



Universidad
Zaragoza

**ESTUDIO DE LA OXIDACIÓN DEL 1-BUTANOL
CON DIFERENTES CONCENTRACIONES DE
OXÍGENO Y EN PRESENCIA DE NO**

Trabajo Fin de Grado

Grado en Ingeniería Química

Autor: Luis Antonio López Sinche

Ponente: Rafael Bilbao Duñabeitia

Escuela de Ingeniería y Arquitectura. Universidad de Zaragoza.

2018



DECLARACIÓN DE
AUTORÍA Y ORIGINALIDAD

(Este documento debe acompañar al Trabajo Fin de Grado (TFG)/Trabajo Fin de Máster (TFM) cuando sea depositado para su evaluación).

D./D^a. Luis Antonio López Sinche

con nº de DNI 73220752E en aplicación de lo dispuesto en el art.

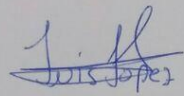
14 (Derechos de autor) del Acuerdo de 11 de septiembre de 2014, del Consejo de Gobierno, por el que se aprueba el Reglamento de los TFG y TFM de la Universidad de Zaragoza,

Declaro que el presente Trabajo de Fin de (Grado/Máster) Grado en Ingeniería Química, (Título del Trabajo)

ESTUDIO DE LA OXIDACIÓN DEL 1-BUTANOL CON DIFERENTES
CONCENTRACIONES DE OXÍGENO Y EN PRESENCIA DE NO

es de mi autoría y es original, no habiéndose utilizado fuente sin ser citada debidamente.

Zaragoza, 2 de febrero de 2018

Fdo: 

Agradecimientos

En primer lugar, a Eduardo Royo Moros que ha sido el director de mi trabajo y por temas administrativos no ha podido constar como tal, gracias ya que en esta experiencia he aprendido mucho y siempre me has ayudado con los problemas que se presentaban, siendo una persona esencial para que pudiese realizar este trabajo fin de grado.

A Rafa Bilbao quien me dio la oportunidad de acceder a este trabajo fin de grado y quien me ha ayudado siempre en todo lo que he necesitado, sin duda sin él tampoco habría podido realizar este trabajo y finalizar esta etapa.

A todas las personas del Grupo de Procesos Termoquímicos que he tenido la oportunidad de conocer.

Sin duda a mis padres Luis y Nancy mi apoyo incondicional durante toda mi vida, a Milena, Alejandro y el pequeño Camilo que son la inspiración de mi vida. A mi hermano, mis amigos y familia que siempre están allí cuando los necesito gracias por todo.

Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

Resumen

La reducción de la contaminación es hoy en día una de las prioridades en cualquier proceso de combustión. En este contexto, en este trabajo fin de grado se ha estudiado la oxidación de 1-butanol ya que es un alcohol en creciente demanda por sus amplias aplicaciones y por sus propiedades como combustible o como aditivo para combustibles.

El 1-butanol tiene propiedades parecidas a las del gasóleo y la gasolina, lo que lo hace muy interesante para su uso en motores de combustión interna. Los motores Diesel emiten materia particulada muy pequeña que es perjudicial para la salud de la población, por lo que minimizar estas emisiones es importante. Se ha observado en recientes experimentos que combustibles oxigenados emiten menos materia particulada en función de la cantidad de oxígeno presente en la mezcla de combustión, por esto el 1-butanol resulta interesante como posible sustituto de los combustibles habituales o como aditivo para minimizar los efectos contaminantes.

El estudio de la oxidación de 1-butanol se ha realizado tomando como variables de operación: la temperatura de reacción, la cantidad de oxígeno en la mezcla gaseosa y la ausencia o presencia de NO. Se ha encontrado que, en general, a medida que aumenta la cantidad de oxígeno en la mezcla de combustión la oxidación ocurre en intervalos de temperatura menores, por lo que para condiciones oxidantes se oxida completamente en un intervalo de 625 a 825 °C y para condiciones reductoras se oxida completamente en un intervalo de 700 a 875 °C.

Se ha observado en estudios recientes que la presencia de NO en la combustión de alcoholes promueve la oxidación en condiciones oxidantes (pobres en alcohol), sin embargo, puede inhibir la oxidación en condiciones reductoras (ricas en alcohol). En este trabajo se han encontrado resultados que corroboran lo encontrado en bibliografía, ya que en el caso de 1-butanol para condiciones oxidantes la combustión ocurre en un intervalo de temperaturas de 500-700 °C y en condiciones reductoras ocurre en un intervalo de 625-900 °C.

Con los resultados experimentales se ha validado un mecanismo cinético mediante simulación por ordenador, donde se ha encontrado que en general el mecanismo propuesto predice bien los resultados experimentales para la mayoría de los compuestos, excepto para el metano y el NO. Se han propuesto unos caminos de reacción para los experimentos en ausencia y presencia de NO encontrando que son muy parecidos para las dos condiciones.

INDICE

| | | |
|-------|--|----|
| 1. | INTRODUCCIÓN..... | 1 |
| 2. | OBJETIVOS..... | 2 |
| 3. | ANTECEDENTES..... | 3 |
| 3.1 | Butanol e isómeros..... | 3 |
| 3.2 | Mezclas con combustibles..... | 4 |
| 4. | MÉTODO EXPERIMENTAL..... | 6 |
| 4.1 | Instalación experimental..... | 6 |
| 4.1.1 | Sistema de reacción..... | 8 |
| 4.1.2 | Sistema de alimentación y acondicionamiento de gases..... | 8 |
| 4.1.3 | Sistema de análisis de gases..... | 9 |
| 4.2 | Experimentos..... | 9 |
| 4.2.1 | Estequiometría..... | 9 |
| 4.3 | Metodología experimental..... | 11 |
| 5. | RESULTADOS EXPERIMENTALES..... | 12 |
| 5.1 | Influencia de la temperatura en la oxidación de butanol en ausencia y en presencia de NO. 12 | |
| 5.1.1 | Influencia de la temperatura en la oxidación de butanol en ausencia de NO..... | 15 |
| 5.1.2 | Influencia de la temperatura en la oxidación de butanol en presencia de NO. .. | 16 |
| 6. | SIMULACIÓN EXPERIMENTAL Y CAMINOS DE REACCIÓN..... | 19 |
| 6.1 | Simulaciones de los experimentos en ausencia de NO..... | 19 |
| 6.2 | Simulaciones de los experimentos en presencia de NO. | 24 |
| 6.3 | Caminos de reacción..... | 28 |
| 7. | CONCLUSIONES..... | 32 |
| 8. | BIBLIOGRAFÍA..... | 34 |

1. INTRODUCCIÓN

En una sociedad que incrementa sus necesidades energéticas cada año es necesario buscar alternativas a los recursos energéticos más usados como son el carbón y petróleo [1]. Según Eurostat (Comisión Europea de Estadística) sobre un 33.1 % del consumo de energía se destina al transporte, donde mayoritariamente se usan derivados del petróleo como la gasolina o el gasóleo [2]. El uso abusivo de estos combustibles ha generado un problema de contaminación evidente, ya que generan emisiones de materia particulada (hollín) y variedad de gases que causan diversos efectos de contaminación en el medio ambiente y representan un riesgo para la salud de la población.

Los motores de combustión interna, además de CO₂ Y H₂O, generan otros productos de la combustión como: NO_x, CO, SO_x, Aldehídos, Aromáticos, Hidrocarburos (C_nH_m), Alcoholes y materia particulada (hollín) en mayor o menor medida [3,4]. Con la notable cantidad de productos de la combustión que afectan al medio ambiente es necesario minimizar estas emisiones ya que tienen efectos directos en la salud de la población y el medio ambiente.

Los medios de transporte con motores Diesel han adquirido importancia por su mayor eficiencia, lo que ha derivado en un problema de contaminación. Aunque emiten niveles bajos de Hidrocarburos y CO, tienen elevados niveles de emisión de materia particulada (PM) y NO_x que genera problemas graves ya que son potenciales fuentes de enfermedades [4,5,6,7].

El tamaño de materia particulada que emiten los motores Diesel es muy pequeño (<0.1 μm) por lo que se introduce en los pulmones y pueden pasar al riego sanguíneo. Recientes estudios muestran que la materia particulada de este tamaño puede ser causante del incremento de enfermedades pulmonares y cardiovasculares, así como de su mortandad [8,9].

Como primera vía para la reducción de la PM se ha observado que diferentes tipos de combustibles generan diferentes cantidades de materia particulada. Se ha demostrado en recientes investigaciones que combustibles oxigenados y aditivos producen menores emisiones de hollín que combustibles sin oxígeno, así diversos autores encontraron que las mezclas de hidrocarburos oxigenados con gasóleo normal generaban menos PM, y la cantidad de PM se reducía en función de la cantidad total de oxígeno que se añadía en la mezcla de combustión [10,11].

2. OBJETIVOS

En relación con lo anteriormente expuesto en la introducción, en este trabajo fin de grado se pretende estudiar la oxidación de un hidrocarburo oxigenado como es el 1-butanol (n-butanol) en ausencia y en presencia de NO. Se determinarán los productos de su oxidación en diversas condiciones de temperatura y estequiometría con respecto al oxígeno (condiciones estequiométricas, condiciones reductoras y condiciones oxidantes) en un reactor tubular continuo, con el objetivo de sacar conclusiones sobre el comportamiento del 1-butanol cuando se oxida.

Los objetivos específicos son:

- I. Estudiar la oxidación del 1-butanol para diferentes estequiometrías de oxígeno en un intervalo de temperaturas de 400 a 1100 °C y 1 atmósfera de presión.
- II. Estudiar la oxidación del 1-butanol en ausencia y presencia de NO.
- III. Validar un modelo de simulación con los resultados experimentales obtenidos.
- IV. Proponer unos caminos de reacción para la oxidación de 1-butanol en ausencia y presencia de NO.

Se usarán los resultados experimentales para realizar un estudio teórico con el que validar un mecanismo cinético usando CHEMKIN PRO [12] aplicando un modelo de reactor con flujo pistón. El mecanismo que se usará parte de la base del elaborado por Glarborg y cols. [13] para la oxidación de hidrocarburos de bajo peso molecular y su interacción con NO, al cual se le añade un set de reacción de oxidación de etanol y que se actualizó progresivamente para la oxidación de: acetileno [14], mezclas de etanol y acetileno [15], CO bajo diferentes condiciones de CO₂ y H₂O [16] y acetileno bajo el efecto de recirculación del flujo de gases [17]. Para ese mecanismo se introdujo también el set de reacción para la oxidación de 1-butanol propuesto por Cai y cols. [18]. Los datos termodinámicos que se usarán en la simulación fueron tomados de las mismas fuentes de origen que los mecanismos. El mecanismo cuenta con 179 especies y 982 reacciones que se presentan en el anexo IV.

Además de validar los modelos de oxidación, se van a proponer unos caminos de reacción de las oxidaciones que se obtendrán en la misma simulación en CHEMKIN PRO.

3. ANTECEDENTES

En este capítulo se presentan las propiedades del butanol, así como las propiedades de sus isómeros, señalando las ventajas que presenta el 1-butanol frente a los demás. Además, se presentan los principales métodos de producción.

Se expondrán también resultados de experimentos relacionados con la oxidación de 1-butanol de la bibliografía y de su comportamiento como aditivo en algunos combustibles.

3.1 Butanol e isómeros.

El butanol se puede clasificar como un biocombustible secundario de primera y segunda generación según sus procesos de fabricación.

El butanol es un hidrocarburo con un grupo OH que lo caracteriza como alcohol. En su estructura cuenta con 4 carbonos, y su fórmula molecular es C₄H₉OH, con un poder calorífico superior de 7337 kcal por litro de butanol que en comparación con la gasolina que tiene 7660 kcal por litro de gasolina, es un valor bastante competitivo [19].

Este compuesto presenta cuatro isómeros que son: n-butanol o 1-butanol cuya fórmula es CH₃-CH₂-CH₂-CH₂-OH, 2-butanol CH₃-CH₂-CH(OH)-CH₃, iso-butanol (CH₃)₂-CH₂-OH, y ter-butanol (CH₃)₃-C-OH. Como se observa en la tabla 3.1 estos isómeros presentan características muy similares en cuanto a contenido energético y en cuanto a comportamiento como mezclas con otros combustibles, pero la forma de obtenerlos es diferente para cada uno de ellos [19].

Tabla 3.1. Propiedades de los isómeros de butanol [20].

| Propiedades | 1-butanol | 2-butanol | ter-butanol | Iso-butanol |
|---|-----------|-----------|-------------|-------------|
| Densidad(kg/m ³) | 809,8 | 806,3 | 788,7 | 801,8 |
| RON (número de octano de investigación) | 96 | 101 | 105 | 113 |
| MON (número de octanaje del motor) | 78 | 32 | 89 | 94 |
| Temperatura de fusión (°C) | -89,5 | -114,7 | 25,7 | -108 |
| Temperatura de ebullición (°C) a P=1 atm | 117,7 | 99,5 | 82,4 | 108 |
| Entalpía de vaporización a T _{sat} (kJ/kg) | 582 | 551 | 527 | 566 |
| Temperature de autoignición (°C) | 343 | 406,1 | 477,8 | 415,6 |
| Límites inflamables (vol %) | 1,4 | 1,7 | 2,4 | 1,2 |
| Viscosidad (Mpa*s a 25 °C) | 2544 | 3096 | 3350 | 4312 |

El isómero de nuestro interés es el 1-butanol ya que, aunque entre los isómeros tengan propiedades parecidas, es el que tiene ya un proceso industrial de producción ya ampliamente implantado. La producción de 1-butanol mayoritariamente se realiza mediante el proceso Fermentación ABE (Acetone-butanol-ethanol fermentation), se trata de una conversión

anaerobia de carbohidratos por bacterias *Clostridium acetobutylicum* donde la aparición de más de 12 g/L de 1-butanol es tóxica e inhibe la producción de más 1-butanol [19]. Se ampliará la información sobre la producción de los isómeros de butanol en el Anexo I.

Etanol y 1-butanol son unos de los biocombustibles de más importancia, pero el 1-butanol presenta algunas ventajas por lo que en los últimos años se ha realizado un esfuerzo por investigar más a fondo sobre cómo optimizar los procesos de producción. El 1-butanol presenta una serie de ventajas respecto al etanol ya que posee mayor poder calorífico, es menos corrosivo, menor susceptibilidad a contaminar el agua, mejor rendimiento en motores y mayor cantidad de fuentes de materia prima [21].

Los usos mayoritarios del 1-butanol son como: disolvente (para pinturas, resinas, tintes, etc.), plastificante (mejora los procesos de materiales plásticos), producto intermedio químico (para ésteres butílicos, éteres butílicos, etc.), cosméticos (maquillaje de ojos, labiales, etc.), aditivo para combustible [22].

3.2 Mezclas con combustibles.

El 1-butanol, al que se denominará butanol de aquí en adelante, tiene propiedades similares a combustibles comunes y es un buen candidato para sustituir al etanol en las mezclas o incluso sustituir algunos combustibles completamente. Los combustibles derivados del petróleo tienen hidrocarburos con variedad de longitudes de cadena, por lo que se representan con intervalos de cadena. En la tabla 3.2 se muestran propiedades de combustibles comunes y butanol.

Tabla 3.2. Propiedades de alcoholes y derivados del petróleo [22].

| Propiedades | Gasolina | Gasóleo | Metanol | Etanol | Butanol |
|---|-------------------|-----------|--------------------|----------------------------------|----------------------------------|
| Fórmula molecular | C4–C12 | C12–C25 | CH ₃ OH | C ₂ H ₅ OH | C ₄ H ₉ OH |
| Número de cetano | 0–10 | 40–55 | 3 | 8 | 25 |
| Número de octano | 80–99 | 20–30 | 111 | 108 | 96 |
| Contenido en oxígeno (% en peso) | 0 | 0 | 50 | 34,8 | 21,6 |
| Densidad (g/mL) a 20 °C | 0,72–0,78 | 0,82–0,86 | 0,796 | 0,79 | 0,808 |
| Temperatura de autoignición (°C) | ~300 | ~210 | 470 | 434 | 343 |
| Temperatura de inflamación (°C) | 45–38 | 65–88 | 12 | 8 | 35 |
| PCI (poder calorífico inferior) (MJ/kg) | 42,7 | 42,5 | 19,9 | 26,8 | 33,1 |
| Temperatura de ebullición (°C) | 25–215 | 180–370 | 64,5 | 78,4 | 117,7 |
| Calor latente (kJ/kg) a 25 °C | 380–500 | 270 | 1109 | 904 | 582 |
| Límites de inflamabilidad (%vol.) | 0,6–8 | 1,5–7,6 | 6,0–36,5 | 4,3–19 | 1,4–11,2 |
| Presión de saturación (kPa) a 38°C | 31,01 | 1,86 | 31,69 | 13,8 | 2,27 |
| Viscosidad (mm ² /s) a 40°C | 0,4–0,8 (20°C) | 1,9–4,1 | 0,59 | 1,08 | 2,63 |

Como se observa en la tabla 3.2 muchas de las propiedades del butanol son similares a las de la gasolina o el gasóleo, lo que facilita su mezcla y su posterior incorporación en los motores de combustión interna. Por otro lado, presenta una considerable cantidad de oxígeno con lo que su combustión es más “limpia” ya que introduce un exceso de oxígeno en la mezcla aire-combustible que favorece que se oxiden en mayor medida los hidrocarburos provocando menos emisiones de contaminantes [20].

En trabajos anteriores [23,24] se ha observado que la presencia de NO puede influir en la conversión de algunos alcoholes, Alzueta y cols. estudiaron la oxidación de metanol y etanol en presencia y ausencia de NO, en estos estudios se observa que el NO inhibe la oxidación de los alcoholes para condiciones reductoras y promueve la oxidación para condiciones oxidantes.

4. MÉTODO EXPERIMENTAL

En este capítulo se va a realizar la descripción de la instalación experimental utilizada, de las condiciones en que se realizan los experimentos y la metodología utilizada.

4.1 Instalación experimental.

La instalación experimental utilizada pertenece al Grupo de Procesos Termoquímicos (GTP) adscritas al departamento de Ingeniería Química y Tecnologías del Medio Ambiente (IQTMA) de la Universidad de Zaragoza al instituto de investigación en Ingeniería de Aragón (I3A).

En esta instalación experimental se trabaja a presión de 1 atm y en un intervalo de temperaturas de 400 °C a 1100 °C. Con esta instalación se estudia la oxidación del butanol en ausencia y en presencia de NO.

En la figura 4.1 se presentan las partes principales de la instalación:

- Sistema de reacción (6,7)
- Sistema de alimentación y acondicionamiento de gases (1,2,3,4,5,8)
- Sistema de análisis de gases (9,10,11)

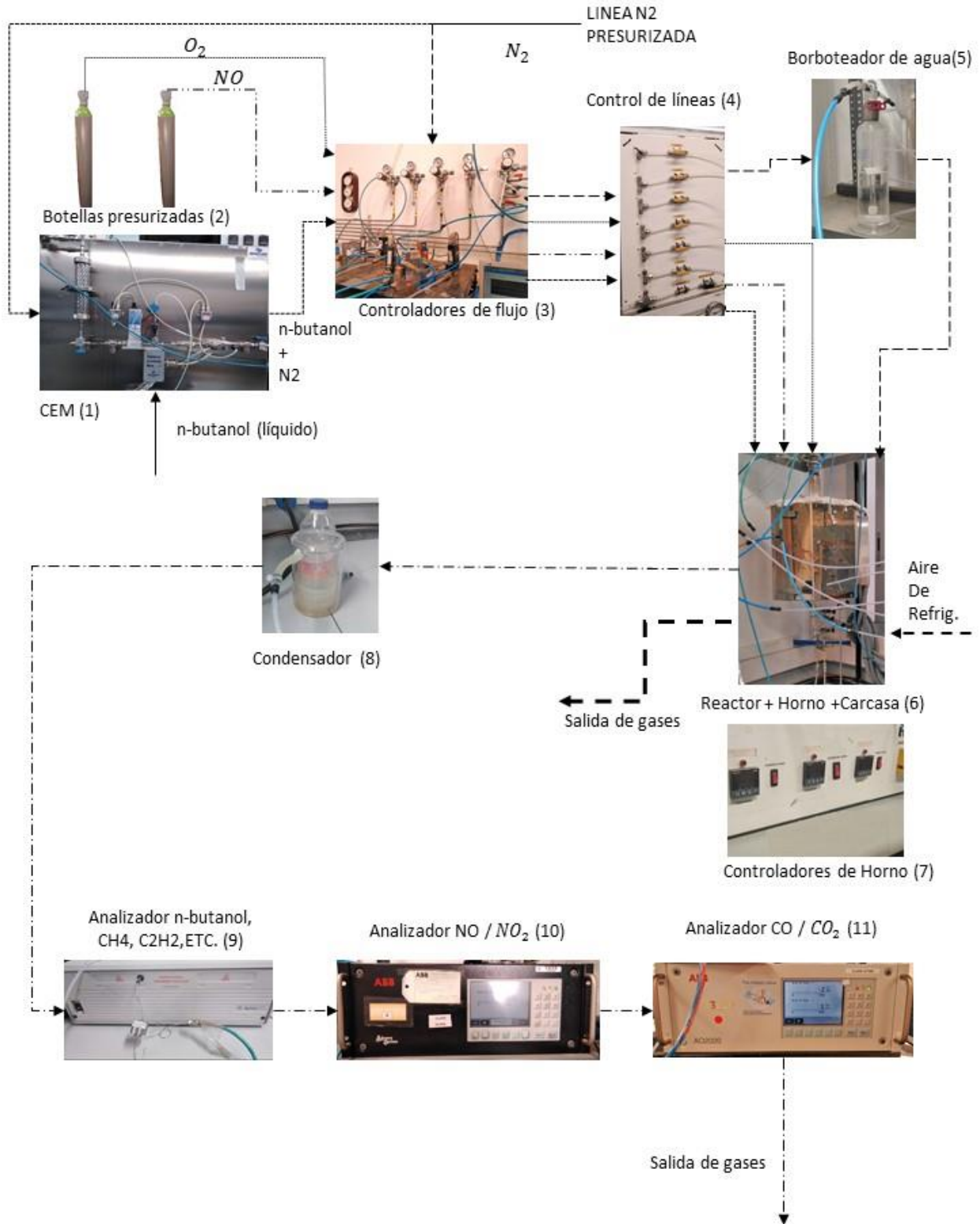


Figura 4.1. Esquema de la instalación experimental para la oxidación de butanol en ausencia y en presencia de NO.

4.1.1 Sistema de reacción.

El sistema de reacción es la parte de la instalación experimental en la que se va a producir la oxidación del butanol. Se introduce una mezcla de oxígeno- N_2 -butanol-agua u oxígeno- N_2 -butanol-agua-óxido de nitrógeno (NO), ambas mezclas en fase gas.

Los elementos principales de esta parte de la instalación son: el reactor y el horno.

- El reactor está conformado por un tubo de cuarzo, la zona de reacción es de 200 mm de longitud y 8,7 mm de diámetro. Está localizado dentro del horno el cual calienta el reactor hasta obtener la temperatura deseada. El reactor está rodeado de una manta de fibra de vidrio para conservar mejor la temperatura y mantener el reactor con la temperatura homogénea en la zona de reacción. Por el reactor se hace pasar un caudal de $1000 \frac{ml (STP)}{min}$ de mezcla. El tiempo de residencia en la zona de reacción depende de la temperatura, de la geometría y del caudal de gas. La ecuación que representa el tiempo de residencia es la 4.1. En el Anexo II se muestra como se calcula esta ecuación.

$$t_r(s) = 195/T(K) \text{ [Ecuación 4.1]}$$

- El horno consta de una carcasa metálica que recubre el reactor. Este horno cuenta con tres zonas de calentamiento controladas por termopares. Estas zonas están debidamente calibradas para obtener una temperatura lo más homogénea posible a lo largo de la zona de reacción. Este horno permite trabajar en un intervalo de temperaturas de [100-1100] °C.

4.1.2 Sistema de alimentación y acondicionamiento de gases.

Los elementos de esta parte de la instalación cumplen la función de: proporcionar y transportar los reactivos a la zona de reacción, acondicionar los reactivos para que lleguen a la zona de reacción en el estado adecuado para que los sistemas trabajen en óptimas condiciones y controlar que se trabaje en un intervalo de caudales constante.

Los elementos principales son: botellas presurizadas, controladores de flujo, medidores de caudal, evaporadores (Controlled Evaporator Mixer) y condensadores (hielo).

4.1.3 Sistema de análisis de gases.

El sistema de análisis de gases cuenta con dos medidores en continuo, uno ABB que utiliza un método de espectrometría UV para NO/NO₂ (10) y otro ABB AO2020 con método por infrarrojos para CO/CO₂ (11). Además, cuenta con un micro-cromatógrafo de gases A3000 de Agilent (9), para el butanol y el resto de las especies de interés como: CO, CO₂, H₂, CH₄, C₂H₄, C₂H₆, C₄H₈, CH₃CHO, etc. Es necesario introducir un condensador antes de que los gases entren a los analizadores para que en la corriente no haya vapor de agua que puede dañar los equipos o falsificar medidas.

4.2 Experimentos.

En este punto se va a detallar las características de los experimentos realizados, así como las principales variables de operación.

El objetivo de este trabajo es estudiar la oxidación del butanol con diferentes concentraciones de oxígeno (condiciones reductoras, estequiométricas y oxidantes). Además, cada una de estas condiciones se estudiarán en ausencia y en presencia de NO. Las variables por modificar en los experimentos serán entonces, la temperatura, la ausencia o presencia de NO y la estequiometría.

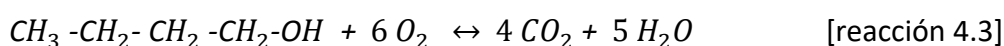
La presión de todos los experimentos es 1 atm ya que se realizan a presión atmosférica, por lo que la presión no será una variable para este trabajo. Los experimentos se han realizado en un intervalo de temperaturas de 400 a 1100 °C.

4.2.1 Estequiometría.

La influencia que tiene la cantidad de oxígeno en la oxidación del butanol es otro aspecto clave en este trabajo. Se utiliza la relación Λ , definida como:

$$\Lambda = \frac{O_{2exp.}}{O_{2esteq.}} \quad [\text{Ecuación 4.2}]$$

Para realizar este cálculo se parte de la reacción de oxidación completa del butanol:



Para definir las condiciones en función de la cantidad de oxígeno, se definen condiciones estequiométricas cuando se oxida con el oxígeno necesario para la combustión completa del butanol, lo cual corresponderá a un $\lambda = 1$, condiciones reductoras para cuando se añade una cantidad de oxígeno insuficiente para que se de combustión completa correspondiendo a $\lambda = 0,7$ y condiciones oxidantes cuando la cantidad de oxígeno que se añade en la mezcla de reacción es aproximadamente superior a 10 veces la cantidad estequiométrica necesaria, correspondiendo un $\lambda = 10$.

A continuación, en las tablas 4.1 y 4.2 se muestran las condiciones de concentración en las que se llevan a cabo los experimentos. Se pretende trabajar con 500 ppmv de Butanol como concentración óptima y ajustar el resto de los reactivos para obtener un caudal de $1000 \frac{ml (STP)}{min}$ según las condiciones de oxidación que se quieran estudiar.

Tabla 4.1. Condiciones iniciales de los experimentos de oxidación de butanol en ausencia NO.

| EXPERIMENTOS EN AUSENCIA DE NO (P = 1 bar) | | | |
|--|-----------|-----------|-----------|
| N.º EXPERIMENTO | A 1 | A 2 | A 3 |
| λ teórico | 0,7 | 1,00 | 10,00 |
| λ real | 0,79 | 0,98 | 8,85 |
| O2 (ppm) | 2095,52 | 3002,61 | 29912,06 |
| butanol (ppm) | 441,00 | 510,00 | 563,00 |
| NO (ppm) | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| H2O(ppm) | 6000 | 6000 | 6000 |
| N2 (ppm) | 991463,48 | 990487,39 | 963524,94 |

Tabla 4.2. Condiciones iniciales de los experimentos de oxidación de butanol en presencia NO.

| EXPERIMENTOS EN PRESENCIA DE NO (P = 1 bar) | | | |
|---|-----------|-----------|-----------|
| N.º EXPERIMENTO | B 1 | B 2 | B 3 |
| λ teórico | 0,7 | 1,00 | 10,00 |
| λ real | 0,74 | 1,05 | 11,45 |
| O ₂ (ppm) | 2097,44 | 2997,24 | 31421,95 |
| butanol (ppm) | 473,00 | 475,00 | 457,53 |
| NO (ppm) | 1700,00 | 1500,00 | 1750,00 |
| H ₂ O (ppm) | 6000 | 6000 | 6000 |
| N ₂ (ppm) | 989729,56 | 989027,76 | 960370,52 |

4.3 Metodología experimental.

El butanol se introduce líquido de una botella al sistema CEM (Controlled Evaporator Mixer). Este sistema calienta el butanol hasta unos 150 °C y lo vaporiza, se introducen aproximadamente 500 ppmv de butanol y tras ser vaporizado se arrastra con una corriente de N₂ con un caudal de $150 \frac{ml(STP)}{min}$ hasta la entrada a la zona de reacción donde se mezcla con oxígeno y N₂ (saturado de agua) para llegar a un caudal de $1000 \frac{ml(STP)}{min}$. El oxígeno se alimenta de una botella presurizada al 1.8% de O₂, se calcula el caudal de O₂ en función de la condición (reductora, estequiométrica, oxidante) que se desee experimentar. Se introduce también agua, haciendo pasar la corriente de N₂ por un borboteador que satura la corriente con agua, se introducen aproximadamente 6000 ppmv de agua.

A partir de 400 °C se aumenta la temperatura progresivamente en intervalos de 25 °C o 50 °C hasta que en el analizador se detecta que hay conversión de butanol. Cuando se detecta conversión se toman datos de los productos de la oxidación variando la temperatura dentro del intervalo de trabajo. Para la recogida de datos se realizan 5 pinchazos en el analizador discontinuo y se anotan los valores de los analizadores en continuo para cada temperatura.

Para que los productos no se conviertan tras salir del reactor, en la salida se introduce por la parte externa del reactor una corriente de aire atmosférico como refrigerante.

5. RESULTADOS EXPERIMENTALES

En este punto se presentan los resultados más representativos de los experimentos realizados. En el Anexo III se muestran los resultados experimentales restantes.

Se realizarán un análisis de la influencia de las principales variables de operación, en nuestro caso la temperatura, la estequiometría y la ausencia o presencia de NO.

5.1 Influencia de la temperatura en la oxidación de butanol en ausencia y en presencia de NO.

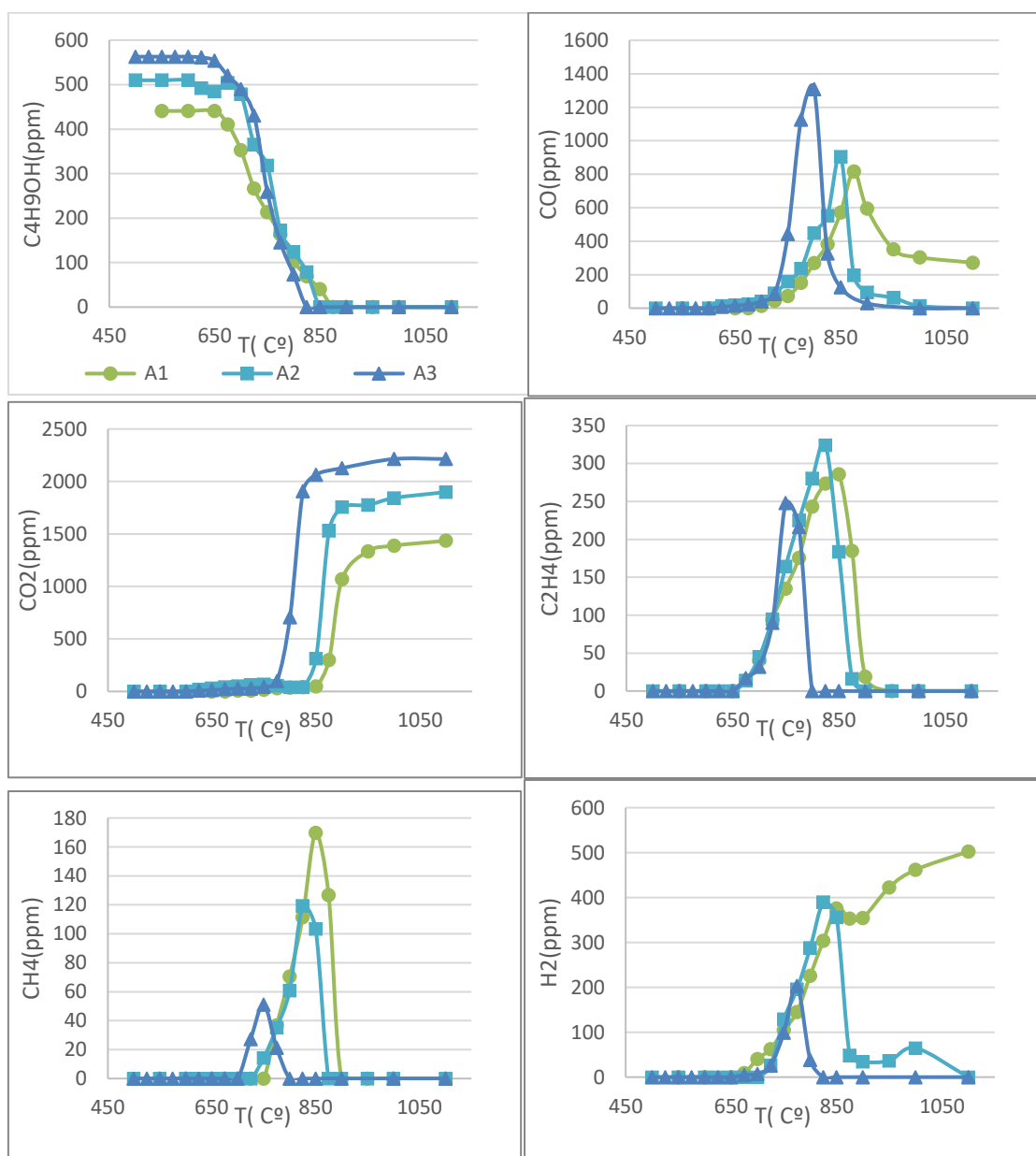


Figura 5.1. Oxidación de butanol y algunos productos en ausencia de NO para diferentes λ frente a la temperatura. Experimentos A1, A2, A3.

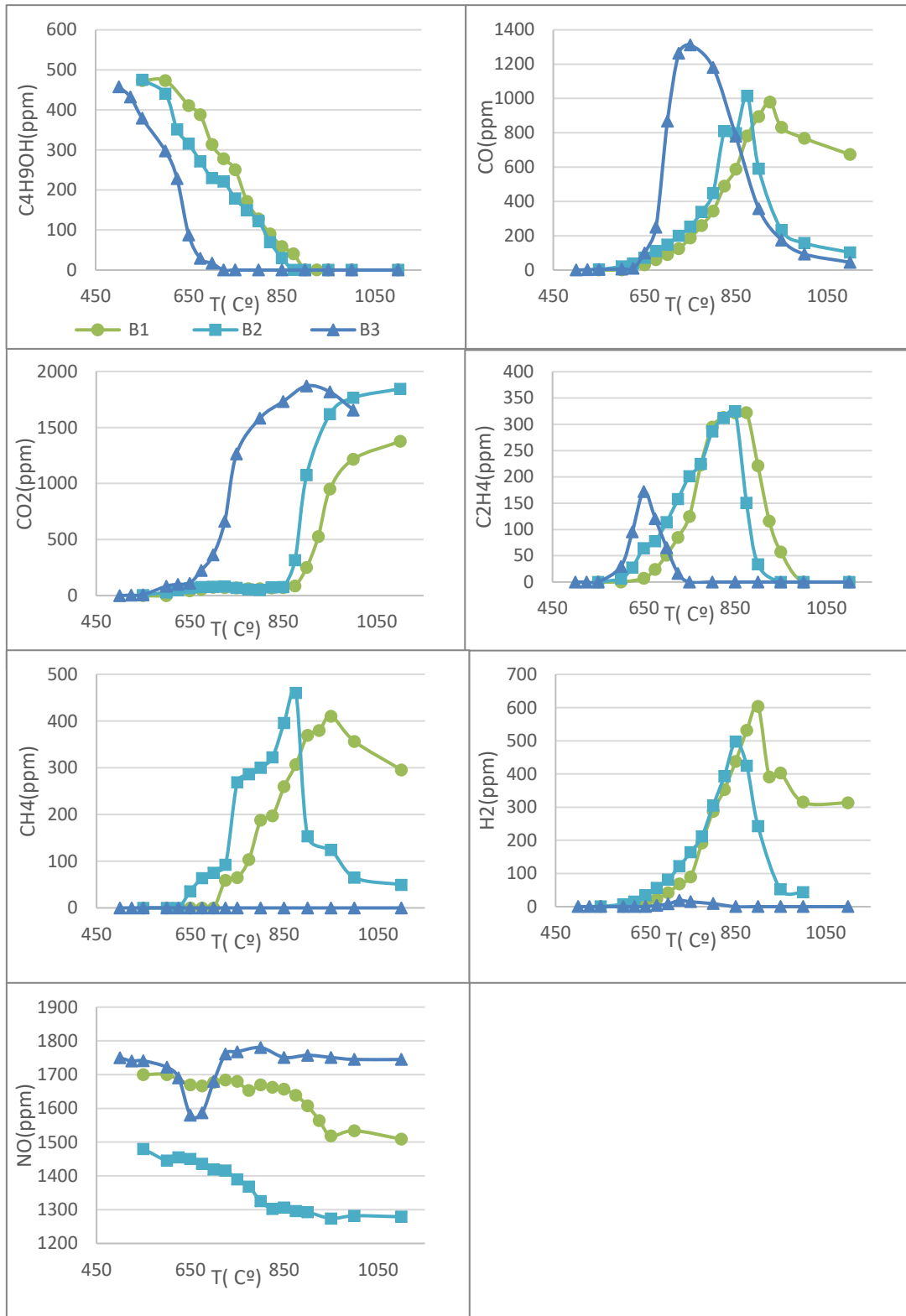


Figura 5.2. Oxidación de butanol y algunos productos en presencia de NO para diferentes λ frente a la temperatura. Experimentos B1, B2, B3.

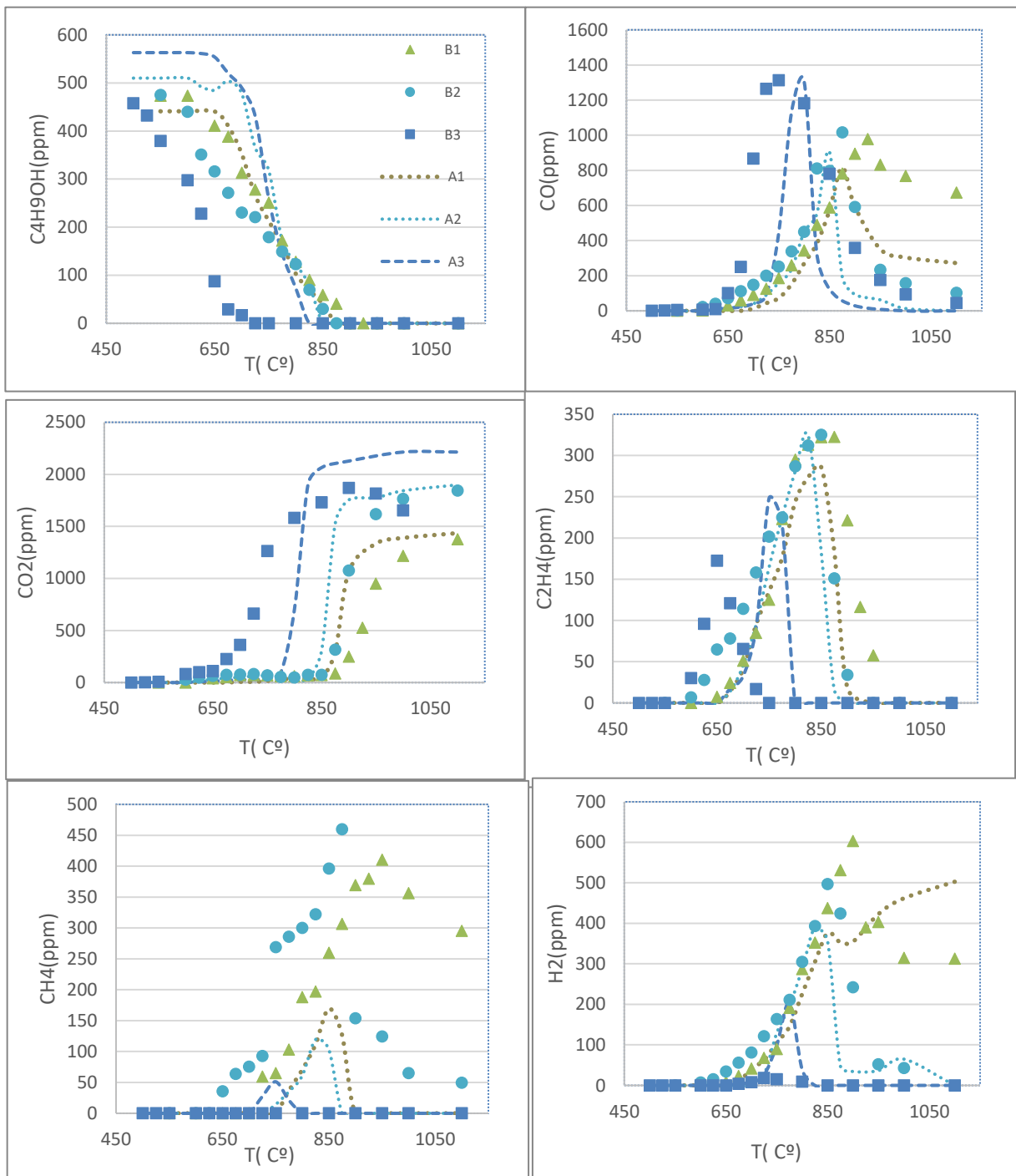


Figura 5.3. Oxidación de butanol y algunos productos en presencia de NO y en ausencia de NO para diferentes λ frente a la temperatura. Experimentos A1, A2, A3 vs B1, B2, B3.

5.1.1 Influencia de la temperatura en la oxidación de butanol en ausencia de NO.

Los experimentos se han realizado en un intervalo de 400-1100 °C donde la conversión del butanol transcurre completamente para todas las condiciones estudiadas. Se va a describir la evolución de la oxidación del butanol y la evolución de la aparición de los productos de reacción tomando como variable de operación la temperatura de reacción, los resultados se muestran en la figura 5.1.

La oxidación del butanol comienza a una temperatura menor en condiciones oxidantes y estequiométricas ($\lambda = 8,85$, $\lambda=0,98$) a unos 625 °C aproximadamente, que en condiciones reductoras ($\lambda=0,79$), donde la oxidación comienza sobre los 700 °C. Una vez ha comenzado la oxidación esta se produce de manera casi lineal con la temperatura para los tres casos. Para condiciones oxidantes se convierte todo el butanol a los 825 °C, para condiciones estequiométricas a los 850 °C y para condiciones reductoras a los 875 °C. Se podría afirmar que en estas condiciones el butanol se convierte completamente en un intervalo de temperatura de 600-875°C.

Los principales productos de reacción son: CO_2 , CO , H_2 , C_2H_4 , CH_4 , C_2H_6 , C_4H_8 (1-buteno) y CH_3CHO (acetaldehído). En la figura 5.1, se muestran los resultados obtenidos de CO , CO_2 , C_2H_4 , CH_4 y H_2 , en el Anexo III se muestran los resultados de etano, 1-butano y acetaldehído.

En condiciones oxidantes el CO tiene su máximo de concentración aproximadamente a 800 °C, en condiciones estequiométricas sobre los 850 °C y en reductoras sobre los 875 °C. En condiciones reductoras el CO no se oxida completamente a CO_2 debido al déficit de oxígeno.

El CO_2 aparece sobre los 800 °C y presenta mayores concentraciones en condiciones oxidantes ya que los hidrocarburos se oxidan casi completamente al disponer de oxígeno suficiente. En condiciones estequiométricas aparece sobre los 825 °C y la concentración es menor. En condiciones reductoras aparece sobre los 850 °C y por el déficit de oxígeno la concentración es la menor de todas.

El eteno (C_2H_4) comienza a aparecer sobre los 675 °C para todas las condiciones de oxidación, obtiene un máximo para todas las condiciones a 750 °C ($\lambda=0,79$), 825 °C ($\lambda=0,98$) y 850 °C ($\lambda = 8,85$) y se convierte totalmente a 950 °C ($\lambda=0,79$), 900 °C ($\lambda=0,98$) y 800 °C ($\lambda = 8,85$).

El metano (CH_4) empieza a aparecer en condiciones oxidantes sobre los 700 °C, 725 °C en condiciones estequiométricas y 750 °C en reductoras. Aparecen máximos a 750 °C ($\lambda = 8,85$), 825 °C ($\lambda=0,98$), 850 °C ($\lambda=0,79$) y se consume completamente a 900 °C ($\lambda=0,79$), 850 °C ($\lambda=0,98$) y 825 °C ($\lambda = 8,85$).

En condiciones reductoras se genera más cantidad de H_2 , ya que no se consume en la reacción porque no hay suficiente oxígeno para generar agua y a la vez oxidar los hidrocarburos. En condiciones reductoras no ocurre combustión completa, por lo

que el H_2 que es producto de las combustiones parciales de los hidrocarburos presentes en la reacción es más notable y no se convierte totalmente.

El H_2 se comienza a generar sobre los 725 °C para todas las condiciones estequiométricas y alcanza máximos a 775 °C ($\lambda = 8,85$) y a 825°C ($\lambda=0,98$). En condiciones reductoras continúa aumentando hasta el final de nuestro intervalo de estudio por lo anteriormente mencionado. Se consume totalmente a 825 °C ($\lambda = 8,85$) y a 900 °C ($\lambda=0,98$).

5.1.2 Influencia de la temperatura en la oxidación de butanol en presencia de NO.

En este punto se va a analizar cómo influye la presencia de NO en la oxidación de butanol y su evolución frente a la temperatura.

Los resultados obtenidos en presencia de NO se presentan en la figura 5.2, donde se presenta la evolución del butanol y los productos de reacción más representativos. En la figura 5.3 se comparan los resultados obtenidos en ausencia y en presencia de NO.

Se puede observar que la conversión de butanol comienza antes en los experimentos en presencia de NO para todas las condiciones de oxidación. Para condiciones oxidantes comienza sobre los 500 °C ($\lambda=11,45$), para condiciones estequiométricas sobre los 600 °C ($\lambda=1,05$), para condiciones reductoras sobre los 625 °C ($\lambda=0,74$). La conversión sucede de una manera lineal igual que en los experimentos en ausencia de NO, pero de una manera más suave, es decir las pendientes son menos pronunciadas.

El butanol se convierte totalmente para todas las condiciones, a 725 °C ($\lambda=11,45$), 875 °C ($\lambda=1,05$) y a 900 °C ($\lambda=0,74$). Como se puede observar la conversión ocurre en un intervalo más amplio que en ausencia de NO, entre 500-900 °C aproximadamente.

El CO comienza a aparecer en condiciones oxidantes y estequiométricas sobre los 625 °C y sobre los 650 °C para condiciones reductoras. Presenta unos máximos en 750 °C ($\lambda=11,45$), 875 °C ($\lambda=1,05$), 925 °C ($\lambda=0,74$) y no se llega a consumir en el intervalo de temperatura estudiado, si bien en condiciones oxidantes y estequiométricas se convierte más de un 90% del CO. En condiciones reductoras no se convierte más de un 25 % de lo producido en la reacción.

El CO_2 empieza a aparecer en condiciones oxidantes a unos 600 °C y presenta una subida pronunciada a medida que se consume el CO. En condiciones estequiométricas el CO_2 empieza a aparecer a los 600 °C y sufre una subida pronunciada después que el CO llega

al máximo. En condiciones reductoras aparece sobre los 650 °C y sube suavemente hasta los 1100 °C donde tiene su máximo, se produce una cantidad baja de CO_2 en este caso casi un 30 % menos de la que debería producirse porque no hay combustión completa. En este caso las aportaciones de C_2H_4 , CH_4 , C_2H_6 , C_4H_8 y CH_3CHO se hacen muy importantes para generar de CO_2 .

El eteno (C_2H_4) empieza a generarse en condiciones oxidantes a una temperatura de 600 °C, alcanza un máximo a los 650 °C y se convierte completamente a los 750 °C. En condiciones estequiométricas empieza a generarse sobre los 600 °C, obtiene su máximo a los 850 °C y se consume completamente a los 950 °C. En condiciones reductoras empieza a generarse sobre los 650 °C, obtiene su máximo sobre los 875 °C y se consume completamente a los 1000 °C.

En condiciones estequiométricas empieza a aparecer CH_4 a los 650 °C, se genera una cantidad importante y alcanza su máximo a los 875 °C, si bien no llega a consumirse completamente en el intervalo de temperatura de estudio. En condiciones reductoras empieza a generarse a los 725 °C y alcanza su máximo sobre los 950 °C donde empieza a convertirse, pero su conversión es muy pequeña ya que en estas condiciones no hay suficiente oxígeno para oxidar todos los hidrocarburos. En condiciones oxidantes no se genera CH_4 . Esto se debe a que hay disponible oxígeno suficiente para que la combustión completa se produzca por caminos más fáciles como por ejemplo para generar CO o CO_2 .

El H_2 empieza a aparecer en condiciones estequiométricas a los 600 °C, a los 850 °C presenta un máximo y se consume casi totalmente a los 1100 °C. En condiciones reductoras empieza a aparecer a los 650 °C, presenta un máximo a los 900 °C y se consume muy poco cuando llega a los 1100 °C. En condiciones oxidantes se genera muy poca cantidad de H_2 empieza a generarse a los 675 °C y a los 850 °C ya se ha consumido totalmente.

Los comportamientos de etano (C_2H_6), 1-buteno (C_4H_8) y acetaldehído (CH_3CHO) se describirán en el Anexo III.

En condiciones estequiométricas y reductoras el NO se comporta de manera muy parecida, ya que sufre una suave conversión desde los 500 °C hasta los 1100 °C.

En condiciones oxidantes el NO se comporta de una manera diferente, casi no se convierte hasta los 625 °C donde sufre una caída de concentración hasta los 700 °C donde recupera su concentración inicial y no se convierte casi nada hasta los 1100 °C.

En la figura 5.3 se puede observar que el NO provoca algunos comportamientos diferentes en la oxidación de butanol dependiendo en las condiciones de concentración en las que se encuentre, pero en general se puede observar que la presencia de NO promueve las reacciones donde hay más oxígeno. En los estudios

sobre oxidación de etanol y su interacción con NO de Alzueta y cols. [23] se observa que el NO inhibe la oxidación de etanol para condiciones reductoras (condiciones ricas en etanol) y por lo contrario para condiciones oxidantes (condiciones pobres en etanol) promovía la oxidación haciendo que esta ocurriera a menores temperaturas. En nuestro caso se puede concluir lo mismo ya que en condiciones oxidantes el intervalo de temperaturas en el que se oxida el butanol es de 625-825 °C para la oxidación en ausencia de NO y de 500-700 °C para experimentos en presencia de NO. Se observa claramente que la oxidación queda favorecida para condiciones oxidantes cuando se trabaja con NO.

6. SIMULACIÓN Y CAMINOS DE REACCIÓN

En este apartado se presentan los resultados más representativos de las simulaciones realizadas sobre la oxidación de butanol en ausencia y presencia de NO en CHEMKIN PRO. El resto de resultados se presentarán en Anexo IV. Además, se presentan los caminos de reacción obtenidos para la simulación de la oxidación de butanol en ausencia de NO.

Como mencionó en los objetivos, el mecanismo que se usa parte de la base del elaborado por Glarborg y cols. [13] para la oxidación de hidrocarburos de bajo peso molecular y su interacción con NO, al cual se le añade un set de reacción de oxidación de etanol y que se actualizó progresivamente para la oxidación de: acetileno [14], mezclas de etanol y acetileno [15], CO bajo diferentes condiciones de CO₂ y H₂O [16] y acetileno bajo el efecto de recirculación del flujo de gases [17]. Para ese mecanismo se introdujo también el set de reacción para la oxidación de 1-butanol propuesto por Cai y cols. [18]. Los datos termodinámicos que se usarán en la simulación fueron tomados de las mismas fuentes de origen que los mecanismos. El mecanismo cuenta con 179 especies y 982 reacciones que se presentan adjuntos dentro del mecanismo cinético usado en el anexo IV.

CHEMKIN PRO es un programa de simulación, el programa trabaja con 2 ficheros de datos donde se introduce la información necesaria para que pueda simular reacciones químicas.

Los datos de concentraciones usados en la simulación son los mismos que los datos experimentales de las tablas 4.1 y 4.2.

6.1 Simulaciones de los resultados obtenidos en los experimentos en ausencia de NO.

Las figuras 6.1, 6.2 y 6.3 presentan los resultados experimentales frente a los resultados de las simulaciones para los experimentos en ausencia de NO.

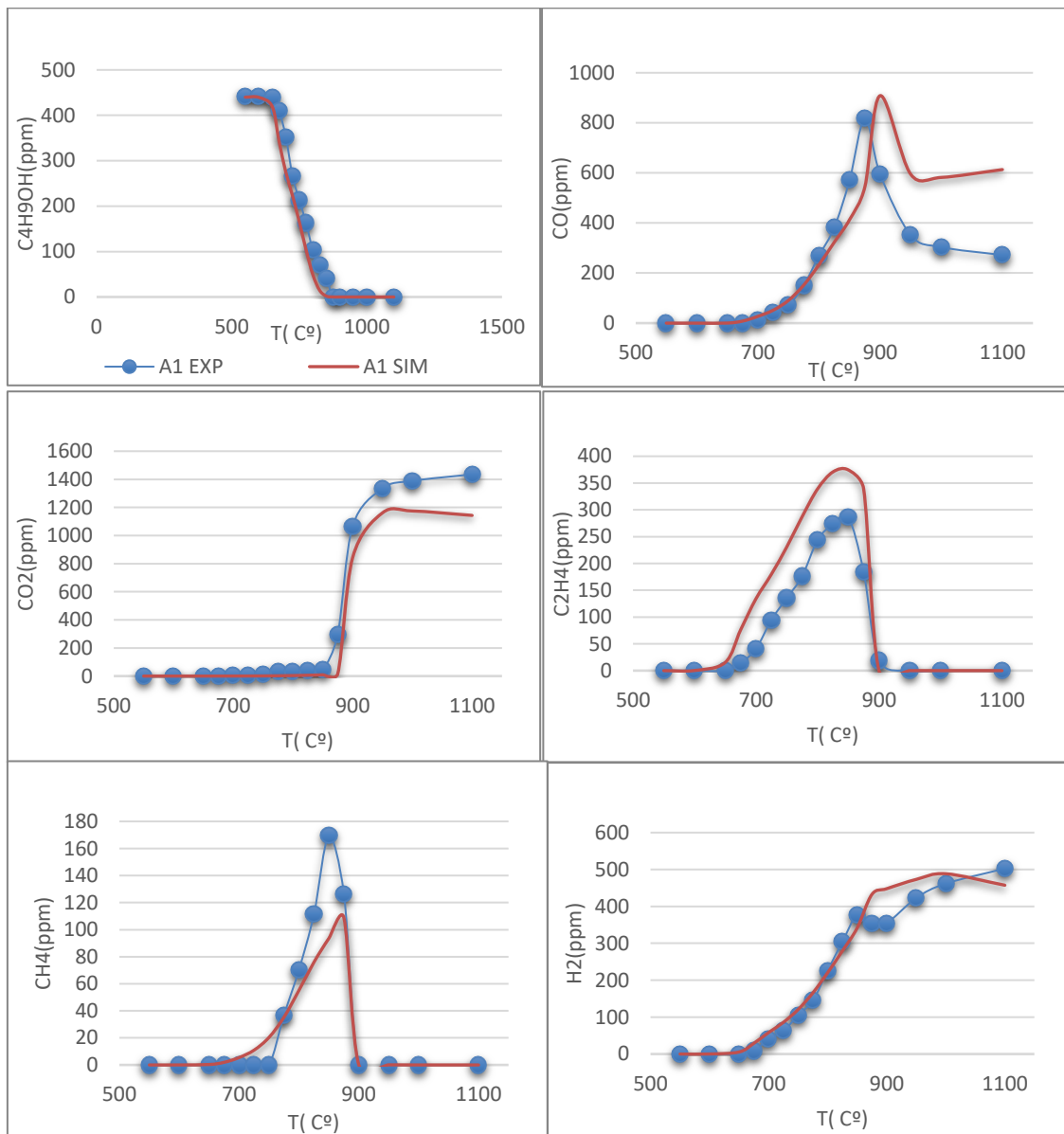


Figura 6.1. Simulación de la oxidación de butanol en ausencia de NO vs resultados experimentales de la oxidación de butanol en ausencia de NO para λ 0,79. A1 EXP vs A1 SIM.

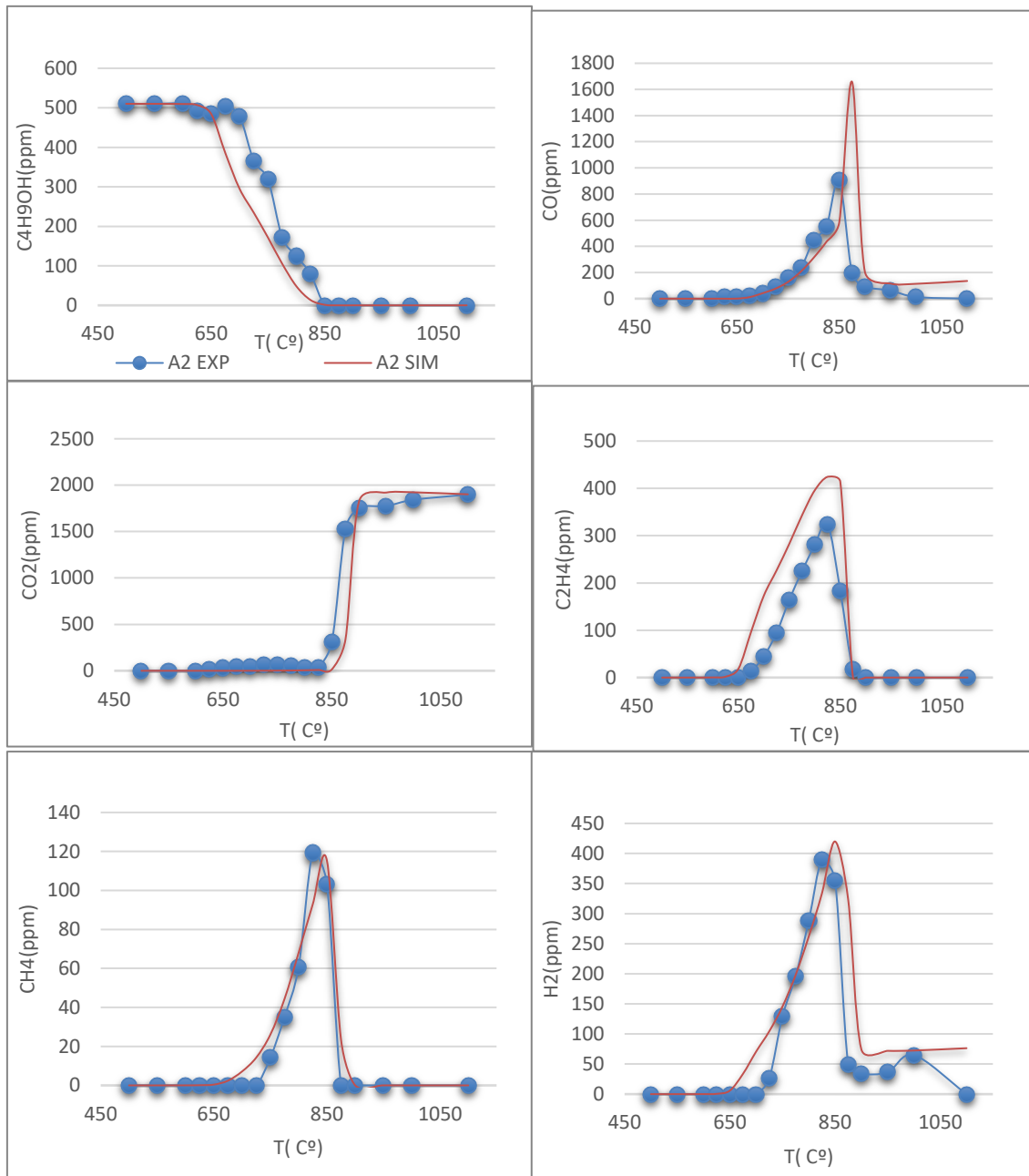


Figura 6.2. Simulación de la oxidación de butanol en ausencia de NO vs resultados experimentales de la oxidación de butanol en ausencia de NO para λ 0,98. A2 EXP vs A2 SIM.

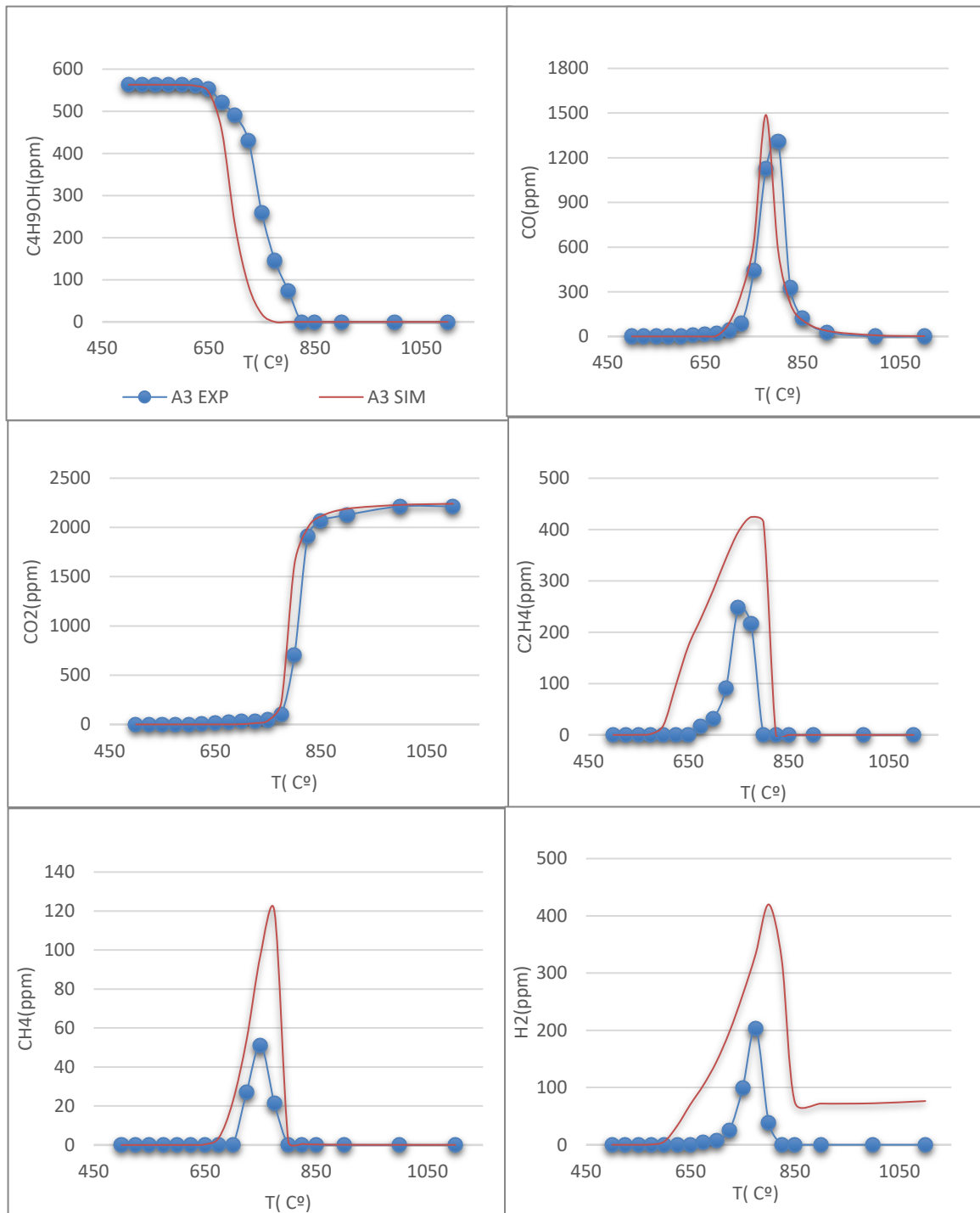


Figura 6.3. Simulación de la oxidación de butanol en ausencia de NO vs resultados experimentales de la oxidación de butanol en ausencia de NO para λ 8,85. A3 EXP vs A3 SIM.

Para condiciones reductoras (λ 0,79) se puede observar (figura 6.1) que la simulación se ajusta muy bien para la conversión de butanol para todo el intervalo de temperaturas de estudio. Para el CO la simulación se ajusta bastante bien, pero para temperaturas altas a partir de los 850 °C aproximadamente hay algunas diferencias que podrían responder a que la simulación añade alguna idealidad que no se produce en la realidad.

En la simulación del CO_2 ocurre algo parecido, ya que para temperaturas bajas predice bien lo que ocurre, pero a temperaturas altas se aleja un poco de los resultados experimentales.

En la simulación del eteno (C_2H_4) el modelo predice bien la temperatura a la que aparece y la temperatura a la que se convierte totalmente, pero sobreestima un poco la cantidad que se produce, aunque la forma de la curva que representa los datos experimentales es muy similar a de la simulación.

En la simulación del CH_4 los valores de donde empieza a generarse y donde se convierte completamente se ajustan bien. Sin embargo, subestima la cantidad que se genera por lo que la curva de la simulación queda por debajo que la experimental.

La simulación del H_2 presenta unos valores que se ajustan bastante bien a los experimentales en todo el rango de temperaturas de estudio.

Para condiciones estequiométricas ($\lambda = 0,98$) las simulaciones (figura 6.2) se ajustan bastante bien para el butanol, CH_4 , CO_2 y H_2 . Se puede observar que las curvas de la simulación son muy parecidas a las experimentales.

Para el CO la simulación predice bien para temperaturas bajas, pero a partir de los 825 °C se aleja de los resultados experimentales.

La simulación del eteno (C_2H_4) predice bastante bien cuando empieza a aparecer y cuando se consume totalmente, pero sobreestima la cantidad que se produce.

Para condiciones oxidantes ($\lambda=8,85$) la simulación (figura 6.3) se ajusta muy bien a los resultados experimentales del CO y CO_2 , pero en la simulación del butanol predice una conversión mayor a la de los resultados experimentales que ocurren de manera lineal con una pendiente más suave.

Las simulaciones del eteno (C_2H_4) y del metano (CH_4) predice bien cuando empiezan a aparecer y cuando se consumen totalmente, pero sobreestima las cantidades que se generan de ambos compuestos.

En la simulación del H_2 la forma de la curva de la simulación se asemeja bastante a la curva experimental, pero sobreestima la cantidad que se genera. Para temperaturas altas no predicen bien lo que ocurre ya que se desvía bastante de la curva experimental en este tramo.

En general se puede concluir que la simulación predice de forma razonable los resultados experimentales obtenidos.

6.2 Simulaciones de los resultados obtenidos en los experimentos en presencia de NO.

En las figuras 6.4, 6.5 y 6.6 se presentan los resultados experimentales frente a los resultados de las simulaciones para los experimentos en presencia de NO.

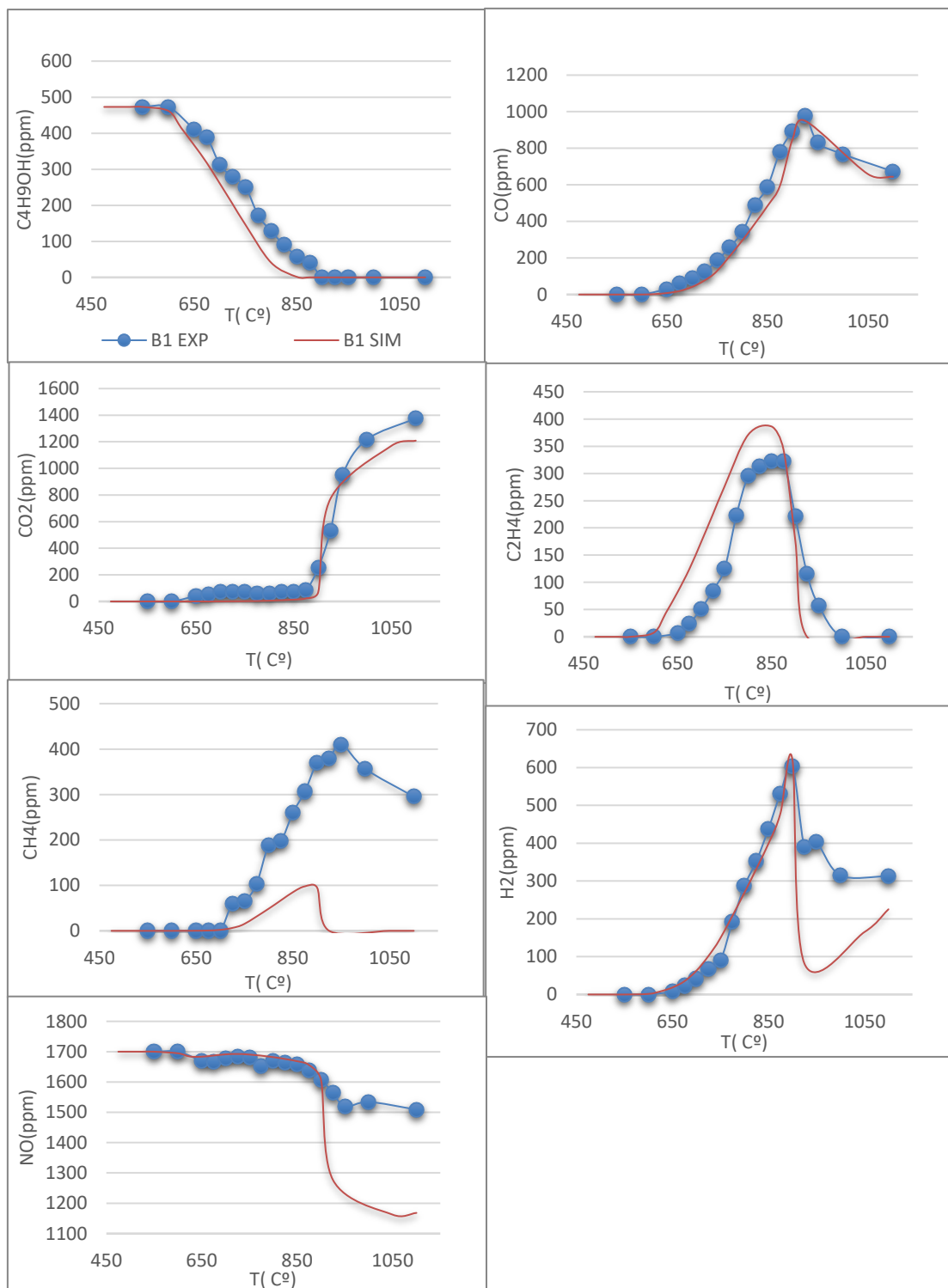


Figura 6.4. Simulación de la oxidación de butanol en presencia de NO vs resultados experimentales de la oxidación de butanol en presencia de NO para λ 0.74. B1 EXP vs B1 SIM.

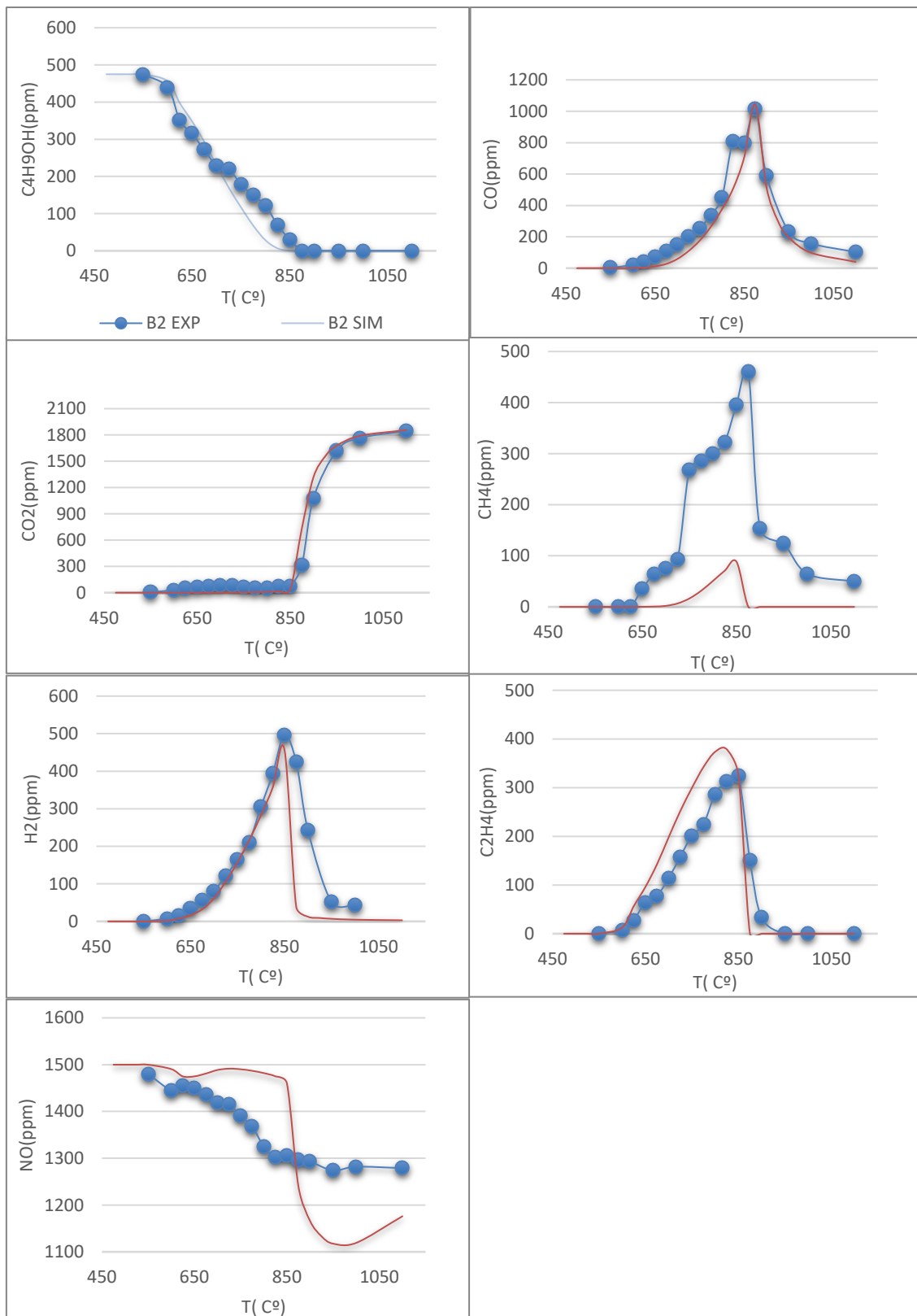


Figura 6.5. Simulación de la oxidación de butanol en presencia de NO vs resultados experimentales de la oxidación de butanol en presencia de NO para λ 1,05. B2 EXP vs B2 SIM.

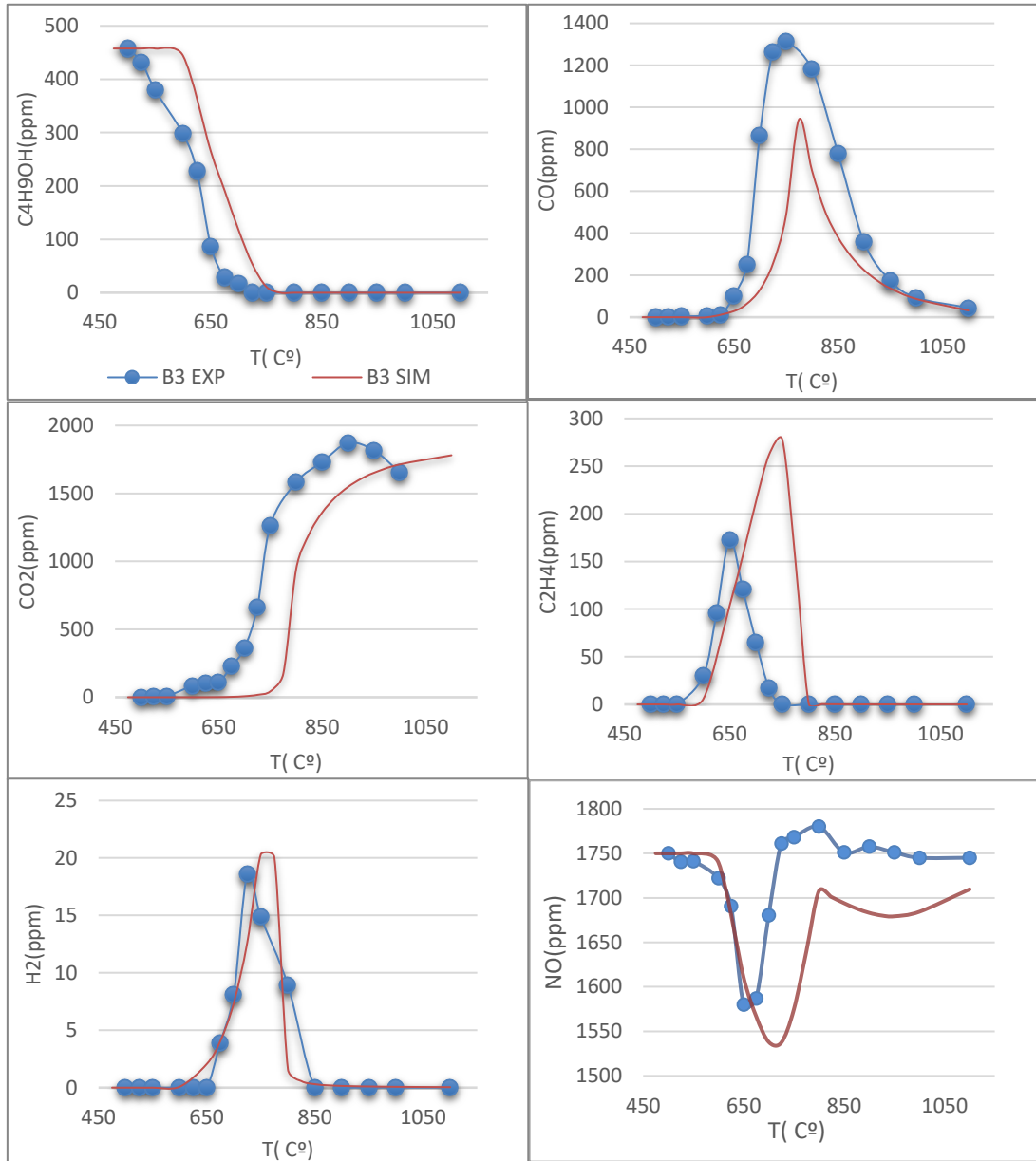


Figura 6.6. Simulación de la oxidación de butanol en presencia de NO vs resultados experimentales de la oxidación de butanol en presencia de NO para λ 11,45. B3 EXP vs B3 SIM.

Para condiciones reductoras ($\lambda=0,74$) las simulaciones de butanol, CO, CO_2 y C_2H_4 se ajustan muy bien a las curvas experimentales para todo el intervalo de temperaturas de estudio.

La simulación de CH_4 predice mal como se comporta la curva experimental a diferencia de los experimentos en ausencia de NO en la que la simulación sigue bastante bien la curva experimental.

En la simulación de H_2 se observa que sigue muy bien la curva experimental hasta 925 °C, después para temperaturas más altas la simulación se desvía bastante.

Hasta 900 °C la simulación de NO sigue muy bien la curva experimental, pero a partir de esa temperatura sufre una desviación muy grande.

Para condiciones estequiométricas ($\lambda=1,05$) la simulación predice muy bien las curvas experimentales de butanol, CO, CO_2 , H_2 y C_2H_4 para todo el intervalo de temperaturas de estudio.

La simulación no predice bien la curva experimental del CH_4 al igual que en $\lambda=0,74$.

En la simulación del comportamiento del NO se observa que tampoco hay una buena predicción de lo que ocurre en la curva experimental.

Para oxidantes ($\lambda=11,45$) en una descripción general se observa que las curvas de la simulación se asemejan bastante a todas las curvas experimentales, si bien en las curvas experimentales no aparece CH_4 .

En el caso del CO, CO_2 y NO la curva de la simulación subestima ligeramente lo que ocurre en la curva experimental, sin embargo, la forma de la curva es muy parecida.

6.3 Caminos de reacción.

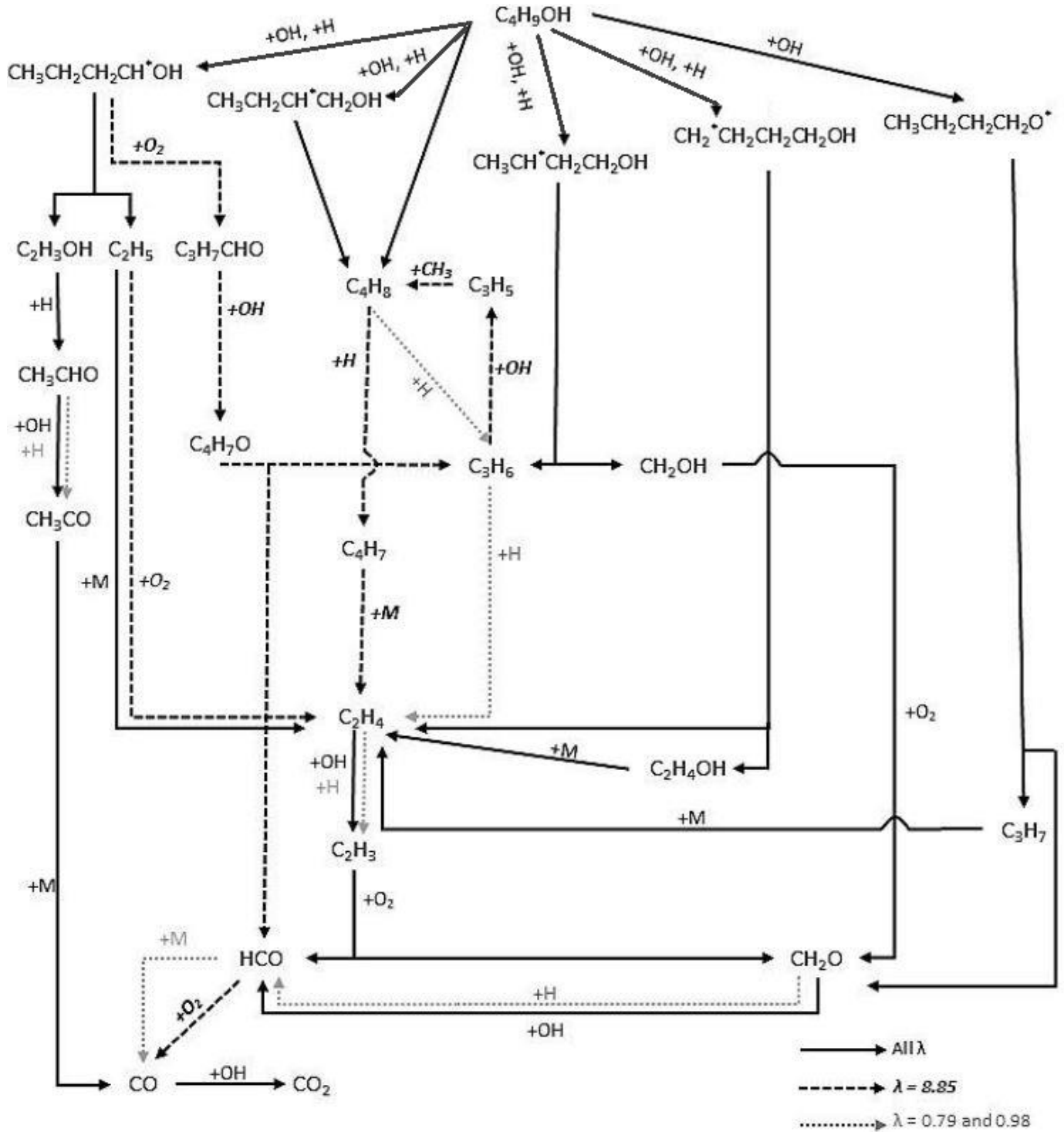
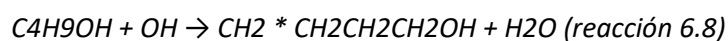
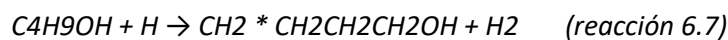
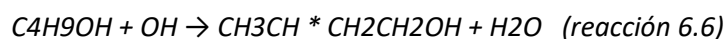
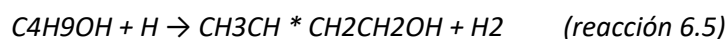
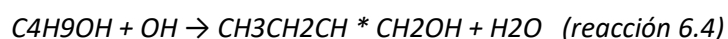
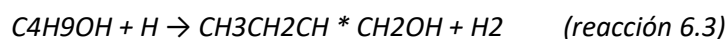


Figura 6.7. Caminos de reacción en la simulación de oxidación de butanol en ausencia de NO.

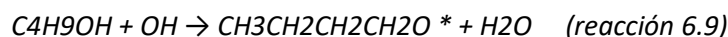
Dado que en ausencia de NO la simulación predice satisfactoriamente los resultados experimentales obtenidos se obtendrán los caminos de reacción que se muestran en la Figura 6.7.

Se puede observar que la oxidación de butanol comienza mayoritariamente con la formación de radicales por extracción de hidrogeno al butanol. Se forman cuatro radicales mayoritarios que son: $AC4H8OH$ ($CH_3CH_2CH_2CH \cdot OH$), $BC4H8OH$ ($CH_3CH_2CH \cdot CH_2OH$), $CC4H8OH$ ($CH_3CH \cdot CH_2CH_2OH$) y $DC4H8OH$ ($CH_2 \cdot CH_2CH_2CH_2OH$).

Las reacciones que dan lugar a estos radicales son:



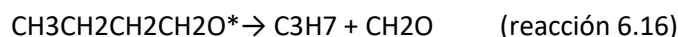
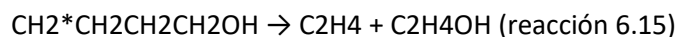
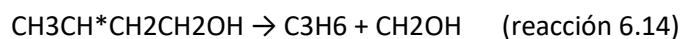
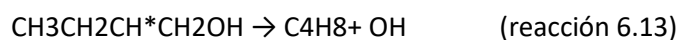
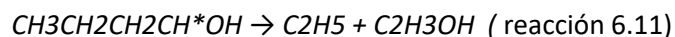
El butanol se descompone también en los productos C_4H_8 y $CH_3CH_2CH_2CH_2O \cdot$ aunque estos se formen en menor cantidad.



La cantidad de estos últimos productos se vuelve mínima a medida que aumenta la concentración de oxígeno. Esto se puede observar también en los trabajos de Sarathy cols. [25] y Dagaut y cols. [26]. Para todas las condiciones de oxidación la reacción 6.2 es la que lleva mayoritariamente al consumo del butanol. La proximidad del grupo OH debilita los enlaces C-H con lo que facilita la abstracción de H para las reacciones de abstracción volviendo a ser este comportamiento común para las oxidaciones en alcoholes, como se puede observar en los experimentos con etanol [27], 1-propanol [28] y 1-pentanol [29].

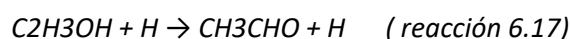
Las siguientes reacciones representan como se descomponen los radicales formados en la primera parte de la conversión del butanol:

Se puede observar como estos radicales reaccionan con otros radicales, que hacen que rompan enlaces C-C para formar compuestos con cadenas más cortas de Carbono. CH₃CH₂CH₂CH * OH forma C₂H₅ y C₂H₃OH (reacción 6.11) para condiciones estequiométricas y reductoras. Sin embargo, para condiciones oxidantes se forma C₃H₇CHO al reaccionar con O₂ (reacción 6.12).

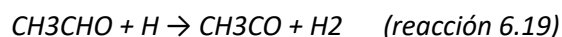


El CH₃CH₂CH * CH₂OH produce C₄H₈ por eliminación de OH (reacción 6.13). CH₃CH * CH₂CH₂OH forma C₃H₆ y CH₂OH (reacción 6.14). CH₂ * CH₂CH₂CH₂OH se descompone en C₂H₄ y C₂H₄OH (reacción 6.15). CH₃CH₂CH₂CH₂O *, se descompone en CH₂O y C₃H₇ (reacción 6.16) que después se convertirá en C₂H₄.

C₂H₅ que se forma en la reacción 6.11, se convierte en C₂H₄ a través de diferentes vías de reacción, dependiendo de la estequiometría y la concentración de grupos radicales.

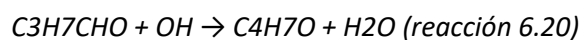


Por otra parte, de acuerdo con la reacción 6.17 el C₂H₃OH se descompone para dar mayoritariamente CH₃CHO. El CH₃CHO posteriormente reacciona con radicales OH (reacción 6.18) para todas las condiciones de oxidación, y con radicales H (reacción 6.19) solo en condiciones reductoras y estequiométricas, para formar CH₃CO.

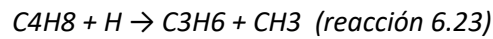
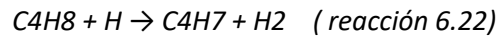


Este camino de reacción termina en CO para dar finalmente CO₂.

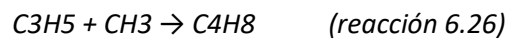
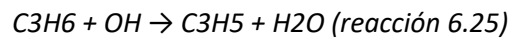
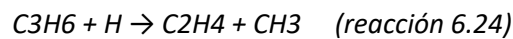
El C₃H₇CHO, en condiciones oxidantes reacciona con OH para formar C₄H₇O (reacción 6.20) y además se convierte en C₃H₆ y HCO (reacción 6.21).



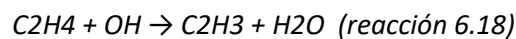
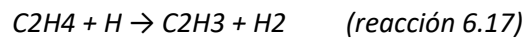
El C₄H₈ va por diferentes caminos de reacción dependiendo de las condiciones de oxidación. En condiciones oxidantes, reacciona con los radicales H y forma radicales C₄H₇. En reductoras y estequiométricas, el C₄H₈ reacciona con H y produce radicales C₃H₆ y CH₃ (reacción 6.23).



El C₃H₆ reacciona con H para formar C₂H₄ y CH₃ (reacción 6.24) en condiciones reductoras y estequiométricas, pero, en condiciones oxidantes, forma C₃H₅ (reacción 6.25) y finalmente reacciona con radicales CH₃ para producir C₄H₈ (reacción 6.26).



El C₂H₄ se convierte por las reacciones 6.27 y 6.28 con H y OH. El C₂H₃ formado en estas reacciones produce HCO y CH₂O al reaccionar con O₂, que se convierte rápidamente en CO y posteriormente en CO₂.



Los caminos de reacción para la oxidación de butanol en presencia de NO son similares a los obtenidos en la oxidación en ausencia de NO. Se puede observar en los resultados de las figuras 6.4, 6.5 y 6.6 que la simulación no predice bien el comportamiento del NO.

7. CONCLUSIONES

Las principales conclusiones obtenidas en este Trabajo Fin de Grado son:

El butanol se oxida completamente en ausencia de NO en un intervalo de 625 a 825 °C para condiciones oxidantes y de 700 a 875 °C para condiciones reductoras.

Al añadir NO a los gases de reacción, el butanol se ha oxidado completamente en un intervalo de 500 a 700 °C para condiciones oxidantes y de 625 a 900 °C para condiciones reductoras. Esto concuerda con lo encontrado en bibliografía, para condiciones reductoras inhibe la oxidación ya que ocurre en un intervalo de temperaturas mayor que en ausencia de NO y para condiciones oxidantes la promueve ya que ocurre a menor temperatura y en un intervalo también menor.

Con respecto a la manera de oxidarse de los hidrocarburos que se producen en la oxidación del butanol (CH_4 , C_2H_4 , C_2H_6 , C_4H_8 , CH_3CHO), se observa que en condiciones oxidantes se producen en menores cantidades o incluso no se producen. Esto se debe a que los caminos de oxidación a CO_2 y CO son más fáciles por lo que los productos se derivan hacia estos.

En condiciones estequiométricas se observa un comportamiento intermedio entre las condiciones oxidantes y reductoras por lo que se generan hidrocarburos e H_2 y estos se oxidan.

En condiciones reductoras se generan hidrocarburos (C_2H_4 , CH_4) y H_2 en concentraciones importantes. El H_2 no llega a oxidarse completamente ya que no hay suficiente oxígeno para que se pueda oxidar, esto ocurre tanto en ausencia como en presencia de NO.

El metano sin embargo en ausencia de NO se oxida completamente, pero en presencia de NO se oxida muy poco.

La simulación predice bien los comportamientos de los compuestos en la oxidación en ausencia de NO para todas las condiciones estudiadas y para los compuestos de mayor importancia que son: CO_2 , CO , H_2 , C_2H_4 , CH_4 . No así para otros de menor importancia como: C_2H_6 , C_4H_8 y CH_3CHO .

En la simulación en presencia de NO, el modelo predice bien los comportamientos de CO_2 , CO , H_2 , C_2H_4 para todas las condiciones estudiadas, pero no predice bien los comportamientos de CH_4 y NO, así como tampoco los de los compuestos de menor importancia.

Se puede concluir que este modelo predice bien como se comporta el butanol en su oxidación, aunque se puede trabajar para optimizarlo mejorando las ecuaciones que simulan los compuestos que aparecen en menor concentración.

Realizar este Trabajo Fin de Grado me ha proporcionado nuevos conocimientos sobre temas relacionados con la combustión, combustibles, alcoholes y los avances en estos campos, así como la oportunidad de trabajar en un laboratorio aplicando técnicas experimentales y métodos de análisis que no conocía. Me ha permitido aprender las complicaciones y desafíos que presenta realizar experimentos de manera rigurosa.

Además, me ha permitido aprender como se estructura y ejecuta un mecanismo de reacción para simular por ordenador procesos que ocurren en la realidad.

8. BIBLIOGRAFÍA

[1] Enerdata, Global Energy Statistical Yearbook 2017 (consultada en noviembre 6, 2017).

<https://yearbook.enerdata.net/total-energy/world-consumption-statistics.html>.

[2] Eurostat (consultada en noviembre 6, 2017).

[http://ec.europa.eu/eurostat/statisticsexplained/index.php/File:Final_energy_consumption,_EU28,_2015_\(%25_of_total,_based_on_tonnes_of_oil_equivalent\)_YB17.png](http://ec.europa.eu/eurostat/statisticsexplained/index.php/File:Final_energy_consumption,_EU28,_2015_(%25_of_total,_based_on_tonnes_of_oil_equivalent)_YB17.png)

[3] Elliott M.A., Nebel G.J., Rounds F.G., "The Composition of Exhaust Gases from Diesel, Gasoline and Propane Powered Motor Coaches". Journal of the Air Pollution Control Association, 5:2, 103-108, 1955.

[4] Heywood J.B., "Internal Combustion Engine Fundamentals". McGraw-Hill Book Company, New York, pp. 569–573, 1988.

[5] Lim J., Yu L.E., Kostetski Y.Y., Lim C., Ryu J., Kim J., "Effects of Driving Conditions on Diesel Exhaust Particulates". Journal of the Air & Waste Management Association, 58:8, 1077-1085, 2008.

[6] Vojtisek-Lom M., "Total Diesel Exhaust Particulate Length Measurements Using a Modified Household Smoke Alarm Ionization Chamber". Journal of the Air & Waste Management Association, 61:2, 126-134, 2011.

[7] Lloyd A.C., Cackette T.A., "Diesel Engines: Environmental Impact and Control". Journal of the Air & Waste Management Association, 51:6, 809-847, 2001.

[8] Ostiguy C., Soucy B., Lapointe G., Woods C., Ménard L., Trottie M., "Health Effects of Nanoparticles", ISBN: 978-2-89631-320-4, 2008.
<http://www.irsst.qc.ca/media/documents/PubIRSST/R-589.pdf>

[9] Gehr P., Blank F., Rothen-Rutishauser B. M., "Fate of inhaled particles after interaction with the lung Surface". Paediatric Respiratory Reviews Volume 7, Supplement 1, Pages S73-S75, 2006.

[10] Westbrook C. K., Pitz W. J., Curran H.J, Phys J., "Chemical Kinetic Modeling Study of the Effects of Oxygenated Hydrocarbons on Soot Emissions from Diesel Engines". Chem. A, 110, 6912-6922, 2006.

[11] Miyamoto N., Ogawa H., Nurun N. M., Obata K., Arima T. "Smokeless, Low NOx, High Thermal Efficiency, and Low Noise Diesel Combustion with Oxygenated Agents as Main Fuel". Society of Automotive Engineers, 1998.

- [12] CHEMKIN-PRO 15131, Reaction Design: San Diego, 2013
- [13] Glarborg P., Alzueta M.U., Dam-Johansen K., Miller J.A., “*Kinetic modeling of hydrocarbon/nitric oxide interactions in a flow reactor*”. *Combust. Flame*, 115:1–27, 1998.
- [14] Alzueta M.U., Borruey M., Callejas A., Millera Á., Bilbao R., “*An experimental and modeling study of the oxidation of acetylene in a flow reactor*”. *Combust. Flame*, 152:377–386, 2008.
- [15] Abián M., Esarte C., Millera Á., Bilbao R., Alzueta M.U., “*Oxidation of acetylene–ethanol mixtures and their interaction with NO*”. *Energy & Fuels*, 22:3814–3823, 2008.
- [16] Abián M., Giménez-Lopez J., Bilbao R., Alzueta M.U., “*Effect of different concentration levels of CO₂ and H₂O on the oxidation of CO: Experiments and modelling*”. *Proc. Combust. Inst.*, 33:317–323, 2011.
- [17] Abián M., Millera Á., Bilbao R., Alzueta M. U., “*An experimental and modeling study of the influence of flue gases recirculated on ethylene conversion*”. *Combust. Flame*, 161, 2288–2296, 2014.
- [18] Cai J., Zhang L., Zhang F., Wang Z., Cheng Z., Yuan W., Qi F., “*Experimental and kinetic modeling study of n-butanol pyrolysis and combustion*”. *Energy & Fuels*, 26:5550–5568, 2012.
- [19] Nigam P. S., Singh A., “*Production of liquid biofuels from renewable resources*”. *Progress in Energy and Combustion Science* 37,52–68, 2011.
- [20] Wallner T., Miers S. A., McConnell S., “*A Comparison of Ethanol and Butanol as Oxygenates Using a Direct-Injection, Spark-Ignition Engine*”. Argonne National Laboratory, Argonne, IL 60439, 2009.
- [21] Hui X., Niemeyer K. E., Brady K. B., Sung C-J., “*Reduced Chemistry for Butanol Isomers at Engine-Relevant Conditions*”. *Energy & Fuels*, 31, 867–881, 2017.
- [22] Jin C., Yao M., Liu H., Lee C. F., Ji J., “*Progress in the production and application of n-butanol as a biofuel*”. *Energy Reviews* 15, 4080–4106, 2011.
- [23] Alzueta M. U., Hernandez J. M., “*Ethanol Oxidation and Its Interaction with Nitric Oxide*”. *Energy & Fuels*, 16, 166–171, 2002.
- [24] Alzueta M.U., Bilbao R., Finestra M., “*Methanol Oxidation and Its Interaction with Nitric Oxide*”. *Energy & Fuels*, 15, 724–729, 2001.

- [25] Sarathy S.M., Thomson M.J., Togbe C., Dagaut P., Halter F., Mounaim-Rousselle C., "An experimental and kinetic modeling study of *n*-butanol combustion". *Combust. Flame*, 156:852–864, 2009.
- [26] Dagaut P, Togbé C., "Oxidation kinetics of butanol–gasoline surrogate mixtures in a jet-stirred reactor: Experimental and modeling study". *Fuel* 87, 3313–3321, 2008.
- [27] Alzueta M.U., Hernández J.M., "Ethanol oxidation and its interaction with nitric oxide". *Energy & Fuels*, 16:166–171, 2002.
- [28] Galmiche B., Togbé C., Dagaut P., Halter F., Foucher F., "Experimental and detailed kinetic modeling study of the oxidation of 1-propanol in a pressurized Jet-Stirred Reactor (JSR) and combustion bomb". *Energy & Fuels*, 25:2013-2021, 2011.
- [29] Heufer K.A., Sarathy S.M., Curran H.J., Davi A.C., Westbrook C.K., Pitz W.J., "Detailed kinetic modeling study of *n*-pentanol oxidation". *Energy & Fuels*, 11:6678-6685, 2011.

Anexos

ÍNDICE DE ANEXOS

| | | |
|-----|--|----|
| 1. | ANEXO I: Métodos de producción de isómeros de butanol..... | 1 |
| 1.1 | 1-Butanol e isobutanol..... | 3 |
| 1.2 | 2-butanol y ter-butanol..... | 6 |
| 2. | ANEXO II: Cálculo del tiempo de reacción..... | 7 |
| 3. | ANEXO III: Resultados experimentales..... | 8 |
| 3.1 | Experimentos en ausencia de NO. | 9 |
| 3.2 | Experimentos en presencia NO..... | 10 |
| 4. | ANEXO IV: Simulación experimental y mecanismo cinético. | 11 |
| 4.1 | Simulación experimental..... | 11 |
| 4.2 | Mecanismo cinético. | 14 |
| 5. | BIBLIOGRAFIA..... | 61 |

1. ANEXO I: Métodos de producción de isómeros de butanol.

Los isómeros de butanol son líquidos a temperatura ambiente y su producción mundial ronda los $2,5 \times 10^6$ toneladas año.

Los procesos de producción de los isómeros de butanol son diferentes según el isómero que se desee obtener, en este anexo se muestran los procesos de producción más comunes de cada isómero.

El 1-butanol es un bioalcohol secundario de primera y segunda generación, que mayoritariamente se genera mediante fermentación ABE (Acetone–Butanol–Ethanol). En la figura 1 se presenta un esquema sobre la clasificación de biofuels.

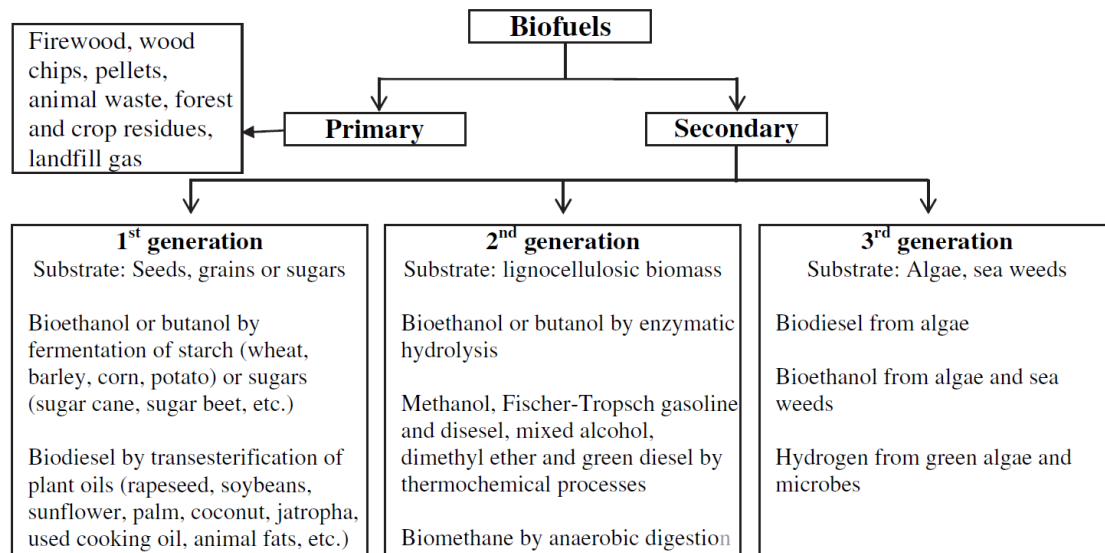


Figura 1.1. Clasificación de biofuels [1].

La manera de obtener butanol fue descubierta por Louise Pasteur en 1861 a escala de laboratorio, industrialmente se empezó a producir sobre los años 1912-1914 mediante fermentación ABE usando melaza y granos de cereal para fermentarlos con bacterias *Clostridium acetobutylicum* [2].

El proceso ABE históricamente ha sido usado en su mayoría para sintetizar acetona que era un componente de mucho valor industrial. El butanol por otra parte tenía otros usos menores como solvente en la producción de caucho y lacado de secado rápido para dar un buen acabado en carrocerías de automóviles, entre otros usos minoritarios [2].

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

El interés por producir butanol fue incrementando posteriormente al descubrirse una gran cantidad de aplicaciones de este hidrocarburo oxigenado, lo que termino en que

muchas empresas se especializaran en la optimización de procesos para obtener butanol como producto principal [2].

Durante el siglo XX se desarrollaron muchos procesos para la obtención de butanol. La tabla 1 presenta los principales procesos desarrollados en esa época.

Production of biobutanol in industrial scale during the period 1920–1980s.

| Production years | Location | Substrate | Notes |
|---------------------------------------|---|---|---|
| 1913–1914 | Rainham, England | Potato starch | "Fernbach's process" |
| 1916–1918 | Toronto, Canada | Starch | Fermentation by a mixture of bacteria "Weizmann's process" |
| 1917–1918 | Terre Haute, USA | Corn starch, molasses | Total production 3000 t of acetone and 6000 t of butanol Two distilleries in operation |
| 1920–1935 | | | Butanol as the main product from 1920 9 months of shutdown in 1920 because of business decline Bacteriophage infection in 1923 |
| 1923–1935 | Peoria, USA | Corn starch, molasses | Built up because of the bacteriophage infection in Terre Haute and the good availability of substrates (corn) 96 units, total volume about 18,168 m ³ |
| 1930s | Philadelphia and Puerto Rico in USA, Egypt, India and Australia | Molasses | Production of methanol from the fermentation gases by catalysts Use of phage-immunized <i>C. saccharobutylicum</i> strains capable of metabolizing sucrose |
| 1940s–1960s 1929–1935 ^a | Japan Dokshukino, Grosnyi and Talitsk, USSR | Molasses Wheat and rye starch, wheat flour, molasses, pentosane hydrolysates from hemicelluloses | <i>C. madisonii</i> used in 1940s in Puerto Rico <i>C. saccharoperbutylacetonicum</i> used Total capacity of Dokshukino plant: 6500 m ³ |
| 1935–early 1950s | Bromborough, England | Molasses | Parallel batteries of reactors in series to increase site production 1958–1962: development of continuous substrate preparation and distillation with batch fermentation 1959–1961: development of a pentose hydrolysis and fermentation Strains of <i>C. saccharobutylicum</i> used |
| 1936–1982 | Germiston, South Africa | Maize mash, molasses ^b | Strains P265 and P270 used in the 1970s |
| 1960 ^c | Shanghai, Beijing, and Wuxi, China | Starch | Several phage infections detected during the production years Yearly production of 1000 t in each plant |
| 1965–1970 ^c | Zhejiang, Tianjin, Yunnan, and Shanxi, China | Starch substrates (corn, corn starch, cassava) | Production capacities 3000–10 000 t/year |
| 1980s ^c | Hebei and Shandong, China | Starch substrates (corn, corn starch, cassava, sweet potato) | Total annual solvent production of 170 000 t reached |
| 1947–1957 | Formosa, Taiwan | Molasses | Strain of <i>C. toanum Baba</i> used |

^a Some of the plants worked until the end of the 1980s.

^b The substrate was used after 1944.

^c Building up year of the plant.

Figura 1.2. Producción de butanol a escala industrial durante 1920-1980 [2].

1.1 1-Butanol e isobutanol.

En este punto se presentan algunos procesos de producción de 1-butanol e isobutanol [3]:

1. Hidroformilación de propeno.

Se produce una Hidroformilación de propeno con una posterior hidrogenación de los aldehídos que se obtienen (butanal, isobutanol) para formar 1-butanol e isobutanol. Se obtienen butanol e isobutanol en una proporción 4:1.

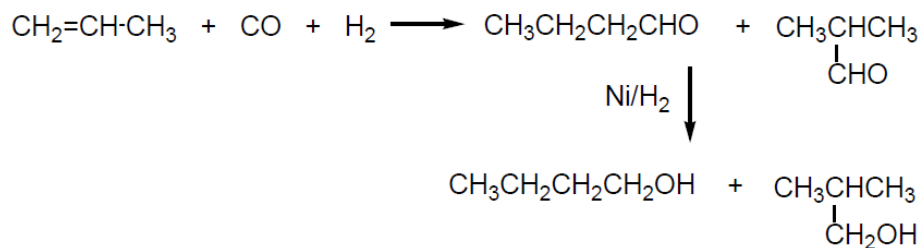


Figura 1.3. Hidroformilación de propeno [4].

2. Condensación aldólica.

Se produce una condensación aldólica de acetaldehído con una hidrogenación del crotonaldehído resultante. El acetaldehído, que previamente se obtiene por deshidrogenación de etanol, por condensación aldólica en medio básico da lugar a 3-hidroxiacetona, este se deshidrata a 2-butenal en presencia de pequeñas cantidades de ácido acético. Este compuesto por hidrogenación catalítica se transforma en 1-butanol. Este método de producción de 1-butanol sólo se usa en Brasil donde se produce etanol por fermentación de caña de azúcar.

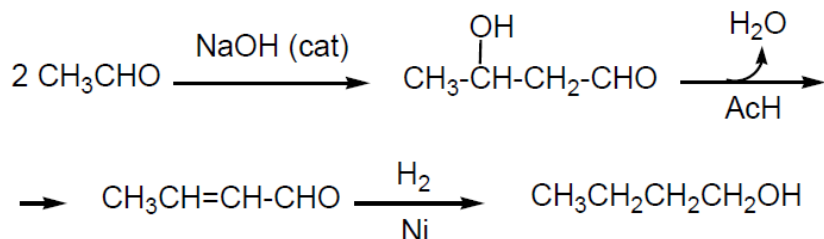


Figura 1.4. Condensación aldólica de acetaldehído [4].

3. Producción por fermentación de almidón o azúcar por bacterias *Clostridium acetobutylicum* (fermentación ABE).

Las materias primas para el proceso ABE son principalmente materia biológica tanto materia comestible como materia de desechos de procesos industriales como puede ser: maíz, fibra de maíz, paja de arroz, desechos de huerta, microalgas, remolacha, etc. Es decir, materia prima que contenga glucosa.

Dado que usar materia comestible resulta costoso y plantea problemas éticos a lo hora de destinar para producir alcoholes productos esenciales para la alimentación de la población, las investigaciones se centran en utilizar como materia prima biomasa lignocelulósica, que es una biomasa vegetal constituida fundamentalmente por celulosa, hemicelulosas y lignina.

La biomasa lignocelulósica, es un material orgánico muy abundante en la tierra. Está presente en los bosques, cultivos agrícolas, residuos de cosechas, residuos industriales (residuos de la industria de la madera y los tableros, residuos de la industria del papel y el papel reciclado, etc) [4].

La fermentación ABE se trata de una conversión anaerobia de carbohidratos por bacterias como: *Clostridium acetobutylicum*, *Clostridium beijerinckii*, *Clostridium saccharobutylicum*, *Clostridium tetanomorphum*. Todas estas bacterias pueden sintetizar estos alcoholes. La *Clostridium acetobutylicum* es el microorganismo más estudiado y alterado genéticamente para la producción de acetona, butanol y etanol para la fermentación ABE.

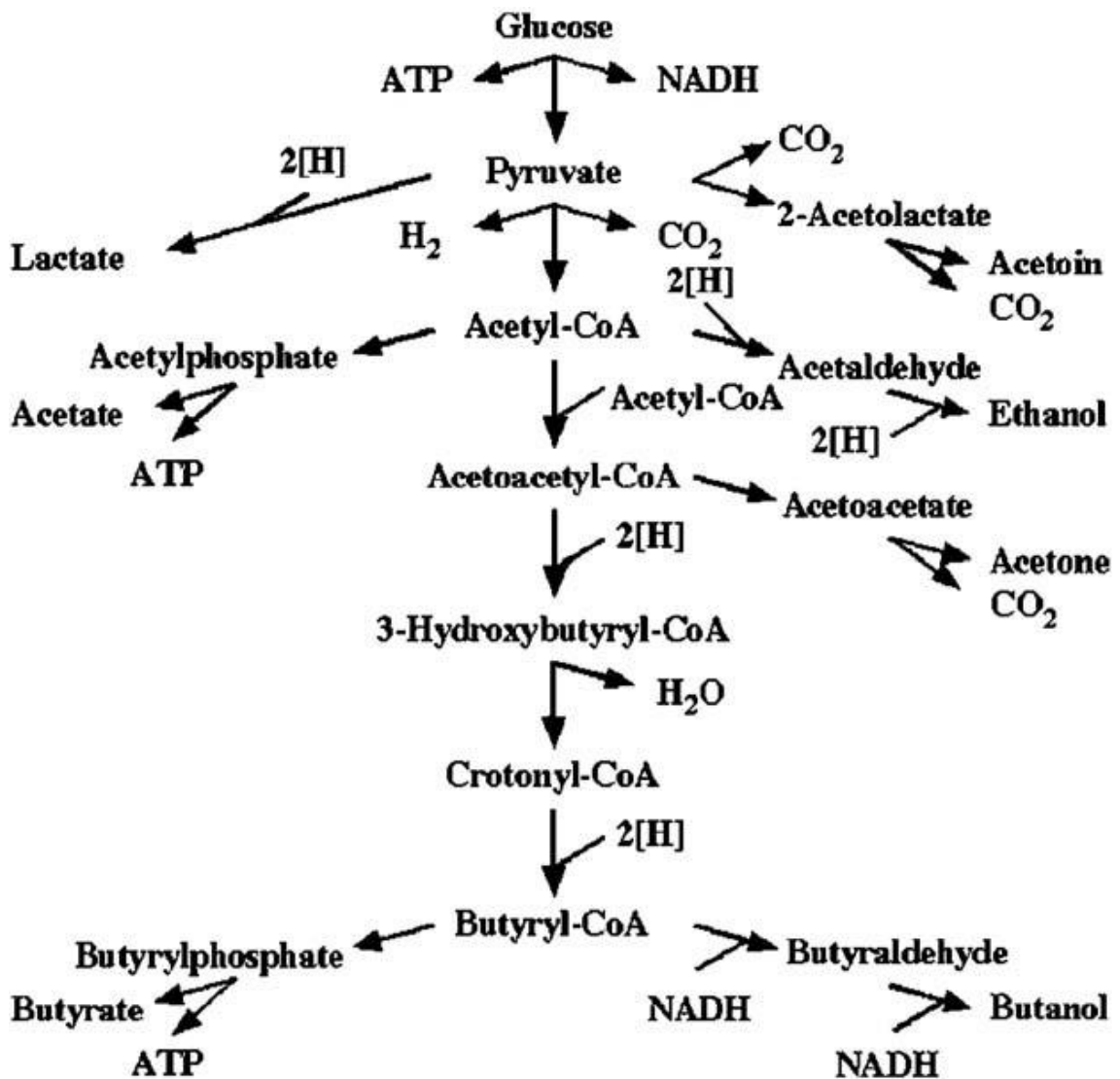


Figura 1.5. Ruta metabólica de la *Clostridium acetobutylicum* [5].

La Figura 1.5 muestra la ruta metabólica de la fermentación ABE, comprende 2 fases características de la fermentación, la Acidogénesis y Solventogénesis. La Acidogénesis comprende la formación de ácido Acético y Butírico con ATP (adenosín trifosfato) durante el crecimiento exponencial de las células. A este le sigue la Solventogénesis una fase de crecimiento estacionario, los ácidos son reasimilados, y acetona-butanol- etanol aparecen como productos secundarios.

4. Fermentación de almidón.

En la antigua Unión Soviética se producía acetona-butanol-etanol por medio de fermentación de almidón. Por cada Kg de almidón fermentado se obtienen 240Kg de butanol, 120 Kg de acetona, 50 Kg de etanol y 450 Kg de CO₂ y agua.

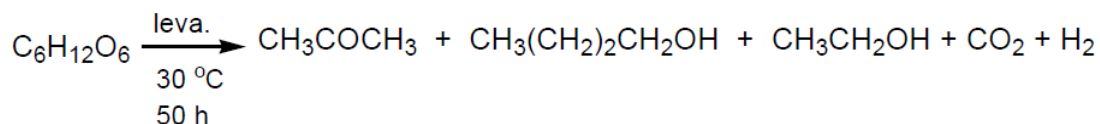


Figura 1.6. Fermentación de almidón [5].

1.2 2-butanol y ter-butanol.

1. El 2-butanol y el ter-butanol de manera parecida al 1-butanol y al isobutanol se obtienen por hidratación en fase líquida de los correspondientes alquenos, la diferencia está en que necesitan de unas resinas de intercambio iónico para que la producción se derive hacia estos isómeros [3].

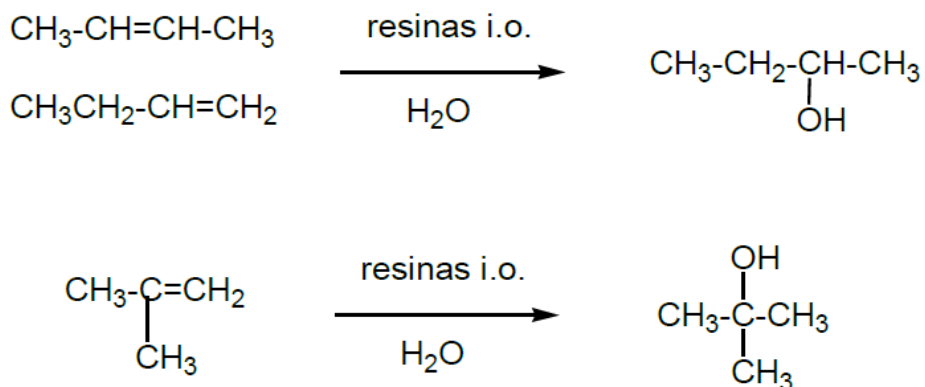


Figura 1.7. Hidratación de alquenos en presencia de resinas [6].

2. ANEXO II: Cálculo del tiempo de residencia en la zona de reacción.

El tiempo de residencia depende de la temperatura, de la geometría y del caudal de gas circulante por el reactor.

La fórmula del tiempo de residencia es:

$$t_r = \frac{V}{Q} \quad [\text{Ecuación 1}]$$

Siendo: V = Volumen del reactor y Q = Caudal que circula por el reactor.

El volumen del reactor lo obtenemos por sus medidas:

- Longitud = 20 cm
- Radio= 0,435 cm

$$V = \pi r^2 * \text{Longitud} = 11,889 \text{ cm}^3 \quad [\text{Ecuación 2}]$$

Necesitamos poner Q en función de la temperatura por lo que usamos la ecuación de gases ideales:

$$P*Q = n*R*T \quad [\text{Ecuación 3}]$$

Siendo:

- $R = 82 \left[\frac{\text{atm} * \text{cm}^3}{\text{mol} * \text{K}} \right]$
- $P = 1 \text{ [atm]}$
- $n = 0,04464 \text{ [mol/ min]}$ que se obtienen de los $1000 \frac{\text{ml (STP)}}{\text{min}}$ de caudal de gas.
- $T = \text{Temperatura [K]}$

$$Q = \frac{n * P * T}{P} = 3,6 * T \left[\frac{\text{cm}^3}{\text{min}} \right]$$

$$Q = \frac{3,6667 * T}{60} \left[\frac{\text{cm}^3}{\text{s}} \right]$$

Finalmente:

$$t_r = \frac{V}{Q} = \frac{11,89}{0,061 * T} = \frac{194,87}{T} \approx \frac{195}{T} \text{ [s]}$$

3. ANEXO III: Resultados experimentales.

En este capítulo se presentan los resultados experimentales del etano (C₂H₆), acetaldehído (CH₃CHO) y buteno (C₄H₈).

Las tablas 3.1 y 3.2 muestran las concentraciones de los compuestos que se han utilizado para la simulación.

Tabla 3.1. Condiciones iniciales de los experimentos de oxidación de butanol en ausencia de NO.

| EXPERIMENTOS EN AUSENCIA DE NO (P = 1 bar) | | | |
|--|-----------|-----------|-----------|
| N.º EXPERIMENTO | A 1 | A 2 | A 3 |
| λ teórico | 0,7 | 1,00 | 10,00 |
| λ real | 0,79 | 0,98 | 8,85 |
| O ₂ (ppm) | 2095,52 | 3002,61 | 29912,06 |
| butanol (ppm) | 441,00 | 510,00 | 563,00 |
| NO (ppm) | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| H ₂ O(ppm) | 6000 | 6000 | 6000 |
| N ₂ (ppm) | 991463,48 | 990487,39 | 963524,94 |

Tabla 3.2. Condiciones iniciales de los experimentos de oxidación de butanol en presencia de NO

| EXPERIMENTOS EN PRESENCIA DE NO (P = 1 bar) | | | |
|---|-----------|-----------|-----------|
| N.º EXPERIMENTO | B 1 | B 2 | B 3 |
| λ teórico | 0,7 | 1,00 | 10,00 |
| λ real | 0,74 | 1,05 | 11,45 |
| O ₂ (ppm) | 2097,44 | 2997,24 | 31421,95 |
| butanol (ppm) | 473,00 | 475,00 | 457,53 |
| NO (ppm) | 1700,00 | 1500,00 | 1750,00 |
| H ₂ O(ppm) | 6000 | 6000 | 6000 |
| N ₂ (ppm) | 989729,56 | 989027,76 | 960370,52 |

3.1 Experimentos en ausencia de NO.

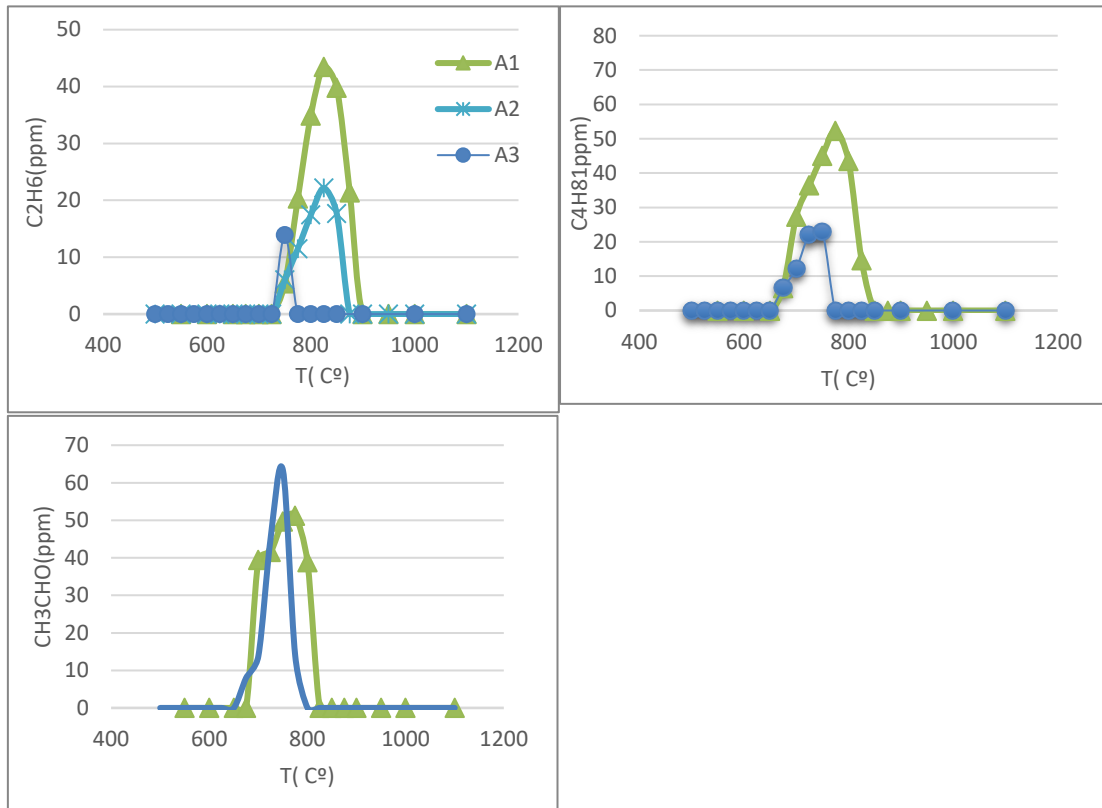


Figura 3.1. Resultados experimentales de oxidación de butanol en ausencia de NO. Experimentos A1, A2, A3.

En la figura 3.1 se presentan los resultados de etano (C_2H_6), 1-buteno (C_4H_8) y acetaldehído (CH_3CHO) obtenidos en la oxidación de butanol en ausencia de NO.

Se puede observar que las concentraciones de estos compuestos son muy pequeñas en comparación con los expuestos en la memoria, por lo que se describen brevemente.

El C_2H_6 aparece de manera mayoritaria en condiciones reductoras ya que en condiciones oxidantes los caminos hacia CO_2 y CO son más favorables.

Con el C_4H_8 y el CH_3CHO ocurre lo mismo hasta el punto de que en condiciones oxidantes no aparecen.

3.2 Experimentos en presencia NO.

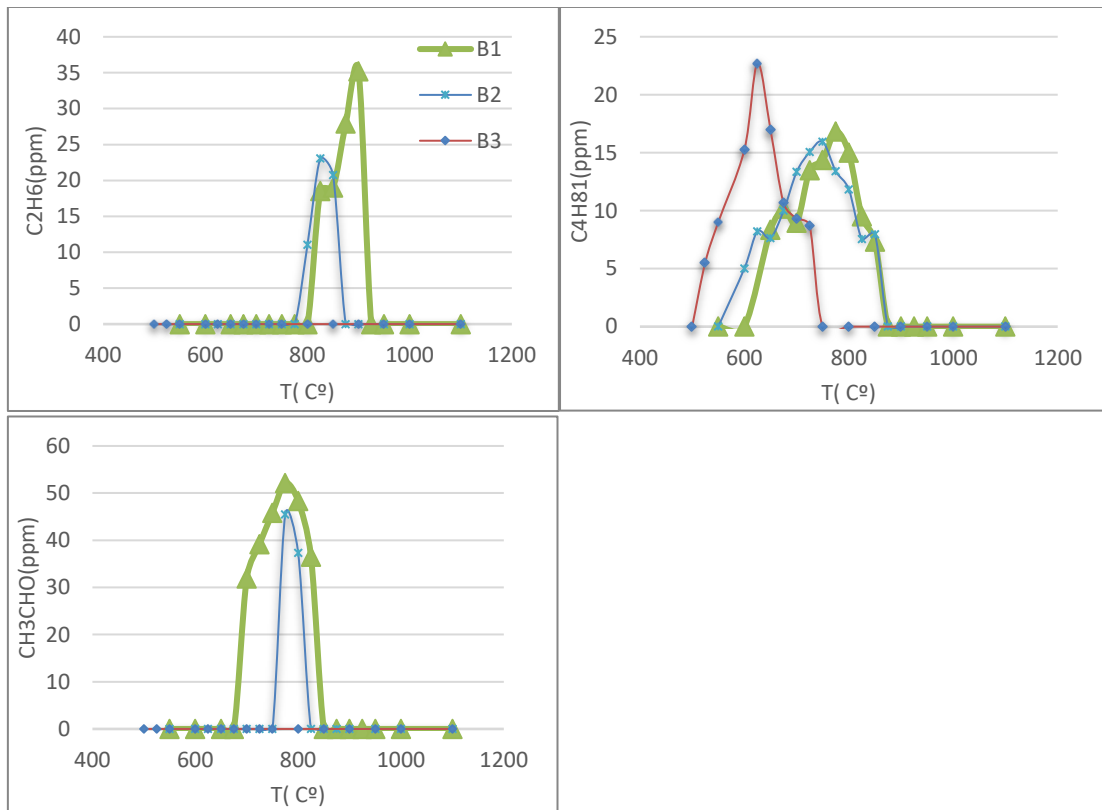


Figura 3.2. Resultados experimentales de oxidación de butanol en presencia de NO. Experimentos B1, B2, B3.

En la figura 3.2 se presentan los resultados de etano (C_2H_6), 1-buteno (C_4H_81) y acetaldehído (CH_3CHO) obtenidos en la oxidación de butanol en presencia de NO.

Como se puede observar las concentraciones de estos compuestos son muy pequeñas, en general ocurre lo mismo que en el punto 3.1 y para condiciones oxidantes se minimiza producción de estos compuestos excepto para el 1-buteno que se ve un incremento anómalo, pero con una concentración muy baja.

En condiciones reductoras para C_2H_6 y CH_3CHO se obtienen mayores concentraciones debido al déficit de oxígeno.

4. ANEXO IV: Simulación y mecanismo cinético.

4.1 Simulación.

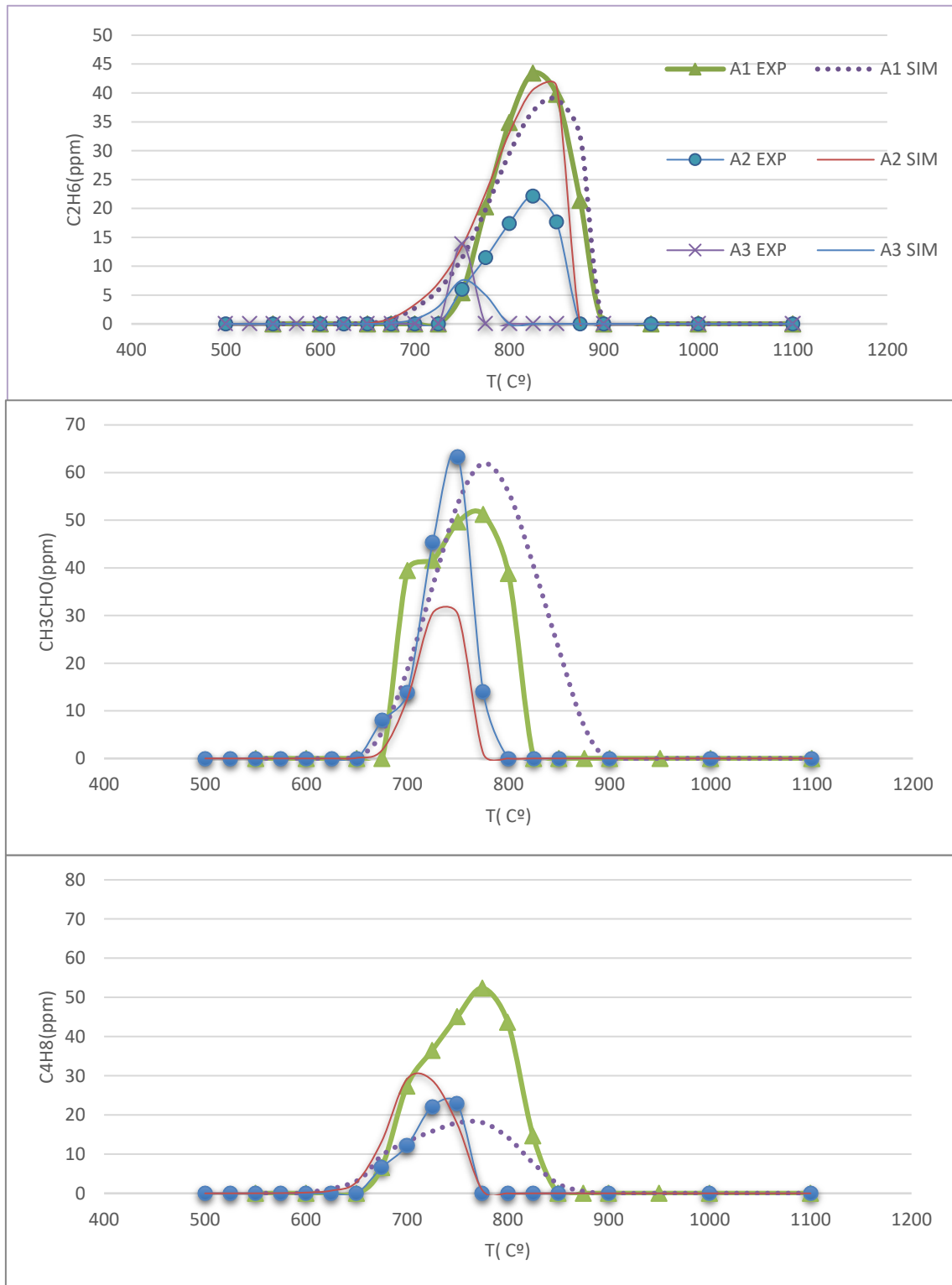


Figura 4.1. Resultados experimentales frente a simulados de la oxidación de butanol en ausencia de NO.

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

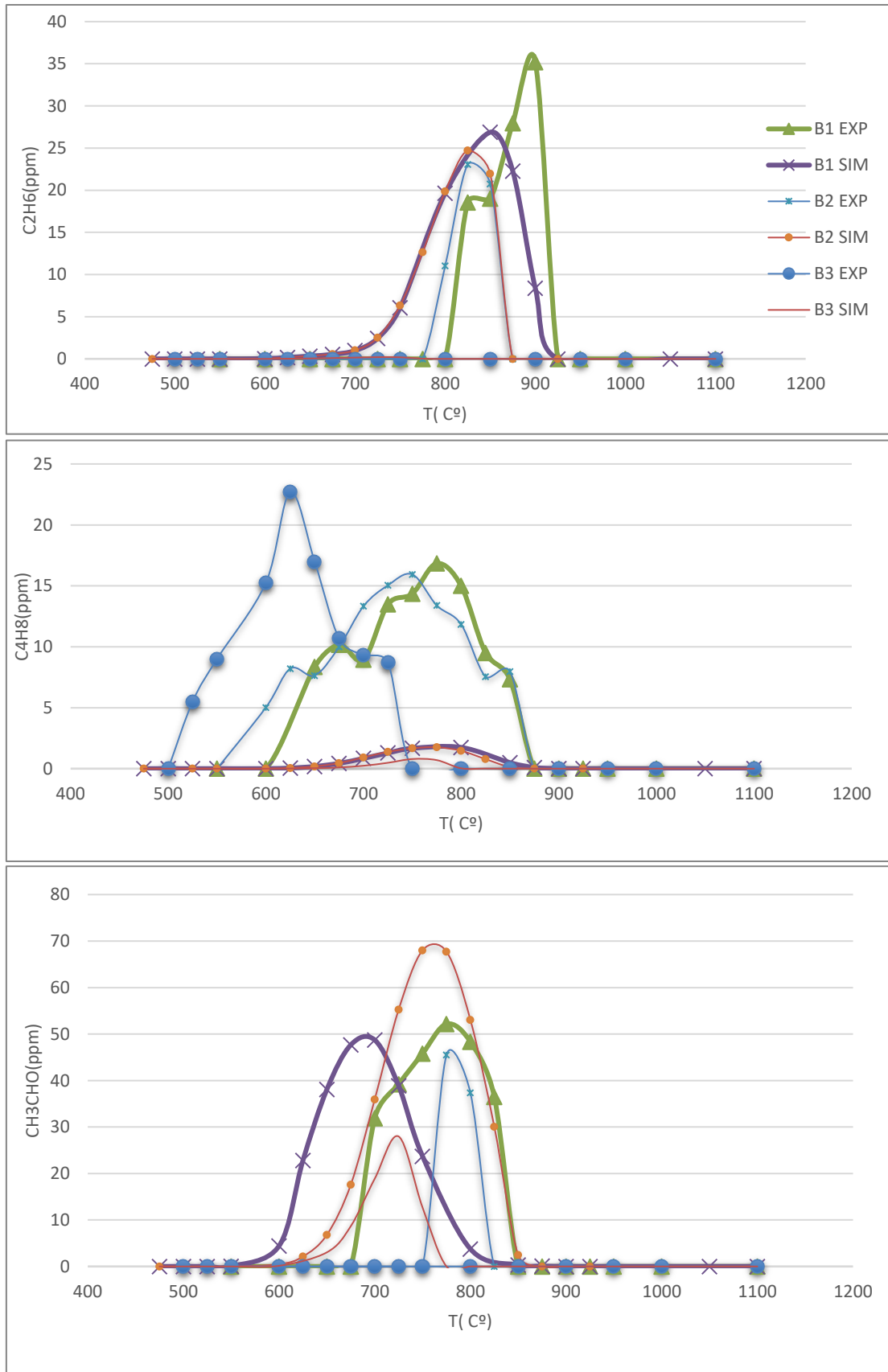


Figura 4.2. Resultados experimentales frente a simulados de la oxidación de butanol en presencia de NO.

En las figuras 4.1y 4.2 se muestran los resultados de la simulación frente a los resultados experimentales en ausencia y en presencia de NO.

Como se puede observar en las gráficas la simulación no predice bien las curvas de los resultados experimentales para los experimentos en ausencia y en presencia de NO.

Para mejorar este mecanismo cinético se podría trabajar en estos compuestos y así obtener un mecanismo que se ajuste más a la realidad.

4.2 Mecanismo cinético.

A continuación, se presenta el mecanismo cinético completo usado en la simulación.

```
!           MSR MODIFIED M1A MECHANISM FROM POPE AND MILLER           !
!                                                                           !
!=====! !
!Modified and updtated: Abián M., Millera A., Bilbao R., Alzueta M.U.,
!           Impact of SO2 on the formation of soot from ethylene pyrolysis.
!           FUEL 159 (2015) 550-558
!
ELEMENTS
H O C N S AR HE
END
SPECIES
!
CO
CO2
C2H4
C2H2
CH4
H2           ! m=      2
C2H6         ! m=     30
CH2O         ! m=     30
H            ! m=      1
CH           ! m=     13
CH2          ! m=     14
CH2 (S)      ! m=     14
CH3          ! m=     15
O            ! m=     16
OH           ! m=     17
H2O          ! m=     18
C2           ! m=     24
C2H          ! m=     25
C2H3         ! m=     27
HCO          ! m=     29
N2           ! m=     28
C2H5         ! m=     29
CH2OH        ! m=     31
CH3O         ! m=     31
O2           ! m=     32
CH3OH        ! m=     32
HO2          ! m=     33
H2O2         ! m=     34
C3H2         ! m=     38
H2CCCH       ! m=     39
C2H2OH
AR           ! m=     40
C2O          ! m=     40
HCCO         ! m=     41
CH2CHCH2    ! m=     41
CH3CCH2     ! m=     41
CH3CHCH     ! m=     41
CH2CO        ! m=     42
HCCOH        ! m=     42
OCHCHO       ! m=     58
CH2HCO
!
! ESPECIES INCLUIDAS EN EL MECANISMO DE ETANOL
```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

!
C2H5OH
C2H4OH
CH3CH2O
CH3CHO
CH3CO
C2H5CHO
C2H5CO
HCOO
NO
HCN
C
NO2
NO3
HNO
HONO
H2NO
HNOH
NH3
NH2
NH
N
N2H2
NNH
N2O
CN
NCO
HNCO
HOCN
HCNO
C2N2
NCN
CH3CN
CH2CN
H2CN
CH3NO
HONO2
CH3CHOH
!
!Nuevas especies incluidas
!
CH3O2
CH2CHCHCH2
CH2CHCHCH
C4H2
HCCHCCH
CH2CHCCH
CH2CHCCH2
H2CCCCH
C4H
H2CCCCCH
HCCCCHCCH
C6H2 ! m= 74
C5H2 ! m= 62
C5H5 ! m= 65
H2C4O ! m= 66
!
!
!Especies incluidas en el mecanismo del n-butanol janhai Cai
!C0
HE
!C1
CH* HOCHO HOCH2O
!C2

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

H2CC  CH3CO      CH3CHO      C2H3OH      C2H5O      CH2OCH      CH2OCH2      CH2CHO
HCCOH HCCOH      CH2COH      CH2COH      CH2*
!C3
C3H3      pC3H4      aC3H4      cC3H4      aC3H5      CH3CCH2
C3H6      nC3H7      iC3H7      C3H8      C2H3CHO
CC3H6OH  C3H5OH      C2H5CHO      C3H5O-enol2 C3H5OJ(13) C3H4O
!C4
nC4H3      iC4H3      C4H4      nC4H5      iC4H5      C4H5-2      C4H6
C4H612    C4H6-2      SAXC4H7      C4H7      iC4H7      iC4H7-1      C4H7-2      CH3CCHCH3
C4H81     C4H82      iC4H8      pC4H9      sC4H9      iC4H9      tC4H9
C4H10     iC4H10
C4H9OH    C4H9O      C3H7CHO      AC4H8OH      BC4H8OH      CC4H8OH      DC4H8OH      C4H9O
C4H7OH1-1 C4H7OH2-1  C4H7OH1-4    CH3CHCHCHO
C4H7OJ(8) C4H7OJ(12) C4H7OJ(13)  C4H7OJ(16)
!C5
C5H3      cC5H4      C5H4      lC5H5      C5H6      lC5H7
!C6
      C6H3      l-C6H4      o-C6H4      nC6H5      Al-      fulvene      Al
!
!fin de las especies del mecanismo de n-butanol de janhuai Cai
!
!
END
!
!
THERMO
      300.000  1000.000  5000.000
C2H4      121286C  2H  4      G  0300.00  5000.00  1000.00      1
0.03528418E+02  0.11485185E-01-0.04418385E-04  0.07844600E-08-0.05266848E-12      2
0.04428288E+05  0.02230389E+02-0.08614880E+01  0.02796162E+00-0.03388677E-03      3
0.02785152E-06-0.09737879E-10  0.05573046E+05  0.02421148E+03      4
CO      121286C  1O  1      G  0300.00  5000.00  1000.00      1
0.03025078E+02  0.14426885E-02-0.05630827E-05  0.10185813E-09-0.06910951E-13      2
-0.14268350E+05  0.06108217E+02  0.03262451E+02  0.15119409E-02-0.03881755E-04      3
0.05581944E-07-0.02474951E-10-0.14310539E+05  0.04848897E+02      4
CO2      121286C  1O  2      G  0300.00  5000.00  1000.00      1
0.04453623E+02  0.03140168E-01-0.12784105E-05  0.02393996E-08-0.16690333E-13      2
-0.04896696E+06-0.09553959E+01  0.02275724E+02  0.09922072E-01-0.10409113E-04      3
0.06866686E-07-0.02117280E-10-0.04837314E+06  0.10188488E+02      4
CH4      121286C  1H  4      G  0300.00  5000.00  1000.00      1
0.01683478E+02  0.10237236E-01-0.03875128E-04  0.06785585E-08-0.04503423E-12      2
-0.10080787E+05  0.09623395E+02  0.07787415E+01  0.01747668E+00-0.02783409E-03      3
0.03049708E-06-0.12239307E-10-0.09825229E+05  0.13722195E+02      4
CH2O      121286C  1H  2O  1      G  0300.00  5000.00  1000.00      1
0.02995606E+02  0.06681321E-01-0.02628954E-04  0.04737153E-08-0.03212517E-12      2
-0.15320369E+05  0.06912572E+02  0.16527311E+01  0.12631439E-01-0.01888168E-03      3
0.02050031E-06-0.08413237E-10-0.14865404E+05  0.13784820E+02      4
H      120186H  1      G  0300.00  5000.00  1000.00      1
0.02500000E+02  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00      2
0.02547162E+06-0.04601176E+01  0.02500000E+02  0.00000000E+00  0.00000000E+00      3
0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.02547162E+06-0.04601176E+01      4
H2      121286H  2      G  0300.00  5000.00  1000.00      1
0.02991423E+02  0.07000644E-02-0.05633828E-06-0.09231578E-10  0.15827519E-14      2
-0.08350340E+04-0.13551101E+01  0.03298124E+02  0.08249441E-02-0.08143015E-05      3
-0.09475434E-09  0.04134872E-11-0.10125209E+04-0.03294094E+02      4
C      121086C  1      G  0300.00  5000.00  1000.00      1
0.02602087E+02-0.01787081E-02  0.09087041E-06-0.11499333E-10  0.03310844E-14      2
0.08542154E+06  0.04195177E+02  0.02498584E+02  0.08085776E-03-0.02697697E-05      3
0.03040729E-08-0.11066518E-12  0.08545878E+06  0.04753459E+02      4
CH      121286C  1H  1      G  0300.00  5000.00  1000.00      1
0.02196223E+02  0.02340381E-01-0.07058201E-05  0.09007582E-09-0.03855040E-13      2
0.07086723E+06  0.09178373E+02  0.03200202E+02  0.02072875E-01-0.05134431E-04      3
0.05733890E-07-0.01955533E-10  0.07045259E+06  0.03331587E+02      4
CH2(S)      83194H  2C  1  0  0G  300.000  4000.000  1400.00      0 1

```


ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | | | | | | | |
|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|----|---------|----------|---------|---|---|
| 0.40752106E+01 | 0.15779120E-02 | -0.10806129E-06 | -0.84592437E-10 | 0.14033284E-13 | 2 | | | | | |
| 0.50007492E+05 | -0.15480316E+01 | 0.35932946E+01 | 0.13151238E-02 | 0.30756846E-06 | 3 | | | | | |
| 0.42637904E-09 | -0.34178712E-12 | 0.50451547E+05 | 0.17780241E+01 | | 4 | | | | | |
| CH2 | 83194H | 2C | 1 | 0 | OG | 300.000 | 4000.000 | 1400.00 | 0 | 1 |
| 0.39737520E+01 | 0.16097502E-02 | -0.10785119E-06 | -0.86399922E-10 | 0.14301196E-13 | 2 | | | | | |
| 0.45608973E+05 | 0.75549729E-01 | 0.36872995E+01 | 0.15066403E-02 | 0.69679857E-07 | 3 | | | | | |
| 0.23537297E-09 | -0.19397147E-12 | 0.45863672E+05 | 0.20267601E+01 | | 4 | | | | | |
| CH3 | 121286C | 1H | 3 | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | | 1 |
| 0.02844051E+02 | 0.06137974E-01 | -0.02230345E-04 | 0.03785161E-08 | -0.02452159E-12 | 2 | | | | | |
| 0.16437809E+05 | 0.05452697E+02 | 0.02430442E+02 | 0.11124099E-01 | -0.01680220E-03 | 3 | | | | | |
| 0.16218288E-07 | -0.05864952E-10 | 0.16423781E+05 | 0.06789794E+02 | | 4 | | | | | |
| O | 120186O | 1 | | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | | 1 |
| 0.02542059E+02 | -0.02755061E-03 | -0.03102803E-07 | 0.04551067E-10 | -0.04368051E-14 | 2 | | | | | |
| 0.02923080E+06 | 0.04920308E+02 | 0.02946428E+02 | -0.16381665E-02 | 0.02421031E-04 | 3 | | | | | |
| -0.16028431E-08 | 0.03890696E-11 | 0.02914764E+06 | 0.02963995E+02 | | 4 | | | | | |
| CH4 | 121286C | 1H | 4 | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | | 1 |
| 0.01683478E+02 | 0.10237236E-01 | -0.03875128E-04 | 0.06785585E-08 | -0.04503423E-12 | 2 | | | | | |
| -0.10080787E+05 | 0.09623395E+02 | 0.07787415E+01 | 0.01747668E+00 | -0.02783409E-03 | 3 | | | | | |
| 0.03049708E-06 | -0.12239307E-10 | -0.09825229E+05 | 0.13722195E+02 | | 4 | | | | | |
| OH | 121286O | 1H | 1 | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | | 1 |
| 0.02882730E+02 | 0.10139743E-02 | -0.02276877E-05 | 0.02174683E-09 | -0.05126305E-14 | 2 | | | | | |
| 0.03886888E+05 | 0.05595712E+02 | 0.03637266E+02 | 0.01850910E-02 | -0.16761646E-05 | 3 | | | | | |
| 0.02387202E-07 | -0.08431442E-11 | 0.03606781E+05 | 0.13588605E+01 | | 4 | | | | | |
| H2O | 20387H | 2O | 1 | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | | 1 |
| 0.02672145E+02 | 0.03056293E-01 | -0.08730260E-05 | 0.12009964E-09 | -0.06391618E-13 | 2 | | | | | |
| -0.02989921E+06 | 0.06862817E+02 | 0.03386842E+02 | 0.03474982E-01 | -0.06354696E-04 | 3 | | | | | |
| 0.06968581E-07 | -0.02506588E-10 | -0.03020811E+06 | 0.02590232E+02 | | 4 | | | | | |
| C2 | 121286C | 2 | | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | | 1 |
| 0.04135978E+02 | 0.06531618E-03 | 0.01837099E-05 | -0.05295085E-09 | 0.04712137E-13 | 2 | | | | | |
| 0.09967272E+06 | 0.07472923E+01 | 0.06996045E+02 | -0.07400601E-01 | 0.03234703E-04 | 3 | | | | | |
| 0.04802535E-07 | -0.03295917E-10 | 0.09897487E+06 | -0.13862268E+02 | | 4 | | | | | |
| C2H | 83194H | 1C | 2 | 0 | OG | 300.000 | 4000.000 | 1400.00 | 0 | 1 |
| 0.52086663E+01 | 0.12875765E-02 | -0.10398387E-06 | -0.67526325E-10 | 0.11751871E-13 | 2 | | | | | |
| 0.64697773E+05 | -0.53721781E+01 | 0.39396334E+01 | 0.32114412E-02 | -0.39412765E-06 | 3 | | | | | |
| -0.74782530E-09 | 0.27493521E-12 | 0.65224684E+05 | 0.17814000E+01 | | 4 | | | | | |
| C2H2 | 121386C | 2H | 2 | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | | 1 |
| 0.04436770E+02 | 0.05376039E-01 | -0.01912816E-04 | 0.03286379E-08 | -0.02156709E-12 | 2 | | | | | |
| 0.02566766E+06 | -0.02800338E+02 | 0.02013562E+02 | 0.15190446E-01 | -0.16163189E-04 | 3 | | | | | |
| 0.09078992E-07 | -0.01912746E-10 | 0.02612444E+06 | 0.08805378E+02 | | 4 | | | | | |
| C2H3 | 83194H | 3C | 2 | 0 | OG | 300.000 | 4000.000 | 1400.00 | 0 | 1 |
| 0.71861677E+01 | 0.34552682E-02 | -0.29435373E-06 | -0.20681942E-09 | 0.36797774E-13 | 2 | | | | | |
| 0.32229627E+05 | -0.15977573E+02 | 0.24955740E+01 | 0.10269993E-01 | -0.10226917E-05 | 3 | | | | | |
| -0.27594382E-08 | 0.96919825E-12 | 0.34232813E+05 | 0.10614626E+02 | | 4 | | | | | |
| CO | 121286C | 1O | 1 | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | | 1 |
| 0.03025078E+02 | 0.14426885E-02 | -0.05630827E-05 | 0.10185813E-09 | -0.06910951E-13 | 2 | | | | | |
| -0.14268350E+05 | 0.06108217E+02 | 0.03262451E+02 | 0.15119409E-02 | -0.03881755E-04 | 3 | | | | | |
| 0.05581944E-07 | -0.02474951E-10 | -0.14310539E+05 | 0.04848897E+02 | | 4 | | | | | |
| C2H4 | 121286C | 2H | 4 | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | | 1 |
| 0.03528418E+02 | 0.11485185E-01 | -0.04418385E-04 | 0.07844600E-08 | -0.05266848E-12 | 2 | | | | | |
| 0.04428288E+05 | 0.02230389E+02 | -0.08614880E+01 | 0.02796162E+00 | -0.03388677E-03 | 3 | | | | | |
| 0.02785152E-06 | -0.09737879E-10 | 0.05573046E+05 | 0.02421148E+03 | | 4 | | | | | |
| HCO | 121286H | 1C | 1O | 1 | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | | 1 |
| 0.03557271E+02 | 0.03345572E-01 | -0.13350060E-05 | 0.02470572E-08 | -0.01713850E-12 | 2 | | | | | |
| 0.03916324E+05 | 0.05552299E+02 | 0.02898329E+02 | 0.06199146E-01 | -0.09623084E-04 | 3 | | | | | |
| 0.10898249E-07 | -0.04574885E-10 | 0.04159922E+05 | 0.08983614E+02 | | 4 | | | | | |
| N2 | 121286N | 2 | | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | | 1 |
| 0.02926640E+02 | 0.14879768E-02 | -0.05684760E-05 | 0.10097038E-09 | -0.06753351E-13 | 2 | | | | | |
| -0.09227977E+04 | 0.05980528E+02 | 0.03298677E+02 | 0.14082404E-02 | -0.03963222E-04 | 3 | | | | | |
| 0.05641515E-07 | -0.02444854E-10 | -0.10208999E+04 | 0.03950372E+02 | | 4 | | | | | |
| C2H5 | 83194H | 5C | 2 | 0 | OG | 300.000 | 4000.000 | 1400.00 | 0 | 1 |
| 0.87349157E+01 | 0.54537677E-02 | -0.37647177E-06 | -0.31297920E-09 | 0.52844000E-13 | 2 | | | | | |
| 0.10265269E+05 | -0.23104086E+02 | 0.24398923E+01 | 0.13747212E-01 | -0.85500653E-06 | 3 | | | | | |
| -0.31469924E-08 | 0.93754355E-12 | 0.13158588E+05 | 0.13099146E+02 | | 4 | | | | | |
| CH2O | 121286C | 1H | 2O | 1 | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | | 1 |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | | | | | | |
|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|---------|---------|---------|---------|---|
| 0.02995606E+02 | 0.06681321E-01 | -0.02628954E-04 | 0.04737153E-08 | -0.03212517E-12 | 2 | | | | |
| -0.15320369E+05 | 0.06912572E+02 | 0.16527311E+01 | 0.12631439E-01 | -0.01888168E-03 | 3 | | | | |
| 0.02050031E-06 | -0.08413237E-10 | -0.14865404E+05 | 0.13784820E+02 | | 4 | | | | |
| C2H6 | 121686C | 2H | 6 | G | 0300.00 | 4000.00 | 1000.00 | 1 | |
| 0.04825938E+02 | 0.13840429E-01 | -0.04557258E-04 | 0.06724967E-08 | -0.03598161E-12 | 2 | | | | |
| -0.12717793E+05 | -0.05239506E+02 | 0.14625388E+01 | 0.15494667E-01 | 0.05780507E-04 | 3 | | | | |
| -0.12578319E-07 | 0.04586267E-10 | -0.11239176E+05 | 0.14432295E+02 | | 4 | | | | |
| CH2OH | 120186H | 3C | 1O | 1 | G | 0250.00 | 4000.00 | 1000.00 | 1 |
| 0.06327520E+02 | 0.03608270E-01 | -0.03201547E-05 | -0.01938750E-08 | 0.03509704E-12 | 2 | | | | |
| -0.04474509E+05 | -0.08329365E+02 | 0.02862628E+02 | 0.10015273E-01 | -0.05285435E-05 | 3 | | | | |
| -0.05138539E-07 | 0.02246041E-10 | -0.03349678E+05 | 0.10397938E+02 | | 4 | | | | |
| CH3O | 121686C | 1H | 3O | 1 | G | 0300.00 | 3000.00 | 1000.00 | 1 |
| 0.03770799E+02 | 0.07871497E-01 | -0.02656384E-04 | 0.03944431E-08 | -0.02112616E-12 | 2 | | | | |
| 0.12783252E+03 | 0.02929575E+02 | 0.02106204E+02 | 0.07216595E-01 | 0.05338472E-04 | 3 | | | | |
| -0.07377636E-07 | 0.02075610E-10 | 0.09786011E+04 | 0.13152177E+02 | | 4 | | | | |
| O2 | 121386O | 2 | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 | |
| 0.03697578E+02 | 0.06135197E-02 | -0.12588420E-06 | 0.01775281E-09 | -0.11364354E-14 | 2 | | | | |
| -0.12339301E+04 | 0.03189165E+02 | 0.03212936E+02 | 0.11274864E-02 | -0.05756150E-05 | 3 | | | | |
| 0.13138773E-08 | -0.08768554E-11 | -0.10052490E+04 | 0.06034737E+02 | | 4 | | | | |
| CH3OH | 121686C | 1H | 4O | 1 | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 |
| 0.04029061E+02 | 0.09376593E-01 | -0.03050254E-04 | 0.04358793E-08 | -0.02224723E-12 | 2 | | | | |
| -0.02615791E+06 | 0.02378195E+02 | 0.02660115E+02 | 0.07341508E-01 | 0.07170050E-04 | 3 | | | | |
| -0.08793194E-07 | 0.02390570E-10 | -0.02535348E+06 | 0.11232631E+02 | | 4 | | | | |
| HO2 | 20387H | 1O | 2 | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 |
| 0.04072191E+02 | 0.02131296E-01 | -0.05308145E-05 | 0.06112269E-09 | -0.02841164E-13 | 2 | | | | |
| -0.15797270E+03 | 0.03476029E+02 | 0.02979963E+02 | 0.04996697E-01 | -0.03790997E-04 | 3 | | | | |
| 0.02354192E-07 | -0.08089024E-11 | 0.01762273E+04 | 0.09222724E+02 | | 4 | | | | |
| H2O2 | 120186H | 2O | 2 | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 |
| 0.04573167E+02 | 0.04336136E-01 | -0.14746888E-05 | 0.02348903E-08 | -0.14316536E-13 | 2 | | | | |
| -0.01800696E+06 | 0.05011369E+01 | 0.03388753E+02 | 0.06569226E-01 | -0.14850125E-06 | 3 | | | | |
| -0.04625805E-07 | 0.02471514E-10 | -0.01766314E+06 | 0.06785363E+02 | | 4 | | | | |
| C3H2 | 102193H | 2C | 3 | | G | 0150.00 | 4000.00 | 1000.00 | 1 |
| 0.07670981E+02 | 0.02748749E-01 | -0.04370942E-05 | -0.06455599E-09 | 0.16638874E-13 | 2 | | | | |
| 0.06259722E+06 | -0.12368903E+02 | 0.03166713E+02 | 0.02482571E+00 | -0.04591637E-03 | 3 | | | | |
| 0.04268019E-06 | -0.14821524E-10 | 0.06350421E+06 | 0.08869446E+02 | | 4 | | | | |
| H2CCCH | 032599C | 3H | 3 | | G | 0300.00 | 4000.00 | 1000.00 | 1 |
| 0.08831047E+02 | 0.04357194E-01 | -0.04109066E-05 | -0.02368723E-08 | 0.04376520E-12 | 2 | | | | |
| 0.39983875E+05 | -0.22559194E+02 | 0.04754199E+02 | 0.11080277E-01 | 0.02793323E-05 | 3 | | | | |
| -0.05479212E-07 | 0.01949629E-10 | 0.41398515E+05 | -1.94548824E-01 | | 4 | | | | |
| AR | 120186AR | 1 | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 | |
| 0.02500000E+02 | 0.00000000E+00 | 0.00000000E+00 | 0.00000000E+00 | 0.00000000E+00 | 2 | | | | |
| -0.07453750E+04 | 0.04366000E+02 | 0.02500000E+02 | 0.00000000E+00 | 0.00000000E+00 | 3 | | | | |
| 0.00000000E+00 | 0.00000000E+00 | -0.07453750E+04 | 0.04366000E+02 | | 4 | | | | |
| C2O | 121286C | 2O | 1 | | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 |
| 0.04849809E+02 | 0.02947585E-01 | -0.10907286E-05 | 0.01792562E-08 | -0.11157585E-13 | 2 | | | | |
| 0.03282055E+06 | -0.06453225E+01 | 0.03368850E+02 | 0.08241803E-01 | -0.08765145E-04 | 3 | | | | |
| 0.05569262E-07 | -0.15400086E-11 | 0.03317081E+06 | 0.06713314E+02 | | 4 | | | | |
| C3H4 | 101993H | 4C | 3 | | G | 0300.00 | 4000.00 | 1400.00 | 1 |
| 0.09776256E+02 | 0.05302137E-01 | -0.03701117E-05 | -0.03026385E-08 | 0.05089581E-12 | 2 | | | | |
| 0.01954972E+06 | -0.03077061E+03 | 0.02539830E+02 | 0.16334371E-01 | -0.01764950E-04 | 3 | | | | |
| -0.04647365E-07 | 0.01729130E-10 | 0.02251242E+06 | 0.09935702E+02 | | 4 | | | | |
| C3H4P | 101993H | 4C | 3 | | G | 0300.00 | 4000.00 | 1400.00 | 1 |
| 0.09768102E+02 | 0.05219151E-01 | -0.03753140E-05 | -0.02992191E-08 | 0.05107878E-12 | 2 | | | | |
| 0.01860277E+06 | -0.03020678E+03 | 0.03029730E+02 | 0.14989613E-01 | -0.13985000E-05 | 3 | | | | |
| -0.03969619E-07 | 0.13882165E-11 | 0.02148408E+06 | 0.08004594E+02 | | 4 | | | | |
| HCCO | 32387H | 1C | 2O | 1 | G | 0300.00 | 4000.00 | 1000.00 | 1 |
| 0.06758073E+02 | 0.02000400E-01 | -0.02027607E-05 | -0.10411318E-09 | 0.01965164E-12 | 2 | | | | |
| 0.01901513E+06 | -0.09071262E+02 | 0.05047965E+02 | 0.04453478E-01 | 0.02268282E-05 | 3 | | | | |
| -0.14820945E-08 | 0.02250741E-11 | 0.01965891E+06 | 0.04818439E+01 | | 4 | | | | |
| CH2CHCH2 | 82489C | 3H | 5 | | G | 0300.00 | 4000.00 | 1000.00 | 1 |
| 0.09651539E+02 | 0.08075596E-01 | -0.07965424E-05 | -0.04650696E-08 | 0.08603281E-12 | 2 | | | | |
| 0.15300955E+05 | -0.02686773E+03 | 0.02276486E+02 | 0.01985564E+00 | 0.11238421E-05 | 3 | | | | |
| -0.10145757E-07 | 0.03441342E-10 | 0.01789496E+06 | 0.13725151E+02 | | 4 | | | | |
| CH3CCH2 | 82489C | 3H | 5 | | G | 0300.00 | 4000.00 | 1000.00 | 1 |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | | | | | | | |
|------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|----------------|----------------|----------|----------|-----|
| 0.09101018E+02 | 0.07964167E-01 | -0.07884945E-05 | -0.04562036E-08 | 0.08529212E-12 | 2 | | | | | |
| 0.02670680E+06 | -0.02150559E+03 | 0.03385811E+02 | 0.14045337E-01 | 0.03204127E-04 | 3 | | | | | |
| -0.03824120E-07 | -0.09053742E-11 | 0.02909066E+06 | 0.11266487E+02 | | 4 | | | | | |
| CH3CHCH | 82489C | 3H | 5 | G | 0300.00 | 4000.00 | 1000.00 | 1 | | |
| 0.09209764E+02 | 0.07871412E-01 | -0.07724522E-05 | -0.04497357E-08 | 0.08377272E-12 | 2 | | | | | |
| 0.02853967E+06 | -0.02232369E+03 | 0.03161863E+02 | 0.15180997E-01 | 0.02722659E-04 | 3 | | | | | |
| -0.05177112E-07 | 0.05435286E-12 | 0.03095547E+06 | 0.11979733E+02 | | 4 | | | | | |
| CH2CO | 121686C | 2H | 2O | 1 | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 | |
| 0.06038817E+02 | 0.05804840E-01 | -0.01920953E-04 | 0.02794484E-08 | -0.14588676E-13 | 2 | | | | | |
| -0.08583402E+05 | -0.07657581E+02 | 0.02974970E+02 | 0.12118712E-01 | -0.02345045E-04 | 3 | | | | | |
| -0.06466685E-07 | 0.03905649E-10 | -0.07632636E+05 | 0.08673553E+02 | | 4 | | | | | |
| HCCOH | 32387H | 2C | 2O | 1 | G | 0300.00 | 4000.00 | 1000.00 | 1 | |
| 0.07328324E+02 | 0.03336416E-01 | -0.03024705E-05 | -0.01781106E-08 | 0.03245168E-12 | 2 | | | | | |
| 0.07598258E+05 | -0.14012140E+02 | 0.03899465E+02 | 0.09701075E-01 | -0.03119309E-05 | 3 | | | | | |
| -0.05537732E-07 | 0.02465732E-10 | 0.08701190E+05 | 0.04491874E+02 | | 4 | | | | | |
| C3H6 | 120186C | 3H | 6 | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 | | |
| 0.06732257E+02 | 0.14908336E-01 | -0.04949899E-04 | 0.07212022E-08 | -0.03766204E-12 | 2 | | | | | |
| -0.09235703E+04 | -0.13313348E+02 | 0.14933071E+01 | 0.02092517E+00 | 0.04486794E-04 | 3 | | | | | |
| -0.16689121E-07 | 0.07158146E-10 | 0.10748264E+04 | 0.16145340E+02 | | 4 | | | | | |
| C2H2OH HCCO TRAN | 121196H | 3C | 2O | 1 | OG | 300.000 | 3000.000 | 1000.000 | 0 1 | |
| 0.57206843E+01 | 0.10704185E-01 | -0.50358494E-05 | 0.11324499E-08 | -0.10086621E-12 | 2 | | | | | |
| 0.12849424E+05 | -0.47081776E+01 | 0.81498282E-01 | 0.31640644E-01 | -0.34085361E-04 | 3 | | | | | |
| 0.18978838E-07 | -0.41950165E-11 | 0.14060783E+05 | 0.22908977E+02 | | 4 | | | | | |
| CH2HCO | 110393O | 1H | 3C | 2 | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 | |
| 0.05975670E+02 | 0.08130591E-01 | -0.02743624E-04 | 0.04070304E-08 | -0.02176017E-12 | 2 | | | | | |
| 0.04903218E+04 | -0.05045251E+02 | 0.03409062E+02 | 0.10738574E-01 | 0.01891492E-04 | 3 | | | | | |
| -0.07158583E-07 | 0.02867385E-10 | 0.15214766E+04 | 0.09558290E+02 | | 4 | | | | | |
| CH3CO | 120186C | 2H | 3O | 1 | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 | |
| 0.05612279E+02 | 0.08449886E-01 | -0.02854147E-04 | 0.04238376E-08 | -0.02268403E-12 | 2 | | | | | |
| -0.05187863E+05 | -0.03274949E+02 | 0.03125278E+02 | 0.09778220E-01 | 0.04521448E-04 | 3 | | | | | |
| -0.09009462E-07 | 0.03193717E-10 | -0.04108507E+05 | 0.11228854E+02 | | 4 | | | | | |
| CO2 | 121286C | 1O | 2 | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 | | |
| 0.04453623E+02 | 0.03140168E-01 | -0.12784105E-05 | 0.02393996E-08 | -0.16690333E-13 | 2 | | | | | |
| -0.04896696E+06 | -0.09553959E+01 | 0.02275724E+02 | 0.09922072E-01 | -0.10409113E-04 | 3 | | | | | |
| 0.06866686E-07 | -0.02117280E-10 | -0.04837314E+06 | 0.10188488E+02 | | 4 | | | | | |
| CH3CHO | 120186C | 2O | 1H | 4 | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 | |
| 0.05868650E+02 | 0.10794241E-01 | -0.03645530E-04 | 0.05412912E-08 | -0.02896844E-12 | 2 | | | | | |
| -0.02264568E+06 | -0.06012946E+02 | 0.02505695E+02 | 0.13369907E-01 | 0.04671953E-04 | 3 | | | | | |
| -0.11281401E-07 | 0.04263566E-10 | -0.02124588E+06 | 0.13350887E+02 | | 4 | | | | | |
| CH3O2 | BUR95 | H | 3C | 1O | 2 | OG | 200.000 | 6000.000 | 1000.000 | 0 1 |
| 0.66812963E | 01 | 0.80057271E-02 | -0.27188507E-05 | 0.40631365E-09 | -0.21927725E-13 | 2 | | | | |
| 0.52621851E | 03 | -0.99423847E | 01 | 0.20986490E | 01 | 0.15786357E-01 | 0.75683261E-07 | 3 | | |
| -0.11274587E-07 | 0.56665133E-11 | 0.20695879E | 04 | 0.15007068E | 02 | 0.33715510E+04 | 4 | | | |
| CH3OOH | BUR95 | H | 4C | 1O | 2 | 00G | 200.000 | 6000.000 | 1000.000 | 1 |
| 0.61600316E+01 | 0.10239957E-01 | -0.36101507E-05 | 0.57550301E-09 | -0.34178147E-13 | 2 | | | | | |
| -0.17654526E+05 | -0.61911544E+01 | 0.49652507E+01 | 0.92343510E-03 | 0.34455956E-04 | 3 | | | | | |
| -0.44469600E-07 | 0.17456120E-10 | -0.16726970E+05 | 0.29880275E+01 | -0.14980760E+05 | 4 | | | | | |
| C4H | 121686C | 4H | 1 | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 | | |
| 0.06242882E+02 | 0.06193682E-01 | -0.02085931E-04 | 0.03082203E-08 | -0.16364826E-13 | 2 | | | | | |
| 0.07568019E+06 | -0.07210806E+02 | 0.05023247E+02 | 0.07092375E-01 | -0.06073762E-07 | 3 | | | | | |
| -0.02275752E-07 | 0.08086994E-11 | 0.07623812E+06 | -0.06942594E+00 | | 4 | | | | | |
| C4H2 | 121686C | 4H | 2 | G | 0300.00 | 5000.00 | 1000.00 | 1 | | |
| 0.09031407E+02 | 0.06047252E-01 | -0.01948788E-04 | 0.02754863E-08 | -0.13856080E-13 | 2 | | | | | |
| 0.05294735E+06 | -0.02385067E+03 | 0.04005191E+02 | 0.01981000E+00 | -0.09865877E-04 | 3 | | | | | |
| -0.06635158E-07 | 0.06077413E-10 | 0.05424065E+06 | 0.01845736E+02 | | 4 | | | | | |
| H2CCCCH | 82489C | 4H | 3 | G | 0300.00 | 4000.00 | 1000.00 | 1 | | |
| 0.11314095E+02 | 0.05014414E-01 | -0.05350444E-05 | -0.02825309E-08 | 0.05403279E-12 | 2 | | | | | |
| 0.05181211E+06 | -0.03062434E+03 | 0.06545799E+02 | 0.12424768E-01 | 0.05603226E-05 | 3 | | | | | |
| -0.05631141E-07 | 0.16652183E-11 | 0.05352502E+06 | -0.04264082E+02 | | 4 | | | | | |
| HCCCHCH | 82489C | 4H | 3 | G | 0300.00 | 4000.00 | 1000.00 | 1 | | |
| 0.10752738E+02 | 0.05381153E-01 | -0.05549637E-05 | -0.03052266E-08 | 0.05761740E-12 | 2 | | | | | |
| 0.06121419E+06 | -0.02973025E+03 | 0.04153881E+02 | 0.01726287E+00 | -0.02389374E-05 | 3 | | | | | |
| -0.10187000E-07 | 0.04340504E-10 | 0.06338070E+06 | 0.06036506E+02 | | 4 | | | | | |
| CH2CHCCH | 82489C | 4H | 4 | G | 0300.00 | 4000.00 | 1000.00 | 1 | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | | |
|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------------------------------|-----|
| 0.10697773E+02 | 0.06982014E-01 | -0.06567747E-05 | -0.03884517E-08 | 0.07200946E-12 | 2 |
| 0.03034803E+06 | -0.03128430E+03 | 0.03233893E+02 | 0.01865634E+00 | 0.12703205E-05 | 3 |
| -0.09410096E-07 | 0.02956110E-10 | 0.03301097E+06 | 0.09922676E+02 | | 4 |
| CH2CHCCH2 | 82489C | 4H | 5 | G 0300.00 4000.00 1000.00 | 1 |
| 0.11997762E+02 | 0.07990580E-01 | -0.08098172E-05 | -0.04568733E-08 | 0.08636911E-12 | 2 |
| 0.03228493E+06 | -0.03528494E+03 | 0.03879443E+02 | 0.01997663E+00 | 0.01872777E-04 | 3 |
| -0.09306953E-07 | 0.02386116E-10 | 0.03526859E+06 | 0.09842152E+02 | | 4 |
| CH2CHCHCH | 82489C | 4H | 5 | G 0300.00 4000.00 1000.00 | 1 |
| 0.12865971E+02 | 0.07943369E-01 | -0.08626466E-05 | -0.04655635E-08 | 0.08951131E-12 | 2 |
| 0.03783552E+06 | -0.04182502E+03 | 0.02995240E+02 | 0.02288456E+00 | 0.01975471E-04 | 3 |
| -0.11482454E-07 | 0.03197823E-10 | 0.04142218E+06 | 0.12894539E+02 | | 4 |
| CH2CHCHCH2 | 120189C | 4H | 6 | G 0300.00 4000.00 1000.00 | 1 |
| 0.12544366E+02 | 0.09596525E-01 | -0.09187012E-05 | -0.05429640E-08 | 0.10053636E-12 | 2 |
| 0.08597330E+05 | -0.04217450E+03 | 0.01931624E+02 | 0.02479030E+00 | 0.03018071E-04 | 3 |
| -0.11546856E-07 | 0.02586623E-10 | 0.12554682E+05 | 0.01701999E+03 | | 4 |
| OCHCHO | 120596H | 2C | 20 | 2 OG 300.000 3000.000 1000.00 | 0 1 |
| 0.49087462E+01 | 0.13182673E-01 | -0.71416730E-05 | 0.18461316E-08 | -0.18525858E-12 | 2 |
| -0.27116386E+05 | 0.59148768E+00 | 0.25068862E+01 | 0.18899139E-01 | -0.10302623E-04 | 3 |
| 0.62607508E-09 | 0.88114253E-12 | -0.26427374E+05 | 0.13187043E+02 | | 4 |
| C5H2 | 20587C | 5H | 2 | G 0300.00 5000.00 1000.00 | 1 |
| 0.11329175E+02 | 0.07424056E-01 | -0.02628188E-04 | 0.04082541E-08 | -0.02301332E-12 | 2 |
| 0.07878706E+06 | -0.03617117E+03 | 0.03062321E+02 | 0.02709998E+00 | -0.10091697E-04 | 3 |
| -0.12727451E-07 | 0.09167219E-10 | 0.08114969E+06 | 0.07071078E+02 | | 4 |
| H2CCCCCH | 101993H | 3C | 5 | G 0300.00 4000.00 1400.00 | 1 |
| 0.14407361E+02 | 0.04424058E-01 | -0.03618244E-05 | -0.02456408E-08 | 0.04327859E-12 | 2 |
| 0.05896103E+06 | -0.04775144E+03 | 0.07441420E+02 | 0.15851654E-01 | -0.02219895E-04 | 3 |
| -0.04928037E-07 | 0.01984559E-10 | 0.06162266E+06 | -0.09047891E+02 | | 4 |
| HCCCHCCH | 101993H | 3C | 5 | G 0300.00 4000.00 1400.00 | 1 |
| 0.14122474E+02 | 0.04593411E-01 | -0.03738175E-05 | -0.02574328E-08 | 0.04539160E-12 | 2 |
| 0.06249257E+06 | -0.04722335E+03 | 0.06854796E+02 | 0.01699404E+00 | -0.02582284E-04 | 3 |
| -0.05488764E-07 | 0.02281480E-10 | 0.06515364E+06 | -0.07133854E+02 | | 4 |
| C5H5 | 101993H | 5C | 5 | G 0300.00 4000.00 1400.00 | 1 |
| 0.15310937E+02 | 0.07473806E-01 | -0.05837457E-05 | -0.04386651E-08 | 0.07696839E-12 | 2 |
| 0.02525889E+06 | -0.05951593E+03 | 0.10073161E+01 | 0.03189880E+00 | -0.04748189E-04 | 3 |
| -0.11023903E-07 | 0.04584680E-10 | 0.03047390E+06 | 0.01934167E+03 | | 4 |
| H2C4O | 120189H | 2C | 40 | 1 G 0300.00 4000.00 1000.00 | 1 |
| 0.10268878E+02 | 0.04896164E-01 | -0.04885080E-05 | -0.02708566E-08 | 0.05107013E-12 | 2 |
| 0.02346902E+06 | -0.02815985E+03 | 0.04810971E+02 | 0.13139988E-01 | 0.09865073E-05 | 3 |
| -0.06120720E-07 | 0.16400028E-11 | 0.02545803E+06 | 0.02113424E+02 | | 4 |
| C6H2 | 121686C | 6H | 2 | G 0300.00 5000.00 1000.00 | 1 |
| 0.12756519E+02 | 0.08034381E-01 | -0.02618215E-04 | 0.03725060E-08 | -0.01878850E-12 | 2 |
| 0.08075469E+06 | -0.04041262E+03 | 0.05751085E+02 | 0.02636719E+00 | -0.11667596E-04 | 3 |
| -0.10714498E-07 | 0.08790297E-10 | 0.08262012E+06 | -0.04335532E+02 | | 4 |
| C6H4 | 111293H | 4C | 6 | G 0300.00 4000.00 1000.00 | 1 |
| 0.14016253E+02 | 0.08242769E-01 | -0.08099663E-05 | -0.04654132E-08 | 0.08748122E-12 | 2 |
| 0.04410395E+06 | -0.05139376E+03 | 0.15200236E+01 | 0.02876611E+00 | 0.14177245E-05 | 3 |
| -0.16505889E-07 | 0.05873156E-10 | 0.04844894E+06 | 0.01719033E+03 | | 4 |
| C6H5 | 82489C | 6H | 5 | G 0300.00 4000.00 1000.00 | 1 |
| 0.15775887E+02 | 0.09651109E-01 | -0.09429416E-05 | -0.05469111E-08 | 0.10265216E-12 | 2 |
| 0.03302698E+06 | -0.06176280E+03 | 0.11435567E+00 | 0.03627324E+00 | 0.11582856E-05 | 3 |
| -0.02196964E-06 | 0.08463556E-10 | 0.03836054E+06 | 0.02380117E+03 | | 4 |
| C6H6 | 20387C | 6H | 6 | G 0300.00 5000.00 1000.00 | 1 |
| 0.12910740E+02 | 0.01723296E+00 | -0.05024210E-04 | 0.05893497E-08 | -0.01947521E-12 | 2 |
| 0.03664511E+05 | -0.05002699E+03 | -0.03138012E+02 | 0.04723103E+00 | -0.02962207E-04 | 3 |
| -0.03262819E-06 | 0.01718691E-09 | 0.08890031E+05 | 0.03657573E+03 | | 4 |
| CH3CN | 111596H | 3C | 2N | 1 OG 300.000 3000.000 1000.00 | 0 1 |
| 0.23924046E+01 | 0.15618873E-01 | -0.79120497E-05 | 0.19372333E-08 | -0.18611956E-12 | 2 |
| 0.84999377E+04 | 0.11145236E+02 | 0.25197531E+01 | 0.13567523E-01 | -0.25764077E-05 | 3 |
| -0.30893967E-08 | 0.14288692E-11 | 0.85533762E+04 | 0.10920868E+02 | | 4 |
| CH2CN | 111596H | 2C | 2N | 1 OG 300.000 3000.000 1000.00 | 0 1 |
| 0.46058146E+01 | 0.94485160E-02 | -0.47116329E-05 | 0.11389957E-08 | -0.10828942E-12 | 2 |
| 0.29171486E+05 | 0.10084415E+01 | 0.25296724E+01 | 0.18114138E-01 | -0.18960575E-04 | 3 |
| 0.11944583E-07 | -0.32544142E-11 | 0.29592293E+05 | 0.10993441E+02 | | 4 |
| HNO | pg9601H | 1N | 10 | 1 G 0300.00 5000.00 1000.00 | 1 |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

0.03615144E+02 0.03212486E-01-0.01260337E-04 0.02267298E-08-0.01536236E-12 2
0.11769108E+05 0.04810264E+02 0.02784403E+02 0.06609646E-01-0.09300223E-04 3
0.09437980E-07-0.03753146E-10 0.12025976E+05 0.09035629E+02 4
HCN 110193H 1C 1N 1 G 0300.00 4000.00 1000.00 1
0.03426457E+02 0.03924190E-01-0.01601138E-04 0.03161966E-08-0.02432850E-12 2
0.01485552E+06 0.03607795E+02 0.02417787E+02 0.09031856E-01-0.01107727E-03 3
0.07980141E-07-0.02311141E-10 0.01501044E+06 0.08222891E+02 4
HNCO 110193H 1C 1N 1O 1G 0300.00 4000.00 1400.00 1
0.06545307E+02 0.01965760E-01-0.01562664E-05-0.01074318E-08 0.01874680E-12 2
-0.01664773E+06-0.01003880E+03 0.03858467E+02 0.06390342E-01-0.09016628E-05 3
-0.01898224E-07 0.07651380E-11-0.01562343E+06 0.04882493E+02 4
HOCN 110193H 1C 1N 1O 1G 0300.00 4000.00 1400.00 1
0.06022112E+02 0.01929530E-01-0.01455029E-05-0.01045811E-08 0.01794814E-12 2
-0.04040321E+05-0.05866433E+02 0.03789424E+02 0.05387981E-01-0.06518270E-05 3
-0.01420164E-07 0.05367969E-11-0.03135335E+05 0.06667052E+02 4
NCO 110193C 1N 1O 1 G 0300.00 4000.00 1400.00 1
0.06072346E+02 0.09227829E-02-0.09845574E-06-0.04764123E-09 0.09090445E-13 2
0.01359820E+06-0.08507293E+02 0.03359593E+02 0.05393239E-01-0.08144585E-05 3
-0.01912868E-07 0.07836794E-11 0.01462809E+06 0.06549694E+02 4
NO* dummy O 1N 1 0 G 0300.00 4000.00 1400.00 1
0.06072346E+02 0.09227829E-02-0.09845574E-06-0.04764123E-09 0.09090445E-13 2
0.01359820E+06-0.08507293E+02 0.03359593E+02 0.05393239E-01-0.08144585E-05 3
-0.01912868E-07 0.07836794E-11 0.01462809E+06 0.06549694E+02 4
!
!VALORES TERMODINAMICOS DEL MECANISMO DE ETANOL
!
C2H5OH BUR 8/88C 2H 6O 1 G 200.000 6000.000 1000.00 1
0.65624365E+01 0.15204222E-01-0.53896795E-05 0.86225011E-09-0.51289787E-13 2
-0.31525621E+05-0.94730202E+01 0.48586957E+01-0.37401726E-02 0.69555378E-04 3
-0.88654796E-07 0.35168835E-10-0.29996132E+05 0.48018545E+01-0.28257829E+05 4
C2H4OH MARI99C 2H 5O 1 OG 200.000 4000.000 1000.00 1
0.74564000E+00 0.02930200E-00-2.18510000E-05 8.85746000E-09-1.38170000E-12 2
-0.54736000E+04 0.22235000E+02 0.74564000E+00 0.02930200E-00-2.18510000E-05 3
8.85746000E-09-1.38170000E-12-0.54736000E+04 0.22235000E+02 4
C2H5CHO BURC92C 3H 6O 1 OG 273.150 5000.000 1000.00 1
0.33137982E+01 0.26619606E-01-0.10475596E-04 0.18815334E-08-0.12761310E-12 2
-0.25459603E+05 0.96608447E+01 0.76044596E+01-0.86403564E-02 0.73930097E-04 3
-0.79687398E-07 0.28004927E-10-0.25489789E+05-0.67643691E+01-0.23097645E+05 4
C2H5CO BURC92C 3H 5O 1 OG 298.150 5000.000 1000.00 1
0.30445698E+01 0.23236429E-01-0.86317936E-05 0.14799550E-08-0.96860829E-13 2
-0.61787211E+04 0.13122302E+02 0.67368294E+01-0.26945299E-02 0.49927017E-04 3
-0.50025808E-07 0.15011503E-10-0.65703366E+04-0.23398732E+01-0.43321855E+04 4
HCOO BOZELLI C 1H 1O 2 OG 300.000 5000.000 1453.000 01
6.40920688E+00 3.28189026E-03-1.18710674E-06 1.91323635E-10-1.13932748E-14 2
-2.20542060E+04-1.04575060E+01 1.52482282E+00 1.26249843E-02-6.61406757E-06 3
7.72750880E-10 2.09088864E-13-2.02040511E+04 1.64205770E+01 4
!
!
CH3NO BUR0302 T12/92C 1H 3N 1O 1G 200.00 6000.00 1000. 1
!BURCAT
0.50677397E+01 0.93871079E-02-0.33958317E-05 0.55076729E-09-0.33095301E-13 2 !H298
= 18.88 kcal/mol
0.71852464E+04-0.10709779E+01 0.52463494E+01-0.68175691E-02 0.46713959E-04 3 !S298
= 62.33 cal/mol/K
-0.53482743E-07 0.19916692E-10 0.79241319E+04 0.18687355E+01 0.95017371E+04 4 !
!
!
END
!
!
REACTIONS
C2H3+O2=C2H2+HO2 1.34E6 1.61 -383.5 !
C2H4+O2=CH2HCO+OH 2.0E08 1.500 39000.000 !

```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

C2H4+O2=C2H3+HO2          4.2E13      0.00   57630.000 !
C2H2+O=HCCO+H             1.4E07      2.000   1900.000 !
H+C2H2 (+M)=C2H3 (+M)     3.64E10     1.09    2640 ! Marinov 1996
      xxxxxxxxxxxxxxxx
      LOW/2.254E40  -7.269  6577./
      TROE/0.5 675. 675./
      H2/2/ CO/2/ CO2/3/ H2O/5/
CH3+CH3 (+M)=C2H6 (+M)    2.1E16     -0.97   620. ! GRI2.11
      LOW /1.26E50  -9.67  6220/
      TROE/ 0.5325 151 1038 4970 /
      N2/1.43/ H2O/8.59/ H2/2/ CO/2/ CO2/3/
!#! H2O/8.59/ H2/2/ CO/2/ CO2/3/
CH3+H (+M)=CH4 (+M)      1.3E16      -0.63   383. ! GRI-MECH2.11
      LOW/1.75E33  -4.76  2440.0/
      TROE/0.783  74.0 2941.0 6964.0/
      H2/2.86/ H2O/8.57/ CH4/2.86/ CO/2.14/ CO2/2.86/ C2H6/4.29/ N2/1.43/
CH4+O2=CH3+HO2           0.790E+14   0.000   56000.000 ! SKINNER ET AL 1972
!CH4+O2=CH3+HO2         4.000E+13   0.000   57000.000 ! CEC 1994
CH4+H=CH3+H2             1.3E4       3.0    8040. !cec 92
CH4+OH=CH3+H2O           0.160E+07   2.100   2460.000 ! TULLY
CH4+O=CH3+OH             1.02E9      1.5     8604. !TSANG
CH4+HO2=CH3+H2O2        0.180E+12   0.000   18700.000 ! NBS
CH3+HO2=CH3O+OH         8.0E12     0.0 0.0 ! Jam&PG rbn (Troee unpub.)
CH3+O=CH2O+H             8.0E13     0.0 0.0 !GUTMAN
CH3+O2=CH3O+O           2.87E13     0.0    30481 !frenk JPC 1995
CH3+O2=CH2O+OH          1.85E12     0.0    20315 !Frenk jpc 1995
CH2OH+H=CH3+OH          0.100E+15   0.000   0.000 ! NBS 87
CH3O+H=CH3+OH           0.100E+15   0.000   0.000 ! EST JAM
CH3+OH=CH2+H2O          0.750E+07   2.000   5000.000 ! JAM
CH3+HCO=CH4+CO          1.2E14     0.0    0.0 ! NBS 86
CH3+H=CH2+H2            0.900E+14   0.000   15100.000 ! PG
CH3+OH (+M)=CH3OH (+M)   6.3E13     0.0 0.0 !GRI2.11
      LOW/1.89E38  -6.3   3100/
      TROE/0.2105 83.5 5398 8370/
      N2/1.43/ H2O/8.58/ CO2/3/ CO/2/ H2/2/
!#! H2O/8.58/ CO2/3/ CO/2/ H2/2/
!CH3OH+OH=CH2OH+H2O     5.30E4      2.53   960. ! NBS
!cojo la del mecanismo etanol
!CH3OH+OH=CH3O+H2O      1.32E4      2.53   960. !
!cojo la del mecanismo etanol
CH3OH+O=CH2OH+OH        3.88E5      2.5    3080. ! NBS
!CH3OH+H=CH2OH+H2      1.7E7       2.1    4868 ! NBS
!cojo la del mecanismo etanol
!CH3OH+H=CH3O+H2       4.24E6      2.1    4868 ! NBS
!cojo la del mecanismo etanol
!CH3OH+HO2=CH2OH+H2O2   9.64E10     0.0    12578. ! NBS
!cojo la del mecanismo etanol
CH2O+H (+M)=CH3O (+M)    5.4E11     0.454  2600. ! GRI2.11
      LOW/1.54E30  -4.8   5560 /
      TROE/ 0.758 94 1555 4200/
      N2/1.43/ H2O/8.58/ CO/2/ H2/2/ CO2/3/
!#! H2O/8.58/ CO/2/ H2/2/ CO2/3/
H+CH2O (+M)=CH2OH (+M)   5.4E11     0.454  3600. ! GRI2.11
      LOW/.91E32  -4.82  6530/
      TROE/0.7187 103 1291 4160/
      N2/1.43/ H2O/8.58/ CO/2/ CO2/3/ H2/2/
!#! H2O/8.58/ CO/2/ CO2/3/ H2/2/
CH3O+H=CH2O+H2          0.200E+14   0.000   0.000 ! PG
!CH2OH+H=CH2O+H2        0.200E+14   0.000   0.000
!cojo la del mecanismo etanol
CH3O+OH=CH2O+H2O        0.100E+14   0.000   0.000 ! PG
CH2OH+OH=CH2O+H2O       0.100E+14   0.000   0.000
CH3O+O=CH2O+OH          0.100E+14   0.000   0.000 ! PG
!CH2OH+O=CH2O+OH        0.100E+14   0.000   0.000

```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

!cojo la del mecanismo etanol

| | | | | | |
|---|-----------|--------|-----------|---|--------------------------------|
| CH3O+O2=CH2O+HO2 | 0.630E+11 | 0.000 | 2600.000 | ! | PG |
| CH2OH+O2=CH2O+HO2 | 1.57E15 | -1.0 | 0.0 | ! | EURCOM 1992 |
| DUP | | | | | |
| CH2OH+O2=CH2O+HO2 | 7.23E13 | 0.0 | 3577. | ! | |
| DUP | | | | | |
| CH2+H=CH+H2 | 0.100E+19 | -1.560 | 0.000 | ! | THORNE,ET AL |
| CH2+OH=CH+H2O | 0.113E+08 | 2.000 | 3000.000 | ! | JAM |
| CH2+OH=CH2O+H | 0.250E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | PG |
| CH+O2=HCO+O | 0.330E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | PG |
| CH+O=CO+H | 0.570E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | PG |
| CH+OH=HCO+H | 0.300E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | PG |
| CH+CO2=HCO+CO | 0.340E+13 | 0.000 | 690.000 | ! | PG |
| CH+H2O=CH2O+H | 5.72E12 | 0.0 | -751.0 | ! | LIN |
| CH+CH2O=CH2CO+H | 0.946E+14 | 0.000 | -515.000 | ! | THORNE |
| CH+C2H2=C3H2+H | 0.100E+15 | 0.000 | 0.000 | ! | THORNE |
| CH+CH2=C2H2+H | 0.400E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | PG |
| CH+CH3=C2H3+H | 0.300E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | PG |
| CH+CH4=C2H4+H | 0.600E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | PG |
| CH2+CO2=CH2O+CO | 0.110E+12 | 0.000 | 1000.000 | ! | PG |
| CH2+O=CO+H+H | 0.500E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | JAM 2/87 |
| CH2+O=CO+H2 | 0.300E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | JAM 2/87 |
| CH2+O2=CO+H2O | 2.20E22 | -3.3 | 2867. | ! | DOMBROWSKY (HGGW) BER.BUN.1992 |
| CH2+O2=CO2+H+H | 3.29E21 | -3.3 | 2867. | ! | |
| CH2+O2=CH2O+O | 3.29E21 | -3.3 | 2867. | ! | |
| CH2+O2=CO2+H2 | 2.63E21 | -3.3 | 2867. | ! | |
| CH2+O2=CO+OH+H | 1.64E21 | -3.3 | 2867. | ! | |
| CH2+CH2=C2H2+H+H | 0.400E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | BRAUN,ET AL |
| CH2+HCCO=C2H3+CO | 0.300E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | JAM,1/11/82 |
| CH2+C2H2=H2CCCH+H | 0.120E+14 | 0.000 | 6600.000 | ! | BOHLAND ET AL,21S |
| CH2+CH4=CH3+CH3 | 4.3E12 | 0.0 | 10030. | ! | PG 86 |
| CH2O+OH=HCO+H2O | 0.343E+10 | 1.180 | -447.000 | ! | NBS |
| CH2O+H=HCO+H2 | 1.3E8 | 1.62 | 2166. | ! | CEC 94 |
| CH2O+M=HCO+H+M | 0.331E+17 | 0.000 | 81000.000 | ! | DEAN,C 1980 |
| H2/2/ CO/2/ CO2/3/ H2O/5/ | | | | | |
| CH2O+O=HCO+OH | 0.180E+14 | 0.000 | 3080.000 | ! | NBS |
| CH2O+CH3=HCO+CH4 | 7.8E-8 | 6.1 | 1967. | ! | CEC 1994 |
| CH2O+HO2=HCO+H2O2 | 3.0E12 | 0.0 | 13000. | ! | CEC 1994 |
| CH2O+O2=HCO+HO2 | 6.0E13 | 0.0 | 40660 | ! | CEC 94 |
| HCO+OH=H2O+CO | 0.100E+15 | 0.000 | 0.000 | ! | TEMPS |
| HCO+M=H+CO+M | 3.48E17 | -1.0 | 17010.0 | ! | Timoen et al 1987 |
| CO/1.87/ H2/1.87/ CH4/2.81/ CO2/3./ H2O/5./ | | | | | |
| HCO+H=CO+H2 | 0.119E+14 | 0.250 | 0.000 | ! | HARD.. 21ST, JAM |
| HCO+O=CO+OH | 0.300E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | PG |
| HCO+O=CO2+H | 0.300E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | PG |
| HCO+O2=HO2+CO | 7.58E12 | 0.0 | 406. | ! | TIMONEN (GUTMAN) JPC 1988 |
| CO+O+M=CO2+M | 0.617E+15 | 0.000 | 3000.000 | ! | NBS |
| H2/2/ CO/2/ CO2/3/ H2O/16/ | | | | | |
| CO+OH=CO2+H | 1.51E7 | 1.3 | -758 | ! | BAULCH&DRYSDALE |
| CO+O2=CO2+O | 2.53E12 | 0.0 | 47688. | ! | TSANG,BAULCH |
| !HO2+CO=CO2+OH | 0.580E+14 | 0.000 | 22934.000 | ! | ATRI ET AL ,C 197 |
| HO2+CO=CO2+OH | 1.570E5 | 2.18 | 17900.000 | ! | YOU/WANG,2007 |
| C2H4+H=C2H3+H2 | 5.42E14 | 0.0 | 14902 | ! | EURCOM 1992 |
| C2H4+O=CH3+HCO | 8.1E6 | 1.88 | 180. | ! | CEC 94 |
| C2H4+O=CH2CO+H2 | 6.8E5 | 1.88 | 180 | ! | |
| C2H4+OH=C2H3+H2O | 0.202E+14 | 0.000 | 5955.000 | ! | TULLY 1987 |
| C2H4+CH3=C2H3+CH4 | 5.0E11 | 0.0 | 15000 | ! | JAM&Pg rbn (Zhang 1990) |
| CH2+CH3=C2H4+H | 0.400E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | JAM |
| C2H4+H (+M)=C2H5 (+M) | 1.081E12 | 0.454 | 1822. | ! | MARINOV |
| LOW/1.112E34 -5.0 4448.0/ | | | | | |
| TROE/0.5 95.0 95.0 200./ | | | | | |
| H2/2/ CO/2/ CO2/3/ H2O/5/ | | | | | |
| C2H3+H=C2H2+H2 | 0.400E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | HOYERMANN |
| C2H3+O=CH2CO+H | 0.300E+14 | 0.000 | 0.000 | ! | HOYERMANN 21ST |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

C2H3+O2=CH2O+HCO          4.58E16   -1.39   1015 ! Mebel,et al.
C2H3+OH=C2H2+H2O           2.0E13    0.0    0.0  ! JAM
C2H3+C2H=C2H2+C2H2         0.300E+14 0.000   0.000 ! MMSK
C2H3+CH3=C2H2+CH4           2.1E13    0.0    0.0  ! NBS, Fahr 91(rbn PG)
C2H3+CH2O=C2H4+HCO          5.4E3     2.81   5860 ! NBS 86
C2H3+HCO=C2H4+CO            9.0E13    0.0    0.0  ! NBS 86
C2H3+C2H3=H2CCCH+CH3        1.8E13    0.0    0.0  ! CJP 091699 adj
C2H3+C2H3=C2H4+C2H2         6.3E13    0.0    0.0  ! CJP 091699 adj
C2H3+CH=CH2+C2H2           0.500E+14 0.000   0.000 ! JAM
OH+C2H2=C2H+H2O             3.37E7    2.0    14000. ! MILLER
OH+C2H2=HCCOH+H             5.04E5    2.3    13500. ! MILLER
OH+C2H2=CH2CO+H             2.18E-4   4.5    -1000. ! MILLER
OH+C2H2=CH3+CO              4.83E-4   4.0    -2000. ! MILLER
!OH+C2H2 (+M)=C2H2OH (+M)    1.52E8    1.7    1000. ! MILLER&MELIUS!
!
!   LOW/1.81E23  -2.0   0.0 /
!   H2/2/  CO/2/   CO2/3/  H2O/5/
!   HO2+C2H2=CH2HCO+O          1.0E12   0.0   10000 ! JAM          xxxxxxxx
!   HO2+C2H2=CH2O+HCO          1.0E12   0.00  10000 ! JAM          xxxxxxxx
! last 2 k's crudely based on calculations of Mebel,Morokuma,Lin,et al (C2H3+O2)
HCCOH+H=HCCO +H2            3.0E7    2.0    1000. ! JAM
HCCOH+OH=HCCO+H2O           1.0E7    2.0    1000. !JAM
HCCOH+O=HCCO+OH              2.0E7    3.0    1900. !JAM(O+C2H2)
C2H2+O=C2H+OH                0.316E+16 -0.600  15000.000 !MMSK
C2H2OH+O=OCHCHO+H            5.0E13   0.0    0.0  ! JAM 1996
C2H2OH+O2=OCHCHO+OH          1.0E12   0.0    5000. ! JAM 1996
OCHCHO+M=HCO+HCO+M           1.0E17    0.0   25000. ! JAM
      xxxxxxxxxxxxxx
OCHCHO+H=CH2O+HCO            3.0E13   0.0    0.0  !JAM
CH2CO+O=CO2+CH2              0.175E+13 0.000  1350.000 ! SEE WAGNER,TEMPS ET
CH2CO+H=CH3+CO               5.93E6    2.0    1300. ! CEC 92 / JAM
CH2CO+H=HCCO+H2              3.0E7     2.0   10000.000 ! JAM 1996
CH2CO+O=HCCO+OH              2.0E7     2.0   10000.000 !
CH2CO+OH=HCCO+H2O            1.0E7     2.0   3000.000 !
CH2CO+OH=CH2OH+CO            7.2E12    0.0    0.0  ! Temps,HggW,et al 1992
CH2CO+OH=CH3+CO2              3.0E12    0.0    0.0  ! Grussdorf 94 (PG rbn)
CH2+CO (+M)=CH2CO (+M)       8.1E11    0.5   4510. ! GRI2.11
  LOW/ 1.88E33  -5.11  7095./
  TROE/ 0.5907  275  1226  5185/
    H2/2/  CO/2/  CO2/3/  H2O/8.58/  N2/1.43/
C2H+O2=CO+CO+H                2.52E13   0.0    0.0  ! GLASS&CURL (STEPHENS) JPC1987
C2H+CH4=CH3+C2H2              7.23E12   0.0    976  ! Leone JPC 1996
CH+CO (+M)=HCCO (+M)           5.0E13   0.0    0.0  ! GRI2.11
  LOW/ 1.88E28  -3.74  1936 /
  TROE/ 0.5757  237  1652  5069 /
    N2/1.43/  H2O/8.58/  CO/2/  CO2/3/  H2/2/
!#!  H2O/8.58/  CO/2/  CO2/3/  H2/2/
HCCO+C2H2=H2CCCH+CO           1.0E11   0.0    3000. ! JAM
H+HCCO=CH2 (S)+CO              0.100E+15 0.000   0.000 ! PEETERS 1985
O+HCCO=H+CO+CO                 0.100E+15 0.000   0.000 ! PEETERS 1985
HCCO+O2=CO2+CO+H               1.4E7     1.7    1000. ! HGGW.Peeters,JAM
HCCO+O2=CO +CO +OH             2.88E7    1.7    1000. !
CH+HCCO=C2H2+CO                0.500E+14 0.000   0.000 ! JAM EST
HCCO+HCCO=C2H2+CO+CO           0.100E+14 0.000   0.000 ! MMSK
HCCO+OH=C2O+H2O                6.0E13    0.0    0.0  ! JAM
C2O+H=CH+CO                     1.0E13    0.0    0.0  ! JAM
C2O+O=CO+CO                     5.0E13    0.0    0.0  ! JAM
C2O+OH=CO+CO+H                 2.0E13    0.0    0.0  ! JAM
C2O+O2=CO+CO+O                 2.0E13   0.0    0.0  ! JAM
C2H+O=CH+CO                     0.500E+14 0.000   0.000 ! BROWNE
C2H+OH=HCCO+H                   0.200E+14 0.000   0.000 ! JAM,12/22
C2H+OH=C2+H2O                   4.0E7     2.0    8000. ! JAM
C2+H2=C2H+H                     4.0E5     2.4    1000. ! JAM
C2+O2=CO+CO                     5.0E13    0.0    0.0  ! JAM

```


ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

C2+OH=C2O+H          5.0E13   0.0   0.0   ! JAM
!C2H2+O2=HCCO+OH      0.200E+09  1.500  30100.000 ! MMSK
C2H2+O2=HCO+HCO       0.200E+09  1.500  30100.000 ! MMSK/Benson 1996
C2H2+M=C2H+H+M        9.08E30   -3.7  127138. !TSANG&HAMP (TAN&GARD)
    H2/2/ CO/2/ CO2/3/ H2O/5/
C2H4+M=C2H2+H2+M      3.50E+16  0.000  71500. ! CEC 94
    N2/1.5/ H2O/10/
!#!    H2O/10/
C2H3+H(+M)=C2H4(+M)   6.1E12   0.27  280.000 ! GRI2.11
    LOW /0.98E30 -3.86 3320./
    TROE /0.7820 207.50 2663.00 6095.00/
    H2/2.85/ CO/2.1/ CO2/2.85/ H2O/7.14/ CH4/2.85/ C2H6/4.29/ N2/1.43/
!
!
!
!REACCIONES MECANISMO REBURNING
!
!
!
! *****
! *    H2/O2 Subset                                *
! *****
!
O+OH=O2+H             2.0E14  -0.40    0
O+H2=OH+H             5.0E04   2.67   6290
OH+H2=H2O+H           2.1E08   1.52   3450
2OH=O+H2O             4.3E03   2.70  -2486
H+H+M=H2+M            1.0E18  -1.00    0
    H2O/0/
H+H+H2O=H2+H2O       6.0E19  -1.25    0
H+O+M=OH+M            6.2E16  -0.60    0
    H2O/5/
H+OH+M=H2O+M         1.6E22  -2.00    0
    H2O/5/
O+O+M=O2+M           1.9E13   0.00  -1788
    H2O/5/
!
H+O2+M=HO2+M         8E17   -0.80    0 ! (Dagaut 2009 E&F)
    H2O/20/ N2/0/ CO2/4/
!
H+O2+N2 = HO2+N2     6.7E19  -1.42    0 ! *
H+HO2=H2+O2          4.3E13   0.00  1411
H+HO2=2OH             1.7E14   0.00   874
H+HO2=O+H2O           3.0E13   0.0   1721
O+HO2=O2+OH           3.3E13   0.0    0
OH+HO2=H2O+O2         1.9E16  -1.0    0
HO2+HO2=H2O2+O2      4.2E14   0.0  11982
    DUP
HO2+HO2=H2O2+O2      1.3E11   0.0  -1629
    DUP
H2O2+M=OH+OH+M       1.3E17   0.0  45500
    H2O/5/
H2O2+H=HO2+H2        1.7E12   0.0   3755
H2O2+H=OH+H2O        1.0E13   0.0   3576
H2O2+O=OH+HO2        6.6E11   0.0   3974
H2O2+OH=H2O+HO2      7.8E12   0.0   1330
    DUP
H2O2+OH=H2O+HO2      5.8E14   0.0   9560 ! +
    DUP
! *****
! *    CH4/CH3/CH2/CH/C Subset                        *
! *****
!
CH2 (S) +H2=CH3+H     7.2E13   0.0    0 !
CH2 (S) +H2O=CH3+OH  3.0E15  -0.6    0 !

```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

CH2 (S) +N2=CH2+N2          1.3E13  0.0    430 !
CH2 (S) +AR=CH2+AR          1.5E13  0.0    884 !
CH2 (S) +H=CH2+H            2.0E14  0.0     0 !
CH2 (S) +H2O=CH2+H2O        3.0E13  0.0     0 !
CH2 (S) +H=CH+H2            3.0E13  0.0     0 !
CH2 (S) +O=CO+H+H           3.0E13  0.0     0 !
CH2 (S) +OH=CH2O+H          3.0E13  0.0     0 !
CH2 (S) +O2=CO+OH+H         7.0E13  0.0     0 !
CH2 (S) +CO2=CH2O+CO        3.0E12  0.0     0 !
CH2 (S) +CH4=CH3+CH3        4.3E13  0.0     0 !
CH2 (S) +CH3=C2H4+H         2.0E13  0.0     0 !
CH2 (S) +CH2CO=C2H4+CO      1.6E14  0.0     0 !
CH2 (S) +C2H6=CH3+C2H5      1.2E+14 0.0     0 !
CH+H=C+H2                   1.5E14  0.0     0 !
CH+OH=C+H2O                 4.0E7   2.0    3000 !
C+OH=CO+H                   5.0E13  0.00    0 !
C+O2=CO+O                   2.0E13  0.00    0 !
C+CH3=C2H2+H                5.0E13  0.00    0 !
C+CH2=C2H+H                 5.0E13  0.00    0 !
!
! *****
! *   CH3OH/CH2OH/CH2O subset *
! *****
CH2OH+O2=CH2O+HO2           1.6E15 -1.0     0 !
DUP
CH2OH+O2=CH2O+HO2           7.2E13  0.0    3577 !
DUP
!
! *****
! *   C2H6/C2H5/C2H4/C2H3/C2H2/C2H/C2 subset *
! *****
!
C2H6+H=C2H5+H2              5.4E02  3.50   5210 !
C2H6+O=C2H5+OH               3.0E07  2.00   5115 !
C2H6+OH=C2H5+H2O            7.2E6   2.0    864 !
C2H6+HO2 = C2H5+H2O2        1.3E13  0.00  20460 !
C2H6+O2=C2H5+HO2            5.0E13  0.0   55000 !
C2H6+CH3=C2H5+CH4           5.5E-1  4.00   8300 !
C2H5+H (+M) = C2H6 (+M)     5.2E17 -0.99  1580 !
  LOW / 2.0E41 -7.08 6685/
  TROE/ 0.8422 125 2219 6882 /
  N2/1.0/ H2O/6/ AR/0.7/
C2H5+H=CH3+CH3              4.9E12  0.35    0 !
C2H5+O = CH3+CH2O           4.2E13  0.00    0 !
C2H5+O = CH3CHO+H           5.3E13  0.00    0 !
C2H5+O = C2H4+OH            3.0E13  0.00    0 !
C2H5+OH = C2H4+H2O          2.4E13  0.00    0 !
C2H5+O2 = C2H4+HO2          1.0E10  0.00 -2190 !
C2H5+CH2O = C2H6+HCO        5.5E03  2.81   5860 !
C2H5+HCO = C2H6+CO          1.2E14  0.00    0 !
C2H5+CH3 = C2H4+CH4         1.1E12  0.00    0 !
C2H5+C2H5 = C2H6+C2H4       1.5E12  0.00    0 !
C2H4+O = CH2HCO+H           4.7E06  1.88    180 !
C2H4+HO2=CH3CHO+OH          2.2E12  0.0   17200 !
C2H3+O2 = CH2HCO+O          3.03E11 -0.29  10.73 !
H2+C2H=C2H2+H               4.1E05  2.39    864 !
C2H2+O=CH2+CO               6.1E6   2.00   1900 !
OH+C2H2 (+M)=C2H2OH (+M)    1.5E8   1.7   1000 !
  LOW/1.81E23 -2.0 0.0 /
  H2/2/ CO/2/ CO2/3/ H2O/5/
!HO2+C2H2=CH2HCO+O          1.0E12  0.0  10000 !
!HO2+C2H2=CH2O+HCO          1.0E12  0.0  10000 !
!
! *****

```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

! *   CH3CHO/CH2HCO/CH3CO/CH2CO/HCCOH/HCCO/C2O subset *
! *****
!
CH3CHO = CH3+HCO           7.1E15  0.00  81280 !
CH3CHO+H = CH3CO+H2       4.1E09  1.16   2400 !
CH3CHO+O = CH3CO+OH       5.8E12  0.00   1800 !
CH3CHO+OH=CH3CO+H2O      2.3E10  0.73  -1110 !
CH3CHO+HO2 = CH3CO+H2O2   3.0E12  0.00  12000 !
CH3CHO+O2 = CH3CO+HO2     3.0E13  0.00  39000 !
CH3CHO+CH3=CH3CO+CH4     2.0E-6  5.6    2464 !
CH2HCO=CH3+CO            1.0E13  0.0    42000 !
!CH2HCO+M=CH3+CO+M      2.0E16  0.0    42000 !
!   H2/2/ CO/2/ CO2/3/ H2O/5/
CH2HCO+H=CH3+HCO         1.0E14  0.0     0 !
CH2HCO+H=CH3CO+H         3.0E13  0.0     0 !
CH2HCO+O=CH2O + HCO      5.0E13  0.0     0 !
CH2HCO+OH=CH2CO+H2O     2.0E13  0.0     0 !
CH2HCO+OH=CH2OH+HCO     1.0E13  0.0     0 !
CH2HCO+O2 = CH2O+CO+OH   2.2E11  0.0   1500 !
CH2HCO+CH3=C2H5CHO       5.0E13  0.0     0 !
CH2HCO+CH2=C2H4+HCO     5.0E13  0.0     0 !
CH2HCO+CH =C2H3+HCO     1.0E14  0.0     0 !
C2H5+HCO = C2H5CHO       1.8E13  0.0     0 !
C2H5CHO+H = C2H5CO+H2    8.0E13  0.0     0 !
C2H5CHO+O = C2H5CO+OH    7.8E12  0.0   1730 !
C2H5CHO+OH = C2H5CO+H2O  1.2E13  0.0     0 !
C2H5+CO = C2H5CO         1.5E11  0.0   4800 !
C2H2OH+H=CH2HCO+H       5.0E13  0.0     0 !
CH3CO (+M)=CH3+CO (+M)   2.8E13  0.0  17100 !
  LOW/2.1E15  0.0 14000./
  TROE/ 0.5 1.0E-30 1.0E30 /
    H2/2/ CO/2/ CO2/3/ H2O/5/
CH3CO+H = CH3+HCO        2.1E13  0.00     0 !
CH3CO+H = CH2CO+H2       1.2E13  0.00     0 !
CH3CO+O = CH3+CO2        1.5E14  0.00     0 !
CH3CO+O = CH2CO+OH       4.0E13  0.00     0 !
CH3CO+OH = CH2CO+H2O     1.2E13  0.00     0 !
!
! *****
! *   H/N/O subset *
! *   taken from [nh2no2] except where noted *
! *****
!
H+NO+M=HNO+M             4.0E20 -1.75     0 ! a (GLA 1998, se ha quitado la
eficacia del tercer cuerpo para el N2 ya que se tiene en cuenta en la siguiente
reacción)
  H2O/10/ O2/1.5/ H2/2/ CO2/3/ N2/0/
H+NO+N2=HNO+N2          7.0E19 -1.50     0 !
NO+O+M=NO2+M            7.5E19 -1.41     0 !
  N2/1.7/ O2/1.5/ H2O/10/
!!!!OH+NO+M=HONO+M      5.1E23 -2.51   -68 !
!!!! H2O/5/
HO2+NO=NO2+OH           2.1E12  0.00   -479 !
NO2+H=NO+OH             8.4E13  0.0     0 !
NO2+O=NO+O2            3.9E12  0.0    -238 !
NO2+O (+M)=NO3 (+M)     1.3E13  0.0     0 !
  LOW/1.0E28 -4.08 2470./
  N2/1.5/ O2/1.5/ H2O/18.6/
NO2+NO2=NO+NO+O2       1.6E12  0.0   26123 !
NO2+NO2=NO3+NO         9.6E09  0.73  20900 !
NO3+H=NO2+OH           6.0E13  0.0     0 !
NO3+O=NO2+O2           1.0E13  0.0     0 !
NO3+OH=NO2+HO2         1.4E13  0.0     0 !
NO3+HO2=NO2+O2+OH     1.5E12  0.0     0 !

```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | | |
|---------------------------|---------|--------|-------|-------|---|
| NO3+NO2=NO+NO2+O2 | 5.0E10 | 0.0 | 2940 | ! | |
| HNO+H=H2+NO | 4.5E11 | 0.72 | 655 | ! | |
| HNO+O=NO+OH | 1.0E13 | 0.0 | 0 | ! | |
| HNO+OH=NO+H2O | 3.6E13 | 0.0 | 0 | ! | |
| !!!!!!!HNO+O2=HO2+NO | | 1.0E13 | 0.0 | 25000 | ! |
| HNO+NO2=HONO+NO | 6.0E11 | 0.0 | 2000 | ! | |
| HNO+HNO=N2O+H2O | 9.0E08 | 0.0 | 3100 | ! | |
| HNO+NH2=NH3+NO | 3.63E6 | 1.63 | -1252 | ! | |
| H2NO+M=HNO+H+M | 2.5E15 | 0.0 | 50000 | ! | |
| H2O/5/ N2/2/ | | | | | |
| H2NO+H=HNO+H2 | 3.0E7 | 2.0 | 2000 | ! | |
| H2NO+H=NH2+OH | 5.0E13 | 0.0 | 0 | ! | |
| H2NO+O=HNO+OH | 3.0E7 | 2.0 | 2000 | ! | |
| H2NO+O = NH2+O2 | 2.0E14 | 0 | 0 | ! | |
| H2NO+OH=HNO+H2O | 2.0E7 | 2.0 | 1000 | ! | |
| H2NO+NO=HNO+HNO | 2.0E04 | 2.0 | 13000 | ! | |
| H2NO+NO2=HNO+HONO | 6.0E11 | 0.0 | 2000 | ! | |
| HONO+H=H2+NO2 | 1.2E13 | 0.0 | 7352 | ! | |
| HONO+O=OH+NO2 | 1.2E13 | 0.0 | 5961 | ! | |
| HONO+OH=H2O+NO2 | 4.0E12 | 0.0 | 0 | ! | |
| NH3+M = NH2+H+M | 2.2E16 | 0 | 93470 | ! | |
| NH3+H=NH2+H2 | 6.4E05 | 2.39 | 10171 | ! | |
| NH3+O=NH2+OH | 9.4E06 | 1.94 | 6460 | ! | |
| NH3+OH=NH2+H2O | 2.0E06 | 2.04 | 566 | ! | |
| NH3+HO2=NH2+H2O2 | 3.0E11 | 0.0 | 22000 | ! | |
| NH2+H=NH+H2 | 4.0E13 | 0.00 | 3650 | ! | |
| NH2+O=HNO+H | 6.6E14 | -0.50 | 0 | ! | |
| NH2+O=NH+OH | 6.8E12 | 0. | 0 | ! | |
| NH2+OH=NH+H2O | 4.0E06 | 2. | 1000 | ! | |
| NH2+HO2=H2NO+OH | 5.0E13 | 0.0 | 0 | ! | |
| NH2+HO2=NH3+O2 | 1.0E13 | 0.0 | 0 | ! | |
| NH2+NO=NNH+OH | 8.9E12 | -0.35 | 0 | ! | |
| NH2+NO=N2+H2O | 1.3E16 | -1.25 | 0 | ! | |
| DUP | | | | | |
| NH2+NO=N2+H2O | -8.9E12 | -0.35 | 0 | ! | |
| DUP | | | | | |
| NH2+NO2=N2O+H2O | 3.2E18 | -2.2 | 0 | ! | |
| NH2+NO2=H2NO+NO | 3.5E12 | 0. | 0 | ! | |
| NH2+H2NO=NH3+HNO | 3.0E12 | 0.0 | 1000 | ! | |
| HONO+NH2=NO2+NH3 | 71.1 | 3.02 | -4941 | ! | |
| NH2+NH2=N2H2+H2 | 8.5E11 | 0. | 0 | ! | |
| NH2+NH=N2H2+H | 5.0E13 | 0. | 0 | ! | |
| NH2+N=N2+H+H | 7.2E13 | 0. | 0 | ! | |
| NH+H=N+H2 | 3.0E13 | 0. | 0 | | |
| NH+O=NO+H | 9.2E13 | 0. | 0 | | |
| NH+OH=HNO+H | 2.0E13 | 0. | 0 | | |
| NH+OH=N+H2O | 5.0E11 | 0.50 | 2000 | | |
| NH+O2=HNO+O | 4.6E05 | 2. | 6500 | ! | |
| NH+O2=NO+OH | 1.3E06 | 1.5 | 100 | ! | |
| NH+NO=N2O+H | 2.9E14 | -0.4 | 0 | ! | |
| DUP | | | | | |
| NH+NO=N2O+H | -2.2E13 | -0.23 | 0 | | |
| DUP | | | | | |
| NH+NO=N2+OH | 2.2E13 | -0.23 | 0 | | |
| NH+NO2=N2O+OH | 1.0E13 | 0. | 0 | | |
| NH+NH=N2+H+H | 2.5E13 | 0. | 0 | | |
| NH+N=N2+H | 3.0E13 | 0. | 0 | | |
| N+OH=NO+H | 3.8E13 | 0. | 0 | | |
| N+O2=NO+O | 6.4E09 | 1. | 6280 | | |
| N+NO=N2+O | 3.3E12 | 0.30 | 0 | | |
| N2H2+M=NNH+H+M | 5.0E16 | 0. | 50000 | | |
| H2O/15/ O2/2/ N2/2/ H2/2/ | | | | | |
| N2H2+H=NNH+H2 | 5.0E13 | 0. | 1000 | | |
| N2H2+O=NH2+NO | 1.0E13 | 0. | 0 | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | |
|--|--------|--------|---------|
| N2H2+O=NNH+OH | 2.0E13 | 0. | 1000 |
| N2H2+OH=NNH+H2O | 1.0E13 | 0. | 1000 |
| N2H2+NO=N2O+NH2 | 3.0E12 | 0. | 0 |
| N2H2+NH2=NH3+NNH | 1.0E13 | 0. | 1000 |
| N2H2+NH=NNH+NH2 | 1.0E13 | 0. | 1000 |
| NNH=N2+H | 1.0E7 | 0. | 0 ! |
| NNH+H=N2+H2 | 1.0E14 | 0. | 0 |
| NNH+O=N2+OH | 8.0E13 | 0. | 0 |
| NNH+O=N2O+H | 1.0E14 | 0. | 0 |
| NNH+O=NH+NO | 5.0E13 | 0. | 0 |
| NNH+OH=N2+H2O | 5.0E13 | 0. | 0 |
| NNH+O2=N2+HO2 | 2.0E14 | 0. | 0 ! |
| NNH+O2=N2+O2+H | 5.0E13 | 0. | 0 ! |
| NNH+NO=N2+HNO | 5.0E13 | 0. | 0 |
| NNH+NH2=N2+NH3 | 5.0E13 | 0. | 0 |
| NNH+NH=N2+NH2 | 5.0E13 | 0. | 0 |
| N2O+M=N2+O+M | 4.0E14 | 0. | 56100 |
| N2/1.7/ O2/1.4/ H2O/12/ CO/1.5/ CO2/3/ | | | |
| N2O+H=N2+OH | 3.3E10 | 0. | 4729 |
| DUP | | | |
| N2O+H=N2+OH | 4.4E14 | 0. | 19254 |
| DUP | | | |
| N2O+O=NO+NO | 6.6E13 | 0. | 26630 ! |
| N2O+O=N2+O2 | 1.0E14 | 0. | 28000 ! |
| N2O+OH=N2+HO2 | 1.3E-2 | 4.72 | 36561 ! |
| N2O+OH=HNO+NO | 1.2E-4 | 4.33 | 25081 ! |
| !HNO+NO = N2O+OH | 2.0E12 | 0.0 | 26000 ! |
| N2O+NO=NO2+N2 | 5.3E05 | 2.23 | 46281 ! |
| ! | | | |
| ! ***** | | | |
| ! * cyanide subset * | | | |
| ! ***** | | | |
| ! | | | |
| CN+H2=HCN+H | 3.0E05 | 2.45 | 2237 ! |
| HCN+O=NCO+H | 1.4E04 | 2.64 | 4980 |
| HCN+O=NH+CO | 3.5E03 | 2.64 | 4980 |
| HCN+O=CN+OH | 2.7E09 | 1.58 | 29200 |
| HCN+OH = CN+H2O | 3.9E06 | 1.83 | 10300 ! |
| HCN+OH=HOCN+H | 5.9E04 | 2.40 | 12500 |
| HCN+OH=HNCO+H | 2.0E-3 | 4. | 1000 |
| HCN+OH=NH2+CO | 7.8E-4 | 4. | 4000 |
| HCN+CN=C2N2+H | 1.5E07 | 1.71 | 1530 ! |
| CN+O=CO+N | 7.7E13 | 0. | 0 ! |
| CN+OH=NCO+H | 4.0E13 | 0. | 0 ! |
| CN+O2=NCO+O | 7.5E12 | 0. | -389 ! |
| CN+CO2=NCO+CO | 3.7E06 | 2.16 | 26884 ! |
| CN+NO2=NCO+NO | 5.3E15 | -0.752 | 344 ! |
| CN+NO2=CO+N2O | 4.9E14 | -0.752 | 344 ! |
| CN+NO2=N2+CO2 | 3.7E14 | -0.752 | 344 ! |
| CN+HNO=HCN+NO | 1.8E13 | 0.00 | 0 |
| CN+HONO=HCN+NO2 | 1.2E13 | 0.00 | 0 |
| CN+N2O=NCN+NO | 3.9E03 | 2.6 | 3696 ! |
| CN+HNCO=HCN+NCO | 1.5E13 | 0. | 0 ! |
| CN+NCO=NCN+CO | 1.8E13 | 0. | 0 ! |
| HNCO=NH+CO | 1.1E16 | 0. | 86000 ! |
| HNCO+H=NH2+CO | 2.2E07 | 1.7 | 3800 ! |
| HNCO+O=HNO+CO | 1.5E08 | 1.57 | 44012 ! |
| HNCO+O=NH+CO2 | 9.8E7 | 1.41 | 8524 ! |
| HNCO+O=NCO+OH | 2.2E6 | 2.11 | 11425 ! |
| HNCO+OH=NCO+H2O | 6.4E05 | 2. | 2563 ! |
| HNCO+HO2=NCO+H2O2 | 3.0E11 | 0. | 22000 ! |
| HNCO+O2=HNO+CO2 | 1.0E12 | 0. | 35000 ! |
| HNCO+NH2=NH3+NCO | 5.0E12 | 0. | 6200 ! |
| HNCO+NH=NH2+NCO | 3.0E13 | 0. | 23700 ! |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | |
|--|--------|-------|-------|---|
| HOCN+H=NCO+H2 | 2.0E07 | 2. | 2000 | ! |
| HOCN+O=NCO+OH | 1.5E04 | 2.64 | 4000 | ! |
| HOCN+OH=NCO+H2O | 6.4E05 | 2. | 2563 | ! |
| HCNO+H=HCN+OH | 1.0E14 | 0 | 12000 | ! |
| HCNO+O=HCO+NO | 2.0E14 | 0. | 0 | ! |
| HCNO+OH=CH2O+NO | 4.0E13 | 0. | 0 | ! |
| NCO+M=N+CO+M | 3.1E16 | -0.50 | 48000 | ! |
| NCO+H=NH+CO | 5.0E13 | 0. | 0 | ! |
| NCO+O=NO+CO | 4.7E13 | 0. | 0 | ! |
| NCO+OH=NO+HCO | 5.0E12 | 0. | 15000 | ! |
| NCO+O2=NO+CO2 | 2.0E12 | 0. | 20000 | ! |
| NCO+H2=HNCO+H | 7.6E02 | 3. | 4000 | ! |
| NCO+HCO=HNCO+CO | 3.6E13 | 0. | 0 | ! |
| NCO+NO=N2O+CO | 6.2E17 | -1.73 | 763 | ! |
| NCO+NO=N2+CO2 | 7.8E17 | -1.73 | 763 | ! |
| NCO+NO2=CO+NO+NO | 2.5E11 | 0. | -707 | ! |
| NCO+NO2=CO2+N2O | 3.0E12 | 0. | -707 | ! |
| NCO+HNO=HNCO+NO | 1.8E13 | 0. | 0 | ! |
| NCO+HONO=HNCO+NO2 | 3.6E12 | 0. | 0 | ! |
| NCO+N=N2+CO | 2.0E13 | 0. | 0 | ! |
| NCO+NCO=N2+CO+CO | 1.8E13 | 0. | 0 | ! |
| C2N2+O=NCO+CN | 4.6E12 | 0. | 8880 | ! |
| C2N2+OH=HOCN+CN | 1.9E11 | 0. | 2900 | ! |
| NCN+O=CN+NO | 1.0E14 | 0. | 0 | ! |
| NCN+OH=HCN+NO | 5.0E13 | 0. | 0 | ! |
| NCN+H=HCN+N | 1.0E14 | 0. | 0 | ! |
| NCN+O2=NO+NCO | 1.0E13 | 0. | 0 | ! |
| H+CH3CN=HCN+CH3 | 4.0E7 | 2. | 2000 | ! |
| H+CH3CN=CH2CN+H2 | 3.0E7 | 2. | 1000 | ! |
| O+CH3CN=NCO+CH3 | 1.5E4 | 2.64 | 4980 | ! |
| OH+CH3CN=CH2CN+H2O | 2.0E7 | 2. | 2000 | ! |
| CH2CN+O=CH2O+CN | 1.0E14 | 0. | 0. | ! |
| CN+CH2OH=CH2CN+OH | 5.0E13 | 0. | 0 | ! |
| H2CN+M=HCN+H+M | 3.0E14 | 0. | 22000 | ! |
| ! | | | | |
| ! ***** | | | | |
| ! * subset for CxHyOz+nitrogen species reactions * | | | | |
| ! ***** | | | | |
| ! | | | | |
| CO+NO2 = CO2+NO | 9.0E13 | 0. | 33779 | ! |
| CO+N2O=N2+CO2 | 3.2E11 | 0. | 20237 | ! |
| CO2+N=NO+CO | 1.9E11 | 0. | 3400 | ! |
| CH2O+NCO=HNCO+HCO | 6.0E12 | 0. | 0 | ! |
| CH2O+NO2 = HCO+HONO | 8.0E02 | 2.77 | 13730 | ! |
| !!!!HCO+NO=HNO+CO | 7.2E12 | 0. | 0 | ! |
| HCO+NO2 = CO+HONO | 1.2E23 | -3.29 | 2355 | ! |
| HCO+NO2 = H+CO2+NO | 8.4E15 | -0.75 | 1930 | ! |
| HCO+HNO=CH2O+NO | 6.0E11 | 0. | 2000 | ! |
| CH4+CN=CH3+HCN | 6.2E04 | 2.64 | -437 | ! |
| NCO+CH4 = CH3+HNCO | 9.8E12 | 0.00 | 8120 | ! |
| CH3+NO=HCN+H2O | 1.5E-1 | 3.523 | 3950 | ! |
| CH3+NO=H2CN+OH | 1.5E-1 | 3.523 | 3950 | ! |
| CH3+N=H2CN+H | 7.1E13 | 0. | 0 | ! |
| CH3+CN=CH2CN+H | 1.0E14 | 0. | 0 | ! |
| CH3+HOCN=CH3CN+OH | 5.0E12 | 0. | 2000 | ! |
| CH2+NO=HCN+OH | 2.2E12 | 0. | -378 | ! |
| CH2+NO=HCNO+H | 1.3E12 | 0. | -378 | ! |
| CH2+NO2=CH2O+NO | 5.9E13 | 0. | 0 | ! |
| CH2+N=HCN+H | 5.0E13 | 0. | 0 | ! |
| CH2+N2=HCN+NH | 1.0E13 | 0. | 74000 | ! |
| H2CN+N=N2+CH2 | 2.0E13 | 0. | 0 | ! |
| CH2 (S) +NO=HCN+OH | 2.0E13 | 0. | 0 | ! |
| CH2 (S) +NO=CH2+NO | 1.0E14 | 0. | 0 | ! |
| CH2 (S) +HCN=CH3+CN | 5.0E13 | 0. | 0 | ! |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | |
|-------------------------------|--------|-------|----------------|---------|
| CH+NO2=HCO+NO | 1.0E14 | 0. | 0 ! | |
| CH+NO = HCN+O | 4.8E13 | 0.00 | 0 ! | |
| CH+NO = HCO+N | 3.4E13 | 0.00 | 0 ! | |
| CH+NO = NCO+H | 1.9E13 | 0.00 | 0 ! | |
| CH+N=CN+H | 1.3E13 | 0. | 0 ! | |
| CH+N2=HCN+N | 3.7E07 | 1.42 | 20723 ! | |
| CH+N2O=HCN+NO | 1.9E13 | 0. | -511 ! | |
| C+NO=CN+O | 2.0E13 | 0. | 0 ! | |
| C+NO=CO+N | 2.8E13 | 0. | 0 ! | |
| C+N2=CN+N | 6.3E13 | 0. | 46019 ! | |
| C+N2O=CN+NO | 5.1E12 | 0. | 0 ! | |
| C2H6+CN=C2H5+HCN | 1.2E05 | 2.77 | -1788 ! | |
| C2H6+NCO = C2H5+HNCO | 1.5E-9 | 6.89 | -2910 ! | |
| C2H4+CN = C2H3+HCN | 5.9E14 | -0.24 | 0 ! | |
| C2H3+NO=C2H2+HNO | 1.0E12 | 0. | 1000 ! | |
| C2H3+N=HCN+CH2 | 2.0E13 | 0. | 0 ! | |
| C2H2+NCO = HCCO+HCN | 1.4E12 | 0.00 | 1815 ! | |
| !!!!C2H+NO=CN+HCO | 2.1E13 | 0. | 0 ! | |
| CH2CO+CN=HCCO+HCN | 2.0E13 | 0. | 0 ! | |
| HCCO+NO=HCNO+CO | 7.2E12 | 0. | 0 ! | |
| HCCO+NO=HCN+CO2 | 1.6E13 | 0. | 0 ! | |
| HCCO+NO2=HCNO+CO2 | 1.6E13 | 0. | 0 ! | |
| HCCO+N=HCN+CO | 5.0E13 | 0. | 0 ! | |
| ! | | | | |
| ! | | | | |
| ! REACCIONES MECANISMO ETANOL | | | | |
| ! | | | | |
| ! | | | | |
| ! ***** | | | | |
| ! * C2H6OH subset * | | | | |
| ! ***** | | | | |
| ! | | | | |
| C2H5OH(+M) = CH2OH+CH3(+M) | 5.9E23 | -1.68 | 91163! MAR99 * | |
| LOW /2.9E85 -18.9 109914/ | | | | |
| TROE/ 0.5 200 890 4600 / | | | | |
| H2O/5.0/ H2/2/ CO/2/ CO2/3/ | | | | |
| C2H5OH(+M) = C2H5+OH(+M) | 1.2E23 | -1.54 | 96005! MAR99 * | |
| LOW /3.2E85 -18.8 114930/ | | | | |
| TROE/ 0.5 300 900 5000 / | | | | |
| H2O/5.0/ H2/2/ CO/2/ CO2/3/ | | | | |
| C2H5OH(+M) = C2H4+H2O(+M) | 2.8E13 | 0.09 | 66136! MAR99 * | |
| LOW /2.6E83 -18.8 86452/ | | | | |
| TROE/ 0.7 350 800 3800 / | | | | |
| H2O/5.0/ | | | | |
| C2H5OH(+M) = CH3CHO+H2(+M) | 7.2E11 | 0.09 | 91007! MAR99 * | |
| LOW /4.5E87 -19.4 115586/ | | | | |
| TROE/ 0.9 900 1100 3500 / | | | | |
| H2O/5.0/ | | | | |
| C2H5OH+OH = C2H4OH+H2O | 1.7E11 | 0.27 | 600! MAR99 * | overall |
| !C2H5OH+OH = CH3CHOH+H2O | 2.6E06 | 2.00 | -1373! DRY | |
| C2H5OH+OH = CH3CHOH+H2O | 4.6E11 | 0.15 | 0! MAR99 | |
| C2H5OH+OH = CH3CH2O+H2O | 7.5E11 | 0.30 | 1634! MAR99 | |
| C2H5OH+H = C2H4OH+H2 | 1.2E07 | 1.80 | 5098! MAR99 * | fit |
| C2H5OH+H = CH3CHOH+H2 | 2.6E07 | 1.65 | 2827! MAR99 | |
| C2H5OH+H = CH3CH2O+H2 | 1.5E07 | 1.60 | 3038! MAR99 | |
| C2H5OH+O = C2H4OH+OH | 9.4E07 | 1.70 | 5459! MAR99 * | overall |
| C2H5OH+O = CH3CHOH+OH | 1.9E07 | 1.85 | 1824! MAR99 | |
| C2H5OH+O = CH3CH2O+OH | 1.6E07 | 2.00 | 4448! MAR99 | |
| C2H5OH+CH3 = C2H4OH+CH4 | 2.2E02 | 3.18 | 9622! MAR99 * | fit |
| C2H5OH+CH3 = CH3CHOH+CH4 | 7.3E02 | 2.99 | 7948! MAR99 | |
| C2H5OH+CH3 = CH3CH2O+CH4 | 1.4E02 | 2.99 | 7649! MAR99 | |
| C2H5OH+HO2 = C2H4OH+H2O2 | 1.2E04 | 2.55 | 15750! MAR99 | |
| C2H4OH+O2 = CH2O+CH2O+OH | 6.0E10 | 0.00 | 24500! MAR99 | |
| C2H5OH+HO2 = CH3CHOH+H2O2 | 8.2E03 | 2.55 | 10750! MAR99 | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | | |
|--|--------|-------|--------|---------------|--------------------|
| C2H5OH+HO2 = CH3CH2O+H2O2 | 2.5E12 | 0.00 | 24000! | MAR99 | |
| ! | | | | | |
| CH3CH2O+M = CH3CHO+H+M | 1.2E35 | -5.89 | 25274! | MAR99 | |
| CH3CH2O+M = CH3+CH2O+M | 1.3E38 | -6.96 | 23800! | MAR99 | |
| CH3CH2O+CO = C2H5+CO2 | 4.7E02 | 3.16 | 5380! | MAR99 | * anal to ch3o+co |
| CH3CH2O+O2 = CH3CHO+HO2 | 4.0E10 | 0.00 | 1100! | HAR90 | |
| CH3CH2O+H = CH3+CH2OH | 3.0E13 | 0.00 | 0! | MAR99 | * |
| CH3CH2O+H = C2H4+H2O | 3.0E13 | 0.00 | 0! | MAR99 | * |
| CH3CH2O+OH = CH3CHO+H2O | 1.0E13 | 0.00 | 0! | MAR99 | * |
| ! | | | | | |
| CH3CHOH+O2 = CH3CHO+HO2 | 4.8E14 | 0.00 | 5017! | MAR99 | * anal to ch2oh+o2 |
| DUP | | | | | |
| CH3CHOH+O2 = CH3CHO+HO2 | 8.4E15 | -1.20 | 0! | MAR99 | * |
| DUP | | | | | |
| !CH3CHOH+CH3 = C3H6+H2O | 2.0E13 | 0.00 | 0! | MAR99 | * |
| CH3CHOH+O = CH3CHO+OH | 1.0E14 | 0.00 | 0! | MAR99 | * |
| CH3CHOH+H = CH3+CH2OH | 3.0E13 | 0.00 | 0! | MAR99 | * |
| CH3CHOH+H = C2H4+H2O | 3.0E13 | 0.00 | 0! | MAR99 | * |
| CH3CHOH+HO2 = CH3CHO+OH+OH | 4.0E13 | 0.00 | 0! | MAR99 | * |
| CH3CHOH+OH = CH3CHO+H2O | 5.0E12 | 0.00 | 0! | MAR99 | * |
| CH3CHOH+M = CH3CHO+H+M | 1.0E14 | 0.00 | 25000! | MAR99 | * |
| !!CH3CHO+OH = CH3CO+H2O | 9.2E06 | 1.50 | -962! | TAY96 | * |
| !!CH3CHO+OH = CH2HCO+H2O | 1.7E05 | 2.40 | 815! | TAY96 | * |
| ! | | | | | |
| !***** | | | | | |
| ! *** CH2O/HCO Subset | | | | | |
| !***** | | | | | |
| ! | | | | | |
| HCO+HCO=CO+CH2O | 3.0E13 | 0.00 | 0! | cec94 (300) | |
| ! | | | | | |
| !***** | | | | | |
| ! *** CH3OH/CH2OH/CH2O Subset *** | | | | | |
| !***** | | | | | |
| ! | | | | | |
| !CH3OH (+M)=CH3+OH (+M) | 1.9E16 | 0.0 | 91730 | !TSA87+Held98 | |
| ! LOW/2.95E44 -7.35 95640/ | | | | | |
| ! TROE/0.414 279 5459/ | | | | | |
| ! N2/1.43/ H2O/8.58/ | | | | | |
| CH3OH (+M)=CH2OH+H (+M) | 2.7E16 | -0.08 | 98940 | !TSA87+Held98 | |
| ! LOW/2.34E40 -6.33 103100/ | | | | | |
| ! TROE/0.773 693 5333/ | | | | | |
| CH3OH+H=CH2OH+H2 | 1.7E7 | 2.1 | 4868 | | |
| CH3OH+H=CH3O+H2 | 4.2E6 | 2.1 | 4868 | | |
| !CH3OH+H=CH2OH+H2 | 1.67E7 | 2.0 | 4520 | ! LI/WILL96 | |
| !CH3OH+H=CH3O+H2 | 3.8E7 | 2.0 | 5860 | ! LI/WILL96 | |
| !CH3OH+O=CH2OH+OH | 3.9E5 | 2.5 | 3080 | | |
| !CH3OH+OH=CH2OH+H2O | 5.30E4 | 2.53 | 960 | | |
| !CH3OH+OH=CH2OH+H2O | 7.1E06 | 1.80 | -600 | ! BOT/COH91 | |
| !CH3OH+OH=CH3O+H2O | 1.32E4 | 2.53 | 960 | | |
| !CH3OH+OH=CH3O+H2O | 1.0E06 | 2.10 | 500 | ! BOT/COH91 | |
| CH3OH+OH=CH2OH+H2O | 1.4E06 | 2.00 | -3510 | ! LI/WILL96 | |
| CH3OH+OH=CH3O+H2O | 6.3E06 | 2.00 | 6300 | ! LI/WILL96 | |
| !CH3OH+HO2=CH2OH+H2O2 | 9.6E10 | 0.0 | 12578 | ! nbs87 | |
| !CH3OH+HO2=CH2OH+H2O2 | 3.0E12 | 0.0 | 12578 | ! | |
| ! A factor fit to ch3oh oxidation data | | | | | |
| CH3OH+HO2=CH2OH+H2O2 | 1.0E12 | 0.0 | 10040 | ! 81tsu | |
| CH3OH+O2=CH2OH+HO2 | 2.1E13 | 0.00 | 44900 | ! nbs87 | |
| CH3OH+CH3=CH2OH+CH4 | 3.2E01 | 3.17 | 7170 | ! nbs87 | |
| CH3OH+CH3=CH3O+CH4 | 1.5E01 | 3.10 | 6940 | ! nbs87 | |
| CH3O+HO2=CH2O+H2O2 | 3.0E11 | 0.00 | 0 | ! nbs86 | |
| CH3O+CO=CH3+CO2 | 1.6E13 | 0.00 | 11800 | ! nbs86 | |
| CH3O+CH3=CH2O+CH4 | 2.4E13 | 0.00 | 0 | ! nbs86 | |
| CH3O+CH2O=CH3OH+HCO | 1.0E11 | 0.00 | 3000 | ! nbs86 | |
| CH3O+HCO=CH3OH+CO | 9.0E13 | 0.00 | 0 | ! nbs86 | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | | |
|--|--------|-------|-------|---|-------------------|
| CH3O+CH3OH=CH3OH+CH2OH | 3.0E11 | 0.00 | 4100 | ! | nbs86 |
| CH3O+CH3O=CH3OH+CH2O | 6.0E13 | 0.00 | 0 | ! | nbs86 |
| !CH2OH+H=CH2O+H2 | 2.0E13 | 0.00 | 0 | | |
| ! PG98: removed | | | | | |
| CH2OH+H=CH2O+H2 | 4.8E13 | 0.00 | 0 | ! | DOB/WAG94 |
| !CH2OH+O=CH2O+OH | 1.0E13 | 0.00 | 0 | | |
| ! PG98: removed | | | | | |
| CH2OH+O=CH2O+OH | 6.5E13 | 0.00 | -700 | ! | SEE/GUT94 |
| CH2OH+O2=CH2O+HO2 | 1.6E15 | -1.0 | 0 | | |
| DUP | | | | | |
| CH2OH+O2=CH2O+HO2 | 7.2E13 | 0.0 | 3577 | | |
| DUP | | | | | |
| CH2OH+HO2=CH2O+H2O2 | 3.6E13 | 0.0 | 0 | ! | Grotheer ea 85 |
| CH2OH+HCO=CH3OH+CO | 1.2E14 | 0.0 | 0 | ! | nbs87 |
| CH2OH+HCO=CH2O+CH2O | 1.8E14 | 0.0 | 0 | ! | nbs87 |
| CH2OH+CH2O=CH3OH+HCO | 5.5E03 | 2.8 | 5860 | ! | nbs87 |
| CH2OH+CH2OH=CH3OH+CH2O | 5.0E12 | 0.0 | 0 | ! | nbs87 |
| CH2OH+CH3O=CH3OH+CH2O | 2.4E12 | 0.0 | 0 | ! | nbs87 |
| ! | | | | | |
| !***** | | | | | |
| ! *** H/N/O Subset *** | | | | | |
| !***** | | | | | |
| ! | | | | | |
| HONO2+OH=NO3+H2O | 1.0E10 | 0.0 | -1240 | ! | LAM/BEN84 |
| H2NO+O2=HNO+HO2 | 3.0E12 | 0.0 | 25000 | ! | a (JAM 6/98) |
| HONO+HONO=>NO+NO2+H2O | 3.5E-1 | 3.64 | 12100 | ! | MEB/LIN98 |
| H2NO+HO2=HNO+H2O2 | 2.9E04 | 2.69 | 1600 | ! | a (BOZ/DEA98) |
| HNOH+H=NH2+OH | 4.0E13 | 0.0 | 0 | ! | a (BOZ/DEA98) |
| HNOH+H=HNO+H2 | 4.8E8 | 1.5 | 378 | ! | a (BOZ/DEA98) |
| HNOH+O=HNO+OH | 7.0E13 | 0.0 | 0 | ! | a (BOZ/DEA98) |
| DUP | | | | | |
| HNOH+O=HNO+OH | 3.3E08 | 1.5 | -358 | ! | a (BOZ/DEA98) |
| DUP | | | | | |
| HNOH+OH=HNO+H2O | 2.4E6 | 2.0 | -1192 | ! | a (BOZ/DEA98) |
| HNOH+NH2=NH3+HNO | 1.8E6 | 1.94 | -1152 | ! | a (BOZ/DEA98) |
| HNOH+HO2=HNO+H2O2 | 2.9E4 | 2.69 | -1600 | ! | a (BOZ/DEA98) |
| HNOH+M=HNO+H+M | 2.0E24 | -2.84 | 58934 | ! | a (BOZ/DEA98) |
| H2O/10/ | | | | | |
| HNOH+O2=HNO+HO2 | 3.0E12 | 0.0 | 25000 | ! | a (JAM 10/98) |
| HNOH+NO2=HONO+HNO | 6.0E11 | 0.0 | 2000 | ! | a (JAM 98) |
| ! | | | | | |
| !***** | | | | | |
| ! *** Subset for CxHyOz+nitrogen species reactions *** | | | | | |
| !***** | | | | | |
| ! | | | | | |
| CH3OH+NO2=CH2OH+HONO | 3.7E11 | 0.0 | 21400 | ! | ANA/HAN88 |
| CH2OH+NO=CH2O+HNO | 1.3E12 | 0.0 | 0 | ! | NES/STI89/p (300) |
| CH2OH+NO2=CH2O+HONO | 5.0E12 | 0.0 | 0 | ! | NES/STI89/p (300) |
| CH2OH+HNO=CH3OH+NO | 3.0E12 | 0.0 | 0 | ! | PG98 est. |
| CH3O+NO=CH2O+HNO | 1.3E14 | -0.7 | 0 | ! | ATK92 |
| CH3O+NO2=CH2O+HONO | 6.0E12 | 0.0 | 2285 | ! | MCC/KAU85 |
| CH3O+HNO=CH3OH+NO | 3.2E13 | 0.0 | 0 | ! | HE/LIN88 |
| CH3+NO (+M)=CH3NO (+M) | 9.0E12 | 0.0 | 119 | ! | DAV/PIL91 |
| LOW/3.2E23 -1.87 0/ | | | | | |
| H2O/10/ N2/1.5/ | | | | | |
| CH3+NO2=CH3O+NO | 4.0E13 | -0.20 | 0 | ! | PG98 |
| CH3+HONO=CH4+NO2 | 1.0E12 | 0.0 | 0 | ! | PG98 est. |
| ! analogy NH2+HONO | | | | | |
| CH3NO=HCN+H2O | 3.0E13 | 0.0 | 50000 | ! | LIF93 est. |
| ! | | | | | |
| !NUEVAS REACCIONES AÑADIDAS | | | | | |
| ! | | | | | |
| CH3+O2 (+M)=CH3O2 (+M) | 7.8E8 | 1.2 | 0 | | |
| LOW/5.8E25 -3.3 0/ | | | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

CH3O2+O=CH3O+O2          2.59E13   0       0
CH3O2+H=CH3O+OH          9.64E13   0       0
CH3O2+NO=CH3O+NO2       3.10E12   0      -358
CH3O2+CH3=CH3O+CH3O     3.24E13   0       0
!
!
!
C2H+NO=CN+HCO           6.03E13  0.       570
!
!
!
!
!
!!!!*****Mecanismo NO-NO2 (articulo P. Glarborg et al., Combustion and Flame
132, 629-638, 2003
!
OH+NO+M=HONO+M          5.1E23 -2.51   -68 ! Cambio en las eficacias de tercer
cuerpo antes: H2O/5/ Ahora en relación cn NO+O+M=NO2+M
N2/1.7/ O2/1.5/ H2O/10/
!!!!!!H2O/5/
!
!
NO2+HO2=HONO+O2         6.3E08   1.25    5000 !Hori et al., 1998
HNO+O2=NO+HO2           2.0E13   0.0    16000 !Dean et al., 2000
HCO+NO=CO+HNO           7.0E13   -0.40  0 ! Veyret et al., 1981
!
!
! REACCIONES DEL ARTI DE GLARBORG 2003, anteriormente no estaban
!
CH2O+M=CO+H2+M          2.8E15   0       63800 !KUMARAN, 1998 (GLARBORG 2003)
H2O/5/
HCO+HO2=CO2+OH+H        3.0E13   0       0 ! TSANG 1986 (GLARBORG 2003)
!!!!*****
!
!Reacciones Jianhuai Cai
!
C4H9OH= nC3H7 +CH2OH    8.43E+101 -25.53  122927
! CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /0.006579           8.43E+101 -25.53  122927 /
! CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /0.039474           1.19E+100 -24.71  124635 /
! CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /0.092105           3.91E+97  -23.86  124610 /
! CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /0.263158           2.11E+94  -22.79  123938 /
! CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /1.000000           4.26E+87  -20.71  121583 /
! CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /10.00000           4.45E+71  -15.91  114141 /
! CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /100.0000           4.28E+52  -10.32  103881 /
! CBS-APNO RRKM calculations
C4H9OH= CH3+CC3H6OH     1.00E+103 -26.05  125924
!This work CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /0.006579           1.00E+103 -26.05  125924 /
!This work CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /0.039474           1.46E+102 -25.48  128466 /
!This work CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /0.092105           2.30E+100 -24.80  129028 /
!This work CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /0.263158           4.48E+97  -23.87  128871 /
!This work CBS-APNO RRKM calculations

```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | |
|--|-----------|--------|----------|
| PLOG /1.000000 | 4.54E+91 | -21.96 | 127237 / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /10.00000 | 1.19E+76 | -17.23 | 120522 / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /100.0000 | 1.67E+56 | -11.36 | 110115 / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| C4H9OH= C2H5 +C2H4OH | 2.44E+103 | -26.02 | 125685 |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.006579 | 2.44E+103 | -26.02 | 125685 / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.039474 | 2.61E+102 | -25.42 | 128121 / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.092105 | 2.84E+100 | -24.69 | 128556 / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.263158 | 5.22E+97 | -23.76 | 128368 / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /1.000000 | 4.61E+91 | -21.84 | 126653 / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /10.00000 | 1.32E+76 | -17.12 | 119918 / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /100.0000 | 2.10E+56 | -11.28 | 109480 / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| C4H9OH= C4H81+H2O | 4.10E+83 | -20.67 | 102698 |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.006579 | 4.10E+83 | -20.67 | 102698 / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.039474 | 3.24E+77 | -18.76 | 100769 / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.092105 | 1.39E+73 | -17.43 | 98970. / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.263158 | 2.22E+68 | -15.98 | 96774. / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /1.000000 | 2.14E+60 | -13.60 | 92789. / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /10.00000 | 4.82E+44 | -9.003 | 84357. / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /100.0000 | 1.25E+29 | -4.465 | 75432. / |
| !This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| C4H9OH+H=AC4H8OH+H2 | 9.25e+05 | 2.280 | 3760 |
| !2011 Harper & Van Geem & Pyl & Marin & Green | | | |
| C4H9OH+H=BC4H8OH+H2 | 2.26e+06 | 2.150 | 5660 |
| !2011 Harper & Van Geem & Pyl & Marin & Green | | | |
| C4H9OH+H=CC4H8OH+H2 | 1.14e+06 | 2.250 | 5440 |
| !2011 Harper & Van Geem & Pyl & Marin & Green | | | |
| C4H9OH+H=DC4H8OH+H2 | 3.47e+06 | 2.270 | 7880 |
| !2011 Harper & Van Geem & Pyl & Marin & Green | | | |
| C4H9OH+H=C4H9O+H2 | 1.54e+05 | 2.480 | 8920 |
| !2011 Harper & Van Geem & Pyl & Marin & Green | | | |
| C4H9OH+OH=DC4H8OH+H2O | 5.28E+09 | 0.970 | 1586 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| C4H9OH+OH=CC4H8OH+H2O | 1.14E+03 | 2.87 | -2926 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| C4H9OH+OH=BC4H8OH+H2O | 1.54E+00 | 3.700 | -3736 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| C4H9OH+OH=AC4H8OH+H2O | 3.61E+03 | 2.890 | -2291 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| C4H9OH+OH=C4H9O+H2O | 5.88E+02 | 2.820 | -585 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| C4H9OH+HO2=DC4H8OH+H2O2 | 8.80E-02 | 4.310 | |
| 1.727e+04 !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| C4H9OH+HO2=CC4H8OH+H2O2 | 2.76E-04 | 4.760 | |
| 1.185e+04 !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| C4H9OH+HO2=BC4H8OH+H2O2 | 7.51E-03 | 4.520 | |
| 1.471e+04 !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | |
|--|---------------|-------|-------|
| C4H9OH+HO2=AC4H8OH+H2O2 | 3.50E-05 | 5.260 | |
| 8.268e+03 !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| C4H9OH+HO2=C4H9O+H2O2 | 6.47E-07 | 5.300 | |
| 1.053e+04 !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| C4H9OH+O=DC4H8OH+OH | 9.81E+05 | 2.430 | 4750 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| | REV/ 1.10E+02 | 3.041 | |
| 5.668E+03/ | | | |
| C4H9OH+O=CC4H8OH+OH | 5.52E+05 | 2.450 | 2830 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| | REV/ 2.81E+00 | 3.457 | |
| 6.218E+03/ | | | |
| C4H9OH+O=BC4H8OH+OH | 1.44E+05 | 2.610 | 3029 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| | REV/ 7.32E-01 | 3.617 | |
| 6.417E+03/ | | | |
| C4H9OH+O=AC4H8OH+OH | 1.45E+05 | 2.470 | 8760 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| | REV/ 1.69E+02 | 2.899 | |
| 7.704E+03/ | | | |
| C4H9OH+O=C4H9O+OH | 1.46E-03 | 4.730 | 1727 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| | REV/ 4.99E-05 | 4.891 | - |
| 9.750E+02/ | | | |
| C4H9OH+CH3=AC4H8OH+CH4 | 1.99E+01 | 3.370 | 7634 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH3=BC4H8OH+CH4 | 8.02E+00 | 3.230 | 6461 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH3=CC4H8OH+CH4 | 1.51E+00 | 3.460 | 5481 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH3=DC4H8OH+CH4 | 4.53E-01 | 3.650 | 7154 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH3=C4H9O+CH4 | 1.02E+00 | 3.570 | 8221 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+HCO=CH2O+AC4H8OH | 1.00E+07 | 1.900 | 17000 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+HCO=CH2O+C4H9O | 3.40E+04 | 2.500 | 13500 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+HCO=CH2O+DC4H8OH | 1.00E+05 | 2.500 | 18500 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+HCO=CH2O+CC4H8OH | 1.00E+07 | 1.900 | 17000 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+HCO=CH2O+BC4H8OH | 1.00E+07 | 1.900 | 17000 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH2OH=CH3OH+AC4H8OH | 6.00E+01 | 2.950 | 12000 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH2OH=CH3OH+BC4H8OH | 6.00E+01 | 2.950 | 12000 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH2OH=CH3OH+CC4H8OH | 6.00E+01 | 2.950 | 12000 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH2OH=CH3OH+DC4H8OH | 9.90E+01 | 2.950 | 14000 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH2OH=CH3OH+C4H9O | 1.20E+02 | 2.760 | 10800 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH3O=CH3OH+AC4H8OH | 1.50E+11 | 0.000 | 4500 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH3O=CH3OH+C4H9O | 2.30E+10 | 0.000 | 2900 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH3O=CH3OH+DC4H8OH | 1.60E+11 | 0.000 | 7300 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH3O=CH3OH+CC4H8OH | 1.50E+11 | 0.000 | 4500 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+CH3O=CH3OH+BC4H8OH | 1.50E+11 | 0.000 | 4500 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | |
|---|----------|---------|---------|
| C4H9OH+C2H5=C2H6+AC4H8OH | 2.00E+11 | 0.000 | 11000 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+C2H5=C2H6+C4H9O | 1.00E+11 | 0.000 | 9200 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+C2H5=C2H6+DC4H8OH | 3.00E+11 | 0.000 | 13500 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+C2H5=C2H6+CC4H8OH | 2.00E+11 | 0.000 | 11000 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C4H9OH+C2H5=C2H6+BC4H8OH | 2.00E+11 | 0.000 | 11000 |
| !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| ! | | | |
| ! | | | |
| ! | | | |
| ! Reactions of C4H8OH | | | |
| ! beta scission of C4H8OH | | | |
| AC4H8OH=C2H5+C2H3OH | 1 | 0 | 0 |
| ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.006579 | 1.76E+24 | -4.935 | 20126.2 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.039474 | 5.61E+27 | -5.690 | 22941.6 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.092105 | 5.34E+29 | -6.136 | 24593.1 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.263158 | 3.34E+32 | -6.783 | 26991.0 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /1.000000 | 3.47E+36 | -7.730 | 30559.5 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /10.00000 | 2.17E+50 | -11.271 | 42436.6 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /100.0000 | 9.30E+54 | -12.229 | 48452.4 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| AC4H8OH=C4H7OH1-1+H | 1 | 0 | 0 |
| ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.006579 | 1.61E+21 | -5.266 | 22642.2 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.039474 | 5.49E+25 | -6.164 | 25610.9 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.092105 | 1.36E+28 | -6.663 | 27396.9 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.263158 | 3.02E+31 | -7.391 | 30059.0 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /1.000000 | 1.90E+36 | -8.472 | 34117.7 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /10.00000 | 1.64E+53 | -12.761 | 48388.5 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /100.0000 | 5.84E+60 | -14.413 | 56993.2 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| AC4H8OH=C3H7CHO+H | 1 | 0 | 0 |
| ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.006579 | 9.12E+22 | -5.052 | 20777.5 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.039474 | 6.37E+26 | -5.858 | 23807.4 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.092105 | 7.52E+28 | -6.309 | 25520.3 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /0.263158 | 7.58E+31 | -6.987 | 28070.9 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /1.000000 | 2.38E+36 | -8.037 | 32008.2 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /10.00000 | 3.05E+51 | -11.890 | 44960.8 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| PLOG /100.0000 | 2.02E+57 | -13.125 | 52127.3 |
| / ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| BC4H8OH=C4H81+OH | 1 | 0 | 0 |
| ! This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | |
|-----|--------------------------------------|----------|---------|---------|
| | PLOG /0.006579 | 3.85E+18 | -3.363 | 14183.8 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.039474 | 2.64E+21 | -3.940 | 16418.6 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.092105 | 1.04E+23 | -4.284 | 17747.3 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.263158 | 2.11E+25 | -4.800 | 19737.0 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /1.000000 | 7.99E+28 | -5.636 | 22908.3 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /10.00000 | 2.82E+40 | -8.579 | 33125.2 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /100.0000 | 1.44E+43 | -9.042 | 37584.7 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | BC4H8OH=C3H5OH+CH3 | 1.00E+00 | 0.000 | 0.0 |
| ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.006579 | 6.56E+30 | -6.923 | 26202.2 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.039474 | 2.95E+36 | -8.235 | 30835.1 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.092105 | 2.63E+39 | -8.934 | 33368.5 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.263158 | 2.11E+43 | -9.869 | 36824.0 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /1.000000 | 1.43E+48 | -11.019 | 41391.2 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /10.00000 | 1.17E+56 | -12.892 | 49469.4 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /100.0000 | 1.65E+53 | -11.710 | 51223.1 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | BC4H8OH=C4H7OH1-1+H | 1 | 0 | 0 |
| ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.006579 | 5.22E+15 | -3.599 | 17405.5 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.039474 | 9.68E+19 | -4.419 | 19818.5 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.092105 | 1.43E+22 | -4.850 | 21320.2 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.263158 | 2.13E+25 | -5.524 | 23741.3 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /1.000000 | 8.39E+29 | -6.542 | 27565.3 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /10.00000 | 4.69E+46 | -10.723 | 41946.9 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /100.0000 | 1.18E+53 | -12.060 | 49931.7 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | BC4H8OH=C4H7OH2-1+H | 1 | 0 | 0 |
| ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.006579 | 1.25E+14 | -3.536 | 19014.0 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.039474 | 1.10E+19 | -4.498 | 21126.6 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.092105 | 4.18E+21 | -5.014 | 22683.9 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.263158 | 1.34E+25 | -5.744 | 25149.9 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /1.000000 | 1.41E+30 | -6.837 | 29140.9 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /10.00000 | 1.74E+48 | -11.321 | 44481.2 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /100.0000 | 1.08E+56 | -12.992 | 53658.3 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | CC4H8OH=C3H6+CH2OH | 1 | 0 | 0 |
| ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | |
|-----|--------------------------------------|----------|---------|---------|
| | PLOG /0.006579 | 7.86E+21 | -4.280 | 17660.6 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.039474 | 1.73E+25 | -4.993 | 20371.9 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.092105 | 1.53E+27 | -5.431 | 22025.4 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.263158 | 8.85E+29 | -6.069 | 24422.5 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /1.000000 | 1.00E+34 | -7.028 | 28077.4 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /10.00000 | 5.12E+46 | -10.267 | 39309.6 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /100.0000 | 2.86E+49 | -10.701 | 44158.0 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | CC4H8OH=C4H7OH2-1+H | 1 | 0 | 0 |
| ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.006579 | 1.11E+18 | -4.655 | 21296.5 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.039474 | 1.68E+23 | -5.684 | 24357.5 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.092105 | 6.17E+25 | -6.205 | 26192.4 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.263158 | 2.33E+29 | -6.968 | 28988.2 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /1.000000 | 3.97E+34 | -8.135 | 33416.7 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /10.00000 | 1.01E+52 | -12.498 | 48344.4 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /100.0000 | 6.39E+58 | -13.891 | 57006.9 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | CC4H8OH=C4H7OH1-4+H | 1 | 0 | 0 |
| ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.006579 | 9.82E+17 | -4.657 | 21366.7 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.039474 | 1.18E+23 | -5.658 | 24310.6 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.092105 | 5.47E+25 | -6.206 | 26209.8 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.263158 | 2.30E+29 | -6.981 | 29033.8 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /1.000000 | 4.01E+34 | -8.150 | 33460.6 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /10.00000 | 9.88E+51 | -12.510 | 48375.3 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /100.0000 | 6.74E+58 | -13.911 | 57059.6 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | DC4H8OH=C2H4+C2H4OH | 1 | 0 | 0 |
| ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.006579 | 2.41E+26 | -5.523 | 22329.0 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.039474 | 4.46E+30 | -6.488 | 25916.5 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.092105 | 9.94E+32 | -7.035 | 27965.4 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /0.263158 | 2.03E+36 | -7.821 | 30923.9 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /1.000000 | 1.04E+41 | -8.957 | 35277.6 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /10.00000 | 1.82E+53 | -12.050 | 46603.9 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | PLOG /100.0000 | 3.05E+53 | -11.763 | 50035.4 |
| / ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |
| | DC4H8OH=C4H7OH1-4+H | 1 | 0 | 0 |
| ! | This work CBS-APNO RRKM calculations | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

PLOG /0.006579 3.87E+24 -5.891 24244.0
/ ! This work CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /0.039474 3.02E+29 -6.937 28111.9
/ ! This work CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /0.092105 1.48E+32 -7.540 30370.6
/ ! This work CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /0.263158 8.36E+35 -8.403 33639.7
/ ! This work CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /1.000000 2.52E+41 -9.698 38601.0
/ ! This work CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /10.00000 3.73E+56 -13.518 52356.8
/ ! This work CBS-APNO RRKM calculations
PLOG /100.0000 4.18E+58 -13.653 57699.6
/ ! This work CBS-APNO RRKM calculations
C4H9O=C3H7CHO+H 1 0 0
! Ref: AC4H8OH=C3H7CHO+H
PLOG /0.006579 9.12E+22 -5.052 20777.5
/ ! Ref: AC4H8OH=C3H7CHO+H
PLOG /0.039474 6.37E+26 -5.858 23807.4
/ ! Ref: AC4H8OH=C3H7CHO+H
PLOG /0.092105 7.52E+28 -6.309 25520.3
/ ! Ref: AC4H8OH=C3H7CHO+H
PLOG /0.263158 7.58E+31 -6.987 28070.9
/ ! Ref: AC4H8OH=C3H7CHO+H
PLOG /1.000000 2.38E+36 -8.037 32008.2
/ ! Ref: AC4H8OH=C3H7CHO+H
PLOG /10.00000 3.05E+51 -11.890 44960.8
/ ! Ref: AC4H8OH=C3H7CHO+H
PLOG /100.0000 2.02E+57 -13.125 52127.3
/ ! Ref: AC4H8OH=C3H7CHO+H
nC3H7+CH2O=C4H9O 5.00e+10 0.00 3457
! 2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al.
!
! isomerization of C4H8OH from 2011 Hansen & Harper & Green
DC4H8OH(+m)=BC4H8OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork
!#1 (DC4H8OH) High-P Limit: intra_H_migration exact: Others-R3H_SS
!C_rad_out_2H Cs_H_out_H/NonDeC deltaHrxn(T=298K) = -
!2.230002825941977 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / -5.1328000e+00 1.4232000e+00 -3.2494000e-01 /
CHEB / 6.4647000e+00 1.3579000e+00 -2.8319000e-02 /
CHEB / -3.8145000e+00 2.8123000e-01 9.5623000e-02 /
CHEB / -2.2150000e+00 -2.6461000e-01 6.1258000e-02 /
CHEB / -1.0282000e+00 -3.3193000e-01 -1.2487000e-02 /
DC4H8OH(+m)=AC4H8OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork
!#1 (DC4H8OH) High-P Limit: intra_H_migration estimate: (Average:)
!R4H_SSS C_rad_out_2H Cs_H_out_H/NonDeO deltaHrxn(T=298K)
!= -6.859238675343352 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / -6.0039000e-01 4.9027000e-01 -3.5277000e-02 /
CHEB / 2.3296000e+00 7.4492000e-01 -2.8788000e-02 /
CHEB / -3.5389000e+00 2.3753000e-01 3.9843000e-02 /
CHEB / -2.1789000e+00 -1.7270000e-01 5.3466000e-02 /
CHEB / -1.0329000e+00 -2.9392000e-01 6.2342000e-03 /
DC4H8OH(+m)=CC4H8OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork
!#1 (DC4H8OH) High-P Limit: intra_H_migration estimate: (Average:)
!Others-R2H_S C_rad_out_2H Cs_H_out_H/(NonDeC/Cs)
!deltaHrxn(T=298K) = -3.42975638096393 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / -4.7521000e+00 9.6025000e-01 -2.4496000e-02 /
CHEB / 6.9781000e+00 1.7144000e+00 -1.7125000e-01 /

```


ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```
CHEB / -3.5694000e+00 1.7498000e-01 1.7364000e-01 /
CHEB / -2.1994000e+00 -2.5279000e-01 9.7946000e-02 /
CHEB / -1.0696000e+00 -3.6336000e-01 -5.5506000e-03 /
BC4H8OH(+m)=AC4H8OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork
!#1 (DC4H8OH) High-P Limit: intra_H_migration estimate: (Average:)
!Others-R2H_S C_rad_out_H/NonDeC Cs_H_out_H/NonDeO
!deltaHrxn(T=298K) = -4.6292358494013754 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / -6.9606000e+00 1.2623000e+00 -1.3268000e-01 /
CHEB / 7.6193000e+00 1.4727000e+00 -4.2712000e-02 /
CHEB / -3.8680000e+00 1.6921000e-01 9.9579000e-02 /
CHEB / -2.2202000e+00 -2.6711000e-01 3.4595000e-02 /
CHEB / -1.0384000e+00 -2.9495000e-01 -2.0037000e-02 /
BC4H8OH(+m)=CC4H8OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork
!#1 (DC4H8OH) High-P Limit: intra_H_migration exact: Others-R2H_S
!C_rad_out_H/NonDeC Cs_H_out_H/NonDeC deltaHrxn(T=298K) = -
!1.1997535550219531 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / -6.5541000e+00 2.0414000e+00 -5.3690000e-01 /
CHEB / 8.0978000e+00 1.1828000e+00 1.9798000e-01 /
CHEB / -3.2996000e+00 1.9304000e-01 1.4618000e-01 /
CHEB / -1.9226000e+00 -2.6211000e-01 4.4570000e-02 /
CHEB / -9.5485000e-01 -3.0667000e-01 -2.8223000e-02 /
C4H9O(+m)=DC4H8OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork
!#1 (DC4H8OH) High-P Limit: intra_H_migration exact: R5H_SSSS
!O_rad_out Cs_H_out_2H deltaHrxn(T=298K) = -
!2.839757518331451 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / -4.8054000e+00 2.1566000e+00 -3.2413000e-01 /
CHEB / 2.0760000e-01 6.7615000e-01 1.7529000e-01 /
CHEB / -4.8354000e+00 -1.5736000e-01 3.1551000e-02 /
CHEB / -2.2979000e+00 -3.6743000e-01 -2.2430000e-02 /
CHEB / -8.0585000e-01 -2.3788000e-01 -3.2405000e-02 /
C4H9O(+m)=BC4H8OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork
!#1 (DC4H8OH) High-P Limit: intra_H_migration estimate: (Average:)
!Others-R3H_SS O_rad_out Cs_H_out_H/(NonDeC/Cs)
!deltaHrxn(T=298K) = -5.069760344273428 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / -9.9988000e+00 2.4422000e+00 -3.9584000e-01 /
CHEB / 4.1445000e+00 1.3212000e+00 1.7642000e-01 /
CHEB / -4.4543000e+00 8.2525000e-03 7.0224000e-02 /
CHEB / -2.2414000e+00 -3.9610000e-01 2.2490000e-02 /
CHEB / -8.2761000e-01 -2.6233000e-01 6.2600000e-03 /
C4H9O(+m)=AC4H8OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork
!#1 (DC4H8OH) High-P Limit: intra_H_migration estimate: (Average:)
!Others-R2H_S O_rad_out Cs_H_out_H/(NonDeC/Cs)
!deltaHrxn(T=298K) = -9.698996193674803 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / -6.9414000e+00 1.0146000e+00 -2.6288000e-01 /
CHEB / 1.6426000e+00 1.5041000e+00 2.4953000e-01 /
CHEB / -4.6246000e+00 8.1772000e-02 7.3117000e-02 /
CHEB / -2.3859000e+00 -3.5454000e-01 1.2760000e-02 /
CHEB / -9.0433000e-01 -2.7337000e-01 -8.5569000e-03 /
C4H9O(+m)=CC4H8OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork
!#1 (DC4H8OH) High-P Limit: intra_H_migration estimate: (Average:)
!R4H_SSS O_rad_out Cs_H_out_H/NonDeC deltaHrxn(T=298K)
!= -6.269513899295381 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```
CHEB / -5.5871000e+00 2.8247000e+00 -3.8042000e-01 /
CHEB / 1.6412000e+00 5.0500000e-01 2.1023000e-01 /
CHEB / -4.3607000e+00 -1.7857000e-01 5.1107000e-02 /
CHEB / -2.0344000e+00 -3.3644000e-01 -2.5833000e-02 /
CHEB / -7.4279000e-01 -2.1199000e-01 -4.0130000e-02 /
C4H9O(+m)=C4H7+H2O(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from
!PDepNetwork #1 (DC4H8OH) deltaHrxn(T=298K) = 3.8594344389765283
!kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / -2.4930000e+01 6.7149000e+00 -1.2828000e+00 /
CHEB / 1.3634000e+01 1.4279000e+00 7.1923000e-01 /
CHEB / -4.1393000e+00 -2.5228000e-02 4.7608000e-01 /
CHEB / -1.7955000e+00 -4.3485000e-01 1.5452000e-01 /
CHEB / -6.2448000e-01 -2.3364000e-01 -1.2411000e-02 /
CC4H8OH(+m)=AC4H8OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork
!#1 (DC4H8OH) High-P Limit: intra_H_migration estimate: (Average:)
!Others-R3H_SS C_rad_out_H/NonDeC_Cs_H_out_H/NonDeO
!deltaHrxn(T=298K) = -3.4294822943794223 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / -4.0248000e+00 9.9078000e-01 -1.5557000e-01 /
CHEB / 6.4976000e+00 1.2820000e+00 -7.0726000e-02 /
CHEB / -3.3253000e+00 3.5732000e-01 7.8697000e-02 /
CHEB / -1.9992000e+00 -1.8361000e-01 6.0787000e-02 /
CHEB / -9.8785000e-01 -2.9849000e-01 -1.4160000e-02 /

DC4H8OH+H(+m)=C4H9OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork #3
(C4H9OH) High-P Limit: R_Recombination Primary Kinetic Library: MRH
deltaHrxn(T=298K) = -101.90906048999024 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 1.3664000e+01 4.7464000e-01 -4.9080000e-02 /
CHEB / -1.1753000e+00 8.1668000e-01 -6.5679000e-02 /
CHEB / -8.6386000e-01 5.1192000e-01 -3.4125000e-03 /
CHEB / -4.8253000e-01 2.0632000e-01 3.6914000e-02 /
CHEB / -2.1172000e-01 1.3782000e-02 3.7496000e-02 /

CC4H8OH+H(+m)=C4H9OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork #3
(C4H9OH) High-P Limit: R_Recombination Primary Kinetic Library: MRH
deltaHrxn(T=298K) = -98.47930410902632 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 1.3782000e+01 4.3829000e-01 -4.3901000e-02 /
CHEB / -1.1549000e+00 7.6901000e-01 -6.3553000e-02 /
CHEB / -8.3161000e-01 5.1025000e-01 -1.2535000e-02 /
CHEB / -4.8779000e-01 2.3323000e-01 2.6349000e-02 /
CHEB / -2.3290000e-01 4.0913000e-02 3.3770000e-02 /

BC4H8OH+H(+m)=C4H9OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork #3
(C4H9OH) High-P Limit: R_Recombination Primary Kinetic Library: MRH
deltaHrxn(T=298K) = -99.67905766404826 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 1.3820000e+01 4.4998000e-01 -4.5472000e-02 /
CHEB / -1.2166000e+00 7.8492000e-01 -6.4356000e-02 /
CHEB / -8.4287000e-01 5.1171000e-01 -9.8319000e-03 /
CHEB / -4.7839000e-01 2.2504000e-01 2.9777000e-02 /
CHEB / -2.2331000e-01 3.1961000e-02 3.5223000e-02 /

AC4H8OH+H(+m)=C4H9OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork #3
(C4H9OH) High-P Limit: R_Recombination Primary Kinetic Library: MRH
deltaHrxn(T=298K) = -95.04982181464689 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

CHEB / 5 3 /
CHEB / 1.3821000e+01 4.0531000e-01 -3.9844000e-02 /
CHEB / -1.0670000e+00 7.2168000e-01 -6.0860000e-02 /
CHEB / -7.8935000e-01 5.0136000e-01 -1.8970000e-02 /
CHEB / -4.8258000e-01 2.5309000e-01 1.6875000e-02 /
CHEB / -2.4463000e-01 6.6384000e-02 2.8622000e-02 /

C4H9O+H(+m)=C4H9OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork #3 (C4H9OH)
High-P Limit: R_Recombination Primary Kinetic Library: MRH deltaHrxn(T=298K) = -
104.74881800832169 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 1.3721000e+01 5.0139000e-01 -5.3537000e-02 /
CHEB / -1.3245000e+00 8.4787000e-01 -6.6341000e-02 /
CHEB / -8.9034000e-01 5.0789000e-01 4.5508000e-03 /
CHEB / -4.9147000e-01 1.8467000e-01 4.4190000e-02 /
CHEB / -2.0701000e-01 -4.1993000e-03 3.8657000e-02 /

!
oxidation of C4H8OH
AC4H8OH+O2(+m)=C4H7OH1-1+HO2(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from PDepNetwork #1
(CCCC(OO)OH) deltaHrxn(T=298K) = -16.718172208634233 kcal/mol
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 1.1703000e+01 -1.0270000e+00 -8.7726000e-02 /
CHEB / 7.3859000e-01 1.1079000e+00 2.7689000e-02 /
CHEB / -4.0842000e-02 1.6591000e-01 9.5300000e-02 /
CHEB / -1.4810000e-01 -1.8799000e-01 1.0907000e-02 /
CHEB / -4.2422000e-02 -1.2700000e-01 -4.7276000e-02 /
O2+AC4H8OH=HO2+C3H7CHO 4.68e+11 0.332 -1063.5
!2011 Hansen & Harper & Green (from Zador et al calculated for CH3CHOH+O2=HO2+CH3CHO
(consistent with RMG) (edited by MHS 04.27.11))
O2+C4H9O=HO2+C3H7CHO 3.61E+11 0.0 0.0
!2011 Hansen & Harper & Green
BC4H8OH+O2=C4H7OH1-1+HO2 1.30E+12 0.000 5.000E+03
!2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov
REV/ 3.83E+14 -0.540 2.450E+04 /!
BC4H8OH+O2=C4H7OH2-1+HO2 1.30E+12 0.000 5.000E+03
!2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov
REV/ 4.75E+11 0.213 2.015E+04 /!
CC4H8OH+O2=C4H7OH1-4+HO2 1.30E+12 0.000 5.000E+03
!2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov
REV/ 1.91E+12 -0.020 1.854E+04 /!
CC4H8OH+O2=C4H7OH2-1+HO2 5.30E+11 0.000 5.000E+03
!2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov
REV/ 1.93E+11 0.213 2.015E+04 /!
DC4H8OH+O2=C4H7OH1-4+HO2 1.30E+12 0.000 5.000E+03
!2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov
REV/ 8.63E+10 0.376 2.101E+04 /!

!
!
sub-mechanism of C3H7CHO, C4H7OH and C4H7O from 2011 Hansen & Harper &
Green
C3H7CHO+H=C4H7OJ(8)+H2 2.07e+07 1.760
6.700e+02 !2011 Hansen & Harper & Green
C3H7CHO+H=C4H7OJ(12)+H2 1.39e+06 2.060
1.110e+03 !2011 Hansen & Harper & Green
C3H7CHO+H=C4H7OJ(13)+H2 2.60e+08 1.690
4.780e+03 !2011 Hansen & Harper & Green
C3H7CHO+H=C4H7OJ(16)+H2 1.88e+08 1.750
7.510e+03 !2011 Hansen & Harper & Green
C3H7CHO+CH3=C4H7OJ(8)+CH4 2.92e+04 2.290
5.440e+03 !2011 Hansen & Harper & Green
C3H7CHO+CH3=C4H7OJ(12)+CH4 4.00e+11 0.000
9.500e+03 !2011 Hansen & Harper & Green

```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | |
|---|----------|-------|---------|
| C3H7CHO+CH3=C4H7OJ(13)+CH4 | 2.90e+06 | 1.770 | |
| 8.530e+03 !2011 Hansen & Harper & Green | | | |
| C3H7CHO+CH3=C4H7OJ(16)+CH4 | 8.34e+05 | 1.900 | |
| 1.105e+04 !2011 Hansen & Harper & Green | | | |
| C3H7CHO+OH=C4H7OJ(16)+H2O | 1.88e+05 | 2.51 | 442.16 |
| !2011 Hansen & Harper & Green | | | |
| C3H7CHO+OH=C4H7OJ(13)+H2O | 7.90e+06 | 1.9 | 160. |
| !2011 Hansen & Harper & Green | | | |
| C3H7CHO+O=C4H7OJ(16)+OH | 25650.0 | 3.05 | 3.123e3 |
| !2011 Hansen & Harper & Green | | | |
| C3H7CHO+O=C4H7OJ(13)+OH | 47800.0 | 2.71 | 2.11e3 |
| !2011 Hansen & Harper & Green | | | |
| C3H7CHO+O=C4H7OJ(12)+OH | 47800.0 | 2.71 | 2.11e3 |
| !2011 Hansen & Harper & Green | | | |
| C4H7OJ(16)+H2O2=C3H7CHO+HO2 | 5.76e+00 | 3.16 | |
| 0.75e+03 !2011 Hansen & Harper & Green | | | |
| C4H7OJ(13)+H2O2=C3H7CHO+HO2 | 1.35e+00 | 3.42 | |
| 1.43e+03 !2011 Hansen & Harper & Green | | | |
| C4H7OH1-1(+m)=C3H7CHO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 | | | |
| TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 / | | | |
| CHEB / 4 4 / | | | |
| CHEB / -1.0685000e+01 2.2888000e-01 -3.3032000e-02 2.0907000e-04 / | | | |
| CHEB / 1.6820000e+01 4.3045000e-01 -5.8800000e-02 -6.8637000e-04 / | | | |
| CHEB / -3.9390000e-01 3.5733000e-01 -4.0178000e-02 -3.2348000e-03 / | | | |
| CHEB / -3.2316000e-01 2.6046000e-01 -1.7788000e-02 -5.5452000e-03 / | | | |
| C2H4+CH2CHO(+m)=C4H7OJ(16)(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from | | | |
| TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 / | | | |
| CHEB / 5 3 / | | | |
| CHEB / 5.9110000e+00 5.9389000e-01 -5.1149000e-02 / | | | |
| CHEB / 5.1346000e-01 9.2973000e-01 -3.5420000e-02 / | | | |
| CHEB / -1.9459000e+00 4.4177000e-01 4.4812000e-02 / | | | |
| CHEB / -1.2502000e+00 6.0834000e-02 5.4772000e-02 / | | | |
| CHEB / -6.8759000e-01 -1.0517000e-01 1.6142000e-02 / | | | |
| C4H7OJ(16)+H(+m)=nC3H7+HCO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction | | | |
| TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 / | | | |
| CHEB / 4 4 / | | | |
| CHEB / 1.2810000e+01 -1.0691000e+00 -1.4345000e-01 2.0774000e-02 / | | | |
| CHEB / 9.1734000e-01 9.6711000e-01 3.7766000e-02 -3.9769000e-02 / | | | |
| CHEB / 8.5018000e-02 2.3379000e-01 9.8594000e-02 -2.7235000e-03 / | | | |
| CHEB / -7.4764000e-02 -4.7232000e-02 3.6399000e-02 1.6995000e-02 / | | | |
| C4H7OJ(16)+H(+m)=CH3+C3H5OJ(13)(+m) 1.0E0 0.0 0.0 | | | |
| TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 / | | | |
| CHEB / 4 4 / | | | |
| CHEB / 1.1988000e+01 -1.0291000e+00 -1.4621000e-01 1.9200000e-02 / | | | |
| CHEB / 1.4476000e+00 9.6822000e-01 4.8711000e-02 -4.0075000e-02 / | | | |
| CHEB / 2.0069000e-01 1.9909000e-01 1.0085000e-01 1.2258000e-03 / | | | |
| CHEB / -4.7864000e-02 -6.3055000e-02 2.8919000e-02 1.8296000e-02 / | | | |
| C4H7OJ(16)+H(+m)=C2H5+CH2CHO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction | | | |
| TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 / | | | |
| CHEB / 4 4 / | | | |
| CHEB / 1.2541000e+01 -1.0662000e+00 -1.4358000e-01 2.0650000e-02 / | | | |
| CHEB / 8.6602000e-01 9.6749000e-01 3.8523000e-02 -3.9783000e-02 / | | | |
| CHEB / 7.4443000e-02 2.3127000e-01 9.8792000e-02 -2.4334000e-03 / | | | |
| CHEB / -7.8365000e-02 -4.8586000e-02 3.5864000e-02 1.7111000e-02 / | | | |
| CH3CHCHCHO+H(+m)=C4H7OJ(16)(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from | | | |
| TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 / | | | |
| CHEB / 5 3 / | | | |
| CHEB / 6.6559000e+00 1.8201000e-01 -2.4773000e-01 / | | | |
| CHEB / 6.9088000e-01 2.0362000e+00 9.4096000e-02 / | | | |
| CHEB / -1.8144000e+00 5.5499000e-01 9.8043000e-02 / | | | |
| CHEB / -1.2450000e+00 1.9798000e-02 2.4823000e-02 / | | | |
| CHEB / -6.6045000e-01 -1.1146000e-01 -8.5740000e-03 / | | | |
| C3H6+HCO(+m)=C4H7OJ(13)(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from | | | |
| TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 / | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```
CHEB / 5 3 /
CHEB / 7.3109000e+00 8.8281000e-01 -1.0927000e-01 /
CHEB / -8.8687000e-01 9.6345000e-01 4.5553000e-02 /
CHEB / -1.9724000e+00 2.9785000e-01 6.7463000e-02 /
CHEB / -1.0890000e+00 -4.0639000e-02 2.4734000e-02 /
CHEB / -5.2844000e-01 -1.0449000e-01 -1.1586000e-02 /
C4H7OJ(13)+H(+m)=nC3H7+HCO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 1.2065000e+01 -1.1430000e+00 -1.2024000e-01 1.6065000e-02 /
CHEB / 1.0036000e+00 1.0031000e+00 6.3995000e-03 -3.0295000e-02 /
CHEB / 1.0301000e-01 2.7177000e-01 9.4356000e-02 -7.8975000e-03 /
CHEB / -9.3978000e-02 -3.7730000e-02 4.4883000e-02 1.4270000e-02 /
C4H7OJ(13)+H(+m)=C2H5+CH2CHO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 1.1792000e+01 -1.1397000e+00 -1.2059000e-01 1.6034000e-02 /
CHEB / 9.5559000e-01 1.0037000e+00 7.2865000e-03 -3.0432000e-02 /
CHEB / 9.2269000e-02 2.6889000e-01 9.4806000e-02 -7.6385000e-03 /
CHEB / -9.7655000e-02 -3.9412000e-02 4.4375000e-02 1.4458000e-02 /
C4H7OJ(13)+H(+m)=CH3+C3H5OJ(13) (+m) 1.0E0 0.0 0.0
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 1.1188000e+01 -1.0965000e+00 -1.2612000e-01 1.5787000e-02 /
CHEB / 1.5818000e+00 1.0063000e+00 1.9455000e-02 -3.2378000e-02 /
CHEB / 2.1450000e-01 2.3196000e-01 9.9830000e-02 -4.2233000e-03 /
CHEB / -6.7858000e-02 -5.7378000e-02 3.7407000e-02 1.6573000e-02 /
CH3CHCHCHO+H(+m)=C4H7OJ(13) (+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 9.3483000e+00 1.5707000e+00 -3.2997000e-01 /
CHEB / -1.7522000e+00 8.8302000e-01 1.8763000e-01 /
CHEB / -2.0158000e+00 2.5796000e-01 8.7326000e-02 /
CHEB / -1.0705000e+00 -6.1343000e-02 1.6291000e-02 /
CHEB / -4.9899000e-01 -1.0928000e-01 -1.6366000e-02 /
C4H7OJ(12)+H(+m)=nC3H7+HCO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 1.2023000e+01 -1.2421000e+00 -9.0489000e-02 8.7477000e-03 /
CHEB / 1.4483000e+00 1.0191000e+00 -2.7466000e-02 -1.7710000e-02 /
CHEB / 1.3073000e-01 3.3684000e-01 7.7332000e-02 -1.1371000e-02 /
CHEB / -1.2106000e-01 -9.0429000e-03 5.2885000e-02 8.7459000e-03 /
C4H7OJ(12)+H(+m)=C2H5+CH2CHO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 1.1743000e+01 -1.2382000e+00 -9.1051000e-02 8.8190000e-03 /
CHEB / 1.4067000e+00 1.0204000e+00 -2.6603000e-02 -1.7939000e-02 /
CHEB / 1.1913000e-01 3.3359000e-01 7.8195000e-02 -1.1225000e-02 /
CHEB / -1.2487000e-01 -1.1355000e-02 5.2565000e-02 9.0018000e-03 /
C4H7OJ(12)+H(+m)=CH3+C3H5OJ(13) (+m) 1.0E0 0.0 0.0
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 1.1047000e+01 -1.1882000e+00 -9.9621000e-02 1.0016000e-02 /
CHEB / 2.1186000e+00 1.0308000e+00 -1.4075000e-02 -2.1343000e-02 /
CHEB / 2.2651000e-01 2.9107000e-01 8.8290000e-02 -9.0225000e-03 /
CHEB / -9.5336000e-02 -3.6384000e-02 4.7216000e-02 1.2117000e-02 /
C4H7OJ(12)+H(+m)=CH3+C3H5O-enol2(+m) 1.0E0 0.0 0.0
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 1.0718000e+01 -1.3747000e+00 -8.1684000e-02 5.6644000e-03 /
CHEB / 2.0817000e+00 9.6901000e-01 -7.1663000e-02 -1.0461000e-02 /
CHEB / 3.2736000e-01 4.4346000e-01 5.3067000e-02 -2.2165000e-02 /
CHEB / -8.4344000e-02 7.3039000e-02 7.8729000e-02 -3.5840000e-03 /
C4H7OJ(12)+H(+m)=C3H7CHO(+m) 1.0E0 0.0 0.0
```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 1.3122000e+01 5.3966000e-01 -9.3484000e-02 1.2189000e-02 /
CHEB / -1.1327000e+00 8.5072000e-01 -1.0114000e-01 -1.0829000e-03 /
CHEB / -7.5578000e-01 4.8391000e-01 -1.0311000e-02 -1.0955000e-02 /
CHEB / -4.4010000e-01 2.0538000e-01 2.2781000e-02 -4.4860000e-03 /
nC3H7+CO(+m)=C4H7OJ(8)(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 6.0131000e+00 1.4665000e+00 -1.6439000e-01 /
CHEB / -2.7393000e+00 5.9344000e-01 1.7909000e-01 /
CHEB / -2.4632000e+00 5.9579000e-02 2.2454000e-02 /
CHEB / -1.1143000e+00 -9.7958000e-02 -2.7117000e-02 /
CHEB / -4.0343000e-01 -5.6523000e-02 -2.0229000e-02 /
C4H7OJ(8)+H(+m)=nC3H7+HCO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 1.0695000e+01 -1.3235000e+00 -7.0425000e-02 3.7640000e-03 /
CHEB / 2.1010000e+00 1.0059000e+00 -4.7904000e-02 -9.8158000e-03 /
CHEB / 1.6849000e-01 4.0221000e-01 5.7395000e-02 -1.2584000e-02 /
CHEB / -1.4688000e-01 2.8298000e-02 5.8971000e-02 3.4686000e-03 /
C4H7OJ(8)+H(+m)=C2H5+CH2CHO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 1.0401000e+01 -1.3193000e+00 -7.1105000e-02 3.8900000e-03 /
CHEB / 2.0728000e+00 1.0085000e+00 -4.7279000e-02 -1.0038000e-02 /
CHEB / 1.5388000e-01 3.9880000e-01 5.8683000e-02 -1.2601000e-02 /
CHEB / -1.5073000e-01 2.5161000e-02 5.8982000e-02 3.7552000e-03 /
C4H7OJ(8)+H(+m)=CH3+C3H5OJ(13)(+m) 1.0E0 0.0 0.0
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 9.5422000e+00 -1.2633000e+00 -8.1759000e-02 6.0967000e-03 /
CHEB / 2.9588000e+00 1.0317000e+00 -3.6792000e-02 -1.3854000e-02 /
CHEB / 2.1635000e-01 3.5190000e-01 7.4566000e-02 -1.2352000e-02 /
CHEB / -1.1693000e-01 -9.6272000e-03 5.6824000e-02 7.6301000e-03 /
CH3+C3H5OJ(13)(+m)=nC3H7+HCO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 1.1372000e+01 -1.3112000e+00 -7.3073000e-02 4.3833000e-03 /
CHEB / 1.9559000e+00 1.0113000e+00 -4.5791000e-02 -1.0713000e-02 /
CHEB / 1.5979000e-01 3.9225000e-01 6.1167000e-02 -1.2728000e-02 /
CHEB / -1.3443000e-01 2.0626000e-02 5.8853000e-02 4.2919000e-03 /
CH3+C3H5OJ(13)(+m)=C2H5+CH2CHO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction
TCHEB / 300.0 2000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / 1.1081000e+01 -1.3070000e+00 -7.3742000e-02 4.5053000e-03 /
CHEB / 1.9251000e+00 1.0136000e+00 -4.5117000e-02 -1.0943000e-02 /
CHEB / 1.4589000e-01 3.8882000e-01 6.2399000e-02 -1.2720000e-02 /
CHEB / -1.3830000e-01 1.7619000e-02 5.8797000e-02 4.5810000e-03 /
CH3CHCHCHO+H(+m)=C3H6+HCO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 1.1345000e+01 -6.0793000e-01 -1.8865000e-01 /
CHEB / 1.8442000e+00 6.8240000e-01 1.7821000e-01 /
CHEB / -2.3383000e-02 3.1921000e-02 5.0433000e-02 /
CHEB / -6.3878000e-02 -8.6366000e-02 -1.8325000e-02 /
CHEB / -1.5966000e-02 -3.4715000e-02 -2.2306000e-02 /
CH3CHCHCHO+H(+m)=CH3+C3H4O(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 1.1003000e+01 -6.8565000e-01 -1.6132000e-01 /
CHEB / 2.0051000e+00 8.2888000e-01 1.4818000e-01 /
CHEB / -6.1272000e-02 -3.7874000e-02 6.1423000e-02 /
CHEB / -4.6547000e-02 -1.0579000e-01 -3.2507000e-02 /
```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

CHEB / 2.2750000e-02 -2.4414000e-02 -2.4614000e-02 /
CH3+C3H4O(+m)=C3H6+HCO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 7.1479000e+00 -1.0768000e+00 -3.1819000e-01 /
CHEB / 3.8510000e+00 1.2892000e+00 3.1613000e-01 /
CHEB / 1.2244000e-01 -6.9194000e-02 7.1777000e-02 /
CHEB / -6.6355000e-03 -1.3254000e-01 -4.5494000e-02 /
CHEB / 1.0894000e-02 -3.1080000e-02 -2.9981000e-02 /
CH3+C3H4O(+m)=C2H4+CH2CHO(+m) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 5.5917000e+00 -1.5800000e+00 -2.5066000e-01 /
CHEB / 5.0107000e+00 1.6293000e+00 1.7383000e-01 /
CHEB / -1.2872000e-01 1.8690000e-01 1.0795000e-01 /
CHEB / -2.7007000e-01 -1.0932000e-01 2.1285000e-02 /
CHEB / -1.2413000e-01 -9.8274000e-02 -1.6581000e-02 /
SAXC4H7+OH(+m)=C4H7OH2-1(+M) 1.0E0 0.0 0.0 !NetReaction from
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 1.2311000e+01 3.2329000e-01 -2.8294000e-02 /
CHEB / -1.1064000e+00 5.9931000e-01 -4.6700000e-02 /
CHEB / -8.5778000e-01 4.7464000e-01 -2.2305000e-02 /
CHEB / -6.4119000e-01 3.1474000e-01 4.4849000e-03 /
CHEB / -4.5495000e-01 1.6585000e-01 2.2604000e-02 /
!
!           reaction of CC3H6OH and C3H5OH
C2H4+CH2OH(+m)=CC3H6OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0
!2011 Hansen & Harper & Green
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 5.1513000e+00 6.1961000e-01 1.5255000e-02 /
CHEB / -1.5127000e+00 8.4198000e-01 1.3872000e-02 /
CHEB / -2.2367000e+00 3.4034000e-01 -5.3980000e-02 /
CHEB / -9.7673000e-01 1.5481000e-01 -5.6513000e-02 /
CHEB / -3.8093000e-01 1.0234000e-01 1.8402000e-02 /
C3H5OH+H(+m)=CC3H6OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0
!2011 Hansen & Harper & Green
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 8.0407000e+00 1.6901000e+00 -9.1779000e-02 /
CHEB / -1.8018000e+00 -1.8528000e-01 1.0984000e-01 /
CHEB / -1.3513000e+00 2.8058000e-01 -3.1834000e-01 /
CHEB / -7.4490000e-01 5.9254000e-01 -2.4404000e-02 /
CHEB / -5.2715000e-01 2.7313000e-01 1.9072000e-01 /
C3H5OH(+m)=C2H3+CH2OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0
!2011 Hansen & Harper & Green
TCHEB / 300.0 2100.0 / PCHEB / 0.01 100.0 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / -2.4591000e+01 1.1744000e+00 -3.7013000e-01 9.3729000e-02 /
CHEB / 2.9114000e+01 1.2461000e+00 -1.7656000e-01 -3.0030000e-02 /
CHEB / -8.8524000e-01 5.5572000e-01 3.1694000e-02 -3.2621000e-02 /
CHEB / -5.0644000e-01 1.7648000e-01 5.4567000e-02 -3.7844000e-03 /
C3H5OH(+m)=aC3H5+OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0
!2011 Hansen & Harper & Green
TCHEB / 300.0 2100.0 / PCHEB / 0.01 100.0 /
CHEB / 4 4 /
CHEB / -1.8131000e+01 2.8382000e-01 -4.1581000e-02 6.8979000e-04 /
CHEB / 2.4331000e+01 4.5092000e-01 -7.3156000e-02 7.3116000e-04 /
CHEB / -4.7723000e-01 3.6416000e-01 -2.4369000e-02 -7.0657000e-03 /
CHEB / -3.5266000e-01 2.1093000e-01 1.1356000e-02 -7.7840000e-03 /
C3H5OH+H=C3H6+OH 3.20E+22 -2.39 11180
!Ref. C4H81+H = C3H6+CH3 in 2009 Kiefer et al.

```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | |
|---|----------------|--------|--------|
| C3H5OH+H=C2H4+CH2OH | 8.80E+16 | -1.05 | 6461.0 |
| !Ref. C3H6+H=C2H4+CH3 in USC Mech II | | | |
| C2H3CHO+H=C2H4+HCO | 1.46E+30 | -4.34 | 21647. |
| !Ref. C4H6+H = C2H4+C2H3 in USC Mech II | | | |
| ! reaction of C2H4OH and C2H3OH | | | |
| C2H4+OH(+m)=C2H4OH(+m) 1.0E0 0.0 0.0 | | | |
| !2011 Hansen & Harper & Green | | | |
| TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 / | | | |
| CHEB / 5 3 / | | | |
| CHEB / 1.1100000e+01 8.5680000e-01 -1.3851000e-01 / | | | |
| CHEB / -1.9142000e+00 7.6643000e-01 6.2856000e-02 / | | | |
| CHEB / -1.2074000e+00 2.3621000e-01 7.1501000e-02 / | | | |
| CHEB / -6.6981000e-01 3.0217000e-04 2.9791000e-02 / | | | |
| CHEB / -3.4387000e-01 -5.6010000e-02 3.1016000e-04 / | | | |
| C2H3OH+H(+m)=CH3CHO+H(+m) 1.0E0 0.0 0.0 | | | |
| !2011 Hansen & Harper & Green | | | |
| TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 / | | | |
| CHEB / 5 3 / | | | |
| CHEB / 1.1686000e+01 -8.9255000e-01 -1.8968000e-01 / | | | |
| CHEB / 1.0258000e+00 8.8111000e-01 1.1329000e-01 / | | | |
| CHEB / -1.0827000e-01 1.5423000e-01 1.0637000e-01 / | | | |
| CHEB / -1.1460000e-01 -6.6920000e-02 1.3608000e-02 / | | | |
| CHEB / -4.7884000e-02 -6.4850000e-02 -2.4835000e-02 / | | | |
| C2H3OH=CH3CHO | 7.42E+46 | -10.56 | |
| 6.742E+04 !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| PLOG / 0.1 | 7.42E+46 | -10.56 | |
| 6.72E+04 /! | | | |
| PLOG / 1.0 | 4.42E+42 | -9.09 | |
| 67069.198 /! | | | |
| PLOG / 100.0 | 2.90E+27 | -4.35 | |
| 61612.896 /! | | | |
| CH3CHO+OH=CH3+HOCHO | 3.00E+15 | -1.076 | 0.000 |
| C2H3OH+HOCHO=CH3CHO+HOCHO | 2.81E-02 | 3.286 | -4509 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| | Rev / 7.04E+04 | 1.209 | 556 |
| / | | | |
| C2H3OH=C2H3+OH | 3.399E+20 | -1.564 | |
| 1.107E+05 !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C2H3OH=CH2CHO+H | 1.243E+14 | -0.397 | |
| 9.539E+04 !2010 Black & Curran & Pichon & Simmie & Zhukov | | | |
| C2H3OH+HO2=CH3CHOH+O2 | 4.11E+06 | 1.62 | 15440 |
| !2009 da Silva and Bozzelli C2H3OH+HO2 calculation | | | |
| C2H3OH+HO2=CH3CHO+HO2 | 1.49E+05 | 1.67 | 6810 |
| !2009 da Silva and Bozzelli C2H3OH+HO2 calculation | | | |
| C2H3OH+OH=HCCHOH+H2O | 2.11E+06 | 2.00 | 2778 |
| !2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook | | | |
| C2H3OH+OH=CH2COH+H2O | 1.11E+06 | 2.00 | 1451 |
| !2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook | | | |
| C2H3OH+OH=CH2CHO+H2O | 7.46E+11 | 0.30 | 1634 |
| !2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook | | | |
| C2H3OH+H=HCCHOH+H2 | 8.04E+05 | 2.50 | 12280 |
| !2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook | | | |
| C2H3OH+H=CH2COH+H2 | 4.05E+05 | 2.50 | 9794 |
| !2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook | | | |
| C2H3OH+H=CH2CHO+H2 | 1.50E+07 | 1.60 | 3038 |
| !2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook | | | |
| C2H3OH+O=HCCHOH+OH | 2.81E+13 | 0.00 | 5200 |
| !2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook | | | |
| C2H3OH+O=CH2COH+OH | 2.81E+13 | 0.00 | 5200 |
| !2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook | | | |
| C2H3OH+O=CH2CHO+OH | 2.81E+13 | 0.00 | 5200 |
| !2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook | | | |
| C2H3OH+HO2=HCCHOH+H2O2 | 5.60E+12 | 0.00 | 17700 |
| !2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

C2H3OH+HO2=CH2COH+H2O2          5.60E+12      0.00      17700
!2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook
C2H3OH+HO2=CH2CHO+H2O2          5.60E+12      0.00      17700
!2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook
C2H3OH+CH3=HCCHOH+CH4          3.98E+11      0.00      9500
!2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook
C2H3OH+CH3=CH2COH+CH4          3.98E+11      0.00      9500
!2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook
C2H3OH+CH3=CH2CHO+CH4          3.98E+11      0.00      9500
!2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook
CH2COH=H+CH2CO                  1.00E+14      0.00      25000
!2010 Veloo & Wang & Egolfopoulos & Westbrook
!
#####
#####
! #####C0-C4 Mechanism under this line are from USC Mech II and C4H8
model#####
!
#####
#####
! USC Mech II :Wang H, You X, Joshi AV, Davis SG, Laskin A, Egolfopoulos F, et al.
High-Temperature Combustion Reaction Model of H2/CO/C1-C4 Compounds,
http://ignisuscedu/USC_Mech_IIhtm. 2007
! C4H8 model :Zhang YJ, Cai JH, Zhao L et al. An experimental and kinetic modeling
study of three butene isomers pyrolysis at low pressure. Combustion and Flame.
2011:10.1016
!
!#####nC4H10
reactions#####
C4H10 (+M)=nC3H7+CH3 (+M)          4.28E14      0.0      69902
!04 OMA
/
LOW / 5.34E17      0.0      42959
TROE / 0.28      0.1 1500.0
50000.0 /
C4H10 (+M)=C2H5+C2H5 (+M)          2.72E15      0.0      75605
!04 OMA
/
LOW / 4.72E18      0.0      49575
TROE / 0.28      0.1 1500.0
50000.0 /
pC4H9+H(+M) = C4H10(+M)          3.60E+13      0.00      0.0      !
=(nC3H7+H) TS3 600 cm-1 JetSurF 2.0
LOW / 3.01E+48      -9.32      5833.6 /
TROE / 0.498 1314.0 1314.0 50000.0 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/

sC4H9+H(+M) = C4H10(+M)          2.40E+13      0.00      0.0      !
=(iC3H7+H) TS3 600 cm-1 JetSurF 2.0
LOW / 1.70E+58 -12.08      11263.7 /
TROE / 0.649 1213.1 1213.1 13369.7 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/

C4H10+H = pC4H9+H2          1.33E+06      2.54      6756
!2006 Orme & Curran & Simmie
C4H10+H = sC4H9+H2          2.60E+06      2.40      4471
!2006 Orme & Curran & Simmie
C4H10+CH3 = pC4H9+CH4          9.06E-01      3.65      7154
!2006 Orme & Curran & Simmie
C4H10+CH3 = sC4H9+CH4          3.02E+00      3.46      5481
!2006 Orme & Curran & Simmie
C4H10+C2H5 = pC4H9+C2H6          1.58E+11      0.00      12300
!2009 Westbrook & Pitz et al.
C4H10+C2H5 = sC4H9+C2H6          1.00E+11      0.00      10400
!2009 Westbrook & Pitz et al.

```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

!
!#####reactions of
iC4H10#####
iC4H10(+M) = iC3H7+CH3(+M) 4.83E+16 0.0 79900
!2004 Oehlschlaeger & Davidson & Hanson
LOW /2.41E+19 0.0 52600 /
TROE / 0.75 0.1 750.0 50000.0 /
iC4H9+H(+M) = iC4H10(+M) 3.60E+13 0.00 0.0
!USC Mech II(TS4, 600cm-1)
LOW /3.27E+56 -11.74 6430.8 /
TROE / 0.506 1266.6 1266.6 50000.0 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
tC4H9+H(+M) = iC4H10(+M) 2.40E+13 0.00 0.0
!USC Mech II(TS4, 600cm-1)
LOW /1.47E+61 -12.94 8000.0 /
TROE / 0.000 1456.4 1000.0 10000.5 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
iC4H10+H = tC4H9+H2 6.00E+05 2.4 2583
!2006 Orme & Curran & Simmie
iC4H10+H = iC4H9+H2 2.00E+06 2.54 6756
!2006 Orme & Curran & Simmie
!
!#####reactions of pC4H9 and
sC4H9#####
pC4H9(+M) = C2H4+C2H5(+M) 1.00E+13 0.00 28366.4
!USC Mech II(98TSA !BS)
LOW /7.10E-35 15.41 -600.0 /
TROE /-5.91 333.0 28.0 50000.0 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
sC4H9(+M) = C3H6+CH3(+M) 1.80E+13 0.00 29348.0
!USC Mech II(98TSA !BS)
LOW /4.00E-39 16.78 -600.4 /
TROE /-7.03 314.0 28.0 50000.0 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
C4H81+H(+M) = pC4H9(+M) 1.33E+13 0.00 3260.7
! =(C3H6+H) TS5 600 cm-1
LOW / 6.26E+38 -6.66 7000.0 /
TROE / 1.000 1000.0 1310.0 48097.0 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
C4H81+H(+M) = sC4H9(+M) 1.33E+13 0.00 1559.8
! =(C3H6+H) TS5 600 cm-1
LOW / 8.70E+42 -7.50 4721.8 /
TROE / 1.000 1000.0 645.4 6844.3 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
C4H82+H(+M) = sC4H9(+M) 1.33E+13 0.00 1559.8
! =(C3H6+H=iC3H7) TS5 600cm-1
LOW / 8.70E+42 -7.50 4721.8 /
TROE / 1.000 1000.0 645.4 6844.3 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
!#####reactions of
C4H82#####
CH3CHCH+CH3(+M) = C4H82(+M) 5.00E+13 0.0 0.0
!Ref C2H3+CH3(+M)=C3H6(+M)
LOW /8.54E+58 -11.940 9769.80 /
TROE /0.175 1340.6 60000.0 10139.8 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/C2H2/3.00/ C2H4/3.00/
C4H82 = aC3H5+CH3 0.75E+66 -15.6 97300
!2012 C4H8 Pyrolysis model
C4H82+H = SAXC4H7+H2 3.16E+06 2.5 6756
!Ref C6H12+H=SAXC6H11+H2 in 2009 Kiefer et al. x2
C4H82+H=CH3CCHCH3+H2 1.32E+06 2.53 12240.0
!Ref C2H4+H=C2H3+H2
C4H82 = H+SAXC4H7 4.60E+84 -20.03 132787
!Ref C3H6=aC3H5+H in 2009 Kiefer et al. x2 25Torr/5 to 5Torr

```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

C4H82+H = C3H6+CH3 3.46E+17 -1.05 6461.0
!Ref C3H6+H=C2H4+CH3 x2 in USC Mech II (91TSA RRKM 0.1 atm)
C4H82+CH3 = SAXC4H7+CH4 4.40E+00 3.50 5675.0
!Ref C3H6+CH3=aC3H5+CH3 x2 in USC Mech II
!
#####reactions of
C4H81#####
aC3H5+CH3(+M) = C4H81(+M) 1.00E+14 -0.32 -262.3
!USC Mech II (91TSA)
LOW / 3.91E+60 -12.81 6250.0 /
TROE / 0.104 1606.0 60000.0 6118.4 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
C2H5+C2H3(+M) = C4H81(+M) 1.50E+13 0.00 0.0
!USC Mech II (86TSA/HAM)
LOW / 1.55E+56 -11.79 8984.5 /
TROE / 0.198 2277.9 60000.0 5723.2 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
C4H7+H(+M) = C4H81(+M) 3.60E+13 0.00 0.0
!USC Mech II (= nC3H7+H)
LOW / 3.01E+48 -9.32 5833.6 /
TROE / 0.498 1314.0 1314.0 50000.0 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
C4H81+H=C4H82+H 5.00E+14 -0.26 7600.0
!Ref: pC3H4+H = aC3H4+H in USC Mech II
SAXC4H7+H=C4H81 5.00E+13 0.0 5000.0
!EST
C4H7-2+H = C4H81 1.00E+13 0.0 0.0
!EST
C4H81+H = SAXC4H7+H2 1.30E+06 2.40 4471.0
!JetSurF 2.0 (C3H8+H)
C4H81+H = C4H7+H2 1.30E+06 2.4 4470
!Ref C6H12+H=C6H11-5+H2 in 2009 Kiefer et al.
C4H81+H = C4H7-2+H2 4.00E+05 2.50 9790.0
!Ref C3H6+H=CH3CCH2+H2 in USC Mech II (91TSA)
C4H81+H = C3H6+CH3 3.20E+22 -2.39 11180
!2009 Kiefer et al. 25Torr
C4H81+H = C2H4+C2H5 8.80E+16 -1.05 6461.0
!Ref C3H6+H=C2H4+CH3 in USC Mech II (91TSA RRKM 0.1 atm)
C4H81+CH3 = SAXC4H7+CH4 2.82E+00 3.60 7153
!Ref C6H12+CH3=SAXC6H11+CH4 in 2009 Kiefer et al.
C4H81+CH3 = C4H7+CH4 4.50E-01 3.65 7153.0
!USC Mech II (C3H8+CH3)
C4H81+aC3H5 = SAXC4H7+C3H6 7.90E+10 0.00 12400
!LLNL
C4H81+OH=C4H7+H2O 7.000E+02 2.660 527.00
C4H81+OH=SAXC4H7+H2O 6.200E+06 2.000 -298.0
!USC Mech II 2X(C3H6+OH)
!
! reactions of iC4H7 iC4H7-1
iC4H7+H = aC3H5+CH3 2.20E+51 -9.98 37730.0
!USC Mech II
iC4H7=aC3H4+CH3 0.50E+12 0.0 51000
!2009 Yasunaga et al. /20 to 5 Torr
iC4H7-1=pC3H4+CH3 1.20E+13 0.0 37000
!2009 Yasunaga et al. /10 to 5 Torr
iC4H7+H=aC3H4+CH4 6.31E+13 0.0 0.0
!2009 Yasunaga et al.
iC4H7-1+H=pC3H4+CH4 3.00E+13 0.0 0.0
!EST
iC4H7-1=iC4H7 5.00E+11 0.0 36000
!2009 Yasunaga et al. /10 to 5 Torr
iC4H7=SAXC4H7 6.00E+13 0. 70000
!Assume by this work 6.00E+13

```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | |
|--|---------------------|---------|----------------|---|
| iC4H7+H=SAXC4H7+H | 1.47E+13 | 0.26 | 4103 | |
| !Ref aC3H4+H=pC3H4+H | | | | |
| ! | | | | |
| ! reactions of saxC4H7 C4H7 C4H7-2 | | | | |
| C4H7(+M) = SAXC4H7(+M) | 5.75E+12 | 0.0 | 30400 | |
| !2010 Miyoshi | | | | |
| | LOW /1.17E+15 | 0.0 | 8170 | / |
| ! | | | | |
| | TROE /0.031 50 | 100000 | 50000 | / |
| SAXC4H7(+M) = C4H6+H(+M) | 4.70E+08 | 1.32 | 44697.6 | |
| !USC Mech II (08/TSAwip) | | | | |
| | LOW /4.6E-37 | 15.37 | -603.1 | / |
| | H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ | CO/1.5/ | CO2/2/ C2H6/3/ | |
| C4H7(+M)=C2H3+C2H4(+M) | 1.78E14 | 0.0 | 18590 | |
| !2010 Miyoshi | | | | |
| | LOW / 4.2E+37 | -6.262 | 18970 | / |
| | TROE / 1 50 | 1670 | 50000 | / |
| SAXC4H7+CH3=C4H6+CH4 | 3.00E+12 | -0.32 | -131.0 | |
| !Ref aC3H5+CH3=aC3H4+CH4 | | | | |
| C4H612+H = SAXC4H7 | 1.20E+10 | 0.69 | 3000 | |
| !2007 Gueniche & Battin et al./10 for pressure falloff | | | | |
| C4H7-2 = SAXC4H7 | 2.00E+12 | 0.0 | 47000 | |
| !2007 Gueniche & Battin et al./10 for pressure falloff | | | | |
| C4H7-2 = CH3+aC3H4 | 2.00E+12 | 0.0 | 32500 | |
| !2007 Gueniche & Battin et al./10 for pressure falloff | | | | |
| C4H7-2 = C4H7 | 3.30E+08 | 1.0 | 43300 | |
| !2007 Gueniche & Battin et al./10 for pressure falloff | | | | |
| C4H612+H = C4H7-2 | 1.30E+12 | 0.0 | 3200 | |
| !2007 Gueniche & Battin et al./10 for pressure falloff | | | | |
| CH3CCHCH3=pC3H4+CH3 | 2.00E+12 | 0.0 | 31500 | |
| !2007 Gueniche & Battin et al./10 for pressure falloff | | | | |
| ! | | | | |
| ! reactions of C4H6 | | | | |
| C2H3+C2H3 = C4H6 | 7.00E+57 | -13.82 | 17629. | |
| !USC Mech II (RRKM 0.026 atm WAN/FRE) | | | | |
| C4H6 = C4H4+H2 | 0.50E+15 | 0.0 | 94700. | |
| !USC Mech II (96HID/HIG) /5 to 5 Torr | | | | |
| C4H6 = H2CC+C2H4 | 1.00E+13 | 0.0 | 85000.0 | |
| !Est | | | | |
| C4H612+H = C4H6+H | 2.00E+13 | 0.0 | 4000. | |
| !Estimated | | | | |
| C4H6+H = nC4H5+H2 | 1.33E+06 | 2.53 | 12240. | |
| !USC Mech II | | | | |
| C4H6+H = iC4H5+H2 | 6.65E+05 | 2.53 | 9240. | |
| !USC Mech II (Estimated) | | | | |
| C4H6+H = C2H4+C2H3 | 1.46E+30 | -4.34 | 21647. | |
| !USC Mech II (97WAN/FRE 1 atm) | | | | |
| C4H6+H = pC3H4+CH3 | 2.00E+13 | 0.0 | 7000. | |
| !Estimated 2.00E+12 | | | | |
| C4H6+H = aC3H4+CH3 | 2.00E+13 | 0.0 | 7000. | |
| !Estimated 2.00E+12 | | | | |
| C4H6+CH3 = nC4H5+CH4 | 2.00E+14 | 0.0 | 22800. | |
| !96HID/HIG | | | | |
| C4H6+CH3 = iC4H5+CH4 | 1.00E+14 | 0.0 | 19800. | |
| !96HID/HIG | | | | |
| C4H6+C3H3 = nC4H5+aC3H4 | 1.00E+13 | 0.0 | 22500. | |
| !96HID/HIG | | | | |
| C4H6+C3H3 = iC4H5+aC3H4 | 0.50E+13 | 0.0 | 19500. | |
| !96HID/HIG | | | | |
| iC4H5+H=C4H6 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 | |
| !EST | | | | |
| nC4H5+H=C4H6 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 | |
| !EST | | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | |
|---|--|---------|------------|
| iC4H5+H = C3H3+CH3 | 2.00E+13 | 0.0 | 2000. |
| !USC Mech II (Estimated) | | | |
| C4H5-2=C4H4+H | 3.33E+20 | -3.125 | 47560 |
| !EST | | | |
| ! | | | |
| ! Reaction of C4H4 | | | |
| H2CC+C2H2(+M) = C4H4(+M) | 3.50E+05 | 2.055 | -2400. |
| !USC Mech II (99LAS/WAN) | | | |
| | LOW /1.40E+60 | -12.599 | 7417. / |
| | TROE /0.98 560. | 580. | 4164. / |
| | H2/2.0/ CH4/2.0/ H2O/6.0/ C2H2/3.0/ CO/1.5/ C2H4/3.0/ C2H6/3.0/ CO2/2.0/ | | |
| C2H3+C2H = C4H4 | 1.00E+14 | 0.00 | 0. |
| !1988 Duran | | | |
| aC3H5+CH = C4H4+H2 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| C3H3+CH2* = C4H4+H | 4.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| !2007 Gueniche & Glaude & Fournet & Battin | | | |
| C4H4+H = nC4H3+H2 | 6.65E+05 | 2.53 | 12240. |
| !USC Mech II (97WAN/FRE) | | | |
| C4H4+H = iC4H3+H2 | 3.33E+05 | 2.53 | 9240. |
| !USC Mech II (97WAN/FRE) | | | |
| C3H3+CH2=C4H4+H | 5.00E+13 | 0.00 | 0. |
| !2007 Gueniche & Glaude & Fournet & Battin(1992 Miller) | | | |
| C3H2+CH3=C4H4+H | 5.00E+12 | 0.00 | 0. |
| !USC Mech II | | | |
| C4H4+OH = nC4H3+H2O | 3.10E+07 | 2.0 | 3430. |
| !97WAN/FRE | | | |
| C4H4+OH = iC4H3+H2O | 1.55E+07 | 2.0 | 430. |
| !97WAN/FRE | | | |
| C4H4+O = C3H3+HCO | 6.000E+08 | 1.450 | -860 |
| ! = C4H6+O | | | |
| ! | | | |
| ! reactions of C4H3 | | | |
| C2H2+C2H(+M) = nC4H3(+M) | 8.30E+10 | 0.899 | -363.00 |
| !USC Mech II (92WAN) | | | |
| | LOW /1.240E+31 | -4.718 | 1871.00 / |
| | TROE /1.0 100. | 5613. | 13387. / |
| | H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/ C2H6/3.0/ | | |
| | C2H2/2.5/ C2H4/2.5/ | | |
| C2H2+C2H(+M) = iC4H3(+M) | 8.30E+10 | 0.899 | -363.00 |
| !USC Mech II (92WAN) | | | |
| | LOW /1.240E+31 | -4.718 | 1871.00 / |
| | TROE /1.0 100. | 5613. | 13387. / |
| | H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/ C2H6/3.0/ | | |
| | C2H2/2.5/ C2H4/2.5/ | | |
| C4H2+H(+M)<=>iC4H3(+M) | 4.31E+10 | 1.160 | 1751.91 |
| !USC Mech II (92WAN) | | | |
| | H2/2.00/ H2O/12.00/ CO2/3.60/ CO/1.75/ AR/0.70/ | | |
| | CH4/2.00/ C2H6/3.00/ | | |
| | LOW /2.30e+45 | -8.100 | 2507.17 / |
| | TROE /0.0748 | 1.00 | -4216.00 / |
| C4H2+H<=>nC4H3 | 1.37e+39 | -7.87 | 15442.16 |
| ! | | | |
| C3H3+CH = nC4H3+H | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| !USC Mech II (Estimated) | | | |
| C3H2+CH2 = nC4H3+H | 5.00E+13 | 0.0 | 0. |
| !USC Mech II (92MIL/MEL) | | | |
| C2H2+C2H2 = C4H2+H2 | 1.50E+13 | 0.0 | 42700 |
| !2007 Gueniche & Glaude & Fournet & Battin(Leung 95) | | | |
| C2H2+C2H = C4H2+H | 9.60E+13 | 0.00 | 0.00 |
| !USC Mech II (91SHI/MIC, 92KOS/FUK, 93FAR/MOR) | | | |
| ! | | | |
| ! #C3 | | | |
| ! reactions of C3H7 | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

```

C3H6+H(+m)=nC3H7(+m) 1.0E0 0.0 0.0
!2011 Hansen & Harper & Green
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 8.9772000e+00 2.1284000e+00 -3.2537000e-01 /
CHEB / -1.0895000e+00 5.8705000e-01 1.9159000e-01 /
CHEB / -1.4038000e+00 2.2366000e-01 7.3516000e-02 /
CHEB / -7.2291000e-01 3.3841000e-02 7.1462000e-03 /
CHEB / -3.4559000e-01 -2.2149000e-02 -1.2492000e-02 /
C2H4+CH3(+m)=nC3H7(+m) 1.0E0 0.0 0.0
!2011 Hansen & Harper & Green
TCHEB / 290.0 3000.0 / PCHEB / 0.009869232667160128 98.69232667160128 /
CHEB / 5 3 /
CHEB / 7.5747000e+00 1.1761000e+00 -2.0378000e-01 /
CHEB / 6.7200000e-01 6.3972000e-01 1.5056000e-01 /
CHEB / -1.4459000e+00 2.1652000e-01 6.1788000e-02 /
CHEB / -7.5644000e-01 7.4581000e-03 8.1627000e-03 /
CHEB / -3.6805000e-01 -3.8464000e-02 -9.7210000e-03 /
C3H6+H(+M) = iC3H7(+M) 1.33E+13 0.00 1559.8
!USC Mech II (91TSA)
LOW /8.70E+42 -7.50 4721.8 /
TROE /1.000 1000.0 645.4 6844.3 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
iC3H7+H = CH3+C2H5 5.90E+23 -2.81 10009.0
!USC Mech II (88TSA RRKM 0.1 atm)
!
! reactions of C3H6
C2H3+CH3 (+M) = C3H6(+M) 2.50E+13 0.000 0.00
!USC Mech II (86TSA/HAM)
LOW /4.270E+58 -11.940 9769.80 /
TROE /0.175 1340.6 60000.0 10139.8 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
C2H2/3.00/ C2H4/3.00/
aC3H5+H(+M) = C3H6(+M) 2.00E+14 0.00 0.0
!USC Mech II (91TSA)
LOW / 1.33E+60 -12.00 5967.8 /
TROE / 0.020 1096.6 1096.6 6859.5 /
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ AR/0.7/
C3H6+H = CH3CCH2+H2 4.00E+05 2.50 9790.0
!USC Mech II (91TSA)
C3H6+H = CH3CHCH+H2 8.04E+05 2.50 12283.0
!USC Mech II (91TSA)
C3H6+CH3 = CH3CCH2+CH4 8.40E-01 3.50 11660.0
!USC Mech II (91TSA)
C3H6+CH3 = CH3CHCH+CH4 1.35E+00 3.50 12848.0
!USC Mech II (91TSA)
C3H6+H = aC3H5+H2 1.73E+05 2.50 2490.0
!USC Mech II (91TSA)
C3H6+H = C2H4+CH3 8.80E+16 -1.05 6461.0
!USC Mech II (91TSA RRKM 0.1 atm)
C3H6+CH3 = aC3H5+CH4 2.20E+00 3.50 5675.0
!USC Mech II (91TSA)
C3H6 = H2 + pC3H4 1.18E+95 -23.6 125649
!2009 Kiefer et al.
C3H6 = H2 + aC3H4 1.18E+95 -23.6 125649
!ref:C3H6 = H2 + pC3H4
C3H6+O = CH2CO+CH3+H 0.80E+08 1.65 327.0
!USC Mech II (91TSA)
C3H6+O = C2H3CHO+H+H 0.40E+08 1.65 327.0
!USC Mech II (91TSA)
C3H6+O = C2H5+HCO 3.50E+07 1.65 -972.0
!USC Mech II (91TSA)
C3H6+O = aC3H5+OH 1.80E+11 0.70 5880.0
!USC Mech II (91TSA)

```

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | |
|---|-------------------|-----------|--------|-----------|
| C3H6+O = CH3CCH2+OH | | 6.00E+10 | 0.70 | 7630.0 |
| !USC Mech II (91TSA) | | | | |
| C3H6+O = CH3CHCH+OH | | 1.21E+11 | 0.70 | 8960.0 |
| !USC Mech II (91TSA) | | | | |
| C3H6+OH = aC3H5+H2O | | 3.10E+06 | 2.00 | -298.0 |
| !USC Mech II (91TSA) | | | | |
| C3H6+OH = CH3CCH2+H2O | | 1.10E+06 | 2.00 | 1450.0 |
| !USC Mech II (91TSA) | | | | |
| C3H6+OH = CH3CHCH+H2O | | 2.14E+06 | 2.00 | 2778.0 |
| !USC Mech II (91TSA) | | | | |
| ! | reactions of C3H5 | | | |
| C2H2+CH3=aC3H5 | | 8.2E+53 | -13.32 | 33200. |
| !2008 Miller & Senosiain & Klippenstein | | | | |
| | PLOG /0.1 | 8.2E+53 | -13.32 | 33200./ |
| | PLOG /1. | 2.7E+53 | -12.82 | 35700./ |
| | PLOG /10. | 4.4E+49 | -11.40 | 36700./ |
| | PLOG /100. | 3.8E+44 | -9.63 | 37600./ |
| pC3H4+H=aC3H5 | | 1.1E+60 | -14.56 | 28100. |
| !2008 Miller & Senosiain & Klippenstein | | | | |
| | PLOG /0.1 | 1.1E+60 | -14.56 | 28100./ |
| | PLOG /1. | 4.9E+60 | -14.37 | 31600./ |
| | PLOG /10. | 2.2E+59 | -13.61 | 34900./ |
| | PLOG /100. | 1.6E+55 | -12.07 | 37500./ |
| aC3H4+H=aC3H5 | | 9.60E+61 | -14.67 | 26000.0 |
| !USC Mech II (99DAV/LAW RRKM) | | | | |
| | PLOG /0.1 | 9.60E+61 | -14.67 | 26000.0 / |
| | PLOG /1.0 | 1.52E+59 | -13.54 | 26949.0 / |
| | PLOG /2.0 | 3.78E+57 | -12.98 | 26785.0 / |
| | PLOG /5.0 | 7.34E+54 | -12.09 | 26187.0 / |
| | PLOG /10.0 | 2.40E+52 | -11.30 | 25400.0 / |
| | PLOG /100.0 | 6.90E+41 | -8.06 | 21300.0 / |
| aC3H5 = CH3CCH2 | | 3.90E+59 | -15.42 | 75400.0 |
| !USC Mech II (99DAV/LAW RRKM 0.1 atm) | | | | |
| aC3H5 = CH3CHCH | | 1.30E+55 | -14.53 | 73800.0 |
| !USC Mech II (99DAV/LAW RRKM 0.1 atm) | | | | |
| C2H5+C2H3 = aC3H5+CH3 | | 8.00E+25 | -3.46 | 11775.0 |
| !USC Mech II (86TSA/HAM RRKM 0.1 atm) | | | | |
| aC3H5+H = aC3H4+H2 | | 9.56E+03 | 2.80 | 3291.11 |
| !2009 Pitsch | | | | |
| aC3H5+CH3 = aC3H4+CH4 | | 3.00E+12 | -0.32 | -131.0 |
| !2009 Kifer et al | | | | |
| aC3H5+aC3H5 = pC3H4+C3H6 | | 8.43E+10 | 0.0 | -263 |
| !2009 Kifer et al | | | | |
| CH3CCH2 = CH3CHCH | | 1.60E+44 | -12.16 | 52200.0 |
| !USC Mech II (99DAV/LAW RRKM 0.1 atm) | | | | |
| H+pC3H4 = CH3CHCH | | 3.38E+50 | -12.75 | 7722 |
| !2008 Miller 30 Torr /4 | | | | |
| CH3+C2H2 = CH3CHCH | | 1.70E+49 | -12.3 | 16642 |
| !2008 Miller 30 Torr /4 | | | | |
| H+aC3H4 = CH3CCH2 | | 0.40E+53 | -13.10 | 14472 |
| !2008 Miller 30 Torr /4 | | | | |
| H+pC3H4 = CH3CCH2 | | 0.80E+52 | -12.69 | 14226 |
| !2008 Miller 30 Torr /4 | | | | |
| C2H2+CH3 = CH3CCH2 | | 6.80E+20 | -4.16 | 18000.0 |
| !USC Mech II (99DAV/LAW RRKM 0.1 atm) | | | | |
| CH3CCH2+H = aC3H5+H | | 1.47E+13 | 0.26 | 4103 |
| !Ref aC3H4+H=pC3H4+H | | | | |
| CH3CHCH+H = aC3H5+H | | 1.47E+13 | 0.26 | 4103 |
| !Ref H+aC3H4=H+pC3H4 | | | | |
| aC3H5+OH = aC3H4+H2O | | 6.00E+12 | 0.00 | 0.0 |
| !91TSA | | | | |
| C2H3+CH3 = aC3H5+H | | 1.500E+24 | -2.830 | 18618.0 |
| !86TSA/HAM | | | | |
| ! | | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | | |
|---|---|------------|-----------|---------|
| ! | reactions of C3H4 | | | |
| aC3H4=pC3H4 | | 6.0256E+53 | -12.18 | 84276. |
| !2008 Miller & Senosiain & Klippenstein | | | | |
| | PLOG /0.03947 | 6.0256E+53 | -12.18 | 84276./ |
| | PLOG /1. | 7.7625E+39 | -7.80 | 78446./ |
| | PLOG /10. | 4.7863E+48 | -10.0 | 88685./ |
| C3H3+H=pC3H4 | | 3.6308E+36 | -7.36 | 6039. |
| !2008 Miller & Senosiain & Klippenstein | | | | |
| | PLOG /0.03947 | 3.6308E+36 | -7.36 | 6039./ |
| | PLOG /1. | 7.943E+29 | -5.06 | 4861./ |
| | PLOG /10. | 1.072E24 | -3.15 | 3261./ |
| C3H3+H=aC3H4 | | 3.3884E+36 | -7.41 | 6337. |
| !2008 Miller & Senosiain & Klippenstein | | | | |
| | PLOG /0.03947 | 3.3884E+36 | -7.41 | 6337./ |
| | PLOG /1. | 3.1623E+29 | -5. | 4711./ |
| | PLOG /10. | 8.7096E+23 | -3.20 | 3255./ |
| aC3H4+H = C3H3+H2 | | 6.60E+03 | 3.1 | 5522 |
| !2008 Miller & Senosiain & Klippenstein | | | | |
| pC3H4+H = C3H3+H2 | | 3.57E+04 | 2.8 | 4821 |
| !2008 Miller & Senosiain & Klippenstein | | | | |
| aC3H4+CH3 = C3H3+CH4 | | 6.61E-04 | 5 | 8300 |
| !2009 Kiefer et al. | | | | |
| pC3H4+CH3 = C3H3+CH4 | | 2.19E-04 | 5 | 8300 |
| !2009 Kiefer et al. | | | | |
| H+aC3H4 = H+pC3H4 | | 1.47E+13 | 0.26 | 4103 |
| !2008 Miller & Senosiain & Klippenstein 30 Torr | | | | |
| H+aC3H4 = CH3+C2H2 | | 2.72E+09 | 1.2 | 6834 |
| !2008 Miller & Senosiain & Klippenstein 30 Torr | | | | |
| H+pC3H4 = C2H2+CH3 | | 3.89E+10 | 0.989 | 4114 |
| !2008 Miller & Senosiain & Klippenstein 30 Torr | | | | |
| aC3H4+O = C2H4+CO | | 2.00E+07 | 1.8 | 1000.0 |
| !USC Mech II (98DAV/LAW) | | | | |
| aC3H4+OH = C3H3+H2O | | 5.30E+06 | 2.0 | 2000.0 |
| !USC Mech II (97WAN/FRE) | | | | |
| pC3H4+O = HCCO+CH3 | | 0.73E+13 | 0.0 | 2250.0 |
| !USC Mech II (96ADU/BLU#) | | | | |
| pC3H4+O = C2H4+CO | | 1.00E+13 | 0.0 | 2250.0 |
| !USC Mech II (96ADU/BLU#) | | | | |
| pC3H4+OH = C3H3+H2O | | 1.00E+06 | 2.0 | 100.0 |
| !USC Mech II (98DAV/LAW) | | | | |
| ! | | | | |
| ! | reactions of C3H3 C3H2 | | | |
| C3H2+H (+M) <=> C3H3 (+M) | | 1.02e+13 | 0.27 | 279.64 |
| !2009 Pitsch | | | | |
| | LOW /2.80e+30 | -3.860 | 3319.79 / | |
| | TROE /0.782 207.50 | 2663.00 | 6095.00 / | |
| | H2/2.00/ H2O/12.00/ CO2/3.60/ CO/1.75/ AR/0.70/ | | | |
| | CH4/2.00/ C2H6/3.00/ | | | |
| C3H3+H = C3H2+H2 | | 1.00E+13 | 0.0 | 1000. |
| !USC Mech II | | | | |
| CH3+C2H = C3H3+H | | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| !USC Mech II (86TSA/HAM) | | | | |
| C2H2+CH2 = C3H3+H | | 1.20E+13 | 0.00 | 6620.00 |
| !USC Mech II (88BOH/TEM; 86FRA/BHA) | | | | |
| C2H2+CH2* = C3H3+H | | 2.00E+13 | 0.00 | 0.00 |
| !USC Mech II (97WAN/FRE) | | | | |
| ! | reactions of C5H5 and C5H6 | | | |
| C5H5 + H (+M) = C5H6 (+M) | | 1.00E+14 | 0.000 | 0.00 |
| ! USC Mech II (92-EMD-BRE, est., 94-FRA-HER) | | | | |
| | LOW / 4.40E+80 | -18.280 | 12994.0 / | |
| ! USC Mech II (96-DAV-WAN, 97-WAN-FRE) | | | | |
| | TROE / 0.068 400.7 | 4135.8 | 5501.9 / | |
| | H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/ | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | |
|--|---------------|--------|----------|
| C5H5 (+M)=C2H2+C3H3 (+M) | 6.31E+13 | -0.075 | 62300.0 |
| !2009 Detilleux and Vandooren (KERN ET AL. 1998) | | | |
| | LOW /1.00E+45 | 8.4 | 47500/ |
| C2H3+C3H3=1C5H5+H | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| !USC Mech II | | | |
| C4H5-2+C2H4=C5H6+CH3 | 5.00E+14 | 0.0 | 25000.0 |
| !USC Mech II | | | |
| aC3H5+C2H2=1C5H7 | 8.38E+30 | -6.2 | 12824.0 |
| !USC Mech II (90DEAN) | | | |
| iC4H5+CH3=1C5H7+H | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| !Est | | | |
| C5H6+H=C5H5+H2 | 3.00E+14 | 0.0 | 6640.0 |
| !2001 Mac&Bac | | | |
| C5H6+H=C2H2+aC3H5 | 7.74E+36 | -6.2 | 32890.0 |
| !USC Mech II (98-ZHO-BOZ) | | | |
| C5H6+H=1C5H7 | 8.27+126 | -32.3 | 82348.0 |
| !USC Mech II (02-MOS-LIN) | | | |
| aC3H5+C2H3=1C5H7+H | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| !USC Mech II (90DEAN) | | | |
| C5H6+C2H3=C5H5+C2H4 | 6.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| !2001 Mac&Bac | | | |
| C5H6+CH3=C5H5+CH4 | 5.00E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| !2001 Mac&Bac | | | |
| C5H5+H=cC5H4+H2 | 3.23E+07 | 2.095 | 15842.0 |
| !MIT [Mebel et al. 1997, C6H6+H] | | | |
| C5H5+CH3=cC5H4+CH4 | 2.00E+12 | 0.0 | 15060.0 |
| !MIT [Zhang et al. 1989, C6H6+CH3] | | | |
| 1C5H5+H=C5H4+H2 | 1.81E+12 | 0.0 | 0.0 |
| !MIT [C2H5+H, Tsang/Hampson '86] | | | |
| 1C5H5+CH3=C5H4+CH4 | 1.95E+13 | -0.50 | 0.0 |
| !MIT [C2H5+CH3, Tsang/Hampson '86] | | | |
| C5H5=1C5H5 | 1.64E+96 | -23.50 | 137409.0 |
| !MIT [Moskaleva and Lin 2000, 100 torr] | | | |
| ! | | | |
| ! reactions of C6H2 and C6H4 | | | |
| C3H2+C3H2=C6H2+H2 | 7.00e+11 | 0.0 | 0.0 |
| !2010 Toluene pyrolysis | | | |
| C6H3+H=C6H2+H2 | 3.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| !USC Mech II (97WAN/FRE) | | | |
| C4H2+C2H=C6H2+H | 7.80E+13 | 0.0 | 0. |
| != C2H2 + C2H | | | |
| o-C6H4=C4H2+C2H2 | 2.00E+14 | 0.0 | 83000.0 |
| !2010 Toluene pyrolysis | | | |
| 1-C6H4+H=o-C6H4+H | 2.20E+47 | -10.0 | 24000.0 |
| !USC Mech II (20 Torr RRKM WAN/FRE) | | | |
| 1-C6H4+H=C6H3+H2 | 1.33E+06 | 2.5 | 9240.0 |
| !USC Mech II | | | |
| C3H2+C3H2=1-C6H4 | 3.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| !Est. ref: C3H3+C3H3=A1 (1987WU/KER6291) | | | |
| C4H2+C2H2=1-C6H4 | 4.47E+11 | 0.0 | 30010.0 |
| !Est. ref: C4H4+C2H2=A1 (MIT) | | | |
| nC4H3+C2H2=1-C6H4+H | 3.70E+16 | -1.2 | 11100.0 |
| !USC Mech II (20 Torr RRKM WAN/FRE) | | | |
| C4H4+C2H=1-C6H4+H | 1.20E+13 | 0.0 | 0.0 |
| !USC Mech II | | | |
| C6H3+H=1-C6H4 | 4.20E+44 | -10.3 | 7890.0 |
| !USC Mech II (20 Torr RRKM WAN/FRE) | | | |
| C5H3+CH2=1-C6H4+H | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| !ABF | | | |
| C4H2+C2H=C6H3 | 4.50E+37 | -7.7 | 7100.0 |
| !USC Mech II (20 Torr RRKM WAN/FRE) | | | |
| C6H2+H=C6H3 | 4.30E+45 | -10.2 | 13250.0 |
| !USC Mech II (20 Torr RRKM WAN/FRE) | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| | | | |
|--|-----------|--|-------------------|
| C6H3+H=C4H2+C2H2 | 2.40E+19 | -1.6 | 2800.0 |
| !USC Mech II (20 Torr RRKM WAN/FRE) | | | |
| ! | | | |
| ! reactions of A1- | | | |
| A1--o-C6H4+H | 3.00E+13 | 0.0 | 72923.0 |
| !2010 Toluene pyrolysis | | | |
| nC4H3+C2H2=A1- | 2.30E+68 | -17.6 | 24400.0 |
| !USC Mech II (20 Torr RRKM WAN/FRE) | | | |
| A1--H=o-C6H4+H2 | 4.40E-13 | 7.831 | 9261.0 |
| ![Mebel et al. 2001, 100 torr] MIT | | | |
| nC6H5=A1- | 1.66E+11 | 0.0 | 16350.0 |
| ![Dewar et al. 1987] MIT | | | |
| 1-C6H4+H=A1- | 3.60E+77 | -20.1 | 28100.0 |
| !USC Mech II (20 Torr RRKM WAN/FRE) | | | |
| ! | | | |
| ! Reaction of HOCHO | | | |
| HOCH2O=HOCHO+H | 1.000e+14 | 0.000 | 14900 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| CH2O+OH=HOCH2O | 4.500e+15 | -1.100 | 0.00 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| HOCHO+OH=>H2O+CO2+H | 2.620e+06 | 2.060 | 916 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| HOCHO+OH=>H2O+CO+OH | 1.850e+07 | 1.510 | -962 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| HOCHO+H=>H2+CO2+H | 4.240e+06 | 2.100 | 4868 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| HOCHO+H=>H2+CO+OH | 6.030e+13 | -0.350 | 2988 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| HOCHO+CH3=>CH4+CO+OH | 3.900e-07 | 5.800 | 2200 |
| !2012 Sarathy & Vranckx & Yasunaga & Mehl & Osswald et al. | | | |
| ! | | | |
| !reactions of CH2CHO | | | |
| ! | | | |
| CH2CHO+H (+M) = CH3CHO (+M) | 1.000E+14 | 0.000 | 0.00 |
| ! Calculated RRKM | | | |
| | LOW / | 5.200E+39 | -7.297 4700.00 / |
| | TROE / | 0.55 8900.0 | 4350.0 7244.0 / |
| | | H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/ C2H2/3.00/ C2H4/3.00/ | |
| CH2CHO (+M)=CH2CO+H (+M) | | 1.430E+15 | -0.15 45600 |
| ! 2006 Senosiain & Klippenstein & Miller | | | |
| | LOW / | 6.000E+29 | -3.8 43424 |
| / | | | |
| | TROE / | 9.85E-01 3.93E+02 | 9.80E+09 5.00E+09 |
| / | | | |
| CH2CHO (+M)=CH3+CO (+M) | | 2.930E+12 | 0.29 40300 |
| ! 2006 Senosiain & Klippenstein & Miller | | | |
| | LOW / | 9.520E+33 | -5.07 41300 |
| / | | | |
| | TROE / | 7.13E-17 1.15E+03 | 4.99E+09 1.79E+09 |
| / | | | |
| CH2CHO+H = CH3CO+H | | 5.000E+12 | 0.000 0.00 |
| ! Estimated | | | |
| CH2CHO+H = CH3+HCO | | 9.000E+13 | 0.000 0.00 |
| ! Estimated | | | |
| CH2CHO+H = CH2CO+H2 | | 2.000E+13 | 0.000 4000.00 |
| ! 82MIL/MIT | | | |
| CH2CHO+O = CH2CO+OH | | 2.000E+13 | 0.000 4000.00 |
| ! 82MIL/MIT | | | |
| CH2CHO+OH = CH2CO+H2O | | 1.000E+13 | 0.000 2000.00 |
| ! 82MIL/MIT | | | |
| CH2CHO+O2 = CH2CO+HO2 | | 1.400E+11 | 0.000 0.00 |
| ! 92BAU/COB | | | |
| CH2CHO+O2 = CH2O+CO+OH | | 1.800E+10 | 0.000 0.00 |
| ! 92BAU/COB | | | |

ANEXOS. Estudio de la oxidación de 1-butanol con diferentes concentraciones de oxígeno y en presencia de NO.

| ! reactions of A1 | | | | |
|---|----------|-------|----------|--|
| A1+H=A1-+H2 | 3.88e+08 | 1.86 | 15976.0 | |
| !1997 Mebel et al | | | | |
| A1-+H=A1 | 8.02E+19 | -2.0 | 1968.0 | |
| !MIT 2001 Mebel et al. 100 torr | | | | |
| A1-+CH4=A1+CH3 | 3.89E-03 | 4.6 | 5256.0 | |
| !USC Mech II (99-TOK-LIN) | | | | |
| A1-+C2H6=A1+C2H5 | 2.10E+11 | 0.0 | 4443.0 | |
| !USC Mech II (01-PAR-LIN) | | | | |
| C5H6+A1-==C5H5+A1 | 3.10E+11 | 0.0 | 5500.0 | |
| !2001 Mac&Bac | | | | |
| nC4H3+C2H3=A1 | 2.87E+14 | 0.0 | 817.0 | |
| !2006 Brezinsky | | | | |
| aC3H4+C3H3=A1+H | 2.20E+11 | 0.0 | 2000.0 | |
| !2002 D'Anna & Kent | | | | |
| iC4H5+C2H2=A1+H | 3.00E+11 | 0.0 | 14900.0 | |
| !2002 D'Anna & Kent | | | | |
| C4H4+C2H3=A1+H | 1.90E+12 | 0.0 | 2510.0 | |
| !MIT Kubitza et al. '94, in Lindstedt/Skevis '97 | | | | |
| pC3H4+C3H3=A1+H | 2.20E+11 | 0.0 | 2000.0 | |
| !MIT 1987 Wu and Kern | | | | |
| C4H4+C2H2=A1 | 4.47E+11 | 0.0 | 30010.0 | |
| !MIT 1986 Chanmugathas/Heicklen | | | | |
| nC4H5+C2H2=A1+H | 2.10E+15 | -1.1 | 4800.0 | |
| !USC Mech II (20 Torr RRKM WAN/FRE) | | | | |
| nC4H5+C2H3=A1+H2 | 1.84E-13 | 7.1 | -3611.0 | |
| !USC Mech II (89WES/DEA) | | | | |
| C4H5-2+C2H2=A1+H | 5.00E+14 | 0.0 | 25000.0 | |
| !USC Mech II | | | | |
| C3H3+C3H3=A1-+H | 2.02e+33 | -6.0 | 15940.0 | |
| !2009 Hansen et al C3H4 FLAME | | | | |
| C3H3+C3H3=fulvene | 1.45e+65 | -16.0 | 25035.0 | |
| !2009 Hansen et al C3H4 FLAME 30Torr /5 to 5 Torr | | | | |
| duplicate | | | | |
| C3H3+C3H3=fulvene | 0.84e+39 | -9.0 | 6098.0 | |
| !2009 Hansen et al C3H4 FLAME 30Torr /5 to 5 Torr | | | | |
| duplicate | | | | |
| C3H3+C3H3=A1 | 0.35e+66 | -15.9 | 27529.0 | |
| !2009 Hansen et al C3H4 FLAME 30Torr /5 to 5 Torr | | | | |
| duplicate | | | | |
| C3H3+C3H3=A1 | 0.24e+35 | -7.4 | 5058.0 | |
| !2009 Hansen et al C3H4 FLAME 30Torr /5 to 5 Torr | | | | |
| duplicate | | | | |
| fulvene=A1 | 5.62E+81 | -19.4 | 121500.0 | |
| !2009 Hansen et al C3H4 FLAME | | | | |
| fulvene+H=A1+H | 3.00e+12 | 0.5 | 2000.0 | |
| !2009 Hansen et al C3H4 FLAME | | | | |
| fulvene=A1-+H | 2.57E+97 | -23.2 | 153470.0 | |
| !2009 Hansen et al C3H4 FLAME | | | | |
| aC3H4+C3H2=A1 | 7.40E+12 | -0.7 | 920.0 | |
| !2002 D'Anna & Kent | | | | |
| pC3H4+C3H2=A1 | 1.40E+13 | -0.8 | 1030.0 | |
| !2002 D'Anna & Kent | | | | |
| !! | | | | |

END

5. BIBLIOGRAFÍA

[1] Nigam P.S., Singh A., " *Production of liquid biofuels from renewable resources*". Progress in Energy and Combustion Science 37, 52-68, 2011.

[2] García V., Pääkkilä J., Ojamo H., Muurinen E., Keiski R.L.,

" Challenges in biobutanol production: How to improve the efficiency?". Renewable and Sustainable Energy Reviews 15 ,964–980, 2011.

[3] Weisserme K., Arpe H-J., "QUÍMICA ORGÁNICA INDUSTRIAL". EDITORIAL REVERTÉ. ISBN 84-291-7989-5.

[4] Abril A.J., Navarro E.A., "Etanol a partir de biomasa lignocelulósica". ResearchGate, 2012.

[5] Jin C., Yao M., Liu H., Lee C. F., Ji J., " *Progress in the production and application of n-butanol as a biofuel*". Energy Reviews 15 ,4080–4106, 2011.

[6]Escuela de Ingenierías Industriales – Universidad de Valladolid (consultado él 1/1/2018) . <https://www.eii.uva.es/organica/qoi/tema-06.php>