

燃烧动力学数据库搜索使用说明

燃烧动力学数据库目前包含 2077 个物种的热力学数据，2100 个反应的动力学参数，包括链烷烃、环烷烃及芳烃的反应。数据集成自文献发表、量子化学计算。数据库的热力学数据搜索以 mol 文件或分子组成为输入，给出 Chemkin 格式的热力学数据；反应的动力学参数可以按分子的唯一性、按分子组成来搜索反应，并实现了按反应势能面的搜索，这是本数据库的优势之处。

在使用过程中遇到的问题请发邮件至 xyli@scu.edu.cn 和 lizr@scu.edu.cn，我们会及时处理，感谢您的使用与建议。

1. 热力学数据搜索

2. 动力学数据搜索

2.1 输入文件及说明

(1) input.parm

共两行：第一行为说明，第二行为搜寻方法参数，可为 1、2 或 3。

(2) 当搜寻方法参数为 1 时，表示**按物种结构等价性进行反应搜索**。物种结构是由用户提供的 mol 文件表示。此时，首先需要提供文件“input-reaction-mol.in’，用于描述欲搜寻的反应，文件中每一行对应一个欲搜索的反应方程式。反应方程式中每一物种命名用<>括起来。输入例子为：

```
<CH3>+<CH3>=<C2H5>+<H>
<CH3>=<H>+<CH2>
<C4H7>=<1-3-BUTADIENE>+<H>
```

其次，在文件夹“input-mol-files”中，用户需提供反应涉及到的每一物种对应的 mol 文件。在上面的例子中需要提供 CH3.mol、C2H5.mol、H.mol、CH2.mol、C4H7.mol 和 1-3-BUTADIENE.mol 这些 mol 文件。

(3) 当搜寻方法参数为 2 时，表示**按物种的分子组成搜索反应**。此时，只需要提供文件“input-reaction-fml.in’，用于描述欲搜寻的反应，输入例子为：

```
<CH3>+<CH3>=<C2H5>+<H>
<CH3>=<H>+<CH2>
<C4H7>=<1-3-BUTADIENE>+<H>
```

其中，每一行对应一欲搜寻的反应方程式。反应方程式中每一物种的分子组成用<>括起来。

(4) 当搜寻方法参数为 3 时，表示**按反应势能面搜索反应**。此时，只需要提供文

件“input-reaction-pes.in’, 用于描述欲搜寻的反应势能面，输入例子为：

<C2H6>

<CH4>

<C4H7>

其中，每一行对应一个欲搜寻的反应势能面。每一反应势能面用<>括起来。

2.2 输出文件

输出文件包括 output 和 output-reactions-data.out, 前者为各种输出信息，包含可能的出错信息等，后者为提供的最终搜寻结果。