

## **Part 6—References**

1. Finlayson-Pitts, B. J.; Pitts, J. N., *Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere*. Academic Press: New York, 1999; p 969.
2. Jacob, D. J., *Introduction to Atmospheric Chemistry*. Princeton University Press: Princeton, NJ, 1999.
3. Seinfeld, J. H.; Pandis, S. N., *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*. Wiley: New York, 2006; p 1203.
4. Jerrett, M.; Burnett, R. T.; Pope, C. A., 3rd; Ito, K.; Thurston, G.; Krewski, D.; Shi, Y.; Calle, E.; Thun, M., *New Engl. J. Med.* **2009**, *360* (11), 1085–1095.
5. Madsen, D. South Coast Air Basin Smog Trend. <http://www.aqmd.gov/smog/historicaldata.htm>.
6. Ball, S. M.; Jones, R. L., *Chem. Rev.* **2003**, *103* (12), 5239–5262.
7. Berden, G.; Peeters, R.; Meijer, G., *Int. Rev. Phys. Chem.* **2000**, *19* (4), 565–607.
8. O'Keefe, A.; Deacon, D. A. G., *Rev. Sci. Instrum.* **1988**, *59* (12), 2544–2551.
9. Scherer, J. J.; Voelkel, D.; Rakestraw, D. J.; Paul, J. B.; Collier, C. P., *Chem. Phys. Lett.* **1995**, *245* (2-3), 273–280.
10. Vallance, C., *New J. Chem.* **2005**, *29* (7), 867–874.
11. Zalicki, P.; Zare, R. N., *J. Chem. Phys.* **1995**, *102* (7), 2708–2717.
12. Mollner, A. K.; Valluvadasan, S.; Feng, L.; Sprague, M. K.; Okumura, M.; Milligan, D. B.; Bloss, W. J.; Sander, S. P.; Martien, P. T.; Harley, R. A.; McCoy, A. B.; Carter, W. P. L., *Science* **2010**, *330* (6004), 646–649.
13. Robertshaw, J. S.; Smith, I. W. M., *J. Phys. Chem.* **1982**, *86* (5), 785–790.
14. Nizkorodov, S. A.; Wennberg, P. O., *J. Phys. Chem. A* **2002**, *106* (6), 855–859.
15. Bean, B. D.; Mollner, A. K.; Nizkorodov, S. A.; Nair, G.; Okumura, M.; Sander, S. P.; Peterson, K. A.; Francisco, J. S., *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107* (36), 6974–6985.
16. Zhang, X.; Nimlos, M. R.; Ellison, G. B.; Varner, M. E.; Stanton, J. F., *J. Chem. Phys.* **2006**, *124* (8), 084305.
17. Benson, S. W., *Int. J. Chem. Kinet.* **2001**, *33* (9), 509–512.
18. Dibble, T. S., *Chem. Phys. Lett.* **2002**, *355* (1-2), 193–200.
19. Hermans, I.; Muller, J. F.; Nguyen, T. L.; Jacobs, P. A.; Peeters, J., *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109* (19), 4303–4311.
20. Hermans, I.; Nguyen, T. L.; Jacobs, P. A.; Peeters, J., *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126* (32), 9908–9909.
21. Anglada, J. M.; Domingo, V. M., *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109* (47), 10786–10794.
22. Cours, T.; Canneaux, S.; Bohr, F., *Int. J. Quantum Chem* **2007**, *107* (6), 1344–1354.
23. Grieman, F. J.; Noell, A. C.; Davis-Van Atta, C.; Okumura, M.; Sander, S. P., *J. Phys. Chem. A* **2011**, *115* (38), 10527–10538.
24. Su, F.; Calvert, J. G.; Shaw, J. H.; Niki, H.; Maker, P. D., *Chem. Phys. Lett.* **1979**, *65* (2), 221–225.
25. Burrows, J. P.; Moortgat, G. K.; Tyndall, G. S.; Cox, R. A.; Jenkin, M. E.; Hayman, G. D.; Veyret, B., *J. Phys. Chem.* **1989**, *93* (6), 2375–2382.
26. Veyret, B.; Lesclaux, R.; Rayez, M. T.; Rayez, J. C.; Cox, R. A.; Moortgat, G. K., *J. Phys. Chem.* **1989**, *93* (6), 2368–2374.

27. Sander, S. P.; Abbatt, J.; Barker, J. R.; Burkholder, J. B.; Friedl, R. R.; Golden, D. M.; Huie, R. E.; Kolb, C. E.; Kurylo, M. J.; Moortgat, G. K.; Orkin, V. L.; Wine, P. H., Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Atmospheric Studies, Evaluation No. 17, JPL Publication 10-6, *Jet Propulsion Laboratory, Pasadena* **2011**.
28. Atkinson, R., *Atmos. Environ.* **2007**, *41* (38), 8468–8485.
29. Garland, E. R. Laboratory Studies of Atmospheric Reactions Using Infrared Cavity Ringdown Spectroscopy. Ph.D. Thesis, California Institute of Technology, Pasadena, CA, **2002**.
30. Mollner, A. K. Cavity Ringdown Spectroscopy Studies of Atmospheric Reactions: Peroxynitrous Acid Formation and Alkoxy Radical Isomerization. Ph.D. Thesis, California Institute of Technology, Pasadena, CA, **2007**.
31. Sprague, M. K.; Garland, E. R.; Mollner, A. K.; Bloss, C.; Bean, B. D.; Weichman, M. L.; Mertens, L. A.; Okumura, M.; Sander, S. P., *J. Phys. Chem. A* **2012**, *Articles ASAP*, DOI 10.1021/jp212136r.
32. Heicklen, J., The Decomposition of Alkyl Nitrites and the Reactions of Alkoxy Radicals. In *Advances in Photochemistry*, John Wiley & Sons: **2007**; pp 177–272.
33. Brown, S. S., *Chem. Rev.* **2003**, *103* (12), 5219–5238.
34. Chance, K. V.; Park, K.; Evenson, K. M.; Zink, L. R.; Stroh, F.; Fink, E. H.; Ramsay, D. A., *J. Mol. Spectrosc.* **1997**, *183* (2), 418.
35. Hochanad, C. J.; Ogren, P. J.; Ghormley, J. A., *J. Chem. Phys.* **1972**, *56* (9), 4426–4432.
36. Yamada, C., *J. Chem. Phys.* **1983**, *78* (7), 4379.
37. Scherer, J. J.; Paul, J. B.; O'Keefe, A.; Saykally, R. J., *Chem. Rev.* **1997**, *97* (1), 25–51.
38. Engeln, R.; Berden, G.; Peeters, R.; Meijer, G., *Rev. Sci. Instrum.* **1998**, *69* (11), 3763–3769.
39. Ye, J.; Ma, L. S.; Hall, J. L., *J. Opt. Soc. Am. B* **1998**, *15* (1), 6–15.
40. Sharpe, S. W.; Johnson, T. J.; Sams, R. L.; Chu, P. M.; Rhoderick, G. C., *Appl. Spectrosc.* **2004**, *58* (12), 1452–1461.
41. NIST Mass Spec Data Center, S. E. S., director, "Infrared Spectra" in NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69. Linstrom, P. J.; Mallard, W. G., Eds. 2011. <http://webbook.nist.gov> (accessed November 2, 2011).
42. McCoy, A. B.; Fry, J. L.; Francisco, J. S.; Mollner, A. K.; Okumura, M., *J. Chem. Phys.* **2005**, *122* (10), 104311.
43. McCoy, A. B.; Sprague, M. K.; Okumura, M., *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114* (3), 1324–1333.
44. Sharp, E. N.; Rupper, P.; Miller, T. A., *PCCP* **2008**, *10* (27), 3955–3981.
45. Takematsu, K. Cavity Ringdown Spectroscopy of the Nitrate and Peroxy Radicals. Ph.D. Thesis, California Institute of Technology, Pasadena, CA, 2011.
46. Paschotta, R., *Encyclopedia of Laser Physics and Technology*. Wiley-VCH: Berlin, 2008.
47. Reid, S. A.; Tang, Y., *Appl. Opt.* **1996**, *35* (9), 1473–1477.
48. Demartino, A.; Frey, R.; Pradere, F., *IEEE J. Quantum Elect.* **1980**, *16* (11), 1184–1191.

49. Fuelberth, T. M. The Building of an Infrared Source for Use in Free Radical Kinetics Important in Stratospheric Ozone Depletion: Cavity Ringdown Detection. M.S. Thesis, California Institute of Technology, Pasadena, CA, 1997.
50. Barbieri, B.; Beverini, N.; Galli, M.; Inguscio, M.; Strumia, F., *Nuovo Cimento D* **1984**, *4* (2), 172–180.
51. Barbieri, B.; Beverini, N.; Sasso, A., *Rev Mod Phys* **1990**, *62* (3), 603–644.
52. Reisner, D. E.; Field, R. W.; Kinsey, J. L.; Dai, H. L., *J. Chem. Phys.* **1984**, *80* (12), 5968–5978.
53. Reisner, D. E.; Vaccaro, P. H.; Kittrell, C.; Field, R. W.; Kinsey, J. L.; Dai, H. L., *J. Chem. Phys.* **1982**, *77* (1), 573–575.
54. Fink, E. H.; Ramsay, D. A., *J. Mol. Spectrosc.* **1997**, *185* (2), 304–324.
55. Osmann, G.; Bunker, P. R.; Jensen, P.; Buenker, R. J.; Gu, J. P., *J. Mol. Spectrosc.* **1999**, *197* (2), 262–274.
56. Anastasi, C.; Smith, I. W. M., *J. Chem. Soc.-Faraday Trans. II* **1976**, *72*, 1459–1468.
57. Atkinson, R.; Perry, R. A.; Pitts, J. N., *J. Chem. Phys.* **1976**, *65* (1), 306–310.
58. Chen, W. J.; Lo, W. J.; Cheng, B. M.; Lee, Y. P., *J. Chem. Phys.* **1992**, *97* (10), 7167–7173.
59. Cheng, B. M.; Lee, J. W.; Lee, Y. P., *J. Phys. Chem.* **1991**, *95* (7), 2814–2817.
60. Lo, W. J.; Lee, Y. P., *Chem. Phys. Lett.* **1994**, *229* (4–5), 357–361.
61. Lo, W. J.; Lee, Y. P., *J. Chem. Phys.* **1994**, *101* (7), 5494–5499.
62. Barker, J. R.; Golden, D. M., *Chem. Rev.* **2003**, *103* (12), 4577–4591.
63. Chakraborty, D., *Chem. Phys.* **1998**, *231* (1), 39.
64. Doclo, K., *Chem. Phys. Lett.* **1998**, *297* (3–4), 205.
65. Golden, D. M.; Barker, J. R.; Lohr, L. L., *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107* (50), 11057–11071.
66. Golden, D. M.; Smith, G. P., *J. Phys. Chem. A* **2000**, *104* (17), 3991–3997.
67. Matthews, J.; Sinha, A., *J. Chem. Phys.* **2005**, *122* (10).
68. Matthews, J.; Sinha, A.; Francisco, J. S., *J. Chem. Phys.* **2004**, *120* (22), 10543–10553.
69. Miller, Y.; Chaban, G. M.; Finlayson-Pitts, B. J.; Gerber, R. B., *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110* (16), 5342–5354.
70. Pollack, I. B.; Konen, I. M.; Li, E. X. J.; Lester, M. I., *J. Chem. Phys.* **2003**, *119* (19), 9981–9984.
71. Williams, C. F.; Pogrebnya, S. K.; Clary, D. C., *J. Chem. Phys.* **2007**, *126* (15), 154321.
72. Zhang, J.; Donahue, N., *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110* (21), 6898–6911.
73. Burkholder, J. B.; Hammer, P. D.; Howard, C. J., *J. Phys. Chem.* **1987**, *91* (8), 2136–2144.
74. Fry, J. L.; Nizkorodov, S. A.; Okumura, M.; Roehl, C. M.; Francisco, J. S.; Wennberg, P. O., *J. Chem. Phys.* **2004**, *121* (3), 1432–1448.
75. Konen, I. M.; Li, E. X. J.; Stephenson, T. A.; Lester, M. I., *J. Chem. Phys.* **2005**, *123* (20), 094320.
76. Li, E. X. J.; Konen, I. M.; Lester, M. I.; McCoy, A. B., *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110* (17), 5607–5612.

77. M. J. Frisch, G. W. T., H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, et al. *Gaussian 98W, Revision A.01*, Gaussian Inc.: 1998.
78. M. J. Frisch, G. W. T., H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, et al. *Gaussian 03, Revision A.02*, Gaussian Inc.: 2003.
79. M. J. Frisch, G. W. T., H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, et al. *Gaussian 03W, Revision C.01*, Gaussian Inc.: 2003.
80. Laidig, W. D.; Purvis, G. D.; Bartlett, R. J., *Int. J. Quantum Chem* **1982**, 561–573.
81. Purvis, G. D.; Bartlett, R. J., *J. Chem. Phys.* **1982**, 76 (4), 1910–1918.
82. Scuseria, G. E.; Janssen, C. L.; Schaefer, H. F., *J. Chem. Phys.* **1988**, 89 (12), 7382–7387.
83. Scuseria, G. E.; Schaefer, H. F., *J. Chem. Phys.* **1989**, 90 (7), 3700–3703.
84. Headgordon, M.; Pople, J. A.; Frisch, M. J., *Chem. Phys. Lett.* **1988**, 153 (6), 503–506.
85. Moller, C.; Plesset, M. S., *Phys. Rev.* **1934**, 46 (7), 0618–0622.
86. Pople, J. A.; Headgordon, M.; Raghavachari, K., *J. Chem. Phys.* **1987**, 87 (10), 5968–5975.
87. Donahue, N. M.; Mohrschladt, R.; Dransfield, T. J.; Anderson, J. G.; Dubey, M. K., *J. Phys. Chem. A* **2001**, 105 (9), 1515–1520.
88. Konen, I. M.; Pollack, I. B.; Li, E. X. J.; Lester, M. I.; Varner, M. E.; Stanton, J. F., *J. Chem. Phys.* **2005**, 122 (9), 094320.
89. Buendia-Atencio, C.; Leyva, V.; Gonzalez, L., *J. Phys. Chem. A* **2010**, 114 (35), 9537–9544.
90. Herbert, J. M.; McCoy, A. B.; Szalay, P. G.; Stanton, J. F.; Ellison, G. B., *Abstr Pap Am Chem S* **2004**, 228, U203–U204.
91. Lohr, L. L.; Barker, J. R.; Shroll, R. M., *J. Phys. Chem. A* **2003**, 107 (38), 7429–7433.
92. Renbaum, L. H.; Smith, G. D., *PCCP* **2009**, 11 (36), 8040–8047.
93. Zhang, J. Y.; Dransfield, T.; Donahue, N. M., *J. Phys. Chem. A* **2004**, 108 (42), 9082–9095.
94. Zhao, Y. L.; Houk, K. N.; Olson, L. P., *J. Phys. Chem. A* **2004**, 108 (27), 5864–5871.
95. Jensen, F., *Introduction to Computational Chemistry*. John Wiley and Sons: New York, NY, 1999.
96. Barnes, I.; Becker, K. H.; Fink, E. H.; Reimer, A.; Zabel, F.; Niki, H., *Chem. Phys. Lett.* **1985**, 115 (1), 1–8.
97. Gierczak, T.; Ravishankara, A. R., *Int. J. Chem. Kinet.* **2000**, 32 (9), 573–580.
98. Huie, R. E.; Clifton, C. L., *Chem. Phys. Lett.* **1993**, 205 (2-3), 163–167.
99. Su, F.; Calvert, J. G.; Shaw, J. H., *J. Phys. Chem.* **1979**, 83 (25), 3185–3191.
100. Tomas, A.; Villenave, E.; Lesclaux, R., *J. Phys. Chem. A* **2001**, 105 (14), 3505–3514.
101. Tyndall, G. S.; Cox, R. A.; Granier, C.; Lesclaux, R.; Moortgat, G. K.; Pilling, M. J.; Ravishankara, A. R.; Wallington, T. J., *J. Geophys. Res.—Atmos.* **2001**, 106 (D11), 12157–12182.

102. Veyret, B.; Rayez, J. C.; Lesclaux, R., *J. Phys. Chem.* **1982**, *86* (17), 3424–3430.
103. Rabani, J.; Klugroth, D.; Henglein, A., *J. Phys. Chem.* **1974**, *78* (21), 2089–2093.
104. Dóbé, S.; Temps, F.; Bohland, T.; Wagner, H. G., *Z Naturforsch A* **1985**, *40* (12), 1289–1298.
105. Gab, S.; Turner, W. V.; Wolff, S.; Becker, K. H.; Ruppert, L.; Brockmann, K. J., *Atmos. Environ.* **1995**, *29* (18), 2401–2407.
106. Horie, O.; Moortgat, G. K., *Fresenius J. Anal. Chem.* **1991**, *340* (10), 641–645.
107. Olivella, S.; Bofill, J. M.; Sole, A., *Chem.-Eur. J.* **2001**, *7* (15), 3377–3386.
108. Aloisio, S.; Francisco, J. S., *J. Phys. Chem. A* **2000**, *104* (14), 3211–3224.
109. Evleth, E. M.; Melius, C. F.; Rayez, M. T.; Rayez, J. C.; Forst, W., *J. Phys. Chem.* **1993**, *97* (19), 5040–5045.
110. Li, Q. S.; Zhang, X.; Zhang, S. W., *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109* (51), 12027–12035.
111. Nguyen, T. L.; Vereecken, L.; Peeters, J., *Z. Phys. Chem.* **2010**, *224* (7-8), 1081–1093.
112. Zhao, Y. C.; Wang, B. X.; Li, H. Y.; Wang, L., *J. Mol. Struct—Theochem* **2007**, *818* (1–3), 155–161.
113. Roehl, C. M.; Marka, Z.; Fry, J. L.; Wennberg, P. O., *Atmos. Chem. Phys.* **2007**, *7*, 713–720.
114. Maricq, M. M.; Wallington, T. J., *J. Phys. Chem.* **1992**, *96* (2), 986–992.
115. Melnik, D.; Chhantyal-Pun, R.; Miller, T. A., *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114* (43), 11583–11594.
116. Gratien, A.; Nilsson, E.; Doussin, J.-F.; Johnson, M. S.; Nielsen, C. J.; Stenstrom, Y.; Picquet-Varrault, B., *J. Phys. Chem. A* **2007**, *111* (45), 11506–11513.
117. Manion, J. A.; Huie, R. E.; Levin, R. D.; Jr., D. R. B.; Orkin, V. L.; Tsang, W.; McGivern, W. S.; Hudgens, J. W.; Knyazev, V. D.; Atkinson, D. B.; Chai, E.; Tereza, A. M.; Lin, C.-Y.; Allison, T. C.; Mallard, W. G.; Westley, F.; Herron, J. T.; Hampson, R. F.; Frizzell, D. H. NIST Chemical Kinetics Database, NIST Standard Reference Database 17, Version 7.0 (Web Version), Release 1.4.3, Data version 2008.12. <http://kinetics.nist.gov/>
118. Atkinson, R.; Baulch, D. L.; Cox, R. A.; Crowley, J. N.; Hampson, R. F.; Hynes, R. G.; Jenkin, M. E.; Rossi, M. J.; Troe, J., *Atmos. Chem. Phys.* **2006**, *6*, 3625–4055.
119. Fry, J. L.; Matthews, J.; Lane, J. R.; Roehl, C. M.; Sinha, A.; Kjaergaard, H. G.; Wennberg, P. O., *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110* (22), 7072–7079.
120. Western, C. M. *PGopher, a Program for Simulating Rotational Structure*, University of Bristol: 2012.
121. M. J. Frisch, G. W. T., H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, et al. *Gaussian 09, Revision C.01*, Gaussian, Inc.: 2009.
122. Chung, C.-Y.; Cheng, C.-W.; Lee, Y.-P.; Liao, H.-Y.; Sharp, E. N.; Rupper, P.; Miller, T. A., *J. Chem. Phys.* **2007**, *127* (4).
123. Curtiss, L. A.; Raghavachari, K.; Trucks, G. W.; Pople, J. A., *J. Chem. Phys.* **1991**, *94* (11), 7221–7230.
124. Zalyubovsky, S. J.; Wang, D. B.; Miller, T. A., *Chem. Phys. Lett.* **2001**, *335* (3–4), 298–304.
125. Dennington, R.; Keith, T.; Millam, J. *GaussView 3.09*, Semichem Inc.: Shawnee Mission, KS, 2003.

126. *SigmaPlot 8.0*, SPSS Inc.: Chicago, IL, 2002.
127. Just, G. M. P.; McCoy, A. B.; Miller, T. A., *J. Chem. Phys.* **2007**, *127* (4).
128. Johnson, R. D., NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database. NIST Standard Reference Database Number 101: 2011.
129. Caralp, F.; Forst, W., *PCCP* **2003**, *5* (20), 4653–4655.
130. Devolder, P., *J Photoch Photobio A* **2003**, *157* (2–3), 137–147.
131. Jungkamp, T. P. W.; Smith, J. N.; Seinfeld, J. H., *J. Phys. Chem. A* **1997**, *101* (24), 4392–4401.
132. Lendvay, G.; Viskolcz, B., *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102* (52), 10777–10786.
133. Mereau, R.; Rayez, M. T.; Caralp, F.; Rayez, J. C., *PCCP* **2000**, *2* (9), 1919–1928.
134. Mereau, R.; Rayez, M. T.; Caralp, F.; Rayez, J. C., *PCCP* **2003**, *5* (21), 4828–4833.
135. Somnitz, H., *PCCP* **2008**, *10* (7), 965–973.
136. Somnitz, H.; Zellner, R., *PCCP* **2000**, *2* (9), 1907–1918.
137. Somnitz, H.; Zellner, R., *PCCP* **2000**, *2* (19), 4319–4325.
138. Somnitz, H.; Zellner, R., *PCCP* **2000**, *2* (9), 1899–1905.
139. Somnitz, H.; Zellner, R., *Z. Phys. Chem.* **2006**, *220* (8), 1029–1048.
140. Vereecken, L.; Peeters, J., *J. Chem. Phys.* **2003**, *119* (10), 5159–5170.
141. Caralp, F.; Forst, W.; Bergeat, A., *PCCP* **2008**, *10* (37), 5746–5753.
142. Atkinson, R., *Int. J. Chem. Kinet.* **1997**, *29* (2), 99–111.
143. Atkinson, R.; Arey, J., *Chem Rev* **2003**, *103* (12), 4605–4638.
144. Orlando, J. J.; Tyndall, G. S.; Wallington, T. J., *Chem. Rev.* **2003**, *103* (12), 4657–4689.
145. Atkinson, R.; Aschmann, S. M., *Environ. Sci. Technol.* **1995**, *29* (2), 528–536.
146. Atkinson, R.; Kwok, E. S. C.; Arey, J.; Aschmann, S. M., *Faraday Discuss.* **1995**, *100*, 23–37.
147. Kwok, E. S. C.; Arey, J.; Atkinson, R., *J. Phys. Chem.* **1996**, *100* (1), 214–219.
148. Niki, H.; Maker, P. D.; Savage, C. M.; Breitenbach, L. P., *J. Phys. Chem.* **1981**, *85* (18), 2698–2700.
149. Curran, H. J., *Int. J. Chem. Kinet.* **2006**, *38* (4), 250–275.
150. Johnson, D.; Cassanelli, P.; Cox, R. A., *Atmos. Environ.* **2004**, *38* (12), 1755–1765.
151. Mereau, R.; Rayez, M. T.; Caralp, F.; Rayez, J. C., *PCCP* **2000**, *2* (17), 3765–3772.
152. Vereecken, L.; Peeters, J., *PCCP* **2010**, *12* (39), 12608–20.
153. Kwok, E. S. C.; Atkinson, R.; Arey, J., *Abstr. Pap. Am. Chem. Soc.* **1995**, *209*, ENVR-106.
154. Carter, W. P. L.; Lloyd, A. C.; Sprung, J. L.; Pitts, J. N., *Int. J. Chem. Kinet.* **1979**, *11* (1), 45–101.
155. Cassanelli, P.; Cox, R. A.; Orlando, J. J.; Tyndall, G. S., *J. Photoch. Photobio. A* **2006**, *177* (2–3), 109–115.
156. Cox, R. A.; Patrick, K. F.; Chant, S. A., *Environ Sci Technol* **1981**, *15* (5), 587–592.
157. Dóbé, S.; Berces, T.; Marta, F., *Int. J. Chem. Kinet.* **1986**, *18* (3), 329–344.
158. Heiss, A.; Sahetchian, K., *Int. J. Chem. Kinet.* **1996**, *28* (7), 531–544.
159. Hein, H.; Hoffmann, A.; Zellner, R., *PCCP* **1999**, *1* (16), 3743–3752.

160. Cassanelli, P.; Johnson, D.; Cox, R. A., *PCCP* **2005**, 7 (21), 3702–3710.
161. Geiger, H.; Barnes, I.; Becker, K. H.; Bohn, B.; Brauers, T., *J Atmos Chem* **2002**, 42 (1), 323–357.
162. Bai, J. L.; Okabe, H.; Halpern, J. B., *Chem. Phys. Lett.* **1988**, 149 (1), 37–39.
163. Carter, C. C.; Atwell, J. R.; Gopalakrishnan, S.; Miller, T. A., *J. Phys. Chem. A* **2000**, 104 (40), 9165–9170.
164. Carter, C. C.; Gopalakrishnan, S.; Atwell, J. R.; Miller, T. A., *J. Phys. Chem. A* **2001**, 105 (13), 2925–2928.
165. Ebata, T.; Yanagishita, H.; Obi, K.; Tanaka, I., *Chem. Phys.* **1982**, 69 (1–2), 27–33.
166. Foster, S. C.; Misra, P.; Lin, T. Y. D.; Damo, C. P.; Carter, C. C.; Miller, T. A., *J. Phys. Chem.* **1988**, 92 (21), 5914–5921.
167. Gopalakrishnan, S.; Carter, C. C.; Zu, L.; Stakhursky, V.; Tarczay, G.; Miller, T. A., *J. Chem. Phys.* **2003**, 118 (11), 4954–4969.
168. Gopalakrishnan, S.; Zu, L.; Miller, T. A., *J. Phys. Chem. A* **2003**, 107 (26), 5189–5201.
169. Gopalakrishnan, S.; Zu, L.; Miller, T. A., *Chem. Phys. Lett.* **2003**, 380 (5–6), 749–757.
170. Inoue, G.; Okuda, M.; Akimoto, H., *J. Chem. Phys.* **1981**, 75 (5), 2060–2065.
171. Jin, J.; Sioutis, I.; Tarczay, G.; Gopalakrishnan, S.; Bezant, A.; Miller, T. A., *J. Chem. Phys.* **2004**, 121 (23), 11780–11797.
172. Lin, J. L.; Zu, L. L.; Fang, W. H., *J. Phys. Chem. A* **2011**, 115 (3), 274–279.
173. Liu, X. M.; Damo, C. P.; Lin, T. Y. D.; Foster, S. C.; Misra, P.; Yu, L.; Miller, T. A., *J. Phys. Chem.* **1989**, 93 (6), 2266–2275.
174. Lotz, C., *PCCP* **2001**, 3 (13), 2607–2613.
175. Ohbayashi, K.; Akimoto, H.; Tanaka, I., *J. Phys. Chem.* **1977**, 81 (8), 798–802.
176. Powers, D. E.; Pushkarsky, M. B.; Miller, T. A., *J. Chem. Phys.* **1997**, 106 (17), 6863–6877.
177. Stakhursky, V. L.; Zu, L. L.; Liu, J. J.; Miller, T. A., *J. Chem. Phys.* **2006**, 125 (9), 094316.
178. Zhang, L.; Callahan, K. M.; Derbyshire, D.; Dibble, T. S., *J. Phys. Chem. A* **2005**, 109 (41), 9232–9240.
179. Zhang, L.; Kitney, K. A.; Ferenac, M. A.; Deng, W.; Dibble, T. S., *J. Phys. Chem. A* **2004**, 108 (3), 447–454.
180. Zu, L.; Liu, J. J.; Gopalakrishnan, S.; Miller, T. A., *Can. J. Chem.* **2004**, 82 (6), 854–866.
181. Tan, X. Q.; Williamson, J. M.; Foster, S. C.; Miller, T. A., *J. Phys. Chem.* **1993**, 97 (37), 9311–9316.
182. Wendt, H. R.; Hunziker, H. E., *J. Chem. Phys.* **1979**, 71 (12), 5202–5205.
183. Noyes, W. A., *Organic Syntheses* **1943**, Coll. Vol. 2, 108.
184. Chen, M. W.; Just, G. M. P.; Codd, T.; Miller, T. A., *J. Chem. Phys.* **2011**, 135 (18), 184304.
185. Chhantyal-Pun, R.; Kline, N. D.; Thomas, P. S.; Miller, T. A., *J. Phys. Chem. Lett.* **2010**, 1 (12), 1846–1852.
186. Keller, B. A.; Felder, P.; Huber, J. R., *J. Phys. Chem.* **1987**, 91 (5), 1114–1120.
187. Bruhlmann, U.; Dubs, M.; Huber, J. R., *J. Chem. Phys.* **1987**, 86 (3), 1249–1257.



188. Mestdagh, J. M.; Berdah, M.; Dimicoli, I.; Mons, M.; Meynadier, P.; Doliveira, P.; Piuze, F.; Visticot, J. P.; Jouvet, C.; Lardeuxdedonder, C.; Martrenchardbarra, S.; Soep, B.; Solgadi, D., *J. Chem. Phys.* **1995**, *103* (3), 1013–1023.
189. Yue, X. F.; Sun, J. L.; Yin, H. M.; Wei, Q.; Han, K. L., *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113* (14), 3303–3310.
190. Glover, B. G.; Miller, T. A., *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109* (49), 11191–11197.
191. Ianni, J. C. *Kintecus, Windows Version 3.95*, 2008.
192. Fittschen, C.; Frenzel, A.; Imrik, K.; Devolder, P., *Int. J. Chem. Kinet.* **1999**, *31* (12), 860–866.
193. Balla, R. J.; Nelson, H. H.; McDonald, J. R., *Chem. Phys.* **1985**, *99* (2), 323–335.
194. Bevington, P. R., *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. McGraw-Hill: 1969.
195. Sharp, E. N.; Rupper, P.; Miller, T. A., *J. Phys. Chem. A* **2008**, *112* (7), 1445–1456.
196. Foresman, J. B.; Frisch, A., *Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods*. Gaussian Inc.: 1996.
197. Valiev, M.; Bylaska, E. J.; Govind, N.; Kowalski, K.; Staraatsma, T. P.; van Dam, H. J. J.; Wang, D.; Nieplocha, J.; Apra, E.; Windus, T. L.; de Jong, W. A., *Comput. Phys. Commun.* **2010**, *181* (9), 1477–1489.
198. Curtiss, L. A.; Jones, C.; Trucks, G. W.; Raghavachari, K.; Pople, J. A., *J. Chem. Phys.* **1990**, *93* (4), 2537–2545.
199. Curtiss, L. A.; Raghavachari, K.; Redfern, P. C.; Rassolov, V.; Pople, J. A., *J. Chem. Phys.* **1998**, *109* (18), 7764–7776.
200. Curtiss, L. A.; Redfern, P. C.; Raghavachari, K., *J. Chem. Phys.* **2007**, *126* (8), 084108.
201. Pople, J. A.; Head-Gordon, M.; Fox, D. J.; Raghavachari, K.; Curtiss, L. A., *J. Chem. Phys.* **1989**, *90* (10), 5622–5629.
202. Montgomery, J. A.; Frisch, M. J.; Ochterski, J. W.; Petersson, G. A., *J. Chem. Phys.* **1999**, *110* (6), 2822–2827.
203. Montgomery, J. A.; Frisch, M. J.; Ochterski, J. W.; Petersson, G. A., *J. Chem. Phys.* **2000**, *112* (15), 6532–6542.
204. Montgomery, J. A.; Ochterski, J. W.; Petersson, G. A., *J. Chem. Phys.* **1994**, *101* (7), 5900–5909.
205. Wood, G. P. F.; Radom, L.; Petersson, G. A.; Barnes, E. C.; Frisch, M. J.; Montgomery, J. A., Jr., *J. Chem. Phys.* **2006**, *125* (9), 094106.
206. Barnes, E. C.; Petersson, G. A.; Montgomery, J. A., Jr.; Frisch, M. J.; Martin, J. M. L., *J. Chem. Theory Comput.* **2009**, *5* (10), 2687–2693.
207. Boese, A. D.; Oren, M.; Atasoylu, O.; Martin, J. M. L.; Kallay, M.; Gauss, J., *J. Chem. Phys.* **2004**, *120* (9), 4129–4141.
208. Karton, A.; Rabinovich, E.; Martin, J. M. L.; Ruscic, B., *J. Chem. Phys.* **2006**, *125* (14), 144108.
209. Martin, J. M. L.; de Oliveira, G., *J. Chem. Phys.* **1999**, *111* (5), 1843–1856.
210. Martin, J. M. L.; de Oliveira, G., *Abstr. Pap. Am. Chem. Soc.* **2000**, *219*, U591–U591.
211. Parthiban, S.; Martin, J. M. L., *J. Chem. Phys.* **2001**, *114* (14), 6014–6029.
212. Aloisio, S.; Francisco, J. S., *J. Am. Chem. Soc.* **1999**, *121* (37), 8592–8596.

213. Beames, J. M.; Lester, M. I.; Murray, C.; Varner, M. E.; Stanton, J. F., *J. Chem. Phys.* **2011**, *134* (4), 044314.
214. Braams, B.; Yu, H. G., *PCCP* **2008**, *10*, 3150–3155.
215. Cacace, F.; de Petris, C.; Pepi, F.; Troiani, A., *Science* **1999**, *285* (5424), 81–82.
216. Caridade, P.; Betancourt, M.; Garrido, J. D.; Varandas, A. J. C., *J. Phys. Chem. A* **2001**, *105* (31), 7435–7440.
217. Cooper, P. D.; Moore, M. H.; Hudson, R. L., *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110* (26), 7985–7988.
218. Denis, P. A.; Kieninger, M.; Ventura, O. N.; Cachau, R. E.; Diercksen, G. H. F., *Chem. Phys. Lett.* **2003**, *377* (3–4), 483–484.
219. Derro, E. L.; Murray, C.; Sechler, T. D.; Lester, M. I., *J. Phys. Chem. A* **2007**, *111* (45), 11592–11601.
220. Derro, E. L.; Sechler, T. D.; Murray, C.; Lester, M. I., *J. Phys. Chem. A*, **2008**, *112* (39), 9269–9276.
221. Fabian, W. M. F.; Kalcher, J.; Janoschek, R., *Theor. Chem. Acc.* **2005**, *114* (1–3), 182–188.
222. Mansergas, A.; Anglada, J. M.; Olivella, S.; Ruiz-Lopez, M. F.; Martins-Costa, M., *PCCP* **2007**, *9* (44), 5865–5873.
223. Mazziotti, D. A., *J. Phys. Chem. A* **2007**, *111* (49), 12635–12640.
224. Murray, C.; Derro, E. L.; Sechler, T. D.; Lester, M. I., *J. Phys. Chem. A* **2007**, *111* (22), 4727–4730.
225. Nelander, B.; Engdahl, A.; Svensson, T., *Chem. Phys. Lett.* **2000**, *332* (3–4), 403–408.
226. Setokuchi, O.; Sato, M.; Matuzawa, S., *J. Phys. Chem. A* **2000**, *104* (14), 3204–3210.
227. Speranza, M., *Inorg. Chem.* **1996**, *35* (21), 6140–6151.
228. Speranza, M., *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102* (38), 7535–7536.
229. Suma, K.; Sumiyoshi, Y.; Endo, Y., *Science* **2005**, *308* (5730), 1885–1886.
230. Varner, M. E.; Harding, M. E.; Vazquez, J.; Gauss, J.; Stanton, J. F., *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113* (42), 11238–11241.
231. Yang, J.; Li, Q. S.; Zhang, S. W., *PCCP* **2007**, *9* (4), 466–469.
232. Yu, H. G.; Varandas, A. J. C., *Chem. Phys. Lett.* **2001**, *334* (1–3), 173–178.
233. Sridharan, U. C.; Klein, F. S.; Kaufman, F., *J. Chem. Phys.* **1985**, *82* (1), 592–593.
234. Butkovskaya, N.; Rayez, M. T.; Rayez, J. C.; Kukui, A.; Le Bras, G., *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113* (42), 11327–11342.