

## STUDI *ab-initio* MEKANISME PEMBENTUKAN TRANSISI REAKSI OKSIDASI CO OLEH NO<sub>2</sub> DI UDARA

### Deski Beri

Jurusan Kimia FMIPA Universitas Negeri Padang  
Jl. Prof. Dr. Hamka, Padang, Sumatera Barat 25131  
Email: deski.beri@gmail.com

### ABSTRACT

The transition state formation's mechanism of CO oxidation reaction by molecule of NO<sub>2</sub> has been done using *ab-initio* computation by Density Functional Theory (DFT). Geometry optimization was done by B3LYP and 6-31G\* basis set using HyperGauss and HyperDFT computer software. The result is we hypothesise that there was three transition state takes place, there were *trans*-Transition State (KT<sub>1</sub>), *cis*-Transition State (KT<sub>2</sub>) and *cyclic*-Transition State (KT<sub>3</sub>). All of three was gradually takes place in a very short time intervals.

Keywords: density functional theory (DFT), geometry optimization, intermediate, transition state

### PENDAHULUAN

Reaksi oksidasi CO merupakan topik riset yang menarik karena pemakaian yang luas dalam kimia lingkungan dan industri (Jiang, Xiao, Kuznetsov, & Edwards, 2010). Memahami proses mekanisme oksidasi CO telah dilakukan semenjak puluhan tahun yang lalu, pertama kali dilakukan pada tahun 1941 oleh Brown, dkk. (Brown & Crist, 1941), kemudian Gaydon, dkk. 1963 (Gaydon, Kimbell, & Palmer, 1963), dilanjutkan oleh Milks, dkk. (Milks, Adams, & Matula, 1979) kemudian (Tsang & Herron, 1991) dan (Bacskay & Mackie, 2005a), dan terus berkembang. Keterlibatan gas oksidator alami seperti NO<sub>2</sub> dan SO<sub>2</sub> dipelajari untuk memahami reaksi oksidasi pseudo gas yang ingin dipahami mekanismenya. Ketertarikan tentang topik ini meningkat pesat karena isu lingkungan, pemanasan global dan hujan asam yang sangat menyita perhatian dunia.

Teori Fungsi Kerapatan (TFK) merupakan teori kuantum yang sangat banyak digunakan dan dikembangkan dalam beberapa dekade terakhir (Bacskay & Mackie, 2005b) karena dapat menjelaskan struktur molekul secara *ab-initio* dengan sangat baik (Xu & Lin, 2006).

TFK sangat banyak digunakan untuk menjelaskan tentang struktur molekul (Brown & Crist, 1941), mekanisme pembentukan reaksi, pembentukan kompleks teraktifasi dan pembentukan keadaan transisi yang kadangkala menyulitkan para ahli kimia dan fisika menguraikan secara sederhana (Opencourseware, 2008).

TFK (Ismail, Park, Wong, Green, & Lin, 2005) berdasarkan kepada teorema yang dibuktikan oleh Pierre Hohenberg dan Walter Kohn yang menyatakan bahwa *energy dan semua sifat lain dari molekul dalam keadaan diam khususnya hanya ditentukan oleh peluang kerapatan elektron tersebut dalam keadaan diamnya*  $\rho(x, y, z)$ . Sehingga secara sederhana dapat dinyatakan bahwa energy elektron dalam keadaan diam  $E_{gs}$  adalah fungsi kerapatan  $\rho$  dan dapat ditulis sebagai berikut  $E_{gs} = E_{gs}[\rho(x, y, z)]$  atau secara sederhana ditulis sebagai:

$$E_{gs} = E_{gs}[\rho]$$

Kurung siku menunjukkan fungsi kerapatan  $\rho$ . Penyelesaian **Pers. 1** menggunakan sistem acuan duga-duga dengan metoda Kohn-Sham (KS). Metoda KS bertitik tolak pada

asumsi bahwa setiap elektron berdiri sendiri dengan energi potensialnya sendiri sehingga memiliki peluang kerapatan elektron  $\rho_e$  akan mendekati sama dengan peluang kerapatan elektron dalam keadaan diam  $\rho$  molekul sebenarnya. Karena elektron pada sistem acuan tidak berinteraksi satu sama lain maka Hamiltonian  $\hat{H}_e$  dari sistem acuan merupakan jumlah dari Hamiltonian dari elektron tunggal

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^n v_x(x_i, y_i, z_i) \equiv \sum_{i=1}^n \hat{h}_i^{KS}$$

$$\hat{h}_i^{KS} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^n v_x(x_i, y_i, z_i)$$

adalah Hamiltonian Kohn-Sham untuk satu elektron (Dalton et al., 2002). Karena sistem acuan  $s$  mengandung partikel yang tidak berinteraksi, fungsi gelombangnya tidak memerlukan spin antisimetrik, produk fungsi gelombang satu elektron spasial adalah merupakan fungsi eigen dari  $\hat{h}_i^{KS}$ . Sehingga, agar persyaratan spin dan antisimetrik dipenuhi, maka fungsi gelombang keadaan diamnya harus berupa determinan Slater dari orbital spin, masing-masing satu untuk satu jenis elektron. Setiap spin orbital merupakan produk dari orbital spasial  $\theta_i^{KS}$  dan suatu fungsi spin (baik  $\alpha$  maupun  $\beta$ ). Sehingga orbital Kohn-Sham  $\varphi_i^{KS}$  merupakan fungsi eigen dari  $\hat{h}_i^{KS}$ .

$$\hat{h}_i^{KS} \varphi_i^{KS} = \epsilon_i^{KS} \varphi_i^{KS}$$

$\epsilon_i^{KS}$  adalah energi orbital Kohn-Sham dari  $\varphi_i^{KS}$ . Setiap orbital Kohn-Sham menyimpan dua elektron yang berlawanan tanda. Dapat dibuktikan bahwa peluang kerapatan  $\rho$  untuk suatu fungsi gelombang adalah jumlah dari peluang kerapatan semua orbital tunggal  $|\varphi_i^{KS}|^2$ . Sehingga fungsi kerapatan molekul menjadi:

$$\rho = \rho_e = \sum_{i=1}^n |\varphi_i^{KS}|^2$$

Kohn dan Sham menurunkan persamaan energi untuk elektron dalam keadaan diam  $E_e$  sebagai berikut

$$E_e = \langle K_{e\bar{s}} \rangle - \langle V_{Ne} \rangle - J - V_{XX} - E_{XC}[\rho]$$

$\langle K_{e\bar{s}} \rangle$  adalah rata-rata energi kinetik elektron pada sistem acuan,  $\langle V_{Ne} \rangle$  adalah rata-rata ener-

gi potensial dari tarikan antara elektron dan inti dalam molekul,  $J$  merupakan nilai tolakan listrik yang terdapat pada sejumlah besar unsur bermuatan yang diasumsikan menyebar di sekeliling elektron yang menjadi subjek perhatian,  $V_{XX}$  merupakan konstanta yang nilainya bergantung kepada muatan inti dan jarak antar inti dan dihitung berdasarkan geometri molekul dimana perhitungan dibuat, dan  $E_{XC}[\rho]$  disebut sebagai fungsi energi penukar korelasi yang merupakan fungsi kerapatan  $\rho$  dan dihitung dengan cara:

$$E_{XC}[\rho] \equiv \langle K_e \rangle - \langle K_{e\bar{s}} \rangle - \langle V_{ee} \rangle_{\text{pers. 6}}$$

$E_{XC}[\rho]$  adalah jumlah dari perbedaan antara (a) energi kinetik rata-rata  $\langle K_e \rangle - \langle K_{e\bar{s}} \rangle$  molekul dan dalam sistem acuan; dan (b) adalah selisih antara energi potensial rata-rata dari tolakan antarelektron dalam molekul ( $\langle V_{ee} \rangle$ ) dan energi tolakan sendiri awan elektron bermuatan  $J$ . Nilai dari  $\langle K_e \rangle$  dan  $\langle K_{e\bar{s}} \rangle$  diharapkan sama satu sama lain demikian juga halnya dengan nilai untuk  $\langle V_{ee} \rangle$  dan  $J$ . Jika Pers. 6 disubstitusikan kepada Pers. 5 akan diperoleh,

$$E_e = \langle K_e \rangle - \langle V_{Ne} \rangle - \langle V_{ee} \rangle - V_{XX}$$

Persamaan 7 merupakan persamaan hamiltonian energi yang memenuhi pendekatan Born-Oppenheimer yang cukup dapat diandalkan yaitu:

$$\hat{H}_e = \hat{K}_e - \hat{V}_{Ne} - \hat{V}_{ee} - \hat{V}_{XX} \text{ Pers. 7}$$

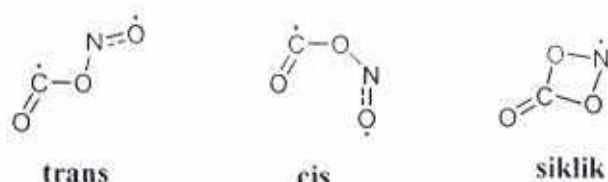
## METODE PENELITIAN

Geometri molekul 1,2,3 dan 4 ditentukan dengan Teori Fungsi Kerapatan (TFK) memakai optimisasi geometri dengan metoda B3LYP dan basis set 6-31G\*. Komputasi dilakukan pada keadaan gas dan tanpa melibatkan solven. Pemakaian B3LYP sangat tepat untuk sistem yang cukup besar karena ikut melibatkan pengaruh korelasi elektron dalam banyak hal.

Keadaan Transisi (KT) dihitung dengan analisis vibrasi dengan pengujian geometri frekuensi imajiner tunggal ( $i \cdot \text{cm}^{-1}$ ). Dari keadaan transisi kemudian dilakukan metoda pelacakan koordinat intrinsik untuk mencocokkan bahwa produk yang terbentuk adalah hasil yang

diharapkan. Semua perhitungan dilakukan dengan menggunakan program Hyper-DFT/HyperGauss yang terintegrasi ke dalam program Hyperchem Release 7. Pembuatan

gambar molekul dan perhitungan sudut ikatan secara VSEPR dilakukan dengan menggunakan CambridgeSoft: Chemdraw Ultra 8.0 dan Chem3D Ultra 8.0.



Gambar 1 Struktur dari *trans*-OCONO, *cis*-OCONO dan *siklik*-OCONO

Tabel 1 Panjang Ikatan (Dalam Angstrom), Besar Sudut Ikatan dan Dihedral (Dalam Derajat) Ketiga Formasi Intermediet yang Mungkin untuk Reaksi CO dan NO<sub>2</sub>

No	Struktur	Ikatan	Nilai (Å)	Sudut Ikatan	Nilai (°)	Sudut Dihedral	Nilai (°)	$\Delta H_f^\ddagger$	Dipol
1 <i>trans</i>		O(1)-C(2)	1.086	O(1)-	167.614	O(1)-C(2)-	-	20.3	2.600
		C(2)-O(3)	1.370	C(2)-	115.624	O(3)-N(4)	132.20	2962	Debye
		O(3)-	1.316	O(3)	120.000	C(2)-O(3)-	2	kcal/	
		N(4)-N(4)-	1.132	C(2)-		N(4)-O(5)	102.07	mole	
		O(5)		O(3)-			1		
				N(4)					
				O(3)-					
				N(4)					
				O(3)-					
				N(4)-					
				O(5)					
2 <i>cis</i>		O(1)-C(2)	1.213	O(1)-	120.000	O(1)-C(2)-	-0.000	3.65	0.946
		C(2)-O(3)	1.410	C(2)-	109.500	O(3)-N(4)	0.000	859	Debye
		O(3)-N(4)	1.316	O(3)	120.000	C(2)-O(3)-		kcal/	
		N(4)-O(5)	1.132	C(2)-		N(4)-O(5)		mole	
				O(3)-					
				N(4)					
				O(3)-					
				N(4)-					
				O(5)					
3 <i>siklik</i>		O(1)-C(2)	1.213	O(1)-	120.000	O(1)-C(2)-	-	41.0	1.073
		C(2)-O(3)	1.410	C(2)-	120.000	O(3)-N(5)	125.26	3738	Debye
		C(2)-O(4)	1.410	O(3)	90.000	O(4)-C(2)-	4	kcal/	
		O(3)-N(5)	1.316	O(3)	90.000	O(3)-N(5)	0.000	mole	
		O(4)-N(5)	1.413	C(2)-	86.186	O(1)-C(2)-	125.26		
				O(4)	93.814	O(4)-N(5)	4		
				O(3)-		O(3)-C(2)-	0.000		
				C(2)-		O(4)-N(5)	0.000		
				O(4)		C(2)-O(3)-	0.000		
				C(2)-		N(5)-O(4)			
				O(3)-		C(2)-O(4)-			
				N(5)		N(5)-O(3)			
				C(2)-					
				O(4)					
				N(5)					
				O(3)-					
				N(5)-					
				O(4)					

## HASIL DAN PEMBAHASAN

Reaksi antara CO dan NO<sub>2</sub> yang diusulkan melibatkan tiga intermediet yang mungkin sebelum produk reaksi yang diharapkan tercapai. Intermediet yang diusulkan adalah bentuk *trans*-OCONO, *cis*-OCONO, *siklik*-OCONO. Representasi ketiga formasi dapat dilihat pada Gambar 1. Hasil perhitungan VSEPR terhadap ketiga formasi diberikan pada Tabel 1.

Melalui teori VSEPR sederhana sudut ikatan OCO, OCN, ONO yang dioptimasi, jarak ikatan siklik jauh lebih panjang dibanding po-

sisi *cis* atau *trans*. Momen dipol struktur *trans* > siklik > *cis*, sedangkan energi pembentukan siklik > *trans* > *cis* secara geometri, dengan teori VSEPR struktur *cis* memiliki peluang lebih mungkin terbentuk sebagai spesi intermediet dibandingkan dengan struktur *trans* atau siklik.

Perhitungan energi penukar korelasi dengan B3LYP dan algoritma optimasi menggunakan metoda Polak-Ribiere diperoleh perhitungan energi total, energi korelasi, momen dipol dan simetri menggunakan Hyper-gauss dan HyperDFT seperti terlihat pada Tabel 2.

Tabel 2 Hasil Perhitungan Hypergauss dan HyperDFT

No	Struktur	$E_s$	$\langle K_{e,e} \rangle$	$\langle V_{e,e} \rangle$	$I$	$V_{CC}$	$E_{cc}(\rho)^*$	Virial -V/T	Orbital virtual *	Momen Dipol (Debye)	Si met ri
1	<i>cis</i> - OCONO	199598	197793	-	88275.012	25.091339	-	-	19.56	-	-
		1686004 (kcal/m ol)	2461594 (kcal/m ol)	287875.18 15648 (kcal/mol)	9644 (kcal/mol)	9 (kcal/mol/ Ang)	200460.385 8124 (kcal/mol)	2.0091	(Alpha) 18.57 (Beta)	0.3574	C <sub>1</sub>
2	<i>trans</i> - OCONO	199647	197583	-	90054.075	22.348831	-	-	19.56	-	-
		4302292 (kcal/m ol)	5663724 (kcal/m ol)	289701.50 52675 (kcal/mol)	0383 (kcal/mol)	4 (kcal/mol/ Ang)	200556.416 2149 (kcal/mol)	2.0089	(Alpha) 18.57 (Beta)	0.4922	C <sub>s</sub>
3	<i>siklik</i> - OCONO	148951	200860	-	13108.350	112.26695	-	-	19.56	-	-
		9381432 (kcal/m ol)	5237106 (kcal/m ol)	162060.28 88261 (kcal/mol)	6829 (kcal/mol)	48 (kcal/mol Ang)	148950.985 8871 (kcal/mol)	1.7416	(Alpha) 18.57 (Beta)	2092.3720	C <sub>1</sub>
4	CO	70935.6	70343.2	-	13023.545	15.854560	-	-	8.22	-	-
		167158 (kcal/m ol)	610345 (kcal/m ol)	83959.161 7534 (kcal/mol)	0376 (kcal/mol)	4 (kcal/mol/ Ang)	71208.6232 417 (kcal/mol)	2.0084	(Alpha) 6.24 (Beta)	1.4618	C <sup>*</sup>
5	CO <sub>2</sub>	118264	117216	-	35946.297	8.7529088	-	-	11.34	-	-
		0187355 (kcal/m ol)	5602607 (kcal/m ol)	154230.31 66318 (kcal/mol)	8963 (kcal/mol)	8 (kcal/mol/ Ang)	118759.053 4650 (kcal/mol)	2.0091	(Alpha) 11.34 (Beta)	0.0517	D <sub>h</sub>
6	ONO	128628	127438	-	39345.963	0.1894271	-	-	12.37	-	-
		2344102 (kcal/m ol)	5369151 (kcal/m ol)	167974.19 82063 (kcal/mol)	7961 (kcal/mol)	0 (kcal/mol/ Ang)	129196.295 9118 (kcal/mol)	2.0093	(Alpha) 11.34 (Beta)	0.2977	C <sub>2v</sub>
7	NO	81470.8	80807.2	-	16128.534	48.684741	-	-	8.22	-	-
		132021 (kcal/m ol)	986165 (kcal/m ol)	97509.747 8078 (kcal/mol)	6056 (kcal/mol)	9 (kcal/mol/ Ang)	81781.3922 951 (kcal/mol)	2.0082	(Alpha) 7.23 (Beta)	0.1034	C <sup>*</sup> <sub>v</sub>

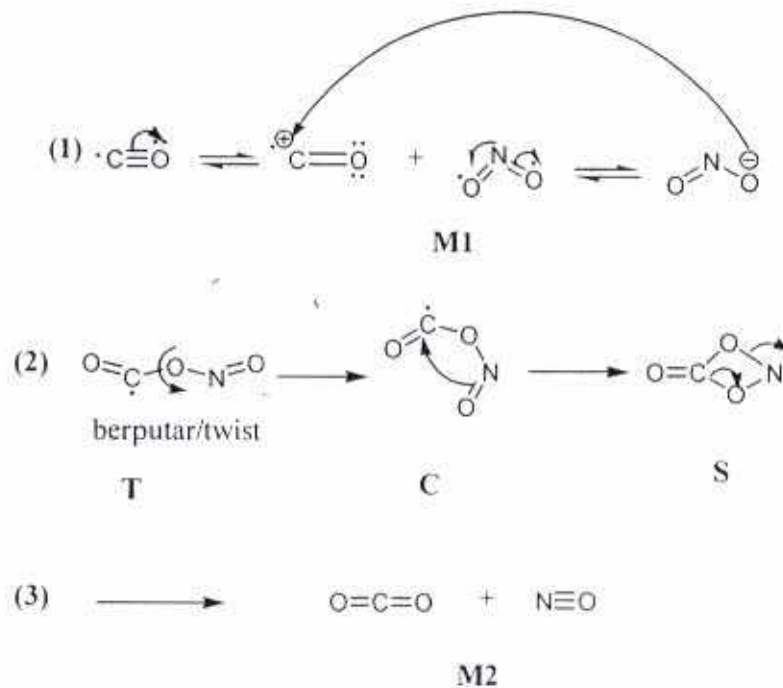
\*Data diperoleh dengan menggunakan energi korelasi Moller-Pleset Perturbation (MP2)

Data pada Tabel 2 menunjukkan bahwa energi total intermediet terkecil untuk struktur molekul OCONO adalah formasi siklik, diikuti oleh posisi *trans* dan *cis* demikian juga energi korelasi. Sehingga dalam reaksi, spesi intermediet siklik lebih direkomendasikan untuk

terbentuk dibandingkan kedua posisi lain. Momen dipol yang dibentuk posisi siklik > *trans* > *cis*. Berdasarkan pola kecenderungan tingkat energi intermediet diramalkan migrasi elektron dalam molekul sesuai dengan Skema Reaksi 1. Pada skema diramalkan secara ske-

matis pada reaktan M1 elektron bermigrasi menuju O, sehingga C akan kekurangan elektron dan bersifat lebih elektropositif, pada saat yang sama pada molekul ONO, elektron lebih tertarik kepada salah satu oksigen, hal ini membuat nitrogen kehilangan elektron dan bersifat elektropositif, kemudian populasi elektron berlebih pada oksigen struktur ONO menarik karbon pada CO untuk mendekat dan berpasangan membentuk struktur *trans*-OCONO (T), karena terjadinya tolakan elektron sesama elektropositif membuat sumbu simetri C<sub>v</sub> pada struktur *trans* berputar sehingga membentuk struktur *cis* (C), struktur *cis* ini bertahan beberapa femto

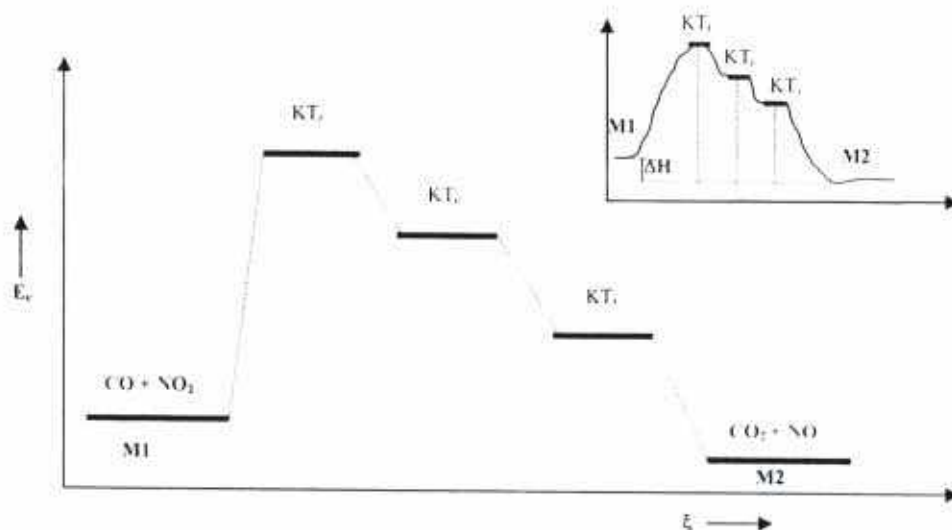
detik. Elektron yang terdapat pada ikatan rangkap NO memberikan pasangan elektron pada C di dekatnya yang sangat kekurangan elektron sehingga terbentuk struktur siklik (S) OCONO pada (2), akhirnya elektron pada struktur inipun kehilangan kestabilan dan populasi elektron pada O menangkap pasangan elektron untuk membentuk ikatan rangkap stabil dan memaksa ikatan salah satu O--N untuk kolaps dan membentuk molekul CO<sub>2</sub> dan NO yang stabil pada M2. Mekanisme perindahan elektron yang lebih lengkap dapat dilihat pada skema reaksi 1 (Gambar 2).



Gambar 2 Reaksi Usul Mekanisme Perpindahan Elektron yang Bersesuaian dengan Perhitungan HyperGauss dan HyperDFT

Penjelasan keadaan energi pada struktur Skema Reaksi 1 sesuai dengan data pada Tabel 2 dimana energi pembentukan struktur T > C > S, sehingga dapat dijelaskan bahwa terbentuk keadaan transisi (KT) dalam pembentukan senyawa CO<sub>2</sub> dan NO (M2) dari reaktan CO dan NO, keadaan transisi *trans* (KT<sub>1</sub>) memiliki energi total elektronik sebesar

199647.4302292 (kcal/mol), Keadaan Transisi-*cis* (KT<sub>2</sub>) memiliki energi total elektronik sebesar -199598.1686004 (kcal/mol) dan Keadaan Transisi- siklik (KT<sub>3</sub>) memiliki energi total elektronik sebesar -148951.9381432 (kcal/mol). Dapat ditawarkan jalur mekanisme pembentukan keadaan transisi seperti terlihat pada Gambar 3.



Gambar 3 Trayek Reaksi Perubahan Reaktan ( $\text{CO} + \text{NO}_2$ ) Menjadi Produk ( $\text{CO}_2 + \text{NO}$ ) Melalui 3 Jenis Keadaan Transisi (1) Keadaan Transisi Siklik ( $\text{KT}_1$ ), (2) Keadaan Transisi-*cis* ( $\text{KT}_2$ ) dan Keadaan Transisi-*trans* ( $\text{KT}_3$ )

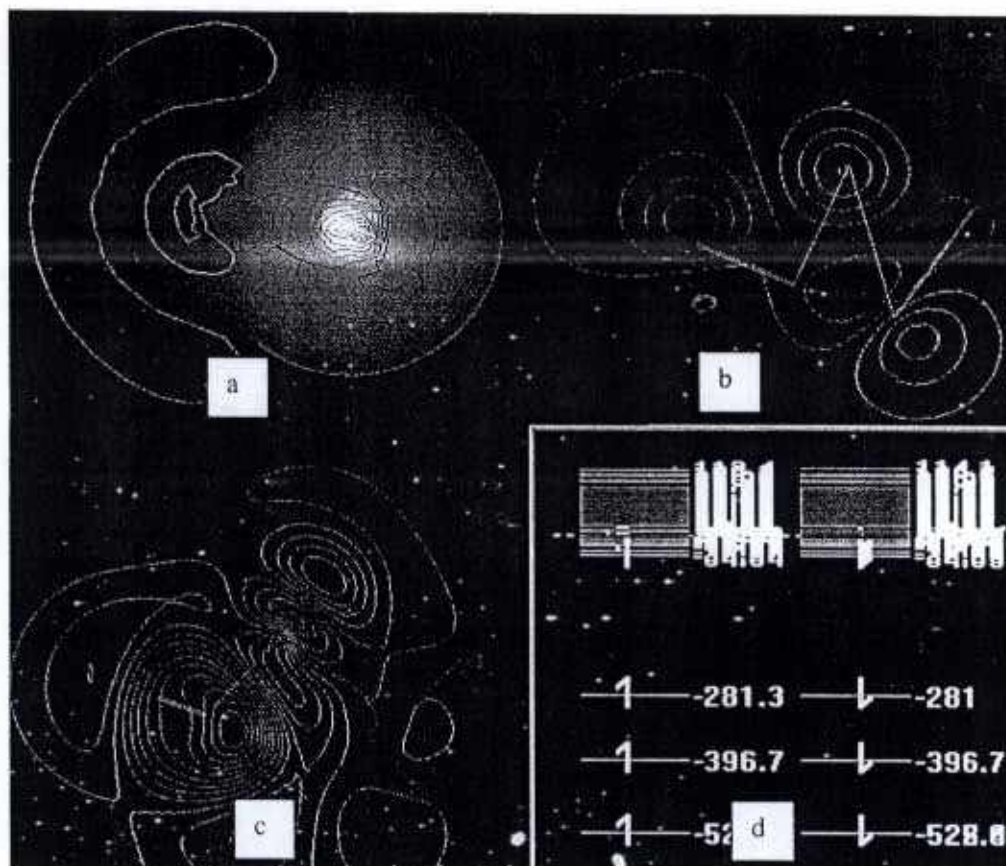
Perhitungan dengan Hypergauss/HyperDFT memberikan pola orbital ikatan HOMO, LUMO, dan tingkat energi molekul yang bereaksi sebagaimana disajikan pada Gambar 4.

Molekul CO Gambar 4a yang direpresentasikan dalam struktur bola dan tongkat memiliki kerapatan elektron HOMO (warna hijau) dan LUMO (warna ungu). Struktur intermediat *cis* dengan orbital molekul Gambar 4b mengalami perubahan bentuk orbital molekul setelah terjadi pemutaran (*twisting*) menjadi *trans* pada tingkat energi yang sama (Gambar 4c).

### KESIMPULAN DAN SARAN

Teori Fungsi Kerapatan cukup efektif meramalkan mekanisme reaksi oksidasi senyawa

wa CO menjadi  $\text{CO}_2$  oleh  $\text{NO}_2$ . Pada perhitungan diperoleh bahwa pembentukan senyawa  $\text{CO}_2$  melalui jalur mekanisme keadaan transisi bertingkat. Jalur mekanisme yang ditawarkan berdasarkan kepada fungsi kerapatan elektron dan migrasinya. Pada mekanisme yang ditawarkan formasi *trans* merupakan formasi dengan energi tertinggi, kemudian mengalami *twisting* menjadi *cis* dan akhirnya membentuk struktur siklik sebelum kemudian kolaps menjadi reaktan. Mekanisme ini berlangsung dalam orde femtodetik sehingga diperlukan usaha lebih lanjut untuk memahami jalur mekanisme yang sesungguhnya dari reaksi oksidasi CO menjadi  $\text{CO}_2$  dengan oksidator  $\text{NO}_2$ .



Gambar 4 Representasi Orbital Molekul (a) HOMO pada Molekul CO, (b) HOMO pada Molekul *cis*-OCONO, (c) HOMO pada Molekul *trans*-OCONO dan (d) Diagram Tingkat Energi CO

#### DAFTAR KEPUSTAKAAN

- Bacskey GB and Mackie JC. 2005a. Oxidation of CO by SO<sub>2</sub>: A theoretical study. *The Journal of Physical Chemistry A* 109(9), 2019–2025. doi:10.1021/jp045086n.
- Bacskey GB & Mackie JC. 2005b. Oxidation of CO by SO<sub>2</sub>: a theoretical study. *The journal of physical chemistry*. 109(9), 2019–2025. doi:10.1021/jp045086n.
- Brown FB and Crist RH. 1941. Further studies on the oxidation of nitric oxide; the rate of the reaction between carbon monoxide and nitrogen dioxide. *The Journal of Chemical Physics* 9(12), 840–846. doi:doi:10.1063/1.1750854.
- Dalton JS, Janes PA, Jones NG, Nicholson JA, Hallam KR and Allen GC. 2002. Photocatalytic oxidation of NO<sub>x</sub> gases using TiO<sub>2</sub>: a surface spectroscopic approach. *Environmental pollution (Barking, Essex: 1987)*, 120(2), 415–22. Retrieved from <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/12395856>.
- Gaydon AG, Kimbell GH and Palmer HB. 1963. A shock-tube study of the kinetics of decomposition of sulphur dioxide. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 276(1367), 461–474. doi:10.1098/rspa.1963.0219.
- Ismail H, Park J, Wong BM, Green WH and Lin MC. 2005. A theoretical and experimental kinetic study of phenyl radical addition to butadiene. *Proceedings of the Combustion Institute*.

- 30(1), 1049–1056. doi:10.1016/j.proci.2004.08.127.
- Jiang Z, Xiao T, Kuznetsov VL and Edwards PP. 2010. Turning carbon dioxide into fuel. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences*, 368(1923), 3343–64. doi:10.1098/rsta.2010.0119.
- Milks D, Adams TN and Matula RA. 1979. Single pulse shock tube study of the reaction between nitrogen dioxide ( $\text{NO}_2$ ) and carbon monoxide (CO). *Combustion Science and Technology*, 19(3-4), 151–159. doi:10.1080/00102207908946876.
- Opencourseware MIT. 2008. Complex Reactions and Mechanisms (continued ).
- Tsang W and Herron JT. 1991. Chemical kinetic data base for propellant combustion i. Reactions involving  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{HNO}$ ,  $\text{HNO}_2$ ,  $\text{HCN}$  and  $\text{N}_2\text{O}$ . *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 20(4), 609–663. doi:doi:10.1063/1.555890.
- Xu ZF and Lin MC. 2006. ab initio kinetics for the unimolecular reaction  $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH} \rightarrow \text{CO} + \text{C}_5\text{H}_6$ . *The journal of physical chemistry. A*, 110(4), 1672–1677. doi:10.1021/jp055241d.