

# 目次

## 1. 序論

1.1 研究の背景	...	3
1.2 研究の流れ	...	4

## 2. 数値計算の方法

2.1 素反応モデル	...	5
2.2 計算に必要なパラメーター	...	5
2.3 計算の準備	...	6
2.4 反応速度定数の計算	...	7
2.5 逆反応の反応速度定数の計算	...	9
2.6 関連物質の変化量の計算	...	10
2.7 温度の計算	...	12
2.8 繰り返し計算の方法	...	13

## 3. 計算に使用するデータ

3.1 概要	...	14
3.2 $\text{CH}_3$ , $\text{C}_2\text{H}_2$ , $\text{CH}_3\text{OH}$ , $\text{C}_3\text{H}_8$ の素反応モデル	...	15
3.3 正ブタンの素反応モデル	...	29
3.4 正ヘプタンの素反応モデル 1	...	46
3.5 正ヘプタンの素反応モデル 2	...	48

## 4. 数値計算法の工夫

4.1 数値計算における問題点	...	62
4.2 時間刻みの設定方法	...	63
4.3 実際の計算における時間刻みの現状	...	66

## 5. 計算結果

5.1 概要	... 68
5.2 計算結果 1	... 68
5.3 計算結果 2	... 81
5.4 計算結果 3	... 86
5.5 計算結果 4	... 99

## 6. 考察

6.1 数値計算を行った上で	... 103
6.2 個別の数値計算結果の分析	... 104
6.3 まとめ	... 106

## 7. おわりに

7.1 謝辞	... 107
7.2 参考資料	... 107
7.3 学会発表・学会誌掲載のリスト	... 107

# 1. 序論

## 1.1 研究の背景

現在のところ、自動車、航空機、船舶などの輸送用機器の動力源や、または発電用の動力源などとして、多くの場所で熱機関が使用されている。熱機関といえば、熱を動力に変換する装置のことであり、ガソリンエンジン、ディーゼルエンジン、ガスタービンエンジン、蒸気タービンエンジンなど様々な形態のものが存在する。そこで、問題となるのが、熱がどのように供給されているかということである。熱機関は、通常、燃焼により熱源が確保されているおり、内燃機関と外燃機関に大別される。ただし、将来のエネルギー源として考案されている、太陽熱でスターリングエンジンを駆動する方式のものなど、どちらにも属さない例外もある。熱源として燃焼現象を使用する以上、熱機関の性能向上のためには燃焼現象の解明が重要な課題となる。

燃焼現象の解明が特に重要なのは内燃機関の場合である。もちろん外燃機関の場合にも、排出ガスの問題においては、有害物質とされている未燃炭化水素、CO、NO<sub>x</sub>などの削減方法を考えるに当たって燃焼現象について十分に知っておく必要がある。しかしながら、内燃機関の場合には、燃焼現象という化学反応によって得られるエネルギーを直接的に動力に変換しているので、どのような条件なら点火し、さらには火炎を維持できるのか、そして点火するまでにどの程度時間がかかり、どのような物質がどの程度の時間で生成しているのかということが即座にエンジンの性能に影響してくることになる。そのため、内燃機関の場合には、燃焼現象を十分に把握しない限り、性能向上には限界があるということなのである。例えば、ガソリンエンジンやディーゼルエンジンといった、レシプロエンジンの場合には、厳密なサイクル計算の際に、点火遅れや自発点火の状況を知る必要があり、ガスタービンエンジンの場合には、燃焼器の設計の際に火炎の状況を知る必要がある。

これまでには、このような特性を知るために数多くの実験が行われてきた。実験するといっても、エンジンの場合の燃焼と全く同じ条件で行うのは極めて難しく、できたとしても非常に手間がかかるものであったため、思うようにデータを得ることはできなかった。しかし、これらの実験により燃焼機構が随分解明され、燃焼に関連する物質についての様々なパラメーターも知ることができるようになった。さらに、実験方法についても近年、新たな方法が考案されており、少しずつ理想的な条件で実験が可能になりつつある。それでも、ひとつひとつ実験するのでは、多大な手間がかかることには変わりなく、思うようにデータを得ることはできないので、これまでの実験で得られたデータを利用してコンピューターを用いた数値計算を行い、容易に燃焼についてのデータを得られるようにする必要がある。コンピューターを用いた数値計算ならば、手間が省け、かつ、細かい情報を得る

ことも可能なので非常に便利である。ただし、今現在では、燃焼についての数値計算法は確立されているわけではなく、燃焼反応に関する数値計算の試みもそれほど多くはない。そのため、本研究では、これまでに実験によって得られた燃焼反応に関するデータを利用して、計算方法を工夫しつつ、どの程度の数値計算が可能であるか調査し、燃焼現象の数値シミュレーションの問題点及び、今後の指針を探ることを目的とする。

## 1.2 研究の流れ

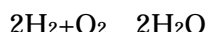
燃焼現象についてコンピューターを用いた数値計算をする場合は、化学反応式における反応速度定数を用いて、反応物に対して生成する物質の量を、ある時間刻みを設定し、温度とともに順番に計算していくという方式が基本となる。燃焼反応に関する化学反応式とそれに関係する化学種の物性とその化学反応に関する各種のパラメーターは、それぞれの燃焼反応ごとにまとめられている。このようにまとめられたものは素反応モデルと呼ばれている。ちなみに、素反応モデルは実験結果から得られたものである。燃焼現象についての数値計算が、実用的なところで役立つようにするためには、火炎伝播や、燃焼系における対流を計算しなくてはならないので、化学反応に関する計算以外に、流体力学的な計算も行っていく必要がある。しかしながら、化学反応に関する計算法についても、今現在では確立されておらず、その試みもそれほど多くないので、化学反応に関する数値計算から研究を行っていかなくてはならない。そこで、本研究では、燃焼現象の数値計算の第一歩として、化学反応だけで計算可能な条件でのシミュレーションを行う。体積一定で自発点火という条件であれば、理想的な条件下であれば、均一に反応が進むので、流体力学的な計算なしで、ある程度のシミュレーションが可能である。化学反応についての計算は、素反応モデルを用いて、反応速度の計算、そして各物質のエンタルピーから温度を計算していくという、基本的な方法で行う。本研究では、体積一定の条件における自発点火のシミュレーションを行うわけであるが、そのような環境についての実験装置としては急速圧縮機が有望である。今後、急速圧縮機を用いた実験方法が確立されれば、計算結果と実験結果の比較が容易にできるようになり、計算法についても様々な改良が可能になるため、期待されるところである。

本研究で行う数値計算は、単純な Euler 法を用いるが、時間刻みを調整することや、計算を進めていく上で予想可能になった事柄について様々な仮定をおくことにより、正しく計算できるように工夫する。そして、数値計算の結果得られたデータを、可能な限り実験データと比較して、数値計算の問題点及び適切な指針を探っていく。

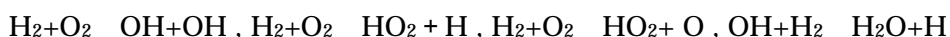
## 2. 数値計算の方法

### 2.1 素反応モデル

例えば、最も簡単な、量論比の酸素と水素の燃焼反応は、通常、



のように表現されるが、それは単に量論関係(質量保存)を表す総括反応式であって、実際には反応物質と生成物質のほかに多くの中間生成物が生じ、それらに関する多くの反応(素反応)によって構成されている。この場合は、OH, H, O, HO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>という中間生成物が生じ、



などの素反応が起こっている。そして、この最も簡単な水素の燃焼反応でも、素反応の数は約数十個ある。

ただし、メタンの素反応の数は百個にも達し、空気中での燃焼となると、窒素 N を含む中間生成物も生じるため、素反応の数は大幅に増える。ブタン酸素反応では 600 ~ 700 個、正ヘブタンと空気の反応ではもっと複雑になるので、素反応の数は 5000 ~ 6000 個というように途方もない数になる。しかし素反応の中には、反応速度が極めて遅く、全体の反応機構には、ほとんど影響を及ぼさないものも多い。従って、そのような素反応は無視しても良いことになり、考慮する化学種と素反応が少なくてすむので、随分計算し易くなる。そのため、素反応モデルの中には、すべての素反応の寄与度を適切に評価し、無視できる反応を取り除いてあるため、化学種と素反応の数はかなり少なくなっているものもある。

### 2.2 計算に必要なパラメーター

初期条件としては、反応開始時の条件を与える。温度  $T_0$  (K)、圧力  $P_0$  (Pa)、関連物質  $Y_i$  のモル数  $f_a$  (mol) が初期条件となる。

化学反応に関するパラメーターは、それぞれの化学反応について、頻度係数  $cf$ 、温度の項の指数  $n$ 、活性化エネルギー  $ef$  (cal/mol) が基本となる。ただし、反応によっては、この 3 個を高圧での値として設定し、低圧における、頻度係数  $cf_0$ 、温度の項の指数  $n_0$ 、活性化エネルギー  $ef_0$  (cal/mol) も設定する。また、反応によっては、この他に計算式に存在する係数として  $acent$ ,  $ts_3$ ,  $ts_1$ ,  $ts_2$  を設定する。そのため、計算上では、 $cf$ ,  $n$ ,  $ef$ ,  $cf_0$ ,  $n_0$ ,  $ef_0$ ,  $acent$ ,  $ts_3$ ,  $ts_1$ ,  $ts_2$  の 10 個のパラメーターを用意し、それぞれの反応で関係ないパ

ラメーターは 0 とおく。ただし、後の項目の、これらのデータを掲載した表中では、0 であるパラメーターについて、空欄または、その項目自体を省略しているものが多いので注意。その他、後で詳しく述べるが、第 3 体が必要な反応では、第 3 体の密度の計算方法に関するパラメーターを用意しなくてはならない。

それぞれの化学種についてのパラメーターとしては、分子量  $sm$  のほか、平衡定数、定積比熱、エンタルピーの計算式中の係数として  $T\_bnd$  (K),  $tdl\_1$ ,  $tdl\_2$ ,  $tdl\_3$ ,  $tdl\_4$ ,  $tdl\_5$ ,  $tdl\_6$ ,  $tdh\_1$ ,  $tdh\_2$ ,  $tdh\_3$ ,  $tdh\_4$ ,  $tdh\_5$ ,  $tdh\_6$  を得る。

その他、計算方法の設定に関するパラメーターが必要である。時間刻み  $\Delta t$  (s) をどうするかということや、場合によっては、様々な仮定をしたうえで計算しなくてはならないので、どのような仮定を立てるかなどということがパラメーターとなる。これらについては、数値計算では非常に重要であり、本研究の大きな課題である。

## 2.3 計算の準備

系全体のモル数  $tfa$  (mol) は、関連物質  $Y_i$  ( $i=1,2,\dots,ns$ ) の初期モル数を  $fa0_i$  (mol) と書けば、

$$tfa = \sum_{i=1}^{ns} fa0_i$$

関連物質  $Y_i$  のモル分率を、 $fa_i$  (mol) と書けば、

$$fa_i = \frac{fa0_i}{tfa}$$

関連物質  $Y_i$  の気体定数  $rs_i$  (J / kg · K) は、関連物質  $Y_i$  の質量  $fa0_i$  (kg) と分子量  $sm_i$ 、そして、気体定数  $R = 8.314510$  (J / mol · K) を用いて、

$$P \times V = fa0_i \times R \times T = \frac{fs0_i \times 10^3}{sm_i} \times R \times T = fs0_i \times rs_i \times T$$

であるから、

$$rs_i = \frac{R}{sm_i} \times 10^3$$

系全体の平均分子量  $sma$  は、

$$sma = \sum_{i=1}^{ns} (fa_i \times sm_i)$$

関連物質  $Y_i$  の質量比率  $fs_i$  は、

$$fs_i = fa_i \times \frac{sm_i}{sma}$$

系全体の気体定数は  $rm$  (J / kg · K) は、

$$rm = \sum_{i=1}^{ns} (rs_i \times fs_i)$$

初期密度  $\rho_0$  (kg/m<sup>3</sup>) は、

$$\rho_0 = \frac{P_0}{rm \times T_0}$$

関連物質  $Y_i$  の 1m<sup>3</sup>あたりのモル数  $N_i$  (mol/m<sup>3</sup>) は、

$$N_i = \frac{fs_i \times \rho_0 \times 10^3}{sm_i}$$

という順序で計算する。この値を利用して時間ごとに計算する。

## 2.4 反応速度定数の計算

反応速度定数の計算方法は、アレニウスの法則が基本になっている。アレニウス (Arrhenius) は数多くの実験データに基づいて、反応速度定数  $K$  と温度の関係式、

$$K = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

を提案した。これはアレニウスの法則という。  $A$  は反応の頻度係数である。ただし、その後の実験事実により、頻度係数  $A$  も温度に依存することが明らかにされており、反応速度定数と温度の関係は以下のように与えられる。

$$K = AT^{\zeta} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

$\zeta$  は正または負の実数である。

しかし、アレニウスの法則に従わない反応もある。特に、第 3 体が必要な再結合反応である。例えば、



について考える。この場合第 3 体  $M$  の濃度は圧力に強く依存するため、高圧と低圧での反応次数は異なる。高圧では、



低圧では、



となる。このような反応の反応速度を表すには、次のようなリンデマン近似を用いる。高

圧での反応速度定数を  $K_{\infty}$ 、低圧での反応速度定数を  $K_0$ 、 $M$  のモル数を  $C_M$  すると、

$$K = K_{\infty} \left( \frac{p_r}{1 + p_r} \right), \quad p_r = \frac{K_0 C_M}{K_{\infty}}$$

となる。

実際の計算では、化学反応  $j$  ( $j=1,2,\dots,nr$ ) の反応速度定数  $rkf_j$  は次のように計算する。

ただし、化学反応  $j$  について、頻度係数  $cf$  は  $cf_j$ 、 $\zeta_j$  は  $\zeta_j$ 、活性化エネルギー  $ef$  (cal/mol)

は  $ef_j$  と表現し、 $rcal = 1.985887$  を用いる。 $cf_0$ ,  $0$ ,  $ef_0$ ,  $acent$ ,  $ts_3$ ,  $ts_1$ ,  $ts_2$  の値が全

て 0 であれば、アレニウスの法則に従う反応であり、反応要素の数が  $k$  個のとき、

$$rkf_j = cf_j \times 10^{-6 \times (k-1)} \times T^{\zeta_j} \times \exp\left(-\frac{ef_j}{rcal \times T}\right)$$

である。例えば、 $OH+H_2 \rightarrow H_2O+H$  の反応では  $k=2$ 、 $H_2 \rightarrow H+H$  の反応では  $k=1$  である。

アレニウスの法則に従わない反応について、リンデマン近似によるものは、

$$rkf1_j = cf_j \times 10^{-6 \times (k-2)} \times T^{\zeta_j} \times \exp\left(-\frac{ef_j}{rcal \times T}\right)$$

$$rkf0_j = cf0_j \times 10^{-6 \times (k-1)} \times T^{\zeta0_j} \times \exp\left(-\frac{ef0_j}{rcal \times T}\right)$$

$$pred_j = \frac{rkf0_j \times tmole_m}{rkf1_j}$$

$$rkf_j = rkf1_j \times \frac{pred}{pred + 1}$$

である。例えば、 $H+O_2(+m) \rightarrow HO_2(+m)$  の反応の場合であり、この場合は  $k=3$  である。 $acent$ ,  $ts_3$ ,  $ts_1$ ,  $ts_2$  の値が全て 0 であり、 $cf_0$ ,  $0$ ,  $ef_0$  の中に 0 でないものが含まれていれば、リンデマン近似による反応であり、この方法で計算することになる。

この 2 つのパターンに含まれないものは、次のように計算する。

$$rkf1_j = cf_j \times 10^{-6 \times (k-2)} \times T^{\zeta_j} \times \exp\left(-\frac{ef_j}{rcal \times T}\right)$$



$$rkf0_j = cf0_j \times 10^{-6 \times (k-1)} \times T^{\zeta0_j} \times \exp\left(-\frac{ef0_j}{rcal \times T}\right)$$

$$pred_j = \frac{rkf0_j \times tmole_m}{rkf1_j}$$

$$fcent_j = (1 - acent_j) \times \exp\left(-\frac{T}{ts3_j}\right) + acent_j \times \exp\left(-\frac{T}{ts1_j}\right) + \exp\left(-\frac{ts2_j}{T}\right)$$

$$ctro_j = -0.4 - 0.67 \times \ln(fcent_j)$$

$$firo_j = fcent_j \times \exp\left(\frac{1}{1 + \left(\frac{\ln pred_j + ctro_j}{ntro_j - 0.14 \times (\ln pred_j + ctro_j)}\right)^2}\right)$$

$$rkf_j = rkf1_j \times \frac{pred_j}{pred_j + 1} \times firo_j$$

例えば、 $\text{OH} + \text{OH}(+m) = \text{H}_2\text{O}_2(+m)$ の反応の場合であり、この場合は $k = 3$ である。

## 2.5 逆反応の反応速度定数の計算

逆反応の反応速度定数は、平衡定数を求め、そこから計算する。平衡定数を計算するためには、まず、各物質についてgipの値を求める必要がある。関連物質 $Y_i$ について、tdl\_1の値をtdl1<sub>i</sub>、T\_bndの値をT<sub>bnd</sub>、gipの値をgip<sub>i</sub>など書くならば、  
 $T < T_{bnd}$  のとき、

$$gip_i = tdl1_i - tdl7_i - T \times \frac{tdl2_i}{2} - T^2 \times \frac{tdl3_i}{6} - T^3 \times \frac{tdl4_i}{12} - T^4 \times \frac{tdl5_i}{20} + \frac{tdl6_i}{T} - tdl1_i \times \ln T$$

$T \geq T_{bnd}$  のとき、

$$gip_i = tdlh1_i - tdlh7_i - T \times \frac{tdh2_i}{2} - T^2 \times \frac{tdh3_i}{6} - T^3 \times \frac{tdh4_i}{12} - T^4 \times \frac{tdh5_i}{20} + \frac{tdh6_i}{T} - tdlh1_i \times \ln T$$

となる。

次に、それぞれの素反応についてdgipの値を計算することになる。ここでは、以下のよ

うな物質  $Y_i, Y_{i+1}, Y_{i+2}, Y_{i+3}$  に関する反応  $j$  ( $n_{i,j}, n_{i+1,j}, n_{i+2,j}, n_{i+3,j}$  は係数) を考える。

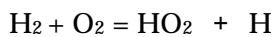
$$n_{i,j} Y_i + n_{i+1,j} Y_{i+1} = n_{i+2,j} Y_{i+2} + n_{i+3,j} Y_{i+3}$$

反応  $j$  の  $dgip$  の値を  $dgip_j$  とするならば

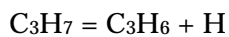
$$dgip_j = n_{i,j} \times gip_i + n_{i+1,j} \times gip_{i+1} - n_{i+2,j} \times gip_{i+2} - n_{i+3,j} \times gip_{i+3}$$

となる。

ここからは、すぐに平衡定数が求まるのだが、化学反応により、少々求め方が異なる。  
素反応は様々なものがあり、



のように、左辺と右辺の化学種の数に等しいものもある。



のように、左辺と右辺の化学種の数に異なるものもある。この二つの反応については平衡定数の求め方は異なる。反応  $j$  が、左辺の化学種の係数の和  $k$  個、右辺の化学種の係数の和

$l$  個であった場合、反応  $j$  の平衡定数  $eqk_j$  は、定数  $rmol = 8.205783 \times 10^{-5}$  を用いて

$$eqk_j = \exp(-dgip_j) \times (rmol \times T)^{l-k}$$

と求まる。

これより、反応  $j$  の逆反応の反応速度定数  $rkb_j$  は、

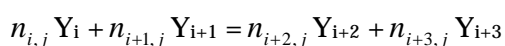
$$rkb_j = rkf_j \times eqk_j$$

となる。

## 2.6 関連物質の変化量の計算

それぞれの反応の、反応速度定数が求まれば、そこから、関連物質の変化量の計算が可能となる。ただし、反応によっては少々複雑になる。

まず、それぞれの反応について、反応速度を計算する。反応  $j$  が、一般的な、



という反応の場合、右への反応速度は、

$$rpf_j = rkf_j \times N_i \times N_{i+1}$$

左への反応速度は、

$$rpb_j = rkb_j \times N_{i+2} \times N_{i+3}$$

これより、トータルの反応速度  $domg_j$  は、

$$domg_j = rpf_j - rpb_j$$

である。第3体が必要な反応では、計算方法が特殊である。反応  $j$  が、

$$n_{i,j} Y_i + n_{i+1,j} Y_{i+1} (+m) = n_{i+2,j} Y_{i+2} + n_{i+3,j} Y_{i+3} (+m)$$

というように表記した、cf, , ef 以外のパラメーター  $cf_0$ ,  $0$ ,  $ef_0$ ,  $acent$ ,  $ts_3$ ,  $ts_1$ ,  $ts_2$  を用いて反応速度係数を求める反応であれば、すでに、その反応速度定数自体に反応速度の第3体  $m$  による影響が反映されているため、ここでは、第3体  $m$  を入れて計算する必要はなく、

$$rpf_j = rkf_j \times N_i \times N_{i+1}$$

$$rpb_j = rkb_j \times N_{i+2} \times N_{i+3}$$

$$domg_j = rpf_j - rpb_j$$

である。

その一方で、反応  $j$  が、

$$n_{i,j} Y_i + n_{i+1,j} Y_{i+1} + m = n_{i+2,j} Y_{i+2} + n_{i+3,j} Y_{i+3} + m$$

というように表記した、パラメーター  $cf$ , ,  $ef$  だけで反応速度定数を求められる反応であれば、ここで、第3体  $m$  の影響を反映させるための計算が必要で、

$$rpf_j = rkf_j \times N_i \times N_{i+1} \times tmole_m$$

$$rpb_j = rkb_j \times N_{i+2} \times N_{i+3} \times tmole_m$$

$$domg_j = rpf_j - rpb_j$$

である。

$tmole_m$  も  $1m^3$ あたりのモル数という意味ではあるが、 $tmole_m = \sum_{i=1}^{ns} N_i$  のこともあれば、その他の方法で計算される。 $tmole_m$  の計算方法は様々であるが、先にも述べたように、その計算方法も、計算に必要なパラメーターとして最初に分る。

ここからは、関連物質  $Y_i$  の変化量の計算は簡単で、例えば、

反応 1 :  $OH+H_2=H+H_2O$

反応 2 :  $O+OH=O_2+H$

反応 3 :  $O+H_2=OH+H$

反応 4 :  $H+HO_2=OH+OH$

反応 5 :  $2H+H_2=2H_2$

で、 $Y_i$  が  $H$  であったならば、 $Y_i$  の変化量は、

$$\dot{N}_i = domg_1 + domg_2 + domg_3 - domg_4 - 2 \times domg_5$$

となる。一般化すると次のようになる。 $Y_i$  の関連する反応が  $ni$  個あり、その反応を  $j = f_i(x)$  ( $x = 1, 2, \dots, ni$ ) とおけば、

$$\dot{N}_i = \sum_{x=1}^{ni} (g_{f_i(x)}(i) \times f_i(x))$$

である。ただし、 $g_j(i)$  の値は、反応  $j$  で、 $Y_i$  が右辺にあれば、 $1 \times (Y_i$  の係数)、 $Y_i$  が左辺にあれば、 $Y_i$  が左辺にあれば  $(-1) \times (Y_i$  の係数) である。

## 2.7 温度の計算

温度は以下のように、求める。

$$tdrm1 = \sum_{i=1}^{ns} (td1_i \times fs_i \times rs_i)$$

ただし、 $T > T_{bnd}$  のとき  $td1_i = tdh1_i$ 、 $T \leq T_{bnd}$  のとき  $td1_i = tdl1_i$

$$tdrm2 = \sum_{i=1}^{ns} (td2_i \times fs_i \times rs_i)$$

ただし、 $T > T_{bnd}$  のとき  $td2_i = tdh2_i$ 、 $T \leq T_{bnd}$  のとき  $td2_i = tdl2_i$

$$tdrm3 = \sum_{i=1}^{ns} (td3_i \times fs_i \times rs_i)$$

ただし、 $T > T_{bnd}$  のとき  $td3_i = tdh3_i$ 、 $T \leq T_{bnd}$  のとき  $td3_i = tdl3_i$

$$tdrm4 = \sum_{i=1}^{ns} (td4_i \times fs_i \times rs_i)$$

ただし、 $T > T_{bnd}$  のとき  $td4_i = tdh4_i$ 、 $T \leq T_{bnd}$  のとき  $td4_i = tdl4_i$

$$tdrm5 = \sum_{i=1}^{ns} (td5_i \times fs_i \times rs_i)$$

ただし、 $T > T_{bnd}$  のとき  $td5_i = tdh5_i$ 、 $T \leq T_{bnd}$  のとき  $td5_i = tdl5_i$

ここから、定積比熱  $C_v$  は、

$$C_v = tdrm1 + T \times tdrm2 + T^2 \times tdrm3 + T^3 \times tdrm4 + T^4 \times tdrm5 - rm$$

というように計算される。それぞれの物質のある状態における単位質量あたりのエンタルピー  $H_i$  は、

$T > T_{bnd}$  ならば

$$H_i = rs_i \times \left( tdh6_i + T \times tdh1_i + T^2 \times \frac{tdh2_i}{2} + T^3 \times \frac{tdh3_i}{3} + T^4 \times \frac{tdh4_i}{4} + T^5 \times \frac{tdh5_i}{5} \right)$$

$T \leq T_{bnd}$  ならば

$$H_i = rs_i \times \left( tdl6_i + T \times tdl1_i + T^2 \times \frac{tdl2_i}{2} + T^3 \times \frac{tdl3_i}{3} + T^4 \times \frac{tdl4_i}{4} + T^5 \times \frac{tdl5_i}{5} \right)$$

と表現される。この値が求めれば、その物質が増えたり減ったりした場合に系全体に対して放出または吸収される熱量を計算できるようになる。あるエンタルピーを持った物質  $Y_i$  が増えるということは、その分だけ、系全体からその物質に熱が吸収されるわけであるから、系全体に放出される熱量は、それと符号が反対になり、それぞれの物質について、

$$-\dot{N}_i \times H_i \times sm_i \times 10^{-3} \times \Delta t \quad (\text{J/m}^3)$$

である。これより、定積変化の条件であるから、系の温度変化率  $\dot{T}$  は、定積比熱を用いて、

$$\dot{T} = -\sum_{i=1}^{ns} \frac{\dot{N}_i \times H_i \times sm_i \times 10^{-3}}{C_v}$$

である。

## 2.8 繰り返し計算の方法

関連物質  $Y_i$  の変化量  $\dot{N}_i$  (mol/m<sup>3</sup>) と、系の温度変化  $\dot{T}$  が求まったので、

$N_i$  に  $N_i + \dot{N}_i \times \Delta t$ 、 $T$  に  $T + \dot{T} \times \Delta t$  の値を代入して、再び反応速度定数から計算していく。

これを繰り返し行えば、燃焼についての数値計算ができる(Eular 法)。

## 3.計算に使用するデータ

### 3.1 概要

本研究では、メタン( $\text{CH}_4$ )、アセチレン( $\text{C}_2\text{H}_2$ )、メタノール( $\text{CH}_3\text{OH}$ )、プロパン( $\text{C}_3\text{H}_8$ ) の燃焼反応の素反応モデル、正ブタン ( $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ 、 $\text{C}_4\text{H}_{10}$  と表記) の燃焼反応の素反応モデル、正ヘプタン( $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ 、 $\text{n-C}_7\text{H}_{16}$  または  $\text{nC}_7\text{H}_{16}$  と表記) の燃焼反応の素反応モデル 2 種類を使用して数値計算を行う。通常は、異なる物質の燃焼現象について数値計算を行う場合、それぞれについて別の素反応モデルを用いる必要があるが、メタン、アセチレン、メタノール、プロパンについては、これら全ての場合の燃焼反応について計算に使用できる素反応モデルを用意したので、同一の素反応モデルを用いて計算を行う。また、正ヘプタンの燃焼反応は非常に複雑で、数値計算には大幅に簡略化された素反応モデルを使用しなくてはならないため、それぞれの素反応モデルを評価する必要性があるため 2 種類の素反応モデルを用いる。

メタン、アセチレン、メタノール、プロパンの燃焼反応の素反応モデルは、化学種を 126 個、素反応を 638 個、扱ったもので、かなり厳密であり、詳細な計算が可能である。この素反応モデルは空気中での燃焼反応の計算が可能で、 $\text{NO}_x$  の生成に関する計算も可能である。正ブタンの燃焼反応の素反応モデルは、化学種を 153 個、素反応を 689 個、扱ったもので、かなり厳密であり、詳細な計算が可能である。ただし、酸素との反応しか考慮していないので、空気中での燃焼反応の計算は不可能である。正ヘプタンの燃焼反応の素反応モデルは 2 種類のものを使用する。1 つ目は、化学種を 29 個、素反応を 52 個、扱ったもので、大幅に簡略されている。この素反応モデルは、一応のところ空気中での燃焼をシミュレートできるが、窒素原子 N に関連する化学反応は扱っていないため、 $\text{NO}_x$  の生成に関する計算は不可能である。2 つ目は化学種を 160 個、素反応を 770 個、扱ったもので、比較的詳細な計算が可能なものであるが、それでも相当に簡略化されたモデルである。この素反応モデルは、一応のところ空気中での燃焼をシミュレートできるが、窒素原子 N に関連する化学反応は扱っていないため、 $\text{NO}_x$  の生成に関する計算は不可能である。

メタン、アセチレン、メタノール、プロパン、正ブタンについては、可燃限界あるいは、自発点火する最低の温度(最低自己着火温度)に近い領域などの、特別に計算時間がかかる条件でなければ、厳密な素反応モデルを用いても一応は計算可能である。しかしながら、正ヘプタンとなると、厳密な素反応モデルがあまりにも化学種と素反応の数が多いことに加えて、点火、燃焼の過程が複雑なので、同じ化学種、素反応の数でも計算時間が長くなりがちである。そのため、特別に簡略化した素反応モデル(化学種 29 個、素反応 52 個のものなど)を用いる必要もある。

## 3.2 CH<sub>3</sub> , C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> , CH<sub>3</sub>OH , C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> の素反応モデル

表 1 に化学種、表 2.1～2.9 に素反応とそれに関するパラメーター、表 3.1, 3.2, 4.1, 4.2 に平衡定数、定積比熱、エンタルピーの計算式中で使用するパラメーターを掲載した。

表 1

番号	化学種	分子量	番号	化学種	分子量
1	H <sub>2</sub>	2.01594	64	NNH	29.02137
2	H	1.00797	65	NO	30.0061
3	CH <sub>4</sub>	16.04303	66	NO <sub>2</sub>	46.0055
4	CH <sub>3</sub>	15.03506	67	N <sub>2</sub> O	44.0128
5	CH <sub>2</sub>	14.02709	68	HNO	31.01407
6	CH	13.01912	69	CN	26.01785
7	CH <sub>2</sub> O	30.02649	70	HCN	27.02582
8	HCO	29.01852	71	H <sub>2</sub> CN	28.03379
9	CO <sub>2</sub>	44.00995	72	HCNN	41.03252
10	CO	28.01055	73	HCNO	43.02522
11	O <sub>2</sub>	31.9988	74	HOCN	43.02522
12	O	15.9994	75	HNCO	43.02522
13	OH	17.00737	76	NCO	42.01725
14	HO <sub>2</sub>	33.00677	77	N <sub>2</sub>	28.0134
15	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	34.01474	78	HNO <sub>2</sub>	47.01347
16	H <sub>2</sub> O	18.01534	79	HONO	47.01347
17	C <sub>2</sub> H	25.03027	80	NO <sub>3</sub>	62.0049
18	HCCO	41.02967	81	HONO <sub>2</sub>	63.01287
19	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	26.03824	82	C <sub>2</sub> COO	75.08804
20	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	27.04621	83	C <sub>2</sub> CQ	76.09601
21	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	28.05418	84	C <sub>2</sub> JCCQ	75.08804
22	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	29.06215	85	CCYC <sub>2</sub> O	58.08067
23	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	30.07012	86	CCQCOO	107.08684
24	CH <sub>2</sub> OH	31.03446	87	CC*OCQ	90.07947
25	CH <sub>3</sub> O	31.03446	88	CJCCQ	75.08804
26	HCCOH	42.03764	89	C*CCQ	74.08007
27	H <sub>2</sub> CCCH	39.05736	90	CQCJCQ	107.08684
28	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	38.04939	91	CQCC*O	90.07947
29	CH <sub>2</sub> (S)	14.02709	92	COOCCQ	107.08684
30	CH <sub>2</sub> CO	42.03764	93	CCCOO	75.08804
31	C <sub>2</sub> O	40.0217	94	CCQC*O	90.07947
32	HCOH	30.02649	95	CCJCQ	75.08804
33	CH <sub>3</sub> OH	32.04243	96	CJCQCQ	107.08684
34	CH <sub>2</sub> HCO	43.04561	97	CCOCCQ	107.08684
35	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	42.08127	98	CYCCCO	58.08067
36	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	41.0733	99	CH <sub>3</sub> OOH	48.04183
37	PC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	41.0733	100	CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	47.03386
38	SC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	41.0733	101	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OOH	62.06892
39	CH <sub>2</sub> CHCHO	56.06473	102	CCQ	76.09601
40	PC <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	40.06533	103	CCCOJ	59.08864
41	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	40.06533	104	CCCHO	58.08067
42	CH <sub>3</sub> CO	43.04561	105	CQC*O	76.05238
43	CH <sub>2</sub> CHCO	55.05676	106	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OOH	61.06095
44	CH <sub>3</sub> CHCO	56.06473	107	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	73.0721
45	CH <sub>3</sub> HCO	44.05358	108	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> H	74.08007
46	CHOCHO	58.03704	109	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub>	82.1466
47	IC <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	43.08924	110	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub>	81.13863
48	NC <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	43.08924	111	C <sub>2</sub> COJ	59.08864
49	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	46.06952	112	ACETONE	58.08067
50	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH	45.06155	113	HOC <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	59.08864
51	CH <sub>3</sub> CHOH	45.06155	114	HOC <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	91.08744
52	CH <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> O	57.0727	115	HOC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	77.06035
53	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> O	45.06155	116	HOOC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	93.05975
54	HCOOH	46.02589	117	HOC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O	73.0721
55	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	44.09721	118	HOC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	105.0709
56	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	61.06095	119	HOCCQCHO	106.07887
57	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	43.04561	120	HOCCQC	92.09541
58	C	12.01115	121	CHCHCHO	55.05676
59	AR	39.948	122	CH <sub>3</sub> NO	45.04116
60	N	14.0067	123	CH <sub>3</sub> ONO	61.04056
61	NH	15.01467	124	CH <sub>3</sub> ONO <sub>2</sub>	77.03996
62	NH <sub>2</sub>	16.02264	125	CH <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	61.04056

表 2.1

番号	反応式	cf	ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
1	oh+h2=h+h2o	2.14E+08	1.5	3449						
2	o+oh=o2+h	2.02E+14	-0.4	0						
3	o+h2=oh+h	5.06E+04	2.7	6290						
4	h+o2(+m1)=ho2(+m1)	4.52E+13	0	0	1.05E+19	-1.257	0			
5	h+o2(+n2)=ho2(+n2)	4.52E+13	0	0	2.03E+20	-1.59	0			
6	h+o2(+h2)=ho2(+h2)	4.52E+13	0	0	1.52E+19	-1.133	0			
7	h+o2(+h2o)=ho2(+h2o)	4.52E+13	0	0	2.10E+23	-2.437	0			
8	oh+ho2=h2o+o2	2.13E+28	-4.8	3500						
9	oh+ho2=h2o+o2	9.10E+14	0	10964						
10	h+ho2=oh+oh	1.50E+14	0	1000						
11	h+ho2=h2+o2	6.63E+13	0	2126						
12	h+ho2=o+h2o	3.01E+13	0	1721						
13	o+ho2=o2+oh	3.25E+13	0	0						
14	oh+oh=o+h2o	3.57E+04	2.4	-2112						
15	h+h+m2=h2+m2	1.00E+18	-1	0						
16	h+h+h2=h2+h2	9.20E+16	-0.6	0						
17	h+h+h2o=h2+h2o	6.00E+19	-1.3	0						
18	h+oh+m3=h2o+m3	2.21E+22	-2	0						
19	h+o+m3=oh+m3	4.71E+18	-1	0						
20	o+o+m=o2+m	1.89E+13	0	-1788						
21	ho2+ho2=h2o2+o2	4.20E+14	0	11982						
22	ho2+ho2=h2o2+o2	1.30E+11	0	-1629						
23	oh+oh(+m)=h2o2(+m)	1.24E+14	-0.4	0	3.04E+30	-4.63	2049	0.47	1.00E+02	2.00E+03
24	h2o2+h=h2o+h2	1.98E+06	2	2435						
25	h2o2+h=oh+h2o	3.07E+13	0	4217						
26	h2o2+o=oh+ho2	9.55E+06	2	3970						
27	h2o2+oh=h2o+ho2	2.40E+00	4	-2162						
28	ch3+ch3(+m4)=c2h6(+m4)	9.22E+16	-1.2	636	1.14E+36	-5.246	1705	0.405	1.12E+03	6.96E+01
29	ch3+h(+m4)=ch4(+m4)	2.14E+15	-0.4	0	3.31E+30	-4	2108	0	1.00E-15	1.00E-15
30	ch4+h=ch3+h2	2.20E+04	3	8750						
31	ch4+oh=ch3+h2o	4.19E+06	2	2547						
32	ch4+o=ch3+oh	6.92E+08	1.6	8485						
33	ch4+ho2=ch3+h2o2	1.12E+13	0	24640						
34	ch3+ho2=ch3o+oh	7.00E+12	0	0						
35	ch3+ho2=ch4+o2	3.00E+12	0	0						
36	ch3+o=ch2o+h	8.00E+13	0	0						
37	ch3+o2=ch3o+o	1.45E+13	0	29209						
38	ch3+o2=ch2o+oh	3.51E+11	0	14640						
39	ch3+o2=ch3o2	9.03E+58	-15	17023						
40	ch3o2+o=ch3o+o2	2.60E+13	0	0						
41	ch3o2+ch3=ch3o+ch3o	2.40E+13	0	0						
42	ch3o2+ho2=ch3ooh+o2	2.29E+11	0	-1550						
43	ch3ooh=ch3o+oh	6.00E+14	0	42300						
44	ch3ooh+oh=ch3o2+h2o	3.12E+06	2	-298						
45	ch3o+h=ch3+oh	1.00E+13	0	0						
46	ch2oh+h=ch3+oh	1.00E+13	0	0						
47	ch3+oh=ch2(s)+h2o	2.65E+13	0	2186						
48	ch3+oh=ch2+h2o	3.00E+06	2	2500						
49	ch3+oh=hco+h2	5.48E+13	0	2981						
50	ch3+h=ch2+h2	9.00E+13	0	15100						
51	ch3+m=ch+h2+m	6.90E+14	0	82469						
52	ch3+m=ch2+h+m	1.90E+16	0	91411						
53	ch3+oh(+m5)=ch3oh(+m5)	8.70E+13	0.1	0	8.84E+41	-7.4	626	0.025	1.00E-15	8.00E+03
54	ch3oh(+m5)=ch2(s)+h2o	2.84E+10	1	89871	1.78E+49	-8.81	99369	0.9	7.40E+02	9.80E+02
55	ch3oh(+m5)=hco+h2(+m5)	4.20E+09	1.1	85604	5.02E+47	-8.402	94823	0.9	6.15E+02	9.15E+02
56	ch3oh(+m5)=ch2o+h2(+m5)	2.03E+09	1	91443	9.78E+47	-8.4	101760	0.9	8.25E+02	1.13E+03
57	ch3oh+oh=ch2oh+h2o	2.61E+05	2.2	-1344						
58	ch3oh+oh=ch3o+h2o	2.62E+06	2.1	916						
59	ch3oh+o=ch2oh+oh	3.88E+05	2.5	3080						
60	ch3oh+h=ch2oh+h2	1.70E+07	2.1	4868						
61	ch3oh+h=ch3o+h2	4.24E+06	2.1	4868						
62	ch3oh+ho2=ch2oh+h2o2	9.64E+10	0	12578						
63	ch2o+h(+m6)=ch3o(+m6)	5.40E+11	0.5	2600	1.50E+30	-4.8	5560	0.758	9.40E+01	1.56E+03
64	ch2o+h(+m6)=ch2oh(+m6)	5.40E+11	0.5	3600	9.10E+31	-4.82	6530	0.7187	1.03E+02	1.29E+03
65	ch3o+ch3=ch2o+ch4	1.20E+13	0	0						
66	ch3o+h=ch2o+h2	2.00E+13	0	0						
67	ch2oh+h=ch2o+h2	2.00E+13	0	0						
68	ch3o+oh=ch2o+h2o	1.00E+13	0	0						
69	ch2oh+oh=ch2o+h2o	1.00E+13	0	0						
70	ch3o+o=ch2o+oh	1.00E+13	0	0						
71	ch2oh+o=ch2o+oh	1.00E+13	0	0						
72	ch3o+o2=ch2o+ho2	6.30E+10	0	2600						
73	ch3o+co=ch3+co2	4.68E+02	3.2	5380						
74	ch2oh+o2=ch2o+ho2	1.57E+15	-1	0						
75	ch2oh+o2=ch2o+ho2	7.23E+13	0	3577						



表 2.2

番号	反応式	cf	ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
76	hco+h=hco+h2o	2.00E+13	0	0						
77	hco+h=ch2o+h	2.00E+14	0	0						
78	hco+h=co2+h+h	5.00E+13	0	0						
79	hco+h=co+oh+h	3.00E+13	0	0						
80	hco+h2=co+oh+oh	1.00E+13	0	0						
81	hco+h2=co2+h2o	1.00E+13	0	0						
82	hco=h2o	2.10E+19	-3.1	31700						
83	ch2+h=ch+h2	1.00E+18	-1.6	0						
84	ch2+oh=ch+h2o	1.13E+07	2	3000						
85	ch2+oh=ch2o+h	2.50E+13	0	0						
86	ch2+co2=ch2o+co	1.10E+11	0	1000						
87	ch2+o=co+h+h	5.00E+13	0	0						
88	ch2+o=co+h2	3.00E+13	0	0						
89	ch2+o2=ch2o+o	3.29E+21	-3.3	2868						
90	ch2+o2=co2+h+h	3.29E+21	-3.3	2868						
91	ch2+o2=co2+h2	1.01E+21	-3.3	1508						
92	ch2+o2=co+h2o	7.28E+19	-2.5	1809						
93	ch2+o2=hco+oh	1.29E+20	-3.3	284						
94	ch2+ch3=c2h4+h	4.00E+13	0	0						
95	ch2+ch2=c2h2+h+h	4.00E+13	0	0						
96	ch2+hcco=c2h3+co	3.00E+13	0	0						
97	ch2+c2h2=h2ccch+h	1.20E+13	0	6600						
98	ch2(s)+m7=ch2+m7	1.00E+13	0	0						
99	ch2(s)+ch4=ch3+ch3	4.00E+13	0	0						
100	ch2(s)+c2h6=ch3+c2h5	1.20E+14	0	0						
101	ch2(s)+o2=co+oh+h	7.00E+13	0	0						
102	ch2(s)+h2=ch3+h	7.00E+13	0	0						
103	ch2(s)+c2h2=h2ccch+h	1.50E+14	0	0						
104	ch2(s)+c2h4=ac3h5+h	1.30E+14	0	0						
105	ch2(s)+o=co+h+h	3.00E+13	0	0						
106	ch2(s)+oh=ch2o+h	3.00E+13	0	0						
107	ch2(s)+h=ch+h2	3.00E+13	0	0						
108	ch2(s)+co2=ch2o+co	3.00E+12	0	0						
109	ch2(s)+ch3=c2h4+h	2.00E+13	0	0						
110	ch2(s)+ch2co=c2h4+co	1.60E+14	0	0						
111	ch+o2=hco+o	3.30E+13	0	0						
112	ch+o=co+h	5.70E+13	0	0						
113	ch+oh=hco+h	3.00E+13	0	0						
114	ch+co2=hco+co	3.40E+12	0	690						
115	ch+h2o=ch2o+h	1.17E+15	-0.8	0						
116	ch+ch2o=ch2co+h	9.46E+13	0	-515						
117	ch+c2h2=c3h2+h	1.00E+14	0	0						
118	ch+ch2=c2h2+h	4.00E+13	0	0						
119	ch+ch3=c2h3+h	3.00E+13	0	0						
120	ch+ch4=c2h4+h	6.00E+13	0	0						
121	ch2o+oh=hco+h2o	3.43E+09	1.2	-447						
122	ch2o+h=hco+h2	2.19E+08	1.8	3000						
123	ch2o+m=hco+h+m	3.31E+16	0	81000						
124	ch2o+o=hco+oh	1.80E+13	0	3080						
125	hco+o2=ho2+co	7.58E+12	0	410						
126	hco+m8=h+co+m8	1.86E+17	-1	17000						
127	hco+oh=h2o+co	1.00E+14	0	0						
128	hco+h=co+h2	1.19E+13	0.3	0						
129	hco+o=co+oh	3.00E+13	0	0						
130	hco+o=co2+h	3.00E+13	0	0						
131	co+oh=co2+h	9.42E+03	2.3	-2351						
132	co+o+m=co2+m	6.17E+14	0	3000						
133	co+o2=co2+o	2.53E+12	0	47688						
134	co+ho2=co2+oh	5.80E+13	0	22934						
135	c2h6+ch3=c2h5+ch4	5.50E-01	4	8300						
136	c2h6+h=c2h5+h2	5.40E+02	3.5	5210						
137	c2h6+o=c2h5+oh	3.00E+07	2	5115						
138	c2h6+oh=c2h5+h2o	7.23E+06	2	864						
139	c2h5+h=c2h4+h2	1.25E+14	0	8000						
140	c2h5+h=ch3+ch3	3.00E+13	0	0						
141	c2h5+h=c2h6	3.00E+13	0	0						
142	c2h5+oh=c2h4+h2o	4.00E+13	0	0						
143	c2h5+o=ch3+ch2o	1.00E+14	0	0						
144	c2h5+ho2=c2h6+o2	3.00E+12	0	0						
145	c2h5+ho2=ch3ch2o+oh	3.00E+13	0	0						
146	c2h5+o2=c2h4+ho2	2.89E+28	-5.4	7585						
147	c2h5+o2=c2h5o2	2.22E+52	-13.3	9756						
148	c2h5+o2=ch3hco+oh	4.90E+11	-0.5	8357						
149	c2h5+o2=ch2ch2ooh	5.18E+42	-10.7	8576						
150	c2h5o2=ch2ch2ooh	2.96E+55	-14.2	37892						

表 2.3

番号	反応式	cf	ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
151	c2h5o2=c2h4+ho2	7.37E+54	-13.6	41070						
152	c2h5o2+ho2=c2h5oo+o2	2.29E+11	0	-1550						
153	c2h5oo=ch3ch2o+oh	6.00E+14	0	42300						
154	ch2ch2oo=c2h4+ho2	6.87E+45	-11.1	23227						
155	ch2ch2oo+o2=hooc2h4o2	1.00E+12	0	-1100						
156	hooc2h4o2=cqc*o+oh	6.00E+10	0	24500						
157	cqc*o=ch2o+hco+oh	6.00E+14	0	42300						
158	c2h4+oh=c2h4oh	1.29E+12	0	-817						
159	c2h4oh+o2=hoc2h4o2	1.00E+12	0	-1100						
160	hoc2h4o2=ch2o+ch2o+oh	6.00E+10	0	24500						
161	c2h4+oh=c2h3+h2o	2.02E+13	0	5936						
162	c2h4+o=ch3+hco	1.02E+07	1.9	179						
163	c2h4+o=ch2hco+h	3.39E+06	1.9	179						
164	c2h4+ch3=c2h3+ch4	6.62E+00	3.7	9500						
165	c2h4+h=c2h3+h2	3.36E-07	6	1692						
166	c2h4+h(+m4)=c2h5(+m4)	1.08E+12	0.5	1822	1.11E+34	-5	4448	1	1.00E-15	9.50E+01
167	c2h4(+m)=c2h2+h2(+m)	1.80E+13	0	76000	1.50E+15	0	55443			2.00E+02
168	c2h3+h(+m6)=c2h4(+m6)	6.10E+12	0.3	280	9.80E+29	-3.86	3320	0.782	2.08E+02	2.66E+03
169	c2h3+h=c2h2+h2	4.00E+13	0	0						6.10E+03
170	c2h3+o=c2h2co+h	3.00E+13	0	0						
171	c2h3+o2=ch2o+hco	1.70E+29	-5.3	6500						
172	c2h3+o2=ch2hco+o	5.50E+14	-0.6	5260						
173	c2h3+o2=c2h2+ho2	2.12E-06	6	9484						
174	c2h3+oh=c2h2+h2o	2.00E+13	0	0						
175	c2h3+c2h=c2h2+c2h2	3.00E+13	0	0						
176	c2h3+ch=c2h+c2h2	5.00E+13	0	0						
177	c2h3+ch3=ac3h5+h	4.73E+02	3.7	5677						
178	c2h3+ch3=c3h6	4.46E+56	-13	13865						
179	c2h3+ch3=c2h2+ch4	2.00E+13	0	0						
180	c2h2+oh=c2h+h2o	3.37E+07	2	14000						
181	c2h2+oh=hccoh+h	5.04E+05	2.3	13500						
182	c2h2+oh=c2hco+h	2.18E-04	4.5	-1000						
183	c2h2+oh=c2h2oh	1.02E+12	0	463						
184	c2h2+oh=ch3+co	4.83E-04	4	-2000						
185	hccoh+h=ch2co+h	1.00E+13	0	0						
186	c2h2oh+o2=chocho+oh	2.00E+12	0	0						
187	c2h2oh+h=ch2hco+h	1.00E+14	0	0						
188	c2h2+o=c2h+co	6.12E+06	2	1900						
189	c2h2+o=hcco+h	1.43E+07	2	1900						
190	c2h2+o=c2h+oh	3.16E+15	-0.6	15000						
191	c2h2+ch3=c2h+ch4	1.81E+11	0	17289						
192	c2h2+o2=hcco+oh	4.00E+07	1.5	30100						
193	c2h2+m=c2h+h+m	4.20E+16	0	107000						
194	c2h2+h(+m4)=c2h3(+m4)	3.11E+11	0.6	2589	2.25E+40	-7.269	6577	1	1.00E-15	6.75E+02
195	c2h5oh(+m4)=ch3+ch2oh(+m4)	5.71E+23	-1.7	94405	3.11E+85	-18.84	113100	0.5	5.50E+02	8.25E+02
196	c2h5oh(+m4)=c2h5+oh(+m4)	2.40E+23	-1.6	99535	5.11E+85	-18.8	118770	0.5	6.50E+02	8.00E+02
197	c2h5oh(+m6)=c2h4+h2o(+m6)	1.57E+13	0.1	65684	6.68E+82	-18.7	85500	6.7	1.00E-15	4.60E+02
198	c2h5oh(+m6)=ch3hco+h2(+m6)	1.67E+09	1	90820	2.04E+82	-17.94	111670	0.9	9.00E+02	1.12E+03
199	c2h5oh+oh=c2h4oh+h2o	1.74E+11	0.3	600						7.50E+03
200	c2h5oh+oh=ch3choh+h2o	4.64E+11	0.1	0						
201	c2h5oh+oh=ch3ch2o+h2o	7.46E+11	0.3	1634						
202	c2h5oh+h=c2h4oh+h2	1.23E+07	1.8	5098						
203	c2h5oh+h=ch3choh+h2	2.58E+07	1.6	2827						
204	c2h5oh+h=ch3ch2o+h2	1.50E+07	1.6	3038						
205	c2h5oh+o=c2h4oh+oh	9.41E+07	1.7	5459						
206	c2h5oh+o=ch3choh+oh	1.88E+07	1.9	1824						
207	c2h5oh+o=ch3ch2o+oh	1.58E+07	2	4448						
208	c2h5oh+ch3=c2h4oh+ch4	1.33E+02	3.2	9362						
209	c2h5oh+ch3=ch3choh+ch4	4.44E+02	2.9	7690						
210	c2h5oh+ch3=ch3ch2o+ch4	1.34E+02	2.9	7452						
211	c2h5oh+ho2=ch3choh+h2o2	7.20E+03	2.5	10750						
212	c2h5oh+ho2=c2h4oh+h2o2	1.00E+04	2.5	15750						
213	c2h5oh+ho2=ch3ch2o+h2o2	2.50E+12	0	24000						
214	ch3ch2o+m=ch3hco+h+m	1.16E+35	-5.9	25274						
215	ch3ch2o+m=ch3+ch2o+m	1.35E+38	-7	23800						
216	ch3ch2o+o2=ch3hco+ho2	4.00E+10	0	1100						
217	ch3ch2o+co=c2h5+co2	4.68E+02	3.2	5380						
218	ch3ch2o+h=ch3+ch2oh	1.00E+13	0	0						
219	ch3ch2o+h=ch3hco+h2	1.00E+13	0	0						
220	ch3ch2o+oh=ch3hco+h2o	1.00E+13	0	0						
221	ch3choh+o2=ch3hco+ho2	4.82E+14	0	5017						
222	ch3choh+o2=ch3hco+ho2	8.43E+15	-1.2	0						
223	ch3choh+ch3=ic3h7+oh	2.00E+13	0	0						
224	ch3choh+o=ch3hco+oh	1.00E+14	0	0						
225	ch3choh+h=ch3hco+h2	1.00E+13	0	0						

表 2.4

番号	反応式	cf	ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
226	ch3choh+h=ch3+ch2oh	1.00E+13	0	0						
227	ch3choh+ho2=ch3hco+oh+oh	4.00E+13	0	0						
228	ch3choh+oh=ch3hco+h2o	5.00E+12	0	0						
229	ch3choh+m=ch3hco+h+m	1.00E+14	0	25000						
230	ch3hco+oh=ch3co+h2o	9.24E+06	1.5	-962						
231	ch3hco+oh=ch2hco+h2o	1.72E+05	2.4	815						
232	ch3hco+oh=ch3+hcooh	3.00E+15	-1.1	0						
233	ch3hco+o=ch3co+oh	1.77E+18	-1.9	2975						
234	ch3hco+o=ch2hco+oh	3.72E+13	-0.2	3556						
235	ch3hco+h=ch3co+h2	4.66E+13	-0.3	2988						
236	ch3hco+h=ch2hco+h2	1.85E+12	0.4	5359						
237	ch3hco+ch3=ch3co+ch4	3.90E-07	5.8	2200						
238	ch3hco+ch3=ch2hco+ch4	2.45E+01	3.1	5727						
239	ch3hco+ho2=ch3co+h2o2	2.40E+19	-2.2	14030						
240	ch3hco+ho2=ch2hco+h2o2	2.32E+11	0.4	14864						
241	hcooh+m=co+h2o+m	2.09E+14	0	40400						
242	hcooh+m=co2+h2+m	1.35E+15	0	60600						
243	hcooh+oh=co2+h2o+h	2.62E+06	2.1	916						
244	hcooh+oh=co+h2o+oh	1.85E+07	1.5	-962						
245	hcooh+h=co2+h2+h	4.24E+06	2.1	4868						
246	hcooh+h=co+h2+oh	6.06E+13	-0.3	2988						
247	hcooh+ch3=ch4+co+oh	3.90E-07	5.8	2200						
248	hcooh+ho2=co+h2o2+oh	2.40E+19	-2.2	14030						
249	hcooh+o=co+oh+oh	1.77E+18	-1.9	2975						
250	ch2hco+h=ch3+hco	5.00E+13	0	0						
251	ch2hco+h=ch2co+h2	2.00E+13	0	0						
252	ch2hco+o=ch2o+hco	1.00E+14	0	0						
253	ch2hco+oh=ch2co+h2o	3.00E+13	0	0						
254	ch2hco+o2=ch2o+co+oh	3.00E+10	0	0						
255	ch2hco+ch3=c2h5+co+h	4.90E+14	-0.5	0						
256	ch2hco+ho2=ch2o+hco+oh	7.00E+12	0	0						
257	ch2hco+ho2=ch3hco+o2	3.00E+12	0	0						
258	ch2hco=ch3+co	1.17E+43	-9.8	43756						
259	ch2hco=ch2co+h	1.81E+43	-9.6	45868						
260	chocho(+m)=ch2o+co(+m)	4.27E+12	0	50600	8.91E+16	0	49200			
261	chocho=co+co+h2	4.07E+42	-8.5	69278						
262	chocho+oh=hco+co+h2o	1.00E+13	0	0						
263	chocho+o=hco+co+oh	7.24E+12	0	1970						
264	chocho+h=ch2o+hco	1.00E+12	0	0						
265	chocho+ho2=hco+co+h2o2	1.70E+12	0	10700						
266	chocho+ch3=hco+co+ch4	1.74E+12	0	8440						
267	chocho+o2=hco+co+ho2	1.00E+14	0	37000						
268	ch3co(+m)=ch3+co(+m)	3.00E+12	0	16722	1.20E+15	0	12518			
269	ch2co+o=co2+ch2	1.75E+12	0	1350						
270	ch2co+h=ch3+co	2.71E+04	2.8	714						
271	ch2co+h=hcco+h2	2.00E+14	0	8000						
272	ch2co+o=hcco+oh	1.00E+13	0	8000						
273	ch2co+oh=hcco+h2o	1.00E+13	0	2000						
274	ch2co+oh=ch2oh+co	3.73E+12	0	-1013						
275	ch2co(+m)=ch2+co(+m)	3.00E+14	0	70980	3.60E+15	0	59270			
276	c2h+h2=c2h2+h	4.09E+05	2.4	864.3						
277	c2h+o=ch+co	5.00E+13	0	0						
278	c2h+oh=hcco+h	2.00E+13	0	0						
279	c2h+o2=co+co+h	9.04E+12	0	-457						
280	hcco+c2h2=h2ccch+co	1.00E+11	0	3000						
281	hcco+h=ch2(s)+co	1.00E+14	0	0						
282	hcco+o=h+co+co	8.00E+13	0	0						
283	hcco+o=ch+co2	2.95E+13	0	1113						
284	hcco+o2=hco+co+o	2.50E+08	1	0						
285	hcco+o2=co2+hco	2.40E+11	0	-854						
286	hcco+ch=c2h2+co	5.00E+13	0	0						
287	hcco+hcco=c2h2+co+co	1.00E+13	0	0						
288	hcco+oh=c2o+h2o	3.00E+13	0	0						
289	c2o+h=ch+co	1.00E+13	0	0						
290	c2o+o=co+co	5.00E+13	0	0						
291	c2o+oh=co+co+h	2.00E+13	0	0						
292	c2o+o2=co+co+o	2.00E+13	0	0						
293	c3h8(+m4)=c2h5+ch3(+m4)	7.90E+22	-1.8	88629	7.24E+27	-2.88	67448	1	1.00E-15	1.50E+03
294	ic3h7+ho2=c3h8+o2	3.00E+12	0	0						
295	nc3h7+ho2=c3h8+o2	3.00E+12	0	0						
296	c3h8+ho2=nc3h7+h2o2	4.76E+04	2.5	16492						
297	c3h8+ho2=ic3h7+h2o2	9.64E+03	2.6	13909						
298	c3h8+oh=nc3h7+h2o	3.16E+07	1.8	934						
299	c3h8+oh=ic3h7+h2o	7.08E+06	1.9	-159						
300	c3h8+o=nc3h7+oh	3.73E+06	2.4	5504						

表 2.5

番号	反応式	cf		ef	cf0	0	ef0	acent	ts3		ts1	ts2
301	c3h8+o=ic3h7+oh	5.48E+05		2.5	3139							
302	c3h8+h=ic3h7+h2	1.30E+06		2.4	4471							
303	c3h8+h=nc3h7+h2	1.33E+06		2.5	6756							
304	c3h8+ch3=nc3h7+ch4	9.04E-01		3.6	7153							
305	c3h8+ch3=ic3h7+ch4	1.51E+00		3.5	5480							
306	c3h8+c2h3=ic3h7+c2h4	1.00E+03		3.1	8830							
307	c3h8+c2h3=nc3h7+c2h4	6.00E+02		3.3	10500							
308	c3h8+c2h5=ic3h7+c2h6	1.51E+00		3.5	7470							
309	c3h8+c2h5=nc3h7+c2h6	9.03E-01		3.6	9140							
310	c3h8+ac3h5=c3h6+nc3h7	2.35E+02		3.3	19842							
311	c3h8+ac3h5=c3h6+ic3h7	7.83E+01		3.3	18169							
312	nc3h7+(m4)=c2h4+ch3+(m4)	1.23E+13		-0.1	30202	5.49E+49	-10	35766	2.17	1.00E-15	2.51E+02	1.19E+03
313	c3h6+h+(m4)=ic3h7+(m4)	5.70E+09		1.2	874	1.64E+54	-11.1	9364	1	1.00E-15	2.60E+02	3.00E+03
314	ic3h7+o2=c2coo	1.75E+58	-14.9	12608								
315	ic3h7+o2=c2jcq	7.06E+27	-5.9	4802								
316	ic3h7+o2=c3h6+ho2	1.88E+20	-2.7	7109								
317	ic3h7+o2=ccyc2o+oh	4.54E+04	1.6	5000								
318	c2coo=c2jcq	6.18E+61	-16	43008								
319	c2coo=c3h6+ho2	1.51E+72	-18.7	51699								
320	c2coo=ccyc2o+oh	1.95E+57	-15	49595								
321	c2coo+ho2=c2cq+o2	2.29E+11	0	-1550								
322	c2cq=c2coj+oh	6.00E+14	0	42300								
323	c2coj=acetone+h	2.00E+14	0	21500								
324	c2coj=ch3+ch3hco	4.00E+14	0	17200								
325	c2coj+o2=acetone+ho2	4.90E+10	0	1590								
326	c2coj+co=ic3h7+co2	4.68E+02	3.2	5380								
327	c2jcq=ch2hco+ch3+oh	8.19E+07	0.5	29230								
328	c2jcq+o2=ccqcoo	1.08E+31	-6	5019								
329	c2jcq+o2=cc*ocq+oh	1.15E+27	-4.6	10312								
330	c2jcq+o2=cjcqcq	6.98E+30	-6.1	11470								
331	c2jcq+o2=c*c+q+ho2	1.41E+42	-9.2	20724								
332	ccqcoo=cc*ocq+oh	2.46E+23	-4	24702								
333	ccqcoo=cjcqcq	4.72E+25	-4.9	26209								
334	cjcqcq=cc*c+q+oh	1.17E+24	-4.7	21921								
335	cjcqcq=c*c+q+ho2	3.53E+20	-2.8	18874								
336	cc*c+q=ch3co+ch2o+oh	6.00E+14	0	42300								
337	acetone+oh=ch2co+ch3+h2o	7.23E+06	2	864								
338	acetone+o=ch2co+ch3+oh	3.00E+07	2	5115								
339	acetone+h=ch2co+ch3+h2	5.40E+02	3.5	5210								
340	nc3h7+o2=cccoo	8.57E+46	-10.8	11555								
341	nc3h7+o2=cccho+oh	2.04E+16	-1.3	18186								
342	nc3h7+o2=ccjcq	1.45E+36	-7.6	13874								
343	nc3h7+o2=c3h6+ho2	3.83E+26	-4.4	7724								
344	nc3h7+o2=cjcqcq	3.47E+45	-10.1	19704								
345	cccoo=c3h6+ho2	1.88E+61	-14.9	49716								
346	cccoo=cjcqcq	4.18E+34	-7.3	31801								
347	cccoo=ccjcq	1.61E+42	-9.8	35783								
348	ccjcq=c3h6+ho2	2.19E+30	-6.1	18849								
349	ccjcq=ccyc2o+oh	1.01E+20	-3.4	20038								
350	cjcqcq=c3h6+ho2	1.22E+57	-13.8	43391								
351	cjcqcq=cyccco+oh	2.23E+14	-1.3	18153								
352	ccjcq+o2=cccoocq	1.00E+36	-7.7	6314								
353	ccjcq+o2=cjcqcq	5.00E+34	-7.2	13951								
354	ccjcq+o2=c*c+q+ho2	8.54E+43	-9.5	22551								
355	ccjcq+o2=ccqc*o+oh	6.13E+28	-5	11272								
356	ccqc*o=ch3hco+hco+oh	6.00E+14	0	42300								
357	ccqc*o=ch2hco+ch2o+oh	6.00E+14	0	42300								
358	cccoocq=cjcqcq	3.21E+37	-8.3	34660								
359	cccoocq=ccqc*o+oh	1.21E+30	-5.8	28978								
360	cjcqcq=ccqc*o+oh	1.41E+33	-7.1	28454								
361	c*c+q=ch2chch2o+oh	6.00E+14	0	42300								
362	cjcqcq+o2=ccococq	6.92E+28	-5.3	4441								
363	cjcqcq+o2=ccqc*o+oh	1.46E+29	-5.5	10127								
364	cjcqcq+o2=cqjcqcq	4.81E+32	-6.7	12303								
365	cjcqcq+o2=c*c+q+ho2	1.76E+41	-8.8	20150								
366	ccococq=cqcc*o+oh	1.81E+18	-2.7	20340								
367	ccococq=cqjcqcq	4.08E+30	-6.2	30612								
368	ccococq=c*c+q+ho2	1.06E+38	-8	40074								
369	cqjcqcq=cqcc*o+oh	2.37E+30	-6.8	27650								
370	cqjcqcq=c*c+q+ho2	1.44E+24	-4	19130								
371	cccoo+ho2=cccoq+o2	2.29E+11	0	-1550								
372	cccoq=cccoj+oh	6.00E+14	0	42300								
373	cccoj+o2=cccho+ho2	1.95E+11	0	1980								
374	cccoj+co=nc3h7+co2	4.68E+02	3.2	5380								
375	cccoj+m=c2h5+ch2o+m	1.35E+38	-7	23800								

表 2.6

番号	反応式	cf		ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
376	cccj+m=cccho+h+m	1.16E+35	-5.9	25274							
377	cccho+oh=c2h5+co+h2o	1.00E+10		1	0						
378	cccho+o=c2h5+co+oh	7.24E+12		0	1970						
379	cccho+h=c2h5+co+h2	3.98E+13		0	4200						
380	ic3h7+h=c2h5+ch3	5.00E+13		0	0						
381	nc3h7+h=c2h5+ch3	1.00E+14		0	0						
382	c3h6=c2h2+ch4	2.50E+12		0	70000						
383	c3h6=ac3h4+h2	3.00E+13		0	80000						
384	pc3h5+h=c3h6	1.00E+14		0	0						
385	sc3h5+h=c3h6	1.00E+14		0	0						
386	c3h6+ho2=ac3h5+h2o2	9.64E+03	2.6	13910							
387	c3h6+oh=hoc3h6	2.92E+12	0	-1000							
388	hoc3h6+o2=hoc3h6o2	1.00E+12	0	-1100							
389	hoc3h6o2=ch3hco+ch2o+oh	6.00E+10	0	26000							
390	hoc3h6o2+ho2=hocqgc+o2	2.29E+11	0	-1550							
391	hocqgc=ch2oh+ch3hco+oh	6.00E+14	0	42300							
392	c3h6+oh=ac3h5+h2o	2.60E+06	2	-298							
393	c3h6+oh=sc3h5+h2o	1.11E+06	2	1451							
394	c3h6+oh=pc3h5+h2o	2.11E+06	2	2778							
395	c3h6+o=ch3co+ch3	5.00E+07	1.8	76							
396	c3h6+o=c2h5+hco	1.58E+07	1.8	-1216							
397	c3h6+o=ac3h5+oh	5.24E+11	0.7	5884							
398	c3h6+o=pc3h5+oh	1.20E+11	0.7	8959							
399	c3h6+o=sc3h5+oh	6.03E+10	0.7	7632							
400	c3h6+h=c2h4+ch3	4.00E+13	0	1302							
401	c3h6+h=ac3h5+h2	1.73E+05	2.5	2492							
402	c3h6+h=sc3h5+h2	4.09E+05	2.5	9794							
403	c3h6+h=pc3h5+h2	8.04E+05	2.5	12284							
404	c3h6+ch3=ac3h5+ch4	2.22E+00	3.5	5675							
405	c3h6+ch3=sc3h5+ch4	8.43E-01	3.5	11656							
406	c3h6+ch3=pc3h5+ch4	1.35E+00	3.5	12848							
407	c3h6+hco=ac3h5+ch2o	1.08E+07	1.9	17010							
408	c3h6+o2=ac3h5+ho2	1.00E+14	0	40000							
409	ch3chco+oh=ch2chco+h2o	4.00E+06	2	0							
410	ch3chco+o=ch2chco+oh	7.60E+08	1.5	8500							
411	ch3chco+h=ch2chco+h2	2.00E+05	2.5	2500							
412	ch3chco+h=c2h5+co	2.00E+13	0	2000							
413	ch3chco+o=ch3+hco+co	3.00E+07	2	0							
414	ch2chcho+oh=hoc3h4o	2.92E+12	0	-1000							
415	ch2chcho+oh=chchcho+h2o	1.01E+13	0	5936							
416	chchcho+o2=c2h2+co+ho2	2.00E+12	0	0							
417	chchcho=c2h2+hco	1.00E+14	0	33000							
418	hoc3h4o+o2=hoc3h4o3	1.00E+12	0	-1100							
419	hoc3h4o3=ch2o+chocho+oh	6.00E+10	0	26000							
420	hoc3h4o3+ho2=hocqgc+o2	2.29E+11	0	-1550							
421	hocqgc=ch2oh+chocho+oh	6.00E+14	0	42300							
422	ch2chcho+oh=ch2chco+h2o	9.24E+06	1.5	-962							
423	ch2chcho+o=ch2chco+oh	7.24E+12	0	1970							
424	ch2chcho+o=c2hco+hco	5.01E+07	1.8	76							
425	ch2chcho+h=ch2chco+h2	3.98E+13	0	4200							
426	ch2chcho+h=c2h4+hco	2.00E+13	0	1500							
427	ch2chcho+o2=ch2chco+ho2	3.00E+13	0	36000							
428	ch2chco=c2h3+co	1.00E+14	0	34000							
429	ch2chco+o=c2h3+co2	1.00E+14	0	0							
430	ac3h5+o2=ac3h5o2	6.98E+22	-4.4	-5119							
431	ac3h5+o2=ch2chcho+oh	1.82E+13	-0.4	22859							
432	ac3h5+o2=ac3h4+ho2	4.99E+15	-1.4	22428							
433	ac3h5+o2=ch2hco+ch2o	1.06E+10	0.3	12838							
434	ac3h5+o2=c2h2+ch2o+oh	2.78E+25	-4.8	15468							
435	ac3h5o2+ac3h5=ch2chch2o+ch2chch2o	2.40E+13	0	0							
436	ac3h5o2+ho2=ac3h5o2h+o2	2.29E+11	0	-1550							
437	ac3h5o2h=ch2chch2o+oh	6.00E+14	0	42300							
438	ac3h5+ho2=ch2chch2o+oh	1.00E+13	0	0							
439	ch2chch2o+o2=ch2chcho+ho2	4.00E+10	0	1100							
440	ch2chch2o+co=ac3h5+co2	4.68E+02	3.2	5380							
441	ch2chcho+h(+m6)=ch2chch2o(+m6)	5.40E+11	0.5	2600	1.50E+30	-4.8	5560	0.78	9.40E+01	1.56E+03	4.20E+03
442	ac3h5+oh=ac3h4+h2o	1.00E+13	0	0							
443	ac3h5+h=ac3h4+h2	5.00E+13	0	0							
444	ac3h5+h=c3h6	1.88E+26	-3.6	5468							
445	ac3h5+o=ch2chcho+h	1.81E+14	0	0							
446	ac3h5+ch3=ac3h4+ch4	3.02E+12	-0.3	-131							
447	ac3h5+ac3h5=c6h10	3.00E+47	-8	19780							
448	c6h10+oh=c6h9+h2o	4.16E+06	2	-298							
449	c6h9+ho2=ch2chcho+ac3h5+oh	5.00E+12	0	0							
450	pc3h5+o2=ch3hco+hco	1.09E+23	-3.3	3892							

表 2.7

番号	反応式	cf		ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
451	pc3h5+o2=ch3chco+h+o	1.60E+15	-0.8	3135							
452	pc3h5+o=ch3chco+h	1.00E+14	0	0							
453	pc3h5+h=pc3h4+h2	2.00E+13	0	0							
454	pc3h5+oh=pc3h4+h2o	1.00E+13	0	0							
455	pc3h5+h=ac3h5+h	1.00E+14	0	0							
456	sc3h5+h=ac3h5+h	1.00E+14	0	0							
457	sc3h5+o2=ch3co+ch2o	1.09E+22	-3.3	3892							
458	sc3h5+o=ch2co+ch3	1.00E+14	0	0							
459	sc3h5+h=pc3h4+h2	4.00E+13	0	0							
460	sc3h5+oh=pc3h4+h2o	2.00E+13	0	0							
461	ac3h4+h=h2ccch+h2	2.00E+07	2	5000							
462	ac3h4+o=c2h4+co	1.34E+07	1.9	179							
463	ac3h4+oh=h2ccch+h2o	1.00E+07	2	1000							
464	ac3h4+ch3=h2ccch+ch4	1.50E+00	3.5	5600							
465	ac3h4=pc3h4	1.48E+13	0	60401							
466	pc3h4+h=h2ccch+h2	2.00E+07	2	5000							
467	pc3h4+o=c2h4+co	1.50E+13	0	2102							
468	pc3h4+oh=h2ccch+h2o	1.00E+07	2	1000							
469	pc3h4+ch3=h2ccch+ch4	1.50E+00	3.5	5600							
470	pc3h4+h=ch3+c2h2	5.12E+10	1	2060							
471	pc3h4+h(+m)=sc3h5(+m)	6.50E+12	0	2000	8.45E+39	-7.27	6577				
472	ac3h4+h(+m)=ac3h5(+m)	1.20E+11	0.7	3007	5.56E+33	-5	4448				
473	ac3h4+h(+m)=sc3h5(+m)	8.49E+12	0	2000	1.11E+34	-5	4448				
474	h2ccch+o2=ch2co+hco	3.00E+10	0	2868							
475	h2ccch+o=c2h2+c2h	1.40E+14	0	0							
476	h2ccch+h=c3h2+h2	5.00E+13	0	1000							
477	h2ccch+oh=c3h2+h2o	2.00E+13	0	0							
478	h2ccch+ch3=c3h2+ch4	2.00E+13	0	0							
479	h2ccch+h(+m9)=ac3h4(+m9)	1.66E+15	-0.4	0	3.36E+45	-8.52	6293				
480	h2ccch+h(+m9)=pc3h4(+m9)	1.66E+15	-0.4	0	8.78E+45	-8.9	7974				
481	c3h2+o2=hcco+co+h	2.00E+12	0	1000							
482	c3h2+o=c2h2+co	1.00E+14	0	0							
483	c3h2+oh=c2h2+hco	5.00E+13	0	0							
484	n+no=n2+o	3.50E+13	0	330							
485	n+o2=no+o	2.65E+12	0	6400							
486	n+oh=no+h	7.33E+13	0	1120							
487	n2o+o=n2+o2	1.40E+12	0	10810							
488	n2o+o=2no	2.90E+13	0	23150							
489	n2o+h=n2+oh	4.40E+14	0	18880							
490	n2o+oh=n2+ho2	2.00E+12	0	21060							
491	n2o(+m10)=n2+o(+m10)	1.30E+11	0	59620	6.20E+14	0	56100				
492	no+ho2=no2+oh	2.11E+12	0	-480							
493	no+o+m10=no2+m10	1.06E+20	-1.4	0							
494	no2+o=no+o2	3.90E+12	0	-240							
495	no2+h=no+oh	1.32E+14	0	360							
496	nh+o=no+h	5.00E+13	0	0							
497	nh+h=n+h2	3.20E+13	0	330							
498	nh+oh=hno+h	2.00E+13	0	0							
499	nh+oh=n+h2o	2.00E+09	1.2	0							
500	nh+o2=hno+o	4.61E+05	2	6500							
501	nh+o2=no+oh	1.28E+06	1.5	100							
502	nh+n=n2+h	1.50E+13	0	0							
503	nh+h2o=hno+h2	2.00E+13	0	13850							
504	nh+no=n2+oh	2.16E+13	-0.2	0							
505	nh+no=n2o+h	4.16E+14	-0.5	0							
506	nh2+o=oh+nh	7.00E+12	0	0							
507	nh2+o=h+hno	4.60E+13	0	0							
508	nh2+h=nh+h2	4.00E+13	0	3650							
509	nh2+oh=nh+h2o	9.00E+07	1.5	-460							
510	nnh=n2+h	3.30E+08	0	0							
511	nnh+m10=n2+h+m10	1.30E+14	-0.1	4980							
512	nnh+o2=ho2+n2	5.00E+12	0	0							
513	nnh+o=oh+n2	2.50E+13	0	0							
514	nnh+o=nh+no	7.00E+13	0	0							
515	nnh+h=h2+n2	5.00E+13	0	0							
516	nnh+oh=h2o+n2	2.00E+13	0	0							
517	nnh+ch3=ch4+n2	2.50E+13	0	0							
518	h+no+m10=hno+m10	8.95E+19	-1.3	740							
519	hno+o=no+oh	2.50E+13	0	0							
520	hno+h=h2+no	4.50E+11	0.7	660							
521	hno+oh=no+h2o	1.30E+07	1.9	-950							
522	hno+o2=ho2+no	1.00E+13	0	13000							
523	cn+o=co+n	7.70E+13	0	0							
524	cn+oh=nco+h	4.00E+13	0	0							
525	cn+h2o=hcn+oh	8.00E+12	0	7460							

表 2.8

番号	反応式	cf		ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
526	cn+o2=nco+o	6.14E+12	0	-440							
527	cn+h2=hcn+h	2.10E+13	0	4710							
528	nco+o=no+co	2.35E+13	0	0							
529	nco+h=nh+co	5.40E+13	0	0							
530	nco+oh=no+h+co	2.50E+12	0	0							
531	nco+n=n2+co	2.00E+13	0	0							
532	nco+o2=no+co2	2.00E+12	0	20000							
533	nco+m10=n+co+m10	8.80E+16	-0.5	48000							
534	nco+no=n2o+co	2.85E+17	-1.5	740							
535	nco+no=n2+co2	5.70E+18	-2	800							
536	hcn+m10=h+cn+m10	1.04E+29	-3.3	126600							
537	hcn+o=nco+h	1.11E+04	2.6	4980							
538	hcn+o=nh+co	2.77E+03	2.6	4980							
539	hcn+o=cn+oh	2.13E+09	1.6	26600							
540	hcn+oh=hocn+h	1.10E+06	2	13370							
541	hcn+oh=hnco+h	4.40E+03	2.3	6400							
542	hcn+oh=nh2+co	1.60E+02	2.6	9000							
543	h+hcn+m10=h2cn+m10	1.40E+26	-3.4	1900							
544	h2cn+n=n2+ch2	6.00E+13	0	400							
545	c+n2=cn+n	6.30E+13	0	46020							
546	ch+n2=hcn+n	2.86E+08	1.1	20400							
547	ch+n2(+m10)=hcnn(+m10)	3.10E+12	0.1	0	1.30E+25	-3.16	740	0.667	2.35E+02	2.12E+03	4.54E+03
548	ch2+n2=hcn+nh	1.00E+13	0	74000							
549	ch2(s)+n2=nh+hcn	1.00E+11	0	65000							
550	c+no=cn+o	1.90E+13	0	0							
551	c+no=co+n	2.90E+13	0	0							
552	ch+no=hcn+o	5.00E+13	0	0							
553	ch+no=h+nco	2.00E+13	0	0							
554	ch+no=n+hco	3.00E+13	0	0							
555	ch2+no=h+hncn	3.10E+17	-1.4	1270							
556	ch2+no=oh+hcn	2.90E+14	-0.7	760							
557	ch2+no=h+hcn	3.80E+13	-0.4	580							
558	ch2(s)+no=h+hncn	3.10E+17	-1.4	1270							
559	ch2(s)+no=oh+hcn	2.90E+14	-0.7	760							
560	ch2(s)+no=h+hcn	3.80E+13	-0.4	580							
561	ch3+no=hcn+h2o	9.60E+13	0	28800							
562	ch3+no=h2cn+oh	1.00E+12	0	21750							
563	hcnn+o=co+h+n2	2.20E+13	0	0							
564	hcnn+o=hcn+no	2.00E+12	0	0							
565	hcnn+o2=o+hco+n2	1.20E+13	0	0							
566	hcnn+oh=h+hco+n2	1.20E+13	0	0							
567	hcnn+h=ch2+n2	1.00E+14	0	0							
568	hnco+o=nh+co2	9.80E+07	1.4	8500							
569	hnco+o=hno+co	1.50E+08	1.6	44000							
570	hnco+o=nco+oh	2.20E+06	2.1	11400							
571	hnco+h=nh2+co	2.25E+07	1.7	3800							
572	hnco+h=h2+nco	1.05E+05	2.5	13300							
573	hnco+oh=nco+h2o	4.65E+12	0	6850							
574	hnco+oh=nh2+co2	1.55E+12	0	6850							
575	hnco+m10=nh+co+m10	1.18E+16	0	84720							
576	hcn+o=h+hncn	2.10E+15	-0.7	2850							
577	hcn+o=oh+hcn	2.70E+11	0.2	2120							
578	hcn+o=nh2+co	1.70E+14	-0.8	2890							
579	hcn+o=h+hncn	2.00E+07	2	2000							
580	hcco+no=hcn+co	2.35E+13	0	0							
581	ch3+n=h2cn+h	6.10E+14	-0.3	290							
582	ch3+n=hcn+h2	3.70E+12	0.1	-90							
583	nh3+h=nh2+h2	5.40E+05	2.4	9915							
584	nh3+oh=nh2+h2o	5.00E+07	1.6	955							
585	nh3+o=nh2+oh	9.40E+06	1.9	6460							
586	ch3no2(+m)=ch3+no2(+m)	1.78E+16	0	58500	1.26E+17	0	42000				
587	ch3no2+oh=ch2o+no+h2o	3.00E+06	2	2000							
588	ch3no2+o=ch2o+no+oh	1.51E+13	0	5354							
589	ch3no2+h=ch2o+no+h2	4.67E+12	0	3732							
590	ch3no2+ch3=ch2o+no+ch4	7.08E+11	0	11140							
591	ac3h5+no2=c3h5no2	1.44E+50	-12	10260							
592	c3h5no2+oh=ch2cho+no+h2o	2.08E+06	2	-298							
593	c3h5no2+h=ch2cho+no+h2	1.15E+05	2.5	2492							
594	c3h5no2+ch3=ch2cho+no+ch4	1.48E+00	3.5	5675							
595	hno2+h=no2+h2	2.40E+08	1.5	5087							
596	hno2+o=no2+oh	1.70E+08	1.5	3020							
597	hno2+oh=no2+h2o	1.20E+06	2	-596							
598	hno2+ch3=no2+ch4	8.10E+05	1.9	4838							
599	hno2=hono	1.30E+29	-5.5	52814							
600	hono+ch3=no2+ch4	8.10E+05	1.9	5504							

表 2.9

番号	反応式	cf	ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
601	hono+oh=no2+h2o	1.26E+10	1	135						
602	hono+o=no2+oh	1.21E+13	0	5962						
603	hono+h=no2+h2	1.21E+13	0	7353						
604	hono+hono=no+no2+h2o	1.02E+13	0	8540						
605	no+oh(+m)=hono(+m)	2.00E+13	0	0	2.33E+23	-2.4	0			
606	oh+no2(+m6)=hono2(+m6)	2.40E+13	0	0	6.42E+32	-5.49	2351	0.525	1.00E-15	1.00E-15 1.00E+15
607	hono2+oh=no3+h2o	1.03E+10	0	-1240						
608	no3=no+o2	2.50E+06	0	12122						
609	no2+o+m=no3+m	2.94E+21	-2	0						
610	no2+no2=no3+no	9.60E+09	0.7	20923						
611	no2+no2=no3+no	1.60E+12	0	26123						
612	ch3o+no(+m)=ch3ono(+m)	1.21E+13	0	-322	2.70E+27	-3.5	0			
613	ch3o2+no=ch3o+no2	2.53E+12	0	-358						
614	c2h5o2+no=ch3ch2o+no2	2.53E+12	0	-358						
615	hoc2h4o2+no=ch2oh+ch2o+no2	2.53E+12	0	-358						
616	ac3h5o2+no=ch2chch2o+no2	2.53E+12	0	-358						
617	hoc3h6o2+no=ch2oh+ch3hco+no2	2.53E+12	0	-358						
618	hoc3h4o3+no=chocho+ch2oh+no2	2.53E+12	0	-358						
619	ccccoo+no=cccoj+no2	2.11E+12	0	-358						
620	c2coo+no=c2coj+no2	2.11E+12	0	-358						
621	ch3o+no=ch2o+hno	6.00E+13	-0.6	0						
622	ch3ch2o+no=ch3hco+hno	4.00E+13	-0.6	0						
623	ch2chch2o+no=ch2chcho+hno	4.00E+13	-0.6	0						
624	cccoj+no=cccho+hno	4.00E+13	-0.6	0						
625	ch3+no(+m)=ch3no(+m)	2.17E+11	0.6	0	2.06E+27	-3.5	0			
626	co+no2=co2+no	9.04E+13	0	33782						
627	ch3+no2=ch3o+no	1.50E+13	0	0						
628	ch3o+no2(+m)=ch3ono2(+m)	1.20E+13	0	0	1.40E+30	-4.5	0			
629	c2h5+no2=ch3ch2o+no	2.70E+13	0	0						
630	ch2hco+no2=ch2o+hco+no	1.00E+13	0	0						
631	ac3h5+no2=ch2chch2o+no	2.30E+13	0	0						
632	c6h9+no2=ch2chcho+ac3h5+no	2.00E+13	0	0						
633	no2+ho2=hono+o2	6.31E+08	1.3	5000						
634	ch3o+no2=ch2o+hono	4.00E+12	0	2285						
635	ch3ch2o+no2=ch3hco+hono	2.70E+12	0	105						
636	ch2chch2o+no2=ch2chcho+hono	2.70E+12	0	105						
637	c2coj+no2=acetone+hono	2.70E+12	0	105						
638	cccoj+no2=cccho+hono	2.70E+12	0	105						

表 2.1 ~ 表 2.9 の補足

番号  $i$  の化学種を  $Y_i$  と書く。例えば、 $Y_1 = \text{H}_2$ 、 $Y_3 = \text{CH}_4$ 、 $Y_9 = \text{CO}_2$ 、 $Y_{11} = \text{O}_2$ 。

$$m = \sum_{i=1}^{126} Y_i$$

$$m1 = m - \text{H}_2\text{O} - \text{H}_2 - \text{N}_2 + 9 \text{CH}_4 + 2.8 \text{CO}_2 + 0.9 \text{CO}$$

$$m2 = m - \text{H}_2\text{O} - \text{H}_2$$

$$m3 = m + 5.4 \text{H}_2\text{O}$$

$$m4 = m + 4 \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2 + 2 \text{CO}_2 + \text{CO}$$

$$m5 = m + 9 \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2 + 2 \text{CO}_2 + \text{CO}$$

$$m6 = m + 4 \text{H}_2\text{O}$$

$$m7 = m + 11 \text{H} + 3 \text{C}_2\text{H}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$$

$$m8 = m + 4 \text{H}_2\text{O} + 0.87 \text{H}_2 + 2 \text{CO}_2 + 0.87 \text{CO} + 1.81 \text{CH}_4$$

$$m9 = m + 4 \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2 + 2 \text{CO}_2 + \text{CO} + \text{O}_2 + \text{C}_2\text{H}_2$$

$$m10 = m + \text{H}_2 + 5 \text{H}_2\text{O} + \text{CH}_4 + 0.5 \text{CO} + \text{CO}_2 + 2 \text{C}_2\text{H}_6 - 0.3 \text{Ar}$$



表 3.1

化学種	T_bnd (K)	tdl_1	tdl_2	tdl_3	tdl_4	tdl_5	tdl_6	tdl_7
H2	1000	3.2981240E+00	8.2494420E-04	-8.1430150E-07	-9.4754340E-11	4.1348720E-13	-1.0125210E+03	-3.2940940E+00
H	1000	2.5000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	2.5471630E+04	-4.6011760E-01
CH4	1000	7.7874150E-01	1.7476680E-02	-2.7834090E-05	3.0497080E-08	-1.2239310E-11	-9.8252290E+03	1.3722190E+01
CH3	1000	2.4304430E+00	1.1124100E-02	-1.6802200E-05	1.6218290E-08	-5.8649530E-12	1.6423780E+04	6.7897940E+00
CH2	1350	3.4962399E+00	2.2025864E-03	-4.2382880E-07	1.3648471E-11	4.3193737E-15	4.5919277E+04	2.9496435E+00
CH	1000	3.2002020E+00	2.0728760E-03	-5.1344310E-06	5.7338900E-09	-1.9555330E-12	7.0452590E+04	3.3315880E+00
CH2O	1000	1.6527310E+00	1.2631440E-02	-1.8881680E-05	2.0500310E-08	-8.4132370E-12	-1.4865400E+04	1.3784820E+01
HCO	1000	2.8983300E+00	6.1991470E-03	-9.6230840E-06	1.0898250E-08	-4.5748850E-12	4.1599220E+03	8.9836140E+00
CO2	1000	2.2757250E+00	9.9220720E-03	-1.0409110E-05	6.8666870E-09	-2.1172800E-12	-4.8373140E+04	1.0188490E+01
CO	1000	3.2624520E+00	1.5119410E-03	-3.8817550E-06	5.5819440E-09	-2.4749510E-12	-1.4310540E+04	4.8488970E+00
O2	1000	3.2129360E+00	1.1274860E-03	-5.7561500E-07	1.3138770E-09	-8.7685540E-13	-1.0052490E+03	6.0347380E+00
O	1000	2.9464290E+00	-1.6381660E-03	2.4210320E-06	-1.6028430E-09	3.8906960E-13	2.9147640E+04	2.9639950E+00
OH	1000	3.6372660E+00	1.8509100E-04	-1.6761650E-06	2.3872030E-09	-8.4314420E-13	3.6067820E+03	1.3588600E+00
HO2	1000	2.9799630E+00	4.9966970E-03	-3.7909970E-06	2.3541920E-09	-8.0890240E-13	1.7622740E+02	9.2227240E+00
H2O2	1000	3.3887540E+00	6.5692260E-03	-1.4850130E-07	-4.6258060E-09	2.4715150E-12	-1.7663150E+04	6.7853630E+00
H2O	1000	3.3868420E+00	3.4749820E-03	-6.3546960E-06	6.9685810E-09	-2.5065880E-12	-3.0208110E+04	2.5902330E+00
C2H	1000	2.7377040E+00	8.0484460E-03	-9.2443100E-06	6.5252590E-09	-1.9395800E-12	6.6838130E+04	7.3002200E+00
HCCO	1000	5.0479650E+00	4.4534780E-03	2.2682830E-07	-1.4820950E-09	2.2507420E-13	1.9658920E+04	4.8184390E-01
C2H2	1000	2.0135620E+00	1.5190450E-02	-1.6163190E-05	9.0789920E-09	-1.9127460E-12	2.6124440E+04	8.8053780E+00
C2H3	1671	2.7392594E+00	7.0301159E-03	2.3664730E-06	-3.5956974E-09	8.9175649E-13	3.4286898E+04	1.0153154E+01
C2H4	1000	-8.6148800E-01	2.7961630E-02	-3.3886770E-05	2.7851520E-08	-9.7378790E-12	5.5730460E+03	2.4211490E+01
C2H5	1375	1.4737485E+00	1.6360661E-02	-4.3289683E-06	-1.1727066E-09	5.7232588E-13	1.3332699E+04	1.6634985E+01
C2H6	1000	1.4625390E+00	1.5494670E-02	5.7805070E-06	-1.2578320E-08	4.5862670E-12	-1.1239180E+04	1.4432290E+01
CH2OH	1410	2.6006785E+00	1.2844785E-02	-8.3379619E-06	2.7572761E-09	-3.5704111E-13	-2.3347872E+03	1.1327231E+01
CH3O	1000	2.1062040E+00	7.2165950E-03	5.3384720E-06	-7.3776360E-09	2.0756110E-12	9.7860110E+02	1.3152180E+01
HCCOH	1000	3.8994650E+00	9.7010750E-03	-3.1193090E-07	-5.5377320E-09	2.4657320E-12	8.7011900E+03	4.4918750E+00
H2CCCH	1000	4.7542000E+00	1.1080280E-02	2.7933230E-07	-5.4792120E-09	1.9496290E-12	3.9888830E+04	5.8545490E-01
C3H2	1000	3.1667140E+00	2.4825720E-02	-4.5916370E-05	4.2680190E-08	-1.4821520E-11	6.3504210E+04	8.8694460E+00
CH2(S)	1359	3.3234070E+00	2.2806258E-03	-2.4815602E-07	-1.0206539E-10	2.4882662E-14	5.0495447E+04	3.0940150E+00
CH2CO	1000	2.9749710E+00	1.2118710E-02	-2.3450460E-06	-6.4668850E-09	3.9056490E-12	-7.6326370E+03	8.6735530E+00
C2O	1000	3.3688510E+00	8.2418030E-03	-8.7651450E-06	5.5692620E-09	-1.5400090E-12	3.3170810E+04	6.7133140E+00
HCOH	1398	-2.8215742E+00	3.5733170E-02	-3.8086158E-05	1.8620595E-08	-3.4595784E-12	1.1295667E+04	3.4848776E+01
CH3OH	1000	2.6601150E+00	7.3415080E-03	7.1700510E-06	-8.7931940E-09	2.3905700E-12	-2.5353480E+04	1.1232630E+01
CH2HCO	1000	3.4090620E+00	1.0738570E-02	1.8914920E-06	-7.1585830E-09	2.8673850E-12	1.5214770E+03	9.5582900E+00
C3H6	1000	1.4933070E+00	2.0925180E-02	4.4867940E-06	-1.6689120E-08	7.1581460E-12	1.0748260E+03	1.6145340E+01
AC3H5	1000	2.2764860E+00	1.9855640E-02	1.1238420E-06	-1.0145760E-08	3.4413420E-12	1.7894970E+04	1.3725150E+01
PC3H5	1000	3.1618630E+00	1.5181000E-02	2.7226590E-06	-5.1771120E-09	5.4352860E-14	3.0955480E+04	1.1979730E+01
SC3H5	1000	3.3858110E+00	1.4045340E-02	3.2041270E-06	-3.8241200E-09	-9.0537420E-13	2.9090660E+04	1.1266490E+01
CH2CHCHO	1389	5.8046788E-01	3.1638467E-02	-2.2793272E-05	8.4230158E-09	-1.2732798E-12	-9.4714682E+03	2.2126423E+01
PC3H4	1400	3.0297300E+00	1.4989610E-02	-1.3985000E-06	-3.9696190E-09	1.3882170E-12	2.1484080E+04	8.0045940E+00
AC3H4	1400	2.5398310E+00	1.6334370E-02	-1.7649500E-06	-4.6473650E-09	1.7291310E-12	2.2512430E+04	9.9357020E+00
CH3CO	1000	3.1252780E+00	9.7782200E-03	4.5214480E-06	-9.0094620E-09	3.1937180E-12	-4.1085080E+03	1.1228850E+01
CH2CHCO	1391	7.8337045E-01	2.9035390E-02	-2.2884693E-05	9.2564523E-09	-1.5221324E-12	6.1340953E+04	2.2085890E+01
CH3CHCO	1392	2.6918731E+00	2.4976140E-02	-1.6171211E-05	5.4639111E-09	-7.6249664E-13	-1.1875880E+04	1.1989810E+01
CH3HCO	1000	2.5056950E+00	1.3369910E-02	4.6719530E-06	-1.1281400E-08	4.2635660E-12	-2.1245890E+04	1.3350890E+01
CHOCCHO	1396	1.8810512E+00	2.3638637E-02	-1.8344330E-05	6.8484296E-09	-9.9273367E-13	-2.6928019E+04	1.7299475E+01
IC3H7	1373	5.8635846E-01	3.2102106E-02	-1.6951700E-05	3.9898630E-09	-2.8751033E-13	9.2600359E+03	2.2663258E+01
NC3H7	1390	1.1336657E-01	3.5417139E-02	-2.2807370E-05	7.8874681E-09	-1.1685696E-12	1.0682159E+04	2.4552076E+01
C2H5OH	1000	4.8586957E+00	-3.7401726E-03	6.9555378E-05	-8.8654796E-08	3.5168835E-11	-2.9996132E+04	4.8018545E+00
C2H4OH	1405	7.7615761E-01	2.9100251E-02	-2.1398057E-05	8.1683389E-09	-1.2559160E-12	-5.4680840E+03	2.2106019E+01
CH3CHOH	1524	2.1002681E+00	1.9262668E-02	-5.1743744E-06	-1.9619058E-09	9.3639706E-13	-6.1287304E+03	1.4090930E+01
CH2CHCH2O	1000	-2.0881483E-03	3.5847320E-02	-2.6760635E-05	1.0691430E-08	-1.7633073E-12	9.8967308E+03	2.5450151E+01
CH3CH2O	1405	-2.7129638E-01	2.9883981E-02	-1.9709055E-05	6.3733989E-09	-7.7796505E-13	-3.1639720E+03	2.4770600E+01
HCOOH	1500	9.3260310E-01	1.8910020E-02	-1.5549640E-05	7.2900310E-09	-1.4836950E-12	-4.7600710E+04	1.9506530E+01
C3H8	1000	8.9692080E-01	2.6689860E-02	5.4314250E-06	-2.1260010E-08	9.2433300E-12	-1.3954920E+04	1.9355330E+01
C2H5O2	1401	1.1450926E+00	3.4095049E-02	-2.6331716E-05	1.0921131E-08	-1.8697441E-12	-3.7586270E+03	2.2510653E+01
C2H2OH	1432	4.6520296E+00	4.1880899E-03	9.0205513E-06	-8.6693959E-09	2.1780344E-12	1.5877099E+04	4.7808999E+00
C	1000	2.4985850E+00	8.0857770E-05	-2.6976970E-07	3.0407290E-10	-1.1066520E-13	8.5458780E+04	4.7534590E+00
AR	1000	2.5000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	-7.4537500E+02	4.3660010E+00
N	1000	2.5030710E+00	-2.1800180E-05	5.4205290E-08	-5.6475600E-11	2.0999040E-14	5.6098900E+04	4.1675660E+00
NH	1000	3.3397580E+00	1.2530090E-03	-3.4916460E-06	4.2188120E-09	-1.5576180E-12	4.1850470E+04	2.5071810E+00
NH2	1000	3.4324930E+00	3.2995400E-03	-6.6136000E-06	8.5909470E-09	-3.5720470E-12	2.1772280E+04	3.0901110E+00
NH3	1000	2.2043520E+00	1.0114760E-02	-1.4652650E-05	1.4472350E-08	-5.3285090E-12	-6.5254880E+03	8.1271380E+00
NNH	1000	3.5013440E+00	2.0535870E-03	7.1704100E-07	4.9213480E-10	-9.6711700E-13	2.8333470E+04	6.3918370E+00
NO	1000	3.3765420E+00	1.2530630E-03	-3.3027510E-06	5.2178100E-09	-2.4462630E-12	9.8179610E+03	5.8295900E+00
NO2	1000	2.6706000E+00	7.8385010E-03	-8.0638650E-06	6.1617150E-09	-2.3201500E-12	2.8962910E+03	1.1612070E+01
N2O	1000	2.5430580E+00	9.4921930E-03	-9.7927750E-06	6.2638450E-09	-1.9018260E-12	8.7651000E+03	9.5112220E+00
HNO	1000	2.7844030E+00	6.6096460E-03	-9.3002230E-06	9.4379800E-09	-3.7531460E-12	1.0918780E+04	9.0356290E+00
CN	1000	3.6632040E+00	-1.1565290E-03	2.1634090E-06	1.8542080E-10	-8.2146950E-13	5.1281180E+04	3.7390160E+00
HCN	1000	2.4177870E+00	9.0318560E-03	-1.1077270E-05	7.9801410E-09	-2.3111410E-12	1.5010440E+04	8.2228910E+00
H2CN	1000	2.8516610E+00	5.6952330E-03	1.0711440E-06	-1.6226120E-09	-2.3511080E-13	2.8637820E+04	8.9927510E+00
HCNN	1000	2.5243194E+00	1.5960619E-02	-1.8816354E-05	1.2125540E-08	-3.2357378E-12	5.4261984E+04	1.1675870E+01
HCNO	1000	3.1848590E+00	9.7523160E-03	-1.2802030E-06	-6.1631040E-09	3.2262750E-12	1.7979070E+04	6.1238440E+00
HOCN	1400	3.7894240E+00	5.3879810E-03	-6.5182700E-07	-1.4201640E-09	5.3679690E-13	-3.1353350E+03	6.6670520E+00
HNCO	1400	3.8584670E+00	6.3903420E-03	-9.0166280E-07	-1.8982240E-09	7.6513800E-13	-1.5623430E+04	4.8824930E+00

表 3.2

化学種	T_bnd (K)	tdl_1	tdl_2	tdl_3	tdl_4	tdl_5	tdl_6	tdl_7
NCO	1400	3.3595930E+00	5.3932390E-03	-8.1445850E-07	-1.9128680E-09	7.8367940E-13	1.4628090E+04	6.5496940E+00
N2	1000	3.2986770E+00	1.4082400E-03	-3.9632220E-06	5.6415150E-09	-2.4448550E-12	-1.0209000E+03	3.9503720E+00
HNO2	1500	1.9348380E+00	1.0100360E-02	-4.9646160E-06	8.7011200E-10	-2.3241350E-15	-8.1054840E+03	1.4732500E+01
HONO	1000	2.2904130E+00	1.4099220E-02	-1.3678720E-05	7.4987800E-09	-1.8769050E-12	-1.0431950E+04	1.3280770E+01
NO3	1000	1.2210760E+00	1.8787970E-02	-1.3443210E-05	1.2746010E-09	1.3540600E-12	7.4731440E+03	1.8402030E+01
HONO2	1500	7.8776680E-01	2.3823290E-02	-2.2059640E-05	1.0340480E-08	-1.9728570E-12	-1.6304420E+04	2.1089640E+01
C2COO	1388	1.4994164E+00	4.4308120E-02	-3.2241446E-05	1.2968714E-08	-2.2337057E-12	-9.1163722E+03	2.1547187E+01
C2CQ	1393	5.0808137E-01	5.3472776E-02	-4.1331650E-05	1.7122122E-08	-2.9481724E-12	-2.7323798E+04	2.4721000E+01
C2JCQ	1393	1.2389159E+00	4.9070145E-02	-3.9051829E-05	1.6592705E-08	-2.9119820E-12	-2.7048341E+03	2.3494107E+01
CCYC2O	1402	-2.3694292E+00	4.7509250E-02	-3.7847767E-05	1.5726186E-08	-2.6556295E-12	-1.2112209E+04	3.4577702E+01
CCQCQO	1386	2.6536949E+00	5.7394617E-02	-4.7060575E-05	2.0436018E-08	-3.6566191E-12	-2.0106511E+04	2.1387538E+01
CC*OCQ	1372	4.3349906E+00	3.6731372E-02	-2.0968960E-05	5.6032850E-09	-5.6040975E-13	-3.8638895E+04	1.2429899E+01
CJCCQ	1384	1.9204714E+00	4.3838049E-02	-3.0495008E-05	1.1124667E-08	-1.7066783E-12	-5.4155624E+02	2.1837942E+01
C*CCQ	1387	2.1668916E+00	3.9507015E-02	-2.6925794E-05	9.6435494E-09	-1.4520955E-12	-9.3490883E+03	1.8821253E+01
QCQJCQ	1378	3.7014775E+00	5.1427729E-02	-3.6296648E-05	1.2909658E-08	-1.8800532E-12	-1.3883478E+04	2.0258888E+01
CQCQ*O	1379	3.2088506E+00	4.1138679E-02	-2.6169641E-05	8.0803304E-09	-9.7629419E-13	-3.5513641E+03	1.6952107E+01
COOCCQ	1382	3.3152486E+00	5.2567264E-02	-3.9607382E-05	1.5966456E-08	-2.7139982E-12	-1.8953900E+04	2.0117701E+01
CCCOO	1384	2.1304511E+00	3.9490248E-02	-2.4727691E-05	8.4381745E-09	-1.2744344E-12	-6.9489635E+03	2.0098966E+01
CCQC*O	1388	1.1050724E+00	5.2739671E-02	-4.3180577E-05	1.8161829E-08	-3.1053557E-12	-3.6362754E+04	2.4721682E+01
CCJCQ	1369	2.2424729E+00	3.9293218E-02	-2.2120554E-05	5.2521996E-09	-3.0394507E-13	-1.8322713E+03	2.1553610E+01
CJCQCQ	1386	2.4629190E+00	6.1512848E-02	-5.2399366E-05	2.2810641E-08	-4.0115232E-12	-1.3697832E+04	2.3763616E+01
CCOCCQ	1386	2.6536949E+00	5.7394627E-02	-4.7060575E-05	2.0436018E-08	-3.6566191E-12	-2.0106511E+04	2.1387538E+01
CYCCCO	1401	-4.2671146E+00	4.9745125E-02	-3.7382599E-05	1.4421479E-08	-2.2515327E-12	-9.8759988E+03	4.3500491E+01
CH3OOH	1000	4.9652507E+00	9.2343510E-04	3.4455956E-05	-4.4469600E-08	1.7456120E-11	-1.6726970E+04	2.9880275E+00
CH3O2	2000	2.0986490E+00	1.5786357E-02	7.5683261E-08	-1.1274587E-08	5.6665133E-12	2.0695879E+03	1.5007068E+01
C2H5OOH	1409	1.7644209E-01	4.2947536E-02	-3.4505619E-05	1.4090980E-08	-2.2971020E-12	-2.2362813E+04	2.5615687E+01
CCCO	1385	1.1621336E+00	4.8347015E-02	-3.2933787E-05	1.1760066E-08	-1.7680348E-12	-2.5155839E+04	2.3201045E+01
CCCOJ	1390	2.8970652E-01	3.9307556E-02	-2.4806935E-05	8.0708357E-09	-1.0799829E-12	-6.2447427E+03	2.5438781E+01
CCCHO	1378	2.1630844E+00	2.9550126E-02	-1.5244625E-05	3.4950395E-09	-2.3889663E-13	-2.4226014E+04	1.6115335E+01
CQC*O	1395	5.0623011E+00	2.4480199E-02	-1.6586885E-05	6.2524611E-09	-9.9261585E-13	-3.0192983E+04	6.3791753E+00
CH2CH2OOH	1424	3.0305312E+00	2.6275569E-02	5.5724319E-06	-1.8111952E-08	5.8305582E-12	1.5862680E+03	1.3803534E+01
AC3H5O2	1376	2.3727208E+00	3.3270534E-02	-1.9242064E-05	5.0400167E-09	-4.4600389E-13	9.6298181E+03	1.7655018E+01
AC3H5O2H	1367	1.9010337E+00	4.0012360E-02	-2.4150468E-05	6.4002698E-09	-5.4102308E-13	-8.4099692E+03	2.0541778E+01
C6H10	1395	-1.8001353E+00	6.7111188E-02	-4.8405449E-05	1.8405573E-08	-2.8936781E-12	8.1024952E+03	3.7224205E+01
C6H9	1399	-2.5069766E+00	7.0283882E-02	-5.6375796E-05	2.3798111E-08	-4.0966433E-12	2.6360383E+04	3.9014153E+01
C2CQJ	1395	-1.0036957E-01	4.3111893E-02	-3.1063182E-05	1.2066836E-08	-1.9721497E-12	-8.4490300E+03	2.5765001E+01
ACETONE	1367	1.6217601E+00	2.7410217E-02	-9.0275481E-06	-9.4594827E-10	7.5937732E-13	-2.7790662E+04	1.8471203E+01
HOC3H6	1674	1.2049430E+00	3.3085788E-02	-1.6389364E-05	3.1810392E-09	-6.8422929E-14	-9.1296172E+03	2.4715520E+01
HOC3H6O2	1391	1.8610298E+00	5.0148285E-02	-3.9766012E-05	1.7353296E-08	-3.1662070E-12	-2.7442621E+04	2.2799077E+01
HOC2H4O2	1395	3.5881161E+00	2.9941416E-02	-2.3515655E-05	1.1263553E-08	-2.2866369E-12	-2.1740944E+04	1.4216673E+01
HOOC2H4O2	1421	1.3568805E+00	5.2787285E-02	-4.9085146E-05	2.2421671E-08	-3.9788991E-12	-1.5283557E+04	2.6242144E+01
HOC3H4O	1397	3.0933983E+00	3.1135049E-02	-1.9685368E-05	6.5265243E-09	-8.9996263E-13	-1.9155274E+04	1.6457771E+01
HOC3H4O3	1381	5.7047608E+00	3.2304841E-02	-1.9497656E-05	6.8158882E-09	-1.1200572E-12	-3.3928586E+04	8.0947281E+00
HOCCQCHO	1387	4.6038244E+00	4.2020113E-02	-2.9292719E-05	1.1339784E-08	-1.9049900E-12	-5.2122279E+04	1.1767100E+01
HOCCQC	1400	1.4943779E+00	5.6458957E-02	-4.7231935E-05	2.1341225E-08	-3.9363729E-12	-4.4852783E+04	2.4281057E+01
CHCHCHO	1380	2.0358348E+00	2.5573985E-02	-1.8171332E-05	6.2855114E-09	-8.4622235E-13	1.7307722E+04	1.5736897E+01
CH3NO	1500	2.1099550E+00	1.5178220E-02	-7.0717890E-06	1.5106110E-09	-1.6042040E-13	8.2936120E+03	1.5697020E+01
CH3ONO	1500	1.4903450E+00	2.6454330E-02	-2.1123320E-05	9.4143990E-09	-1.8112050E-12	-9.1257820E+03	1.8137660E+01
CH3ONO2	1500	7.8033540E-01	3.4542040E-02	-2.8223280E-05	1.2323240E-08	-2.3021640E-12	-1.4653460E+04	2.2457520E+01
CH3NO2	1390	-3.7077508E-01	2.8370279E-02	-2.0833962E-05	8.0898067E-09	-1.3052108E-12	-9.4568154E+03	3.0645915E+01
C3H5NO2	1377	1.2472253E+00	4.6966447E-02	-3.4776032E-05	1.2852787E-08	-1.9251755E-12	-2.3024360E+03	2.2591423E+01

表 4.1

化学種	tdh_1	tdh_2	tdh_3	tdh_4	tdh_5	tdh_6	tdh_7
H2	2.9914230E+00	7.0006440E-04	-5.6338290E-08	-9.2315780E-12	1.5827520E-15	-8.3503400E+02	-1.3551100E+00
H	2.5000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	2.5471630E+04	-4.6011760E-01
CH4	1.6834790E+00	1.0237240E-02	-3.8751290E-06	6.7855850E-10	-4.5034230E-14	-1.0080790E+04	9.6233950E+00
CH3	2.8440520E+00	6.1379740E-03	-2.2303450E-06	3.7851610E-10	-2.4521590E-14	1.6437810E+04	5.4526970E+00
CH2	3.4431047E+00	2.3263801E-03	-5.3314800E-07	5.7404397E-11	-2.4269485E-15	4.5937574E+04	3.2348471E+00
CH	2.1962230E+00	2.3403810E-03	-7.0582010E-07	9.0075820E-11	-3.8550400E-15	7.0867230E+04	9.1783730E+00
CH2O	2.9956060E+00	6.6813210E-03	-2.6289550E-06	4.7371530E-10	-3.2125170E-14	-1.5320370E+04	6.9125720E+00
HCO	3.5572710E+00	3.3455730E-03	-1.3350060E-06	2.4705730E-10	-1.7138510E-14	3.9163240E+03	5.5522990E+00
CO2	4.4536230E+00	3.1401690E-03	-1.2784110E-06	2.3939970E-10	-1.6690330E-14	-4.8966960E+04	-9.5539590E-01
CO	3.0250780E+00	1.4426890E-03	-5.6308280E-07	1.0185810E-10	-6.9109520E-15	-1.4268350E+04	6.1082180E+00
O2	3.6975780E+00	6.1351970E-04	-1.2588420E-07	1.7752810E-11	-1.1364350E-15	-1.2339300E+03	3.1891660E+00
O	2.5420600E+00	-2.7550620E-05	-3.1028030E-09	4.5510670E-12	-4.3680520E-16	2.9230800E+04	4.9203080E+00
OH	2.8827300E+00	1.0139740E-03	-2.2768770E-07	2.1746840E-11	-5.1263050E-16	3.8868880E+03	5.5957120E+00
HO2	4.0721910E+00	2.1312960E-03	-5.3081450E-07	6.1122690E-11	-2.8411650E-15	-1.5797270E+02	3.4760290E+00
H2O2	4.5731670E+00	4.3361360E-03	-1.4746890E-06	2.3489040E-10	-1.4316540E-14	-1.8006960E+04	5.0113700E-01
H2O	2.6721460E+00	3.062930E-03	-8.7302600E-07	1.2009960E-10	-6.3916180E-15	-2.9899210E+04	6.8628170E+00
C2H	3.9863670E+00	3.1431230E-03	-1.2672430E-06	2.9243630E-10	-2.7163200E-14	6.6558840E+04	1.1910630E+00
HCCO	6.7580730E+00	2.0004000E-03	-2.0276070E-07	-1.0411320E-10	1.9651650E-14	1.9015130E+04	-9.0712620E+00
C2H2	4.4367700E+00	5.3760390E-03	-1.9128170E-06	3.2863790E-10	-2.1567100E-14	2.5667660E+04	-2.8003380E+00
C2H3	3.9604771E+00	7.9942601E-03	-2.8560809E-06	4.5835081E-10	-2.7257014E-14	3.3515354E+04	2.2566341E+00
C2H4	3.5284190E+00	1.1485180E-02	-4.4183850E-06	7.8446010E-10	-5.2668480E-14	4.4282890E+03	2.2303890E+00
C2H5	5.6011609E+00	1.0697708E-03	-3.6350478E-06	5.6181665E-10	-3.2491471E-14	1.1453985E+04	-7.022521E+00
C2H6	4.8259380E+00	1.3840430E-02	-4.5572590E-06	6.7249670E-10	-3.5981610E-14	-1.2717790E+04	-5.2395070E+00
CH2OH	6.0012780E+00	4.9872157E-03	-1.6095352E-06	2.4022714E-10	-1.3558270E-14	-3.5015710E+03	-6.9283684E+00
CH3O	3.7708000E+00	7.8714970E-03	-2.6563840E-06	3.9444310E-10	-2.1126160E-14	1.2783250E+02	2.9295750E+00
HCCOH	7.3283240E+00	3.3364160E-03	-3.0247050E-07	-1.7811060E-10	3.2451680E-14	7.5982580E+03	-1.4012140E+01
H2CCCH	8.8310470E+00	4.3571950E-03	-4.1090670E-07	-2.3687230E-10	4.3765200E-14	3.8474200E+04	-2.1779190E+01
C3H2	7.6709810E+00	2.7487490E-03	-4.3709430E-07	-6.4555990E-11	1.6638870E-14	6.2597220E+04	-1.2368900E+01
CH2(S)	3.0962718E+00	2.8083918E-03	-7.1361453E-07	8.4213630E-11	-3.8464083E-15	5.0573970E+04	4.3139227E+00
CH2CO	6.0388170E+00	5.8048400E-03	-1.9209540E-06	2.7944850E-10	-1.4588680E-14	-8.5834020E+03	-7.6575810E+00
C2O	4.8498090E+00	2.9475850E-03	-1.0907290E-06	1.7925620E-10	-1.1157580E-14	3.2820550E+04	-6.4532260E-01
HCOH	9.1874927E+00	1.5201115E-03	-6.2760352E-07	1.0972799E-10	-6.8965513E-15	7.8136459E+03	-2.7343421E+01
CH3OH	4.0290610E+00	9.3765930E-03	-3.0502540E-06	4.3587930E-10	-2.2247230E-14	-2.6157910E+04	2.3781960E+00
CH2HCO	5.9756700E+00	8.1305910E-03	-2.7436240E-06	4.0703040E-10	-2.1760170E-14	4.9032180E+02	-5.0452510E+00
C3H6	6.7322570E+00	1.4908340E-02	-4.9498990E-06	7.2120220E-10	-3.7662040E-14	-9.2357030E+02	-1.3313350E+01
AC3H5	9.6515390E+00	8.0755960E-03	-7.9654240E-07	-4.6506960E-10	8.6032800E-14	1.5300960E+04	-2.6867740E+01
PC3H5	9.2097640E+00	7.8714130E-03	-7.7245230E-07	-4.4973570E-10	8.3772720E-14	2.8539670E+04	-2.2323700E+01
SC3H5	9.1010180E+00	7.9641680E-03	-7.8849450E-07	-4.5620360E-10	8.5292120E-14	2.6706800E+04	-2.1505590E+01
CH2CHCHO	9.9595006E+00	9.8656304E-03	-3.4204805E-06	5.3597837E-10	-3.1300197E-14	-1.2745620E+04	-2.8299586E+01
PC3H4	9.7681020E+00	5.2191510E-03	-3.7531400E-07	-2.9921910E-10	5.1078780E-14	1.8602770E+04	-3.0206780E+01
AC3H4	9.7762560E+00	5.3021380E-03	-3.7011180E-07	-3.0263860E-10	5.0895810E-14	1.9549720E+04	-3.0770610E+01
CH3CO	5.6122790E+00	8.4498860E-03	-2.8541470E-06	4.2383760E-10	-2.2684040E-14	-5.1878630E+03	-3.2749490E+00
CH2CHCO	9.4810557E+00	7.7771476E-03	-2.7115567E-06	4.2649597E-10	-2.4972249E-14	3.2085802E+03	-2.4291668E+01
CH3CHCO	9.4038680E+00	9.909486E-03	-3.3413060E-06	5.1378702E-10	-2.9610225E-14	-1.4277128E+04	-2.4290202E+01
CH3HCO	5.8686500E+00	1.0794240E-02	-3.6455300E-06	5.4129120E-10	-2.8968440E-14	-2.2645690E+04	-6.0129460E+00
CHOCCHO	9.7543856E+00	4.9764595E-03	-1.7441048E-06	2.7558699E-10	-1.6196989E-14	-2.9583290E+04	-2.4803837E+01
IC3H7	9.7356394E+00	1.3330363E-02	-4.8810604E-06	7.5630481E-10	-4.3838016E-14	5.6700091E+03	-2.7841493E+01
NC3H7	9.4379935E+00	1.4716068E-02	-5.0333842E-06	7.8131750E-10	-4.3520926E-14	7.2739651E+03	-2.6013674E+01
C2H5OH	6.5624365E+00	1.5204222E-02	-5.3896795E-06	8.6225011E-10	-5.1289787E-14	-3.1525621E+04	-9.4730202E+00
C2H4OH	8.7554450E+00	9.4945315E-03	-3.0880358E-06	4.6353762E-10	-2.6273004E-14	-8.0960205E+03	-2.0327193E+01
CH3CHOH	7.9543275E+00	1.0500817E-02	-3.5063159E-06	5.3617461E-10	-3.0797846E-14	-8.6219977E+03	-1.9041113E+01
CH2CHCH2O	9.4447744E+00	1.2703963E-02	-4.5634918E-06	8.0611333E-10	-5.2659980E-14	6.7024280E+03	-2.4938708E+01
CH3CH2O	8.3118239E+00	1.0342632E-02	-3.3918609E-06	5.1221262E-10	-2.9160171E-14	-6.1309795E+03	-2.1398558E+01
HCOOH	7.9596980E+00	3.0245320E-03	-3.4342420E-07	-1.3267670E-10	2.5202400E-14	-5.0274450E+04	-1.8722080E+01
C3H8	7.5252170E+00	1.8890340E-02	-6.2839240E-06	9.1793730E-10	-4.8124100E-14	-1.6464550E+04	-1.7843900E+01
C2H5O2	1.0117493E+01	1.1441448E-02	-3.8709311E-06	5.9645699E-10	-3.4419519E-14	-6.7219349E+03	-2.5102991E+01
C2H2OH	6.2280019E+00	7.4905573E-03	-2.5069082E-06	3.8391659E-10	-2.2074048E-14	1.4649910E+04	-6.1300779E+00
C	2.6020870E+00	-1.7870810E-04	9.0870410E-08	-1.1499330E-11	3.3108440E-16	8.5421540E+04	4.1951770E+00
AR	2.5000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	-7.4537500E+02	4.3660010E+00
N	2.4502680E+00	1.0661460E-04	-7.4653370E-08	1.8796520E-11	-1.0259840E-15	5.6116040E+04	4.4487580E+00
NH	2.7602490E+00	1.3753460E-03	-4.4519140E-07	7.6927920E-11	-5.0175920E-15	4.2078280E+04	5.8571990E+00
NH2	2.9613110E+00	2.9326990E-03	-9.0636000E-07	1.6172570E-10	-1.2042000E-14	2.1919770E+04	5.7778780E+00
NH3	2.4619040E+00	6.0591660E-03	-2.0049770E-06	3.1360030E-10	-1.9383170E-14	-6.4932700E+03	7.4720970E+00
NNH	4.4153420E+00	1.6143880E-03	-1.6328940E-07	-8.5598460E-11	1.6147910E-14	2.7880290E+04	9.0428880E-01
NO	3.2454350E+00	1.2691380E-03	-5.0158900E-07	9.1692830E-11	-6.2754190E-15	9.8008400E+03	6.4172940E+00
NO2	4.6828590E+00	2.4624290E-03	-1.0422590E-06	1.9769020E-10	-1.3917170E-14	2.2612920E+03	9.8859850E-01
N2O	4.7189770E+00	2.8737140E-03	-1.1974960E-06	2.2505520E-10	-1.5753370E-14	8.1658110E+03	-1.6572500E+00
HNO	3.6151440E+00	3.2124860E-03	-1.2603370E-06	2.2672980E-10	-1.5362360E-14	1.0661910E+04	4.8102640E+00
CN	3.7201200E+00	1.5183510E-04	1.9873810E-07	-3.7983710E-11	1.3282300E-15	5.1116260E+04	2.8885970E+00
HCN	3.4264570E+00	3.9241900E-03	-1.6011380E-06	3.1619660E-10	-2.4328500E-14	1.4855520E+04	3.6077950E+00
H2CN	5.2097030E+00	2.9692910E-03	-2.8555890E-07	-1.6355500E-10	3.0432590E-14	2.7677110E+04	-4.4444780E+00
HCNN	5.8946362E+00	3.9895959E-03	-1.5982380E-06	2.9249395E-10	-2.0094686E-14	5.3452941E+04	-5.1030502E+00
HCNO	6.6924120E+00	2.3683600E-03	-2.3715100E-07	-1.2755030E-10	2.4071370E-14	1.6947370E+04	-1.2454340E+01
HOCN	6.0221120E+00	1.9295300E-03	-1.4550290E-07	-1.0458110E-10	1.7948140E-14	-4.0403210E+03	-5.8664330E+00
HNCO	6.5453070E+00	1.9657600E-03	-1.5626640E-07	-1.0743180E-10	1.8746800E-14	-1.6647730E+04	-1.0038800E+01

表 4.2

化学種	tdh_1	tdh_2	tdh_3	tdh_4	tdh_5	tdh_6	tdh_7
NCO	6.0723460E+00	9.2278290E-04	-9.8455740E-08	-4.7641230E-11	9.0904450E-15	1.3598200E+04	-8.5072930E+00
N2	2.9266400E+00	1.4879770E-03	-5.6847610E-07	1.0097040E-10	-6.7533510E-15	-9.2279770E+02	5.9805280E+00
HNO2	6.4796300E+00	1.9952740E-03	-1.7403870E-07	-9.6958720E-11	1.7014800E-14	-9.9992710E+03	-1.0672860E+01
HONO	5.4868930E+00	4.2180650E-03	-1.6491430E-06	2.9718770E-10	-2.0211480E-14	-1.1268650E+04	-2.9970020E+00
NO3	7.1203070E+00	3.2462280E-03	-1.4316130E-06	2.7970530E-10	-2.0130080E-14	5.8644790E+03	-1.2137300E+01
HONO2	9.7561480E+00	1.9009480E-03	-3.2400200E-07	-3.9766390E-11	1.1003340E-14	-1.9422440E+04	-2.6900230E+01
C2COO	1.3249349E+01	1.6408219E-02	-5.6743206E-06	8.8733634E-10	-5.1736153E-14	-1.3268560E+04	-4.1593083E+01
C2CQ	1.5179850E+01	1.7258890E-02	-5.9558284E-06	9.3010356E-10	-5.4181050E-14	-3.2293868E+04	-5.3502596E+01
C2JCQ	1.4769039E+01	1.5100738E-02	-5.2204062E-06	8.1624693E-10	-4.7589359E-14	-7.2308456E+03	-4.8439579E+01
CCYC2O	1.0938459E+01	1.3866769E-02	-4.7418140E-06	7.3605543E-10	-4.2698906E-14	-1.6468606E+04	-3.5970514E+01
CCQCQO	1.9174681E+01	1.5983613E-02	-5.6116391E-06	8.8658401E-10	-5.2067419E-14	-2.5667098E+04	-6.6519446E+01
CC*OCQ	1.5663673E+01	1.4377046E-02	-5.0765029E-06	8.0509395E-10	-4.7406854E-14	-4.3071935E+04	-5.0020287E+01
CJCCQ	1.4691356E+01	1.4985577E-02	-5.2363139E-06	8.2466217E-10	-4.8323707E-14	-5.1404022E+03	-4.7208967E+01
C*CCQ	1.3391832E+01	1.4221625E-02	-4.9340973E-06	7.7335578E-10	-4.5165859E-14	-1.3393944E+04	-4.1885136E+01
CCQJCQ	1.9967875E+01	1.5091208E-02	-5.3524267E-06	8.5143021E-10	-5.0242961E-14	-1.9737944E+04	-6.7760995E+01
CQCC*O	1.6030098E+01	1.3987707E-02	-4.9246891E-06	7.7955695E-10	-4.5845004E-14	-4.0276755E+04	-5.2952518E+01
COOCCQ	1.8583338E+01	1.6531766E-02	-5.8111981E-06	9.1884930E-10	-5.3992027E-14	-2.4336309E+04	-6.1949587E+01
CCCOO	1.2635739E+01	1.6982707E-02	-5.8844947E-06	9.2140912E-10	-5.3771818E-14	-1.0928200E+04	-3.7256553E+01
CCQC*O	1.7075623E+01	1.3101349E-02	-4.6194941E-06	7.3199133E-10	-4.3078868E-14	-4.1700864E+04	-6.0267377E+01
CCJCQ	1.4569888E+01	1.4547119E-02	-4.9763431E-06	7.7360658E-10	-4.4952882E-14	-6.4982013E+03	-4.6058194E+01
CJCQCQ	2.1216074E+01	1.3969127E-02	-4.9510390E-06	7.8723525E-10	-4.6441195E-14	-1.9872623E+04	-7.5690694E+01
CCOCCQ	1.9174681E+01	1.5983613E-02	-5.6116391E-06	8.8658401E-10	-5.2067419E-14	-2.5667098E+04	-6.6519446E+01
CYCCCO	1.0110056E+01	1.4954184E-02	-5.1099061E-06	7.9294217E-10	-4.5993217E-14	-1.4711210E+04	-3.3223559E+01
CH3OOH	6.1600316E+00	1.0239957E-02	-3.6101507E-06	5.7550301E-10	-3.4178147E-14	-1.7654526E+04	-6.1911544E+00
CH3O2	6.6812963E+00	8.0057271E-03	-2.7188507E-06	4.0631365E-10	-2.1927725E-14	5.2621851E+02	-9.9423847E+00
C2H5OOH	1.2655527E+01	1.1334722E-02	-3.8225673E-06	5.8808979E-10	-3.3911205E-14	-2.6383969E+04	-4.0420022E+01
CCCO	1.5092944E+01	1.7162642E-02	-5.9806185E-06	9.4014363E-10	-5.5019421E-14	-3.0202663E+04	-5.2221499E+01
CCCOJ	1.1013031E+01	1.5811027E-02	-5.3874322E-06	8.3426482E-10	-4.8314735E-14	-1.0152897E+04	-3.2751169E+01
CCCHO	1.0242769E+01	1.3964199E-02	-4.7624800E-06	7.3810571E-10	-4.2775950E-14	-2.7414314E+04	-2.8534684E+01
CQC*O	1.1216976E+01	9.9919014E-03	-3.2613078E-06	5.4102181E-10	-3.4201984E-14	-3.2345110E+04	-2.6678537E+01
CH2CH2OOH	2.2201793E+01	1.6295270E-03	-7.0860569E-07	1.2845752E-10	-8.2887801E-15	-6.5925933E+03	-9.5493642E+01
AC3H5O2	1.2738498E+01	1.2464977E-02	-4.3825700E-06	6.9310153E-10	-4.0734240E-14	5.6544353E+03	-3.9284873E+01
AC3H5O2H	1.5415512E+01	1.2608647E-02	-4.5012049E-06	7.1913423E-10	-4.2564208E-14	-1.3527341E+04	-5.3533782E+01
C6H10	1.6718619E+01	2.3017941E-02	-7.8186631E-06	1.2083182E-09	-6.9882612E-14	1.7430663E+03	-6.1956593E+01
C6H9	1.6871644E+01	2.0893640E-02	-7.1129227E-06	1.1008556E-09	-6.3730973E-14	2.0034093E+04	-6.3613046E+01
C2CQJ	1.1459275E+01	1.5590281E-02	-5.3444323E-06	8.3085811E-10	-4.8245529E-14	-1.2463853E+04	-3.6220362E+01
ACETONE	9.9373330E+00	1.4881483E-02	-5.2239346E-06	8.2520463E-10	-4.8456142E-14	-3.1465639E+04	-2.8800346E+01
HOC3H6	9.3128782E+00	1.6757921E-02	-5.7555548E-06	9.0058436E-10	-5.2656684E-14	-1.2016963E+04	-1.9501106E+01
HOC3H6O2	1.4929483E+01	1.7034566E-02	-5.8744418E-06	9.1687875E-10	-5.3386628E-14	-3.1849295E+04	-4.6682036E+01
HOC2H4O2	9.2233992E+00	1.4134636E-02	-4.7528302E-06	7.2879596E-10	-4.1896963E-14	-2.3598403E+04	-1.5384739E+01
HOOC2H4O2	1.6933415E+01	9.4934044E-03	-3.1224059E-06	4.7265446E-10	-2.6959985E-14	-1.9874407E+04	-5.4749318E+01
HOC3H4O	1.1238729E+01	1.3043529E-02	-4.4246119E-06	6.8296302E-10	-3.9458868E-14	-2.2100996E+04	-2.7657785E+01
HOC3H4O3	1.3671250E+01	1.5660022E-02	-5.4230739E-06	8.4876054E-10	-4.9513699E-14	-3.7064105E+04	-3.5676970E+01
HOCCQCHO	1.5672593E+01	1.6462494E-02	-5.6904927E-06	8.8958424E-10	-5.1855511E-14	-5.6117260E+04	-4.7988436E+01
HOCCQC	1.5850339E+01	1.7937063E-02	-6.0879830E-06	9.3997323E-10	-5.4315408E-14	-4.9415039E+04	-5.1175197E+01
CHCHCHO	1.0202946E+01	6.9864247E-03	-2.4045342E-06	3.7538673E-10	-2.1879123E-14	1.4457559E+04	-2.8242319E+01
CH3NO	8.8205470E+00	3.7062330E-03	-2.8947410E-07	-1.8979100E-10	3.2375440E-14	5.3628620E+03	-2.2132200E+01
CH3ONO	1.1361290E+01	4.1593490E-03	-4.1456700E-07	-1.6951400E-10	3.0287320E-14	-1.2814820E+04	-3.5454350E+01
CH3ONO2	1.4361890E+01	4.1122430E-03	-5.1130520E-07	-1.4964360E-10	3.0121560E-14	-1.9724400E+04	-5.1318420E+01
CH3NO2	7.5063243E+00	9.5212195E-03	-3.2776056E-06	5.0867860E-10	-2.9445538E-14	-1.2162263E+04	-1.1525181E+01
C3H5NO2	1.6510192E+01	1.2076820E-02	-4.3115876E-06	6.8887501E-10	-4.0774949E-14	-7.6884267E+03	-5.9670603E+01

### 3.3 正ブタンの素反応モデル

表 5 に化学種、表 6.1～6.10 に素反応とそれに関するパラメーター、表 7.1～7.3, 8.1～8.3 に平衡定数、定積比熱、エンタルピーの計算式中使用するパラメーターを掲載した。概要の項でも述べたように、酸素との反応しか考慮していないので、空気中での燃焼反応については計算できない。

表 5

番号	化学種	分子量	番号	化学種	分子量	番号	化学種	分子量
1	OH	17.00737	52	CH3CHCO	56.06473	103	C10H10	130.1912
2	H2	2.01594	53	CH2CHCO	55.05676	104	indene	116.16411
3	H	1.00797	54	CH2CHCHO	56.06473	105	C6H5CO	105.1173
4	H2O	18.01534	55	C-C5H6	66.10357	106	C6H5CH2OH	108.14121
5	O	15.9994	56	C4H8-1	56.10836	107	C6H4C2H3	103.14499
6	O2	31.9988	57	PC3H4	40.06533	108	C6H5CCH2	103.14499
7	HO2	33.00677	58	C-C5H5	65.0956	109	C6H5CHCH	103.14499
8	H2O2	34.01474	59	CH3CHCCH2	54.09242	110	C6H5CCO	117.12845
9	CH3	15.03506	60	CH3CH2CCH	54.09242	111	C6H4C2H	101.12905
10	C2H6	30.07012	61	HCCHCCH	51.06851	112	C10H7	127.16729
11	CH4	16.04303	62	H2CCCCCH	51.06851	113	CH3C6H4CH3	106.1689
12	CH3O	31.03446	63	C6H6	78.11472	114	CH3indene	130.1912
13	CH2O	30.02649	64	fulvene	78.11472	115	CH3C6H4C2H5	120.19599
14	CH2(S)	14.02709	65	C6H5	77.10675	116	indenyl	115.15614
15	CH2	14.02709	66	CHCHCHO	55.05676	117	phnthrm	178.2358
16	HCOH	30.02649	67	HCCCHO	54.04879	118	CH3C6H4C2H3	118.18005
17	CH	13.01912	68	HCCCO	53.04082	119	CH3indenyl	129.18323
18	CH3OH	32.04243	69	C4H10	58.1243	120	CH3phnthrm	192.26289
19	CH2OH	31.03446	70	PC4H9	57.11633	121	C10H9	129.18323
20	HCO	29.01852	71	SC4H9	57.11633	122	C10H7OH	144.17466
21	CO2	44.00995	72	C4H8-2	56.10836	123	C10H7O	143.16669
22	CO	28.01055	73	C4H7	55.10039	124	C10H7CH2	141.19438
23	C2H4	28.05418	74	CH2CHCHCH	53.08445	125	acenphthln	152.19756
24	C2H2	26.03824	75	CH3CHCCH	53.08445	126	C10H7CCH	152.19756
25	HCCO	41.02967	76	CH3CCCH2	53.08445	127	flnthn	202.2581
26	C2H3	27.04621	77	H2CCCCCH2	52.07648	128	C10H7CH3	142.20235
27	H2CCCH	39.05736	78	C6H5CH2	91.13384	129	bz(a)ndene	166.22465
28	C2H5	29.06215	79	CH3C6H4CH2	105.16093	130	C10H7C2H5	156.22944
29	AC3H5	41.0733	80	H2C4O	66.05994	131	C10H7C2H3	154.2135
30	CH2CO	42.03764	81	C5H3	63.07966	132	C10H7CCH2	153.20553
31	C	12.01115	82	C5H2	62.07169	133	C10H6CCH	151.18959
32	C3H2	38.04939	83	C6H2	74.08284	134	phnthryl-1	177.22783
33	C2H	25.03027	84	l-C5H8	68.11951	135	phnthryl-9	177.22783
34	CH2HCO	43.04561	85	l-C5H7	67.11154	136	phnthroxy-9	193.22723
35	C3H6	42.08127	86	C-C5H7	67.11154	137	fluoryl	165.21668
36	CH2CHCCH	52.07648	87	C6H5O	93.10615	138	fluorene	166.22465
37	CH2CHCHCH2	54.09242	88	C6H5OH	94.11412	139	bz(a)ndnyl	165.21668
38	CH2CHCCH2	53.08445	89	C-C5H4O	80.08703	140	bz(a)phnthrm	228.29634
39	HCCOH	42.03764	90	C-C5H5O	81.095	141	phnthrol-1	194.2352
40	CH3HCO	44.05358	91	C-C5H4OH	81.095	142	phnthrol-9	194.2352
41	CH3CO	43.04561	92	C10H8	128.17526	143	anthracn	178.2358
42	CHOCHO	58.03704	93	C6H5C2H3	104.15296	144	phnthroxy-1	193.22723
43	C2	24.0223	94	C6H5C2H	102.13702	145	pyrene	202.2581
44	C4H2	50.06054	95	OC6H4O	108.09758	146	hc4-p(def)pthn	190.24695
45	C2O	40.0217	96	biphenyl	154.2135	147	hc4-p(def)pthyl	189.23898
46	C3H8	44.09721	97	C-2*4C6H6O	94.11412	148	bz(ghi)fin	226.2804
47	IC3H7	43.08924	98	C6H5CH3	92.14181	149	ch3cy24pd	80.13066
48	NC3H7	43.08924	99	OC6H4CH3	107.13324	150	ch3cy24pd1	79.12269
49	PC3H5	41.0733	100	HOC6H4CH3	108.14121	151	cyc6h7	79.12269
50	SC3H5	41.0733	101	C6H5CHO	106.12527	152	ch3dcy24pd	79.12269
51	AC3H4	40.06533	102	C6H5C2H5	106.1689	153	fulvenyl	77.10675

表 6.1

番号	反応式	cf		ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
1	oh+h2=h+h2o	2.14E+08	1.52	3449							
2	o+oh=o2+h	2.02E+14	-0.4	0							
3	o+h2=oh+h	5.06E+04	2.67	6290							
4	h+o2(+m1)=ho2(+m1)	4.52E+13	0	0	1.05E+19	-1.257	0				
5	h+o2(+n2)=ho2(+n2)	4.52E+13	0	0	2.03E+20	-1.59	0				
6	h+o2(+h2)=ho2(+h2)	4.52E+13	0	0	1.52E+19	-1.133	0				
7	h+o2(+h2o)=ho2(+h2o)	4.52E+13	0	0	2.10E+23	-2.437	0				
8	oh+ho2=h2o+o2	2.13E+28	-4.827	3500							
9	oh+ho2=h2o+o2	9.10E+14	0	10964							
10	h+ho2=oh+oh	1.50E+14	0	1000							
11	h+ho2=h2+o2	8.45E+11	0.65	1241							
12	h+ho2=o+h2o	3.01E+13	0	1721							
13	o+ho2=o2+oh	3.25E+13	0	0							
14	oh+oh=o+h2o	3.57E+04	2.4	-2112							
15	h+h+m5=h2+m5	1.00E+18	-1	0							
16	h+h+h2=h2+h2	9.20E+16	-0.6	0							
17	h+h+h2o=h2+h2o	6.00E+19	-1.25	0							
18	h+oh+m6=h2o+m6	2.21E+22	-2	0							
19	h+o+m6=oh+m6	4.71E+18	-1	0							
20	o+o+m=o2+m	1.89E+13	0	-1788							
21	ho2+ho2=h2o2+o2	4.20E+14	0	11982							
22	ho2+ho2=h2o2+o2	1.30E+11	0	-1629							
23	oh+oh(+m)=h2o2(+m)	1.24E+14	-0.37	0	3.04E+30	-4.63	2049	0.47	100	2000	1.00E+15
24	h2o2+h=h2o+h2	1.98E+06	2	2435							
25	h2o2+h=oh+h2o	3.07E+13	0	4217							
26	h2o2+o=oh+ho2	9.55E+06	2	3970							
27	h2o2+oh=h2o+ho2	2.40E+00	4.042	-2162							
28	ch3+ch3(+m2)=c2h6(+m2)	9.22E+16	-1.174	636	1.14E+36	-5.246	1705	0.405	1120	69.6	1.00E+15
29	ch3+h(+m2)=ch4(+m2)	2.14E+15	-0.4	0	3.31E+30	-4	2108	0	1.00E-15	1.00E-15	40
30	ch4+h=ch3+h2	2.20E+04	3	8750							
31	ch4+oh=ch3+h2o	4.19E+06	2	2547							
32	ch4+o=ch3+oh	6.92E+08	1.56	8485							
33	ch4+ho2=ch3+h2o2	1.12E+13	0	24640							
34	ch3+ho2=ch3o+oh	7.00E+12	0	0							
35	ch3+ho2=ch4+o2	3.00E+12	0	0							
36	ch3+o=ch2o+h	8.00E+13	0	0							
37	ch3+o2=ch3o+o	1.45E+13	0	29209							
38	ch3+o2=ch2o+oh	2.51E+11	0	14640							
39	ch3o+h=ch3+oh	1.00E+14	0	0							
40	ch3+oh=ch2(s)+h2o	2.65E+13	0	2186							
41	ch3+oh=ch2+h2o	3.00E+06	2	2500							
42	ch3+oh=hco+h2	5.48E+13	0	2981							
43	ch3+oh=ch2o+h2	2.25E+13	0	4300							
44	ch3+h=ch2+h2	9.00E+13	0	15100							
45	ch3+m=ch+h2+m	6.90E+14	0	82469							
46	ch3+m=ch2+h+m	1.90E+16	0	91411							
47	ch3+oh(+m3)=ch3oh(+m3)	5.65E+13	0.1	0	5.75E+41	-7.4	626	0.025	1.00E-15	8000	3000
48	ch3oh(+m3)=hco+h2(+m3)	4.15E+16	-0.15	92285	4.23E+44	-7.65	92911	0.025	1.00E-15	8000	3000
49	ch3oh+oh=ch2oh+h2o	2.61E+05	2.182	-1344							
50	ch3oh+oh=ch3o+h2o	2.62E+06	2.056	916							
51	ch3oh+o=ch2oh+oh	3.88E+05	2.5	3080							
52	ch3oh+h=ch2oh+h2	1.70E+07	2.1	4868							
53	ch3oh+h=ch3o+h2	4.24E+06	2.1	4868							
54	ch3oh+ho2=ch2oh+h2o2	9.64E+10	0	12578							
55	ch3o+m=ch2o+h+m	5.45E+13	0	13497							
56	ch2oh+m=ch2o+h+m	1.00E+14	0	25000							
57	ch3o+h=ch2o+h2	2.00E+13	0	0							
58	ch2oh+h=ch2o+h2	2.00E+13	0	0							
59	ch3o+oh=ch2o+h2o	1.00E+13	0	0							
60	ch2oh+oh=ch2o+h2o	1.00E+13	0	0							
61	ch3o+o=ch2o+oh	1.00E+13	0	0							
62	ch2oh+o=ch2o+oh	1.00E+13	0	0							
63	ch3o+o2=ch2o+ho2	6.30E+10	0	2600							
64	ch2oh+o2=ch2o+ho2	1.57E+15	-1	0							
65	ch2oh+o2=ch2o+ho2	7.23E+13	0	3577							
66	hco+h=cco+h2o	2.00E+13	0	0							
67	hco+h=ch2o+h	2.00E+14	0	0							
68	hco+h+o=co2+h+h	5.00E+13	0	0							
69	hco+h+o=co+oh+h	3.00E+13	0	0							
70	hco+h+o2=co2+h+oh	5.00E+12	0	0							
71	hco+h+o2=co2+h2o	3.00E+13	0	0							
72	ch2+h=ch+h2	1.00E+18	-1.56	0							

表 6.2

番号	反応式	cf	ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
73	ch2+oh=ch+h2o	1.13E+07	2	3000						
74	ch2+oh=ch2o+h	2.50E+13	0	0						
75	ch2+co2=ch2o+co	1.10E+11	0	1000						
76	ch2+o=co+h+h	5.00E+13	0	0						
77	ch2+o=co+h2	3.00E+13	0	0						
78	ch2+o2=ch2o+o	3.29E+21	-3.3	2868						
79	ch2+o2=co2+h+h	3.29E+21	-3.3	2868						
80	ch2+o2=co2+h2	1.01E+21	-3.3	1508						
81	ch2+o2=co+h2o	7.28E+19	-2.54	1809						
82	ch2+o2=hco+oh	1.29E+20	-3.3	284						
83	ch2+ch3=c2h4+h	4.00E+13	0	0						
84	ch2+ch2=c2h2+h+h	4.00E+13	0	0						
85	ch2+hco=c2h3+co	3.00E+13	0	0						
86	ch2+c2h2=h2ccch+h	1.20E+13	0	6600						
87	ch2(s)+m7=ch2+m7	1.00E+13	0	0						
88	ch2(s)+ch4=ch3+ch3	4.00E+13	0	0						
89	ch2(s)+c2h6=ch3+c2h5	1.20E+14	0	0						
90	ch2(s)+o2=co+oh+h	7.00E+13	0	0						
91	ch2(s)+h2=ch3+h	7.00E+13	0	0						
92	ch2(s)+c2h2=h2ccch+h	1.50E+14	0	0						
93	ch2(s)+c2h4=ac3h5+h	1.30E+14	0	0						
94	ch2(s)+o=co+h+h	3.00E+13	0	0						
95	ch2(s)+oh=ch2o+h	3.00E+13	0	0						
96	ch2(s)+h=ch+h2	3.00E+13	0	0						
97	ch2(s)+co2=ch2o+co	3.00E+12	0	0						
98	ch2(s)+ch3=c2h4+h	2.00E+13	0	0						
99	ch2(s)+ch2co=c2h4+co	1.60E+14	0	0						
100	ch+o2=hco+o	3.30E+13	0	0						
101	ch+o=co+h	5.70E+13	0	0						
102	ch+oh=hco+h	3.00E+13	0	0						
103	ch+oh=c+h2o	4.00E+07	2	3000						
104	ch+co2=hco+co	3.40E+12	0	690						
105	ch+h=c+h2	1.50E+14	0	0						
106	ch+h2o=ch2o+h	1.17E+15	-0.75	0						
107	ch+ch2o=ch2co+h	9.46E+13	0	-515						
108	ch+c2h2=c3h2+h	1.00E+14	0	0						
109	ch+ch2=c2h2+h	4.00E+13	0	0						
110	ch+ch3=c2h3+h	3.00E+13	0	0						
111	ch+ch4=c2h4+h	6.00E+13	0	0						
112	c+o2=co+o	2.00E+13	0	0						
113	c+oh=co+h	5.00E+13	0	0						
114	c+ch3=c2h2+h	5.00E+13	0	0						
115	c+ch2=c2h+h	5.00E+13	0	0						
116	ch2o+oh=hco+h2o	3.43E+09	1.18	-447						
117	ch2o+h=hco+h2	2.19E+08	1.77	3000						
118	ch2o+m=hco+h+m	3.31E+16	0	81000						
119	ch2o+o=hco+oh	1.80E+13	0	3080						
120	hco+o2=ho2+co	7.58E+12	0	410						
121	hco+m8=h+co+m8	1.86E+17	-1	17000						
122	hco+oh=h2o+co	1.00E+14	0	0						
123	hco+h=co+h2	1.19E+13	0.25	0						
124	hco+o=co+oh	3.00E+13	0	0						
125	hco+o=co2+h	3.00E+13	0	0						
126	co+oh=co2+h	9.42E+03	2.25	-2351						
127	co+o+m=co2+m	6.17E+14	0	3000						
128	co+o2=co2+o	2.53E+12	0	47688						
129	co+ho2=co2+oh	5.80E+13	0	22934						
130	c2h6+ch3=c2h5+ch4	5.50E-01	4	8300						
131	c2h6+h=c2h5+h2	5.40E+02	3.5	5210						
132	c2h6+o=c2h5+oh	3.00E+07	2	5115						
133	c2h6+oh=c2h5+h2o	7.23E+06	2	864						
134	c2h5+h=c2h4+h2	1.25E+14	0	8000						
135	c2h5+h=ch3+ch3	3.00E+13	0	0						
136	c2h5+h=c2h6	1.00E+14	0	0						
137	c2h5+oh=c2h4+h2o	4.00E+13	0	0						
138	c2h5+o=ch3+ch2o	1.00E+14	0	0						
139	c2h5+ho2=ch3+ch2o+oh	3.00E+13	0	0						
140	c2h5+o2=c2h4+ho2	3.00E+20	-2.86	6760						
141	c2h4+h=c2h3+h2	3.36E-07	6	1692						
142	c2h4+oh=c2h3+h2o	2.02E+13	0	5936						
143	c2h4+o=ch3+hco	1.02E+07	1.88	179						
144	c2h4+o=c2h2hco+h	3.39E+06	1.88	179						



表 6.3

番号	反応式	cf		ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
145	c2h4+ch3=c2h3+ch4	6.62E+00	3.7	9500							
146	c2h4+h (+m2)=c2h5(+m2)	1.08E+12	0.454	1822	1.11E+34	-5	4448	1	1.00E-15	95	200
147	c2h4(+m)=c2h2+h2(+m)	1.80E+13	0	76000	1.50E+15	0	55443				
148	c2h4(+m)=c2h3+h(+m)	2.00E+16	0	110000	1.40E+15	0	81833				
149	c2h3+h=c2h2+h2	4.00E+13	0	0							
150	c2h3+o=c2h2co+h	3.00E+13	0	0							
151	c2h3+o2=c2h2o+hco	1.70E+29	-5.312	6500							
152	c2h3+o2=c2h2co+o	3.50E+14	-0.611	5260							
153	c2h3+o2=c2h2+ho2	2.12E-06	6	9484							
154	c2h3+oh=c2h2+h2o	2.00E+13	0	0							
155	c2h3+c2h=c2h2+c2h2	3.00E+13	0	0							
156	c2h3+ch=c2h2+c2h2	5.00E+13	0	0							
157	c2h3+ch3=ac3h5+h	4.73E+02	3.7	5677							
158	c2h3+ch3=c3h6	4.46E+56	-13	13865							
159	c2h3+ch3=c2h2+ch4	2.00E+13	0	0							
160	c2h3+c2h2=c2h2cch+h	2.00E+12	0	5000							
161	c2h3+c2h4=c2h2cch2+h	5.00E+11	0	7304							
162	c2h3+c2h3=c2h2cch2+h	7.00E+13	0	0							
163	c2h3+c2h3=c2h4+c2h2	1.45E+13	0	0							
164	c2h2+oh=c2h+h2o	3.37E+07	2	14000							
165	c2h2+oh=hccoh+h	5.04E+05	2.3	13500							
166	c2h2+oh=c2hco+h	2.18E-04	4.5	-1000							
167	c2h2+oh=c2hco+h	2.00E+11	0	0							
168	c2h2+oh=ch3+co	4.83E-04	4	-2000							
169	hccoh+h=c2hco+h	1.00E+13	0	0							
170	c2h2+o=c2h+co	6.12E+06	2	1900							
171	c2h2+o=hcco+h	1.43E+07	2	1900							
172	c2h2+o=c2h+oh	3.16E+15	-0.6	15000							
173	c2h2+ch3=c2h+ch4	1.81E+11	0	17289							
174	c2h2+o2=hcco+oh	4.00E+07	1.5	30100							
175	c2h2+m=c2h+h+m	4.20E+16	0	107000							
176	c2h2+h (+m2)=c2h3(+m2)	3.11E+11	0.58	2589	2.25E+40	-7.269	6577	1	1.00E-15	675	1.00E+15
177	ch3co+oh=ch3co+h2o	5.37E+10	0.73	-1110							
178	ch3co+h=c3co+h2	4.09E+09	1.16	2400							
179	ch3co+o=c3co+oh	5.89E+12	0	1810							
180	ch3co+ho2=c3co+h2o2	1.70E+12	0	10700							
181	ch3co+o2=c3co+ho2	2.00E+13	0.5	42200							
182	ch3co+ch3=c3co+ch4	2.00E-06	5.64	2464							
183	ch2hco+h=c2hco+h2	4.00E+13	0	0							
184	ch2hco+o=c2h2o+hco	1.00E+14	0	0							
185	ch2hco+oh=c2hco+h2o	3.00E+13	0	0							
186	ch2hco+o2=c2h2o+co+oh	3.00E+10	0	0							
187	ch2hco+ch3=>c2h5+co+h	4.90E+14	-0.5	0							
188	ch2hco=c2hco+h	3.95E+38	-7.649	45115							
189	chocho(+m)=ch2o+co(+m)	4.27E+12	0	50600	8.91E+16	0	49200				
190	chocho=co+co+h2	4.07E+42	-8.5	69278							
191	chocho+oh=hco+co+h2o	1.00E+13	0	0							
192	chocho+o=hco+co+oh	7.24E+12	0	1970							
193	chocho+h=c2h2+hco	1.00E+12	0	0							
194	chocho+ho2=hco+co+h2o2	1.70E+12	0	10700							
195	chocho+ch3=hco+co+ch4	1.74E+12	0	8440							
196	chocho+o2=hco+co+ho2	1.00E+14	0	37000							
197	ch3co(+m)=ch3+co(+m)	3.00E+12	0	16722	1.20E+15	0	12518				
198	ch2co+o=co2+ch2	1.75E+12	0	1350							
199	ch2co+h=ch3+co	7.00E+12	0	3011							
200	ch2co+h=hcco+h2	2.00E+14	0	8000							
201	ch2co+o=hcco+oh	1.00E+13	0	8000							
202	ch2co+oh=hcco+h2o	1.00E+13	0	2000							
203	ch2co+oh=c2h2oh+co	3.73E+12	0	-1013							
204	ch2co(+m)=ch2+co(+m)	3.00E+14	0	70980	3.60E+15	0	59270				
205	c2h+h2=c2h2+h	4.09E+05	2.39	864.3							
206	c2h+o=ch+co	5.00E+13	0	0							
207	c2h+oh=hcco+h	2.00E+13	0	0							
208	c2h+oh=c2+h2o	4.00E+07	2	8000							
209	c2h+o2=co+co+h	9.04E+12	0	-457							
210	c2h+c2h2=c4h2+h	9.64E+13	0	0							
211	c2h+c2h4=c2h2cch+h	1.20E+13	0	0							
212	hcco+c2h2=h2ccch+co	1.00E+11	0	3000							
213	hcco+h=c2(s)+co	1.00E+14	0	0							
214	hcco+o=h+co+co	8.00E+13	0	0							
215	hcco+o=ch+co2	2.95E+13	0	1113							
216	hcco+o2=hco+co+o	2.50E+08	1	0							

表 6.4

番号	反応式	cf		ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
217	hcco+o2=c2o2+hco	2.40E+11	0	-854							
218	hcco+ch=c2h2+co	5.00E+13	0	0							
219	hcco+hcco=c2h2+co+co	1.00E+13	0	0							
220	hcco+oh=c2o+h2o	3.00E+13	0	0							
221	c2o+h=ch+co	1.00E+13	0	0							
222	c2o+o=co+co	5.00E+13	0	0							
223	c2o+oh=co+co+h	2.00E+13	0	0							
224	c2o+o2=co+co+o	2.00E+13	0	0							
225	c2+h2=c2h+h	4.00E+05	2.4	1000							
226	c2+o2=co+co	5.00E+13	0	0							
227	c2+oh=c2o+h	5.00E+13	0	0							
228	c3h8(+m2)=c2h5+ch3(+m2)	7.90E+22	-1.8	88629	7.24E+27	-2.88	67448	1	1.00E-15	1500	1.00E+15
229	c3h8+o2=ic3h7+ho2	4.00E+13	0	48610							
230	c3h8+o2=nc3h7+ho2	4.00E+13	0	51360							
231	c3h8+ho2=nc3h7+h2o2	4.76E+04	2.55	16492							
232	c3h8+ho2=ic3h7+h2o2	9.64E+03	2.6	13909							
233	c3h8+oh=nc3h7+h2o	3.16E+07	1.8	934							
234	c3h8+oh=ic3h7+h2o	7.08E+06	1.9	-159							
235	c3h8+o=nc3h7+oh	3.73E+06	2.4	5504							
236	c3h8+o=ic3h7+oh	5.48E+05	2.5	3139							
237	c3h8+h=ic3h7+h2	1.30E+06	2.4	4471							
238	c3h8+h=nc3h7+h2	1.33E+06	2.54	6756							
239	c3h8+ch3=nc3h7+ch4	9.04E-01	3.65	7153							
240	c3h8+ch3=ic3h7+ch4	1.51E+00	3.46	5480							
241	c3h8+c2h3=ic3h7+c2h4	1.00E+03	3.1	8830							
242	c3h8+c2h3=nc3h7+c2h4	6.00E+02	3.3	10500							
243	c3h8+c2h5=ic3h7+c2h6	1.51E+00	3.46	7470							
244	c3h8+c2h5=nc3h7+c2h6	9.03E-01	3.65	9140							
245	c3h8+ac3h5=c3h6+nc3h7	2.35E+02	3.3	19842							
246	c3h8+ac3h5=c3h6+ic3h7	7.83E+01	3.3	18169							
247	nc3h7(+m2)=c2h4+ch3(+m2)	1.23E+13	-0.1	30202	5.49E+49	-10	35766	2.17	1.00E-15	251	1185
248	nc3h7+o2=c3h6+ho2	3.58E+09	0	-3532							
249	ic3h7+o2=c3h6+ho2	6.10E+20	-2.86	7910							
250	c3h6+h(+m2)=ic3h7(+m2)	5.70E+09	1.16	874	1.64E+54	-11.1	9364	1	1.00E-15	260	3000
251	ic3h7+h=c2h5+ch3	5.00E+13	0	0							
252	nc3h7+h=c2h5+ch3	1.00E+14	0	0							
253	c3h6=pc3h5+h	7.58E+14	0	101300							
254	c3h6=sc3h5+h	1.45E+15	0	98060							
255	c3h6=c2h2+ch4	2.50E+12	0	70000							
256	c3h6=ac3h4+h2	3.00E+13	0	80000							
257	c3h6+ho2=ac3h5+h2o2	9.64E+03	2.6	13910							
258	c3h6+oh+o2=ch3hco+ch2o+oh	3.00E+10	0	-8280							
259	c3h6+oh=ac3h5+h2o	3.12E+06	2	-298							
260	c3h6+oh=sc3h5+h2o	1.11E+06	2	1451							
261	c3h6+oh=pc3h5+h2o	2.11E+06	2	2778							
262	c3h6+o=ch3chco+h+h	5.01E+07	1.76	76							
263	c3h6+o=c2h5+hco	1.58E+07	1.76	-1216							
264	c3h6+o=ac3h5+oh	5.24E+11	0.7	5884							
265	c3h6+o=pc3h5+oh	1.20E+11	0.7	8959							
266	c3h6+o=sc3h5+oh	6.03E+10	0.7	7632							
267	c3h6+h=c2h4+ch3	7.23E+12	0	1302							
268	c3h6+h=ac3h5+h2	1.73E+05	2.5	2492							
269	c3h6+h=sc3h5+h2	4.09E+05	2.5	9794							
270	c3h6+h=pc3h5+h2	8.04E+05	2.5	12284							
271	c3h6+o2=pc3h5+ho2	2.00E+13	0	47600							
272	c3h6+o2=sc3h5+ho2	2.00E+13	0	44000							
273	c3h6+o2=ac3h5+ho2	2.29E+12	0	39200							
274	c3h6+ch3=ac3h5+ch4	2.22E+00	3.5	5675							
275	c3h6+ch3=sc3h5+ch4	8.43E-01	3.5	11656							
276	c3h6+ch3=pc3h5+ch4	1.35E+00	3.5	12848							
277	c3h6+hco=ac3h5+ch2o	1.08E+07	1.9	17010							
278	ch3chco+oh=ch2chco+h2o	4.00E+06	2	0							
279	ch3chco+o=ch2chco+oh	7.60E+08	1.5	8500							
280	ch3chco+h=ch2chco+h2	2.00E+05	2.5	2500							
281	ch3chco+h=c2h5+co	2.00E+13	0	2000							
282	ch3chco+o=ch3+hco+co	3.00E+07	2	0							
283	ch2chcho+oh=ch2chco+h2o	1.00E+13	0	0							
284	ch2chcho+o=ch2chco+oh	7.24E+12	0	1970							
285	ch2chcho+o=ch2co+hco+h	5.01E+07	1.76	76							
286	ch2chcho+h=ch2chco+h2	3.98E+13	0	4200							
287	ch2chcho+h=c2h4+hco	2.00E+13	0	3500							
288	ch2chcho+o2=ch2chco+ho2	3.00E+13	0	36000							

表 6.5

番号	反応式	cf	ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
289	ch2chco=c2h3+co	1.00E+14	0	34000						
290	ch2chco+o=c2h3+co2	1.00E+14	0	0						
291	ac3h5+o2=ch2chcho+oh	1.82E+13	-0.41	22859						
292	ac3h5+o2=ac3h4+ho2	4.99E+15	-1.4	22428						
293	ac3h5+o2=ch2hco+ch2o	1.06E+10	0.34	12838						
294	ac3h5+o2=c2h2+ch2o+oh	2.78E+25	-4.8	15468						
295	ac3h5+ho2=ch2chcho+h+oh	1.00E+13	0	0						
296	ac3h5+oh=ac3h4+h2o	1.00E+13	0	0						
297	ac3h5+h=ac3h4+h2	5.00E+13	0	0						
298	ac3h5+h=c3h6	1.88E+26	-3.6	5468						
299	ac3h5+o=ch2chcho+h	1.81E+14	0	0						
300	ac3h5+ch3=ac3h4+ch4	3.02E+12	-0.32	-131						
301	ac3h5+c2h2=c-c5h6+h	2.95E+32	-5.83	25733						
302	ac3h5+ch3=c4h8-1	1.76E+50	-11	18600						
303	ac3h5+c2h3=c-c5h6+h+h	1.59E+65	-14	61265						
304	pc3h5+o2=ch3hco+hco	1.09E+23	-3.29	3892						
305	pc3h5+o2=ch3chco+h+o	1.60E+15	-0.78	3135						
306	pc3h5+o=ch3chco+h	1.00E+14	0	0						
307	pc3h5+h=pc3h4+h2	2.00E+13	0	0						
308	pc3h5+oh=pc3h4+h2o	1.00E+13	0	0						
309	pc3h5+h=ac3h5+h	1.00E+14	0	0						
310	sc3h5+h=ac3h5+h	1.00E+14	0	0						
311	sc3h5+o2=ch3co+ch2o	1.09E+22	-3.29	3892						
312	sc3h5+o=ch2co+ch3	1.00E+14	0	0						
313	sc3h5+h=pc3h4+h2	4.00E+13	0	0						
314	sc3h5+oh=pc3h4+h2o	2.00E+13	0	0						
315	ac3h4+h=h2ccc+h2	2.00E+07	2	5000						
316	ac3h4+o=c2h4+co	1.34E+07	1.88	179						
317	ac3h4+oh=h2ccc+h2o	1.00E+07	2	1000						
318	ac3h4+ch3=h2ccc+ch4	1.50E+00	3.5	5600						
319	ac3h4=pc3h4	1.48E+13	0	60401						
320	pc3h4+h=h2ccc+h2	2.00E+07	2	5000						
321	pc3h4+o=c2h4+co	1.50E+13	0	2102						
322	pc3h4+oh=h2ccc+h2o	1.00E+07	2	1000						
323	pc3h4+ch3=h2ccc+ch4	1.50E+00	3.5	5600						
324	pc3h4+h=ch3+c2h2	5.12E+10	1	2060						
325	pc3h4+h(+m)=sc3h5(+m)	6.50E+12	0	2000	8.45E+39	-7.27	6577			
326	ac3h4+h(+m)=ac3h5(+m)	1.20E+11	0.69	3007	5.56E+33	-5	4448			
327	ac3h4+h(+m)=sc3h5(+m)	8.49E+12	0	2000	1.11E+34	-5	4448			
328	h2ccc+o2=ch2co+hco	3.00E+10	0	2868						
329	h2ccc+o=ch2o+c2h	2.00E+13	0	0						
330	h2ccc+h=c3h2+h2	5.00E+13	0	3000						
331	h2ccc+oh=c3h2+h2o	2.00E+13	0	0						
332	h2ccc+c2h3=c-c5h5+h	9.63E+40	-7.8	28820						
333	h2ccc+ch3=ch3chcch2	5.00E+12	0	0						
334	h2ccc+ch3=ch3ch2cch	5.00E+12	0	0						
335	h2ccc+h=hcchcch+h	7.00E+13	0	0						
336	h2ccc+h=h2ccc+h	7.00E+13	0	0						
337	h2ccc+h(+m4)=ac3h4(+m4)	1.66E+15	-0.37	0	3.36E+45	-8.52	6293			
338	h2ccc+h(+m4)=pc3h4(+m4)	1.66E+15	-0.37	0	8.78E+45	-8.9	7974			
339	h2ccc+h2ccc=c6h6	5.56E+20	-2.535	1692						
340	h2ccc+ac3h5=fulvene+h+h	5.56E+20	-2.535	1692						
341	h2ccc+h2ccc=c6h5+h	2.00E+12	0	0						
342	c3h2+o2=hcco+co+h	5.00E+13	0	0						
343	c3h2+oh=c2h2+hco	5.00E+13	0	0						
344	chchcho+o2=hco+chocho	3.00E+12	0	0						
345	chchcho=c2h2+hco	1.00E+14	0	33000						
346	chchcho+h=ch2chco+h	1.00E+14	0	0						
347	chchcho+oh=hcccho+h2o	1.00E+13	0	0						
348	chchcho+h=hcccho+h2	2.00E+13	0	0						
349	hcccho+h=c2h2+hco	1.00E+14	0	3000						
350	hcccho+oh=hccco+h2o	1.00E+13	0	0						
351	hcccho+h=hccco+h2	4.00E+13	0	4200						
352	hccco+o2=hco+co+co	1.40E+09	1	0						
353	hccco+h=c2h2+co	1.00E+14	0	0						
354	c4h10=c2h5+c2h5	2.00E+16	0	81300						
355	c4h10=nc3h7+ch3	1.74E+17	0	85700						
356	c4h10=pc4h9+h	1.00E+14	0	100000						
357	c4h10=sc4h9+h	1.00E+14	0	100000						
358	c4h10+o2=pc4h9+ho2	2.50E+13	0	49000						
359	c4h10+o2=sc4h9+ho2	4.00E+13	0	47600						
360	c4h10+ac3h5=pc4h9+c3h6	7.94E+11	0	20500						

表 6.6

番号	反応式	cf	ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
361	c4h10+ac3h5=sc4h9+c3h6	3.16E+11	0	16400						
362	c4h10+ch3=pc4h9+ch4	5.00E+11	0	13600						
363	c4h10+ch3=sc4h9+ch4	4.30E+11	0	10500						
364	c4h10+h=pc4h9+h2	2.84E+05	2.54	6050						
365	c4h10+h=sc4h9+h2	5.68E+05	2.4	3765						
366	c4h10+oh=pc4h9+h2o	4.13E+07	1.73	753						
367	c4h10+oh=sc4h9+h2o	7.23E+07	1.64	-247						
368	c4h10+o=pc4h9+oh	1.13E+14	0	7850						
369	c4h10+o=sc4h9+oh	5.62E+13	0	5200						
370	c4h10+ho2=pc4h9+h2o2	1.70E+13	0	20460						
371	c4h10+ho2=sc4h9+h2o2	1.12E+13	0	17700						
372	sc4h9(+m2)=c3h6+ch3(+m2)	2.14E+12	0.65	30856	6.32E+58	-12.85	35567			
373	sc4h9=c4h8-1+h	2.00E+13	0	40400						
374	sc4h9=c4h8-2+h	5.01E+12	0	37900						
375	pc4h9(+m2)=c2h5+c2h4(+m2)	1.06E+13	0	27828	1.90E+55	-11.91	32263			
376	pc4h9=c4h8-1+h	1.26E+13	0	38600						
377	c4h8-1=c2h3+c2h5	1.00E+19	-1	96770						
378	c4h8-1=h+c4h7	4.11E+18	-1	97350						
379	c4h8-1+ch3=c4h7+ch4	1.00E+11	0	7300						
380	c4h8-1+h=c4h7+h2	5.00E+13	0	3900						
381	c4h8-1+o=nc3h7+hco	1.80E+05	2.5	-1029						
382	c4h8-1+o=ch2chcho+ch3+h	9.67E+04	2.5	-1029						
383	c4h8-1+oh=c4h7+h2o	2.25E+13	0	2217						
384	c4h8-1+ac3h5=c4h7+c3h6	7.90E+10	0	12400						
385	c4h8-1+o2=c4h7+ho2	4.00E+12	0	33200						
386	c4h8-2=h+c4h7	4.11E+18	-1	97350						
387	c4h8-2+ch3=c4h7+ch4	1.00E+11	0	8200						
388	c4h8-2+h=c4h7+h2	5.00E+13	0	3800						
389	c4h8-2+o=ic3h7+hco	2.79E+06	2.12	-1775						
390	c4h8-2+oh=c4h7+h2o	3.90E+13	0	2217						
391	c4h8-2+o=ch3co+c2h5	1.53E+07	1.87	-1476						
392	c4h8-2+o=ch3+ch3chco+h	8.22E+06	1.87	-1476						
393	c4h8-2+o2=c4h7+ho2	8.00E+13	0	37400						
394	c4h7=ch2chch2+h	1.00E+14	0	55000						
395	c4h7+oh=ch2chch2+h2o	1.00E+13	0	0						
396	c4h7+ch3=ch2chch2+ch4	8.00E+12	0	0						
397	c4h7+ac3h5=c3h6+ch2chch2	6.31E+12	0	0						
398	c4h7+o2=ch2chch2+ho2	1.00E+09	0	0						
399	c4h7+h=ch2chch2+h2	3.16E+13	0	0						
400	ch2chch2+oh=ch2chch2+h2o	2.00E+07	2	5000						
401	ch2chch2+oh=ch2chch2+h2o	2.00E+07	2	2000						
402	ch2chch2+o=hco+ac3h5	6.02E+08	1.45	-858						
403	ch2chch2+o=ch2hco+c2h3	1.00E+12	0	0						
404	ch2chch2+h=ch2chch2+h2	3.00E+07	2	13000						
405	ch2chch2+h=ch2chch2+h2	3.00E+07	2	6000						
406	ch3ch2cch+oh=ch3chch2+h2o	1.00E+07	2	2000						
407	ch3ch2cch+h=c2h5+c2h2	1.00E+14	0	3000						
408	ch3chch2+oh=ch2chch2+h2o	2.00E+07	2	1000						
409	ch3chch2+oh=ch3ccch2+h2o	1.00E+07	2	2000						
410	ch3chch2+oh=ch3chch2+h2o	2.00E+07	2	2500						
411	ch3chch2+h=ch2chch2+h2	5.00E+07	2	5000						
412	ch3chch2+h=ch3ccch2+h2	1.50E+07	2	6000						
413	ch3chch2+h=ch3chch2+h2	3.00E+07	2	6500						
414	ch3chch2+h=ch3+ac3h4	2.00E+13	0	2000						
415	ch3chch2+h=ch3+h2ccch	1.00E+14	0	0						
416	ch3chch2+o2=ch3chco+hco	4.16E+10	0	2510						
417	ch3chch2+oh=ch2chch2+h2o	3.00E+13	0	0						
418	ch2chccch2+h=ch3+h2ccch	1.00E+14	0	0						
419	ch2chccch2+h=ch3ccch2+h	3.00E+13	0	0						
420	ch2chccch2+c2h2=c6h6+h	3.00E+11	0	14900						
421	ch3ccch2+h=ch3+h2ccch	1.00E+14	0	0						
422	ch3ccch2+o2=ch3co+ch2co	4.16E+10	0	2510						
423	ch3ccch2+h=h2ccch2+h2	1.00E+14	0	8000						
424	ch3ccch2+oh=h2ccch2+h2o	1.00E+13	0	0						
425	ch2chchch+h=ch2chch2+h	1.00E+14	0	0						
426	ch2chchch+oh=ch2chch2+h2o	2.00E+07	2	1000						
427	ch2chchch+h=ch2chch2+h2	3.00E+07	2	1000						
428	ch2chchch+c2h2=c6h6+h	1.60E+16	-1.33	5400						
429	ch3chccch(+m)=ch2chccch+h(+m)	1.00E+13	0	49000	2.00E+14	0	41000			
430	ch3ccch2(+m)=h2ccch2+h(+m)	1.00E+13	0	56000	2.00E+14	0	48000			
431	ch2chccch2(+m)=ch2chccch+h(+m)	1.00E+14	0	50000	2.00E+15	0	42000			
432	ch2chchch(+m)=ch2chccch+h(+m)	1.00E+14	0	37000	1.00E+14	0	30000			

表 6.7

番号	反応式	cf	ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
433	ch2chchch+o2=chchcho+ch2o	1.00E+12	0	0						
434	ch2chchch+o2=ch2chcch+ho2	1.00E+07	2	10000						
435	ch3ccch2+h2ccch=c6h5ch2+h	3.00E+12	0	0						
436	ch3chcch+h2ccch=c6h5ch2+h	3.00E+12	0	0						
437	ch3ccch2+ch3ccch2=ch3c6h4ch2+h	3.00E+12	0	0						
438	ch3chcch+ch3chcch=ch3c6h4ch2+h	3.00E+12	0	0						
439	h2ccch2+oh=h2ccch+h2o	2.00E+07	2	2000						
440	h2ccch2+h=h2ccch+h2	3.00E+07	2	6000						
441	ch2chcch+oh=hcchcch+h2o	7.50E+06	2	5000						
442	ch2chcch+h=hcchcch+h2	2.00E+07	2	15000						
443	ch2chcch+oh=h2ccch+h2o	1.00E+07	2	2000						
444	ch2chcch+h=h2ccch+h2	3.00E+07	2	5000						
445	hcchcch+h=h2ccch+h	1.00E+14	0	0						
446	hcchcch+c2h2=c6h5	9.60E+70	-17.77	31300						
447	hcchcch+o2=hcccho+hco	3.00E+12	0	0						
448	h2ccch+o2=ch2co+hcco	1.00E+12	0	0						
449	h2ccch+oh=c4h2+h2o	3.00E+13	0	0						
450	h2ccch+o=c2co+c2h	2.00E+13	0	0						
451	h2ccch+o=h2c4o+h	2.00E+13	0	0						
452	h2ccch+h=c4h2+h2	5.00E+13	0	0						
453	h2ccch+ch2=ac3h4+c2h	2.00E+13	0	0						
454	h2ccch+c2h2=c6h5	3.00E+11	0	14900						
455	h2ccch(+m)=c4h2+h(+m)	1.00E+14	0	47000	2.00E+15	0	40000			
456	hcchcch(+m)=c4h2+h(+m)	1.00E+14	0	36000	1.00E+14	0	30000			
457	c4h2+ch2=c5h3+h	1.30E+13	0	4326						
458	c4h2+ch=c5h2+h	1.00E+14	0	0						
459	c4h2+ch2(s)=c5h3+h	3.00E+13	0	0						
460	c4h2+c2h=c6h2+h	9.60E+13	0	0						
461	c4h2+oh=h2c4o+h	6.66E+12	0	-410						
462	c4h2+o=c3h2+co	1.20E+12	0	0						
463	h2c4o+h=c2h2+hcco	5.00E+13	0	3000						
464	h2c4o+oh=ch2co+hcco	1.00E+07	2	2000						
465	l-c5h8+oh=l-c5h7+h2o	7.00E+06	2	0						
466	l-c5h8+h=l-c5h7+h2	7.00E+06	2	5000						
467	l-c5h8+h=ac3h5+c2h4	3.35E+08	1.5	2000						
468	c-c5h7=c-c5h6+h	3.16E+15	0	36000						
469	c-c5h7=l-c5h7	3.16E+15	0	39500						
470	l-c5h7+o=ch2chcho+c2h3	2.00E+14	0	0						
471	l-c5h7+h=l-c5h8	1.00E+14	0	0						
472	c-c5h6+o2=c-c5h5+ho2	5.00E+13	0	35400						
473	c-c5h6+ho2=c-c5h5+h2o2	1.99E+12	0	11660						
474	c-c5h6+oh=c-c5h5+h2o	3.43E+09	1.18	-447						
475	c-c5h6+o=c-c5h5+oh	1.81E+13	0	3080						
476	c-c5h6+h=c-c5h5+h2	2.19E+08	1.77	3000						
477	c-c5h6+ch3=c-c5h5+ch4	3.11E+11	0	5500						
478	c-c5h6+c2h3=c-c5h5+c2h4	6.00E+12	0	0						
479	c-c5h6+ch2chch=c-c5h5+ch2chch2	6.00E+12	0	0						
480	c-c5h6+c6h5o=c-c5h5+c6h5oh	3.16E+11	0	8000						
481	c-c5h5+h=c-c5h6	2.00E+14	0	0						
482	c-c5h5+o=c-c5h4+o+h	1.00E+14	0	0						
483	c-c5h5+ho2=c-c5h5o+oh	3.00E+13	0	0						
484	c-c5h5+oh=c-c5h4oh+h	3.00E+13	0	0						
485	c-c5h5+c-c5h5=c10h8+h+h	2.00E+13	0	8000						
486	c-c5h5o=ch2chchch+co	2.51E+11	0	43900						
487	c-c5h4oh=c-c5h4o+h	2.10E+13	0	48000						
488	c-c5h4o=co+c2h2+c2h2	1.00E+15	0	78000						
489	c6h6+o2=c6h5+ho2	6.30E+13	0	60000						
490	c6h6+oh=c6h5+h2o	1.63E+08	1.42	1454						
491	c6h6+oh=c6h5oh+h	6.70E+12	0	10592						
492	c6h6+o=c6h5o+h	2.40E+13	0	4670						
493	c6h6+h=c6h5+h2	3.03E+02	3.3	5690						
494	c6h5+h=c6h6	8.00E+13	0	0						
495	c6h5+c2h4=c6h5c2h3+h	7.23E+01	3.5	8345						
496	c6h5+c2h2=c6h5c2h+h	3.98E+13	0	10099						
497	c6h5+oh=c6h5o+h	5.00E+13	0	0						
498	c6h5+o=c-c5h5+co	1.00E+14	0	0						
499	c6h5+o2=c6h5o+o	2.60E+13	0	6120						
500	c6h5+o2=oc6h4o+h	3.00E+13	0	8981						
501	c6h5+c6h5=biphenyl	5.00E+12	0	0						
502	c6h5+c6h6=biphenyl+h	4.00E+11	0	4000						
503	oc6h4o=c-c5h4o+co	1.00E+15	0	78000						
504	c6h5o=co+c-c5h5	7.40E+11	0	43850						

表 6.8

番号	反応式	cf	ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
505	c6h5o+h=c6h5oh	1.00E+14	0	0						
506	c6h5o+h=c-2*4c6h6o	1.00E+14	0	0						
507	c6h5oh+oh=c6h5o+h2o	2.95E+06	2	-1310						
508	c6h5oh+ch3=c6h5o+ch4	1.81E+11	0	7716						
509	c6h5oh+h=c6h5o+h2	1.58E+13	0	6100						
510	c6h5oh+o=c6h5o+oh	2.81E+13	0	7352						
511	c6h5oh+c2h3=c2h4+c6h5o	6.00E+12	0	0						
512	c6h5oh+c6h5=c6h6+c6h5o	4.91E+12	0	4400						
513	c-2*4c6h6o+h=c-c5h7+co	2.51E+13	0	4700						
514	c6h5ch3=c6h5+ch3	1.40E+16	0	99800						
515	c6h5ch3+o2=c6h5ch2+ho2	2.00E+12	0	39080						
516	c6h5ch3+oh=c6h5ch2+h2o	1.26E+13	0	2583						
517	c6h5ch3+o=c6h5ch2+oh	5.00E+08	1.5	8000						
518	c6h5ch3+h=c6h5ch2+h2	3.98E+02	3.44	3120						
519	c6h5ch3+h=c6h6+ch3	1.20E+13	0	5148						
520	c6h5ch3+o=oc6h4ch3+h	1.63E+13	0	3418						
521	c6h5ch3+ch3=ch4+c6h5ch2	3.16E+11	0	9500						
522	c6h5ch3+c6h5=c6h6+c6h5ch2	2.10E+12	0	4400						
523	c6h5ch2+h=c6h5ch3	1.80E+14	0	0						
524	c6h5ch2+c6h5oh=c6h5o+c6h5ch3	1.05E+11	0	9500						
525	c6h5ch2+oc6h4ch3=oc6h4ch3+c6h5ch3	1.05E+11	0	9500						
526	c6h5ch2+o=c6h5cho+h	2.50E+14	0	0						
527	c6h5ch2+o=c6h5+ch2o	8.00E+13	0	0						
528	c6h5ch2+ho2=c6h5cho+h+oh	2.50E+14	0	0						
529	c6h5ch2+ho2=c6h5+ch2o+oh	8.00E+13	0	0						
530	c6h5ch2+ch3=c6h5c2h5	1.19E+13	0	221						
531	c6h5ch2+h2ccc=c10h10	1.00E+10	0	0						
532	c6h5ch2+c2h2=indene+h	3.20E+11	0	7000						
533	c6h5ch2+c6h5cho=c6h5ch3+c6h5co	2.77E+03	2.81	5773						
534	c6h5ch2+oh=c6h5ch2oh	6.00E+13	0	0						
535	c6h5ch2oh+oh=c6h5cho+h2o+h	8.43E+12	0	2583						
536	c6h5ch2oh+h=c6h5cho+h2+h	8.00E+13	0	8235						
537	c6h5ch2oh+h=c6h6+ch2oh	1.20E+13	0	5148						
538	c6h5ch2oh+c6h5ch2=c6h5cho+c6h5ch3+h	2.11E+11	0	9500						
539	c6h5ch2oh+c6h5=c6h5cho+c6h6+h	1.40E+12	0	4400						
540	c6h5cho+o2=c6h5co+ho2	1.02E+13	0	38950						
541	c6h5cho+oh=c6h5co+h2o	1.71E+09	1.18	-447						
542	c6h5cho+h=c6h5co+h2	5.00E+13	0	4928						
543	c6h5cho+h=c6h5+ch2o	2.00E+13	0	2000						
544	c6h5cho+h=c6h6+hco	1.20E+13	0	5148						
545	c6h5cho+o=c6h5co+oh	9.04E+12	0	3080						
546	c6h5cho+ch3=ch4+c6h5co	2.77E+03	2.81	5773						
547	c6h5cho+c6h5=c6h6+c6h5co	7.01E+11	0	4400						
548	c6h5co=c6h5+co	3.98E+14	0	29400						
549	oc6h4ch3+h=oc6h4ch3	2.50E+14	0	0						
550	oc6h4ch3=c6h6+h+co	2.51E+11	0	43900						
551	hoc6h4ch3+oh=oc6h4ch3+h2o	6.00E+12	0	0						
552	hoc6h4ch3+h=oc6h4ch3+h2	1.15E+14	0	12400						
553	hoc6h4ch3+h=c6h5ch3+oh	2.21E+13	0	7910						
554	hoc6h4ch3+h=c6h5oh+ch3	1.20E+13	0	5148						
555	c6h5c2h5+oh=c6h5c2h3+h2o+h	8.43E+12	0	2583						
556	c6h5c2h5+h=c6h5c2h3+h2+h	8.00E+13	0	8235						
557	c6h5c2h3+oh=c6h4c2h3+h2o	1.63E+08	1.42	1454						
558	c6h5c2h3+h=c6h4c2h3+h2	3.03E+02	3.3	5690						
559	c6h5c2h3+oh=c6h5cch2+h2o	1.00E+07	2	2000						
560	c6h5c2h3+h=c6h5cch2+h2	2.00E+07	2	6000						
561	c6h5chch+h=c6h5cch2+h	1.00E+14	0	0						
562	c6h5cch2+oh=c6h5c2h+h2o	2.00E+13	0	0						
563	c6h5cch2+h=c6h5c2h+h2	5.00E+13	0	0						
564	c6h5c2h+o=c6h5cco+h	4.80E+09	1	0						
565	c6h5cco+o2=c6h5co+co2	1.00E+12	0	0						
566	c6h5c2h+oh=c6h4c2h+h2o	1.63E+08	1.42	1454						
567	c6h5c2h+h=c6h4c2h+h2	3.03E+02	3.3	5690						
568	c6h5c2h+ch3=c6h4c2h+ch4	1.67E+12	0	15057						
569	c6h4c2h+c2h2=c10h7	1.07E+04	2.324	-657.3						
570	c6h4c2h3+ch3=indene+h+h	2.00E+13	0	0						
571	ch3c6h4ch3+oh=ch3c6h4ch2+h2o	2.95E+13	0	2623						
572	ch3c6h4ch3+o=ch3c6h4ch2+oh	5.00E+08	1.5	8000						
573	ch3c6h4ch3+h=ch3c6h4ch2+h2	3.98E+02	3.44	3120						
574	ch3c6h4ch2+c2h2=c10h10+h	3.20E+11	0	7000						
575	ch3c6h4ch2+c2h2=ch3indene+h	3.20E+11	0	7000						
576	ch3c6h4ch2+h=ch3c6h4ch3	7.46E+13	0	78						

表 6.9

番号	反応式	cf		ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
577	ch3c6h4ch2+ch3=ch3c6h4c2h5	6.00E+12	0	221							
578	indene+oh=indenyl+h2o	3.43E+09	1.18	-447							
579	indene+o=indenyl+oh	1.81E+13	0	3080							
580	indene+h=indenyl+h2	2.19E+08	1.77	3000							
581	indenyl+h=indene	2.00E+14	0	0							
582	indenyl+o=c6h5chch+co	1.00E+14	0	0							
583	indenyl+ho2=c6h5chch+co+oh	1.00E+13	0	0							
584	indenyl+c-c5h5=phnthrm+h+h	1.00E+13	0	8000							
585	ch3c6h4c2h5+oh=ch3c6h4c2h3+h2o+h	8.43E+12	0	2583							
586	ch3c6h4c2h5+h=ch3c6h4c2h3+h2+h	8.00E+13	0	8235							
587	ch3c6h4c2h3+oh=indene+h+h2o	1.26E+13	0	2583							
588	ch3c6h4c2h3+h=indene+h+h2	3.98E+02	3.44	3120							
589	ch3indene+oh=ch3indenyl+h2o	3.43E+09	1.18	-447							
590	ch3indene+o=ch3indenyl+oh	1.81E+13	0	3080							
591	ch3indene+h=ch3indenyl+h2	2.19E+08	1.77	3000							
592	ch3indene+h=indene+ch3	1.20E+13	0	5200							
593	ch3indenyl+h=ch3indene	2.00E+14	0	0							
594	ch3indenyl+c-c5h5=ch3phnthrm+h+h	1.00E+13	0	8000							
595	c10h10+oh=c10h9+h2o	5.00E+06	2	0							
596	c10h10+o=c10h9+oh	7.00E+11	0.7	6000							
597	c10h10+h=c10h9+h2	2.00E+05	2.5	2500							
598	c10h9+h=c10h10	1.00E+14	0	0							
599	c10h8+h=c10h9	5.00E+14	0	5000							
600	c10h8+oh=c10h7+h2o	2.44E+08	1.42	1454							
601	c10h8+oh=c10h7oh+h	9.00E+12	0	10592							
602	c10h8+o=c10h7o+h	1.40E+13	0	1792							
603	c10h8+h=c10h7+h2	4.55E+02	3.3	5690							
604	c10h7+h=c10h8	1.00E+14	0	0							
605	c10h7+o2=c10h7o+o	1.00E+13	0	0							
606	c10h7+oh=c10h7o+h	5.00E+13	0	0							
607	c10h7+ch3=c10h7ch2+h	2.00E+13	0	0							
608	c10h7+c2h2=acenphthln+h	1.00E+20	-2.08	12000							
609	c10h7+c2h2=c10h7cch+h	1.17E-07	5.248	-9482							
610	c10h7+c6h5=flmthn+h+h	5.00E+12	0	0							
611	c10h7+c6h6=flmthn+h+h2	4.00E+11	0	4000							
612	c10h7+o=c10h7oh	1.00E+14	0	0							
613	c10h7oh+oh=c10h7o+h2o	2.95E+06	2	-1312							
614	c10h7oh+h=c10h7o+h2	1.58E+13	0	6100							
615	c10h7o=indenyl+co	7.40E+11	0	43850							
616	c10h7ch3+oh=c10h7ch2+h2o	1.27E+13	0	2583							
617	c10h7ch3+o=c10h7ch2+oh	5.00E+08	1.5	8000							
618	c10h7ch3+h=c10h7ch2+h2	3.98E+02	3.44	3120							
619	c10h7ch3+h=c10h8+ch3	1.20E+13	0	5148							
620	c10h7ch2+h=c10h7ch3	1.00E+14	0	0							
621	c10h7ch2+o=c10h7ch2o	1.00E+14	0	0							
622	c10h7ch2+ho2=>c10h7+ch2o+oh	1.00E+13	0	0							
623	c10h7ch2+c2h2=bz(a)ndene+h	3.20E+11	0	7000							
624	c10h7ch2+ch3=c10h7c2h5	1.19E+13	0	221							
625	c10h7c2h5+oh=c10h7c2h3+h2o+h	8.44E+12	0	2583							
626	c10h7c2h5+h=c10h7c2h3+h2+h	8.00E+13	0	8235							
627	c10h7c2h3+oh=c10h7cch2+h2o	1.00E+07	2	2000							
628	c10h7c2h3+h=c10h7cch2+h2	2.00E+07	2	6000							
629	c10h7cch2+oh=c10h7cch+h2o	2.00E+13	0	0							
630	c10h7cch2+h=c10h7cch+h2	5.00E+13	0	0							
631	c10h7cch+oh=c10h6cch+h2o	1.63E+08	1.42	1454							
632	c10h7cch+h=c10h6cch+h2	3.03E+02	3.3	5690							
633	c10h7cch+h=acenphthln+h	8.46E+21	-2.614	7062.6							
634	c10h6cch+c2h2=phnthryl-1	1.07E+04	2.324	-657.3							
635	fluorene+oh=fluoryl+h2o	3.43E+09	1.18	-447							
636	fluorene+o=fluoryl+oh	1.81E+13	0	3080							
637	fluorene+h=fluoryl+h2	2.19E+08	1.77	3000							
638	fluoryl+h=fluorene	2.00E+14	0	0							
639	bz(a)ndnyl+h=bz(a)ndene	2.00E+14	0	0							
640	bz(a)ndene+oh=bz(a)ndnyl+h2o	3.43E+09	1.18	-447							
641	bz(a)ndene+o=bz(a)ndnyl+oh	1.81E+13	0	3080							
642	bz(a)ndene+h=bz(a)ndnyl+h2	2.19E+08	1.77	3000							
643	bz(a)ndnyl+c-c5h5=bz(a)phnthrm+h+h	1.00E+13	0	8000							
644	phnthrm+oh=phnthryl-1+h2o	2.17E+08	1.42	1454							
645	phnthrm+oh=phnthryl-9+h2o	5.43E+07	1.42	1454							
646	phnthrm+oh=phnthrol-1+h	9.00E+12	0	10592							
647	phnthrm+oh=phnthrol-9+h	9.00E+12	0	10592							
648	phnthrm+h=phnthryl-1+h2	4.04E+02	3.3	5690							

表 6.10

番号	反応式	cf		ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
649	phnthrn+h=phnthryl-9+h2	1.01E+02	3.3	5690							
650	anthracn=phnthrn	8.00E+12	0	65000							
651	phnthryl-1+h=phnthrn	8.00E+13	0	0							
652	phnthryl-9+h=phnthrn	8.00E+13	0	0							
653	phnthryl-1+o2= phnthroxy-1+o	1.00E+13	0	0							
654	phnthryl-9+o2= phnthroxy-9+o	1.00E+13	0	0							
655	phnthrol-1+oh=phnthroxy-1+h2o	2.95E+06	2	-1310							
656	phnthrol-1+h=phnthroxy-1+h2	1.59E+13	0	6100							
657	phnthroxy-1+h=phnthrol-1	1.00E+14	0	0							
658	phnthrol-9+oh=phnthroxy-9+h2o	2.95E+06	2	-1310							
659	phnthrol-9+h=phnthroxy-9+h2	1.59E+13	0	6100							
660	phnthroxy-9+h=phnthrol-9	1.00E+14	0	0							
661	phnthroxy-1=bz(a)ndnyl+co	7.40E+11	0	43850							
662	phnthroxy-9=fluoryl+co	7.40E+11	0	43850							
663	phnthryl-1+c2h2=pyrene+h	3.49E+10	0.557	5658							
664	phnthryl-1+ch3=hc4-p(def)pthn+h+h	2.00E+13	0	0							
665	ch3phnthrn+oh=hc4-p(def)pthn+h2o+h	1.27E+13	0	2583							
666	ch3phnthrn+h=hc4-p(def)pthn+h2+h	3.98E+02	3.44	3120							
667	ch3phnthrn+h=phnthrn+ch3	1.20E+13	0	5148							
668	hc4-p(def)pthn+oh=hc4-p(def)pthyl+h2o	3.43E+09	1.18	-447							
669	hc4-p(def)pthn+o=hc4-p(def)pthyl+oh	1.81E+13	0	3080							
670	hc4-p(def)pthn+h=hc4-p(def)pthyl+h2	2.19E+08	1.77	3000							
671	hc4-p(def)pthyl+h=hc4-p(def)pthn	2.00E+14	0	0							
672	bz(a)phnthrn+h=bz(ghi)fln+h2+h	3.03E+02	3.3	5690							
673	bz(a)phnthrn+oh=bz(ghi)fln+h2o+h	1.63E+08	1.42	1454							
674	h2ccch+ch2=ch2chcch+h	4.00E+13	0	0							
675	c-c5h5+ch3=ch3cy24pd	1.76E+50	-11	18600							
676	ch3cy24pd+h=c-c5h6+ch3	1.00E+13	0	1300							
677	c6h6+h=ch3cy24pd1	2.39E+27	-3.92	29200							
678	cyc6h7=ch3cy24pd1	5.00E+12	0	38100							
679	ch3cy24pd1+h=ch3cy24pd	1.00E+14	0	0							
680	ch3cy24pd1+h=c-c5h5+ch3	1.00E+14	0	0							
681	cyc6h7=ch3dcy24pd	5.50E+10	0	23500							
682	c6h6+h=cyc6h7	4.87E+56	-12.73	26800							
683	ch3dcy24pd+h2=ch3cy24pd+h	4.00E+12	0	15000							
684	fulvene=c6h6	9.84E+37	-7.4	76979							
685	fulvene+h=c6h6+h	3.00E+12	0.5	2000							
686	fulvene+h=fulvenyl+h2	3.03E+02	3.3	5690							
687	fulvene+oh=fulvenyl+h2o	1.63E+08	1.42	1454							
688	fulvenyl+h=c6h5+h	1.00E+14	0	0							
689	fulvenyl+o2=c-c5h4o+hco	1.00E+12	0	0							

表 6.1 ~ 表 6.10 の補足

番号*i*の化学種を $Y_i$ と書く。例えば、 $Y_2 = \text{H}_2$ 、 $Y_4 = \text{H}_2\text{O}$ 、 $Y_6 = \text{O}_2$ 、 $Y_{21} = \text{CO}_2$ 。

$$m = \sum_{i=1}^{153} Y_i$$

$$m1 = m - \text{H}_2\text{O} - \text{H}_2 + 9 \text{CH}_4 + 2.8 \text{CO}_2 + 0.9 \text{CO}$$

$$m2 = m + 4 \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2 + 2 \text{CO}_2 + \text{CO}$$

$$m3 = m + 15 \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2 + 2 \text{CO}_2 + \text{CO}$$

$$m4 = m + 4 \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2 + 2 \text{CO}_2 + \text{CO} + \text{O}_2 + \text{C}_2\text{H}_2$$

$$m5 = m - \text{H}_2\text{O} - \text{H}_2$$

$$m6 = m + 5.4 \text{H}_2\text{O}$$

$$m7 = m + 11 \text{H} + 3 \text{C}_2\text{H}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$$

$$m8 = m + 4 \text{H}_2\text{O} + 0.87 \text{H}_2 + 2 \text{CO}_2 + 0.87 \text{CO} + 1.81 \text{CH}_4$$



表 7.1

化学種	T_bnd (K)	tdl_1	tdl_2	tdl_3	tdl_4	tdl_5	tdl_6	tdl_7
OH	1000	3.6372660E+00	1.8509100E-04	-1.6761650E-06	2.3872030E-09	-8.4314420E-13	3.6067820E+03	1.3588600E+00
H2	1000	3.2981240E+00	8.2494420E-04	-8.1430150E-07	-9.4754340E-11	4.1348720E-13	-1.0125210E+03	-3.2940940E+00
H	1000	2.5000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	2.5471630E+04	-4.6011760E-01
H2O	1000	3.3868420E+00	3.4749820E-03	-6.3546960E-06	6.9685810E-09	-2.5065880E-12	-3.0208110E+04	2.5902330E+00
O	1000	2.9464290E+00	-1.6381660E-03	2.4210320E-06	-1.6028430E-09	3.8906960E-13	2.9147640E+04	2.9639950E+00
O2	1000	3.2129360E+00	1.1274860E-03	-5.7561500E-07	1.3138770E-09	-8.7685540E-13	-1.0052490E+03	6.0347380E+00
HO2	1451	3.4762950E+00	2.2046775E-03	1.5684188E-06	-2.1275580E-09	5.8314072E-13	6.1707345E+02	7.0230852E+00
H2O2	1000	3.3887540E+00	6.5692260E-03	-1.4850130E-07	-4.6258060E-09	2.4715150E-12	-1.7663150E+04	6.7853630E+00
CH3	1000	2.4304430E+00	1.1124100E-02	-1.6802200E-05	1.6218290E-08	-5.8649530E-12	1.6423780E+04	6.7897940E+00
C2H6	1000	1.4625390E+00	1.5494670E-02	5.7805070E-06	-1.2578320E-08	4.5862670E-12	-1.1239180E+04	1.4432290E+01
CH4	1000	7.7874150E-01	1.7476680E-02	-2.7834090E-05	3.0497080E-08	-1.2239310E-11	-9.8252290E+03	1.3722190E+01
CH3O	1000	2.1062040E+00	7.2165950E-03	5.3384720E-06	-7.3776360E-09	2.0756110E-12	9.7860110E+02	1.3152180E+01
CH2O	1000	1.6527310E+00	1.2631440E-02	-1.8881680E-05	2.0500310E-08	-8.4132370E-12	-1.4865400E+04	1.3784820E+01
CH2(S)	1359	3.3234070E+00	2.2806258E-03	-2.4815602E-07	1.0206539E-10	2.4882662E-14	5.0495447E+04	3.0940150E+00
CH2	1350	3.4962399E+00	2.2025865E-03	-4.2382880E-07	1.3648471E-11	4.3193737E-15	4.5919277E+04	2.9496435E+00
HCOH	1398	-2.8215742E+00	3.5733170E-02	-3.8086158E-05	1.8620595E-08	-3.4595784E-12	1.1295667E+04	3.4848776E+01
CH	1000	3.2002020E+00	2.0728760E-03	-5.1344310E-06	5.7338900E-09	-1.9555330E-12	7.0452590E+04	3.3315880E+00
CH3OH	1000	2.6601150E+00	7.3415080E-03	7.1700510E-06	-8.7931940E-09	2.3905700E-12	-2.5353480E+04	1.1232630E+01
CH2OH	1410	2.6006785E+00	1.2844785E-02	-8.3379619E-06	2.7572761E-09	-3.5704111E-13	-2.3347872E+03	1.1327231E+01
HCO	1000	2.8983300E+00	6.1991470E-03	-9.6230840E-06	1.0898250E-08	-4.5748850E-12	4.1599220E+03	8.9836140E+00
CO2	1000	2.2757250E+00	9.9220720E-03	-1.0409110E-05	6.8666870E-09	-2.1172800E-12	-4.8373140E+04	1.0188490E+01
CO	1000	3.2624520E+00	1.5119410E-03	-3.8817550E-06	5.5819440E-09	-2.4749510E-12	-1.4310540E+04	4.8488970E+00
C2H4	1000	-8.6148800E-01	2.7961630E-02	-3.3886770E-05	2.7851520E-08	-9.7378790E-12	5.5730460E+03	2.4211490E+01
C2H2	1000	2.0135620E+00	1.5190450E-02	-1.6163190E-05	9.0789920E-09	-1.9127460E-12	2.6124440E+04	8.8053780E+00
HCCO	1000	5.0479650E+00	4.4534780E-03	2.2682830E-07	-1.4820950E-09	2.2507420E-13	1.9658920E+04	4.8184390E-01
C2H3	1671	2.7392594E+00	7.0301159E-03	2.3664730E-06	-3.5956974E-09	8.9175694E-13	3.4286898E+04	1.0153154E+01
H2CCCH	1000	4.7542000E+00	1.1080280E-02	2.7933230E-07	-5.4792120E-09	1.9496290E-12	3.9888830E+04	5.8545490E-01
C2H5	1375	1.4737485E+00	1.6360661E-02	-4.3289682E-06	-1.1727067E-09	5.7232588E-13	1.3332699E+04	1.6634985E+01
AC3H5	1378	9.7301382E-01	2.8181860E-02	-1.6293881E-05	3.9619433E-09	-2.2570454E-13	1.8523075E+04	1.9320141E+01
CH2CO	1000	2.9749710E+00	1.2118710E-02	-2.3450460E-06	6.4666850E-09	3.9056490E-12	-7.6326370E+03	8.6735530E+00
C	1000	2.4885850E+00	8.0857770E-05	-2.6976970E-07	3.0407290E-10	-1.1066520E-13	8.5458780E+04	4.7534590E+00
C3H2	1000	3.1667140E+00	2.4825720E-02	-4.5916370E-05	4.2680190E-08	-1.4821520E-11	6.3504210E+04	8.8694460E+00
C2H	1000	2.7377040E+00	8.0484460E-03	-9.2443100E-06	6.5252590E-09	-1.9395800E-12	6.6838130E+04	7.3002200E+00
CH2HCO	1000	3.4090620E+00	1.0738570E-02	1.8914920E-06	-7.1585830E-09	2.8673850E-12	1.5214770E+03	9.5582900E+00
C3H6	1000	1.4933070E+00	2.0925180E-02	4.4867940E-06	-1.6689120E-08	7.1581460E-12	1.0748260E+03	1.6145340E+01
CH2CHCCH	1000	3.2338930E+00	1.8656340E-02	1.2703200E-06	-9.4100960E-09	2.9561110E-12	3.3010970E+04	9.9226760E+00
CH2CHCHCH2	1000	1.9316240E+00	2.4790300E-02	3.0180710E-06	-1.1546860E-08	2.5866230E-12	1.2554680E+04	1.7019990E+01
CH2CHCHCH2	1000	3.8794430E+00	1.9976640E-02	1.8727770E-06	-9.3069530E-09	2.3861160E-12	3.5268590E+04	9.8421520E+00
HCCOH	1000	3.8994650E+00	9.7010750E-03	-3.1193090E-07	-5.5377320E-08	2.4657320E-12	8.7011900E+03	4.4918750E+00
CH3HCO	1000	2.5056950E+00	1.3369910E-02	4.6719530E-06	-1.1281400E-08	4.2635660E-12	-2.1245890E+04	1.3350890E+01
CH3CO	1000	3.1252780E+00	9.7782200E-03	4.5214480E-06	-9.0094620E-09	3.1937180E-12	-4.1085080E+03	1.1228850E+01
CHOCHO	1396	1.8810512E+00	2.3638637E-02	-1.8344330E-05	6.8484296E-09	-9.9273367E-13	-2.6928019E+04	1.7299475E+01
C2	1000	6.9960450E+00	-7.4006020E-03	3.2347040E-06	4.8025350E-09	-3.2959180E-12	9.8974870E+04	-1.3862270E+01
C4H2	1000	4.0051920E+00	1.9810000E-02	-9.8658770E-06	-6.6351580E-09	6.0774130E-12	5.4240650E+04	1.8457370E+00
C2O	1000	3.3688510E+00	8.2418030E-03	-8.7651450E-06	5.5692620E-09	-1.5400090E-12	3.3170810E+04	6.7133140E+00
C3H8	1000	8.9692080E-01	2.6689860E-02	5.4314250E-06	-2.1260010E-08	9.2433300E-12	-1.3954920E+04	1.9355330E+01
IC3H7	1373	5.8635846E-01	3.2102107E-02	-1.6951700E-05	3.9898630E-09	-2.8751033E-13	9.2600359E+03	2.2663258E+01
NC3H7	1390	1.1336657E-01	3.5417139E-02	-2.2807370E-05	7.8874681E-09	-1.1685696E-12	1.0682160E+04	2.4552076E+01
PC3H5	1000	3.1618630E+00	1.5181000E-02	2.7226590E-06	-5.1771120E-09	5.4352860E-14	3.0955480E+04	1.1979730E+01
SC3H5	1000	3.3858110E+00	1.4045340E-02	3.2041270E-06	-3.8241200E-09	-9.0537420E-13	2.9090660E+04	1.1266490E+01
AC3H4	1400	2.5398310E+00	1.6334370E-02	-1.7649500E-06	-4.6473650E-09	1.7291310E-12	2.2512430E+04	9.9357020E+00
CH3CHCO	1400	1.4838012E+00	3.2220301E-02	-2.7025003E-05	1.2049916E-08	-2.1836593E-12	-1.1527654E+04	1.7155207E+01
CH2CHCO	1393	9.8525657E-01	3.4076698E-02	-3.2065669E-05	1.5174131E-08	-2.8351717E-12	6.7452360E+03	1.8754198E+01
CH2CHCHO	1389	5.8046788E-01	3.1638467E-02	-2.2793272E-05	8.4230158E-09	-1.2732799E-12	-9.4714682E+03	2.2126423E+01
C-C5H6	1000	-3.1967390E+00	4.0813610E-02	6.8165050E-07	-3.1374590E-08	1.5772230E-11	1.5290680E+04	3.8699390E+01
C4H8-1	1000	1.1811380E+00	3.0853380E-02	5.0865247E-06	-2.4654888E-08	1.1110193E-11	-1.7904004E+03	2.1075639E+01
PC3H4	1400	3.0297300E+00	1.4989610E-02	-1.3985000E-06	-3.9696190E-09	1.3882170E-12	2.1484080E+04	8.0045940E+00
C-C5H5	1403	-4.4831334E+00	6.1497877E-02	-5.7772592E-05	2.7330826E-08	-5.0825916E-12	3.1170771E+04	4.1511673E+01
CH3CHCCH2	1390	1.1314205E+00	3.4493916E-02	-2.1441829E-05	6.8419588E-09	-8.9424406E-13	1.7203695E+04	1.8929580E+01
CH3CH2CCH	1000	3.7260430E+00	2.0534930E-02	3.0214390E-06	-8.1318130E-09	1.0952800E-12	2.0488210E+04	8.5388260E+00

表 7.2

化学種	T <sub>bnd</sub> (K)	tdl_1	tdl_2	tdl_3	tdl_4	tdl_5	tdl_6	tdl_7
HCCHCCH	1000	4.1538820E+00	1.7262870E-02	-2.3893740E-07	-1.0187000E-08	4.3405050E-12	6.3380710E+04	6.0365070E+00
H2CCCCH	1380	6.2901052E+00	1.7306121E-02	-1.2582725E-05	5.2980690E-09	-9.7406024E-13	5.6087663E+04	-3.7753171E+00
C6H6	1000	-3.1380120E+00	4.7231030E-02	-2.9622080E-06	-3.2628190E-08	1.7186920E-11	8.8900310E+03	3.6575730E+01
fulvene	1000	-5.6096307E+00	7.3064757E-02	-7.0326923E-05	3.6580449E-08	-8.0201931E-12	2.7468885E+04	4.8339178E+01
C6H5	1392	-3.7787019E+00	5.5713599E-02	-4.2463724E-05	1.6473599E-08	-2.5889617E-12	3.9955405E+04	4.1501898E+01
CHCHCHO	1394	1.2090527E+00	3.1912522E-02	-2.9344376E-05	1.3807748E-08	-2.5832811E-12	1.7971158E+04	1.9398964E+01
HCCCHO	1383	2.9639596E+00	2.1198929E-02	-1.6930686E-05	6.9140718E-09	-1.1512416E-12	1.0177668E+04	9.9216312E+00
HCCCO	1453	6.4093804E+00	1.1571512E-02	-1.0263992E-05	4.5252438E-09	-8.0215033E-13	2.7012656E+04	-5.9267506E+00
C4H10	1500	-2.2566180E+00	5.8817320E-02	-4.5257830E-05	2.0371150E-08	-4.0794580E-12	-1.7602330E+04	3.3295950E+01
PC4H9	1391	-5.6377928E-02	4.7466502E-02	-3.0947858E-05	1.0773070E-08	-1.5944028E-12	6.1217093E+03	2.5897479E+01
SC4H9	1389	1.7468533E-01	4.5819079E-02	-2.8476592E-05	9.3337177E-09	-1.2984554E-12	4.4108877E+03	2.5085164E+01
C4H8-2	1000	1.2594252E+00	2.7808424E-02	8.7013932E-06	-2.4402205E-08	9.8977710E-12	-2.9647742E+03	2.0514290E+01
C4H7	1000	-1.0805140E+00	4.6386860E-02	-3.4646970E-05	1.4013740E-08	-2.3950400E-12	1.3755380E+04	2.9344660E+01
CH2CHCHCH	1000	2.9952400E+00	2.2884560E-02	1.9754710E-06	-1.1482450E-08	3.1978240E-12	4.1422180E+04	1.2894540E+01
CH3CHCCH	1558	3.8737581E+00	2.3529231E-02	-7.9195458E-06	-1.3438265E-09	9.2683335E-13	3.6069715E+04	7.0733725E+00
CH3CCCH2	1000	5.0684500E+00	1.5717470E-02	2.9689750E-06	-4.9905870E-09	-2.9842240E-13	3.5188550E+04	6.7918930E+00
H2CCCCH2	1000	3.8490070E+00	1.7131690E-02	1.6442700E-06	-7.7615900E-09	1.9478600E-12	3.6083720E+04	5.7321210E+00
C6H5CH2	1392	-3.8252357E+00	7.2285469E-02	-5.8139728E-05	2.4021185E-08	-4.0301554E-12	2.3715302E+04	1.4243641E+01
CH3C6H4CH2	1390	-2.3716429E+00	7.6193272E-02	-5.4633529E-05	2.0093922E-08	-3.0294454E-12	1.9159020E+04	3.6187766E+01
H2C4O	1000	4.8109710E+00	1.3139990E-02	9.8650730E-07	-6.1207200E-09	1.6400030E-12	2.5458030E+04	2.1134240E+00
C5H3	1386	6.3057279E+00	2.2777462E-02	-1.5764172E-05	5.4324639E-09	-7.3604556E-13	6.7120696E+04	-2.2053839E+00
C5H2	1000	3.0623220E+00	2.7099980E-02	-1.0091700E-05	-1.2727450E-08	9.1672190E-12	8.1149690E+04	7.0710780E+00
C6H2	1000	5.7510850E+00	2.6367200E-02	-1.1667600E-05	-1.0714500E-08	8.7902970E-12	8.2620130E+04	-4.3355320E+00
I-C5H8	1000	-3.0882087E-01	4.8355898E-02	-2.2284758E-05	0.0000000E+00	0.0000000E+00	7.2982329E+03	2.6828785E+01
I-C5H7	1000	-5.6457147E-01	4.8115796E-02	-2.3131123E-05	0.0000000E+00	0.0000000E+00	2.4904574E+04	2.7439042E+01
C-C5H7	1416	-2.3672616E+00	5.8442319E-02	-4.7862233E-05	2.0271042E-08	-3.4412314E-12	2.4743275E+04	2.3337734E+01
C6H5O	1000	1.1074970E+00	3.9569460E-02	8.4972950E-07	-2.4363110E-08	9.6506600E-12	3.1596720E+03	1.9734960E+01
C6H5OH	1000	1.3914560E+00	3.9319580E-02	1.7770960E-06	-2.2776730E-08	8.3096590E-12	-1.4721810E+04	1.9178130E+01
C-C5H4O	1000	2.3043601E-01	3.2322572E-02	2.8900908E-05	-7.0680613E-08	3.3407174E-11	5.5554724E+03	2.5330946E+01
C-C5H5O	1392	-2.8311284E+00	5.6727729E-02	-4.4475730E-05	1.7492445E-08	-2.7600485E-12	2.0499215E+04	3.6963441E+01
C-C5H4OH	1000	-1.2820812E+00	4.9040075E-02	-1.3687402E-05	-2.9134476E-08	1.9006885E-11	8.8893319E+03	3.0797801E+01
C10H8	1389	-7.2211335E+00	9.8683594E-02	-7.8593798E-05	3.2131128E-08	-5.3509542E-12	1.7252746E+04	5.4945570E+01
C6H5C2H3	1400	-5.7544375E+00	8.7039890E-02	-7.2853368E-05	3.1272008E-08	-5.3937928E-12	1.6267371E+04	5.1277546E+01
C6H5C2H	1389	-3.1352791E+00	7.1515332E-02	-5.6092447E-05	2.2085436E-08	-3.4922599E-12	3.6508671E+04	3.8968955E+01
OC6H4O	1392	-1.5866487E+00	6.3766105E-02	-5.4990367E-05	2.3956030E-08	-4.1745641E-12	-1.7240256E+04	3.0084771E+01
biphenyl	1000	-4.0739527E+00	8.6973310E-02	-4.2353613E-06	-6.4564460E-08	3.4150169E-11	1.9405965E+04	4.4741348E+01
C-2*4C6H6O	1391	-4.4527334E+00	6.8324066E-02	-5.1724263E-05	1.9030754E-08	-2.7227656E-12	-9.8441623E+03	4.5736190E+01
C6H5CH3	1389	-4.0898229E+00	6.8647737E-02	-4.7471657E-05	1.6700121E-08	-2.3957801E-12	4.5949970E+03	4.4152773E+01
OC6H4CH3	1398	-3.8292015E+00	7.7337622E-02	-6.1592908E-05	2.4372864E-08	-3.8077962E-12	2.8937719E+01	4.0664780E+01
HOC6H4CH3	1400	-4.1766357E+00	8.2947916E-02	-6.9261893E-05	2.9704739E-08	-5.1202791E-12	-1.7371528E+04	4.4368111E+01
C6H5CHO	1386	-2.3708229E+00	6.2884313E-02	-4.2646075E-05	1.3941608E-08	-1.7447495E-12	-6.1165619E+03	3.8547877E+01
C6H5C2H5	1397	-5.9360008E+00	8.9461842E-02	-6.8123051E-05	2.6610373E-08	-4.2139810E-12	1.9431750E+03	5.3330954E+01
C10H10	1394	-7.7016580E+00	1.0411584E-01	-7.9756232E-05	3.1434330E-08	-5.0435572E-12	1.4216901E+04	5.9825072E+01
indene	1396	-8.8716568E+00	9.7908041E-02	-8.0628484E-05	3.4005898E-08	-5.7834078E-12	1.8609096E+04	6.3694295E+01
C6H5CO	1392	-1.5672969E+00	5.9981751E-02	-4.2915359E-05	1.4866685E-08	-1.9893845E-12	1.1287383E+04	3.5549001E+01
C6H5CH2OH	1396	-3.7247590E+00	7.4237504E-02	-5.4148179E-05	2.0117893E-08	-3.0219905E-12	-1.3822499E+04	4.5334282E+01
C6H4C2H3	1394	-5.1800432E+00	8.4570972E-02	-7.5733926E-05	3.3855402E-08	-6.0146511E-12	4.5562170E+04	4.8968209E+01
C6H5CCCH2	2047	-9.9011369E-01	6.3693063E-02	-4.1237761E-05	1.2573872E-08	-1.4273174E-12	3.8503951E+04	3.4243944E+01
C6H5CHCH	1394	-2.7225127E+00	7.0970137E-02	-5.2752632E-05	1.9736984E-08	-2.9589080E-12	4.5000724E+04	3.9014353E+01
C6H5CCO	1391	2.4690329E+00	5.6811179E-02	-3.8443292E-05	1.2278165E-08	-1.4484140E-12	2.4941104E+04	1.8946532E+01
C6H4C2H	1383	-1.4049530E+00	6.1664117E-02	-4.6950628E-05	1.8022180E-08	-2.7960479E-12	6.7349009E+04	3.2317779E+01
C10H7	1389	-6.1959613E+00	9.3089123E-02	-7.4679070E-05	3.0610717E-08	-5.0947575E-12	4.5870638E+04	5.1386510E+01
CH3C6H4CH3	1383	-2.9333069E+00	7.3328625E-02	-4.4179456E-05	1.2438944E-08	-1.2479516E-12	1.0547332E+02	4.0586297E+01
CH3indene	1401	-9.1489951E+00	1.0955656E-01	-8.7413381E-05	3.4951916E-08	-5.5364234E-12	1.5821332E+04	6.8586371E+01
CH3C6H4C2H5	1392	-4.4185238E+00	9.3524533E-02	-6.5417110E-05	2.3198974E-08	-3.3085160E-12	-2.6279103E+03	4.8580563E+01
indenyil	1396	-7.5544902E+00	9.1710969E-02	-7.7858859E-05	3.4078125E-08	-6.0058531E-12	2.9992228E+04	5.8608484E+01
phnthrm	1388	-9.0085599E+00	1.3307357E-01	-1.0679509E-04	4.3906351E-08	-7.3443682E-12	2.2543355E+04	6.3291803E+01
CH3C6H4C2H3	1387	-2.7602960E+00	8.3225244E-02	-5.8547258E-05	2.1452121E-08	-3.2664230E-12	1.1465415E+04	4.0061351E+01
CH3indenyil	1390	-6.6267497E+00	9.6403794E-02	-7.0450949E-05	2.5061494E-08	-3.4515296E-12	2.5547787E+04	5.8160980E+01
CH3phnthrm	1388	-7.6272850E+00	1.3738295E-01	-1.0395490E-04	4.0346480E-08	-6.4078458E-12	1.9631605E+04	5.9269363E+01

表 7.3

化学種	T bnd (K)	tdl_1	tdl_2	tdl_3	tdl_4	tdl_5	tdl_6	tdl_7
C10H9	1392	-7.4168228E+00	1.0126573E-01	-7.9057721E-05	3.1756640E-08	-5.1992037E-12	2.7336974E+04	5.7166331E+01
C10H7OH	1428	-8.8535787E+00	1.0764951E-01	-1.0297360E-04	5.0484330E-08	-9.6009309E-12	-9.2318166E+03	7.2629070E+01
C10H7O	1402	-3.9692411E+00	9.5447982E-02	-7.3703163E-05	2.7231262E-08	-3.8541543E-12	1.1636862E+04	4.2147378E+01
C10H7CH2	1389	-5.5151448E+00	1.0624507E-01	-8.5751075E-05	3.5512244E-08	-5.9805571E-12	3.1814645E+04	4.8429168E+01
acenphtln	1390	-7.6719341E+00	1.1393376E-01	-9.4342107E-05	3.9840632E-08	-6.7999006E-12	2.8982883E+04	5.7381495E+01
C10H7CCH	1425	-7.7398423E+00	1.1170656E-01	-1.0495960E-04	5.0399300E-08	-9.4264287E-12	3.8688127E+04	6.5711083E+01
flrnthn	1393	-1.0360284E+01	1.5124278E-01	-1.2561306E-04	5.2503937E-08	-8.7810395E-12	3.2495091E+04	6.9701366E+01
C10H7CH3	1388	-5.8356940E+00	1.0289470E-01	-7.5513004E-05	2.8405572E-08	-4.3786588E-12	1.2711709E+04	5.1608884E+01
bz(a)ndene	1393	-1.0760731E+01	1.3278541E-01	-1.0960509E-04	4.6275870E-08	-7.8868423E-12	2.6747688E+04	7.1815186E+01
C10H7C2H5	1393	-7.5775435E+00	1.2390580E-01	-9.7448794E-05	3.9410322E-08	-6.4689151E-12	1.0024309E+04	6.0851279E+01
C10H7C2H3	1391	-5.9383267E+00	1.1371247E-01	-9.0138907E-05	3.6947500E-08	-6.1846618E-12	2.4116002E+04	5.2389986E+01
C10H7CCH2	1383	-2.4470704E+00	9.6237430E-02	-6.5948470E-05	2.1653234E-08	-2.6975655E-12	4.6580593E+04	4.0435322E+01
C10H6CCH	1425	-6.7851974E+00	1.0684096E-01	-1.0212618E-04	4.9630737E-08	-9.3598975E-12	6.7982224E+04	6.0999378E+01
phnthryl-1	1388	-7.9840314E+00	1.2748146E-01	-1.0288173E-04	4.2385239E-08	-7.0877305E-12	5.0335982E+04	5.9051323E+01
phnthryl-9	1388	-7.9840314E+00	1.2748146E-01	-1.0288173E-04	4.2385239E-08	-7.0877305E-12	5.0335982E+04	5.9051323E+01
phnthroxy-9	1390	-6.8858308E+00	1.3556863E-01	-1.1110749E-04	4.4935427E-08	-7.1864570E-12	1.7507423E+04	5.4878290E+01
fluoryl	1396	-4.4406271E+00	1.0665792E-01	-7.6851931E-05	2.7395022E-08	-3.8596219E-12	3.3344906E+04	4.4181003E+01
fluorene	1395	-5.7221375E+00	1.1272385E-01	-7.9440605E-05	2.7214710E-08	-3.6139268E-12	1.9388893E+04	4.9095629E+01
bz(a)ndnyl	1391	-9.8639338E+00	1.2887450E-01	-1.1077759E-04	4.9057636E-08	-8.7544646E-12	3.6724833E+04	6.8595400E+01
bz(a)phnthrn	1387	-1.0778323E+01	1.6740437E-01	-1.3491708E-04	5.5634359E-08	-9.3275693E-12	3.3487484E+04	7.0872495E+01
phnthrol-1	1387	-7.6415057E+00	1.3920311E-01	-1.1705589E-04	5.0720746E-08	-8.9156708E-12	3.5819215E+03	5.8442713E+01
phnthrol-9	1387	-7.6415057E+00	1.3920311E-01	-1.1705589E-04	5.0720746E-08	-8.9156708E-12	3.5819215E+03	5.8442713E+01
anthracn	1388	-9.0085599E+00	1.3307357E-01	-1.0679509E-04	4.3906351E-08	-7.3443682E-12	2.5371739E+04	6.2602321E+01
phnthroxy-1	1390	-6.8858308E+00	1.3556863E-01	-1.1110749E-04	4.4935427E-08	-7.1864570E-12	1.7507423E+04	5.4878290E+01
pyrene	1391	-1.2566549E+01	1.5937210E-01	-1.3649090E-04	5.9202034E-08	-1.0302793E-11	2.4953663E+04	7.8035772E+01
hc4-p(def)pthn	1415	-1.3677382E+01	1.2616785E-01	-1.0474249E-04	4.4358265E-08	-7.6217491E-12	2.9688930E+04	9.9984963E+01
hc4-p(def)pthyl	1418	-1.1575059E+01	1.1606885E-01	-9.5572931E-05	4.0216147E-08	-6.8816496E-12	4.3479084E+04	9.1339878E+01
bz(ghi)fln	1384	-1.1533500E+01	1.6216738E-01	-1.2922913E-04	5.1529462E-08	-8.2745722E-12	4.7158934E+04	7.0076096E+00
ch3cy24pd	1399	-6.6532003E+00	7.4464048E-02	-5.8286419E-05	2.3160354E-08	-3.6901713E-12	1.1766931E+04	5.3816277E+01
ch3cy24pd1	1408	-5.5020043E+00	7.4723112E-02	-6.5332159E-05	2.8887006E-08	-5.0667586E-12	2.6073734E+04	5.0323986E+01
cyc6h7	1378	-5.9251044E+00	6.5862652E-02	-4.3598840E-05	1.2897316E-08	-1.2642389E-12	2.4327818E+04	5.2188851E+01
ch3dcy24pd	1401	-6.2011004E+00	7.3339909E-02	-6.1451846E-05	2.6024875E-08	-4.3899876E-12	3.4764627E+04	5.2240891E+01
fulvenyl	1400	-3.3752965E+00	5.9230012E-02	-4.8554040E-05	1.9735076E-08	-3.1640068E-12	5.6389781E+04	3.9193224E+01

表 8.1

化学種	tdh_1	tdh_2	tdh_3	tdh_4	tdh_5	tdh_6	tdh_7
OH	2.8827300E+00	1.0139740E-03	-2.2768770E-07	2.1746840E-11	-5.1263050E-16	3.8868880E+03	5.5957120E+00
H2	2.9914230E+00	7.0006440E-04	-5.6338290E-08	-9.2315780E-12	1.5827520E-15	-8.3503400E+02	-1.3551100E+00
H	2.5000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	2.5471630E+04	-4.6011760E-01
H2O	2.6721460E+00	3.0562930E-03	-8.7302600E-07	1.2009960E-10	-6.3916180E-15	-2.9899210E+04	6.8628170E+00
O	2.5420600E+00	-2.7550620E-05	-3.1028030E-09	4.5510670E-12	-4.3680520E-16	2.9230800E+04	4.9203080E+00
O2	3.6975780E+00	6.1351970E-04	-1.2588420E-07	1.7752810E-11	-1.1364350E-15	-1.2339300E+03	3.1891660E+00
HO2	4.5831150E+00	1.7273034E-03	-6.1918314E-07	9.9193919E-11	-5.8822157E-15	3.1336586E+01	3.4619939E-01
H2O2	4.5731670E+00	4.3361360E-03	-1.4746890E-06	2.3489040E-10	-1.4316540E-15	-1.8006960E+04	5.0113700E-01
CH3	2.8440520E+00	6.1379740E-03	-2.2303450E-06	3.7851610E-10	-2.4521590E-14	1.6437810E+04	5.4526970E+00
C2H6	4.8259380E+00	1.3840430E-02	-4.5572590E-06	6.7249670E-10	-3.5981610E-14	-1.2717790E+04	-5.2395070E+00
CH4	1.6834790E+00	1.0237240E-02	-3.8751290E-06	6.7855850E-10	-4.5034230E-14	-1.0080790E+04	9.6233950E+00
CH3O	3.7708000E+00	7.8714970E-03	-2.6563840E-06	3.9444310E-10	-2.1126160E-14	1.2783250E+02	2.9295750E+00
CH2O	2.9956060E+00	6.6813210E-03	-2.6289550E-06	4.7371530E-10	-3.2125170E-14	-1.5320370E+04	6.9125720E+00
CH2(S)	3.0962718E+00	2.8083919E-03	-7.1361453E-07	8.4213630E-11	-3.8464083E-15	5.0573970E+04	4.3139227E+00
CH2	3.4431047E+00	2.3263801E-03	-5.3314800E-07	5.7404397E-11	-2.4269485E-15	4.5937574E+04	3.2348471E+00
HCOH	9.1874927E+00	1.5201115E-03	-6.2760352E-07	1.0972799E-10	-6.8965513E-15	7.8136459E+03	-2.7343421E+01
CH	2.1962230E+00	2.3403810E-03	-7.0582010E-07	9.0075820E-11	-3.8550400E-15	7.0867230E+04	9.1783730E+00
CH3OH	4.0290610E+00	9.3765930E-03	-3.0502540E-06	4.3587930E-10	-2.2247230E-14	-2.6157910E+04	2.3781960E+00
CH2OH	6.0012780E+00	4.9872157E-03	-1.6095352E-06	2.4022714E-10	-1.3558270E-14	-3.5015710E+03	-6.9283684E+00
HCO	3.5572710E+00	3.3455730E-03	-1.3350060E-06	2.4705730E-10	-1.7138510E-14	3.9163240E+03	5.5522990E+00
CO2	4.4536230E+00	3.1401690E-03	-1.2784110E-06	2.3939970E-10	-1.6690330E-14	-4.8966960E+04	-9.5539590E-01
CO	3.0250780E+00	1.4426890E-03	-5.6308280E-07	1.0185810E-10	-6.9109520E-15	-1.4268350E+04	6.1082180E+00
C2H4	3.5284190E+00	1.1485180E-02	-4.4183850E-06	7.8446010E-10	-5.2668480E-14	4.4282890E+03	2.2303890E+00
C2H2	4.4367700E+00	5.3760390E-03	-1.9128170E-06	3.2863790E-10	-2.1567100E-14	2.5667660E+04	-2.8003380E+00
HCCO	6.7580730E+00	2.0004000E-03	-2.0276070E-07	-1.0411320E-10	1.9651650E-14	1.9015130E+04	-9.0712620E+00
C2H3	3.9604771E+00	7.9942601E-03	-2.8560809E-06	4.5835081E-10	-2.7257014E-14	3.3515354E+04	2.2566341E+00
H2CCH	8.8310470E+00	4.3571950E-03	-4.1090670E-07	-2.3687230E-10	4.3765200E-14	3.8474200E+04	-2.1779190E+01
C2H5	5.6011609E+00	1.0697708E-02	-3.6350478E-06	5.6181665E-10	-3.2491471E-14	1.1453985E+04	-7.0225241E+00
AC3H5	9.7576247E+00	1.0061515E-02	-3.4060845E-06	5.2569664E-10	-3.0391731E-14	1.5284573E+04	-2.8623717E+01
CH2CO	6.0388170E+00	5.8048400E-03	-1.9209540E-06	2.7944850E-10	-1.4588680E-14	-8.5834020E+03	-7.6575810E+00
C	2.6020870E+00	-1.7870810E-04	9.0870410E-08	-1.1499330E-11	3.3108440E-16	8.5421540E+04	4.1951770E+00
C3H2	7.6709810E+00	2.7487490E-03	-4.3709430E-07	-6.4555990E-11	1.6638870E-14	6.2597220E+04	-1.2368900E+01
C2H	3.9863670E+00	3.1431230E-03	-1.2672430E-06	2.9243630E-10	-2.7163200E-14	6.6558840E+04	1.1910630E+00
CH2HCO	5.9756700E+00	8.1305910E-03	-2.7436240E-06	4.0703040E-10	-2.1760170E-14	4.9032180E+02	-5.0452510E+00
C3H6	6.7322570E+00	1.4908340E-02	-4.9498990E-06	7.2120220E-10	-3.7662040E-14	-9.2357030E+02	-1.3313350E+01
CH2CHCCH	1.0697770E+01	6.9820140E-03	-6.5677470E-07	-3.8845170E-10	7.2009460E-14	3.0348030E+04	-3.1284300E+01
CH2CHCHCH2	1.2544370E+01	9.5965250E-03	-9.1870120E-07	-5.4296400E-10	1.0053640E-13	8.5973300E+03	-4.2174510E+01
CH2CHCCH2	1.1997760E+01	7.9905800E-03	-8.0981730E-07	-4.5687330E-10	8.6369100E-14	3.2284930E+04	-3.5284950E+01
HCCOH	7.3283240E+00	3.3364160E-03	-3.0247050E-07	-1.7811060E-10	3.2451680E-14	7.5982580E+03	-1.4012140E+01
CH3HCO	5.8686500E+00	1.0794240E-02	-3.6455300E-06	5.4129120E-10	-2.8968440E-14	-2.2645690E+04	-6.0129460E+00
CH3CO	5.6122790E+00	8.4498860E-03	-2.8541470E-06	4.2383760E-10	-2.2684040E-14	-5.1878630E+03	-3.2749490E+00
CHOCHO	9.7543856E+00	4.9764595E-03	-1.7441048E-06	2.7558699E-10	-1.6196989E-14	-2.9583290E+04	-2.4803837E+01
C2	4.1359790E+00	6.5316180E-05	1.8370990E-07	-5.2950850E-11	4.7121370E-15	9.9672720E+04	7.4729230E-01
C4H2	9.0314070E+00	6.0472530E-03	-1.9487890E-06	2.7548630E-10	-1.3856080E-14	5.2947360E+04	-2.3850680E+01
C2O	4.8498090E+00	2.9475850E-03	-1.0907290E-06	1.7925620E-10	-1.1157580E-14	3.2820550E+04	-6.4532260E-01
C3H8	7.5252170E+00	1.8890340E-02	-6.2839240E-06	9.1793730E-10	-4.8124100E-14	-1.6464550E+04	-1.7843900E+01
IC3H7	9.7356394E+00	1.4330363E-02	-4.8810604E-06	7.5630481E-10	-4.3838016E-14	5.6700091E+03	-2.7841493E+01
NC3H7	9.4379935E+00	1.4716068E-02	-5.0333842E-06	7.8131750E-10	-4.3520926E-14	7.2739651E+03	-2.6013674E+01
PC3H5	9.2097640E+00	7.8714130E-03	-7.7245230E-07	-4.4973570E-10	8.3772720E-14	2.8539670E+04	-2.2323700E+01
SC3H5	9.1010180E+00	7.9641680E-03	-7.8849450E-07	-4.5620360E-10	8.5292120E-14	2.6706800E+04	-2.1505590E+01
AC3H4	9.7762560E+00	5.3021380E-03	-3.7011180E-07	-3.0263860E-10	5.0895810E-14	1.9549720E+04	-3.0770610E+01
CH3CHCO	1.0021912E+01	9.5696630E-03	-3.2622164E-06	5.0523171E-10	-2.9259326E-14	-1.4248274E+04	-2.7782997E+01
CH2CHCO	1.0994892E+01	6.5800007E-03	-2.3183264E-06	3.6717842E-10	-2.1602096E-14	3.6637865E+03	-3.3573626E+01
CH2CHCHO	9.9595006E+00	9.8656304E-03	-3.4204805E-06	5.3597837E-10	-3.1300197E-14	-1.2745620E+04	-2.8299586E+01
C-C5H6	9.6898150E+00	1.8382620E-02	-6.2648840E-06	9.3933770E-10	-5.0877080E-14	1.1021240E+04	-3.1229080E+01
C4H8-1	2.0535841E+00	3.4350607E-02	-1.5883197E-05	3.3089662E-09	-2.5361045E-13	-2.1397231E+03	1.5556360E+01
PC3H4	9.7681020E+00	5.2191510E-03	-3.7531400E-07	-2.9921910E-10	5.1078780E-14	1.8602770E+04	-3.0206780E+01
C-C5H5	1.2904448E+01	1.2698902E-02	-4.3572684E-06	6.7803468E-10	-3.9404704E-14	2.5966581E+04	-4.8941433E+01
CH3CHCCH2	1.0503968E+01	1.4124263E-02	-4.8063722E-06	7.4363499E-10	-4.3040037E-14	1.3769708E+04	-3.1992095E+01
CH3CH2CCH	1.2006950E+01	9.5760690E-03	-8.9950180E-07	-5.3698080E-10	9.9341740E-14	1.7294200E+04	-3.8026920E+01

表 8.2

化学種	tdh_1	tdh_2	tdh_3	tdh_4	tdh_5	tdh_6	tdh_7
HCCHCCH	1.0752740E+01	5.3811530E-03	-5.5496380E-07	-3.0522660E-10	5.7617400E-14	6.1214190E+04	-2.9730250E+01
H2CCCCCH	1.0622434E+01	6.9608380E-03	-2.3710729E-06	3.6729202E-10	-2.1281958E-14	5.4531124E+04	-2.7088792E+01
C6H6	1.2910740E+01	1.7232970E-02	-5.0242110E-06	5.8934970E-10	-1.9475210E-14	3.6645120E+03	-5.0026990E+01
fulvene	5.5099388E+00	3.3879926E-02	-1.7737071E-05	4.4769284E-09	-4.4127372E-13	2.4921871E+04	-6.7757489E+00
C6H5	1.3047587E+01	1.5419956E-02	-5.3632005E-06	8.4223345E-10	-4.9261380E-14	3.4232284E+04	-4.8480631E+01
CHCHCHO	1.0266640E+01	7.0961293E-03	-2.4727273E-06	3.8873973E-10	-2.2752341E-14	1.5165380E+04	-2.7992744E+01
HCCCHO	9.5348909E+00	5.2735638E-03	-1.8679029E-06	2.9688494E-10	-1.7509389E-14	7.9434135E+03	-2.5182045E+01
HCCCO	4.7290130E+00	8.5526374E-03	-3.1126163E-06	4.4505302E-10	-2.0327202E-14	2.8862372E+04	6.4469792E+00
C4H10	1.9987850E+01	1.0372810E-02	-9.6108180E-07	-4.6230180E-10	8.2028280E-14	-2.6255710E+04	-8.8379070E+01
PC4H9	1.2585239E+01	1.9211169E-02	-6.5732641E-06	1.0206187E-09	-5.9213324E-14	1.5339515E+03	-4.2565074E+01
SC4H9	1.2339864E+01	1.9456655E-02	-6.6658740E-06	1.0358785E-09	-6.0133706E-14	-9.7505564E+01	-4.1108816E+01
C4H8-2	8.2797676E-01	3.5864539E-02	-1.6634498E-05	3.4732759E-09	-2.6657398E-13	-3.0521033E+03	2.1355710E+01
C4H7	5.5214200E+00	2.6836840E-02	-1.2864300E-05	3.0886400E-09	-3.0308560E-13	1.1980440E+04	-4.4824470E+00
CH2CHCHCH	1.2865970E+01	7.9433690E-03	-8.6264660E-07	-4.6556350E-10	8.9511310E-14	3.7835520E+04	-4.1825020E+01
CH3CHCCH	1.1570730E+01	1.1052165E-02	-3.7467999E-06	5.7898874E-10	-3.3505617E-14	3.2891620E+04	-3.6142724E+01
CH3CCCH2	1.1565060E+01	8.0302970E-03	-7.6494500E-07	-4.4765340E-10	8.3132600E-14	3.2568130E+04	-3.0140660E+01
H2CCCCCH2	1.0620830E+01	7.1993700E-03	-6.8062340E-07	-4.0211850E-10	7.3784980E-14	3.3587980E+04	-3.1935830E+01
C6H5CH2	1.7775266E+01	1.8836676E-02	-6.5896898E-06	1.0387342E-09	-6.0909628E-14	1.6506129E+04	-7.3716833E+01
CH3C6H4CH2	2.0287702E+01	2.3884841E-02	-8.2302030E-07	1.3084785E-09	-7.6583582E-14	1.1204783E+04	-8.5767716E+01
H2C4O	1.0268880E+01	4.8961640E-03	-4.8850810E-07	-2.7085660E-10	5.1070130E-14	2.3469030E+04	-2.8159850E+01
C5H3	1.3109814E+01	7.1695246E-03	-2.3978973E-06	3.6716147E-10	-2.1111548E-14	6.4760754E+04	-3.8797138E+01
C5H2	1.1329170E+01	7.420570E-03	-2.6281890E-06	4.0825410E-10	-2.3013330E-14	7.8787060E+04	-3.6171170E+01
C6H2	1.2756520E+01	8.0343810E-03	-2.6182150E-06	3.7250600E-10	-1.8788510E-14	8.0754690E+04	-4.0412630E+01
I-C5H8	1.9403114E+01	9.6325407E-03	-1.5683147E-06	0.0000000E+00	0.0000000E+00	2.0635571E+02	-8.0798713E+01
I-C5H7	1.8941353E+01	8.5102411E-03	-1.4014643E-06	0.0000000E+00	0.0000000E+00	1.8109184E+04	-7.8403470E+01
C-C5H7	1.3684512E+01	1.6447612E-02	-5.5008593E-06	8.4111791E-10	-4.8280978E-14	1.9689899E+04	-6.1153240E+01
C6H5O	1.8226390E+01	1.0039850E-02	-9.9156680E-07	-5.6728040E-10	1.0683720E-13	-2.6208460E+03	-7.3613910E+01
C6H5OH	1.8216330E+01	1.1424270E-02	-1.0966840E-06	-6.4274420E-10	1.1988930E-13	-2.0536640E+04	-7.3042340E+01
C-C5H4O	1.2606535E+01	1.6747067E-02	-6.1097587E-06	9.9674576E-10	-6.0111834E-14	1.4114657E+03	-4.2604911E+00
C-C5H5O	1.4832289E+01	1.4048338E-02	-4.9230205E-06	7.7704122E-10	-4.5610394E-14	1.4552367E+04	-5.7322819E+01
C-C5H4OH	1.3367777E+01	1.5205911E-02	-5.4592662E-06	8.8135325E-10	-5.2774563E-14	4.7218184E+03	-4.5920099E+01
C10H8	2.2679681E+01	2.5640616E-02	-9.0188432E-06	1.4267903E-09	-8.3874675E-14	7.1586914E+03	-1.0456034E+02
C6H5C2H3	1.9467553E+01	2.1991624E-02	-7.5667225E-06	1.1796716E-09	-6.8648396E-14	8.1610660E+03	-8.1939437E+01
C6H5C2H	1.9182213E+01	1.7644985E-02	-6.1821059E-06	9.7569744E-10	-5.7269813E-14	2.8984717E+04	-8.0190300E+01
OC6H4O	1.7611075E+00	1.4194322E-02	-5.0713000E-06	8.1690362E-10	-4.8549688E-14	-2.3411369E+04	-7.1306144E+01
biphenyl	2.4289017E+01	3.4006648E-02	-1.1722408E-05	1.7729298E-09	-9.6812532E-14	1.0287000E+04	-1.0802374E+02
C-2*4C6H6O	1.7530006E+01	1.6286489E-02	-5.5835944E-06	8.6960363E-10	-5.0605637E-14	-1.7258852E+04	-7.1831975E+01
C6H5C2H3	1.6309154E+01	2.2533161E-02	-7.8428183E-06	1.2320063E-09	-7.2067504E-14	-2.6624194E+03	-6.5981463E+01
OC6H4CH3	2.0033348E+01	1.8314247E-02	-6.1726598E-06	9.5035355E-10	-5.4863404E-14	-7.7686417E+03	-8.6060610E+01
HOC6H4CH3	1.9731172E+01	2.1224507E-02	-7.2760266E-06	1.1315899E-09	-6.5739529E-14	-2.5045178E+04	-8.1878339E+01
C6H5CHO	1.7402489E+01	1.8950832E-02	-6.5869431E-06	1.0341305E-09	-6.0479316E-14	-1.3141852E+04	-6.8337132E+01
C6H5C2H5	2.0281672E+01	2.5946408E-02	-8.9266706E-06	1.3916116E-09	-8.0978628E-14	-6.8869584E+03	-8.6589258E+01
C10H10	2.2988033E+01	2.9867308E-02	-1.0340816E-05	1.6188493E-09	-9.4475553E-14	3.8342293E+03	-1.0405908E+02
indene	2.0035929E+01	2.4752662E-02	-8.5809473E-06	1.3445692E-09	-7.8520965E-14	9.1627509E+03	-8.9512633E+01
C6H5CO	1.7511626E+01	1.6265051E-02	-5.6505189E-06	8.8692268E-10	-5.1865799E-14	4.6764155E+03	-6.7053197E+01
C6H5CH2OH	1.8157516E+01	2.2662015E-02	-7.7946511E-06	1.2149107E-09	-7.0688343E-14	-2.1331974E+04	-7.1951279E+01
C6H4C2H3	1.7454086E+01	2.2204069E-02	-9.3335048E-06	1.7352870E-09	-1.1368561E-13	3.8760490E+04	-6.9045417E+01
C6H5CCCH2	1.7113952E+01	2.2537792E-02	-7.9949642E-06	1.2789372E-09	-7.5948485E-14	3.2489210E+04	-6.2824327E+01
C6H5CHCH	1.8766577E+01	2.0061926E-02	-6.9088370E-06	1.0779979E-09	-6.2775918E-14	3.7679115E+04	-7.6027623E+01
C6H5CCO	2.0571761E+01	1.6562619E-02	-5.7363153E-06	8.9855685E-10	-5.2471963E-14	1.8552314E+04	-7.8830722E+01
C6H4C2H	1.7886958E+01	1.6057552E-02	-5.6058786E-06	8.8293624E-10	-5.1759689E-14	6.0726663E+04	-7.1064853E+01
C10H7	2.2223550E+01	2.3466306E-02	-8.2655934E-06	1.3088620E-09	-7.6993361E-14	3.6311587E+04	-1.0012183E+02
CH3C6H4CH3	1.9204648E+01	2.7102991E-02	-9.3801352E-06	1.4681488E-09	-8.5670431E-14	-8.1302651E+03	-8.0255232E+01
CH3indene	2.3904065E+01	2.7037558E-02	-9.0327056E-06	1.3822039E-09	-7.9447269E-14	5.0940471E+03	-1.0667975E+02
CH3C6H4C2H5	2.2927190E+01	3.0408970E-02	-1.0359379E-05	1.6046173E-09	-9.2965900E-14	-1.2137724E+04	-9.8449383E+01
indenylyl	1.8849699E+01	2.3075039E-02	-7.9701250E-06	1.2457342E-09	-7.2620333E-14	2.1514831E+04	-8.0737713E+01
phnthrm	3.1565962E+01	3.3728958E-02	-1.1890551E-05	1.8839237E-09	-1.1086338E-13	8.8682588E+03	-1.5307388E+02
CH3C6H4C2H3	2.1366496E+01	2.7935416E-02	-9.6917888E-06	1.5191770E-09	-8.8732604E-14	2.9109219E+03	-9.0011126E+01
CH3indenylyl	2.3850689E+01	2.5273164E-02	-8.5828640E-06	1.3281889E-09	-7.6947800E-14	1.5162297E+04	-1.0520526E+02
CH3phnthrm	3.4021435E+01	3.8759962E-02	-1.3602694E-05	2.1487093E-09	-1.2617993E-13	5.2599570E+03	-1.6401117E+02

表 8.3

化学種	tdh_1	tdh_2	tdh_3	tdh_4	tdh_5	tdh_6	tdh_7
C10H9	2.2788496E+01	2.7827168E-02	-9.7121442E-06	1.5285513E-09	-8.9535153E-14	1.7126051E+04	-1.0405127E+02
C10H7OH	1.7054560E+01	2.7139978E-02	-8.3755699E-06	1.2080609E-09	-6.6426506E-14	-1.6060664E+04	-5.9133888E+01
C10H7O	2.7320272E+01	2.0628715E-02	-7.0711984E-06	1.1013696E-09	-6.4102464E-14	1.2267753E+03	-1.2481315E+02
C10H7CH2	2.6659611E+01	2.6990385E-02	-9.4982790E-06	1.5031353E-09	-8.8383194E-14	2.1018061E+04	-1.2297516E+02
acenphtln	2.7014784E+01	2.7182810E-02	-9.5811234E-06	1.5178707E-09	-8.9317005E-14	1.7496254E+04	-1.2690376E+02
C10H7CCH	2.0361132E+01	2.7324233E-02	-8.5369452E-06	1.2434081E-09	-6.8895058E-14	3.0990536E+04	-7.8243589E+01
flmthn	3.6145949E+01	3.4353528E-02	-1.1981521E-05	1.8854960E-09	-1.1045469E-13	1.7290264E+04	-1.7694259E+02
C10H7CH3	2.5169545E+01	3.0662367E-02	-1.0732526E-05	1.6923341E-09	-9.9257101E-14	1.8917119E+03	-1.1503600E+02
bz(a)ndene	2.8895502E+01	3.2868507E-02	-1.1462590E-05	1.8032517E-09	-1.0559833E-13	1.3721447E+04	-1.3855508E+02
C10H7C2H5	2.8985338E+01	3.3968000E-02	-1.1726503E-05	1.8324564E-09	-1.0681434E-13	-2.1856474E+03	-1.3385252E+02
C10H7C2H3	2.7797639E+01	3.0939408E-02	-1.0819297E-05	1.7049472E-09	-9.9953364E-14	1.2754145E+04	-1.2746055E+02
C10H7CCH2	2.8182168E+01	2.7791440E-02	-9.5906253E-06	1.4991945E-09	-8.7435932E-14	3.5776363E+04	-1.2492875E+02
C10H6CCH	2.0009863E+01	2.5293929E-02	-7.8822203E-06	1.1457416E-09	-6.3384911E-14	6.0748408E+04	-7.5884297E+01
phnthryl-1	3.1111223E+01	3.1552395E-02	-1.1136296E-05	1.7658155E-09	-1.0397069E-13	3.7195357E+04	-1.4932746E+02
phnthryl-9	3.1111223E+01	3.1552395E-02	-1.1136296E-05	1.7658155E-09	-1.0397069E-13	3.7195357E+04	-1.4932746E+02
phnthroxy-9	3.6341092E+01	2.8504430E-02	-9.8499655E-06	1.5421201E-09	-9.0066405E-14	3.3374447E+03	-1.7473485E+02
fluoryl	2.8504484E+01	3.0476558E-02	-1.0597562E-05	1.6639907E-09	-9.7315717E-14	2.1943985E+04	-1.3283425E+02
fluorene	2.9698590E+01	3.2142794E-02	-1.1203514E-05	1.7619749E-09	-1.0316338E-13	7.0235655E+03	-1.4165003E+02
bz(a)ndnryl	2.7766117E+01	3.1129338E-02	-1.0829218E-05	1.7008859E-09	-9.9495599E-14	2.4585241E+04	-1.3010806E+02
bz(a)phnthrn	4.0456900E+01	4.1810977E-02	-1.4759577E-05	2.3405882E-09	-1.3782282E-13	1.6233898E+04	-2.0229062E+02
phnthrol-1	3.4064226E+01	3.3724056E-02	-1.1887292E-05	1.8832385E-09	-1.1081594E-13	-1.0198350E+04	-1.6286388E+02
phnthrol-9	3.4064226E+01	3.3724056E-02	-1.1887292E-05	1.8832385E-09	-1.1081594E-13	-1.0198350E+04	-1.6286388E+02
anthracn	3.1565962E+01	3.3728958E-02	-1.1890551E-05	1.8839237E-09	-1.1086338E-13	1.1696643E+04	-1.5376336E+02
phnthroxy-1	3.6341092E+01	2.8504430E-02	-9.8499655E-06	1.5421201E-09	-9.0066405E-14	3.3374447E+03	-1.7473485E+02
pyrene	3.6082372E+01	3.5109519E-02	-1.2395891E-05	1.9660343E-09	-1.1578147E-13	9.1286954E+03	-1.7946536E+02
hc4-p(def)pthn	1.3961937E+01	5.9878449E-02	-2.3197185E-05	4.7666306E-09	-3.3618657E-13	2.1357748E+04	-4.4133751E+01
hc4-p(def)pthyl	1.3237562E+01	4.7613717E-02	-2.2361243E-05	4.6368128E-09	-3.2903585E-13	3.5985128E+04	-3.8068636E+01
bz(ghi)fln	4.0505409E+01	3.7051749E-02	-1.3207088E-05	2.1079890E-09	-1.2468709E-13	2.9494075E+04	-2.0806842E+02
ch3cy24pd	1.5435285E+01	1.9980171E-02	-6.8027042E-06	1.0534963E-09	-6.1033673E-14	4.4745658E+03	-6.3639364E+01
ch3cy24pd1	1.6152309E+01	1.7042382E-02	-5.8315790E-06	9.0582823E-10	-5.2578987E-14	1.9341225E+04	-6.3324515E+01
cyc6h7	1.6217974E+01	1.7635476E-02	-6.1014037E-06	9.5594648E-10	-5.5858072E-14	1.6461125E+04	-6.7688285E+01
ch3dcy24pd	1.5561816E+01	1.7331186E-02	-5.8909469E-06	9.1142742E-10	-5.2772741E-14	2.7819030E+04	-6.2647123E+01
fulvenyl	1.4973386E+01	1.3127955E-02	-4.4393157E-06	6.8504817E-10	-3.9611517E-14	5.0466271E+04	-5.7994601E+01

### 3.4 正ヘプタンの素反応モデル 1

表 9 に化学種、表 10 に素反応とそれに関するパラメーター、表 11, 12 に平衡定数、定積比熱、エンタルピーの計算式中使用するパラメーターを掲載した。概要の項でも述べたように、一応は空気中の燃焼を計算できるが、窒素原子 N に関する反応は扱っていない。

表 9

番号	化学種	分子量	番号	化学種	分子量	番号	化学種	分子量
1	nc7h16	100.20557	11	h	1.00797	21	c2h5	29.06215
2	o2	31.9988	12	o	15.9994	22	c3h4	40.06533
3	n2	28.0134	13	ch3o	31.03446	23	c3h5	41.0733
4	co2	44.00995	14	ch2o	30.02649	24	c3h6	42.08127
5	h2o	18.01534	15	hco	29.01852	25	c3h7	43.08924
6	co	28.01055	16	ch2	14.02709	26	c7h15-2	99.1976
7	h2	2.01594	17	ch3	15.03506	27	c7h15o2	131.1964
8	oh	17.00737	18	ch4	16.04303	28	c7ket12	146.18783
9	h2o2	34.01474	19	c2h3	27.04621	29	c5h11co	99.15397
10	ho2	33.00677	20	c2h4	28.05418			

表 10

番号	反応式	cf		ef	番号	反応式	cf		ef
1	nc7h16+h=c7h15-2+h2	4.380E+07	2	4760.000	27	o+oh=o2+h	4.000E+14	-0.5	0.000
2	nc7h16+oh=c7h15-2+h2o	9.700E+09	1.3	1690.000	28	h+ho2=oh+oh	1.700E+14	0	875.000
3	nc7h16+ho2=c7h15-2+h2o2	1.650E+13	0	16950.000	29	oh+oh=o+h2o	6.000E+08	1.3	0.000
4	nc7h16+o2=c7h15-2+ho2	2.000E+15	0	47380.000	30	h+o2+m1=ho2+m1	3.600E+17	-0.72	0.000
5	c7h15-2+o2=c7h15o2	1.560E+12	0	0.000	31	h2o2+m1=oh+oh+m1	1.000E+16	0	45500.000
6	c7h15o2+o2=c7ket12+oh	4.500E+14	0	18232.712	32	h2+oh=h2o+h	1.170E+09	1.3	3626.000
7	c7ket12=c5h11co+ch2o+oh	9.530E+14	0	41100.000	33	ho2+h2o=h2o2+o2	3.000E+12	0	0.000
8	c5h11co=c2h4+c3h7+co	9.840E+15	0	40200.000	34	ch2o+oh=hco+h2o	5.563E+10	1.095	-76.517
9	c7h15-2=c2h5+c2h4+c3h6	7.045E+14	0	34600.000	35	ch2o+ho2=hco+h2o2	3.000E+12	0	8000.000
10	c3h7=c2h4+ch3	9.600E+13	0	30950.000	36	hco+o2=ho2+co	3.300E+13	-0.4	0.000
11	c3h7=c3h6+h	1.250E+14	0	36900.000	37	hco+m=h+co+m	1.591E+18	0.95	56712.329
12	c3h6+ch3=c3h5+ch4	9.000E+12	0	8480.000	38	ch3+ch3o=ch4+ch2o	4.300E+14	0	0.000
13	c3h5+o2=c3h4+ho2	6.000E+11	0	10000.000	39	c2h4+oh=c2h2o+ch3	6.000E+13	0	960.000
14	c3h4+oh=c2h3+ch2o	1.000E+12	0	0.000	40	c2h4+oh=c2h3+h2o	8.020E+13	0	5955.000
15	c3h4+oh=c2h4+hco	1.000E+12	0	0.000	41	c2h3+o2=c2h2o+hco	4.000E+12	0	-250.000
16	ch3+ho2=ch3o+oh	5.000E+13	0	0.000	42	c2h3+hco=c2h4+co	6.034E+13	0	0.000
17	ch3+oh=ch2+h2o	7.500E+06	2	5000.000	43	c2h5+o2=c2h4+ho2	2.000E+10	0	-2200.000
18	ch2+oh=ch2o+h	2.500E+13	0	0.000	44	ch4+o2=ch3+ho2	7.900E+13	0	56000.000
19	ch2+o2=hco+oh	4.300E+10	0	-500.000	45	oh+ho2=h2o+o2	7.500E+12	0	0.000
20	ch2+o2=co2+h2	6.900E+11	0	500.000	46	ch3+o2=ch2o+oh	3.800E+11	0	9000.000
21	ch2+o2=co+h2o	2.000E+10	0	-1000.000	47	ch4+h=ch3+h2	6.600E+08	1.6	10840.000
22	ch2+o2=ch2o+o	5.000E+13	0	9000.000	48	ch4+oh=ch3+h2o	1.600E+06	2.1	2460.000
23	ch2+o2=co2+h+h	1.600E+12	0	1000.000	49	ch4+o=c3h+oh	1.020E+09	1.5	8604.000
24	ch2+o2=co+oh+h	8.600E+10	0	-500.000	50	ch4+ho2=ch3+h2o2	9.000E+11	0	18700.000
25	ch3o+co=ch3+co2	1.570E+14	0	11800.000	51	ch4+ch2=ch3+ch3	4.000E+12	0	-570.000
26	co+oh=co2+h	8.987E+07	1.38	5232.877	52	c3h6=c2h3+ch3	3.150E+15	0	85500.000

表 10 の補足

番号  $i$  の化学種を  $Y_i$  と書く。例えば、 $Y_1 = \text{n-C}_7\text{H}_{16}$ 、 $Y_2 = \text{O}_2$ 、 $Y_4 = \text{CO}_2$ 、 $Y_5 = \text{H}_2\text{O}$ 。

$$m = \sum_{i=1}^{29} Y_i$$

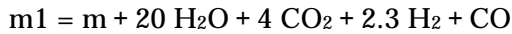


表 11

化学種	T bnd (K)	tdl 1	tdl 2	tdl 3	tdl 4	tdl 5	tdl 6	tdl 7
nc7h16	1391	-1.26836187E+00	8.54355820E-02	-5.25346786E-05	1.62945721E-08	-2.02394925E-12	-2.56586565E+04	3.53732912E+01
o2	1000	3.21293600E+00	1.12748600E-03	-5.75615000E-07	1.31387700E-09	-8.76855400E-13	-1.00524900E+03	6.03473800E+00
n2	1000	3.29867700E+00	1.40824000E-03	-3.96322200E-06	5.64151500E-09	-2.44485500E-12	-1.02090000E+03	3.95037200E+00
co2	1000	2.27572500E+00	9.92207200E-03	-1.04091100E-05	6.86668700E-09	-2.11728000E-12	-4.83731400E+04	1.01884900E+01
h2o	1000	3.38684200E+00	3.47498200E-03	-6.35469600E-06	6.96858100E-09	-2.50658800E-12	-3.02081100E+04	2.59023300E+00
co	1000	3.26245200E+00	1.51194100E-03	-3.88175500E-06	5.58194400E-09	-2.47495100E-12	-1.43105400E+04	4.84889700E+00
h2	1000	3.29812400E+00	8.24944200E-04	-8.14301500E-07	-9.47543400E-11	4.13487200E-13	-1.01252100E+03	-3.29409400E+00
oh	1000	3.63726600E+00	1.85091000E-04	-1.67616500E-06	2.38720300E-09	-8.43144200E-13	3.60678200E+03	1.35886000E+00
h2o2	1000	3.38875400E+00	6.56922600E-03	-1.48501300E-07	-4.62580600E-09	2.47151500E-12	-1.76631500E+04	6.78536300E+00
ho2	1000	2.97996300E+00	4.99669700E-03	-3.79099700E-06	2.35419200E-09	-8.08902400E-13	1.76227400E+02	9.22272400E+00
h	1000	2.50000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	2.54716300E+04	-4.60117600E-01
o	1000	2.94642900E+00	-1.63816600E-03	2.42103200E-06	-1.60284300E-09	3.89069600E-13	2.91476400E+04	2.96399500E+00
ch3o	1000	2.10620400E+00	7.21659500E-03	5.33847200E-06	-7.37763600E-09	2.07561100E-12	9.78601100E+02	1.31521800E+01
ch2o	1000	1.65273100E+00	1.26314400E-02	-1.88816800E-05	2.05003100E-08	-8.41323700E-12	-1.48654000E+04	1.37848200E+01
hco	1000	2.89833000E+00	6.19914700E-03	-9.62308400E-06	1.08982500E-08	-4.57488500E-12	4.15992200E+03	8.98361400E+00
ch2	1000	3.76223700E+00	1.15981900E-03	2.48958500E-07	8.80083600E-10	-7.33243500E-13	4.53679100E+04	1.71257800E+00
ch3	1000	2.43044300E+00	1.11241000E-02	-1.68022000E-05	1.62182900E-08	-5.86495300E-12	1.64237800E+04	6.78979400E+00
ch4	1000	7.78741500E-01	1.74766800E-02	-2.78340900E-05	3.04970800E-08	-1.22393100E-11	-9.82522900E+03	1.37221900E+01
c2h3	1000	2.45927600E+00	7.37147600E-03	2.10987300E-06	-1.32164200E-09	-1.18478400E-12	3.33522500E+04	1.15562000E+01
c2h4	1000	-8.61488000E-01	2.79616300E-02	-3.38867700E-05	2.78515200E-08	-9.73787900E-12	5.57304600E+03	2.42114900E+01
c2h5	1000	2.69070200E+00	8.71913300E-03	4.41983900E-06	9.33870300E-10	-3.92777300E-12	1.28704000E+04	1.21382000E+01
c3h4	1000	2.61307487E+00	1.21223371E-02	1.85405400E-05	-3.45258475E-08	1.53353389E-11	2.15415642E+04	1.02503319E+01
c3h5	1000	3.78794693E+00	9.48414335E-03	2.42343368E-05	-3.65604010E-08	1.48592356E-11	1.86261218E+04	7.82822499E+00
c3h6	1388	3.94615444E-01	2.89107662E-02	-1.54886808E-05	3.88814209E-09	-3.37890352E-13	1.06688164E+03	2.19003736E+01
c3h7	1000	1.05155180E-01	2.59919800E-02	2.38005400E-06	-1.96095690E-08	9.37324700E-12	1.06318630E-01	2.11225590E-01
c7h15-2	1382	-3.79155767E-02	7.56726570E-02	-4.07473634E-05	9.32678943E-09	-4.92360745E-13	-2.35605303E+03	3.37321506E+01
c7h15o2	1000	2.37499334E+00	8.34651906E-02	-5.13897320E-05	1.64217662E-08	-2.19505216E-12	-1.99237961E+04	2.53067342E+01
c7ket12	1000	5.82433697E-01	1.01207869E-01	-7.65855996E-05	3.00738606E-08	-4.82902792E-12	-4.68054419E+04	3.33331449E+01
c5h11co	1000	2.14479069E+00	6.17863563E-02	-3.74134690E-05	1.13283795E-08	-1.36917698E-12	-1.43451172E+04	2.23128045E+01

表 12

化学種	tdh 1	tdh 2	tdh 3	tdh 4	tdh 5	tdh 6	tdh 7
nc7h16	2.22148969E+01	3.47675750E-02	-1.18407129E-05	1.83298478E-09	-1.06130266E-13	-3.42760081E+04	-9.23040196E+01
o2	3.69757800E+00	6.13519700E-04	-1.25884200E-07	1.77528100E-11	-1.13643500E-15	-1.23393000E+03	3.18916600E+00
n2	2.92664000E+00	1.48797700E-03	-5.68476100E-07	1.00970400E-10	-6.75335100E-15	-9.22797700E+02	5.98052800E+00
co2	4.45362300E+00	3.14016900E-03	-1.27841100E-06	2.39399700E-10	-1.66903300E-14	-4.89669600E+04	-9.55395900E-01
h2o	2.67214600E+00	3.05629300E-03	-8.73026000E-07	1.20099600E-10	-6.39161800E-15	-2.98992100E+04	6.86281700E+00
co	3.02507800E+00	1.44268900E-03	-5.63082800E-07	1.01858100E-10	-6.91095200E-15	-1.42683500E+04	6.10821800E+00
h2	2.99142300E+00	7.00064400E-04	-5.63382900E-08	-9.23157800E-12	1.58275200E-15	-8.35034000E+02	-1.35511000E+00
oh	2.88273000E+00	1.01397400E-03	-2.27687700E-07	2.17468400E-11	-5.12630500E-16	3.88688800E+03	5.59571200E+00
h2o2	4.57316700E+00	4.33613600E-03	-1.47468900E-06	2.34890400E-10	-1.43165400E-14	-1.80069600E+04	5.01137000E-01
ho2	4.07219100E+00	2.13129600E-03	-5.30814500E-07	6.11226900E-11	-2.84116500E-15	-1.57972700E+02	3.47602900E+00
h	2.50000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	2.54716300E+04	-4.60117600E-01
o	2.54206000E+00	-2.75506200E-05	-3.10280300E-09	4.55106700E-12	-4.36805200E-16	2.92308000E+04	4.92030800E+00
ch3o	3.77080000E+00	7.87149700E-03	-2.65638400E-06	3.94443100E-10	-2.11261600E-14	1.27832500E+02	2.92957500E+00
ch2o	2.99560600E+00	6.68132100E-03	-2.62895500E-06	4.73715300E-10	-3.21251700E-14	-1.53203700E+04	6.91257200E+00
hco	3.55727100E+00	3.34557300E-03	-1.33500600E-06	2.47057300E-10	-1.71385100E-14	3.91632400E+03	5.55229900E+00
ch2	3.63640800E+00	1.93305700E-03	-1.68701600E-07	-1.00989900E-10	1.80825600E-14	4.53413400E+04	2.15656100E+00
ch3	2.84405200E+00	6.13797400E-03	-2.23034500E-06	3.78516100E-10	-2.45215900E-14	1.64378100E+04	5.45269700E+00
ch4	1.68347900E+00	1.02372400E-02	-3.87512900E-06	6.78558500E-10	-4.50342300E-14	-1.00807900E+04	9.62339500E+00
c2h3	5.93346800E+00	4.01774600E-03	-3.96674000E-07	-1.44126700E-10	2.37864400E-14	3.18543500E+04	-8.53031300E+00
c2h4	3.52841900E+00	1.14851800E-02	-4.41838500E-06	7.84460100E-10	-5.26684800E-14	4.42828900E+03	2.23038900E+00
c2h5	7.19048000E+00	6.48407700E-03	-6.42806500E-07	-2.34787900E-10	3.88087700E-14	1.06745500E+04	-1.47808900E+01
c3h4	6.31694869E+00	1.11336262E-02	-3.96289018E-06	6.35633775E-10	-3.78749885E-14	2.01174617E+04	-1.09718862E+01
c3h5	6.54761132E+00	1.33152246E-02	-4.78333100E-06	7.71949814E-10	-4.61930808E-14	1.72714707E+04	-9.27486841E+00
c3h6	8.01595958E+00	1.37023634E-02	-4.66249733E-06	7.21254402E-10	-4.17370126E-14	-1.87821271E+03	-2.00160668E+01
c3h7	7.70269870E-01	1.60442030E-02	-5.28332200E-06	7.62985900E-10	-3.93922840E-14	8.29843360E-01	-1.54801800E-01
c7h15-2	2.16368842E+01	3.23324804E-02	-1.09273807E-05	1.68357060E-09	-9.71774091E-14	-1.05873616E+04	-8.52209653E+01
c7h15o2	2.49023689E+01	3.50716920E-02	-1.20440306E-05	1.87464822E-09	-1.08947791E-13	-2.82976050E+04	-9.73923542E+01
c7ket12	2.97472906E+01	3.06622294E-02	-1.05563590E-05	1.64627343E-09	-9.58171675E-14	-5.66856828E+04	-1.22432490E+02
c5h11co	1.94783812E+01	2.50466029E-02	-8.54861346E-06	1.32557944E-09	-7.68503296E-14	-2.07923937E+04	-7.21995578E+01



## 3.5 正ヘプタンの素反応モデル 2

表 13 に化学種、表 14.1 ~ 14.7 に素反応とそれに関するパラメーター、表 15.1 ~ 15.3 , 16.1 ~ 16.3 に平衡定数、定積比熱、エンタルピーの計算式中で使用するパラメーターを掲載した。概要の項でも述べたように、一応は空気中の燃焼を計算できるが、窒素原子 N に関する反応は扱っていない。表 14.1 ~ 14.7 で掲載の順番と反応番号の順番が異なる部分があるので注意。

表 13

番号	化学種	分子量	番号	化学種	分子量	番号	化学種	分子量
1	n2	0	55	c5h11-1	71.14342	109	c7h14-2	98.18963
2	ch3	15.03506	56	c5h11-2	71.14342	110	c7h14-3	98.18963
3	h	1.00797	57	c2h5o	45.06155	111	c7h13	97.18166
4	ch4	16.04303	58	c2h5o2	61.06095	112	c7h15o2-4	131.1964
5	h2	2.01594	59	ch3o2	47.03386	113	c7h15o-1	83.1982
6	oh	17.00737	60	ch3o2h	48.04183	114	c7h15o-2	67.1988
7	h2o	18.01534	61	c3h2	38.04939	115	c7h15o-3	51.1994
8	o	15.9994	62	o2c2h4oh	77.06035	116	c7h14ooh1-2	131.1964
9	c2h6	30.07012	63	c2h4o2h	61.06095	117	c7h14ooh1-3	131.1964
10	c2h5	29.06215	64	c2h3co	55.05676	118	c7h14ooh1-4	131.1964
11	hco	29.01852	65	c2h3cho	56.06473	119	c7h14ooh2-3	131.1964
12	co	28.01055	66	c3h5o	57.0727	120	c7h14ooh2-4	131.1964
13	co2	44.00995	67	c3h6o1-2	58.08067	121	c7h14ooh2-5	131.1964
14	o2	31.9988	68	c3h6ooh1-2	75.08804	122	c7h14ooh3-1	131.1964
15	h2o2	34.01474	69	c3h6ooh2-1	75.08804	123	c7h14ooh3-2	131.1964
16	ho2	33.00677	70	nc3h7o	59.08864	124	c7h14ooh3-4	131.1964
17	c2h4	28.05418	71	ic3h7o	59.08864	125	c7h14ooh3-5	131.1964
18	ch3oh	32.04243	72	nc3h7o2	75.08804	126	c7h14ooh3-6	131.1964
19	ch2oh	31.03446	73	ic3h7o2	75.08804	127	c7h14ooh4-2	131.1964
20	ch3o	31.03446	74	c4h7o	71.09979	128	c7h14ooh4-3	131.1964
21	ch2o	30.02649	75	c4h8ooh1-3o2	121.11393	129	c7h14o1-3	114.18903
22	c2h2	26.03824	76	c4h8ooh1-3	89.11513	130	c7h14o1-4	114.18903
23	c2h3	27.04621	77	nc4ket13	48.0446	131	c7h14o2-4	130.18843
24	c2h	25.03027	78	c4h8ooh1-2	89.11513	132	c7h14o2-5	130.18843
25	hcco	41.02967	79	c4h8o1-3	72.10776	133	c7h14o3-5	146.18783
26	ch2	14.02709	80	pc4h9o2	89.11513	134	c7h14ooh1-3o2	163.1952
27	ch	13.01912	81	c3h3	39.05736	135	c7h14ooh2-3o2	163.1952
28	ch2co	42.03764	82	hocho	46.02589	136	c7h14ooh2-4o2	163.1952
29	ch2(s)	14.02709	83	c2h3o1	43.04561	137	c7h14ooh2-5o2	163.1952
30	pc2h4oh	45.06155	84	nc3h7cho	72.10776	138	c7h14ooh3-1o2	163.1952
31	ch3co	43.04561	85	nc3h7co	71.09979	139	c7h14ooh3-2o2	163.1952
32	ch3cho	44.05358	86	c3h6cho-2	23.10159	140	c7h14ooh3-4o2	163.1952
33	c3h5-s	41.0733	87	ch2ch2coch3	71.09979	141	c7h14ooh3-5o2	163.1952
34	c3h4-p	40.06533	88	c2h5coch2	71.09979	142	c7h14ooh3-6o2	163.1952
35	c3h5-a	41.0733	89	c2h5coc2h4p	85.12688	143	c7h14ooh4-2o2	163.1952
36	c3h6	42.08127	90	nc3h7coch2	85.12688	144	c7h14ooh4-3o2	163.1952
37	c3h4-a	40.06533	91	nc4h9cho	86.13485	145	nc7ket13	146.18783
38	ch3chco	56.06473	92	nc4h9co	85.12688	146	nc7ket23	146.18783
39	c3h5-t	41.0733	93	hoch2o	47.03386	147	nc7ket24	146.18783
40	c4h6	54.09242	94	c6h13-1	85.17051	148	nc7ket25	146.18783
41	nc3h7	43.08924	95	c6h12-1	84.16254	149	nc7ket31	146.18783
42	ic3h7	43.08924	96	c6h11	83.15457	150	nc7ket32	146.18783
43	c3h8	44.09721	97	nc7h16	100.20557	151	nc7ket34	146.18783
44	c5h9	69.12748	98	c7h15-1	99.1976	152	nc7ket35	146.18783
45	c4h7	55.10039	99	c7h15-2	99.1976	153	nc7ket36	146.18783
46	c4h8-1	56.10836	100	c7h15-3	99.1976	154	nc7ket42	146.18783
47	sc4h9	57.11633	101	c7h15-4	99.1976	155	nc7ket43	146.18783
48	pc4h9	57.11633	102	c7h15o2-1	131.1964	156	nc4h9coch2	99.15397
49	ch3coch3	58.08067	103	c7h15o2h-1	130.18843	157	c4h7ooh1-4	88.10716
50	ch3coch2	57.0727	104	c7h15o2-2	131.1964	158	c5h9ooh1-4	102.13425
51	c2h5co	57.0727	105	c7h15o2h-2	129.18046	159	c4h7o1-4	71.09979
52	c2h5cho	58.08067	106	c7h15o2-3	131.1964	160	c5h9o1-4	85.12688
53	c5h10-1	70.13545	107	c7h15o2h-3	128.17249			
54	ch2cho	43.04561	108	c7h14-1	98.18963			

表 14.1

番号	反応式	cf		ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
1	ch3+h(+M1)=ch4(+M1)	2.14E+15	-0.4	0	3.31E+30	-4	2108.03	0	1.00E-15	1.00E-15	40
2	ch4+h=ch3+h2	1.73E+04	3	8223.95							
3	ch4+oh=ch3+h2o	1.93E+05	2.4	2106.12							
4	ch4+o=ch3+oh	2.13E+06	2.21	6479.92							
5	c2h6+ch3=c2h5+ch4	1.51E-07	6	6047.08							
6	hco+oh=co+h2o	1.02E+14	0	0							
7	co+oh=co2+h	1.40E+05	1.95	-1347.04							
8	h+o2=o+oh	1.97E+14	0	16539.91							
9	o+h2=h+oh	5.08E+04	2.67	6292.07							
10	o+h2o=2 oh	2.97E+06	2.02	13400.1							
11	oh+h2=h+h2o	2.16E+08	1.51	3429.97							
12	hco+M2=h+co+M2	1.86E+17	-1	17000							
13	h2o2+oh=h2o+ho2	1.00E+12	0	0							
14	c2h4+o=ch3+hco	1.02E+07	1.88	179.02							
15	h+c2h4(+M1)=c2h5(+M1)	1.08E+12	0.45	1821.94	1.11E+34	-5	4447.9	1	1.00E-15	95	200
16	ch3oh(+M3)=ch3+oh(+M3)	1.90E+16	0	91729.92	2.95E+44	-7.35	95460.09	0.414	279	5459	1.00E+100
17	c2h6+h=c2h5+h2	5.54E+02	3.5	5167.07							
18	ch3oh+ho2=ch2oh+h2o2	3.98E+13	0	19400.1							
19	c2h5+o2=c2h4+ho2	1.22E+30	-5.76	10099.9							
20	c2h6+oh=c2h5+h2o	5.13E+06	2.06	854.92							
21	c2h6+o=c2h5+oh	1.13E+14	0	7849.9							
22	ch3+ho2=ch3o+oh	1.10E+13	0	0							
23	co+ho2=co2+oh	3.01E+13	0	23000							
24	2 ch3(+M1)=c2h6(+M1)	9.21E+16	-1.17	635.76	1.14E+36	-5.246	1705.07	0.405	1120	69.6	1.00E+15
25	h2o+M2=h+oh+M2	1.84E+27	-3	122599.9							
26	h+o2(+M2)=ho2(+M2)	1.48E+12	0.6	0	3.50E+16	-0.41	-1115.92	0.5	1.00E-30	1.00E+30	1.00E+100
27	co+o(+M2)=co2(+M2)	1.80E+10	0	2384.08	1.35E+24	-2.788	4190.97				
28	co+o2=co2+o	1.07E-15	7.13	13320.03							
29	hco+h=co+h2	7.34E+13	0	0							
30	hco+o=co+oh	3.02E+13	0	0							
31	ch2o+M=hco+h+M	6.28E+29	-3.57	93200.05							
32	ch2o+oh=hco+h2o	3.43E+09	1.18	-446.94							
33	ch2o+h=hco+h2	9.33E+08	1.5	2976.1							
34	ch2o+o=hco+oh	4.16E+11	0.57	2761.95							
35	ch3+oh=ch2o+h2	2.25E+13	0	4299.95							
36	ch3+o=ch2o+h	8.00E+13	0	0							
37	ch3+o2=ch3o+o	2.00E+18	-1.57	29210.09							
38	ch2o+ch3=hco+ch4	3.64E-06	5.42	998.09							
39	hco+ch3=ch4+co	1.21E+14	0	0							
40	ch3o(+M)=ch2o+h(+M)	5.45E+13	0	13500	2.34E+25	-2.7	30599.9				
41	c2h4(+M)=c2h2+h2(+M)	1.80E+13	0	76000	1.50E+15	0	55443.12				
42	ho2+o=oh+o2	3.25E+13	0	0							
43	hco+ho2=ch2o+o2	2.97E+10	0.33	-3860.9							
44	ch3o+o2=ch2o+ho2	5.50E+10	0	2424							
45	ch3+ho2=ch4+o2	3.60E+12	0	0							
46	hco+o2=co+ho2	7.58E+12	0	409.89							
47	ho2+h=2 oh	7.08E+13	0	299.95							
48	ho2+h=h2+o2	1.66E+13	0	820.03							
49	ho2+oh=h2o+o2	2.89E+13	0	-500							
50	h2o2+o2=2 ho2	5.94E+17	-0.66	53150.1							
51	2 oh(+M2)=h2o2(+M2)	1.24E+14	-0.37	0	3.04E+30	-4.63	2049	0.47	100	2000	1.00E+15
52	h2o2+h=h2o+oh	2.41E+13	0	3969.89							
53	ch4+ho2=ch3+h2o2	3.42E+11	0	19289.91							
54	ch2o+ho2=hco+h2o2	5.82E-03	4.53	6556.88							
55	oh+M2=o+h+M2	3.91E+22	-2	105299.95							
56	o2+M2=2 o+M2	6.47E+20	-1.5	121500							
57	h2+M2=2 h+M2	4.57E+19	-1.4	104400.1							
58	c2h3+h(+M)=c2h4(+M)	6.10E+12	0.27	280.11	9.80E+29	-3.86	3320.03	0.782	208	2663	6095
59	c2h5+c2h3=2 c2h4	3.00E+12	0	0							
60	c2h2+h(+M1)=c2h3(+M1)	3.11E+11	0.58	2588.91	2.25E+40	-7.269	6576.96	1	1.00E-15	675	1.00E+15
61	c2h4+h=c2h3+h2	8.42E-03	4.62	2582.93							
62	c2h4+oh=c2h3+h2o	2.02E+13	0	5955.07							
63	c2h3+o2=c2h2+ho2	5.19E-15	-1.26	3309.99							
64	c2h2+M=c2h+h+M	4.20E+16	0	107000							
65	c2h2+o2=hcco+oh	2.00E+08	1.5	30099.9							
66	ch2+o2=co+h2o	7.28E+19	-2.54	1809.03							
67	c2h2+oh=c2h+h2o	3.37E+07	2	14000							
68	o+c2h2=c2h+oh	3.16E+15	-0.6	15000							
69	c2h2+o=c2h+co	6.12E+06	2	1900.1							
70	c2h+o2=hco+co	2.41E+12	0	0							

表 14.2

番号	反応式	cf		ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
71	c2h+o=co+ch	1.81E+13	0	0							
72	ch2+o2=hco+oh	1.29E+20	-3.3	283.94							
73	ch2+o=co+2 h	5.00E+13	0	0							
74	ch2+h=ch+h2	1.00E+18	-1.56	0							
75	ch2+oh=ch+h2o	1.13E+07	2	3000							
76	ch2+o2=co+2 h	3.29E+21	-3.3	2868.07							
77	ch+o2=hco+o	3.30E+13	0	0							
78	ch3oh+oh=ch2oh+h2o	7.10E+06	1.8	-596.08							
79	ch3oh+h=ch3o+h2	3.60E+12	0	6094.89							
80	ch3oh+h=ch2oh+h2	1.44E+13	0	6094.89							
81	ch3oh+ch3=ch2oh+ch4	3.19E+01	3.17	7172.08							
82	ch3oh+o=ch2oh+oh	3.88E+05	2.5	3080.07							
83	ch2oh+o2=ch2o+ho2	3.81E+06	2	1641.01							
84	ch2oh(+M)=ch2o+h(+M)	2.80E+14	-0.73	32820.03	6.01E+33	-5.39	36200.05	0.96	67.6	1855	7543
85	c2h3+o2=c2h2+ho2	2.12E-06	6	9483.99							
86	h2o2+o=oh+ho2	9.55E+06	2	3969.89							
87	c2h2+o=hcco+h	1.43E+07	2	1900.1							
88	c2h2+oh=ch2co+h	2.19E-04	4.5	-1000							
89	ch2co+h=ch3+co	1.10E+13	0	3400.1							
90	ch2co+o=ch2+co2	1.75E+12	0	1349.9							
91	ch2+o2=ch2o+o	3.29E+21	-3.3	2868.07							
92	ch2co(+M)=ch2+co(+M)	3.00E+14	0	70979.92	3.60E+15	0	59270.08				
93	ch2co+o=hcco+oh	1.00E+13	0	8000							
94	ch2co+oh=hcco+h2o	1.00E+13	0	2000							
95	ch2co+h=hcco+h2	2.00E+14	0	8000							
96	hcco+oh=2 hco	1.00E+13	0	0							
97	hcco+h=ch2(s)+co	1.10E+14	0	0							
98	hcco+o=h+2 co	8.00E+13	0	0							
99	c2h6+o2=c2h5+ho2	4.00E+13	0	50900.1							
100	c2h6+ho2=c2h5+h2o2	1.70E+13	0	20460.09							
101	ch2+o2=co+2h2	1.01E+21	-3.3	1507.89							
102	ch3+c2h3=ch4+c2h2	3.92E+11	0	0							
103	ch3+c2h5=ch4+c2h4	1.95E+13	-0.5	0							
104	ch3oh+ch2o=2 ch3o	3.84E+13	0.05	84719.89							
105	ch2o+ch3o=ch3oh+hco	1.15E+11	0	1280.11							
106	ch4+ch3o=ch3+ch3oh	1.57E+11	0	8842.02							
107	c2h6+ch3o=c2h5+ch3oh	3.00E+11	0	7000							
108	c2h3+h=c2h2+h2	2.00E+13	0	2500							
109	ch3o+ch3oh=ch2oh+ch3oh	3.00E+11	0	4074.09							
110	ch3oh+oh=ch3o+h2o	1.00E+06	2.1	496.65							
111	c2h5+h=2 ch3	3.61E+13	0	0							
112	c2h3+o2=ch2o+hco	1.70E+29	-5.31	6500							
113	c2h6=c2h5+h	2.78E+21	-1.56	103799.95							
114	pc2h4oh=c2h4+oh	1.29E+12	-0.37	26849.9							
115	c2h4+ch3=c2h3+ch4	6.62E+00	3.7	9500							
116	ch3co(+M)=ch3+co(+M)	3.00E+12	0	16719.89	1.20E+15	0	12517.93				
117	ch3cho=ch3+hco	2.61E+15	0.15	80549.95							
118	ch3cho+o2=ch3co+ho2	3.01E+13	0	39150.1							
119	ch3cho+oh=ch3co+h2o	2.00E+06	1.8	1299.95							
120	ch3cho+h=ch3co+h2	1.34E+13	0	3299.95							
121	ch3cho+o=ch3co+oh	5.94E+12	0	1868.07							
122	ch3cho+ho2=ch3co+h2o2	3.01E+12	0	11929.97							
123	ch3cho+ch3=ch3co+ch4	2.61E+06	1.78	5911.09							
124	c3h5-s=c2h2+ch3	9.60E+39	-8.17	42030.11							
125	c2h2+ch3=c3h4-p+h	1.21E+17	-1.2	16679.97							
126	c3h5-a=c2h2+ch3	2.40E+48	-9.9	82080.07							
127	c3h6=c2h3+ch3	2.73E+62	-13.28	123200.05							
128	c2h2+ch3=c3h4-a+h	6.74E+19	-2.08	31590.11							
129	c3h6=c3h5-a+h	2.01E+61	-13.26	118500							
130	c3h6+o=c2co+ch3+h	2.50E+07	1.76	76							
131	c3h6+o=c2h5+hco	1.58E+07	1.76	-1216.06							
132	c3h6+o=ch3cho+2 h	2.50E+07	1.76	76							
133	c3h6=c3h5-s+h	7.71E+69	-16.09	140000							
134	c3h6+ho2=c3h5-a+h2o2	1.50E+11	0	14190.01							
135	c3h6+ho2=c3h5-s+h2o2	7.50E+09	0	12570.03							
136	c3h6+ho2=c3h5-t+h2o2	3.00E+09	0	9929.97							
137	c3h6+oh=c3h5-a+h2o	3.12E+06	2	-298.04							
138	c3h6+oh=c3h5-s+h2o	2.11E+06	2	2777.96							
139	c4h6=2 c2h3	4.03E+19	-1	98150.1							
140	c4h6+oh=c2h5+ch2co	1.00E+12	0	0							

表 14.3

番号	反応式	cf		ef	cf0	0	ef0	acent	ts3	ts1	ts2
211	ch3coch3+oh=ch3coch2+h2o	1.05E+10	0.97	1586.04							
212	ch3coch3+h=ch3coch2+h2	5.63E+07	2	7700.05							
213	ch3coch3+o=ch3coch2+oh	1.13E+14	0	7849.9							
214	ch3coch3+ch3=ch3coch2+ch4	3.96E+11	0	9783.94							
215	ch3coch3+ch3o=ch3coch2+ch3oh	1.00E+11	0	7000							
216	ch3coch2=ch2co+ch3	1.00E+14	0	31000							
217	ch3coch3+o2=ch3coch2+ho2	1.20E+14	0	46000							
218	ch3coch3+ho2=ch3coch2+h2o2	1.70E+13	0	20460.09							
219	c2h5co=c2h5+co	1.83E+15	-0.73	12909.89							
220	c2h5cho+h=c2h5co+h2	3.98E+13	0	4200.05							
221	c2h5cho+o=c2h5co+oh	5.01E+12	0	1789.91							
222	c2h5cho+oh=c2h5co+h2o	2.69E+10	0.76	-340.11							
223	c2h5cho+ch3=c2h5co+ch4	2.61E+06	1.78	5911.09							
224	c2h5cho+ho2=c2h5co+h2o2	1.00E+12	0	11000							
225	c2h5cho+ch3o=c2h5co+ch3oh	1.00E+12	0	3299.95							
226	c2h5cho+c2h5=c2h5co+c2h6	1.00E+12	0	8000							
227	c2h5cho=c2h5+hco	9.85E+18	-0.73	81710.09							
228	c2h5cho+o2=c2h5co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.05							
229	c2h5cho+nc3h7=c2h5co+c3h8	1.70E+12	0	8440.01							
230	c2h5cho+ic3h7=c2h5co+c3h8	1.70E+12	0	8440.01							
231	c2h5cho+c2h3=c2h5co+c2h4	1.70E+12	0	8440.01							
232	c2h5cho+c3h5-a=c2h5co+c3h6	1.70E+12	0	8440.01							
233	c5h10-1=c2h5+c3h5-a	1.00E+16	0	71400.1							
234	c5h10-1+h=c5h9+h2	2.80E+13	0	4000							
235	c5h10-1+o=c5h9+oh	2.54E+05	2.56	-1130.02							
236	c5h10-1+o=pc4h9+hco	1.00E+11	0	0							
237	c5h10-1+o=nc3h7+ch3co	1.00E+11	0	0							
238	c5h10-1+oh=c5h9+h2o	6.80E+13	0	3059.99							
239	c5h10-1+oh=pc4h9+ch2o	1.00E+11	0	0							
240	c5h10-1+oh=nc3h7+ch3cho	1.00E+11	0	0							
241	c5h10-1+ch3=c5h9+ch4	1.00E+11	0	7299.95							
242	h2o2+h=h2+ho2	4.82E+13	0	7950.05							
243	hco+o=co2+h	3.00E+13	0	0							
244	ch3+M=ch2+h+M	1.97E+16	0	92520.08							
245	ch3+h=ch2+h2	9.00E+13	0	15099.9							
246	ch3+oh=ch2+h2o	3.00E+06	2	2500							
247	ch+ch4=c2h4+h	6.00E+13	0	0							
248	ch3oh(+M)=ch2oh+h(+M)	2.69E+16	-0.08	98940.01	2.34E+40	-6.33	103099.9	0.773	693	5333	1.00E+100
249	ch3co+h=ch2co+h2	2.00E+13	0	0							
250	ch3co+o=ch2co+oh	2.00E+13	0	0							
251	ch3co+ch3=ch2co+ch4	5.00E+13	0	0							
252	c2h4+o=c2hcho+h	3.39E+06	1.88	179.02							
253	c2h5+o=c3cho+h	5.00E+13	0	0							
254	c2h6+ch=c2h5+ch2	1.10E+14	0	-260.04							
255	ch2oh+ch2o=ch3oh+hco	1.29E-01	4.56	6596.08							
256	c3h6+o2=c3h5-t+ho2	1.40E+12	0	60700.05							
257	c2h3+c2h4=c4h6+h	5.00E+11	0	7299.95							
258	c5h11-1=c2h4+nc3h7	7.97E+17	-1.44	29789.91							
259	c5h11-1=h+c5h10-1	3.48E+15	-0.66	37880.02							
260	c5h11-1+o2=c5h10-1+ho2	3.00E-19	0	3000							
261	c5h11-1=c5h11-2	3.88E+09	0.35	19760.04							
262	c5h11-2=c3h6+c2h5	3.03E+21	-2.26	30960.09							
263	c5h11-2=c5h10-1+h	1.65E+19	-1.64	40780.11							
264	c5h11-2+o2=c5h10-1+ho2	4.50E-19	0	5020.08							
265	c2h5o+M=ch3+ch2o+M	1.35E+38	-6.96	23799.95							
266	c2h5o+o2=ch3cho+ho2	4.28E+10	0	1097.04							
267	h2o2+o2=2 ho2	1.84E+14	-0.66	39549.95							
268	c2h3+o2=ch2cho+o	3.50E+14	-0.61	5260.04							
269	c2h5o2=c2h5+o2	4.93E+50	-11.5	42250							
270	ch3o2+M=ch3+o2+M	4.34E+27	-3.42	30469.89							
271	ch3o2h=ch3o+oh	6.31E+14	0	42299.95							
272	c3h2+o2=hcco+co+h	5.00E+13	0	0							
273	ch3o2+ch2o=ch3o2h+hco	1.99E+12	0	11669.93							
274	c2h4+ch3o2=c2h3+ch3o2h	1.13E+13	0	30429.97							
275	ch4+ch3o2=ch3+ch3o2h	1.81E+11	0	18479.92							
276	ch3oh+ch3o2=ch2oh+ch3o2h	1.81E+12	0	13710.09							
277	c2h5+ho2=c2h5o+oh	3.20E+13	0	0							
278	ch3o2+ch3=2 ch3o	7.00E+12	0	-1000							
279	ch3o2+c2h5=ch3o+c2h5o	7.00E+12	0	-1000							
280	ch3o2+ho2=ch3o2h+o2	1.75E+10	0	-3275.1							

表 14.4

番号	反応式	cf		ef		番号	反応式	cf		ef
141	c4h6+oh=c2o+c3h5-a	1.00E+12	0	0		281	h2o2+oh=h2o+ho2	5.80E+14	0	9559.99
142	c4h6+oh=c2h3+ch3cho	1.00E+12	0	0		282	2 ch3o2=c2h2+ch3oh+o2	3.11E+14	-1.61	-1050.91
143	c4h6+o=c2h4+ch2co	1.00E+12	0	0		283	2 ch3o2=o2+2 ch3o	1.40E+16	-1.61	1859.94
144	c4h6+o=c2h2o+c3h4-a	1.00E+12	0	0		284	c2h6+ch3o2=c2h5+ch3o2h	1.70E+13	0	20460.09
145	c2h4+o2=c2h3+ho2	4.00E+13	0	58200.05		285	o2c2h4oh=pc2h4oh+o2	3.90E+16	-1	30000
146	ch2o+M=co+h2+M	1.83E+32	-4.42	87119.98		286	o2c2h4oh=oh+2 ch2o	1.25E+10	0	18900.1
147	nc3h7=c3h3+c2h4	2.28E+14	-0.55	28400.1		287	c2h5o2=c2h4o2h	5.64E+47	-11.44	37320.03
148	nc3h7=h+c3h6	2.67E+15	-0.64	36820.03		288	c2h5o+M=c3h3cho+h+M	1.16E+35	-5.89	25270.08
149	nc3h7+o2=c3h6+ho2	3.00E+11	0	3000		289	ch3o2+ch3cho=c3h3o2h+ch3co	3.01E+12	0	11929.97
150	c2h4+ch3o=c2h3+ch3oh	1.20E+11	0	6750		290	c2h3co=c2h3+co	2.04E+14	-0.4	31450.05
151	c3h6+oh=c3h5-t+h2o	1.11E+06	2	1451		291	c2h3cho+oh=c2h3co+h2o	9.24E+06	1.5	-962
152	c3h6+o=c3h5-a+oh	5.24E+11	0.7	5884.08		292	c2h3cho+h=c2h3co+h2	1.34E+13	0	3299.95
153	c3h6+o=c3h5-s+oh	1.20E+11	0.7	8958.89		293	c2h3cho+o=c2h3co+oh	5.94E+12	0	1868.07
154	c3h6+o=c3h5-t+oh	6.03E+10	0.7	7631.93		294	c2h3cho+ho2=c2h3co+h2o2	3.01E+12	0	11929.97
155	c3h6+h=c3h5-a+h2	1.73E+05	2.5	2492.11		295	c2h3cho+ch3=c2h3co+ch4	2.61E+06	1.78	5911.09
156	c3h6+o2=c3h5-s+ho2	2.00E+12	0	62900.1		296	c2h3cho+ch3o2=c2h3co+ch3o2h	3.01E+12	0	11929.97
157	c3h6+h=c2h4+ch3	4.83E+33	-5.81	18500		297	c3h5o=c2h3cho+h	1.00E+14	0	29099.9
158	ic3h7=h+c3h6	8.57E+18	-1.57	40340.11		298	c3h5o=c2h3+ch2o	2.03E+12	0.09	23559.99
159	ic3h7+h=c3h6+h2	2.00E+13	0	0		299	c3h5o+o2=c2h3cho+ho2	1.00E+12	0	6000
160	ic3h7+o2=c3h6+ho2	4.50E+11	0	5020.08		300	c3h5-a+ho2=c3h5o+oh	7.00E+12	0	-1000
161	c3h8-ch3+c2h5	7.90E+22	-1.8	88630.02		301	c3h5-a+ch3o2=c3h5o+ch3o	7.00E+12	0	-1000
162	c3h8+o2=ic3h7+ho2	4.00E+13	0	47500		302	c3h6+ho2=c3h6o1-2+oh	1.29E+12	0	14900.1
163	c3h8+o2=nc3h7+ho2	4.00E+13	0	47500		303	c3h6+ch3o2=c3h5-a+ch3o2h	3.24E+11	0	14900.1
164	h+c3h8-h2+ic3h7	1.30E+06	2.4	4471.08		304	c3h6o1-2=c2h4+ch2o	6.00E+14	0	60000
165	h+c3h8-h2+nc3h7	1.88E+05	2.75	6280.11		305	c3h6o1-2+oh=c2o+c2h3+h2o	5.00E+12	0	0
166	c3h8+o=ic3h7+oh	2.81E+13	0	5200.05		306	c3h6o1-2+h=c2h2o+c2h3+h2	2.63E+07	2	5000
167	c3h8+o=nc3h7+oh	1.13E+14	0	7849.9		307	c3h6o1-2+o=c2h2o+c2h3+oh	8.43E+13	0	5200.05
168	c3h8+oh=nc3h7+h2o	1.05E+10	0.97	1586.04		308	c3h6o1-2+ho2=c2h2o+c2h3+h2o2	1.00E+13	0	15000
169	c3h8+oh=ic3h7+h2o	4.67E+07	1.61	-34.89		309	c3h6o1-2+ch3o2=c2h2o+c2h3+ch3o2h	1.00E+13	0	19000
170	c3h8+ho2=ic3h7+h2o2	5.60E+12	0	17700.05		310	c3h6o1-2+ch3=c2h2o+c2h3+ch4	2.00E+11	0	10000
171	c3h8+ho2=nc3h7+h2o2	1.68E+13	0	20429.97		311	c2h4o2=c2h4+ho2	9.29E+30	-6.1	19929.97
172	ch3+c3h8-ch4+ic3h7	3.98E+11	0	9500		312	c3h6ooh1-2=c3h6o1-2+oh	1.25E+15	-1.19	17580.07
173	ch3+c3h8-ch4+nc3h7	1.29E+12	0	11599.9		313	c3h6ooh2-1=c3h6o1-2+oh	3.46E+16	-1.61	18869.98
174	ic3h7+c3h8=nc3h7+c3h8	3.00E+10	0	12900.1		314	c3h6ooh1-2=c3h6+ho2	5.50E+14	-0.85	15260.04
175	c2h3+c3h8=c2h4+ic3h7	1.00E+11	0	10400.1		315	c3h6ooh2-1=c3h6+ho2	2.44E+19	-2.14	18229.92
176	c2h3+c3h8=c2h4+nc3h7	1.00E+11	0	10400.1		316	nc3h7o=c2h5+ch2o	1.39E+16	-0.87	19770.08
177	c2h5+c3h8=c2h6+ic3h7	1.00E+11	0	10400.1		317	ic3h7o=ch3+ch3cho	3.85E+17	-1.25	20489.96
178	c2h5+c3h8=c2h6+nc3h7	1.00E+11	0	10400.1		318	ic3h7o=ch3coch3+h	2.00E+14	0	21500
179	c3h8+c3h5-a=ic3h7+c3h6	2.00E+11	0	16099.9		319	nc3h7o=c2h5cho+h	2.51E+14	0	23400.1
180	c3h8+c3h5-a=nc3h7+c3h6	7.94E+11	0	20500		320	ic3h7o+o2=ch3coch3+ho2	9.09E+09	0	390.06
181	c3h8+ch3o=nc3h7+ch3oh	3.00E+11	0	7000		321	ch3+oh=c2(s)+h2o	2.65E+13	0	2185.95
182	c3h8+ch3o=ic3h7+ch3oh	3.00E+11	0	7000		322	ch3oh+o2=c2h2oh+ho2	2.05E+13	0	44900.1
183	c5h9=c3h5-a+c2h4	2.50E+13	0	45000		323	nc3h7o2+ch3o2=nc3h7o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.61	1859.94
184	c5h9=c2h3+c3h6	2.50E+13	0	30000		324	ic3h7o2+ch3o2=ic3h7o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.61	1859.94
185	c4h7=c4h6+h	1.20E+14	0	49299.95		325	nc3h7o2=c3h6ooh1-2	2.00E+11	0	26849.9
186	c4h7=c2h4+c2h3	1.00E+11	0	37000		326	ic3h7o2=c3h6ooh2-1	6.00E+11	0	29400.1
187	c4h8-1+c4h6=2 c4h7	2.35E+12	0	46719.89		327	ic3h7o2+c2h5o2=ic3h7o+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.61	1859.94
188	c4h7+ch3=c4h6+ch4	8.00E+12	0	0		328	nc3h7o2+c2h5o2=nc3h7o+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.61	1859.94
189	c3h5-a+c4h7=c3h6+c4h6	6.31E+12	0	0		329	2 ic3h7o2=o2+2 ic3h7o	1.40E+16	-1.61	1859.94
190	c4h7+o2=c4h6+ho2	1.00E+09	0	0		330	2 nc3h7o2=o2+2 nc3h7o	1.40E+16	-1.61	1859.94
191	h+c4h7=c4h6+h2	3.16E+13	0	0		331	ic3h7o2+nc3h7o2=ic3h7o+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.61	1859.94
192	c2h5+c4h7=c4h6+c2h6	3.98E+12	0	0		332	ic3h7o2+ch3=ic3h7o+ch3o	7.00E+12	0	-1000
193	c2h5+c4h7=c2h4+c4h8-1	9.24E+06	1.5	-962		333	ic3h7o2+c2h5=ic3h7o+c2h5o	7.00E+12	0	-1000
194	c2h3+c4h7=c2h4+c4h6	3.98E+12	0	0		334	ic3h7o2+ic3h7=2 ic3h7o	7.00E+12	0	-1000
195	c4h8-1=c3h5-a+ch3	5.00E+15	0	71000		335	ic3h7o2+nc3h7=ic3h7o+nc3h7o	7.00E+12	0	-1000
196	c4h8-1=c2h3+c2h5	1.00E+19	-1	96770.08		336	ic3h7o2+c3h5-a=ic3h7o+c3h5o	7.00E+12	0	-1000
197	c4h8-1=h+c4h7	4.11E+18	-1	97349.9		337	ic3h7o2+c4h7=ic3h7o+c4h7o	7.00E+12	0	-1000
198	c4h8-1+ch3=c4h7+ch4	1.00E+11	0	7299.95		338	nc3h7o2+ch3=nc3h7o+ch3o	7.00E+12	0	-1000
199	c4h8-1+h=c4h7+h2	5.00E+13	0	3900.1		339	nc3h7o2+c2h5=nc3h7o+c2h5o	7.00E+12	0	-1000
200	c4h8-1+oh=c4h7+h2o	2.25E+13	0	2217.02		340	nc3h7o2+ic3h7=nc3h7o+ic3h7o	7.00E+12	0	-1000
201	c4h8-1+c3h5-a=c4h7+c3h6	7.90E+10	0	12400.1		341	nc3h7o2+nc3h7=2 nc3h7o	7.00E+12	0	-1000
202	c4h8-1+ho2=c4h7+h2o2	1.40E+12	0	14900.1		342	nc3h7o2+c3h5-a=nc3h7o+c3h5o	7.00E+12	0	-1000
203	c4h8-1+o2=c4h7+ho2	2.70E+13	0	33200.05		343	nc3h7o2+c4h7=nc3h7o+c4h7o	7.00E+12	0	-1000
204	sc4h9=c3h6+ch3	7.37E+17	-1.4	30229.92		344	nc3h7o2=nc3h7+o2	3.87E+18	-1.16	36080.07
205	sc4h9=c4h8-1+h	3.59E+20	-2.1	40969.89		345	ic3h7o2=ic3h7+o2	4.21E+16	-0.34	35909.89
206	sc4h9+o2=c4h8-1+ho2	4.50E-19	0	5020.08		346	nc3h7+ho2=nc3h7o+oh	7.00E+12	0	-1000
207	pc4h9=c2h5+c2h4	7.50E+17	-1.41	29580.07		347	ic3h7+ho2=ic3h7o+oh	7.00E+12	0	-1000
208	pc4h9=c4h8-1+h	1.16E+17	-1.17	38159.89		348	ch3o2+nc3h7=ch3o+nc3h7o	7.00E+12	0	-1000
209	pc4h9+o2=c4h8-1+ho2	3.00E-19	0	3000		349	ch3o2+ic3h7=ch3o+ic3h7o	7.00E+12	0	-1000
210	ch3coch3=ch3co+ch3	1.22E+23	-1.99	83950.05		350	ch3o2+c3h8=ch3o2h+nc3h7	1.70E+13	0	20460.09

表 14.5

番号	反応式	cf		ef	番号	反応式	cf		ef
351	ch3o2+c3h8=ch3o2h+ic3h7	2.00E+12	0	17000	421	c3h4-a+c3h5-a=c3h3+c3h6	2.00E+11	0	7700.05
352	c4h7o=c3h3cho+c2h3	7.94E+14	0	19000	422	c3h4-a+c2h=c3h3+c2h2	1.00E+13	0	0
353	c4h7o=c2h3cho+c3h	7.94E+14	0	19000	423	c3h4-p+m=c3h3+h+m	1.14E+17	0	70000
354	c4h7+h2o=c4h7o+h	7.00E+12	0	-1000	424	c3h4-p=c2h+c3h	4.20E+16	0	100000
355	c4h7+ch3o2=c4h7o+ch3o	7.00E+12	0	-1000	425	c3h4-p+o2=c3h3+h2o	2.00E+13	0	41599.9
356	c4h7+c2h5o2=c4h7o+c2h5o	7.00E+12	0	-1000	426	c3h4-p+h2o=c2h4+co+h	3.00E+12	0	19000
357	c4h8-1+h=nc3h7+ch2o	1.00E+12	0	0	427	c3h4-p+h=c3h3+h2o	1.00E+07	2	1000
358	c4h8-1+o=c3h6+ch2o	7.23E+05	2.34	-1049.95	428	c3h4-p+o=c3h3+h	7.65E+08	1.5	8599.9
359	c4h8-1+o=c3h3cho+c2h4	1.30E+13	0	849.9	429	c3h4-p+o=c2h3+hco	3.20E+12	0	2010.04
360	c4h8-1+o=c3h3co+c2h5	1.30E+13	0	849.9	430	c3h4-p+o=hcco+c3h	9.60E+08	1	0
361	c4h8-1+h=ch3cho+c2h5	1.00E+12	0	0	431	c3h5-t=c3h4-p+h	1.08E+15	-0.6	38489.96
362	c4h8-1+h=ch3co+c2h6	5.00E+11	0	0	432	c3h5-s=c3h4-p+h	4.19E+15	-0.79	37479.92
363	c4h8-1+o=c2h5cho+c2h	1.30E+13	0	849.9	433	c3h4-p+h=c3h3+h2	2.00E+07	2	5000
364	c4h8-1+o=c2h5co+c3h	1.30E+13	0	849.9	434	c3h4-p+c3h3=c3h3+c3h4	1.50E+00	3.5	5599.9
365	c4h8-1+h=c2h5cho+c3h	1.00E+12	0	0	435	c3h4-p+c2h=c3h3+c2h2	1.00E+12	0	0
366	c4h8-1+h=c2h5co+c3h4	5.00E+11	0	0	436	c3h4-p+c2h3=c3h3+c2h4	1.00E+12	0	7700.05
367	c4h8-1+h=c2h5co+c3h2o	1.40E+12	0	14900.1	437	c3h4-p+c3h5-a=c3h3+c3h6	1.00E+12	0	7700.05
368	c4h8ooh1-3o2=c4h8ooh1-3+o2	8.09E+21	-1.94	37830.07	438	c3h3+o=c2h2o+c2h	1.00E+13	0	0
369	c4h8ooh1-3o2=nc4ket13+h	2.50E+10	0	21400.1	439	c3h3+h=c3h2+h2o	1.00E+13	0	0
370	c4h8ooh1-2=c4h8-1+h2o	2.21E+18	-1.94	16390.06	440	c3h3+o2=ch2co+hco	3.01E+10	0	2869.98
371	c4h8ooh1-3=c4h8o1-3+h	5.00E+10	0	15250	441	c3h3+c3h3=c2h5+c2h	4.56E+17	-1.1	48729.92
372	c4h8ooh1-3=h+ch2o+c3h6	6.64E+13	-0.16	29900.1	442	pc4h9o2=pc4h9+o2	7.60E+18	-1.22	35840.11
373	c4h8o1-3+h=ch2o+c3h5-a+h2o	5.00E+12	0	0	443	c2h3o1=c3h3co	8.50E+14	0	14000
374	c4h8o1-3+h=ch2o+c3h5-a+h2	5.00E+12	0	0	444	c2h3o1=ch2cho	1.00E+14	0	14000
375	c4h8o1-3+o=ch2o+c3h5-a+h	5.00E+12	0	0	445	ch2cho=ch2co+h	3.09E+15	-0.26	50820.03
376	c4h8o1-3+h2o=ch2o+c3h5-a+h2o2	1.00E+13	0	15000	446	ch2cho+o2=ch2o+co+h	2.00E+13	0	4200.05
377	c4h8o1-3+ch3o2=ch2o+c3h5-a+ch3o2h	1.00E+13	0	19000	447	nc4ket13=ch3cho+ch2cho+h	1.05E+16	0	41599.9
378	c4h8o1-3+ch3=ch2o+c3h5-a+ch4	2.00E+11	0	10000	448	c3h5-a+o2=c3h4-a+h2o	2.18E+21	-2.85	30760.04
379	pc4h9o2=c4h8ooh1-2	2.00E+11	0	26849.9	449	c3h5-a+o2=ch2cho+ch2o	7.14E+15	-1.21	21049.95
380	pc4h9o2=c4h8ooh1-3	2.50E+10	0	20849.9	450	c3h5-a+o2=c2h2+ch2o+h	9.72E+29	-5.71	21450.05
381	c2h5cho+ch3o2=c2h5co+ch3o2h	3.01E+12	0	11929.97	451	hcco+o2=co2+hco	2.40E+11	0	-853.97
382	c2h5cho+c4h7=c2h5co+c4h8-1	1.70E+12	0	8440.01	452	c3h6+h=c3h5-s+h2	8.04E+05	2.5	12280.11
383	c2h5o2=c2h4+h2o	3.37E+55	-13.42	44669.93	453	ch2co+h=ch2oh+co	3.73E+12	0	-1012.91
384	c2h4o2h=c2h5+o2	2.15E+37	-8.21	28020.08	454	ch3+o2=ch2o+h	7.47E+11	0	14250
385	c3h4-a+h2o=c2h4+co+h	1.00E+12	0	14000	455	c2h4+h2=2 ch3	3.77E+12	0.83	84710.09
386	c3h4-a+h2o=c3h3+h2o2	3.00E+13	0	14000	456	c3h5-t+o2=ch2o+ch3co	3.71E+25	-3.96	7043.02
387	ch3cho+h=ch3+hcho	3.00E+15	-1.08	0	457	ic3h7+h=ch3h6+h2o	2.41E+13	0	0
388	c3h5-t+o2=c3h4-a+h2o	1.89E+30	-5.59	15539.91	458	ic3h7+o=c3h3coch3+h	4.82E+13	0	0
389	c3h6+o2=c3h5-a+h2o	4.00E+12	0	39900.1	459	ic3h7+o=c3h3cho+ch3	4.82E+13	0	0
390	c3h6+c3h3=c3h5-a+ch4	2.21E+00	3.5	5674.95	460	c3h6+h=c3h5-t+h2	4.05E+05	2.5	9793.98
391	c3h6+c3h3=c3h5-s+ch4	1.35E+00	3.5	12849.9	461	c3h6=c3h5-t+h	5.62E+71	-16.58	139299.95
392	c3h6+c3h3=c3h5-t+ch4	8.40E-01	3.5	11659.89	462	nc3h7cho+o2=nc3h7co+h2o	2.00E+13	0.5	42200.05
393	c3h6+c2h5=c3h5-a+c2h6	1.00E+11	0	9799.95	463	nc3h7cho+h=nc3h7co+h2o	1.00E+13	0	0
394	c3h5-t=c2h2+ch3	2.16E+10	-8.31	45109.94	464	nc3h7cho+h=nc3h7co+h2	4.00E+13	0	4200.05
395	c3h5-a+h2o=c2h3+ch2o+h	1.00E-18	0	0	465	nc3h7cho+o=nc3h7co+h	5.00E+12	0	1789.91
396	c3h5-a+h=c3h4-a+h2	1.81E+13	0	0	466	nc3h7cho+h2o=nc3h7co+h2o2	2.80E+12	0	13599.9
397	c3h5-a+ch3=c3h4-a+ch4	1.00E+11	0	0	467	nc3h7cho+c3h3=nc3h7co+c3h4	1.70E+12	0	8440.01
398	c3h5-a+c2h5=c2h6+c3h4-a	4.00E+11	0	0	468	nc3h7cho+c3h3o=nc3h7co+c3h3oh	1.15E+11	0	1280.11
399	c3h5-a+c2h5=c2h4+c3h6	4.00E+11	0	0	469	nc3h7cho+c3h3o2=nc3h7co+c3h3o2h	1.00E+12	0	9500
400	c3h5-a+c2h3=c2h4+c3h4-a	1.00E+12	0	0	470	nc3h7cho+h=nc3h6cho-2+h2o	4.67E+07	1.61	-34.89
401	c3h4-a+c3h6=2 c3h5-a	8.39E+17	-1.29	33690.01	471	nc3h7cho+h2o=c3h6cho-2+h2o2	1.48E+04	2.6	13909.89
402	c3h5-a+o2=c2h3cho+h	2.47E+13	-0.44	23020.08	472	nc3h7cho+c3h3o2=c3h6cho-2+c3h3o2h	9.63E+03	2.6	13909.89
403	c3h5-s+o2=ch3cho+hco	4.34E+12	0	0	473	nc3h7co=nc3h7+co	1.00E+11	0	9599.9
404	c3h5-s+h=c3h4-a+h2	3.33E+12	0	0	474	ch3cho+h=ch2h5+co2	1.73E+12	0	-1010.04
405	c3h5-s+ch3=c3h4-a+ch4	1.00E+11	0	0	475	ch3cho+h=c2h5+co	4.40E+12	0	1458.89
406	c3h5-t+o2=ch3coch2+o	3.81E+17	-1.36	5580.07	476	ch3cho+o=ch3cho+co	3.20E+12	0	-436.9
407	c3h5-t+h=c3h4-p+h2	3.33E+12	0	0	477	ch2ch2coch3=c2h4+c3h3co	5.97E+12	0	20729.92
408	c3h5-t+ch3=c3h4-p+ch4	1.00E+11	0	0	478	ch2h5coch2=ch2co+c2h5	1.57E+13	0	30000
409	c3h4-a+m=c3h3+h+m	1.14E+17	0	70000	479	c3h6cho-2=c3h6+hco	8.25E+12	-0.18	21900.1
410	c3h4-a=c3h4-p	1.20E+15	0	92400.1	480	ch2h5coc2h4p=c2h5co+c2h4	1.55E+17	-1.46	27840.11
411	c3h4-a+o2=c3h3+h2o	4.00E+13	0	39159.89	481	nc3h7coch2=nc3h7+ch2co	1.23E+18	-1.4	43450.05
412	c3h4-a+h2o=ch2co+ch2+h	4.00E+12	0	19000	482	nc4h9cho+o2=nc4h9co+h2o	2.00E+13	0.5	42200.05
413	c3h3+h=c3h2+h2	5.00E+13	0	0	483	nc4h9cho+h=nc4h9co+h2o	1.00E+13	0	0
414	c3h4-a+h=c3h3+h2o	1.00E+07	2	1000	484	nc4h9cho+h=nc4h9co+h2	4.00E+13	0	4200.05
415	c3h4-a+o=c2h4+co	7.80E+12	0	1599.9	485	nc4h9cho+o=nc4h9co+h	5.00E+12	0	1789.91
416	c3h2+h=ch2h+hco	5.00E+13	0	0	486	nc4h9cho+h2o=nc4h9co+h2o2	2.80E+12	0	13599.9
417	c3h5-a=c3h4-a+h	6.66E+15	-0.43	63219.89	487	nc4h9cho+c3h3=nc4h9co+c3h4	1.70E+12	0	8440.01
418	c3h5-t=c3h4-a+h	3.51E+14	-0.44	40890.06	488	nc4h9cho+c3h3o=nc4h9co+c3h3oh	1.15E+11	0	1280.11
419	c3h4-a+h=c3h3+h2	2.00E+07	2	5000	489	nc4h9cho+c3h3o2=nc4h9co+c3h3o2h	1.00E+12	0	9500
420	c3h4-a+ch3=c3h3+ch4	3.67E-02	4.01	6830.07	490	nc4h9co=pc4h9+co	1.00E+11	0	9599.9

表 14.6

番号	反応式	cf		ef	番号	反応式	cf		ef
491	hoch2o=ch2o+oh	8.55E+13	-0.1	17530.11	561	nc7h16+c2h5=c7h15-4+c2h6	5.00E+10	0	10400.1
492	hoch2o=hocho+h	1.00E+14	0	14900.1	562	nc7h16+ch3o=c7h15-1+ch3oh	3.16E+11	0	7000
493	hocho+M=co+h2o+M	2.30E+13	0	50000	563	nc7h16+ch3o=c7h15-2+ch3oh	2.19E+11	0	5000
494	hocho+M=co2+h2+M	1.50E+16	0	57000	564	nc7h16+ch3o=c7h15-3+ch3oh	2.19E+11	0	5000
495	hocho=hco+oh	4.59E+18	-0.46	108299.95	565	nc7h16+ch3o=c7h15-4+ch3oh	1.10E+11	0	5000
496	hocho+oh=h2o+co2+h	2.62E+06	2.06	916.11	566	nc7h16+c2h3=c7h15-1+c2h4	1.00E+12	0	18000
497	hocho+oh=h2o+co+oh	1.85E+07	1.51	-962	567	nc7h16+c2h3=c7h15-2+c2h4	8.00E+11	0	16799.95
498	hocho+h=h2+co2+h	4.24E+06	2.1	4868.07	568	nc7h16+c2h3=c7h15-3+c2h4	8.00E+11	0	16799.95
499	hocho+h=h2+co+oh	6.03E+13	-0.35	2988.05	569	nc7h16+c2h3=c7h15-4+c2h4	4.00E+11	0	16799.95
500	hocho+ch3=ch4+co+oh	3.90E-07	5.8	2200.05	570	nc7h16+ch3o2=c7h15-1+ch3o2h	1.21E+13	0	20429.97
501	hocho+ho2=h2o2+co+oh	1.00E+12	0	11919.93	571	nc7h16+ch3o2=c7h15-2+ch3o2h	8.06E+12	0	17700.05
502	hocho+o=co+2 oh	1.77E+18	-1.9	2974.9	572	nc7h16+ch3o2=c7h15-3+ch3o2h	8.06E+12	0	17700.05
503	ch2(s)+M=ch2+M	1.00E+13	0	0	573	nc7h16+ch3o2=c7h15-4+ch3o2h	4.03E+12	0	17700.05
504	ch2(s)+ch4=2 ch3	4.00E+13	0	0	574	nc7h16+c7h15o2-1=c7h15-1+c7h15o2h-1	1.21E+13	0	20429.97
505	ch2(s)+c2h6=ch3+c2h5	1.20E+14	0	0	575	nc7h16+c7h15o2-2=c7h15-1+c7h15o2h-2	1.21E+13	0	20429.97
506	ch2(s)+o2=co+oh+h	7.00E+13	0	0	576	nc7h16+c7h15o2-3=c7h15-1+c7h15o2h-3	1.21E+13	0	20429.97
507	ch2(s)+h2=ch3+h	7.00E+13	0	0	577	nc7h16+c7h15o2-1=c7h15-2+c7h15o2h-1	8.06E+12	0	17700.05
508	ch2(s)+h=ch+h2	3.00E+13	0	0	578	nc7h16+c7h15o2-2=c7h15-2+c7h15o2h-2	8.06E+12	0	17700.05
509	ch2(s)+o=co+2 h	3.00E+13	0	0	579	nc7h16+c7h15o2-3=c7h15-2+c7h15o2h-3	8.06E+12	0	17700.05
510	ch2(s)+oh=ch2o+h	3.00E+13	0	0	580	nc7h16+c7h15o2-1=c7h15-3+c7h15o2h-1	8.06E+12	0	17700.05
511	ch2(s)+co2=ch2o+co	3.00E+12	0	0	581	nc7h16+c7h15o2-2=c7h15-3+c7h15o2h-2	8.06E+12	0	17700.05
512	ch2(s)+ch3=c2h4+h	2.00E+13	0	0	582	nc7h16+c7h15o2-3=c7h15-3+c7h15o2h-3	8.06E+12	0	17700.05
513	ch2(s)+ch2co=c2h4+co	1.60E+14	0	0	583	nc7h16+c7h15o2-1=c7h15-4+c7h15o2h-1	4.03E+12	0	17700.05
514	c6h13-1+o2=c6h12-1+ho2	3.00E-19	0	3000	584	nc7h16+c7h15o2-2=c7h15-4+c7h15o2h-2	4.03E+12	0	17700.05
515	c6h13-1=c2h4+pc4h9	5.45E+17	-1.29	29580.07	585	nc7h16+c7h15o2-3=c7h15-4+c7h15o2h-3	4.03E+12	0	17700.05
516	c6h13-1=c6h12-1+h	2.09E+16	-0.89	37950.05	586	nc7h16+c7h15-1=c7h15-2+nc7h16	1.00E+11	0	10400.1
517	c6h12-1+oh=c6h11+h2o	3.00E+13	0	1229.92	587	nc7h16+c7h15-1=c7h15-3+nc7h16	1.00E+11	0	10400.1
518	c6h12-1+h=c6h11+h2	3.70E+13	0	3900.1	588	nc7h16+c7h15-1=c7h15-4+nc7h16	5.00E+10	0	10400.1
519	c6h12-1+ch3=c6h11+ch4	1.00E+12	0	7299.95	589	nc7h16+c7h15-2=c7h15-3+nc7h16	1.00E+11	0	10400.1
520	c6h12-1+o=c6h11+oh	2.12E+11	0.13	9125	590	nc7h16+c7h15-2=c7h15-4+nc7h16	5.00E+10	0	10400.1
521	c6h12-1+oh=c5h11-1+ch2o	1.00E+11	0	-4000	591	nc7h16+c7h15-3=c7h15-4+nc7h16	5.00E+10	0	10400.1
522	c6h12-1+o=c5h11-1+hco	1.00E+11	0	-1049.95	592	c7h15-1=c5h11-1+c2h4	8.16E+17	-1.42	30840.11
523	c6h11=c3h6+c3h5-a	2.50E+13	0	45000	593	c7h15-1=c7h14-1+h	4.20E+16	-0.94	37940.01
524	c6h11=c4h8-1+c2h3	2.50E-17	0	45000	594	c7h15-2=pc4h9+c3h6	2.22E+16	-0.89	30130.02
525	c6h11=c4h7+c2h4	2.50E-17	0	45000	595	c7h15-2=c7h14-1+h	1.34E+15	-0.55	38760.04
526	c6h12-1=nc3h7+c3h5-a	1.00E+16	0	71000	596	c7h15-2=c7h14-2+h	2.71E+15	-0.72	37590.11
527	nc7h16=h+c7h15-1	1.34E+88	-21.17	142799.95	597	c7h15-3=c4h8-1+nc3h7	3.29E+11	0.19	22909.89
528	nc7h16=h+c7h15-2	6.50E+87	-21.01	139500	598	c7h15-3=c6h12-1+ch3	1.03E+14	-0.42	28690.01
529	nc7h16=h+c7h15-3	6.50E+87	-21.01	139500	599	c7h15-3=c7h14-2+h	2.71E+15	-0.72	37590.11
530	nc7h16=h+c7h15-4	3.25E+87	-21.01	139500	600	c7h15-3=c7h14-3+h	2.02E+15	-0.66	37679.97
531	nc7h16=c6h13-1+ch3	2.93E+73	-16.61	118900.1	601	c7h15-4=c2h5+c5h10-1	5.43E+16	-0.89	30590.11
532	nc7h16=c5h11-1+c2h5	8.10E+77	-17.62	120400.1	602	c7h15-4=c7h14-3+h	4.02E+15	-0.66	37679.97
533	nc7h16=pc4h9+nc3h7	1.42E+78	-17.71	120700.05	603	c7h15-1+o2=c7h14-1+ho2	3.00E-09	0	3000
534	nc7h16+h=c7h15-1+h2	1.88E+05	2.75	6280.11	604	c7h15-2+o2=c7h14-1+ho2	4.50E-09	0	5020.08
535	nc7h16+h=c7h15-2+h2	2.60E+06	2.4	4471.08	605	c7h15-2+o2=c7h14-2+ho2	3.00E-09	0	3000
536	nc7h16+h=c7h15-3+h2	2.60E+06	2.4	4471.08	606	c7h15-3+o2=c7h14-2+ho2	3.00E-09	0	3000
537	nc7h16+h=c7h15-4+h2	1.30E+06	2.4	4471.08	607	c7h15-3+o2=c7h14-3+ho2	3.00E-09	0	3000
538	nc7h16+o=c7h15-1+oh	1.93E+05	2.68	3716.06	608	c7h15-4+o2=c7h14-3+ho2	6.00E-09	0	3000
539	nc7h16+o=c7h15-2+oh	9.54E+04	2.71	2106.12	609	c7h15-1=c7h15-3	1.39E+09	0.98	33760.04
540	nc7h16+o=c7h15-3+oh	9.54E+04	2.71	2106.12	610	c7h15-1=c7h15-4	2.54E+09	0.35	19760.04
541	nc7h16+o=c7h15-4+oh	4.77E+04	2.71	2106.12	611	c7h15-2=c7h15-3	9.59E+08	1.39	39700.05
542	nc7h16+oh=c7h15-1+h2o	1.05E+10	0.97	1590.11	612	c7h15-1=c7h15-2	5.48E+08	1.62	38760.04
543	nc7h16+oh=c7h15-2+h2o	9.40E+07	1.61	-34.89	613	c7h14-1+oh=c7h13+h2o	3.00E+13	0	1229.92
544	nc7h16+oh=c7h15-3+h2o	9.40E+07	1.61	-34.89	614	c7h14-2+oh=c7h13+h2o	3.00E+13	0	1229.92
545	nc7h16+oh=c7h15-4+h2o	4.70E+07	1.61	-34.89	615	c7h14-3+oh=c7h13+h2o	3.00E+13	0	1229.92
546	nc7h16+ho2=c7h15-1+h2o2	1.68E+13	0	20440.01	616	c7h14-1+h=c7h13+h2	3.70E+13	0	3900.1
547	nc7h16+ho2=c7h15-2+h2o2	1.12E+13	0	17690.01	617	c7h14-2+h=c7h13+h2	3.70E+13	0	3900.1
548	nc7h16+ho2=c7h15-3+h2o2	1.12E+13	0	17690.01	618	c7h14-3+h=c7h13+h2	3.70E+13	0	3900.1
549	nc7h16+ho2=c7h15-4+h2o2	5.60E+12	0	17690.01	619	c7h14-1+ch3=c7h13+ch4	1.00E+12	0	7299.95
550	nc7h16+ch3=c7h15-1+ch4	9.04E-01	3.65	7153.92	620	c7h14-2+ch3=c7h13+ch4	1.00E+12	0	7299.95
551	nc7h16+ch3=c7h15-2+ch4	5.41E+04	2.26	7287.05	621	c7h14-3+ch3=c7h13+ch4	1.00E+12	0	7299.95
552	nc7h16+ch3=c7h15-3+ch4	5.41E+04	2.26	7287.05	622	c7h14-1+o=c7h13+oh	2.62E+11	0.46	11909.89
553	nc7h16+ch3=c7h15-4+ch4	2.71E+04	2.26	7287.05	623	c7h14-2+o=c7h13+oh	1.29E+11	0.63	14780.11
554	nc7h16+o2=c7h15-1+ho2	6.00E+13	0	52799.95	624	c7h14-3+o=c7h13+oh	1.73E+11	0.57	14690.01
555	nc7h16+o2=c7h15-2+ho2	4.00E+13	0	50150.1	625	c7h14-1+oh=ch2o+c6h13-1	1.00E+11	0	-4000
556	nc7h16+o2=c7h15-3+ho2	4.00E+13	0	50150.1	626	c7h14-1+oh=ch3cho+c5h11-1	1.00E+11	0	-4000
557	nc7h16+o2=c7h15-4+ho2	2.00E+13	0	50150.1	627	c7h14-2+oh=ch3cho+c5h11-1	1.00E+11	0	-4000
558	nc7h16+c2h5=c7h15-1+c2h6	1.00E+11	0	13400.1	628	c7h14-2+oh=c2h5cho+pc4h9	1.00E+11	0	-4000
559	nc7h16+c2h5=c7h15-2+c2h6	1.00E+11	0	10400.1	629	c7h14-3+oh=c2h5cho+pc4h9	1.00E+11	0	-4000
560	nc7h16+c2h5=c7h15-3+c2h6	1.00E+11	0	10400.1	630	c7h14-1+o=c7h13+ch4	1.00E+11	0	-1049.95

表 14.7



番号	反応式	cf		ef	番号	反応式	cf		ef
631	c7h14-2+o=ch3cho+c5h10-1	1.00E+11	0	-1049.95	701	c7h14ooh3-5=oh+c2h5cho+c4h8-1	2.47E+18	-1.55	27020.08
632	c7h14-3+o=ch3cho+c5h10-1	1.00E+11	0	-1049.95	702	c7h14ooh4-2=oh+nc3h7cho+c3h6	1.30E+18	-1.49	26799.95
633	c7h13=c3h5-a+c4h8-1	2.50E+13	0	45000	703	c7h14ooh1-3o2=c7h14ooh1-3+o2	6.00E+23	-2.54	38390.06
634	c7h13=c4h7+c3h6	2.50E+13	0	45000	704	c7h14ooh2-3o2=c7h14ooh2-3+o2	6.35E+23	-2.55	38400.1
635	c7h14-1=pc4h9+c3h5-a	1.00E+16	0	71000	705	c7h14ooh2-4o2=c7h14ooh2-4+o2	6.35E+23	-2.55	38400.1
636	c7h14-2=c4h7+nc3h7	1.00E+16	0	71000	706	c7h14ooh2-5o2=c7h14ooh2-5+o2	6.35E+23	-2.55	38400.1
637	c7h14-3=c4h7+nc3h7	1.00E+16	0	71000	707	c7h14ooh3-1o2=c7h14ooh3-1+o2	1.60E+21	-2	36520.08
638	c7h15o2-1=c7h15-1+o2	2.22E+19	-1.45	36090.11	708	c7h14ooh3-2o2=c7h14ooh3-2+o2	6.35E+23	-2.55	38400.1
639	c7h15o2-2=c7h15-2+o2	9.88E+21	-1.97	37859.94	709	c7h14ooh3-4o2=c7h14ooh3-4+o2	6.35E+23	-2.55	38400.1
640	c7h15o2-3=c7h15-3+o2	9.88E+21	-1.97	37859.94	710	c7h14ooh3-5o2=c7h14ooh3-5+o2	6.35E+23	-2.55	38400.1
641	c7h15o2-4=c7h15-4+o2	9.88E+21	-1.97	37859.94	711	c7h14ooh3-6o2=c7h14ooh3-6+o2	6.35E+23	-2.55	38400.1
642	c7h15-1+c7h15o2-1=2 c7h15o-1	7.00E+12	0	-1000	712	c7h14ooh4-2o2=c7h14ooh4-2+o2	3.19E+23	-2.55	38400.1
643	c7h15-1+c7h15o2-2=c7h15o-1+c7h15o-2	7.00E+12	0	-1000	713	c7h14ooh4-3o2=c7h14ooh4-3+o2	3.19E+23	-2.55	38400.1
644	c7h15-1+c7h15o2-3=c7h15o-1+c7h15o-3	7.00E+12	0	-1000	714	c7h14ooh1-3o2=nc7ket13+oh	2.50E+10	0	21400.1
645	c7h15-2+c7h15o2-1=c7h15o-2+c7h15o-1	7.00E+12	0	-1000	715	c7h14ooh2-3o2=nc7ket23+oh	1.00E+11	0	23849.9
646	c7h15-2+c7h15o2-2=2 c7h15o-2	7.00E+12	0	-1000	716	c7h14ooh2-4o2=nc7ket24+oh	1.25E+10	0	17849.9
647	c7h15-2+c7h15o2-3=c7h15o-2+c7h15o-3	7.00E+12	0	-1000	717	c7h14ooh2-5o2=nc7ket25+oh	1.56E+09	0	16049.95
648	c7h15-3+c7h15o2-1=c7h15o-3+c7h15o-1	7.00E+12	0	-1000	718	c7h14ooh3-1o2=nc7ket31+oh	1.25E+10	0	17849.9
649	c7h15-3+c7h15o2-2=c7h15o-3+c7h15o-2	7.00E+12	0	-1000	719	c7h14ooh3-2o2=nc7ket32+oh	1.00E+11	0	23849.9
650	c7h15-3+c7h15o2-3=2 c7h15o-3	7.00E+12	0	-1000	720	c7h14ooh3-4o2=nc7ket34+oh	1.00E+11	0	23849.9
651	c7h15o2-1=c7h14ooh1-2	2.00E+11	0	26849.9	721	c7h14ooh3-5o2=nc7ket35+oh	1.25E+10	0	17849.9
652	c7h15o2-1=c7h14ooh1-3	2.50E+10	0	20849.9	722	c7h14ooh3-6o2=nc7ket36+oh	1.56E+09	0	16049.95
653	c7h15o2-1=c7h14ooh1-4	3.13E+09	0	19049.95	723	c7h14ooh4-2o2=nc7ket42+oh	1.25E+10	0	17849.9
654	c7h15o2-2=c7h14ooh2-3	2.00E+11	0	26849.9	724	c7h14ooh4-3o2=nc7ket43+oh	1.00E+11	0	23849.9
655	c7h15o2-2=c7h14ooh2-4	2.50E+10	0	20849.9	725	nc7ket13=nc4h9cho+ch2cho+oh	1.05E+16	0	41599.9
656	c7h15o2-2=c7h14ooh2-5	3.13E+09	0	19049.95	726	nc7ket23=nc4h9cho+ch3co+oh	1.05E+16	0	41599.9
657	c7h15o2-3=c7h14ooh3-1	3.75E+10	0	24400.1	727	nc7ket24=nc3h7cho+ch3coch2+oh	1.05E+16	0	41599.9
658	c7h15o2-3=c7h14ooh3-2	2.00E+11	0	26849.9	728	nc7ket25=c2h5cho+ch2ch2coch3+oh	1.05E+16	0	41599.9
659	c7h15o2-3=c7h14ooh3-4	2.00E+11	0	26849.9	729	nc7ket31=ch2o+nc4h9coch2+oh	1.50E+16	0	42000
660	c7h15o2-3=c7h14ooh3-5	2.50E+10	0	20849.9	730	nc7ket32=ch3cho+nc4h9co+oh	1.05E+16	0	41599.9
661	c7h15o2-3=c7h14ooh3-6	3.13E+09	0	19049.95	731	nc7ket34=nc3h7cho+c2h5co+oh	1.05E+16	0	41599.9
662	c7h15o2-4=c7h14ooh4-2	5.00E+10	0	20849.9	732	nc7ket35=c2h5cho+c2h5coch2+oh	1.05E+16	0	41599.9
663	c7h15o2-4=c7h14ooh4-3	4.00E+11	0	26849.9	733	nc7ket36=ch3cho+c2h5coc2h4p+oh	1.05E+16	0	41599.9
664	c7h15o2-1+ho2=c7h15o2h-1+o2	1.75E+10	0	-3275.1	734	nc7ket42=ch3cho+nc3h7coch2+oh	1.05E+16	0	41599.9
665	c7h15o2-2+ho2=c7h15o2h-2+o2	1.75E+10	0	-3275.1	735	nc7ket43=c2h5cho+nc3h7co+oh	1.05E+16	0	41599.9
666	c7h15o2-3+ho2=c7h15o2h-3+o2	1.75E+10	0	-3275.1	736	c7h14o1-3+oh=c6h12-1+hco+h2o	2.50E+12	0	0
667	h2o2+c7h15o2-1=ho2+c7h15o2h-1	2.40E+12	0	10000	737	c7h14o1-4+oh=c5h10-1+ch2cho+h2o	2.50E+12	0	0
668	h2o2+c7h15o2-2=ho2+c7h15o2h-2	2.40E+12	0	10000	738	c7h14o2-4+oh=ch3co+c5h10-1+h2o	2.50E+12	0	0
669	h2o2+c7h15o2-3=ho2+c7h15o2h-3	2.40E+12	0	10000	739	c7h14o2-5+oh=ch3coch2+c4h8-1+h2o	2.50E+12	0	0
670	c7h15o2-1+ch3o2=c7h15o-1+ch3o+o2	1.40E+16	-1.61	1859.94	740	c7h14o3-5+oh=c2h5co+c4h8-1+h2o	2.50E+12	0	0
671	c7h15o2-2+ch3o2=c7h15o-2+ch3o+o2	1.40E+16	-1.61	1859.94	741	c7h14o1-3+oh=c2h4+nc4h9co+h2o	2.50E+12	0	0
672	c7h15o2-3+ch3o2=c7h15o-3+ch3o+o2	1.40E+16	-1.61	1859.94	742	c7h14o1-4+oh=c2h4+nc3h7coch2+h2o	2.50E+12	0	0
673	2 c7h15o2-1=2o2+2 c7h15o-1	1.40E+16	-1.61	1859.94	743	c7h14o2-4+oh=c3h6+nc3h7co+h2o	2.50E+12	0	0
674	c7h15o2-1+c7h15o2-2=c7h15o-1+c7h15o-2+o	1.40E+16	-1.61	1859.94	744	c7h14o2-5+oh=c3h6+c2h5coch2+h2o	2.50E+12	0	0
675	c7h15o2-1+c7h15o2-3=c7h15o-1+c7h15o-3+o	1.40E+16	-1.61	1859.94	745	c7h14o3-5+oh=c2h5cho+c4h7+h2o	2.50E+12	0	0
676	2 c7h15o2-2=2o2+2 c7h15o-2	1.40E+16	-1.61	1859.94	746	c7h14o1-3+ho2=c6h12-1+hco+h2o2	5.00E+12	0	17700.05
677	c7h15o2-2+c7h15o2-3=c7h15o-2+c7h15o-3+o	1.40E+16	-1.61	1859.94	747	c7h14o1-4+ho2=c5h10-1+ch2cho+h2o2	5.00E+12	0	17700.05
678	2 c7h15o2-3=2o2+2 c7h15o-3	1.40E+16	-1.61	1859.94	748	c7h14o2-4+ho2=ch3co+c5h10-1+h2o2	5.00E+12	0	17700.05
679	c7h15o2h-1=c7h15o-1+oh	1.50E+16	0	42500	749	c7h14o2-5+ho2=ch3coch2+c4h8-1+h2o2	5.00E+12	0	17700.05
680	c7h15o2h-2=c7h15o-2+oh	1.25E+16	0	41599.9	750	c7h14o3-5+ho2=c2h5co+c4h8-1+h2o2	5.00E+12	0	17700.05
681	c7h15o2h-3=c7h15o-3+oh	1.25E+16	0	41599.9	751	c7h14o1-3+ho2=c2h4+nc4h9co+h2o2	5.00E+12	0	17700.05
682	c7h15o-1=ch2o+c6h13-1	4.68E+17	-1.34	20260.04	752	c7h14o1-4+ho2=c2h4+nc3h7coch2+h2o2	5.00E+12	0	17700.05
683	c7h15o-2=ch3cho+c5h11-1	8.66E+21	-2.39	21880.02	753	c7h14o2-4+ho2=c3h6+nc3h7co+h2o2	5.00E+12	0	17700.05
684	c7h15o-3=c2h5cho+pc4h9	5.60E+21	-2.33	21359.94	754	c7h14o2-5+ho2=c3h6+c2h5coch2+h2o2	5.00E+12	0	17700.05
685	c7h14ooh1-2=c7h14-1+ho2	5.38E+17	-1.81	19059.99	755	c7h14o3-5+ho2=c2h5cho+c4h7+h2o2	5.00E+12	0	17700.05
686	c7h14ooh2-3=c7h14-2+ho2	8.89E+18	-2.1	21479.92	756	nc4h9coch2=pc4h9+ch2co	1.55E+18	-1.41	43140.06
687	c7h14ooh3-2=c7h14-2+ho2	8.89E+18	-2.1	21479.92	757	c7h14ooh1-3=c4h7ooh1-4+nc3h7	3.82E+14	-0.74	27469.89
688	c7h14ooh3-4=c7h14-3+ho2	6.62E+18	-2.03	20570.03	758	c7h14ooh1-4=c5h10-1+c2h4+ho2	2.44E+16	-1.08	29450.05
689	c7h14ooh4-3=c7h14-3+ho2	1.32E+19	-2.03	20570.03	759	c7h14ooh2-4=c5h9ooh1-4+c2h5	1.67E+18	-1.75	27669.93
690	c7h14ooh1-3=c7h14o1-3+oh	7.50E+10	0	15250	760	c7h14ooh2-5=c4h8-1+c3h6ooh2-1	2.13E+16	-0.96	28799.95
691	c7h14ooh1-4=c7h14o1-4+oh	9.38E+09	0	7000	761	c7h15-1+ho2=c7h15o-1+oh	7.00E+12	0	-1000
692	c7h14ooh2-4=c7h14o2-4+oh	7.50E+10	0	15250	762	c7h15-2+ho2=c7h15o-2+oh	7.00E+12	0	-1000
693	c7h14ooh2-5=c7h14o2-5+oh	9.38E+09	0	7000	763	c7h15-3+ho2=c7h15o-3+oh	7.00E+12	0	-1000
694	c7h14ooh3-1=c7h14o1-3+oh	7.50E+10	0	15250	764	c7h15-1+ch3o2=c7h15o-1+ch3o	7.00E+12	0	-1000
695	c7h14ooh3-5=c7h14o3-5+oh	7.50E+10	0	15250	765	c7h15-2+ch3o2=c7h15o-2+ch3o	7.00E+12	0	-1000
696	c7h14ooh3-6=c7h14o2-5+oh	9.38E+09	0	7000	766	c7h15-3+ch3o2=c7h15o-3+ch3o	7.00E+12	0	-1000
697	c7h14ooh4-2=c7h14o2-4+oh	7.50E+10	0	15250	767	c4h7ooh1-4=c4h7o1-4+oh	2.02E+20	-1.53	47039.91
698	c7h14ooh1-3=oh+ch2o+c6h12-1	8.12E+13	-0.14	31090.11	768	c5h9ooh1-4=c5h9o1-4+oh	1.18E+20	-1.38	46049.95
699	c7h14ooh2-4=oh+ch3cho+c5h10-1	5.36E+17	-1.4	26750	769	c4h7o1-4=ch2o+c3h5-a	2.41E+16	-1.14	7549.95
700	c7h14ooh3-1=oh+nc4h9cho+c2h4	2.21E+19	-1.67	26979.92	770	c5h9o1-4=ch3cho+c3h5-a	7.72E+20	-2.43	5890.06

表 14.1 ~ 表 14.7 の補足

番号*i*の化学種を $Y_i$ と書く。例えば、 $Y_1=\text{N}_2$ 、 $Y_7=\text{H}_2\text{O}$ 、 $Y_{13}=\text{CO}_2$ 、 $Y_{14}=\text{O}_2$ 。

$$M = \sum_{i=1}^{160} Y_i$$

$$M1 = M + \text{H}_2 + 4 \text{H}_2\text{O} + \text{CO} + 2 \text{CO}_2$$

$$M2 = M + 1.5 \text{H}_2 + 11 \text{H}_2\text{O} + 0.9 \text{CO} + 2.8 \text{CO}_2$$

$$M3 = M + \text{H}_2 + 15 \text{H}_2\text{O} + \text{CO} + 2 \text{CO}_2$$

表 15.1

化学種	T. bnd (K)	tdl 1	tdl 2	tdl 3	tdl 4	tdl 5	tdl 6	tdl 7
n2	1000	3.29867700E+00	1.40824000E-03	-3.96322200E-06	5.64151500E-09	-2.44485500E-12	-1.02090000E+03	3.95037200E+00
ch3	1000	2.43044300E+00	1.11241000E-02	-1.68022000E-05	1.62182900E-08	-5.86495300E-12	1.64237800E+04	6.78979400E+00
h	1000	2.50000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	2.54716300E+04	-4.60117600E-01
ch4	1000	7.78741500E-01	1.74766800E-02	-2.78340900E-05	3.04970800E-08	-1.22393100E-11	-9.82522900E+03	1.37221900E+01
h2	1000	3.29812400E+00	8.24944200E-04	-8.14301500E-07	-9.47543400E-11	4.13487200E-13	-1.01252100E+03	-3.29409400E+00
oh	1357	3.43586219E+00	2.02235804E-04	-1.13546412E-07	2.42445149E-10	-7.43651031E-14	3.74321252E+03	2.45014127E+00
h2o	1000	3.38684200E+00	3.47498200E-03	-6.35469600E-06	6.96858100E-09	-2.50658800E-12	-3.02081100E+04	2.59023300E+00
o	1000	2.94642900E+00	-1.63816600E-03	2.42103200E-06	-1.60284300E-09	3.89069600E-13	2.91476400E+04	2.96399500E+00
c2h6	1384	-2.52854344E-02	2.40764754E-02	-1.11893472E-05	2.08340901E-09	-5.29868616E-14	-1.12345534E+04	2.11648750E+01
c2h5	1000	2.69070200E+00	8.71913300E-03	4.41983900E-06	9.33870300E-10	-3.92777300E-12	1.28704000E+04	1.21382000E+01
hco	1000	2.89833000E+00	6.19914700E-03	-9.62308400E-06	1.08982500E-08	-4.57488500E-12	4.15992200E+03	8.98361400E+00
co	1000	3.26245200E+00	1.51194100E-03	-3.88175500E-06	5.58194400E-09	-2.47495100E-12	-1.43105400E+04	4.84889700E+00
co2	1000	2.27572500E+00	9.92207200E-03	-1.04091100E-05	6.86668700E-09	-2.11728000E-12	-4.83731400E+04	1.01884900E+01
o2	1000	3.21293600E+00	1.12748600E-03	-5.75615000E-07	1.31387700E-09	-8.76855400E-13	-1.00524900E+03	6.03473800E+00
h2o2	1000	3.38875400E+00	6.56922600E-03	-1.48501300E-07	-4.62580600E-09	2.47151500E-12	-1.76631500E+04	6.78536300E+00
ho2	1390	3.18310656E+00	3.66767950E-03	-9.32385122E-07	-3.25852919E-10	1.51139912E-13	8.09181013E+02	8.39371099E+00
c2h4	1000	-8.61488000E-01	2.79616300E-02	-3.38867700E-05	2.78515200E-08	-9.73787900E-12	5.57304600E+03	2.42114900E+01
ch3oh	1000	2.66011500E+00	7.34150800E-03	7.17005100E-06	-8.79319400E-09	2.39057000E-12	-2.53534800E+04	1.12326300E+01
ch2oh	1000	2.86262800E+00	1.00152700E-02	-5.28543600E-07	-5.13854000E-09	2.24604100E-12	-3.34967900E+03	1.03979400E+01
ch3o	1000	2.10620400E+00	7.21659500E-03	5.33847200E-06	-7.37763600E-09	2.07561100E-12	9.78601100E+02	1.31521800E+01
ch2o	1000	1.65273100E+00	1.26314400E-02	-1.88816800E-05	2.05003100E-08	-8.41323700E-12	-1.48654000E+04	1.37848200E+01
c2h2	1000	2.01356200E+00	1.51904500E-02	-1.61631900E-05	9.07899200E-09	-1.91274600E-12	2.61244400E+04	8.80537800E+00
c2h3	1000	2.45927600E+00	7.37147600E-03	2.10987300E-06	-1.32164200E-09	-1.18478400E-12	3.33522500E+04	1.15562000E+01
c2h	1000	2.73770400E+00	8.04844600E-03	-9.24431000E-06	6.52525900E-09	-1.93958000E-12	6.68381300E+04	7.30022000E+00
hcco	1000	5.04796500E+00	4.45347800E-03	2.26828300E-07	-1.48209500E-09	2.25074200E-13	1.96589200E+04	4.81843900E-01
ch2	1000	3.76223700E+00	1.15981900E-03	2.48958500E-07	8.80083600E-10	-7.33243500E-13	4.53679100E+04	1.71257800E+00
ch	1000	3.20020200E+00	2.07287600E-03	-5.13443100E-06	5.73389000E-09	-1.95553300E-12	7.04525900E+04	3.33158800E+00
ch2co	1000	2.97497100E+00	1.21187100E-02	-2.34504600E-06	-6.46668500E-09	3.90564900E-12	-7.63263700E+03	8.67355300E+00
ch2(s)	1000	3.97126500E+00	-1.69908900E-04	1.02536900E-06	2.49255100E-09	-1.98126600E-12	4.98936800E+04	5.75320700E-02
pc2h4oh	1391	1.17714711E+00	2.48115685E-02	-1.50299503E-05	4.79006785E-09	-6.40994211E-13	-4.95369043E+03	2.20081586E+01

表 15.2

化学種	T bnd (K)	tdl 1	tdl 2	tdl 3	tdl 4	tdl 5	tdl 6	tdl 7
ch3co	1000	3.12527800E+00	9.77822000E-03	4.52144800E-06	-9.00946200E-09	3.19371800E-12	-4.10850800E+03	1.12288500E+01
ch3cho	1000	2.50569500E+00	1.33699100E-02	4.67195300E-06	-1.12814000E-08	4.26356600E-12	-2.12458900E+04	1.33508900E+01
c3h5-s	1390	1.32807335E+00	2.53107914E-02	-1.51530439E-05	4.74345565E-09	-6.24666084E-13	3.06873903E+04	1.83328787E+01
c3h4-p	1400	3.02973000E+00	1.49896100E-02	-1.39850000E-06	-3.96961900E-09	1.38821700E-12	2.14840800E+04	8.00459400E+00
c3h5-a	1397	-5.29131958E-01	3.34559100E-02	-2.53401027E-05	1.02865754E-08	-1.73258340E-12	1.93834226E+04	2.53067131E+01
c3h6	1388	3.94615444E-01	2.89107662E-02	-1.54868608E-05	3.88814209E-09	-3.37890352E-13	1.06688164E+03	2.19003736E+01
c3h4-a	1400	2.53983100E+00	1.63343700E-02	-1.76495000E-06	-4.64736500E-09	1.72913100E-12	2.25124300E+04	9.93570200E+00
ch3chco	1400	1.48380119E+00	3.22203013E-02	-2.70250033E-05	1.20499164E-08	-2.18365931E-12	-1.15276540E+04	1.71552068E+01
c3h5-t	1382	2.17916644E+00	2.03826623E-02	-7.91413834E-06	4.76906187E-10	2.70398536E-13	2.94895338E+04	1.48785684E+01
c4h6	1000	3.19710800E+00	2.02559200E-02	6.51019200E-06	-1.65844200E-08	6.40028200E-12	1.57152000E+04	9.89566000E+00
nc3h7	1000	1.92253700E+00	2.47892700E-02	1.81024900E-06	-1.78326600E-08	8.58299600E-12	9.71328100E+03	1.39927100E+01
ic3h7	1000	1.71330000E+00	2.54261600E-02	1.58080800E-06	-1.82128600E-08	8.82771000E-12	7.53580900E+03	1.29790100E+01
c3h8	1000	8.96920800E-01	2.66898600E-02	5.43142500E-05	-2.12600100E-08	9.24333000E-12	-1.39549200E+04	1.93553300E+01
c5h9	1392	-1.38013950E+00	5.57608487E-02	-3.70143928E-05	1.26883901E-08	-1.78538835E-12	1.25589824E+04	3.26441304E+01
c4h7	1392	-3.50508352E-01	4.26511243E-02	-2.90979373E-05	1.05403914E-08	-1.60059854E-12	1.49933591E+04	2.67295696E+01
c4h8-1	1392	-8.31372089E-01	4.52580978E-02	-2.93658559E-05	1.00220436E-08	-1.43191680E-12	-1.57875035E+03	2.95084236E+01
sc4h9	1373	7.70280143E-01	3.86280904E-02	-1.57100260E-05	7.16860109E-10	7.00801289E-13	6.28812837E+03	2.49106489E+01
pc4h9	1395	-4.37779725E-01	4.78972364E-02	-3.14023159E-05	1.09786472E-08	-1.62010664E-12	7.68945248E+03	2.86852732E+01
ch3coch3	1374	1.30767163E+00	2.92021742E-02	-1.19045617E-05	6.52150087E-10	4.67751203E-13	-2.75328269E+04	1.96395025E+01
ch3coch2	1391	1.80339187E+00	3.01407085E-02	-1.93505552E-05	6.38199034E-09	-8.66103180E-13	-5.37233261E+03	1.78046408E+01
c2h5co	1373	2.93313946E+00	2.47427911E-02	-1.21222003E-05	2.34701048E-09	-5.26843338E-14	-5.69663063E+03	1.35958355E+01
c2h5cho	1378	2.16308444E+00	2.95501264E-02	-1.52446252E-05	3.49503947E-09	-2.38896627E-13	-2.42260137E+04	1.61153348E+01
c5h10-1	1392	-1.06223481E+00	5.74218294E-02	-3.74486890E-05	1.27364989E-08	-1.79609789E-12	-4.46546666E+03	3.22739790E+01
ch2cho	1000	3.40960200E+00	1.07385700E-02	1.89149200E-06	-7.15858300E-09	2.86738500E-12	1.52147700E+03	9.55829000E+00
c5h11-1	1397	-9.05255912E-01	6.10632852E-02	-4.09491825E-05	1.46093470E-08	-2.18859615E-12	4.83995303E+03	3.25574963E+01
c5h11-2	1377	4.98943596E-01	5.09850184E-02	-2.40687488E-05	3.59465210E-09	3.01383099E-13	3.40702366E+03	2.78600953E+01
c2h5o	1389	4.94420708E-01	2.71774434E-02	-1.65909010E-05	5.15204200E-09	-6.84496915E-13	-3.35252925E+03	2.28079378E+01
c2h5o2	1386	3.25121167E+00	2.36765869E-02	-1.18477606E-05	2.79401564E-09	-2.41043601E-13	-5.44533068E+03	1.27953147E+01
ch3o2	1385	4.26146906E+00	1.00873599E-02	-3.21506184E-06	2.09409267E-10	4.18339103E-14	-6.84394259E+02	5.16330320E+00
ch3o2h	1390	3.23442817E+00	1.90129767E-02	-1.13366287E-05	3.40306653E-09	-4.11830222E-13	-1.77197262E+04	9.25623949E+00
c3h2	1000	3.16671400E+00	2.48257200E-02	-4.59163700E-05	4.26801900E-08	-1.48215200E-11	6.35042100E+04	8.86944600E+00
o2c2h4oh	1392	4.11839445E+00	2.72240632E-02	-1.60824430E-05	5.17033408E-09	-7.31610168E-13	-2.30857785E+04	1.28482112E+01
c2h4o2h	1388	3.40977031E+00	2.65939711E-02	-1.57408161E-05	4.41132564E-09	-4.49209001E-13	2.05874655E+03	1.35264941E+01
c2h3co	1393	1.05143589E+00	3.06932973E-02	-2.65560368E-05	1.18183987E-08	-2.11589812E-12	6.87879551E+03	2.04173489E+01
c2h3cho	1393	2.9335162E-01	3.54321417E-02	-2.94936324E-05	1.28100124E-08	-2.26144108E-12	-1.16521584E+04	2.28878280E+01
c3h5o	1380	1.19822582E+00	3.05579837E-02	-1.80630276E-05	4.86150033E-09	-4.19854562E-13	9.58217784E+03	2.15566221E+01
c3h6o1-2	1379	-1.21988153E+00	4.28578772E-02	-3.17530249E-05	1.21763736E-08	-1.94154303E-12	-1.22953761E+04	2.88467826E+01
c3h6ooh1-2	1381	4.08359443E+00	3.40423239E-02	-1.62692689E-05	2.38765400E-09	2.21650818E-13	-2.27965073E+03	1.20159683E+01
c3h6ooh2-1	1395	2.33885419E+00	4.35977621E-02	-3.09323192E-05	1.13505578E-08	-1.70839946E-12	-2.88672352E+03	1.78673585E+01
nc3h7o	1390	2.89706514E-01	3.93075560E-02	-2.48069355E-05	8.07083573E-09	-1.07998290E-12	-6.24474269E+03	2.54387810E+01
ic3h7o	1395	-1.00369576E-01	4.31118928E-02	-3.10631817E-05	1.20668364E-08	-1.97214967E-12	-8.44902998E+03	2.57650010E+01
nc3h7o2	1387	3.15306348E+00	3.52691052E-02	-1.90649122E-05	5.01988372E-09	-5.10606304E-13	-8.35295454E+03	1.49406763E+01
ic3h7o2	1394	2.25116181E+00	4.04764261E-02	-2.70779685E-05	9.87383732E-09	-1.54391980E-12	-1.04027797E+04	1.67736536E+01
c4h7o	1380	2.67256826E+00	3.71198825E-02	-2.06862859E-05	5.48873888E-09	-5.35864183E-13	-8.58050888E+03	1.64848950E+01
c4h8ooh1-3o2	1395	5.01285046E+00	5.83017270E-02	-4.05195371E-05	1.48315962E-08	-2.26233460E-12	-2.46570201E+04	1.17446314E+01
c4h8ooh1-3	2021	2.78455585E+00	4.88189773E-02	-2.78981669E-05	7.20477548E-09	-6.14607480E-13	-4.93663384E+03	2.09179383E+01
nc4ket13	1389	3.61128634E+00	5.43913301E-02	-3.92348917E-05	1.48519881E-08	-2.33227509E-12	-4.04682412E+04	1.48248314E+01
c4h8ooh1-2	1379	4.58873307E+00	4.21293468E-02	-1.91956104E-05	2.59922321E-09	2.80120772E-13	-5.24542343E+03	1.21592799E+01
c4h8o1-3	1371	-2.53690104E+00	5.43995707E-02	-3.43390305E-05	1.01079922E-08	-1.10262736E-12	-1.52980680E+04	3.67400719E+01
pc4h9o2	1388	3.00751292E+00	4.70763532E-02	-2.66182332E-05	7.46167798E-09	-8.28942632E-13	-1.12534231E+04	1.73052261E+01
c3h3	1000	4.75420000E+00	1.10802800E-02	2.79332300E-07	-5.47921200E-09	1.94962900E-12	3.98888300E+04	5.85454900E-01
hocho	1376	1.43548185E+00	1.63363016E-02	-1.06257421E-05	3.32132977E-09	-4.02176103E-13	-4.64616504E+04	1.72885798E+01
c2h3o1	1491	3.35999844E-01	3.09570853E-02	-2.52838600E-05	9.42237535E-09	-1.30399273E-12	7.99950911E+03	2.50825660E+01
nc3h7cho	1378	1.87415959E+00	4.19240315E-02	-2.35148779E-05	6.26913673E-09	-6.09443908E-13	-2.71032194E+04	1.91568574E+01
nc3h7co	1380	2.67256826E+00	3.71198825E-02	-2.06862859E-05	5.48873888E-09	-5.35864183E-13	-8.58050888E+03	1.64848950E+01
c3h6cho-2	1682	2.95067531E+00	3.34223079E-02	-1.45356815E-05	1.67282048E-09	2.62011555E-13	-3.79034324E+03	1.74324072E+01
ch2ch2coch3	1380	2.40255609E+00	3.67294268E-02	-1.97316510E-05	5.07323216E-09	-4.99655275E-13	-6.15006886E+03	1.93993386E+01
c2h5coch2	1380	2.40255609E+00	3.67294268E-02	-1.97316510E-05	5.07323216E-09	-4.99655275E-13	-9.27035071E+03	1.87098570E+01
c2h5cocc2h4p	1376	2.39449461E+00	4.98731839E-02	-3.07394387E-05	9.95080260E-09	-1.37570832E-12	-9.32123954E+03	2.01162807E+01
nc3h7coch2	1389	9.58299271E-01	5.68162532E-02	-3.99112781E-05	1.52671514E-08	-2.49221047E-12	-1.23062238E+04	2.34112884E+01
nc4h9cho	1381	1.59663472E+00	5.43541416E-02	-3.21020651E-05	9.35773559E-09	-1.06688932E-12	-2.99841025E+04	2.21281498E+01
nc4h9co	1382	2.43530238E+00	4.93682376E-02	-2.89883082E-05	8.42863812E-09	-9.68287172E-13	-1.14675541E+04	1.92695879E+01
hoch2o	1452	4.11183145E+00	7.53850697E-03	3.77337370E-06	-5.38746005E-09	1.45615887E-12	-2.12471918E+04	7.46807254E+00
c6h13-1	1397	-7.62937152E-01	7.18105209E-02	-4.71329725E-05	1.62249790E-08	-2.32087543E-12	1.89021556E+03	3.35439856E+01
c6h12-1	1392	-1.35275205E+00	6.98655426E-02	-4.59408022E-05	1.56967343E-08	-2.21296175E-12	-7.34368617E+03	3.53120691E+01

表 15.3

化学種	T bnd (K)	tdl 1	tdl 2	tdl 3	tdl 4	tdl 5	tdl 6	tdl 7
c6h11	1388	-1.78981302E+00	6.71660911E-02	-4.34180588E-05	1.43931014E-08	-1.96953043E-12	8.35230470E+03	3.63570478E+01
nc7h16	1391	-1.26836187E+00	8.54355820E-02	-5.25346786E-05	1.62945721E-08	-2.02394925E-12	-2.56586565E+04	3.53732912E+01
c7h15-1	1390	-4.99570406E-01	8.08826467E-02	-5.00532754E-05	1.56549308E-08	-1.96616227E-12	-1.04590223E+03	3.46564011E+01
c7h15-2	1382	-3.79155767E-02	7.56726570E-02	-4.07473634E-05	9.32678943E-09	-4.92360745E-13	-2.35605303E+03	3.37321506E+01
c7h15-3	1382	-3.79155767E-02	7.56726570E-02	-4.07473634E-05	9.32678943E-09	-4.92360745E-13	-2.35605303E+03	3.37321506E+01
c7h15-4	1382	-3.79155767E-02	7.56726570E-02	-4.07473634E-05	9.32678943E-09	-4.92360745E-13	-2.35605303E+03	3.30426690E+01
c7h15o2-1	1390	2.37499334E+00	8.34651906E-02	-5.13897320E-05	1.64217662E-08	-2.19505216E-12	-1.99237961E+04	2.53067342E+01
c7h15o2h-1	1391	1.50495380E+00	9.18579072E-02	-5.89020045E-05	1.93151334E-08	-2.59456017E-12	-3.69871515E+04	2.86394003E+01
c7h15o2-2	1392	1.51378168E+00	8.85572745E-02	-5.92457147E-05	2.11801862E-08	-3.20741722E-12	-2.19818400E+04	2.76255370E+01
c7h15o2h-2	1393	6.29165042E-01	9.70053636E-02	-6.68336695E-05	2.41186253E-08	-3.61669837E-12	-3.90427262E+04	3.10277331E+01
c7h15o2-3	1392	1.51378168E+00	8.85572745E-02	-5.92457147E-05	2.11801862E-08	-3.20741722E-12	-2.19818400E+04	2.76255370E+01
c7h15o2h-3	1393	6.29165042E-01	9.70053636E-02	-6.68336695E-05	2.41186253E-08	-3.61669837E-12	-3.90427262E+04	3.10277331E+01
c7h14-1	1392	-1.67720549E+00	8.24611601E-02	-5.46504108E-05	1.87862303E-08	-2.65737983E-12	-1.02168601E+04	3.85086032E+01
c7h14-2	1390	-1.16533279E+00	7.90439806E-02	-4.96101666E-05	1.58569009E-08	-2.05346433E-12	-1.17362359E+04	3.59871070E+01
c7h14-3	1392	-2.03026994E+00	8.26324377E-02	-5.45514471E-05	1.87705822E-08	-2.67571220E-12	-1.15141029E+04	4.02316266E+01
c7h13	1392	-2.01707658E+00	8.08915559E-02	-5.43383904E-05	1.88066108E-08	-2.66059253E-12	6.81102828E+03	3.89797235E+01
c7h15o2-4	1392	1.51378168E+00	8.85572745E-02	-5.92457147E-05	2.11801862E-08	-3.20741722E-12	-2.19818400E+04	2.69360553E+01
c7h15o-1	1391	-4.59189934E-01	8.74464647E-02	-5.69015135E-05	1.93195908E-08	-2.68753465E-12	-1.78233113E+04	3.56475170E+01
c7h15o-2	1395	-1.09087925E+00	9.23217022E-02	-6.44477835E-05	2.36808474E-08	-3.61067567E-12	-1.99926675E+04	3.77738325E+01
c7h15o-3	1395	-1.09087925E+00	9.23217022E-02	-6.44477835E-05	2.36808474E-08	-3.61067567E-12	-1.99926675E+04	3.77738325E+01
c7h14ooh1-2	1384	2.49875186E+00	8.32443344E-02	-4.85933986E-05	1.28927950E-08	-1.09878385E-12	-1.36530733E+04	2.73754005E+01
c7h14ooh1-3	1384	2.49875186E+00	8.32443344E-02	-4.85933986E-05	1.28927950E-08	-1.09878385E-12	-1.36530733E+04	2.73754005E+01
c7h14ooh1-4	1384	2.49875186E+00	8.32443344E-02	-4.85933986E-05	1.28927950E-08	-1.09878385E-12	-1.36530733E+04	2.73754005E+01
c7h14ooh2-3	1389	1.62083964E+00	8.83636215E-02	-5.64527235E-05	1.76325999E-08	-2.10369342E-12	-1.57072842E+04	2.97815441E+01
c7h14ooh2-4	1389	1.62083964E+00	8.83636215E-02	-5.64527235E-05	1.76325999E-08	-2.10369342E-12	-1.57072842E+04	2.97815441E+01
c7h14ooh2-5	1389	1.62083964E+00	8.83636215E-02	-5.64527235E-05	1.76325999E-08	-2.10369342E-12	-1.57072842E+04	2.97815441E+01
c7h14ooh3-1	1393	1.37396160E+00	9.25294066E-02	-6.44403647E-05	2.35223293E-08	-3.56678305E-12	-1.44255429E+04	2.97386718E+01
c7h14ooh3-2	1389	1.62083964E+00	8.83636215E-02	-5.64527235E-05	1.76325999E-08	-2.10369342E-12	-1.57072842E+04	2.97815441E+01
c7h14ooh3-4	1389	1.62083964E+00	8.83636215E-02	-5.64527235E-05	1.76325999E-08	-2.10369342E-12	-1.57072842E+04	2.97815441E+01
c7h14ooh3-5	1389	1.62083964E+00	8.83636215E-02	-5.64527235E-05	1.76325999E-08	-2.10369342E-12	-1.57072842E+04	2.97815441E+01
c7h14ooh3-6	1389	1.62083964E+00	8.83636215E-02	-5.64527235E-05	1.76325999E-08	-2.10369342E-12	-1.57072842E+04	2.97815441E+01
c7h14ooh4-2	1389	1.62083964E+00	8.83636215E-02	-5.64527235E-05	1.76325999E-08	-2.10369342E-12	-1.57072842E+04	2.90920624E+01
c7h14ooh4-3	1389	1.62083964E+00	8.83636215E-02	-5.64527235E-05	1.76325999E-08	-2.10369342E-12	-1.57072842E+04	2.90920624E+01
c7h14o1-3	1397	-6.65407598E+00	1.06857688E-01	-8.28600373E-05	3.37794034E-08	-5.65586099E-12	-2.34614627E+04	6.05805871E+01
c7h14o1-4	1397	-7.67475343E+00	1.08451023E-01	-8.27531084E-05	3.30380469E-08	-5.41492429E-12	-3.34640974E+04	6.49157213E+01
c7h14o2-4	1400	-6.14247505E+00	1.06851133E-01	-8.34772177E-05	3.40576579E-08	-5.66867936E-12	-2.58080917E+04	5.73755835E+01
c7h14o2-5	1400	-7.32465040E+00	1.09089081E-01	-8.42725073E-05	3.38514638E-08	-5.54204874E-12	-3.57842594E+04	6.24742748E+01
c7h14o3-5	1400	-6.14247505E+00	1.06851133E-01	-8.34772177E-05	3.40576579E-08	-5.66867936E-12	-2.58080917E+04	5.73755835E+01
c7h14ooh1-3o2	1389	3.84933185E+00	9.45955097E-02	-5.94934121E-05	1.78836457E-08	-2.00618696E-12	-3.32051631E+04	2.25912030E+01
c7h14ooh2-3o2	1392	3.09603698E+00	9.93182239E-02	-6.69045928E-05	2.24191270E-08	-2.97843662E-12	-3.52824732E+04	2.43873873E+01
c7h14ooh2-4o2	1392	3.09603698E+00	9.93182239E-02	-6.69045928E-05	2.24191270E-08	-2.97843662E-12	-3.52824732E+04	2.43873873E+01
c7h14ooh2-5o2	1392	3.09603698E+00	9.93182239E-02	-6.69045928E-05	2.24191270E-08	-2.97843662E-12	-3.52824732E+04	2.43873873E+01
c7h14ooh3-1o2	1389	3.84933185E+00	9.45955097E-02	-5.94934121E-05	1.78836457E-08	-2.00618696E-12	-3.32051631E+04	2.25912030E+01
c7h14ooh3-2o2	1392	3.09603698E+00	9.93182239E-02	-6.69045928E-05	2.24191270E-08	-2.97843662E-12	-3.52824732E+04	2.43873873E+01
c7h14ooh3-4o2	1392	3.09603698E+00	9.93182239E-02	-6.69045928E-05	2.24191270E-08	-2.97843662E-12	-3.52824732E+04	2.43873873E+01
c7h14ooh3-5o2	1392	3.09603698E+00	9.93182239E-02	-6.69045928E-05	2.24191270E-08	-2.97843662E-12	-3.52824732E+04	2.43873873E+01
c7h14ooh3-6o2	1392	3.09603698E+00	9.93182239E-02	-6.69045928E-05	2.24191270E-08	-2.97843662E-12	-3.52824732E+04	2.43873873E+01
c7h14ooh4-2o2	1392	3.09603698E+00	9.93182239E-02	-6.69045928E-05	2.24191270E-08	-2.97843662E-12	-3.52824732E+04	2.43873873E+01
c7h14ooh4-3o2	1392	3.09603698E+00	9.93182239E-02	-6.69045928E-05	2.24191270E-08	-2.97843662E-12	-3.52824732E+04	2.43873873E+01
nc7ket13	1390	3.02737415E+00	9.05777002E-02	-6.33607268E-05	2.32162136E-08	-3.53384105E-12	-4.91487120E+04	2.25860013E+01
nc7ket23	1394	1.97237667E-01	1.01003617E-01	-7.54631627E-05	2.92849376E-08	-4.66295964E-12	-5.04393242E+04	3.49969216E+01
nc7ket24	1389	2.69842062E+00	9.01458551E-02	-6.19413386E-05	2.22789039E-08	-3.34178948E-12	-5.27915898E+04	2.39852490E+01
nc7ket25	1389	2.69842062E+00	9.01458551E-02	-6.19413386E-05	2.22789039E-08	-3.34178948E-12	-5.27915898E+04	2.39852490E+01
nc7ket31	1385	3.68813236E+00	8.66822494E-02	-5.84182707E-05	2.08545324E-08	-3.15008235E-12	-5.10084351E+04	2.07041129E+01
nc7ket32	1392	3.48224628E-01	1.02657937E-01	-8.00268737E-05	3.29012562E-08	-5.57165153E-12	-5.07205435E+04	3.39067009E+01
nc7ket34	1392	3.48224628E-01	1.02657937E-01	-8.00268737E-05	3.29012562E-08	-5.57165153E-12	-5.07205435E+04	3.39067009E+01
nc7ket35	1389	2.69842062E+00	9.01458551E-02	-6.19413386E-05	2.22789039E-08	-3.34178948E-12	-5.27915898E+04	2.39852490E+01
nc7ket36	1389	2.69842062E+00	9.01458551E-02	-6.19413386E-05	2.22789039E-08	-3.34178948E-12	-5.27915898E+04	2.39852490E+01
nc7ket42	1388	2.79961812E+00	9.18777171E-02	-6.64218079E-05	2.57008201E-08	-4.18119784E-12	-5.30617949E+04	2.31534700E+01
nc7ket43	1392	3.48224628E-01	1.02657937E-01	-8.00268737E-05	3.29012562E-08	-5.57165153E-12	-5.07205435E+04	3.39067009E+01
nc4h9cooh2	1387	6.57240675E-01	6.91820222E-02	-4.79956182E-05	1.78114857E-08	-2.80456388E-12	-1.51806661E+04	2.65180216E+01
c4h7ooh1-4	1393	1.79804670E+00	5.23302551E-02	-3.64638246E-05	1.31971888E-08	-1.97165993E-12	-1.32846748E+04	2.25862038E+01
c5h9ooh1-4	1397	7.67782330E-01	6.93519317E-02	-5.21650213E-05	2.06237355E-08	-3.35844189E-12	-1.78318101E+04	2.80373555E+01
c4h7o1-4	1393	-2.92647947E-01	4.83149119E-02	-3.48133220E-05	1.31921468E-08	-2.06485553E-12	6.29978883E+03	3.03629978E+01
c5h9o1-4	1398	-8.53018802E-01	6.41880432E-02	-4.91931508E-05	2.00188214E-08	-3.35963237E-12	1.19509504E+03	3.38333616E+01

表 16.1

化学種	tdh 1	tdh 2	tdh 3	tdh 4	tdh 5	tdh 6	tdh 7
n2	2.92664000E+00	1.48797700E-03	-5.68476100E-07	1.00970400E-10	-6.75335100E-15	-9.22797700E+02	5.98052800E+00
ch3	2.84405200E+00	6.13797400E-03	-2.23034500E-06	3.78516100E-10	-2.45215900E-14	1.64378100E+04	5.45269700E+00
h	2.50000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	2.54716300E+04	-4.60117600E-01
ch4	1.68347900E+00	1.02372400E-02	-3.87512900E-06	6.78558500E-10	-4.50342300E-14	-1.00807900E+04	9.62339500E+00
h2	2.99142300E+00	7.00064400E-04	-5.63382900E-08	-9.23157800E-12	1.58275200E-15	-8.35034000E+02	-1.35511000E+00
oh	2.62599754E+00	1.31992406E-03	-3.59724670E-07	4.25630800E-11	-1.82048016E-15	4.12085374E+03	7.10667307E+00
h2o	2.67214600E+00	3.05629300E-03	-8.73026000E-07	1.20099600E-10	-6.39161800E-15	-2.98992100E+04	6.86281700E+00
o	2.54206000E+00	-2.75506200E-05	-3.10280300E-09	4.55106700E-12	-4.36805200E-16	2.92308000E+04	4.92038000E+00
c2h6	6.10683385E+00	1.29236361E-02	-4.42527196E-06	6.87391726E-10	-3.98901732E-14	-1.37500014E+04	-1.30081250E+01
c2h5	7.19048000E+00	6.48407700E-03	-6.42806500E-07	-2.34787900E-10	3.88087700E-14	1.06745500E+04	-1.47808900E+01
hco	3.55727100E+00	3.34557300E-03	-1.33500600E-06	2.47057300E-10	-1.71385100E-14	3.91632400E+03	5.55229900E+00
co	3.02507800E+00	1.44268900E-03	-5.63082800E-07	1.01858100E-10	-6.91095200E-15	-1.42683500E+04	6.10821800E+00
co2	4.45362300E+00	3.14016900E-03	-1.27841100E-06	2.39399700E-10	-1.66903300E-14	-4.89669600E+04	-9.55395900E-01
o2	3.69757800E+00	6.13519700E-04	-1.25884200E-07	1.77528100E-11	-1.13643500E-15	-1.23393000E+03	3.18916600E+00
h2o2	4.57316700E+00	4.33613600E-03	-1.47468900E-06	2.34890400E-10	-1.43165400E-14	-1.80069600E+04	5.01137000E-01
ho2	4.10547423E+00	2.38452835E-03	-8.06347989E-07	1.24191723E-10	-7.16400108E-15	3.98127689E+02	3.12515836E+00
c2h4	3.52841900E+00	1.14851800E-02	-4.41838500E-06	7.84460100E-10	-5.26684800E-14	4.42828900E+03	2.23038900E+00
ch3oh	4.02906100E+00	9.37659300E-03	-3.05025400E-06	4.35879300E-10	-2.22472300E-14	-2.61579100E+04	2.37819600E+00
ch2oh	6.32752000E+00	3.60827100E-03	-3.20154700E-07	-1.93875000E-10	3.50970500E-14	-4.47450900E+03	-8.32936600E+00
ch3o	3.77080000E+00	7.87149700E-03	-2.65638400E-06	3.94443100E-10	-2.11261600E-14	1.27832500E+02	2.92957500E+00
ch2o	2.99560600E+00	6.68132100E-03	-2.62895500E-06	4.73715300E-10	-3.21251700E-14	-1.53203700E+04	6.91257200E+00
c2h2	4.43677300E+00	5.37603900E-03	-1.91281700E-06	3.28637900E-10	-2.15671000E-14	2.56676600E+04	-2.80033800E+00
c2h3	5.93346800E+00	4.01774600E-03	-3.96674000E-07	-1.44126700E-10	2.37864400E-14	3.18543500E+04	-8.53031300E+00
c2h	3.98636700E+00	3.14312300E-03	-1.26724300E-06	2.92436300E-10	-2.71632000E-14	6.65588400E+04	1.19106300E+00
hcco	6.75807300E+00	2.00040000E-03	-2.02760700E-07	-1.04113200E-10	1.96516500E-14	1.90151300E+04	-9.07126200E+00
ch2	3.63640800E+00	1.93305700E-03	-1.68701600E-07	-1.00989900E-10	1.80825600E-14	4.53413400E+04	2.15656100E+00
ch	2.19622300E+00	2.34038100E-03	-7.05820100E-07	9.00758200E-11	-3.85504000E-15	7.08672300E+04	9.17837300E+00
ch2co	6.03881700E+00	5.80484000E-03	-1.92095400E-06	2.79448500E-10	-1.45886800E-14	-8.58340200E+03	-7.65758100E+00
ch2(s)	3.55288900E+00	2.06678800E-03	-1.91411600E-07	-1.10467300E-10	2.02135000E-14	4.98497500E+04	1.68657000E+00
pc2h4oh	7.52241939E+00	1.10492715E-02	-3.72576465E-06	5.72827397E-10	-3.30061759E-14	-7.29333590E+03	-1.24958732E+01
ch3co	5.61227900E+00	8.44988600E-03	-2.85414700E-06	4.23837600E-10	-2.26840400E-14	-5.18786300E+03	-3.27494900E+00
ch3cho	5.86865000E+00	1.07942400E-02	-3.64553000E-06	5.41291200E-10	-2.89684400E-14	-2.26456900E+04	-6.01294600E+00
c3h5-s	7.88765879E+00	1.13012591E-02	-3.84213130E-06	5.93982677E-10	-3.43567175E-14	2.82377716E+04	-1.74291589E+01
c3h4-p	9.76810200E+00	5.21915100E-03	-3.75314000E-07	-2.99219100E-10	5.10787800E-14	1.86027700E+04	-3.02067800E+01
c3h5-a	8.45883958E+00	1.12695483E-02	-3.83792864E-06	5.94059119E-10	-3.43918030E-14	1.63576092E+04	-2.25809450E+01
c3h6	8.01595958E+00	1.37023634E-02	-4.66249733E-06	7.21254402E-10	-4.17370126E-14	-1.87821271E+03	-2.0016068E+01
c3h4-a	9.77625600E+00	5.30213800E-03	-3.70111800E-07	-3.02638600E-10	5.08958100E-14	1.95497200E+04	-3.07706100E+01
ch3chco	1.00219123E+01	9.56966300E-03	-3.26221644E-06	5.05231706E-10	-2.92593257E-14	-1.42482738E+04	-2.77829973E+01
c3h5-t	7.37492443E+00	1.17510061E-02	-4.00021283E-06	6.18947395E-10	-3.58215018E-14	2.72874911E+04	-1.43478655E+01
c4h6	8.04658300E+00	1.64852500E-02	-5.52222700E-06	8.12359300E-10	-4.29507800E-14	1.37013000E+04	-1.80045800E+01
nc3h7	7.97829100E+00	1.57611300E-02	-5.17324300E-06	7.44389200E-10	-3.82497800E-14	7.57940200E+03	-1.93561100E+01
ic3h7	8.06336900E+00	1.57448800E-02	-5.18239200E-06	7.47724500E-10	-3.85442200E-14	5.31387100E+03	-2.19264700E+01
c3h8	7.52521700E+00	1.88903400E-02	-6.28392400E-06	9.17937300E-10	-4.81241000E-14	-1.64645500E+04	-1.78439000E+01
c5h9	1.41860454E+01	2.07128899E-02	-7.06960617E-06	1.09607133E-09	-6.35322208E-14	7.00496135E+03	-5.14501773E+01
c4h7	1.12103578E+01	1.60483196E-02	-5.46502292E-06	8.45941053E-10	-4.89772739E-14	1.09041937E+04	-3.55593015E+01
c4h8-1	1.13508668E+01	1.80617877E-02	-6.16093029E-06	9.54652959E-10	-5.53089641E-14	-5.97871038E+03	-3.64369438E+01
sc4h9	1.18293992E+01	1.94203812E-02	-6.55835141E-06	1.00989031E-09	-5.82693176E-14	1.79315973E+03	-3.68210535E+01
pc4h9	1.21510082E+01	1.94310717E-02	-6.61577950E-06	1.02375136E-09	-5.92529707E-14	3.17231942E+03	-3.93425822E+01
ch3coch3	9.91421984E+00	1.46030709E-02	-5.06085765E-06	7.92682855E-10	-4.62739645E-14	-3.11167423E+04	-2.86113215E+01
ch3coch2	1.02303975E+01	1.16494161E-02	-4.01005537E-06	6.25205246E-10	-3.63784362E-14	-8.44380462E+03	-2.79197220E+01
c2h5co	9.87881997E+00	1.17515676E-02	-4.00614923E-06	6.20850617E-10	-3.59835225E-14	-8.47292283E+03	-2.49235196E+01
c2h5cho	1.02427695E+01	1.39641989E-02	-4.76248001E-06	7.38105706E-10	-4.27759503E-14	-2.74143135E+04	-2.85346843E+01
c5h10-1	1.45851539E+01	2.24072471E-02	-7.63348025E-06	1.18188966E-09	-6.84385139E-14	-1.00898205E+04	-5.23683936E+01
ch2cho	5.97567000E+00	8.13059100E-03	-2.74362400E-06	4.07030400E-10	-2.17601700E-14	4.90321800E+02	-5.04525100E+00
c5h11-1	1.53234740E+01	2.39041200E-02	-8.14771619E-06	1.26176236E-09	-7.30677335E-14	-9.23241637E+02	-5.49528859E+01
c5h11-2	1.50998007E+01	2.37225333E-02	-8.01388900E-06	1.23431039E-09	-7.12300125E-14	-2.33420039E+03	-5.29613979E+01
c2h5o	7.87339772E+00	1.13072907E-02	-3.84421421E-06	5.94414105E-10	-3.43894538E-14	-6.07274953E+03	-1.73416790E+01
c2h5o2	9.15255914E+00	1.24709284E-02	-4.27100650E-06	6.63470012E-10	-3.85024363E-14	-7.82759319E+03	-1.99384891E+01
ch3o2	5.95787891E+00	7.90728626E-03	-2.68246234E-06	4.13891337E-10	-2.39007330E-14	-1.53574838E+03	-4.71963886E+00
ch3o2h	8.43117091E+00	8.06817909E-03	-2.77094921E-06	4.31332243E-10	-2.50692146E-14	-1.96678771E+04	-1.91170629E+01
c3h2	7.67098100E+00	2.74874900E-03	-4.37094300E-07	-6.45559900E-11	1.66388700E-14	6.25972200E+04	-1.23689000E+01
o2c2h4oh	1.07432659E+01	1.30957787E-02	-4.45370088E-06	6.88548738E-10	-3.98230113E-14	-2.55911274E+04	-2.33254953E+01
c2h4o2h	1.11476965E+01	1.04949968E-02	-3.62326819E-06	5.66061229E-10	-3.29857328E-14	-8.35606734E+02	-2.87480538E+01
c2h3co	9.99505311E+00	7.34623223E-03	-2.56370222E-06	4.03462270E-10	-2.36317330E-14	4.00522160E+03	-2.67674022E+01
c2h3cho	1.04184959E+01	9.48963321E-03	-3.29310529E-06	5.16279203E-10	-3.01587291E-14	-1.49630281E+04	-3.07235061E+01

表 16.2

化学種	tdh_1	tdh_2	tdh_3	tdh_4	tdh_5	tdh_6	tdh_7
c3h5o	1.02551752E+01	1.14983720E-02	-3.84645659E-06	5.88910346E-10	-3.38557923E-14	6.26560810E+03	-2.77655042E+01
c3h6o1-2	1.19825289E+01	1.23964696E-02	-4.39113813E-06	6.97911182E-10	-4.11585127E-14	-1.69739189E+04	-4.22894035E+01
c3h6ooh1-2	1.43342402E+01	1.50496617E-02	-5.20515993E-06	8.14227552E-10	-4.74899437E-14	-6.33723421E+03	-4.47976591E+01
c3h6ooh2-1	1.48333794E+01	1.45208404E-02	-4.99887477E-06	7.79489590E-10	-4.53629117E-14	-7.24052565E+03	-4.92810904E+01
nc3h7o	1.10130308E+01	1.58110271E-02	-5.38743215E-06	8.34264825E-10	-4.83147349E-14	-1.01528968E+04	-3.27511689E+01
ic3h7o	1.14592753E+01	1.55902812E-02	-5.34443227E-06	8.30858106E-10	-4.82455289E-14	-1.24638531E+04	-3.62203624E+01
nc3h7o2	1.23635662E+01	1.69377420E-02	-5.80705297E-06	9.02805946E-10	-5.24229836E-14	-1.19482794E+04	-3.57854035E+01
ic3h7o2	1.27059050E+01	1.65446528E-02	-5.64857588E-06	8.75666817E-10	-5.07449775E-14	-1.41513305E+04	-3.96629320E+01
c4h7o	1.30026331E+01	1.63104877E-02	-5.57642899E-06	8.65670629E-10	-5.02255667E-14	-1.25523385E+04	-4.02608515E+01
c4h8ooh1-3o2	2.11658891E+01	2.09636033E-02	-7.20558874E-06	1.12228133E-09	-6.52546797E-14	-3.03479380E+04	-7.52165802E+01
c4h8ooh1-3	1.56428727E+01	2.11527368E-02	-7.38808963E-06	1.16936828E-09	-6.89245122E-14	-9.36522030E+03	-4.85929362E+01
nc4ket13	1.90814911E+01	1.80751568E-02	-6.21426271E-06	9.68245503E-10	-5.63196737E-14	-4.58537579E+04	-6.82492782E+01
c4h8ooh1-2	1.67765697E+01	2.02436108E-02	-7.00755314E-06	1.09668146E-09	-6.39812135E-14	-1.01952999E+04	-5.57317121E+01
c4h8o1-3	1.54227092E+01	1.70211052E-02	-6.06347951E-06	9.67354762E-10	-5.71992419E-14	-2.20194174E+04	-6.13871862E+01
nc4h9o2	1.55697813E+01	2.14098453E-02	-7.34517126E-06	1.14248918E-09	-6.63646622E-14	-1.60672005E+04	-5.16056477E+01
c3h3	8.83104700E+00	4.35719500E-03	-4.10906700E-07	-2.36872300E-10	4.37652000E-14	3.84742000E+04	-2.17791900E+01
hocho	6.68733013E+00	5.14289368E-03	-1.82238513E-06	2.89719163E-10	-1.70892199E-14	-4.83995400E+04	-1.13104798E+01
c2h3o1	1.14373827E+01	4.23746386E-03	-1.54815052E-06	2.51163559E-10	-1.50252425E-14	4.35403066E+03	-3.40412712E+01
nc3h7cho	1.35988068E+01	1.81652474E-02	-6.17844458E-06	9.55980208E-10	-5.53442958E-14	-3.15845348E+04	-4.51790228E+01
nc3h7co	1.30026331E+01	1.63104877E-02	-5.57642899E-06	8.65670629E-10	-5.02255667E-14	-1.25523385E+04	-4.02608515E+01
c3h6cho-2	1.11942816E+01	1.81806772E-02	-6.35916662E-06	1.00727333E-09	-5.93943618E-14	-6.86826460E+03	-2.80298956E+01
ch2ch2cooch3	1.24694368E+01	1.71022143E-02	-5.92156726E-06	9.26816806E-10	-5.40730504E-14	-1.01378242E+04	-3.62186375E+01
c2h5cooch2	1.24694368E+01	1.71022143E-02	-5.92156726E-06	9.26816806E-10	-5.40730504E-14	-1.32581060E+04	-3.69081191E+01
c2h5coc2h4p	1.62000827E+01	2.05106647E-02	-6.96977982E-06	1.07826230E-09	-6.24324406E-14	-1.45067221E+04	-5.52272610E+01
nc3h7cooch2	1.61502419E+01	2.14093466E-02	-7.36059614E-06	1.14656816E-09	-6.66717222E-14	-1.76968561E+04	-5.83864884E+01
nc4h9cho	1.67965163E+01	2.25684519E-02	-7.67631588E-06	1.18769369E-09	-6.87545554E-14	-3.56826080E+04	-6.09063312E+01
nc4h9co	1.61782939E+01	2.07991920E-02	-7.11787892E-06	1.10559975E-09	-6.41697187E-14	-1.66537752E+04	-5.58943579E+01
hoch2o	6.39521515E+00	7.43673043E-03	-2.50422354E-06	3.84879712E-10	-2.21778689E-14	-2.25557758E+04	-6.63865583E+00
c6h13-1	1.85219223E+01	2.82755903E-02	-9.62785872E-06	1.49000931E-09	-8.62480621E-14	-5.00124444E+03	-7.06345855E+01
c6h12-1	1.78337529E+01	2.67377658E-02	-9.10036773E-06	1.40819768E-09	-8.15124244E-14	-1.42062860E+04	-6.68818851E+01
c6h11	1.73781063E+01	2.52715626E-02	-8.74710351E-06	1.36884407E-09	-7.98569285E-14	1.33730775E+03	-6.77269441E+01
nc7h16	2.22148969E+01	3.47675750E-02	-1.18407129E-05	1.83298478E-09	-1.06130266E-13	-3.42760081E+04	-9.23040196E+01
c7h15-1	2.17940709E+01	3.26280243E-02	-1.11138244E-05	1.72067148E-09	-9.96366999E-14	-9.20938221E+03	-8.64954311E+01
c7h15-2	2.16368842E+01	3.23324804E-02	-1.09273807E-05	1.68357060E-09	-9.71774091E-14	-1.05873616E+04	-8.52209653E+01
c7h15-3	2.16368842E+01	3.23324804E-02	-1.09273807E-05	1.68357060E-09	-9.71774091E-14	-1.05873616E+04	-8.52209653E+01
c7h15-4	2.16368842E+01	3.23324804E-02	-1.09273807E-05	1.68357060E-09	-9.71774091E-14	-1.05873616E+04	-8.52209653E+01
c7h15o2-1	2.49023689E+01	3.50716920E-02	-1.20440306E-05	1.87464822E-09	-1.08947791E-13	-2.82976050E+04	-9.73923542E+01
c7h15o2h-1	2.73495733E+01	3.52545289E-02	-1.21399643E-05	1.89323260E-09	-1.10181893E-13	-4.64103498E+04	-1.11617766E+02
c7h15o2-2	2.52622017E+01	3.46652053E-02	-1.18812593E-05	1.84687322E-09	-1.07234165E-13	-3.05051074E+04	-1.00675588E+02
c7h15o2h-2	2.77098165E+01	3.48487880E-02	-1.19777002E-05	1.86556340E-09	-1.08475524E-13	-4.86189131E+04	-1.14905489E+02
c7h15o2-3	2.52622017E+01	3.46652053E-02	-1.18812593E-05	1.84687322E-09	-1.07234165E-13	-3.05051074E+04	-1.00675588E+02
c7h15o2h-3	2.77098165E+01	3.48487880E-02	-1.19777002E-05	1.86556340E-09	-1.08475524E-13	-4.86189131E+04	-1.14905489E+02
c7h14-1	2.10898039E+01	3.10607878E-02	-1.05644793E-05	1.63405780E-09	-9.45598219E-14	-1.83260065E+04	-8.44391108E+01
c7h14-2	2.06192047E+01	3.14852991E-02	-1.07162057E-05	1.65827662E-09	-9.59911785E-14	-1.96713162E+04	-8.22519387E+01
c7h14-3	2.06822750E+01	3.15388629E-02	-1.07571215E-05	1.66690260E-09	-9.65810393E-14	-1.96450604E+04	-8.25235002E+01
c7h13	2.06977799E+01	2.93585249E-02	-9.99754351E-06	1.54773305E-09	-8.96230815E-14	-1.23454647E+03	-8.35627043E+01
c7h15o2-4	2.52622017E+01	3.46652053E-02	-1.18812593E-05	1.84687322E-09	-1.07234165E-13	-3.05051074E+04	-1.01365070E+02
c7h15o-1	2.36489937E+01	3.38195865E-02	-1.15717686E-05	1.79692111E-09	-1.04265757E-13	-2.65280214E+04	-9.48882293E+01
c7h15o-2	2.43070968E+01	3.31267815E-02	-1.13034023E-05	1.75198875E-09	-1.01526943E-13	-2.88623481E+04	-9.87360860E+01
c7h15o-3	2.43070968E+01	3.31267815E-02	-1.13034023E-05	1.75198875E-09	-1.01526943E-13	-2.88623481E+04	-9.87360860E+01
c7h14ooh1-2	2.70028807E+01	3.22272216E-02	-1.09366516E-05	1.68977918E-09	-9.77321946E-14	-2.27229231E+04	-1.06332170E+02
c7h14ooh1-3	2.70028807E+01	3.22272216E-02	-1.09366516E-05	1.68977918E-09	-9.77321946E-14	-2.27229231E+04	-1.06332170E+02
c7h14ooh1-4	2.70028807E+01	3.22272216E-02	-1.09366516E-05	1.68977918E-09	-9.77321946E-14	-2.27229231E+04	-1.06332170E+02
c7h14ooh2-3	2.73843966E+01	3.17800796E-02	-1.07557689E-05	1.65881427E-09	-9.58200506E-14	-2.49404488E+04	-1.09739277E+02
c7h14ooh2-4	2.73843966E+01	3.17800796E-02	-1.07557689E-05	1.65881427E-09	-9.58200506E-14	-2.49404488E+04	-1.09739277E+02
c7h14ooh2-5	2.73843966E+01	3.17800796E-02	-1.07557689E-05	1.65881427E-09	-9.58200506E-14	-2.49404488E+04	-1.09739277E+02
c7h14ooh3-1	2.72931159E+01	3.27034748E-02	-1.12483701E-05	1.75282538E-09	-1.01955579E-13	-2.35554130E+04	-1.09813224E+02
c7h14ooh3-2	2.73843966E+01	3.17800796E-02	-1.07557689E-05	1.65881427E-09	-9.58200506E-14	-2.49404488E+04	-1.09739277E+02
c7h14ooh3-4	2.73843966E+01	3.17800796E-02	-1.07557689E-05	1.65881427E-09	-9.58200506E-14	-2.49404488E+04	-1.09739277E+02
c7h14ooh3-5	2.73843966E+01	3.17800796E-02	-1.07557689E-05	1.65881427E-09	-9.58200506E-14	-2.49404488E+04	-1.09739277E+02
c7h14ooh3-6	2.73843966E+01	3.17800796E-02	-1.07557689E-05	1.65881427E-09	-9.58200506E-14	-2.49404488E+04	-1.09739277E+02
c7h14ooh4-2	2.73843966E+01	3.17800796E-02	-1.07557689E-05	1.65881427E-09	-9.58200506E-14	-2.49404488E+04	-1.10428759E+02
c7h14ooh4-3	2.73843966E+01	3.17800796E-02	-1.07557689E-05	1.65881427E-09	-9.58200506E-14	-2.49404488E+04	-1.10428759E+02
c7h14o1-3	2.33840162E+01	3.26747680E-02	-1.12496957E-05	1.75424237E-09	-1.02088356E-13	-3.35320676E+04	-9.93857329E+01
c7h14o1-4	2.31118905E+01	3.33659362E-02	-1.14966228E-05	1.79372703E-09	-1.04427245E-13	-4.38631326E+04	-9.93440338E+01

表 16.3

化学種	tdh_1	tdh_2	tdh_3	tdh_4	tdh_5	tdh_6	tdh_7
c7h14o2-4	2.39263696E+01	3.19760128E-02	-1.09563797E-05	1.70304471E-09	-9.88892529E-14	-3.57770124E+04	-1.02450761E+02
c7h14o2-5	2.36576563E+01	3.26661812E-02	-1.12033725E-05	1.74258165E-09	-1.01232864E-13	-4.61139813E+04	-1.02440732E+02
c7h14o3-5	2.39263696E+01	3.19760128E-02	-1.09563797E-05	1.70304471E-09	-9.88892529E-14	-3.57770124E+04	-1.02450761E+02
c7h14ooh1-3o2	3.23937788E+01	3.33911097E-02	-1.15672104E-05	1.81146023E-09	-1.05739941E-13	-4.36321048E+04	-1.32597311E+02
c7h14ooh2-3o2	3.27436761E+01	3.30060143E-02	-1.14146253E-05	1.78556283E-09	-1.04147126E-13	-4.58332974E+04	-1.35817581E+02
c7h14ooh2-4o2	3.27436761E+01	3.30060143E-02	-1.14146253E-05	1.78556283E-09	-1.04147126E-13	-4.58332974E+04	-1.35817581E+02
c7h14ooh2-5o2	3.27436761E+01	3.30060143E-02	-1.14146253E-05	1.78556283E-09	-1.04147126E-13	-4.58332974E+04	-1.35817581E+02
c7h14ooh3-1o2	3.23937788E+01	3.33911097E-02	-1.15672104E-05	1.81146023E-09	-1.05739941E-13	-4.36321048E+04	-1.32597311E+02
c7h14ooh3-2o2	3.27436761E+01	3.30060143E-02	-1.14146253E-05	1.78556283E-09	-1.04147126E-13	-4.58332974E+04	-1.35817581E+02
c7h14ooh3-4o2	3.27436761E+01	3.30060143E-02	-1.14146253E-05	1.78556283E-09	-1.04147126E-13	-4.58332974E+04	-1.35817581E+02
c7h14ooh3-5o2	3.27436761E+01	3.30060143E-02	-1.14146253E-05	1.78556283E-09	-1.04147126E-13	-4.58332974E+04	-1.35817581E+02
c7h14ooh3-6o2	3.27436761E+01	3.30060143E-02	-1.14146253E-05	1.78556283E-09	-1.04147126E-13	-4.58332974E+04	-1.35817581E+02
c7h14ooh4-2o2	3.27436761E+01	3.30060143E-02	-1.14146253E-05	1.78556283E-09	-1.04147126E-13	-4.58332974E+04	-1.35817581E+02
c7h14ooh4-3o2	3.27436761E+01	3.30060143E-02	-1.14146253E-05	1.78556283E-09	-1.04147126E-13	-4.58332974E+04	-1.35817581E+02
nc7ket13	2.85888117E+01	3.15562212E-02	-1.08440166E-05	1.68894899E-09	-9.82098038E-14	-5.81497451E+04	-1.15032511E+02
nc7ket23	2.94068890E+01	3.11132474E-02	-1.07475750E-05	1.67981822E-09	-9.79195344E-14	-6.04319021E+04	-1.21313991E+02
nc7ket24	2.82068850E+01	3.20833500E-02	-1.10699870E-05	1.72876170E-09	-1.00709919E-13	-6.18824724E+04	-1.13686529E+02
nc7ket25	2.82068850E+01	3.20833500E-02	-1.10699870E-05	1.72876170E-09	-1.00709919E-13	-6.18824724E+04	-1.13686529E+02
nc7ket31	2.79110835E+01	3.22465428E-02	-1.11080316E-05	1.73289508E-09	-1.00880504E-13	-5.97622360E+04	-1.10365114E+02
nc7ket32	2.93483957E+01	3.11049077E-02	-1.07311701E-05	1.67579269E-09	-9.76240849E-14	-6.04805074E+04	-1.20609073E+02
nc7ket34	2.93483957E+01	3.11049077E-02	-1.07311701E-05	1.67579269E-09	-9.76240849E-14	-6.04805074E+04	-1.20609073E+02
nc7ket35	2.82068850E+01	3.20833500E-02	-1.10699870E-05	1.72876170E-09	-1.00709919E-13	-6.18824724E+04	-1.13686529E+02
nc7ket36	2.82068850E+01	3.20833500E-02	-1.10699870E-05	1.72876170E-09	-1.00709919E-13	-6.18824724E+04	-1.13686529E+02
nc7ket42	2.82722993E+01	3.18336613E-02	-1.09420284E-05	1.70451864E-09	-9.91282349E-14	-6.19707814E+04	-1.13656794E+02
nc7ket43	2.93483957E+01	3.11049077E-02	-1.07311701E-05	1.67579269E-09	-9.76240849E-14	-6.04805074E+04	-1.20609073E+02
nc4h9coch2	1.98575871E+01	2.52406370E-02	-8.72522623E-06	1.36422047E-09	-7.95374883E-14	-2.20531958E+04	-7.71140999E+01
c4h7ooh1-4	1.66978343E+01	1.80578399E-02	-6.22476839E-06	9.71479434E-10	-5.65686551E-14	-1.85344720E+04	-5.76609547E+01
c5h9ooh1-4	2.02179950E+01	2.21511744E-02	-7.60711244E-06	1.18420679E-09	-6.88331594E-14	-2.44297406E+04	-7.58287543E+01
c4h7o1-4	1.31417783E+01	1.64166051E-02	-5.56949199E-06	8.60114769E-10	-4.97230006E-14	1.67967537E+03	-4.16160087E+01
c5h9o1-4	1.66809382E+01	2.07591828E-02	-7.09289768E-06	1.10031617E-09	-6.37992567E-14	-4.67568455E+03	-5.95056483E+01

## 4. 数値計算法の工夫

### 4.1 数値計算における問題点

数値計算において最も注意を要するのは、時間刻み  $\Delta t$  (s) の設定である。できる限り正確な計算をしようとする場合は、時間刻みを小さくしていけばよいというのが、一般的な解釈である。しかし、時間刻みを小さくしていくと、計算ステップが増えるため、計算時間が長くなる。特に、本研究のように、素反応から燃焼反応全般を計算していくというような場合、計算手順が極めて多いので、計算時間の問題は非常に重要である。そのため、ただ単純に時間刻みを小さくしていくという方法では、適正な計算は困難である。燃焼のシミュレーションの場合には、本研究の場合の Euler 法以外に、ヤコビアンを使用する方法などが用いられる場合もある。ただし、本研究では、燃焼現象に関する計算の基本を確立するという位置づけのものなので、あくまで Euler 法を用いた計算方法を基本に、様々な計算の工夫をしていくことにする。

時間刻みを大きくしていくと、誤差が増えることはもちろんのこと、その前に計算値が暴走して、計算不能になってしまう。最も致命的な原因としては、次のようなものが考えられる。本研究では、関連物質  $Y_i$  の密度  $N_i$  (mol/m<sup>3</sup>) と系の温度  $T$  (K) の、時間  $t$  (s) についての関数、 $\dot{N}_i(t)$  と  $T(t)$  を数値計算で求める。そのために、

$$N_i(t + \Delta t) = N_i(t) + \dot{N}_i(t) \times \Delta t$$

$$T(t + \Delta t) = T(t) + \dot{T}(t) \times \Delta t$$

という計算を繰り返すわけである。ところが、時間刻みが大き過ぎると、計算の途中で、 $N_i(t + \Delta t) < 0$  となる場合が発生してしまうことがある。物質の量がマイナスになるということなど論外であり、一般的に考えればどうしようもない計算ミスに見えるかもしれない。しかし、中間生成物は、極微量だけ生成しすぐに消滅するというものも少なくないので、普通に計算すれば、このような現象は意外と起こりやすいのである。いったん、 $N_i(t + \Delta t) < 0$  などということが起こると、まず、反応速度や温度の計算の時点で異常事態に陥ることは明らかであろう。そのためには、反応速度や温度を計算する際に、 $N_i(t) < 0$  であれば、 $N_i(t) = 0$  として計算すればよいのだが、それでも、このような現象が繰り返されれば、計算上、異常が生じるのは明らかである。

当然のことながら、 $N_i(t + \Delta t) < 0$  とならないようにするためには、時間刻みを小さくしていけばよい。しかし、時間刻みを小さくしていけば、計算に必要なステップが増えるので、計算時間が増大し過ぎてしまう。このように、どうにもならないことのようにも見え



るが、実は、 $N_i(t + \Delta t) < 0$  となりがちなのは、反応が急激に起こるごく一部の過程なので、その部分だけ時間刻みを小さくし、それ以外の部分で比較的大きな時間刻みを設定すれば、ある程度の正確さを保ちながら計算時間の短縮が可能なのである。そこで、状況に応じて時間刻みをうまく変えていくことも重要な課題である。

その他、計算時間の短縮のために、必要のない部分の計算を避けるということも行う。そのために、計算結果として出るはずのある数値のなかで、あらかじめ予想できるものは最初から数値を与えることによって、その部分の計算を省略する。

## 4.2 時間刻みの設定方法

効率良く計算するためには、時間刻みをステップによって変える必要がある。まず第一に、反応が急激に進むところでは計算誤差が出やすいので時間刻みを小さくする必要がある。さらに反応が急激に進む過程では温度変化が大きいということが予想される。そこで、各ステップごとに温度変化が一定になるように、ある時間刻み  $\Delta t_1$  (s) を設定する。

### [手順 1]

ステップごとの温度変化を  $\Delta t_{st}$  とおくと、

$$\Delta t_1 = \frac{\Delta t_{st}}{\dot{T}}$$

となる。

ただし、 $\Delta t = \Delta t_1$  においても、時間刻みが大き過ぎて、計算の途中で  $N_i(t + \Delta t) < 0$  となる現象を防ぎきることはできない。先にも述べたように、反応速度や温度の計算の際に  $N_i(t) < 0$  であれば  $N_i(t) = 0$  として計算する対処法もあるが、これでは十分な解決方法にならないので、まずは、 $N_i(t + \Delta t) < 0$  などとはならないように時間刻みを設定することが重要である。だが、まずその前に、次のような処理をしておく必要がある。

質量保存の法則から、系の密度  $\rho$  (kg/m<sup>3</sup>) は、

$$\rho = \sum_{i=1}^{ns} (s m_i \times N_i \times 10^{-3}) = \rho_0$$

で一定になるはずである。しかし、数値計算では誤差により、各ステップで増える物質全体の質量密度変化率  $\rho_{up}$  (kg/m<sup>3</sup>) と、減る物質全体の質量密度変化率  $\rho_{dw}$  (kg/m<sup>3</sup>) の値が一致せず、 $\rho$  が一定ではなくなってしまうことがある。そこで、次のように補正する。

## [手順 2]

$$\rho_{up} = \sum_{i=1}^{ns} (\dot{N}_{up_i}(t) \times sm_i)$$

ただし、 $\dot{N}_i(t) \geq 0$  のとき  $\dot{N}_{up_i}(t) = \dot{N}_i(t)$ 、 $\dot{N}_i(t) < 0$  のとき  $\dot{N}_{up_i}(t) = 0$

$$\rho_{dw} = \sum_{i=1}^{ns} (\dot{N}_{dw_i}(t) \times sm_i)$$

ただし、 $\dot{N}_i(t) \geq 0$  のとき  $\dot{N}_{dw_i}(t) = 0$ 、 $\dot{N}_i(t) < 0$  のとき  $\dot{N}_{dw_i}(t) = -\dot{N}_i(t)$

と計算する。ここで、

$$\Delta t_{up1} = \Delta t1 \times \frac{2 \times \rho_{dw}}{\rho_{up} + \rho_{dw}}$$

$$\Delta t_{dw1} = \Delta t1 \times \frac{2 \times \rho_{up}}{\rho_{up} + \rho_{dw}}$$

$$N_i(t + \Delta t) = N_i(t) + \dot{N}_i(t) \times \Delta t$$

ただし、 $\dot{N}_i(t) \geq 0$  のとき  $\Delta t = \Delta t_{up1}$ 、 $\dot{N}_i(t) < 0$  のとき  $\Delta t = \Delta t_{dw1}$

このような計算を行うことで、増える物質と減る物質のバランスを保つことができる。  
次に  $N_i(t + \Delta t) < 0$  とならないための処理をする。

## [手順 3]

$N_i(t + \Delta t) < 0$  とならないようにするために、時間刻みは  $\Delta t_{up}$  (s) と  $\Delta t_{dw}$  (s) を用いて以下のように計算する。

$$N_i(t + \Delta t) = N_i(t) + \dot{N}_i(t) \times \Delta t$$

ただし、 $\dot{N}_i(t) \geq 0$  のとき  $\Delta t = \Delta t_{up}$ 、 $\dot{N}_i(t) < 0$  のとき  $\Delta t = \Delta t_{dw}$

また、

$$\Delta t_{up} = dtset \times \Delta t_{up1}$$

$$\Delta t_{dw} = dtset \times \Delta t_{dw1}$$

ここで、 $dtset$  の求め方は次のようになる。関連物質  $Y_i$  ( $i=1,2,\dots,ns$ ) について、

$$N_i(t) + \dot{N}_i(t) \times \Delta t \geq yset \text{ となるものは、}$$

$$dtset1 = 1$$

$N_i(t) + \dot{N}_i(t) \times \Delta t < yset$  となるものは、

$$dtset1 = \frac{N_i(t)}{-\dot{N}_i(t) \times \Delta t}$$

となる  $dtset1$  という値を求める。その中で、最も小さいものについて、

$$dtset = dtset1$$

とする。前手順までの時間刻み設定で  $N_i(t + \Delta t) < yset$  とならない場合には、

$$dtset = 1$$

である。なお、当初の目的通り、 $N_i(t + \Delta t) < 0$  とならないようにするためには、 $yset = 0$  とおく。ただし、どうしても計算ステップが多くなり過ぎる場合に、確実に  $N_i(t + \Delta t) < 0$  となるような時間刻みを設定するわけにはいかないこともある。そのため、 $yset$  (mol/m<sup>3</sup>) という表現を用いた。これについては後で詳しく述べる。

このようにして、理論的には  $N_i(t + \Delta t) < 0$  となる現象を防ぐことができるが、実際には計算誤差により  $N_i(t + \Delta t) < 0$  となることもある。ただし、 $N_i(t + \Delta t) > -ysetrlt$  で、 $ysetrlt$  の値は極微量なので、この結果自体に計算上の問題はない。ただし、反応速度や温度の計算の際に  $N_i(t + \Delta t) < 0$  となるものがあると困ったことになる。処理方法としては、次のような 2 つの方法が考えられる。

### [処理方法 1]

計算を続けていくと、 $N_i(t + \Delta t) < 0$  となる現象が発生するが、その場合に直接的に、

$$N_i(t + \Delta t) = 0$$

とする。そして、次のステップでは、全ての計算手順で、このように置き換えた値を使用する。この場合、1 回  $N_i(t + \Delta t) < 0$  を  $N_i(t + \Delta t) = 0$  と置き換えるごとに、

$$-sm_i \times N_i(t + \Delta t) \text{ (単位 kg/m}^3\text{)}$$

だけ系全体の密度が増えることになる。手順 3 で  $yset = 0$  とおいた場合には、次の処理方法 2 とほぼ同じ結果になり、全く問題ないが、 $yset < 0$  の場合には、次第に系全体の密度が増大していき、計算に深刻な問題が生じる危険性がある。

### [処理方法 2]

計算を続けていくと、 $N_i(t + \Delta t) < 0$  となる現象が発生する。ただし、この方法では、次のステップで、反応速度や温度の計算では  $N_i(t) = 0$  とおいて計算するが、関連物質の質量密度の計算に限り  $N_i(t) < 0$  のまま普通に、

$$N_i(t + \Delta t) = N_i(t) + \dot{N}_i(t) \times \Delta t$$

と計算する。この方法では、 $y_{set} < 0$ であっても、系の密度は一定に保たれ、一度  $N_i(t) < 0$  という値になった物質が計算上、生成しにくいため、計算に深刻な問題が生じる危険性は少ない。しかし、あくまで  $y_{set} < 0$  とおいた以上、現実とは違うプロセスで計算が進行することになるので、 $y_{set} < 0$  とするにはかなりの注意が必要である。

このように、処理方法 1 にしても、処理方法 2 にしても、問題は非常に多い。だが、両者を比較すると次のように異なる。処理方法 1 を用いると、 $N_i(t + \Delta t) < 0$  が単純に  $N_i(t + \Delta t) = 0$  と置き換えられるため、一度  $N_i(t) < 0$  となった物質がすぐに生成し、それに伴って、特定の物質が爆発的に生成するということが、計算上、発生する。そうすると、一気に系の密度が数倍あるいは数十倍に増え、計算が暴走することにつながる。これほどまでに計算上の異常がある場合、うまく調整してスムーズに計算を進めるのは容易ではない。その一方で、処理方法 2 を用いれば、系の密度がいずれの場合にも一定に保たれるので、計算誤差が蓄積する場合にも、関連物質については構成比率が問題になるだけで、計算結果にオーダーレベルの狂いが生じることはない。限定的な使用では、計算誤差の発生がこの程度なら、調整によりスムーズに計算を進めることは、それほど困難ではない。従って、処理方法 1 より、処理方法 2 を用いる方が得策であると考えられるので、本研究では処理方法 2 を用いる。

## 4.3 実際の計算における時間刻みの現状

計算において、時間刻みの一番の決定要因は、手順 3 による場合が多い。要するに、どれだけ  $N_i(t) + \dot{N}_i(t) \times \Delta t < 0$  となり易いかが、時間刻みの決定要因となることが多いということである。また、手順 1、手順 2、手順 3 を利用して、時間刻みを決定した場合、それでもなおかつ計算ステップ、計算ステップがあまりに多くて計算時間が長くなりすぎることもある。正確な計算を行うためには、常に  $N_i(t) < 0$  というような状況は避けたいところであるが、やむをえない場合に限り、次のような手段を用いる。

まず、時間刻みについての一番の決定要因である、手順 3 で  $y_{set} < 0$  とすれば時間刻みは大きくなる。そして、 $y_{set}$  をどんどん小さくしていけば時間刻みは大きくなる。ただし、その場合、計算誤差もどんどん拡大してしまう。そのため、 $y_{set} < 0$  と設定する場合にはそれなりの対処方法を考えなくてはならない場合が多い。

手順 3 で  $y_{set} < 0$  とした場合、次のように問題が発生する。まず最初に、最も誤差が生

じやすいのは温度である。なぜなら、関連物質の中に、単位重量あたりのエンタルピーが非常に大きいものが含まれているので、そのような物質の量についてはわずかに違うだけで、系の温度が大幅に違ってきてしまうからである。そうすると今度は、温度が大幅に違うので、各物質の平衡点に変化が生じ、各物質の量が再び変わってしまう。そして、不正な原因で増えたり減ったりした物質の中に単位重量あたりのエンタルピーが非常に大きいものが含まれていれば、またまた、温度に狂いが生じるという具合に、悪循環が起こる。このようにして最終的には、どうしてもなく現実と違った結果が出てしまうのである。実際に  $y_{set} < 0$  とおいた場合、 $y_{set} = 0$  とおいた場合と比べて、温度が大幅に高い計算結果になっている。

ここで、対処方法として、次のようなことを行う。 $y_{set} < 0$  とおいた場合、計算に問題が生じやすいのは温度であるから、温度の計算の際には  $y_{set} = 0$  とし、温度の計算が終了してから、強制的に温度を定めた状態で  $y_{set} < 0$  とすればよい。このようにする理由は、燃烧反応により温度が上昇してから系の組成が平衡に達するまでの計算に時間がかかるからである。この場合、平衡に達するまでの間にも、解離や再結合の反応による温度を計算しなくてはならないようにも見えるが、実際の燃烧反応では点火後の温度は周囲の環境に依存しているため、あらかじめ温度を定めた状態で計算しても問題ないのである。

実際の計算の中で、 $y_{set}$  の値をどのように設定したのかについては、次の結果の項目で詳しく説明する。

## 5. 計算結果

### 5.1 概要

「3. 計算に使用するデータ」の項目でも述べたように、本研究では、燃焼反応について、メタン、アセチレン、メタノール、プロパンの素反応モデル、正ブタンの素反応モデル、正ヘプタンの素反応モデル 2 種類の、計 4 種類の素反応モデルを使用している。計算結果としては、時間を横軸に温度を縦軸にとった、化学反応(自発点火)による温度変化を示したグラフと、時間を横軸に縦軸には反応に関連する物質のモル分率あるいは  $1\text{m}^3$  あたりのモル数をとった関連物質の生成量を示したグラフを用意した。ここでは、それらのグラフを示すとともに、そこから読み取れる事柄について説明していくことにする。なお、集計の都合上、計算に使用した素反応モデルごとに説明していく。また、メタン、アセチレン、メタノール、プロパンの素反応モデルを使用して得られた計算結果を計算結果 1、正ブタンの素反応モデルを使用して得られた計算結果を計算結果 2、正ヘプタンの素反応モデル 1 (化学種 29、素反応 52)を使用して得られた計算結果を計算結果 3、正ヘプタンの素反応モデル 2 (化学種 160、素反応 770)を使用して得られた計算結果を計算結果 4 とする。計算条件について今後、「4.2 時間刻みの設定方法」の項目の中の[手順 1]で、ステップごとの温度変化  $\Delta t_{st}$  (K)は  $dt_{st}$  (K)、[手順 3]で  $y_{set}$  については負の値なので、 $-y_{set}$  を  $Y_{set}$  と書くことにする。また、計算ステップ(繰り返し計算の回数)は  $i_{out}$  と書くことにする。

### 5.2 計算結果 1

ここでは全ての計算について、 $dt_{st} = 1.0$  (K)、 $Y_{set} = 0$  とおいて計算した。初期条件で、反応開始時の圧力は全て  $P_0 = 1.013 \times 10^5$  (Pa) (大気圧、1 気圧)である。グラフは P.71 ~ P.80 に掲載したのでそれを参照のこと。窒素原子 N に関する反応も扱った素反応モデルを使用して計算しているので、 $\text{NO}_x$  の生成も結果から読み取ることができる。

#### [メタンの燃焼反応]

1 つ目の計算結果は、当量比 1、初期温度 973 K (700 度)の条件における、メタンの空気中の自発点火について数値計算を行った結果である。実際に計算では、 $T_0 = 973$  (K)、 $\text{CH}_4 : fa = 0.103$  (mol)、 $\text{O}_2 : fa = 0.206$  (mol)、 $\text{N}_2 : fa = 0.774$  (mol)、その他の物質は  $fa = 0$  (mol)

で計算した。また、 $i_{out} = 5.0 \times 10^7$  まで計算した。計算結果は図 1.1 ~ 1.4 に示す。図 1.1 は時間と温度の関係を示すグラフで、このグラフからは自発点火が非常に急激な反応であることが読み取れる。そして点火遅れ(自発点火までに必要な時間)が 7.1 秒、断熱火炎温度が 2759 K (2486 度)であることが分かる。図 1.2 は時間と関連物質の生成量の関係を示すグラフであり、縦軸はモル分率 = (関連物質のモル数) / (系全体のモル数) である。このグラフから、やはり急激な反応が起こっていることはもちろん、常識的に推測できるように燃焼の結果として水と二酸化炭素が生成していることが分かる。ただし、この場合は比較的多くの一酸化炭素が生成していることから、完全燃焼とは言い難い状態であることも分かる。図 1.3 , 1.4 は図 1.2 と同様、時間と関連物質の生成量の関係を示すグラフであるが、生成量が少ない物質についても状況が分かるように縦軸の目盛りを変えたものである。これらのグラフから、窒素酸化物NOが生成していることや、一酸化炭素が先に生成し、それから二酸化炭素が生成していることが分かる。また、急激な反応に先立ち、いくつもの中間生成物が生成していることや、反応終了後も、高温のためか、燃焼反応の中間生成物である物質が残っていることが分かる。

2 つ目の計算結果は、当量比 0.1、初期温度 973 K (700 度)の条件における、メタンの空気中での自発点火について数値計算を行った結果である。希薄燃焼の条件である。実際に計算では、 $T_0 = 973$  (K)、 $CH_4 : fa = 0.0103$  (mol)、 $O_2 : fa = 0.206$  (mol)、 $N_2 : fa = 0.774$  (mol)、その他の物質は  $fa = 0$  (mol) で計算した。また、 $i_{out} = 5.0 \times 10^7$  まで計算した。計算結果は図 2.1 ~ 2.4 に示す。グラフの見方は当量比 1 の場合と同じだが、窒素  $N_2$  のモル分率は省略してある。このグラフから、点火遅れが 5.7 秒、断熱火炎温度が 1295 K (1022 度)であることが分かる。当量比 1 の場合と比べて、反応後の温度が低いことや、反応後には水と二酸化炭素のみが生成しており、一酸化炭素はほとんど残っていないという違いがある。この場合は、ほぼ完全燃焼である。ただし、一酸化炭素が先に生成し、それから二酸化炭素が生成していることについては当量比 1 の場合と同様で、急激な反応の前には当量比 1 の場合と同じような中間生成物が生成しており、反応機構自体に大きな差異はないようである。

## [アセチレンの燃焼反応]

ここで掲載したものは、当量比 1、初期温度 973 K (700 度)の条件における、アセチレンの空気中での自発点火について数値計算を行った結果である。実際に計算では、 $T_0 = 973$  (K)、 $C_2H_2 : fa = 0.082$  (mol)、 $O_2 : fa = 0.206$  (mol)、 $N_2 : fa = 0.774$  (mol)、その他の物質は  $fa = 0$  (mol) で計算した。また、 $i_{out} = 5.0 \times 10^7$  まで計算した。計算結果は図 3.1 ~ 3.4 に示す。グラフの見方はこれまでと同様である。このグラフから、点火遅れが 0.0055 秒、断熱火炎温度が 3010 K (2737 度)であることが分かる。メタンの場合と同様、反応の結果、水と二酸化炭素が生成しているが、一酸化炭素が非常に多く生成しているのが特徴である。かなりの

不完全燃焼である。その他、高温なので燃焼反応の中間生成物である物質が反応後にも残っていることや、急激な反応の前に、様々な中間生成物が生成しているが、メタンの場合とは少々種類が異なることが読み取れる。

### [メタノールの燃焼反応]

ここで掲載したものは、当量比 1、初期温度 973 K (700 度)の条件における、メタノールの空気中での自発点火について数値計算を行った結果である。実際に計算では、 $T_0 = 973$  (K)、 $\text{CH}_3\text{OH} : fa = 0.137$  (mol)、 $\text{O}_2 : fa = 0.206$  (mol)、 $\text{N}_2 : fa = 0.774$  (mol)、その他の物質は  $fa = 0$  (mol) で計算した。また、 $i_{out} = 3.5 \times 10^7$  まで計算した。計算結果は図 4.1 ~ 4.4 に示す。グラフの見方はこれまでと同様である。このグラフから、点火遅れが 0.22 秒、断熱火炎温度が 2733K (2460 度)であることが分かる。やはり、総括反応式から想像できるような物質が反応後に生成していることが分かる。ただし、当量比 1 の場合は、他の物質と同様に、かなりの量の一酸化炭素が最終的に残り、窒素酸化物NOも比較的多く生成するようである。

### [プロパンの燃焼反応]

ここで掲載したものは、当量比 1、初期温度 973 K (700 度)の条件における、プロパンの空気中での自発点火について数値計算を行った結果である。実際に計算では、 $T_0 = 973$  (K)、 $\text{C}_3\text{H}_8 : fa = 0.0412$  (mol)、 $\text{O}_2 : fa = 0.206$  (mol)、 $\text{N}_2 : fa = 0.774$  (mol)、その他の物質は  $fa = 0$  (mol) で計算した。また、 $i_{out} = 7.5 \times 10^8$  まで計算した。計算結果は図 5.1 ~ 5.4 に示す。グラフの見方はこれまでとほぼ同様であるが、ここでは図 5.2 ~ 5.4 について縦軸がモル分率ではなく  $1\text{m}^3$  あたりのモル数である。また、図 5.4 は見やすくするために、時間軸も目盛りを変えてある。このグラフから、点火遅れが 0.21 秒、断熱火炎温度が 3235K (2962 度)であることが分かる。やはり、総括反応式から想像できるような物質が反応後に生成していることが分かる。ただし、当量比 1 の場合は、他の物質と同様に、かなりの量の一酸化炭素が最終的に残り、窒素酸化物NOも比較的多く生成するようである。

当量比 1、反応開始時の温度 973K (700 度)、圧力 1 気圧の条件における、空気 メタンの



混合気の燃焼反応(自発点火)について数値計算を行った結果を図 1.1 ~ 図 1.4 に示す

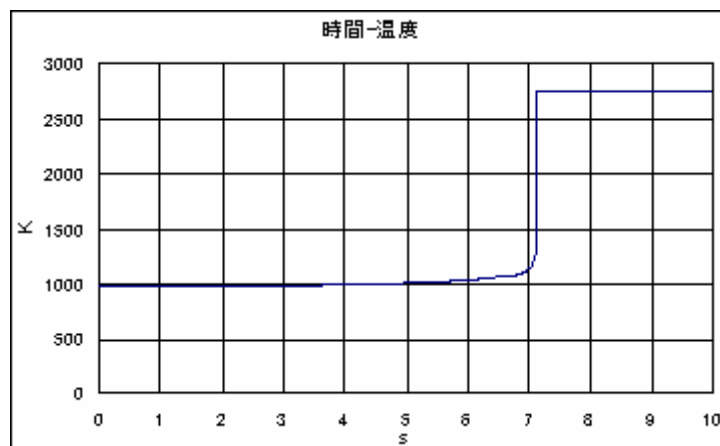


図 1.1

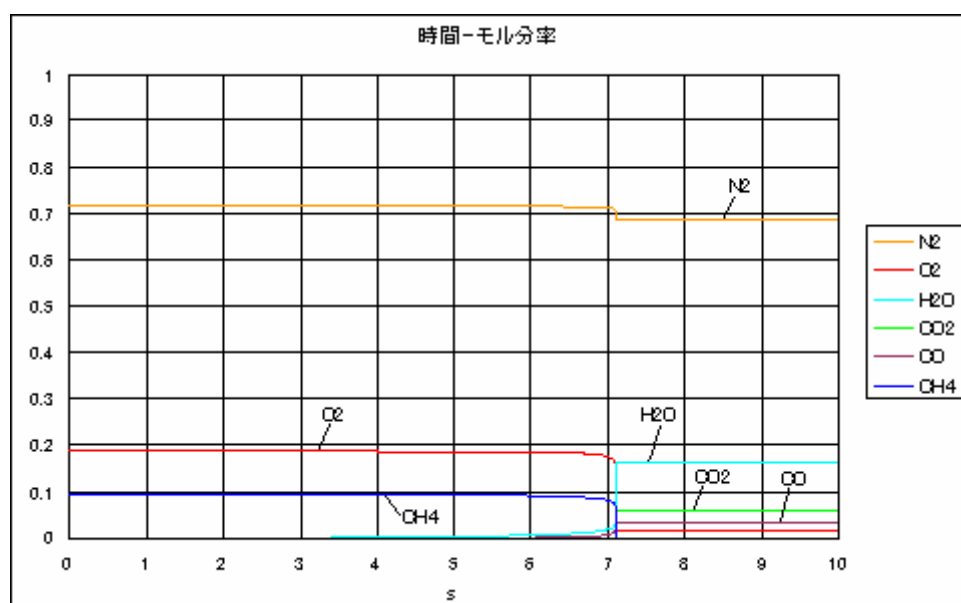


図 1.2

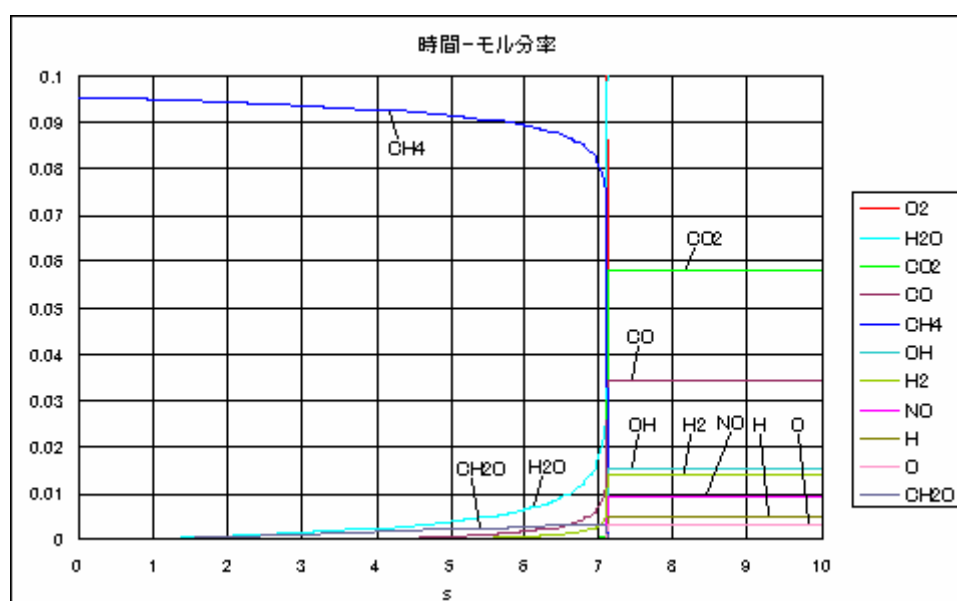


図 1.3

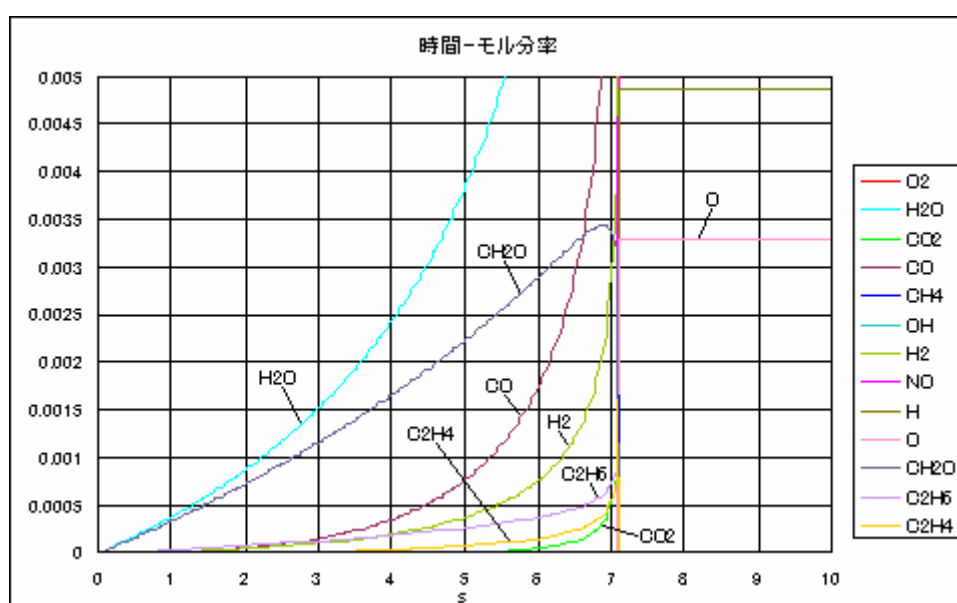


図 1.4

当量比 0.1、反応開始時の温度 973K (700 度)、圧力 1 気圧の条件における、空気 メタンの混合気の燃焼反応(自発点火)について数値計算を行った結果を図 2.1 ~ 図 2.4 に示す

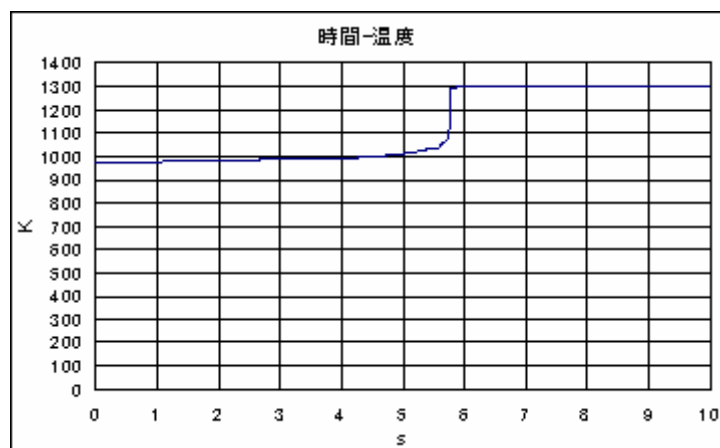


図 2.1

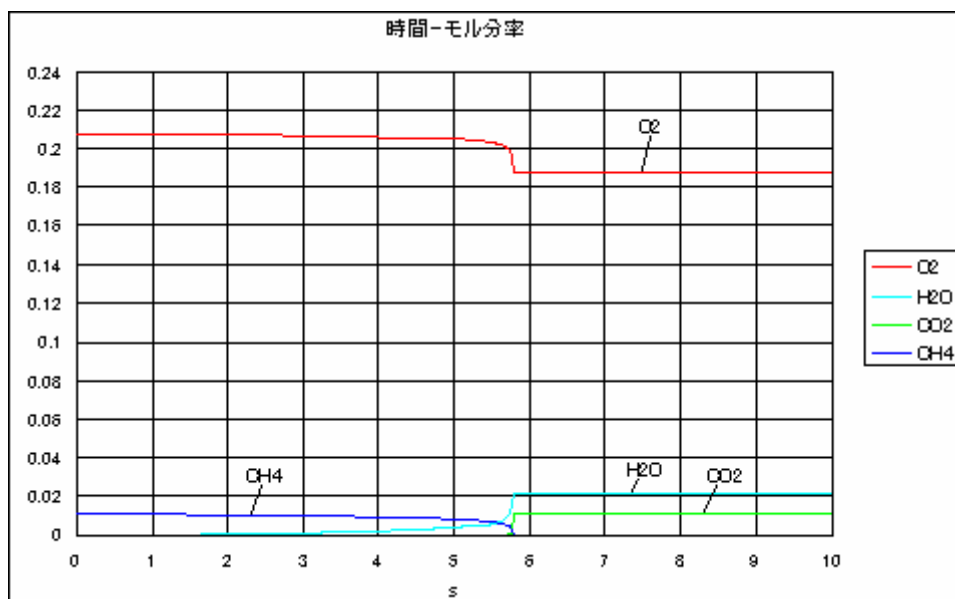


図 2.2

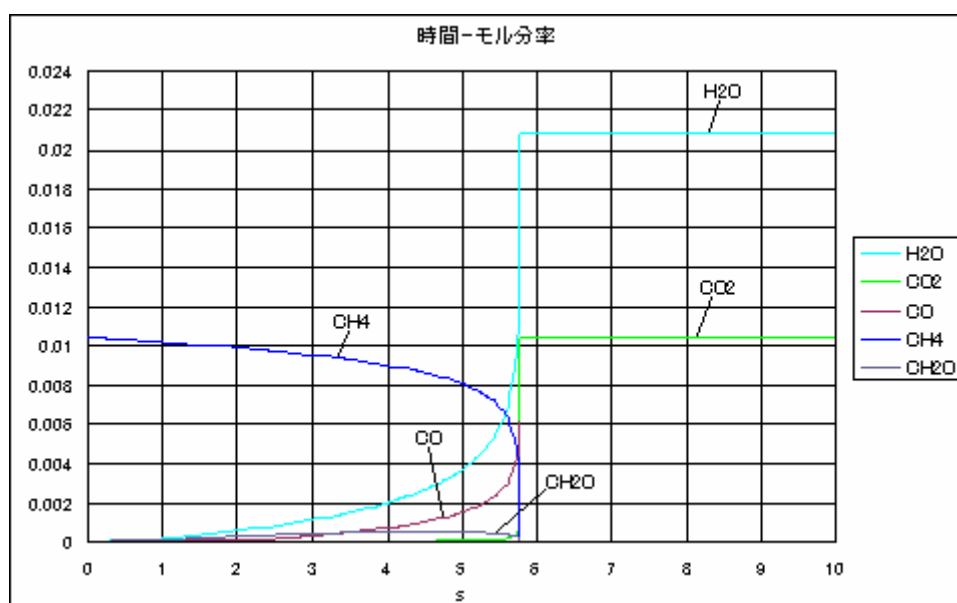


図 2.3

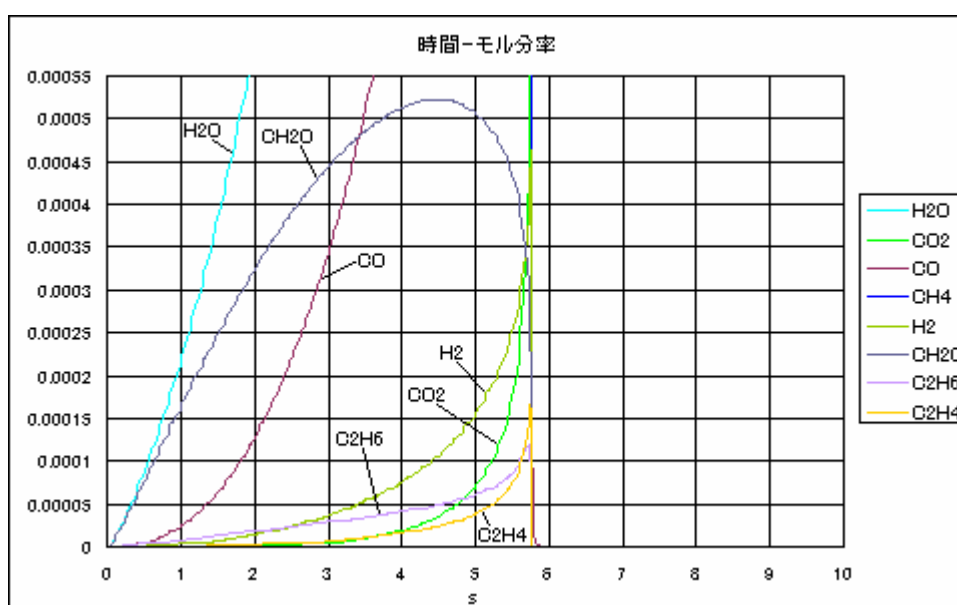


図 2.4

当量比 1、反応開始時の温度 973K (700 度)、圧力 1 気圧の条件における、空気 アセチレンの混合気の燃焼反応(自発点火)について数値計算を行った結果を図 3.1 ~ 図 3.4 に示す

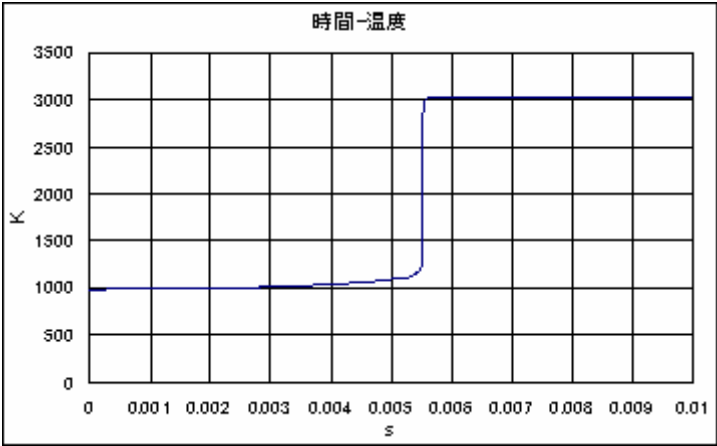


図 3.1

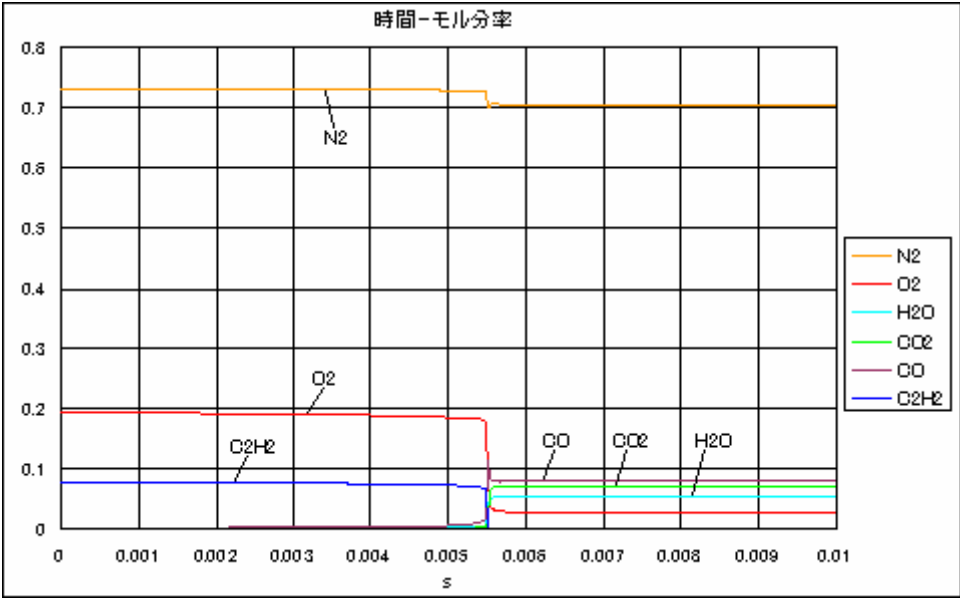


図 3.2

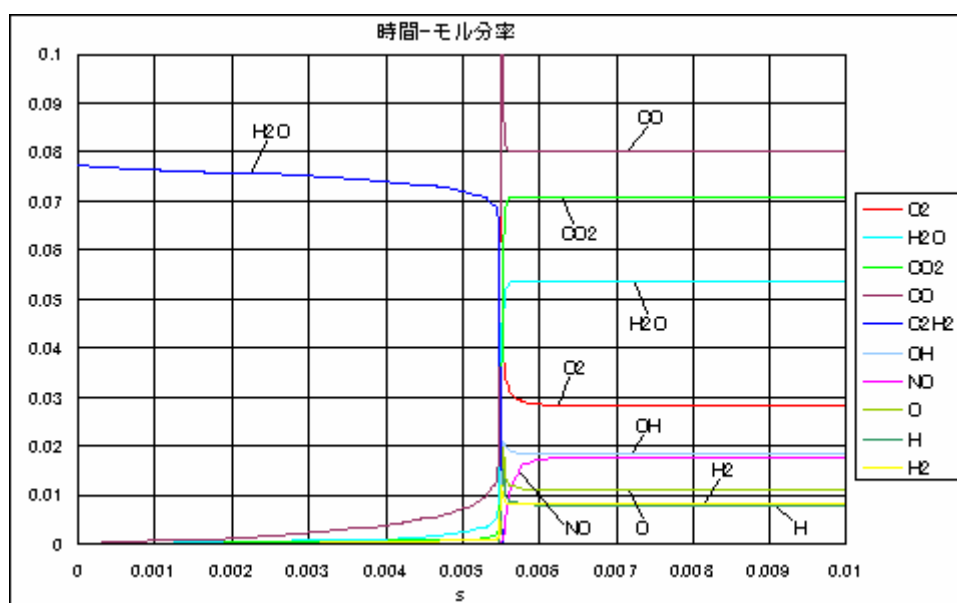


図 3.3

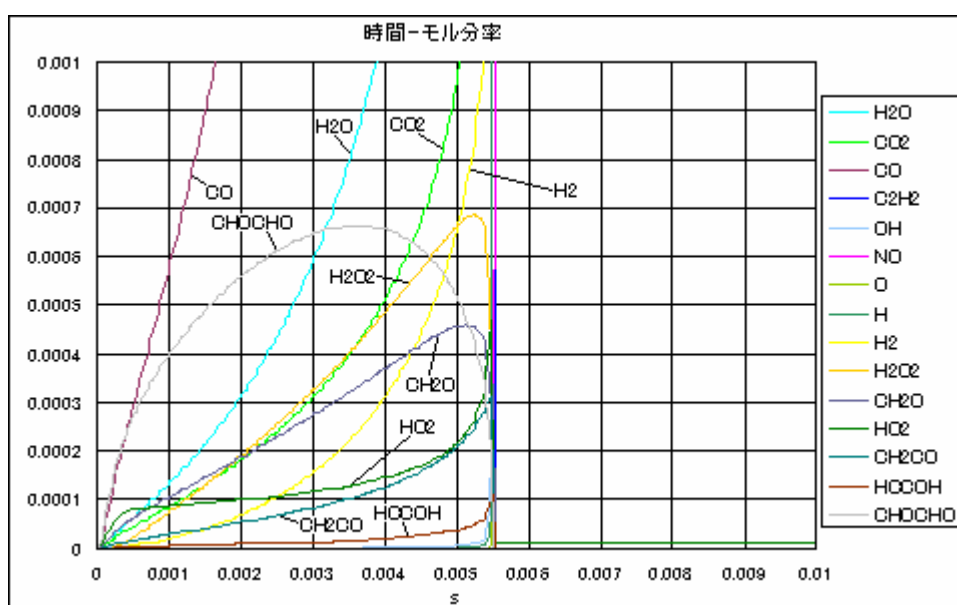


図 3.4

当量比 1、反応開始時の温度 973K (700 度)、圧力 1 気圧の条件における、空気 メタノールの混合気の燃焼反応(自発点火)について数値計算を行った結果を図 4.1 ~ 図 4.4 に示す

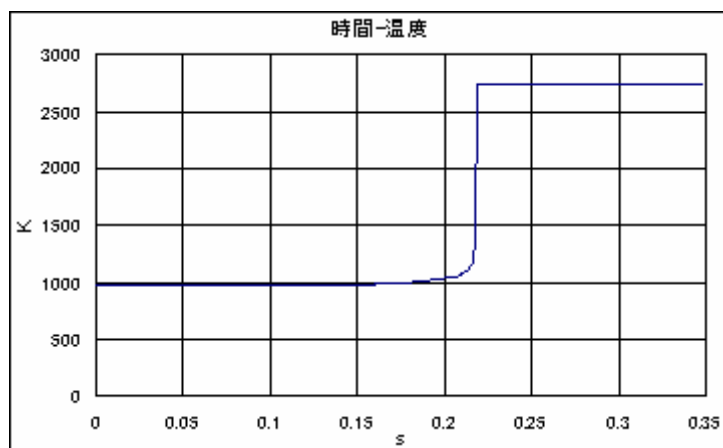


図 4.1

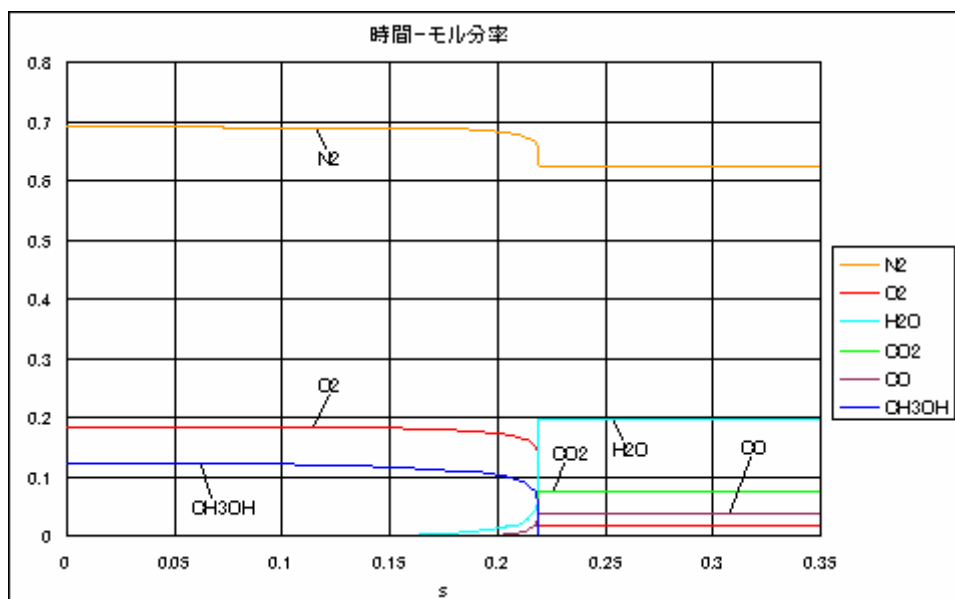


図 4.2

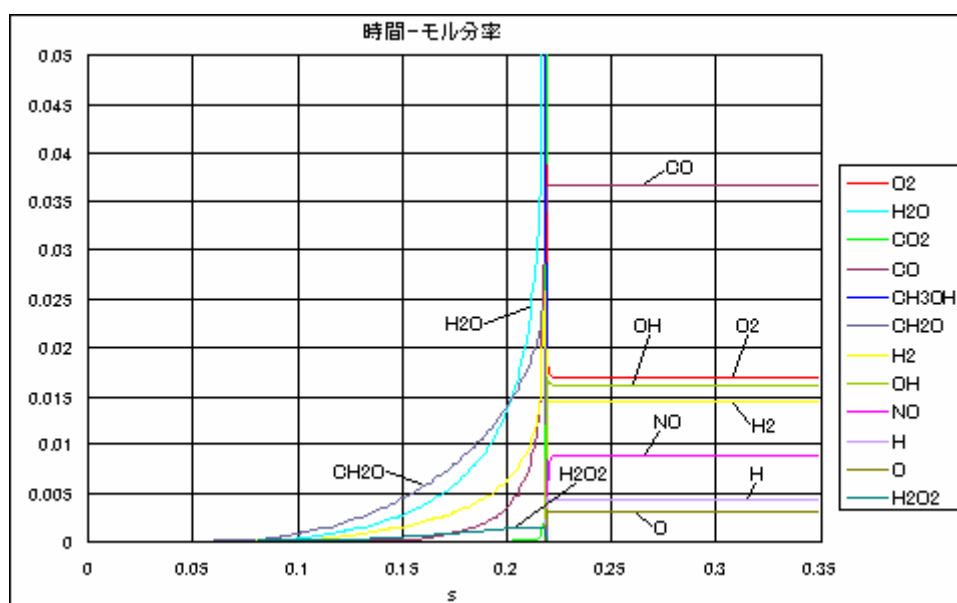


図 4.3

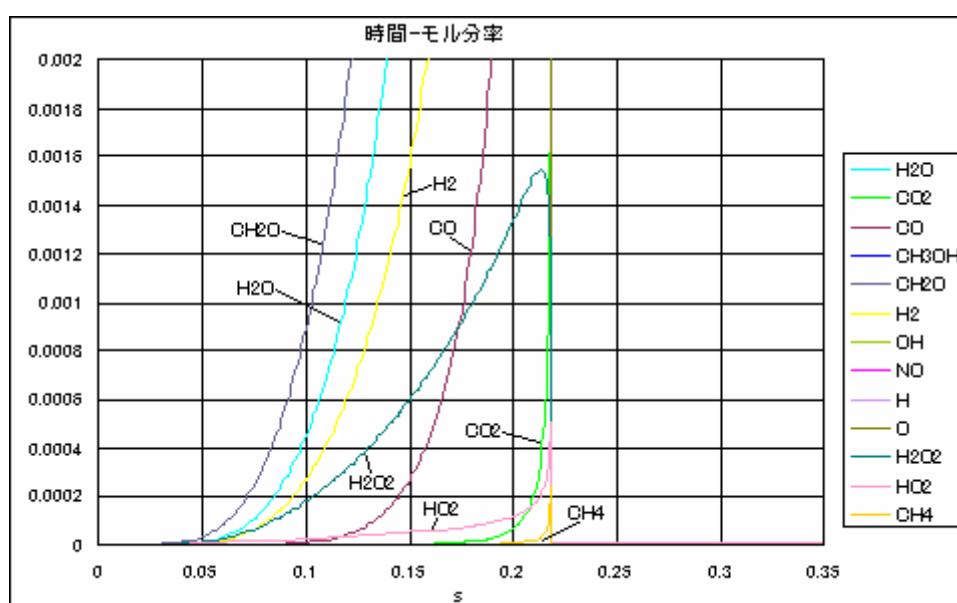


図 4.4



当量比 1、反応開始時の温度 973K (700 度)、圧力 1 気圧の条件における、空気 プロパンの混合気の燃焼反応(自発点火)について数値計算を行った結果を図 5.1 ~ 図 5.4 に示す

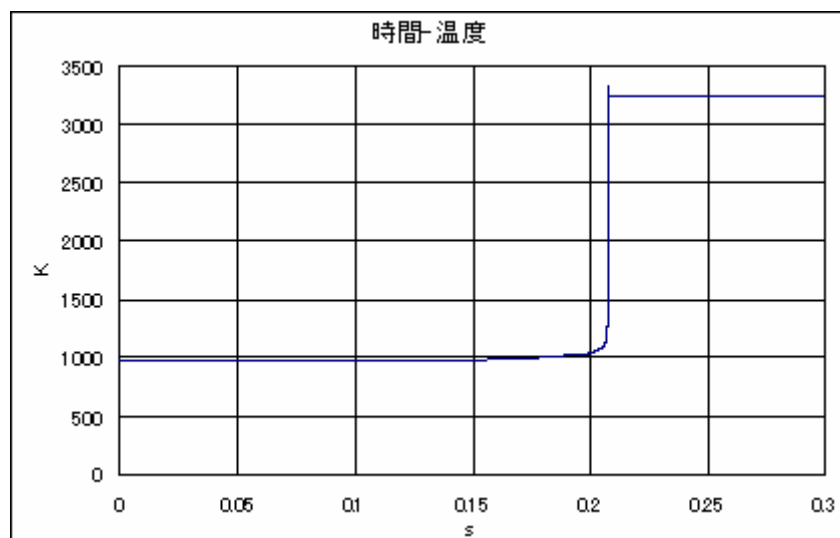


図 5.1

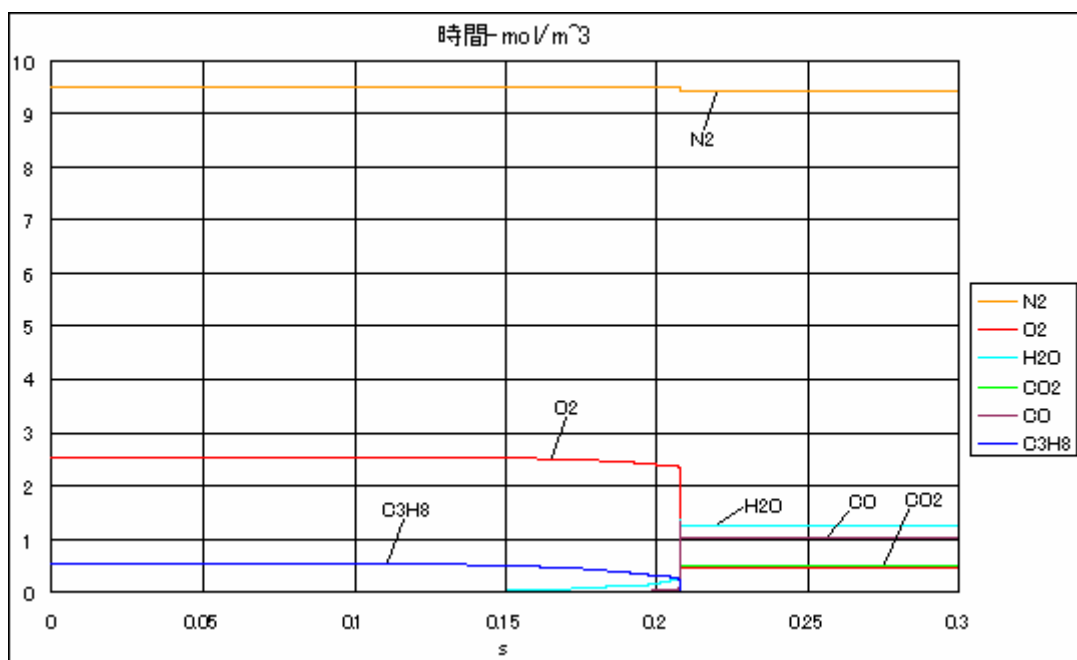


図 5.2

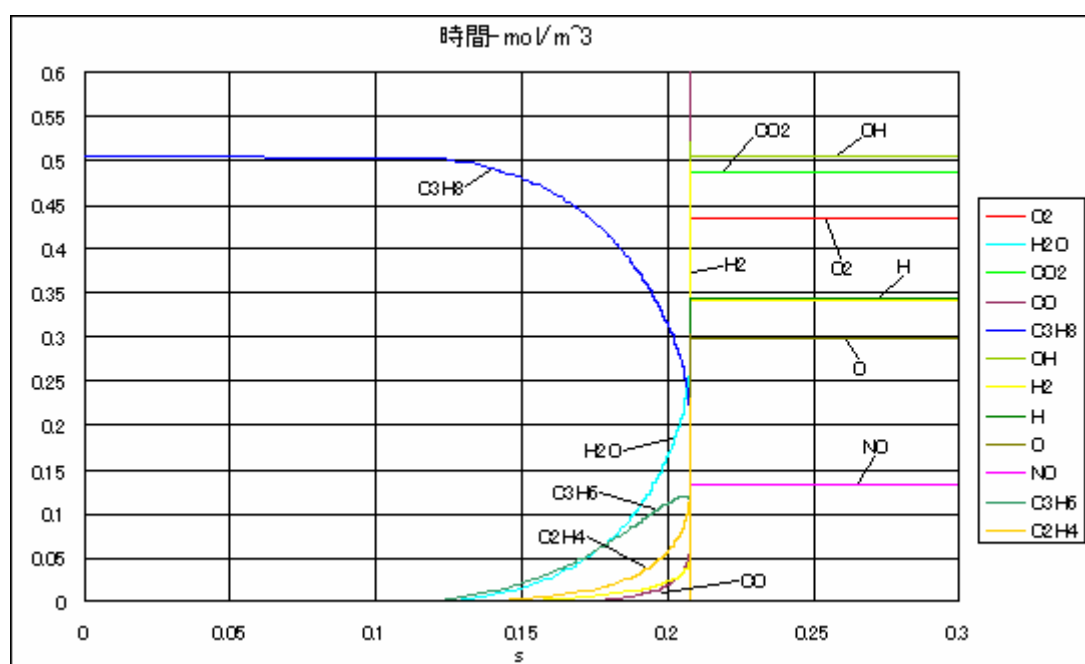


図 5.3

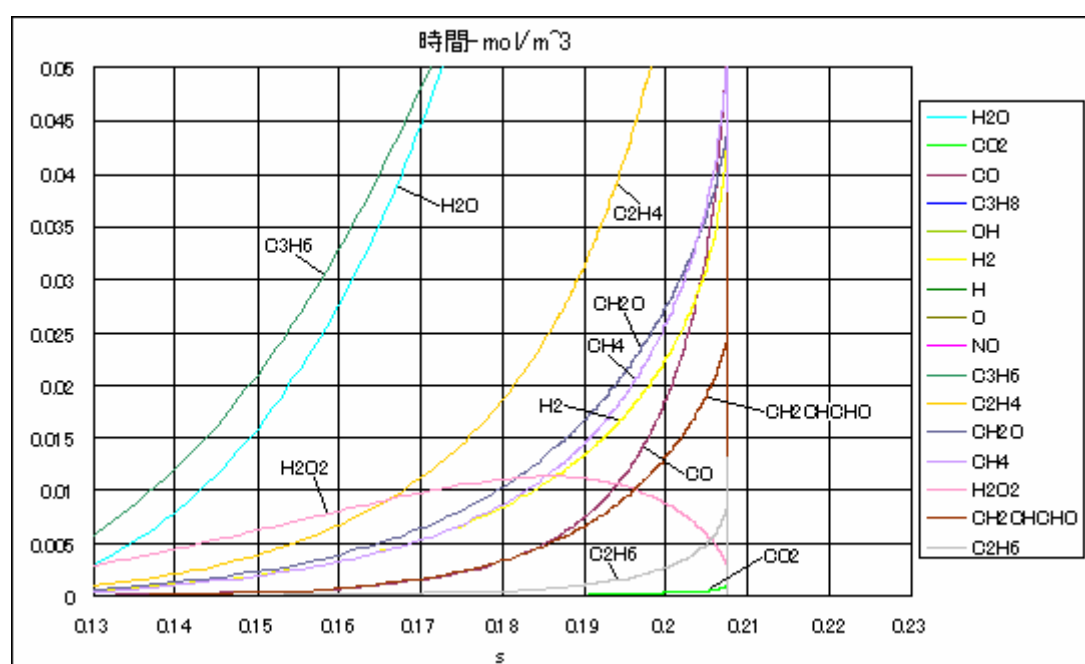


図 5.4

## 5.3 計算結果 2

ここで示す 2 つの計算結果について、反応開始時の圧力はどちらも  $P_0 = 1.013 \times 10^5$  (Pa) (大気圧、1 気圧)である。グラフはP.82 ~ P.85 に掲載したのでそれを参照のこと。先にも述べたように、計算に使用した素反応モデルは酸素中での反応を前提にしたものなので、計算結果はどちらも酸素中での燃焼反応(自発点火)をシミュレートしたものである。

1 つ目の計算結果は、当量比 1、初期温度 973 K (700 度)の条件における、正ブタンの酸素中での自発点火について数値計算を行った結果である。実際に計算では、 $P_0 = 1.013 \times 10^5$  (Pa)、 $T_0 = 973$  (K)、 $C_4H_{10} : fa = 0.1$  (mol)、 $O_2 : fa = 0.65$  (mol)、その他の物質は  $fa = 0$  (mol) で計算した。計算条件は、 $dt\_st = 1.0$  (K) 、 $Y\_set = 0$  であり、 $iout = 2.335 \times 10^8$  まで計算している。計算結果は図 6.1 ~ 6.4 に示す。このグラフから、点火遅れが 0.113 秒、断熱火炎温度が 3109K (2836 度)であることが分かる。また、予想されるように、反応の結果、水と二酸化炭素が生成していることが分かる。なお、この場合も、一酸化炭素の生成は比較的多く、高温なので、反応の中間生成物も反応後にかなりの量が残っている。

2 つ目の計算結果は、当量比 0.1、初期温度 973 K (700 度)の条件における、正ブタンの酸素中での自発点火について数値計算を行った結果である。実際に計算では、 $P_0 = 1.013 \times 10^5$  (Pa)、 $T_0 = 973$  (K)、 $C_4H_{10} : fa = 0.01$  (mol)、 $O_2 : fa = 0.65$  (mol)、その他の物質は  $fa = 0$  (mol) で計算した。計算条件は、 $dt\_st = 1.0$  (K) 、 $Y\_set = 1.0 \times 10^{-10}$  であり、 $iout = 8.15 \times 10^7$  まで計算している。計算結果は図 7.1 ~ 7.4 に示す。このグラフから、点火遅れが 0.222 秒、断熱火炎温度が 1703K (1430 度)であることが分かる。やはり、予想されるように、反応の結果、水と二酸化炭素が生成しているが、反応後には、一酸化炭素はほとんど残っておらず、中間生成物についてもOHが少々残っている程度である。また、この場合、反応が一段階で急激に起こるのではなく、最初に急激な反応が起こった後、緩やかな反応が起こり、そして反応が終了しているのが特徴である。実際に、図 7.1 を見ると、最初に温度が急激に上昇し、その後、緩やかな温度上昇に転じ、それから温度が一定に達していることが分かる。さらに、図 7.3 を見ると、最初の急激な反応では  $C_2H_4$  ,  $C_3H_6$  ,  $CH_2O$  ,  $H_2O_2$  などの中間生成物が関係し、その後の緩やかな反応では  $C-C_5H_4O$  ,  $OH$  などの中間生成物が関係しているというように、これら 2 つの反応で、関連している中間生成物も異なることが分かる。

当量比 1、反応開始時の温度 973K (700 度)、圧力 1 気圧の条件における、酸素 正ブタンの混合気の燃焼反応(自発点火)について数値計算を行った結果を図 6.1 ~ 図 6.4 に示す

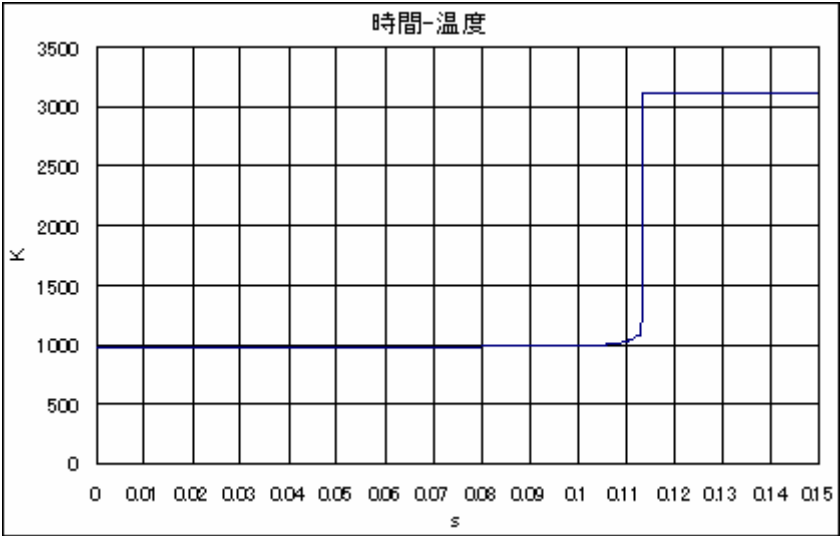


図 6.1

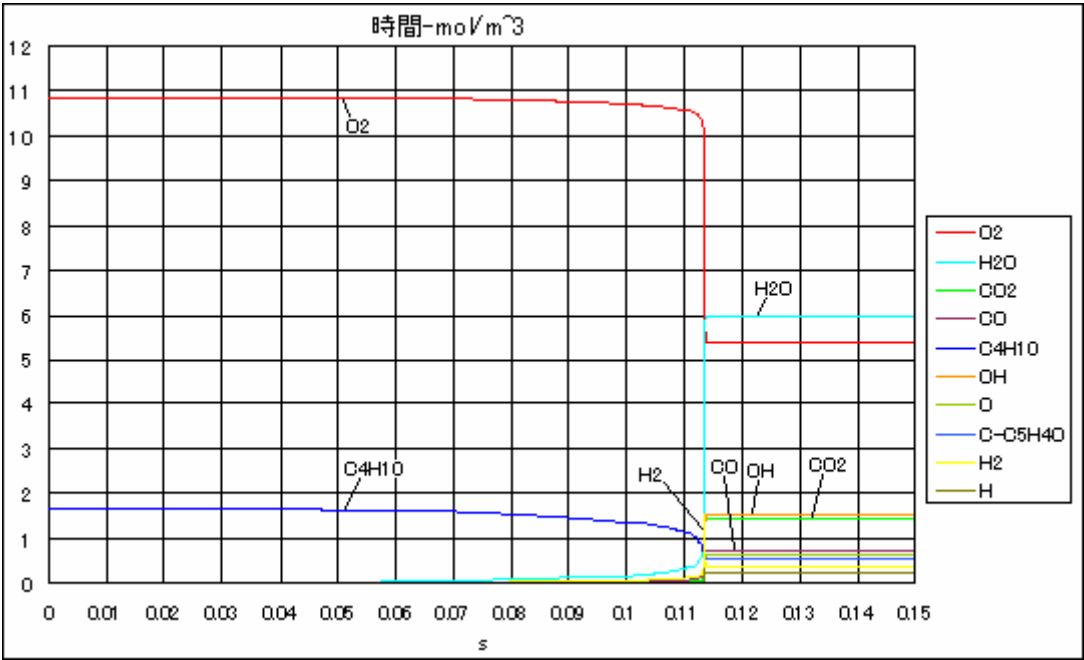


図 6.2

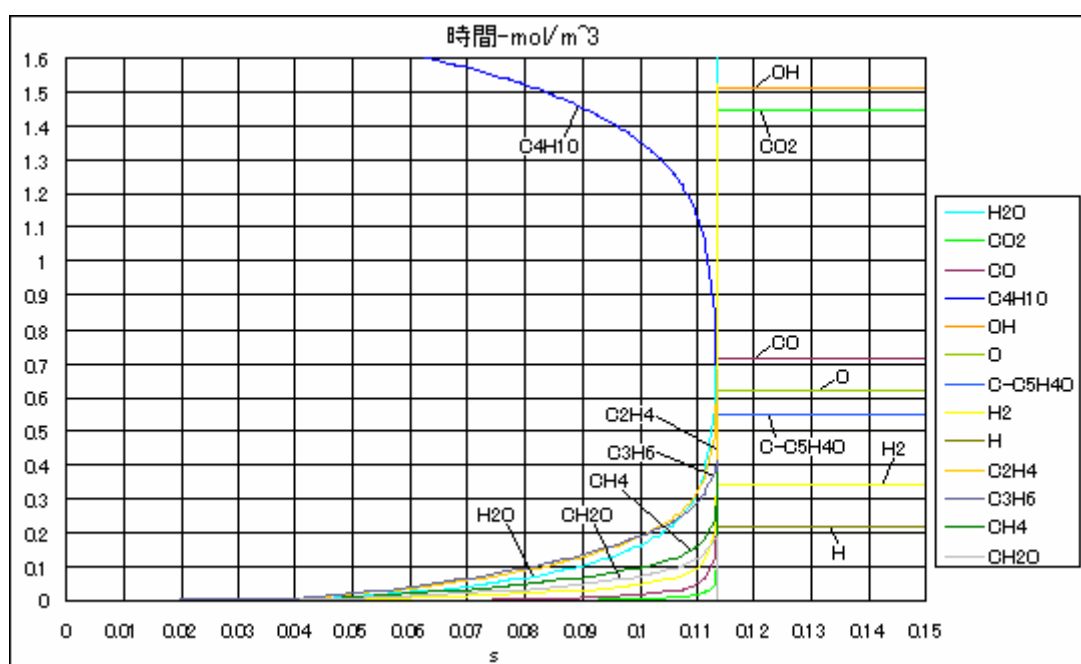


図 6.3

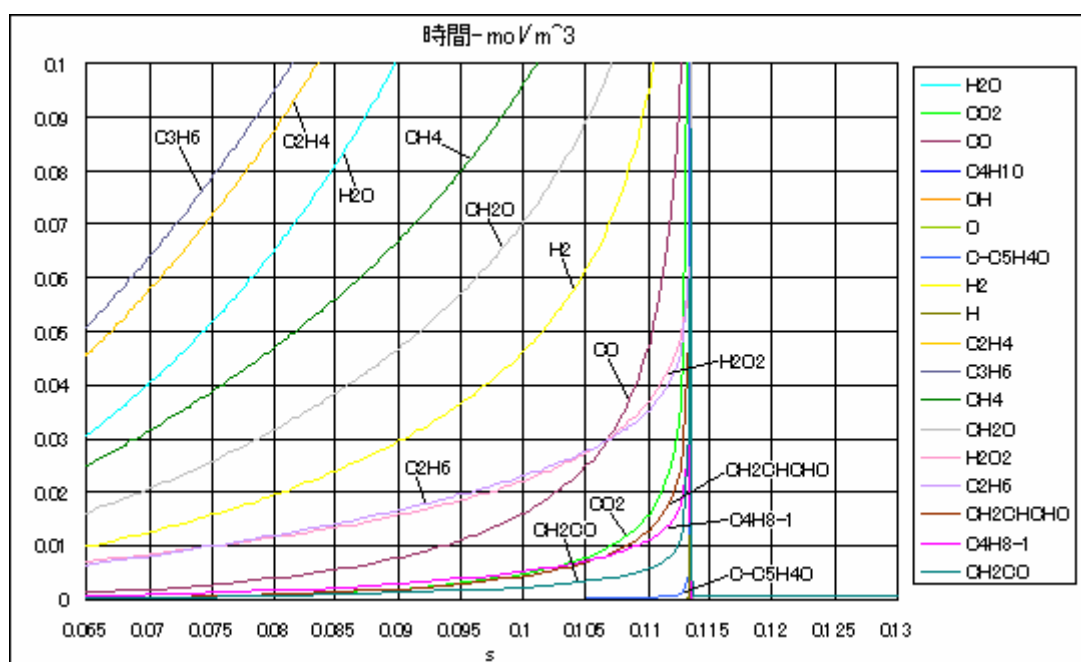


図 6.4

当量比 0.1、反応開始時の温度 973K (700 度)、圧力 1 気圧の条件における、酸素 正ブタンの混合気の燃焼反応(自発点火)について数値計算を行った結果を図 7.1 ~ 図 7.4 に示す

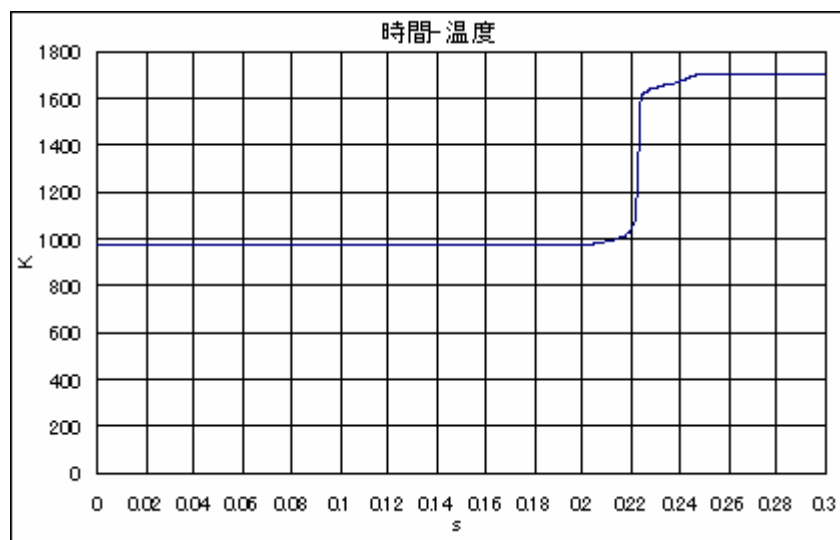


図 7.1

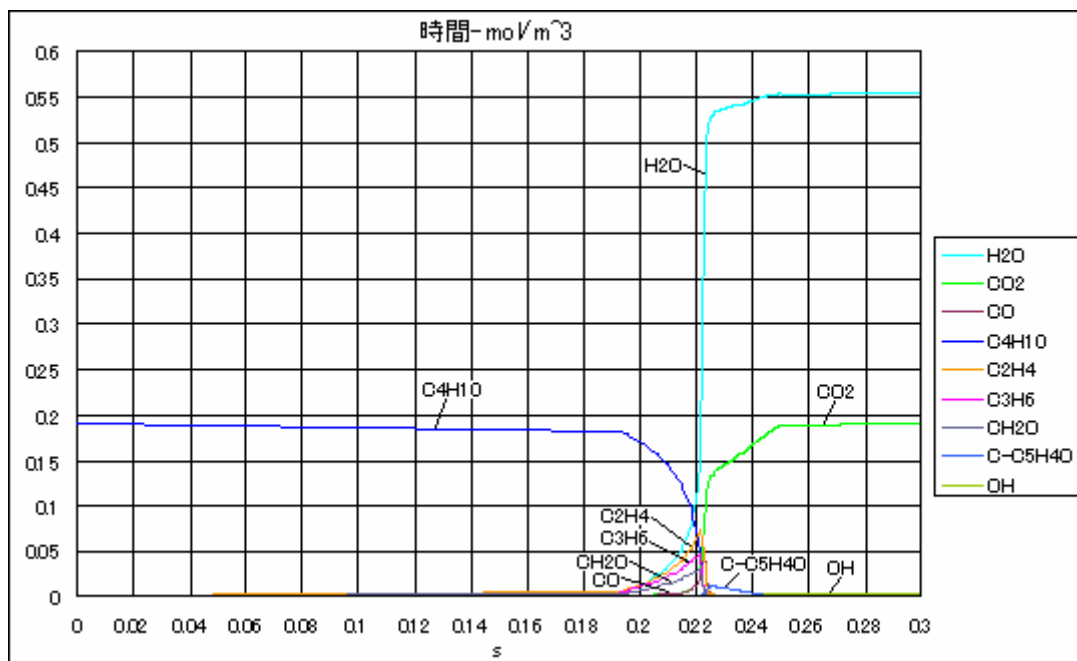


図 7.2

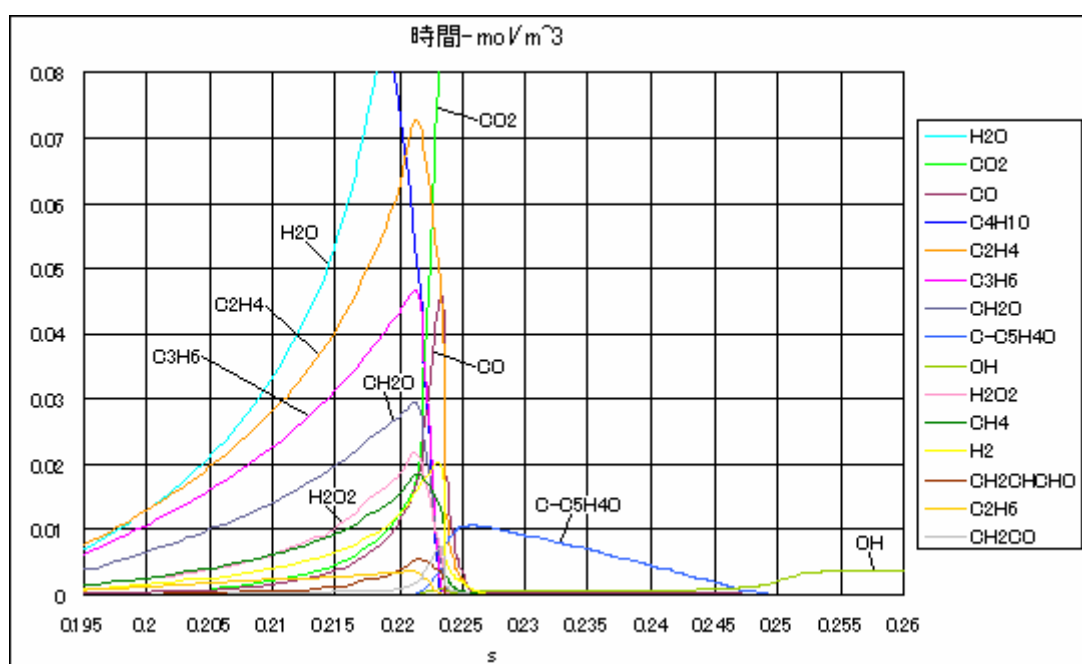


図 7.3

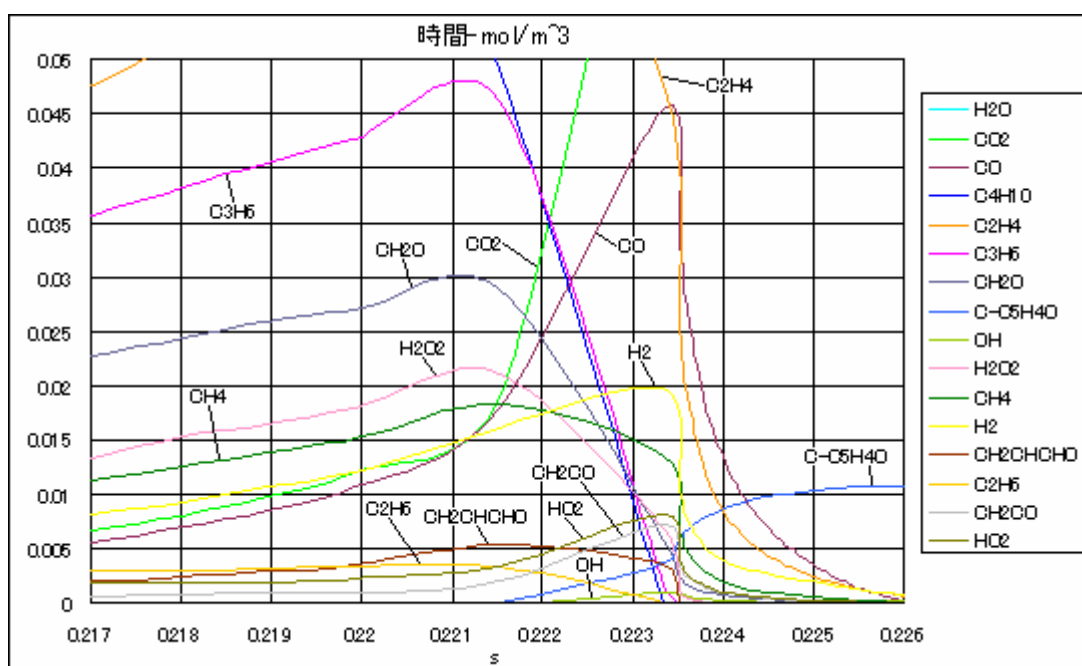


図 7.4

## 5.4 計算結果 3

ここで示す計算結果は全て、反応開始時の圧力 $P_0 = 1.013 \times 10^5$  (Pa) (大気圧、1 気圧)、空気 - 正ヘプタンの混合気という条件で計算したものである。グラフはP.88 ~ P.98 に掲載したのでそれを参照のこと。先にも述べたように、計算に使用した素反応モデルは、一応のところ空気中での燃焼反応を計算できるものだが、窒素原子Nに関連する反応は扱っていないので、 $\text{NO}_x$  の生成についてはシミュレートしていない。

1 つ目の計算結果は、当量比 1、初期温度 973 K (700 度)の条件における、正ヘプタンの空気中での自発点火について数値計算を行った結果である。実際に計算では、 $T_0 = 973$  (K)、 $\text{n-C}_7\text{H}_{16}$  :  $f_a = 0.0187$  (mol)、 $\text{O}_2$  :  $f_a = 0.206$  (mol)、 $\text{N}_2$  :  $f_a = 0.774$  (mol)、その他の物質は  $f_a = 0$  (mol)で計算した。計算条件は、 $dt_{st} = 1.0$  (K)、 $i_{out} = 5.0 \times 10^8$  のとき  $Y_{set} = 0$ 、 $i_{out} > 5.0 \times 10^8$  のとき  $Y_{set} = 1.0 \times 10^{-5}$  で温度変化は 0 に強制的に固定というもので、 $i_{out} = 8.43 \times 10^8$  まで計算している。 $i_{out} = 5.0 \times 10^8$  の間にすでに温度が一定になってしまうのでこのような条件を設定した。このようにしないと関連物質が平衡に達するまでの過程における計算時間が長くなりすぎてしまう。これについては「4.数値計算法の工夫」の項目を参照。計算結果は図 8.1 ~ 8.7 に示す。図 8.1 ~ 8.4 はこれまでと同様で、図 8.1 が時間と温度の関係を示したグラフで、図 8.2 ~ 図 8.4 が時間と  $1\text{m}^3$  あたりのモル数の関係を示したグラフである。これらのグラフから、断熱火炎温度が 3216K (2943 度)であり、反応が起こり、正ヘプタンや酸素が減少するとともに、水と二酸化炭素、それから多量の一酸化炭素が生成していることが分かる。また、反応の過程で、様々な中間生成物が関連していることや、高温なので、反応が終了してからも、それらの中間生成物の多くが残っていることが分かる。図 8.5 ~ 8.7 は図 8.1 の時間と温度の関係を示したグラフが見にくいので目盛りを変えたものである。これらのグラフからは、反応が何段階にもわたって起こっていることが分かる。それから、図 8.6 を見ると、最初の段階の反応は、反応開始時から徐々に進行するため、点火遅れの時間は定義できないようである。

2 つ目の計算結果は、当量比 0.1、初期温度 973 K (700 度)の条件における、正ヘプタンの空気中での自発点火について数値計算を行った結果である。実際に計算では、 $T_0 = 973$  (K)、 $\text{n-C}_7\text{H}_{16}$  :  $f_a = 0.00187$  (mol)、 $\text{O}_2$  :  $f_a = 0.206$  (mol)、 $\text{N}_2$  :  $f_a = 0.774$  (mol)、その他の物質は  $f_a = 0$  (mol)で計算した。計算条件は、 $dt_{st} = 1.0$  (K)、 $i_{out} = 5.0 \times 10^8$  のとき  $Y_{set} = 0$ 、 $i_{out} > 5.0 \times 10^8$  のとき  $Y_{set} = 1.0 \times 10^{-5}$  で温度変化は 0 に強制的に固定というもので、 $i_{out} = 7.13 \times 10^8$  まで計算している。計算結果は図 9.1 ~ 9.9 に示す。グラフの見方は当量比 1 のときと同様である。これらのグラフから、断熱火炎温度は 2516K (2243 度)であり、他の物質の燃焼反応と同様、当量比 1 の場合と比べて、一酸化炭素の生成が少なく、完全燃焼に近くなっていることが分かる。ただし、この場合も、当量比 1 のときと同様、反応が何段階にもわたって起こっており、図 9.7 を見る限り、最初の段階の反応は、反応開始時から徐々



に進行するため、点火遅れの時間が定義できないことについても同様である。

3 つ目の計算結果は、当量比 1、初期温度 573 K (300 度)の条件における、正ヘプタンの空気中での自発点火について数値計算を行った結果である。実際に計算では、 $T_0 = 573$  (K)、 $n\text{-C}_7\text{H}_{16} : fa = 0.0187$  (mol)、 $\text{O}_2 : fa = 0.206$  (mol)、 $\text{N}_2 : fa = 0.774$  (mol)、その他の物質は  $fa = 0$  (mol) で計算した。計算条件は、 $dt\_st = 1.0$  (K)、 $Y\_set = 0$  であり、 $iout = 1.04 \times 10^9$  まで計算している。計算結果は図 10.1 ~ 10.4 に示す。このように、比較的、最低自己着火温度では計算能力的に非常に厳しいので、物質的に平衡に達するまでの計算は不可能であった。ただし、時間と温度の関係を知るには十分であり、反応に関係する中間生成物の状況の把握もある程度可能である。このように低い温度から反応を開始する場合には、メタン、アセチレン、メタノール、プロパン、正ブタンなどと同様に、しばらく時間が経過してから急激な反応が起こることが分かる。

図 11.1 ~ 図 11.6 は、反応開始時の温度と、反応の進み方の関係が分かるように、反応開始時の温度が低い順に、時間と温度の関係を示すグラフを掲載したものである。これらのグラフは全て、当量比 1 で、実際に、 $n\text{-C}_7\text{H}_{16} : fa = 0.0187$  (mol)、 $\text{O}_2 : fa = 0.206$  (mol)、 $\text{N}_2 : fa = 0.774$  (mol)、その他の物質は  $fa = 0$  (mol) で計算したものである。図 11.1 は、反応開始時の温度が 523K (250 度)のもので、計算条件は、 $dt\_st = 1.0$  (K)、 $Y\_set = 1.0 \times 10^{-4}$  であり、 $iout = 8.2 \times 10^8$  まで計算している。図 11.2 は、反応開始時の温度が 573K (300 度)のもので、計算条件は、 $dt\_st = 1.0$  (K)、 $Y\_set = 0$  であり、 $iout = 5.72 \times 10^8$  まで計算している。図 11.3 は、反応開始時の温度が 623K (350 度)のもので、計算条件は、 $dt\_st = 1.0$  (K)、 $Y\_set = 0$  であり、 $iout = 3.22 \times 10^8$  まで計算している。図 11.4 は、反応開始時の温度が 673K (400 度)のもので、計算条件は、 $dt\_st = 1.0$  (K)、 $Y\_set = 0$  であり、 $iout = 4.14 \times 10^7$  まで計算している。図 11.5 は、反応開始時の温度が 723K (450 度)のもので、計算条件は、 $dt\_st = 1.0$  (K)、 $Y\_set = 0$  であり、 $iout = 2.45 \times 10^7$  まで計算している。図 11.6 は、反応開始時の温度が 773K (500 度)のもので、計算条件は、 $dt\_st = 1.0$  (K)、 $Y\_set = 0$  であり、 $iout = 2.25 \times 10^7$  まで計算している。

当量比 1、反応開始時の温度 973K (700 度)、圧力 1 気圧の条件における、空気 正へプタンの混合気の燃焼反応(自発点火)について数値計算を行った結果を図 8.1 ~ 図 8.7 に示す  
 時間軸の単位は、 $10^{-10}$  秒 である

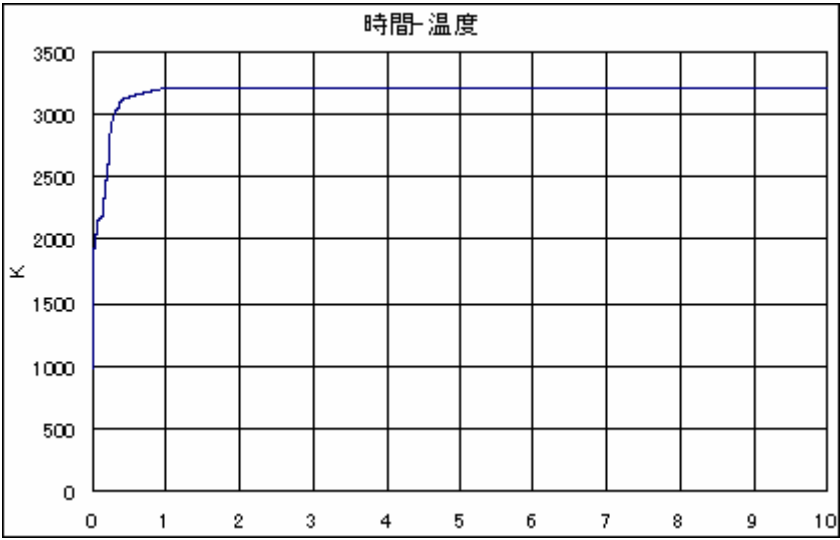


図 8.1

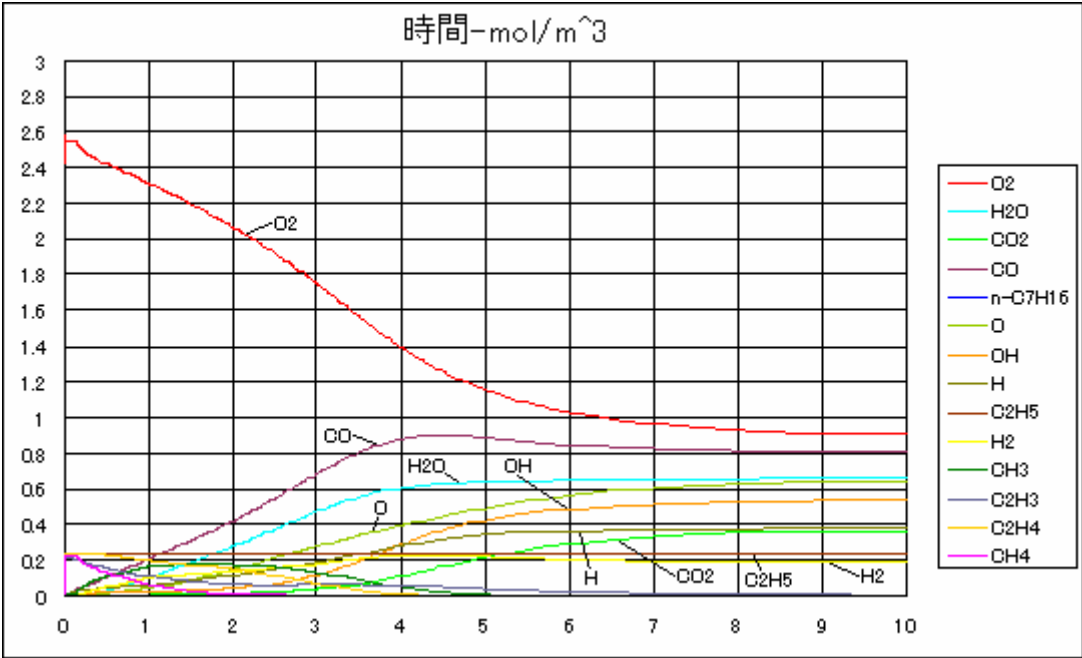


図 8.2

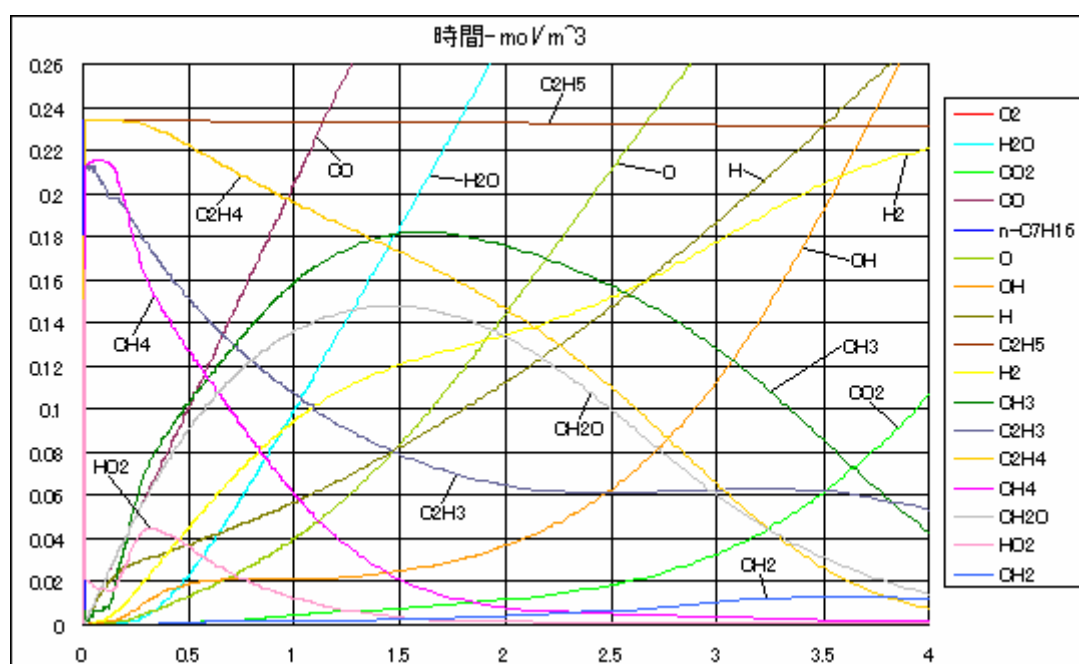


図 8.3

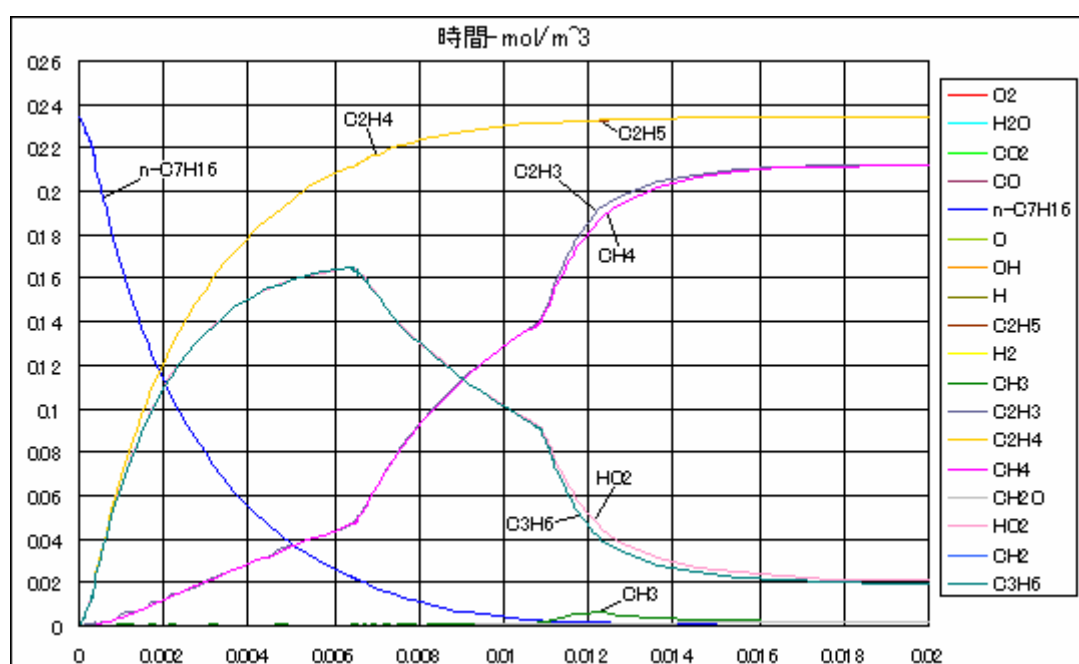


図 8.4

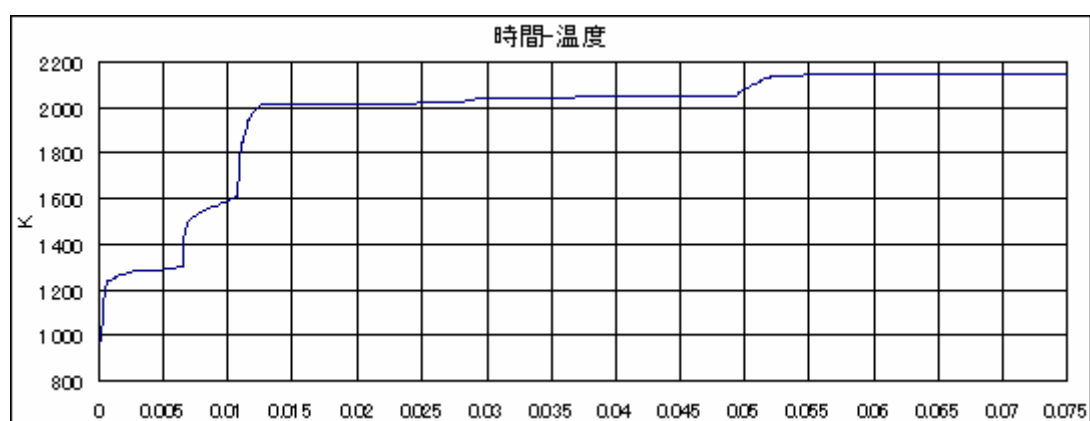


図 8.5

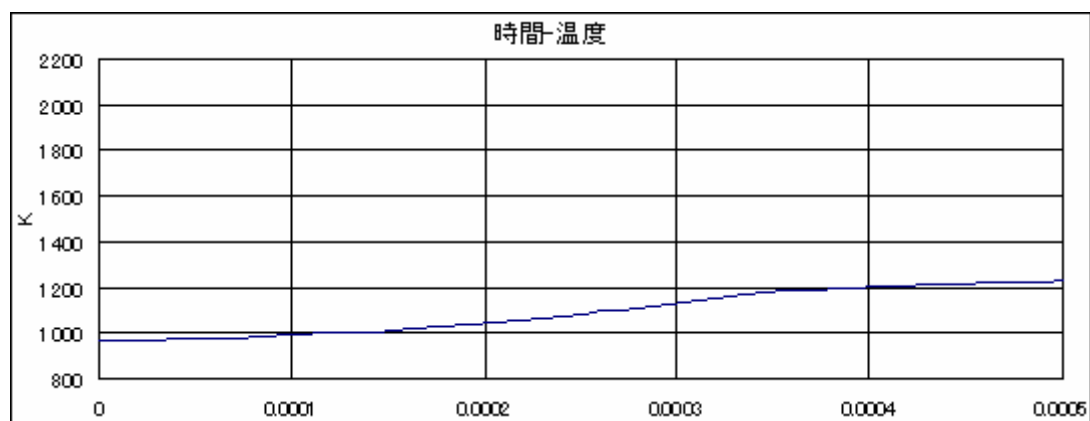


図 8.6

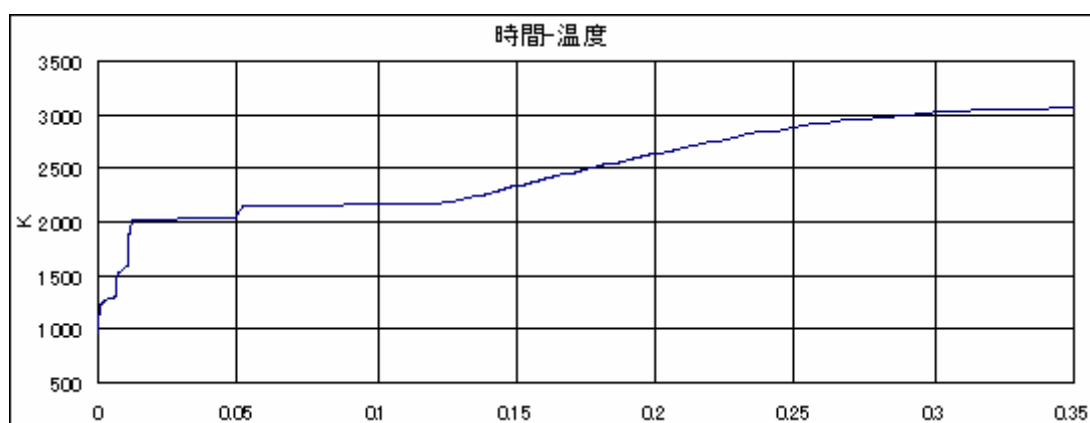


図 8.7

当量比 0.1、反応開始時の温度 973K (700 度)、圧力 1 気圧の条件における、空気 正ヘプタンの混合気の燃焼反応(自発点火)について数値計算を行った結果を図 9.1 ~ 図 9.9 に示す  
時間軸の単位は、 $10^{-8}$  秒 である

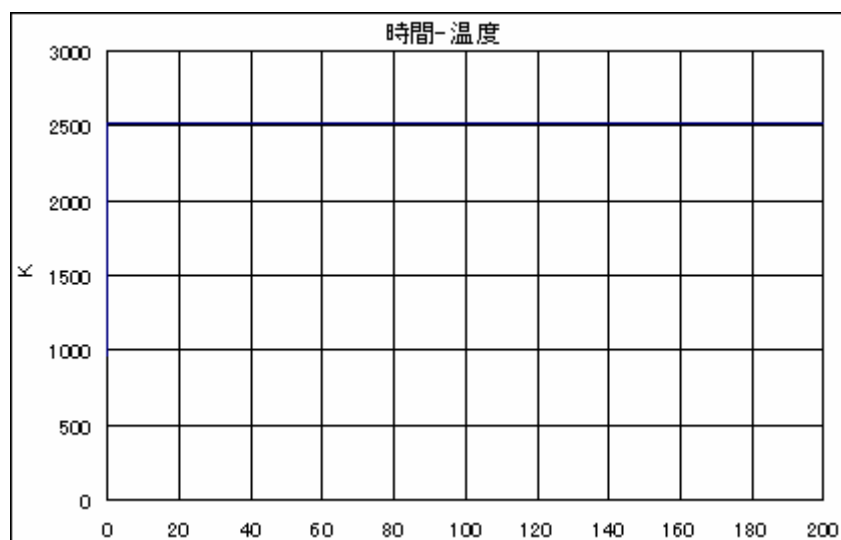


図 9.1

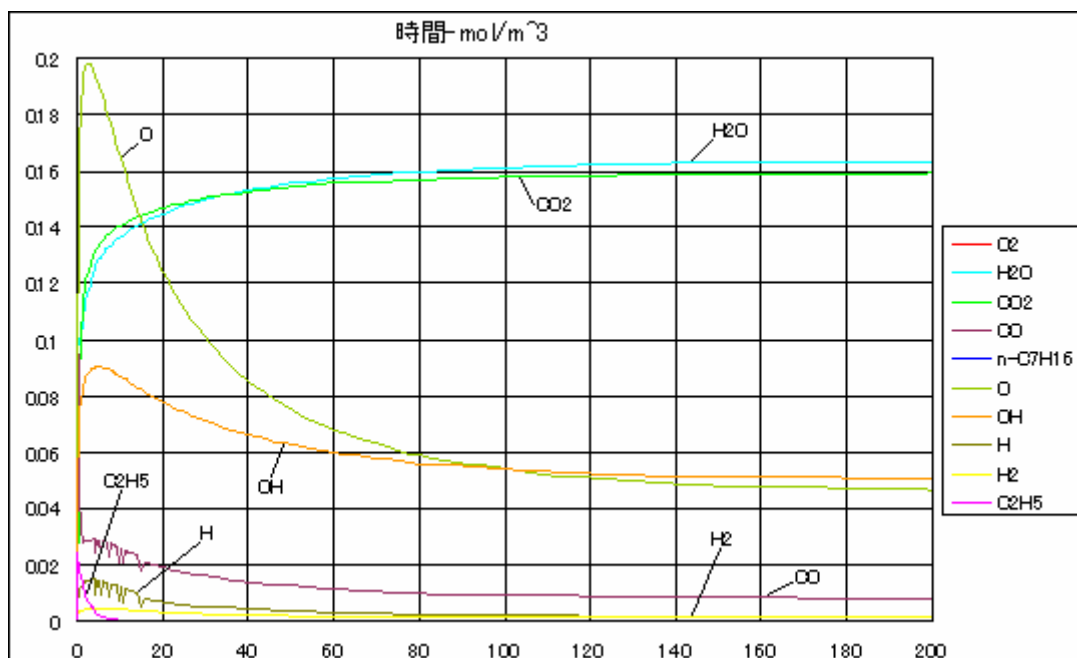


図 9.2

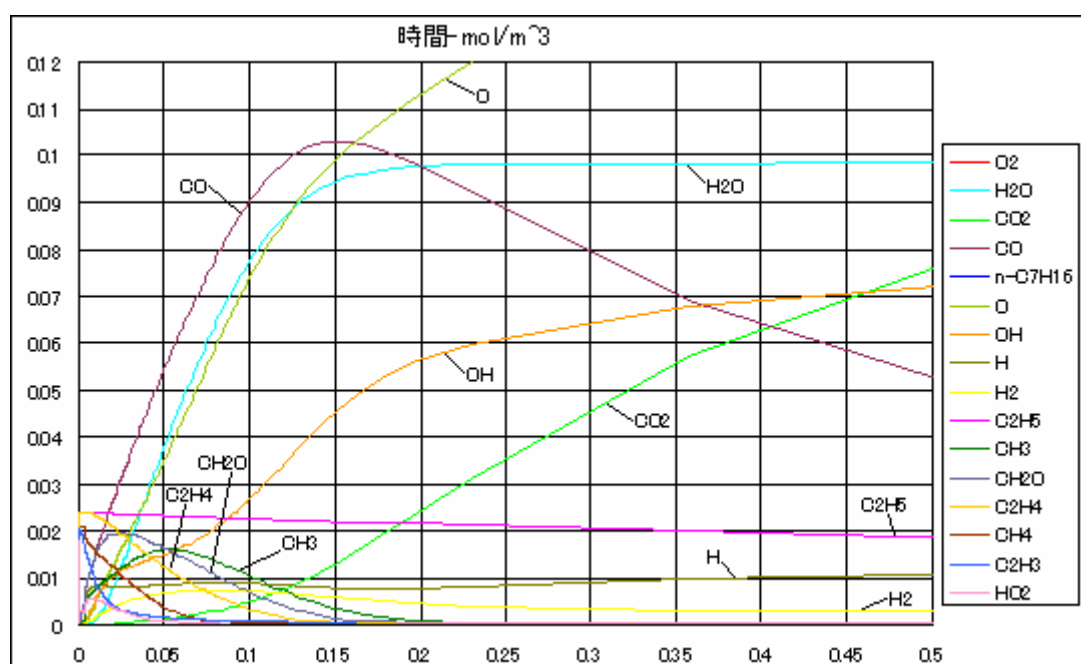


図 9.3

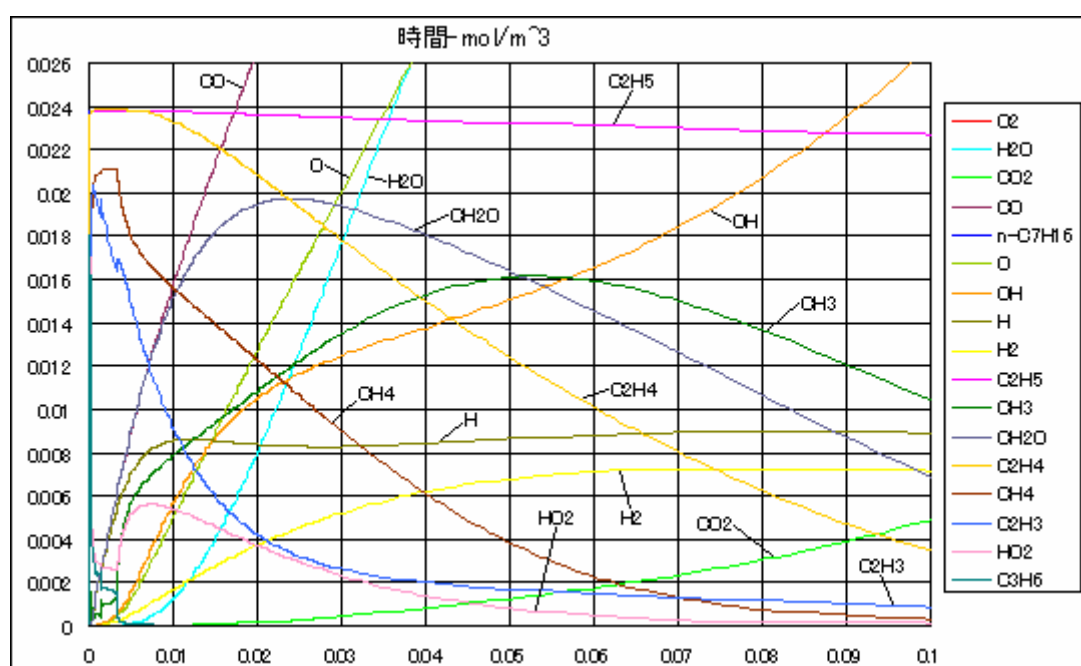


図 9.4

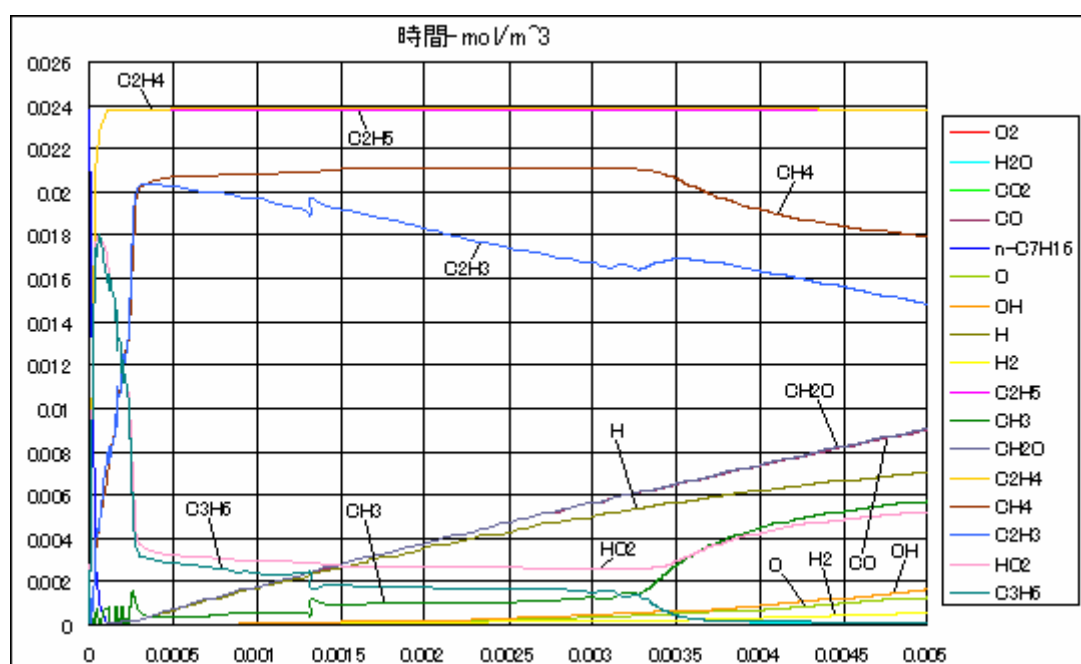


図 9.5

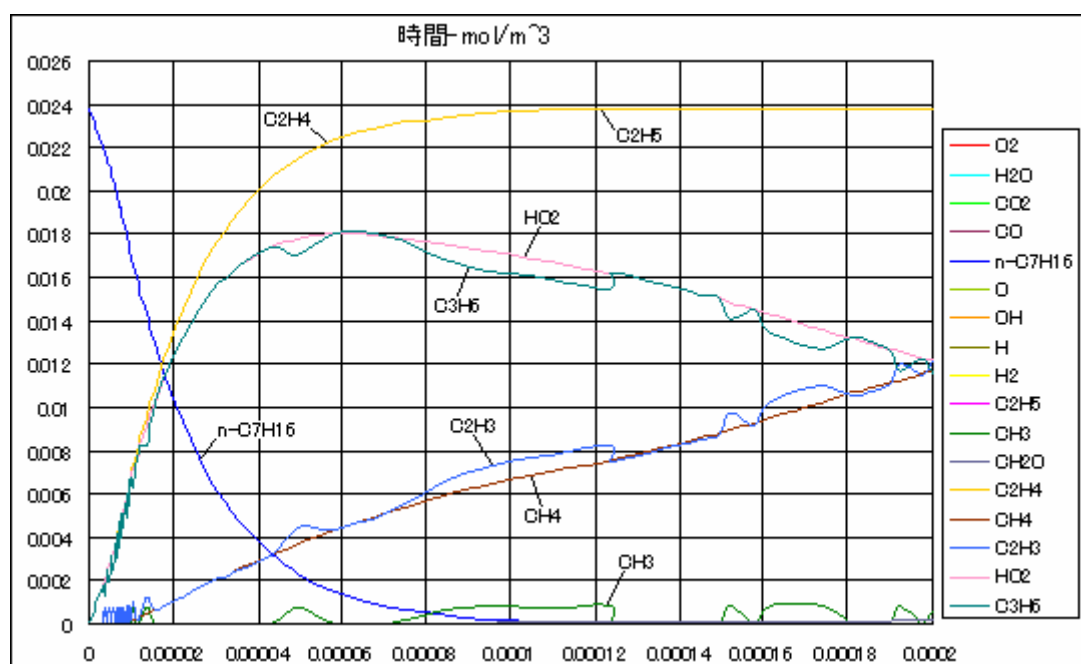


図 9.6

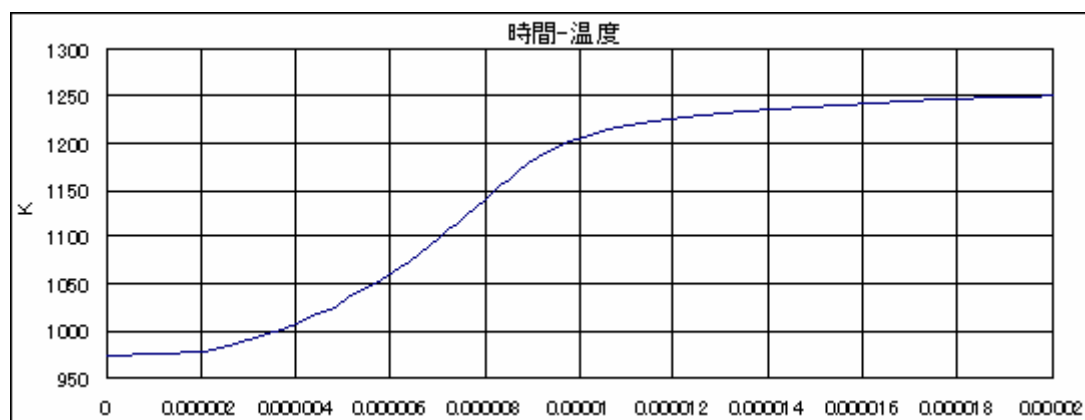


図 9.7

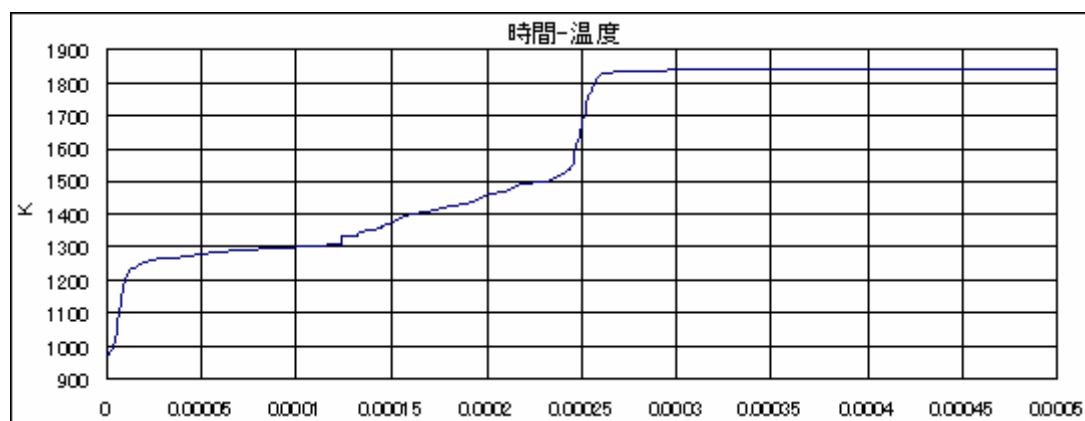


図 9.8

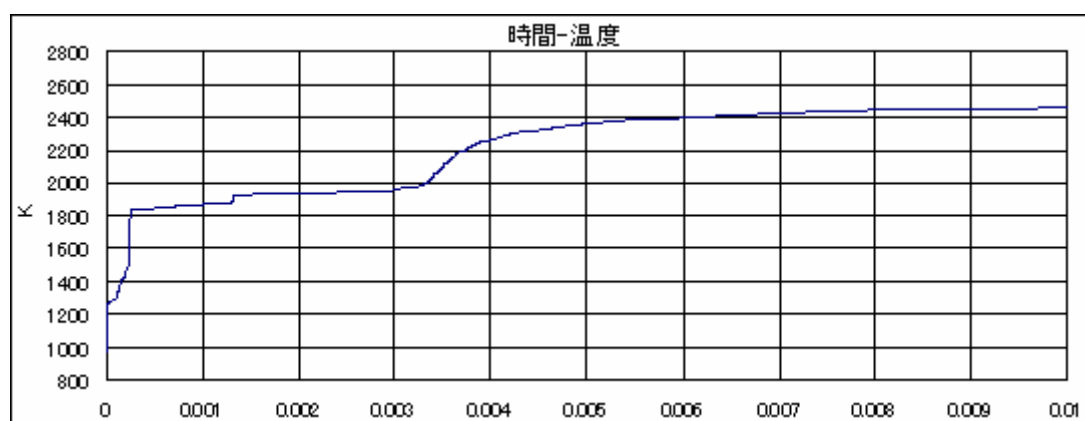


図 9.9



当量比 1、反応開始時の温度 573K (300 度)、圧力 1 気圧の条件における、空気 正ヘプタンの混合気の燃焼反応(自発点火)について数値計算を行った結果を図 10.1 ~ 図 10.4 に示す  
時間軸の単位は、 $10^{-11}$  秒 である

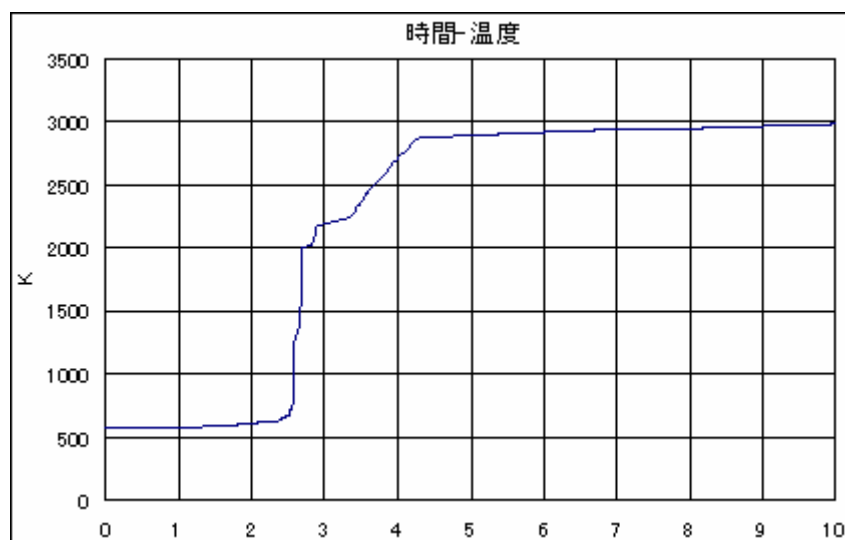


図 10.1

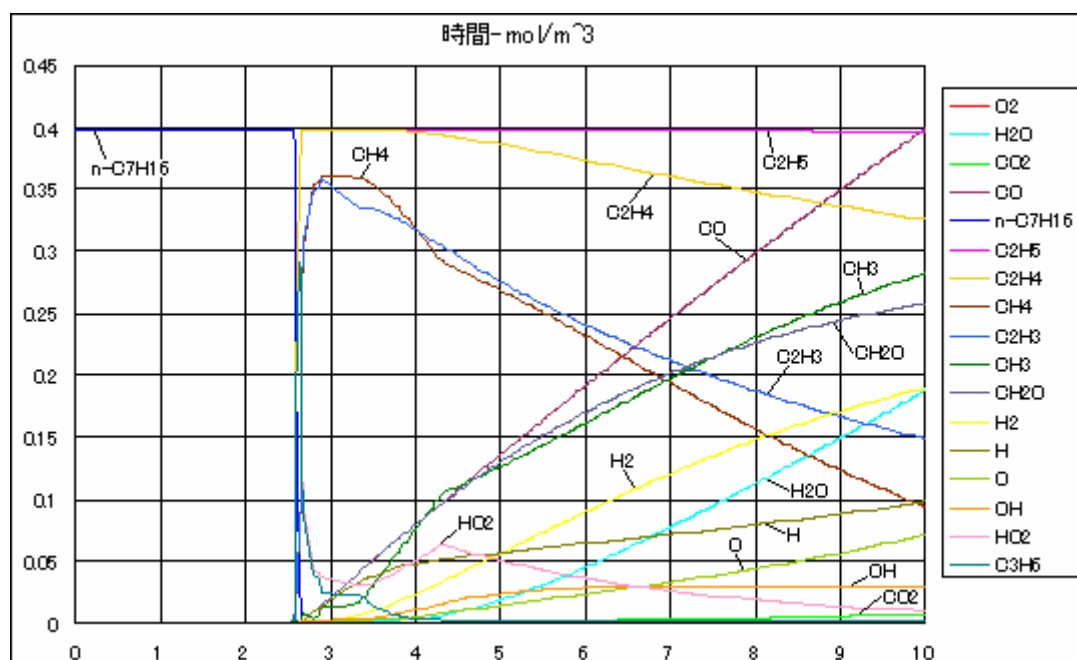


図 10.2

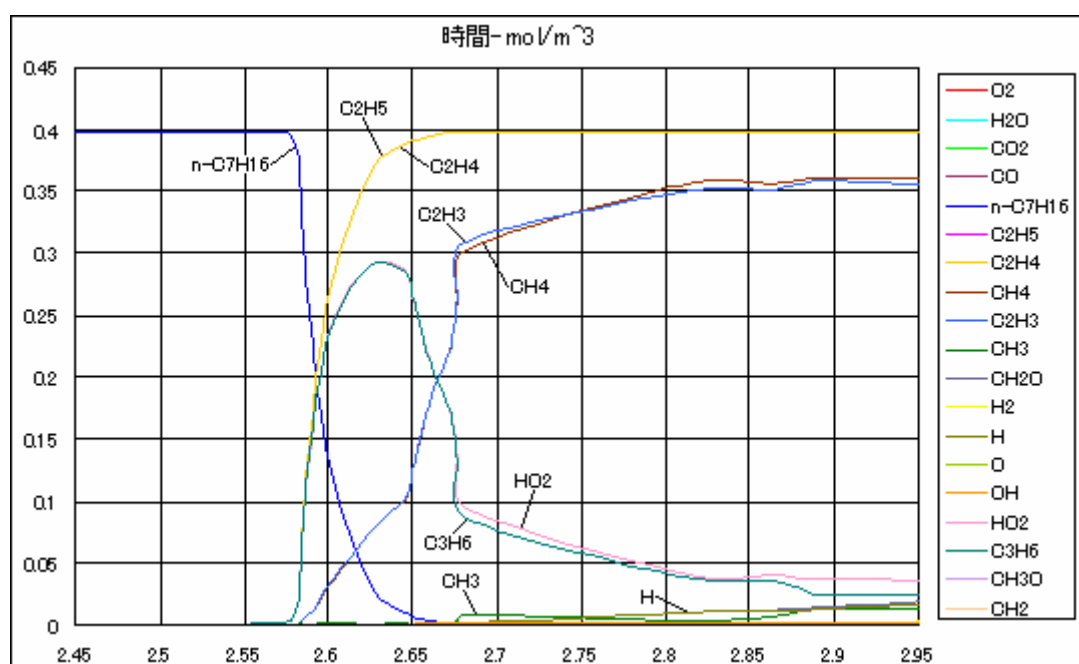


図 10.3

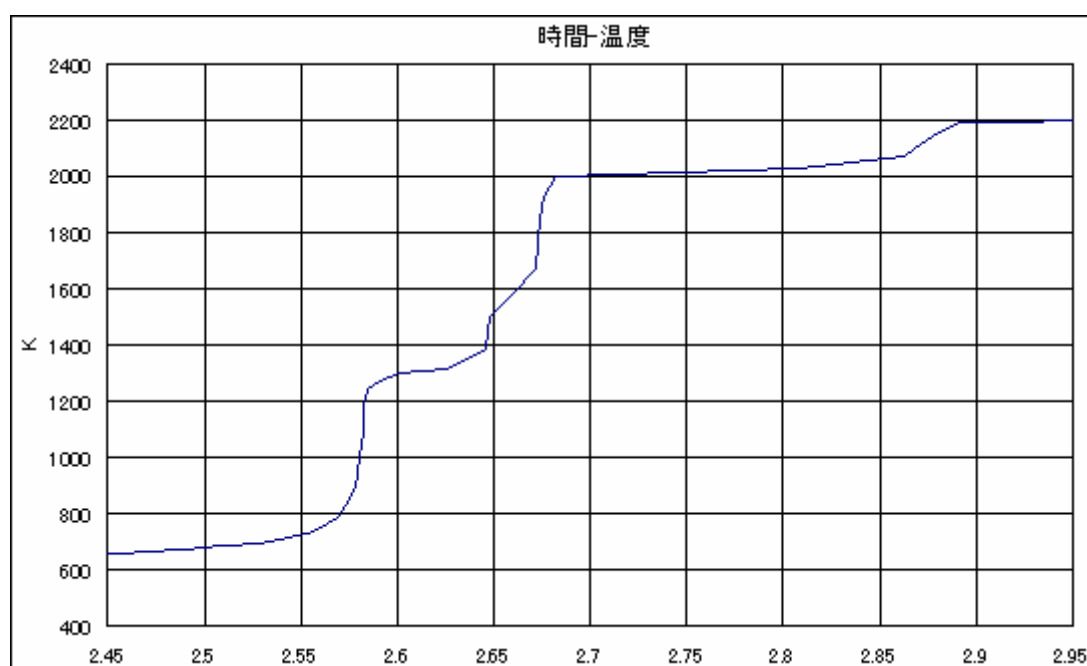


図 10.4

当量比 1、圧力 1 気圧の条件における、空気 正ヘプタンの混合気の燃焼反応(自発点火)について数値計算を行った結果を、反応開始時の温度の順で図 11.1 ~ 図 11.6 に示す  
時間軸の単位は、 $10^{-12}$  秒 である

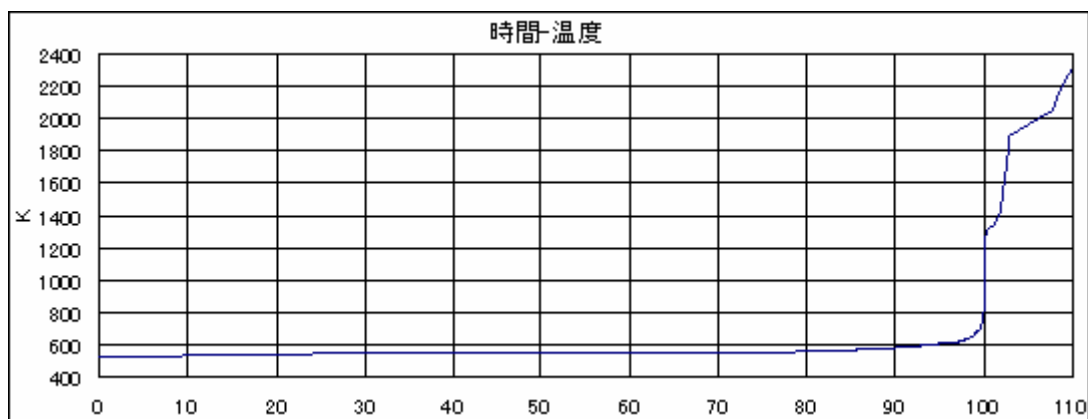


図 11.1 反応開始時の温度 523K (250 度)

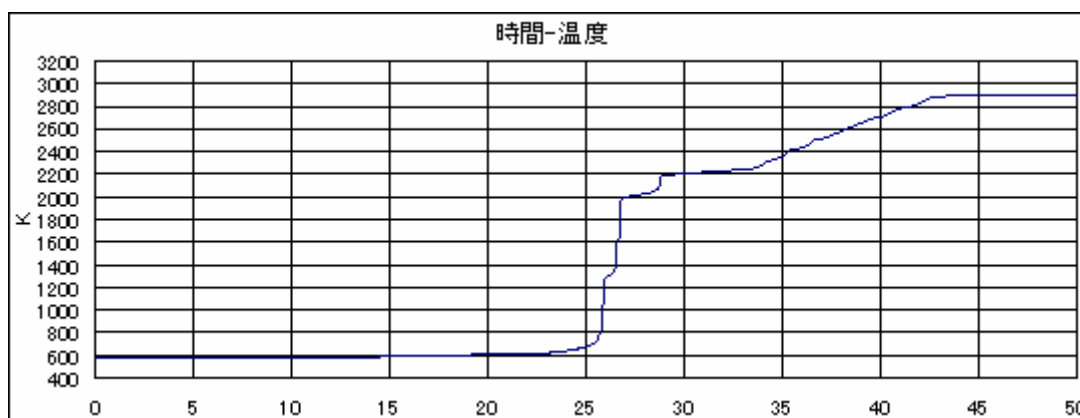


図 11.2 反応開始時の温度 573K (300 度)

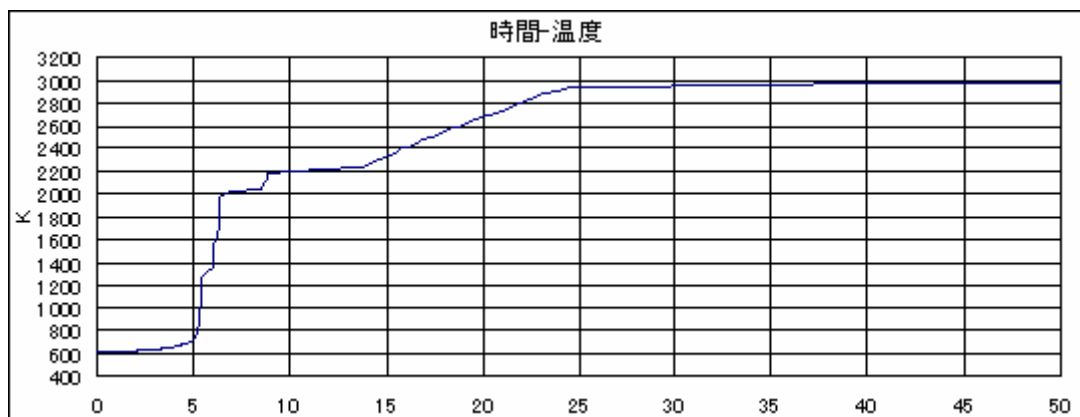


図 11.3 反応開始時の温度 623K (350 度)

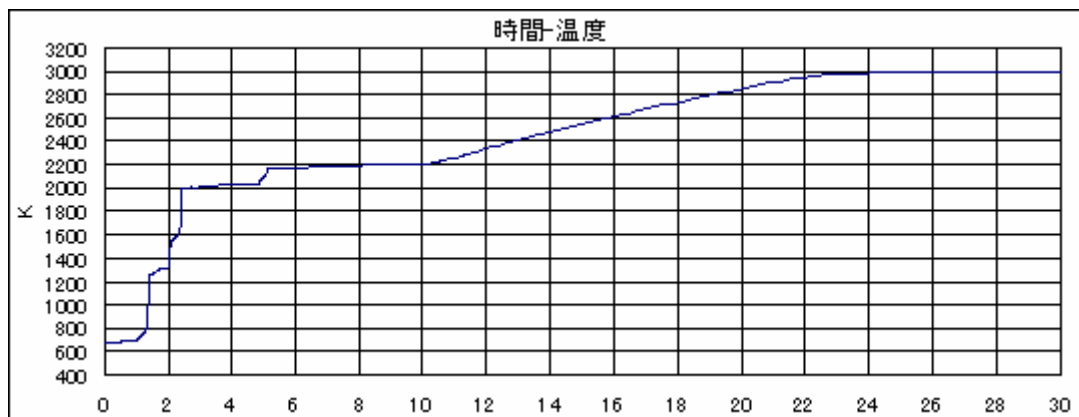


図 11.4 反応開始時の温度 673K (400 度)

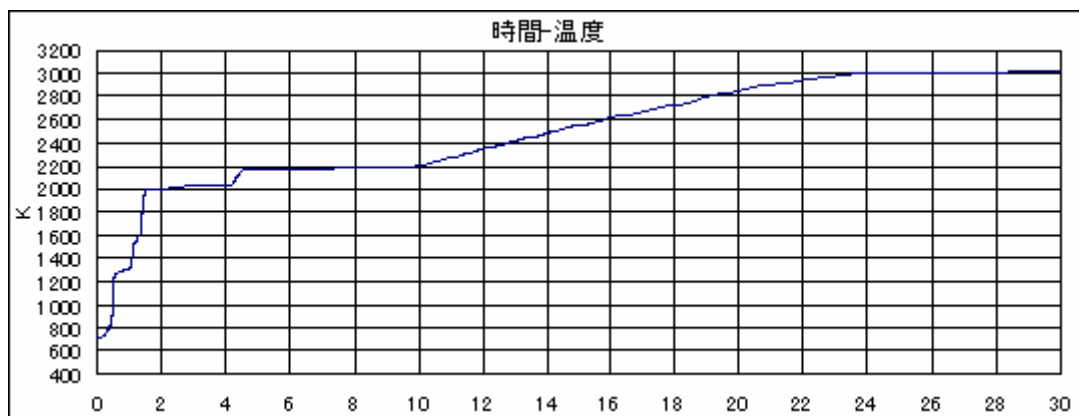


図 11.5 反応開始時の温度 723K (450 度)

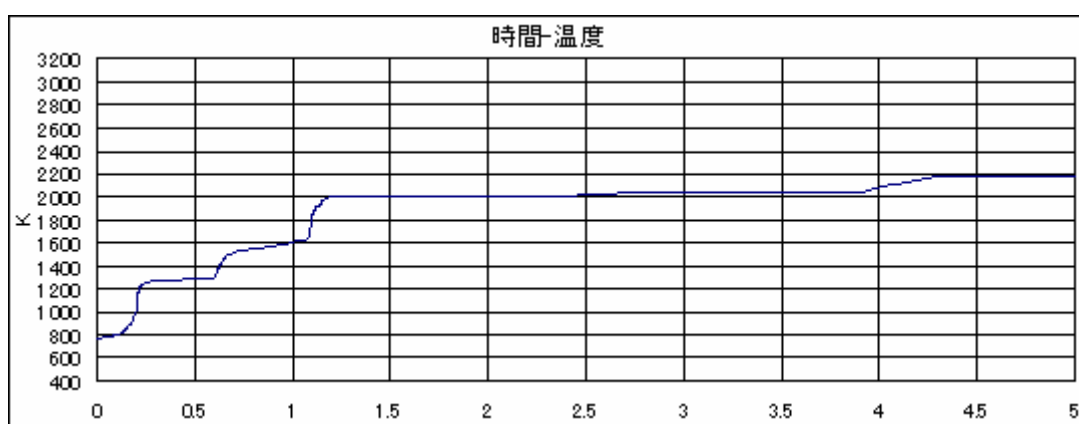


図 11.6 反応開始時の温度 773K (500 度)

## 5.5 計算結果 4

ここで示す計算結果は、反応開始時の圧力 $P_0 = 1.013 \times 10^5$  (Pa) (大気圧、1 気圧)、温度は 973K (700 度)、当量比 1 である空気 - 正ヘプタンの混合気という条件で計算したものである。グラフは P.100 ~ P.102 に掲載したのでそれを参照のこと。先にも述べたように、計算に使用した素反応モデルは、一応のところ空気中での燃焼反応を計算できるものだが、窒素原子 N に関連する反応は扱っていないので、 $\text{NO}_x$  の生成についてはシミュレートしていない。

実際には、 $T_0 = 973$  (K)、 $\text{n-C}_7\text{H}_{16}$  :  $f_a = 0.0187$  (mol)、 $\text{O}_2$  :  $f_a = 0.206$  (mol)、 $\text{N}_2$  :  $f_a = 0.774$  (mol)、その他の物質は  $f_a = 0$  (mol) で計算した。計算条件は、 $\text{dt\_st} = 1.0$  (K)、 $Y_{\text{set}} = 0$  であり、 $i_{\text{out}} = 1.026 \times 10^8$  まで計算している。計算に使用した素反応モデルが、比較的詳細なものなので、計算能力的にはかなり厳しく、物質的に平衡に達するまで計算することは困難であった。計算結果は図 12.1 ~ 12.6 に示す。多くの化学種と素反応を扱った素反応モデルを使用しているので計算結果 3 には出てこなかった中間生成物が反応に関係していることが分かる。

当量比 1、反応開始時の温度 973K (700 度)、圧力 1 気圧の条件における、空気 正ヘプタンの混合気の燃焼反応(自発点火)について数値計算を行った結果を図 12.1 ~ 図 12.6 に示す  
時間軸の単位は、 $10^{-16}$  秒 である

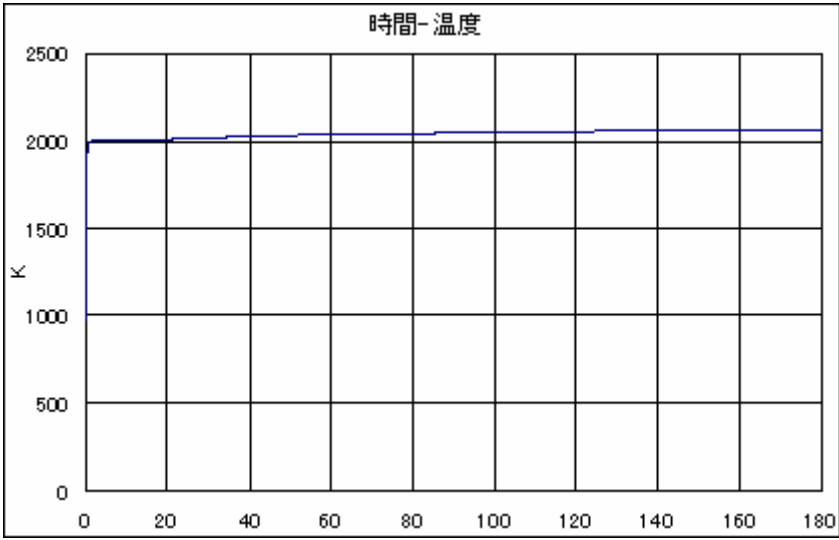


図 12.1

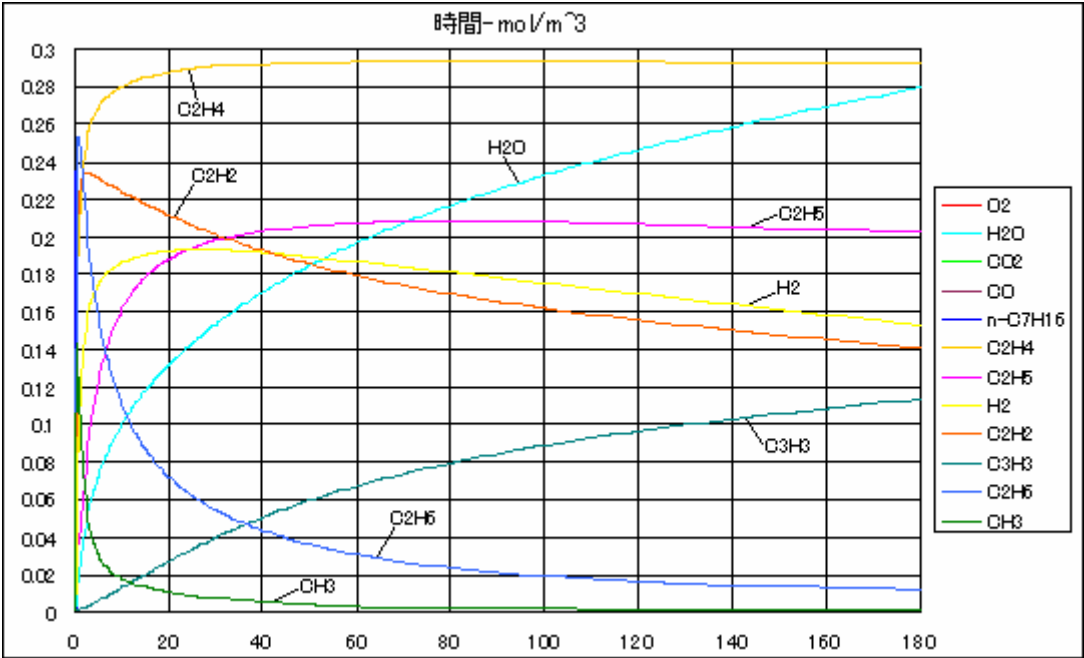


図 12.2

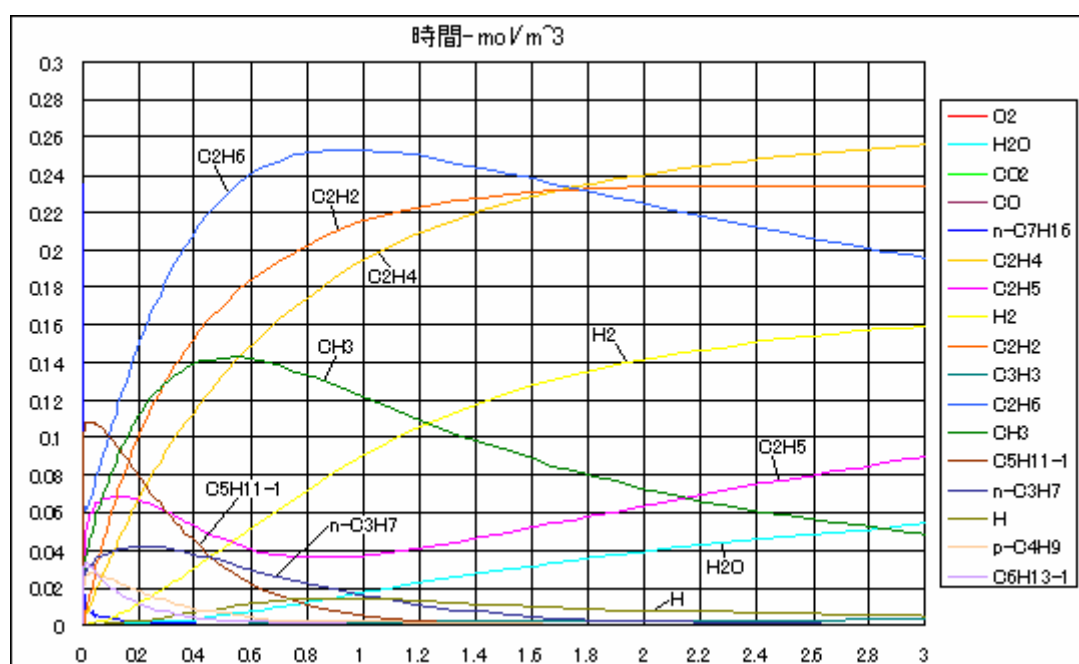


図 12.3

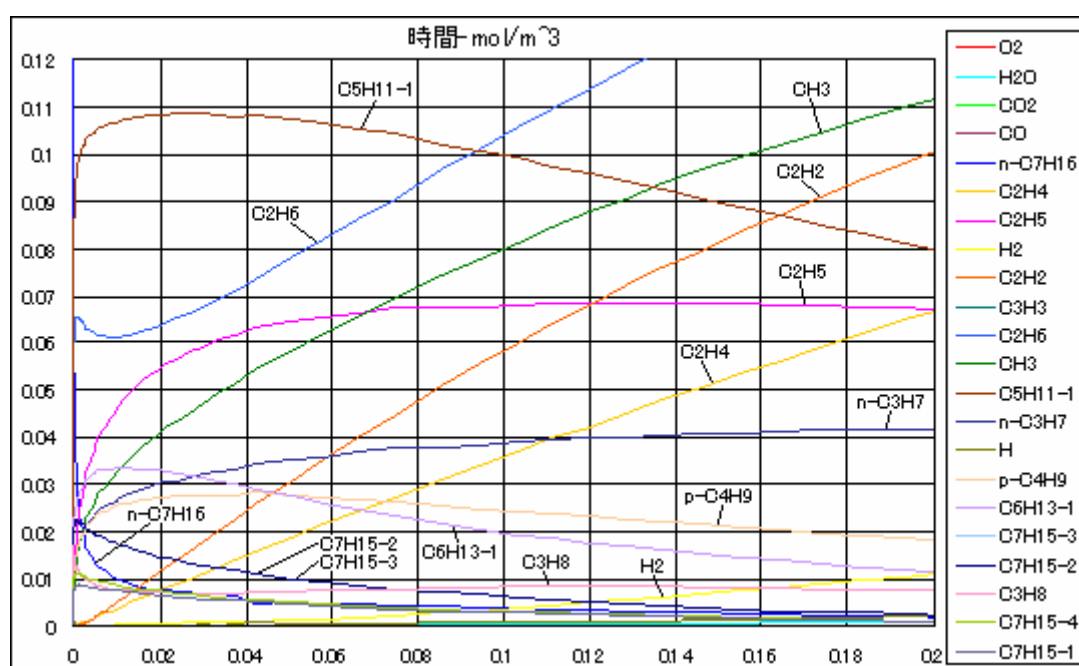


図 12.4

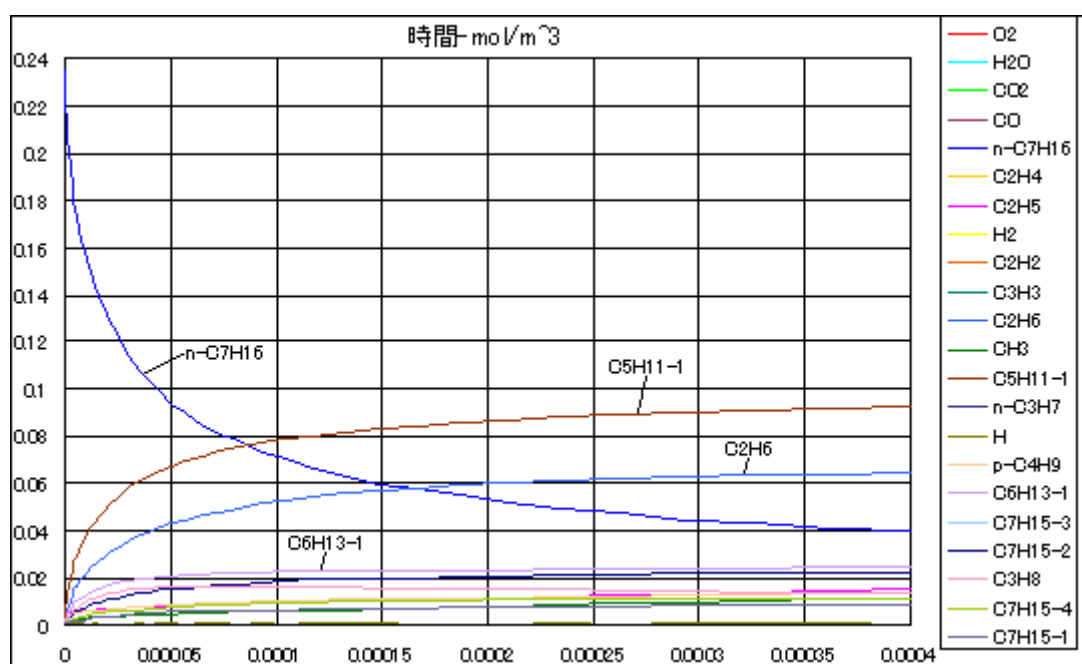


図 12.5

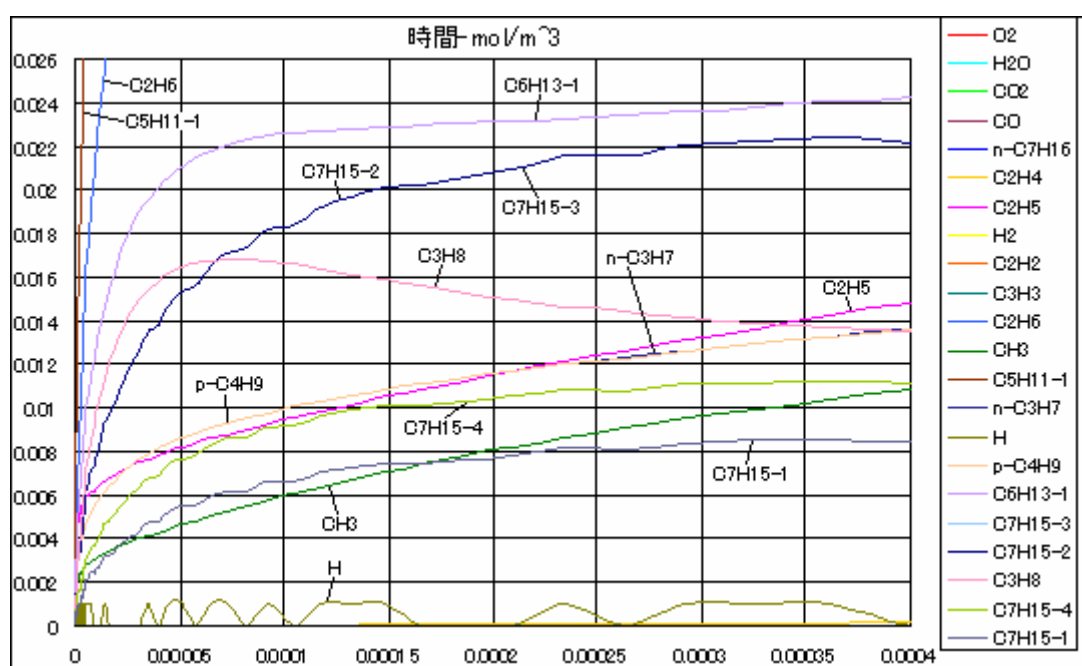


図 12.6



## 6. 考察

### 6.1 数値計算を行った上で

本研究では様々な可燃物質の予混合気の自発点火現象について数値計算を行ってきたわけであるが、その結果に妥当性があるかどうか検証する必要がある。しかしながら、今のところ、本研究で数値計算を行った、体積一定条件における予混合気の自発点火という現象について、理想的な環境で実験が行われているわけではないので、単純に実験結果と比較してデータが合っているか違っているかを確かめることはできない。ただし、似たような環境における実験結果は存在するので、計算方法と関連付けながら、実験結果と計算結果の相関関係を調べることは可能である。なお、計算結果についても、複数の条件について計算したものもあるので、矛盾点がないかどうか調べる必要もある。

計算結果全体を眺めてみると、正ヘプタン以外、要するにメタン、アセチレン、メタノール、プロパン、正ブタンについては、点火遅れ(自発点火までに要する時間)についても、燃焼反応の結果として生じる物質についても、とりあえず常識的に考えられる範囲である。しかしながら、正ヘプタンの場合は、どちらの素反応モデルを使用した場合についても、点火遅れの時間や、物質的に平衡に達する時間が異様に短いということに問題がありそうである。その一方で、正ヘプタンの場合にも、素反応モデル 1 (化学種 29、素反応 52)を使用した場合の結果では、燃焼反応に関連する物質と、燃焼反応の結果として生じる物質については、一応、予想されるものではあるだろう。また、素反応モデル 2 (化学種 160、素反応 770)を使用した場合の計算結果についても、水が大量に生成しているところを見る限り、燃焼反応に関連する物質と、燃焼反応の結果として生じる物質については、特に問題はないのかもしれない。ただし、物質的な平衡までは計算できなかったので何ともいえない。あと、グラフを見ると、素反応モデル 1 を使用した計算結果と、素反応モデル 2 を使用した計算結果で、断熱火炎温度や、温度の上昇の仕方が異なることは、気になるところである。

正ヘプタンの燃焼反応については、一見ただけでも計算結果には様々な問題点が見つかるものであり、それ以外の物質の燃焼反応についても、結果の妥当性については疑問が残るところも多い。しかしながら、燃焼反応についての数値計算は、非常に複雑なので計算能力的にも厳しく、この問題の計算の精度向上による解決は非常に難しい。計算能力については、近年、コンピューターの性能が一段と向上したので、ある程度何とかできるようになったが、それでも思い通りに計算できるレベルには至っていない。実際に、本研究における数値計算は、何とか燃焼反応について最後まで計算を進めるのが精一杯であり、途中でしか計算できなかったものも存在する

## 6.2 個別の数値計算結果の分析

ここでは、それぞれの物質の燃焼反応について、計算結果を示すグラフから読み取れることについて説明する。

まず、反応の結果、最終的に生成している物質について考えてみることにする。メタン、アセチレン、メタノール、プロパンの燃焼反応では、図 1.1～図 5.4 から分かるように、主なものとしては、 $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{CO}$  があり、その他、 $\text{H}_2$ 、 $\text{OH}$ 、 $\text{H}$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{NO}$  という物質が存在している。ただし、図 2.1～2.4 を見ると分かるように、当量比 0.1 であるメタン - 空気の混合気の燃焼反応では、 $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$  しか生成していないことが分かる。最終的にこのような物質の組成になる理由としては、次のようなことが考えられる。 $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$  が発生するのは燃焼現象である以上、総括反応式から分かることであるが、かなりの量の  $\text{CO}$  が発生するのは、当量比 1 (量論混合比) であっても実際には、高温環境では解離現象により総括反応式にはない反応が起こり酸素の量が不足することや、高温のまま物質的に平衡に達しているため、 $\text{CO}$  と  $\text{O}_2$  の反応が途中で平衡に達してしまうことにより、不完全燃焼になるためである。高温のまま反応が終了しているのは、完全な断熱変化を仮定しているためである。なお、当量比 0.1 であるメタン - 空気の混合気の燃焼反応というような希薄燃焼では、酸素の量に余裕があり、反応後の温度も低くなる条件なので、ほぼ完全燃焼となり、 $\text{CO}$  はほとんど発生しない。当量比 1 の燃焼反応ではどれも、反応終了後に  $\text{H}_2$  が残っているのは、自発点火前(急激に温度が上昇するよりも前の段階)に  $\text{H}_2$  の生成が始まり、自発点火反応で大きく減少していることを見ると、高温のまま反応が終了しているため、 $\text{O}_2$  との反応が途中で平衡に達しているからであると考えられる。当量比 0.1 であるメタン - 空気の混合気の燃焼反応では、反応後の温度が低いので、自発点火とともに  $\text{H}_2$  は急激に減少して消滅している。反応終了後に  $\text{OH}$ 、 $\text{H}$ 、 $\text{O}$  が残っているのは、自発点火前にこれらの物質がほとんど生成していないことを見ると、高温のため  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{O}_2$ 、 $\text{H}_2$  が解離して生じたためであると考えられる。当量比 0.1 であるメタン - 空気の混合気の燃焼反応では、反応後の温度が低いので、 $\text{OH}$ 、 $\text{H}$ 、 $\text{O}$  は、ほとんど生成していない。 $\text{NO}$  が生成しているのは、一般に言われるように、高温では  $\text{N}_2$  と  $\text{O}_2$  が反応して  $\text{NO}$  になるためである。この反応は、高温であるほど  $\text{NO}$  への反応が進むので、反応後の温度が低い当量比 0.1 であるメタン - 空気の混合気の燃焼反応では、ほとんど  $\text{NO}$  は発生していない。実際に、公害の原因とされる窒素酸化物の発生を避けるために、希薄燃焼により燃焼温度を下げることも行われている。正ブタンの燃焼反応でも図 6.1～図 7.4 から分かるように、主なものとしては、 $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{CO}$  があり、その他、 $\text{H}_2$ 、 $\text{OH}$ 、 $\text{H}$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{C}-\text{C}_5\text{H}_4\text{O}$  という物質が存在している。正ブタンの燃焼反応の数値計算は、使用した素反応モデルの都合上、正ブタン - 酸素の混合気の自発点火をシミュレートしたものである。正ブタンの燃焼反応の場合もやはり、当量比 1 であれば、 $\text{CO}$  がたくさん生成しているが、当量比 0.1 だと、 $\text{CO}$  はほとんど生成していない。ただし、この場合、

当量比 0.1 でも、当量比 0.1 であるメタン - 空気の混合気の燃焼反応よりは反応後の温度が高いので、OH が少し残った状態になっている。あと、当量比 1 のときには、反応終了後に  $C-C_5H_4O$  という物質が残っているが、当量比 0.1 のときは残っていないという違いがある。正ヘプタンの燃焼反応では、物質的に平衡に達するまで計算したのは、素反応モデル 1 (化学種 29、素反応 52) を用いて計算した、反応開始時の温度が 973K (700 度) の条件のもの 2 種類だけなので、この 2 つについてのみ考えることにする。正ヘプタンの燃焼反応では図 8.1 ~ 図 9.9 から分かるように、主なものとしては、 $H_2O$ 、 $CO_2$ 、 $CO$  があり、その他、 $H_2$ 、 $OH$ 、 $H$ 、 $O$ 、 $C_2H_5$  という物質が存在している。メタン、アセチレン、メタノール、プロパン、正ブタンと異なり、未燃炭化水素  $C_2H_5$  があるという特徴がある。また、正ヘプタンの場合、当量比 0.1 の希薄燃焼でも反応後の温度がかなり高温になるので、 $CO$ 、 $H_2$ 、 $OH$ 、 $O$  の生成がある。ただし、 $CO$  の生成は少なく、未燃炭化水素  $C_2H_5$  は、ほとんど発生していない。

次に自発点火に関連している物質について考えることにする。メタン、アセチレン、メタノール、プロパンについては、それぞれ、自発点火前に様々な中間生成物が生成しているわけである。その中で、メタンとプロパンでは、中間生成物の中に炭化水素系統が多いが、アセチレンとメタノールでは酸素原子  $O$  を含む中間生成物が多いことが分かる。また、炭素  $C$  の数が多い物質の燃焼反応ほど、中間生成物の中に複雑な組成のものが多くことが分かる。正ブタンの燃焼については、当量比が 1 の場合と当量比が 0.1 の場合とで、燃焼反応のパターンが異なることが分かった。これは、中間生成物  $C-C_5H_4O$  他の物質と反応して消滅するか、そのまま残るかの違いであることをグラフから読み取ることができる。また、正ブタンの場合には、最初に、 $C_4H_{10}$  が解離して次々に炭素原子  $C$  の数が少ない炭化水素が生成していることが分かる。正ヘプタンの燃焼については、2 つの素反応モデルを用いて計算したが、素反応モデル 1 (化学種 29、素反応 52) を用いて計算した結果と、素反応モデル 2 (化学種 160、素反応 770) を用いて計算した結果にはいくつかの違いがあった。反応後の温度が異なることはもちろん、温度の上昇の仕方や、反応にかかる時間など、あらゆる面で異なる。確かに、素反応モデル 2 は素反応モデル 1 よりも多くの化学種と素反応を扱っているので、反応の際に、より多くの種類の炭化水素が関係しているという結果が出ているのは当然のことだろう。ただし、反応の過程で  $C_2H_4$  と  $C_2H_5$  が多く生成しているのは両者の共通点である。より多くのデータを得ることができた、素反応モデル 1 を使用して得た計算結果からは次のようなことが分かった。まず 1 つは、計算結果から、正ヘプタンの燃焼反応では何段階にもわたって反応が進んでいくが、それぞれの反応に固有の中間生成物が関連しているということである。実際には、最初に少しだけ温度が上昇している反応は冷炎反応として知られている。もう 1 つは、反応開始時の温度や、混合気の当量比が違って、反応のメカニズム自体は同じであるということである。グラフを見れば、それぞれの段階で起きる反応に関係している中間生成物は、反応開始時の温度や混合気の当量比が違って同じであることが分かる。素反応モデル 2 を使用して得た計算結果からは、反

応が何段階にもわたって起きていることを読み取ることはできなかった。計算方法に問題があった可能性も否定できないが、この素反応モデルでは、扱っている化学種と素反応の数は多いものの、冷炎反応はシミュレートできない可能性が高い。正ヘプタンの燃焼のメカニズムは複雑で、現在では十分に解明されていないので、素反応モデル自体の信頼性も高いとはいえない。まして、簡略化したモデルともなると、さらに正確性に欠けることになりがちである。

## 6.3 まとめ

本研究で行った数値計算についての一番の問題点は、正ヘプタンの燃焼反応で、反応時間が異様に短くなることである。その他、断熱火炎温度についても、実験結果よりも高い温度になっているが、これについては、実験では体積一定で断熱変化という条件を正確に再現できないことを考えれば、ある程度の妥当性はあるであろう。ただし、正ヘプタンの燃焼反応について、使用した素反応モデルにより、断熱火炎温度まで違ってきていることは気になる点である。その一方で、素反応モデル 1 を使用して得た計算結果からは、実際に知られている冷炎反応の現象を捉えられたので、それなりに良い結果が得られていると言える。その他、反応によって、生成している物質について見れば、実験結果と比較して、定性的には、ある程度、妥当性はあるであろう。ただし、実験環境と、計算条件は完全に同じではないので、はっきりしたことは何とも言えない。今後、実験方法が改良され、本研究のような条件での正確な実験が可能になり、計算との比較がしっかりできるようになることを期待するところである。

先にも述べたように、本研究では、一応のところの計算結果を出すのが精一杯であり、計算精度を向上させるどころではなかった。ただし、最も基本的な計算方法である Euler 法でありながら、時間刻みの工夫により、複雑な燃焼反応のシミュレーションが可能にできたことは、本研究の大きな意義であると考えられる。

## 7. おわりに

### 7.1 謝辞

本研究の遂行にあたって、多くの、援助をいただいた方々に感謝します。まず、研究方針について、多くのアドバイスをいただいた、河野 通方 教授、研究方法のアドバイス及び、研究に必要な様々な資料を提供してくださった、津江 光洋 助教授、燃焼現象に関する数値計算プログラムの例を提供してくださった、河野研究室の先輩である、中谷 辰爾さんに感謝します。その他、研究に直接的には関係ないにしても、様々な点で協力してくださった、河野研究室の多くの方々に感謝します。このように、無事、研究として完成させることに協力してくださいまして、どうもありがとうございました。

### 7.2 参考資料

燃焼現象の基礎、新岡 嵩・河野 通方・佐藤 順一

基礎講座 燃焼学入門、飯沼 一男

工業熱力学、岡島 敏 河野 通方 著

[http://www.erc.wisc.edu/modeling/modeling\\_index.htm](http://www.erc.wisc.edu/modeling/modeling_index.htm)

<http://www-cms.llnl.gov/combustion/combustion2.html>

<http://www-cms.llnl.gov/combustion/archive.html>

<http://www.princeton.edu/~fldryer/nasa.dir/current3.htm>

[http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)

### 7.3 学会発表・学会誌掲載のリスト

記載する内容はありません。