

Supplementary material for

Exploration of the influence of environmental conditions on secondary organic aerosol formation and organic species properties using explicit simulations: development of the VBS-GECKO parameterization

Victor Lannuque^{1,2,3}, Marie Camredon¹, Florian Couvidat², Alma Hodzic^{4,5}, Richard Valorso¹, Sasha Madronich⁴, Bertrand Bessagnet² and Bernard Aumont¹

10 ¹LISA, UMR CNRS 7583, IPSL, Université Paris Est Créteil and Université Paris Diderot, 94010 Créteil Cedex, France.

² INERIS, National Institute for Industrial Environment and Risks, Parc Technologique ALATA, 60550 Verneuil-en-Halatte, France.

15 ³ Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie, 20 avenue du Grésillé - BP 90406, 49004 Angers Cedex 01, France.

⁴National Center for Atmospheric Research, Boulder, Colorado, USA.

⁵Laboratoire d'Aérologie, Observatoire Midi-Pyrénées, Université Paul Sabatier, CNRS, Toulouse, France.

20 *Correspondence to:* Marie Camredon (marie.camredon@lisa.u-pec.fr) and Bernard Aumont (bernard.aumont@lisa.u-pec.fr).

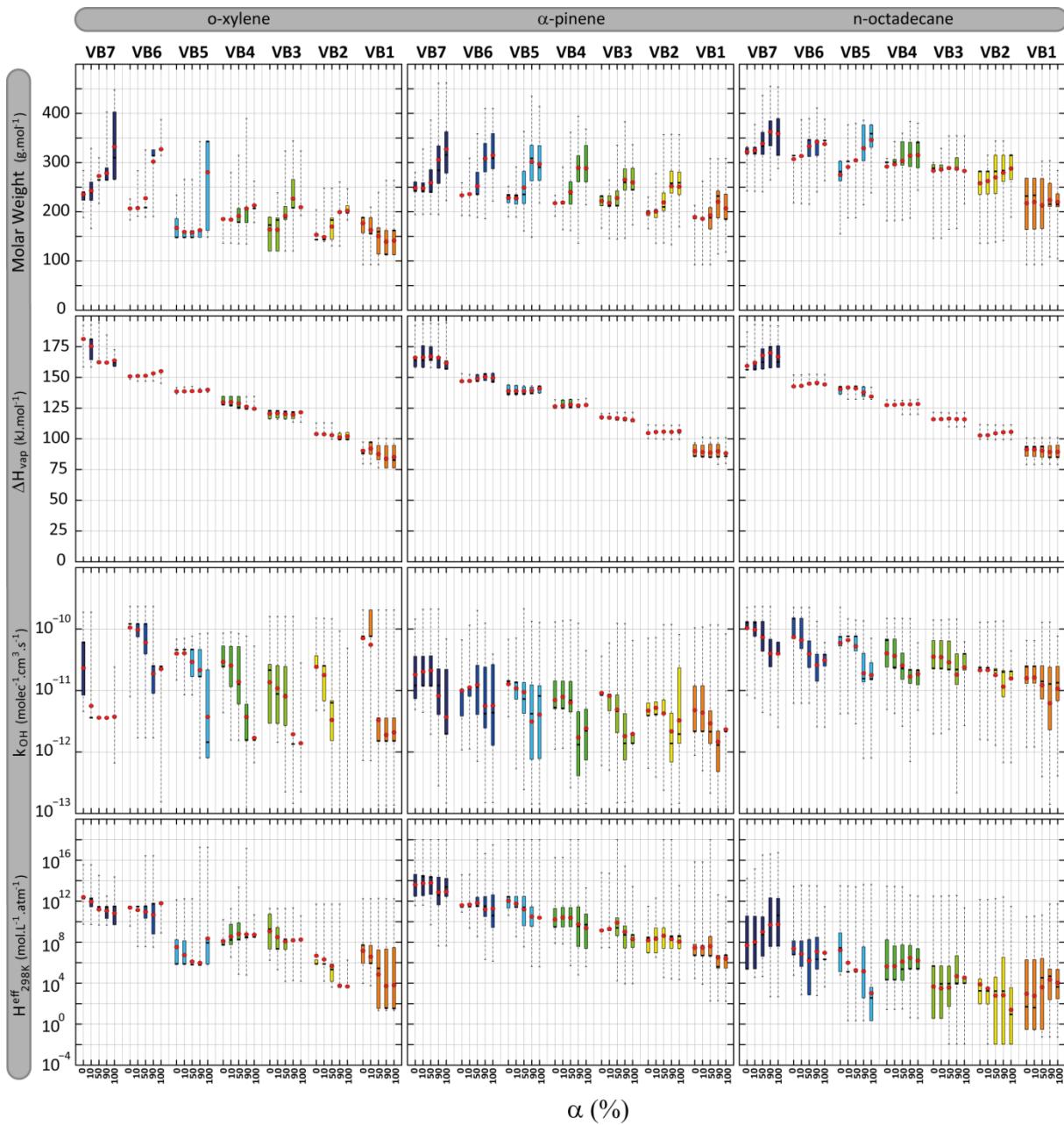


Figure S1: Boxplots of the distribution of organic species (gaseous and particulate summed) in term of volatility ($P_{\text{sat},298\text{K}}$) and molar mass (Mw), vaporisation enthalpy ($\Delta\text{H}_{\text{vap}}$), OH reactivity (k_{OH}) and solubility ($H_{\text{eff}}^{298\text{K}}$). Simulated results are shown for o-xylene, α -pinene and n-octadecane oxidation during 5 days of oxidation for the scenarios performed at a temperature of 298K, a zenith angle of 50°, a C_{OA} of $1 \mu\text{g m}^{-3}$, 40 ppb of ozone and at 5 different α values: 0, 10, 50, 90 and 100%. The distribution of the properties weighted by the concentration in carbon atoms of the species in each volatility class is represented as boxplots showing the 25, 50 and 75 percentiles and the minimal and maximal values. Red points are the mean properties weighted by the concentration in carbon atoms of the species in each volatility class.

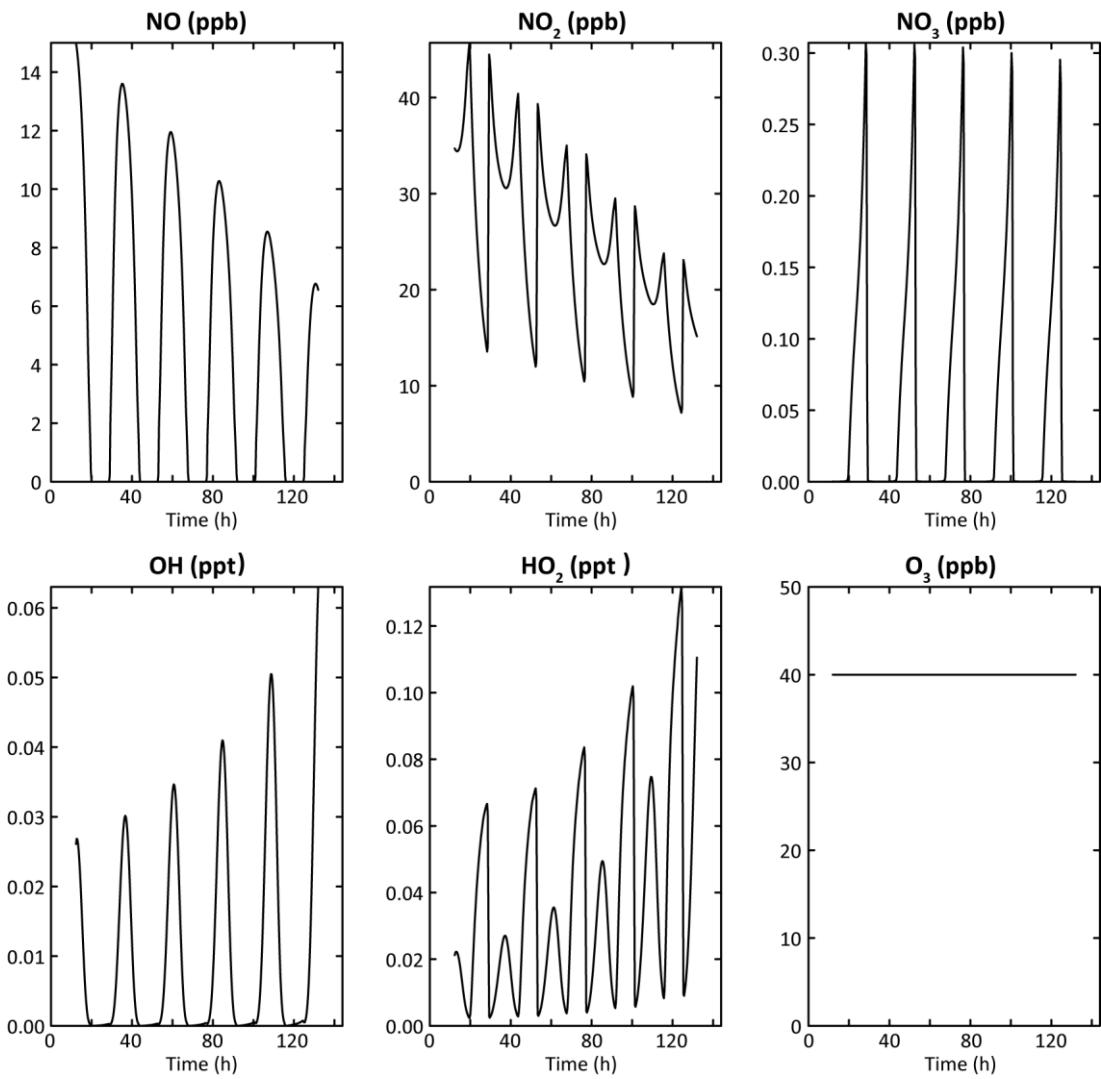


Figure S2: Simulated temporal evolutions of NO, NO₂, NO₃, OH, HO₂ and O₃ concentrations for the SUM_HNOX evaluation scenarios.

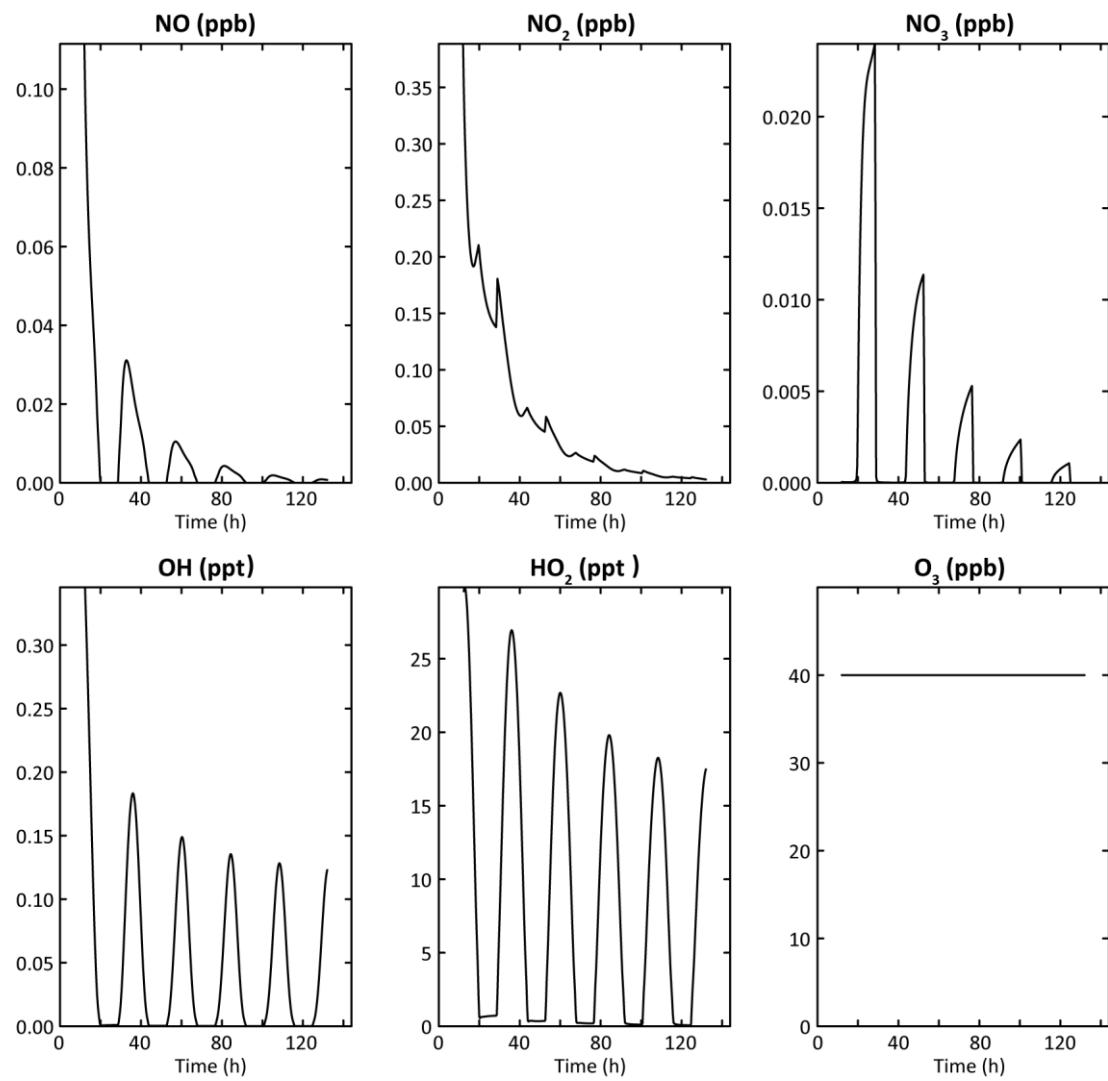


Figure S3: Simulated temporal evolutions of NO, NO₂, NO₃, OH, HO₂ and O₃ concentrations for the SUM_LNOX evaluation scenarios.

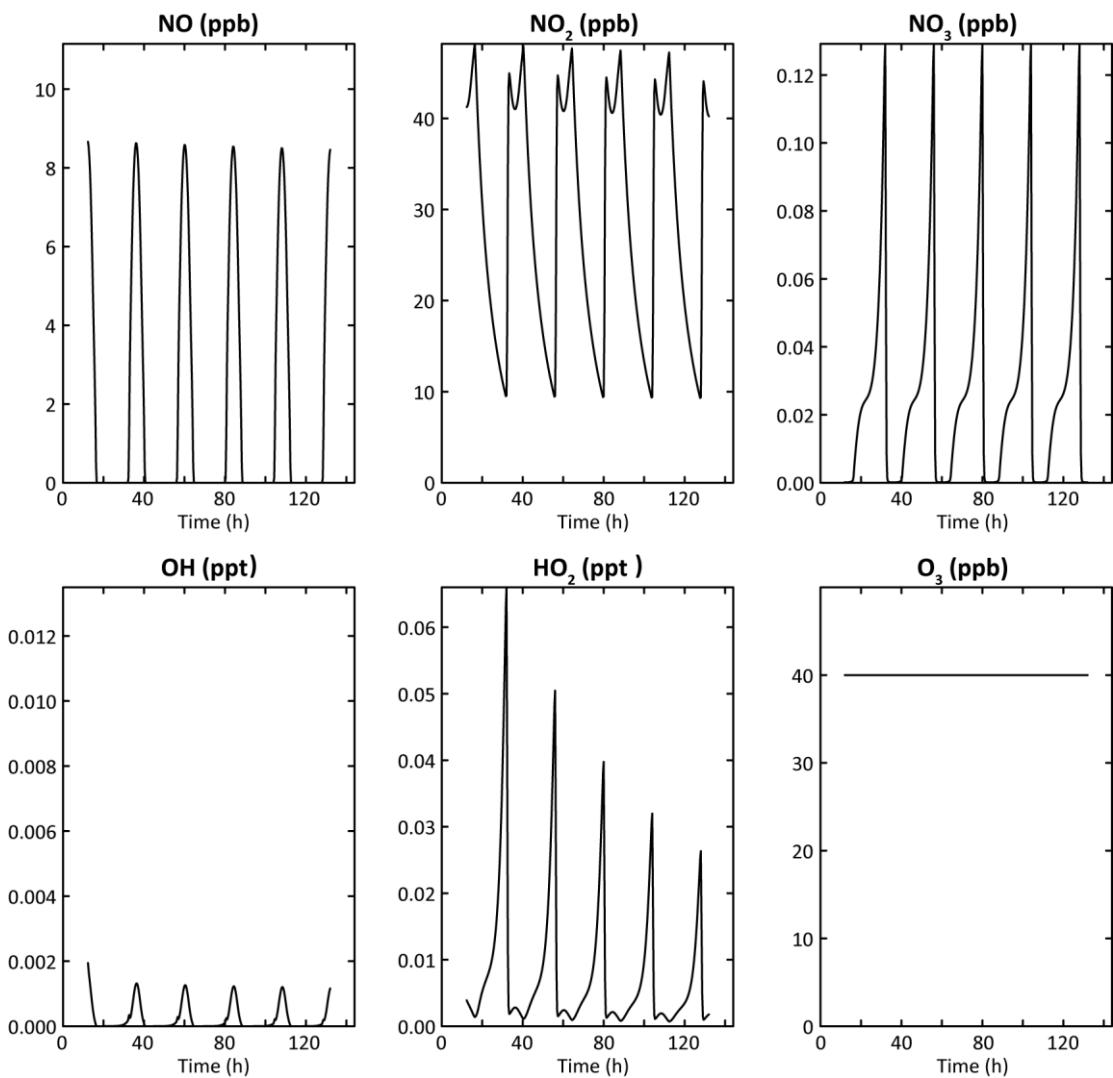


Figure S4: Simulated temporal evolutions of NO, NO₂, NO₃, OH, HO₂ and O₃ concentrations for the WIN_HNOX evaluation scenarios.

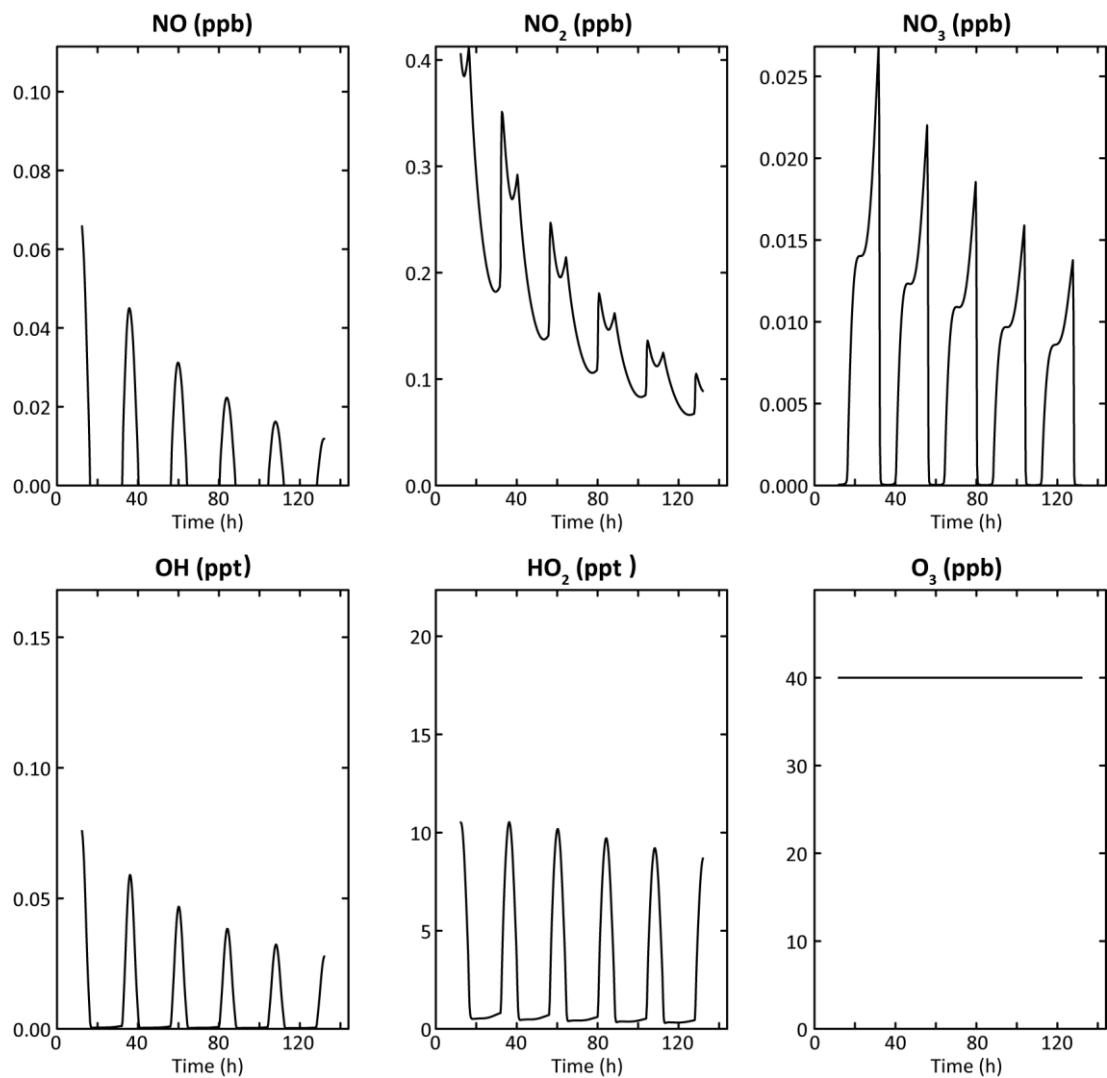


Figure S5: Simulated temporal evolutions of NO, NO₂, NO₃, OH, HO₂ and O₃ concentrations for the WIN_LNOX evaluation scenarios.

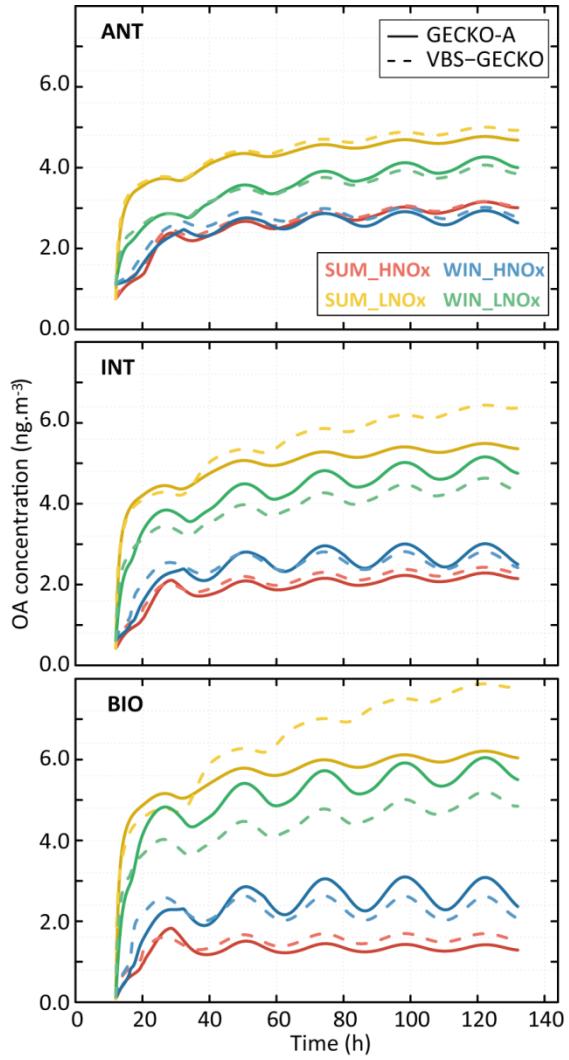


Figure S6: Simulated organic aerosol (OA) mass with GECKO-A (continuous lines) and VBS-GECKO (dashed lines), for the different evaluation scenarios using $C_{oa} = 20 \mu\text{g.m}^{-3}$. Top panel presents results for the ANT cases, middle panel for the INT cases and bottom panel for the BIO cases. The different colours represent the different scenarios (see text).

Table S1: Matrices of the optimized coefficients of the VBS-GECKO parameterization.

How to read the table:

<i>ALC10 + OH => ALC1B(1-7) ← reaction</i>							
5	0.123	0.039	0.108	0.001	0.000	0.000	0.000
	0.176	0.038	0.139	0.009	0.003	0.001	0.000
	0.295	0.054	0.094	0.019	0.019	0.002	0.003
	0.222	0.092	0.058	0.035	0.019	0.002	0.005
	0.175	0.030	0.003	0.008	0.002	0.000	0.000
10	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑
	VB1	VB2	VB3	VB4	VB5	VB6	VB7
							← volatility bin formed

OXIDATION REACTIONS						(k in $s^{-1} \text{molec}^{-1} \text{cm}^3$)
ALC10 + OH => ALC1B(1-7)						$k = 1.099 \times 10^{-11}$
0.123	0.039	0.108	0.001	0.000	0.000	0.000
0.176	0.038	0.139	0.009	0.003	0.001	0.000
0.295	0.054	0.094	0.019	0.019	0.002	0.003
0.222	0.092	0.058	0.035	0.019	0.002	0.005
0.175	0.030	0.003	0.008	0.002	0.000	0.000
ALC1B1 + OH => ALC1B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.970	0.011	0.000	0.027	0.006	0.009	0.000
0.957	0.015	0.008	0.029	0.012	0.006	0.002
0.964	0.011	0.026	0.025	0.012	0.002	0.003
0.981	0.011	0.009	0.006	0.002	0.000	0.000
0.941	0.164	0.046	0.008	0.002	0.000	0.002
ALC1B2 + OH => ALC1B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.000	0.965	0.000	0.100	0.010	0.022	0.000
0.000	0.968	0.000	0.083	0.000	0.017	0.008
0.000	0.905	0.120	0.033	0.000	0.004	0.000
0.000	0.870	0.000	0.000	0.010	0.010	0.001
0.000	0.552	0.056	0.000	0.024	0.014	0.001
ALC1B3 + OH => ALC1B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.999	0.000	0.741	0.000	0.000	0.005	0.000
0.800	0.000	0.609	0.000	0.015	0.006	0.001
0.000	0.101	0.111	0.083	0.050	0.021	0.022
0.000	0.102	0.864	0.025	0.008	0.000	0.009
0.000	0.035	0.555	0.071	0.002	0.005	0.000
ALC1B4 + OH => ALC1B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.000	0.292	0.000	0.329	0.036	0.000	0.077
0.000	0.140	0.000	0.253	0.001	0.018	0.000
0.000	0.299	0.335	0.236	0.000	0.000	0.079
0.000	0.006	0.107	0.706	0.002	0.005	0.029
0.000	0.087	0.263	0.794	0.071	0.000	0.000
ALC1B5 + OH => ALC1B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.000	0.227	0.001	0.027	0.008	0.073	0.143
0.000	0.542	0.006	0.213	0.375	0.000	0.373
0.001	0.087	0.030	0.086	0.247	0.034	0.050
0.000	0.105	0.099	0.242	0.004	0.045	0.017
0.000	0.154	0.119	0.262	0.147	0.130	0.193
ALC1B6 + OH => ALC1B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.130	0.104	0.003	0.000	0.069	0.000	0.364
0.045	0.081	0.003	0.064	0.145	0.200	0.058
0.002	0.005	0.202	0.142	0.226	0.304	0.241
0.001	0.176	0.185	0.185	0.079	0.161	0.104
0.037	0.144	0.181	0.080	0.093	0.399	0.117

<i>ALC14 + OH => ALC2B(1-7)</i>						<i>k = 1.678 × 10⁻¹¹</i>
0.595	0.100	0.000	0.004	0.059	0.004	0.000
0.610	0.012	0.039	0.003	0.084	0.000	0.001
0.560	0.009	0.165	0.032	0.072	0.009	0.010
0.613	0.001	0.189	0.175	0.078	0.032	0.015
0.879	0.000	0.115	0.019	0.019	0.007	0.000
<i>ALC2B1 + OH => ALC2B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.676	0.261	0.000	0.036	0.063	0.000	0.000
0.650	0.289	0.009	0.069	0.030	0.004	0.005
0.740	0.116	0.028	0.077	0.049	0.015	0.007
0.815	0.038	0.012	0.020	0.009	0.001	0.000
0.687	0.040	0.032	0.087	0.029	0.006	0.001
<i>ALC2B2 + OH => ALC2B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.612	0.000	0.000	0.181	0.197	0.038	0.007
0.600	0.000	0.000	0.079	0.269	0.039	0.009
0.214	0.522	0.054	0.000	0.000	0.045	0.021
0.343	0.874	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.060	0.541	0.245	0.000	0.061	0.000	0.017
<i>ALC2B3 + OH => ALC2B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.000	0.774	0.000	0.000	0.305	0.044
0.000	0.000	0.797	0.000	0.000	0.227	0.088
0.000	0.386	0.465	0.000	0.108	0.004	0.054
0.000	0.000	0.682	0.000	0.087	0.048	0.090
0.000	0.408	0.234	0.000	0.043	0.067	0.086
<i>ALC2B4 + OH => ALC2B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.000	0.683	0.000	0.000	0.000	0.014
0.127	0.000	0.343	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.224	0.000	0.000	0.000	0.319	0.303
0.000	0.000	0.166	0.320	0.000	0.050	0.059
0.103	0.000	0.163	0.000	0.000	0.000	0.162
<i>ALC2B5 + OH => ALC2B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.000	0.384	0.183	0.000	0.059	0.000
0.000	0.000	0.300	0.202	0.000	0.342	0.000
0.069	0.004	0.000	0.692	0.000	0.000	0.220
0.000	0.000	0.045	0.473	0.171	0.003	0.303
0.277	0.067	0.245	0.446	0.450	0.002	0.000
<i>ALC2B6 + OH => ALC2B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.897
0.000	0.005	0.000	0.295	0.000	0.000	0.758
0.036	0.000	0.462	0.245	0.278	0.000	0.150
0.000	0.000	0.005	0.021	0.396	0.477	0.004
0.242	0.071	0.063	0.271	0.148	0.344	0.035

<i>ALC18 + OH => ALC3B(1-7)</i>						<i>k = 2.224 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.000	1.000	0.002	0.000	0.000	0.013
0.000	0.028	0.953	0.000	0.061	0.000	0.000
0.022	0.182	0.656	0.000	0.171	0.020	0.014
0.000	0.358	0.570	0.000	0.140	0.048	0.032
0.000	0.381	0.621	0.000	0.102	0.022	0.004
<i>ALC3B1 + OH => ALC3B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.191	0.176	0.000	0.334	0.000	0.000	0.000
0.268	0.000	0.052	0.243	0.000	0.096	0.000
0.608	0.000	0.350	0.034	0.007	0.049	0.000
0.574	0.349	0.000	0.007	0.028	0.000	0.000
0.836	0.000	0.000	0.035	0.000	0.000	0.000
<i>ALC3B2 + OH => ALC3B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.676	0.110	0.000	0.000	0.355	0.000
0.000	0.802	0.000	0.000	0.000	0.000	0.334
0.000	0.791	0.000	0.047	0.046	0.000	0.019
0.414	0.473	0.019	0.008	0.001	0.039	0.008
0.000	0.715	0.085	0.000	0.050	0.056	0.004
<i>ALC3B3 + OH => ALC3B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.997	0.000	0.033	0.114	0.000	0.000	0.201
0.875	0.020	0.000	0.183	0.000	0.000	0.215
0.391	0.000	0.000	0.154	0.000	0.131	0.254
0.000	0.000	0.432	0.102	0.054	0.140	0.160
0.186	0.000	0.111	0.068	0.044	0.220	0.204
<i>ALC3B4 + OH => ALC3B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.000	0.000	0.000	0.111	0.000	0.384
0.000	0.157	0.000	0.000	0.058	0.252	0.000
0.000	0.076	0.002	0.327	0.014	0.000	0.182
0.000	0.000	0.000	0.706	0.000	0.000	0.112
0.073	0.000	0.000	0.656	0.000	0.000	0.219
<i>ALC3B5 + OH => ALC3B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.000	0.000	1.000	0.268	0.000	1.000
0.000	1.000	0.000	0.000	0.276	0.000	1.000
0.000	0.029	0.000	0.323	0.237	0.000	0.852
0.000	0.000	0.000	0.200	0.210	0.000	0.584
0.020	0.000	0.000	0.246	0.063	0.000	0.589
<i>ALC3B6 + OH => ALC3B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.000	0.000	0.333	0.000	0.000	0.812
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.287
0.000	0.020	0.022	0.079	0.257	0.000	0.183
0.000	0.000	0.000	0.059	0.009	0.000	0.415
0.195	0.000	0.000	0.034	0.463	0.000	0.000

<i>ALC22 + OH => ALC4B(1-7)</i>						<i>k = 2.811 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.002	0.010	0.000	0.972	0.022	0.006
0.000	0.006	0.010	0.033	0.880	0.017	0.060
0.000	0.002	0.014	0.168	0.633	0.025	0.179
0.007	0.025	0.014	0.309	0.552	0.083	0.105
0.001	0.000	0.000	0.346	0.590	0.104	0.023
<i>ALC4B1 + OH => ALC4B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.229	0.003	0.233	0.163	0.000	0.000	0.994
0.488	0.231	0.023	0.054	0.000	0.000	0.498
0.008	0.038	0.177	0.050	0.000	0.031	0.184
0.129	0.002	0.033	0.006	0.005	0.028	0.000
0.707	0.196	0.159	0.000	0.000	0.005	0.000
<i>ALC4B2 + OH => ALC4B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.491	0.507	0.003	0.233	0.000	0.000	0.605
0.263	0.669	0.032	0.181	0.000	0.147	0.452
0.296	0.406	0.252	0.122	0.000	0.135	0.226
0.104	0.010	0.082	0.153	0.080	0.034	0.228
0.131	0.260	0.044	0.000	0.000	0.000	0.000
<i>ALC4B3 + OH => ALC4B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.056	0.006	0.103	0.000	0.000	0.045
0.000	0.000	0.012	0.155	0.000	0.000	0.096
0.000	0.000	0.199	0.000	0.000	0.001	0.000
0.201	0.142	0.090	0.037	0.080	0.010	0.281
0.276	0.022	0.316	0.018	0.000	0.152	0.000
<i>ALC4B4 + OH => ALC4B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.000	0.000	0.506	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.013	0.361	0.000	0.000	0.443
0.238	0.024	0.279	0.620	0.000	0.128	0.381
0.281	0.076	0.022	0.629	0.005	0.007	0.253
0.011	0.000	0.000	0.568	0.000	0.007	0.471
<i>ALC4B5 + OH => ALC4B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.000	0.997	0.000	0.000	0.417	0.414
0.000	0.000	0.983	0.000	0.000	0.377	0.441
0.000	0.000	0.268	0.000	0.000	0.124	0.644
0.177	0.000	0.000	0.000	0.000	0.106	0.683
0.186	0.179	0.066	0.000	0.000	0.077	0.454
<i>ALC4B6 + OH => ALC4B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.000	0.014	0.892	0.000	0.000	0.985
0.000	0.000	0.001	0.924	0.000	0.000	0.279
0.176	0.189	0.060	0.129	0.051	0.093	0.326
0.304	0.060	0.102	0.054	0.093	0.639	0.084
0.110	0.071	0.012	0.178	0.083	0.567	0.102

<i>ALC26 + OH => ALC5B(1-7)</i>						<i>k = 3.377 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.000	0.029	0.004	0.014	0.000	0.924
0.000	0.000	0.032	0.013	0.014	0.031	0.892
0.000	0.000	0.044	0.013	0.017	0.145	0.755
0.000	0.000	0.044	0.022	0.012	0.245	0.629
0.000	0.000	0.034	0.019	0.001	0.301	0.664
<i>ALC5B1 + OH => ALC5B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.070	0.053	0.000	0.000	0.000	0.000	0.483
0.352	0.005	0.079	0.012	0.000	0.179	0.063
0.043	0.110	0.002	0.003	0.002	0.104	0.378
0.047	0.088	0.092	0.014	0.001	0.180	0.273
0.001	0.000	0.000	0.000	0.008	0.140	0.455
<i>ALC5B2 + OH => ALC5B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.075	0.041	0.000	0.001	0.000	0.000	0.421
0.000	0.278	0.000	0.001	0.119	0.089	0.083
0.095	0.000	0.061	0.000	0.000	0.120	0.295
0.014	0.171	0.001	0.000	0.003	0.022	0.451
0.042	0.125	0.113	0.000	0.004	0.215	0.537
<i>ALC5B3 + OH => ALC5B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.353	0.430	0.604	0.003	0.001	0.001	0.808
0.000	0.000	0.617	0.000	0.000	0.002	1.000
0.097	0.237	0.597	0.000	0.000	0.087	0.873
0.176	0.096	0.679	0.000	0.000	0.227	0.691
0.229	0.314	0.345	0.000	0.000	0.318	0.814
<i>ALC5B4 + OH => ALC5B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.029	0.020	0.007	0.036	0.049	0.002	0.154
0.066	0.053	0.107	0.400	0.000	0.103	0.502
0.141	0.110	0.090	0.326	0.001	0.039	0.470
0.155	0.118	0.160	0.309	0.031	0.174	0.312
0.300	0.247	0.149	0.056	0.064	0.184	0.736
<i>ALC5B5 + OH => ALC5B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.001	0.023	0.000	0.078	0.973	0.000	0.105
0.001	0.136	0.000	0.000	0.898	0.012	0.250
0.011	0.178	0.155	0.111	0.219	0.002	0.240
0.037	0.304	0.057	0.123	0.354	0.073	0.232
0.040	0.119	0.011	0.159	0.025	0.115	0.068
<i>ALC5B6 + OH => ALC5B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.221	0.008	0.110	0.027	0.015	0.986	0.155
0.003	0.136	0.000	0.034	0.083	0.007	0.274
0.181	0.067	0.005	0.046	0.121	0.143	0.535
0.031	0.351	0.088	0.000	0.003	0.061	0.333
0.216	0.000	0.000	0.000	0.004	0.170	0.613

<i>ENE10 + OH => ENE1B(1-7)</i>						<i>k = 4.402 × 10⁻¹¹</i>
0.387	0.346	0.036	0.000	0.002	0.039	0.000
0.367	0.326	0.033	0.003	0.000	0.039	0.009
0.322	0.132	0.049	0.055	0.008	0.040	0.019
0.273	0.139	0.072	0.074	0.006	0.015	0.011
0.286	0.124	0.027	0.021	0.001	0.002	0.002
<i>ENE10 + O3 => ENE1B(1-7)</i>						<i>k = 0.929 × 10⁻¹⁷</i>
0.403	0.071	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.362	0.157	0.000	0.006	0.012	0.000	0.000
0.219	0.148	0.170	0.014	0.039	0.006	0.000
0.128	0.660	0.092	0.010	0.011	0.017	0.000
0.167	0.435	0.086	0.000	0.000	0.011	0.000
<i>ENE10 + NO3 => ENE1B(1-7)</i>						<i>k = 0.265 × 10⁻¹³</i>
0.065	0.161	0.003	0.121	0.013	0.016	0.073
0.070	0.052	0.000	0.209	0.000	0.037	0.070
0.168	0.084	0.081	0.313	0.009	0.071	0.039
0.108	0.401	0.057	0.146	0.015	0.074	0.094
0.238	0.292	0.102	0.182	0.003	0.038	0.024
<i>ENE1B1 + OH => ENE1B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.88	0.000	0.178	0.020	0.017	0.012	0.000
0.863	0.000	0.145	0.036	0.015	0.018	0.000
0.927	0.000	0.041	0.031	0.008	0.006	0.000
0.971	0.060	0.003	0.002	0.000	0.000	0.000
0.906	0.103	0.048	0.015	0.000	0.000	0.000
<i>ENE1B2 + OH => ENE1B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.063	0.000	0.086	0.000	0.000	0.000	0.025
0.185	0.000	0.102	0.000	0.000	0.000	0.011
0.000	0.845	0.161	0.064	0.030	0.028	0.035
0.000	0.115	0.128	0.127	0.034	0.028	0.001
0.000	0.000	0.033	0.152	0.008	0.034	0.000
<i>ENE1B3 + OH => ENE1B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.043	1.000	0.000	0.385	0.025	0.117	0.002
0.000	1.000	0.000	0.340	0.031	0.092	0.061
0.139	0.155	0.103	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.103	0.778	0.011	0.011	0.005	0.028
0.000	0.012	0.576	0.000	0.018	0.000	0.000
<i>ENE1B4 + OH => ENE1B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	1.000	0.889	0.000	0.000	0.047	0.023
0.000	1.000	0.483	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.063	0.258	0.000	0.000	0.093
0.000	0.098	0.034	0.628	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.075	0.540	0.000	0.042	0.067
<i>ENE1B5 + OH => ENE1B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.038	0.862	0.041	0.106	0.000	0.000	0.476
0.001	0.640	0.549	0.072	0.058	0.000	0.613
0.000	0.164	0.055	0.018	0.098	0.000	0.270
0.000	0.147	0.087	0.175	0.088	0.051	0.143
0.006	0.282	0.116	0.067	0.515	0.111	0.051
<i>ENE1B6 + OH => ENE1B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.527	0.132	0.141	0.062	0.000	0.553
0.000	0.209	0.285	0.126	0.000	0.000	0.453
0.001	0.012	0.286	0.051	0.054	0.000	0.263
0.000	0.174	0.042	0.025	0.006	0.261	0.034
0.160	0.291	0.131	0.008	0.153	0.472	0.015

<i>ENE14 + OH => ENE2B(1-7)</i>	<i>k = 4.970 × 10⁻¹¹</i>					
0.052	0.037	0.002	0.505	0.084	0.000	0.075
0.087	0.046	0.045	0.471	0.072	0.000	0.070
0.227	0.107	0.143	0.290	0.041	0.024	0.065
0.296	0.118	0.209	0.160	0.043	0.028	0.055
0.329	0.117	0.132	0.119	0.037	0.013	0.024
<i>ENE14 + O3 => ENE2B(1-7)</i>	<i>k = 1.011 × 10⁻¹⁷</i>					
0.486	0.000	0.000	0.000	0.018	0.000	0.000
0.496	0.051	0.000	0.124	0.048	0.000	0.000
0.528	0.090	0.000	0.118	0.089	0.016	0.000
0.548	0.057	0.029	0.182	0.144	0.038	0.030
0.500	0.000	0.000	0.116	0.133	0.018	0.000
<i>ENE14 + NO3 => ENE2B(1-7)</i>	<i>k = 0.305 × 10⁻¹³</i>					
0.028	0.000	0.013	0.161	0.024	0.182	0.255
0.049	0.000	0.040	0.175	0.032	0.177	0.228
0.013	0.000	0.148	0.267	0.073	0.177	0.191
0.012	0.000	0.264	0.166	0.128	0.172	0.281
0.028	0.000	0.384	0.239	0.121	0.163	0.204
<i>ENE2B1 + OH => ENE2B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>					
0.841	0.289	0.000	0.000	0.222	0.079	0.000
0.856	0.143	0.000	0.000	0.094	0.067	0.000
0.820	0.000	0.081	0.059	0.018	0.031	0.000
0.825	0.052	0.101	0.029	0.008	0.007	0.000
0.790	0.123	0.145	0.047	0.024	0.003	0.000
<i>ENE2B2 + OH => ENE2B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>					
0.000	0.533	0.000	0.000	0.016	0.000	0.000
0.000	0.513	0.000	0.000	0.091	0.000	0.000
0.008	0.575	0.000	0.000	0.004	0.000	0.066
0.125	0.604	0.000	0.000	0.049	0.039	0.003
0.000	0.510	0.423	0.092	0.017	0.027	0.000
<i>ENE2B3 + OH => ENE2B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>					
0.000	0.000	0.801	0.000	0.000	0.000	0.422
0.000	0.017	0.736	0.000	0.000	0.000	0.412
0.086	0.324	0.573	0.000	0.215	0.078	0.101
0.118	0.149	0.550	0.000	0.052	0.043	0.095
0.019	0.000	0.175	0.000	0.042	0.095	0.088
<i>ENE2B4 + OH => ENE2B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>					
0.000	1.000	0.161	0.000	0.731	0.000	0.241
0.000	1.000	0.104	0.000	0.483	0.000	0.229
0.011	0.204	0.028	0.000	0.047	0.000	0.341
0.000	0.000	0.000	0.475	0.004	0.000	0.112
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.269
<i>ENE2B5 + OH => ENE2B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>					
0.000	0.000	0.224	0.009	0.000	0.066	0.000
0.000	0.000	0.346	0.088	0.000	0.092	0.000
0.191	0.176	0.000	0.423	0.159	0.000	0.255
0.000	0.000	0.001	0.177	0.300	0.000	0.151
0.428	0.014	0.000	0.398	0.253	0.000	0.000
<i>ENE2B6 + OH => ENE2B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>					
0.297	0.017	0.000	0.630	0.333	0.449	0.000
0.297	0.439	0.000	0.218	0.168	0.308	0.250
0.267	0.148	0.094	0.003	0.199	0.000	0.032
0.008	0.083	0.092	0.098	0.211	0.118	0.123
0.267	0.089	0.015	0.372	0.267	0.068	0.000

<i>ENE18 + OH => ENE3B(1-7)</i>						<i>k = 5.537 × 10⁻¹¹</i>
0.014	0.000	0.356	0.017	0.002	0.479	0.038
0.080	0.022	0.337	0.032	0.033	0.443	0.046
0.095	0.149	0.283	0.056	0.102	0.258	0.062
0.338	0.218	0.184	0.086	0.118	0.096	0.067
0.444	0.161	0.208	0.070	0.102	0.103	0.038
<i>ENE18 + O3 => ENE3B(1-7)</i>						<i>k = 1.011 × 10⁻¹⁷</i>
0.386	0.098	0.499	0.008	0.010	0.224	0.000
0.516	0.110	0.477	0.035	0.023	0.217	0.000
0.329	0.092	0.759	0.000	0.005	0.021	0.000
0.610	0.012	0.284	0.000	0.035	0.064	0.138
0.047	0.000	0.929	0.000	0.000	0.137	0.000
<i>ENE18 + NO3 => ENE3B(1-7)</i>						<i>k = 0.326 × 10⁻¹³</i>
0.020	0.001	0.002	0.000	0.267	0.363	0.315
0.001	0.000	0.000	0.000	0.26	0.362	0.309
0.000	0.000	0.000	0.000	0.265	0.358	0.327
0.000	0.048	0.055	0.000	0.290	0.326	0.359
0.000	0.000	0.011	0.000	0.308	0.382	0.328
<i>ENE3B1 + OH => ENE3B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.148	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.016	0.011	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.770	0.000	0.000	0.015	0.000	0.153	0.000
0.352	0.159	0.179	0.054	0.004	0.095	0.000
0.176	0.412	0.170	0.093	0.000	0.032	0.000
<i>ENE3B2 + OH => ENE3B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.144	0.050	0.000	0.000	0.000	0.000
0.066	0.681	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.624	0.010	0.098	0.126	0.000	0.162
0.029	0.529	0.000	0.169	0.127	0.022	0.077
0.001	0.185	0.000	0.000	0.227	0.061	0.047
<i>ENE3B3 + OH => ENE3B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.332	0.002	0.000	0.112	0.016	0.000	0.644
0.216	0.023	0.000	0.102	0.042	0.000	0.638
0.000	0.005	0.052	0.177	0.089	0.000	0.346
0.336	0.019	0.301	0.106	0.097	0.005	0.175
0.440	0.000	0.009	0.227	0.033	0.000	0.262
<i>ENE3B4 + OH => ENE3B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.220	0.001	0.776	0.531	0.032	0.000	0.736
0.000	0.072	1.000	0.536	0.098	0.000	0.145
0.000	0.000	0.662	0.213	0.130	0.000	0.000
0.120	0.000	0.121	0.588	0.078	0.000	0.003
0.411	0.000	0.177	0.003	0.153	0.000	0.000
<i>ENE3B5 + OH => ENE3B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.237	0.425	0.045	0.063	0.185	0.000	0.715
0.325	0.073	0.722	0.000	0.113	0.000	0.472
0.000	0.205	0.589	0.022	0.030	0.000	0.672
0.000	0.000	0.000	0.000	0.101	0.000	0.740
0.116	0.000	0.000	0.067	0.000	0.066	0.625
<i>ENE3B6 + OH => ENE3B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.440	0.000	0.149	0.000	0.000	0.000	0.709
0.099	0.015	0.000	0.000	0.000	0.000	0.820
0.000	0.027	0.016	0.078	0.174	0.000	0.366
0.224	0.023	0.072	0.002	0.031	0.148	0.248
0.375	0.360	0.001	0.003	0.000	0.219	0.032

<i>ENE22 + OH => ENE4B(1-7)</i>	<i>k = 6.105 × 10⁻¹¹</i>
0.000 0.002 0.008 0.036 0.373 0.000 0.525	
0.000 0.057 0.015 0.040 0.365 0.013 0.517	
0.000 0.230 0.009 0.098 0.275 0.013 0.436	
0.021 0.368 0.020 0.162 0.237 0.052 0.294	
0.000 0.496 0.000 0.147 0.241 0.040 0.206	
<i>ENE22 + O3 => ENE4B(1-7)</i>	<i>k = 1.011 × 10⁻¹⁷</i>
0.000 0.000 0.000 0.000 0.870 0.234 0.000	
0.039 0.436 0.000 0.001 0.626 0.192 0.004	
0.051 0.135 0.001 0.047 0.594 0.125 0.040	
0.000 0.038 0.089 0.000 0.824 0.067 0.025	
0.000 0.473 0.039 0.000 0.611 0.045 0.008	
<i>ENE22 + NO3 => ENE4B(1-7)</i>	<i>k = 0.337 × 10⁻¹³</i>
0.001 0.037 0.007 0.000 0.000 0.000 1.000	
0.000 0.000 0.041 0.000 0.000 0.000 1.000	
0.000 0.000 0.071 0.001 0.000 0.000 1.000	
0.213 0.000 0.001 0.002 0.000 0.000 1.000	
0.086 0.000 0.002 0.002 0.000 0.000 1.000	
<i>ENE4B1 + OH => ENE4B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.192 0.011 0.000 0.000 0.000 0.002 0.511	
0.962 0.118 0.000 0.000 0.957 0.000 0.000	
0.966 0.000 0.000 0.000 0.501 0.000 0.000	
0.053 0.000 0.005 0.009 0.000 0.000 0.312	
0.000 0.002 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000	
<i>ENE4B2 + OH => ENE4B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.531 0.192 0.000 0.000 0.000 0.000 0.993	
0.000 0.225 0.000 0.000 0.000 0.019 0.001	
0.000 0.537 0.000 0.052 0.000 0.107 0.071	
0.017 0.625 0.000 0.092 0.022 0.074 0.034	
0.000 0.248 0.056 0.204 0.074 0.149 0.084	
<i>ENE4B3 + OH => ENE4B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.452 0.739 0.003 0.006 0.000 0.221 0.077	
0.000 0.071 0.508 0.000 0.000 0.074 0.908	
0.000 0.012 0.150 0.016 0.006 0.000 0.841	
0.166 0.000 0.710 0.000 0.300 0.000 0.264	
0.000 0.000 0.088 0.000 0.000 0.000 0.000	
<i>ENE4B4 + OH => ENE4B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.625 1.000 0.262 0.461 0.000 0.000 1.000	
0.000 0.046 0.584 0.550 0.000 0.305 1.000	
0.000 0.001 0.001 0.513 0.000 0.285 0.824	
0.000 0.000 0.000 0.263 0.000 0.331 0.478	
0.000 0.000 0.520 0.028 0.000 0.661 0.507	
<i>ENE4B5 + OH => ENE4B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000 0.000 0.000 0.000 0.414 0.000 0.286	
0.000 0.014 0.000 0.000 0.000 0.000 0.512	
0.000 0.000 0.056 0.000 0.000 0.000 0.420	
0.053 0.000 0.204 0.099 0.000 0.118 0.189	
0.123 0.000 0.018 0.057 0.436 0.026 0.278	
<i>ENE4B6 + OH => ENE4B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.576 0.238 0.225 0.054 1.000 0.155 0.000	
0.000 0.186 0.001 0.000 0.547 0.000 0.141	
0.007 0.000 0.068 0.147 0.842 0.000 0.126	
0.268 0.034 0.151 0.149 0.126 0.063 0.108	
0.398 0.042 0.220 0.106 0.000 0.026 0.077	

<i>ENE26 + OH => ENE5B(1-7)</i>	<i>k = 6.673 × 10⁻¹¹</i>
0.000 0.000 0.048 0.007 0.003 0.000 0.937	
0.000 0.000 0.049 0.050 0.006 0.003 0.872	
0.000 0.000 0.057 0.174 0.012 0.072 0.650	
0.000 0.000 0.058 0.283 0.009 0.123 0.479	
0.000 0.000 0.024 0.363 0.000 0.166 0.503	
<i>ENE26 + O3 => ENE5B(1-7)</i>	<i>k = 1.011 × 10⁻¹⁷</i>
0.000 0.000 0.010 0.599 0.000 0.000 0.557	
0.000 0.000 0.000 0.570 0.000 0.009 0.448	
0.000 0.000 0.000 0.325 0.000 0.081 0.531	
0.000 0.000 0.000 0.199 0.027 0.151 0.631	
0.000 0.000 0.000 0.430 0.015 0.070 0.500	
<i>ENE26 + NO3 => ENE5B(1-7)</i>	<i>k = 0.343 × 10⁻¹³</i>
0.254 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000	
0.112 0.142 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000	
0.157 0.087 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000	
0.240 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000	
0.148 0.108 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000	
<i>ENE5B1 + OH => ENE5B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000 0.000 0.000 0.001 0.000 0.000 0.852	
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.664	
0.000 0.053 0.000 0.000 0.000 0.000 0.875	
0.000 0.000 0.000 0.000 0.001 0.000 0.911	
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.004 1.000	
<i>ENE5B2 + OH => ENE5B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.025 0.062 0.154 0.000 0.000 0.000 0.485	
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000	
0.000 0.000 0.000 0.002 0.000 0.001 0.840	
0.303 0.000 0.037 0.032 0.022 0.001 0.509	
0.000 0.000 0.000 0.000 0.003 0.000 1.000	
<i>ENE5B3 + OH => ENE5B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.262 0.347 0.256 0.001 0.000 0.000 0.978	
0.322 0.851 0.032 0.000 0.000 0.235 1.000	
0.358 0.214 0.245 0.107 0.034 0.009 1.000	
0.561 0.180 0.254 0.246 0.062 0.150 0.971	
0.004 0.016 0.248 0.778 0.205 0.037 0.087	
<i>ENE5B4 + OH => ENE5B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.184 0.039 0.000 0.024 0.000 0.001 0.496	
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.165 0.813	
0.000 0.000 0.000 0.339 0.007 0.227 0.627	
0.000 0.000 0.000 0.439 0.026 0.206 0.414	
0.000 0.000 0.000 0.224 0.048 0.186 0.574	
<i>ENE5B5 + OH => ENE5B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.270 0.406 0.221 0.705 0.787 0.060 0.029	
0.296 0.455 0.106 0.285 0.692 0.040 0.326	
0.040 0.086 0.113 0.005 0.699 0.000 0.109	
0.000 0.000 0.000 0.000 1.000 0.011 0.000	
0.000 0.000 0.000 0.000 0.928 0.000 0.000	
<i>ENE5B6 + OH => ENE5B(1-7)</i>	<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.252 0.209 0.347 0.268 0.322 0.516 0.341	
0.013 0.072 0.010 0.000 0.037 0.056 0.378	
0.001 0.002 0.000 0.000 0.360 0.143 0.084	
0.023 0.273 0.073 0.003 0.028 0.039 0.331	
0.000 0.112 0.000 0.000 0.305 0.000 0.803	

<i>APINEN + OH => BIO1B(1-7)</i>				<i>k = 1.21 × 10⁻¹¹ × exp(440/T)</i>		
0.268	0.162	0.000	0.116	0.030	0.001	0.053
0.280	0.149	0.009	0.110	0.028	0.010	0.047
0.245	0.111	0.040	0.082	0.024	0.023	0.032
0.252	0.082	0.058	0.034	0.009	0.007	0.005
0.161	0.047	0.041	0.054	0.006	0.001	0.001
<i>APINEN + O3 => BIO1B(1-7)</i>				<i>k = 5.00 × 10⁻¹⁶ × exp(-530/T)</i>		
0.739	0.000	0.184	0.022	0.000	0.000	0.000
0.706	0.024	0.145	0.010	0.000	0.000	0.000
0.654	0.099	0.038	0.001	0.006	0.000	0.000
0.476	0.090	0.013	0.002	0.004	0.000	0.001
0.518	0.086	0.007	0.003	0.003	0.000	0.000
<i>APINEN + NO3 => BIO1B(1-7)</i>				<i>k = 1.19 × 10⁻¹² × exp(490/T)</i>		
1.000	0.026	0.000	0.000	0.253	0.000	0.000
1.000	0.023	0.000	0.000	0.217	0.000	0.000
0.565	0.013	0.000	0.083	0.116	0.019	0.005
0.391	0.031	0.065	0.093	0.027	0.003	0.006
0.409	0.007	0.053	0.031	0.000	0.001	0.000
<i>BIO1B1 + OH => BIO1B(1-7)</i>				<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>		
0.790	0.000	0.009	0.007	0.009	0.000	0.000
0.790	0.007	0.009	0.023	0.010	0.000	0.000
0.826	0.059	0.041	0.018	0.003	0.000	0.000
0.962	0.043	0.024	0.009	0.001	0.000	0.000
0.905	0.000	0.018	0.019	0.004	0.000	0.000
<i>BIO1B2 + OH => BIO1B(1-7)</i>				<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>		
0.000	1.000	0.000	0.063	0.045	0.185	0.039
0.000	0.975	0.015	0.058	0.032	0.139	0.051
0.010	0.790	0.089	0.027	0.019	0.014	0.000
0.001	0.787	0.016	0.007	0.016	0.000	0.001
0.153	0.829	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
<i>BIO1B3 + OH => BIO1B(1-7)</i>				<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>		
0.148	0.000	1.000	0.269	0.000	0.000	0.000
0.294	0.000	1.000	0.174	0.000	0.000	0.000
0.701	0.000	0.563	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.715	0.000	0.015	0.018	0.008
0.026	0.230	0.718	0.024	0.000	0.020	0.000
<i>BIO1B4 + OH => BIO1B(1-7)</i>				<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>		
0.000	0.158	0.186	0.000	0.000	0.000	0.097
0.000	0.134	0.093	0.000	0.000	0.000	0.037
0.000	0.000	0.000	0.462	0.106	0.144	0.192
0.000	0.000	0.125	0.727	0.029	0.000	0.000
0.268	0.087	0.000	0.000	0.142	0.001	0.014
<i>BIO1B5 + OH => BIO1B(1-7)</i>				<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>		
0.000	0.044	0.000	0.000	1.000	0.000	0.185
0.100	0.000	0.000	0.005	1.000	0.079	0.158
0.000	0.021	0.000	0.321	0.546	0.028	0.005
0.000	0.000	0.086	0.242	0.374	0.113	0.068
0.201	0.012	0.187	0.002	0.335	0.046	0.229
<i>BIO1B6 + OH => BIO1B(1-7)</i>				<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>		
0.000	0.129	0.012	0.405	0.000	0.997	0.280
0.416	0.085	0.092	0.341	0.000	0.691	0.686
0.048	0.304	0.319	0.324	0.108	0.136	0.039
0.026	0.082	0.079	0.110	0.199	0.436	0.287
0.002	0.107	0.194	0.036	0.005	0.455	0.112

<i>BPINEN + OH => BIO2B(1-7)</i>			<i>k = 2.38 × 10⁻¹¹ × exp(357/T)</i>			
0.824	0.051	0.002	0.013	0.103	0.000	0.003
0.753	0.061	0.026	0.014	0.082	0.008	0.004
0.445	0.102	0.079	0.053	0.086	0.020	0.021
0.375	0.131	0.067	0.071	0.044	0.003	0.018
0.554	0.090	0.045	0.045	0.027	0.001	0.001
<i>BPINEN + O3 => BIO2B(1-7)</i>			<i>k = 1.500 × 10⁻¹⁷</i>			
0.594	0.000	0.085	0.000	0.000	0.000	0.004
0.586	0.000	0.084	0.000	0.000	0.000	0.000
0.513	0.000	0.090	0.000	0.000	0.000	0.000
0.341	0.070	0.017	0.000	0.003	0.001	0.000
0.296	0.051	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
<i>BPINEN + NO3 => BIO2B(1-7)</i>			<i>k = 2.510 × 10⁻¹²</i>			
1.000	0.057	0.030	0.000	0.122	0.000	0.000
1.000	0.079	0.037	0.000	0.079	0.000	0.000
0.430	0.194	0.083	0.093	0.131	0.026	0.033
0.349	0.411	0.109	0.145	0.034	0.023	0.018
0.381	0.288	0.078	0.044	0.013	0.029	0.003
<i>BIO2B1 + OH => BIO2B(1-7)</i>			<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>			
0.613	0.000	0.020	0.000	0.031	0.000	0.000
0.637	0.000	0.010	0.005	0.022	0.000	0.000
0.873	0.030	0.027	0.020	0.010	0.002	0.000
0.927	0.030	0.016	0.002	0.001	0.001	0.000
0.518	0.010	0.000	0.003	0.003	0.000	0.000
<i>BIO2B2 + OH => BIO2B(1-7)</i>			<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>			
0.000	0.975	0.000	0.131	1.000	0.129	0.018
0.000	0.862	0.000	0.101	1.000	0.215	0.033
0.000	0.779	0.000	0.058	0.144	0.067	0.029
0.000	0.823	0.019	0.054	0.016	0.006	0.003
0.449	0.856	0.092	0.062	0.001	0.006	0.000
<i>BIO2B3 + OH => BIO2B(1-7)</i>			<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>			
1.000	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.034
0.911	0.000	0.995	0.136	0.000	0.006	0.021
0.004	0.011	0.527	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.596	0.000	0.017	0.006	0.000
0.000	0.000	0.438	0.073	0.000	0.023	0.016
<i>BIO2B4 + OH => BIO2B(1-7)</i>			<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>			
0.000	0.000	0.142	0.519	0.621	0.432	0.305
0.000	0.000	0.091	0.181	0.000	0.059	0.180
0.131	0.108	0.217	0.486	0.000	0.000	0.119
0.000	0.000	0.270	0.682	0.034	0.012	0.048
0.000	0.001	0.182	0.602	0.050	0.000	0.033
<i>BIO2B5 + OH => BIO2B(1-7)</i>			<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>			
0.000	0.000	0.026	0.021	0.359	0.049	0.229
0.000	0.095	0.001	0.053	0.187	0.062	0.193
0.000	0.093	0.310	0.187	0.442	0.083	0.061
0.000	0.033	0.134	0.107	0.581	0.016	0.007
0.014	0.044	0.032	0.109	0.524	0.024	0.145
<i>BIO2B6 + OH => BIO2B(1-7)</i>			<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>			
0.077	0.207	0.051	0.424	0.378	0.964	0.060
0.000	0.026	0.017	0.327	0.405	0.940	0.624
0.341	0.016	0.244	0.166	0.081	0.289	0.196
0.203	0.028	0.044	0.256	0.002	0.192	0.309
0.001	0.005	0.122	0.069	0.078	0.091	0.069

LIMONE + OH => BIO3B(1-7)	$k = 4.20 \times 10^{-11} \times \exp(401/T)$					
0.309	0.025	0.011	0.039	0.039	0.027	0.251
0.335	0.032	0.035	0.048	0.036	0.029	0.197
0.292	0.064	0.047	0.089	0.037	0.035	0.104
0.344	0.059	0.076	0.052	0.026	0.017	0.013
0.301	0.022	0.051	0.005	0.006	0.008	0.001
LIMONE + O3 => BIO3B(1-7)	$k = 2.95 \times 10^{-15} \times \exp(-783/T)$					
0.523	0.029	0.045	0.024	0.026	0.000	0.129
0.546	0.021	0.054	0.004	0.016	0.000	0.127
0.329	0.007	0.051	0.046	0.031	0.017	0.171
0.255	0.035	0.062	0.033	0.022	0.045	0.037
0.344	0.000	0.012	0.001	0.008	0.032	0.004
LIMONE + NO3 => BIO3B(1-7)	$k = 1.22 \times 10^{-11}$					
0.588	0.000	0.000	0.067	0.000	0.037	0.147
0.620	0.082	0.000	0.058	0.000	0.029	0.129
0.235	0.100	0.008	0.098	0.044	0.097	0.148
0.386	0.030	0.071	0.090	0.053	0.025	0.011
0.412	0.000	0.051	0.000	0.020	0.000	0.000
BIO3B1 + OH => BIO3B(1-7)	$k = 4 \times 10^{-11}$					
0.000	0.000	0.000	0.000	0.029	0.060	0.733
0.000	0.010	0.000	0.081	0.063	0.054	0.579
0.710	0.063	0.093	0.049	0.037	0.022	0.035
0.929	0.068	0.026	0.021	0.005	0.004	0.000
0.808	0.183	0.037	0.051	0.022	0.009	0.001
BIO3B2 + OH => BIO3B(1-7)	$k = 4 \times 10^{-11}$					
0.000	0.155	0.000	0.055	1.000	0.000	0.147
0.000	0.842	0.000	0.017	0.000	0.147	0.000
0.433	0.687	0.022	0.000	0.001	0.000	0.000
0.000	0.683	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002
0.000	0.158	0.000	0.025	0.000	0.003	0.026
BIO3B3 + OH => BIO3B(1-7)	$k = 4 \times 10^{-11}$					
0.000	0.000	0.000	0.000	0.378	0.000	0.366
0.000	0.000	0.224	0.000	0.882	0.000	0.323
0.000	0.000	0.235	0.146	0.066	0.000	0.000
0.000	0.167	0.525	0.298	0.109	0.020	0.038
0.118	0.017	0.508	0.170	0.054	0.000	0.010
BIO3B4 + OH => BIO3B(1-7)	$k = 4 \times 10^{-11}$					
0.000	0.016	0.000	0.000	0.000	0.001	0.406
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.263
0.000	0.000	0.137	0.100	0.255	0.146	0.213
0.000	0.000	0.196	0.288	0.000	0.001	0.008
0.000	0.105	0.011	0.371	0.007	0.038	0.005
BIO3B5 + OH => BIO3B(1-7)	$k = 4 \times 10^{-11}$					
0.000	0.028	0.187	0.000	0.290	0.000	0.191
0.283	0.010	0.359	0.036	0.000	0.000	0.000
0.165	0.217	0.261	0.180	0.000	0.000	0.005
0.000	0.000	0.107	0.006	0.388	0.046	0.023
0.029	0.163	0.038	0.146	0.105	0.004	0.008
BIO3B6 + OH => BIO3B(1-7)	$k = 4 \times 10^{-11}$					
0.017	0.043	0.397	0.288	0.171	0.601	0.322
0.373	0.014	0.379	0.193	0.077	0.826	0.193
0.267	0.089	0.160	0.398	0.157	0.381	0.052
0.000	0.004	0.169	0.141	0.127	0.309	0.130
0.120	0.062	0.134	0.057	0.040	0.427	0.074

BENZEN + OH => ARO1B(1-7)						$k = 1.216 \times 10^{-12}$
0.267	0.001	0.015	0.012	0.004	0.010	0.001
0.240	0.019	0.006	0.009	0.007	0.005	0.000
0.248	0.027	0.003	0.000	0.002	0.000	0.000
0.274	0.003	0.001	0.000	0.000	0.003	0.002
0.195	0.006	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000
ARO1B1 + OH => ARO1B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.999	0.050	0.000	0.004	0.000	0.006	0.005
1.000	0.014	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
0.993	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000
0.975	0.006	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
0.976	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
ARO1B2 + OH => ARO1B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.131	0.103	0.010	0.005	0.000	0.000	0.000
0.057	0.661	0.069	0.000	0.013	0.028	0.000
0.024	0.615	0.011	0.117	0.009	0.029	0.016
0.156	0.001	0.157	0.103	0.077	0.061	0.003
0.115	0.286	0.090	0.009	0.000	0.000	0.001
ARO1B3 + OH => ARO1B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.524	0.146	0.316	0.018	0.036	0.009	0.381
0.009	0.014	0.011	0.004	0.000	0.060	0.867
0.026	0.170	0.773	0.019	0.051	0.124	0.052
0.019	0.082	0.001	0.043	0.088	0.054	0.058
0.097	0.004	0.584	0.061	0.004	0.005	0.005
ARO1B4 + OH => ARO1B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.093	0.149	0.175	0.247	0.224	0.004	0.057
0.258	0.181	0.045	0.722	0.088	0.065	0.000
0.162	0.014	0.017	0.612	0.000	0.039	0.087
0.001	0.095	0.000	0.095	0.000	0.013	0.006
0.124	0.052	0.141	0.031	0.087	0.057	0.099
ARO1B5 + OH => ARO1B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.088	0.235	0.227	0.026	0.132	0.169	0.087
0.048	0.053	0.017	0.005	0.001	0.009	0.079
0.109	0.037	0.000	0.080	0.507	0.030	0.052
0.284	0.188	0.206	0.110	0.592	0.033	0.033
0.274	0.174	0.197	0.122	0.244	0.032	0.014
ARO1B6 + OH => ARO1B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.011	0.087	0.088	0.100	0.008	0.240	0.043
0.010	0.102	0.024	0.003	0.130	0.189	0.272
0.025	0.013	0.201	0.043	0.214	0.783	0.124
0.077	0.217	0.001	0.003	0.045	0.694	0.059
0.076	0.073	0.056	0.004	0.090	0.369	0.199

TOLUEN + OH => ARO2B(1-7)						$k = 5.639 \times 10^{-12}$
0.112	0.054	0.003	0.127	0.033	0.004	0.000
0.128	0.057	0.054	0.060	0.018	0.003	0.000
0.156	0.084	0.051	0.009	0.000	0.004	0.001
0.105	0.005	0.004	0.000	0.000	0.001	0.005
0.004	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
ARO2B1 + OH => ARO2B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.938	0.000	0.005	0.000	0.000	0.000	0.000
0.956	0.034	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001
0.965	0.018	0.000	0.001	0.001	0.000	0.004
0.987	0.036	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.509	0.130	0.130	0.137	0.139	0.142	0.007
ARO2B2 + OH => ARO2B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.588	0.960	0.069	0.000	0.000	0.000	0.000
0.347	0.589	0.061	0.000	0.002	0.000	0.000
0.190	0.083	0.114	0.004	0.041	0.000	0.077
0.117	0.168	0.142	0.003	0.007	0.000	0.006
0.132	0.356	0.134	0.137	0.145	0.143	0.001
ARO2B3 + OH => ARO2B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.095	0.034	0.009	0.000	0.000	0.000	0.014
0.459	0.516	0.260	0.000	0.026	0.000	0.011
0.098	0.091	0.000	0.002	0.001	0.000	0.086
0.124	0.134	0.049	0.006	0.032	0.002	0.001
0.133	0.134	0.361	0.136	0.147	0.144	0.001
ARO2B4 + OH => ARO2B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.290	0.262	0.139	0.000	0.092	0.027	0.030
0.277	0.147	0.055	0.000	0.134	0.041	0.046
0.000	0.081	0.087	0.145	0.015	0.000	0.087
0.228	0.061	0.000	0.096	0.046	0.023	0.102
0.140	0.137	0.141	0.385	0.147	0.149	0.000
ARO2B5 + OH => ARO2B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.137	0.020	0.200	0.056	0.002	0.000	0.018
0.088	0.042	0.148	0.067	0.001	0.092	0.008
0.085	0.000	0.125	0.008	0.550	0.000	0.001
0.016	0.143	0.068	0.010	0.041	0.111	0.020
0.154	0.156	0.147	0.151	0.398	0.151	0.079
ARO2B6 + OH => ARO2B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.110	0.071	0.092	0.208	0.365	0.616	0.120
0.073	0.259	0.135	0.012	0.002	0.633	0.108
0.153	0.059	0.204	0.079	0.000	0.437	0.101
0.045	0.076	0.026	0.071	0.052	0.126	0.108
0.135	0.135	0.135	0.135	0.134	0.569	0.134

OXYLEN + OH => ARO3B(1-7)						$k = 1.360 \times 10^{-11}$
0.593	0.036	0.007	0.010	0.007	0.021	0.003
0.464	0.039	0.001	0.008	0.008	0.014	0.002
0.132	0.077	0.029	0.006	0.002	0.002	0.001
0.087	0.046	0.013	0.000	0.000	0.000	0.005
0.000	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
ARO3B1 + OH => ARO3B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.907	0.059	0.000	0.001	0.001	0.002	0.000
0.839	0.063	0.011	0.004	0.001	0.000	0.002
0.975	0.014	0.000	0.002	0.002	0.000	0.000
0.817	0.125	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000
0.435	0.110	0.104	0.119	0.140	0.185	0.001
ARO3B2 + OH => ARO3B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.316	0.734	0.033	0.000	0.000	0.000	0.011
0.321	0.789	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
0.000	0.874	0.000	0.000	0.000	0.000	0.025
0.309	0.765	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.106	0.351	0.105	0.129	0.155	0.184	0.000
ARO3B3 + OH => ARO3B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.308	0.332	0.005	0.086	0.020	0.008	0.017
0.081	0.205	0.157	0.190	0.006	0.139	0.108
0.129	0.185	0.295	0.005	0.003	0.084	0.186
0.155	0.121	0.005	0.179	0.205	0.024	0.048
0.110	0.117	0.357	0.126	0.164	0.192	0.000
ARO3B4 + OH => ARO3B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.040	0.295	0.243	0.206	0.187	0.000	0.001
0.296	0.000	0.110	0.000	0.180	0.136	0.044
0.229	0.107	0.043	0.347	0.005	0.001	0.096
0.215	0.000	0.133	0.188	0.038	0.191	0.026
0.137	0.137	0.145	0.347	0.172	0.208	0.001
ARO3B5 + OH => ARO3B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.134	0.042	0.082	0.013	0.454	0.058	0.006
0.262	0.129	0.330	0.185	0.156	0.071	0.111
0.056	0.110	0.144	0.089	0.273	0.124	0.160
0.316	0.046	0.104	0.245	0.285	0.072	0.000
0.177	0.184	0.181	0.182	0.368	0.223	0.138
ARO3B6 + OH => ARO3B(1-7)						$k = 4 \times 10^{-11}$
0.145	0.240	0.376	0.272	0.018	0.507	0.445
0.291	0.306	0.207	0.160	0.266	0.000	0.331
0.000	0.091	0.105	0.092	0.011	0.458	0.083
0.001	0.217	0.014	0.146	0.035	0.021	0.228
0.200	0.201	0.208	0.193	0.193	0.498	0.223

<i>MXYLEN + OH => ARO4B(1-7)</i>						<i>k = 2.305 × 10⁻¹¹</i>
0.139	0.167	0.000	0.051	0.012	0.019	0.002
0.126	0.175	0.018	0.027	0.017	0.009	0.000
0.084	0.141	0.033	0.010	0.012	0.004	0.001
0.009	0.040	0.011	0.000	0.002	0.000	0.002
0.056	0.029	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000
<i>ARO4B1 + OH => ARO4B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.883	0.119	0.068	0.013	0.000	0.000	0.002
0.915	0.100	0.052	0.007	0.000	0.000	0.001
0.959	0.139	0.003	0.003	0.001	0.000	0.000
0.307	0.073	0.205	0.150	0.010	0.049	0.087
0.969	0.015	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<i>ARO4B2 + OH => ARO4B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.268	0.455	0.168	0.015	0.018	0.049	0.004
0.193	0.409	0.011	0.012	0.027	0.020	0.005
0.167	0.061	0.033	0.000	0.005	0.000	0.014
0.000	0.998	0.009	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<i>ARO4B3 + OH => ARO4B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.064	0.000	0.782	0.000	0.000	0.000	0.000
0.228	0.004	0.692	0.000	0.000	0.000	0.002
0.000	0.045	0.026	0.061	0.000	0.010	0.163
0.039	0.114	0.042	0.110	0.076	0.007	0.016
0.090	0.127	0.049	0.192	0.284	0.259	0.121
<i>ARO4B4 + OH => ARO4B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.763	0.703	0.167	0.000	0.000	0.000	0.049
0.241	0.046	0.008	0.000	0.000	0.107	0.078
0.000	0.105	0.158	0.237	0.007	0.000	0.000
0.308	0.117	0.017	0.120	0.072	0.135	0.064
0.227	0.037	0.139	0.283	0.153	0.251	0.062
<i>ARO4B5 + OH => ARO4B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.094	0.260	0.072	0.190	0.000	0.001	0.017
0.369	0.028	0.108	0.011	0.000	0.115	0.002
0.168	0.001	0.164	0.126	0.153	0.000	0.006
0.005	0.022	0.022	0.086	0.404	0.215	0.002
0.204	0.002	0.040	0.162	0.435	0.028	0.040
<i>ARO4B6 + OH => ARO4B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.000	0.141	0.193	0.159	0.554	0.000	0.000
0.226	0.312	0.033	0.129	0.017	0.000	0.106
0.159	0.045	0.114	0.000	0.000	0.349	0.043
0.003	0.193	0.000	0.194	0.153	0.069	0.039
0.000	0.005	0.184	0.186	0.015	0.203	0.202

<i>PXYLEN + OH => ARO5B(1-7)</i>						<i>k = 1.431 × 10⁻¹¹</i>
0.587	0.080	0.000	0.003	0.000	0.005	0.001
0.476	0.095	0.000	0.003	0.000	0.003	0.000
0.176	0.105	0.010	0.004	0.000	0.002	0.000
0.060	0.084	0.007	0.002	0.001	0.000	0.003
0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<i>ARO5B1 + OH => ARO5B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.929	0.046	0.008	0.000	0.000	0.001	0.001
0.866	0.084	0.007	0.002	0.002	0.001	0.001
0.938	0.064	0.000	0.001	0.004	0.000	0.000
0.963	0.033	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000
0.406	0.107	0.104	0.125	0.161	0.198	0.002
<i>ARO5B2 + OH => ARO5B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.443	0.272	0.144	0.020	0.000	0.005	0.003
0.474	0.022	0.050	0.001	0.000	0.006	0.005
0.164	0.210	0.059	0.000	0.000	0.000	0.047
0.186	0.604	0.005	0.000	0.000	0.000	0.002
0.098	0.341	0.109	0.126	0.165	0.201	0.000
<i>ARO5B3 + OH => ARO5B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.108	0.109	0.845	0.000	0.000	0.000	0.003
0.266	0.251	0.832	0.019	0.001	0.001	0.015
0.124	0.189	0.032	0.140	0.037	0.003	0.086
0.003	0.096	0.308	0.015	0.004	0.009	0.066
0.114	0.114	0.335	0.134	0.170	0.207	0.000
<i>ARO5B4 + OH => ARO5B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.200	0.240	0.130	0.098	0.097	0.140	0.056
0.363	0.057	0.157	0.049	0.144	0.046	0.015
0.093	0.032	0.077	0.524	0.000	0.045	0.031
0.379	0.208	0.044	0.096	0.047	0.077	0.025
0.143	0.143	0.144	0.343	0.184	0.219	0.000
<i>ARO5B5 + OH => ARO5B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.030	0.348	0.219	0.224	0.247	0.160	0.205
0.031	0.273	0.402	0.250	0.031	0.170	0.106
0.187	0.090	0.000	0.007	0.337	0.004	0.082
0.101	0.190	0.053	0.116	0.364	0.030	0.049
0.196	0.194	0.203	0.198	0.332	0.230	0.148
<i>ARO5B6 + OH => ARO5B(1-7)</i>						<i>k = 4 × 10⁻¹¹</i>
0.005	0.100	0.208	0.322	0.102	0.259	0.117
0.166	0.149	0.129	0.153	0.096	0.223	0.059
0.008	0.081	0.034	0.069	0.057	0.729	0.074
0.064	0.164	0.044	0.105	0.029	0.146	0.054
0.214	0.213	0.214	0.213	0.206	0.444	0.235

PHOTOLYSIS REACTIONS	(J in s ⁻¹)
<i>ALC1B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 19.1 × J(acetone)</i>
<i>ALC2B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 19.4 × J(acetone)</i>
<i>ALC3B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 6.39 × J(acetone)</i>
<i>ALC4B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 6.25 × J(acetone)</i>
<i>ALC5B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 0.00 × J(acetone)</i>
<i>ENE1B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 17.6 × J(acetone)</i>
<i>ENE2B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 9.26 × J(acetone)</i>
<i>ENE3B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 2.74 × J(acetone)</i>
<i>ENE4B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 6.13 × J(acetone)</i>
<i>ENE5B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 0.00 × J(acetone)</i>
<i>BIO1B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 11.5 × J(acetone)</i>
<i>BIO2B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 23.5 × J(acetone)</i>
<i>BIO3B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 23.3 × J(acetone)</i>
<i>ARO1B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 1.50 × J(acetone)</i>
<i>ARO2B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 19.9 × J(acetone)</i>
<i>ARO3B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 2.30 × J(acetone)</i>
<i>ARO4B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 2.59 × J(acetone)</i>
<i>ARO5B(1-6) + hv => loss of matter</i>	<i>J = 16.4 × J(acetone)</i>