

ANEXO A

Revisión bibliográfica

Este anexo contiene la revisión bibliográfica realizada, la cual abarca una breve descripción de los contaminantes regulados emitidos por los vehículos, la normativa Euro, las técnicas usadas para reducir dichas emisiones, así como también el estado del arte en relación al estudio de la pirólisis y la oxidación del DMF.

A.1- Contaminantes emitidos por los vehículos

Los vehículos emiten una serie de contaminantes debido al proceso de combustión del combustible. Entre los contaminantes se puede nombrar: formaldehído (CH_2O), tolueno (C_7H_8), materia particulada (MP), metano (CH_4), hidrocarburos (HC), dióxido de azufre (SO_2), dióxido de carbono (CO_2), óxidos de nitrógeno (NO_x), benceno (C_6H_6), óxido de carbono (CO), entre otros. A pesar de estos contaminantes ser perjudiciales tanto para el medio ambiente como para la salud de las personas, sólo se regulan cuatro de ellos: CO, MP, HC y NO_x , por ser éstos los más abundantes y más fáciles de medir. Éstos se explican a continuación:

- **Monóxido de Carbono (CO):** El CO es un gas reductor inodoro, incoloro, inflamable y altamente tóxico. Cuando inhalado, sus moléculas ingresan al torrente sanguíneo, inhibiendo la distribución del oxígeno. Así, en bajas concentraciones produce mareos, jaqueca y fatiga, mientras que en concentraciones mayores puede ser fatal.

Este gas se produce cuando se queman materiales combustibles como gas, gasolina, keroseno, carbón, petróleo, tabaco o madera en presencia de poco oxígeno. Más del 90% del CO atmosférico proviene de fuentes naturales, de manera muy especial de la oxidación del metano. Los restantes 10% provienen de fuentes antropogénicas en donde se destaca el transporte y, en menor medida, las plantas de combustión, las instalaciones de tratamiento y distribución de combustibles fósiles. El CO en contacto con el aire libre se une rápidamente con el oxígeno para formar dióxido de carbono (CO_2), este resultado no es tóxico pero tiene un inconveniente, dado que es uno de los gases causantes de la aparición del efecto invernadero.

- **Hidrocarburos inquemados (HCs):** Las emisiones de hidrocarburos resultan cuando no se queman las moléculas del combustible en el motor o sólo se queman parcialmente. Hay una gran variedad de hidrocarburos, desde metano hasta compuestos de cadena larga. En la atmósfera los hidrocarburos volátiles van del C_1 al C_{10} . Los principales son los alcanos, alquenos, aromáticos y especies oxigenadas (aldehídos, cetonas y alcoholes). Los hidrocarburos aromáticos (benceno y tolueno) constituyen una amenaza mayor que los alifáticos. Esto porque los vapores son mucho más irritantes para las membranas mucosas y pueden causar lesiones sistemáticas al ser inhalados.

Parte de los HCs que se encuentran en la atmósfera se origina de forma natural por la emisión directa de la vegetación, por procesos biológicos, actividades geotérmicas y liberación de yacimientos de carbón, gas natural y petróleo. Sin embargo, existen también actividades antropogénicas que lo causan. Entre las principales se encuentran: el transporte (ciertos hidrocarburos del tubo de escape son tóxicos, y tienen el potencial de causar cáncer), pérdidas en procesos industriales (refinerías de petróleo, fabricación de negro de humo, fabricación de amoníaco, etc.), incineración de residuos y evaporación de disolventes orgánicos (estaciones de servicio, incendios forestales, metano procedente de arrozales, etc.).

Los hidrocarburos reaccionan en presencia de los NO_x y la luz solar para formar ozono a nivel del suelo, que es uno de los componentes principales del smog (Smog- Llamado también niebla tóxica y es una forma de contaminación atmosférica. Se produce de manera semejante a la lluvia ácida, es decir, por la combinación de compuestos químicos con la humedad del aire. A diferencia de la lluvia ácida, el smog no se precipita sino que queda como niebla flotando en el ambiente. Es perjudicial para la salud, provocando problemas cardiopulmonares).

• **Óxidos de nitrógeno (NO_x):** Los óxidos de nitrógeno son una mezcla de gases que son compuestos de nitrógeno y oxígeno, siendo los más significativos el óxido de nitrógeno (NO) y el dióxido de nitrógeno (NO₂). El primero, es un gas a temperatura ambiente, de olor dulce e incoloro, mientras que el segundo tiene un olor fuerte y es un líquido a temperatura ambiente, volviéndose gas marrón-rojizo arriba de 70 °C. Los NO_x pueden llegar a provocar irritaciones de los órganos respiratorios. Además de ser uno de los principales causantes del smog y la lluvia ácida.

El NO (NO_x más abundante) puede formarse durante la combustión, principalmente, a través de tres mecanismos diferentes: NO térmico, NO inmediato y NO del combustible. El **NO térmico** se refiere al NO formado por la reacción a altas temperaturas (T>1200 °C) entre el nitrógeno gaseoso (N₂) y el oxígeno atómico (O), ambos provenientes del aire de combustión. Este proceso es descrito por el mecanismo de Zeldovich, el cual abarca las siguientes reacciones:



Los motores diesel emiten grandes cantidades de NO, debido a las altas temperaturas que se alcanzan (Tener en cuenta que el NO se forma dentro de la cámara de combustión durante el período en que existe la máxima temperatura). Sin embargo, la formación de NO térmico se puede minimizar disminuyendo la concentración de nitrógeno, de oxígeno o la temperatura. Lo que se hace actualmente en los vehículos diesel es recircular los gases de escape (EGR- *Exhaust gas recirculation*), provocando la disminución de la temperatura de la llama.

Por otro lado, el **NO inmediato**, fue denominado por Fenimore y resulta, principalmente, del radical CH, que es una especie intermediaria generada a través de una reacción compleja. Este radical reacciona con el nitrógeno del aire de combustión formando cianuro de hidrógeno (HCN), el cual en reacciones posteriores es transformado a NO (R-A.4).



A diferencia del NO térmico, el NO inmediato se forma a temperaturas relativamente bajas (≈727 °C). Por último, el NO del combustible resulta de la reacción entre el nitrógeno contenido en el combustible y el oxígeno del aire de combustión. Cuando el nitrógeno está contenido en aromáticos, el principal producto es el HCN, mientras que si el nitrógeno está contenido en aminas, el principal producto es el amoníaco (NH₃). Tanto el HCN como el NH₃ son oxidados a NO, pero también pueden ser reducidos a N₂ a través reacciones paralelas (reacciones R-A.5 - R-A.8)



• **Materia particulada (MP):** En esta categoría se incluye todo tipo de sustancias, a excepción del agua, que existe como líquido o sólido en la atmósfera y tiene dimensiones microscópicas o submicroscópicas. Los efectos de estas partículas en la salud dependen de su tamaño y concentración. Con fines reglamentarios y para calcular sus efectos sanitarios, las partículas se miden y clasifican mediante lo que se conoce como fracción respirable de partículas: PM10, PM2,5 y PM0,1, indicadores que se refieren a partículas con menos de 10 µm de diámetro, menos de 2,5 µm de diámetro y menos de 0,1 µm de diámetro, respectivamente. El humo visible

está compuesto por partículas de tamaño PM₁₀ o más grandes. Las partículas que más afectan la salud son las que se encuentran en el “rango respirable”, es decir, las que están entre PM₁₀ y PM_{0,1}. Este rango comprende partículas que pueden llegar hasta los pulmones y depositarse allí. Las partículas más pequeñas que las PM_{0,1} suelen exhalarse.

La MP se origina de forma natural por sucesos como son los incendios forestales, las erupciones volcánicas, las tormentas de viento y de polvo, y el rocío salino. Entre las actividades antropogénicas figuran la quema de madera, carbón, petróleo y combustibles gaseosos; la quema de residuos de carbón, residuos agrícolas y desechos sólidos municipales; las emisiones de cenizas volátiles de las centrales eléctricas. Aunque la principal fuente de emisión son los vehículos diesel.

En la combustión, la MP se origina por dos fuentes principales: material inorgánico presente en el combustible (cenizas) y negro de humo formado por la combustión incompleta. En los combustibles pesados, el contenido en cenizas puede llegar hasta 0,1% en masa. Por otro lado, el negro de humo puede formarse debido a la recombinación de volátiles o fracciones leves del combustible, sobre condiciones específicas que aun no están bien conocidas ni determinadas. Puede formarse también debido a la desvolatilización (liberación de volátiles) incompleta de gotas o del combustible sólido, los cuales no tuvieron tiempo, temperatura ni oxígeno suficiente para la oxidación completa. Muchos de los compuestos constituyentes del negro de humo son peligrosos a la salud, especialmente los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH), cuyo efecto cancerígeno está científicamente comprobado.

A.2- Normativa Euro

La norma europea sobre emisiones (norma Euro) es un conjunto de requisitos que regulan los límites aceptables para las emisiones de gases de combustión de los vehículos nuevos vendidos en los Estados Miembros de la Unión Europea (automóviles, camiones, trenes, tractores y máquinas similares, barcas). Para cada tipo de vehículo se aplican límites diferentes. Las normas Euro comenzaron a aplicarse a partir del 1 de Octubre de 1990 con la Euro 0, y son equivalentes a las normas norte americanas EPA. A partir de ese año empezaron a surgir nuevas normas Euro, fijándose límites de emisiones cada vez más restrictivos sobre los contaminantes. En estas normas no se obliga el uso de una tecnología en concreto para limitar las emisiones de contaminantes, aunque se consideran las técnicas disponibles a la hora de establecer las normas.

Actualmente está en vigor la norma Euro V (desde Octubre del 2008), entrando en vigor el próximo año la norma Euro VI (Septiembre del 2014). Las modificaciones de la norma V a la norma VI se centra en la reducción de emisiones de los NO_x producidos por los vehículos a diesel. En la tabla A.1 se muestran los límites de emisiones para los vehículos a gasolina y a diesel (Categoría M1).

Tabla A.1- Límites de emisiones de las Normas Euro V y Euro VI para vehículos ligeros a gasolina y a diesel.
Valores en g/km.

GASOLINA	CO	HC	HC+NO _x	NO _x	MP
Euro V	1	0,1	—	0,06	0,005
Euro VI	1	0,1	—	0,06	0,005
DIESEL					
Euro V	0,5	—	0,23	0,18	0,005
Euro VI	0,5	—	0,17	0,08	0,005

Como se observa en la tabla, las emisiones de los NO_x producidos por los vehículos a diesel, tendrán que reducirse en más del 50% en relación a las emisiones permitidas en la norma Euro V. Por lo que se intenta mejorar las técnicas existentes para controlar dichas emisiones y así poder cumplir con las nuevas exigencias. Cabe destacar que es muy difícil eliminar los NO_x sin ocasionar el aumento de las emisiones de MP, por lo que las técnicas que se investigan/mejoran tienen que compensar ambos contaminantes.

A.3- Técnicas para reducir las emisiones de contaminantes producidas por los vehículos

De modo a disminuir las emisiones de contaminantes producidos por los vehículos, se aplican una serie de técnicas, y algunas de ellas se muestran a continuación en la tabla A.2.

Tabla A.2- Algunas técnicas para reducir emisiones de contaminantes producidas por los vehículos.

Técnica		Contaminante con emisión reducida
Modificaciones en el motor	Recirculación de gases de escape	NO _x
	Alta presión de inyección	MP
Tratamiento de los gases de escape	Filtro de partículas	MP
	Catalizadores	CO, CO ₂ , NO _x
Cambios en el combustible	Biocombustibles Aditivos oxigenados	CO, CO ₂ , MP, NO _x

En relación al cambio en el combustible, los requisitos que tiene que tener el combustible o el aditivo son los siguientes:

1. Un alto poder calorífico, de modo a que el vehículo tenga un recorrido adecuado entre reabastecimientos de combustible, sin transportar un peso excesivo de éste.
2. Una densidad alta, de modo que el recipiente de almacenamiento del combustible sea de tamaño aceptable.
3. De fácil manejo, normalmente como líquido a temperatura ambiente.
4. Capacidad para evaporarse en el sistema de aire-combustible (Volatilidad adecuada).
5. En el caso de los aditivos, éstos deben ser miscibles con la gasolina y con el diesel.
6. Tener un número de cetano apropiado de modo a que ocurra de forma adecuada la ignición.
7. Otras propiedades diversas como, buena estabilidad en almacenamiento, toxicidad limitada, etc.

A.4- Estudio de la pirólisis del DMF

En la literatura se presentan diversas propuestas para los caminos de descomposición unimolecular del DMF. Se prevén cuatro principales vías (Figura A.1): **(a)** transferencia de un átomo H de C(3) a C(2) llevando a la formación de β -carbeno, **(b)** migración del grupo CH₃ de C(2) a C(3) (o de C(5) a C(4)) produciendo α -carbeno, **(c)** fisión de la ligación C-O, ocurriendo la abertura del anillo y **(d)** fisión inicial de la ligación C-H, originando el radical resonante C₆H₇O y un átomo H.

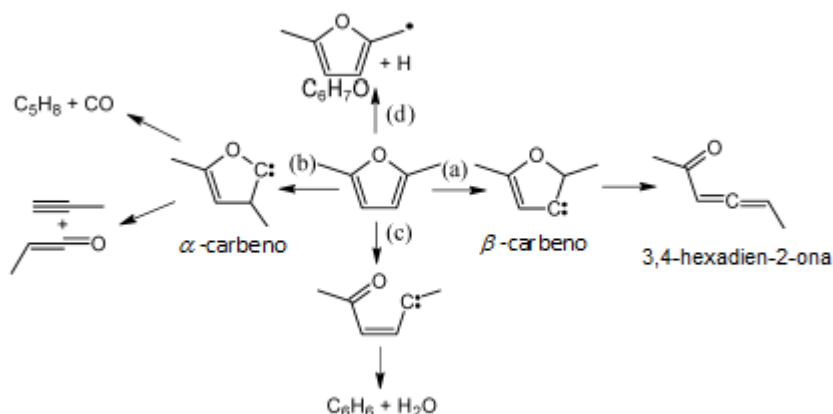


Figura A.1- Principales vías para la descomposición unimolecular del DMF.

La formación de $C_5H_8 + CO$ a partir del α -carbeno fue propuesto por Lifshitz y cols. (1998) en su modelo teórico, de modo a explicar la formación de 1,3-pentadieno (C_5H_8) y sus isómeros. Por otro lado, en el estudio realizado por Simmie y Metcalfe (2011), la única ruta de descomposición del α -carbeno, es la formación de metilacetileno ($CH_3C\equiv CH$) y metilcetona ($CH_3CH=C=O$). En la figura A.2 se muestran los posibles caminos para la descomposición del α -carbeno, a partir de la descomposición unimolecular del DMF, propuesta por estos autores.

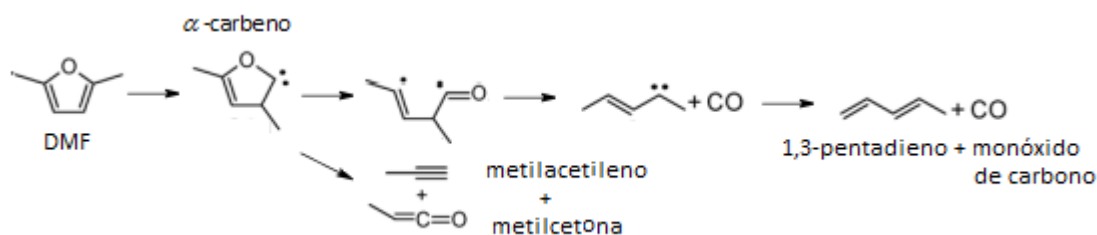


Figura A.2- Caminos para la descomposición unimolecular de DMF iniciada por la migración del grupo CH_3 .

Por otro lado, la formación de 1,2,4,5-hexatetraeno (C_6H_6)+ H_2O a partir de la fisión de la ligación C-O del DMF, fue propuesto por Grela y cols. (1985) para explicar sus resultados experimentales, en los cuales obtuvieron como principales productos de pirólisis $C_6H_6 + H_2O$ y $C_5H_8 + CO$. En la figura A.3, se muestran los posibles caminos de la descomposición del birradical formado a partir de la fisión de la ligación C-O. Estos autores supusieron que, después de que ocurre la fisión y se forma el birradical, se produce una abstracción del átomo H por el átomo O, envolviendo un estado de transición que conduce a la formación de 2,4,5-hexatrien-2-ol ($OHC(CH_3)CH=CH=C=CH_2$). Su subsecuente deshidratación forma el C_6H_6 . Otro posible camino para la descomposición de DMF iniciada por la fisión de la ligación C-O, es que el birradical, después de formarse, se descomponga a ciclopropenilcarbonilo y éste a su vez se reorganice a 2,4-dimetilfurano. Esto es lo que proponen Grela y cols. (1985) como explicación para la formación de $C_5H_8 + CO$.

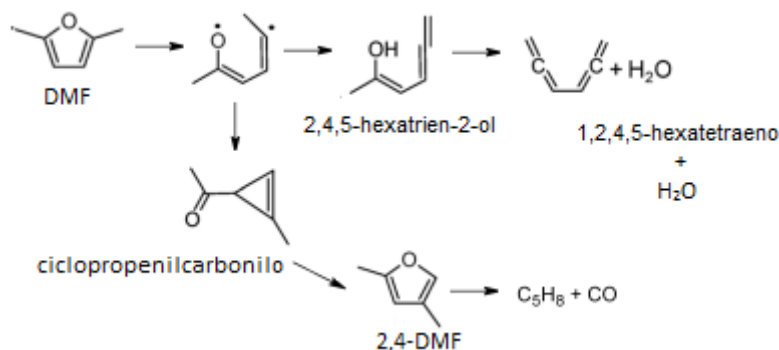


Figura A.3- Camino para la descomposición unimolecular de DMF iniciada por la fisión de la ligación C-O.

En el estudio teórico realizado por Sirjean y Fournet (2013), se comparan las energías de activación de todos estos caminos referenciados. Incluso, se estudian otras alternativas de vías de descomposición del DMF.

A.5- Estudio de la combustión del DMF

La combustión del DMF se encuentra muy poca estudiada, sin embargo existen ya algunas investigaciones realizadas. Por ejemplo, Sirjean y cols. (2013) propusieron un modelo cinético-químico para la descomposición y oxidación del DMF, que incluye reacciones con coeficientes de velocidad a presión atmosférica (1 bar), 10 bar y límite de alta presión. Estos autores, sólo usaron los coeficientes de velocidad a presión atmosférica para validar el modelo, y para ello emplearon los resultados experimentales que obtuvieron en la medición del tiempo de retraso de ignición, usando un reactor de onda de choque (en el rango de temperatura de 1300-1831 K) y los resultados del estudio de pirólisis realizado por Lifshitz y cols. (1998). El modelo completo a presión atmosférica contiene 294 especies y 1459 reacciones.

En general, las predicciones del modelo se asemejan a los resultados experimentales obtenidos tanto en la medición del tiempo de retraso de ignición como en el estudio de pirólisis del DMF. Por el análisis de sensibilidad realizado, observaron que entre todas las reacciones que tienen influencia sobre la conversión del DMF, la abstracción de un átomo H del DMF por átomos de H (y en menor medida por radicales OH) y la iniciación unimolecular resultando en la abertura del anillo ($\text{DMF} \rightarrow \text{C}_6\text{H}_8\text{O}$), son reacciones muy sensibles e influyen en gran medida la reactividad global en las condiciones experimentales. El análisis de sensibilidad también reveló que reacciones envolviendo 1,3-ciclopentadieno (C_5H_6) y fenol ($\text{C}_6\text{H}_6\text{O}$), pueden influir substancialmente, sobre la conversión del DMF.

Por otro lado, Togbé y cols. (2013) estudiaron la llama premezclada de DMF diluida en argón (Ar) (50 %), para dos radios equivalentes ($\emptyset$): 1 y 1,7, identificando y midiendo cuantitativamente alrededor de 60 especies en función de la distancia del quemador. La medición incluyó especies estables, radicales e isómeros, los cuales fueron medidos usando espectroscopia de masa con ionización por impacto con electrones (EI-MBMS) y un cromatógrafo de gases (GC). Usaron los resultados de estos experimentos para validar el modelo cinético-químico propuesto, el cual es una extensión del modelo propuesto por Sirjean y cols. (2013) y cuenta con 305 especies y 1472 reacciones.

En la investigación, detectaron que las especies que se encontraban en mayor cantidad fueron: H_2 , H_2O , CO , O_2 , Ar, CO_2 y DMF. Y entre algunos de los hidrocarburos intermediarios medidos se encontraron: diacetileno (C_4H_2), vinilacetileno (C_4H_4), metano (CH_4), metilo (CH_3), etileno (C_2H_4),

etano (C_2H_6), siendo el acetileno (C_2H_2) el más abundante en ambas condiciones ($1,4 \times 10^{-2}$ y $3,1 \times 10^{-2}$ (fracción molar) para $\phi = 1$ y $1,7$, respectivamente). En relación a los intermediarios oxigenados, el formaldehído (CH_2O) y metilfurano (C_5H_6O), fueron los que obtuvieron mayor fracción molar, siendo el fenol (C_6H_6O) también un intermediario abundante.

En general, las predicciones del modelo se ajustaron bien a los resultados experimentales obtenidos tanto para condiciones estequiométricas como reductoras ($\phi = 1$ y $1,7$, respectivamente). A través del estudio de caminos preferenciales que realizaron, concluyeron que a una distancia del quemador de $3,1$ mm, que corresponde a una temperatura de 1101 K y una conversión de DMF de 73 %, para $\phi = 1,7$, el camino más importante para el consumo de DMF (~ 42 %) es la abstracción de un átomo H del grupo metilo por H, OH, O y CH_3 , para producir el radical resonante estable 5-metil-2-furanilmetilo (C_6H_7O). Así, el camino dominante para el consumo de DMF inicia con la formación de este radical para luego dar origen a los productos estables 1,3-ciclopentadieno (C_5H_6) y fenol (C_6H_6O). El segundo camino importante en el consumo de DMF (~ 30 %) es la reacción del DMF con un átomo H para dar 2-metilfurano (MF) (C_5H_6O) y CH_3 . Otro camino menos probable para que se consuma el DMF (~ 21 %), es la adición de un átomo H al carbono de la posición 2 (C_2) del DMF produciendo 1,3-butadieno (C_4H_6) y el radical acetilo (CH_3CO), estos dos productos se descomponen para dar origen, principalmente, a CO y CH_3 (~ 95 %) o reacciona con CH_3 para formar queteno (C_2H_2O) y metano (CH_4) (~ 4 %). El menor camino de reacción (~ 6 %) para el consumo de DMF, con $\phi = 1,7$, es la adición de OH al C_2 del DMF para dar origen al acetaldehído (CH_3CHO), acetileno (C_2H_2) y al radical CH_3CO .

Somers y cols. (2013), en su investigación sobre la pirólisis y oxidación del DMF, realizaron experimentos de pirólisis (3 % DMF en argón, 1200 - 1350 K y 2 - $2,5$ atm), tiempo de retraso de ignición ((i) $0,75$ % DMF en argón, 1 atm, 1350 - 1800 K y $\phi = 0,5$, 1 y 2 , (ii) 20 atm y 80 atm, 820 - 1210 K y $\phi = 0,5$, 1 y 2), oxidación en un reactor de mezcla perfecta (10 atm, 770 - 1220 K, $\tau = 0,7$ s y $\phi = 0,5$, 1 y 2) y de velocidad de llama laminar del DMF (1 atm, 298 - 358 K y $\phi = 0,6$ - $1,6$). Con los experimentos validaron el modelo que propusieron el cual consta de 545 especies y 2768 reacciones.

En general, los datos experimentales se ajustaron bien al modelo. Sin embargo, se podrían realizar algunas modificaciones al modelo de modo a predecir de forma más satisfactoria la velocidad de la llama laminar. Con el análisis de velocidad realizado al tiempo de retraso de ignición a presión atmosférica, corroboraron que, cuando el DMF se consume en un 20 %, su consumo se debe, mayoritariamente, a la abstracción de un átomo H del grupo metilo por un H ($\sim 23,8$ % y 26 % para $\phi = 0,5$ y 2 , respectivamente), originando el radical 5-metil-2-furanilmetilo (C_6H_7O) para posteriormente evolucionar hacia la formación de fenol. En segundo lugar, está la reacción del DMF con un átomo H (~ 18 % y $19,8$ % para $\phi = 0,5$ y 2 , respectivamente) para dar origen al MF. Por otro lado, cuando la presión es de 20 atm y 80 atm y la relación es estequiométrica, las reacciones de abstracción también parecen dominar sobre el consumo de DMF (42 % y $43,7$ % para 20 atm y 80 atm, respectivamente). Sin embargo, en este caso, ya no es la abstracción por el átomo H el que más domina, sino la abstracción por el radical OH (19 % y $26,9$ % para 20 atm y 80 atm, respectivamente), para formar el radical 5-metil-2-furanilmetilo (C_6H_7O) y posteriormente dar origen al 2-metil-5-formilfurano ($C_6H_6O_2$). En segundo lugar, la velocidad de reacción es mayor para la reacción entre el DMF y el radical OH ($29,6$ % y $39,5$ %, para 20 atm y 80 atm, respectivamente) dando origen, como producto final el metil vinil cetona (C_4H_6O) y el radical acetilo (CH_3CO).

En relación al análisis de velocidad realizado para los experimentos en el reactor de mezcla perfecta, concluyeron que para condiciones oxidantes ($\phi = 0,5$) el DMF se consume preferencialmente por la reacción de adición del radical OH ($\sim 43,9$ %) formando metil vinil

cetona (C_4H_6O) y el radical acetilo (CH_3CO). Como segunda vía de reacción (~29,2 %), se encuentra la reacción con H para producir MF. En oposición, para condiciones reductoras ($\phi=2$), el DMF se consume por la reacción de abstracción de un átomo H, específicamente con el radical metilo (25,3 %), para producir el radical 5-metil-2-furanilmetilo (C_6H_7O) y posteriormente dar origen al 2-metil-5-formilfurano ($C_6H_6O_2$). Como segunda vía se encuentra la reacción con H para dar origen al MF.

En la figura A.4 se muestra de forma resumida, los caminos de reacción del DMF (primarios y secundarios) que se acaban de discutir.

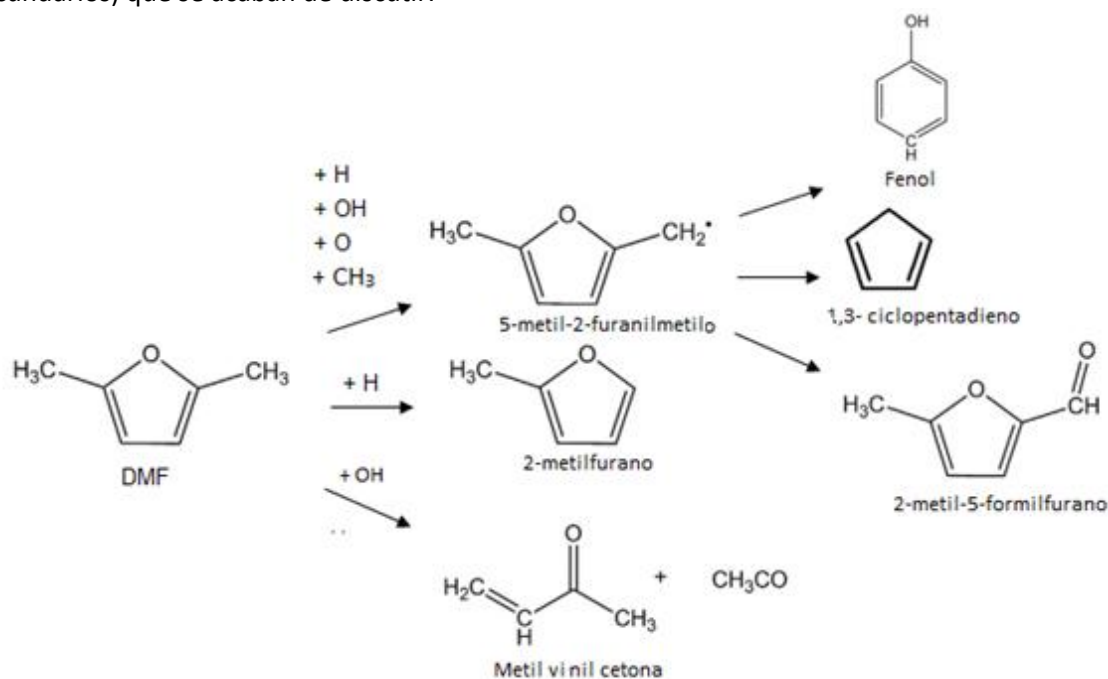


Figura A.4- Principales vías para la oxidación del DMF (Togbé y cols. (2013), Somers y cols. (2013)).

ANEXO B

Metodología experimental

En este anexo se describen detalladamente los sistemas experimentales utilizados (reactantes, materiales, accesorios y equipos), así como los procedimientos experimentales llevados a cabo para el estudio de la combustión del DMF y su interacción con el NO.

B.1– Sistemas experimentales

Para la realización de la investigación se utilizan tres instalaciones experimentales. Dos de ellas (fase gas a presión atmosférica (FGPA) y formación de hollín (FH)) se encuentran en el laboratorio de Reacciones en Combustión perteneciente al Grupo de Procesos Termoquímicos del Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A), el cual está situado en el Edificio de Institutos de Investigación del Campo Río Ebro. Y la tercera (fase gas a presión (FGP)), se encuentra en la nave, que también pertenece al Grupo de Procesos Termoquímicos, y la cual se ubica por detrás del edificio de Institutos de Investigación del Campo Río Ebro.

En la figura B.1, se muestra una fotografía de cada una de las instalaciones utilizadas ((a) Instalación de fase gas a presión atmosférica, (b) Instalación de formación de hollín, (c) Instalación de fase gas a presión).



Figura B.1- Fotografía de las instalaciones experimentales utilizadas. (a) Instalación de fase gas a presión atmosférica. (b) Instalación de formación de hollín. (c) Instalación de fase gas a presión.

Las tres instalaciones cuentan con tres secciones: sistema de alimentación de gases, sistema de reacción y sistema de análisis de gases. A continuación se detallan cada una de estas secciones. Las explicaciones son en común para las tres instalaciones, salvo en algunos casos donde se especifica.

B.1.1– Sistema de alimentación de gases

Esta sección comprende los equipos e instrumentos necesarios para medir, controlar y alimentar los flujos de gases al sistema de reacción. Incluye los reactantes, bomba HPLC, CEM (*Controlled Evaporator Mixer*), controladores de flujo másico, medidor de caudal volumétrico (burbujímetro), sistema de inyección de agua (borboteador), panel de válvulas y conducciones y uniones.

B.1.1.1- Reactantes

Para el estudio de la oxidación del DMF y su interacción con el NO se utilizan diversos reactantes, fundamentalmente gases, que se encuentran almacenados en botellas de alta presión en el laboratorio o en cacetas. Los gases utilizados, son: aire sintético, nitrógeno (N_2), oxígeno (O_2), 2,5-dimetilfurano (DMF) y monóxido de nitrógeno (NO). Se usan determinados gases dependiendo de la instalación donde se trabaje. Todos los reactantes utilizados se muestran en la tabla B.1, así como su concentración, su origen/fabricante y las instalaciones donde se utilizan. Los gases se encuentran diluidos en nitrógeno.

Tabla B.1- Reactantes utilizados y sus características.

Reactante	Estado	Concentración (ppm)	Origen/Fabricante	Experimentos
DMF	Gas	1027	Praxair	FGPA
DMF	Gas	1057	Praxair	FGPA
DMF	Líquido	1000000 (100 %)	ALDRICH	FH,FGP
Aire sintético	Gas	210000 (21 %)	Cacetas	FGPA
Aire sintético	Gas	210000 (21 %)	Air Liquide	FGP
O_2	Gas	4500 (0,45 %)	Air Liquide	FGPA
O_2	Gas	18000 (1,8 %)	Air Liquide	FGPA
NO	Gas	3980	Air Liquide	FGPA (100 ppm DMF)
NO	Gas	3712	Air liquide	FGPA (100 ppm DMF)
NO	Gas	15000 (1,5 %)	Air Liquide	FGPA (350 ppm DMF)
N_2	Gas	1000000 (100 %)	Cacetas	FGPA,FH
N_2	Gas	1000000 (100 %)	Air Liquide	FGP
H_2O	Líquido	1000000	Tornera	FGPA

En la instalación FGPA, tanto el aire sintético como el N_2 provienen de las cacetas, mientras que el O_2 , DMF y NO provienen de las botellas a presión que se encuentran en el laboratorio. En la instalación FH, el N_2 proviene de las cacetas, mientras que el DMF gas es alimentado al sistema usando una bomba HLPC y una línea calorifugada, a partir de DMF líquido y usando como gas portador nitrógeno. Para la instalación FGP, los gases empleados, es decir, el aire sintético y N_2 provienen de las botellas a presión que se encuentran en la nave. En este caso, el DMF gas se produce a partir de la evaporación y arrastre de un determinado caudal másico de DMF líquido, usando un CEM (*Controlled Evaporator Mixer*) y nitrógeno como gas portador.

Los casos en que se utilizan las botellas que se encuentran en el laboratorio en las instalaciones FGPA y FH, la presión de salida del gas se regula mediante un manorreductor, el cual consta de dos medidores de presión. Un medidor de alta presión, que indica la presión a que se encuentra el gas dentro de la botella y un medidor de baja presión que indica la presión a que se alimenta el gas desde la botella hasta los controladores de flujo másico. Para garantizar la estabilidad del flujo, la presión de alimentación tiene que ser superior a la presión a la que se encuentra la instalación. De este modo, en las instalaciones FGPA y FH la presión de alimentación utilizada es 5 bar. Por otro lado, en la instalación FGP, los gases provenientes de las botellas se suministran al sistema a través de seis centrales de la casa AirLiquide, una para cada botella, en las cuales se reduce la presión de la botella hasta la presión de alimentación. La presión máxima que suministra la central es 125 bar, la cual es superior a la presión máxima de la planta (80 bar). En la figura B.2, se muestra una foto de uno de los manorreductores utilizados así como de las centrales.



Figura B.2- Manorreductor (Izquierda) y central (Derecha).

B.1.1.2- Bomba HPLC isocrática

En la instalación FH, el DMF gas se alimenta al sistema evaporando DMF líquido y para ello se usa una bomba HPLC isocrática de Agilent Technologies, serie 1200 (Figura B.3) y una línea calorifugada y como gas portador nitrógeno. Se implementa este sistema de alimentación por no estar disponible una botella de DMF gas con la concentración deseada (6000 ppm) y por no ser fácil el borboteo de DMF con nitrógeno.



Figura B.3- Fotografía de la bomba HPLC isocrática de la instalación de formación de hollín.

La bomba se basa en un diseño en serie de dos émbolos y dos canales. Las dos unidades de émbolos son prácticamente iguales. La bomba incluye: una válvula de entrada activa de cartucho recargable y una válvula de salida; una unidad de amortiguación conectada entre las dos cámaras de los émbolos y una válvula de purga que contiene una frita PTFE disponible a la salida de la bomba para cebar convenientemente la cabeza de la bomba. Para obtener mayor información sobre el funcionamiento de esta bomba consultar el manual del usuario.

La salida de la bomba va conectada a una conexión rápida tipo T (Figura B.4). También a esta conexión va conectado un tubo de teflón, el cual se encuentra recubierto por cinta de fibra de vidrio y por cinta de papel aluminio e incluye una resistencia, un termopar tipo T y un regulador PID de temperatura (serie BS-2300) (la temperatura máxima de trabajo es 260 °C). De este modo, la línea se mantiene calorifugada evitando así la condensación del DMF gas. En el otro extremo de la línea calorifugada se encuentra una rótula macho, la cual se une y sella con grasa de grafito a una de las entradas del reactor. Por la otra entrada de la conexión rápida se introduce el caudal de gas portador, que en este caso es el nitrógeno. El gas portador es usado para facilitar el arrastre del DMF. Cabe mencionar que antes de iniciar con el experimento se recomienda hacer circular la corriente de nitrógeno por el interior del reactor caliente (aproximadamente una hora) de modo a que las paredes del mismo se calienten y evitar la posible condensación del DMF gas sobre ellas.

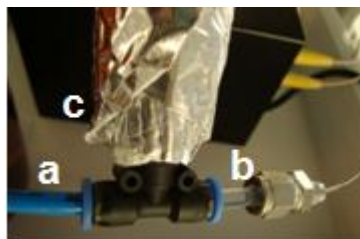


Figura B.4- Conexión rápida tipo T de la línea calorifugada de la bomba HPLC. (a) Caudal de nitrógeno. (b) Caudal de líquido (Salida de la bomba). (c) Línea calorifugada.

A su vez, la cabeza del reactor se recubre con lana de cuarzo, como se muestra en la figura B.5, para que así esa zona se mantenga también caliente y no ocurra la condensación del gas al entrar al reactor.



Figura B.5- Recubrimiento de la cabeza del reactor con lana de cuarzo en la instalación de formación de hollín.

Para inyectar el líquido al sistema de reacción se siguen los siguientes pasos:

1. Introducir en el recipiente de disolvente el líquido a usar, que en este caso es DMF.
2. Encender el sistema de bombeo con el botón que se encuentra ubicado en la parte frontal inferior izquierda.
3. Cebear la bomba. Para ello se abre la válvula de purga, la cual está situada en la parte frontal, girándola en el sentido opuesto a las manecillas del reloj. Tener cuidado de no abrirla demasiado porque se suelta.
4. Hacer circular el líquido. Para ello, se fija el caudal seleccionando METHOD en la pantalla principal y con las flechas bajar hasta llegar a FLOW. Una vez allí, presionar EDIT y escribir con las teclas numerales el caudal (se recomienda un rango de caudal de 3-5 ml/min para el cebado). En seguida surge un aviso donde se pregunta si se desea guardar los cambios realizados. Presionar YES. Posteriormente, presionar ESC (botón que se encuentra al lado de los botones de flechas) para volver a la pantalla principal.
5. Poner la bomba en marcha. Para ello seleccionar CONTROL → SYSTEM: ON/OFF → ENTER (↩) → ON. Hay que esperar unos segundos hasta que la bomba se inicialice. Una vez inicializada, aparece en la pantalla "Isocratic Pump ON". Dejar circular el líquido entre 10-15 min.
6. Una vez cebada, apagar la bomba en OFF (en el mismo lugar donde aparecía la opción ON) y cerrar la válvula de purga. Posteriormente, volver a la pantalla principal presionando ESC y repetir los pasos 4 y 5 pero de esta vez con el caudal de líquido que se desea introducir al sistema. El rango de caudal que se puede introducir es 0,001-10 ml/min.

B.1.1.3- Controlled Evaporator Mixer (CEM)

En la instalación FGP, el DMF gas es alimentado al sistema mediante el uso de un CEM, modelo W-120A-122-K, de Bronkhorst High-Tech (Tabla B.2 y figura B.6), el cual es un equipo que permite alimentar al sistema de reacción un líquido en forma de gas y substituye el uso del borboteador.

Tabla B.2- Características del CEM.

Modelo	Descripción	Capacidad máxima de líquido	Capacidad máxima de gas	Temperatura máxima
W-120A	10 W, por LIQUID-FLOW™	30 g/h	4 IN/min	200 °C

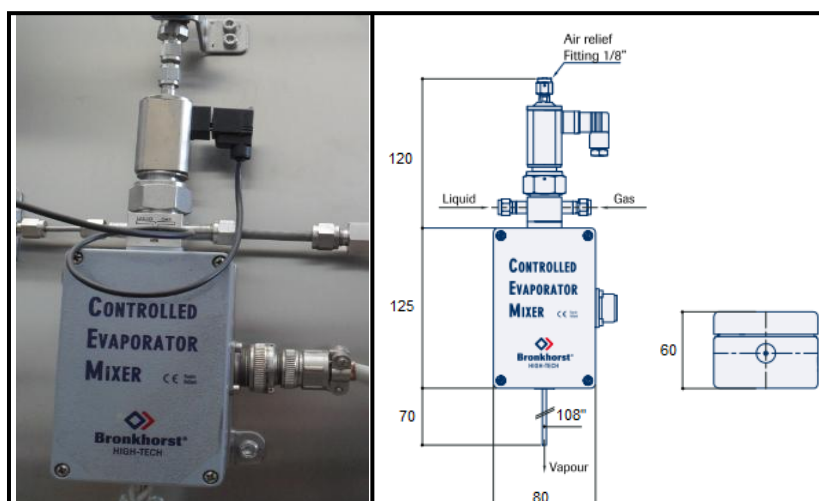


Figura B.6- Fotografía del CEM (izquierda) y sus dimensiones (mm) (derecha) de la instalación de fase gas a presión.

De este modo, el sistema de generación de vapor (Figura B.7) consiste en un medidor de flujo másico de líquido (mini CORI-FLOW M12-RGD-11-0.5 de Bronkhorst HIGH-TECH) (1), un controlador de flujo másico del gas portador, que en este caso es nitrógeno (EL-FLOW F-211CV-RGD-22-V de Bronkhorst HIGH-TECH) (2), un controlador de temperatura (4), un módulo de control de flujos másicos y de presión (3) y un depósito del líquido (5), el cual se encuentra presurizado con nitrógeno. La presión en el interior del depósito es regulada por la válvula (6) y tiene que ser superior, por lo menos 5 bar, a la presión de trabajo.



Figura B.7- Fotografía del sistema de generación de vapor de la instalación de fase gas a presión.

Como se ilustra en la figura B.8, los flujos de líquido y de gas son introducidos de forma individual al CEM en cuyo interior se encuentra un intercambiador de calor de forma a adicionar calor a la mezcla y producir la total evaporación.

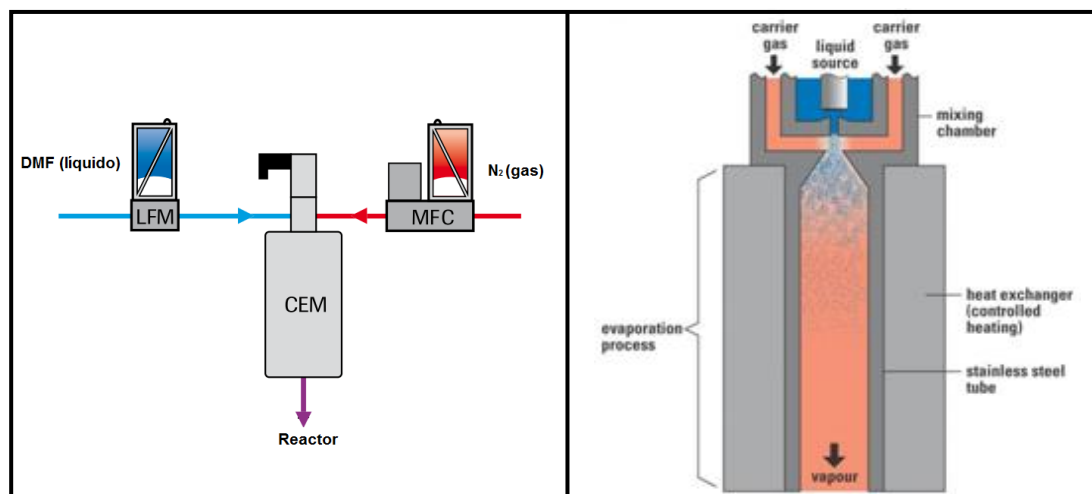


Figura B.8- Funcionamiento del CEM.

Por otro lado, los valores de los flujos de líquido y de gas, así como la temperatura en el CEM, son introducidos en el programa “AP SmallCEM” que se encuentra instalado en el ordenador y cuya interfaz se puede observar en la figura B.9. El flujo de líquido y la temperatura de trabajo del CEM pueden ser determinados mediante el programa FLUIDAT® on the net, disponible en <http://www.fluidat.com/default.asp>.

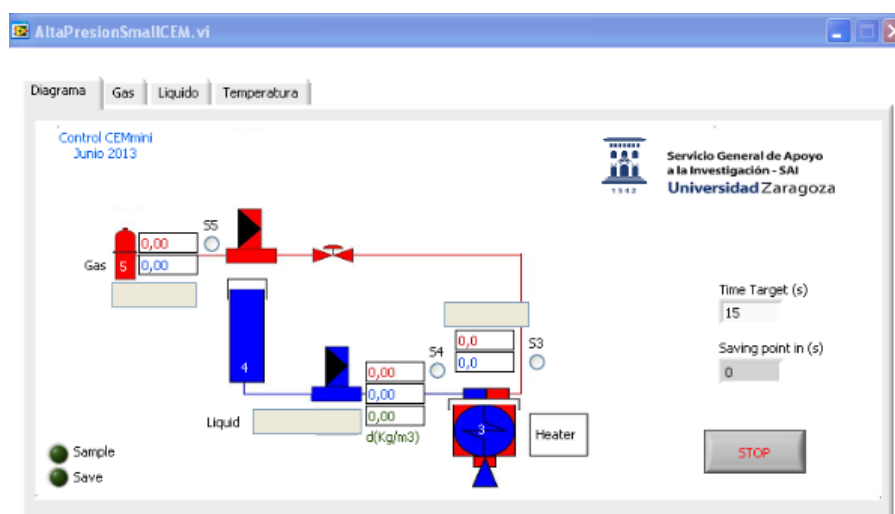


Figura B.9- Interfaz del programa de control del sistema de generación de vapor.

Es importante mencionar que para evitar la condensación del DMF, toda la instalación debe encontrarse a la misma temperatura que el CEM. Para ello, se recubren las líneas de paso de gas con cinta de fibra de vidrio, y se usan resistencias, termopares tipo T y reguladores PID de temperatura (Serie BS-2300 y PIXSYS ATR121).

B.1.1.4- Controladores de flujo másico

Los controladores de flujo másico tienen como objetivo medir, controlar y mantener constante el caudal de gas que llega al sistema de reacción. Por lo tanto, constan de un sensor de caudal, de una válvula de control y de un sistema de control electrónico integral. Los medidores utilizados en las instalaciones FGPA y FH, son modelo 5850 TR de Brooks Instruments y de

Bronkhorst High-Tech. Mientras que los utilizados en la instalación FGP, son modelo F-211CV-AAD-22-V de Bronkhorst High-Tech. En la figura B.10 se muestra el conjunto de controladores de cada instalación.

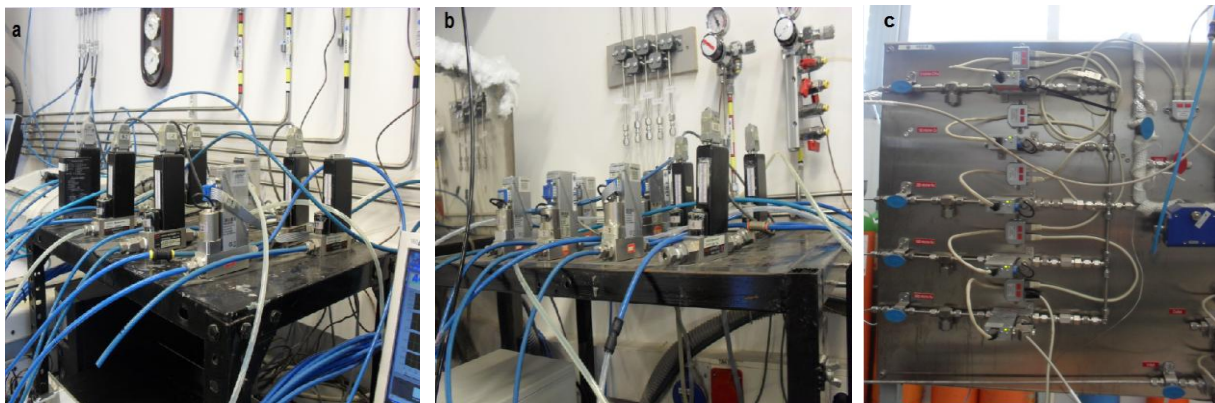


Figura B.10- Conjunto de medidores de flujo másico. (a) Instalación de fase gas a presión atmosférica. (b) Instalación de formación de hollín. (c) Instalación de fase gas a presión.

Los controladores de que se disponen tienen diferentes capacidades, desde 100 mLN/min hasta 2000 mLN/min, en el caso de la instalación FGPA y FH, y desde 150 mLN/min hasta 5000 mLN/min, en el caso de la instalación FGP, funcionando adecuadamente en el intervalo 10-90% de su capacidad.

En las instalaciones FGPA y FH, el grado de apertura del medidor se regula mediante un programa de control de caudales desarrollado por el Servicio de Apoyo a la Investigación de la Universidad de Zaragoza y cuyas interfaces se pueden observar en la figura B.11. Estos programas permiten que el usuario fije el porcentaje de apertura de la válvula, mostrándolo en pantalla. Ese porcentaje de apertura se elige teniendo en cuenta la capacidad del controlador de flujo y el caudal de gas que se quiera tener a la salida del controlador. Debido a que los medidores están calibrados con nitrógeno en condiciones normales de temperatura y presión, se debe medir el caudal a la salida del controlador de modo a verificar si realmente el caudal de gas que está saliendo es el deseado.

En la instalación FGP, a diferencia de las instalaciones anteriores, se introduce directamente el valor del caudal deseado (*set point*) en el programa llamado “Alta Presión” (Interfaz en la figura B.11). Al igual que en las otras instalaciones, debido a que los medidores están calibrados para un componente específico, a la salida del sistema se debe medir el caudal de los gases. Esto con el objetivo de determinar el *set point* necesario para conseguir el flujo deseado.

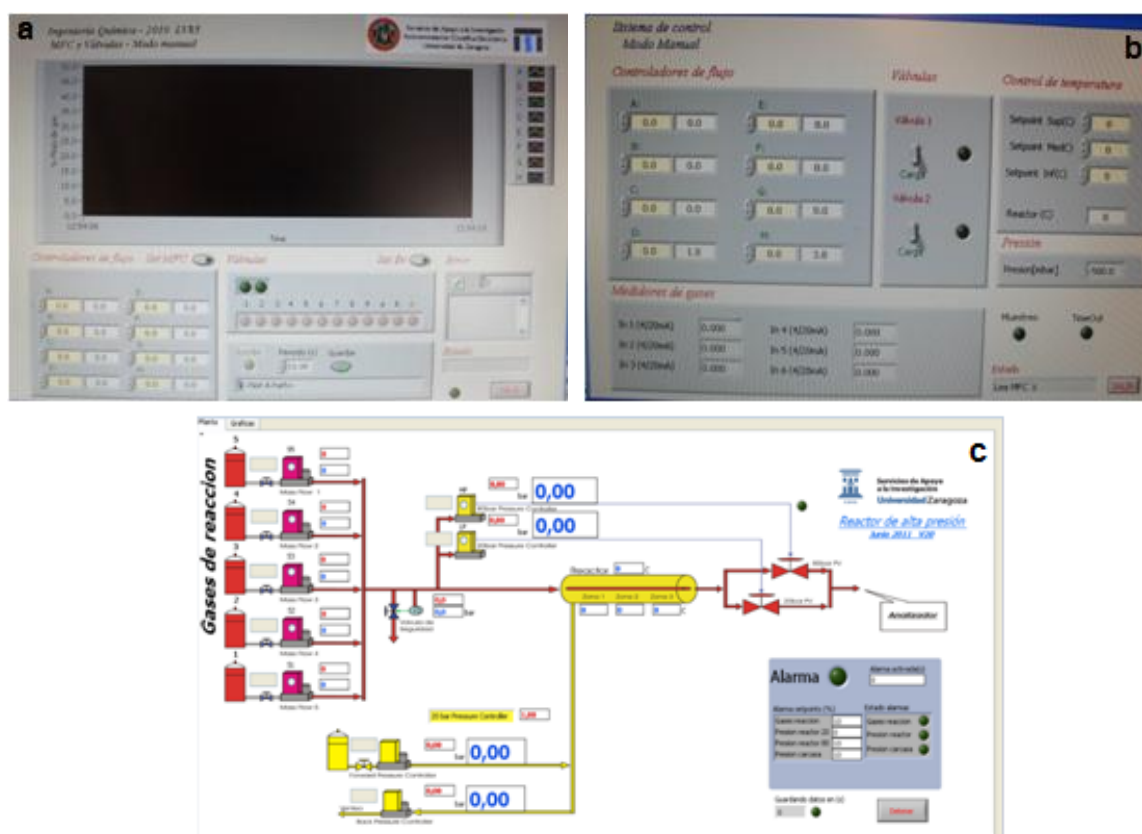


Figura B.11- Interfaz del programa de control de los controladores de flujo másico. (a) Instalación de fase gas a presión atmosférica. (b) Instalación de formación de hollín. (c) Instalación de fase gas a presión.

B.1.1.5- Medidor de caudal volumétrico (burbujímetro)

De modo a verificar que realmente se trabaja con el caudal de gas deseado, se mide el caudal de salida de los controladores de flujo utilizando un burbujímetro. En las instalaciones FGPA y FH se utiliza un burbujímetro digital, modelo Optiflow 650 de Agilent Technologies (Figura B.12). El caudal volumétrico del gas se determina por la generación de una burbuja de jabón que asciende por el burbujímetro con la misma velocidad que lleva el gas. La medición es automática, es decir, el usuario simplemente debe hacer formar la burbuja de jabón presionando la bombilla y esperar a que ésta ascienda por el tubo de flujo de gas y aparezca en la pantalla el valor del caudal volumétrico (l/min). La medición de los caudales volumétricos puede realizarse a la salida de los controladores de flujo másico, o en el panel de válvulas.

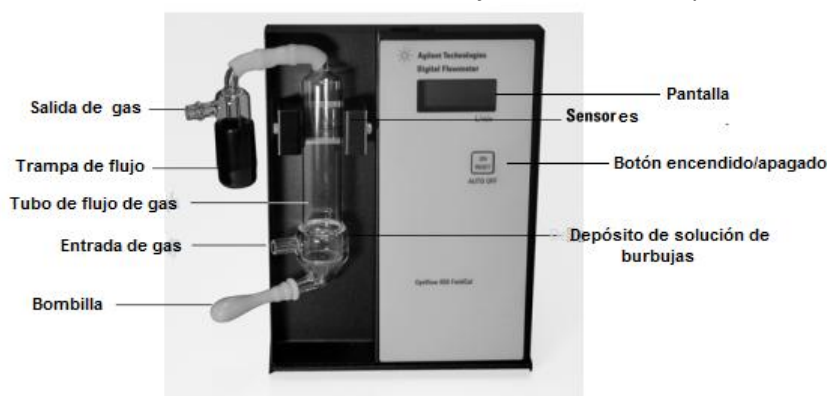


Figura B.12- Medidor de caudal volumétrico (burbujímetro digital).

En la instalación FGP, se cuenta con un burbujímetro manual de 6 cm de radio (Figura B.13). De este modo, conocida la sección transversal del burbujímetro y el tiempo que tarda la burbuja (medido con un cronómetro) en recorrer una determinada distancia, el caudal volumétrico puede ser calculado a partir de la ecuación E-B.1. La medición de los caudales volumétricos se realiza en el panel de reducción de presión, que se encuentra al final de la instalación, y en donde existe una válvula de tres vías que permite redirigir el flujo hacia el burbujímetro o hacia los equipos de medición. Se inicia la medición de los caudales con el gas que tiene el valor más elevado de caudal.

$$Q_{gas} = A.v = \frac{\pi}{4} D^2 \frac{d}{t} \quad \text{E-B.1}$$

Donde:

A = Área transversal del burbujímetro; v = Velocidad de la burbuja; D = Diámetro del burbujímetro; d = distancia recorrida por la burbuja en un tiempo t ; t = tiempo que tarda la burbuja en recorrer una distancia d .

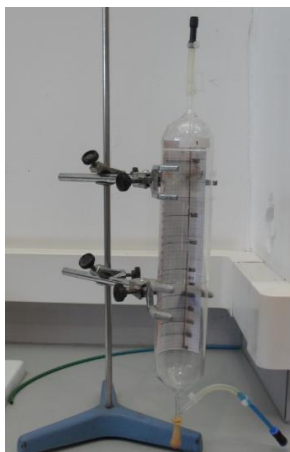


Figura B.13- Medidor de caudal volumétrico (burbujímetro manual).

B.1.1.6- Sistema de inyección de agua

En la instalación FGPA, para evitar el efecto *quenching*, es decir, evitar la recombinación de radicales en las paredes del reactor, se inyecta vapor de agua al sistema. Esto porque a altas temperaturas, el agua es una fuente de radicales OH y H, aportando al sistema una reserva de los mismos.

La inyección de vapor de agua se realiza pasando una corriente de nitrógeno por un borboteador que contiene agua. Así, el nitrógeno se satura de agua y es introducido al reactor. El borboteador utilizado es el que se muestra en la figura B.14. Cuenta con un difusor en la parte inferior para aumentar la superficie de contacto entre el líquido (agua) y el gas (nitrógeno).



Figura B.14- Borboteador de agua.

En los experimentos se introduce al borboteador un caudal constante de nitrógeno de 200 mlN/min. Dependiendo de las condiciones atmosféricas del laboratorio, la cantidad de agua que es arrastrada por la corriente de nitrógeno varía. Para determinarla, se aplica la ecuación E-B.5, obtenida a partir del modelo de Amagat, que supone la saturación de la corriente de gas y cuya deducción se muestra a continuación:

$$\frac{Q_{H_2O}}{Q_T} = y_v \quad \text{E-B.2}$$

$$\frac{Q_{H_2O}}{Q_{H_2O} + Q_{N_2}} = y_v \quad \text{E-B.3}$$

$$Q_{H_2O}(1 - y_v) = Q_{N_2} y_v \quad \text{E-B.4}$$

$$Q_{H_2O} = \frac{Q_{N_2}}{\frac{(1 - y_v)}{y_v}} = \frac{Q_{N_2}}{\frac{P_{sr}}{P_{H_2O}^*} - 1} \quad \text{E-B.5}$$

Donde:

Q_{H_2O} : Caudal de agua introducido (mlN/min); Q_{N_2} : Caudal de nitrógeno introducido (mlN/min);

Q_T : Caudal total (mlN/min); y_v : Fracción molar de vapor de agua; P_{sr} : Presión del sistema de reacción cuando se han introducido todos los gases en el reactor (mbar);

$P_{H_2O}^*$: Presión de vapor de agua a la temperatura del borboteador (mbar).

La presión de vapor de agua se calcula a partir de la ecuación de Antoine (E-B.6), usando las correspondientes constantes para el agua: $A = 18,3036$; $B = 3816,44$; $C = -46,13$.

$$\ln P_{H_2O}^* (\text{mmHg}) = A - \frac{B}{T_{\text{borboteado}} (K) + C} \quad \text{E-B.6}$$

$T_{\text{borboteado}}$ suele considerarse la temperatura del laboratorio y P_{sr} la presión atmosférica. En el segundo caso el valor es siempre constante, sin embargo en el primero no. Por lo que la cantidad de vapor de agua suministrada al sistema no es igual en todos los experimentos e incluso puede

variar dentro del mismo, debido a algún cambio de temperatura que pueda existir en el laboratorio durante la realización de los experimentos. Así, el intervalo de caudal de vapor de agua introducido en los experimentos es 4,63-7,63 mL/min, que corresponde al intervalo de concentración 4630-7630 ppm.

B.1.1.7- Panel de válvulas

Los gases, al salir de los controladores de flujo másico, y antes de entrar al reactor, pasan por un panel de válvulas *todo o nada*. En las instalaciones FGPA y FH, el panel consta de siete válvulas de bola de tres vías (Figura B.15). Por seis de ellas pasan los gases individuales (gases a entrar al reactor) y por la última pasa la mezcla de gases (gases de salida del reactor). Con las válvulas individuales es posible hacer pasar el gas hacia el reactor o hacia el venteo. Del mismo modo, con la válvula de mezcla de gases, es posible hacer pasar la mezcla hacia los equipos de medición o hacia venteo. El panel resulta muy útil cuando se quiere realizar experimentos al mismo tiempo con y sin NO, permitiendo substituir la corriente de NO por una de nitrógeno que la compense y viceversa.

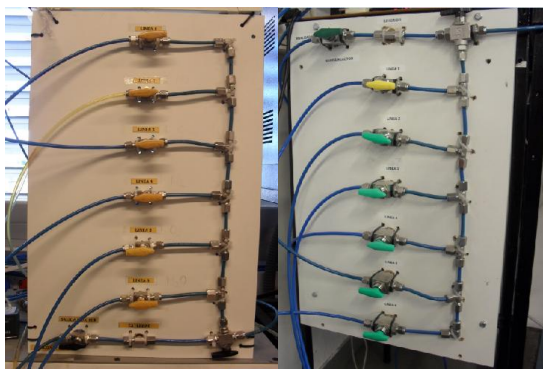


Figura B.15- Panel de válvulas. Instalación de fase gas a presión atmosférica (Izquierda) e instalación de formación de hollín (Derecha).

En el caso de la instalación FGP, tras los controladores de flujo másico, todos los gases son mezclados a lo largo de un tubo de 2 m de longitud aproximadamente. En este tubo se encuentra una válvula *todo o nada* que permite derivar los gases al sistema de ventilación o hacia el reactor.

B.1.1.8- Conducciones y uniones

En las instalaciones FGPA y FH, el recorrido que hacen los gases desde que salen de las botellas hasta que llegan a los equipos de medición es hecho mediante tubos flexibles de poliuretano de 6 mm de diámetro externo y 4 mm de diámetro interno, fornecido por Parker (Figura B.16). En la instalación FGP, el recorrido que realizan los gases desde las botellas hasta el sistema es a través de una tubería de acero inoxidable de, aproximadamente, 6 m de largura, 6 mm de diámetro externo y 1 mm de espesor. En todas las instalaciones, las uniones se realizan con racores de acero inoxidable lineales, de codo y tipo T, y con conexiones rápidas lineales y tipo T (Figura B.16). En el caso de los gases que provienen de las gacetas, estos llegan al laboratorio a través de tubos de acero inoxidable de diferentes tamaños.



Figura B.16- Conducciones y uniones. (a) Tubo de poliuretano. (b) Racores de acero inoxidable. (c) Conexiones rápidas.

B.1.2– Sistema de reacción

Esta sección comprende los equipos necesarios para que la reacción de lleve a cabo. Incluye el reactor, el horno y el sistema de control de temperatura del horno. Debido a que los equipos que conforman el sistema de reacción de las tres instalaciones son muy diferenciables entre sí, se explica cada uno de ellos de forma individual.

B.1.2.1- Instalación de fase gas a presión atmosférica

B.1.2.1.1- Reactor

El reactor usado en los experimentos de fase gas a presión atmosférica es un reactor de flujo de cuarzo, elaborado por la empresa APLITEC, cuyo diseño fue propuesto por el grupo CHEC (Combustion and Harmful Emission Control), de la Universidad Técnica de Dinamarca (DTU) (Kristensen, 1996) con el objetivo de evitar la dispersión axial del gas y obtener condiciones de flujo pistón. Se trabaja con el cuarzo pues es un material que resiste altas temperaturas sin sufrir deformación. Además, es inerte con los gases de trabajo, minimizando las reacciones catalíticas promovidas por las superficies sólidas del reactor. Una foto del reactor se muestra en la Figura B.17.



Figura B.17- Fotografía del reactor de flujo pistón de la instalación de fase gas a presión atmosférica.

El reactor consta de dos partes: cabeza y cuerpo (Figura B.18), que se juntan y sellan usando grasa de grafito, de modo a evitar fugas. Como se puede observar también en la figura B.18, el reactor posee tres entradas superiores por donde se alimentan los gases de reacción (3), una entrada lateral por donde se introduce el nitrógeno saturado de agua (2) y una cuarta entrada superior (8) que corresponde a un tubo ciego por donde se introduce el termopar para medir la temperatura dentro del reactor. Los reactantes introducidos por las tres entradas superiores, atraviesan la zona de precalentamiento (10) por tubos individuales, mezclándose al final de esa zona (7). En el punto 7 también se mezcla, junto a los reactantes, el nitrógeno saturado de agua,

el cual rodea los tubos por donde circulan los reactantes. Una vez mezclados todos los gases, estos pasan a la zona de calentamiento (4) y de reacción (1). Es importante que esta zona se encuentre dentro de la zona isoterma del horno.

En la parte inferior, el reactor posee una entrada (9) y una salida (5). En el primer caso, se introduce aire refrigerante de modo a detener la reacción de los gases justo al final de la zona de reacción y antes de que pasen a los equipos de medición (6). En el segundo caso, es por donde salen los gases producto de la combustión.

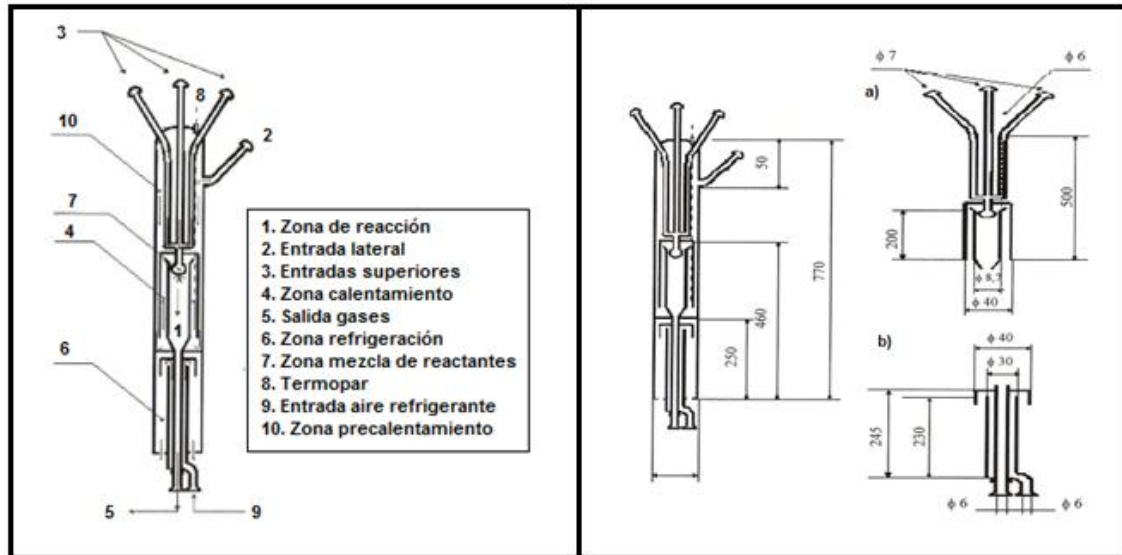


Figura B.18- Esquemas del reactor de flujo pistón de la instalación de fase gas a presión atmosférica. Izquierda: Zonas del reactor. Derecha: Dimensiones de las zonas del reactor (mm). ((a) Cabeza y (b) Cuerpo).

Las entradas y salida del reactor se unen y sellan con grasa de grafito a sus respectivas conducciones, mediante rótulas móviles de cuarzo que evitan las roturas de tensión debidas a la dilatación. Hay que tener cuidado al manipular estas rótulas y al reactor de cuarzo, siendo importante usar guantes de modo a no ensuciarlos con grasa de la mano.

Tiempo de residencia

El tiempo de residencia (τ) de los gases en la zona de reacción, puede ser calculado aplicando la ecuación E-B.7.

$$\tau(s) = \frac{V_{sr}}{Q_T(P_{sr}, T_{sr})} \quad \text{E-B.7}$$

Donde:

V_{sr} : Volumen del sistema de reacción (cm^3); P_{sr} : Presión del sistema de reacción (mbar); T_{sr} : Temperatura del sistema de reacción (K); $Q_T(P_{sr}, T_{sr})$: Caudal total de gases reactantes a la presión y temperatura del reactor (ml/min).

El volumen de la zona de reacción corresponde al volumen de un cilindro. La zona de reacción tiene 200 mm de altura (h) y 8,7 mm de diámetro interno (D) (Figura B.18), así:

$$V_{sr} = \frac{\pi}{4} D^2 h = \frac{\pi}{4} (8,7)^2 (200) = 11889,4 \text{ mm}^3 = 11,89 \text{ cm}^3 \quad \text{E-B.8}$$

El caudal total de gases, en condiciones actuales, se puede determinar con la ecuación E-B.9.

$$Q_T (ml / min) = Q_N \frac{T_{sr}}{273} \frac{1013,25}{P_{sr}} \quad \text{E-B.9}$$

Donde:

Q_N = 1000 mlN/min (Caudal total de gases, en condiciones normales, en los experimentos) y

P_{sr} = 1013,25 mbar (Presión atmosférica).

De este modo, substituyendo E-B.8 y E-B.9 en E-B.7, se obtiene:

$$\tau(s) = \frac{194,6}{T_{sr}(K)} \quad \text{E-B.10}$$

Observando la ecuación E-B.10 se puede concluir que la duración de los gases dentro de la zona de reacción depende únicamente de la temperatura en la zona de reacción.

B.1.2.1.2- Horno

En esta instalación, para calentar la zona de reacción del reactor, se utiliza un horno eléctrico de tubo vertical abierto con potencia de 20 kW, modelo TR-1, fabricado por Forns Hobersal (Figura B.19). Este horno ofrece un perfil de temperatura uniforme en la zona de reacción. Para ello, posee tres zonas calefactorias independientes con resistencias, cuyas potencias se regulan a través de una unidad de control. La temperatura máxima que se alcanza es 1150 °C. Para verificar que las resistencias del horno funcionan correctamente, antes de iniciar los experimentos, es fundamental realizar un perfil de temperatura (Consultar anexo C).



Figura B.19- Fotografía del horno eléctrico de la instalación de fase gas a presión atmosférica.

De modo a evitar pérdidas de calor, se usan dos aislantes diferentes. Un aislante de baja densidad que recubre el interior del horno y lana de vidrio que se coloca en la parte interna superior e inferior del horno de modo a cubrir la holgura que existe entre el horno y el reactor.

B.1.2.1.3- Sistema de control de temperatura del horno

La temperatura del horno es controlada por una unidad de control fabricado por Forns Hobersal. Consiste en una caja que cuenta con tres controladores proporcional integral derivativo (PID), que regulan la temperatura en el horno. El sistema de control posee:

1. Sensor (termómetro), que determine el estado del sistema.
2. Controlador (PID), que genera la señal que gobierna al actuador.

3. Actuador (resistencia eléctrica), que modifica el sistema de manera controlada.

De esta forma, el sensor proporciona una señal al controlador, la cual representa el *punto actual* en el que se encuentra el sistema. A su vez, el controlador lee una señal externa que representa el valor que se desea alcanzar. Esta señal recibe el nombre de *set point* (o punto de consigna o punto de referencia), la cual es de la misma naturaleza y tiene el mismo rango de valores que la señal que proporciona el sensor. Luego, el controlador resta la señal de *punto actual* a la señal de *set point*, obteniendo así la señal de error, que determina en cada instante la diferencia que hay entre el valor deseado (consigna) y el valor medido. La señal de error es utilizada por cada uno de los 3 componentes del controlador PID. Las 3 señales sumadas, componen la señal de salida que el controlador va a utilizar para gobernar al actuador. La señal resultante de la suma de estas tres se llama variable manipulada y no se aplica directamente sobre el actuador, sino que debe ser transformada para ser compatible con el actuador utilizado.

En la figura B.20 se muestra una fotografía de la unidad de control de temperatura del horno. En cada uno de los programadores digitales se introduce el *set point* correspondiente a la temperatura que se quiere tener en el horno.



Figura B.20- Fotografía del sistema de control de temperatura del horno de la instalación de fase gas a presión atmosférica.

B.1.2.2- Instalación de formación de hollín

B.1.2.2.1- Reactor

El reactor usado en el experimento de formación de hollín es un reactor de flujo de cuarzo, elaborado también por la empresa APLITEC. El reactor tiene tres partes: cabeza, cuerpo y sonda móvil. Estas partes se juntan y sellan usando grasa de grafito, de modo a evitar fugas. En la figura figura B.21 se puede observa una fotografía del reactor así como un esquema del mismo.

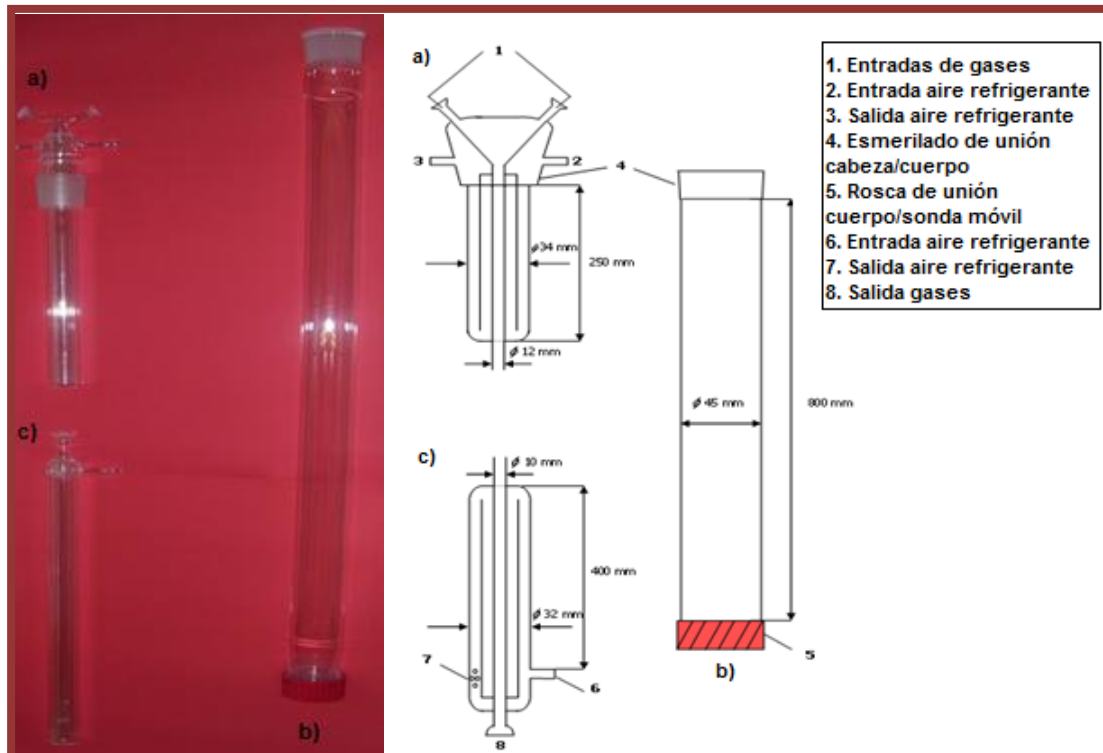


Figura B.21- Fotografía (Izquierda) y esquema (Derecha) del reactor de flujo de la instalación de formación de hollín. (a) Cabeza. (b) Cuerpo. (c) Sonda móvil.

La cabeza del reactor (a), que es donde ocurre la entrada de los gases (1) y del aire de refrigeración (2), está formada por un tubo de 250 mm de longitud y 34 mm de diámetro, con doble camisa de refrigeración, dejando un tubo interno central de 12 mm por donde viajan los gases. Por otro lado, el cuerpo del reactor (b) es un tubo de cuarzo de 800 mm de longitud y 45 mm de diámetro interno. A la salida del cuerpo hay una rosca de poliamida con una junta tórica (5) que permite unir la sonda móvil (c) a la salida del reactor. Esta sonda móvil está formada por un tubo de 400 mm de longitud y 32 mm de diámetro, con doble camisa de refrigeración, que permite controlar el perfil de temperaturas en el interior del reactor y modificar el tiempo de residencia. A la salida de la sonda móvil (8) hay una rótula de cuarzo móvil, la cual se une al sistema de recogida de hollín. Al igual que en el caso anterior, las entradas del reactor se unen y sellan con grasa de grafito a sus respectivas conducciones, mediante rótulas móviles de cuarzo.

Tiempo de residencia

La deducción del tiempo de residencia se realiza usando las ecuaciones E-B.7, E-B.8 y E-B.9, pero a diferencia del caso anterior, el tiempo de residencia no es fijo sino que viene dado por la posición de la sonda móvil, ya que colocando la sonda en una posición u otra, se modifica la longitud de reacción. En el experimento realizado, la sonda móvil se encuentra en su posición más externa, por lo que la longitud de la zona isoterma es, aproximadamente, 160 mm. Determinando el tiempo de residencia de forma análoga al caso anterior, se tiene:

$$\tau(s) = \frac{4168,2}{T_{sr}(K)}$$

E-B.11

B.1.2.2.2- Horno

En esta instalación se emplea un horno eléctrico de tubo vertical cerrado con potencia de 9 kW modelo ST16VC-1, fabricado por Forns Hobersal (Figura B.22). Este horno aporta una zona

isoterma en la zona de reacción, y a diferencia del caso anterior, cuenta con una única zona calefactoria (250 mm de longitud) con seis resistencias en forma de U, de disilicio de molibdeno. Estas seis resistencias se distribuyen desde arriba hasta abajo de la caja del horno, agrupadas en dos grupos de tres resistencias en serie. La temperatura es controlada por un controlador PID. La temperatura máxima de trabajo del horno es 1600 °C. Sin embargo, se aconseja no trabajar por encima de 1500 °C, debido al alto desgaste que pueden sufrir las resistencias si se trabaja a temperaturas tan elevadas.

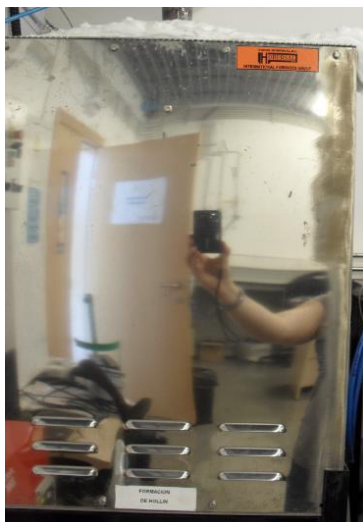


Figura B.22- Fotografía del horno eléctrico de la instalación de formación de hollín.

Al igual que en el caso anterior, de modo a evitar pérdidas de calor, el horno está reforzado con aislante de baja densidad que recubre el interior del horno y lana de vidrio que cubre la holgura entre el reactor y el horno.

B.1.2.2.3- Sistema de control de temperatura del horno

Al igual que en la instalación anterior, la temperatura del horno es controlada por un sistema de control fabricado por Forns Hobersal (Figura B.23). Consiste en una caja que cuenta con un controlador proporcional integral derivativo (PID), que regula la temperatura del horno. La descripción es la misma que el caso anterior (subapartado B.1.2.1.3 de esta sección).



Figura B.23- Fotografía del sistema de control de temperatura del horno de la instalación de formación de hollín.

B.1.2.2.4- Sistema de recogida de hollín

Parte del hollín que se forma durante el proceso de pirólisis es arrastrado por la corriente de gases y retenido en el sistema de recogida de hollín. Este sistema está constituido por un portafiltros de cuarzo y un filtro de microfibra de vidrio de 26 mm de diámetro interior, 60 mm

de longitud, 3,6 mm de espesor y 1 µm de tamaño de poro, fabricado por la empresa Albet. En la Figura B.24 se muestra una fotografía del portafiltros y filtro empleados.



Figura B.24- Fotografía del sistema de recogida de hollín de la instalación de formación de hollín. Izquierda: Portafiltros. Derecha: Filtro.

B.1.2.3- Instalación de fase gas a presión

B.1.2.3.1- Reactor y carcaza

El reactor empleado en los experimentos de la instalación de fase gas a presión, es un tubo largo y estrecho de cuarzo con una longitud de 1500 mm, diámetro interno de 5 mm y diámetro externo de 10 mm (Figura B.25).



Figura B.25- Fotografía del reactor de flujo de la instalación de fase gas a presión.

Tiempo de residencia

En este caso, el tiempo de residencia viene dado por la ecuación E-B.12, por la cual se deduce que éste depende de la presión y de la temperatura en la zona de reacción.

$$\tau(s) = 261,12 \frac{P_{sr}(bar)}{T_{sr}(K)} \quad \text{E-B.12}$$

Por otro lado, la presión del reactor es controlada por dos controladores de presión modelo EL-PRESS de Bronkhorst High-Tech, colocados antes del reactor, uno para presiones de hasta 20 bar (P-512C-21KR-RAD-22-V) y otro para presiones de hasta 80 bar (P-512C-100A-RAD-22-V). Al final de la instalación la presión es reducida desde la presión de trabajo hasta la presión atmosférica, por dos válvulas Badger-RCV-RC200, una para presiones inferiores a 20 bar, y la otra para presiones de hasta 80 bar.

El reactor se encuentra rodeado por un tubo de acero inoxidable AISI 316L, con 1360 mm de longitud, 25 mm de diámetro interno y 40 mm de diámetro externo, que actúa como carcasa para mantener la presión. Así, de forma a evitar la existencia de gradientes bruscos de presión a ambos lados del reactor (se permite un gradiente de presión de 10 bar entre un lado y el otro del reactor), existen dos controladores de presión de flujo másico, con capacidad de 5 INN₂/min, modelo EL-PRESS (P-712CV(612CV)-100A-RAD-22-V) de Bronkhorst High-Tech, los cuales liberan nitrógeno en el interior de la carcasa, para obtener una presión similar a la del interior del reactor.

En la Figura B.26, se puede observar un esquema de la carcasa a presión que ha sido construida por el Servicio de Mecánica de Precisión de la Universidad de Zaragoza. El reactor de cuarzo se introduce dentro del tubo de acero inoxidable, en cuyos extremos existen dos bridas, también de acero inoxidable AISI 316L, una fija y otra móvil. Estos dos cuerpos dejan en su interior un pequeño compartimento, en el cual se encuentran los gases a presión. Estas dos bridas se presionan una con otra con un anillo de Viton. La entrada de nitrógeno para presurizar la carcasa se encuentra en la primera de las bridas. Además, en el interior del compartimento dejado por las dos bridas anteriores, se colocan dos aros que se roscan a la brida fija y que sujetan el tubo de cuarzo. A su vez estos dos aros están sujetos con otras dos juntas de Viton.

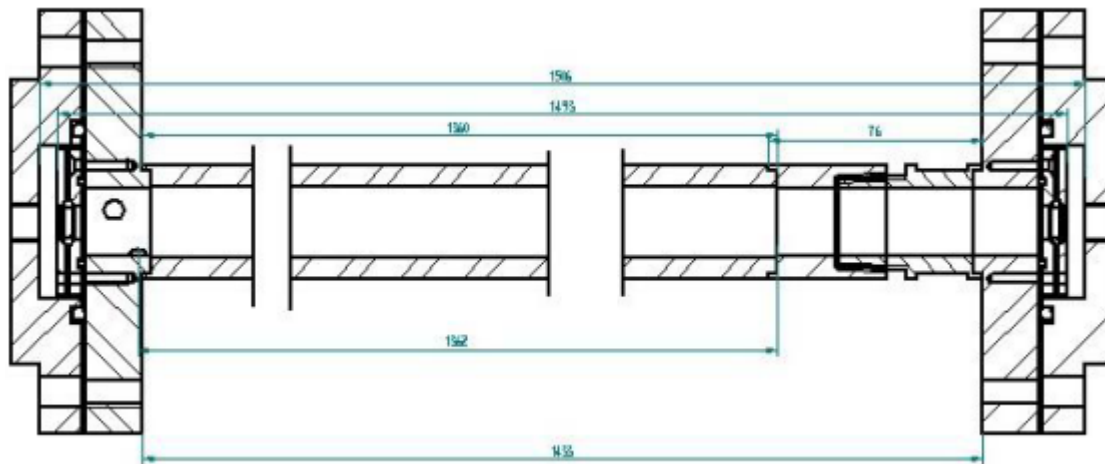


Figura B.26- Esquema de la carcasa a presión de la instalación de fase gas a presión.

B.1.2.3.2- Horno

El horno utilizado en esta instalación es un horno eléctrico horizontal cilíndrico cerrado de la casa KOSMON (Figura B.27), compuesto por un tubo de acero refractario (AISI 310), con 1200 mm de longitud, 42 mm de diámetro interno y 48 mm de diámetro externo, y en cuyo interior se deposita la carcasa. De modo a aportar un perfil de temperatura isoterma, el horno consta de tres zonas de calentamiento (200 mm, 400 mm y 200 mm de longitud) controladas de forma individual, con cuatro resistencias cerámicas de 200 mm cada una. Además, el horno posee una coraza de acero inoxidable y un aislamiento en fibra cerámica Kaowool, la cual puede soportar una temperatura de 1300 °C.



Figura B.27- Fotografía del horno eléctrico de la instalación de fase gas a presión.

B.1.2.3.3- Sistema de control de temperatura del horno

La temperatura en el horno es controlada por una unidad de control fornecida por Eurotherm 3216 con sistema de regulación PID. Cada regulador lleva un sistema de comunicación RS485.

Los termopares utilizados para el control son tipo K, al igual que el utilizado para la monitorización de la temperatura del reactor, cuyo valor puede ser leído en un cuarto regulador incorporado en la caja de control. En la Figura B.28 se muestra una fotografía de la unidad de control de la temperatura del horno.



Figura B.28- Fotografía del sistema de control de temperatura del horno de la instalación de fase gas a presión.

A diferencia del sistema de control de temperatura del horno de las instalaciones anteriores, en donde se introducían los valores de *set point* en los programadores digitales de la unidad de control, aquí los *set point* correspondientes a la temperatura que se quiere tener en el horno, son introducidos en un programa en el ordenador. Este programa es el “AP Temp”, cuya interfaz se puede observar en la figura B.29.

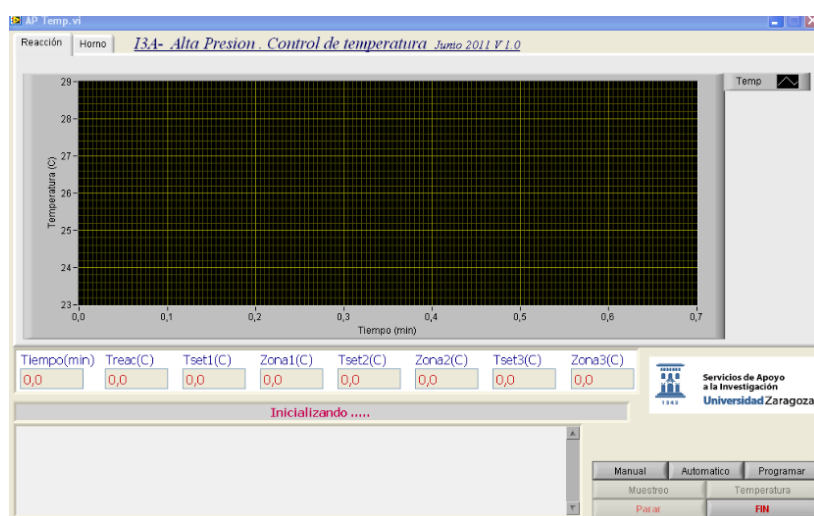


Figura B.29- Interfaz del programa de control de temperatura del horno de la instalación de fase gas a presión.

B.1.3– Sistema de acondicionamiento y análisis de gases

Esta sección comprende los accesorios necesarios para condicionar los gases de combustión así como los equipos para analizarlos. Incluye un condensador, un portafiltros, y los equipos de medición: micro-cromatógrafo de gases (Micro-GC), espectroscópio infrarrojo de transformada de Fouier (FTIR), analizador CO/CO₂ y analizador NO. En la tabla B.3 se muestran los equipos de medición empleados en cada una de las instalaciones.

Tabla B.3- Equipos de medición empleados en las diversas instalaciones.

Instalación	Micro-GC	FTIR	Analizador CO/CO ₂	Analizador NO
FGPA	X	X	X	X
FH	X		X	
FGP	X			

Cabe mencionar que en las instalaciones FGPA y FH, los gases de combustión salen del reactor pasando directamente hacia el condensador o filtro, respectivamente, y posteriormente hacia los siguientes accesorios y equipos de medición. Lo mismo no ocurre en la instalación FGP. En este caso, los gases de combustión, al salir del reactor, pasan por un panel de reducción de presión (Figura B.30). En este panel existen dos válvulas paralelas Badger RCV-RC200, las cuales permiten reducir la presión desde la presión de trabajo hasta presión atmosférica. Una válvula opera hasta presión de 20 bar (1) y la otra hasta presión de 80 bar (2). Una vez reducida la presión los gases pasan por el resto de accesorios de acondicionamiento y equipos de medición.



Figura B.30- Panel de reducción de presión de trabajo hasta presión atmosférica de la instalación de fase gas a presión.

B.1.3.1- Condensador

Se utiliza el condensador con el objetivo de condensar el agua presente en los gases de salida. De este modo, los gases pueden ser analizados sin ocasionar daños a los equipos de medición y sin interferir en los resultados. En la instalación FGPA, el condensador consiste básicamente en un vaso de vidrio con encamisado en las paredes, el cual se llena con agua y hielo. De este modo, los gases húmedos entran por la parte inferior del condensador y circulan por el interior del vaso saliendo secos por la parte superior. En el caso de la instalación FH, no se utiliza condensador, una vez que el experimento es en condición de pirólisis por lo que no se forma agua durante la reacción. Por otro lado, en la instalación FGP, se usa un condensador Peltier ECP 3000, el cual enfría el gas hasta 5 °C. En la figura B.31 se muestran los condensadores utilizados tanto en la instalación FGPA como en la FGP.



Figura B.31- Fotografía de los condensadores. Izquierda: Instalación de fase gas a presión atmosférica. Derecha: Instalación de fase gas a presión.

B.1.3.2- Portafiltros

Los gases que salen del reactor, después de pasar por el condensador, atraviesan un filtro con el objetivo de retener posibles partículas sólidas que hayan podido formarse durante la combustión del DMF. Así, se evita el depósito de partículas en las celdas de análisis.

En las instalaciones FGPA y FH, el filtro es colocado en un portafiltros de acero inoxidable de 47 mm de anchura. Los papeles de filtros empleados son de microfibras de vidrio borosilicato con 0,45 mm de espesor y 0,7 μm de tamaño de poro. En la instalación FGP, el filtro es en T de HOKE de 10-15 μm . En la figura B.32 se muestra el portafiltros empleado para filtrar los gases de salida del reactor.

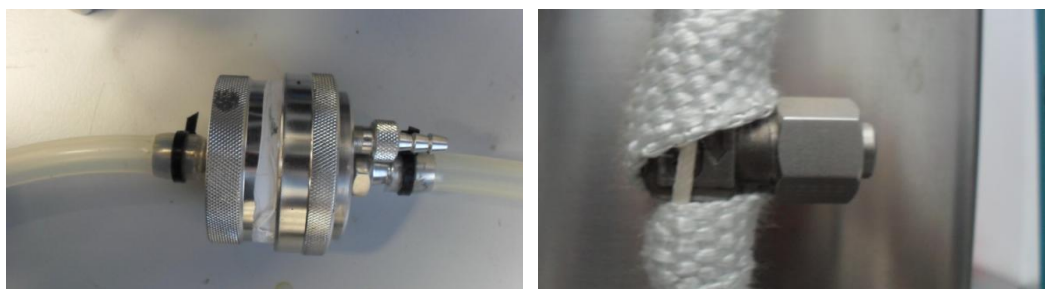


Figura B.32- Fotografía de los portafiltros. Izquierda: Instalación de fase gas a presión atmosférica. Derecha: Instalación de fase gas a presión.

B.1.3.3- Micro-cromatógrafo de gases (Micro-GC)

La cromatografía de gases es una técnica cromatográfica en la que la muestra se volatiliza y se inyecta en la cabeza de una columna cromatográfica. La elución se produce por el flujo de una fase móvil de gas inerte. A diferencia de los otros tipos de cromatografía, la fase móvil no interactúa con las moléculas del analito; su única función es la de transportar el analito a través de la columna.

El Micro-GC utilizado en las tres instalaciones, es modelo 3000A de Agilent (Figura B.33). Es empleado con el objetivo de detectar y cuantificar el DMF, hidrógeno (H_2) y otras especies presentes a lo largo de los experimentos, tales como etileno (C_2H_4), etano (C_2H_6), acetileno (C_2H_2), metano (CH_4), etc. En el caso de la instalación FGP, se usa también para detectar el CO y CO_2 . Cada toma de datos se puede hacer automáticamente, indicando en el software de control el número de mediciones que se quiere realizar en cada toma. El software para controlar el Micro-GC en las instalaciones FGPA y FH se llama soprane, mientras que en la instalación FGP, es EZ-Chrom Elite SI. Estos programas procesan todos los parámetros experimentales así como la recogida y análisis de los datos.



Figura B.33- Micro-cromatógrafo de gases.

El núcleo del instrumento es el módulo del GC, que incluye: un inyector calentado, una columna de muestra, una columna de referencia, un micro-detector de conductividad térmica (TCD), un equipo de control electrónico de la presión (EPC), solenoides de flujo de gas y una tarjeta de control.

El equipo cuenta con tres columnas diferentes (tres módulos), cada una de las cuales sirve para medir unos compuestos determinados y trabajan a diferentes condiciones. En la tabla B.4 se muestra el tipo de columna que se encuentra en cada módulo, el gas portador, los gases detectados por cada una y las condiciones de operación del Micro-GC de la instalación FGP.

Tabla B.4- Gas portador, gases detectados y condiciones de operación de las columnas del micro-cromatógrafo de gases de la instalación de fase gas a presión.

Módulo	Columna	Gas portador	Gases detectados	T _{columna} (°C)	T _{backflush} (s)	P _{columna} (Psi)	T _{análisis} (°C)
A	Tamiz molecular. Con precolumna U	He	Gases permanentes: He, Ar, H ₂ , N ₂ , O ₂ , CH ₄ , CO.	110	8,0	30	150
B	Columna PPU. Con precolumna Plot Q	He	CO ₂ e hidrocarburos ligeros como etileno, etano y acetileno.	75	6	21	150
C	Stabilwax DB.	Ar	Compuestos oxigenados.	85	-	20	150

En los módulos A y B se aplica la técnica backflush. Esta técnica consiste en usar una precolumna (columna situada antes de la columna de separación), de modo a separar los compuestos que se desean medir de aquellos que no deben entrar a la columna. Así, los gases no deseados son expulsados mediante un giro que realiza la precolumna. El tiempo que tarda la precolumna en girar se conoce como tiempo de backflush (T_{backflush}).

Así, durante un análisis ocurren tres pasos: inyección, separación y detección. En la **inyección**, la muestra gaseosa se introduce en la cámara calentada del Micro-GC. La cámara regula la temperatura de la muestra direccionándola hacia el inyector. A continuación, el inyector conduce la muestra a la columna, mientras que una bomba de vacío contribuye a trasladar la muestra por el sistema. La **separación** ocurre en la columna. Después de realizarse la separación en la columna, ocurre la **detección**, donde el gas portador con muestra fluye a través del detector de conductividad térmica (TCD). El gas portador con muestra y el gas portador puro alimentan por separado este detector, pasando cada uno de ellos por diferentes filamentos calientes. La conductividad térmica de las moléculas de muestra produce un cambio en la resistencia eléctrica de los filamentos de muestra en comparación con los filamentos portadores,

produciéndose un cambio de temperatura que se traduce en la variación de una señal eléctrica que es amplificada y registrada. En el Micro-GC de la instalación FGPA, la medición es hecha en 100 segundos, mientras que en el de la instalación FGP, la medición dura 150 segundos. En los experimentos se han realizado cuatro mediciones en cada experimento, cogiendo como valor la media entre ellos.

B.1.3.4- Espectroscópio infrarrojo de transformada de Fouier (FTIR)

La espectroscopia infrarroja es la rama de la espectroscopia que trabaja con la parte infrarroja del espectro electromagnético y sirve para detectar grupos funcionales, identificar compuestos y analizar mezclas. La espectroscopia infrarroja se fundamenta en la absorción de la radiación infrarroja por las moléculas. Así, una molécula absorberá la energía de un haz de luz infrarroja cuando dicha energía incidente sea igual a la necesaria para que se dé una transición vibracional de la molécula. Es decir, la molécula comienza a vibrar de una determinada manera gracias a la energía que se le suministra mediante luz infrarroja. La transformada de Fouier convierte la señal del dominio del tiempo en el dominio de la frecuencia.

El FTIR utilizado en este proyecto es de modelo GENESIS II, de Ati Mattson (Figura B.34). Y se utiliza en los experimentos a presión atmosférica en presencia de NO, de modo a detectar posibles hidrocarburos que se podrían formar durante la combustión y especies tales como cianuro de hidrógeno (HCN), dióxido de nitrógeno (NO₂), óxido nitroso (N₂O) o amoníaco (NH₃).



Figura B.34- Espectroscópio infrarrojo de transformada de Fouier.

A diferencia del Micro-GC, aquí la toma de datos no es automática. Siempre que se quiera realizar un análisis hay que hacer un *Scan*. Sin embargo, tiene la ventaja de que la duración de análisis es menor (20 segundos frente a los 100 segundos del Micro-GC). Este equipo necesita ser calibrado antes de cada experimento, haciendo pasar una corriente de nitrógeno y tomando *background* (en este caso se han tomado 4 *background*).

B.1.3.5- Analizador CO/CO₂

Se emplea el analizador CO/CO₂, con el objetivo de obtener la concentración de estos dos gases a la salida del reactor. El equipo utilizado es un analizador modular (Uras 14) de gases en continuo de la marca ABB Advance Optimacon (Figura B.35). El uso de este equipo es de gran facilidad y rapidez, pues permite recoger directamente de la pantalla el valor de las concentraciones (en ppm) de estos gases para cada temperatura del experimento.



Figura B.35- Analizador CO/CO₂.

Los gases introducidos en la celda de análisis son irradiados y absorben diferente energía dependiendo de la concentración de CO y CO₂ del gas. La energía restante es devuelta y transformada en corriente eléctrica. Hay que calibrar siempre el equipo antes de iniciar con los experimentos. Para tal, se usa una corriente de nitrógeno y se sigue el procedimiento explicado a continuación:

1. Preparar la corriente de nitrógeno para el calibrado. Para ello usar una conexión únicamente para el calibrado, de modo a no contener residuos de otros gases.
2. Verificar que la bomba del analizador se encuentra apagada. Para ello: Menú → Mantenimiento/Prueba → Enter → Ajuste especif. anlz. → bomba. En Stat./Velocidad debe decir "servicio". Caso contrario, presionar la opción Auto/servicio e introducir la clave solicitada.
3. Presionar la tecla "Means" para volver a la pantalla inicial. Menú → Calibrar → CO → Calibración manual → Gas cero → Enter. Al momento de presionar Enter, conectar inmediatamente la corriente de N₂ a la purga del analizador. Tener en atención que la calibración se realiza por la purga y no por la entrada del analizador.
4. Dejar que el valor se estabilice en cero y presionar Enter. Repetir este paso por lo menos tres veces más seleccionando la opción repetir. Una vez estabilizado el valor, seleccionar Enter en vez de repetir.
5. Repetir paso 3 pero en vez de seleccionar Gas cero, seleccionar Cubetas de calibración. Dejar que el valor se estabilice hasta el valor de la consigna ubicado en la parte superior derecha de la pantalla. Presionar Enter. Repetir este paso por lo menos tres veces más seleccionando la opción repetir. Una vez estabilizado el valor, seleccionar Enter en vez de repetir.
6. Repetir los pasos 3, 4 y 5 pero ahora para el CO₂.

IMPORTANTE: Una vez que se realice la última repetición del calibrado de cubetas de CO₂ (lo último a realizar) y se presione Enter en vez de repetir, desconectar inmediatamente la conducción de nitrógeno de la purga del equipo.

B.1.3.6- Analizador NO

El analizador NO es empleado para obtener la concentración de NO a la salida del reactor en los experimentos donde se estudia su interacción con el DMF. La marca del equipo es ABB Advance Optimacon con módulo analizador Uras 14 (Figura B.36). El modo de funcionamiento es el mismo descrito en el caso del analizador CO/CO₂. El procedimiento para la realización de la calibración también es el mismo.



Figura B.36- Analizador NO.

B.2- Procedimientos experimentales

El objetivo general de este trabajo ha sido el estudio de la oxidación del DMF y su interacción con el NO, usando un reactor de flujo y variando las principales variables tales como, temperatura (T), concentración de DMF ([DMF]), estequiometría (λ) y presión (P). Para ello, se llevan a cabo experimentos en diferentes instalaciones (de fase gas a presión atmosférica, de formación de hollín y de fase gas a presión). En todos los experimentos se debe de seguir una serie de pasos antes, durante y después de su realización. A continuación, se indican los pasos a seguir. En el caso en que algún paso sea específico para una de las instalaciones, se indica.

B.2.1- Antes del experimento

1. Medir el perfil de temperaturas, como descrito en el anexo C. Es importante hacerlo pues con ello se verifica el correcto funcionamiento de las resistencias del horno y se garantiza una zona isoterma en el reactor.
2. Verificar que se dispone en el laboratorio de todas las botellas necesarias de reactantes y que tengan el manorreductor puesto. Verificar también que no están vacías.
3. Calibrar el Micro-GC y el FTIR con los compuestos que se quieren analizar, usando una botella patrón.
4. Determinar los caudales de gases a utilizar en el experimento a partir de la ecuación E-B.13, teniendo en cuenta la concentración inicial de gas y el caudal total de gases (1000 mlN/min).

$$Q_{gas} (mlN / min) = Q_T (mlN / min) \frac{[gas]_{exp}}{[gas]_{botella}} \quad \text{E-B.13}$$

Donde:

Q_{gas} : Caudal de gas en condiciones normales (mlN/min); Q_T : Caudal total de gases en condiciones normales (mlN/min); $[gas]_{exp}$: Concentración teórica inicial de gas en el experimento (ppm); $[gas]_{botella}$: Concentración de gas en la botella (O de líquido, en los casos donde se produce el gas a través del líquido) (ppm).

El caudal normal se usa con el objetivo de utilizar siempre un mismo sistema de referencia. Sin embargo, la medición del caudal volumétrico es hecha en valor actual, es decir, en las condiciones del laboratorio. Por lo que se tiene que aplicar la ecuación E-B.14 para convertir el valor normal a valor actual.

$$Q_{gas}(ml/min) = Q_{gas}(mlN/min) \frac{T_{laborator\grave{a}}(K)}{273} \frac{760}{P_{laborator\grave{a}}(mmHg)} \quad \text{E-B.14}$$

Por otro lado, para llegar al caudal total de gases se introduce nitrógeno. Así, por ejemplo, en la instalación FGPA, los caudales de gases que se introducen al reactor son cinco, específicamente: DMF (Q_{DMF}), O_2 (Q_{O_2}), N_2 en el borboteador ($Q_{N_2, borboteador}$), H_2O (Q_{H_2O}) y NO (Q_{NO}), éste último cuando sea el caso. Siendo Q_{H_2O} calculado aplicando la ecuación E-B.5. Por lo que el valor del caudal de nitrógeno que se necesita introducir para cerrar el balance viene dado por la diferencia entre el caudal total normal y la suma de los caudales normales de gases introducidos (E-B.15).

$$Q_{N_2}(mlN/min) = Q_T(mlN/min) - (Q_{DMF} + Q_{O_2} + Q_{N_2, borboteador} + Q_{H_2O} + Q_{NO})(mlN/min) \quad \text{E-B.15}$$

5. En las instalaciones FGPA y FH, verificar que el reactor está bien montado en el horno. Es decir, que la zona de reacción está ubicada entre las resistencias del horno así como verificar que las entradas y salidas del reactor están selladas a sus respectivas conducciones. Para el sellado se usa grasa de grafito. En la instalación FGP, el reactor ya se encuentra introducido en el interior de la carcasa y del horno.

6. En la instalación FGPA y FH, verificar que la holgura entre el horno y el reactor está cubierta por la lana de cuarzo. Esto con el objetivo de evitar pérdidas de calor.

7. En la instalación FGPA, conectar la salida del reactor a la entrada del condensador y conectar la salida del condensador al portafiltros. Esto con el objetivo de condensar el agua y retener posibles partículas sólidas que puedan formarse durante la combustión del DMF, y así no ocasionar daños a los equipos de medición ni interferir en los resultados. En la instalación FH, conectar la salida del sistema de recogida de hollín al portafiltros. Luego, en ambas instalaciones, conectar la salida del portafiltros a los equipos de medición.

8. En la instalación FH, pesar el filtro del sistema de recogida de hollín (B.1.2.2.4) y los vidrios de reloj usados para recoger el hollín que queda retenido en el interior del reactor.

B.2.2- Durante el experimento

1. Abrir la campana de la instalación. Esto con el objetivo de que los gases de reacción salgan hacia el exterior y no queden concentrados dentro del laboratorio/nave.

2. Abrir el aire de refrigeración.

3. Condicionar el Micro-GC para su uso. Para ello se elige el modo CUANTIFICACIÓN en el programa y se espera a que la temperatura de las columnas de muestras alcance su valor. Una vez calientes, ya se puede comenzar analizar (el equipo indica cuando ya está listo). Limpiar el Micro-GC haciendo circular una corriente de nitrógeno (≈ 6 inyecciones). Esto garantiza la eliminación de posibles trazas de reactantes y/o productos, que hayan podido quedar depositados del experimento anterior.

4. Calibrar el FTIR y los analizadores de CO/CO_2 y de NO (éste último sólo en los experimentos con NO). Estos equipos se calibran con nitrógeno. Los pasos a seguir para el calibrado de los analizadores se encuentran indicados en el punto B.1.3.5 de este anexo. No olvidar prender la bomba de los analizadores una vez finalizado el calibrado. En relación al FTIR, éste se calibra

haciendo pasar la corriente de nitrógeno por la entrada del equipo recogiendo así el *background* (blanco). Se suele realizar por lo menos cuatro *backgrounds* en el FTIR.

5. En las instalaciones FGPA y FH, conectar las botellas, usando las conducciones, a los respectivos controladores de flujo másico (los controladores son seleccionados teniendo en cuenta el caudal de gas deseado así como la capacidad de dichos controladores). A su vez, conectar las conducciones de salida de estos controladores a las del panel de válvulas. Todas las conducciones se encuentran enumeradas de modo a saber cuál conducción hace ligación con cuál. En la instalación FGP, las ligaciones ya están todas montadas con tubos de acero inoxidable.

6. Realizar la medición de los caudales volumétricos de los gases. Para ello se abren las botellas de gases (cada botella se abre al momento de comenzar a medir el caudal volumétrico de dicho gas). De seguida, en el caso de las instalaciones FGPA y FH, introducir el % de la apertura de la válvula del controlador en el programa del ordenador (Figura B.11). Al mismo tiempo, ir midiendo con el burbujímetro el caudal volumétrico a la salida del controlador y/o en el panel de válvulas. Caso el caudal volumétrico no sea el deseado, cambiar el valor de la apertura de la válvula de control hasta conseguirlo. En la instalación FGP, la medición de los caudales se realiza de uno en uno, ya que los gases son introducidos al reactor por una única entrada a diferencia de las otras dos instalaciones. Así, se inicia la medición con el gas de mayor caudal y se modifica el *set point* en el programa de control de flujo ("AP SmallCEM" para el caso del nitrógeno y "Alta Presión" para el resto de gases figura B.9 y figura B.11, respectivamente) hasta obtener el caudal deseado. Una vez ajustado el *set point* y conocido el caudal exacto de gas que entra, se prosigue a medir el próximo gas. Para ello, se introduce ese segundo gas al sistema y se suma su caudal teórico con el caudal exacto medido del gas anterior, siendo que la suma de estos dos caudales son los que se miden ahora. Y así con el resto de reactantes que se utilice. Cabe mencionar que en la instalación FGP, durante la medición de los caudales se cierra la válvula que se encuentra en el panel de reducción de presión, la cual dirige los gases hacia los equipos de medición, y se abre la que se encuentra por debajo para que así los gases vayan hacia el burbujímetro.

7. Inyectar el líquido al sistema en las instalaciones FH y FGP. Para ello, primero se debe calentar las líneas calorifugadas introduciendo el *set point* deseado en los controladores de temperatura de dichas líneas. En la instalación FGP, también se debe introducir en el controlador de temperatura del CEM el *set point* deseado usando el programa "AP SmallCEM". Una vez que las líneas están calientes, se procede a introducir el caudal de líquido. Para ello, en la instalación FH se realiza lo expuesto en el punto B.1.1.2 de este anexo, mientras que en la instalación FGP se introduce el *set point* en el programa "AP SmallCEM". Como mencionado en el punto B.1.1.3, tanto el valor de temperatura de las líneas calorifugadas y del CEM así como el caudal de líquido a introducir, pueden ser determinados usando el programa FLUIDAT[®] on the net, disponible en internet. Cabe mencionar que el reactor debe estar caliente al momento de introducir el líquido, para que éste no se condense.

8. Una vez introducidos todos los reactantes al reactor, dejar que la mezcla se homogenice. De seguida, medir el caudal volumétrico a la salida del reactor para verificar que no existen fugas. En la instalación FGPA y FH, la medición se realiza en la última válvula del panel de válvulas, la cual pertenece a los gases que salen del reactor. En la instalación FGP, la medición se realiza en el panel de reducción de presión (el panel que se encuentra al final de la instalación).

Nota: Hay que tener en atención que las válvulas de los gases individuales estén abiertas hacia el reactor y no hacia el exterior. Al igual que la válvula de la mezcla de los gases, ésta tiene que estar abierta hacia los analizadores y no hacia el exterior.

9. En la instalación FGPA, poner hielo con agua dentro del condensador. A lo largo del experimento hay que ir renovándolo.

10. Tomar datos con los equipos de medición a temperatura ambiente. De seguida, subir la temperatura hasta la deseada (sólo en las instalaciones FGPA y FH. En la instalación FGP no se aumenta la temperatura sin antes aumentar la presión), introduciendo los correspondientes valores de *set points* en los programadores digitales del sistema de control de temperatura. Una vez estabilizada la temperatura, esperar aproximadamente 10-15 min para dar tiempo a que ocurra la reacción a esa temperatura, e iniciar la toma de datos con los equipos de medición.

Nota: En la instalación FGPA, se recomienda primero comenzar la toma de datos con el Micro-GC y luego con el FTIR ya que en el primer caso, cada medición demora 100 segundos, mientras que en el segundo caso, el tiempo es de 20 segundos. En los analizadores de CO/CO₂ y de NO, los datos son en continuo y se pueden ver directamente en la pantalla del equipo.

11. Subir la presión en la instalación FGP. Para ello se introduce en el programa “Alta Presión” el *set point* deseado en uno de los dos controladores (20 bar o 80 bar, dependiendo de la presión de trabajo). El aumento de presión debe ser paulatinamente, por ejemplo de 5 en 5 bar, de modo a no ocasionar problemas en la instalación. Una vez alcanzada la presión deseada, subir la temperatura del horno en el programa “AP Temp” (Figura B.29). También la subida de temperatura se realiza gradualmente.

B.2.3– Después del experimento

1. Bajar la temperatura del horno.

2. En la instalación FGP, después de bajar la temperatura del horno, quitar el caudal másico de líquido en el CEM y bajar su temperatura así como de las líneas calefactadas. Proseguir a bajar la presión del sistema, la cual se hace gradualmente.

3. Cerrar las botellas de los gases y dejar que las líneas se vacíen. Una vez vacías, cerrar los manorreductores y las válvulas de los controladores.

4. Apagar la bomba de los analizadores de CO/CO₂ y de NO.

5. Poner el Micro-GC en modo REPOSO (instalaciones FGPA y FH) o PURGA (instalación FGP). Caso se quiera dejar acondicionando, poner el modo ACONDICIONAMIENTO.

6. Cerrar las campanas y el aire de refrigeración.

7. Apagar el sistema de control de temperatura del horno.

8. Realizar la recogida de hollín formado en la instalación FH. Para ello se desmonta el reactor y se limpia su interior con cepillos recogiendo el hollín en un vidrio de reloj ya pesado con anterioridad. Luego, se prosigue con el pesado del vidrio de reloj con hollín y del filtro del sistema de recogida de hollín con hollín (aquí se deposita el hollín que es arrastrado por los gases). Por último, se determina la cantidad de hollín formado:

A=Masa de hollín en el reactor= Vidrio de reloj con hollín- Vidrio de reloj sin hollín.

B=Masa de hollín en el sistema de recogida de hollín= Filtro con hollín – Filtro sin hollín.

$\text{Masa total de hollín} = A+B$

9. Dejar el sistema experimental en condiciones adecuadas para el próximo experimento.

ANEXO C

Perfil de temperaturas

Este anexo contiene los perfiles de temperaturas correspondientes a cada una de las instalaciones.

Los tres reactores de flujo utilizados son isotérmicos, por lo cual es necesario controlar la temperatura a lo largo de la zona de reacción. Así, antes de iniciar los experimentos, es importante verificar que las resistencias del horno de cada instalación funcionan correctamente y que existe condición isoterma.

De este modo, para verificar la homogeneidad de la temperatura, se realizan los perfiles de temperaturas en la zona de reacción. Para tal, se introduce un caudal de nitrógeno por las entradas del reactor, que hagan un caudal total de 1000 mL/min (caudal total con el que se realizan los experimentos). Para medir la temperatura, se introduce un termopar tipo K en el reactor. En la instalación FGPA, se realiza el perfil a las diversas temperaturas y cuyo valor se registra desde la parte superior del reactor (0 cm) a cada 2 cm hasta 20 cm (largura de la zona de reacción). En la instalación de formación de hollín se realiza el perfil únicamente a la temperatura a que se hace el experimento de formación de hollín, es decir, a 1200 °C. En este caso, la zona isoterma tiene aproximadamente, 16 cm de longitud. En la instalación de fase gas a presión, se realiza el perfil a las diversas temperaturas y presiones de trabajo. En esta instalación, el termopar se introduce en el interior de una de las dos vainas disponibles, situadas en la brida de entrada de gases. Las vainas están formadas por dos tubos independientes de acero de 6 mm de diámetro externo, las cuales se encuentran situadas a lo largo de la carcasa que contiene al reactor.

Para ajustar el valor de temperatura que se desea, se debe introducir el valor de los *sent points*, ya definidos para las varias temperaturas, en el sistema de control de temperatura del horno.

En las figuras C.1, C.2 y C.3 se observan los perfiles de temperaturas correspondientes a la instalación FGPA, FH y FGP, respectivamente.

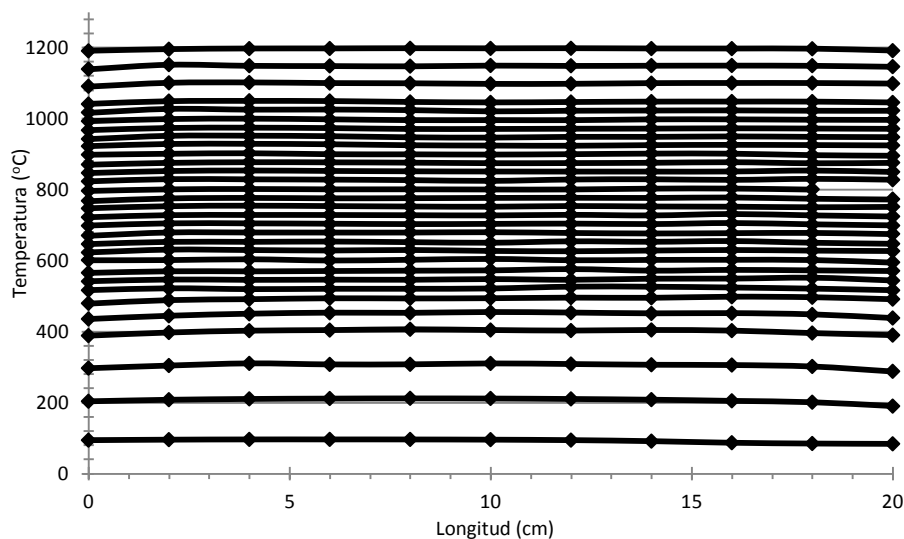


Figura C.1- Perfil de temperaturas de la instalación de fase gas a presión atmosférica.

Como se observa en la figura C.1, la temperatura a lo largo de la zona de reacción no varía en más de 10 °C, por lo que se considera que existen condiciones isotermas. Caso no existiera condición isoterma, significaría que las resistencias no están funcionando de forma correcta y se tendría que cambiar el valor de los *sent points* hasta obtener el valor de temperatura deseado dentro de la zona de reacción.

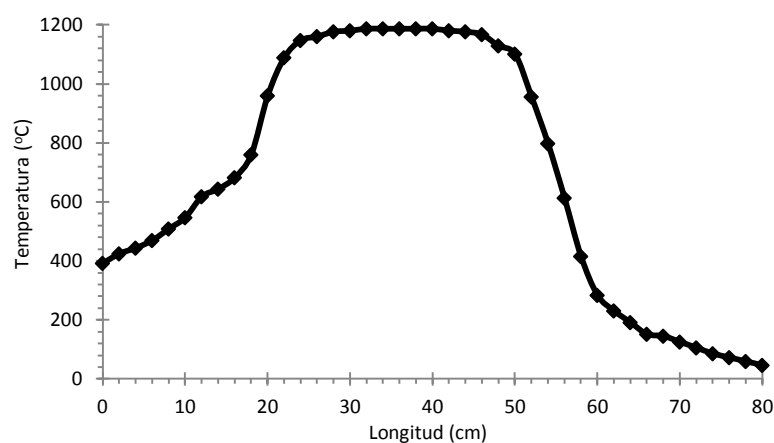


Figura C.2- Perfil de temperaturas de la instalación de formación de hollín.

En la instalación de formación de hollín la longitud de la zona de reacción depende de la posición de la sonda móvil. Por la figura C.2 se observa que para la posición de la sonda móvil del experimento (posición más externa), la zona de reacción tiene una longitud de aproximadamente 16 cm.

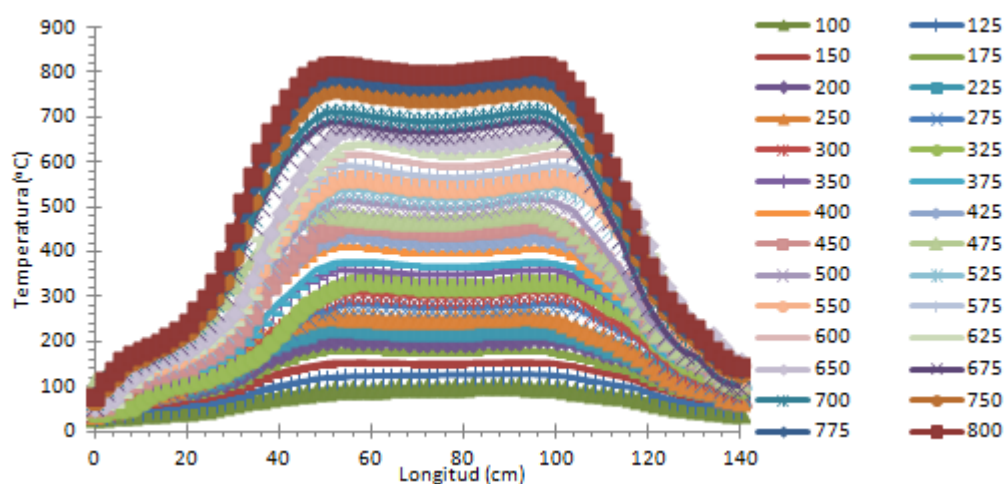


Figura C.3- Perfil de temperaturas de la instalación de fase gas a presión para 20 bar.

La figura C.3, representa el perfil de temperaturas para presión de 20 bar. El perfil se mantiene relativamente constante para el resto de presiones. Por los perfiles se comprueba que en la instalación a presión la longitud de la zona de reacción, con temperatura constante, es aproximadamente 56 cm.

ANEXO D

Software y modelo cinético-químico detallado

En este anexo se explica con detalle los programas empleados para la realización de las simulaciones y del análisis de velocidad y sensibilidad. También se muestra detalladamente el modelo cinético-químico usado.

D.1- Software

El software empleado para realizar las simulaciones y los análisis de velocidad de reacción es CHEMKIN-II (versión 1.6, Septiembre 1990) en conjunto con el código SENKIN y el utilizado para realizar los análisis de sensibilidad es CHEMKIN-Pro. CHEMKIN es un paquete informático cuyo propósito es facilitar la formación, solución e interpretación de los problemas que implican la cinética química en fase gas. Representa una herramienta especialmente potente y flexible para la incorporación de cinéticas químicas complejas en las simulaciones de dinámica de fluidos. El paquete consta de dos componentes principales de software: un intérprete y una librería de subrutina fase gas.

El código SENKIN, necesita subrutinas de los paquetes computacionales CHEMKIN y DASAC. Para resolver un problema usando SENKIN, se debe tener acceso a la base de datos termodinámicos de CHEMKIN, ejecutar el intérprete Chemkin (Ckinterp), enlazar SENKIN con las librerías de CHEMKIN y DASAC, pasar los datos de entrada para SENKIN y almacenar los datos de salida que se originan. En la figura D.1 se muestra la relación entre los varios componentes.

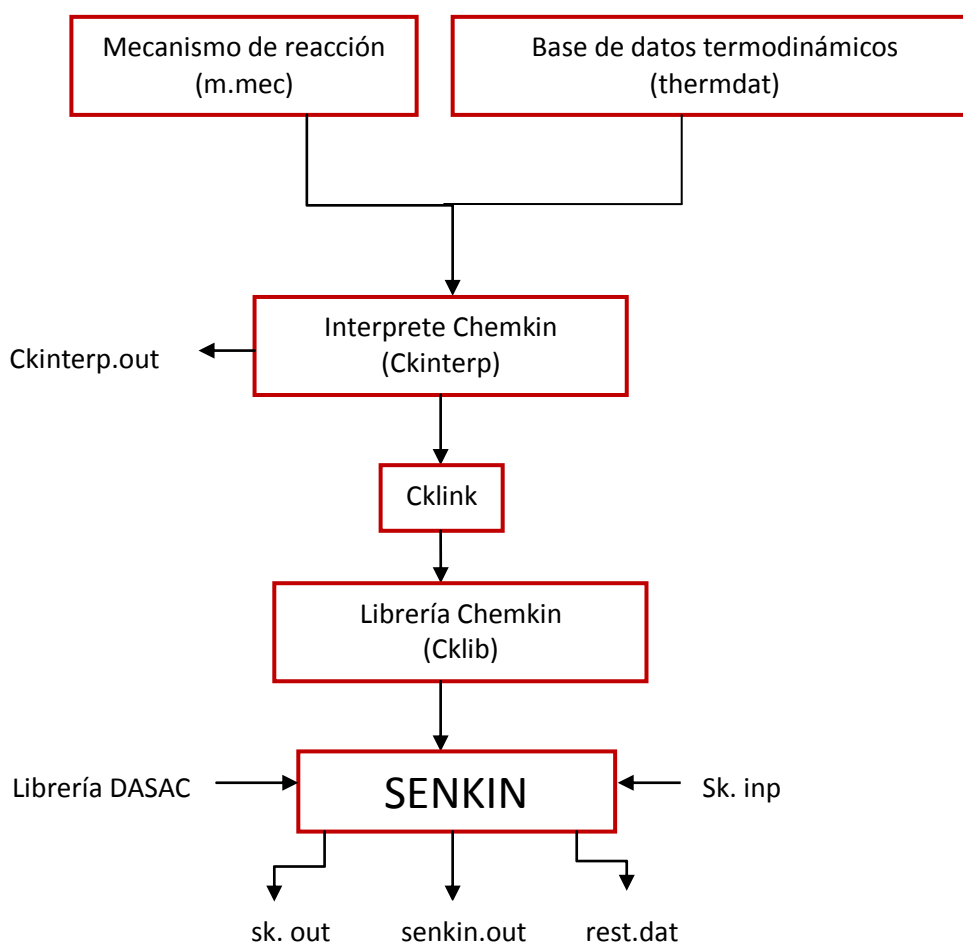


Figura D.1- Esquema estructural del programa de simulación.

Ckinterp es el programa que lee la descripción simbólica del mecanismo de reacción especificado por el usuario (m.mec) y verifica la existencia de los datos termodinámicos necesarios para cada especie calculando así las constantes de velocidad de las reacciones inversas para cada temperatura de trabajo. Los datos termodinámicos de cada especie son extraídos de la base de datos disponible en CHEMKIN-II (thermdat). Otra opción posible para el cálculo de propiedades termodinámicas es especificar los datos en el fichero de entrada.

El fichero de salida del Intérprete (**Ckinterp.out**) contiene una lista de los elementos, especies y reacciones implicadas en el mecanismo. Asimismo, si existen errores en el fichero de entrada, se muestra un mensaje para cada uno de ellos indicando el tipo de error y donde se encuentra. Si no hay errores durante el proceso de compilación, el Intérprete genera un fichero binario de salida (**Cklink**) que contiene toda la información requerida por la subrutina de cálculo relativa a los elementos, especies y reacciones del mecanismo especificado por el usuario. Este fichero sirve de nexo de unión con la librería de subrutinas en fase gaseosa que incluye más de cien subprogramas que permiten calcular ecuaciones de estado, propiedades termodinámicas y velocidades de producción de especies químicas, así como proporcionar información de los elementos, especies y reacciones.

En relación a **SENKIN**, éste utiliza una serie de informaciones, nomeadamente:

- a) La información devuelta por la librería de subrutinas en fase gas.
- b) El fichero **sk.inp** donde el usuario especifica las condiciones del proceso (presión o densidad, temperatura, tiempo de residencia y composición inicial de la mezcla de gases), así como el tipo de cálculos que deben ser realizados. Los comandos utilizados en este fichero son:
 - SENS**- Realiza el análisis de sensibilidad con respecto a las constantes de velocidad de reacción, siendo los coeficientes de sensibilidad escritos en el fichero **sk.out**.
 - CONT**- Se obtiene la solución manteniendo la temperatura y presión del sistema constante.
 - PRES**- Presión inicial de la mezcla de gases. Unidades en atmósfera (atm).
 - TEMP**- Temperatura inicial de la mezcla de gases. Unidades en Kelvin (K).
 - TIME**- Recursos de integración desde tiempo cero hasta el momento final (tiempo de residencia). Unidades en segundos (s).
 - DELT**- Intervalo de tiempo para la impresión de la solución en **Ckinterp.out**. Unidades en segundos (s).
 - REAC**- Moles de las especies reactantes en la mezcla inicial. El comando debe ser seguido por el nombre de la especie y el valor numérico en la misma línea. Unidades en moles o fracción molar.
 - END**- Este comando debe aparecer al final de cada conjunto de entrada de datos.
- c) El software **DASAC**.

De este modo, **SENKIN** genera tres ficheros de salida: **sk.out**, **senkin.out** y **rest.dat**. El fichero de texto **sk.out** contiene toda la información relativa a las condiciones iniciales del proceso y concentración final de cada especie para las condiciones iniciales especificadas por el usuario. Este fichero también incluye los resultados del análisis de velocidad de reacción y sensibilidad en los casos así indicados. El fichero **senkin.out** muestra información del proceso de cálculo. Si surge algún error durante el proceso de cálculo, es en este fichero donde se indica el error originado. En relación al fichero **rest.dat**, éste recoge los posibles fallos o errores ocurridos durante el proceso de cálculo, mostrándolos en **senkin.out**.

D.2- Modelo cinético-químico detallado

Como referido en la sección 4 de la memoria del trabajo, el modelo usado en las simulaciones es el propuesto por Sirjean y cols. 2013, el cual abarca el proceso de pirólisis y combustión del DMF. Además, se le ha adicionado al modelo reacciones pertenecientes a la interacción entre hidrocarburos (C_1 , C_2 y oxigenados) y NO. A continuación se muestran los elementos, especies y reacciones del modelo. En total, el modelo comprende 323 especies y 1690 reacciones.

Junto a las reacciones también se muestran los parámetros de la ecuación de Arrhenius modificada (E-D.1), los cuales se usan para determinar las constantes de velocidad de reacción (k):

E-D.1

A : Factor pre-exponencial (mol, cm, s, K); T : Temperatura (K); n : Exponente de la temperatura; E_a : Energía de activación (cal/mol); R : constante de los gases ideales (1,987 cal/mol.K).

ELEMENTS		ATOMIC													
CONSIDERED		WEIGHT													

1. H		1.00797													
2. O		15.9994													
3. C		12.0112													
4. N		14.0067													
5. AR		39.9480													
6. HE		4.00260													
7. F		18.9984													

		C													
		P H													
		H A													
		A R													
SPECIES	CONSIDERED	S G	MOLECULAR	TEMPERATURE		ELEMENT COUNT									
				E E	WEIGHT	LOW	HIGH	H	O	C	N	A R	H E	F	

1. AR		G O	39.94800	200.0	6000.0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
2. HE		G O	4.00260	200.0	6000.0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
3. N2		G O	28.01340	200.0	6000.0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0
4. DMF		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
5. NO		G O	30.00610	300.0	5000.0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0
6. CO		G O	28.01055	200.0	6000.0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0
7. CO2		G O	44.00995	200.0	6000.0	0	2	1	0	0	0	0	0	0	0
8. H2		G O	2.01594	200.0	6000.0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9. C2H4Z		G O	28.05418	200.0	6000.0	4	0	2	0	0	0	0	0	0	0
10. C2H2T		G O	26.03824	200.0	6000.0	2	0	2	0	0	0	0	0	0	0
11. CH4		G O	16.04303	200.0	6000.0	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0
12. DMF-3yl		G O	95.12209	300.0	5000.0	7	1	6	0	0	0	0	0	0	0
13. R1C6H7O		G O	95.12209	300.0	5000.0	7	1	6	0	0	0	0	0	0	0
14. DM5F-2yl		G O	81.09500	300.0	5000.0	5	1	5	0	0	0	0	0	0	0
15. DM2C6H8O		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
16. DM3C6H8O		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
17. DM4C6H8O		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
18. DM5C6H8O		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
19. DM6C6H8O		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
20. CA1		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
21. CA2		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
22. B1		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
23. B2		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
24. B3		G O	68.11951	300.0	5000.0	8	0	5	0	0	0	0	0	0	0
25. CH3CHCO		G O	56.06473	300.0	5000.0	4	1	3	0	0	0	0	0	0	0
26. C6H6-I2		G O	78.11472	300.0	5000.0	6	0	6	0	0	0	0	0	0	0
27. C5H8-23		G O	68.11951	300.0	5000.0	8	0	5	0	0	0	0	0	0	0
28. CA3		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
29. CA4		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
30. DM9C6H8O		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
31. DM10C6H8O		G O	96.13006	300.0	5000.0	8	1	6	0	0	0	0	0	0	0
32. C5H7-2s		G O	67.11154	300.0	5000.0	7	0	5	0	0	0	0	0	0	0

33. C5H7-2yne-5p	G 0	67.11154	300.0 5000.0	7 0 5 0 0 0 0
34. C5H8-2	G 0	68.11951	300.0 5000.0	8 0 5 0 0 0 0
35. R2C6H7O	G 0	95.12209	300.0 5000.0	7 1 6 0 0 0 0
36. R3C6H7O	G 0	95.12209	300.0 5000.0	7 1 6 0 0 0 0
37. R4C6H7O	G 0	95.12209	300.0 5000.0	7 1 6 0 0 0 0
38. R5C6H7O	G 0	95.12209	300.0 5000.0	7 1 6 0 0 0 0
39. R6C6H7O	G 0	95.12209	300.0 5000.0	7 1 6 0 0 0 0
40. R7C6H7O	G 0	95.12209	300.0 5000.0	7 1 6 0 0 0 0
41. R8C6H7O	G 0	95.12209	300.0 5000.0	7 1 6 0 0 0 0
42. R9C6H7O	G 0	95.12209	300.0 5000.0	7 1 6 0 0 0 0
43. R10C6H7O	G 0	95.12209	300.0 5000.0	7 1 6 0 0 0 0
44. DM1C6H6O	G 0	94.11412	300.0 5000.0	6 1 6 0 0 0 0
45. DM2C6H6O	G 0	94.11412	300.0 5000.0	6 1 6 0 0 0 0
46. DM3C6H6O	G 0	94.11412	300.0 5000.0	6 1 6 0 0 0 0
47. C5H7-1s	G 0	67.11154	300.0 5000.0	7 0 5 0 0 0 0
48. C5H7Y	G 0	67.11154	300.0 5000.0	7 0 5 0 0 0 0
49. C5H7#Y	G 0	67.11154	300.0 5000.0	7 0 5 0 0 0 0
50. DM5FCH2O	G 0	111.12149	300.0 5000.0	7 2 6 0 0 0 0
51. DMF-CHO	G 0	110.11352	300.0 5000.0	6 2 6 0 0 0 0
52. C6H8O#	G 0	96.13006	300.0 5000.0	8 1 6 0 0 0 0
53. CH3COCHCCCH3	G 0	95.12209	300.0 5000.0	7 1 6 0 0 0 0
54. CH3CCCHCO	G 0	80.08703	300.0 5000.0	4 1 5 0 0 0 0
55. CH3CCCH2CO	G 0	81.09500	300.0 5000.0	5 1 5 0 0 0 0
56. CH2CCCHCO	G 0	79.07906	300.0 5000.0	3 1 5 0 0 0 0
57. CH3CCHCHCO	G 0	81.09500	300.0 5000.0	5 1 5 0 0 0 0
58. DMF-3yIO	G 0	111.12149	300.0 5000.0	7 2 6 0 0 0 0
59. R1C6H9O	G 0	97.13803	300.0 5000.0	9 1 6 0 0 0 0
60. R3C6H9O	G 0	97.13803	300.0 5000.0	9 1 6 0 0 0 0
61. R7C6H9O	G 0	97.13803	300.0 5000.0	9 1 6 0 0 0 0
62. DM5F-2yIO	G 0	97.09440	300.0 5000.0	5 2 5 0 0 0 0
63. CH3COCHCCH2	G 0	82.10297	300.0 5000.0	6 1 5 0 0 0 0
64. CH3CHCCHCO	G 0	81.09500	300.0 5000.0	5 1 5 0 0 0 0
65. CH3CHCCHCHO	G 0	82.10297	300.0 5000.0	6 1 5 0 0 0 0
66. OCHCHCHCCH2	G 0	81.09500	300.0 5000.0	5 1 5 0 0 0 0
67. OCCHCHCHCH2	G 0	81.09500	300.0 5000.0	5 1 5 0 0 0 0
68. DMFH	G 0	83.11094	300.0 5000.0	7 1 5 0 0 0 0
69. CH3CHCHCHCHO	G 0	83.11094	300.0 5000.0	7 1 5 0 0 0 0
70. CH3CH2CHCHCO	G 0	83.11094	300.0 5000.0	7 1 5 0 0 0 0
71. furylCHO	G 0	96.08643	300.0 5000.0	4 2 5 0 0 0 0
72. DMF-CO	G 0	109.10555	300.0 5000.0	5 2 6 0 0 0 0
73. furylCO	G 0	95.07846	300.0 5000.0	3 2 5 0 0 0 0
74. furan	G 0	68.07588	300.0 5000.0	4 1 4 0 0 0 0
75. furyl-2	G 0	67.06791	300.0 5000.0	3 1 4 0 0 0 0
76. furyl-3	G 0	67.06791	300.0 5000.0	3 1 4 0 0 0 0
77. CMF	G 0	82.10297	300.0 5000.0	6 1 5 0 0 0 0
78. furylCH2	G 0	81.09500	300.0 5000.0	5 1 5 0 0 0 0
79. CHCHCHCO	G 0	67.06791	300.0 5000.0	3 1 4 0 0 0 0
80. CHCCHCHO	G 0	67.06791	300.0 5000.0	3 1 4 0 0 0 0
81. CHCCHCO	G 0	66.05994	300.0 5000.0	2 1 4 0 0 0 0
82. CH2CCHCHO	G 0	68.07588	300.0 5000.0	4 1 4 0 0 0 0
83. CHCCH2CHO	G 0	68.07588	300.0 5000.0	4 1 4 0 0 0 0
84. C5H6O	G 0	82.10297	300.0 5000.0	6 1 5 0 0 0 0
85. CH2CHCHCHO	G 0	69.08385	300.0 5000.0	5 1 4 0 0 0 0
86. CHCHCHCHOH	G 0	69.08385	300.0 5000.0	5 1 4 0 0 0 0
87. C4H5O-2	G 0	69.08385	300.0 5000.0	5 1 4 0 0 0 0
88. C4H5O-3	G 0	69.08385	300.0 5000.0	5 1 4 0 0 0 0
89. CHCHCHO	G 0	55.05676	300.0 5000.0	3 1 3 0 0 0 0
90. CH2CHCH2CHO	G 0	70.09182	300.0 5000.0	6 1 4 0 0 0 0
91. C5H8O	G 0	84.11891	300.0 5000.0	8 1 5 0 0 0 0
92. furylCH2O	G 0	97.09440	300.0 5000.0	5 2 5 0 0 0 0
93. furan23H	G 0	70.09182	300.0 5000.0	6 1 4 0 0 0 0
94. furan25H	G 0	70.09182	300.0 5000.0	6 1 4 0 0 0 0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

95. THfuran-2yl	G 0	71.09979	300.0 5000.0	7 1 4 0 0 0 0
96. THfuran-3yl	G 0	71.09979	300.0 5000.0	7 1 4 0 0 0 0
97. THfuran	G 0	72.10776	300.0 5000.0	8 1 4 0 0 0 0
98. naphthalene	G 0	128.17526	200.0 6000.0	8 0 10 0 0 0 0
99. naphthyl	G 0	127.16729	200.0 6000.0	7 0 10 0 0 0 0
100. B1C6H6O	G 0	94.11412	300.0 5000.0	6 1 6 0 0 0 0
101. DM4C6H6O	G 0	94.11412	300.0 5000.0	6 1 6 0 0 0 0
102. DM5C6H6O	G 0	94.11412	300.0 5000.0	6 1 6 0 0 0 0
103. cC3H4	G 0	40.06533	300.0 5000.0	4 0 3 0 0 0 0
104. C4H4	G 0	52.07648	300.0 3000.0	4 0 4 0 0 0 0
105. tC4H4	G 0	52.07648	300.0 5000.0	4 0 4 0 0 0 0
106. C4H6Z2	G 0	54.09242	300.0 3000.0	6 0 4 0 0 0 0
107. C4H6-12	G 0	54.09242	300.0 5000.0	6 0 4 0 0 0 0
108. C4H6-1	G 0	54.09242	300.0 5000.0	6 0 4 0 0 0 0
109. C4H6-2	G 0	54.09242	300.0 3000.0	6 0 4 0 0 0 0
110. cC4H6	G 0	54.09242	300.0 5000.0	6 0 4 0 0 0 0
111. C4H8Y	G 0	56.10836	200.0 6000.0	8 0 4 0 0 0 0
112. iC4H8	G 0	56.10836	200.0 6000.0	8 0 4 0 0 0 0
113. C4H10	G 0	58.12430	200.0 6000.0	10 0 4 0 0 0 0
114. C5H8	G 0	68.11951	300.0 5000.0	8 0 5 0 0 0 0
115. iC5H8	G 0	68.11951	300.0 5000.0	8 0 5 0 0 0 0
116. iC5H10	G 0	70.13545	300.0 5000.0	10 0 5 0 0 0 0
117. C5H10	G 0	70.13545	300.0 5000.0	10 0 5 0 0 0 0
118. C5H8#	G 0	68.11951	300.0 5000.0	8 0 5 0 0 0 0
119. C5H6#	G 0	66.10357	300.0 5000.0	6 0 5 0 0 0 0
120. C6H6#	G 0	78.11472	300.0 5000.0	6 0 6 0 0 0 0
121. toluene	G 0	92.14181	300.0 5000.0	8 0 7 0 0 0 0
122. DMCP	G 0	82.14660	300.0 5000.0	10 0 6 0 0 0 0
123. DMCPD	G 0	80.13066	300.0 5000.0	8 0 6 0 0 0 0
124. C5H4O#	G 0	80.08703	200.0 6000.0	4 1 5 0 0 0 0
125. B1O	G 0	15.99940	200.0 6000.0	0 1 0 0 0 0 0
126. B3C	G 0	12.01115	200.0 6000.0	0 0 1 0 0 0 0
127. B4CH	G 0	13.01912	200.0 6000.0	1 0 1 0 0 0 0
128. CH*	G 0	13.01912	300.0 5000.0	1 0 1 0 0 0 0
129. B5CH2	G 0	14.02709	200.0 6000.0	2 0 1 0 0 0 0
130. B6CH2	G 0	14.02709	200.0 6000.0	2 0 1 0 0 0 0
131. H2CC	G 0	26.03824	200.0 6000.0	2 0 2 0 0 0 0
132. H2O	G 0	18.01534	200.0 6000.0	2 1 0 0 0 0 0
133. O2	G 0	31.99880	200.0 6000.0	0 2 0 0 0 0 0
134. H2O2	G 0	34.01474	200.0 6000.0	2 2 0 0 0 0 0
135. HCHO	G 0	30.02649	200.0 6000.0	2 1 1 0 0 0 0
136. CH3OH	G 0	32.04243	200.0 6000.0	4 1 1 0 0 0 0
137. CH3OOH	G 0	48.04183	200.0 6000.0	4 2 1 0 0 0 0
138. C2H6	G 0	30.07012	200.0 6000.0	6 0 2 0 0 0 0
139. CH2COZ	G 0	42.03764	200.0 6000.0	2 1 2 0 0 0 0
140. CH3CHO	G 0	44.05358	200.0 6000.0	4 1 2 0 0 0 0
141. C2H5OH	G 0	46.06952	200.0 6000.0	6 1 2 0 0 0 0
142. C2H5OOH	G 0	62.06892	300.0 5000.0	6 2 2 0 0 0 0
143. CH3COOOH	G 0	76.05238	300.0 5000.0	4 3 2 0 0 0 0
144. C3H6Y	G 0	42.08127	200.0 6000.0	6 0 3 0 0 0 0
145. cC3H6	G 0	42.08127	300.0 5000.0	6 0 3 0 0 0 0
146. C3H8	G 0	44.09721	200.0 6000.0	8 0 3 0 0 0 0
147. C2H6CO	G 0	58.08067	200.0 6000.0	6 1 3 0 0 0 0
148. C2H5CHO	G 0	58.08067	200.0 6000.0	6 1 3 0 0 0 0
149. C2H3CHOZ	G 0	56.06473	300.0 5000.0	4 1 3 0 0 0 0
150. HCCOH	G 0	42.03764	200.0 6000.0	2 1 2 0 0 0 0
151. HO2CHO	G 0	62.02529	300.0 5000.0	2 3 1 0 0 0 0
152. HOCHO	G 0	46.02589	200.0 6000.0	2 2 1 0 0 0 0
153. HOCH2O2H	G 0	64.04123	300.0 5000.0	4 3 1 0 0 0 0
154. CH3OCH3	G 0	46.06952	300.0 5000.0	6 1 2 0 0 0 0
155. C3H6O3	G 0	90.07947	300.0 5000.0	6 3 3 0 0 0 0
156. HO2CH2OCHO	G 0	92.05178	300.0 5000.0	4 4 2 0 0 0 0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

157. CH3OCH2O2H	G 0	78.06832	300.0 5000.0	6 3 2 0 0 0 0
158. CH3OCHO	G 0	60.05298	200.0 6000.0	4 2 2 0 0 0 0
159. C2H4O#3	G 0	44.05358	200.0 6000.0	4 1 2 0 0 0 0
160. R1H	G 0	1.00797	200.0 6000.0	1 0 0 0 0 0 0
161. R2OH	G 0	17.00737	200.0 6000.0	1 1 0 0 0 0 0
162. OH*	G 0	17.00737	300.0 5000.0	1 1 0 0 0 0 0
163. OHE	G 0	17.00737	300.0 5000.0	1 1 0 0 0 0 0
164. CHE	G 0	13.01912	300.0 5000.0	1 0 1 0 0 0 0
165. R3OOH	G 0	33.00677	200.0 5000.0	1 2 0 0 0 0 0
166. R4CH3	G 0	15.03506	200.0 6000.0	3 0 1 0 0 0 0
167. R5CHO	G 0	29.01852	200.0 6000.0	1 1 1 0 0 0 0
168. R6CH2OH	G 0	31.03446	200.0 6000.0	3 1 1 0 0 0 0
169. R7CH3O	G 0	31.03446	200.0 6000.0	3 1 1 0 0 0 0
170. R8CH3OO	G 0	47.03386	300.0 5000.0	3 2 1 0 0 0 0
171. R9C2HT	G 0	25.03027	200.0 6000.0	1 0 2 0 0 0 0
172. R10C2H3V	G 0	27.04621	200.0 6000.0	3 0 2 0 0 0 0
173. R11C2H5	G 0	29.06215	300.0 5000.0	5 0 2 0 0 0 0
174. R12CHCOV	G 0	41.02967	200.0 6000.0	1 1 2 0 0 0 0
175. R13CH2CHO	G 0	43.04561	200.0 6000.0	3 1 2 0 0 0 0
176. R14CH3CO	G 0	43.04561	200.0 6000.0	3 1 2 0 0 0 0
177. R15C2H5O	G 0	45.06155	200.0 6000.0	5 1 2 0 0 0 0
178. R16C2H4OOH	G 0	61.06095	300.0 5000.0	5 2 2 0 0 0 0
179. R17C2H5OO	G 0	61.06095	200.0 6000.0	5 2 2 0 0 0 0
180. R18CH3COOO	G 0	75.04441	300.0 5000.0	3 3 2 0 0 0 0
181. R19C3H7	G 0	43.08924	300.0 5000.0	7 0 3 0 0 0 0
182. R20C4H9	G 0	57.11633	200.0 6000.0	9 0 4 0 0 0 0
183. R21CH3OCO	G 0	59.04501	200.0 6000.0	3 2 2 0 0 0 0
184. R23C2H4OH	G 0	45.06155	200.0 6000.0	5 1 2 0 0 0 0
185. R24C2H4OH	G 0	45.06155	200.0 6000.0	5 1 2 0 0 0 0
186. RO2CHO	G 0	61.01732	300.0 5000.0	1 3 1 0 0 0 0
187. ROCHO	G 0	45.01792	200.0 6000.0	1 2 1 0 0 0 0
188. RHOCH2O2	G 0	63.03326	300.0 5000.0	3 3 1 0 0 0 0
189. RCH3CO2	G 0	59.04501	300.0 5000.0	3 2 2 0 0 0 0
190. ROCH2O2H	G 0	63.03326	300.0 5000.0	3 3 1 0 0 0 0
191. RHOCH2O	G 0	47.03386	300.0 5000.0	3 2 1 0 0 0 0
192. RCH3COCH2	G 0	57.07270	200.0 6000.0	5 1 3 0 0 0 0
193. RO2C2H4OH	G 0	77.06035	300.0 5000.0	5 3 2 0 0 0 0
194. RCH3OCH2	G 0	45.06155	300.0 5000.0	5 1 2 0 0 0 0
195. RCH3OCH2O	G 0	61.06095	300.0 5000.0	5 2 2 0 0 0 0
196. RCH2CHCO	G 0	55.05676	200.0 6000.0	3 1 3 0 0 0 0
197. RC2H3O#3	G 0	43.04561	200.0 6000.0	3 1 2 0 0 0 0
198. RCH3COCH2O2	G 0	89.07150	300.0 5000.0	5 3 3 0 0 0 0
199. RCH3OCH2O2	G 0	77.06035	300.0 5000.0	5 3 2 0 0 0 0
200. RCH2OCH2O2H	G 0	77.06035	300.0 5000.0	5 3 2 0 0 0 0
201. RO2CH2OCH2O2H	G 0	109.05915	300.0 5000.0	5 5 2 0 0 0 0
202. ROCH2OCHO	G 0	75.04441	300.0 5000.0	3 3 2 0 0 0 0
203. RHOCH2OCO	G 0	75.04441	300.0 5000.0	3 3 2 0 0 0 0
204. RCH2OCHO	G 0	59.04501	300.0 5000.0	3 2 2 0 0 0 0
205. pC3H4	G 0	40.06533	200.0 6000.0	4 0 3 0 0 0 0
206. aC3H4	G 0	40.06533	200.0 6000.0	4 0 3 0 0 0 0
207. RC3H5Y	G 0	41.07330	300.0 3000.0	5 0 3 0 0 0 0
208. tC3H5	G 0	41.07330	300.0 3000.0	5 0 3 0 0 0 0
209. sC3H5	G 0	41.07330	300.0 3000.0	5 0 3 0 0 0 0
210. RC3H5O	G 0	57.07270	200.0 6000.0	5 1 3 0 0 0 0
211. C3H3	G 0	39.05736	200.0 6000.0	3 0 3 0 0 0 0
212. C4H2	G 0	50.06054	300.0 5000.0	2 0 4 0 0 0 0
213. C3H2	G 0	38.04939	200.0 6000.0	2 0 3 0 0 0 0
214. iC3H7	G 0	43.08924	200.0 6000.0	7 0 3 0 0 0 0
215. nC4H3	G 0	51.06851	300.0 5000.0	3 0 4 0 0 0 0
216. iC4H3	G 0	51.06851	300.0 5000.0	3 0 4 0 0 0 0
217. nC4H5	G 0	53.08445	300.0 5000.0	5 0 4 0 0 0 0
218. iC4H5	G 0	53.08445	300.0 5000.0	5 0 4 0 0 0 0
219. C4H5-1s	G 0	53.08445	300.0 5000.0	5 0 4 0 0 0 0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

220. C4H5-1p	G 0	53.08445	300.0 5000.0	5 0 4 0 0 0 0
221. C4H5-2	G 0	53.08445	300.0 3000.0	5 0 4 0 0 0 0
222. C6H2	G 0	74.08284	300.0 3000.0	2 0 6 0 0 0 0
223. IC6H5	G 0	77.10675	300.0 5000.0	5 0 6 0 0 0 0
224. IC6H7	G 0	79.12269	300.0 5000.0	7 0 6 0 0 0 0
225. IC6H4	G 0	76.09878	300.0 5000.0	4 0 6 0 0 0 0
226. C6H5#	G 0	77.10675	300.0 5000.0	5 0 6 0 0 0 0
227. C6H7#	G 0	79.12269	300.0 5000.0	7 0 6 0 0 0 0
228. IC6H8	G 0	80.13066	200.0 6000.0	8 0 6 0 0 0 0
229. C6H8#	G 0	80.13066	300.0 5000.0	8 0 6 0 0 0 0
230. C6H9Z#	G 0	81.13863	300.0 5000.0	9 0 6 0 0 0 0
231. C6H10#	G 0	82.14660	300.0 5000.0	10 0 6 0 0 0 0
232. C4H7-1	G 0	55.10039	300.0 5000.0	7 0 4 0 0 0 0
233. C4H7-2	G 0	55.10039	300.0 5000.0	7 0 4 0 0 0 0
234. C4H7Y	G 0	55.10039	300.0 5000.0	7 0 4 0 0 0 0
235. C4H7T	G 0	55.10039	300.0 5000.0	7 0 4 0 0 0 0
236. iC4H7	G 0	55.10039	200.0 6000.0	7 0 4 0 0 0 0
237. C4H7V	G 0	55.10039	300.0 5000.0	7 0 4 0 0 0 0
238. iC5H7Y	G 0	67.11154	300.0 5000.0	7 0 5 0 0 0 0
239. C5H9Y	G 0	69.12748	300.0 5000.0	9 0 5 0 0 0 0
240. iC5H9	G 0	69.12748	300.0 5000.0	9 0 5 0 0 0 0
241. iC5H9Y	G 0	69.12748	300.0 5000.0	9 0 5 0 0 0 0
242. cC3H3	G 0	39.05736	300.0 5000.0	3 0 3 0 0 0 0
243. C8H10#	G 0	106.16890	300.0 5000.0	10 0 8 0 0 0 0
244. C4H4O	G 0	68.07588	200.0 6000.0	4 1 4 0 0 0 0
245. C5H5OH#	G 0	82.10297	200.0 6000.0	6 1 5 0 0 0 0
246. C6H5OH#	G 0	94.11412	300.0 5000.0	6 1 6 0 0 0 0
247. OC6H4O	G 0	108.09758	300.0 5000.0	4 2 6 0 0 0 0
248. C6H5#C2H	G 0	102.13702	200.0 6000.0	6 0 8 0 0 0 0
249. etC6H5	G 0	106.16890	300.0 5000.0	10 0 8 0 0 0 0
250. styrene	G 0	104.15296	300.0 5000.0	8 0 8 0 0 0 0
251. C6H5CHO	G 0	106.12527	300.0 5000.0	6 1 7 0 0 0 0
252. biphenyl	G 0	154.21350	300.0 5000.0	10 0 12 0 0 0 0
253. C5H5#	G 0	65.09560	300.0 2000.0	5 0 5 0 0 0 0
254. IC5H5	G 0	65.09560	300.0 5000.0	5 0 5 0 0 0 0
255. C5H3O#	G 0	79.07906	300.0 5000.0	3 1 5 0 0 0 0
256. C5H5O#	G 0	81.09500	200.0 6000.0	5 1 5 0 0 0 0
257. C5H4OH#	G 0	81.09500	200.0 6000.0	5 1 5 0 0 0 0
258. C6H5O#	G 0	93.10615	300.0 5000.0	5 1 6 0 0 0 0
259. C6H5O2	G 0	109.10555	200.0 6000.0	5 2 6 0 0 0 0
260. C6H4OH#	G 0	93.10615	300.0 5000.0	5 1 6 0 0 0 0
261. OC6H4OH	G 0	109.10555	300.0 5000.0	5 2 6 0 0 0 0
262. HOC6H4CH3	G 0	108.14121	300.0 5000.0	8 1 7 0 0 0 0
263. C6H4OHCHO	G 0	122.12467	300.0 5000.0	6 2 7 0 0 0 0
264. C6H5CH2OH	G 0	108.14121	300.0 5000.0	8 1 7 0 0 0 0
265. C6H5CH2OOH	G 0	124.14061	300.0 5000.0	8 2 7 0 0 0 0
266. bibenzyl	G 0	182.26768	300.0 5000.0	14 0 14 0 0 0 0
267. benzyl	G 0	91.13384	300.0 5000.0	7 0 7 0 0 0 0
268. C6H4CH3	G 0	91.13384	300.0 5000.0	7 0 7 0 0 0 0
269. C6H4OHCO	G 0	121.11670	300.0 5000.0	5 2 7 0 0 0 0
270. HOC6H4CH2OO	G 0	139.13204	300.0 5000.0	7 3 7 0 0 0 0
271. OC6H4CH3	G 0	107.13324	300.0 5000.0	7 1 7 0 0 0 0
272. HOC6H4CH2	G 0	107.13324	300.0 5000.0	7 1 7 0 0 0 0
273. C6H5CO	G 0	105.11730	300.0 5000.0	5 1 7 0 0 0 0
274. C6H5CHOH	G 0	107.13324	300.0 5000.0	7 1 7 0 0 0 0
275. C6H5CH2O	G 0	107.13324	300.0 5000.0	7 1 7 0 0 0 0
276. HOC6H4CH2O	G 0	123.13264	300.0 5000.0	7 2 7 0 0 0 0
277. C6H5CH2OO	G 0	123.13264	300.0 5000.0	7 2 7 0 0 0 0
278. C8H9#	G 0	105.16093	300.0 5000.0	9 0 8 0 0 0 0
279. C8H9#-1	G 0	105.16093	300.0 5000.0	9 0 8 0 0 0 0
280. C6H5C2H2	G 0	103.14499	300.0 5000.0	7 0 8 0 0 0 0
281. bicycle	G 0	93.10615	300.0 5000.0	5 1 6 0 0 0 0

282. C5H8-12	G 0	68.11951	300.0 5000.0	8 0 5 0 0 0 0
283. C5H7#	G 0	67.11154	300.0 5000.0	7 0 5 0 0 0 0
284. C5H7#V	G 0	67.11154	300.0 5000.0	7 0 5 0 0 0 0
285. C5H9#	G 0	69.12748	300.0 5000.0	9 0 5 0 0 0 0
286. C5H9	G 0	69.12748	300.0 5000.0	9 0 5 0 0 0 0
287. RMCP1	G 0	81.13863	300.0 5000.0	9 0 6 0 0 0 0
288. RMCP2	G 0	81.13863	300.0 5000.0	9 0 6 0 0 0 0
289. RMCPY1	G 0	81.13863	300.0 5000.0	9 0 6 0 0 0 0
290. RMCPY2	G 0	81.13863	300.0 5000.0	9 0 6 0 0 0 0
291. RMCPD	G 0	79.12269	300.0 5000.0	7 0 6 0 0 0 0
292. RMCPDY	G 0	79.12269	300.0 5000.0	7 0 6 0 0 0 0
293. CH3CF3	G 0	84.04141	300.0 5000.0	3 0 2 0 0 0 3
294. CH2CF2	G 0	64.03504	300.0 5000.0	2 0 2 0 0 0 2
295. HF	G 0	20.00637	300.0 5000.0	1 0 0 0 0 0 1
296. HNO	G 0	31.01407	300.0 5000.0	1 1 0 1 0 0 0
297. NO2	G 0	46.00550	300.0 5000.0	0 2 0 1 0 0 0
298. NO3	G 0	62.00490	300.0 5000.0	0 3 0 1 0 0 0
299. HONO	G 0	47.01347	300.0 5000.0	1 2 0 1 0 0 0
300. H2NO	G 0	32.02204	300.0 4000.0	2 1 0 1 0 0 0
301. NH3	G 0	17.03061	300.0 5000.0	3 0 0 1 0 0 0
302. NH2	G 0	16.02264	300.0 5000.0	2 0 0 1 0 0 0
303. N2O	G 0	44.01280	300.0 5000.0	0 1 0 2 0 0 0
304. N2H2	G 0	30.02934	300.0 5000.0	2 0 0 2 0 0 0
305. NH	G 0	15.01467	300.0 5000.0	1 0 0 1 0 0 0
306. NNH	G 0	29.02137	250.0 4000.0	1 0 0 2 0 0 0
307. CN	G 0	26.01785	300.0 5000.0	0 0 1 1 0 0 0
308. HCN	G 0	27.02582	300.0 4000.0	1 0 1 1 0 0 0
309. NCO	G 0	42.01725	300.0 4000.0	0 1 1 1 0 0 0
310. HOCN	G 0	43.02522	300.0 4000.0	1 1 1 1 0 0 0
311. HNCO	G 0	43.02522	300.0 4000.0	1 1 1 1 0 0 0
312. C2N2	G 0	52.03570	300.0 5000.0	0 0 2 2 0 0 0
313. NCN	G 0	40.02455	300.0 4000.0	0 0 1 2 0 0 0
314. HCO	G 0	29.01852	300.0 5000.0	1 1 1 0 0 0 0
315. CH3CN	G 0	41.05291	300.0 3000.0	3 0 2 1 0 0 0
316. CH2CN	G 0	40.04494	300.0 3000.0	2 0 2 1 0 0 0
317. H2CN	G 0	28.03379	300.0 4000.0	2 0 1 1 0 0 0
318. CH2O	G 0	30.02649	300.0 5000.0	2 1 1 0 0 0 0
319. HCNO	G 0	43.02522	250.0 4000.0	1 1 1 1 0 0 0
320. HONO2	G 0	63.01287	300.0 4000.0	1 3 0 1 0 0 0
321. HNOH	G 0	32.02204	300.0 4000.0	2 1 0 1 0 0 0
322. N	G 0	14.00670	300.0 5000.0	0 0 0 1 0 0 0
323. CH3NO	G 0	45.04116	300.0 4000.0	3 1 1 1 0 0 0

(k = A T**n exp(-E/RT))				
REACTIONS CONSIDERED	A	n	E	
1. DMF=DM5F-2yl+R4CH3	2.60E+16	0.0	110532.1	
2. R1C6H7O+R1H(+M)=DMF(+M)	6.55E+13	0.1	-51.5	
Low pressure limit: 0.30300+137 -0.33350E+02 0.55560E+05				
TROE centering: 0.16300E+00 0.71400E+03 0.72800E+03 0.51120E+04				
3. DMF-3yl+R1H(+M)=DMF(+M)	1.00E+14	0.0	0.0	
Low pressure limit: 0.10000E+95 -0.21840E+02 0.13900E+05				
TROE centering: 0.43000E-01 0.30400E+03 0.60000E+05 0.58960E+04				
O2	Enhanced by	4.000E-01		
CO	Enhanced by	7.500E-01		
CO2	Enhanced by	1.500E+00		
H2O	Enhanced by	6.500E+00		
AR	Enhanced by	3.500E-01		
C6H6#	Enhanced by	3.000E+00		
4. DMF=DM4C6H8O	8.62E+72	-16.9	108602.0	
5. DMF=CA1	6.54E+10	0.8	81420.0	

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

6. CA1=CH3CHCO+pC3H4	8.52E+13	0.3	31670.0
7. CA1=DM2C6H8O	1.02E+12	0.3	7795.0
8. CA1=B1	4.69E+13	0.0	30862.0
9. B1=CH3CHCO+pC3H4	1.67E+13	0.1	10853.0
10. B1=B3+CO	3.61E+13	0.2	10537.0
11. B3=C5H8	3.65E+05	1.8	7927.0
Declared duplicate reaction...			
12. B3=C5H8	7.25E+06	1.6	7530.0
Declared duplicate reaction...			
13. B3=C5H8-12	1.50E+05	2.0	22542.0
14. CH3CHCO+R1H=RCH2CHCO+H2	1.70E+05	2.5	2500.0
15. CH3CHCO+R2OH=RCH2CHCO+H2O	3.10E+06	2.0	-300.0
16. CH3CHCO+R1H=R11C2H5+CO	7.77E+08	1.4	2780.0
17. CH3CHCO+R2OH=R24C2H4OH+CO	2.00E+12	0.0	-1010.0
18. DMF=B2	4.85E+13	0.5	82727.0
19. B2=DM3C6H8O	1.41E+12	0.0	1610.0
20. B2=DM5C6H8O	1.60E+09	1.0	9294.0
21. B2=DM6C6H8O	6.74E+08	0.9	1230.0
22. DM6C6H8O=C6H6-l2+H2O	1.20E+08	1.5	75786.0
23. DM6C6H8O=>C6H6-l2+R2OH+R1H	3.61E+14	0.0	81632.2
24. C6H6-l2+R1H=aC3H4+C3H3	2.40E+11	0.7	3000.0
25. DM3C6H8O=DM2C6H8O	9.60E+08	1.2	41665.0
26. DM5C6H8O=R14CH3CO+nC4H5	7.44E+16	0.0	86909.9
27. DMF+O2=R1C6H7O+R3OOH	4.20E+12	0.0	36800.0
28. DMF+O2=DMF-3yl+R3OOH	2.00E+13	0.0	71600.0
29. R14CH3CO+C4H5-1s(+M)=DM4C6H8O(+M)	2.00E+13	0.0	0.0
Low pressure limit: 0.67500E+84 -0.19220E+02 0.14980E+05			
TROE centering: 0.73500E+00 0.60000E+05 0.51300E+03 0.10000E+06			
30. DM4C6H8O=CH2COZ+C4H6-12	9.25E+08	1.2	77070.0
31. DM4C6H8O=CH2COZ+C4H6-1	5.42E+07	1.8	65550.0
32. DM2C6H8O=CA4	7.89E+10	0.8	82894.0
33. CA4=CH3CHCO+pC3H4	1.87E+14	0.2	32181.0
34. DM2C6H8O=CA3	3.82E+11	0.6	69588.0
35. CA3=DM9C6H8O	7.69E+12	0.0	323.0
36. DM9C6H8O=C5H8-2+CO	4.44E+08	1.2	37544.0
37. C5H8-2+R1H=C5H7-2s+H2	1.13E+05	2.5	2490.0
38. DM9C6H8O=C5H7-2s+R5CHO	6.19E+16	0.0	68633.4
39. C5H7-2yne-5p=C5H7-2s	1.50E+67	-16.9	59100.0
40. C5H7-2yne-5p=C2H4Z+C3H3	3.30E+13	0.0	22500.0
41. DMF+R1H=R1C6H7O+H2	3.10E+05	2.7	3434.0
42. DMF+B1O=R1C6H7O+R2OH	3.50E+11	0.7	5900.0
43. DMF+R2OH=R1C6H7O+H2O	1.01E+04	3.1	2155.9
44. DMF+R10C2H3V=R1C6H7O+C2H4Z	4.42E+00	3.5	4690.0
45. DMF+R3OOH=R1C6H7O+H2O2	1.90E+04	2.6	13900.0
46. DMF+R4CH3=R1C6H7O+CH4	6.99E+01	3.4	7083.6
47. DMF+C5H5#=R1C6H7O+C5H6#	1.37E+00	3.9	14370.0
48. DMF+RC3H5Y=R1C6H7O+C3H6Y	1.37E+00	3.9	14370.0
49. DMF+C5H7#Y=R1C6H7O+C5H8#	1.37E+00	3.9	14370.0
50. DMF+R4C6H7O=R1C6H7O+C6H8O#	1.37E+00	3.9	14370.0
51. DMF+iC4H5=R1C6H7O+C4H6Z2	1.37E+00	3.9	14370.0
52. DMF+iC4H3=R1C6H7O+C4H4	1.37E+00	3.9	14370.0
53. R1C6H7O=R2C6H7O	2.26E+70	-16.3	72605.0
54. R2C6H7O=R3C6H7O	1.32E+39	-8.1	33755.0
55. R3C6H7O=R4C6H7O	5.46E+24	-3.9	15278.0
56. R3C6H7O=R5C6H7O	6.90E+37	-7.5	29831.0
57. R4C6H7O=DM2C6H6O+R1H	2.92E+85	-20.6	90371.0
58. R4C6H7O=R6C6H7O	4.93E+79	-19.2	84873.0
59. R4C6H7O=R9C6H7O	7.47E+84	-20.6	90140.0
60. R5C6H7O=C5H7Y+CO	3.31E+18	-2.0	8335.0
61. R6C6H7O=DM2C6H6O+R1H	6.52E+48	-10.5	51890.0
62. R6C6H7O=DM3C6H6O+R1H	1.62E+45	-9.4	47815.0
63. R6C6H7O=R7C6H7O	2.02E+35	-6.6	35635.0

64.	R7C6H7O=C5H7-1s+CO	5.82E+29	-5.1	29918.0
65.	R9C6H7O=C5H7#Y+CO	2.13E+24	-4.0	16361.0
66.	R4C6H7O+R1H=DM2C6H6O+H2	1.00E+14	0.0	0.0
67.	R4C6H7O+R1H=C6H8O#	1.00E+14	0.0	0.0
68.	C6H8O#+R1H=H2+R4C6H7O	5.40E+04	2.5	-1900.0
69.	C6H8O#+R2OH=H2O+R4C6H7O	3.00E+06	2.0	-1520.0
70.	C6H8O#+R4CH3=R4C6H7O+CH4	1.00E+11	0.0	7300.0
71.	C6H8O#=C2H4Z+C4H4O	5.44E+98	-24.0	128452.0
72.	R1C6H7O+R3OOH=DM5FCH2O+R2OH	5.00E+12	0.0	0.0
73.	R1C6H7O+O2=DM5FCH2O+B1O	6.30E+12	0.0	40000.0
74.	DM5FCH2O=R1H+DMF-CHO	2.00E+13	0.0	27500.0
75.	DM5FCH2O=DM5F-2yl+HCHO	2.00E+13	0.0	27500.0
76.	DM5FCH2O+O2=DMF-CHO+R3OOH	6.00E+10	0.0	1600.0
77.	R4C6H7O+O2=DM2C6H6O+R3OOH	1.58E+12	0.0	15200.0
78.	DMF+R1H=DMF-3yl+H2	8.20E+05	2.5	12280.0
79.	DMF+R2OH=DMF-3yl+H2O	3.93E+04	2.7	7691.7
80.	DMF+R4CH3=DMF-3yl+CH4	1.36E+00	3.5	12900.0
81.	DMF-3yl=CH3COCHCCCH3	1.10E+13	0.3	31200.0
82.	CH3COCHCCCH3=CH3CCCHCO+R4CH3	1.31E+15	0.0	54116.0
83.	CH3CCCHCO+R1H=CH3CCCH2CO	1.32E+13	0.0	3260.0
84.	CH3CCCH2CO=CO+C4H5-2	2.00E+13	0.0	13800.0
85.	CH3CCCH2CO+O2=CH3CCCHCO+R3OOH	2.60E+11	0.0	2500.0
86.	CH2CCCHCO+R1H=CH3CCCHCO	5.80E+13	0.2	-130.0
87.	CH3CCCHCO+R1H=H2+CH2CCCHCO	1.74E+05	2.5	2510.0
88.	CH3CCCHCO+R2OH=H2O+CH2CCCHCO	3.00E+06	2.0	-298.0
89.	CH3CCCHCO+R4CH3=CH4+CH2CCCHCO	2.20E+00	3.5	5670.0
90.	CH2CCCHCO=CO+iC4H3	1.36E+14	0.1	25979.0
91.	DMF-3yl+O2=DMF-3ylO+B1O	2.60E+13	0.0	6100.0
92.	DMF-3ylO=pC3H4+CO+R14CH3CO	8.10E+12	0.2	34925.0
93.	DMF+R2OH=>R14CH3CO+CH3CHO+C2H2T	7.95E+12	0.0	-665.0
94.	DMF+R1H=CMF+R4CH3	2.32E+22	-2.3	13215.5
95.	DMF+R1H=R14CH3CO+C4H6Z2	1.72E+53	-11.0	35043.0
96.	C6H5O#+R1H(+M)=DM2C6H6O(+M)	1.00E+14	0.0	0.0
Low pressure limit: 0.10000E+95 -0.21840E+02 0.13900E+05				
TROE centering: 0.43000E-01 0.30400E+03 0.60000E+05 0.58960E+04				
	O2	Enhanced by	4.000E-01	
	CO	Enhanced by	7.500E-01	
	CO2	Enhanced by	1.500E+00	
	H2O	Enhanced by	6.500E+00	
	AR	Enhanced by	3.500E-01	
	C6H6#	Enhanced by	3.000E+00	
97.	C6H5O#+R1H(+M)=DM3C6H6O(+M)	1.00E+14	0.0	0.0
Low pressure limit: 0.10000E+95 -0.21840E+02 0.13900E+05				
TROE centering: 0.43000E-01 0.30400E+03 0.60000E+05 0.58960E+04				
	O2	Enhanced by	4.000E-01	
	CO	Enhanced by	7.500E-01	
	CO2	Enhanced by	1.500E+00	
	H2O	Enhanced by	6.500E+00	
	AR	Enhanced by	3.500E-01	
	C6H6#	Enhanced by	3.000E+00	
98.	DM2C6H6O+R1H=C6H5O#+H2	1.20E+08	1.7	2540.0
99.	DM2C6H6O+R2OH=C6H5O#+H2O	3.00E+06	2.0	-1520.0
100.	DM2C6H6O+B1O=C6H5O#+R2OH	8.80E+10	0.7	3250.0
101.	DM2C6H6O+R4CH3=C6H5O#+CH4	1.00E+11	0.0	7300.0
102.	DM2C6H6O+R10C2H3V=C6H5O#+C2H4Z	2.21E+00	3.5	4690.0
103.	DM2C6H6O+RC3H5=C6H5O#+C3H6Y	4.90E+11	0.0	9400.0
104.	DM2C6H6O+C3H3=C6H5O#+aC3H4	2.50E+11	0.0	9400.0
105.	DM2C6H6O+C3H3=C6H5O#+pC3H4	2.50E+11	0.0	9400.0
106.	DM2C6H6O+C5H5#=C6H5O#+C5H6#	4.90E+11	0.0	9400.0
107.	DM2C6H6O+R4C6H7O=C6H5O#+C6H8O#	4.90E+11	0.0	9400.0
108.	DM2C6H6O+iC4H3=C6H5O#+C4H4	4.90E+11	0.0	9400.0
109.	DM2C6H6O+iC4H5=C6H5O#+C4H6Z2	4.90E+11	0.0	9400.0
110.	DM3C6H6O+R1H=C6H5O#+H2	2.40E+08	1.7	2540.0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

111.	DM3C6H6O+R2OH=H2O+C6H5O#	3.00E+06	2.0	-1520.0
112.	DM3C6H6O+B1O=C6H5O#+R2OH	8.80E+10	0.7	3250.0
113.	DM3C6H6O+R4CH3=C6H5O#+CH4	1.00E+11	0.0	7300.0
114.	DM3C6H6O+R10C2H3V=C6H5O#+C2H4Z	2.21E+00	3.5	4690.0
115.	DM3C6H6O+RC3H5Y=C6H5O#+C3H6Y	4.90E+11	0.0	9400.0
116.	DM3C6H6O+C3H3=C6H5O#+aC3H4	2.50E+11	0.0	9400.0
117.	DM3C6H6O+C3H3=C6H5O#+pC3H4	2.50E+11	0.0	9400.0
118.	DM3C6H6O+C5H5=C6H5O#+C5H6#	4.90E+11	0.0	9400.0
119.	DM3C6H6O+R4C6H7O=C6H5O#+C6H8O#	4.90E+11	0.0	9400.0
120.	DM3C6H6O+iC4H3=C6H5O#+C4H4	4.90E+11	0.0	9400.0
121.	DM3C6H6O+iC4H5=C6H5O#+C4H6Z2	4.90E+11	0.0	9400.0
122.	DM2C6H6O=B1C6H6O	8.11E+63	-14.5	75948.0
123.	DM3C6H6O=B1C6H6O	6.92E+64	-14.5	77116.0
124.	DM2C6H6O=C6H5OH#	7.46E+74	-17.7	90359.0
125.	DM2C6H6O=DM5C6H6O	4.06E+57	-12.6	67450.0
126.	DM3C6H6O=C4H4O+C2H2T	2.06+105	-26.2	127274.0
127.	B1C6H6O=DM4C6H6O	1.50E+19	-1.9	8585.0
128.	DM4C6H6O=C5H6#+CO	3.39E+53	-11.7	51575.0
129.	DM5C6H6O=C5H6#+CO	7.99E+65	-15.9	70413.0
130.	CMF=CH3COCHCCH2	2.29E+12	0.4	70891.0
131.	CMF=CH3CHCCHCHO	2.46E+11	0.7	68712.0
132.	R14CH3CO+C3H3=CH3COCHCCH2	4.04E+15	-0.8	0.0
133.	CH3CHCCHCHO=C4H5-1s+R5CHO	7.90E+14	0.0	69880.0
134.	CH3CHCCHCHO=CO+C4H6-1	6.80E+11	0.4	44231.0
135.	CH3CHCCHCHO+R1H=H2+CH3CHCCHCO	4.00E+13	0.0	4200.0
136.	CH3CHCCHCHO+R2OH=H2O+CH3CHCCHCO	4.20E+12	0.0	500.0
137.	CH3CHCCHCHO+R4CH3=CH3CHCCHCO+CH4	2.00E-06	5.6	2500.0
138.	CH3CHCCHCO=C4H5-1s+CO	6.00E+12	0.3	12300.0
139.	CMF+R1H=furylCH2+H2	7.00E+04	2.7	3434.0
140.	CMF+B1O=furylCH2+R2OH	1.75E+11	0.7	5900.0
141.	CMF+R2OH=furylCH2+H2O	5.10E+03	3.1	2155.9
142.	CMF+R3OOH=furylCH2+H2O2	9.50E+03	2.6	13900.0
143.	CMF+R4CH3=furylCH2+CH4	7.00E+01	3.4	7083.6
144.	CMF+C5H5#=furylCH2+C5H6#	6.86E-01	3.9	14370.0
145.	CMF+RC3H5Y=furylCH2+C3H6Y	6.86E-01	3.9	14370.0
146.	CMF+C5H7#Y=furylCH2+C5H8	6.86E-01	3.9	14370.0
147.	CMF+R1H=DM5F-2yl+H2	8.20E+05	2.5	12280.0
148.	CMF+B1O=DM5F-2yl+R2OH	1.20E+11	0.7	8960.0
149.	CMF+R2OH=DM5F-2yl+H2O	2.20E+06	2.0	2780.0
150.	CMF+R4CH3=DM5F-2yl+CH4	1.36E+00	3.5	12900.0
151.	furylCH2=OCHCHCHCCH2	2.05E+13	0.2	40156.0
152.	OCHCHCHCCH2=OCCHCHCHCH2	5.70E+10	1.0	28700.0
153.	OCCHCHCHCH2=CO+nC4H5	1.30E+14	0.0	22390.0
154.	CMF+R1H=DMFH	1.11E+45	-11.2	6205.0
155.	CMF+R1H=furan+R4CH3	2.32E+22	-2.3	13215.5
156.	DMFH=CH3CHCHCHCHO	5.37E+12	0.2	24172.0
157.	CH3CHCHCHCHO=CH3CH2CHCHCO	1.95E+11	0.5	23465.0
158.	CH3CH2CHCHCO=CO+C4H7V	1.30E+14	0.0	22390.0
159.	DM5F-2yl=CH3CCHCHCO	1.80E+13	0.3	34510.0
160.	CH3CCHCHCO=pC3H4+R12CHCOV	5.30E+15	-0.2	34234.0
161.	DM5F-2yl+O2=DM5F-2ylO+B1O	2.60E+13	0.0	6100.0
162.	DM5F-2yl+B1O=DM5F-2ylO	1.00E+14	0.0	0.0
163.	DM5F-2ylO=CO+C2H2T+R14CH3CO	7.70E+13	0.2	40185.0
164.	DM5F-2yl+R1H=CMF	1.00E+14	0.0	0.0
165.	furylCH2+R3OOH=furylCH2O+R2OH	5.00E+12	0.0	0.0
166.	furylCH2+O2=furylCH2O+B1O	6.30E+12	0.0	40000.0
167.	furylCH2O=R1H+furylCHO	2.00E+13	0.0	27500.0
168.	furylCH2O=furyl-2+HCHO	2.00E+13	0.0	27500.0
169.	furylCH2O+O2=furylCHO+R3OOH	6.00E+10	0.0	1600.0
170.	furylCH2+R1H=CMF	1.00E+14	0.0	0.0
171.	DMF-CHO+R1H=DMF-CO+H2	4.00E+13	0.0	3200.0
172.	DMF-CHO+B1O=DMF-CO+R2OH	6.00E+12	0.0	1800.0

173. DMF-CHO+R2OH=DMF-CO+H2O	7.80E+12	0.0	0.0
174. DMF-CHO+R3OOH=DMF-CO+H2O2	3.00E+12	0.0	1100.0
175. DMF-CHO+R4CH3=DMF-CO+CH4	2.00E-06	5.6	1500.0
176. DMF-CO=DM5F-2yl+CO	4.00E+14	0.0	29500.0
177. furylCHO+R1H=furylCO+H2	4.00E+13	0.0	3200.0
178. furylCHO+B1O=furylCO+R2OH	6.00E+12	0.0	1800.0
179. furylCHO+R2OH=furylCO+H2O	7.80E+12	0.0	0.0
180. furylCHO+R3OOH=furylCO+H2O2	3.00E+12	0.0	1100.0
181. furylCHO+R4CH3=furylCO+CH4	2.00E-06	5.6	1500.0
182. furylCO=furyl-2+CO	4.00E+14	0.0	29500.0
183. furan=CH2CCHCHO	4.58E+12	0.4	70891.0
184. furan=C2H2T+CH2COZ	1.82E+14	0.5	86591.0
185. R1H+furyl-2=furan	1.00E+14	0.0	0.0
186. R1H+furyl-3=furan	1.00E+14	0.0	0.0
187. furan+O2=furyl-2+R3OOH	2.00E+13	0.0	70680.0
188. furan+O2=furyl-3+R3OOH	2.00E+13	0.0	70880.0
189. furan+R1H=C4H5O-2	2.60E+13	0.0	3200.0
190. furan+R1H=C4H5O-3	2.60E+13	0.0	1560.0
191. furan+R2OH=C2H3CHOZ+R5CHO	2.74E+12	0.0	-1040.0
192. furan+R1H=furyl-2+H2	8.20E+05	2.5	12280.0
193. furan+R1H=furyl-3+H2	8.20E+05	2.5	12280.0
194. furan+B1O=furyl-2+R2OH	1.20E+11	0.7	8960.0
195. furan+B1O=furyl-3+R2OH	1.20E+11	0.7	8960.0
196. furan+R2OH=furyl-2+H2O	2.20E+06	2.0	2780.0
197. furan+R2OH=furyl-3+H2O	2.20E+06	2.0	2780.0
198. furan+R4CH3=furyl-2+CH4	1.36E+00	3.5	12900.0
199. furan+R4CH3=furyl-3+CH4	1.36E+00	3.5	12900.0
200. furyl-3=furyl-2	1.50E+13	0.0	67800.0
201. furyl-2+O2=RCH2CHCO+CO2	4.50E+16	-1.4	1000.0
202. furyl-2+O2=>CHCHCHO+CO+B1O	3.30E+11	-0.3	10.0
203. furyl-3+O2=RCH2CHCO+CO2	4.50E+16	-1.4	1000.0
204. furyl-2+B1O=CHCHCHO+CO	3.00E+13	0.0	0.0
205. furyl-3+B1O=C2H2T+R5CHO+CO	3.00E+13	0.0	0.0
206. furyl-2=CHCHCHCO	1.81E+13	0.3	34511.0
207. furyl-3=CHCCHCHO	1.05E+13	0.3	31215.0
208. C4H5O-2=C4H5O-3	3.34E+09	1.0	39100.0
209. C4H5O-2=C2H2T+R13CH2CHO	8.11E+12	0.2	34925.0
210. C4H5O-3=CH2CHCHCHO	1.05E+13	0.1	22555.0
211. C4H5O-2+O2=R3OOH+furan	2.60E+11	0.0	2500.0
212. C4H5O-3+O2=R3OOH+furan	1.58E+12	0.0	15200.0
213. C4H5O-2+B1O=C2H3CHOZ+R5CHO	5.50E+13	0.0	0.0
214. C4H5O-3+B1O=C2H2T+HCHO+R5CHO	5.50E+13	0.0	0.0
215. C4H5O-2+R1H=furan23H	1.00E+14	0.0	0.0
216. C4H5O-3+R1H=furan23H	1.00E+14	0.0	0.0
217. C4H5O-3+R1H=furan25H	1.00E+14	0.0	0.0
218. CH2CHCHCHO=CHCHCHCHOH	2.20E+11	0.4	35127.0
219. CH2CHCHCHO=CO+RC3H5Y	4.85E+12	0.3	47443.0
220. CHCHCHCHOH=C2H2T+R13CH2CHO	1.20E+15	0.1	48750.0
221. CH2CHCHCHO+R1H=CH2CHCH2CHO	1.00E+14	0.0	0.0
222. CH2CHCHCHO+R4CH3=C5H8O	1.50E+13	0.0	0.0
223. CHCHCHCO=C2H2T+R12CHCOV	5.30E+15	-0.2	34234.0
224. CHCHCHCO=CHCCHCO+R1H	8.72E+11	0.7	38680.0
225. CHCCHCHO=CO+C3H3	1.46E+12	0.3	48401.0
226. CHCCHCHO=CHCCHCO+R1H	1.03E+12	0.7	51949.0
227. CHCCHCO+R1H=C3H3+CO	1.32E+13	0.0	3260.0
228. CHCCHCHO+R1H=CHCCH2CHO	1.00E+14	0.0	0.0
229. CHCCHCHO+R4CH3=C5H6O	1.50E+13	0.0	0.0
230. CHCHCHO+R1H=C2H3CHOZ	1.00E+14	0.0	0.0
231. C2H2T+R5CHO=CHCHCHO	6.00E+11	0.0	7700.0
232. CH2CCHCHO=R5CHO+C3H3	7.90E+14	0.0	69880.0
233. CH2CCHCHO=CO+pC3H4	6.80E+11	0.4	44231.0
234. furan23H+O2=C4H5O-2+R3OOH	1.40E+13	0.0	47600.0
235. furan23H+O2=C4H5O-3+R3OOH	1.40E+12	0.0	35600.0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

236.	furán23H+R1H=C4H5O-2+H2	9.00E+06	2.0	5000.0
237.	furán23H+R1H=C4H5O-3+H2	5.40E+04	2.5	-1900.0
238.	furán23H+B1O=C4H5O-2+R2OH	2.60E+13	0.0	5200.0
239.	furán23H+B1O=C4H5O-3+R2OH	8.80E+10	0.7	3250.0
240.	furán23H+R2OH=C4H5O-2+H2O	2.60E+06	2.0	-770.0
241.	furán23H+R2OH=C4H5O-3+H2O	3.00E+06	2.0	-1520.0
242.	furán23H+R3OOH=C4H5O-2+H2O2	4.00E+11	0.0	15500.0
243.	furán23H+R3OOH=C4H5O-3+H2O2	6.40E+03	2.6	12400.0
244.	furán23H+R4CH3=C4H5O-2+CH4	2.00E+11	0.0	9600.0
245.	furán23H+R4CH3=C4H5O-3+CH4	1.00E+11	0.0	7300.0
246.	furán23H+R1H=THfurán-2yl	1.00E+14	0.0	3260.0
247.	furán23H+R1H=THfurán-3yl	1.00E+14	0.0	3260.0
248.	furán23H+R2OH=>HCHO+C2H4Z+R5CHO	2.70E+12	0.0	-1100.0
249.	THfurán-2yl=C2H4Z+R13CH2CHO	2.00E+14	0.0	35600.0
250.	THfurán-3yl=HCHO+RC3H5Y	2.00E+14	0.0	35600.0
251.	THfurán-2yl+R1H=THfurán	1.00E+14	0.0	0.0
252.	THfurán-3yl+R1H=THfurán	1.00E+14	0.0	0.0
253.	furán25H+O2=C4H5O-3+R3OOH	2.80E+12	0.0	35600.0
254.	furán25H+R1H=C4H5O-3+H2	1.08E+05	2.5	-1900.0
255.	furán25H+B1O=C4H5O-3+R2OH	1.76E+11	0.7	3250.0
256.	furán25H+R2OH=C4H5O-3+H2O	6.00E+06	2.0	-1520.0
257.	furán25H+R3OOH=C4H5O-3+H2O2	1.28E+04	2.6	12400.0
258.	furán25H+R4CH3=C4H5O-3+CH4	2.00E+11	0.0	7300.0
259.	furán25H+R1H=THfurán-3yl	1.00E+14	0.0	3260.0
260.	furán25H+R2OH=>HCHO+C2H4Z+R5CHO	2.70E+12	0.0	-1100.0
261.	THfurán+O2=THfurán-2yl+R3OOH	2.80E+13	0.0	47600.0
262.	THfurán+O2=THfurán-3yl+R3OOH	2.80E+13	0.0	47600.0
263.	THfurán+R1H=THfurán-2yl+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
264.	THfurán+R1H=THfurán-3yl+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
265.	THfurán+B1O=THfurán-2yl+R2OH	5.20E+13	0.0	5200.0
266.	THfurán+B1O=THfurán-3yl+R2OH	5.20E+13	0.0	5200.0
267.	THfurán+R2OH=THfurán-2yl+H2O	5.20E+06	2.0	-770.0
268.	THfurán+R2OH=THfurán-3yl+H2O	5.20E+06	2.0	-770.0
269.	THfurán+R3OOH=THfurán-2yl+H2O2	8.00E+11	0.0	15500.0
270.	THfurán+R3OOH=THfurán-3yl+H2O2	8.00E+11	0.0	15500.0
271.	THfurán+R4CH3=THfurán-2yl+CH4	4.00E+11	0.0	9600.0
272.	THfurán+R4CH3=THfurán-3yl+CH4	4.00E+11	0.0	9600.0
273.	CHCCH2CHO+R1H=CO+C3H3+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
274.	CHCCH2CHO+R4CH3=CO+C3H3+CH4	2.00E-06	5.6	2500.0
275.	CHCCH2CHO+R2OH=CO+C3H3+H2O	4.20E+12	0.0	500.0
276.	CH2CHCH2CHO+R1H=CO+RC3H5Y+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
277.	CH2CHCH2CHO+R4CH3=CO+RC3H5Y+CH4	2.00E-06	5.6	2500.0
278.	CH2CHCH2CHO+R2OH=CO+RC3H5Y+H2O	4.20E+12	0.0	500.0
279.	C5H8O+R1H=CO+C4H7Y+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
280.	C5H8O+R4CH3=CO+C4H7Y+CH4	2.00E-06	5.6	2500.0
281.	C5H8O+R2OH=CO+C4H7Y+H2O	4.20E+12	0.0	500.0
282.	C5H6O+R1H=CO+C4H5-1s+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
283.	C5H6O+R4CH3=CO+C4H5-1s+CH4	2.00E-06	5.6	2500.0
284.	C5H6O+R2OH=CO+C4H5-1s+H2O	4.20E+12	0.0	500.0
285.	R1H+O2<=>B1O+R2OH	9.65E+14	-0.3	16200.0
286.	B1O+H2<=>R1H+R2OH	5.08E+04	2.7	6292.0
287.	R2OH+H2<=>R1H+H2O	2.16E+08	1.5	3430.0
288.	B1O+H2O<=>R2OH+R2OH	2.97E+06	2.0	13400.0
289.	H2+m<=>R1H+R1H+m	4.58E+19	-1.4	104400.0
	H2	Enhanced by	2.500E+00	
	H2O	Enhanced by	1.200E+01	
	CO	Enhanced by	1.900E+00	
	CO2	Enhanced by	3.800E+00	
290.	B1O+B1O+M<=>O2+M	6.17E+15	-0.5	0.0
	H2	Enhanced by	2.500E+00	
	H2O	Enhanced by	1.200E+01	
	AR	Enhanced by	8.300E-01	

CO	Enhanced by	1.900E+00		
CO2	Enhanced by	3.800E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
HE	Enhanced by	8.300E-01		
291. B1O+R1H+M<=>R2OH+M		4.71E+18	-1.0	0.0
H2	Enhanced by	2.500E+00		
H2O	Enhanced by	1.200E+01		
AR	Enhanced by	7.500E-01		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	2.000E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
HE	Enhanced by	7.500E-01		
292. H2O+M<=>R1H+R2OH+M		6.06E+27	-3.3	120774.0
H2O	Enhanced by	0.000E+00		
H2	Enhanced by	3.000E+00		
N2	Enhanced by	2.000E+00		
O2	Enhanced by	1.500E+00		
293. H2O+H2O<=>R1H+R2OH+H2O		1.06E+26	-2.4	120164.0
294. R1H+O2(+M)<=>R3OOH(+M)		1.48E+12	0.6	0.0
Low pressure limit: 0.34820E+17 -0.41100E+00 -0.11150E+04				
TROE centering: 0.50000E+00 0.10000E-29 0.10000E+31 0.10000E+11				
H2	Enhanced by	1.300E+00		
H2O	Enhanced by	1.400E+01		
AR	Enhanced by	0.000E+00		
CO	Enhanced by	1.900E+00		
CO2	Enhanced by	3.800E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
HE	Enhanced by	6.700E-01		
O2	Enhanced by	1.200E+00		
295. R1H+O2(+AR)<=>R3OOH(+AR)		1.48E+12	0.6	0.0
Low pressure limit: 0.68100E+19 -0.12000E+01 0.00000E+00				
TROE centering: 0.70000E+00 0.10000E-29 0.10000E+31 0.10000E+11				
296. R3OOH+R1H<=>H2+O2		1.66E+13	0.0	823.0
297. R3OOH+R1H<=>R2OH+R2OH		7.08E+13	0.0	295.0
298. R3OOH+B1O<=>R2OH+O2		3.25E+13	0.0	0.0
299. R3OOH+R2OH<=>H2O+O2		2.89E+13	0.0	-497.0
300. R3OOH+R3OOH<=>H2O2+O2		1.03E+14	0.0	11040.0
Declared duplicate reaction...				
301. R3OOH+R3OOH<=>H2O2+O2		1.94E+11	0.0	-1409.0
Declared duplicate reaction...				
302. H2O2(+M)<=>R2OH+R2OH(+M)		2.95E+14	0.0	48430.0
Low pressure limit: 0.12020E+18 0.00000E+00 0.45500E+05				
TROE centering: 0.50000E+00 0.10000E-29 0.10000E+31 0.10000E+11				
H2	Enhanced by	2.500E+00		
H2O	Enhanced by	1.200E+01		
AR	Enhanced by	6.400E-01		
CO	Enhanced by	1.900E+00		
CO2	Enhanced by	3.800E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
HE	Enhanced by	6.400E-01		
303. H2O2+R1H<=>H2O+R2OH		2.41E+13	0.0	3970.0
304. H2O2+R1H<=>H2+R3OOH		2.15E+10	1.0	6000.0
305. H2O2+B1O<=>R2OH+R3OOH		9.55E+06	2.0	3970.0
306. H2O2+R2OH<=>H2O+R3OOH		1.74E+12	0.0	318.0
Declared duplicate reaction...				
307. H2O2+R2OH<=>H2O+R3OOH		7.59E+13	0.0	7269.0
Declared duplicate reaction...				
308. CO+B1O(+M)<=>CO2(+M)		1.80E+10	0.0	2384.0
Low pressure limit: 0.13500E+25 -0.27880E+01 0.41910E+04				

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

H2	Enhanced by	2.000E+00		
O2	Enhanced by	6.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
AR	Enhanced by	5.000E-01		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	3.500E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
HE	Enhanced by	5.000E-01		
309. CO+O2<=>CO2+B1O		1.05E+12	0.0	42540.0
310. CO+R2OH<=>CO2+R1H		7.05E+04	2.1	-355.7
Declared duplicate reaction...				
311. CO+R2OH<=>CO2+R1H		5.76E+12	-0.7	331.8
Declared duplicate reaction...				
312. CO+R3OOH<=>CO2+R2OH		1.57E+05	2.2	17940.0
313. CO+H2(+M)<=>HCHO(+M)		4.30E+07	1.5	79600.0
Low pressure limit: 0.50700E+28 -0.34200E+01 0.84348E+05				
TROE centering: 0.93200E+00 0.19700E+03 0.15400E+04 0.10300E+05				
H2	Enhanced by	2.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
AR	Enhanced by	7.000E-01		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	2.000E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
HE	Enhanced by	7.000E-01		
314. R5CHO+m<=>R1H+CO+m		4.75E+11	0.7	14870.0
H2	Enhanced by	2.000E+00		
H2O	Enhanced by	1.200E+01		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	2.000E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
315. R5CHO+O2<=>CO+R3OOH		7.58E+12	0.0	410.0
316. R5CHO+R1H<=>CO+H2		7.34E+13	0.0	0.0
317. R5CHO+B1O<=>CO+R2OH		3.02E+13	0.0	0.0
318. R5CHO+B1O<=>CO2+R1H		3.00E+13	0.0	0.0
319. R5CHO+R2OH<=>CO+H2O		1.02E+14	0.0	0.0
320. R5CHO+R4CH3<=>CH4+CO		2.65E+13	0.0	0.0
321. HCHO+O2<=>R5CHO+R3OOH		8.07E+15	0.0	53420.0
322. R5CHO+R3OOH=>CO2+R1H+R2OH		3.00E+13	0.0	0.0
323. R5CHO+O2<=>RO2CHO		1.20E+11	0.0	-1100.0
324. HCHO+RO2CHO<=>R5CHO+HO2CHO		1.99E+12	0.0	11660.0
325. ROCHO+R2OH<=>HO2CHO		2.00E+13	0.0	0.0
326. R1H+CO2<=>ROCHO		7.50E+13	0.0	29000.0
327. R5CHO+R5CHO<=>HCHO+CO		1.80E+13	0.0	0.0
328. R5CHO+R5CHO=>H2+CO+CO		3.00E+12	0.0	0.0
329. R5CHO+R1H(+M)<=>HCHO(+M)		1.09E+12	0.5	-260.0
Low pressure limit: 0.13500E+25 -0.25700E+01 0.14250E+04				
TROE centering: 0.78240E+00 0.27100E+03 0.27550E+04 0.65700E+04				
H2	Enhanced by	2.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
AR	Enhanced by	7.000E-01		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	2.000E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
HE	Enhanced by	7.000E-01		
330. B4CH+O2<=>CO+OH*		4.04E+13	0.0	0.0
331. R1H+B1O+m<=>OH*+M		6.00E+14	0.0	6940.0
332. OH*+H2O<=>R2OH+H2O		5.92E+12	0.5	-861.0
Declared duplicate reaction...				

333.	OH*+CO2<=>R2OH+CO2	2.75E+12	0.5	-968.0
334.	OH*+CO<=>R2OH+CO	3.23E+12	0.5	-787.0
335.	OH*+R1H<=>R2OH+R1H	1.50E+12	0.5	0.0
336.	OH*+H2<=>R2OH+H2	2.95E+12	0.5	-444.0
337.	OH*+O2<=>R2OH+O2	2.10E+12	0.5	-482.0
338.	OH*+B1O<=>R2OH+B1O	1.50E+12	0.5	0.0
339.	OH*+R2OH<=>R2OH+R2OH	1.50E+12	0.5	0.0
340.	OH*+CH4<=>R2OH+CH4	3.36E+12	0.5	-635.0
341.	OH*<=>R2OH+Hv	1.40E+06	0.0	0.0
Declared duplicate reaction...				
342.	R9C2HT+B1O<=>CO+CH*	6.20E+12	0.0	0.0
343.	B3C+R1H+m<=>CH*+M	6.00E+14	0.0	6940.0
344.	R9C2HT+O2<=>CO2+CH*	2.17E+10	0.0	0.0
345.	CH*+H2O<=>B4CH+H2O	5.30E+13	0.0	0.0
Declared duplicate reaction...				
346.	CH*+CO<=>B4CH+CO	2.44E+12	0.5	0.0
347.	CH*+CO2<=>B4CH+CO2	2.41E-01	4.3	-1694.0
348.	CH*+O2<=>B4CH+O2	2.48E+06	2.1	-1720.0
349.	CH*+H2<=>B4CH+H2	1.47E+14	0.0	1361.0
350.	CH*+CH4<=>B4CH+CH4	1.73E+13	0.0	167.0
351.	CH*<=>B4CH+Hv	1.86E+06	0.0	0.0
Declared duplicate reaction...				
352.	CH*+N2<=>B4CH+N2	3.03E+02	3.4	-381.0
353.	HCHO+R2OH<=>R5CHO+H2O	7.82E+07	1.6	-1055.0
354.	HCHO+R1H<=>R5CHO+H2	5.74E+07	1.9	2740.0
355.	HCHO+B1O<=>R5CHO+R2OH	6.26E+09	1.1	2260.0
356.	HCHO+R4CH3<=>R5CHO+CH4	3.83E+01	3.4	4312.0
357.	HCHO+R3OOH<=>R5CHO+H2O2	1.88E+04	2.7	11520.0
358.	HCHO+R2OH<=>RHOCH2O	4.50E+15	-1.1	0.0
359.	RHOCH2O<=>HOCHO+R1H	1.00E+14	0.0	14900.0
360.	HOCHO<=>CO+H2O	2.45E+12	0.0	60470.0
361.	HOCHO<=>CO2+H2	2.95E+09	0.0	48520.0
362.	R5CHO+R2OH<=>HOCHO	1.00E+14	0.0	0.0
363.	ROCHO+R3OOH<=>HOCHO+O2	3.50E+10	0.0	-3275.0
364.	HOCHO+R2OH=>H2O+CO2+R1H	2.62E+06	2.1	916.0
365.	HOCHO+R2OH=>H2O+CO+R2OH	1.85E+07	1.5	-962.0
366.	HOCHO+R1H=>H2+CO2+R1H	4.24E+06	2.1	4868.0
367.	HOCHO+R1H=>H2+CO+R2OH	6.03E+13	-0.3	2988.0
368.	HOCHO+R4CH3=>CH4+CO+R2OH	3.90E-07	5.8	2200.0
369.	ROCHO+H2O2<=>HOCHO+R3OOH	2.40E+12	0.0	10000.0
370.	HOCHO+R3OOH=>H2O2+CO+R2OH	1.00E+12	0.0	11920.0
371.	HOCHO+B1O=>CO+R2OH+R2OH	1.77E+18	-1.9	2975.0
372.	HCHO+ROCHO<=>HOCHO+R5CHO	5.60E+12	0.0	13600.0
373.	HCHO+R1H(+M)<=>R6CH2OH(+M)	5.40E+11	0.5	3600.0
Low pressure limit: 0.12700E+33 -0.48200E+01 0.65300E+04				
TROE centering: 0.71870E+00 0.10300E+03 0.12910E+04 0.41600E+04				
H2 Enhanced by 2.000E+00				
H2O Enhanced by 6.000E+00				
CO Enhanced by 1.500E+00				
CO2 Enhanced by 2.000E+00				
CH4 Enhanced by 2.000E+00				
C2H6 Enhanced by 3.000E+00				
374.	R7CH3O(+M)<=>HCHO+R1H(+M)	6.80E+13	0.0	26170.0
Low pressure limit: 0.18670E+26 -0.30000E+01 0.24307E+05				
TROE centering: 0.90000E+00 0.25000E+04 0.13000E+04 0.10000+100				
H2 Enhanced by 2.000E+00				
H2O Enhanced by 6.000E+00				
CO Enhanced by 1.500E+00				
CO2 Enhanced by 2.000E+00				
CH4 Enhanced by 2.000E+00				
C2H6 Enhanced by 3.000E+00				
375.	R7CH3O+O2<=>HCHO+R3OOH	4.38E-19	9.5	-5501.0
376.	HCHO+R7CH3O<=>CH3OH+R5CHO	6.62E+11	0.0	2294.0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

377.	R4CH3+CH3OH<=>CH4+R7CH3O	1.44E+01	3.1	6935.0
378.	R7CH3O+R4CH3<=>HCHO+CH4	1.20E+13	0.0	0.0
379.	R7CH3O+R1H<=>HCHO+H2	2.00E+13	0.0	0.0
380.	R7CH3O+R3OOH<=>HCHO+H2O2	3.01E+11	0.0	0.0
381.	R6CH2OH+O2<=>HCHO+R3OOH	1.51E+15	-1.0	0.0
Declared duplicate reaction...				
382.	R6CH2OH+O2<=>HCHO+R3OOH	2.41E+14	0.0	5017.0
Declared duplicate reaction...				
383.	R6CH2OH+R1H<=>HCHO+H2	6.00E+12	0.0	0.0
384.	R6CH2OH+R3OOH<=>HCHO+H2O2	1.20E+13	0.0	0.0
385.	R6CH2OH+R5CHO<=>HCHO+HCHO	1.80E+14	0.0	0.0
386.	R6CH2OH+R7CH3O<=>HCHO+CH3OH	2.40E+13	0.0	0.0
387.	CH3OH+R5CHO<=>R6CH2OH+HCHO	9.63E+03	2.9	13110.0
388.	R2OH+R6CH2OH<=>H2O+HCHO	2.40E+13	0.0	0.0
389.	B1O+R6CH2OH<=>R2OH+HCHO	4.20E+13	0.0	0.0
390.	R6CH2OH+R6CH2OH<=>HCHO+CH3OH	3.00E+12	0.0	0.0
391.	R6CH2OH+R3OOH<=>RHOCH2O+R2OH	1.00E+13	0.0	0.0
392.	HCHO+R3OOH<=>ROCH2O2H	1.50E+11	0.0	11900.0
393.	ROCH2O2H<=>RHOCH2O2	3.00E+11	0.0	8600.0
394.	RHOCH2O2+R3OOH<=>HOCH2O2H+O2	3.50E+10	0.0	-3275.0
395.	RHOCH2O+R2OH<=>HOCH2O2H	1.00E+13	0.0	0.0
396.	CH3OH(+M)<=>R4CH3+R2OH(+M)	1.90E+16	0.0	91730.0
Low pressure limit: 0.29500E+45 -0.73500E+01 0.95460E+05				
TROE centering: 0.41400E+00 0.27900E+03 0.54590E+04 0.10000E+11				
397.	CH3OH(+M)<=>R6CH2OH+R1H(+M)	2.69E+16	-0.1	98940.0
Low pressure limit: 0.23400E+41 -0.63300E+01 0.10310E+06				
TROE centering: 0.77300E+00 0.69300E+03 0.53330E+04 0.10000E+11				
398.	CH3OH+R1H<=>R7CH3O+H2	3.60E+12	0.0	6095.0
399.	CH3OH+R1H<=>R6CH2OH+H2	1.20E+06	2.4	2583.0
400.	CH3OH+B1O<=>R6CH2OH+R2OH	3.88E+05	2.5	3080.0
401.	CH3OH+R2OH<=>R7CH3O+H2O	5.13E+05	2.1	2450.0
402.	CH3OH+R2OH<=>R6CH2OH+H2O	1.44E+06	2.0	-839.0
403.	CH3OH+O2<=>R6CH2OH+R3OOH	2.05E+13	0.0	44900.0
404.	CH3OH+R3OOH<=>R6CH2OH+H2O2	1.08E+04	2.5	10530.0
405.	CH3OH+R4CH3<=>R6CH2OH+CH4	3.19E+01	3.2	7172.0
406.	R7CH3O+CH3OH<=>R6CH2OH+CH3OH	3.00E+11	0.0	4074.0
407.	R7CH3O+R7CH3O<=>CH3OH+HCHO	6.03E+13	0.0	0.0
408.	R4CH3+R1H(+M)<=>CH4(+M)	6.35E+15	-0.6	383.0
Low pressure limit: 0.17339E+34 -0.47600E+01 0.24440E+04				
TROE centering: 0.78300E+00 0.74000E+02 0.29400E+04 0.69600E+04				
H2 Enhanced by 2.000E+00				
H2O Enhanced by 6.000E+00				
AR Enhanced by 7.000E-01				
CO Enhanced by 1.500E+00				
CO2 Enhanced by 2.000E+00				
CH4 Enhanced by 2.000E+00				
C2H6 Enhanced by 3.000E+00				
HE Enhanced by 7.000E-01				
409.	CH4+R1H<=>R4CH3+H2	6.14E+05	2.5	9587.0
410.	CH4+R2OH<=>R4CH3+H2O	5.83E+04	2.6	2190.0
411.	CH4+B1O<=>R4CH3+R2OH	1.02E+09	1.5	8600.0
412.	CH4+R3OOH<=>R4CH3+H2O2	1.13E+01	3.7	21010.0
413.	CH4+B5CH2<=>R4CH3+R4CH3	2.46E+06	2.0	8270.0
414.	R4CH3+R2OH<=>HCHO+H2	8.00E+09	0.5	-1755.0
415.	R4CH3+R2OH<=>B6CH2+H2O	6.44E+17	-1.3	1417.0
416.	R7CH3O+R1H<=>R4CH3+R2OH	1.50E+12	0.5	-110.0
417.	R6CH2OH+R1H<=>R4CH3+R2OH	1.65E+11	0.7	-284.0
418.	R4CH3+R2OH<=>B5CH2+H2O	5.60E+07	1.6	5420.0
419.	R4CH3+R3OOH<=>R7CH3O+R2OH	1.00E+12	0.3	-687.5
420.	R4CH3+R3OOH<=>CH4+O2	1.16E+05	2.2	-3022.0
421.	R4CH3+B1O<=>HCHO+R1H	5.54E+13	0.1	-136.0
422.	R4CH3+O2<=>R7CH3O+B1O	7.55E+12	0.0	28320.0


```

423. R4CH3+O2<=>HCHO+R2OH          2.64E+00  3.3  8105.0
424. R4CH3+O2(+M)<=>R8CH3OO(+M)      7.81E+09  0.9   0.0
    Low pressure limit: 0.68500E+25 -0.30000E+01 0.00000E+00
    TROE centering:   0.60000E+00 0.10000E+04 0.70000E+02 0.17000E+04
    Declared duplicate reaction...
425. R8CH3OO+HCHO<=>CH3OOH+R5CHO      1.99E+12  0.0 11660.0
426. CH4+R8CH3OO<=>R4CH3+CH3OOH       6.40E-01  3.8 17810.0
427. CH3OH+R8CH3OO<=>R6CH2OH+CH3OOH   1.81E+12  0.0 13710.0
428. R8CH3OO+R4CH3<=>R7CH3O+R7CH3O    5.08E+12  0.0 -1411.0
    Declared duplicate reaction...
429. R8CH3OO+R3OOH<=>CH3OOH+O2        2.47E+11  0.0 -1570.0
430. R8CH3OO+R8CH3OO=>HCHO+CH3OH+O2   3.11E+14 -1.6 -1051.0
431. R8CH3OO+R8CH3OO=>O2+R7CH3O+R7CH3O 1.40E+16 -1.6 1860.0
432. R8CH3OO+R1H<=>R7CH3O+R2OH        9.60E+13  0.0   0.0
    Declared duplicate reaction...
433. R8CH3OO+B1O<=>R7CH3O+O2           3.60E+13  0.0   0.0
    Declared duplicate reaction...
434. R8CH3OO+R2OH<=>CH3OH+O2           6.00E+13  0.0   0.0
435. CH3OOH<=>R7CH3O+R2OH              6.31E+14  0.0 42300.0
436. B6CH2+N2<=>B5CH2+N2               1.50E+13  0.0  600.0
437. B6CH2+AR<=>B5CH2+AR                9.00E+12  0.0  600.0
438. B6CH2+R1H<=>B4CH+H2                3.00E+13  0.0   0.0
439. B6CH2+B1O<=>CO+H2                  1.50E+13  0.0   0.0
440. B6CH2+B1O<=>R5CHO+R1H              1.50E+13  0.0   0.0
441. B6CH2+R2OH<=>HCHO+R1H              3.00E+13  0.0   0.0
442. B6CH2+H2<=>R4CH3+R1H              7.00E+13  0.0   0.0
443. B6CH2+O2=>R1H+R2OH+CO              2.80E+13  0.0   0.0
444. B6CH2+O2<=>CO+H2O                  1.20E+13  0.0   0.0
445. B6CH2+H2O<=>B5CH2+H2O              3.00E+13  0.0   0.0
446. B6CH2+CO<=>B5CH2+CO                9.00E+12  0.0   0.0
447. B6CH2+CO2<=>B5CH2+CO2              7.00E+12  0.0   0.0
448. B6CH2+CO2<=>HCHO+CO                1.40E+13  0.0   0.0
449. B5CH2+R1H(+M)<=>R4CH3(+M)          2.50E+16 -0.8   0.0
    Low pressure limit: 0.32000E+28 -0.31400E+01 0.12300E+04
    TROE centering:   0.68000E+00 0.78000E+02 0.19950E+04 0.55900E+04
    H2      Enhanced by 2.000E+00
    H2O     Enhanced by 6.000E+00
    AR      Enhanced by 7.000E-01
    CO      Enhanced by 1.500E+00
    CO2     Enhanced by 2.000E+00
    CH4     Enhanced by 2.000E+00
    C2H6    Enhanced by 3.000E+00
    HE      Enhanced by 7.000E-01
450. B5CH2+O2<=>R5CHO+R2OH              1.06E+13  0.0 1500.0
451. B5CH2+O2=>CO2+R1H+R1H              2.64E+12  0.0 1500.0
452. B5CH2+B1O=>CO+R1H+R1H              5.00E+13  0.0   0.0
453. B5CH2+R1H<=>B4CH+H2                1.00E+18 -1.6   0.0
    Declared duplicate reaction...
454. B5CH2+R1H<=>B4CH+H2                2.70E+11  0.7 25700.0
    Declared duplicate reaction...
455. B5CH2+R2OH<=>B4CH+H2O              1.13E+07  2.0  3000.0
456. B4CH+O2<=>R5CHO+B1O                3.30E+13  0.0   0.0
457. B3C+R2OH<=>CO+R1H                  5.00E+13  0.0   0.0
458. B3C+O2<=>CO+B1O                    5.00E+13  0.0   0.0
459. B4CH+R1H<=>B3C+H2                  1.10E+14  0.0   0.0
460. B4CH+B1O<=>CO+R1H                  5.70E+13  0.0   0.0
461. B4CH+R2OH<=>R5CHO+R1H              3.00E+13  0.0   0.0
462. B4CH+H2O<=>R1H+HCHO                 1.71E+13  0.0 -755.0
463. B4CH+CO2<=>R5CHO+CO                1.70E+12  0.0  685.0
464. R4CH3+R4CH3(+M)<=>C2H6(+M)         3.42E+15 -0.7 174.9
    Low pressure limit: 0.80540E+32 -0.37500E+01 0.98160E+03
    TROE centering:   0.00000E+00 0.57000E+03 0.10000E+31 0.10000E+31
    H2O     Enhanced by 5.000E+00

```

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

```

CO      Enhanced by  2.000E+00
CO2     Enhanced by  3.000E+00
465. R11C2H5+R1H(+M)<=>C2H6(+M)      5.21E+17 -1.0  1580.0
Low pressure limit: 0.19900E+42 -0.70800E+01 0.66850E+04
TROE centering: 0.84200E+00 0.12500E+03 0.22190E+04 0.68820E+04
H2      Enhanced by  2.000E+00
H2O     Enhanced by  6.000E+00
AR      Enhanced by  7.000E-01
CO      Enhanced by  1.500E+00
CO2     Enhanced by  2.000E+00
CH4     Enhanced by  2.000E+00
C2H6    Enhanced by  3.000E+00
HE      Enhanced by  7.000E-01
466. C2H6+R1H<=>R11C2H5+H2      1.15E+08 1.9  7530.0
467. C2H6+B1O<=>R11C2H5+R2OH      3.55E+06 2.4  5830.0
468. C2H6+R2OH<=>R11C2H5+H2O      1.48E+07 1.9  950.0
469. C2H6+O2<=>R11C2H5+R3OOH      6.03E+13 0.0  51870.0
470. C2H6+R4CH3<=>R11C2H5+CH4      5.48E-01 4.0  8280.0
471. C2H6+R3OOH<=>R11C2H5+H2O2      3.46E+01 3.6  16920.0
472. C2H6+R8CH3OO<=>R11C2H5+CH3OOH      1.94E+01 3.6  17100.0
473. C2H6+R7CH3O<=>R11C2H5+CH3OH      2.41E+11 0.0  7090.0
474. C2H6+B4CH<=>R11C2H5+B5CH2      1.10E+14 0.0  -260.0
475. B6CH2+C2H6<=>R4CH3+R11C2H5      1.20E+14 0.0  0.0
476. C2H4Z+R1H(+M)<=>R11C2H5(+M)      5.27E+09 1.2  1272.7
Low pressure limit: 0.20270E+41 -0.66420E+01 0.57690E+04
TROE centering: 0.97600E+00 0.99900E+10 0.38400E+03 0.32900E+10
H2      Enhanced by  2.000E+00
H2O     Enhanced by  6.000E+00
CH4     Enhanced by  2.000E+00
CO      Enhanced by  1.500E+00
CO2     Enhanced by  2.000E+00
C2H6    Enhanced by  3.000E+00
AR      Enhanced by  7.000E-01
477. H2+R8CH3OO<=>R1H+CH3OOH      1.50E+14 0.0  26030.0
478. H2+R17C2H5OO<=>R1H+C2H5OOH      1.50E+14 0.0  26030.0
479. C2H4Z+C2H4Z<=>R11C2H5+R10C2H3V      4.82E+14 0.0  71530.0
480. R4CH3+R11C2H5<=>CH4+C2H4Z      1.18E+04 2.5  -2921.0
481. R4CH3+R4CH3<=>R11C2H5+R1H      4.99E+12 0.1  10600.0
482. R11C2H5+R1H<=>C2H4Z+H2      2.00E+12 0.0  0.0
483. R11C2H5+B1O<=>CH3CHO+R1H      1.10E+14 0.0  0.0
484. R11C2H5+R3OOH<=>R15C2H5O+R2OH      1.10E+13 0.0  0.0
485. R8CH3OO+R11C2H5<=>R7CH3O+R15C2H5O      8.00E+12 0.0  -1000.0
486. R15C2H5O+O2<=>CH3CHO+R3OOH      4.28E+10 0.0  1097.0
487. R4CH3+HCHO<=>R15C2H5O      3.00E+11 0.0  6336.0
488. CH3CHO+R1H<=>R15C2H5O      8.00E+12 0.0  6400.0
489. R11C2H5+O2<=>R17C2H5OO      2.88E+56 -13.8  14620.0
490. R17C2H5OO+HCHO<=>C2H5OOH+R5CHO      1.99E+12 0.0  11660.0
491. CH4+R17C2H5OO<=>R4CH3+C2H5OOH      1.81E+11 0.0  18480.0
492. CH3OH+R17C2H5OO<=>R6CH2OH+C2H5OOH      1.81E+12 0.0  13710.0
493. R17C2H5OO+R3OOH<=>C2H5OOH+O2      1.75E+10 0.0  -3275.0
494. C2H6+R17C2H5OO<=>R11C2H5+C2H5OOH      8.60E+00 3.8  17200.0
495. C2H5OOH<=>R15C2H5O+R2OH      6.31E+14 0.0  42300.0
496. R11C2H5+O2<=>R16C2H4OOH      1.81E+45 -11.5  14600.0
497. R11C2H5+O2<=>C2H4Z+R3OOH      7.56E+14 -1.0  4749.0
Declared duplicate reaction...
498. R11C2H5+O2<=>C2H4Z+R3OOH      4.00E-01 3.9  13620.0
Declared duplicate reaction...
499. R11C2H5+O2<=>C2H4O#3+R2OH      1.63E+11 -0.3  6150.0
500. R11C2H5+O2<=>CH3CHO+R2OH      8.27E+02 2.4  5285.0
501. R16C2H4OOH<=>R17C2H5OO      1.20E+36 -8.1  27020.0
502. R17C2H5OO<=>CH3CHO+R2OH      2.52E+41 -10.2  43710.0
503. R17C2H5OO<=>C2H4Z+R3OOH      1.82E+38 -8.4  37890.0

```

504.	R17C2H5OO<=>C2H4O#3+R2OH	4.00E+43	-10.5	45580.0
505.	R16C2H4OOH<=>C2H4O#3+R2OH	8.85E+30	-6.1	20660.0
506.	R16C2H4OOH<=>C2H4Z+R3OOH	3.98E+34	-7.3	23250.0
507.	R16C2H4OOH<=>CH3CHO+R2OH	1.19E+34	-9.0	29210.0
508.	C2H4O#3<=>R4CH3+R5CHO	3.63E+13	0.0	57200.0
509.	C2H4O#3<=>CH3CHO	7.41E+12	0.0	53800.0
510.	C2H4O#3+R2OH<=>RC2H3O#3+H2O	1.78E+13	0.0	3610.0
511.	C2H4O#3+R1H<=>RC2H3O#3+H2	8.00E+13	0.0	9680.0
512.	C2H4O#3+R3OOH<=>RC2H3O#3+H2O2	1.13E+13	0.0	30430.0
513.	C2H4O#3+R8CH3OO<=>RC2H3O#3+CH3OOH	1.13E+13	0.0	30430.0
514.	C2H4O#3+R17C2H5OO<=>RC2H3O#3+C2H5OOH	1.13E+13	0.0	30430.0
515.	C2H4O#3+R4CH3<=>RC2H3O#3+CH4	1.07E+12	0.0	11830.0
516.	C2H4O#3+R7CH3O<=>RC2H3O#3+CH3OH	1.20E+11	0.0	6750.0
517.	RC2H3O#3<=>R14CH3CO	8.50E+14	0.0	14000.0
518.	RC2H3O#3<=>R13CH2CHO	1.00E+14	0.0	14000.0
519.	R4CH3+R5CHO<=>CH3CHO	1.75E+13	0.0	0.0
520.	CH3CHO+R1H<=>R14CH3CO+H2	2.37E+13	0.0	3642.0
521.	CH3CHO+B1O<=>R14CH3CO+R2OH	5.94E+12	0.0	1868.0
522.	CH3CHO+R2OH<=>R14CH3CO+H2O	3.37E+12	0.0	-619.0
523.	CH3CHO+O2<=>R14CH3CO+R3OOH	3.01E+13	0.0	39150.0
524.	CH3CHO+R4CH3<=>R14CH3CO+CH4	7.08E-04	4.6	1966.0
525.	CH3CHO+R3OOH<=>R14CH3CO+H2O2	3.01E+12	0.0	11920.0
526.	R8CH3OO+CH3CHO<=>CH3OOH+R14CH3CO	3.01E+12	0.0	11920.0
527.	CH3CHO+R18CH3COOO<=>R14CH3CO+CH3COOOH	3.01E+12	0.0	11920.0
528.	CH3CHO+R2OH<=>R4CH3+HOCHO	3.00E+15	-1.1	0.0
529.	CH3CHO+R2OH<=>R13CH2CHO+H2O	1.72E+05	2.4	815.0
530.	R14CH3CO(+M)<=>R4CH3+CO(+M)	1.07E+12	0.6	16900.0
Low pressure limit: 0.56500E+19 -0.97000E+00 0.14600E+05				
TROE centering: 0.62900E+00 0.87300E+10 0.55200E+01 0.76000E+08				
531.	R14CH3CO+R1H<=>CH2COZ+H2	2.00E+13	0.0	0.0
532.	R14CH3CO+B1O<=>CH2COZ+R2OH	2.00E+13	0.0	0.0
533.	R14CH3CO+R4CH3<=>CH2COZ+CH4	5.00E+13	0.0	0.0
534.	R14CH3CO+O2<=>R18CH3COOO	1.20E+11	0.0	-1100.0
535.	R18CH3COOO+R3OOH<=>CH3COOOH+O2	1.75E+10	0.0	-3275.0
536.	H2O2+R18CH3COOO<=>R3OOH+CH3COOOH	2.41E+12	0.0	9936.0
537.	CH4+R18CH3COOO<=>R4CH3+CH3COOOH	1.81E+11	0.0	18480.0
538.	HCHO+R18CH3COOO<=>R5CHO+CH3COOOH	1.99E+12	0.0	11660.0
539.	C2H6+R18CH3COOO<=>R11C2H5+CH3COOOH	1.70E+13	0.0	20460.0
540.	CH3COOOH<=>RCH3CO2+R2OH	5.01E+14	0.0	40150.0
541.	RCH3CO2+M<=>R4CH3+CO2+M	4.40E+15	0.0	10500.0
542.	R13CH2CHO(+M)<=>CH2COZ+R1H(+M)	1.43E+15	-0.1	45600.0
Low pressure limit: 0.60000E+30 -0.38000E+01 0.43424E+05				
TROE centering: 0.98500E+00 0.39300E+03 0.98000E+10 0.50000E+10				
543.	R13CH2CHO(+M)<=>R4CH3+CO(+M)	2.93E+12	0.3	40300.0
Low pressure limit: 0.95200E+34 -0.50700E+01 0.41300E+05				
TROE centering: 0.71300E-16 0.11500E+04 0.49900E+10 0.17900E+10				
544.	R13CH2CHO+O2<=>HCHO+CO+R2OH	8.95E+13	-0.6	10120.0
545.	B5CH2+CO(+M)<=>CH2COZ(+M)	8.10E+11	0.0	0.0
Low pressure limit: 0.26900E+34 -0.51100E+01 0.70950E+04				
TROE centering: 0.59070E+00 0.27500E+03 0.12260E+04 0.51850E+04				
H2	Enhanced by	2.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
AR	Enhanced by	7.000E-01		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	2.000E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
HE	Enhanced by	7.000E-01		
546.	CH2COZ+R1H<=>R4CH3+CO	1.10E+13	0.0	3400.0
547.	CH2COZ+R1H<=>R12CHCOV+H2	2.00E+14	0.0	8000.0
548.	CH2COZ+B1O<=>B5CH2+CO2	1.75E+12	0.0	1350.0
549.	CH2COZ+B1O<=>R12CHCOV+R2OH	1.00E+13	0.0	8000.0
550.	CH2COZ+R2OH<=>R12CHCOV+H2O	1.00E+13	0.0	2000.0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

551. CH ₂ CO ₂ +R ₂ OH<=>R ₆ CH ₂ OH+CO	2.00E+12	0.0	-1010.0
552. B ₆ CH ₂ +CH ₂ CO ₂ <=>C ₂ H ₄ Z+CO	1.60E+14	0.0	0.0
553. R ₁₂ CHCOV+R ₂ OH=>H ₂ +CO+CO	1.00E+14	0.0	0.0
554. R ₁₂ CHCOV+B ₁ O=>R ₁ H+CO+CO	8.00E+13	0.0	0.0
555. R ₁₂ CHCOV+R ₁ H<=>B ₆ CH ₂ +CO	1.00E+14	0.0	0.0
556. R ₁₂ CHCOV+O ₂ <=>R ₂ OH+2CO	1.60E+12	0.0	854.0
557. B ₄ CH+CO+M<=>R ₁₂ CHCOV+M	7.57E+22	-1.9	0.0
558. B ₄ CH+HCHO<=>R ₁ H+CH ₂ CO ₂	9.46E+13	0.0	-515.0
559. B ₄ CH+R ₁₂ CHCOV<=>CO+C ₂ H ₂ T	5.00E+13	0.0	0.0
560. R ₁₀ C ₂ H ₃ V+R ₁ H(+M)<=>C ₂ H ₄ Z(+M)	6.08E+12	0.3	280.0
Low pressure limit: 0.14000E+31 -0.38600E+01 0.33200E+04			
TROE centering: 0.78200E+00 0.20750E+03 0.26630E+04 0.60950E+04			
H ₂	Enhanced by	2.000E+00	
H ₂ O	Enhanced by	6.000E+00	
AR	Enhanced by	7.000E-01	
CO	Enhanced by	1.500E+00	
CO ₂	Enhanced by	2.000E+00	
CH ₄	Enhanced by	2.000E+00	
C ₂ H ₆	Enhanced by	3.000E+00	
HE	Enhanced by	7.000E-01	
561. C ₂ H ₄ Z(+M)<=>H ₂ +H ₂ CC(+M)	8.00E+12	0.4	88770.0
Low pressure limit: 0.70000E+51 -0.93100E+01 0.99860E+05			
TROE centering: 0.73450E+00 0.18000E+03 0.10350E+04 0.54170E+04			
H ₂	Enhanced by	2.000E+00	
H ₂ O	Enhanced by	6.000E+00	
CH ₄	Enhanced by	2.000E+00	
CO	Enhanced by	1.500E+00	
CO ₂	Enhanced by	2.000E+00	
C ₂ H ₆	Enhanced by	3.000E+00	
AR	Enhanced by	7.000E-01	
562. C ₂ H ₄ Z+R ₁ H<=>R ₁₀ C ₂ H ₃ V+H ₂	5.07E+07	1.9	12950.0
563. C ₂ H ₄ Z+B ₁ O<=>R ₄ CH ₃ +R ₅ CHO	6.78E+06	1.9	183.0
564. C ₂ H ₄ Z+B ₁ O<=>R ₁₃ CH ₂ CHO+R ₁ H	6.78E+06	1.9	183.0
565. C ₂ H ₄ Z+R ₂ OH<=>R ₁₀ C ₂ H ₃ V+H ₂ O	2.23E+04	2.7	2215.5
566. C ₂ H ₄ Z+R ₄ CH ₃ <=>R ₁₀ C ₂ H ₃ V+CH ₄	6.62E+00	3.7	9500.0
567. C ₂ H ₄ Z+O ₂ <=>R ₁₀ C ₂ H ₃ V+R ₃ OOH	4.22E+13	0.0	57623.1
568. C ₂ H ₄ Z+R ₇ CH ₃ O<=>R ₁₀ C ₂ H ₃ V+CH ₃ OH	1.20E+11	0.0	6750.0
569. C ₂ H ₄ Z+R ₈ CH ₃ OO<=>R ₁₀ C ₂ H ₃ V+CH ₃ OOH	8.59E+00	3.8	27132.0
570. C ₂ H ₄ Z+R ₁₇ C ₂ H ₅ OO<=>R ₁₀ C ₂ H ₃ V+C ₂ H ₅ OOH	8.59E+00	3.8	27132.0
571. C ₂ H ₄ Z+R ₁₈ CH ₃ COOO<=>R ₁₀ C ₂ H ₃ V+CH ₃ COOOH	1.13E+13	0.0	30430.0
572. C ₂ H ₄ Z+R ₈ CH ₃ OO<=>C ₂ H ₄ O#3+R ₇ CH ₃ O	2.82E+12	0.0	17110.0
573. C ₂ H ₄ Z+R ₁₇ C ₂ H ₅ OO<=>C ₂ H ₄ O#3+R ₁₅ C ₂ H ₅ O	2.82E+12	0.0	17110.0
574. C ₂ H ₄ Z+R ₃ OOH<=>C ₂ H ₄ O#3+R ₂ OH	5.58E+11	0.0	17190.0
575. B ₄ CH+CH ₄ <=>C ₂ H ₄ Z+R ₁ H	6.00E+13	0.0	0.0
576. B ₆ CH ₂ +R ₄ CH ₃ <=>C ₂ H ₄ Z+R ₁ H	2.00E+13	0.0	0.0
577. C ₂ H ₂ T+R ₁ H(+M)<=>R ₁₀ C ₂ H ₃ V(+M)	1.71E+10	1.3	2709.0
Low pressure limit: 0.63460E+32 -0.46640E+01 0.37800E+04			
TROE centering: 0.76000E+00 0.10000E+31 0.10000E-29			
H ₂	Enhanced by	2.000E+00	
H ₂ O	Enhanced by	6.000E+00	
AR	Enhanced by	7.000E-01	
CO	Enhanced by	1.500E+00	
CO ₂	Enhanced by	2.000E+00	
CH ₄	Enhanced by	2.000E+00	
C ₂ H ₆	Enhanced by	3.000E+00	
HE	Enhanced by	7.000E-01	
578. R ₁₀ C ₂ H ₃ V+O ₂ <=>HCHO+R ₅ CHO	1.70E+29	-5.3	6503.1
579. R ₁₀ C ₂ H ₃ V+O ₂ <=>R ₁₃ CH ₂ CHO+B ₁ O	7.00E+14	-0.6	5262.4
580. R ₁₀ C ₂ H ₃ V+O ₂ =>R ₁ H+CO+HCHO	5.19E+15	-1.3	3312.6
581. R ₄ CH ₃ +R ₁₀ C ₂ H ₃ V<=>CH ₄ +C ₂ H ₂ T	3.92E+11	0.0	0.0
582. R ₁₀ C ₂ H ₃ V+R ₁ H<=>C ₂ H ₂ T+H ₂	9.00E+13	0.0	0.0
583. R ₁₀ C ₂ H ₃ V+R ₁ H<=>H ₂ CC+H ₂	6.00E+13	0.0	0.0

584. $R10C2H3V+R2OH \rightleftharpoons C2H2T+H2O$ 3.01E+13 0.0 0.0
585. $R9C2HT+R1H(+M) \rightleftharpoons C2H2T(+M)$ 1.00E+17 0.0 0.0
Low pressure limit: 0.37500E+34 -0.48000E+01 0.19000E+04
TROE centering: 0.64600E+00 0.13200E+03 0.13150E+04 0.55660E+04
H2 Enhanced by 2.000E+00
H2O Enhanced by 6.000E+00
AR Enhanced by 7.000E-01
CO Enhanced by 1.500E+00
CO2 Enhanced by 2.000E+00
CH4 Enhanced by 2.000E+00
C2H6 Enhanced by 3.000E+00
HE Enhanced by 7.000E-01
586. $C2H2T(+M) \rightleftharpoons H2CC(+M)$ 8.00E+14 -0.5 50750.0
Low pressure limit: 0.24500E+16 -0.64000E+00 0.49700E+05
H2 Enhanced by 2.000E+00
H2O Enhanced by 6.000E+00
CH4 Enhanced by 2.000E+00
CO Enhanced by 1.500E+00
CO2 Enhanced by 2.000E+00
C2H6 Enhanced by 3.000E+00
C2H2T Enhanced by 2.500E+00
C2H4Z Enhanced by 2.500E+00
587. $C2H2T+B1O \rightleftharpoons B5CH2+CO$ 4.08E+06 2.0 1900.0
588. $C2H2T+B1O \rightleftharpoons R12CHCOV+R1H$ 1.63E+07 2.0 1900.0
589. $C2H2T+R2OH \rightleftharpoons CH2COZ+R1H$ 2.18E-04 4.5 -1000.0
590. $C2H2T+R2OH \rightleftharpoons HCCOH+R1H$ 5.04E+05 2.3 13500.0
591. $C2H2T+R2OH \rightleftharpoons R9C2HT+H2O$ 3.37E+07 2.0 14000.0
592. $C2H2T+R2OH \rightleftharpoons R4CH3+CO$ 4.83E-04 4.0 -2000.0
593. $C2H2T+R5CHO \rightleftharpoons R10C2H3V+CO$ 1.00E+07 2.0 6000.0
594. $C2H2T+B5CH2 \rightleftharpoons C3H3+R1H$ 1.20E+13 0.0 6620.0
595. $C2H2T+B6CH2 \rightleftharpoons C3H3+R1H$ 2.00E+13 0.0 0.0
596. $C2H2T+R12CHCOV \rightleftharpoons C3H3+CO$ 1.00E+11 0.0 3000.0
597. $H2CC+R1H \rightleftharpoons C2H2T+R1H$ 1.00E+14 0.0 0.0
598. $H2CC+R2OH \rightleftharpoons CH2COZ+R1H$ 2.00E+13 0.0 0.0
599. $H2CC+O2 \rightleftharpoons R5CHO+R5CHO$ 1.00E+13 0.0 0.0
600. $R1H+HCCOH \rightleftharpoons R1H+CH2COZ$ 1.00E+13 0.0 0.0
601. $C2H5OH(+M) \rightleftharpoons R6CH2OH+R4CH3(+M)$ 2.00E+23 -1.7 96400.0
Low pressure limit: 0.31100E+86 -0.18840E+02 0.11310E+06
TROE centering: 0.50000E+00 0.55000E+03 0.82500E+03 0.61000E+04
H2 Enhanced by 2.000E+00
H2O Enhanced by 5.000E+00
CO Enhanced by 2.000E+00
CO2 Enhanced by 3.000E+00
602. $C2H5OH(+M) \rightleftharpoons R11C2H5+R2OH(+M)$ 2.40E+23 -1.6 99540.0
Low pressure limit: 0.51100E+86 -0.18800E+02 0.11877E+06
TROE centering: 0.50000E+00 0.65000E+03 0.80000E+03 0.10000E+16
H2 Enhanced by 2.000E+00
H2O Enhanced by 5.000E+00
CO Enhanced by 2.000E+00
CO2 Enhanced by 3.000E+00
603. $C2H5OH(+M) \rightleftharpoons C2H4Z+H2O(+M)$ 1.32E+05 2.5 60660.0
Low pressure limit: 0.30900E+56 -0.10920E+02 0.62644E+05
TROE centering: 0.89700E+00 0.10000E+11 0.10000E+01 0.50000E+10
H2O Enhanced by 5.000E+00
604. $C2H5OH(+M) \rightleftharpoons CH3CHO+H2(+M)$ 7.24E+11 0.1 91010.0
Low pressure limit: 0.44600E+88 -0.19420E+02 0.11558E+06
TROE centering: 0.90000E+00 0.90000E+03 0.11000E+04 0.35000E+04
H2O Enhanced by 5.000E+00
605. $C2H5OH+O2 \rightleftharpoons R23C2H4OH+R3OOH$ 2.00E+13 0.0 52800.0
606. $C2H5OH+O2 \rightleftharpoons R24C2H4OH+R3OOH$ 1.50E+13 0.0 50150.0
607. $C2H5OH+R2OH \rightleftharpoons R23C2H4OH+H2O$ 1.81E+11 0.4 717.0
608. $C2H5OH+R2OH \rightleftharpoons R24C2H4OH+H2O$ 5.56E+10 0.5 -380.0
609. $C2H5OH+R2OH \rightleftharpoons R15C2H5O+H2O$ 1.50E+10 0.8 2534.0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

610.	C2H5OH+R1H<=>R23C2H4OH+H2	1.88E+03	3.2	7150.0
611.	C2H5OH+R1H<=>R24C2H4OH+H2	1.79E+05	2.5	3420.0
612.	C2H5OH+R1H<=>R15C2H5O+H2	5.36E+04	2.5	4405.0
613.	C2H5OH+R3OOH<=>R23C2H4OH+H2O2	2.38E+04	2.5	16490.0
614.	C2H5OH+R3OOH<=>R24C2H4OH+H2O2	6.00E+12	0.0	16000.0
615.	C2H5OH+R3OOH<=>R15C2H5O+H2O2	2.50E+12	0.0	24000.0
616.	C2H5OH+R8CH3OO<=>R23C2H4OH+CH3OOH	1.23E+04	2.5	15750.0
617.	C2H5OH+R8CH3OO<=>R24C2H4OH+CH3OOH	8.20E+03	2.5	10750.0
618.	C2H5OH+R8CH3OO<=>R15C2H5O+CH3OOH	2.50E+12	0.0	24000.0
619.	C2H5OH+B1O<=>R23C2H4OH+R2OH	9.69E+02	3.2	4658.0
620.	C2H5OH+B1O<=>R24C2H4OH+R2OH	1.45E+05	2.5	876.0
621.	C2H5OH+B1O<=>R15C2H5O+R2OH	1.46E-03	4.7	1727.0
622.	C2H5OH+R4CH3<=>R23C2H4OH+CH4	3.30E+02	3.3	12290.0
623.	C2H5OH+R4CH3<=>R24C2H4OH+CH4	1.99E+01	3.4	7634.0
624.	C2H5OH+R4CH3<=>R15C2H5O+CH4	2.04E+00	3.6	7721.0
625.	C2H5OH+R11C2H5<=>R23C2H4OH+C2H6	5.00E+10	0.0	13400.0
626.	C2H5OH+R11C2H5<=>R24C2H4OH+C2H6	5.00E+10	0.0	10400.0
627.	C2H4Z+R2OH<=>R23C2H4OH	4.17E+20	-2.8	1240.0
628.	R24C2H4OH+M<=>CH3CHO+R1H+M	1.00E+14	0.0	25000.0
629.	RO2C2H4OH<=>R23C2H4OH+O2	3.90E+16	-1.0	30000.0
630.	RO2C2H4OH=>R2OH+HCHO+HCHO	3.13E+09	0.0	18900.0
631.	R24C2H4OH+O2<=>CH3CHO+R3OOH	3.81E+06	2.0	1641.0
632.	C2H6CO(+M)<=>R14CH3CO+R4CH3(+M)	7.11E+21	-1.6	84680.0
Low pressure limit: 0.70130E+90 -0.20380E+02 0.10715E+06				
TROE centering: 0.86300E+00 0.10000E+11 0.41640E+03 0.32900E+10				
633.	C2H6CO+R2OH<=>RCH3COCH2+H2O	1.25E+05	2.5	445.0
634.	C2H6CO+R1H<=>RCH3COCH2+H2	9.80E+05	2.4	5160.0
635.	C2H6CO+B1O<=>RCH3COCH2+R2OH	5.13E+11	0.2	4890.0
636.	C2H6CO+R4CH3<=>RCH3COCH2+CH4	3.96E+11	0.0	9784.0
637.	C2H6CO+R7CH3O<=>RCH3COCH2+CH3OH	4.34E+11	0.0	6460.0
638.	C2H6CO+O2<=>RCH3COCH2+R3OOH	6.03E+13	0.0	48500.0
639.	C2H6CO+R3OOH<=>RCH3COCH2+H2O2	1.70E+13	0.0	20460.0
640.	C2H6CO+R8CH3OO<=>RCH3COCH2+CH3OOH	1.70E+13	0.0	20460.0
641.	CH2COZ+R4CH3<=>RCH3COCH2	1.76E+04	2.5	6130.0
642.	RCH3COCH2+O2<=>RCH3COCH2O2	1.20E+11	0.0	-1100.0
643.	C2H6CO+RCH3COCH2O2<=>RCH3COCH2+C3H6O3	1.00E+11	0.0	5000.0
644.	HCHO+RCH3COCH2O2<=>R5CHO+C3H6O3	1.29E+11	0.0	9000.0
645.	R3OOH+RCH3COCH2O2<=>C3H6O3+O2	1.00E+12	0.0	0.0
646.	R10C2H3V+R5CHO<=>C2H3CHOZ	1.81E+13	0.0	0.0
647.	C2H3CHOZ+R1H<=>RCH2CHCO+H2	1.34E+13	0.0	3300.0
648.	C2H3CHOZ+B1O<=>RCH2CHCO+R2OH	5.94E+12	0.0	1868.0
649.	C2H3CHOZ+R2OH<=>RCH2CHCO+H2O	9.24E+06	1.5	-962.0
650.	C2H3CHOZ+O2<=>RCH2CHCO+R3OOH	1.01E+13	0.0	40700.0
651.	C2H3CHOZ+R3OOH<=>RCH2CHCO+H2O2	3.01E+12	0.0	11920.0
652.	C2H3CHOZ+R4CH3<=>RCH2CHCO+CH4	2.61E+06	1.8	5911.0
653.	C2H3CHOZ+R10C2H3V<=>RCH2CHCO+C2H4Z	1.74E+12	0.0	8440.0
654.	C2H3CHOZ+R7CH3O<=>RCH2CHCO+CH3OH	1.00E+12	0.0	3300.0
655.	C2H3CHOZ+R8CH3OO<=>RCH2CHCO+CH3OOH	3.01E+12	0.0	11920.0
656.	R10C2H3V+CO<=>RCH2CHCO	1.51E+11	0.0	4810.0
657.	R11C2H5+R5CHO<=>C2H5CHO	1.81E+13	0.0	0.0
658.	C2H5CHO+R1H<=>RC3H5O+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
659.	C2H5CHO+B1O<=>RC3H5O+R2OH	5.00E+12	0.0	1790.0
660.	C2H5CHO+R2OH<=>RC3H5O+H2O	2.69E+10	0.8	-340.0
661.	C2H5CHO+R4CH3<=>RC3H5O+CH4	2.61E+06	1.8	5911.0
662.	C2H5CHO+R3OOH<=>RC3H5O+H2O2	2.80E+12	0.0	13600.0
663.	C2H5CHO+R7CH3O<=>RC3H5O+CH3OH	1.00E+12	0.0	3300.0
664.	C2H5CHO+R8CH3OO<=>RC3H5O+CH3OOH	3.01E+12	0.0	11920.0
665.	C2H5CHO+R11C2H5<=>RC3H5O+C2H6	1.00E+12	0.0	8000.0
666.	C2H5CHO+R15C2H5O<=>RC3H5O+C2H5OH	6.03E+11	0.0	3300.0
667.	C2H5CHO+R17C2H5OO<=>RC3H5O+C2H5OOH	3.01E+12	0.0	11920.0
668.	C2H5CHO+O2<=>RC3H5O+R3OOH	1.01E+13	0.0	40700.0
669.	C2H5CHO+R18CH3COOO<=>RC3H5O+CH3COOOH	3.01E+12	0.0	11920.0

670. C2H5CHO+R10C2H3V<=>RC3H5O+C2H4Z	1.70E+12	0.0	8440.0
671. R11C2H5+CO<=>RC3H5O	1.51E+11	0.0	4810.0
672. CH3OCH3(+M)<=>R4CH3+R7CH3O(+M)	4.38E+21	-1.6	83890.0
Low pressure limit: 0.75200E+16 0.00000E+00 0.42790E+05			
TROE centering: 0.45400E+00 0.10000E-29 0.25100E+04			
673. CH3OCH3+R2OH<=>RCH3OCH2+H2O	6.32E+06	2.0	-651.7
674. CH3OCH3+R1H<=>RCH3OCH2+H2	7.72E+06	2.1	3384.0
675. CH3OCH3+B1O<=>RCH3OCH2+R2OH	7.75E+08	1.4	2250.0
676. CH3OCH3+R3OOH<=>RCH3OCH2+H2O2	1.68E+13	0.0	17690.0
677. CH3OCH3+R8CH3OO<=>RCH3OCH2+CH3OOH	3.12E+02	3.1	13190.0
678. CH3OCH3+R4CH3<=>RCH3OCH2+CH4	1.45E-06	5.7	5700.0
679. CH3OCH3+O2<=>RCH3OCH2+R3OOH	4.10E+13	0.0	44910.0
680. CH3OCH3+R7CH3O<=>RCH3OCH2+CH3OH	6.02E+11	0.0	4074.0
681. CH3OCH3+RCH3OCH2O2<=>RCH3OCH2+CH3OCH2O2H	5.00E+12	0.0	17690.0
682. CH3OCH3+RO2CHO<=>RCH3OCH2+HO2CHO	4.43E+04	2.6	13910.0
683. CH3OCH3+ROCHO<=>RCH3OCH2+HOCHO	1.00E+13	0.0	17690.0
684. RCH3OCH2<=>HCHO+R4CH3	1.60E+13	0.0	25500.0
685. RCH3OCH2+R7CH3O<=>CH3OCH3+HCHO	2.41E+13	0.0	0.0
686. RCH3OCH2+HCHO<=>CH3OCH3+R5CHO	5.49E+03	2.8	5862.0
687. RCH3OCH2+CH3CHO<=>CH3OCH3+R14CH3CO	1.26E+12	0.0	8499.0
688. RCH3OCH2+O2<=>RCH3OCH2O2	2.00E+12	0.0	0.0
689. RCH3OCH2O2+HCHO<=>CH3OCH2O2H+R5CHO	1.00E+12	0.0	11660.0
690. RCH3OCH2O2+CH3CHO<=>CH3OCH2O2H+R14CH3CO	2.80E+12	0.0	13600.0
691. RCH3OCH2O2+RCH3OCH2O2	1.55E+23	-4.5	0.0
=>O2+RCH3OCH2O+RCH3OCH2O			
692. RCH3OCH2O+R2OH<=>CH3OCH2O2H	2.00E+13	0.0	0.0
693. R7CH3O+HCHO<=>RCH3OCH2O	1.00E+11	0.0	11900.0
694. RCH3OCH2O+O2<=>CH3OCHO+R3OOH	5.00E+10	0.0	500.0
695. CH3OCHO+R1H<=>RCH3OCH2O	1.00E+13	0.0	7838.0
696. RCH3OCH2O2<=>RCH2OCH2O2H	6.00E+10	0.0	21580.0
697. RCH2OCH2O2H=>R2OH+HCHO+HCHO	1.50E+13	0.0	19760.0
698. RCH2OCH2O2H+O2<=>RO2CH2OCH2O2H	7.00E+11	0.0	0.0
699. RO2CH2OCH2O2H<=>HO2CH2OCHO+R2OH	4.00E+10	0.0	18580.0
700. HO2CH2OCHO<=>ROCH2OCHO+R2OH	2.00E+16	0.0	41500.0
701. HCHO+ROCHO<=>ROCH2OCHO	1.25E+11	0.0	11900.0
702. ROCH2OCHO<=>RHOCH2OCO	1.00E+11	0.0	14000.0
703. RHOCH2O+CO<=>RHOCH2OCO	1.50E+11	0.0	4800.0
704. R6CH2OH+CO2<=>RHOCH2OCO	1.50E+11	0.0	35720.0
705. RCH2OCHO+R1H<=>CH3OCHO	1.00E+14	0.0	0.0
706. R21CH3OCO+R1H<=>CH3OCHO	1.00E+14	0.0	0.0
707. CH3OCHO(+M)<=>CH3OH+CO(+M)	1.00E+14	0.0	62500.0
Low pressure limit: 0.61430E+61 -0.12070E+02 0.75400E+05			
TROE centering: 0.78000E+00 0.82800E+10 0.43890E+03 0.67000E+09			
708. R7CH3O+R5CHO<=>CH3OCHO	3.00E+13	0.0	0.0
709. R4CH3+ROCHO<=>CH3OCHO	1.00E+13	0.0	0.0
710. CH3OCHO+O2<=>R21CH3OCO+R3OOH	1.00E+13	0.0	49700.0
711. CH3OCHO+O2<=>RCH2OCHO+R3OOH	2.05E+13	0.0	52000.0
712. CH3OCHO+R2OH<=>R21CH3OCO+H2O	1.58E+07	1.8	934.0
713. CH3OCHO+R2OH<=>RCH2OCHO+H2O	5.27E+09	1.0	1586.0
714. CH3OCHO+R3OOH<=>R21CH3OCO+H2O2	4.82E+03	2.6	13910.0
715. CH3OCHO+R3OOH<=>RCH2OCHO+H2O2	2.38E+04	2.5	16490.0
716. CH3OCHO+B1O<=>R21CH3OCO+R2OH	2.76E+05	2.5	2830.0
717. CH3OCHO+B1O<=>RCH2OCHO+R2OH	9.80E+05	2.4	4750.0
718. CH3OCHO+R1H<=>R21CH3OCO+H2	6.50E+05	2.4	4471.0
719. CH3OCHO+R1H<=>RCH2OCHO+H2	6.65E+05	2.5	6756.0
720. CH3OCHO+R4CH3<=>R21CH3OCO+CH4	7.55E-01	3.5	5481.0
721. CH3OCHO+R4CH3<=>RCH2OCHO+CH4	4.52E-01	3.6	7154.0
722. CH3OCHO+R7CH3O<=>R21CH3OCO+CH3OH	5.48E+11	0.0	5000.0
723. CH3OCHO+R7CH3O<=>RCH2OCHO+CH3OH	2.17E+11	0.0	6458.0
724. CH3OCHO+R8CH3OO<=>R21CH3OCO+CH3OOH	4.82E+03	2.6	13910.0
725. CH3OCHO+R8CH3OO<=>RCH2OCHO+CH3OOH	2.38E+04	2.5	16490.0
726. CH3OCHO+R5CHO<=>R21CH3OCO+HCHO	5.40E+06	1.9	17010.0
727. CH3OCHO+R5CHO<=>RCH2OCHO+HCHO	1.03E+05	2.5	18430.0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

728.	R21CH3OCO<=>RCH2OCHO	1.63E+12	-0.2	40670.0
729.	R4CH3+CO2<=>R21CH3OCO	4.76E+07	1.5	34700.0
730.	R7CH3O+CO<=>R21CH3OCO	1.55E+06	2.0	5730.0
731.	HCHO+R5CHO<=>RCH2OCHO	1.50E+11	0.0	11900.0
732.	C3H8(+M)<=>R4CH3+R11C2H5(+M)	1.29E+37	-5.8	97380.0
Low pressure limit: 0.56400E+75 -0.15740E+02 0.98714E+05				
TROE centering: 0.31000E+00 0.50000E+02 0.30000E+04 0.90000E+04				
H2	Enhanced by	2.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
AR	Enhanced by	7.000E-01		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	2.000E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
HE	Enhanced by	7.000E-01		
733.	R10C2H3V+R4CH3(+M)<=>C3H6Y(+M)	2.50E+13	0.0	0.0
Low pressure limit: 0.42700E+59 -0.11940E+02 0.97698E+04				
TROE centering: 0.17500E+00 0.13406E+04 0.60000E+05 0.10140E+05				
734.	C3H6Y+B1O<=>R11C2H5+R5CHO	1.58E+07	1.8	-1216.0
735.	C2H2T+R4CH3<=>RC3H5Y	1.04E+51	-11.9	36476.0
736.	RC3H5Y+B1O<=>C2H3CHOZ+R1H	6.00E+13	0.0	0.0
737.	RC3H5Y+O2<=>R14CH3CO+HCHO	7.14E+15	-1.2	21046.0
738.	RC3H5Y+R1H(+M)<=>C3H6Y(+M)	2.00E+14	0.0	0.0
Low pressure limit: 0.13300E+61 -0.12000E+02 0.59678E+04				
TROE centering: 0.20000E-01 0.10966E+04 0.10966E+04 0.68595E+04				
H2	Enhanced by	2.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
AR	Enhanced by	7.000E-01		
739.	C3H6Y<=>sC3H5+R1H	7.71E+69	-16.1	140000.0
740.	C3H6Y<=>tC3H5+R1H	5.62E+71	-16.6	139300.0
741.	C2H2T+R4CH3<=>sC3H5	2.40E+38	-8.2	17100.0
742.	sC3H5+O2<=>CH3CHO+R5CHO	1.00E+11	0.0	0.0
743.	C2H2T+R4CH3<=>tC3H5	7.31E+25	-5.1	21150.0
744.	sC3H5+B1O<=>C2H4Z+R5CHO	6.00E+13	0.0	0.0
745.	tC3H5+O2<=>R14CH3CO+HCHO	1.00E+11	0.0	0.0
746.	tC3H5+B1O<=>R4CH3+CH2COZ	6.00E+13	0.0	0.0
747.	aC3H4+R2OH<=>CH2COZ+R4CH3	3.12E+12	0.0	-397.0
748.	aC3H4+B1O<=>C2H4Z+CO	2.00E+07	1.8	1000.0
749.	aC3H4+B1O<=>C2H2T+HCHO	3.00E-03	4.6	-4243.0
750.	pC3H4+B1O<=>R12CHCOV+R4CH3	7.30E+12	0.0	2250.0
751.	pC3H4+B1O<=>C2H4Z+CO	1.00E+13	0.0	2250.0
752.	C2H2T+R4CH3<=>pC3H4+R1H	2.51E+11	0.6	15453.0
753.	R9C2HT+R4CH3<=>pC3H4	8.00E+13	0.0	0.0
754.	pC3H4+R2OH<=>CH2COZ+R4CH3	5.00E-04	4.5	-1000.0
755.	pC3H4+B1O<=>R10C2H3V+R5CHO	3.20E+12	0.0	2010.0
756.	C3H3+B1O<=>HCHO+R9C2HT	2.00E+13	0.0	0.0
757.	C3H3+O2<=>CH2COZ+R5CHO	3.00E+10	0.0	2868.0
758.	R11C2H5+R9C2HT<=>C3H3+R4CH3	1.81E+13	0.0	0.0
759.	C2H2T+R4CH3<=>aC3H4+R1H	9.20E+10	0.5	23950.0
760.	R10C2H3V+HCHO<=>RC3H5O	1.50E+11	0.0	10600.0
761.	C4H10(+M)<=>R11C2H5+R11C2H5(+M)	1.36E+37	-6.0	92929.0
Low pressure limit: 0.47200E+19 0.00000E+00 0.49578E+05				
TROE centering: 0.79982E-01 0.10000E-19 0.32428E+05 0.48582E+04				
762.	C4H10(+M)<=>R19C3H7+R4CH3(+M)	6.60E+52	-10.6	100330.0
Low pressure limit: 0.53400E+18 0.00000E+00 0.42959E+05				
TROE centering: 0.95015E-01 0.10000E-19 0.53476E+04 0.43256E+04				
763.	R11C2H5+C2H4Z<=>R20C4H9	1.32E+04	2.5	6130.0
764.	R20C4H9+R1H<=>C4H10	3.61E+13	0.0	0.0

765. R10C2H3V+R11C2H5<=>C4H8Y	9.00E+12	0.0	0.0
766. C2H2T+R9C2HT<=>C4H2+R1H	9.60E+13	0.0	0.0
767. R20C4H9+O2<=>C4H8Y+R3OOH	8.37E-01	3.6	11960.0
768. B4CH+C2H2T=C3H2+R1H	2.10E+14	0.0	-500.0
769. C3H2+B1O=R9C2HT+R1H+CO	3.00E+13	0.0	0.0
770. C3H2+R2OH=C2H2T+R5CHO	5.00E+13	0.0	0.0
771. C3H2+O2=R12CHCOV+CO+R1H	5.00E+13	0.0	0.0
772. C3H3+R1H=C3H2+H2	2.00E+13	0.0	0.0
773. C3H3+R2OH=C3H2+H2O	2.00E+13	0.0	0.0
774. C3H2+R1H=C3H3	1.00E+14	0.0	0.0
775. C3H3+R3OOH=>R2OH+R9C2HT+HCHO	1.00E+15	-0.8	0.0
776. C3H3+C3H3=C6H6#	1.00E+12	0.0	0.0
777. pC3H4+M=C3H3+R1H+M	4.70E+18	0.0	80000.0
778. C2H2T+B5CH2=pC3H4	3.50E+12	0.0	0.0
779. pC3H4+O2=C3H3+R3OOH	2.10E+12	0.0	40800.0
780. pC3H4+R1H(+M)=tC3H5(+M)	8.50E+12	0.0	1700.0
Low pressure limit: 0.56000E+26 -0.72700E+01 0.65800E+04			
781. pC3H4+R1H(+M)=sC3H5(+M)	5.80E+12	0.0	3100.0
Low pressure limit: 0.38000E+26 -0.72700E+01 0.79800E+04			
782. pC3H4+R4CH3=C3H3+CH4	2.20E+00	3.5	5700.0
783. pC3H4+R1H=C3H3+H2	1.70E+05	2.5	2500.0
784. pC3H4+R9C2HT=C3H3+C2H2T	3.60E+12	0.0	0.0
785. pC3H4+R10C2H3V=C3H3+C2H4Z	2.20E+00	3.5	4700.0
786. pC3H4+R11C2H5=C3H3+C2H6	2.20E+00	3.5	6600.0
787. pC3H4+B1O=R2OH+C3H3	3.40E+04	2.2	4800.0
788. pC3H4+R2OH=R1H+C2H3CHOZ	4.30E+11	0.0	-800.0
789. pC3H4+R2OH=C3H3+H2O	3.10E+06	2.0	-300.0
790. pC3H4+R3OOH=C2H4Z+CO+R2OH	6.00E+09	0.0	8000.0
791. pC3H4+R3OOH=C3H3+H2O2	9.60E+03	2.6	13900.0
792. pC3H4+R7CH3O=CH3OH+C3H3	2.00E+12	0.0	4000.0
793. aC3H4=pC3H4	2.50E+12	0.0	59000.0
794. aC3H4+M=C3H3+R1H+M	2.00E+18	0.0	80000.0
795. aC3H4+O2=C3H3+R3OOH	2.80E+13	0.0	39000.0
796. aC3H4+R1H(+M)=RC3H5Y(+M)	4.00E+12	0.0	2700.0
Low pressure limit: 0.56000E+34 -0.50000E+01 0.44400E+04			
797. aC3H4+R1H(+M)=tC3H5(+M)	8.50E+12	0.0	2000.0
Low pressure limit: 0.11000E+35 -0.50000E+01 0.44400E+04			
798. C2H4Z+B4CH=aC3H4+R1H	1.30E+14	0.0	-300.0
799. R10C2H3V+B5CH2=aC3H4+R1H	3.00E+13	0.0	0.0
800. iC4H3+B5CH2=aC3H4+R9C2HT	2.00E+13	0.0	0.0
801. aC3H4+B1O=R1H+CO+R10C2H3V	6.60E+12	0.0	3000.0
802. aC3H4+R1H=C3H3+H2	1.30E+06	2.5	9200.0
803. aC3H4+B1O=C3H3+R2OH	6.20E+12	0.0	1900.0
804. aC3H4+R2OH=C3H3+H2O	6.20E+06	2.0	400.0
805. aC3H4+R4CH3=C3H3+CH4	2.00E+12	0.0	7700.0
806. aC3H4+R9C2HT=C3H3+C2H2T	1.00E+13	0.0	0.0
807. aC3H4+RC3H5Y=C3H3+C3H6Y	2.00E+12	0.0	7700.0
808. aC3H4+R7CH3O=CH3OH+C3H3	4.00E+12	0.0	9600.0
809. aC3H4+R11C2H5=C2H6+C3H3	5.00E+14	0.0	19800.0
810. aC3H4+R10C2H3V=C2H4Z+C3H3	5.00E+14	0.0	19800.0
811. aC3H4+R4CH3=iC4H7	4.00E+10	0.0	5000.0
812. cC3H4=aC3H4	1.50E+14	0.0	50500.0
813. cC3H4=pC3H4	7.10E+13	0.0	47800.0
814. cC3H4+R1H=cC3H3+H2	5.40E+04	2.5	-1900.0
815. cC3H4+R2OH=cC3H3+H2O	3.00E+06	2.0	-1500.0
816. cC3H4+R2OH=C2H4Z+R5CHO	2.80E+12	0.0	-1000.0
817. cC3H3+R3OOH=R2OH+C2H2T+R5CHO	1.00E+15	-0.8	0.0
818. cC3H3+R4CH3=cC4H6	1.00E+13	0.0	0.0
819. cC3H3+R1H=cC3H4	1.00E+14	0.0	0.0
820. RC3H5Y+R1H=aC3H4+H2	1.80E+13	0.0	0.0
821. RC3H5Y+R1H=C3H6Y	1.00E+14	0.0	0.0
822. RC3H5Y+R4CH3=aC3H4+CH4	3.00E+12	-0.3	-100.0
823. RC3H5Y+R4CH3=C4H8Y	1.00E+14	-0.3	-100.0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

824.	RC3H5Y+R2OH=aC3H4+H2O	6.03E+12	0.0	0.0
825.	RC3H5Y+R10C2H3V=aC3H4+C2H4Z	2.40E+12	0.0	0.0
826.	RC3H5Y+R11C2H5=aC3H4+C2H6	2.00E+13	0.0	-100.0
827.	RC3H5Y+B1O=R10C2H3V+HCHO	1.80E+14	0.0	0.0
828.	RC3H5Y+RC3H5Y=aC3H4+C3H6Y	8.40E+10	0.0	-300.0
829.	sC3H5=RC3H5Y	5.00E+13	0.0	37000.0
830.	tC3H5+R1H=aC3H4+H2	3.30E+12	0.0	0.0
831.	tC3H5+R4CH3=aC3H4+CH4	1.00E+11	0.0	0.0
832.	tC3H5+R10C2H3V=aC3H4+C2H4Z	1.00E+12	0.0	0.0
833.	tC3H5+R11C2H5=aC3H4+C2H6	1.00E+12	0.0	0.0
834.	tC3H5+O2=R4CH3+CO+HCHO	4.30E+12	0.0	0.0
835.	tC3H5=RC3H5Y	2.00E+13	0.0	47000.0
836.	C2H4Z+B6CH2=C3H6Y	9.60E+13	0.0	0.0
837.	C2H4Z+B5CH2=C3H6Y	3.20E+12	0.0	5100.0
838.	C2H4Z+R4CH3=C3H6Y+R1H	6.60E+11	0.0	15900.0
839.	R11C2H5+B6CH2=C3H6Y+R1H	9.00E+12	0.0	0.0
840.	C2H6+B4CH=C3H6Y+R1H	1.10E+14	0.0	-300.0
841.	C3H6Y+R1H=sC3H5+H2	4.60E+05	2.5	9800.0
842.	C3H6Y+R1H=tC3H5+H2	8.00E+05	2.5	12300.0
843.	C3H6Y+R1H=RC3H5Y+H2	1.70E+05	2.5	2500.0
844.	C3H6Y+R4CH3=RC3H5Y+CH4	2.20E+00	3.5	5700.0
845.	C3H6Y+R4CH3=sC3H5+CH4	8.40E-01	3.5	11700.0
846.	C3H6Y+R4CH3=tC3H5+CH4	1.30E+00	3.5	12900.0
847.	C3H6Y+R11C2H5=RC3H5Y+C2H6	2.20E+00	3.5	6600.0
848.	C3H6Y+B1O=>CH2COZ+R1H+R4CH3	1.20E+05	2.6	-1130.0
849.	C3H6Y+B1O=RC3H5Y+R2OH	1.70E+11	0.7	5900.0
850.	C3H6Y+R2OH=HCHO+R11C2H5	1.45E+12	0.0	-900.0
851.	C3H6Y+R2OH=R4CH3+CH3CHO	1.45E+12	0.0	-900.0
852.	C3H6Y+R2OH=RC3H5Y+H2O	3.10E+06	2.0	-300.0
853.	C3H6Y+R2OH=sC3H5+H2O	1.10E+06	2.0	1450.0
854.	C3H6Y+R2OH=tC3H5+H2O	2.10E+06	2.0	2800.0
855.	C3H6Y+O2=RC3H5Y+R3OOH	1.90E+12	0.0	39000.0
856.	C3H6Y+R3OOH=RC3H5Y+H2O2	9.60E+03	2.6	13900.0
857.	C3H6Y+R9C2HT=pC3H4+R10C2H3V	1.20E+13	0.0	0.0
858.	cC3H6=C3H6Y	4.60E+14	0.0	62600.0
859.	cC3H6+R1H=RC3H5Y+H2	1.60E+14	0.0	11700.0
860.	cC3H6+R2OH=RC3H5Y+H2O	7.00E+07	1.5	1000.0
861.	cC3H6+R4CH3=RC3H5Y+CH4	2.00E+11	0.0	9600.0
862.	R19C3H7=R4CH3+C2H4Z	6.40E+12	0.0	31000.0
863.	R19C3H7=R1H+C3H6Y	3.00E+13	0.0	38000.0
864.	iC3H7=R1H+C3H6Y	6.00E+13	0.0	39000.0
865.	R19C3H7=iC3H7	1.96E+10	1.0	38600.0
866.	R19C3H7+O2=R3OOH+C3H6Y	1.60E+12	0.0	5000.0
867.	iC3H7+O2=R3OOH+C3H6Y	1.40E+12	0.0	5000.0
868.	R11C2H5+R4CH3=C3H8	3.40E+13	0.0	0.0
869.	C3H8+O2=>R3OOH+iC3H7	1.40E+13	0.0	50323.7
870.	C3H8+O2=>R3OOH+R19C3H7	4.20E+13	0.0	53033.0
871.	B1O+C3H8=>R2OH+iC3H7	2.60E+13	0.0	5200.0
872.	B1O+C3H8=>R2OH+R19C3H7	1.00E+14	0.0	7850.0
873.	C3H8+R1H=>H2+iC3H7	9.00E+06	2.0	5000.0
874.	C3H8+R1H=>H2+R19C3H7	5.70E+07	2.0	7700.0
875.	C3H8+R2OH=>H2O+iC3H7	2.60E+06	2.0	-765.0
876.	C3H8+R2OH=>H2O+R19C3H7	5.40E+06	2.0	450.0
877.	C3H8+R3OOH=>H2O2+iC3H7	4.00E+11	0.0	15500.0
878.	C3H8+R3OOH=>H2O2+R19C3H7	1.20E+12	0.0	17000.0
879.	C3H8+R4CH3=>CH4+iC3H7	2.00E+11	0.0	9600.0
880.	C3H8+R4CH3=>CH4+R19C3H7	6.00E-01	4.0	8200.0
881.	C3H8+R5CHO=>HCHO+iC3H7	1.00E+07	1.9	17000.0
882.	C3H8+R5CHO=>HCHO+R19C3H7	2.00E+05	2.5	18500.0
883.	C3H8+R11C2H5=>C2H6+iC3H7	2.00E+11	0.0	11000.0
884.	C3H8+R11C2H5=>C2H6+R19C3H7	6.00E+11	0.0	13500.0
885.	C3H8+iC3H7=>C3H8+R19C3H7	8.40E-03	4.2	8700.0

886. R1H+iC3H7=>C3H8	8.30E+12	0.0	0.0
887. R9C2HT+R9C2HT=C4H2	1.80E+13	0.0	0.0
888. 2C2H2T=C4H2+H2	1.50E+13	0.0	42700.0
889. C4H2+R2OH=>R5CHO+C3H2	6.70E+12	0.0	-400.0
890. C4H2+O2=R12CHCOV+R12CHCOV	9.60E+12	0.0	31100.0
891. C4H2+R9C2HT=>C6H2+R1H	4.00E+13	0.0	0.0
892. C6H2+R1H=>C4H2+R9C2HT	9.30E+14	0.0	15100.0
893. nC4H3(+M)=C4H2+R1H(+M)	1.00E+14	0.0	36000.0
Low pressure limit: 0.10000E+15 0.00000E+00 0.30000E+05			
TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+01 0.10000E+09			
894. C3H3+B4CH=nC4H3+R1H	7.00E+13	0.0	0.0
895. R9C2HT+R10C2H3V=nC4H3+R1H	1.80E+13	0.0	0.0
896. nC4H3+R1H=iC4H3+R1H	2.40E+11	0.8	2410.0
Declared duplicate reaction...			
897. nC4H3+R1H=C4H2+H2	6.00E+12	0.0	0.0
898. 2C2H2T=nC4H3+R1H	1.00E+12	0.0	64100.0
899. nC4H3+R2OH=C4H2+H2O	1.50E+13	0.0	0.0
900. nC4H3+C2H2T=IC6H5	6.17E+15	-1.5	4800.0
901. nC4H3+C2H2T=C6H5#	7.00E+14	-0.9	6400.0
902. iC4H3=nC4H3	1.50E+13	0.0	67800.0
Declared duplicate reaction...			
903. iC4H3(+M)=C4H2+R1H(+M)	1.00E+14	0.0	55000.0
Low pressure limit: 0.20000E+16 0.00000E+00 0.48000E+05			
TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+01 0.10000E+09			
904. C3H2+B5CH2=iC4H3+R1H	1.20E+14	0.0	800.0
905. iC4H3+R1H=2C2H2T	2.40E+19	-1.6	2800.0
906. C3H3+B4CH=iC4H3+R1H	7.00E+13	0.0	0.0
907. iC4H3+R1H=C4H2+H2	1.20E+13	0.0	0.0
908. iC4H3+B1O=CH2COZ+R9C2HT	2.00E+13	0.0	0.0
909. iC4H3+R2OH=C4H2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
910. iC4H3+O2=CH2COZ+R12CHCOV	1.00E+12	0.0	0.0
911. iC4H3+R10C2H3V=2C3H3	4.00E+12	0.0	0.0
912. iC4H3+R10C2H3V=>IC6H5+R1H	6.00E+12	0.0	0.0
913. C3H3+B5CH2=C4H4+R1H	4.00E+13	0.0	0.0
914. R10C2H3V+C2H2T=>C4H4+R1H	2.00E+13	0.0	25100.0
915. C4H4+R1H=>R10C2H3V+C2H2T	2.00E+13	0.0	12400.0
916. C2H4Z+R9C2HT=C4H4+R1H	1.20E+13	0.0	0.0
917. C4H4+R1H=nC4H3+H2	2.00E+07	2.0	15000.0
918. C4H4+R1H=iC4H3+H2	3.00E+07	2.0	5000.0
919. R9C2HT+C4H4=>C2H2T+iC4H3	4.00E+13	0.0	0.0
920. C2H2T+iC4H3=>R9C2HT+C4H4	3.00E+13	0.0	27900.0
921. R10C2H3V+C4H4=>C2H4Z+nC4H3	5.00E+11	0.0	16300.0
922. nC4H3+C2H4Z=>R10C2H3V+C4H4	3.50E+11	0.0	13400.0
923. R10C2H3V+C4H4=>C2H4Z+iC4H3	5.00E+11	0.0	16300.0
924. iC4H3+C2H4Z=>R10C2H3V+C4H4	1.30E+11	0.0	24100.0
925. C4H4+C2H2T=C6H5#+R1H	1.00E+09	0.0	30020.0
926. C4H4+R10C2H3V=C6H6#+R1H	1.90E+12	0.0	2500.0
927. C4H4+B1O=aC3H4+CO	3.00E+13	0.0	1800.0
928. C4H4+B1O=pC3H4+CO	2.70E+13	0.0	1800.0
929. C4H4+R2OH=nC4H3+H2O	7.50E+06	2.0	5000.0
930. C4H4+R2OH=iC4H3+H2O	1.00E+07	2.0	2000.0
931. aC3H4+aC3H4=C2H4Z+C4H4	1.00E+15	0.0	48000.0
932. tC4H4+R2OH=iC4H3+H2O	2.00E+07	2.0	2000.0
933. tC4H4+R1H=iC4H3+H2	3.00E+07	2.0	6000.0
934. nC4H5(+M)=R1H+C4H4(+M)	1.00E+14	0.0	37000.0
Low pressure limit: 0.10000E+15 0.00000E+00 0.30000E+05			
935. nC4H5+R1H=C4H4+H2	1.50E+13	0.0	0.0
936. nC4H5+R1H=iC4H5+R1H	1.00E+14	0.0	0.0
Declared duplicate reaction...			
937. nC4H5+R4CH3=C5H8	1.00E+13	0.0	0.0
938. nC4H5=C2H2T+R10C2H3V	1.00E+14	0.0	43900.0
939. nC4H5+C2H2T=C6H6#+R1H	2.38E+08	1.2	3700.0
940. nC4H5+C2H2T=IC6H7	7.24E+14	-1.4	4000.0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

941. nC4H5+C2H2T=C6H7#	7.12E+21	-3.6	6300.0
942. R10C2H3V+nC4H5=IC6H7+R1H	3.55E-43	16.2	-200.0
943. R10C2H3V+nC4H5=C6H8#	8.53E+13	-1.1	800.0
944. R10C2H3V+nC4H5=C6H6#+H2	1.84E-13	7.1	-3600.0
945. nC4H5+R2OH=C4H4+H2O	2.50E+12	0.0	0.0
946. nC4H5+O2=R5CHO+C2H3CHOZ	4.50E+16	-1.4	1000.0
947. nC4H5+O2=C4H4+R3OOH	1.34E+06	1.6	-400.0
948. iC4H5=nC4H5	1.50E+13	0.0	67800.0
Declared duplicate reaction...			
949. iC4H5(+M)=R1H+C4H4(+M)	1.00E+14	0.0	50000.0
Low pressure limit: 0.20000E+16 0.00000E+00 0.42000E+05			
950. iC4H5+R1H=C4H4+H2	3.00E+13	0.0	0.0
951. iC4H5+R4CH3=iC5H8	1.00E+13	0.0	0.0
952. 2R10C2H3V=iC4H5+R1H	1.50E+30	-5.0	13000.0
953. iC4H5+R2OH=C4H4+H2O	5.50E+12	0.0	0.0
954. iC4H5+O2=HCHO+RCH2CHCO	4.50E+16	-1.4	1000.0
955. iC4H5+O2=C4H4+R3OOH	1.34E+06	1.6	-400.0
956. C4H5-1s=R1H+C4H4	6.00E+13	0.0	50400.0
957. C4H5-1s+R1H=C4H4+H2	2.00E+13	0.0	0.0
958. C4H5-1s+B1O=R9C2HT+CH3CHO	1.40E+14	0.0	0.0
959. C4H5-1s+R2OH=C4H4+H2O	2.00E+13	0.0	0.0
960. C4H5-1s+R2OH=R5CHO+sC3H5	4.00E+13	0.0	0.0
961. C4H5-1s+O2=R5CHO+CO+C2H4Z	3.00E+10	0.0	2900.0
962. C4H5-1p=R9C2HT+C2H4Z	2.00E+14	0.0	57000.0
963. C4H5-1p+O2=C4H4+R3OOH	1.60E+12	0.0	5000.0
964. C4H5-1p=C4H5-1s	5.00E+12	0.0	37400.0
965. C4H5-2=R1H+tC4H4	6.00E+13	0.0	54300.0
966. C4H5-2=iC4H5	5.00E+12	0.0	50500.0
967. C4H5-2+B1O=C3H3+HCHO	1.40E+14	0.0	0.0
968. C4H5-2+R2OH=R10C2H3V+CO+R4CH3	4.00E+13	0.0	0.0
969. C4H5-2+O2=CH2COZ+CO+R4CH3	3.00E+10	0.0	2900.0
970. R10C2H3V+R10C2H3V=C4H6Z2	9.80E+14	-0.5	0.0
971. C4H6Z2=C4H4+H2	2.50E+15	0.0	94700.0
972. C4H6Z2=iC4H5+R1H	1.40E+15	0.0	98000.0
973. C2H4Z+R10C2H3V=C4H6Z2+R1H	5.00E+11	0.0	7300.0
974. C4H6Z2+R1H=nC4H5+H2	1.30E+06	2.5	12200.0
975. C4H6Z2+R1H=iC4H5+H2	6.60E+05	2.5	9200.0
976. C4H6Z2+R1H=C4H7-1	2.60E+13	0.0	3200.0
977. C4H6Z2+R1H=C4H7Y	2.60E+13	0.0	1560.0
978. C4H6Z2+R4CH3=nC4H5+CH4	7.00E+13	0.0	18500.0
979. C4H6Z2+R4CH3=iC4H5+CH4	7.00E+13	0.0	15500.0
980. C4H6Z2+R4CH3=C5H9Y	6.30E+10	0.0	7490.0
981. C4H6Z2+R4CH3=iC5H9	1.80E+11	0.0	8000.0
982. C4H6Z2+R10C2H3V=nC4H5+C2H4Z	5.00E+14	0.0	22800.0
983. C4H6Z2+R10C2H3V=iC4H5+C2H4Z	5.00E+14	0.0	19800.0
984. C4H6Z2+B1O=RC3H5Y+R1H+CO	6.00E+08	1.4	900.0
985. R10C2H3V+C4H6Z2=C6H8#+R1H	4.15E-11	6.4	2400.0
986. C4H6Z2+C2H2T=C6H8#	2.30E+12	0.0	35000.0
987. R10C2H3V+C4H6Z2=C6H9Z#	7.06E+13	-1.4	4000.0
988. C4H6Z2+C2H4Z=C6H10#	2.30E+10	0.0	27000.0
989. C4H6Z2+R2OH=nC4H5+H2O	6.20E+06	2.0	3400.0
990. C4H6Z2+R2OH=iC4H5+H2O	3.10E+06	2.0	400.0
991. C4H6Z2+R2OH=RC3H5Y+HCHO	2.80E+12	0.0	-900.0
992. C4H6Z2+R2OH=CH3CHO+R10C2H3V	5.60E+12	0.0	-900.0
993. C4H6Z2+O2=iC4H5+R3OOH	4.00E+13	0.0	57900.0
994. C4H6Z2+C3H3=nC4H5+aC3H4	1.00E+13	0.0	22500.0
995. C4H6Z2+C3H3=iC4H5+aC3H4	1.00E+13	0.0	19500.0
996. C4H6-12=C4H6Z2	3.00E+13	0.0	65000.0
997. C4H6-12=iC4H5+R1H	4.20E+15	0.0	92600.0
998. C4H6-12+R1H=R10C2H3V+C2H4Z	4.00E+11	0.0	0.0
999. C4H6-12=C3H3+R4CH3	7.30E+14	0.0	75400.0
1000. C4H6-12+R1H=C4H7-2	1.30E+13	0.0	1600.0

1001.	C4H6-12+R1H=C4H7Y	1.20E+11	0.7	3000.0	
1002.	C4H6-12+R1H=C4H7T	1.30E+13	0.0	3200.0	
1003.	C4H6-12+R1H=iC4H5+H2	1.70E+05	2.5	2500.0	
1004.	C4H6-12+R4CH3=iC4H5+CH4	2.20E+00	3.5	5700.0	
1005.	C4H6-12+R11C2H5=iC4H5+C2H6	2.20E+00	3.5	6600.0	
1006.	C4H6-12+B1O=iC4H5+R2OH	1.70E+11	0.7	5900.0	
1007.	C4H6-12+R2OH=iC4H5+H2O	3.10E+06	2.0	-300.0	
1008.	C4H6-12+R3OOH=iC4H5+H2O2	9.60E+03	2.6	13900.0	
1009.	B6CH2+pC3H4=cC4H6	1.80E+14	0.0	0.0	
1010.	cC4H6=C4H6Z2	3.00E+13	0.0	42300.0	
1011.	cC4H6=C4H6-12	3.00E+13	0.0	43800.0	
1012.	C4H6-1=C4H6-12	2.50E+13	0.0	65000.0	
1013.	C4H6-1=C4H5-1s+R1H	7.70E+14	0.0	87900.0	
1014.	C4H6-1=C4H5-1p+R1H	9.10E+14	0.0	99600.0	
1015.	C4H6-1=C3H3+R4CH3	2.00E+11	0.0	59500.0	
1016.	C4H6-1+R1H=R4CH3+aC3H4	3.20E+12	0.0	1700.0	
1017.	C4H6-1+R1H=R11C2H5+C2H2T	3.20E+12	0.0	1700.0	
1018.	C4H6-1+R1H=H2+C4H5-1s	5.40E+04	2.5	-1900.0	
1019.	C4H6-1+R4CH3=CH4+C4H5-1s	1.50E+12	0.0	7100.0	
1020.	C4H6-1+B1O=R2OH+C4H5-1s	8.80E+10	0.7	3200.0	
1021.	C4H6-1+R2OH=H2O+C4H5-1s	3.00E+06	2.0	-1500.0	
1022.	C4H6-1+O2=>R3OOH+C4H5-1s	1.40E+12	0.0	41400.0	
1023.	C4H6-1+R3OOH=>H2O2+C4H5-1s	6.40E+03	2.6	12400.0	
1024.	C4H6-1+R1H=H2+C4H5-1p	2.90E+07	2.0	7700.0	
1025.	C4H6-1+R4CH3=CH4+C4H5-1p	3.70E+00	4.0	8200.0	
1026.	C4H6-1+B1O=R2OH+C4H5-1p	5.10E+13	0.0	7800.0	
1027.	C4H6-1+R2OH=>H2O+C4H5-1p	2.70E+06	2.0	-400.0	
1028.	C4H6-1+O2=>R3OOH+C4H5-1p	1.20E+13	0.0	49000.0	
1029.	C4H6-1+R3OOH=>H2O2+C4H5-1p	6.00E+11	0.0	17000.0	
1030.	C4H6-1+B1O=R12CHCOV+R11C2H5	1.50E+13	0.0	2100.0	
1031.	C4H6-1+R2OH=CH2COZ+R11C2H5	4.30E+11	0.0	-800.0	
1032.	C4H6-2=C4H6Z2	3.00E+13	0.0	65000.0	
1033.	C4H6-2=C4H6-12	3.00E+13	0.0	67000.0	
1034.	C4H6-2=C4H5-2+R1H	2.00E+14	0.0	87300.0	
1035.	C4H6-2+R1H=R4CH3+pC3H4	6.50E+12	0.0	1700.0	
1036.	C4H6-2+R1H=C4H5-2+H2	3.40E+05	2.5	2500.0	
1037.	C4H6-2+R4CH3=C4H5-2+CH4	4.40E+00	3.5	5700.0	
1038.	C4H6-2+B1O=CO+R10C2H3V+R4CH3	1.50E+13	0.0	2100.0	
1039.	C4H6-2+B1O=R2OH+C4H5-2	1.20E+11	0.7	7600.0	
1040.	C4H6-2+R2OH=CO+C2H4Z+R4CH3	4.30E+11	0.0	-800.0	
1041.	C4H6-2+R2OH=C4H5-2+H2O	6.20E+06	2.0	-300.0	
1042.	C4H6-2+O2=C4H5-2+R3OOH	4.20E+12	0.0	44000.0	
1043.	C4H6-2+R3OOH=C4H5-2+H2O2	1.90E+04	2.6	13900.0	
1044.	C4H7-1=C4H7Y	3.34E+09	1.0	39100.0	
1045.	C4H7-1=C4H7V	3.30E+09	1.0	20700.0	
1046.	C4H7-1=C2H4Z+R10C2H3V	2.00E+13	0.0	35500.0	
1047.	C4H7-1+R4CH3=C5H10	2.00E+13	0.0	0.0	
1048.	C4H7-1+R1H=C4H8Y	1.00E+14	0.0	0.0	
1049.	C4H7Y+R1H=C4H8Y	2.00E+13	0.0	0.0	
1050.	C4H7Y+R1H=H2+C4H6Z2	9.00E+12	0.0	0.0	
1051.	C4H7Y+R1H=H2+C4H6-12	9.00E+12	0.0	0.0	
1052.	C4H7Y+R3OOH=R2OH+C2H3CHOZ+R4CH3	1.00E+15	-0.8	0.0	
1053.	C4H7Y+R4CH3=iC5H10	5.00E+12	0.0	0.0	
1054.	C4H7V=C4H7Y	1.90E+10	1.0	36300.0	
1055.	C4H7V=R11C2H5+C2H2T	2.00E+13	0.0	33000.0	
1056.	C4H7-2=C4H7Y	2.90E+10	1.0	37800.0	
1057.	C4H7-2=R4CH3+pC3H4	2.00E+13	0.0	31500.0	
1058.	C4H7T=C4H7-1	3.34E+09	1.0	40600.0	
1059.	C4H7T=C4H7Y	2.00E+13	0.0	47000.0	
1060.	C4H7T=R4CH3+aC3H4	2.00E+13	0.0	32500.0	
1061.	C4H8Y+O2=C4H7Y+R3OOH	3.60E+12	0.0	38200.0	
1062.	C4H8Y+R1H=C4H7Y+H2	5.40E+04	2.5	-1900.0	
1063.	C4H8Y+R2OH=>HCHO+R4CH3+C2H4Z	1.40E+12	0.0	-1000.0	

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

1064.	C4H8Y+R2OH=R4CH3+C2H5CHO	1.40E+12	0.0	-1000.0
1065.	C4H8Y+R2OH=C4H7Y+H2O	3.00E+06	2.0	-1520.0
1066.	C4H8Y+R4CH3=C4H7Y+CH4	1.00E+11	0.0	7300.0
1067.	C2H5CHO+R1H=H2+CO+R11C2H5	4.00E+13	0.0	4200.0
1068.	C2H5CHO+R2OH=H2O+CO+R11C2H5	4.00E+12	0.0	500.0
1069.	iC4H8+R2OH=iC3H7+HCHO	1.40E+12	0.0	-1040.0
1070.	iC4H8+R1H=>iC4H7+H2	3.50E+05	2.5	2510.0
1071.	iC4H8+R2OH=>iC4H7+H2O	6.00E+06	2.0	-298.0
1072.	iC4H7+R1H=iC4H8	1.00E+14	0.0	0.0
1073.	iC4H7+R3OOH=>R2OH+HCHO+tC3H5	1.00E+15	-0.8	0.0
1074.	C4H4O+R1H=>R10C2H3V+CH2COZ	1.30E+13	0.0	3000.0
1075.	C4H4O+R1H=>C2H4Z+R12CHCOV	1.30E+13	0.0	3000.0
1076.	C4H4O+R1H=>sC3H5+CO	1.30E+13	0.0	1500.0
1077.	C4H4O+R2OH=>C2H3CHOZ+R5CHO	1.40E+12	0.0	-1000.0
1078.	C4H4O+R2OH=>CO2+RC3H5Y	1.40E+12	0.0	-1000.0
1079.	C4H4O+B1O=>R13CH2CHO+R12CHCOV	6.00E+04	2.6	-1100.0
1080.	C4H4O+B1O=>2CH2COZ	6.00E+04	2.6	-1100.0
1081.	C4H4O+R1H=>C2H2T+R12CHCOV+H2	8.20E+05	2.5	12300.0
1082.	C4H4O+R1H=>C3H3+CO+H2	4.10E+05	2.5	9800.0
1083.	C4H4O+R2OH=>C2H2T+R12CHCOV+H2O	2.20E+06	2.0	2800.0
1084.	C4H4O+R2OH=>C3H3+CO+H2O	1.10E+06	2.0	1500.0
1085.	C4H4O+B1O=>C2H2T+R12CHCOV+R2OH	1.20E+11	0.7	8700.0
1086.	C4H4O+B1O=>C3H3+CO+R2OH	6.00E+10	0.7	8700.0
1087.	C5H7Y+R1H=C5H8	1.00E+14	0.0	0.0
1088.	iC5H7Y+R1H=iC5H8	1.00E+14	0.0	0.0
1089.	iC5H7Y=aC3H4+R10C2H3V	2.00E+13	0.0	54512.0
1090.	C5H8+R1H=C5H7Y+H2	1.70E+05	2.5	2500.0
1091.	C5H8+R4CH3=C5H7Y+CH4	2.20E+00	3.5	5670.0
1092.	C5H8+R2OH=H2O+C5H7Y	3.00E+06	2.0	-298.0
1093.	iC5H8+R1H=iC5H7Y+H2	1.70E+05	2.5	2500.0
1094.	iC5H8+R4CH3=iC5H7Y+CH4	2.20E+00	3.5	5670.0
1095.	iC5H8+R2OH=H2O+iC5H7Y	3.00E+06	2.0	-298.0
1096.	C5H9Y=R1H+C5H8	3.00E+13	0.0	50500.0
1097.	C5H9Y+R1H=H2+C5H8	1.80E+13	0.0	0.0
1098.	C5H9Y+R1H=C5H10	2.00E+13	0.0	0.0
1099.	iC5H9=iC5H9Y	1.70E+09	1.0	38100.0
1100.	iC5H9=C3H6Y+R10C2H3V	2.00E+13	0.0	35500.0
1101.	iC5H9=iC5H8+R1H	1.60E+13	0.0	34300.0
1102.	iC5H9Y=iC5H8+R1H	1.00E+13	0.0	51500.0
1103.	iC5H9Y+R1H=H2+iC5H8	1.80E+13	0.0	0.0
1104.	iC5H9Y+R1H=iC5H10	2.00E+13	0.0	0.0
1105.	iC5H9Y+RC3H5Y=iC5H8+C3H6Y	8.40E+10	0.0	-300.0
1106.	iC5H9Y+iC5H9Y=iC5H8+iC5H10	8.40E+10	0.0	-300.0
1107.	C5H10+R1H=C5H9Y+H2	5.40E+04	2.5	-1900.0
1108.	C5H10+R4CH3=C5H9Y+CH4	1.00E+11	0.0	7300.0
1109.	C5H10+R2OH=C5H9Y+H2O	3.00E+06	2.0	-1520.0
1110.	iC5H10+R1H=iC5H9Y+H2	2.50E+04	2.5	-2800.0
1111.	iC5H10+R4CH3=iC5H9Y+CH4	5.00E+10	0.0	5600.0
1112.	iC5H10+R2OH=iC5H9Y+H2O	1.30E+06	2.0	-2600.0
1113.	C6H8#+R1H=H2+C6H7#	1.10E+05	2.5	-1900.0
1114.	C6H8#+R2OH=H2O+C6H7#	6.00E+06	2.0	-1520.0
1115.	C6H8#=C6H6#+H2	1.28E+28	-4.9	49300.0
1116.	C6H10#=C6H9Z#+R1H	5.00E+15	0.0	81400.0
1117.	C5H6#=C2H2T+aC3H4	3.80E+17	0.0	104000.0
1118.	C5H5#+R1H=C5H6#	1.00E+14	0.0	0.0
1119.	C5H6#+O2=C5H5#+R3OOH	1.40E+12	0.0	31600.0
1120.	C5H6#+R1H=C5H5#+H2	6.67E+07	1.9	4259.0
1121.	C5H6#+R1H=RC3H5Y+C2H2T	7.74E+36	-6.8	32918.7
1122.	C5H6#+B1O=C5H5#+R2OH	4.80E+04	2.7	1100.0
1123.	C5H6#+R2OH=C5H5#+H2O	3.10E+06	2.0	0.0
1124.	C5H6#+R3OOH=C5H5#+H2O2	1.10E+04	2.6	12900.0
1125.	C5H6#+R4CH3=C5H5#+CH4	3.51E+03	2.9	5655.0

1126.	C5H6#+RC3H5Y=C5H5#+C3H6Y	1.60E+12	0.0	15100.0
1127.	C5H6#+C3H3=C5H5#+aC3H4	8.00E+11	0.0	15100.0
1128.	C5H6#+C3H3=C5H5#+pC3H4	8.00E+11	0.0	15100.0
1129.	C5H6#+nC4H5=C5H5#+C4H6Z2	1.60E+12	0.0	15100.0
1130.	C5H6#+iC4H5=C5H5#+C4H6Z2	1.60E+12	0.0	15100.0
1131.	C5H6#+iC4H3=C5H5#+C4H4	1.60E+12	0.0	15100.0
1132.	C5H6#+R5C6H7O=C5H5#+C6H8O#	1.60E+12	0.0	15100.0
1133.	C5H6#+C5H7#Y=C5H5#+C5H8#	1.60E+12	0.0	15100.0
1134.	C5H5#+R2OH=C4H6Z2+CO	8.53E+13	0.2	4354.1
1135.	C5H5#+B1O=nC4H5+CO	8.58E+59	-13.6	23877.0
1136.	C5H5#=iC5H5	1.21+109	-28.1	130420.7
1137.	iC5H5=C3H3+C2H2T	1.95E+83	-20.6	69067.0
1138.	C5H5#=C3H3+C2H2T	1.98E+68	-15.0	125000.0
1139.	C5H5#+R4CH3=DMCPD	5.00E+12	0.0	0.0
1140.	2C5H5#=naphthalene+H2	4.30E+36	-6.3	22835.0
1141.	C5H5OH#+R1H=C5H5O#+H2	4.00E+13	0.0	6100.0
1142.	C5H5OH#+R2OH=C5H5O#+H2O	1.00E+13	0.0	1700.0
1143.	C5H5OH#=C5H5O#+R1H	6.54E+48	-9.5	122655.5
1144.	C5H5OH#+R1H=C5H4OH#+H2	1.40E+13	0.0	2000.0
1145.	C5H5OH#+R2OH=C5H4OH#+H2O	1.50E+06	2.0	0.0
1146.	C5H5O#=nC4H5+CO	2.15E+64	-15.1	66507.2
1147.	C5H5O#=C5H4O#+R1H	2.00E+13	0.0	30000.0
1148.	C5H4OH#+R1H=C5H5OH#	2.00E+14	0.0	0.0
1149.	C5H4O#=2C2H2T+CO	6.20E+41	-7.9	98803.8
1150.	C5H4O#+R1H=C5H3O#+H2	8.13E+07	2.0	15880.0
1151.	C5H4O#+R2OH=C5H3O#+H2O	1.10E+08	1.4	1400.0
1152.	C5H3O#=>C2H2T+CO+R9C2HT	2.00E+13	0.0	51000.0
1153.	C5H8#=C5H6#+H2	2.20E+13	0.0	60000.0
1154.	C5H8-12=C5H8#	1.80E+11	0.0	51826.0
1155.	C5H8-12=C5H8	2.20E+14	0.0	67366.0
1156.	C5H8-12=C2H4Z+pC3H4	6.60E+12	0.0	58106.0
1157.	C5H7#+R1H=C5H8#	1.00E+14	0.0	0.0
1158.	C5H7#Y+R1H=C5H8#	1.00E+14	0.0	0.0
1159.	C5H7#V+R1H=C5H8#	1.00E+14	0.0	0.0
1160.	C5H7-1s+R1H=C5H8	1.00E+14	0.0	0.0
1161.	C5H8#+O2=C5H7#+R3OOH	1.40E+13	0.0	47600.0
1162.	C5H8#+O2=C5H7#Y+R3OOH	2.80E+12	0.0	35600.0
1163.	C5H8#+O2=C5H7#V+R3OOH	4.00E+12	0.0	60070.0
1164.	R1H+C5H8#=C5H9#	1.00E+14	0.0	3260.0
1165.	R2OH+C5H8#=>2C2H4Z+R5CHO	2.70E+12	0.0	-1100.0
1166.	C5H8#+R1H=C5H7#+H2	9.00E+06	2.0	5000.0
1167.	C5H8#+R1H=C5H7#Y+H2	1.08E+05	2.5	-1900.0
1168.	C5H8#+R1H=C5H7#V+H2	8.20E+05	2.5	9790.0
1169.	C5H8#+R2OH=C5H7#+H2O	2.60E+06	2.0	-770.0
1170.	C5H8#+R2OH=C5H7#Y+H2O	6.00E+06	2.0	-1520.0
1171.	C5H8#+R2OH=C5H7#V+H2O	2.20E+06	2.0	1450.0
1172.	C5H8#+R4CH3=C5H7#+CH4	2.00E+11	0.0	9600.0
1173.	C5H8#+R4CH3=C5H7#Y+CH4	2.00E+11	0.0	7300.0
1174.	C5H8#+R4CH3=C5H7#V+CH4	1.96E+00	3.5	11700.0
1175.	C5H8#+B1O=C5H7#+R2OH	2.60E+13	0.0	5200.0
1176.	C5H8#+B1O=C5H7#Y+R2OH	1.70E+11	0.7	3250.0
1177.	C5H8#+B1O=C5H7#V+R2OH	1.20E+11	0.7	7630.0
1178.	C5H8#+R11C2H5=C5H7#+C2H6	2.00E+11	0.0	11000.0
1179.	C5H8#+R11C2H5=C5H7#Y+C2H6	8.80E+00	3.5	4140.0
1180.	C5H7#=C5H7#Y	1.24E+49	-10.9	50196.0
1181.	C5H7#=C5H7-1s	7.53E+58	-13.7	61013.0
1182.	C5H7-1s=C2H2T+RC3H5Y	1.51E+23	-3.8	19436.0
1183.	C5H7Y=C5H7#Y	2.03E+52	-11.8	52322.0
1184.	C5H7Y=C5H7-1s	3.59E+61	-15.7	74065.0
1185.	C5H7#=C5H6#+R1H	4.16E+50	-10.8	49854.0
1186.	C5H7#Y=C5H6#+R1H	1.44E+66	-15.5	74112.0
1187.	C5H9#=C5H9	2.00E+14	0.0	35600.0
1188.	C5H9=RC3H5Y+C2H4Z	3.30E+13	0.0	22500.0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

1189.	C5H9=R1H+C5H8	3.00E+13	0.0	38000.0
1190.	C5H9=C5H9Y	3.30E+09	1.0	32350.0
1191.	C5H9+O2=>C5H8+R3OOH	1.60E+12	0.0	5000.0
1192.	C5H7#+O2=C5H6#+R3OOH	5.20E+11	0.0	2500.0
1193.	C5H7#Y+O2=C5H6#+R3OOH	1.58E+12	0.0	15200.0
1194.	C5H7#Y+R3OOH=C2H4Z+RCH2CHCO+R2OH	1.00E+13	0.0	0.0
1195.	C5H7#Y+R1H=C5H6#+H2	1.80E+13	0.0	0.0
1196.	C5H7#Y+R2OH=C5H6#+H2O	6.00E+12	0.0	0.0
1197.	C5H7#Y+R4CH3=DMCP	5.00E+12	0.0	0.0
1198.	DMCP+R1H=RMCP1+H2	9.00E+06	2.0	5000.0
1199.	DMCP+R1H=RMCPY1+H2	5.00E+04	2.5	-1900.0
1200.	DMCP+R1H=RMCP2+H2	2.90E+07	2.0	7700.0
1201.	DMCP+R1H=RMCPY2+H2	2.50E+04	2.5	-2790.0
1202.	DMCP+R2OH=RMCP1+H2O	2.60E+06	2.0	-770.0
1203.	DMCP+R2OH=RMCPY1+H2O	3.00E+06	2.0	-1520.0
1204.	DMCP+R2OH=RMCP2+H2O	2.70E+06	2.0	450.0
1205.	DMCP+R2OH=RMCPY2+H2O	1.30E+06	2.0	-2620.0
1206.	RMCP1=>C2H2T+C4H7Y	2.00E+13	0.0	31000.0
1207.	RMCP1=R4CH3+C5H6#	2.00E+13	0.0	31000.0
1208.	RMCP2=>C2H4Z+nC4H5	2.00E+13	0.0	28700.0
1209.	RMCPY1+R1H=DMCP	1.00E+14	0.0	0.0
1210.	RMCPY2+R1H=DMCP	1.00E+14	0.0	0.0
1211.	C6H5O#+R1H(+M)=C6H5OH#(+M)	2.00E+14	0.0	0.0
Low pressure limit: 0.10000E+95 -0.21840E+02 0.13900E+05				
TROE centering: 0.43000E-01 0.30400E+03 0.60000E+05 0.58960E+04				
O2	Enhanced by	4.000E-01		
CO	Enhanced by	7.500E-01		
CO2	Enhanced by	1.500E+00		
H2O	Enhanced by	6.500E+00		
AR	Enhanced by	3.500E-01		
1212.	C6H5OH#+O2=R3OOH+C6H5O#	1.00E+13	0.0	38900.0
1213.	C6H5OH#+R1H=C6H5O#+H2	5.51E+07	1.9	8660.0
1214.	C6H5OH#+B1O=C6H5O#+R2OH	1.30E+13	0.0	2900.0
1215.	C6H5OH#+R2OH=C6H5O#+H2O	1.40E+08	1.4	-960.0
1216.	C6H5OH#+R3OOH=C6H5O#+H2O2	1.00E+12	0.0	10000.0
1217.	C6H5OH#+R4CH3=C6H5O#+CH4	1.80E+11	0.0	7700.0
1218.	C6H5OH#+C6H5#=C6H5O#+C6H6#	4.90E+12	0.0	4400.0
1219.	C6H5OH#+C5H5#=C6H5O#+C5H6#	4.90E+11	0.0	9400.0
1220.	C6H5OH#+RC3H5Y=C6H5O#+C3H6Y	4.90E+11	0.0	9400.0
1221.	C6H5OH#+C3H3=C6H5O#+aC3H4	2.50E+11	0.0	9400.0
1222.	C6H5OH#+C3H3=C6H5O#+pC3H4	2.50E+11	0.0	9400.0
1223.	C6H5OH#+iC4H5=C6H5O#+C4H6Z2	4.90E+11	0.0	9400.0
1224.	C6H5OH#+iC4H3=C6H5O#+C4H4	4.90E+11	0.0	9400.0
1225.	C6H5OH#+R1H=C6H4OH#+H2	1.70E+14	0.0	16000.0
1226.	C6H5OH#+B1O=C6H4OH#+R2OH	2.00E+13	0.0	14700.0
1227.	C6H5OH#+R2OH=C6H4OH#+H2O	1.40E+13	0.0	4600.0
1228.	C6H5OH#+R3OOH=C6H4OH#+H2O2	4.00E+11	0.0	28900.0
1229.	C6H5OH#+R4CH3=C6H4OH#+CH4	2.00E+12	0.0	15000.0
1230.	C6H4OH#+R1H=C6H5OH#	2.00E+14	0.0	0.0
1231.	C6H5O#=bicycle	6.17E+78	-18.8	90504.0
1232.	bicycle=C5H5#+CO	8.29E+20	-2.4	11112.0
1233.	C6H5O#+R1H=C5H6#+CO	5.00E+13	0.0	0.0
1234.	C6H5O#+B1O=OC6H4OH	2.60E+10	0.5	800.0
1235.	OC6H4OH=CO+C5H4OH#	7.40E+11	0.0	43800.0
1236.	C6H5OH#+B1O=OC6H4OH+R1H	1.60E+13	0.0	3400.0
1237.	C6H5#+R1H(+M)=C6H6#(+M)	1.00E+14	0.0	0.0
Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 0.70000E+04				
TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 0.58500E+03 0.61130E+04				
O2	Enhanced by	4.000E-01		
CO	Enhanced by	7.500E-01		
CO2	Enhanced by	1.500E+00		
H2O	Enhanced by	6.500E+00		

AR	Enhanced by	3.500E-01		
C6H6#	Enhanced by	3.000E+00		
1238. C6H6#+O2=C6H5#+R3OOH	6.00E+13	0.0	63400.0	
1239. C6H6#+R1H=C6H7#	3.20E+13	0.0	3200.0	
1240. C6H6#+B1O=C6H5O#+R1H	2.80E+13	0.0	4910.0	
1241. C6H6#+R2OH=C6H5OH#+R1H	1.30E+13	0.0	10600.0	
1242. C6H6#+R9C2HT=C6H5#C2H+R1H	5.00E+13	0.0	0.0	
1243. C6H6#+R10C2H3V=styrene+R1H	7.90E+11	0.0	6400.0	
1244. C6H6#+R1H=C6H5#+H2	1.22E+08	2.0	15880.0	
1245. C6H6#+B1O=C6H5#+R2OH	2.00E+13	0.0	14700.0	
1246. C6H6#+R2OH=C6H5#+H2O	1.36E+04	2.7	619.6	
1247. C6H6#+R3OOH=C6H5#+H2O2	9.20E+12	0.0	28810.0	
1248. C6H6#+R4CH3=C6H5#+CH4	2.07E+00	3.9	13300.0	
1249. C6H6#+R11C2H5=C6H5#+C2H6	6.30E+11	0.0	15000.0	
1250. C6H5#+C3H6Y=C6H6#+RC3H5Y	7.94E+13	0.0	11940.0	
1251. C6H6#+nC4H5=C6H5#+C4H6Z2	6.30E+11	0.0	15000.0	
1252. C6H6#+iC4H5=C6H5#+C4H6Z2	6.30E+11	0.0	20000.0	
1253. C6H7#=iC6H7	2.50E+14	0.7	41800.0	
1254. C6H7#+O2=C6H6#+R3OOH	7.90E+11	0.0	9900.0	
1255. C6H7#+R1H=C6H8#	1.00E+14	0.0	0.0	
1256. C6H7#+R1H=C6H6#+H2	3.30E+12	0.0	0.0	
1257. C6H7#+R2OH=C6H6#+H2O	1.00E+13	0.0	0.0	
1258. C6H7#+R4CH3=C6H6#+CH4	3.00E+12	-0.3	-100.0	
1259. C6H7#+C6H7#=C6H6#+C6H8#	8.40E+10	0.0	-300.0	
1260. C6H5#=iC6H5	5.00E+13	0.0	72500.0	
1261. iC6H5=>2C2H2T+R9C2HT	2.00E+13	0.0	51000.0	
1262. C6H5#+O2=C6H5O#+B1O	2.60E+13	0.0	6100.0	
1263. C6H5#+C2H2T=C6H5#C2H+R1H	4.00E+13	0.0	10100.0	
1264. C6H5#+C6H6#=biphenyl+R1H	5.60E+12	-0.1	7500.0	
1265. C6H5#+B1O=C5H5#+CO	1.00E+14	0.0	0.0	
1266. C6H5#+R2OH=C6H5OH#	1.00E+13	0.0	0.0	
1267. C6H5#+R5CHO=C6H5CHO	5.00E+12	0.0	0.0	
1268. C6H5#+R10C2H3V=styrene	5.00E+12	0.0	0.0	
1269. C6H5#+R11C2H5=etC6H5	5.00E+12	0.0	0.0	
1270. C6H5#+R3OOH=C6H5O#+R2OH	5.00E+12	0.0	0.0	
1271. C6H5#+C6H5#=biphenyl	3.80E+31	-5.8	7900.0	
1272. C6H5#+R2OH=C6H5O#+R1H	5.00E+13	0.0	0.0	
1273. C6H5#+C6H7#=C6H6#+C6H6#	1.00E+12	0.0	0.0	
1274. toluene=benzyl+R1H	2.09E+15	0.0	87510.0	
1275. toluene=C6H5#+R4CH3	2.66E+16	0.0	97880.0	
1276. toluene+O2=benzyl+R3OOH	1.80E+12	0.0	39700.0	
1277. toluene+R1H=C6H6#+R4CH3	5.67E+08	1.4	5650.0	
1278. toluene+B1O=OC6H4CH3+R1H	1.70E+13	0.0	3600.0	
1279. toluene+R2OH=HOC6H4CH3+R1H	1.30E+13	0.0	10600.0	
1280. toluene+R2OH=C6H5OH#+R4CH3	7.83E+02	2.9	3219.3	
1281. toluene+R1H=benzyl+H2	2.92E+06	2.4	5810.0	
1282. toluene+B1O=benzyl+R2OH	6.30E+11	0.0	0.0	
1283. toluene+R2OH=benzyl+H2O	5.20E+09	1.0	870.0	
1284. toluene+R3OOH=benzyl+H2O2	4.00E+11	0.0	14000.0	
1285. toluene+R4CH3=benzyl+CH4	3.91E+00	3.8	6980.0	
1286. toluene+R5CHO=benzyl+HCHO	3.77E+13	0.0	23787.4	
1287. toluene+R10C2H3V=benzyl+C2H4Z	4.00E+12	0.0	8000.0	
1288. toluene+RC3H5Y=benzyl+C3H6Y	1.60E+12	0.0	15100.0	
1289. toluene+C3H3=benzyl+pC3H4	1.60E+12	0.0	15100.0	
1290. toluene+iC4H5=benzyl+C4H6Z2	1.60E+12	0.0	15100.0	
1291. toluene+nC4H5=benzyl+C4H6Z2	1.60E+12	0.0	11100.0	
1292. toluene+C5H5#=benzyl+C5H6#	1.60E+11	0.0	15100.0	
1293. toluene+C6H5#=benzyl+C6H6#	7.90E+13	0.0	12000.0	
1294. toluene+C6H5O#=benzyl+C6H5OH#	1.60E+11	0.0	15100.0	
1295. toluene+C6H4CH3=benzyl+toluene	7.90E+13	0.0	12000.0	
1296. toluene+OC6H4CH3=benzyl+HOC6H4CH3	1.60E+11	0.0	15100.0	
1297. toluene+C6H5CH2OO=benzyl+C6H5CH2OOH	4.00E+11	0.0	14000.0	
1298. toluene+C6H5CH2O=benzyl+C6H5CH2OH	1.60E+11	0.0	11100.0	

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

1299.	toluene+HOC6H4CH2=benzyl+HOC6H4CH3	1.60E+11	0.0	15100.0
1300.	toluene+R1H=C6H4CH3+H2	1.22E+08	2.0	15880.0
1301.	toluene+B1O=C6H4CH3+R2OH	2.00E+13	0.0	14700.0
1302.	toluene+R2OH=C6H4CH3+H2O	1.36E+04	2.7	619.6
1303.	toluene+R3OOH=C6H4CH3+H2O2	9.20E+12	0.0	28810.0
1304.	toluene+R4CH3=C6H4CH3+CH4	2.07E+00	3.9	13300.0
1305.	benzyl=>C5H5#+C2H2T	6.00E+13	0.0	70000.0
1306.	benzyl=>C3H3+C4H4	2.00E+14	0.0	83600.0
1307.	benzyl+O2=C6H5CH2OO	4.60E+11	0.0	-377.0
1308.	benzyl+O2=C6H5CH2O+B1O	6.30E+12	0.0	40000.0
1309.	benzyl+B1O=C6H5#+HCHO	3.50E+13	0.0	0.0
1310.	benzyl+B1O=C6H5CHO+R1H	1.00E+14	0.0	0.0
1311.	benzyl+R2OH=C6H5CH2OH	2.00E+13	0.0	0.0
1312.	benzyl+R3OOH=C6H5CH2OOH	5.00E+12	0.0	0.0
1313.	2benzyl=bibenzyl	5.01E+12	0.0	454.0
1314.	etC6H5=benzyl+R4CH3	6.10E+15	0.0	75120.0
1315.	C6H4CH3+O2=OC6H4CH3+B1O	2.60E+13	0.0	6100.0
1316.	C6H4CH3+R1H=toluene	1.00E+14	0.0	0.0
1317.	C6H4CH3+B1O=OC6H4CH3	1.00E+14	0.0	0.0
1318.	C6H4CH3+R2OH=HOC6H4CH3	1.00E+13	0.0	0.0
1319.	C6H4CH3+R3OOH=OC6H4CH3+R2OH	5.00E+12	0.0	0.0
1320.	C6H4CH3+R1H=benzyl+R1H	1.00E+13	0.0	0.0
1321.	C6H5CH2OO=C6H5CHO+R2OH	3.40E+09	1.0	37500.0
1322.	C6H5CH2OO+R1H=C6H5CH2OOH	1.00E+14	0.0	0.0
1323.	C6H5CH2OO+R3OOH=C6H5CH2OOH+O2	2.00E+11	0.0	-1300.0
1324.	2C6H5CH2OO=C6H5CH2OH+C6H5CHO+O2	1.40E+10	0.0	-725.0
1325.	C6H5CH2OO+C6H5CH2OO=2C6H5CH2O+O2	6.30E+10	0.0	-725.0
1326.	C6H5CH2O=R1H+C6H5CHO	2.00E+13	0.0	27500.0
1327.	C6H5CH2O=C6H5#+HCHO	2.00E+13	0.0	27500.0
1328.	C6H5CH2O+O2=R3OOH+C6H5CHO	6.00E+10	0.0	1600.0
1329.	OC6H4CH3=>R1H+C6H6#+CO	3.00E+11	0.0	43800.0
1330.	OC6H4CH3=>C3H3+aC3H4+CO	1.50E+11	0.0	43800.0
1331.	OC6H4CH3+R1H=HOC6H4CH3	1.00E+14	0.0	0.0
1332.	C6H5CHO+O2=C6H5CO+R3OOH	7.00E+11	0.0	39500.0
1333.	C6H5CHO=C6H5CO+R1H	3.98E+15	0.0	83740.0
1334.	C6H5CHO+R1H=C6H6#+R5CHO	5.80E+13	0.0	8100.0
1335.	C6H5CHO+R1H=C6H5CO+H2	4.00E+13	0.0	3200.0
1336.	C6H5CHO+B1O=C6H5CO+R2OH	6.00E+12	0.0	1800.0
1337.	C6H5CHO+R2OH=C6H5CO+H2O	7.80E+12	0.0	0.0
1338.	C6H5CHO+R3OOH=C6H5CO+H2O2	3.00E+12	0.0	11000.0
1339.	C6H5CHO+R4CH3=C6H5CO+CH4	2.00E-06	5.6	1500.0
1340.	C6H5CHO+R11C2H5=C6H5CO+C2H6	1.30E+12	0.0	7500.0
1341.	C6H5CHO+RC3H5Y=C6H5CO+C3H6Y	1.30E+12	0.0	11500.0
1342.	C6H5CHO+iC4H5=C6H5CO+C4H6Z2	1.30E+12	0.0	11500.0
1343.	C6H5CHO+nC4H5=C6H5CO+C4H6Z2	1.30E+12	0.0	7500.0
1344.	C6H5CHO+benzyl=toluene+C6H5CO	1.30E+11	0.0	11500.0
1345.	C6H5CHO+C6H5O#=#C6H5CO+C6H5OH#	1.30E+11	0.0	11500.0
1346.	C6H5CHO+OC6H4CH3=C6H5CO+HOC6H4CH3	1.30E+11	0.0	11500.0
1347.	C6H5CHO+C5H5#=#C6H5CO+C5H6#	1.30E+11	0.0	11500.0
1348.	C6H5CHO+HOC6H4CH2=C6H5CO+HOC6H4CH3	1.30E+11	0.0	11500.0
1349.	C6H5CHO+C6H5#=#C6H5CO+C6H6#	1.30E+11	0.0	11500.0
1350.	C6H5CO=C6H5#+CO	4.00E+14	0.0	29500.0
1351.	C6H5CH2OOH=C6H5CH2O+R2OH	1.50E+16	0.0	42000.0
1352.	HOC6H4CH3+O2=OC6H4CH3+R3OOH	1.00E+13	0.0	38900.0
1353.	HOC6H4CH3+O2=HOC6H4CH2+R3OOH	2.10E+12	0.0	38600.0
1354.	HOC6H4CH3+R1H=C6H5OH#+R4CH3	5.80E+13	0.0	8100.0
1355.	HOC6H4CH3+R1H=OC6H4CH3+H2	1.20E+14	0.0	12400.0
1356.	HOC6H4CH3+B1O=OC6H4CH3+R2OH	1.30E+13	0.0	2900.0
1357.	HOC6H4CH3+R2OH=OC6H4CH3+H2O	1.40E+08	1.4	-960.0
1358.	HOC6H4CH3+R3OOH=OC6H4CH3+H2O2	1.00E+12	0.0	10000.0
1359.	HOC6H4CH3+R4CH3=OC6H4CH3+CH4	1.80E+11	0.0	7700.0
1360.	HOC6H4CH3+C6H5#=#OC6H4CH3+C6H6#	4.90E+12	0.0	4400.0

1361.	HOC6H4CH3+C5H5#-OC6H4CH3+C5H6#	4.90E+11	0.0	9400.0
1362.	HOC6H4CH3+RC3H5Y=OC6H4CH3+C3H6Y	4.90E+11	0.0	9400.0
1363.	HOC6H4CH3+iC4H5=OC6H4CH3+C4H6Z2	4.90E+11	0.0	9400.0
1364.	HOC6H4CH3+C6H5O#-OC6H4CH3+C6H5OH#	4.90E+11	0.0	9400.0
1365.	HOC6H4CH3+R1H=HOC6H4CH2+H2	1.20E+14	0.0	8400.0
1366.	HOC6H4CH3+B1O=HOC6H4CH2+R2OH	6.30E+11	0.0	0.0
1367.	HOC6H4CH3+R2OH=HOC6H4CH2+H2O	5.20E+09	1.0	870.0
1368.	HOC6H4CH3+R3OOH=HOC6H4CH2+H2O2	4.00E+11	0.0	14000.0
1369.	HOC6H4CH3+R4CH3=HOC6H4CH2+CH4	1.60E+12	0.0	11100.0
1370.	HOC6H4CH3+RC3H5Y=HOC6H4CH2+C3H6Y	1.60E+12	0.0	15100.0
1371.	HOC6H4CH3+C3H3=HOC6H4CH2+pC3H4	1.60E+12	0.0	15100.0
1372.	HOC6H4CH3+iC4H5=HOC6H4CH2+C4H6Z2	1.60E+12	0.0	15100.0
1373.	HOC6H4CH3+nC4H5=HOC6H4CH2+C4H6Z2	1.60E+12	0.0	11100.0
1374.	HOC6H4CH3+C5H5#-HOC6H4CH2+C5H6#	1.60E+11	0.0	15100.0
1375.	HOC6H4CH3+C6H5#-HOC6H4CH2+C6H6#	7.90E+13	0.0	12000.0
1376.	HOC6H4CH3+C6H5O#-HOC6H4CH2+C6H5OH#	1.60E+11	0.0	15100.0
1377.	HOC6H4CH3+C6H4CH3=HOC6H4CH2+toluene	7.90E+13	0.0	12000.0
1378.	HOC6H4CH3+OC6H4CH3=HOC6H4CH2+HOC6H4CH3	1.60E+11	0.0	15100.0
1379.	HOC6H4CH3+C6H5CH2OO=HOC6H4CH2+C6H5CH2OOH	4.00E+11	0.0	14000.0
1380.	HOC6H4CH3+C6H5CH2O=HOC6H4CH2+C6H5CH2OH	1.60E+11	0.0	11100.0
1381.	HOC6H4CH2+O2=HOC6H4CH2OO	4.60E+11	0.0	-377.0
1382.	HOC6H4CH2+O2=HOC6H4CH2O+B1O	6.30E+12	0.0	40000.0
1383.	HOC6H4CH2+R3OOH=HOC6H4CH2O+R2OH	5.00E+12	0.0	0.0
1384.	HOC6H4CH2+R1H=HOC6H4CH3	1.00E+14	0.0	0.0
1385.	HOC6H4CH2+R4CH3=C6H5OH#+C2H4Z	5.00E+12	0.0	0.0
1386.	HOC6H4CH2OO=C6H4OHCHO+R2OH	3.40E+09	1.0	37500.0
1387.	HOC6H4CH2O=R1H+C6H4OHCHO	2.00E+13	0.0	27500.0
1388.	HOC6H4CH2O=C6H4OH#+HCHO	2.00E+13	0.0	27500.0
1389.	HOC6H4CH2O+O2=R3OOH+C6H4OHCHO	6.00E+10	0.0	1600.0
1390.	C6H4OHCHO+R1H=C6H4OHCO+H2	4.00E+13	0.0	3200.0
1391.	C6H4OHCHO+B1O=C6H4OHCO+R2OH	6.00E+12	0.0	1800.0
1392.	C6H4OHCHO+R2OH=C6H4OHCO+H2O	7.80E+12	0.0	0.0
1393.	C6H4OHCHO+R3OOH=C6H4OHCO+H2O2	3.00E+12	0.0	11000.0
1394.	C6H4OHCHO+R4CH3=C6H4OHCO+CH4	2.00E-06	5.6	1500.0
1395.	C6H4OHCO=C6H4OH#+CO	2.00E+13	0.0	30500.0
1396.	C6H5CH2OH+O2=R3OOH+C6H5CHOH	1.40E+12	0.0	34000.0
1397.	C6H5CH2OH+O2=C6H5CH2O+R3OOH	2.00E+14	0.0	41400.0
1398.	C6H5CH2OH+R1H=C6H6#+R6CH2OH	5.80E+13	0.0	8100.0
1399.	C6H5CH2OH+R1H=C6H5CHOH+H2	8.00E+13	0.0	6400.0
1400.	C6H5CH2OH+B1O=C6H5CHOH+R2OH	4.20E+11	0.0	-2000.0
1401.	C6H5CH2OH+R2OH=C6H5CHOH+H2O	3.50E+09	1.0	-1130.0
1402.	C6H5CH2OH+R3OOH=C6H5CHOH+H2O2	2.70E+11	0.0	12000.0
1403.	C6H5CH2OH+R4CH3=C6H5CHOH+CH4	1.10E+12	0.0	9100.0
1404.	C6H5CH2OH+RC3H5Y=C6H5CHOH+C3H6Y	1.10E+12	0.0	13100.0
1405.	C6H5CH2OH+iC4H5=C6H5CHOH+C4H6Z2	1.10E+12	0.0	13100.0
1406.	C6H5CH2OH+nC4H5=C6H5CHOH+C4H6Z2	1.11E+00	0.0	13100.0
1407.	C6H5CH2OH+C6H5#-C6H5CHOH+C6H6#	5.20E+13	0.0	10000.0
1408.	C6H5CH2OH+C6H4CH3=C6H5CHOH+toluene	5.20E+13	0.0	10000.0
1409.	C6H5CH2OH+C6H5O#-C6H5CHOH+C6H5OH#	1.10E+11	0.0	13100.0
1410.	C6H5CH2OH+benzyl=C6H5CHOH+toluene	1.10E+11	0.0	13100.0
1411.	C6H5CH2OH+OC6H4CH3=C6H5CHOH+HOC6H4CH3	1.10E+11	0.0	13100.0
1412.	C6H5CH2OH+HOC6H4CH2=C6H5CHOH+HOC6H4CH3	1.10E+11	0.0	13100.0
1413.	C6H5CH2OH+C5H5#-C6H5CHOH+C5H6#	1.10E+11	0.0	13100.0
1414.	C6H5CHOH=C6H5CHO+R1H	2.00E+14	0.0	36373.0
1415.	etC6H5=R1H+C8H9#	4.30E+14	0.0	83600.0
1416.	etC6H5+O2=C8H9#+R3OOH	1.40E+12	0.0	34000.0
1417.	etC6H5+O2=C8H9#+1+R3OOH	1.20E+13	0.0	49000.0
1418.	etC6H5+R1H=C6H6#+R11C2H5	5.80E+13	0.0	8100.0
1419.	etC6H5+R1H=C8H9#+H2	8.00E+13	0.0	6400.0
1420.	etC6H5+B1O=C8H9#+R2OH	4.20E+11	0.0	-2.0
1421.	etC6H5+R2OH=C8H9#+H2O	3.50E+09	1.0	-1130.0
1422.	etC6H5+R3OOH=C8H9#+H2O2	2.70E+11	0.0	12000.0
1423.	etC6H5+R4CH3=C8H9#+CH4	1.10E+12	0.0	9100.0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

1424.	etC6H5+RC3H5Y=C8H9#+C3H6Y	1.10E+12	0.0	13100.0
1425.	etC6H5+iC4H5=C8H9#+C4H6Z2	1.10E+12	0.0	13100.0
1426.	etC6H5+nC4H5=C8H9#+C4H6Z2	1.10E+12	0.0	13100.0
1427.	etC6H5+C6H5O#=#C8H9#+C6H5OH#	1.10E+11	0.0	13100.0
1428.	etC6H5+benzyl=C8H9#+toluene	1.10E+11	0.0	13100.0
1429.	etC6H5+OC6H4CH3=C8H9#+HOC6H4CH3	1.10E+11	0.0	13100.0
1430.	etC6H5+HOC6H4CH2=C8H9#+HOC6H4CH3	1.10E+11	0.0	13100.0
1431.	etC6H5+C5H5#=#C8H9#+C5H6#	1.10E+11	0.0	13100.0
1432.	etC6H5+R1H=C8H9#-1+H2	2.80E+07	2.0	7700.0
1433.	etC6H5+B1O=C8H9#-1+R2OH	5.10E+13	0.0	7850.0
1434.	etC6H5+R2OH=C8H9#-1+H2O	2.70E+06	2.0	450.0
1435.	etC6H5+R3OOH=C8H9#-1+H2O2	6.00E+11	0.0	17000.0
1436.	etC6H5+R4CH3=C8H9#-1+CH4	3.00E-01	4.0	8200.0
1437.	C8H9#-1=C2H4Z+C6H5#	7.10E+14	0.0	43500.0
1438.	C8H9#-1=R1H+styrene	3.10E+13	0.0	50670.0
1439.	C8H9#-1=R1H+styrene	1.60E+13	0.0	34800.0
1440.	C8H9#+O2=R3OOH+styrene	7.00E+11	0.0	15000.0
1441.	C8H9#+R3OOH=R2OH+R4CH3+C6H5CHO	5.00E+12	0.0	0.0
1442.	C8H9#-1+O2=R3OOH+styrene	1.50E+12	0.0	5000.0
1443.	C8H9#-1+R3OOH=R2OH+HCHO+benzyl	5.00E+12	0.0	0.0
1444.	C6H5#+iC4H3=naphthalene	3.18E+23	-3.2	2130.0
1445.	C6H5#+C4H4=naphthalene+R1H	3.30E+33	-5.7	12750.0
1446.	benzyl+C3H3=naphthalene+R1H+R1H	6.00E+11	0.0	0.0
1447.	C6H5C2H2+C2H2T=naphthalene+R1H	1.60E+16	-1.3	3300.0
1448.	naphthalene+O2=R3OOH+naphthyl	8.00E+13	0.0	63400.0
1449.	naphthalene+R1H=naphthyl+H2	8.00E+08	1.8	16800.0
1450.	naphthalene+B1O=naphthyl+R2OH	2.70E+13	0.0	14700.0
1451.	naphthalene+R2OH=naphthyl+H2O	2.10E+08	1.4	1450.0
1452.	naphthalene+R3OOH=naphthyl+H2O2	7.30E+12	0.0	28900.0
1453.	naphthalene+R4CH3=naphthyl+CH4	2.70E+12	0.0	15000.0
1454.	naphthyl+R1H=naphthalene	1.00E+14	0.0	0.0
1455.	R1H+NO+M=HNO+M	4.00E+20	-1.8	0.0
	H2O Enhanced by	1.000E+01		
	O2 Enhanced by	1.500E+00		
	H2 Enhanced by	2.000E+00		
	CO2 Enhanced by	3.000E+00		
	N2 Enhanced by	0.000E+00		
1456.	R1H+NO+N2=HNO+N2	7.00E+19	-1.5	0.0
1457.	NO+B1O+M=NO2+M	7.50E+19	-1.4	0.0
	N2 Enhanced by	1.700E+00		
	O2 Enhanced by	1.500E+00		
	H2O Enhanced by	1.000E+01		
1458.	R3OOH+NO=NO2+R2OH	2.10E+12	0.0	-479.0
1459.	NO2+R1H=NO+R2OH	8.40E+13	0.0	0.0
1460.	NO2+B1O=NO+O2	3.90E+12	0.0	-238.0
1461.	NO2+B1O(+M)=NO3(+M)	1.30E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.10000E+29	-0.40800E+01	0.24700E+04
	N2 Enhanced by	1.500E+00		
	O2 Enhanced by	1.500E+00		
	H2O Enhanced by	1.860E+01		
1462.	NO2+NO2=NO+NO+O2	1.60E+12	0.0	26123.0
1463.	NO2+NO2=NO3+NO	9.60E+09	0.7	20900.0
1464.	NO3+R1H=NO2+R2OH	6.00E+13	0.0	0.0
1465.	NO3+B1O=NO2+O2	1.00E+13	0.0	0.0
1466.	NO3+R2OH=NO2+R3OOH	1.40E+13	0.0	0.0
1467.	NO3+R3OOH=NO2+O2+R2OH	1.50E+12	0.0	0.0
1468.	NO3+NO2=NO+NO2+O2	5.00E+10	0.0	2940.0
1469.	HNO+R1H=H2+NO	4.50E+11	0.7	655.0
1470.	HNO+B1O=NO+R2OH	1.00E+13	0.0	0.0
1471.	HNO+R2OH=NO+H2O	3.60E+13	0.0	0.0
1472.	HNO+NO2=HONO+NO	6.00E+11	0.0	2000.0
1473.	HNO+HNO=N2O+H2O	9.00E+08	0.0	3100.0

1474. HNO+NH2=NH3+NO	3.63E+06	1.6	-1252.0
1475. H2NO+M=HNO+R1H+M	2.50E+15	0.0	50000.0
H2O Enhanced by	5.000E+00		
N2 Enhanced by	2.000E+00		
1476. H2NO+R1H=HNO+H2	3.00E+07	2.0	2000.0
1477. H2NO+R1H=NH2+R2OH	5.00E+13	0.0	0.0
1478. H2NO+B1O=HNO+R2OH	3.00E+07	2.0	2000.0
1479. H2NO+B1O=NH2+O2	2.00E+14	0.0	0.0
1480. H2NO+R2OH=HNO+H2O	2.00E+07	2.0	1000.0
1481. H2NO+NO=HNO+HNO	2.00E+04	2.0	13000.0
1482. H2NO+NO2=HNO+HONO	6.00E+11	0.0	2000.0
1483. HONO+R1H=H2+NO2	1.20E+13	0.0	7352.0
1484. HONO+B1O=R2OH+NO2	1.20E+13	0.0	5961.0
1485. HONO+R2OH=H2O+NO2	4.00E+12	0.0	0.0
1486. NH3+M=NH2+R1H+M	2.20E+16	0.0	93470.0
1487. NH3+R1H=NH2+H2	6.40E+05	2.4	10171.0
1488. NH3+B1O=NH2+R2OH	9.40E+06	1.9	6460.0
1489. NH3+R2OH=NH2+H2O	2.00E+06	2.0	566.0
1490. NH3+R3OOH=NH2+H2O2	3.00E+11	0.0	22000.0
1491. NH2+R1H=NH+H2	4.00E+13	0.0	3650.0
1492. NH2+B1O=HNO+R1H	6.60E+14	-0.5	0.0
1493. NH2+B1O=NH+R2OH	6.80E+12	0.0	0.0
1494. NH2+R2OH=NH+H2O	4.00E+06	2.0	1000.0
1495. NH2+R3OOH=H2NO+R2OH	5.00E+13	0.0	0.0
1496. NH2+R3OOH=NH3+O2	1.00E+13	0.0	0.0
1497. NH2+NO=NNH+R2OH	8.90E+12	-0.3	0.0
1498. NH2+NO=N2+H2O	1.30E+16	-1.3	0.0
Declared duplicate reaction...			
1499. NH2+NO=N2+H2O	*****	-0.3	0.0
Declared duplicate reaction...			
1500. NH2+NO2=N2O+H2O	3.20E+18	-2.2	0.0
1501. NH2+NO2=H2NO+NO	3.50E+12	0.0	0.0
1502. NH2+H2NO=NH3+HNO	3.00E+12	0.0	1000.0
1503. HONO+NH2=NO2+NH3	7.11E+01	3.0	-4941.0
1504. NH2+NH2=N2H2+H2	8.50E+11	0.0	0.0
1505. NH2+NH=N2H2+R1H	5.00E+13	0.0	0.0
1506. NH2+N=N2+R1H+R1H	7.20E+13	0.0	0.0
1507. NH+R1H=N+H2	3.00E+13	0.0	0.0
1508. NH+B1O=NO+R1H	9.20E+13	0.0	0.0
1509. NH+R2OH=HNO+R1H	2.00E+13	0.0	0.0
1510. NH+R2OH=N+H2O	5.00E+11	0.5	2000.0
1511. NH+O2=HNO+B1O	4.60E+05	2.0	6500.0
1512. NH+O2=NO+R2OH	1.30E+06	1.5	100.0
1513. NH+NO=N2O+R1H	2.90E+14	-0.4	0.0
Declared duplicate reaction...			
1514. NH+NO=N2O+R1H	*****	-0.2	0.0
Declared duplicate reaction...			
1515. NH+NO=N2+R2OH	2.20E+13	-0.2	0.0
1516. NH+NO2=N2O+R2OH	1.00E+13	0.0	0.0
1517. NH+NH=N2+R1H+R1H	2.50E+13	0.0	0.0
1518. NH+N=N2+R1H	3.00E+13	0.0	0.0
1519. N+R2OH=NO+R1H	3.80E+13	0.0	0.0
1520. N+O2=NO+B1O	6.40E+09	1.0	6280.0
1521. N+NO=N2+B1O	3.30E+12	0.3	0.0
1522. N2H2+M=NNH+R1H+M	5.00E+16	0.0	50000.0
H2O Enhanced by	1.500E+01		
O2 Enhanced by	2.000E+00		
N2 Enhanced by	2.000E+00		
H2 Enhanced by	2.000E+00		
1523. N2H2+R1H=NNH+H2	5.00E+13	0.0	1000.0
1524. N2H2+B1O=NH2+NO	1.00E+13	0.0	0.0
1525. N2H2+B1O=NNH+R2OH	2.00E+13	0.0	1000.0
1526. N2H2+R2OH=NNH+H2O	1.00E+13	0.0	1000.0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

1527.	$\text{N}_2\text{H}_2 + \text{NO} = \text{N}_2\text{O} + \text{NH}_2$	3.00E+12	0.0	0.0
1528.	$\text{N}_2\text{H}_2 + \text{NH}_2 = \text{NH}_3 + \text{NNH}$	1.00E+13	0.0	1000.0
1529.	$\text{N}_2\text{H}_2 + \text{NH} = \text{NNH} + \text{NH}_2$	1.00E+13	0.0	1000.0
1530.	$\text{NNH} = \text{N}_2 + \text{R1H}$	1.00E+07	0.0	0.0
1531.	$\text{NNH} + \text{R1H} = \text{N}_2 + \text{H}_2$	1.00E+14	0.0	0.0
1532.	$\text{NNH} + \text{B1O} = \text{N}_2 + \text{R2OH}$	8.00E+13	0.0	0.0
1533.	$\text{NNH} + \text{B1O} = \text{N}_2\text{O} + \text{R1H}$	1.00E+14	0.0	0.0
1534.	$\text{NNH} + \text{B1O} = \text{NH} + \text{NO}$	5.00E+13	0.0	0.0
1535.	$\text{NNH} + \text{R2OH} = \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$	5.00E+13	0.0	0.0
1536.	$\text{NNH} + \text{O}_2 = \text{N}_2 + \text{R3OOH}$	2.00E+14	0.0	0.0
1537.	$\text{NNH} + \text{O}_2 = \text{N}_2 + \text{O}_2 + \text{R1H}$	5.00E+13	0.0	0.0
1538.	$\text{NNH} + \text{NO} = \text{N}_2 + \text{HNO}$	5.00E+13	0.0	0.0
1539.	$\text{NNH} + \text{NH}_2 = \text{N}_2 + \text{NH}_3$	5.00E+13	0.0	0.0
1540.	$\text{NNH} + \text{NH} = \text{N}_2 + \text{NH}_2$	5.00E+13	0.0	0.0
1541.	$\text{N}_2\text{O} + \text{M} = \text{N}_2 + \text{B1O} + \text{M}$	4.00E+14	0.0	56100.0
	N2 Enhanced by	1.700E+00		
	O2 Enhanced by	1.400E+00		
	H2O Enhanced by	1.200E+01		
	CO Enhanced by	1.500E+00		
	CO2 Enhanced by	3.000E+00		
1542.	$\text{N}_2\text{O} + \text{R1H} = \text{N}_2 + \text{R2OH}$	3.30E+10	0.0	4729.0
	Declared duplicate reaction...			
1543.	$\text{N}_2\text{O} + \text{R1H} = \text{N}_2 + \text{R2OH}$	4.40E+14	0.0	19254.0
	Declared duplicate reaction...			
1544.	$\text{N}_2\text{O} + \text{B1O} = \text{NO} + \text{NO}$	6.60E+13	0.0	26630.0
1545.	$\text{N}_2\text{O} + \text{B1O} = \text{N}_2 + \text{O}_2$	1.00E+14	0.0	28000.0
1546.	$\text{N}_2\text{O} + \text{R2OH} = \text{N}_2 + \text{R3OOH}$	1.30E-02	4.7	36561.0
1547.	$\text{N}_2\text{O} + \text{R2OH} = \text{HNO} + \text{NO}$	1.20E-04	4.3	25081.0
1548.	$\text{N}_2\text{O} + \text{NO} = \text{NO}_2 + \text{N}_2$	5.30E+05	2.2	46281.0
1549.	$\text{CN} + \text{H}_2 = \text{HCN} + \text{R1H}$	3.00E+05	2.5	2237.0
1550.	$\text{HCN} + \text{B1O} = \text{NCO} + \text{R1H}$	1.40E+04	2.6	4980.0
1551.	$\text{HCN} + \text{B1O} = \text{NH} + \text{CO}$	3.50E+03	2.6	4980.0
1552.	$\text{HCN} + \text{B1O} = \text{CN} + \text{R2OH}$	2.70E+09	1.6	29200.0
1553.	$\text{HCN} + \text{R2OH} = \text{CN} + \text{H}_2\text{O}$	3.90E+06	1.8	10300.0
1554.	$\text{HCN} + \text{R2OH} = \text{HOCN} + \text{R1H}$	5.90E+04	2.4	12500.0
1555.	$\text{HCN} + \text{R2OH} = \text{HNCO} + \text{R1H}$	2.00E-03	4.0	1000.0
1556.	$\text{HCN} + \text{R2OH} = \text{NH}_2 + \text{CO}$	7.80E-04	4.0	4000.0
1557.	$\text{HCN} + \text{CN} = \text{C}_2\text{N}_2 + \text{R1H}$	1.50E+07	1.7	1530.0
1558.	$\text{CN} + \text{B1O} = \text{CO} + \text{N}$	7.70E+13	0.0	0.0
1559.	$\text{CN} + \text{R2OH} = \text{NCO} + \text{R1H}$	4.00E+13	0.0	0.0
1560.	$\text{CN} + \text{O}_2 = \text{NCO} + \text{B1O}$	7.50E+12	0.0	-389.0
1561.	$\text{CN} + \text{CO}_2 = \text{NCO} + \text{CO}$	3.70E+06	2.2	26884.0
1562.	$\text{CN} + \text{NO}_2 = \text{NCO} + \text{NO}$	5.30E+15	-0.8	344.0
1563.	$\text{CN} + \text{NO}_2 = \text{CO} + \text{N}_2\text{O}$	4.90E+14	-0.8	344.0
1564.	$\text{CN} + \text{NO}_2 = \text{N}_2 + \text{CO}_2$	3.70E+14	-0.8	344.0
1565.	$\text{CN} + \text{HNO} = \text{HCN} + \text{NO}$	1.80E+13	0.0	0.0
1566.	$\text{CN} + \text{HONO} = \text{HCN} + \text{NO}_2$	1.20E+13	0.0	0.0
1567.	$\text{CN} + \text{N}_2\text{O} = \text{NCN} + \text{NO}$	3.90E+03	2.6	3696.0
1568.	$\text{CN} + \text{HNCO} = \text{HCN} + \text{NCO}$	1.50E+13	0.0	0.0
1569.	$\text{CN} + \text{NCO} = \text{NCN} + \text{CO}$	1.80E+13	0.0	0.0
1570.	$\text{HNCO} = \text{NH} + \text{CO}$	1.10E+16	0.0	86000.0
1571.	$\text{HNCO} + \text{R1H} = \text{NH}_2 + \text{CO}$	2.20E+07	1.7	3800.0
1572.	$\text{HNCO} + \text{B1O} = \text{HNO} + \text{CO}$	1.50E+08	1.6	44012.0
1573.	$\text{HNCO} + \text{B1O} = \text{NH} + \text{CO}_2$	9.80E+07	1.4	8524.0
1574.	$\text{HNCO} + \text{B1O} = \text{NCO} + \text{R2OH}$	2.20E+06	2.1	11425.0
1575.	$\text{HNCO} + \text{R2OH} = \text{NCO} + \text{H}_2\text{O}$	6.40E+05	2.0	2563.0
1576.	$\text{HNCO} + \text{R3OOH} = \text{NCO} + \text{H}_2\text{O}_2$	3.00E+11	0.0	22000.0
1577.	$\text{HNCO} + \text{O}_2 = \text{HNO} + \text{CO}_2$	1.00E+12	0.0	35000.0
1578.	$\text{HNCO} + \text{NH}_2 = \text{NH}_3 + \text{NCO}$	5.00E+12	0.0	6200.0
1579.	$\text{HNCO} + \text{NH} = \text{NH}_2 + \text{NCO}$	3.00E+13	0.0	23700.0
1580.	$\text{HOCN} + \text{R1H} = \text{NCO} + \text{H}_2$	2.00E+07	2.0	2000.0
1581.	$\text{HOCN} + \text{B1O} = \text{NCO} + \text{R2OH}$	1.50E+04	2.6	4000.0

1582. HOCN+R2OH=NCO+H2O	6.40E+05	2.0	2563.0
1583. HCNO+R1H=HCN+R2OH	1.00E+14	0.0	12000.0
1584. HCNO+B1O=HCO+NO	2.00E+14	0.0	0.0
1585. HCNO+R2OH=CH2O+NO	4.00E+13	0.0	0.0
1586. NCO+M=N+CO+M	3.10E+16	-0.5	48000.0
1587. NCO+R1H=NH+CO	5.00E+13	0.0	0.0
1588. NCO+B1O=NO+CO	4.70E+13	0.0	0.0
1589. NCO+R2OH=NO+HCO	5.00E+12	0.0	15000.0
1590. NCO+O2=NO+CO2	2.00E+12	0.0	20000.0
1591. NCO+H2=HNCO+R1H	7.60E+02	3.0	4000.0
1592. NCO+HCO=HNCO+CO	3.60E+13	0.0	0.0
1593. NCO+NO=N2O+CO	6.20E+17	-1.7	763.0
1594. NCO+NO=N2+CO2	7.80E+17	-1.7	763.0
1595. NCO+NO2=CO+NO+NO	2.50E+11	0.0	-707.0
1596. NCO+NO2=CO2+N2O	3.00E+12	0.0	-707.0
1597. NCO+HNO=HNCO+NO	1.80E+13	0.0	0.0
1598. NCO+HONO=HNCO+NO2	3.60E+12	0.0	0.0
1599. NCO+N=N2+CO	2.00E+13	0.0	0.0
1600. NCO+NCO=N2+CO+CO	1.80E+13	0.0	0.0
1601. C2N2+B1O=NCO+CN	4.60E+12	0.0	8880.0
1602. C2N2+R2OH=HOCN+CN	1.90E+11	0.0	2900.0
1603. NCN+B1O=CN+NO	1.00E+14	0.0	0.0
1604. NCN+R2OH=HCN+NO	5.00E+13	0.0	0.0
1605. NCN+R1H=HCN+N	1.00E+14	0.0	0.0
1606. NCN+O2=NO+NCO	1.00E+13	0.0	0.0
1607. R1H+CH3CN=HCN+R4CH3	4.00E+07	2.0	2000.0
1608. R1H+CH3CN=CH2CN+H2	3.00E+07	2.0	1000.0
1609. B1O+CH3CN=NCO+R4CH3	1.50E+04	2.6	4980.0
1610. R2OH+CH3CN=CH2CN+H2O	2.00E+07	2.0	2000.0
1611. CH2CN+B1O=CH2O+CN	1.00E+14	0.0	0.0
1612. CN+R6CH2OH=CH2CN+R2OH	5.00E+13	0.0	0.0
1613. H2CN+M=HCN+R1H+M	3.00E+14	0.0	22000.0
1614. CO+NO2=CO2+NO	9.00E+13	0.0	33779.0
1615. CO+N2O=N2+CO2	3.20E+11	0.0	20237.0
1616. CO2+N=NO+CO	1.90E+11	0.0	3400.0
1617. CH2O+NCO=HNCO+HCO	6.00E+12	0.0	0.0
1618. CH2O+NO2=HCO+HONO	8.00E+02	2.8	13730.0
1619. HCO+NO2=CO+HONO	1.20E+23	-3.3	2355.0
1620. HCO+NO2=R1H+CO2+NO	8.40E+15	-0.8	1930.0
1621. HCO+HNO=CH2O+NO	6.00E+11	0.0	2000.0
1622. CH4+CN=R4CH3+HCN	6.20E+04	2.6	-437.0
1623. NCO+CH4=R4CH3+HNCO	9.80E+12	0.0	8120.0
1624. R4CH3+NO=HCN+H2O	1.50E-01	3.5	3950.0
1625. R4CH3+NO=H2CN+R2OH	1.50E-01	3.5	3950.0
1626. R4CH3+N=H2CN+R1H	7.10E+13	0.0	0.0
1627. R4CH3+CN=CH2CN+R1H	1.00E+14	0.0	0.0
1628. R4CH3+HOCN=CH3CN+R2OH	5.00E+12	0.0	2000.0
1629. B5CH2+NO=HCN+R2OH	2.20E+12	0.0	-378.0
1630. B5CH2+NO=HCNO+R1H	1.30E+12	0.0	-378.0
1631. B5CH2+NO2=CH2O+NO	5.90E+13	0.0	0.0
1632. B5CH2+N=HCN+R1H	5.00E+13	0.0	0.0
1633. B5CH2+N2=HCN+NH	1.00E+13	0.0	74000.0
1634. H2CN+N=N2+B6CH2	2.00E+13	0.0	0.0
1635. B6CH2+NO=HCN+R2OH	2.00E+13	0.0	0.0
1636. B6CH2+NO=B5CH2+NO	1.00E+14	0.0	0.0
1637. B6CH2+HCN=R4CH3+CN	5.00E+13	0.0	0.0
1638. B4CH+NO2=HCO+NO	1.00E+14	0.0	0.0
1639. B4CH+NO=HCN+B1O	4.80E+13	0.0	0.0
1640. B4CH+NO=HCO+N	3.40E+13	0.0	0.0
1641. B4CH+NO=NCO+R1H	1.90E+13	0.0	0.0
1642. B4CH+N=CN+R1H	1.30E+13	0.0	0.0
1643. B4CH+N2=HCN+N	3.70E+07	1.4	20723.0
1644. B4CH+N2O=HCN+NO	1.90E+13	0.0	-511.0

Anexo D- Software y modelo cinético-químico detallado

1645.	B3C+NO=CN+B1O	2.00E+13	0.0	0.0
1646.	B3C+NO=CO+N	2.80E+13	0.0	0.0
1647.	B3C+N2=CN+N	6.30E+13	0.0	46019.0
1648.	B3C+N2O=CN+NO	5.10E+12	0.0	0.0
1649.	C2H6+CN=R11C2H5+HCN	1.20E+05	2.8	-1788.0
1650.	C2H6+NCO=R11C2H5+HNCO	1.50E-09	6.9	-2910.0
1651.	C2H4Z+CN=R10C2H3V+HCN	5.90E+14	-0.2	0.0
1652.	R10C2H3V+NO=C2H2T+HNO	1.00E+12	0.0	1000.0
1653.	R10C2H3V+N=HCN+B5CH2	2.00E+13	0.0	0.0
1654.	C2H2T+NCO=R12CHCOV+HCN	1.40E+12	0.0	1815.0
1655.	R9C2HT+NO=CN+HCO	2.10E+13	0.0	0.0
1656.	CH2COZ+CN=R12CHCOV+HCN	2.00E+13	0.0	0.0
1657.	R12CHCOV+NO=HCNO+CO	7.20E+12	0.0	0.0
1658.	R12CHCOV+NO=HCN+CO2	1.60E+13	0.0	0.0
1659.	R12CHCOV+NO2=HCNO+CO2	1.60E+13	0.0	0.0
1660.	R12CHCOV+N=HCN+CO	5.00E+13	0.0	0.0
1661.	HONO2+R2OH=NO3+H2O	1.00E+10	0.0	-1240.0
1662.	H2NO+O2=HNO+R3OOH	3.00E+12	0.0	25000.0
1663.	HONO+HONO=>NO+NO2+H2O	3.50E-01	3.6	12100.0
1664.	H2NO+R3OOH=HNO+H2O2	2.90E+04	2.7	1600.0
1665.	HNOH+R1H=NH2+R2OH	4.00E+13	0.0	0.0
1666.	HNOH+R1H=HNO+H2	4.80E+08	1.5	378.0
1667.	HNOH+B1O=HNO+R2OH	7.00E+13	0.0	0.0
	Declared duplicate reaction...			
1668.	HNOH+B1O=HNO+R2OH	3.30E+08	1.5	-358.0
	Declared duplicate reaction...			
1669.	HNOH+R2OH=HNO+H2O	2.40E+06	2.0	-1192.0
1670.	HNOH+NH2=NH3+HNO	1.80E+06	1.9	-1152.0
1671.	HNOH+R3OOH=HNO+H2O2	2.90E+04	2.7	-1600.0
1672.	HNOH+M=HNO+R1H+M	2.00E+24	-2.8	58934.0
	H2O Enhanced by 1.000E+01			
1673.	HNOH+O2=HNO+R3OOH	3.00E+12	0.0	25000.0
1674.	HNOH+NO2=HONO+HNO	6.00E+11	0.0	2000.0
1675.	CH3OH+NO2=R6CH2OH+HONO	3.70E+11	0.0	21400.0
1676.	R6CH2OH+NO=CH2O+HNO	1.30E+12	0.0	0.0
1677.	R6CH2OH+NO2=CH2O+HONO	5.00E+12	0.0	0.0
1678.	R6CH2OH+HNO=CH3OH+NO	3.00E+12	0.0	0.0
1679.	R7CH3O+NO=CH2O+HNO	1.30E+14	-0.7	0.0
1680.	R7CH3O+NO2=CH2O+HONO	6.00E+12	0.0	2285.0
1681.	R7CH3O+HNO=CH3OH+NO	3.20E+13	0.0	0.0
1682.	R4CH3+NO(+M)=CH3NO(+M)	9.00E+12	0.0	119.0
	Low pressure limit: 0.32000E+24 -0.18700E+01 0.00000E+00			
	H2O Enhanced by 1.000E+01			
	N2 Enhanced by 1.500E+00			
1683.	R4CH3+NO2=R7CH3O+NO	4.00E+13	-0.2	0.0
1684.	R4CH3+HONO=CH4+NO2	1.00E+12	0.0	0.0
1685.	CH3NO=HCN+H2O	3.00E+13	0.0	50000.0
1686.	R4CH3+O2(+M)=R8CH3OO(+M)	7.80E+08	1.2	0.0
	Low pressure limit: 0.58000E+26 -0.33000E+01 0.00000E+00			
	Declared duplicate reaction...			
1687.	R8CH3OO+B1O=R7CH3O+O2	2.59E+13	0.0	0.0
	Declared duplicate reaction...			
1688.	R8CH3OO+R1H=R7CH3O+R2OH	9.64E+13	0.0	0.0
	Declared duplicate reaction...			
1689.	R8CH3OO+NO=R7CH3O+NO2	3.10E+12	0.0	-358.0
1690.	R8CH3OO+R4CH3=R7CH3O+R7CH3O	3.24E+13	0.0	0.0
	Declared duplicate reaction...			

ANEXO E

Resultados experimentales y de simulación

En este anexo se exponen los resultados experimentales y de simulación obtenidos en todos los experimentos realizados. Así, se presentan primero los resultados generales (Resultados para [DMF]=100 ppm y resultados para [DMF]= 300 ppm) y luego comparativas entre los experimentos (Influencia de la concentración de DMF, interacción con NO e influencia de la presión).

E.1- Resultados para [DMF]=100 ppm

Tabla E.1- Concentración de DMF y de los productos de combustión en fase gas a presión atmosférica en condición de pirólisis ($\lambda=0$) sin y con NO ([DMF]=77/77 ppm, [O₂]=0 ppm, [NO]=0/913 ppm, [H₂O]=4930/4930 ppm, [N₂]=994993/994080 ppm). (Exp. A1 y Exp. A2).

T (°C)	Sin NO				Con NO				
	[DMF] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[H ₂] (ppm)	[DMF] (ppm)	[NO] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[H ₂] (ppm)
21/21	77	0	0	0	77	913	0	0	0
400	77	0	0	0	77	913	0	0	0
500	77	0	0	0	77	913	0	0	0
600	77	0	0	0	77	913	0	0	0
700	77	0	0	0	77	913	0	0	0
725	77	0	0	0	77	913	0	0	0
750	77	0	0	0	77	913	0	0	0
800	71	0	0	0	71	909	0	0	0
850	49	23	0	0	44	909	24	10	0
875	27	40	10	0	29	911	41	13	0
900	11	55	11	0	11	911	59	14	0
950	0	71	10	12	0	906	71	11	10
1000	0	75	11	28	0	905	81	14	28
1050	0	83	11	54	0	902	92	14	48
1100	0	117	13	110	0	894	116	15	—

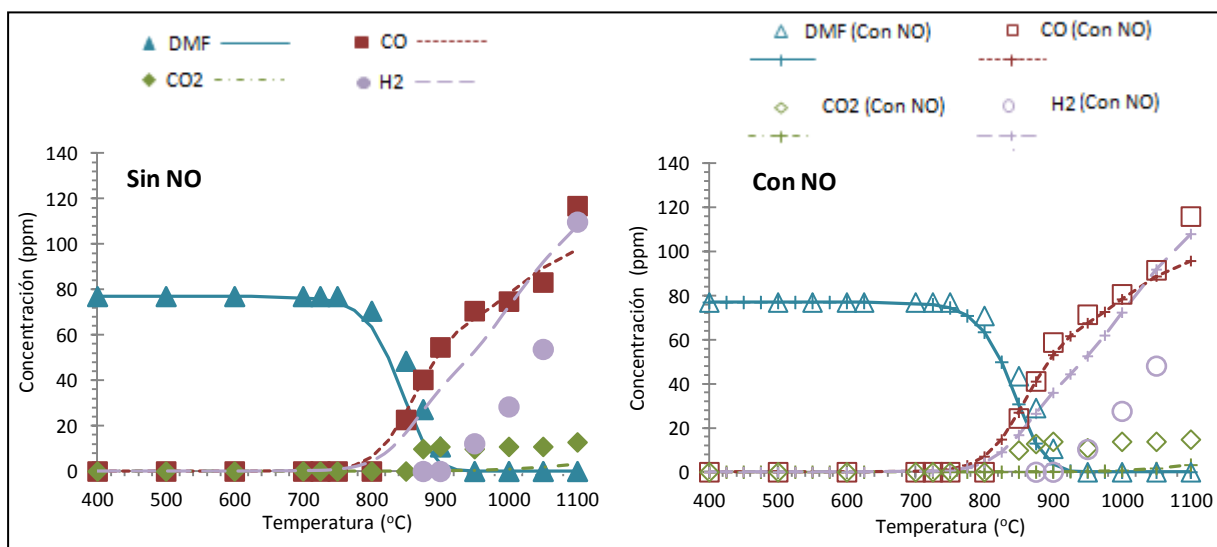


Gráfico E.1- Perfiles de concentración del DMF y de los productos de oxidación para [DMF]=100 ppm, $\lambda=0$, presión atmosférica, sin NO (Izquierda) y con NO (Derecha). (Exp. 1A y Exp. 2A). Símbolos llenos: experimentos sin NO. Símbolos vacíos: experimentos con NO. Líneas sin marcador: simulación sin NO. Líneas con marcador: simulación con NO.

Tabla E.2- Concentración de DMF y de los productos de combustión en fase gas a presión atmosférica en condición muy reductora ($\lambda=0,3$) sin y con NO ([DMF]=78/72 ppm, [O₂]=225 ppm, [NO]=0/898 ppm, [H₂O]=4630/4630 ppm, [N₂]=995067/994175 ppm). (Exp. 3A y Exp. 4A).

T (°C)	Sin NO				Con NO				
	[DMF] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[H ₂] (ppm)	[DMF] (ppm)	[NO] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[H ₂] (ppm)
20/20	78	0	0	0	72	898	0	0	0
400	78	0	0	0	72	898	0	0	0
500	78	0	0	0	72	898	0	0	0
600	78	0	0	0	72	898	0	0	0
700	78	0	0	0	72	898	0	0	0
725	78	0	0	0	72	898	0	0	0
750	78	0	0	0	72	898	0	0	0
775	78	0	0	0	—	—	—	—	—
800	78	19	0	0	66	898	18	0	0
850	54	39	0	0	42	898	42	0	0
875	35	58	0	12	31	898	60	0	0
900	17	85	43	24	10	898	77	14	0
950	2	107	63	47	0	896	97	21	15
1000	—	—	—	—	0	889	112	34	67
1050	—	—	—	—	0	881	138	57	42
1100	0	162	158	157	0	873	163	84	66

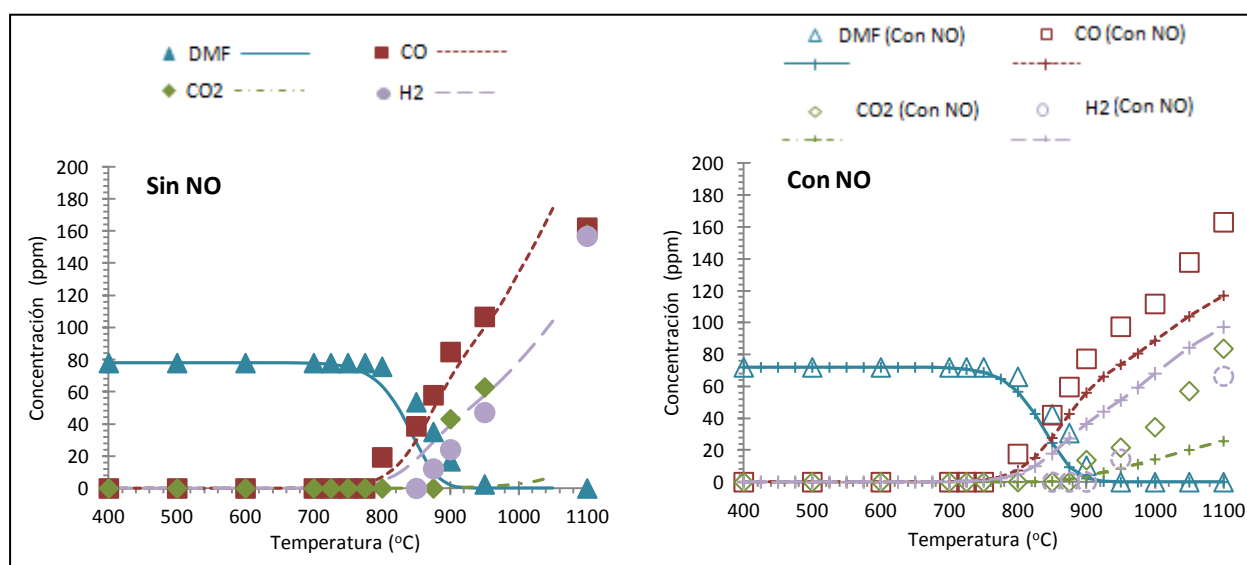


Gráfico E.2- Perfiles de concentración del DMF y de los productos de oxidación para [DMF]=100 ppm, $\lambda=0,3$, presión atmosférica, sin NO (Izquierda) y con NO (Derecha). (Exp. 3A, Exp. 4A). Símbolos llenos: experimentos sin NO. Símbolos vacíos: experimentos con NO. Líneas sin marcador: simulación sin NO. Líneas con marcador: simulación con NO.

Tabla E.3- Concentración de DMF y de los productos de combustión en fase gas a presión atmosférica en condición reductora ($\lambda=0,7$) sin y con NO ([DMF]=70/70 ppm, [O₂]=525 ppm, [NO]=0/888 ppm, [H₂O]=5960/5960 ppm, [N₂]=993445/992557). (Exp. 7A y Exp. 8A).

T (°C)	Sin NO				Con NO				
	[DMF] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[H ₂] (ppm)	[DMF] (ppm)	[NO] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[H ₂] (ppm)
24/24	70	0	0	0	70	888	0	0	0
400	70	0	0	0	70	888	0	0	0
500	70	0	0	0	70	888	0	0	0
600	70	0	0	0	70	888	0	0	0
700	70	0	0	0	70	888	0	0	0
725	70	0	0	0	70	888	0	0	0
750	70	0	0	0	70	888	0	0	0
775	70	0	0	0	70	888	0	0	0
800	67	6	0	0	67	885	10	0	0
850	39	27	0	0	35	881	29	0	0
875	21	43	0	15	19	881	50	0	16
900	6	64	0	28	4	876	68	0	26
950	0	103	19	51	0	876	98	14	49
1000	0	158	97	118	0	861	128	38	66
1050	0	57	328	114	0	851	174	105	82
1100	0	40	339	—	0	803	55	326	81

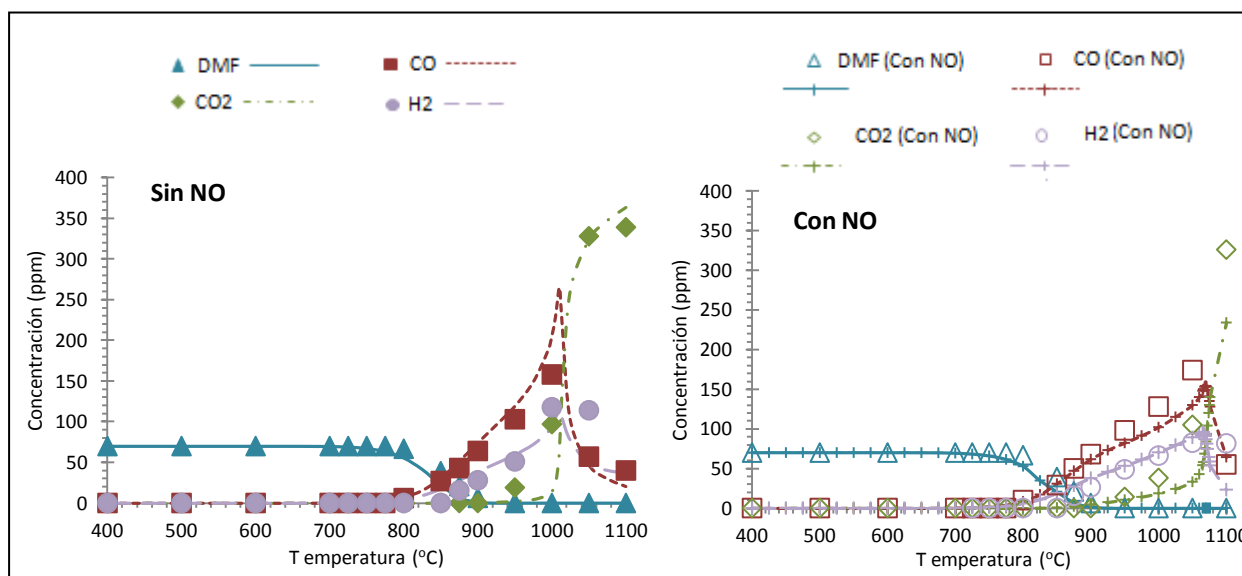


Gráfico E.3- Perfiles de concentración del DMF y de los productos de oxidación para [DMF]=100 ppm, $\lambda=0,7$, presión atmosférica, sin NO (Izquierda) y con NO (Derecha). (Exp. 7A y Exp. 8A). Símbolos llenos: experimentos sin NO. Símbolos vacíos: experimentos con NO. Líneas sin marcador: simulación sin NO. Líneas con marcador: simulación con NO.

Tabla E.4- Concentración de DMF y de los productos de combustión en fase gas a presión atmosférica en condición estequiométrica ($\lambda=1$) sin y con NO ([DMF]=78/78 ppm, [O₂]=750 ppm, [NO]=0/890 ppm, [H₂O]=5600/5600 ppm, [N₂]=993572/992682 ppm). (Exp. 9A y Exp. 10A).

	Sin NO			Con NO			
T (°C)	[DMF] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[DMF] (ppm)	[NO] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)
23/23	78	0	0	78	890	0	0
400	78	0	0	78	890	0	0
550	78	0	0	78	890	0	0
600	78	0	0	78	890	0	0
700	78	0	0	78	892	0	0
750	78	0	0	78	892	12	0
800	63	17	0	60	892	19	0
850	44	42	0	35	892	48	0
875	28	67	0	21	898	72	13
900	7	97	16	7	896	99	19
950	0	166	246	0	873	144	40
1000	0	21	472	0	868	208	211
1100	0	10	476	0	830	18	469

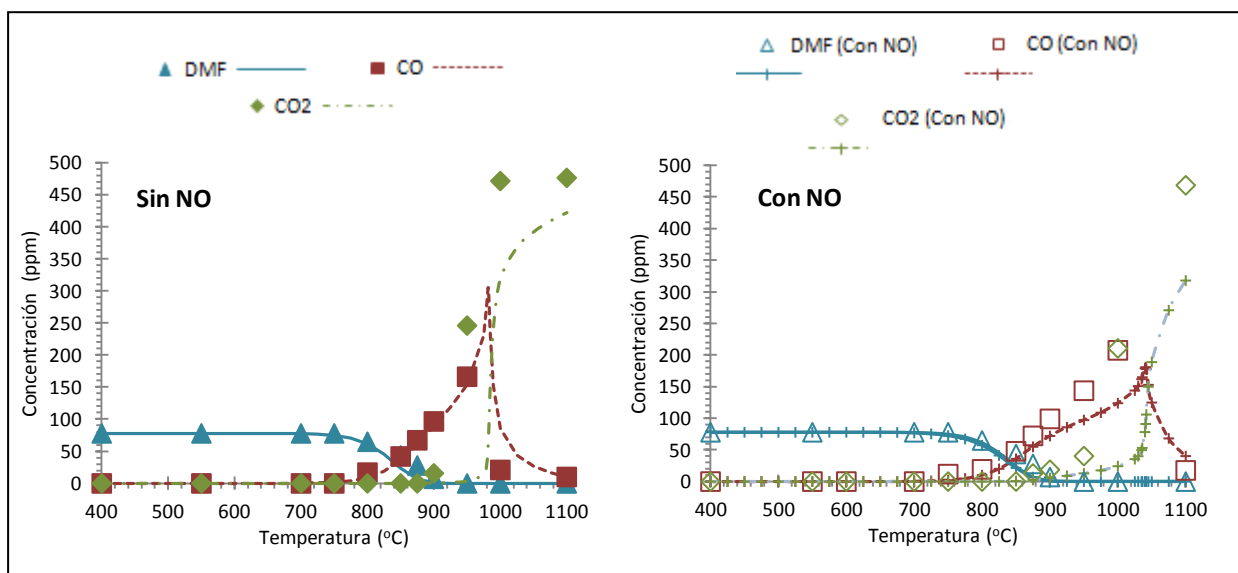


Gráfico E.4- Perfiles de concentración del DMF y de los productos de oxidación para [DMF]=100 ppm, $\lambda=1$, presión atmosférica, sin NO (Izquierda) y con NO (derecha). (Exp. 9A y Exp. 10A). Símbolos llenos: experimentos sin NO. Símbolos vacíos: experimentos con NO. Líneas sin marcador: simulación sin NO. Líneas con marcador: simulación con NO.

Tabla E.5- Concentración de DMF y de los productos de combustión en fase gas a presión atmosférica en condición oxidante ($\lambda=5$) sin y con NO ($[DMF]=78/78$ ppm, $[O_2]=3750$ ppm, $[NO]=0/905$ ppm, $[H_2O]=4930/4930$, $[N_2]=991242/990337$ ppm). (Exp. 13A y Exp. 14A).

	Sin NO			Con NO			
T (°C)	[DMF] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[DMF] (ppm)	[NO] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)
21/21	78	0	0	78	905	0	0
400	78	0	0	78	905	0	0
500	78	0	0	78	905	0	0
550	78	0	0	78	905	0	0
600	78	0	0	67	903	13	0
625	78	0	0	58	898	21	0
650	78	0	0	53	892	38	0
700	74	9	0	46	901	59	10
725	72	12	0	47	903	70	11
800	45	46	10	26	905	143	26
850	16	143	28	6	905	177	134
900	0	76	344	0	909	109	305
950	0	25	439	0	921	48	406
1100	0	0	464	0	931	0	462

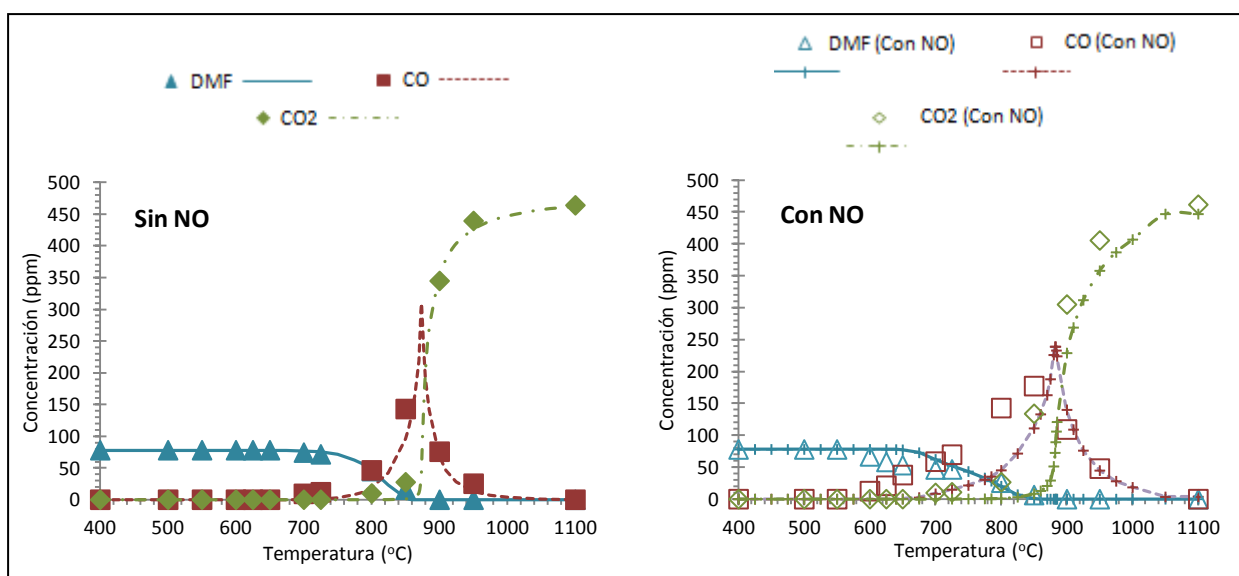


Gráfico E.5- Perfiles de concentración del DMF y de los productos de oxidación para $[DMF]=100$ ppm, $\lambda=5$, presión atmosférica, sin NO (Izquierda) y con NO (Derecha). (Exp. 13A y Exp. 14A). Símbolos llenos: experimentos sin NO. Símbolos vacíos: experimentos con NO. Líneas sin marcador: simulación sin NO. Líneas con marcador: simulación con NO.

Tabla E.6- Concentración de DMF y de los productos de combustión en fase gas a presión atmosférica en condición muy oxidante ($\lambda=30$) sin y con NO ([DMF]=78/76 ppm, [O₂]=22500 ppm, [NO]=0/867 ppm, [H₂O]=4630/6340, [N₂]=972792/970217 ppm). (Exp. 15A y Exp. 16A).

	Sin NO			Con NO			
T (°C)	[DMF] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[DMF] (ppm)	[NO] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)
20/25	78	0	0	76	867	0	0
400	78	0	0	76	867	0	0
500	78	0	0	76	867	0	0
550	—	—	—	60	859	0	0
600	78	0	0	24	846	50	0
625	—	—	—	21	840	155	16
650	—	—	—	11	822	289	32
700	70	12	0	0	877	377	89
725	71	15	0	—	—	—	—
750	60	35	0	0	877	307	218
775	34	79	0	—	—	—	—
800	—	—	—	0	888	177	358
825	5	352	66	—	—	—	—
850	—	—	—	0	896	88	438
875	0	61	406	—	—	—	—
925	0	15	442	—	—	—	—
950	0	7	457	0	903	0	472
1100	0	0	468	0	903	0	492

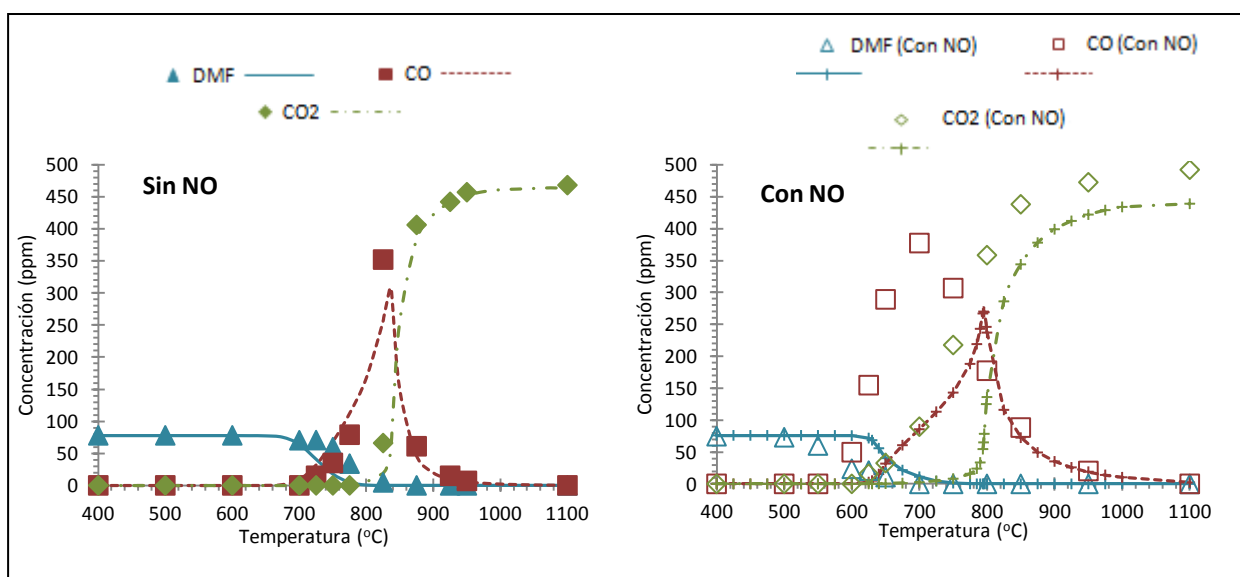


Gráfico E.6- Perfiles de concentración del DMF y de los productos de oxidación para [DMF]=100 ppm, $\lambda=30$, presión atmosférica, sin NO (Izquierda) y con NO (Derecha). (Exp. 15A y Exp. 16A). Símbolos llenos: experimentos sin NO. Símbolos vacíos: experimentos con NO. Líneas sin marcador: simulación sin NO. Líneas con marcador: simulación con NO.

E.2- Resultados para [DMF]=300 ppm

Tabla E.7- Concentración de DMF y de los productos de combustión en fase gas a presión atmosférica en condición muy reductora ($\lambda=0,3$) sin y con NO ([DMF]=302/300 ppm, [O₂]=675 ppm, [NO]=0/876 ppm, [H₂O]=5960/5960 ppm, [N₂]=993063/992189 ppm). (Exp. 5A y 6A).

	Sin NO							Con NO							
T (°C)	[DMF] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[H ₂] (ppm)	[C ₂ H ₄] (ppm)	[C ₂ H ₆] (ppm)	[C ₂ H ₂] (ppm)	[DMF] (ppm)	[NO] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[H ₂] (ppm)	[C ₂ H ₄] (ppm)	[C ₂ H ₆] (ppm)	[C ₂ H ₂] (ppm)
24/24	302	0	0	0	0	0	0	300	876	0	0	0	0	0	0
400	302	0	0	0	0	0	0	300	876	0	0	0	0	0	0
500	302	0	0	0	0	0	0	300	876	0	0	0	0	0	0
600	302	0	0	0	0	0	0	300	876	0	0	0	0	0	0
700	302	0	0	0	0	0	0	300	876	0	0	0	0	0	0
725	302	0	0	0	0	0	0	300	876	0	0	0	0	0	0
750	302	0	0	0	0	0	0	290	876	15	0	0	0	0	0
800	274	25	0	0	0	0	0	265	876	35	0	0	0	0	0
850	202	93	0	0	0	0	0	196	866	105	0	0	0	0	0
875	124	162	0	15	0	16	0	124	860	168	10	14	0	0	0
900	67	237	0	36	18	24	0	60	865	248	14	37	20	23	27
950	7	362	40	83	47	27	79	10	862	353	31	82	45	25	81
1000	0	461	167	121	55	—	136	0	846	429	99	359	60	11	147
1050	0	504	295	174	47	5	194	0	809	506	216	162	51	5	300
1100	0	524	358	229	31	3	218	0	753	556	332	218	27	4	218

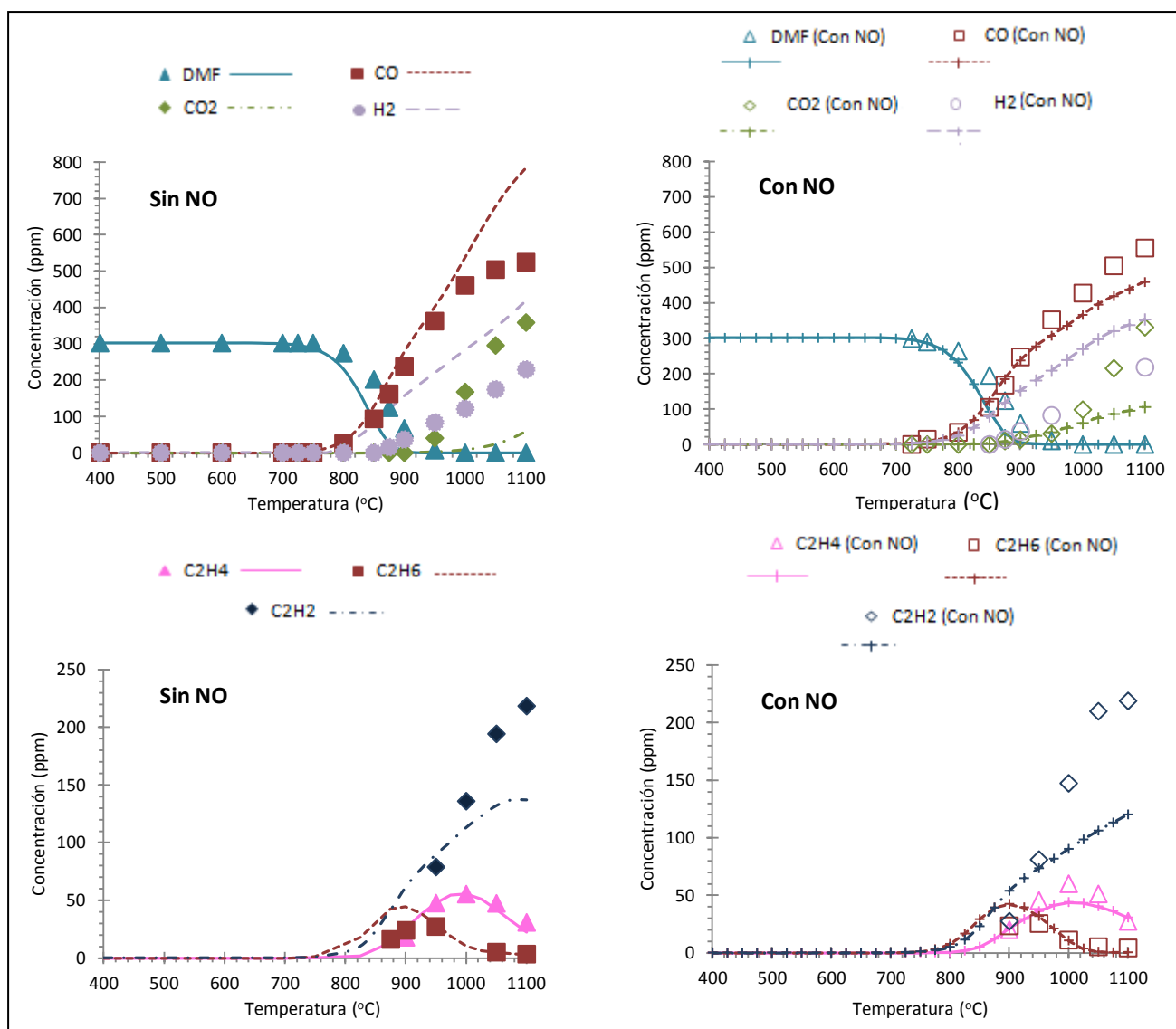


Gráfico E.7- Perfiles de concentración del DMF y de los productos de oxidación para $[DMF]=300$ ppm, $\lambda=0,3$, presión atmosférica, sin NO (Izquierda) y con NO (Derecha). (Exp. 5A y 6A). Símbolos llenos: experimentos sin NO. Símbolos vacíos: experimentos con NO. Líneas sin marcador: simulación sin NO. Líneas con marcador: simulación con NO.

Tabla E.8- Concentración de DMF y de los productos de combustión en fase gas a presión atmosférica en condición estequiométrica ($\lambda=1$) sin y con NO ([DMF]=307/307 ppm, [O₂]=2250 ppm, [NO]=0/898 ppm, [H₂O]=7630/7630 ppm, [N₂]=989813/988915). (Exp. 11A y Exp. 12A).

	Sin NO							Con NO							
T (°C)	[DMF] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[H ₂] (ppm)	[C ₂ H ₄] (ppm)	[C ₂ H ₆] (ppm)	[C ₂ H ₂] (ppm)	[DMF] (ppm)	[NO] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[H ₂] (ppm)	[C ₂ H ₄] (ppm)	[C ₂ H ₆] (ppm)	[C ₂ H ₂] (ppm)
28/28	307	0	0	0	0	0	0	307	898	0	0	0	0	0	0
400	307	0	0	0	0	0	0	307	898	0	0	0	0	0	0
550	307	0	0	0	0	0	0	307	898	0	0	0	0	0	0
650	307	0	0	0	0	0	0	307	898	0	0	0	0	0	0
700	307	0	0	0	0	0	0	293	898	9	0	0	0	0	0
750	307	0	0	0	0	0	0	281	898	21	0	0	0	0	0
800	260	32	0	0	0	0	0	259	898	52	0	0	0	0	0
850	160	139	0	0	0	0	0	153	898	161	0	0	0	0	0
875	89	235	0	23	13	22	30	84	894	266	11	27	19	17	22
900	30	361	14	51	40	30	47	32	894	384	21	52	39	25	40
950	0	488	1083	39	8	—	15	0	880	530	165	92	50	12	89
1000	0	35	1662	36	4	4	4	0	781	69	1603	14	3	2	3
1100	0	17	1672	14	4	3	5	0	708	7	1678	0	5	4	9

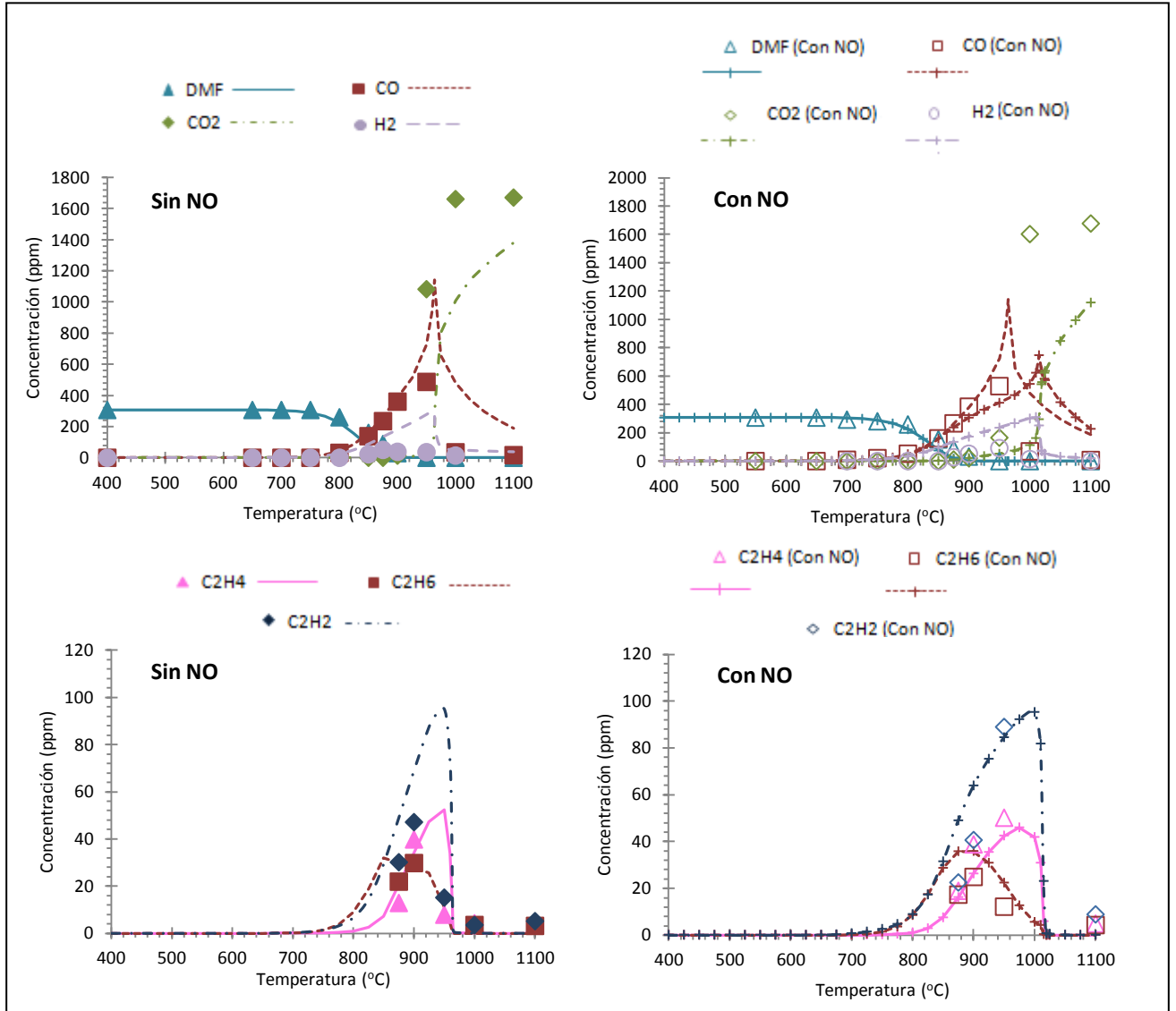


Gráfico E.8- Perfiles de concentración del DMF y de los productos de oxidación para $[DMF]=300$ ppm, $\lambda=1$, presión atmosférica, sin NO (Izquierda) y con NO (Derecha). (Exp. 11A y Exp. 12A). Símbolos llenos: experimentos sin NO. Símbolos vacíos: experimentos con NO. Líneas sin marcador: simulación sin NO. Líneas con marcador: simulación con NO.

Tabla E.9- Concentración de DMF y de los productos de combustión en fase gas a presión atmosférica en condición muy reductora ($\lambda=30$) sin y con NO ([DMF]=308/305 ppm, [O₂]=67500 ppm, [NO]=0/898 ppm, [H₂O]=6340/6340 ppm, [N₂]=925852/924957 ppm). (Exp. 17A y Exp. 18A).

T (°C)	Sin NO			Con NO			
	[DMF] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[DMF] (ppm)	[NO] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)
25/25	308	0	0	305	898	0	0
400	308	0	0	305	898	0	0
500	308	0	0	305	898	0	0
550	—	—	—	250	898	25	0
575	—	—	—	134	760	93	13
600	308	0	0	48	672	563	63
625	—	—	—	25	628	1061	161
650	292	15	0	0	683	1244	282
700	240	80	0	0	818	1126	351
725	157	193	0	—	—	—	—
750	32	507	28	—	—	—	—
775	27	824	101	—	—	—	—
800	—	—	—	0	896	357	1350
825	0	526	1183	—	—	—	—
850	—	—	—	—	—	—	—
875	0	71	1644	—	—	—	—
900	—	—	—	0	896	70	1638
925	0	18	1707	—	—	—	—
950	0	9	1713	—	—	—	—
1100	0	0	1723	0	888	0	1706

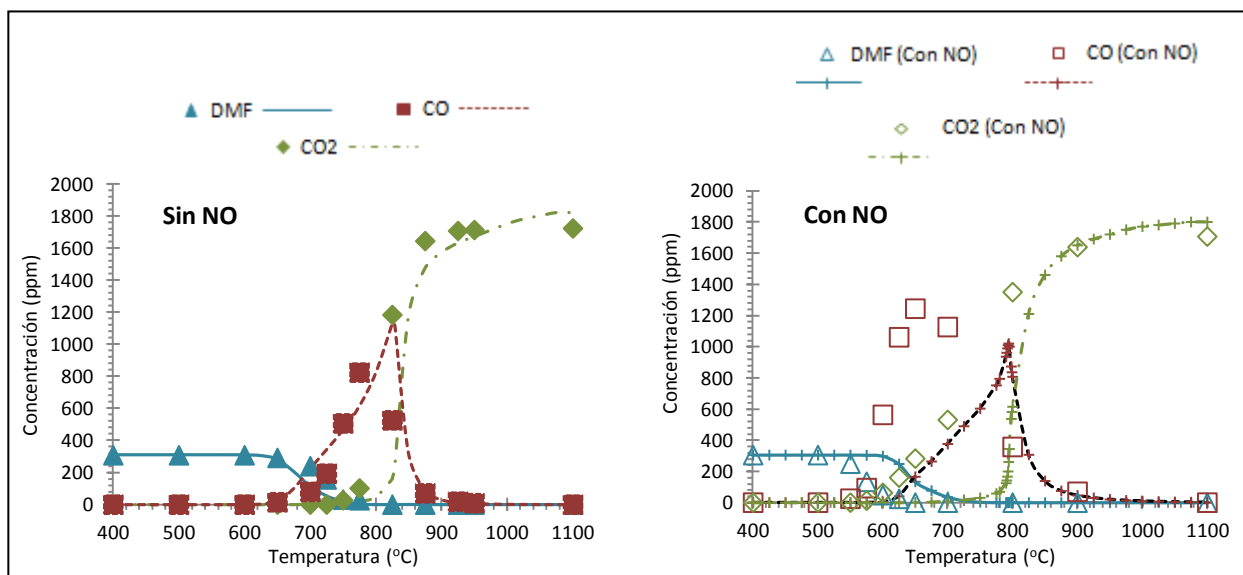


Gráfico E.9- Perfiles de concentración del DMF y de los productos de oxidación para [DMF]=300 ppm, $\lambda=30$, presión atmosférica, sin NO (Izquierda) y con NO (Derecha). (Exp. 17A y Exp. 18A). Símbolos llenos: experimentos sin NO. Símbolos vacíos: experimentos con NO. Líneas sin marcador: simulación sin NO. Líneas con marcador: simulación con NO.

E.3- Influencia de la concentración de DMF

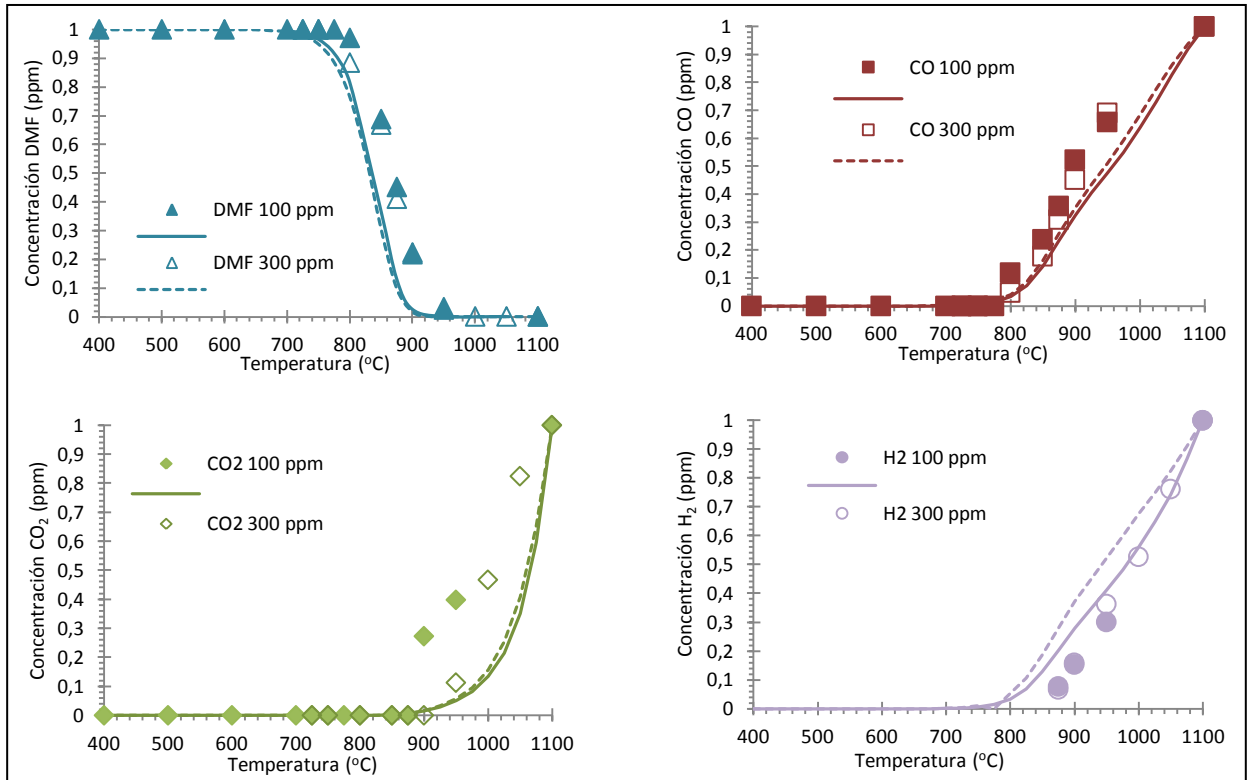


Gráfico E.10- Influencia de la concentración de DMF sobre su oxidación para $\lambda=0,3$, presión atmosférica y sin NO. Concentraciones normalizadas. (Exp.3A y Exp. 5A). Símbolos: experimentos, líneas: simulación.

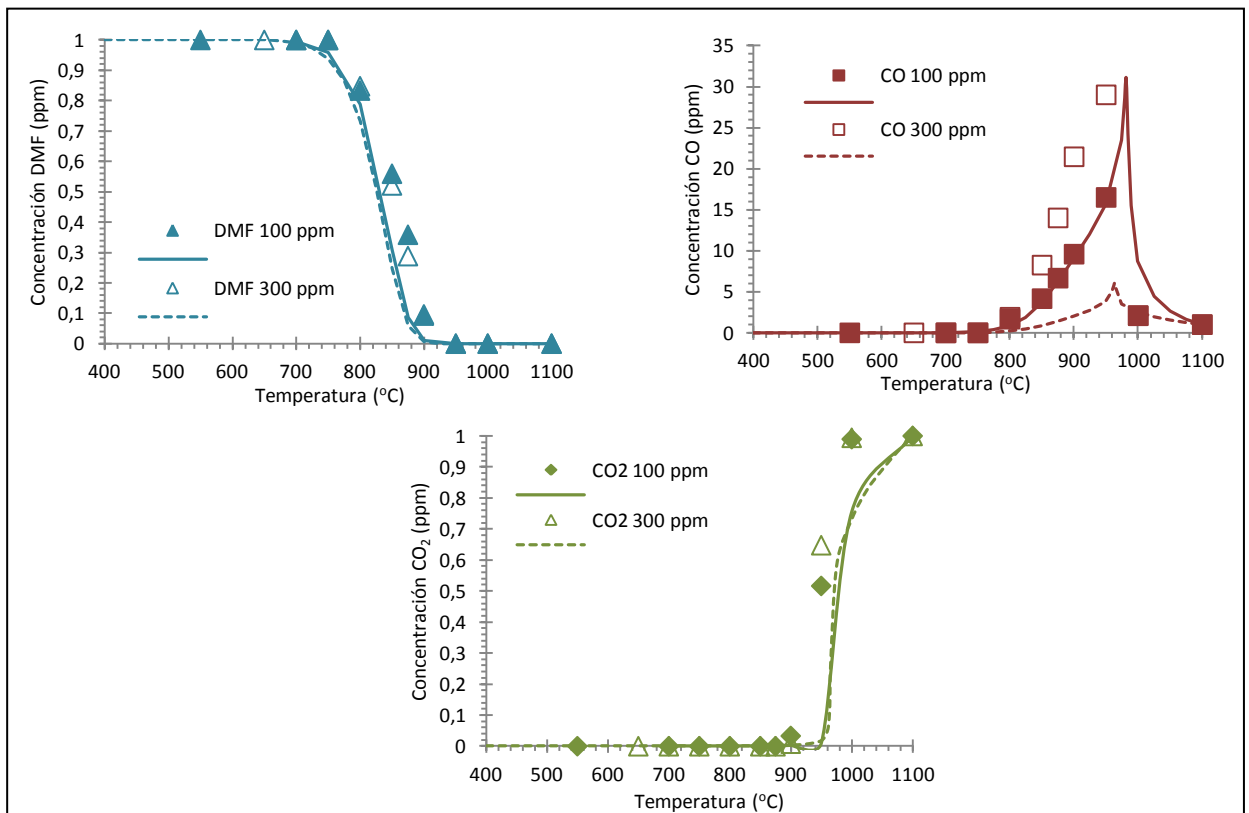


Gráfico E.11- Influencia de la concentración de DMF sobre su oxidación para $\lambda=1$, presión atmosférica y sin NO. Concentraciones normalizadas. (Exp. 9A y Exp. 11A). Símbolos: experimentos, líneas: simulación.

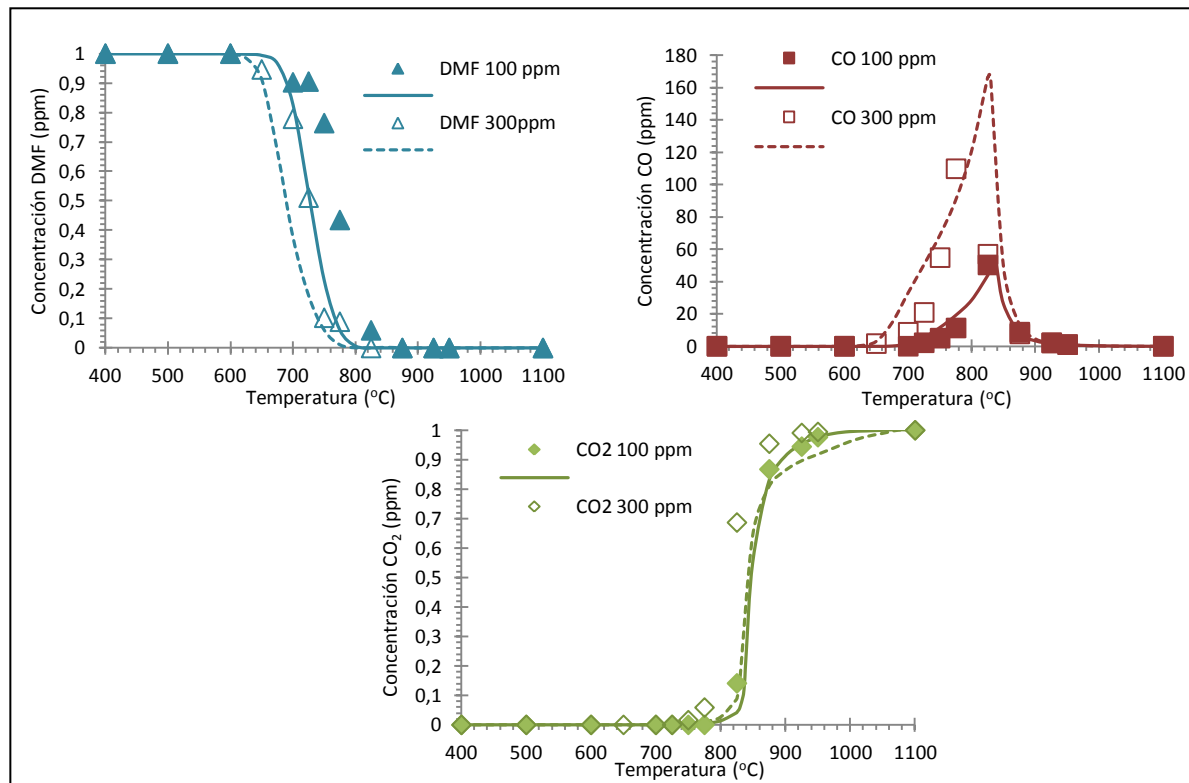


Gráfico E.12- Influencia de la concentración de DMF sobre su oxidación para $\lambda=30$, presión atmosférica y sin NO. Concentraciones normalizadas. (Exp. 15A y Exp. 17A) Símbolos: experimentos, líneas: simulación.

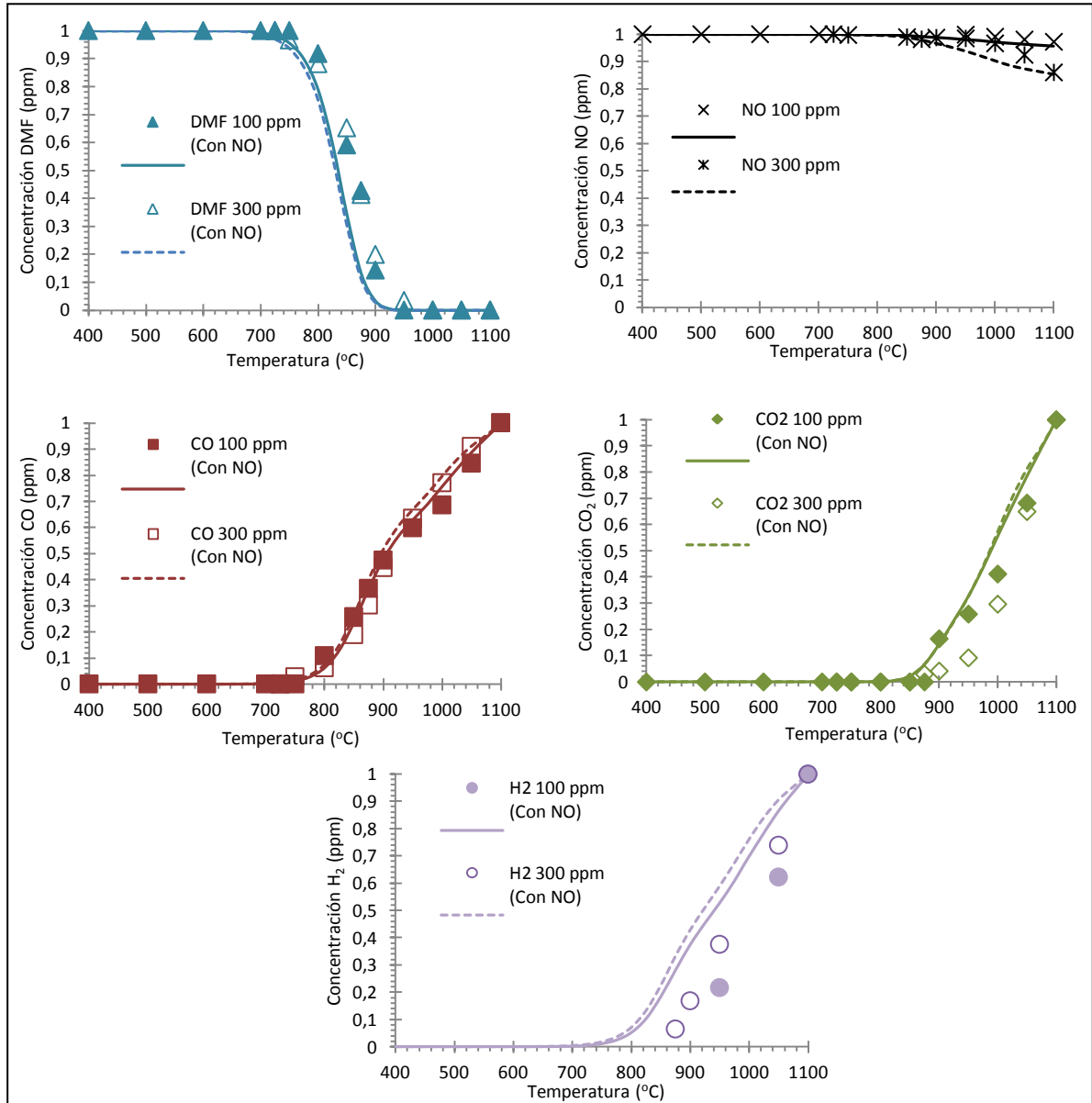


Gráfico E.13- Influencia de la concentración de DMF sobre su oxidación para $\lambda=0,3$, presión atmosférica y con NO. Concentraciones normalizadas. (Exp. 4A y Exp. 6A). Símbolos: experimentos, líneas: simulación.

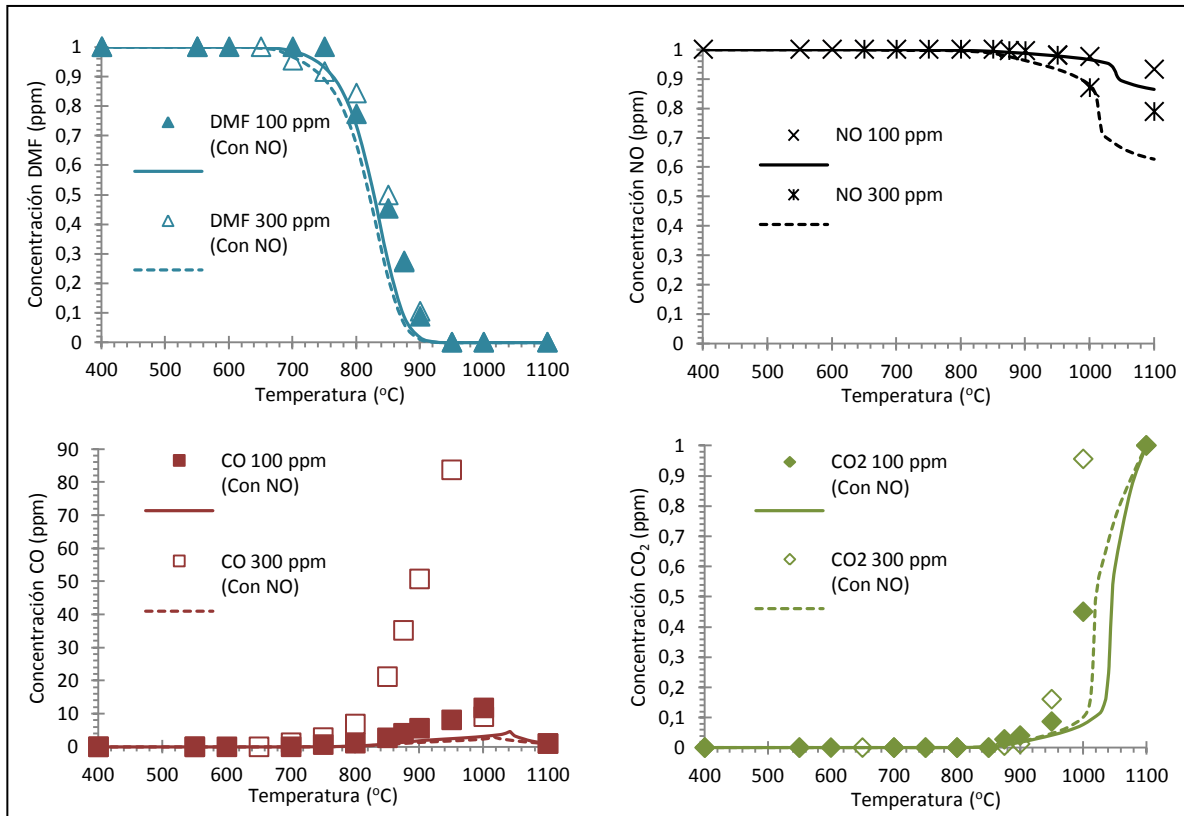


Gráfico E.14- Influencia de la concentración de DMF sobre su oxidación para $\lambda=1$, presión atmosférica y con NO. Concentraciones normalizadas. (Exp. 10A y Exp. 12A). Símbolos: experimentos, líneas: simulación.

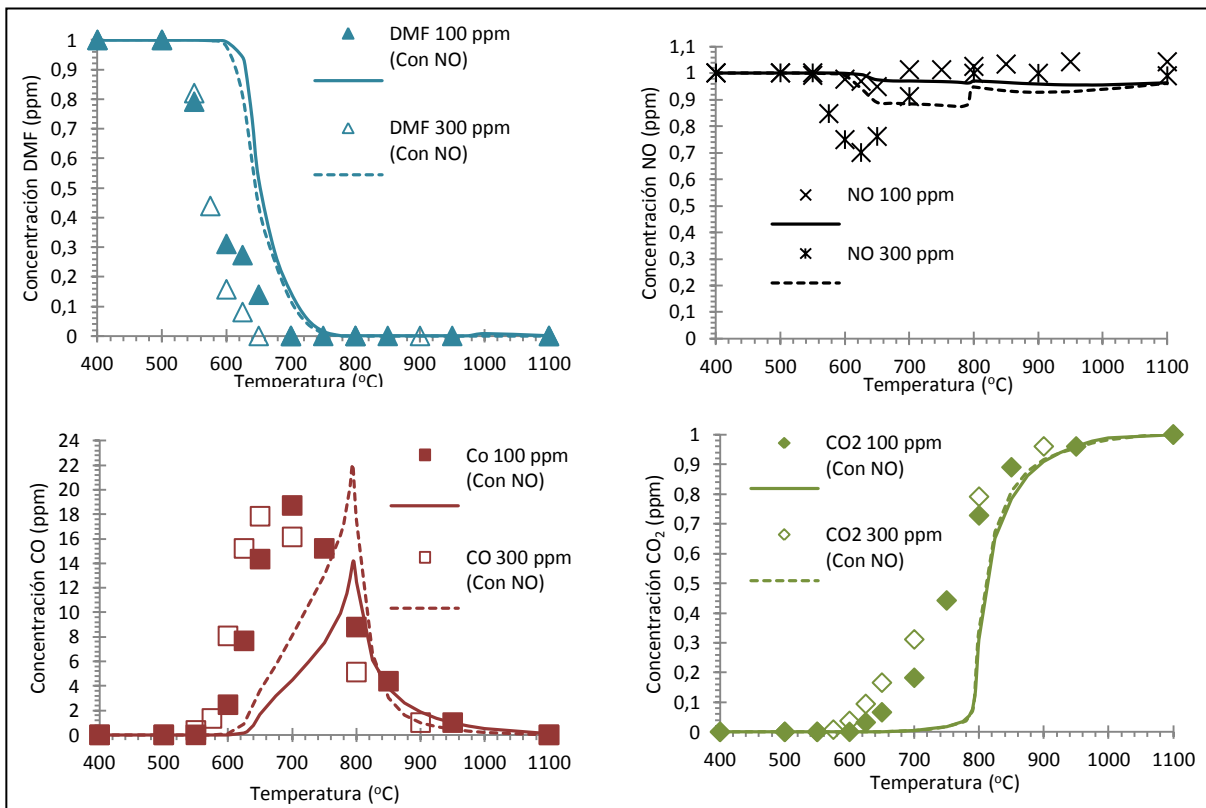


Gráfico E.15- Influencia de la concentración de DMF sobre su oxidación para $\lambda=30$, presión atmosférica y con NO. Concentraciones normalizadas. (Exp. 16A y Exp. 18A) Símbolos: experimentos, líneas: simulación.

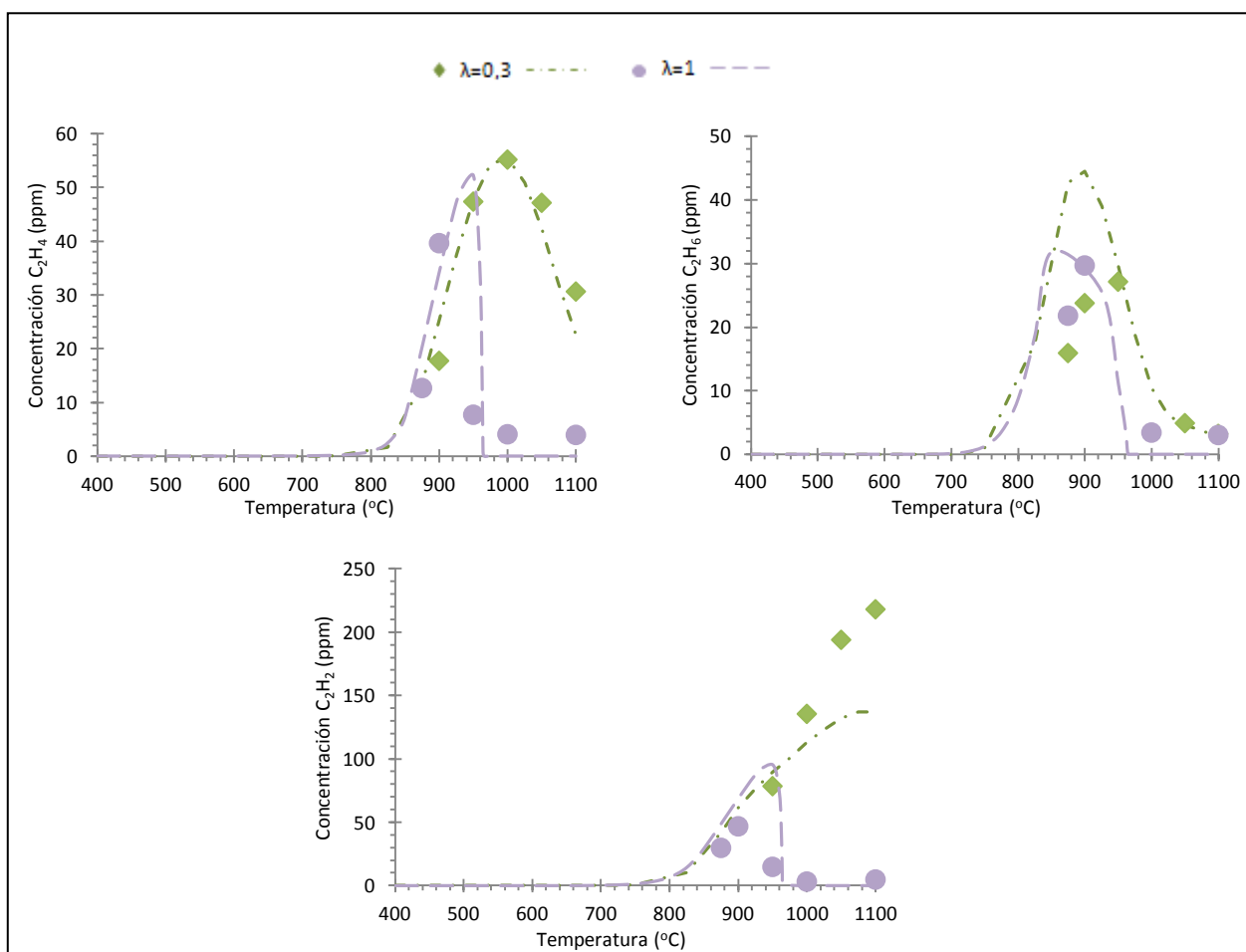


Gráfico E.16-Perfiles de concentración de etileno, etano y acetileno para $[DMF]=300$ ppm, $\lambda=0,3$, y $\lambda=1$, presión atmosférica y sin NO. (Exp. 5A y Exp. 11A). Símbolos: experimentos, líneas: simulación.

E.4- Interacción con NO

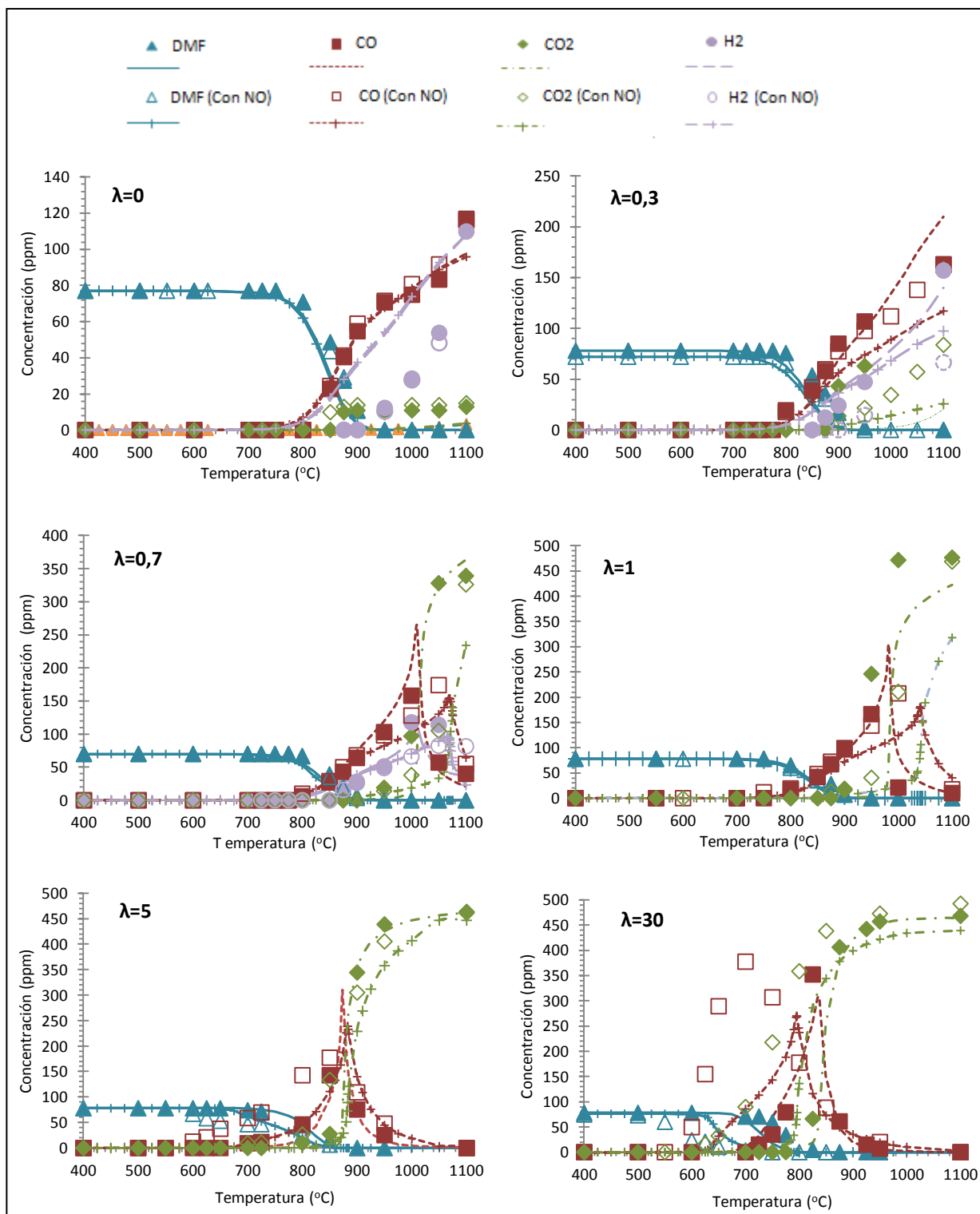


Gráfico E.17- Interacción con NO para $[DMF]=100$ ppm, para todos λ y presión atmosférica con y sin NO. (Exp. 1A, Exp. 2A, Exp. 3A, Exp. 4A, Exp. 7A, Exp. 8A, Exp. 9A, Exp. 10A, Exp. 13A, Exp. 14A, Exp. 15A y Exp. 16A). Símbolos llenos: experimentos sin NO. Símbolos vacíos: experimentos con NO. Líneas sin marcador: simulación sin NO. Líneas con marcador: simulación con NO.

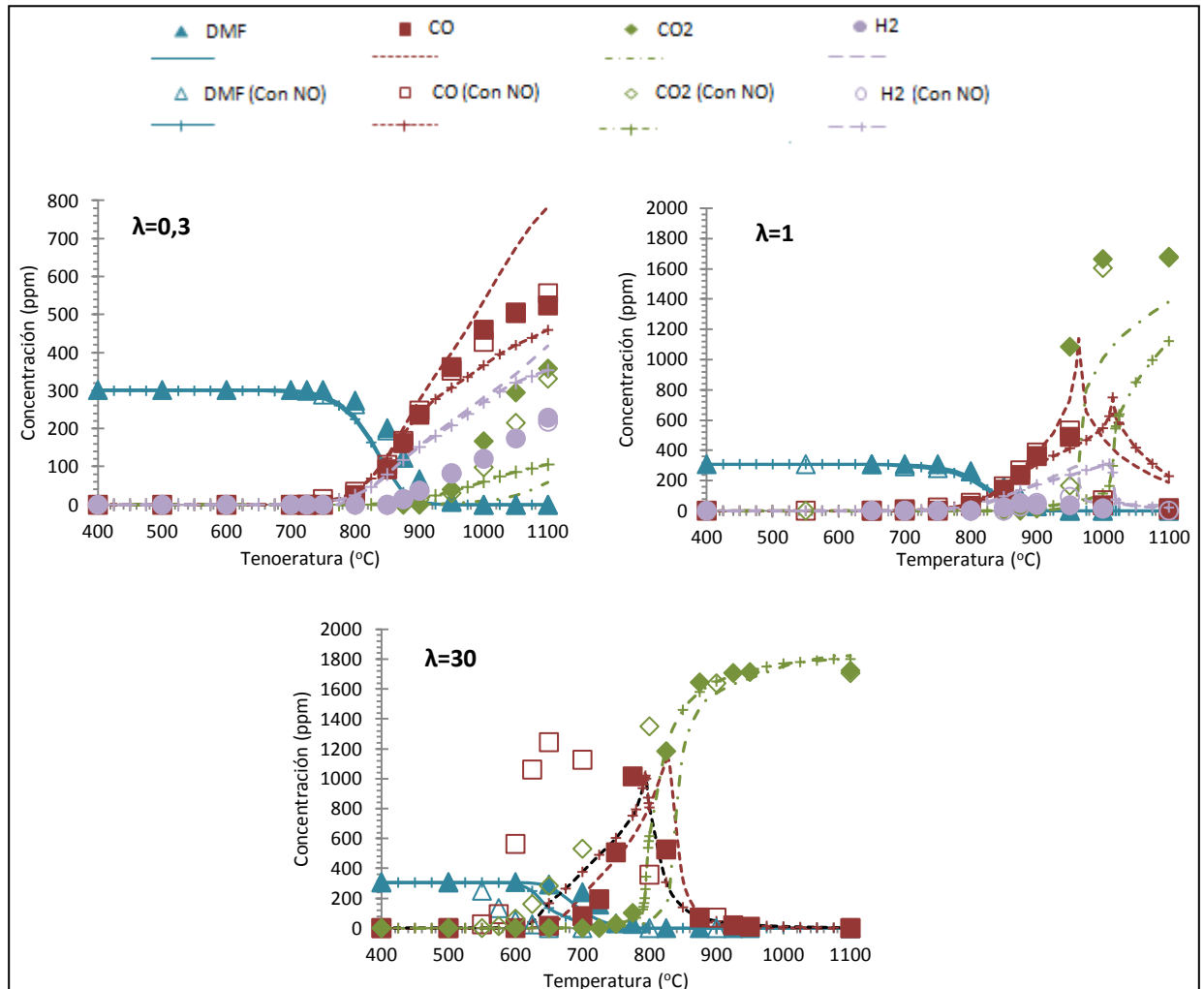


Gráfico E.18- Interacción con NO para $[DMF]=300$ ppm, para todos λ y presión atmosférica con y sin NO. (Exp. 5A, Exp. 6A, Exp. 11A, Exp. 12A, Exp. 17A y Exp. 18A). Símbolos llenos: experimentos sin NO. Símbolos vacíos: experimentos con NO. Líneas sin marcador: simulación sin NO. Líneas con marcador: simulación con NO.

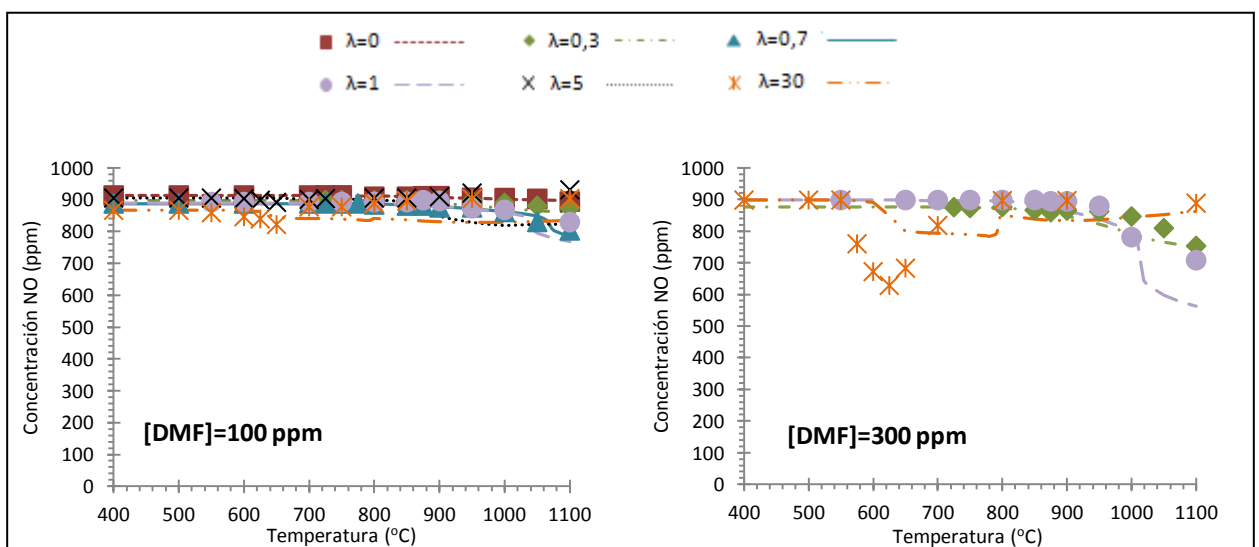


Gráfico E.19- Evolución de la concentración de NO para diferentes estequiometrías, para $[DMF]=100$ ppm (Izquierda) y $[DMF]=300$ ppm (Derecha) y presión atmosférica. (Exp. 2A, Exp. 4A, Exp. 6A, Exp. 8A, Exp. 10A, Exp. 12A, Exp. 14A, Exp. 16A y Exp. 18A).

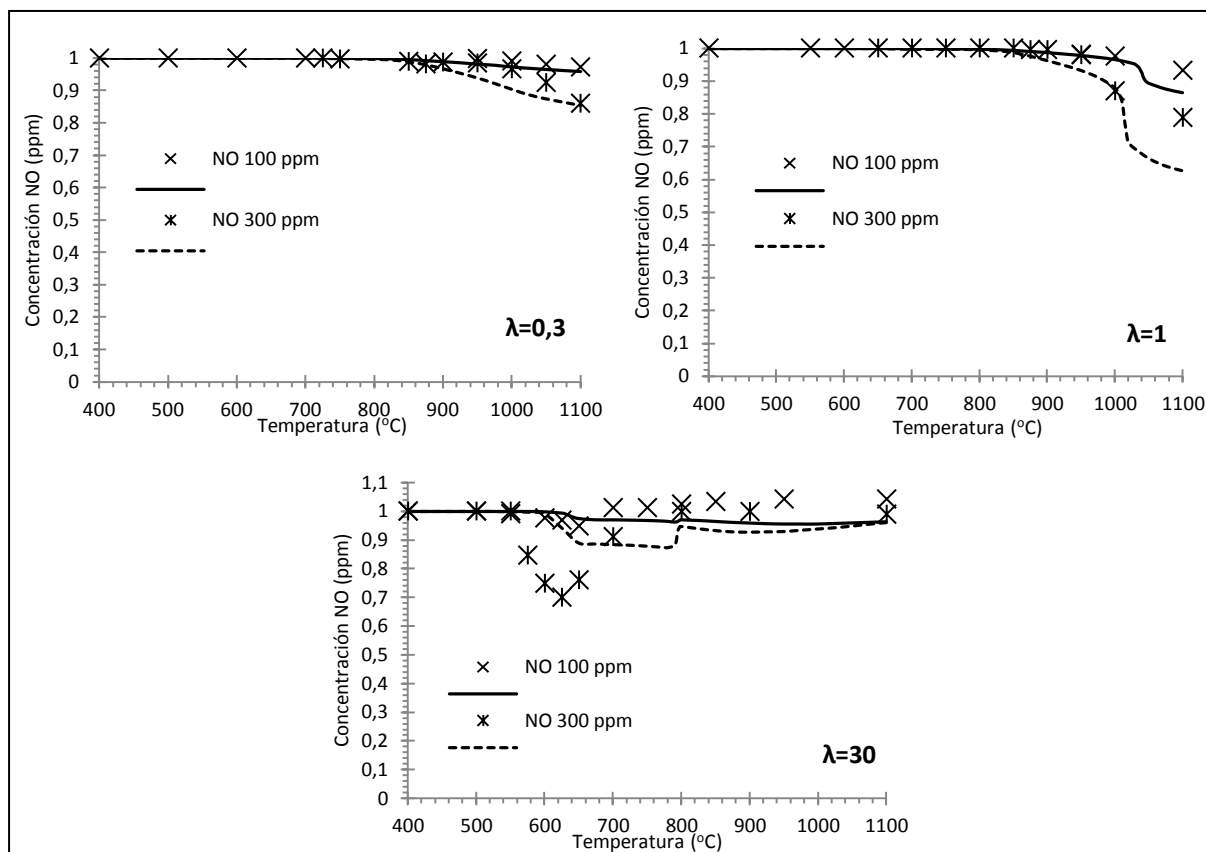


Gráfico E.20- Influencia de la concentración de DMF sobre la reducción de NO para $\lambda=0,3$, $\lambda=1$ y $\lambda=30$ y presión atmosférica. Concentraciones normalizadas. (Exp. 4A, Exp. 6A, Exp. 10A, Exp. 12A, Exp.16A y Exp. 18A). Símbolos: experimentos, líneas: simulación.

E.5- Influencia de la presión

Tabla E.10- Concentración de DMF y de los productos de combustión en fase gas en condición estequiométrica ($\lambda=1$) a 1 bar y a 20 bar ([DMF]=4348/4359 ppm, [O₂]=33750 ppm, [N₂]=961902/961891 ppm). (Exp. 1C y 2C).

	P=1 bar								P=20 bar					
T (°C)	[DMF] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[H ₂] (ppm)	[CH ₄] (ppm)	[C ₂ H ₄] (ppm)	[C ₂ H ₆] (ppm)	[C ₂ H ₂] (ppm)	[DMF] (ppm)	[CO] (ppm)	[CO ₂] (ppm)	[H ₂] (ppm)	[CH ₄] (ppm)	[C ₂ H ₄] (ppm)
25/23	4348	0	0	0	0	0	0	0	4359	0	0	0	0	0
300	4348	0	0	0	0	0	0	0	4359	0	0	0	0	0
350	4348	0	0	0	0	0	0	0	4054	0	6	0	0	0
375	—	—	—	—	—	—	—	—	3781	0	38	0	0	0
400	4348	0	43	0	0	0	0	0	2775	333	169	0	0	0
425	—	—	0	0	0	0	0	0	290	2824	1014	0	0	0
450	4224	0	88	0	0	0	0	0	34	9550	2729	103	152	0
500	4263	0	219	0	0	0	0	0	30	12328	5756	268	415	59
525	—	—	—	—	—	—	—	—	20	11608	6829	221	376	61
550	—	—	—	—	—	—	—	—	14	10871	7486	178	350	58
600	3474	583	1091	0	131	0	0	0	11	9228	9351	0	234	0
625	3119	871	1217	0	141	0	0	0	—	—	—	—	—	—
675	2465	1860	1680	0	277	35	16	72	—	—	—	—	—	—
700	1714	2886	1801	154	366	126	38	104	9	4655	14403	0	0	0
750	123	7866	1650	622	841	603	109	257	—	—	—	—	—	—
775	18	13395	2393	1470	837	564	37	123	—	—	—	—	—	—
800	17	0	19046	0	0	0	0	0	5	333	18623	0	0	0

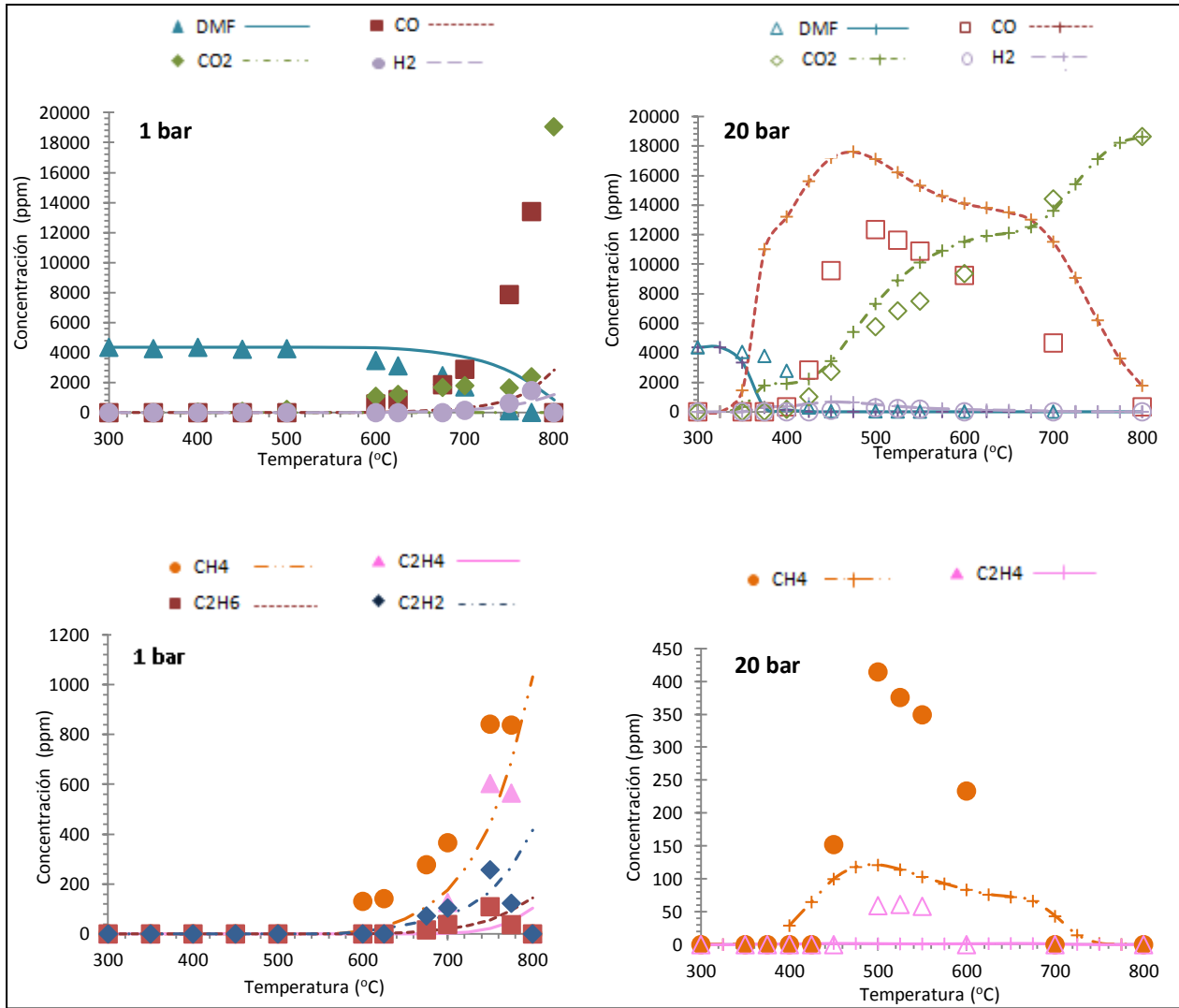


Gráfico E.21- Perfiles de concentración del DMF y de los productos de oxidación para $[DMF]=4500$ ppm, $\lambda=1$ a 1 bar (Izquierda) y a 20 bar (Derecha). (Exp. 1C y Exp. 2C). Símbolos llenos: experimentos a 1 bar. Símbolos vacíos: experimentos a 20 bar. Líneas sin marcador: simulación a 1 bar. Líneas con marcador: simulación a 20 bar.

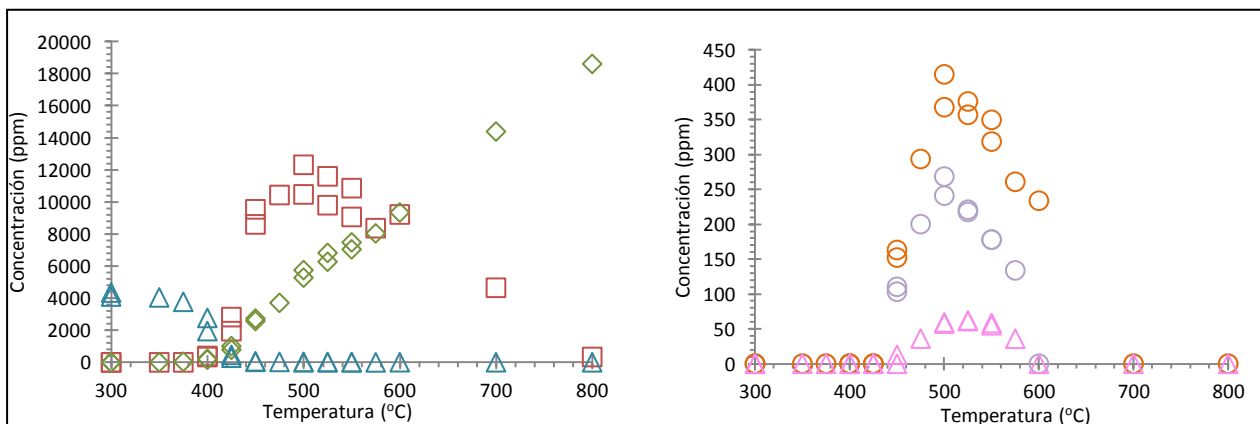


Gráfico E.22- Repetitividad del experimento a 20 bar (Exp. 2C).

ANEXO F

Análisis de velocidad y sensibilidad

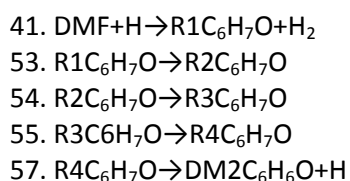
En este anexo se detalla el análisis de velocidad realizado a los resultados, exponiendo así las principales vías de consumo de DMF y de NO. También se profundiza sobre el análisis de sensibilidad efectuado de modo a verificar cuáles reacciones influyen más sobre el consumo y formación de CO.

F.1– Análisis de velocidad de reacción

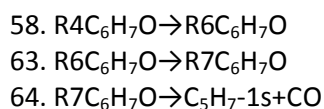
En las figuras 6.1 y 6.2, de la sección 6, se muestran las principales vías de consumo del DMF y del NO, respectivamente, a la temperatura en que se tiene una conversión de DMF de ~50% para las diversas concentraciones de oxígeno y de DMF estudiadas y a presión atmosférica.

Las principales vías de consumo de ambos reactantes varían de acuerdo a la cantidad de oxígeno presente en el medio. De este modo, se detectan cinco caminos preferenciales para el consumo de DMF: **(1)** formación del radical 5-metil-2-furanilmetilo ($R1C_6H_7O$), por la abstracción de un H de uno de los grupos metilo del DMF, **(2)** formación de 3,4-hexadien-2-ona ($DM4C_6H_8O$) por abertura del anillo de DMF **(3)** adición de un H al DMF dando origen al 2-metilfurano (MF) y al radical metilo (CH_3), **(4)** reorganización del DMF originando 1,3-butadieno ($1,3-C_4H_6$) y al radical acetilo (CH_3CO) y **(5)** adición de un OH al DMF para dar origen al acetileno (C_2H_2), al radical acetilo (CH_3CO) y al acetaldehído (CH_3CHO).

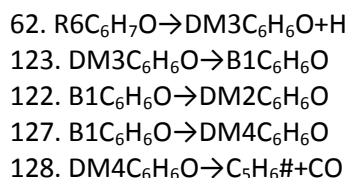
(1) En todas las situaciones, a excepción de condiciones muy oxidantes, la principal vía de consumo de DMF es la abstracción de un H de uno de los dos grupos metilo del DMF, originando el radical resonante 5-metil-2-furanilmetilo ($R1C_6H_7O$). Éste sufre un alargamiento del anillo dando origen al radical $R4C_6H_7O$ y llevando a la posterior formación de 2,4-ciclohexadienona ($DM2C_6H_6O$) a través de la escisión de la ligación C-H.



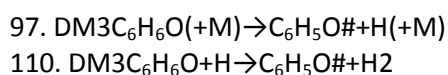
También puede ocurrir que $R4C_6H_7O$ se descomponga en el radical $R6C_6H_7O$ o en el radical $R9C_6H_7O$. En el primer caso, existen dos caminos para su descomposición: (i) la posterior abertura del anillo formando así el radical $R7C_6H_7O$ y consecuente formación del radical C_5H_7-1s por la eliminación de CO.

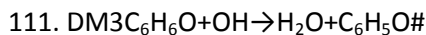


O (ii) la formación de ciclohexa-2,5-dien-1-ona ($DM3C_6H_6O$), dando posterior formación a $DM2C_6H_6O$ o al ciclopentadieno ($C_5H_6\#$) vía el birradical $B1C_6H_6O$ (Esta última formación no ocurre para condiciones muy oxidantes).

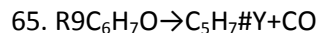
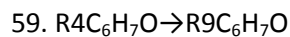


O dando posterior formación al radical fenoxi ($C_6H_5O\#$) por reacción con un tercer cuerpo (+M) o radicales tales como H o OH.

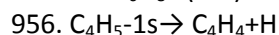
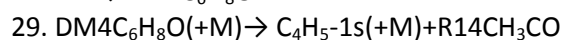




Caso el $\text{R4C}_6\text{H}_7\text{O}$ se descomponga en $\text{R9C}_6\text{H}_7\text{O}$, este radical da origen al radical 2-ciclopenten-1-ilo ($\text{C}_5\text{H}_7\cdot$) por la eliminación de CO.

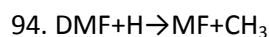


(2) Para condiciones no oxidantes ni muy oxidantes, puede ocurrir la descomposición de DMF por la abertura del anillo, dando origen a 3,4-hexadien-2-ona ($\text{DM4C}_6\text{H}_8\text{O}$), el cual puede reaccionar con un tercer cuerpo produciéndose una ruptura de la ligación C-C y formando así al radical 1,2-butadien-1-ilo ($\text{C}_4\text{H}_5\cdot$) y al radical acetilo ($\text{CH}_3\text{CO}\cdot$). A su vez el $\text{C}_4\text{H}_5\cdot$ causa la formación del vinilacetileno (C_4H_4).

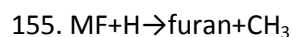


Esta vía ocupa el segundo lugar en condiciones de pirólisis, mientras que en el resto de situaciones en que se produce representa el tercer camino más importante para la descomposición del DMF.

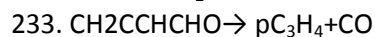
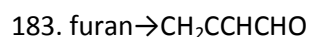
(3) La formación de MF se da para todas las situaciones a excepción de condiciones muy oxidantes, y para todas las situaciones en que se forma representa la segunda vía preferencial para la descomposición del DMF, a excepción de condiciones de pirólisis y oxidantes. El MF se origina por la reacción del DMF con un átomo de hidrógeno produciéndose también el radical metilo.



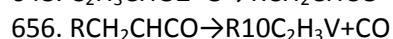
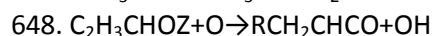
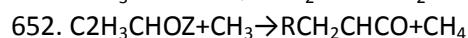
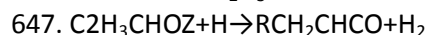
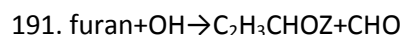
A su vez, el MF puede reaccionar o descomponerse para dar origen al (i) furano por la reacción del MF con un átomo de hidrógeno produciéndose al mismo tiempo el grupo metilo.



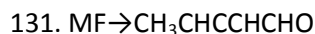
El furano puede descomponerse, en todas las situaciones excepto en condiciones oxidantes en presencia de NO, para dar propino (pC_3H_4) más óxido de carbono.



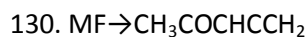
o bien, puede reaccionar con OH hasta formar el radical $\text{R10C}_2\text{H}_3\text{V}$ más CO. Esta reacción no ocurre para condiciones de pirólisis ni muy reductoras.



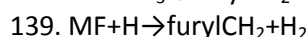
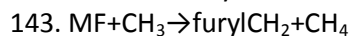
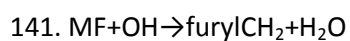
(ii) penta-2,3-dienal ($\text{CH}_3\text{CHCCHCHO}$), que se origina por la descomposición del MF y se forma en todas las condiciones estudiadas y en que se forma MF.



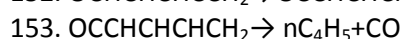
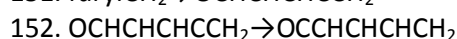
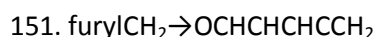
(iii) 3,4-pentadien-2-ona ($\text{CH}_3\text{COCHCCH}_2$), que al igual que en el caso anterior, se origina por la descomposición del MF. Sin embargo, no ocurre para condiciones oxidantes.



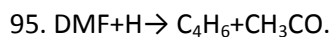
(v) radical 2-furilmetilo (FurylCH_2), debido a la abstracción de un H del grupo metilo del MF, por los radicales OH, CH_3 o H. Esta vía se da para todas las condiciones estudiadas y en que se forma MF a excepción de condiciones de pirólisis, muy reductoras, reductoras y estequiométricas, cuando $[\text{DMF}] = 100 \text{ ppm}$.



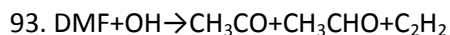
El anillo de furylCH_2 se abre formando intermediarios hasta dar origen a nC_4H_5 más CO.



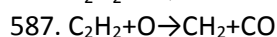
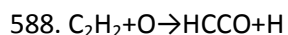
(4) Al igual que en el caso del MF, para todas las situaciones a excepción de condiciones muy oxidantes, puede existir adición de un átomo H al DMF originando 1,3-butadieno ($1,3\text{-C}_4\text{H}_6$) y el radical acetilo (CH_3CO).



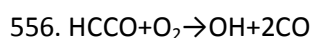
(5) Para condiciones oxidantes y muy oxidantes otra vía importante para la descomposición del DMF es la reacción entre el DMF y el OH para originar acetileno (C_2H_2), radical acetilo (CH_3CO) y acetaldehído (CH_3CHO). Para condiciones muy oxidantes esta representa la principal vía para el consumo de DMF. En cambio, para condiciones oxidantes representa la segunda vía más importante para el consumo de DMF.



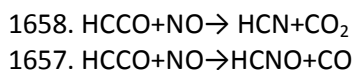
El C_2H_2 reacciona con O para producir HCCO o CH_2 más CO.



A su vez, el HCCO reacciona con oxígeno formando CO y radical OH.

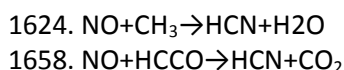


Estas reacciones ocurren en ausencia y en presencia de NO. Sin embargo, cuando está presente el NO, también existe la vía de reacción entre HCCO y NO para dar dos conjuntos de productos: cianuro de hidrógeno (HCN) más CO_2 y ácido fulmínico (HCNO) más CO.

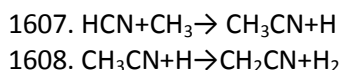


Por otro lado, para el NO se detectan tres caminos preferenciales para su consumo: **(1)** consumo de NO para dar HCN, **(2)** descomposición del NO para dar origen a H_2CN y **(3)** oxidación del NO para dar origen al NO_2 . Asimismo, estas vías son las que se observan para todas las condiciones, excepto para condiciones oxidantes y muy oxidantes, que en estos casos se da únicamente **(3)**.

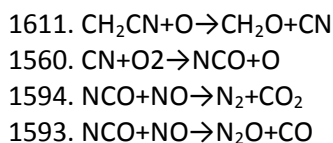
(1) El NO reacciona con el radical metilo (CH_3), siendo que en condiciones muy reductoras puede reaccionar también con HCCO para originar HCN.



El HCN reacciona nuevamente con un radical metilo para originar CH_3CN y posteriormente CH_2CN por una deshidrogenación.

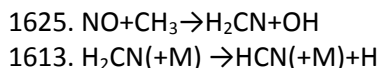


Posteriormente se producen subsecuentes reacciones que dan origen a nitrógeno molecular (N_2) u óxido nitroso (N_2O).

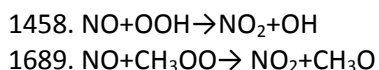


Esta representa la principal vía para la descomposición del NO excepto en condiciones oxidantes y muy oxidantes (cómo mencionado anteriormente, esta vía no se da para estas condiciones) y en condiciones estequiométricas para $[\text{DMF}] = 300$ ppm, representando en este caso la segunda vía preferencial.

(2) Otra posible vía es la reacción de un radical metilo para producir H_2CN el cual a su vez reacciona con un tercer cuerpo para dar HCN por la eliminación de un átomo H.



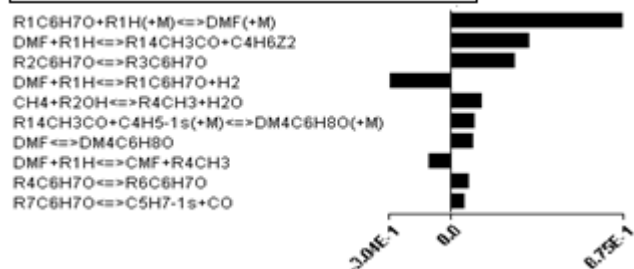
(3) El NO puede reaccionar con el radical hidroxiperosilo (HO_2 , OOH) o con el radical metildioxi (CH_3O_2 , CH_3OO), liberando el radical hidróxilo (OH) o metiloxi (CH_3O), respectivamente.



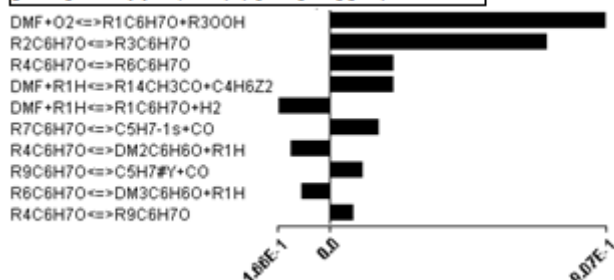
Esta representa la principal vía de consumo de NO cuando las condiciones son estequiométricas y $[\text{DMF}] = 300$ ppm, y la única vía para condiciones oxidantes y muy oxidantes. A su vez, representa la tercera vía para el consumo de NO para condiciones reductoras y estequiométricas y $[\text{DMF}] = 100$ ppm.

F.2- Análisis de sensibilidad

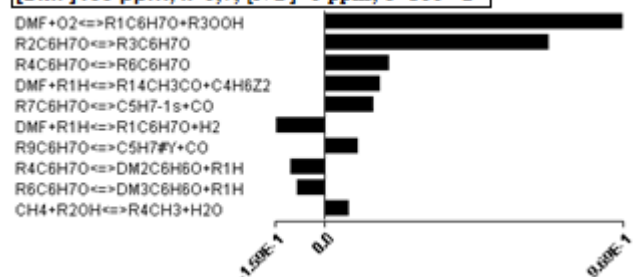
[DMF]=100 ppm, $\lambda=0$, [NO]=0 ppm, T=800 °C



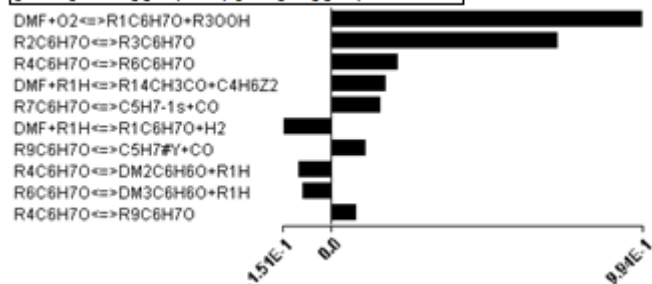
[DMF]=100 ppm, $\lambda=0,3$, [NO]=0 ppm, T 800 °C



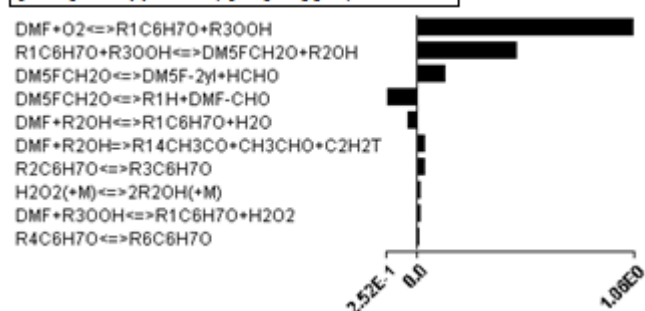
[DMF]100 ppm, $\lambda=0,7$, [NO]=0 ppm, T=800 °C



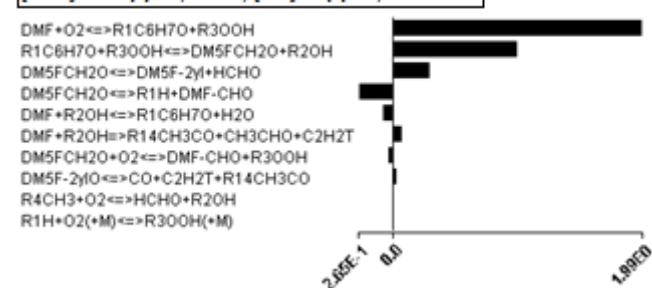
[DMF]=100 ppm, $\lambda=1$, [NO]=0 ppm, T=800 °C



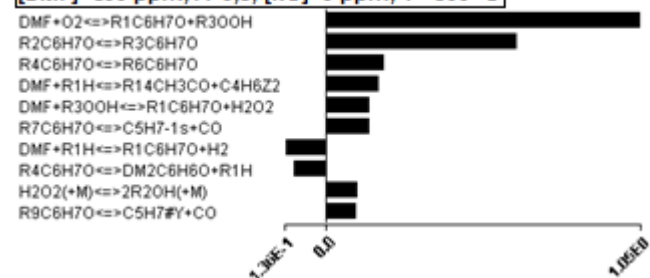
[DMF]=100 ppm, $\lambda=5$, [NO]=0 ppm, T=725 °C



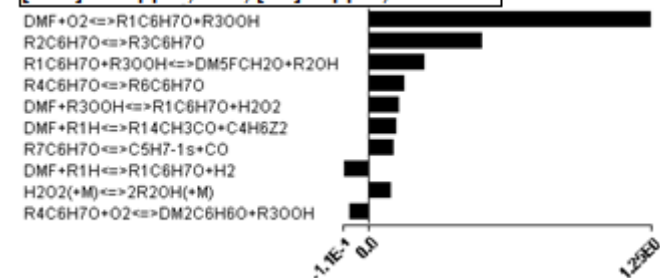
[DMF]=100 ppm, $\lambda=30$, [NO]=0 ppm, T=700 °C



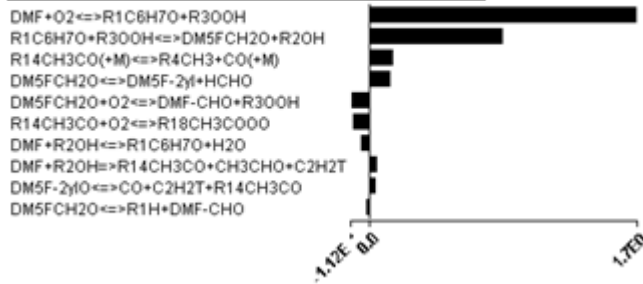
[DMF]=300 ppm, $\lambda=0,3$, [NO]=0 ppm, T= 800 °C



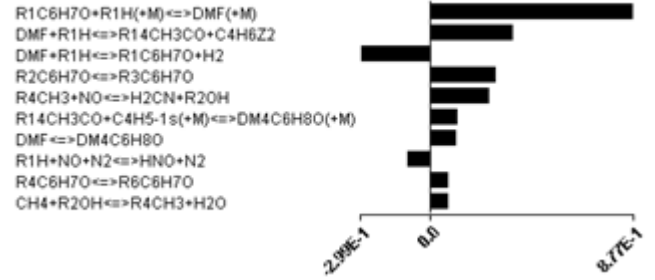
[DMF]=300 ppm, $\lambda=1$, [NO]=0 ppm, T=800 °C



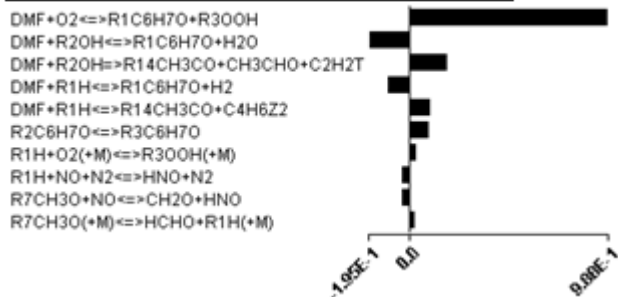
[DMF]=300 ppm, $\lambda=30$, [NO]=0 ppm, T=625 °C



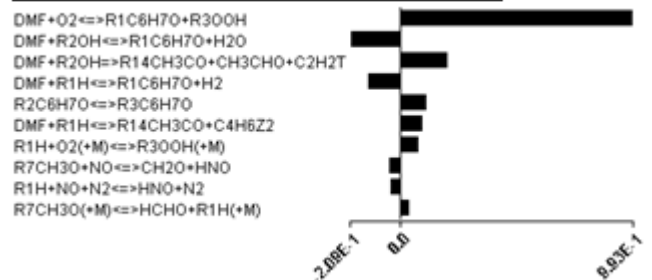
[DMF]=100 ppm, $\lambda=0$, [NO]=900 ppm, T= 800 °C



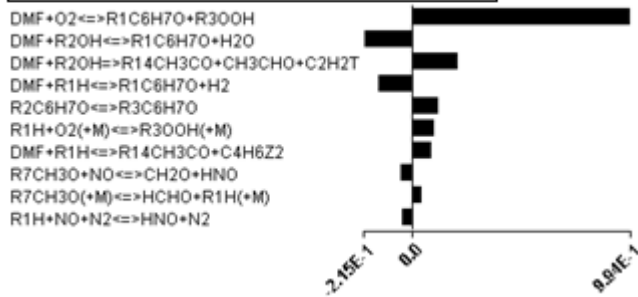
[DMF]=100 ppm, $\lambda=0,3$, [NO]=900 ppm, T=800 °C



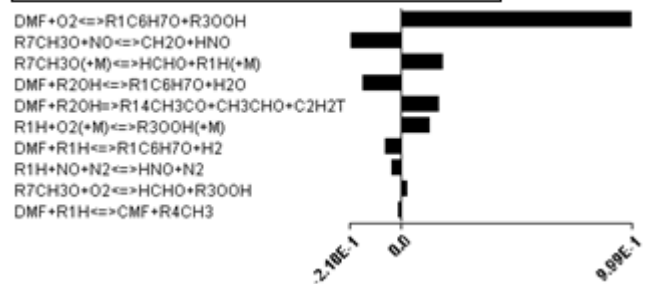
[DMF]=100 pp, $\lambda=0,7$, [NO]=900 ppm, T=800 °C



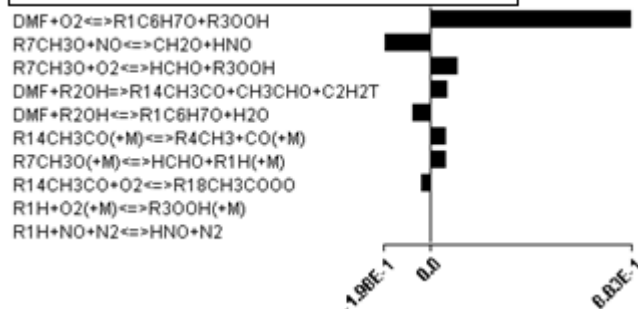
[DMF]=100 ppm, $\lambda=1$, [NO]=900 ppm, T=800 °C



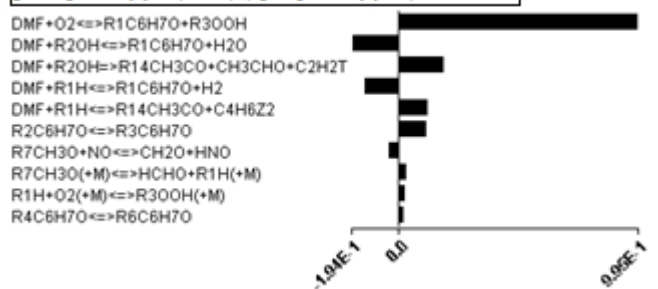
[DMF]=100 ppm, $\lambda=5$, [NO]=900 ppm, T=700 °C



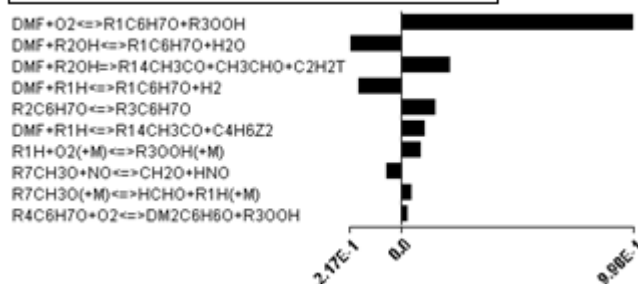
[DMF]=100 ppm, $\lambda=30$, [NO]=900 ppm, T=625 °C



[DMF]=300 ppm, $\lambda=0,3$, [NO]=900 ppm, T=800 °C



[DMF]=300 ppm, $\lambda=1$, [NO]=900 ppm, T=800 °C



[DMF]=300 ppm, $\lambda=30$, [NO]=900 ppm, T=600 °C

