

Proyecto fin de Carrera

Sinergia entre óxidos de nitrógeno y precursores de hollín: Influencia en las emisiones de contaminantes.

Autor: Eduardo Peribáñez Estevan

Directora: María Abián Vicén

Ponente: Dra. M^a Ujué Alzueta Anía

Universidad de Zaragoza

Escuela de Ingeniería y Arquitectura (EINA)

Dpto. de Ingeniería Química y Tecnologías del Medio Ambiente

Junio 2012

Agradecimientos

Me gustaría agradecer a todas las personas que me han acompañado a lo largo de los diferentes pasos de este camino. A todos los compañeros y amigos que me han escuchado, aconsejado o simplemente alegrado el día.

A mi familia, por darme todo el apoyo que me ha permitido llegar hasta aquí. A Olga, por estar siempre ahí, en todo y para todo.

A los compañeros de laboratorio durante el desarrollo del proyecto, que me han hecho sentirme como en casa. A la Dra. María Ujué Alzueta, por toda su dedicación y atención, y especialmente a mi directora María Abián, por toda su ayuda y entrega en la realización de este proyecto.

Todo esto es tan vuestro como mío.

SINERGIA ENTRE ÓXIDOS DE NITRÓGENO Y PRECURSORES DE HOLLÍN: INFLUENCIA EN LAS EMISIONES DE CONTAMINANTES.

RESUMEN

La combustión de hidrocarburos lleva asociada una serie de problemas medioambientales, entre los que destacan la emisión de materia particulada (tipo hollín) y de óxidos de nitrógeno. La aplicación de técnicas de recirculación de flujo de gas en los procesos de combustión implica la interacción de diferentes contaminantes presentes en los gases de salida, pudiendo dar lugar a su reducción.

El objeto de este proyecto es analizar el efecto de la presencia de diferentes óxidos de nitrógeno sobre la cantidad de hollín formado en la pirólisis de etileno. Se han realizado experimentos con diferentes concentraciones de los óxidos de nitrógeno (NO , N_2O , NO_2), desde 500 a 12.000 ppm, en condiciones controladas de presión y temperatura, en un reactor tubular de cuarzo, y en el intervalo de temperaturas de 700 a 1.200 °C. El hollín producido ha sido cuantificado mediante pesada y se ha analizado la composición de los gases de salida. Los resultados experimentales se han simulado con el software CHEMKIM, utilizando mecanismos cinéticos en fase gas procedentes de bibliografía, con el propósito de identificar los principales caminos de reacción involucrados en el proceso.

Los resultados obtenidos muestran que la presencia de óxidos de nitrógeno influye en la cantidad de hollín formada en la pirólisis de etileno, obteniéndose diferentes resultados en función del óxido de nitrógeno presente durante la reacción, la concentración inicial del mismo y la temperatura. En determinadas condiciones experimentales, se ha observado una reducción tanto de la cantidad de hollín formada como de la concentración de los óxidos de nitrógeno a la salida del reactor.

Los resultados teóricos obtenidos a partir de las simulaciones de los experimentos mediante los mecanismos obtenidos de bibliografía, se ajustan a los resultados experimentales obtenidos, permitiendo identificar los principales caminos de reacción involucrados en el proceso de reacción. Se ha encontrado que las principales responsables de la reducción de la cantidad de hollín formada en la pirólisis de etileno son las reacciones de formación de HCN y CO a partir de la interacción de etileno con los óxidos de nitrógeno NO y NO_2 .

Contenido

RESUMEN	2
1. INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS	4
2. ANTECEDENTES.....	6
2.1 CARACTERÍSTICAS DEL HOLLÍN.....	6
2.2 FORMACIÓN DE HOLLÍN. MECANISMOS.....	7
2.3 RECIRCULACIÓN DE GASES DE SALIDA. INTERACCIÓN EN LA FORMACIÓN DE HOLLÍN CON LOS ÓXIDOS DE NITRÓGENO.....	8
2.4 EFECTO DE LA TEMPERATURA.....	9
3. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL	10
3.1 DESCRIPCIÓN DE LA INSTALACIÓN	10
3.2 CONDICIONES EXPERIMENTALES.....	11
3.3 PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL.....	12
3.4 RESUMEN DE EXPERIMENTOS.....	13
4. ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	15
4.1 PRINCIPALES RESULTADOS	15
4.1.1 FORMACIÓN DE HOLLÍN	15
4.1.2 GASES DE SALIDA.....	18
4.3 VALIDACIÓN DEL MECANISMO CINÉTICO.....	24
4.4 ANÁLISIS DEL EFECTO DEL NO	28
4.5 ANÁLISIS DEL EFECTO DEL N ₂ O.....	29
4.6 ANÁLISIS DEL EFECTO DEL NO ₂	31
5. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO.....	34
5.1. CONCLUSIONES.....	34
5.2 TRABAJO FUTURO.....	36
BIBLIOGRAFÍA:	37
ANEXO A: METODOLOGÍA EXPERIMENTAL	41
ANEXO B: RESULTADOS EXPERIMENTALES	57
ANEXO C: SOFTWARE CHEMKIM II	66
ANEXO D: MECANISMOS CINÉTICOS.....	69
ANEXO E: RESULTADOS SIMULACIONES	109

1. INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

La política energética actual busca una diversificación de las fuentes de obtención de energía y una sustitución progresiva del uso de los combustibles fósiles por otros medios de abastecimiento energético. Sin embargo, en la actualidad, los combustibles fósiles ocupan un importante sector del abastecimiento energético, siendo una de las principales formas de obtención de energía prevista a corto y medio plazo.

Uno de los principales problemas asociados a los combustibles fósiles es la emisión de contaminantes propia de los procesos de combustión. La materia particulada carbonosa de tipo hollín es un contaminante habitual en estos procesos, cuya emisión es un grave problema para la salud y el medioambiente. El hollín puede aparecer durante la combustión en zonas de alta temperatura y ricas en combustible, aunque la combustión global se produzca con exceso de aire.

Existen diversas alternativas de diseño para controlar la emisión de hollín. Una de las alternativas que se está investigando es la adición de compuestos gaseosos oxigenados a los combustibles tradicionales, por ejemplo en la combustión. Otra alternativa atractiva debida a la facilidad de aplicación en el diseño de instalaciones reales, es la derivada de la utilización de gases de salida con la presencia de diferentes compuestos gaseosos, mediante la utilización de técnicas de recirculación de flujo de gas (FGR).

Unos de los principales contaminantes gaseosos, presentes en los gases de salida de los sistemas de combustión, son los óxidos de nitrógeno. Los óxidos de nitrógeno son un contaminante asociado a la combustión de combustibles, con un alto impacto en el medioambiente y en la salud humana. El estudio de la influencia de la presencia de óxidos de nitrógeno en la formación de hollín, con el objetivo de la reducción de la emisión de ambos contaminantes, es de interés en el diseño de técnicas de recirculación de los gases de escape, debido a las problemáticas asociadas a ambos compuestos.

Puesto que el hidrocarburo etileno es un precursor clave en la formación del hollín, se ha considerado interesante estudiar el efecto de la adición de diferentes óxidos de nitrógeno (NO , NO_2 y N_2O) sobre la formación de hollín, en la pirólisis de etileno en una atmósfera inerte de nitrógeno.

En este contexto, el presente proyecto pretende llevar a cabo un estudio experimental y de modelado cinético, de la influencia de la presencia de diferentes óxidos de nitrógeno (NO , NO_2 y N_2O) en la formación de hollín durante la pirólisis de etileno, analizando los gases de salida, la cantidad de hollín formado y los mecanismos de reacción involucrados en el proceso. Los resultados obtenidos darán una información interesante para futuras investigaciones sobre la interacción entre los óxidos de nitrógeno y los compuestos precursores del hollín, así como sobre el diseño de estrategias de reducción de la emisión de contaminantes.

Para la consecución de este objetivo principal, se han seguido los siguientes pasos:

- Estudio experimental de la influencia sobre la formación de hollín y los gases de salida de la presencia en diferentes concentraciones de monóxido de nitrógeno (NO) en la pirólisis de etileno para diferentes temperaturas de reacción.
- Estudio experimental de la influencia sobre la formación de hollín y los gases de salida de la presencia en diferentes concentraciones de monóxido de dinitrógeno (N₂O) en la pirólisis de etileno para diferentes temperaturas de reacción.
- Estudio experimental de la influencia sobre la formación de hollín y los gases de salida de la presencia en diferentes concentraciones de dióxido de nitrógeno (NO₂) en la pirólisis de etileno para diferentes temperaturas de reacción.
- Modelado del proceso usando el paquete informático CHEMKIN II, validación del mecanismo cinético químico procedente de la bibliografía por comparación con los resultados experimentales, e identificación de los mecanismos de reacción involucrados en el proceso.

Considerando lo anteriormente expuestos, el desarrollo del proyecto se estructura en capítulos. En el **capítulo 1**, Introducción, se ha abordado el contexto global que motiva el proyecto y el ámbito concreto en el que se encuadra su realización, así como los principales objetivos a desarrollar durante la realización del mismo. En el **capítulo 2**, Antecedentes, se presenta un resumen de los diferentes estudios previos existentes acerca de la problemática del hollín, su proceso de formación y el efecto de la adición de los diferentes óxidos de nitrógeno a la formación de hollín. En el **capítulo 3**, Metodología Experimental, se explican brevemente las instalaciones y equipos utilizados para la realización de los experimentos, el procedimiento experimental seguido, y las condiciones experimentales utilizadas en cada experimento. En el **capítulo 4**, Análisis de Resultados, se realiza un análisis de los principales resultados obtenidos, tanto desde un punto de vista experimental como de modelado cinético, comparándolos, e identificando los principales caminos de reacción implicados en el proceso. Por último, en el **capítulo 5**, Conclusiones y Trabajo Futuro, se resumen las principales conclusiones que se extraen después del análisis de los datos experimentales y del modelado realizado, y se presentan las posibilidades de aplicación e investigación futura a raíz de los resultados obtenidos en el presente proyecto.

El presente Proyecto Fin de Carrera ha sido realizado en las instalaciones del Grupo de Procesos Termoquímicos del Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A) situado en el edificio I+D+i de la Escuela de Ingeniería y Arquitectura (EINA) de la Universidad de Zaragoza.

2. ANTECEDENTES

En esta sección se incluye una introducción teórica y una revisión bibliográfica de los estudios anteriores realizados sobre la temática del proyecto. Se ha realizado un pequeño resumen sobre que se entiende por hollín, sus características y los mecanismos más aceptados a través de los que transcurre su formación. También se hace referencia a la tecnología de recirculación de gases de escape y a estudios previos sobre la influencia de los óxidos de nitrógeno en la formación del hollín.

2.1 CARACTERÍSTICAS DEL HOLLÍN

Se define como hollín (soot) a las partículas compuestas principalmente por carbono en estado sólido, de pequeño tamaño, cuya formación está asociada a procesos de combustión. Otro componente mayoritario es el hidrógeno, que puede estar presente hasta en un 10% en concentración molar, siendo mayor la concentración cuando el tiempo de formación del hollín es menor. Vistas al microscopio, la unidad básica del hollín son partículas prácticamente esféricas con un diámetro entorno a los 200 y 300 Å [Haynes y Wagner, 1981]. Su distribución de tamaños depende ligeramente de las condiciones de operación, aproximándose esta a una distribución normal [Manzello y cols., 2007].

Estas partículas formadas se denominan partículas primarias y tienden a agruparse formando cadenas tanto lineales como ramificadas. Las cadenas se agrupan en capas paralelas en una disposición semejante a la del grafito, pero con mayor espacio entre capas. La estructura final del hollín puede variar en función de su edad y la temperatura a la que ha sido formado.

El hollín es un peligroso contaminante, con efectos en el medioambiente y en la salud humana. Además, su formación implica la ineficiencia de la combustión, genera suciedad en el interior de los motores y propicia el desgaste de los mismos [Gautam y cols., 2007]. La presencia de hollín afecta a los sistemas de lubricación de los motores, alterando las propiedades químicas del lubricante y disminuyendo su viscosidad, [George y cols., 2007] incluso a niveles relativamente bajos de formación de hollín. Otro problema es que el *soot* también puede originar problemas operacionales en los equipos, tales como ensuciamiento de muchos dispositivos de combustión [Mendiara y cols., 2005] o desactivación de los catalizadores.

Desde el punto de vista de los efectos en el medioambiente, el hollín modifica la radiación solar reflejada en la atmósfera [Chylek y Wong, 1995] y es uno de los principales contaminantes causantes del cambio climático [Penner y cols., 1992; Myhre y cols., 1998]. El hollín participa como centro activo en la formación y condensación de las nubes y estelas [Crutzen y Andrade, 1990]. Su deposición y acumulación en el hielo de las zonas polares, aumenta la absorción de radiación solar de este, causando un mayor calentamiento en las regiones árticas [Sheridan y cols., 1992].

2.2 FORMACIÓN DE HOLLÍN. MECANISMOS.

Según la teoría más aceptada sobre la formación del hollín, existen cuatro etapas diferenciadas [Haynes y Wagner, 1981]:

- Formación de los precursores aromáticos.
- Crecimiento de los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs).
- Nucleación de los PAHs. Formación de la primera partícula de hollín.
- Coagulación de las partículas.

La formación de hollín comienza con la pirólisis del combustible. En la pirólisis se crean compuestos precursores del hollín como son el etileno y el acetileno. Estos compuestos y radicales creados en la pirólisis reaccionan entre sí formando moléculas que adoptan estructuras cíclicas en forma de anillos aromáticos. El crecimiento de estos PAHs generará las partículas primarias de hollín. Este crecimiento se produce mediante el mecanismo HACA (*H* - *Abstraction* - C_2H_2 - *Addition*) [Bockhorn, 1994; Frenklach y cols., 1984; Frenklach, 2002; Richter y Howard, 2000; Ranzi y cols. 2001 Siegla y Smith, 1981; Wang y Frenklach, 1997; Wang 2011].

Los PAHs son activados mediante la abstracción de un átomo de hidrógeno, formando un radical que reaccionará con otras especies de hidrocarburos como acetileno, adicionando átomos de carbono y permitiendo el crecimiento de la molécula. La Figura 2.1 muestra un ejemplo de crecimiento del anillo aromático por la ruta HACA.

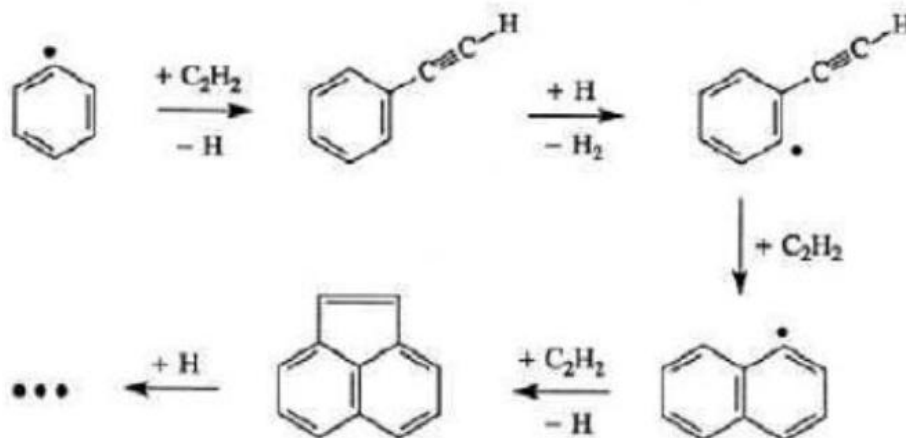


Figura 2.1: Esquema de la ruta HACA para el crecimiento de PAHs [Miller y Melius, 1992].

Las partículas de hollín formadas mediante este mecanismo se denominan partículas primarias. Estas partículas son la base sobre la cual aumentará la cantidad de hollín generado. Este aumento puede ser debido al crecimiento superficial de estas partículas, o a la agrupación de estas mediante coagulación.

2.3 RECIRCULACIÓN DE GASES DE SALIDA. INTERACCIÓN EN LA FORMACIÓN DE HOLLÍN CON LOS ÓXIDOS DE NITRÓGENO.

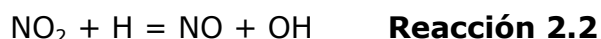
El interés de las interacciones entre los compuestos precursores de la formación del hollín y los diferentes óxidos de nitrógeno presentes, surge del estudio de la recirculación de flujos de gases de escape. En el estudio de la reducción de las emisiones de hollín, la recirculación de gases es una alternativa de fácil aplicación [Novak y Lang, 1999; Buhre y Elliot, 2005; Kvamsdal y cols., 2007]. La recirculación de los gases de salida (EGR) tiene una fuerte influencia en las propiedades físicas del hollín generado [Al-Quarshi y Boehman, 2008], y la composición de los gases de escape recirculados afecta a la cantidad de hollín generado. Por ello, interesa estudiar las interacciones entre los compuestos habituales de los gases de escape, en nuestro caso los óxidos de nitrógeno, y la formación de hollín a partir de sus precursores.

En estudios realizados sobre las interacciones entre la formación del NO y la formación de hollín, la presencia de NO tenía poco efecto sobre la cantidad de hollín generado [Guo y Smallwood, 2007]. Sin embargo, la formación de hollín reducía hasta un 46% las emisiones de NO. Esta reducción era debida a la combinación de dos efectos, el efecto térmico y el efecto químico [Glarborg y cols., 1998; Dagaut y cols., 1999; Miller y cols., 2003].

Por un lado, en el efecto térmico, la formación de hollín produce un aumento de la transferencia de calor por radiación, disminuyendo la temperatura, siendo menos favorable la formación de NO. Por otro lado, el efecto químico está provocado por la competencia entre la formación de hollín y la formación del NO. La formación de hollín consume acetileno, que es uno de sus principales precursores de la formación de hollín [Haynes y Wagner, 1981], lo que hace disminuir la concentración del radical CH. Esto disminuye la tasa de reacción de formación de HCN (Reacción 2.1), siendo esta la reacción limitante en la ruta de formación del NO.



La interacción de la presencia del NO₂ en la formación de hollín ha sido estudiada en una llama laminar con pre mezcla de etileno y aire, [Menon y cols., 2007] observando que la adición de NO₂ provocaba una disminución de la fracción volumétrica de hollín. Esta reducción es atribuida a una disminución de hidrógeno atómico inducida por la reacción con NO₂ (Reacción 2.2).



El hidrógeno atómico está involucrado en las reacciones de formación de hollín mediante el mecanismo HACA [Haynes y Wagner, 1981], por lo que su disminución provoca una reducción de los precursores aromáticos en la formación de hollín.

Una vez formado el hollín, las magnitudes de reacción del NO₂ en las reacciones de oxidación del hollín son superiores a las del resto de óxidos

de nitrógeno [Stanmore y cols., 2008], favoreciendo la presencia de este compuesto a la reducción de la cantidad de hollín.

2.4 EFECTO DE LA TEMPERATURA

La influencia de la temperatura en la formación de hollín es algo compleja. En la pirólisis de etileno a presión atmosférica y atmosfera inerte, la formación de hollín comienza a ser apreciable a partir de los 1.000 °C de temperatura [Ruiz y cols., 2007], aumentando claramente conforme aumenta la temperatura, como así lo demuestra trabajos anteriores realizados en el Grupo de Procesos Termoquímicos, donde se observó que el aumento de la temperatura entre 1.000 y 1.200 °C a una concentración de 15.000 ppm de hidrocarburo, venía acompañado por un aumento de la cantidad de hollín generado. La influencia de la temperatura en la cantidad de hollín viene determinada por parámetros como la relación carbono oxígeno en la mezcla y la estructura de la llama [Haynes y Wagner, 1981].

La temperatura afecta al equilibrio de la formación de hollín y su oxidación, debido a las diferentes energías de activación de los dos procesos. El aumento de la temperatura también favorece la pirólisis, responsable de la formación de los precursores del hollín.

3 METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

3.1 DESCRIPCIÓN DE LA INSTALACIÓN

La experimentación, llevada a cabo durante el desarrollo del proyecto, ha sido realizada en las instalaciones del Grupo de Procesos Termoquímicos del Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A) situado en el edificio I+D+i de la Escuela de Ingeniería y Arquitectura (EINA) de la Universidad de Zaragoza.

La instalación experimental usada, detallada en la Figura 3.1 se puede dividir en cuatro partes fundamentales: el sistema de alimentación de gases, la zona de reacción, el sistema de recogida de hollín y el sistema de análisis de gases de salida.

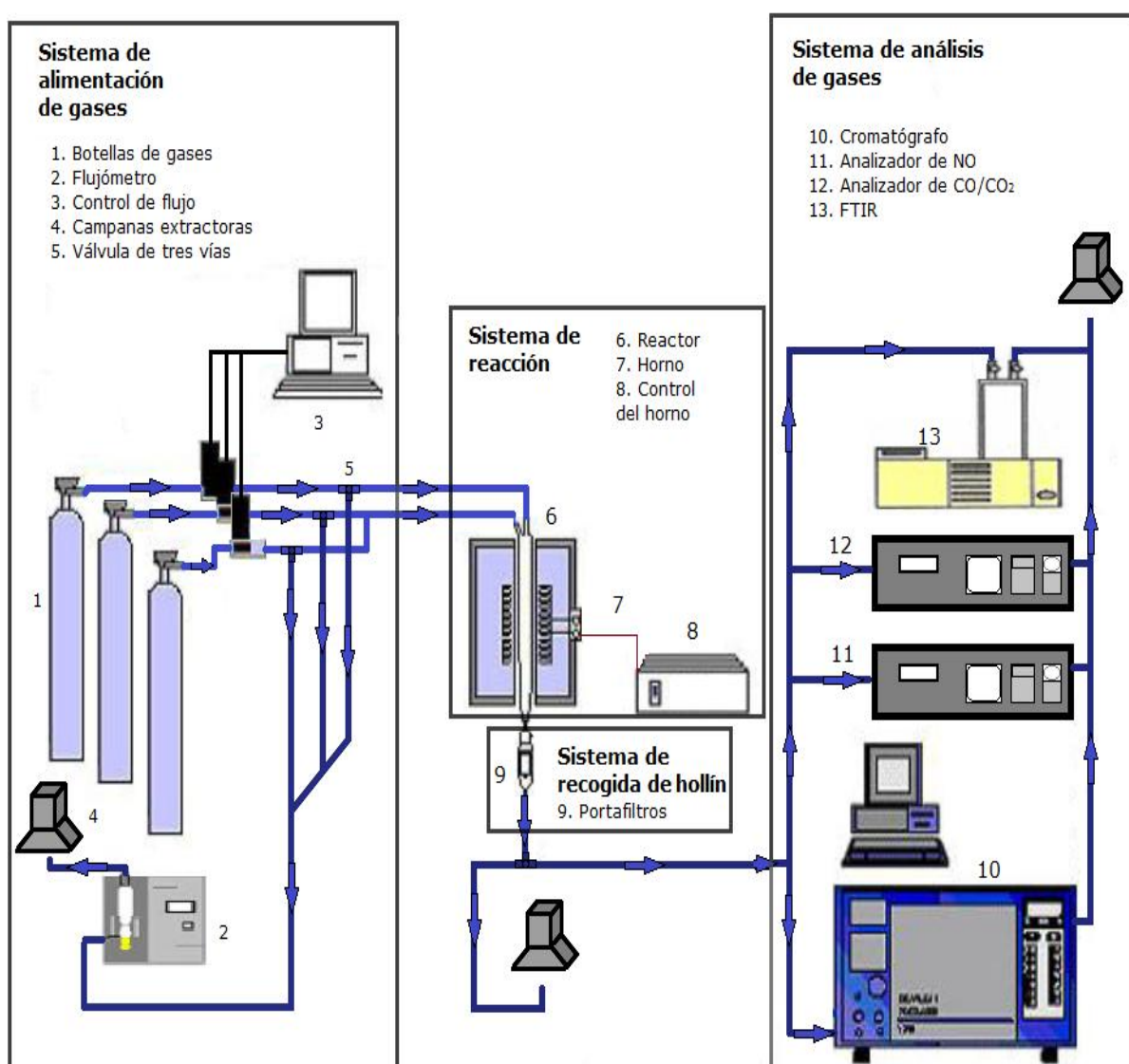


Figura 3.1 Instalación experimental para el estudio de la formación de hollín.

El sistema de alimentación de gases incluye todos los accesorios y equipos necesarios para la alimentación de los gases en la zona de reacción y el control de los mismos. Se han utilizado botellas de gases a presión para el nitrógeno, etileno, los óxidos de nitrógeno (NO, NO₂, y N₂O), y el aire. Para el control del flujo se disponía de controladores de flujo másico conectados a un ordenador y un flujómetro.

La zona de reacción está compuesta por un reactor de cuarzo de forma tubular situado en el interior de un horno eléctrico con control de temperatura. Dicho reactor se encuentra conectado a la zona de alimentación de gases mediante la cabeza del reactor en la entrada y al sistema de recogida de hollín a la salida.

El sistema de recogida de hollín está formado por un portafiltros a la salida del reactor en el que se coloca un filtro desechable de fibra de vidrio para la recogida y cuantificación del hollín mediante pesada.

El sistema de análisis de gases dispone de un cromatógrafo de gases equipado con detectores de ionización de llama (*Flame Ionization Detector*, FID) y de conductividad térmica (*Thermal Conductivity Detector*, TCD), un analizador infrarrojo de NO, un analizador infrarrojo de CO/CO₂, y un espectrómetro FTIR (*Fourier Transform Infra Red*), conectados en serie/paralelo a la salida de la zona de reacción.

En el Anexo A se puede consultar una descripción más extensa de la instalación experimental y los equipos que la constituyen.

3.2 CONDICIONES EXPERIMENTALES

Se diseñaron los experimentos para poder estudiar la influencia de la presencia y concentración de los principales óxidos de nitrógeno (NO, NO₂ y N₂O) en la formación de hollín, a diferentes temperaturas de reacción.

Para ello, partiendo de una concentración inicial de 30.000 ppm de etileno, se estudió la influencia de los diferentes óxidos de nitrógeno por separado. Primero, para una temperatura fija de 1.200 °C, se llevaron a cabo experimentos a diferentes concentraciones de óxido de nitrógeno. Luego, tomando una concentración fija de cada óxido de nitrógeno (5.000 ppm) se realizó una serie de experimentos a diferentes temperaturas de operación (700 – 1.200 °C).

En cada experimento el balance se completa con N₂ hasta obtener un caudal total de 1.000 mLN/min. En estas condiciones, el tiempo de residencia sólo depende de la temperatura de operación, ya que se trabaja a presión atmosférica y flujo total constante, lo que resulta en tiempo de residencia: $tr (s) = 4.550 / T(K)$.

En la **serie 1** de experimentos, se estudió la influencia de la presencia de **NO** (monóxido de mononitrógeno) en la cantidad de hollín formado en la pirólisis del etileno, a diferentes concentraciones y temperaturas de reacción:

- Óxido de nitrógeno: NO (monóxido de mononitrógeno)
- Concentración de etileno a la entrada ≈ 30.000 ppm
- Concentraciones de NO a la entrada $\approx 500-12.000$ ppm
- Temperaturas de reacción: $700-1.200$ °C

En la **serie 2** de experimentos, se estudió la influencia de la presencia de **N₂O** (monóxido de dinitrógeno) en la cantidad de hollín formado en la pirólisis del etileno, a diferentes concentraciones y temperaturas de reacción:

- Óxido de nitrógeno: N₂O (monóxido de dinitrógeno)
- Concentración de etileno a la entrada ≈ 30.000 ppm
- Concentraciones de N₂O a la entrada $\approx 500-12.000$ ppm
- Temperaturas de reacción: $700-1.200$ °C

En la **serie 3** de experimentos, se estudió la influencia de la presencia de **NO₂** (dióxido de mononitrógeno) en la cantidad de hollín formado en la pirólisis del etileno, a diferentes concentraciones y temperaturas de reacción:

- Óxido de nitrógeno: NO₂ (dióxido de mononitrógeno)
- Concentración de etileno a la entrada ≈ 30.000 ppm
- Concentraciones de NO₂ a la entrada $\approx 500-12.000$ ppm
- Temperaturas de reacción: $700-1.200$ °C

3.3 PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

El procedimiento experimental seguido para la realización de los experimentos consta de los siguientes pasos:

- Calibración de los analizadores de gases.
- Pesado del filtro y montaje del sistema de recogida de hollín.
- Ajuste del caudal de los gases en función de la concentración deseada y comprobación con el flujómetro.
- Comprobación en busca de fugas.
- Análisis de los gases de salida a temperatura ambiente para la determinación de las concentraciones de entrada.
- Cierre de los gases reaccionantes y encendido del horno, hasta alcanzar la temperatura de reacción de forma estable, manteniendo por el reactor una circulación de corriente inerte (nitrógeno).

- Apertura de los gases reaccionantes, comienzo de la reacción. Se mantiene la reacción durante tres horas a presión atmosférica y temperatura constantes, en las cuales son analizados repetidas veces los gases de salida, mediante el uso de los cromatógrafos y analizadores de gases, para obtener un valor promedio de sus concentraciones.
- Cierre de los gases reaccionantes, enfriamiento del reactor en atmósfera inerte (nitrógeno).
- Apagado de los analizadores de gases y recopilación de los datos
- Obtención y cuantificación del hollín formado mediante pesada, tanto de las paredes del reactor como del retenido en el filtro.
- Desmontaje y limpieza de los componentes del reactor.
- Montaje de la instalación.
- Eliminación de posibles trazas de hollín, carbón pirolítico e hidrocarburos aromáticos policíclicos de las paredes del reactor mediante quemado con aire a 950 °C durante una hora.
- Enfriamiento del horno y apagado de los equipos.

3.4 RESUMEN DE EXPERIMENTOS

En la Tabla 3.1 se muestran las condiciones experimentales de los experimentos realizados durante el desarrollo del proyecto. En el Anexo B se muestran los resultados detallados de los experimentos.

Durante el desarrollo de los experimentos se busca obtener una serie de datos. Los datos principales obtenidos son la cantidad de hollín formado, mediante pesada al final del experimento, y la composición de los gases de salida durante el desarrollo de la reacción, mediante el uso de los diferentes cromatógrafos y analizadores de gases. Otros datos adicionales que se obtienen son la concentración de los gases de entrada al reactor, la temperatura del horno, la presión en el interior del reactor y la duración del experimento.

Tabla 3.1: Condiciones experimentales.

Experimento	T^a	[C₂H₄] ppm	[NO] ppm	[N₂O] ppm	[NO₂] ppm
0.1*	1.200	30.000	-	-	-
0.2*	1.100	30.000	-	-	-
0.3*	1.000	30.000	-	-	-
0.4*	900	30.000	-	-	-
0.5*	800	30.000	-	-	-
0.6*	700	30.000	-	-	-
1.1	1.200	30.000	12.210	-	-
1.2	1.200	30.000	5.000	-	-
1.2a	1.200	30.000	5.000	-	-
1.3	1.200	30.000	1.000	-	-
1.4	1.200	30.000	500	-	-
1.5	1.100	30.000	5.000	-	-
1.6	1.000	30.000	5.000	-	-
1.7	900	30.000	5.000	-	-
1.8	800	30.000	5.000	-	-
1.9	700	30.000	5.000	-	-
2.1	1.200	30.000	-	11.780	-
2.2	1.200	30.000	-	5.000	-
2.3	1.200	30.000	-	1.000	-
2.4	1.200	30.000	-	500	-
2.5	1.100	30.000	-	5.000	-
2.6	1.000	30.000	-	5.000	-
2.7	900	30.000	-	5.000	-
2.8	800	30.000	-	5.000	-
2.9	700	30.000	-	5.000	-
3.1	1.200	30.000	-	-	12.000
3.2	1.200	30.000	-	-	5.000
3.3	1.200	30.000	-	-	1.000
3.4	1.200	30.000	-	-	500
3.5	1.100	30.000	-	-	5.000
3.6	1.000	30.000	-	-	5.000
3.7	900	30.000	-	-	5.000
3.8	800	30.000	-	-	5.000
3.9	700	30.000	-	-	5.000

**Datos proporcionados por el grupo de procesos termoquímicos [Abián y cols. 2012].*

4. ANÁLISIS DE RESULTADOS

En este capítulo se presenta una recopilación de los resultados experimentales más importantes obtenidos, tanto de formación de hollín como de composición de los principales gases de salida. Se realiza una validación de un modelo cinético comparando los resultados con los datos experimentales. Por último, se analizan los resultados obtenidos, estudiando los efectos de la concentración y presencia de cada óxido de nitrógeno y de la temperatura, con la ayuda del mecanismo cinético-químico utilizado en las simulaciones. En el Anexo B se presentan todos los resultados obtenidos durante el desarrollo de los experimentos.

4.1 PRINCIPALES RESULTADOS

En este apartado se analiza el efecto de la temperatura de reacción y de la concentración de cada uno de los óxidos de nitrógeno considerados en este proyecto, sobre la cantidad de hollín formada y la emisión a la salida de los principales gases generados.

Los resultados experimentales se han comparado con lo obtenido durante la pirólisis de etileno (en ausencia de óxidos de nitrógeno) en atmósfera inerte de nitrógeno.

4.1.1 FORMACIÓN DE HOLLÍN

En la Figura 4.1 se representa el efecto de la temperatura de reacción sobre la cantidad de hollín generado en la pirólisis de etileno, para una concentración inicial constante de 5.000 ppm de cada uno de los óxidos de nitrógeno, así como los resultados de la pirólisis de etileno en atmósfera inerte sin la presencia de ningún aditivo.

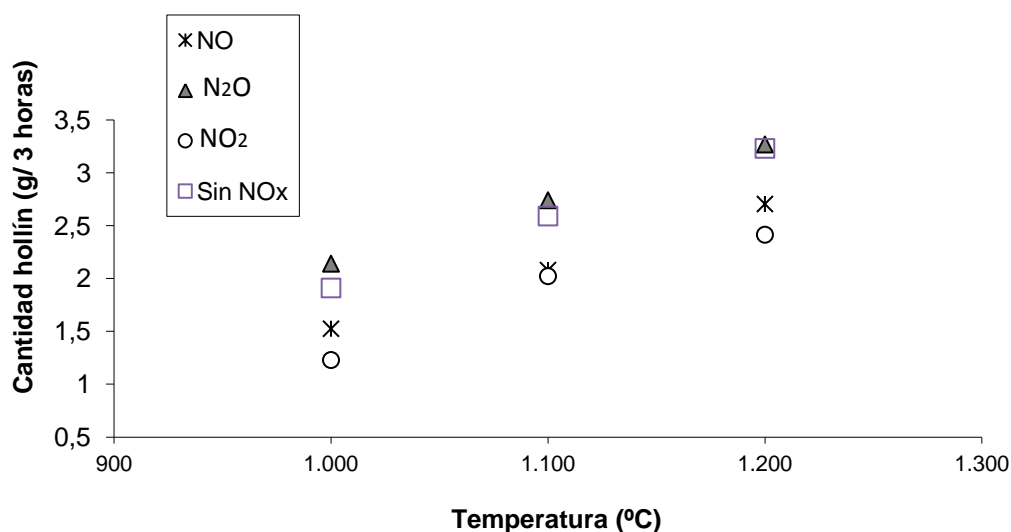


Figura 4.1 Cantidad de hollín formado a diferentes temperaturas de reacción en función de la presencia de los diferentes óxidos de nitrógeno. Experimentos 0.1- 0.3, 1.2, 1.5, 1.6, 2.2, 2.5, 2.6, 3.1, 3.2, 3.6 en Tabla 3.1

Se puede observar un aumento generalizado de la cantidad de hollín generado al aumentar la temperatura, independientemente del óxido de nitrógeno presente en el medio de reacción. Sólo se han representado los experimentos a partir de 1.000 °C, puesto que a menor temperatura la formación de hollín es prácticamente despreciable, dificultando su cuantificación sin incurrir en errores con los métodos empleados.

Respecto al tipo de óxido de nitrógeno adicionado, se observa una reducción del hollín formado con el empleo de NO y NO₂ respecto a la ausencia de estos en la pirólisis del etileno. La adición de N₂O, sin embargo, aumenta ligeramente la cantidad de hollín formado en comparación con la ausencia de óxidos de nitrógeno en la pirólisis de etileno.

Para el estudio de la influencia de la concentración de los óxidos de nitrógeno, se ha analizado, en la Figura 4.2, la cantidad de hollín formado a la temperatura de 1.200 °C, en la pirólisis de etileno para diferentes concentraciones de los óxidos de nitrógeno (0, 500, 1.000, 5.000 y 12.000 ppm). Los resultados obtenidos se han comparado con la pirólisis de etileno sin la presencia de ningún aditivo.

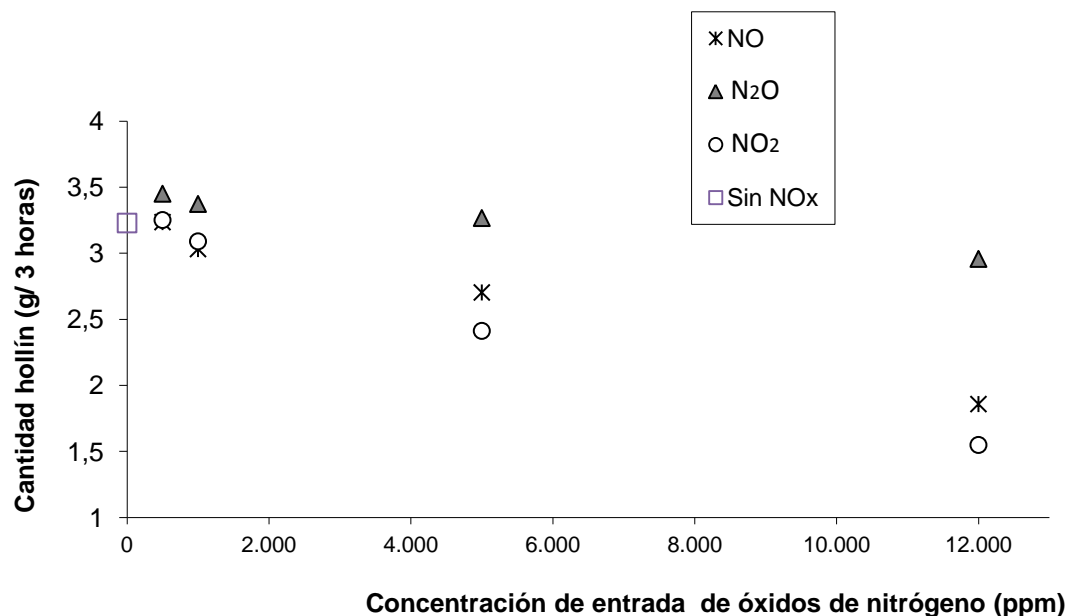


Figura 4.2 Cantidad de hollín formado a diferentes concentraciones iniciales de los óxidos de nitrógeno para una temperatura de 1.200°C. Experimentos 0.1, 1.1-1.4, 2.1-2.4, 3.1-3.4 en Tabla 3.1.

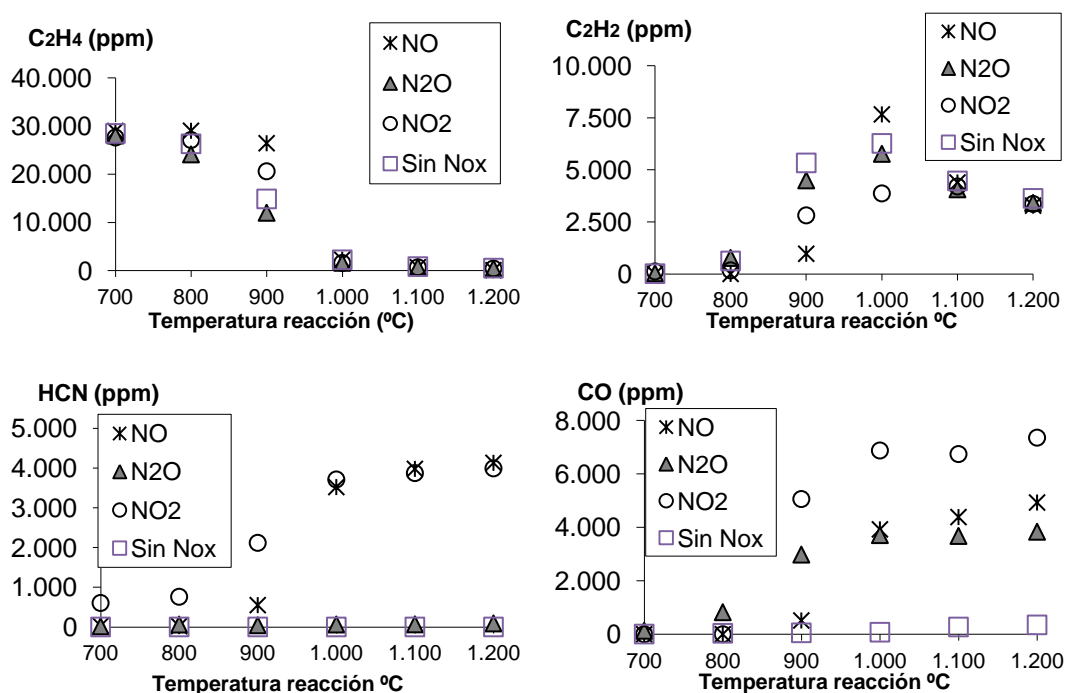
En general, para altas concentraciones de óxidos de nitrógeno (≈ 12.000 ppm) se observa una reducción del hollín formado respecto a la ausencia de aditivo, siendo dicha reducción más importante según la secuencia: $\text{NO}_2 > \text{NO} > \text{N}_2\text{O}$; con poca influencia y de similar magnitud para el NO y el NO_2 , y poco apreciable para el N_2O . Sin embargo, al disminuir la concentración de los diferentes óxidos de nitrógeno se pueden observar diferentes tendencias, analizadas a continuación en función del óxido de nitrógeno considerado.

- En el caso de la utilización de **NO** como aditivo en la pirólisis de etileno, la cantidad de hollín formado disminuye conforme aumenta la concentración inicial de NO. A altas concentraciones (≈ 12.000 y 5.000 ppm) se observa una reducción significativa de la cantidad de hollín formado respecto a la ausencia de óxido de nitrógeno, siendo despreciable el efecto de la presencia de 500 ppm de NO.
- En la adición de **NO₂** a la pirólisis de etileno, para altas concentraciones (≈ 12.000 y 5.000 ppm) se observa un comportamiento similar al de la utilización de NO como aditivo, es decir, una reducción del hollín formado conforme aumenta la concentración del óxido de nitrógeno. No obstante, dicha reducción es de mayor cuantía que con el uso de NO. Cuando las concentraciones de NO_2 son bajas (menores de 1.000 ppm) la tendencia se mantiene, siendo despreciable el efecto de la presencia de 500 ppm de NO_2 , observándose un efecto en la formación de hollín muy similar al obtenido con la utilización de NO como aditivo.
- En la adición de **N₂O** a la pirólisis de etileno, únicamente para la concentración más alta utilizada en los experimentos (≈ 12.000 ppm)

se observa una pequeña reducción de la cantidad de hollín formado respecto a la ausencia de óxidos de nitrógeno en la pirólisis de etileno. Esta reducción es de mucha menor cuantía que la obtenida en el uso de NO y NO₂ como aditivos a la misma concentración. A menores concentraciones de N₂O, (≈ 5.000 ppm), la cantidad de hollín formado es prácticamente similar a la pirólisis de etileno en ausencia de óxidos de nitrógeno. Para bajas concentraciones iniciales de N₂O (≈ 1.000 y 500 ppm), la cantidad de hollín formado es incluso superior a la obtenida en la pirólisis del etileno sin la presencia de aditivos.

4.1.2 GASES DE SALIDA

El estudio de los gases de salida del reactor obtenidos experimentalmente proporciona una valiosa información sobre las reacciones ocurridas en el medio. En la Figura 4.3 se muestran los resultados de los principales gases de salida obtenidos en la pirólisis de etileno a diferentes temperaturas de operación y para una concentración inicial constante de 5.000 ppm de cada óxido de nitrógeno.



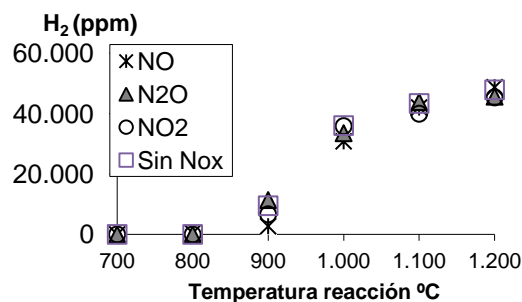


Figura 4.3: Concentraciones experimentales de los principales gases a la salida del reactor, para diferentes temperaturas de reacción y una concentración de 5.000 ppm de cada uno de los óxidos de nitrógeno. Experimentos 0.1-0.6, 1.2, 1.5-1.9, 2.2, 2.5-2.9, 3.2, 3.5-3.9 en Tabla 3.1.

Los resultados más significativos, extraídos del análisis de los gases de salida en función de la temperatura de reacción son los siguientes:

- El consumo de etileno es despreciable a temperaturas inferiores a 800 °C. Se empieza a consumir a los 900 °C, reaccionando casi completamente a partir de los 1.000 °C. El etileno sigue la misma tendencia para todos los óxidos de nitrógeno usados como aditivo. La diferencia más significativa se encuentra a los 900 °C donde reacciona en mayor cuantía cuando se adiciona N₂O, respecto a la adición de los otros óxidos de nitrógeno y a la pirólisis de etileno sin la presencia de ningún óxido de nitrógeno.
- La formación de hidrógeno como producto está relacionada con el consumo de etileno y la formación de hollín, siendo despreciable a temperaturas inferiores a 800 °C, y aumentando significativamente conforme aumenta la temperatura. La concentración de hidrógeno a la salida presenta valores similares para todos los óxidos de nitrógeno empleados como aditivos en la pirólisis de etileno.
- La concentración de HCN en los gases de salida aumenta con la temperatura, salvo para el caso del N₂O, donde no se produce en cantidades apreciables a ninguna de las temperaturas de reacción estudiadas. En la pirólisis de etileno en ausencia de óxidos de nitrógeno tampoco se detecta la formación de HCN.
- La evolución de la concentración a la salida de acetileno sigue la misma tendencia para la adición de cada uno de los óxidos de nitrógeno, así como para la pirólisis de etileno sin la presencia de ningún aditivo. A bajas temperaturas, (700 y 800 °C), su concentración es despreciable. Conforme aumenta la temperatura a partir de este punto, empieza a subir su concentración a la salida, hasta que alcanza el máximo a 1.000 °C de temperatura de reacción. La concentración a la salida disminuye, a temperaturas de 1.100 °C y 1.200 °C.
- La evolución de concentración a la salida del CO tiende a aumentar conforme aumenta la temperatura para todos los óxidos de nitrógeno

usados como aditivos. A temperaturas bajas (700 y 800 °C) la concentración de CO a la salida es despreciable en todos los casos. A partir de 900 °C esta concentración comienza a aumentar, de manera más significativa en el caso de la adición de NO₂ como aditivo.

Una vez vista la evolución de la concentración de los principales gases de salida, representados en la Figura 4.3, en función de la temperatura para una concentración de óxido de nitrógeno constante, se analizan conjuntamente las tendencias en la formación de hollín y la concentración de los gases de salida.

La concentración de salida del etileno comienza a disminuir en torno a los 900 °C. A partir de 1.000 °C, el etileno reacciona casi por completo. El acetileno comienza a formarse a partir de 900 °C, teniendo un máximo de concentración a la salida a los 1.000 °C, para luego disminuir al aumentar la temperatura.

Al aumentar la temperatura, el etileno comienza a reaccionar, formando diferentes hidrocarburos, siendo el acetileno el principal en condiciones de pirólisis. Conforme sigue aumentando la temperatura, el acetileno se une a otros radicales para formar hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs), según el mecanismo HACA [Haynes y Wagner, 1981]. Los PAHs son activados mediante la abstracción de un átomo de hidrógeno, formando un radical que reaccionará con otras especies de hidrocarburos como acetileno, adicionando átomos de carbono y permitiendo el crecimiento de la molécula. El crecimiento de estos anillos aromáticos conducirá a la formación de las primeras partículas de hollín, denominadas partículas primarias. El consumo del etileno produce el aumento inicial en la concentración de acetileno a la salida. Al aumentar la temperatura de reacción se produce una bajada en la concentración de acetileno provocada por el aumento de la formación de hollín, debido a que el acetileno se consume para formar los PAHs.

La concentración de hidrógeno a la salida aumenta con la temperatura, con la misma tendencia para todos los óxidos de nitrógeno (Figura 4.3). El aumento de la concentración de hidrógeno se relaciona con el consumo de etileno y el aumento de la formación de hollín. El hollín está formado principalmente por carbono. Al consumirse el etileno, el carbono de sus átomos pasa a formar parte de otros hidrocarburos con menor proporción de hidrógeno por átomo de carbono, como el acetileno o el benceno, liberando hidrógeno. Al aumentar la formación de hollín y el consumo de etileno con la temperatura, aumenta la concentración de hidrógeno a la salida.

La concentración a la salida del CO aumenta con la temperatura siguiendo la misma tendencia para cada uno de los óxidos de nitrógeno. En el caso de la pirólisis de etileno en atmósfera inerte, no se forma CO debido a la ausencia de oxígeno en la atmósfera de reacción. En las condiciones experimentales del presente proyecto, la mayor parte del oxígeno presente en los óxidos de nitrógeno acaba formando parte del CO. A modo de ejemplo en la Figura 4.4 se representa la evolución del NO y el CO a la salida de la zona de reacción a diferentes temperaturas de operación para

los experimentos de pirólisis del etileno para una concentración inicial constante de 5.000 ppm de NO.

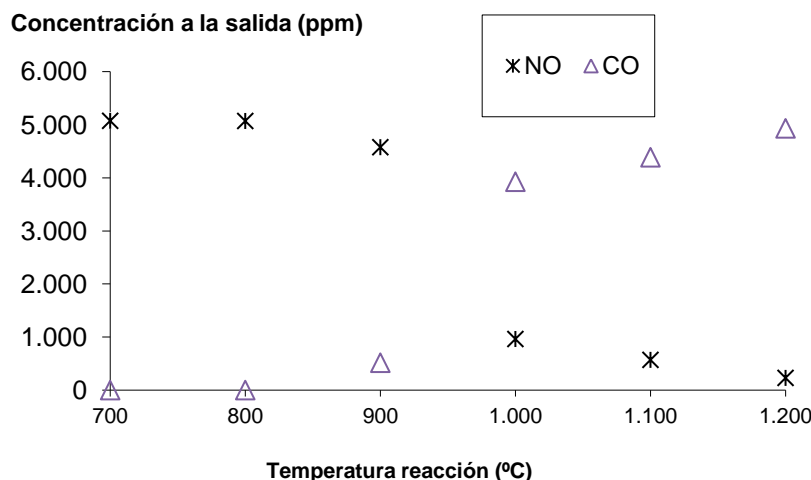


Figura 4.4: Concentración del NO y el CO a la salida del reactor a diferentes temperaturas de operación para los experimentos de pirólisis del etileno a una concentración inicial constante de 5.000 ppm de NO. Experimentos 1.2, 1.5-1.9 en Tabla 3.1.

En estas condiciones experimentales, conforme se consume el NO, el CO aumenta a la salida. La concentración de CO para el resto de los óxidos de nitrógeno sigue la misma tendencia, siendo superior para el NO₂ debido a la presencia de un mayor número de átomos de oxígeno.

La concentración de salida de HCN aumenta con la temperatura en la pirólisis de etileno con NO y NO₂ como aditivo. En el caso de la presencia de N₂O y de la ausencia de óxidos de nitrógeno, la concentración de HCN a la salida es despreciable para todas las temperaturas.

El HCN se forma como producto de las reacciones de consumo del NO y el NO₂ en las condiciones experimentales, detalladas en la Figura 4.11 y en los Apartados 4.4 y 4.5. En el consumo del N₂O no se forma HCN como subproducto. En la Figura 4.5, se presenta la relación entre la concentración a la salida del NO y del HCN para diferentes temperaturas en la pirólisis del etileno a una concentración inicial de 5.000 ppm de NO. Se puede observar como la concentración de HCN aumenta conforme aumenta la temperatura de reacción ya que el consumo de NO también aumenta con la temperatura.

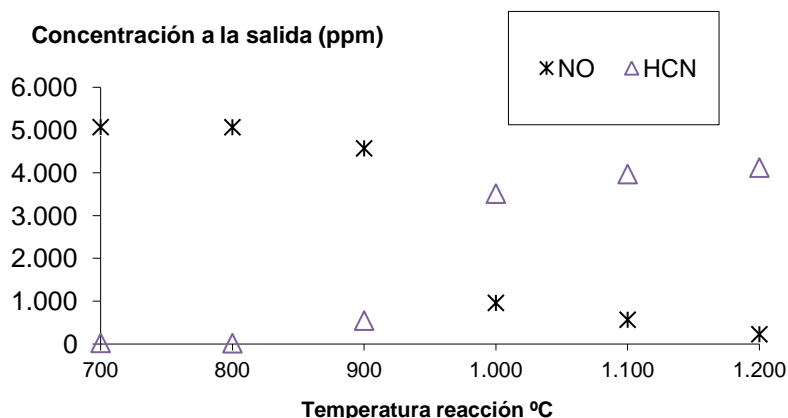
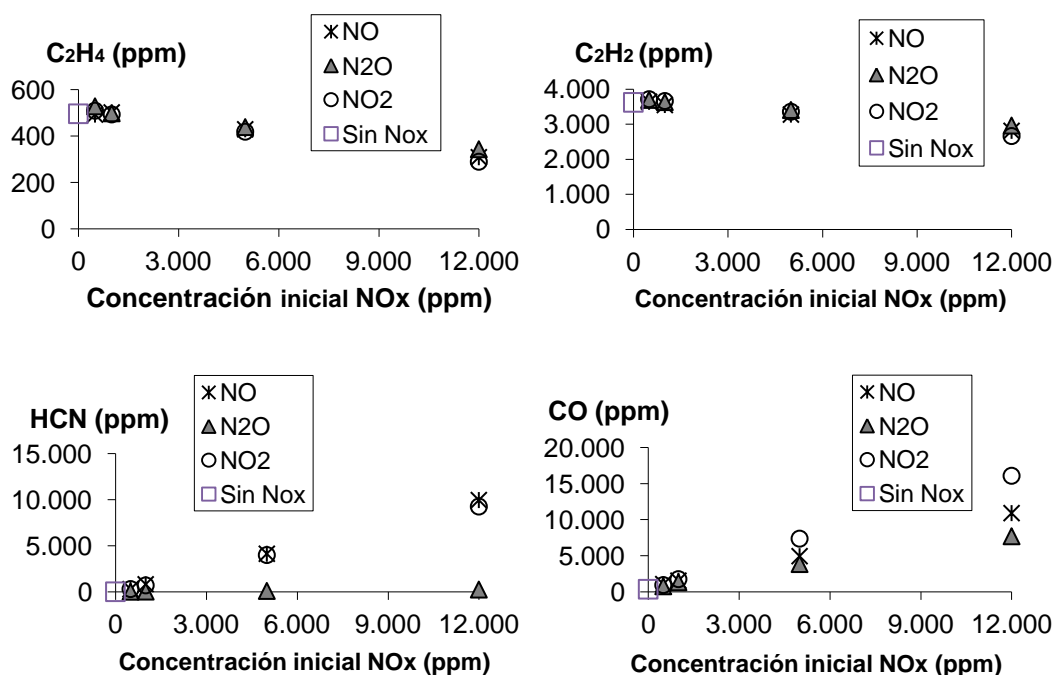


Figura 4.5: Concentración a la salida del NO y del HCN para diferentes temperaturas en la pirolisis del etileno a una concentración inicial de 5.000 ppm de NO. Experimentos 1.2, 1.5-1.9 en Tabla 3.1.

A continuación se exponen en Figura 4.6 los resultados obtenidos experimentalmente para los gases de salida más importantes en la adición de diferentes óxidos de nitrógeno a temperatura constante (1.200 °C). Se ha representado las partes por millón de los gases a la salida en el eje de ordenadas, y la concentración inicial de cada óxido de nitrógeno a la que se realizaba el experimento en el eje de abscisas.



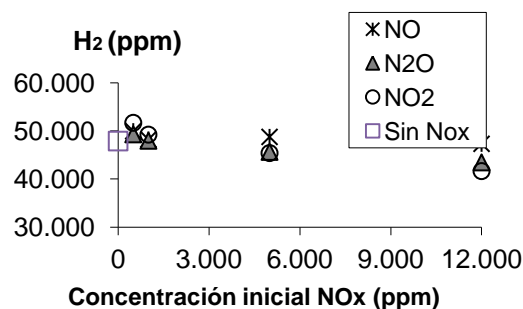


Figura 4.6: Concentraciones experimentales de los principales gases a la salida, para diferentes concentraciones iniciales de los óxidos de nitrógeno a una temperatura constante de 1.200 °C. Experimentos 0.1, 1.1-1.4, 2.1-2.4, 3.1-3.4 en Tabla 3.1.

Las diferencias más significativas de la concentración de los principales gases de salida, en función de la concentración de los diferentes óxidos de nitrógeno son:

- No existen diferencias significativas en la concentración de etileno y acetileno a la salida del reactor, para todos los óxidos de nitrógeno estudiados, lo que indica que la presencia de óxidos de nitrógeno no afecta significativamente al régimen de conversión de etileno.
- Se obtienen cantidades crecientes de HCN conforme aumenta la concentración inicial de NO y NO₂. Sin embargo, la concentración de HCN a la salida para los experimentos con N₂O es prácticamente despreciable, independientemente de su concentración.
- Se obtienen cantidades crecientes de CO conforme aumenta la concentración inicial de óxido de nitrógeno. Las concentraciones de CO a la salida son más altas para el NO₂, intermedias para el NO e inferiores en el caso del N₂O.
- En presencia de óxidos de nitrógeno, la concentración a la salida del hidrógeno disminuye, en general, conforme aumenta la concentración del cualquiera de los óxidos de nitrógeno utilizados como aditivos. Esta disminución es mayor en el caso del NO₂ y el N₂O, y menor para el NO. La concentración de hidrógeno a la salida sufre un ligero aumento para bajas concentraciones de óxidos de nitrógeno (500 ppm) respecto a la pirólisis de etileno sin la presencia de ningún aditivo.

En los experimentos a temperatura constante (1.200 °C) y a diferentes concentraciones de óxidos de nitrógeno, el óxido de nitrógeno se consume casi por completo, obteniéndose concentraciones despreciables de óxidos de nitrógeno a la salida.

Para realizar un análisis mas detallado de los resultados obtenidos tanto de la cantidad de hollín formado como de los gases a la salida del reactor, se han llevado a cabo, simulaciones teóricas con las condiciones experimentales por medio del software CHEMKIN-II. Se han comparado los resultados de las simulaciones con los obtenidos experimentalmente para

realizar la validación del modelo, y a través del análisis de los caminos de reacción, se ha realizado el estudio de las reacciones principales involucradas en el proceso en función de la presencia y concentración de los diferentes óxidos de nitrógeno a las diferentes temperaturas de reacción.

4.3 VALIDACIÓN DEL MECANISMO CINÉTICO

El software utilizado para realizar las simulaciones ha sido el código SENKIN del paquete de cinética química CHEMKIN-II. Este programa permite calcular la evolución en el tiempo de una mezcla homogénea de gases reactantes en un sistema cerrado para unas condiciones dadas. Se han realizado simulaciones emulando las condiciones teóricas de los experimentos, para poder realizar las comparaciones. En el Anexo C se encuentra detallado el funcionamiento del software del programa.

Se disponía de dos posibles modelos para la realización de las simulaciones, que denominaremos modelo A y modelo B. Ambos modelos están formados por la unión de diferentes mecanismos cinético-químicos procedentes de bibliografía descritos a continuación.

El modelo A utiliza un mecanismo de reacción compuesto por los siguientes mecanismos cinéticos:

- Mecanismo cinético propuesto por Skjøth-Rasmussen y cols. (2004), para la oxidación de C_2H_2 con O_2 , actualizado por Alzueta y cols. (2008) para mejorar las reacciones vinculadas a la química del C_2H_2 . Es un mecanismo de 773 reacciones y 159 especies.
- Modelo cinético propuesto por Alzueta y Hernández (2002), para la descomposición de etanol en etileno, acetileno, CO y CO_2 . Es un mecanismo de 500 reacciones y 73 especies.
- Mecanismo cinético propuesto por Glarborg y cols. (1998), para la interacción entre hidrocarburos gaseosos y NO. Es un mecanismo de 447 reacciones elementales y 68 especies.
- Mecanismo cinético propuesto por Appel, Frenklach y Bockhorn (2000), para las reacciones de formación de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) hasta pyreno.

El modelo B utiliza los mecanismos cinéticos del modelo A, pero sin incluir el último modelo cinético descrito, para las reacciones de formación de PAHs.

Los modelos A y B utilizados, son el resultante de la unión de sus respectivos mecanismos cinéticos, suprimiendo las especies y reacciones duplicadas. Es importante destacar que utilizando el modelado cinético no se pueden reproducir de manera exacta los datos experimentales, ya que el modelo incluye únicamente reacciones en fase gas (no incluye reacciones de formación de hollín).

Para la selección del mecanismo con el que analizar la totalidad de los resultados obtenidos, se han simulado las condiciones experimentales de los

experimentos realizados con NO con ambos mecanismos. Los datos obtenidos se han comparado con los experimentales. En las Figura 4.7 y Figura 4.8 se muestran los resultados de la concentración a la salida de los gases más relevantes. Los gases utilizados para la validación de los modelos cinéticos han sido el HCN y el CO, pues son productos gaseosos típicos del consumo de óxidos de nitrógeno en las condiciones experimentales. También se han comparado, en la Figura 4.7 además de los anteriores, el etileno y el NO, pues dan idea de la cantidad de los reactivos consumidos en función de la temperatura.

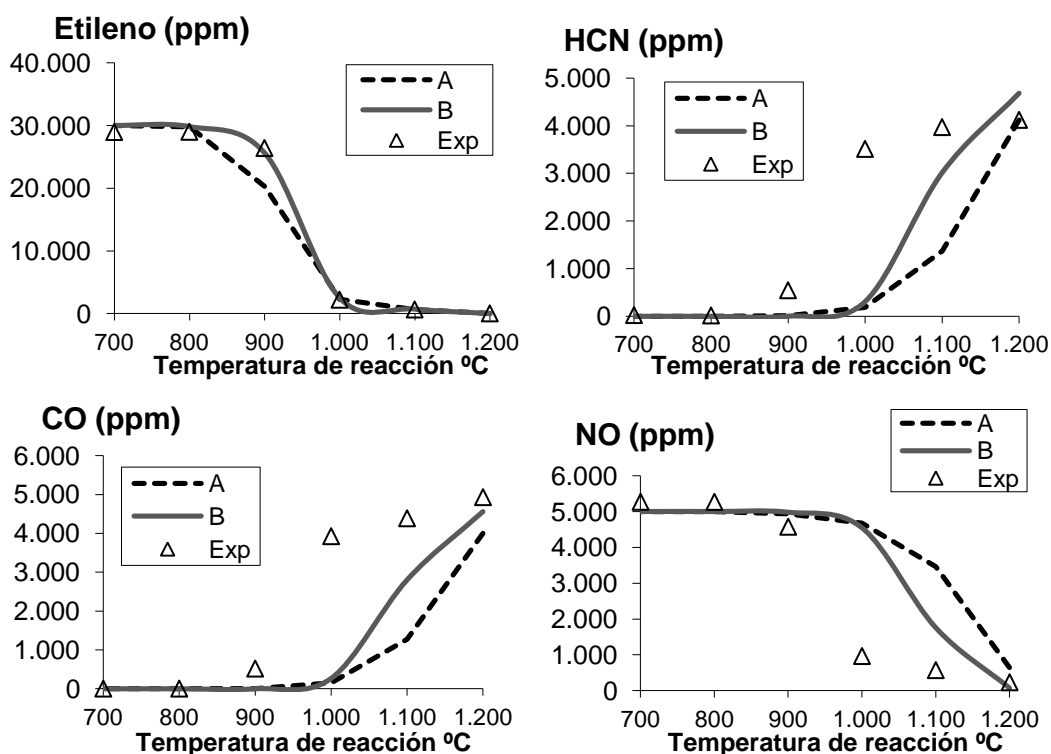


Figura 4.7: Comparación de las simulaciones de los dos modelos con los datos experimentales de los principales gases de salida, para una concentración constante de NO de 5.000 ppm y a diferentes temperaturas de reacción. Experimentos 1.1, 1.5-1.9 en Tabla 3.1.

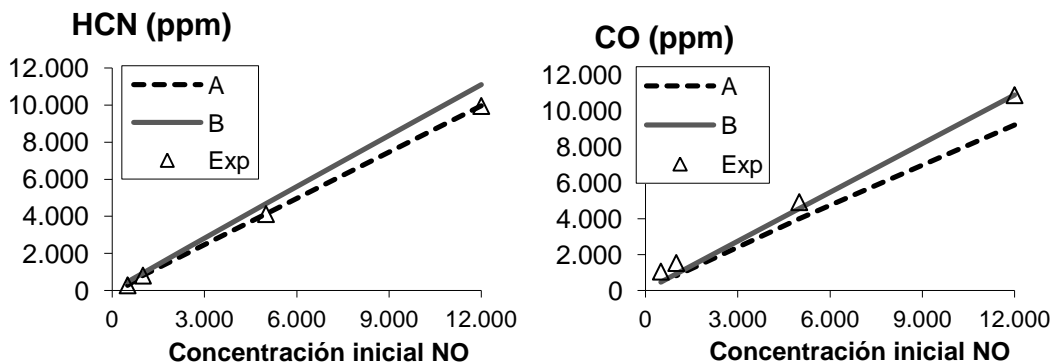


Figura 4.8: Comparación de las simulaciones de los dos modelos con los datos experimentales de los principales gases de salida, para una temperatura constante de 1.200 °C y a diferentes concentraciones de NO. Experimentos 1.1-1.4 en Tabla 3.1.

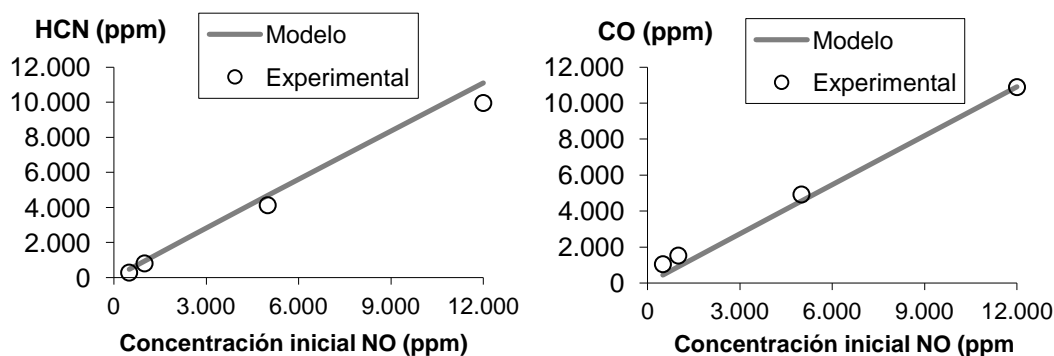
A la temperatura constante de 1.200°C y variando la concentración de NO inicial, (Figura 4.8) ambos modelos se ajustan muy bien a los datos experimentales para los gases de salida HCN y CO.

Para una concentración fija de NO y diferentes temperaturas de reacción, el modelo B se ajusta mejor a los datos experimentales, para las temperaturas de 1.000 y 1.100 °C. Por ello, se decidió utilizar el modelo B para las simulaciones de la totalidad de las condiciones experimentales. En el Anexo E se encuentran todos los resultados obtenidos en las simulaciones de ambos modelos.

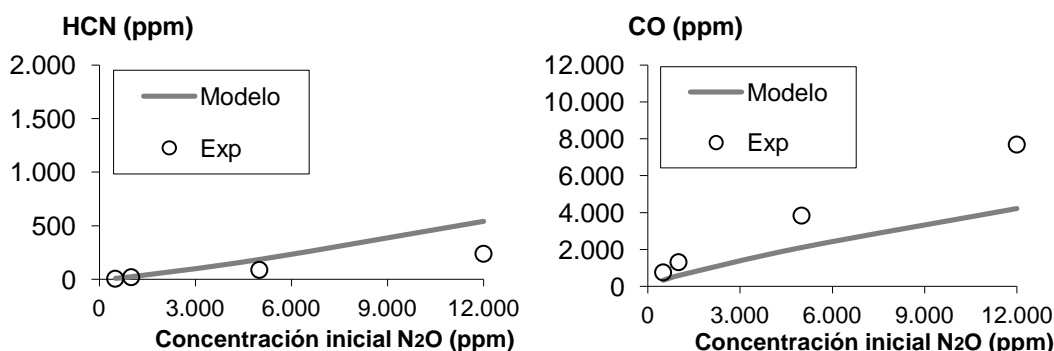
El modelo B elegido está formado por 79 especies y 537 reacciones elementales. En el anexo D se encuentra una descripción completa del mecanismo utilizado.

Una vez elegido el modelo a utilizar, se procedió a la validación del mismo con los resultados experimentales para cada uno de los óxidos de nitrógeno utilizados. Para ello se han simulado las condiciones de cada experimento, comparando los gases de salida experimentales con los resultados obtenidos con la simulación. En la Figura 4.9 se muestra una selección de los resultados más relevantes. En el Anexo B se incluyen todas resultados obtenidos de las comparaciones del modelo B con los resultados experimentales.

- a) Pirólisis de etileno en presencia de distintas concentraciones de NO a 1.200 °C.



- b) Pirólisis de etileno en presencia de distintas concentraciones de N₂O a 1.200 °C.



c) Pirólisis de etileno en presencia de distintas concentraciones de NO_2 a $1.200\text{ }^\circ\text{C}$.

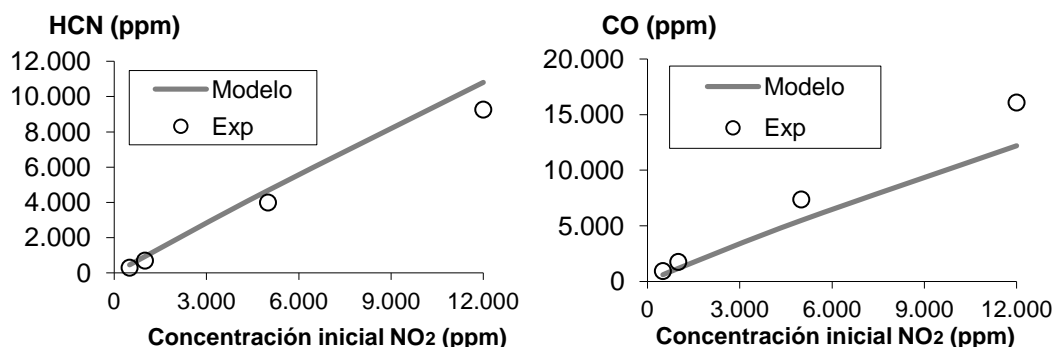


Figura 4.9: Concentración de HCN y CO en función de la presencia y concentración de los principales óxidos de nitrógeno a $1.200\text{ }^\circ\text{C}$: a) NO ; b) N_2O , c) NO_2 . Experimentos 1.1-1.4, 2.1-2.4, 3.1-3.4 en Tabla 3.1.

En la Figura 4.9 se han representado la comparación de los resultados experimentales y teóricos del HCN y del CO, compuestos que son producto de los mecanismos de consumo de los óxidos de nitrógeno usados como aditivos. Se puede observar que los resultados obtenidos con el modelo son muy similares a los experimentales, y siguen la misma tendencia.

Sin embargo, el modelo cinético utilizado tiene sus limitaciones como ya se ha mencionado anteriormente. Se puede observar en la Figura 4.10, el mecanismo no predice adecuadamente la concentración de hidrógeno y acetileno a la salida del reactor. Esto es debido a que el mecanismo utilizado no incluye las reacciones de formación de los hidrocarburos aromaticos policíclicos pesados y las reacciones de formación de hollín. Las predicciones teóricas para el acetileno y el hidrógeno distan mucho de los resultados experimentales debido a que el mecanismo está limitado a la fase gas y no predice los efectos de la formación de hollín, siendo estos dos compuestos clave en dicho proceso. Los resultados experimentales de acetileno son mucho menores que las simulaciones, debido al consumo de este para formar los precursores de hollín según el mecanismo HACA [Haynes y Wagner, 1981]. Los resultados experimentales de hidrógeno son superiores a las simulaciones, debido a que en el proceso de formación de hollín a través de la ruta HACA se libera hidrógeno.

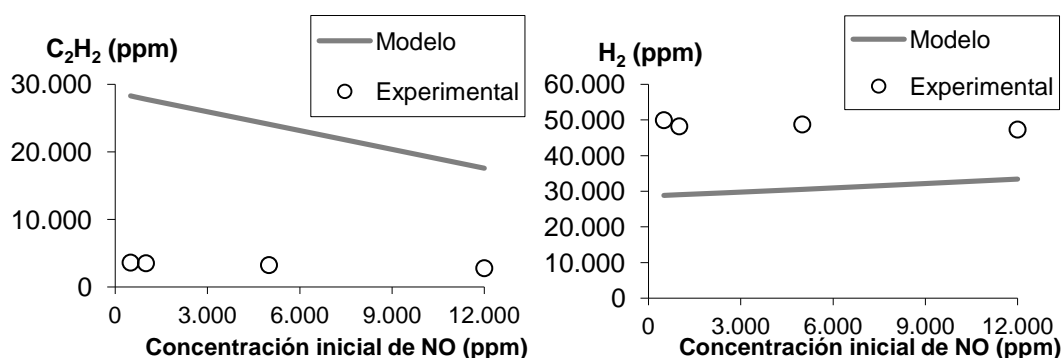


Figura 4.10: Comparación de la simulación de las condiciones experimentales con el modelo con los datos experimentales para el acetileno y el hidrógeno, para diferentes concentraciones de NO a una temperatura de reacción de 1.200 °C. Experimentos 1.1-1.4 en Tabla 3.1.

Aunque el modelo cinético no incluya las reacciones de formación de hollín, dado que el objetivo es reproducir las principales tendencias experimentales, no impide la utilización del mismo, ya que predice adecuadamente la mayoría de especies gaseosas obtenidas, por lo que se puede utilizar para analizar los mecanismos de reacción en presencia de los diferentes óxidos de nitrógeno, siguiendo la metodología establecida por el grupo [Esarte y cols., 2009].

4.4 ANÁLISIS DEL EFECTO DEL NO

Para analizar el efecto del NO en la formación de hollín, utilizado como aditivo en la pirólisis del etileno, se han observado los gases de salida obtenidos en la realización de los experimentos. Además se han comparado los resultados experimentales con resultados obtenidos por medio de simulaciones teóricas y se han analizado los principales caminos de reacción por los que transcurre el proceso.

En los experimentos a temperatura de reacción de 1.200 °C y diferentes concentraciones iniciales de NO como aditivo en la pirólisis de etileno, el NO se consumía casi por completo para todas las concentraciones iniciales empleadas.

Mediante la utilización del modelo cinético-químico se han determinado los principales caminos de reacción involucrados en el consumo de NO y la formación y consumo de los principales compuestos nitrogenados. En la Figura 4.11 se representan los principales caminos de reacción de consumo de NO obtenidos.

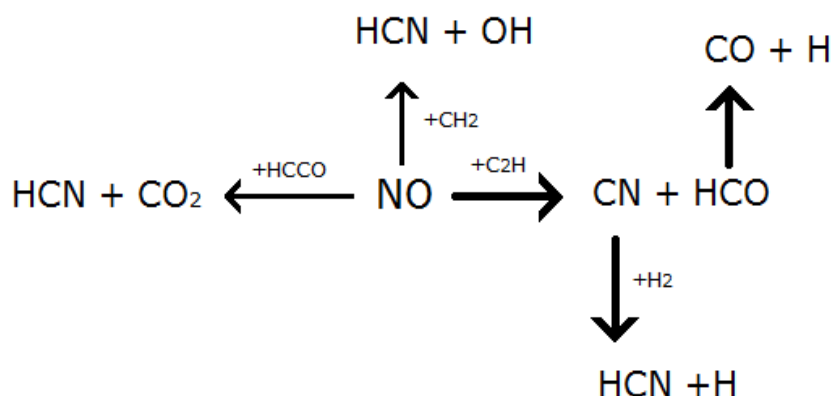
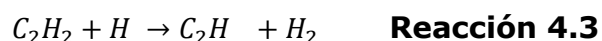
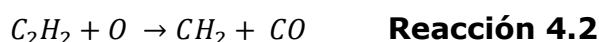
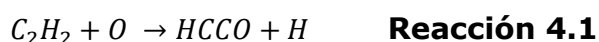


Figura 4.11: Caminos de reacción teóricos para el consumo de NO.

Como se puede observar, las reacciones de consumo de NO conducen principalmente a la formación de HCN, formando además como productos CO_2 , CO, y radicales H y OH. El NO reacciona principalmente con radicales CH_2 , C_2H y HCCO. Estos radicales se forman a partir del acetileno mediante la Reacción 4.1, 4.2 y 4.3.



La disminución de los radicales HCCO, CH_2 y C_2H , debido a las reacciones de consumo de NO, para formar HCN, CO y CO_2 , elimina átomos de carbono de los principales caminos de formación de hollín. Esto justifica que, a mayor concentración de NO, mayor sea la reducción de la cantidad de hollín formado respecto a la pirólisis del etileno como se observa experimentalmente en la Figura 4.2.

Experimentalmente se observa que la concentración de HCN y CO en los gases de salida aumenta conforme aumenta la concentración de NO inicial, (Figura 4.6). Los valores de salida del HCN son similares a los valores de concentración a la entrada de NO, Figura 4.6, confirmando que los caminos de consumo de NO llevan a la formación de HCN. La concentración de CO a la salida es similar a la concentración de NO de entrada. La mayor parte del oxígeno introducido con los óxidos de nitrógeno forma parte, a la salida, del CO, y en menor medida del CO_2 . Los resultados de los gases experimentales validan los caminos de reacción propuestos en la Figura 4.11.

4.5 ANÁLISIS DEL EFECTO DEL N_2O

En los estudios experimentales de la pirólisis de etileno con la presencia de diferentes concentraciones de N_2O como aditivo, realizados a temperatura

constante de 1.200 °C, la concentración a la salida de óxidos de nitrógeno era despreciable para todos los casos, el N₂O introducido se consumía casi completamente en estas condiciones.

Mediante la utilización del modelo cinético se han determinado los caminos de reacción de consumo de N₂O y los principales compuestos nitrogenados en las condiciones experimentales, representados en la Figura 4.12.

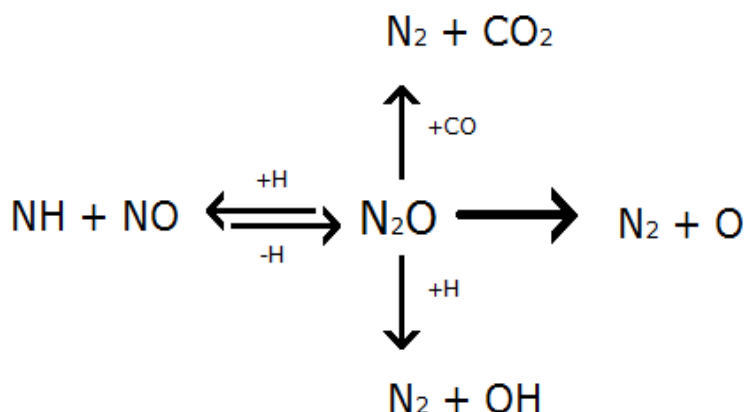


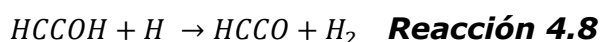
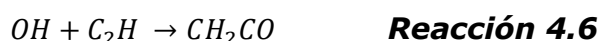
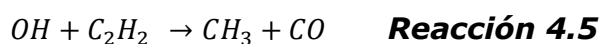
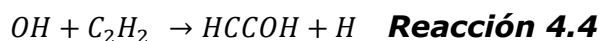
Figura 4.12: Caminos de reacción teóricos para el consumo de N₂O.

Los caminos de reacción para el consumo del N₂O conducen principalmente a la formación de N₂, CO₂ y radicales O y OH. En menor medida, mediante una reacción reversible, se forma NO.

El NO formado en las reacciones de consumo del N₂O, reaccionará consumiéndose según los mecanismos explicados en la Figura 4.11 del apartado anterior, formando principalmente como productos HCN y CO.

Según los mecanismos de reacción del modelo cinético, los radicales O formados en las reacciones de consumo de N₂O, reaccionan con acetileno según las Reacciones 4.1, 4.2 y 4.3.

El radical OH formado en las reacciones de consumo de N₂O, según el modelo cinético del mecanismo, reacciona por los caminos de reacción detallados en las Reacciones 4.4 a 4.8.



Los radicales HCCO, CH₂ y C₂H formados, pueden formar hidrocarburos más complejos, desembocando en la formación de partículas de hollín.

En función de los diferentes caminos de reacción de consumo de N_2O , se pueden formar compuestos como el CO y el HCN, que sustraen átomos de carbono de los caminos de formación de hollín, y compuestos como el HCCO, C_2H y CH_2 , que pueden formar hidrocarburos más complejos que acaben formando partículas de hollín.

En los caminos de reacción de consumo de N_2O , la mayor parte de los átomos de nitrógeno fijo del óxido de nitrógeno, forma N_2 . A diferencia de la presencia de NO como aditivo, en el que mayoritariamente forma HCN. Esto hace que, en general, el consumo del N_2O presente en la pirólisis de etileno no lleve a la retirada de átomos de carbono de los caminos de formación de hollín. Se puede observar en la Figura 4.6 que, al emplear N_2O como aditivo a la entrada, la concentración a la salida de HCN es prácticamente nula y la concentración a la salida de CO es inferior a la producida al emplear NO o NO_2 como aditivo, para una misma concentración de óxido de nitrógeno inicial. La menor formación de moléculas gaseosas que retiren átomos de carbono de los caminos de reacción de formación de hollín, justifica que el uso de diferentes concentraciones de N_2O como aditivo no disminuya significativamente la cantidad de hollín formado respecto a la pirólisis de etileno sin la presencia de ningún óxido de nitrógeno.

La preponderancia de los diferentes caminos de reacción varía ligeramente en función de la concentración inicial presente de N_2O . Para bajas concentraciones, predomina la reacción de formación de N_2 y radical O. Al subir la concentración, aumenta la importancia de la reacción reversible de formación de NO, aunque siempre siendo de menor importancia que las reacciones que consumen el N_2O formando N_2 .

Esto justifica por qué se obtiene más cantidad de hollín a bajas concentraciones de N_2O que con la pirólisis del etileno, debido al efecto de los radicales intermedios formados, mientras que a altas concentraciones se observa una ligera disminución de la cantidad de hollín formado, que se puede atribuir al aumento de la formación de NO.

4.6 ANÁLISIS DEL EFECTO DEL NO_2

En los experimentos de la pirólisis de etileno realizados en presencia de NO_2 a temperatura constante de 1.200 °C, la concentración de los diferentes óxidos de nitrógeno (NO, NO_2 y N_2O) para las diferentes concentraciones de NO_2 iniciales, era despreciable en todos los casos. El óxido de nitrógeno introducido se consumía casi por completo en estas condiciones de reacción.

Mediante la utilización del modelo cinético se han determinado los caminos de reacción de consumo de NO_2 y de los principales compuestos nitrógenados, en las condiciones experimentales. Las reacciones de consumo del NO_2 se muestran en la Figura 4.13.

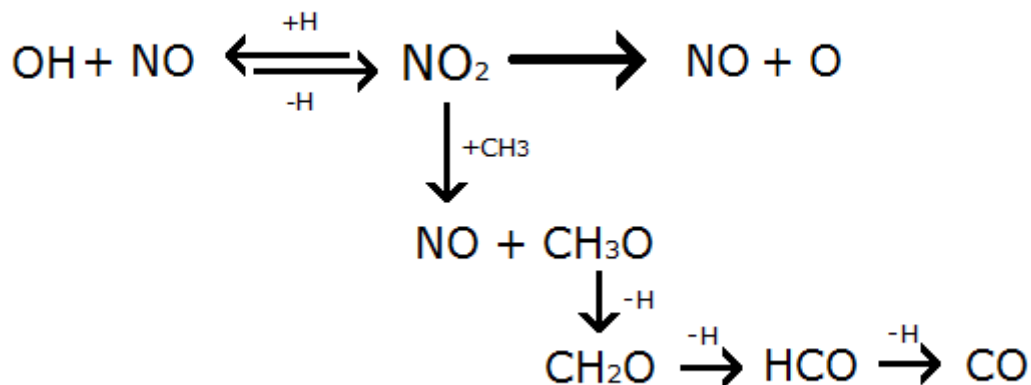


Figura 4.13: Caminos de reacción teóricos para el consumo de NO₂.

Los caminos de consumo del NO₂ llevarán a la formación de NO, el cual se consume por las reacciones de consumo de NO vistas en la Figura 4.11. En función del camino de reacción de consumo de NO₂, se producen diferentes compuestos además del NO. Estos compuestos son los radicales O, radicales OH y CH₃O. El CH₃O, se descompone liberando hidrógeno, dando lugar al CO.

La relevancia de los caminos de reacción de consumo de NO₂ difiere en gran medida en función de su concentración inicial. El NO₂ se convierte a NO, que seguirá reaccionando según la Figura 4.11. Pero dependiendo de la reacción de conversión de NO₂ a NO, se forman diferentes productos intermedios.

A altas concentraciones iniciales de óxido de nitrógeno, en las condiciones experimentales, la reacción predominante de conversión del NO₂ a NO es la que forma CO como producto. Sin embargo, conforme bajan la concentración inicial de NO₂, las reacciones de conversión de NO₂ a NO que forman el radical O y el radical OH ganan importancia como camino de consumo del NO₂.

Los radicales O se consumen según las reacciones 4.1 y 4.2, formando HCCO y CH₂. Los radicales OH se consumen según las reacciones 4.3 a 4.7, formando CO, HCCO y CH₂. El HCCO y el CH₂ son productos que forman parte del camino de reacción que pueden llevar a la formación de hollín, que también pueden interaccionar con el NO formado según los caminos de reacción expuestos en la Figura 4.12, dando lugar a su reducción.

Como ya se ha destacado en la Figura 4.1, la cantidad de hollín generado varía en función de la concentración inicial de NO₂, reduciéndola notablemente para altas concentraciones, con un efecto incluso superior al del NO.

Este hecho se puede atribuir a que en la conversión del NO₂ se forma NO y otros radicales tales como O y OH. Por un lado el NO formado va a interaccionar con los radicales hidrocarburos formados (HCCO, CH₂...),

según los caminos de reacción detallados en la Figura 4.12, eliminando carbono de los caminos típicos de formación de hollín. Por otro lado, los radicales O y OH formados también van a poder contribuir a la disminución de las emisiones de hollín a través de reacciones de oxidación hacia CO y CO₂ de hidrocarburos inquemados, dando lugar a un descenso en las emisiones de hollín con respecto a la utilización de NO.

5. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

5.1. CONCLUSIONES

Se establecieron unos objetivos iniciales al principio del proyecto. Para desarrollarlos, se han realizado experimentos en un reactor de flujo de cuarzo, a presión atmosférica, y diferentes temperaturas de reacción (700-1.200 °C) utilizando una concentración constante de etileno de 30.000 ppm, y diferentes concentraciones (500-12.000 ppm) de distintos óxidos de nitrógeno (NO, NO₂, N₂O).

Se ha estudiado el efecto de la presencia y concentración de los diferentes óxidos de nitrógeno sobre la cantidad de hollín formada y la emisión de los principales productos gaseosos.

Adicionalmente, se han utilizado modelos cinético-químicos para simular las condiciones experimentales, permitiendo realizar una validación de los modelos comparándolos con los datos experimentales y un estudio de las reacciones químicas involucradas.

Con todo esto, se han obtenido las siguientes conclusiones:

Respecto a los experimentos de formación de hollín para la pirólisis de etileno con diferentes óxidos de nitrógeno, se puede concluir:

- La formación de hollín en procesos de pirólisis de etileno se ve influenciada por la presencia de óxidos de nitrógeno en la atmósfera de combustión. Esta influencia es diferente en función del óxido de nitrógeno utilizado.
- La presencia de **NO** en la pirólisis de etileno reduce la cantidad de hollín formado. A mayor concentración de NO introducida en el sistema de reacción, mayor es la reducción de la cantidad de hollín, para una temperatura constante de 1.200 °C.
- La influencia del **N₂O** en la cantidad de hollín formado depende de la concentración inicial de N₂O introducida para una temperatura de reacción constante de 1.200 °C. A concentraciones bajas de N₂O (\approx 500-1.000 ppm) la cantidad de hollín es ligeramente superior al formado en la pirólisis de etileno, en las mismas condiciones experimentales pero sin la presencia de óxidos de nitrógeno. A altas concentraciones de N₂O, (\approx 5.000-12.000 ppm) la cantidad de hollín es ligeramente inferior a la cantidad formada en la pirólisis de etileno sin óxidos de nitrógeno. La influencia del N₂O en la formación del hollín es sensiblemente inferior a la de los otros dos óxidos de nitrógeno estudiados (NO y NO₂).
- La presencia de **NO₂** en la pirólisis de etileno, a una temperatura constante de 1.200 °C, reduce la cantidad de hollín formado, siendo mayor la reducción a mayores concentraciones de NO₂. A bajas concentraciones de NO₂ inicial (\approx 500-1.000 ppm), la disminución de la cantidad de hollín formada es similar a la obtenida con el NO en las

mismas condiciones. Para altas concentraciones de NO_2 inicial ($\approx 5.000\text{-}12.000$ ppm) la reducción del hollín formado es superior a la obtenida con el NO .

- La influencia de la temperatura de reacción en la formación de hollín sigue la misma tendencia para todos los óxidos de nitrógeno utilizados como aditivo y para la pirólisis de etileno en atmósfera inerte sin la presencia de óxidos de nitrógeno. La cantidad de hollín formado es despreciable a temperaturas inferiores a los 1.000°C . A partir de esta temperatura, la cantidad de hollín aumenta conforme aumenta la temperatura de reacción, siendo de mayor cuantía en los experimentos a 1.200°C .
- Las concentraciones de los gases de salida obtenidas con el modelo cinético-químico siguen la tendencia de las obtenidas experimentalmente, por lo que son una buena herramienta para el estudio de las reacciones involucradas en el proceso.
- El etileno y el acetileno actúan como precursores de la formación de hollín, pues el aumento de la formación de hollín con el aumento de la temperatura está asociado a la disminución de la concentración de estos hidrocarburos a la salida.
- A altas temperaturas, a partir de 1.000°C , todos los óxidos de nitrógeno introducidos reaccionan, obteniéndose cantidades despreciables de ellos a la salida.
- Los caminos de consumo del **NO** en la pirólisis de etileno para las condiciones estudiadas, conducen a la formación de HCN y CO . La formación de estos compuestos elimina carbono de los caminos típicos de formación de hollín, propiciando la disminución de la cantidad de hollín producido.
- Los caminos de reacción del **N_2O** y su interacción con C_2H_4 , llevan a la formación de N_2 , HCCO y radicales hidrocarburos. Estos compuestos carbonosos, a diferencia del HCN y el CO , si forman parte de los caminos de formación de hollín habituales, por lo que la presencia de N_2O no contribuye a eliminar carbonos de los caminos de formación de hollín habituales.
- Los caminos de consumo de **NO_2** llevan a la formación de NO , el cual se consume por los caminos anteriormente descritos. Esto lleva la formación de HCN y CO , eliminando carbono de las rutas de formación de hollín habituales. La mayor cantidad de oxígeno disponible en el medio de reacción propicia la formación de más cantidad de CO , por lo que la reducción de hollín es más acentuada que en el caso del uso de NO , para la misma concentración de óxido de nitrógeno.
- Las reacciones de formación de HCN y CO a partir de los óxidos de nitrógeno (Figuras 4.13 y 4.15) son las reacciones principales que permiten reducir la cantidad de hollín formado en las condiciones

experimentales, pues el HCN y el CO son productos finales que eliminan carbonos de los caminos de formación de hollín.

5.2 TRABAJO FUTURO

El trabajo realizado ha permitido obtener información sobre la influencia de la presencia de óxidos de nitrógeno en la formación de hollín, para la pirólisis de etileno en condiciones bien controladas de laboratorio. Para obtener más información sería interesante extender las condiciones del estudio, añadiendo cambios en alguna de las variables estudiadas.

Este trabajo queda abierto a continuar con experimentos en condiciones bien controladas de laboratorio de los efectos de la presión en la cantidad de hollín formado en la pirólisis de etileno con la presencia de óxidos de nitrógeno, puesto que las condiciones habituales de combustión en motores reales ocurren a presiones superiores a la atmosférica.

Dado el potencial del uso de óxidos de nitrógeno para reducir la cantidad de hollín formada, otra línea de trabajo interesante, sobre la que ya se están llevando a cabo investigaciones en el grupo de trabajo, es la influencia de la presencia del NO en la formación de hollín en diferentes biocombustibles, como pueden ser el dimetoximetano, metilformato, dimetil carbonato y el 2,5-dimetilfurano. Todos estos biocombustibles obtenidos de procesos de biorefinería pueden ser utilizados como aditivos a combustibles de automoción y son considerados una posible alternativa a los combustibles actuales.

Por último, la aplicación de estos conocimientos en el diseño de motores reales, mediante el uso de técnicas de recirculación de gases de salida (EGR), implicarían un estudio experimental que incluyera la realización de ensayos con motores en condiciones reales. A partir del conocimiento adquirido en los diferentes estudios en condiciones bien controladas de laboratorio, se podrían obtener indicaciones para el diseño de técnicas EGR en motores. La dificultad del estudio de este tipo de ensayos, debido a el gran número de variables a controlar y las múltiples condiciones de operación que pueden darse hace necesario estudios previos en condiciones bien controladas de laboratorio para las diferentes variables, que permitan obtener información sobre las interacciones de los diferentes compuestos en diferentes condiciones, para un mejor diseño y comprensión de los fenómenos involucrados.

BIBLIOGRAFÍA:

Abián, M., Millera, A., Bilbao, R., Alzueta, M.U., (2012), Experimental study on the effect of different CO₂ concentrations on soot and gas products from ethylene thermal decomposition, *Fuel* 91, 307-312.

Al-Qurashi, K., Boehman, A.L., (2008), Impact of exhaust gas recirculation (EGR) on the oxidative reactivity of diesel engine soot, *Combustion and Flame* 155, 675-695.

Alzueta, M.U., Hernández, J.M., (2002), Ethanol oxidation and its interaction with nitric oxide. *Energy and Fuels*, 16, 166-171.

Appel, J., Bockhorn, H., Frenklach, M. (2000), Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: laminar premixed flames of C₂ hydrocarbons. *Combustion and Flame*, 121, 122-136.

Bockhorn, H., (1994), Soot formation in combustion: mechanism and models. *Springer Verlag, Heidelberg*.

Buhre B.J.P., Elliott L.K., (2005) Oxy-fuel combustion technology for coal fired power generation. *Progress in Energy and Combustion Science* 31, 283-307.

Chylek, P., Wong, J., (1995), Effect of absorbing aerosols on global radiation budget, *Geophysical Research Letters*, Vol. 22, No. 8, 929-931.

Crutzen, P.J., Andrade M.O., (1990) Biomass burning in the tropics: Impact on atmospheric chemistry and biogeochemical cycles. *Science* 250.

Dagaut, P., Lecomte, F., Chevailler, S., Cathonnet, M., (1999), Experimental and kinetic modeling of nitric oxide reduction by acetylene in an atmospheric pressure jet-stirred reactor. *Fuel* 78, 1245-1252.

Esarte, C., Millera, A., Bilbao, R., Alzueta, M. U., (2009), Gas and soot products formed in the pirolisis of acetylene-ethanol blends under flow reactor conditions, *Fuel Processing Technology* 90, 496-503.

Gautam, M., George, S., Balla, S., (2007), Effect of diesel soot contaminated oil on engine wear, *Wear* 262, 1113-1122.

George, S., Balla, S., Gautam, M., Gautam, V., (2007), Effect of diesel soot on lubricant oil viscosity, *Tribology International* 40, 809-818.

Glarborg, P., Alzueta, M.U., Dam-Johansen, K., Miller, J.A., (1998), Kinetic modeling of hydrocarbon/nitric oxide interactions in a flow reactor. *Combustion and Flame* 115, 1-27.

Guo, H., Smallwood, G. J., (2007), The interaction between soot and NO formation in a laminar axisymmetric coflow ethylene/air diffusion flame, *Combustion and Flame* 149, 225-233.

Haynes, B.S., Wagner, H.G., (1981), Soot formation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 7, 229-273.

Frenklach, M., Clary, D.W., Gardiner Jr., W.C. Stein, S.E, (1984), Detailed kinetic modeling of soot formation in shock-tube pyrolysis of acetylene. *Proceedings of the Combustion Institute* 20, 887-901.

Frenklach, M., (2002), Reaction mechanism of soot formation in flames. *Journal Chemical Physical*, 4, 2028-2037.

Kee, R.J., Rupley, F.M., Miller, J.A., (1991), The Chemkin Thermodynamic Database. *Sandia Report SAND87—8215 (1991 update)*, Sandia National Laboratories, Livermore, CA.

Kvamsdal H.M, Jordal K, Bolland O., (2007) A quantitative comparison of gas turbine cycles with CO₂ capture. *Energy* 32, 10-24.

Lutz, A.E., Kee, R.J., Miller, J.A., (1990), Senkin: a fortran program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis. *Sandia Report SAND87-8248*, Sandia National Laboratories, USA.

Manzello, S. L., Lenhert, D. B., Yozgatligil, A., Donovan, M. T., Mulholland, G. W., Zachariah, M. R., Tsang, W., (2007), Soot particle size distributions in a well-stirred reactor/plug flow reactor, *Proceedings of the Combustion Institute* 31, 675–683.

Mendiara, T., Domene, M.P., Millera, A., Bilbao R., Alzueta M.U., (2005), An experimental study of the soot formed in the pyrolysis of acetylene. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 74, 486-493.

Menon, A.V., Lee, S.-Y., Linevsky, M. J., Litzinger, T. A., Santoro, R.J., (2007), Addition of NO₂ to a laminar premixed ethylene–air flame: Effect on soot formation, *Proceedings of the Combustion Institute* 31, 593–601.

Miller, J.A., Melius, C.F., (1992), Kinetic and thermodynamic Issues in the formation of aromatic compounds in flames of aliphatic fuels. *Combustion and Flame* 91, 21-39.

Miller, J.A., Klippenstein, S.J., Glarborg, P., (2003), A Kinetic issue in reburning: the fate of HCNO. *Combustion and Flame* 135, 357-362.

Myhre, G., Stordal, F., Restad, K. and Isaksen, I.S.A., (1998). Estimation of the direct radiative forcing due to sulfate and soot aerosols. *Tellus* 50B, 463–477.

Novak R., Lang G., (1999) Method for carbon dioxide recovery from a feed stream. *Patent EP0964215*.

Penner, J.E., Dickinson, R.E. and O'Neil, C.A., (1992). Effects of aerosol from biomass burning on the global radiation budget. *Science* 256, 1432–1433.

Ranzi, E., Dente, M., Goldaniga, A., Bozzano, G., Faravelli, T., (2001), Lumping procedures in detailed kinetic modeling of gasification, pyrolysis, partial oxidation and combustion of hydrocarbon mixtures. *Progress in Energy and Combustion Science* 27, 99-139.

Richter, H., Howard, J.B., (2000), Formation of polycyclic hydrocarbons and their growth to soot- a review of chemical reaction pathways. *Progress in Energy and Combustion Science* 26, 565-608.

Ruiz, M.P., Callejas, A., Millera, A., Alzueta, M.U., Bilbao, R., (2007), Soot formation from C_2H_2 and C_2H_4 pyrolysis at different temperatures, *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 79, 244–251.

Sheridan, P.J., Schnell, R.C., Hofmann, D.J., Harris, J.M. and Deshler, T., (1992). Electron microscope studies of aerosol layers with likely Kuwaiti origins over Laramie, Wyoming during spring 1991. *Geophysical Research Letters* 19, 389–392.

Siegla D.C., Smith G.W., (1981), Particulate carbon: formation during combustion. *Plenum Press, New York*.

Skjøth-Rasmussen M.S., Glarborg P., Østberg M.; Johannessen J.T., Livbjerg H., Jensen A.D., Christensen T.S., (2004), Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons and soot in fuel-rich oxidation of methane in a laminar flow reactor. *Combustion and Flame* 136, 91–128.

Stanmore, B.R., Tschamber, V., Brilhac, J.F., (2008), Oxidation of carbon by NO_x , with particular reference to NO_2 and N_2O , *Fuel* 87, 131–146.

Wang, H., Frenklach, M., (1997), A detailed kinetic modeling study of aromatic formation in laminar premixed acetylene and ethylene flames. *Combustion and Flame* 110, 173-221.

Wang, H., (2011), Formation of nascent soot and other condensed-phase materials in flames. *Combustion Institute*, 33, 41-67.

ANEXOS

ANEXO A: METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

A1. INSTALACIÓN EXPERIMENTAL:

La experimentación llevada a cabo durante el desarrollo del proyecto, ha sido realizada en las instalaciones del Grupo de Procesos Termoquímicos del Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A) situado en el edificio I+D+i de la Escuela de Ingeniería y Arquitectura (EINA) de la Universidad de Zaragoza.

La instalación experimental (Figura A.1) se puede dividir en tres partes fundamentales: el sistema de alimentación de gases, la zona de reacción, y el sistema de recogida de hollín y análisis de gases de salida.

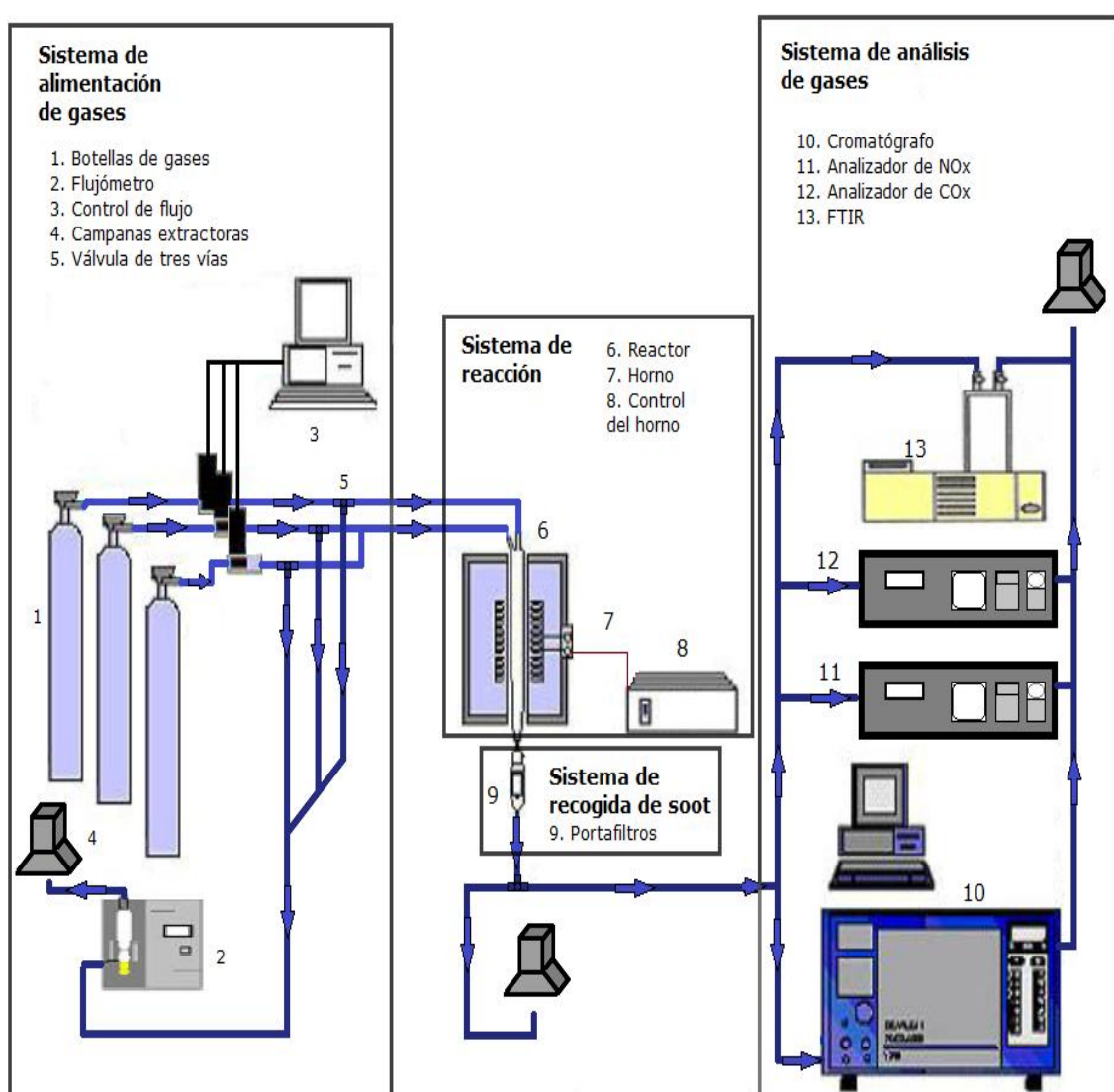


Figura A.1 Esquema de la instalación experimental.

A.1.1 SISTEMA DE ALIMENTACIÓN DE GASES

El sistema de alimentación de gases está compuesto por los siguientes elementos:

- Botellas de gases.
- Manoreductores.
- Líneas de gas y conexiones.
- Controladores de flujo másico.
- Flujómetro digital.
- Válvulas de bola de tres vías.

Botellas de gases:

Durante la realización de los experimentos se han utilizado los siguientes gases: etileno (C_2H_4), nitrógeno (N_2), monóxido de mononitrógeno (NO), monóxido de dinitrógeno (N_2O), dióxido de mononitrógeno (NO_2), aire. Para la realización de las calibraciones de los analizadores de gases se ha utilizado mezclas patrón con diferentes hidrocarburos gaseosos, los diferentes óxidos de nitrógeno estudiados y cianuro de hidrógeno (HCN).

Los gases se obtienen de botellas a presión (Figura A.2) con diferentes concentraciones (Tabla A.1). Las botellas están diluidas con un gas inerte, en este caso nitrógeno. Se encuentran situadas en el propio laboratorio, salvo las botellas de nitrógeno y aire, que se encuentran en casetas exteriores. El aire utilizado para la refrigeración del reactor se obtiene de un compresor, y el aire utilizado en el interior del reactor se obtiene de una botella de aire sintético.

A continuación se adjunta una tabla con las características de las botellas utilizadas.

Tabla A.1: Características de las botellas

Componente	Concentración (ppm)	Inerte	Suministrador	Presión de llenado a 15 °C (bar)
N_2	Puro	-	Carbueros Metálicos	-
Aire	210.000 O_2 + 790.000 N_2	-	Carbueros Metálicos	-
C_2H_4	150.000	N_2	Praxair España	150
NO	15.550	N_2	Air Liquide	151
NO	5.050	N_2	Air Liquide	150
N_2O	15.000	N_2	Air Liquide	151
NO_2	15.080	N_2	Air Liquide	13
NO_2	5.000	N_2	Praxair España	69
HCN	15.000	N_2	Air Liquide	50



Figura A.2 Botellas de gases.

Manoreductores:

Para comunicar las botellas con las líneas de gas se emplean manoreductores (Figura A.3). Los manoreductores son válvulas que permiten reducir la presión a la que se encuentran los gases almacenados en las botellas a un valor constante de trabajo, en este caso 5 bares. Esto permite que aunque la presión en el interior de la botella vaya disminuyendo, la presión de salida de los gases se mantenga constante.

Cada manoreductor dispone de dos medidores, el de alta presión que indica la presión de la botella, y el de baja presión que indica la presión de salida del gas. Una válvula permite regular la presión de salida, y en algunos modelos existe una válvula de cierre de seguridad.



Figura A.3 Manoreductor.

Líneas de gas y uniones

El gas es conducido de las botellas al reactor y del reactor a los analizadores de gases a través de tuberías de poliuretano de 6 mm de diámetro exterior y 1 mm de espesor (6x4) (Figura A.4). Las uniones de los tubos se realizan mediante conexiones rápidas de poliuretano lineales y en forma de T.



Figura A.4 Líneas de conducción de gases.

Controladores de flujo másico

Se utilizan medidores de flujo de gas del tipo EL-FLOW (select) y de la serie 5850 TR (Figura A.5) para regular el caudal de los reactantes y conseguir que sea estable durante todo el experimento.

Los medidores son electroválvulas con alta precisión en la distancia entre la aguja y el asiento de la válvula. Están controlados por computador mediante el software H3Z_2002. Existen diferentes medidores en función del caudal volumétrico con el que se quiere trabajar (2.000, 1.000, 500, 200 ml/minuto).

Dado que han sido calibrados con nitrógeno a 4 bares y 20 grados Celsius de temperatura, no podemos utilizar los controladores para determinar el caudal exacto de gas. Para ello utilizaremos un flujómetro digital que nos permitirá comprobar el caudal real de gas.



Figura A.5 Controlador de flujo másico.

Flujómetro

El flujómetro se utiliza para comprobar el caudal real suministrado por los controladores de flujo másico. Los controladores de flujo másico regulan y mantienen el caudal de gas constante a lo largo del experimento, y el flujómetro nos permite obtener el valor real de este caudal.

El flujómetro es un tubo de vidrio, a través del cual pasa el caudal de gas, que dispone de un sensor que nos permite medir el tiempo que tarda una burbuja de jabón en recorrer una distancia determinada. Esto nos proporcionará el caudal volumétrico, en un rango entre 5 y 5.000 ml/min. Se realizan varias medidas del caudal hasta que se obtenga repetidamente un valor estable, y se ajustará al caudal deseado mediante el uso de los controladores de flujo másico.

Durante la realización de los experimentos se mide el caudal individual de cada corriente gaseosa para ajustarla a un valor que nos permita obtener la concentración deseada, y además se mide el flujo total de gases de salida del sistema de reacción para comprobar que no se producen fugas internas en la instalación.

Válvulas

Las corrientes gaseosas que salen de las botellas, son reguladas por los controladores de flujo másico, y conducidas, a través de las conexiones, a las válvulas de bola de tres vías (Figura A.7) dispuestas en un panel (Figura A.8). Estas válvulas permiten, dada una corriente entrante, conducirla por una de las dos conexiones de salida, pudiendo enviar las corrientes gaseosas al reactor o conducir las a la calle. A cada válvula le llega el gas por la entrada, en la parte trasera, y dependiendo de la orientación de la llave, circulará por una de las dos salidas. Esto permite, por un lado, la conexión del flujómetro digital para medir las corrientes por separado, antes del comienzo de la reacción, y además nos proporciona control manual sobre la admisión de los reactivos al reactor.

La corriente de salida del reactor también es conducida a una válvula de tres vías, para ser enviada o bien a los analizadores de gases, o a la calle a través de las campanas extractoras.

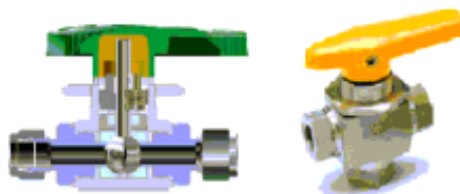


Figura A.7 Esquema de válvula de tres vías.

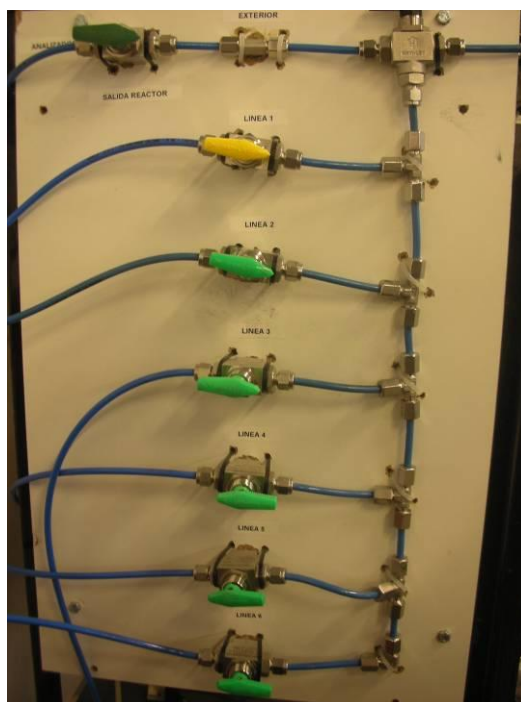


Figura A.8 Panel de válvulas de tres vías.

A.1.2 ZONA DE REACCIÓN

La zona de reacción está compuesta por:

- Horno eléctrico.
- Reactor, que consta de 3 partes:
 - Cabeza del reactor.
 - Cuerpo del reactor.
 - Sonda de salida.
- Pasta lubricante.
- Medidor de presión.

Horno eléctrico

Se utiliza un horno eléctrico de la marca HOBERSAL (Figura A.9) en el cual se inserta el cuerpo del reactor. El horno tiene una potencia de 7 kW y puede alcanzar la temperatura máxima de 1.500 grados Celsius. Un modulo de control con un regulador mantiene la temperatura estable en la zona de reacción y asegura la isothermicidad durante la realización del experimento.

El horno posee además un aislante de baja densidad que lo recubre interiormente para evitar pérdidas de calor. Para mejorar el aislamiento, se recubren las cavidades de entrada y de salida con aislante de lana de vidrio.



Figura A.9 Horno eléctrico y controlador.

Cabeza del reactor

La cabeza del reactor (Figura A.10) conecta los tubos que vienen de las válvulas de tres vías con el cuerpo del reactor. Es un tubo de cuarzo, con dos entradas superiores para los gases, y una salida que se ajusta en el cuerpo del reactor. Dispone de una cámara interior aislada por la que se conecta el aire de refrigeración para evitar que suba mucho la temperatura en la zona de entrada de los gases. Las uniones de las partes de cuarzo están selladas mediante pasta lubricante para unir las juntas y evitar fugas (Figura A.11).



Figura A.10 Cabeza del reactor.



Figura A.11 Montaje de la cabeza del reactor.

Cuerpo del reactor

El cuerpo del reactor es un tubo cilíndrico en el que transcurre la reacción. El cuerpo del reactor está insertado en el horno eléctrico y recubierto con lana de vidrio en las zonas superior e inferior para reducir la pérdida de energía.

Para minimizar las reacciones catalíticas y poder trabajar a altas temperaturas, el material con el que se ha construido el reactor es el cuarzo.

Las Figuras A.12 y A.13 muestran el reactor utilizado y sus planos, respectivamente.

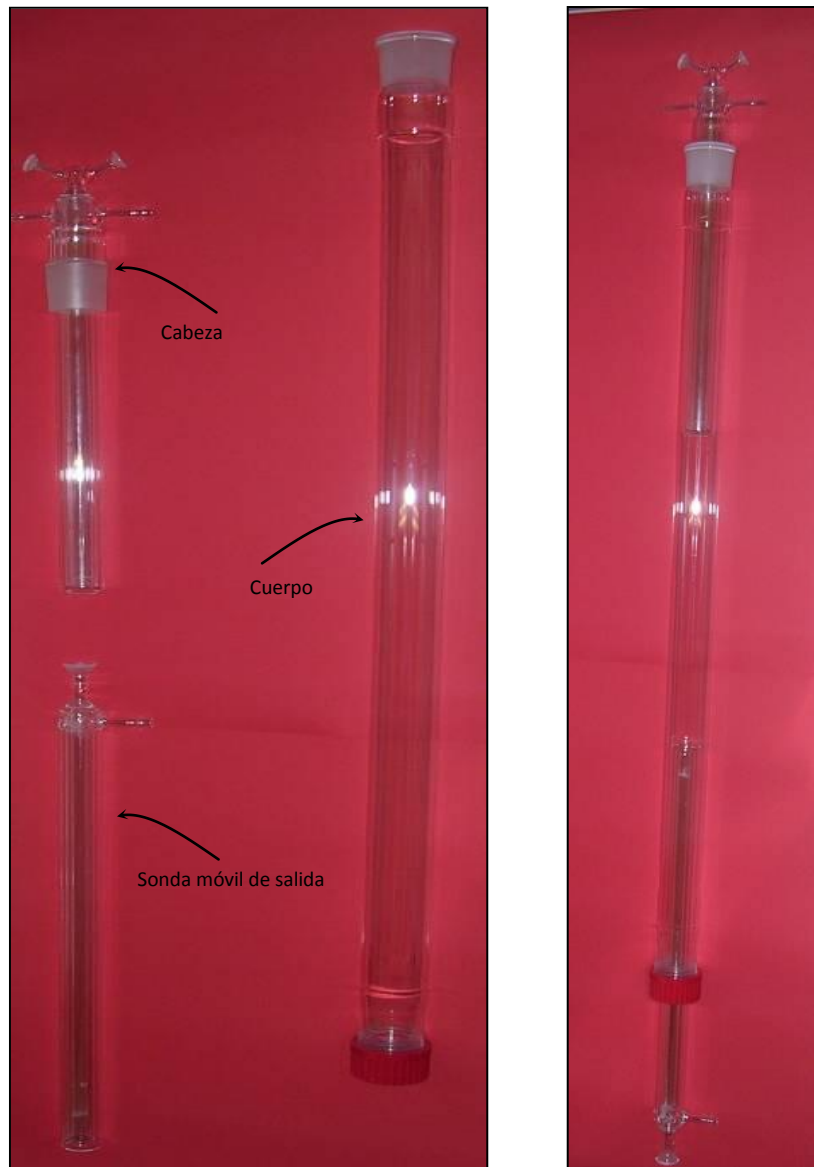


Figura A.12 Reactor.

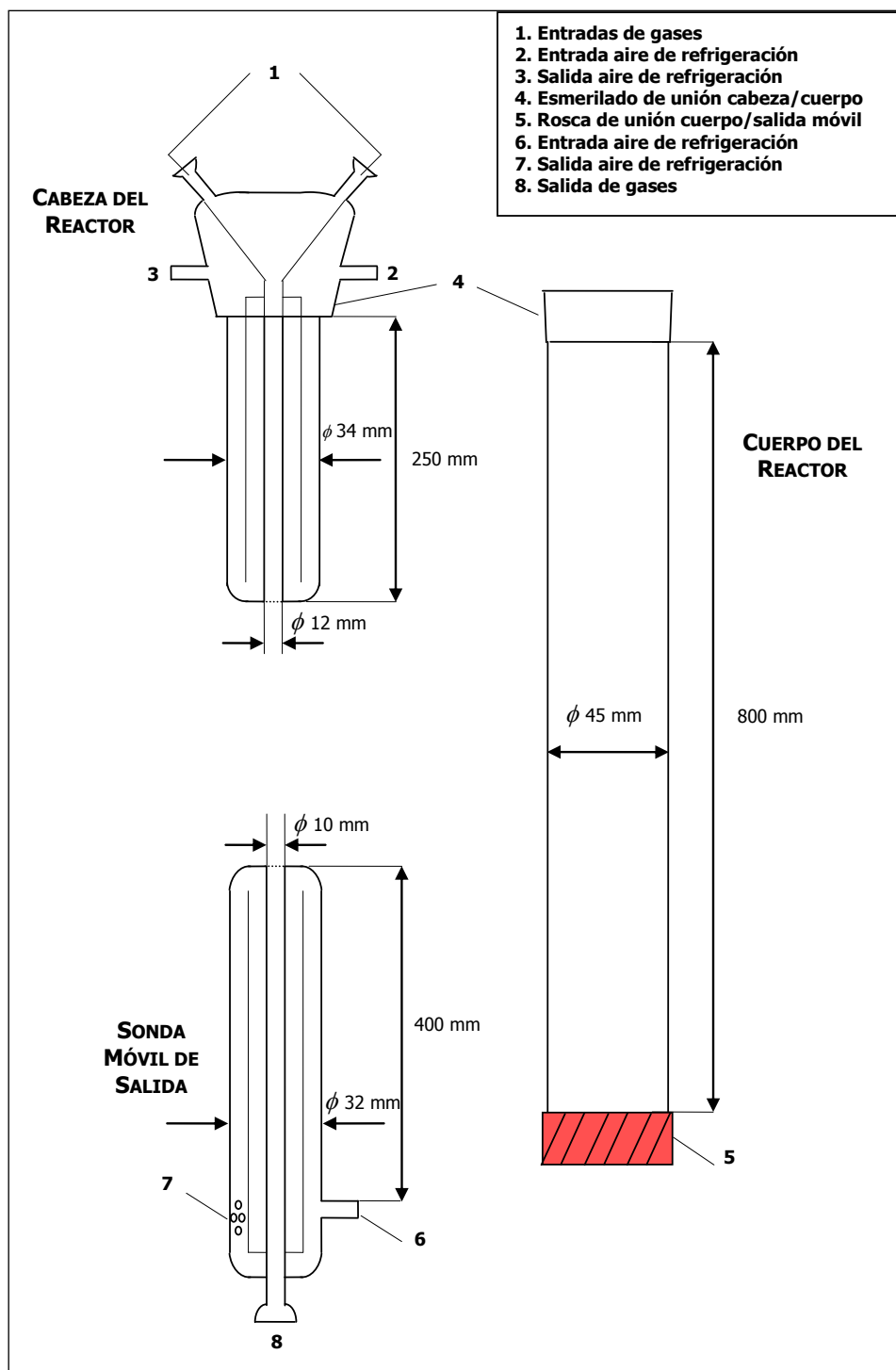


Figura A.13 Planos del reactor.

Sonda de salida del reactor

La salida del reactor es un tubo de cuarzo que se une a la parte inferior del cuerpo del reactor ajustándolo a presión con juntas de silicona ajustadas con una rosca. Está rodeado de una cámara independiente, en la que, al igual que en la cabeza del reactor, circula aire de refrigeración para reducir la temperatura de salida de los gases e impedir que las reacciones prosigan fuera de este.

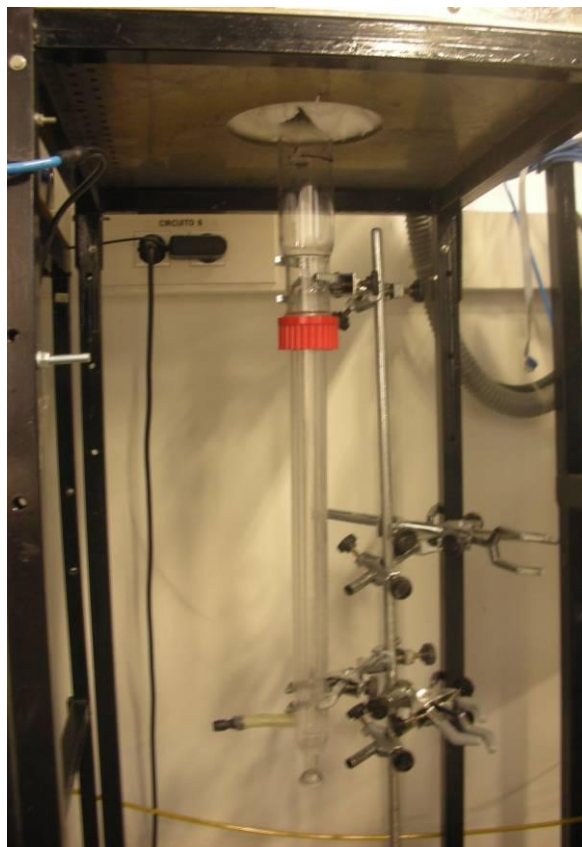


Figura A.14 Montaje sonda del reactor.

Cálculo del tiempo de residencia del reactor

A partir de las dimensiones del reactor y el caudal de gases circulantes se puede calcular el tiempo de residencia de los gases. Para este reactor el tiempo de residencia para caudal y volumen de reacción constantes es únicamente función de la temperatura de reacción y se expresa como $t_r = 4.550/T$, siendo T la temperatura de reacción en grados Kelvin y t_r el tiempo de residencia obtenido en segundos.

Pasta lubricante

Para el sellado de las uniones entre los tubos de cuarzo se utiliza Wolfracoat C, una pasta lubricante para temperaturas entre -30 y 1.200 °C fabricada por Kluber Lubrication. Este lubricante contiene una base de aceite mineral y aceite de ester y un lubricante sólido compuesto por grafito.

Medidor de presión

La presión en el interior del reactor se controla mediante un medidor de presión TC 503 (Figura A.15) conectado a uno de los tubos de poliamida a la entrada del reactor mediante una unión en forma de T. El medidor de presión tiene un rango máximo de 2 bares absolutos, y emite una señal de 4-20 mA. Un transductor del Servicio de Instrumentación Científica y

Electrónica de la Universidad de Zaragoza, traduce la señal de salida del medidor a milibares absolutos.

La presión en el interior del reactor puede variar debido a la acumulación de hollín en el filtro y el taponamiento de estos. El control de la presión es importante, para asegurar unas condiciones estacionarias a lo largo de la reacción y para evitar que una subida de presión provoque fugas o la separación de uniones lubricadas. El rango de trabajo de presión en el interior del reactor en los diferentes experimentos oscila entre los 990 y los 1.020 mbar, en función de la presión atmosférica, la cantidad de hollín en el filtro y el reparto de caudales de salida hacia los diferentes analizadores de gases.



Figura A.15 Medidor de presión.

A.1.3 Sistema analizador de gases y de recogida de hollín

El sistema analizador de gases y de recogida de hollín está compuesto por los siguientes elementos:

- Portafiltros y filtro.
- Filtro de seguridad.
- Cromatógrafo de gases.
- Analizador de NO.
- Analizador de CO/CO₂.
- FTIR.

Portafiltros y filtro

El portafiltros consta de un tubo de cuarzo de 29 mm de diámetro interno. Se une a la salida del reactor por el extremo superior mediante una pieza de conexión, también en cuarzo (Figura A.16). Su extremo inferior termina en un tubo de 6 mm de diámetro exterior. Las uniones se sellan con grasa de grafito para evitar fugas y con una pinza de acero inoxidable.

En el interior del portafiltro, se coloca un filtro de microfibras de vidrio, fabricado por la empresa Whatman, con un diámetro interno de 30 mm y una longitud de 100 mm. El filtro se ajusta en el portafiltros presionándolo contra las paredes. El cartucho es pesado previamente, para poder determinar el peso del hollín acumulado en el experimento.



Figura A.16 Portafiltros y unión con la sonda.

Filtro de seguridad

Tras el sistema de recogida de hollín y antes de la entrada a los analizadores de gases, se coloca un filtro adicional (Figura A.17) para proteger los analizadores de alguna partícula de hollín que pudiera no haber sido retenida por el sistema de recogida de hollín.

El filtro, conectado a los tubos de poliuretano con conexiones rápidas, dispone de un filtro circular de microfibras de vidrio de 47 mm de diámetro, de la marca Whatman.

Antes de cada experimento se comprueba el estado del filtro, para ser sustituido en el caso de que se encuentre sucio o deteriorado.



Figura A.17 Filtro de seguridad.

Cromatógrafo de gases

Para analizar los gases de salida durante la pirólisis del etileno se hace uso de un cromatógrafo de gases de marca Agilent Technologies GC 6890 N con detectores de conductividad térmica (TCD) y detectores de ionización de llama (FID) (Figura A.18).

Los gases se introducen directamente al cromatógrafo mediante conductos de poliamida. El cromatógrafo consta de tres columnas: una para el FID y dos para el TCD. Para el detector FID se hace uso de una columna capilar de marca HP-PONA cuyas dimensiones son 50 m x 200 μm x 50 μm . Para el TCD, las dos columnas son capilares de tipo HP-PLOT Q de dimensiones 45 m x 530 μm x 50 μm y 30 m x 530 μm x 40 μm . Durante el análisis de la muestra, el horno del cromatógrafo se encuentra inicialmente a 40 °C y se mantiene durante 8 minutos. Posteriormente empieza una rampa de 20 °C/min hasta alcanzar una temperatura de 230 °C y se mantiene durante 4 minutos. La temperatura del inyector es de 200 °C.

El detector de ionización de llama (*Flame Ionization Detector*, FID) mezcla el gas a analizar con hidrógeno y enciende la mezcla mediante una chispa eléctrica. Las altas temperaturas producidas pirolizan los compuestos orgánicos, provocando la emisión de iones y electrones. La corriente generada es amplificada y detectada. El número de iones producidos se considera proporcional al número de átomos de carbono de la mezcla. Debido a sus características, es insensible a los gases no combustibles como H_2O , CO_2 y los óxidos de nitrógeno. Con el FID se cuantifican los hidrocarburos pesados presentes en los gases de salida. Se han calibrado para su cuantificación con el FID los siguientes compuestos: benceno, tolueno, etilbenceno, m-xileno.

El detector de conductividad térmica (*Termal Conductivity Detector*, TCD) se basa en las diferentes conductividades que presentan los gases en función de su peso molecular. Se considera que la conductividad térmica es inversamente proporcional al peso molecular del gas. El detector utiliza dos columnas con una resistencia eléctrica, a la que se le aplica una potencia fija. La temperatura del sensor es proporcional a la conductividad térmica del gas circulante. En una de las columnas se coloca el gas a analizar, y en la otra un gas de referencia. Esto permite minimizar los efectos de los cambios en la presión, caudal o potencia eléctrica. Este tipo de dispositivos son conocidos como catarómetros. Se han calibrado para su identificación con el TCD los siguientes compuestos: dióxido de carbono, etileno, acetileno, hidrógeno, metano, monóxido de carbono, cianuro de hidrogeno, isobutano, 1,3-butadieno, etanol.

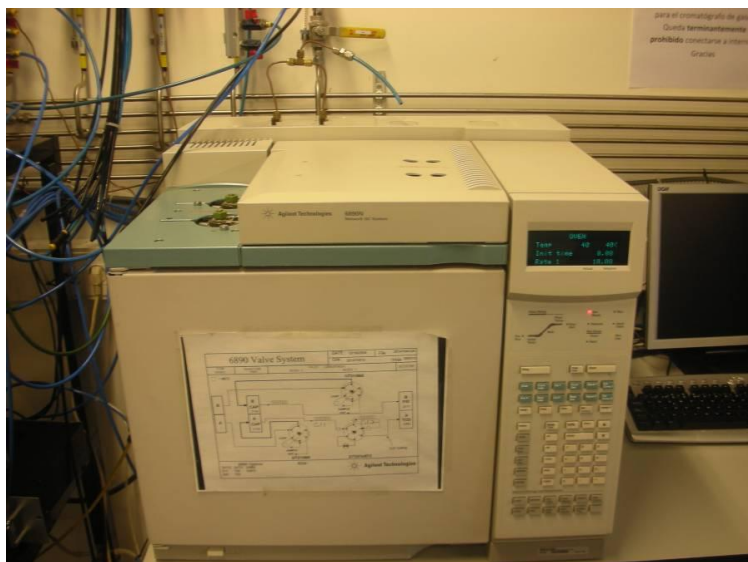


Figura A.18 Cromatógrafo de gases.

Analizadores de NO y CO/CO₂

Los analizadores utilizados durante los experimentos son instrumentos de medida que nos permiten determinar cuantitativamente la concentración de NO y de CO/CO₂ del gas de salida del reactor. Mediante estos analizadores, se recoge directamente en pantalla el valor de concentración de estos compuestos en los gases de salida.

Estos analizadores de infrarojo están constituidos por una celda de análisis construida en aluminio con recubrimiento interior de oro y ventanas de fluoruro cálcico. Cuando los gases son introducidos en la celda son irradiados y absorben diferente energía, dependiendo de la concentración de las especies. La energía restante es devuelta y transformada en corriente eléctrica, pudiéndose leer en forma de mA en el ordenador y en ppm en la pantalla del equipo. Estos equipos deben calibrarse al comienzo de cada experimento. Para la realización de la calibración se les introduce una corriente constante de nitrógeno puro, que el equipo toma como referencia para la calibración.

Los dos analizadores de infrarojo (Figura A.19) pertenecen a la casa comercial ABB, cuyo modelo es URAS14 de detección en el infrarrojo.



Figura A.19 Analizadores de NO y CO/CO₂.

Espectrómetro FTIR

El espectrómetro FTIR (*Fourier Transform Infra Red*) (Figura A.20) se basa en el comportamiento de las moléculas ante la radiación infrarroja para detectarlas y medir su concentración. Las moléculas poliatómicas y las biatómicas heteronucleares absorben radiación infrarroja variando la rotación y vibración de sus átomos. Dependiendo del número y tipo de átomos, y de los ángulos y fortaleza de sus enlaces, cada molécula absorberá de una manera característica.

La absorción de energía produce una alteración en el momento bipolar de los enlaces, haciéndolos vibrar con una determinada frecuencia, que es detectada por el equipo de medida. Esta medida, mediante una operación matemática (transformada de Fourier) es convertida en el espectro.

La absorbancia que detecta el espectrofotómetro varía proporcionalmente con la concentración (ley de Lambert-Beer). Esta variación no es lineal, sobre todo para moléculas ligeras (CO, NO), por lo que es necesario un calibrado previo de los gases que se vayan a analizar. Para calibrar un gas se introducen diferentes concentraciones mediante el empleo de botellas patrón, y con los puntos obtenidos se realiza una curva que nos permitirá determinar la concentración de la muestra por comparación.

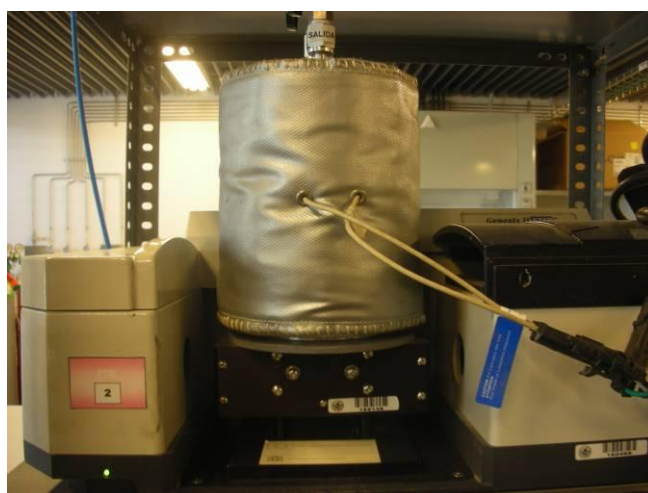


Figura A.20 Espectrofotómetro FTIR.

El manejo del espectrofotómetro se realiza por ordenador a través del software Winfirst 3.1, que permite la obtención, lectura y almacenamiento de los datos. Los componentes electrónicos del espectrofotómetro deben ser purgados constantemente con un caudal de nitrógeno para crear una atmósfera inerte que evite su oxidación. Es importante evitar las vibraciones y las condiciones extremas de humedad y calor.

ANEXO B: RESULTADOS EXPERIMENTALES

En el siguiente anexo se van a presentar los resultados obtenidos durante la realización de los experimentos, tanto de las concentraciones de los gases a la entrada y a la salida, como de la cantidad de hollín formada en cada experimento.

La concentración de los gases ha sido obtenida mediante el uso del cromatografo de gases, el analizador de NO, el analizador de CO/CO₂ y el espectrofotometro FTIR, cuyo funcionamiento esta detallado en el anexo A. Para la realización de las medidas se han obtenido varias muestras a lo largo del experimento, realizandose la media aritmética de los resultados.

La cantidad de hollín formado se ha cuantificado mediante limpieza de las partes del reactor y pesada del hollín obtenido, tanto en las paredes del reactor como en el cartucho de recogida de hollín.

Los experimentos se han realizado a una concentración inicial aproximada de 30.000 ppm de etileno, en un reactor de cuarzo. El tiempo de residencia para caudal y volumen de reacción constantes es unicamente función de la temperatura de reacción y se expresa como $t_r = 4.550/T$, siendo T la temperatura de reacción en grados Kelvin y t_r el tiempo de residencia obtenido en segundos.

La duración de los experimentos era de tres horas para los experimentos en los que se cuantificaba la cantidad de hollín. Para los experimentos a 700-900 °C la duración de los experimentos era la suficiente para medir la concentración de los gases a la salida de forma estable. La duración de cada experimento se muestra en la Tabla B.16.

Los resultados se expresan en tablas, primero para la concentración de los gases a la entrada y a la salida de los experimentos realizados con NO (Tablas B.1-B.4), luego para la concentración de los gases a la entrada y a la salida para los experimentos realizados con N₂O (Tablas B.5-B.8), y para la concentración de los gases a la entrada y a la salida para los experimentos realizados con NO₂ (Tablas B.9-B.12). Por último se representa la cantidad de soot obtenida en cada experimento (Tablas B.13-B.15).

Tabla B.1: Concentraciones de gases a la entrada experimentos 1.1-1.5.

Experimento		1.1	1.2	1.3	1.4	1.5
Concentración teórica NO (ppm)		12000	5000	1000	500	5000
Temperatura de reacción		1200	1200	1200	1200	1100
Fórmula	Nombre	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)
C ₂ H ₄	Etileno	29043	28945	28810	27493	28682
NO	Óxido nítrico	12210	5033	1137	590	4996

Tabla B.2: Concentraciones de gases a la salida experimentos 1.1-1.5.

Experimento		1.1	1.2	1.3	1.4	1.5
Concentración teórica NO (ppm)		12000	5000	1000	500	5000
Temperatura de reacción		1200	1200	1200	1200	1100
Fórmula	Nombre	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)
CO ₂	Dióxido de carbono	232	60	15	10	43
C ₂ H ₄	Etileno	309	429	502	492	678
C ₂ H ₂	Acetileno	2813	3276	3550	3642	4387
C ₂ H ₆	Etano	0	0	0	0	0
H ₂	Hidrógeno	47348	48781	48249	49977	42061
CH ₄	Metano	1076	1078	1103	1086	1810
CO	Monóxido de carbono	10896	4930	1537	1058	4386
C ₆ H ₆	Benceno	58	79	91	62	242
C ₃ H ₆	Propileno	0	0	0	0	0
C ₃ H ₈	Propano	0	0	0	0	0
C ₃ H ₄	Propadieno	0	0	0	168	5
HCN	Cianuro de hidrógeno	9960	4126	808	282	3975
C ₇ H ₈	Tolueno	0	0	0	0	0
C ₄ H ₁₀	Isobutano	7	12	15	15	21
C ₄ H ₆	1,3 Butadieno	25	30	0	0	33
NO	Óxido nítrico	829	219	40	17	579

Tabla B.3: Concentraciones de gases a la entrada experimentos 1.6-1.9 y 1.1.a.

Experimento		1.6	1.7	1.8	1.9	1.1.a
Concentración teórica NO (ppm)		5000	5000	5000	5000	5000
Temperatura de reacción		1000	900	800	700	1200
Fórmula	Nombre	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)
C ₂ H ₄	Etileno	28827	28143	28143	28143	28143
NO	Óxido nítrico	5020	5061	5061	5061	5061

Tabla B.4: Concentraciones de gases a la salida experimentos 1.6-1.9 y 1.1.a.

Experimento		1.6	1.7	1.8	1.9	1.1.a
Concentración teórica NO(ppm)		5000	5000	5000	5000	5000
Temperatura de reacción		1000	900	800	700	1200
Fórmula	Nombre	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)
CO ₂	Dióxido de carbono	17	0	13	1	1
C ₂ H ₄	Etileno	2240	26423	29013	28976	28976
C ₂ H ₂	Acetileno	7656	967	0	0	0
C ₂ H ₆	Etano	11	21	0	0	0
H ₂	Hidrógeno	30845	2705	469	0	0
CH ₄	Metano	2978	1924	2317	2336	2336
CO	Monóxido de carbono	3925	515	0	0	0
C ₆ H ₆	Benceno	625	33	1	2	2
C ₃ H ₆	Propileno	0	21	0	0	0
C ₃ H ₈	Propano	16	73	0	0	0
C ₃ H ₄	Propadieno	3	10	0	0	0
HCN	Cianuro de hidrógeno	3517	549	20	28	28
C ₇ H ₈	Tolueno	3	3	0	0	0
C ₄ H ₁₀	Isobutano	77	129	2	0	0
C ₄ H ₆	1,3 Butadieno	1	0	0	0	0
NO	Óxido nítrico	952	4376	5077	5057	5057

Tabla B.5: Concentraciones de gases a la entrada experimentos 2.1-2.5.

Experimento		2.1	2.2	2.3	2.4	2.5
Concentración teórica N ₂ O (ppm)		12000	5000	1000	500	5000
Temperatura de reacción		1200	1200	1200	1200	1100
Fórmula	Nombre	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)
C ₂ H ₄	Etileno	28664	29057	28915	30023	30017
N ₂ O	Óxido nitroso	12520	4109	1072	306	5000

Tabla B.6: Concentraciones de gases a la salida experimentos 2.1-2.5.

Experimento		2.1	2.2	2.3	2.4	2.5
Concentración teórica N ₂ O		12000	5000	1000	500	5000
Temperatura de reacción		1200	1200	1200	1200	1100
Fórmula	Nombre	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)
CO ₂	Dióxido de carbono	1	18	0	0	0
C ₂ H ₄	Etileno	343	439	498	528	716
C ₂ H ₂	Acetileno	2965	3409	3634	3696	4060
C ₂ H ₆	Etano	0	0	0	0	0
H ₂	Hidrógeno	43489	45671	47987	49313	43868
CH ₄	Metano	1694	1400	1159	1196	2667
CO	Monóxido de carbono	7689	3838	1314	760	3680
C ₆ H ₆	Benceno	75	79	93	94	324
C ₃ H ₆	Propileno	0	0	0	0	0
C ₃ H ₈	Propano	0	0	0	0	0
C ₃ H ₄	Propadieno	3	2	1	0	7
HCN	Cianuro de hidrógeno	239	89	21	7	66
C ₇ H ₈	Tolueno	0	0	0	0	1
C ₄ H ₁₀	Isobutano	10	13	15	15	21
C ₄ H ₆	1,3 Butadieno	0	0	0	0	0
N ₂ O	Óxido nitroso	0	0	0	0	0

Tabla B.7: Concentraciones de gases a la entrada experimentos 2.6-2.9.

Experimento		2.6	2.7	2.8	2.9
Concentración teórica N ₂ O (ppm)		5000	5000	5000	5000
Temperatura de reacción		1000	900	800	700
Fórmula	Nombre	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)
C ₂ H ₄	Etileno	30066	28987	28987	28987
N ₂ O	Óxido nitroso	5000	5000	5000	5000

Tabla B.8: Concentraciones de gases a la entrada experimentos 2.6-2.9.

Experimento		2.6	2.7	2.8	2.9
Concentración teórica N ₂ O		5000	5000	5000	5000
Temperatura de reacción		1000	900	800	700
Fórmula	Nombre	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)
CO ₂	Dióxido de carbono	0	0	0	0
C ₂ H ₄	Etileno	1612	11989	24111	28032
C ₂ H ₂	Acetileno	5762	4491	768	32
C ₂ H ₆	Etano	11	67	122	60
H ₂	Hidrógeno	33544	11388	0	0
CH ₄	Metano	4232	4100	1054	248
CO	Monóxido de carbono	3712	2982	825	131
C ₆ H ₆	Benceno	707	415	286	11
C ₃ H ₆	Propileno	0	37	7	0
C ₃ H ₈	Propano	14	55	211	114
C ₃ H ₄	Propadieno	5	15	7	6
HCN	Cianuro de hidrógeno	62	43	61	16
C ₇ H ₈	Tolueno	6	37	24	0
C ₄ H ₁₀	Isobutano	54	185	1	7
C ₄ H ₆	1,3 Butadieno	0	16	1201	416
N ₂ O	Óxido nitroso	0	0	0	0

Tabla B.9: Concentraciones de gases a la entrada experimentos 3.1-3.5.

Experimento		3.1	3.2	3.3	3.4	3.5
Concentración teórica NO ₂ (ppm)		12000	5000	1000	500	5000
Temperatura de reacción		1200	1200	1200	1200	1100
Fórmula	Nombre	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)
C ₂ H ₄	Etileno	30144	30099	29922	30565	30226
NO ₂	Dióxido de nitrógeno	12000	5000	1000	500	5000

Tabla B.10: Concentraciones de gases a la entrada experimentos 3.1-3.5.

Experimento		3.1	3.2	3.3	3.4	3.5
Concentración teórica NO ₂		12000	5000	1000	500	5000
Temperatura de reacción		1200	1200	1200	1200	1100
Fórmula	Nombre	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)
CO ₂	Dióxido de carbono	755	146	17	6	167
C ₂ H ₄	Etileno	289	419	493	509	670
C ₂ H ₂	Acetileno	2664	3359	3664	3716	4196
C ₂ H ₆	Etano	0	0	0	0	0
H ₂	Hidrógeno	41676	45423	49257	51712	40012
CH ₄	Metano	1393	1283	1197	1203	1999
CO	Monóxido de carbono	16072	7359	1746	924	6744
C ₆ H ₆	Benceno	50	90	91	98	324
C ₃ H ₆	Propileno	0	0	0	0	0
C ₃ H ₈	Propano	0	0	0	0	0
C ₃ H ₄	Propadieno	0	0	2	0	4
HCN	Cianuro de hidrógeno	9256	3987	694	293	3869
C ₇ H ₈	Tolueno	0	0	0	0	1
C ₄ H ₁₀	Isobutano	7	11	15	14	20
C ₄ H ₆	1,3 Butadieno	24	32	0	0	32
NO ₂	Dióxido de nitrógeno	0	0	0	0	0

Tabla B.11: Concentraciones de gases a la entrada experimentos 3.6-3.9.

Experimento		3.6	3.7	3.8	3.9
Concentración teórica NO ₂ (ppm)		5000	5000	5000	5000
Temperatura de reacción		1000	900	800	700
Fórmula	Nombre	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)
C ₂ H ₄	Etileno	30215	29838	29838	29838
NO ₂	Dióxido de nitrógeno	5000	5000	5000	5000

Tabla B.12: Concentraciones de gases a la salida experimentos 3.6.-3.9.

Experimento		3.6	3.7	3.8	3.9
Concentración teórica NO ₂		5000	5000	5000	5000
Temperatura de reacción		1000	900	800	700
Fórmula	Nombre	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)	Entrada (ppm)
CO ₂	Dióxido de carbono	181	155	148	153
C ₂ H ₄	Etileno	1565	20601	27097	27613
C ₂ H ₂	Acetileno	3864	2811	172	120
C ₂ H ₆	Etano	16	53	115	107
H ₂	Hidrógeno	35886	6662	0	0
CH ₄	Metano	4420	1620	498	347
CO	Monóxido de carbono	6878	5061	0	0
C ₆ H ₆	Benceno	375	257	7	0
C ₃ H ₆	Propileno	0	56	71	0
C ₃ H ₆	Propano	5	46	3	0
C ₃ H ₄	Propadieno	4	16	4	0
HCN	Cianuro de hidrógeno	3709	2115	759	603
C ₇ H ₈	Tolueno	4	19	2	2
C ₄ H ₁₀	Isobutano	33	191	79	2
C ₄ H ₆	1,3 Butadieno	11	9	120	150
NO ₂	Dióxido de nitrógeno	0	0	0	0

Tabla B.13: Cantidad de soot experimentos 1.1-1.6.

Experimento	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6
Concentración teórica NO (ppm)	12000	5000	1000	500	5000	5000
Temperatura de reacción	1200	1200	1200	1200	1100	1000
Gramos de soot	1,8597	2,7044	3,0328	3,2369	2,0792	1,5244

Tabla B.14: Cantidad de soot experimentos 2.1-2.6.

Experimento	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6
Concentración teórica N ₂ O (ppm)	12000	5000	1000	500	5000	5000
Temperatura de reacción	1200	1200	1200	1200	1100	1000
Gramos de soot	2,9585	3,2677	3,3744	3,4518	2,7399	2,1398

Tabla B.15: Cantidad de soot experimentos 3.1-3.6.

Experimento	3.1	3.2	3.3	3.4	3.5	3.6
Concentración teórica NO ₂ (ppm)	12000	5000	1000	500	5000	5000
Temperatura de reacción	1200	1200	1200	1200	1100	1000
Gramos de soot	1,5504	2,4138	3,0912	3,2526	2,0218	1,2283

Tabla B.16: Duración de los experimentos.

Experimento	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6
Duración (min)	180	180	180	180	180	32
Experimento	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6
Duración (min)	180	180	180	180	180	24,42
Experimento	3.1	3.2	3.3	3.4	3.5	3.6
Duración (min)	54,27	90	180	180	90	42

La duración estandar de los experimentos en los que se cuantificaba la cantidad de hollín era de 180 min. En algunos casos, no fue posible mantener tanto tiempo la reacción debido a que el taponamiento del filtro a la salidad producía aumento en la presión del reactor. En los casos que esto ocurría, el experimento se cortaba, se anotaba el tiempo, y se extrapolaba la cantidad de hollín a 3 horas de reacción.

En el caso de los experimentos realizados a 1.000 °C, se producía al poco tiempo del comienzo del experimento el efecto del aumento de la presión. Las características del hollín formado a esa temperatura, (partículas de hollín más esponjosas y de mayor tamaño) hacían que se taponara el cartucho de recogida de hollín. Parte del hollín formado a esa temperatura se adhería a las paredes del reactor, haciendo muy difícil una cuantificación exacta de la cantidad del hollín formada. Por ello, el uso de tiempos de reacción muy inferiores produce errores en la extrapolación de los resultados realizada para compararlos con los experimentos habituales de tres horas de duración. Para compensar este efecto, se realizaron experimentos anteriores por el grupo de procesos termoquímicos, renovando el filtro del cartucho sin detener el proceso, para evitar las

subidas de presión por taponamiento del filtro y completar las 3 horas de tiempo de reacción a la temperatura de 1.000 °C, minimizando el error en la cuantificación y pudiéndose determinar la cantidad de hollín que se queda adherido en las paredes del reactor a 1.000 °C.

ANEXO C: SOFTWARE CHEMKIM II

Para el modelado del proceso, se dispone de un programa informático en lenguaje FORTRAN denominado CHEMKIN-II que permite obtener la distribución de productos a partir de un mecanismo detallado de reacción.

Esta aplicación informática no sólo permite calcular la evolución con el tiempo de una mezcla homogénea de gases reactantes de un sistema cerrado, sino que además ofrece la posibilidad de realizar análisis de velocidad de reacción y calcular los coeficientes de sensibilidad de primer orden con respecto a los parámetros cinéticos de cada reacción elemental involucrada en el modelo cinético. Más información sobre este software se puede encontrar en su manual de operación [Lutz y cols., 1990].

CHEMKIN-II permite resolver cinco tipos de problemas cinético-químicos en función de las condiciones termodinámicas impuestas:

1. Sistema adiabático y presión constante.
2. Sistema adiabático y volumen constante.
3. Sistema adiabático y volumen especificado en función del tiempo.
4. Sistema a presión y temperatura constantes.
5. Sistema a presión constante y temperatura especificada en función del tiempo.

El tipo de problema aplicado en este proyecto es el 4, sistema a presión y temperatura constantes, que se utiliza básicamente para el modelado de situaciones como un reactor de flujo-pistón, donde la temperatura se puede medir de forma precisa. En estas condiciones experimentales, el calor de reacción no es importante porque la mezcla contiene mucho diluyente, lo que hace que el calor liberado por masa de mezcla sea relativamente pequeño.

Para poder solucionar cualquiera de estos problemas, CHEMKIN-II utiliza dos tipos de librerías: DASAC y CKINTERP.

DASAC (*Differential Algebraic Sensitivity Analysis Code*) es un paquete informático que permite resolver las ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales que describen la temperatura y fracción molar de cada especie, así como el conjunto de ecuaciones diferenciales lineales que describen los coeficientes de sensibilidad de primer orden de temperatura y composición de mezcla de gases con respecto a las velocidades de reacción individuales.

CKINTERP es el *software* que gobierna el mecanismo de reacción. Esta aplicación informática fue diseñada por Sandia Nacional Laboratorios (Livermore, USA), con el objetivo de facilitar la formación, interpretación y simulación en sistemas de flujo continuo de mecanismos cinéticos constituidos por reacciones químicas elementales en fase gas.

La Figura C.1 muestra un esquema global de las relaciones que existen entre el programa SENKIN y los pre-procesadores que requiere para su funcionamiento, CHEMKIN-II y DASAC.

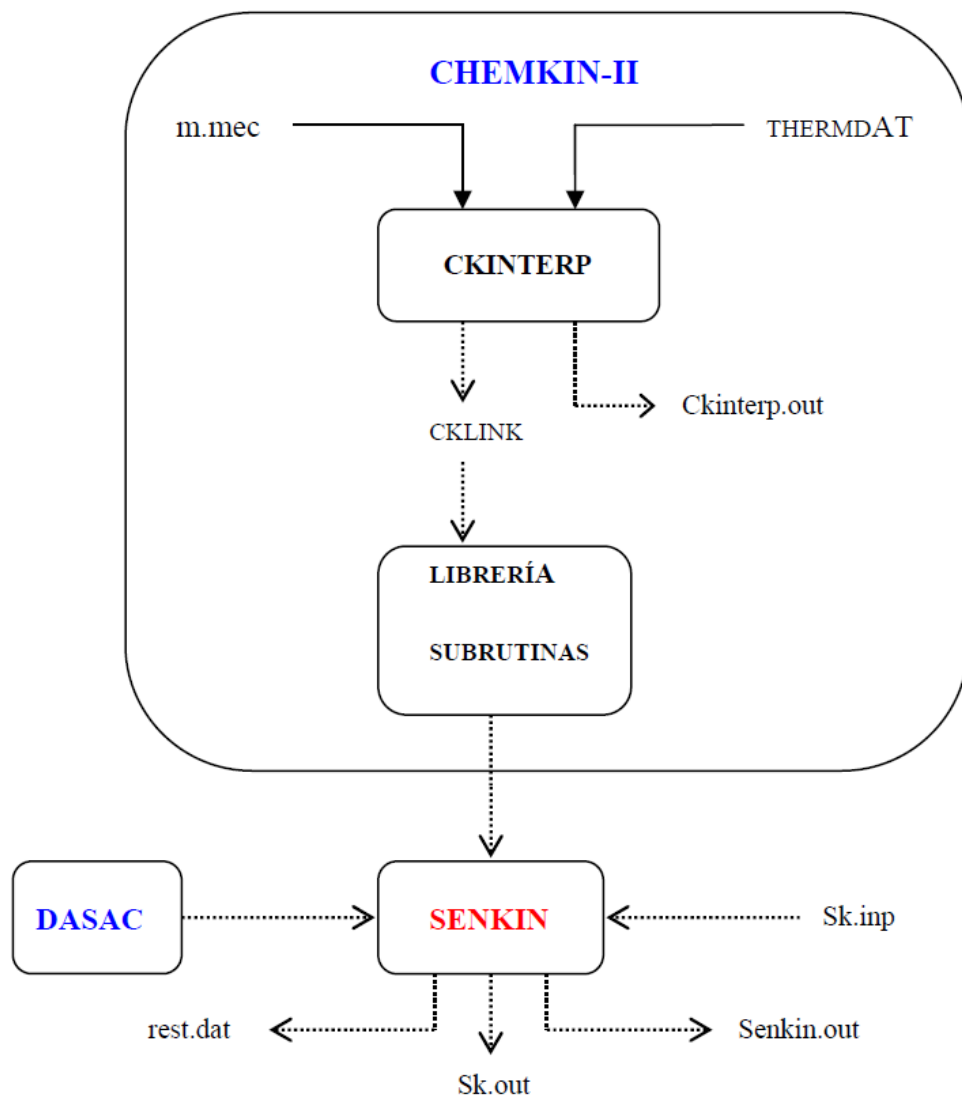


Figura C. 14 Estructura del programa.

CHEMKIN-II está compuesto por dos bloques diseñados en código FORTRAN y dos ficheros básicos:

- Intérprete (código).
- Librería de subrutinas en fase gaseosa (código).
- Base de datos termodinámicos (fichero).
- Fichero binario de salida del Intérprete (fichero).

El Intérprete (*CKINTERP*) es el programa que lee la descripción simbólica del mecanismo de reacción especificado por el usuario (m.mec) y verifica la existencia para cada especie de los datos termodinámicos necesarios para poder calcular las constantes de velocidad de las reacciones inversas para cada temperatura de trabajo.

Los datos termodinámicos de cada especie son extraídos de la base de datos disponible en CHEMKIN-II (THERMDAT) [Kee y cols., 1991], cuyo formato es similar al código utilizado por la NASA para el cálculo de equilibrios químicos complejos. Otra opción posible para el cálculo de propiedades termodinámicas es especificar los parámetros necesarios en el fichero de entrada. En el caso de especies no contempladas en la base de datos, éste es el método a seguir habitualmente.

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

La rutina de cálculo, SENKIN, utiliza la información devuelta por la librería de subrutinas en fase gaseosa, el fichero *sk.inp* donde el usuario especifica las condiciones del proceso (presión o densidad, temperatura y composición inicial de la mezcla de gases), así como el tipo de cálculos que deben ser realizados, y el *software* DASAC.

SENKIN genera tres ficheros de salida: *sk.out*, *senkin.out* y *rest.dat*. El fichero de texto *sk.out* contiene toda la información relativa a condiciones iniciales de proceso y concentración final de cada especie para el tiempo de residencia y temperatura especificados por el usuario. Este fichero también incluye los resultados del análisis de velocidad de reacción y sensibilidad en los casos así indicados. El fichero *senkin.out* muestra información del proceso de cálculo cuando se realiza el análisis de sensibilidad. Por último, el fichero *rest.dat* recoge los posibles fallos o errores ocurridos durante el proceso de cálculo.

ANEXO D: MECANISMOS CINÉTICOS

En el presente anexo se va a detallar las especies y reacciones químicas de los dos mecanismos cinéticos utilizados.

El modelo cinético A es un mecanismo de reacción compuesto por:

- Mecanismo cinético propuesto por Skjøth-Rasmussen y cols. (2004), para la oxidación de C_2H_2 con O_2 , actualizado por Alzueta y cols. (2008) Este modelo mejora las reacciones vinculadas a la química del C_2H_2 . Es un mecanismo de 773 reacciones y 159 especies.
- Modelo cinético propuesto por Alzueta y Hernández (2002), para la descomposición de etanol en etileno, acetileno, CO y CO_2 . Es un mecanismo de 500 reacciones y 73 especies.
- Mecanismo cinético propuesto por Glarborg y cols. (1998), para la interacción entre hidrocarburos gaseosos y NO. Es un mecanismo de 447 reacciones elementales y 68 especies.
- Mecanismo cinético propuesto por Appel, Frenklach y Bockhorn (2000), para las reacciones de formación de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) hasta pyreno.

El modelo resultante es la unión de los respectivos modelos cinéticos, suprimiendo las especies y reacciones químicas repetidas.

El modelo A se compone de las siguientes especies químicas, detallando su peso molecular (PM), su temperatura mínima y máxima y la composición de sus elementos.

ESPECIE	PM	T		ELEMENTOS					
		Min	Max	H	O	C	N	Ar	
1. CO	28.01055	300.0	5000.0	0	1	1	0	0	
2. CO2	44.00995	300.0	5000.0	0	2	1	0	0	
3. H2	2.01594	300.0	5000.0	2	0	0	0	0	
4. C2H4	28.05418	300.0	5000.0	4	0	2	0	0	
5. CH4	16.04303	300.0	5000.0	4	0	1	0	0	
6. C2H6	30.07012	300.0	4000.0	6	0	2	0	0	
7. C2H2	26.03824	300.0	5000.0	2	0	2	0	0	
8. CH2O	30.02649	300.0	5000.0	2	1	1	0	0	
9. H	1.00797	300.0	5000.0	1	0	0	0	0	
10. CH	13.01912	300.0	5000.0	1	0	1	0	0	
11. CH2	14.02709	300.0	4000.0	2	0	1	0	0	
12. CH2(S)	14.02709	300.0	4000.0	2	0	1	0	0	
13. CH3	15.03506	300.0	5000.0	3	0	1	0	0	
14. O	15.99940	300.0	5000.0	0	1	0	0	0	
15. OH	17.00737	300.0	5000.0	1	1	0	0	0	
16. H2O	18.01534	300.0	5000.0	2	1	0	0	0	
17. C2	24.02230	300.0	5000.0	0	0	2	0	0	
18. C2H	25.03027	300.0	4000.0	1	0	2	0	0	
19. C2H3	27.04621	300.0	4000.0	3	0	2	0	0	

20. HCO	29.01852	300.0	5000.0	1	1	1	0	0
21. N2	28.01340	300.0	5000.0	0	0	0	2	0
22. C2H5	29.06215	300.0	4000.0	5	0	2	0	0
23. CH2OH	31.03446	250.0	4000.0	3	1	1	0	0
24. CH3O	31.03446	300.0	3000.0	3	1	1	0	0
25. O2	31.99880	300.0	5000.0	0	2	0	0	0
26. CH3OH	32.04243	300.0	5000.0	4	1	1	0	0
27. HO2	33.00677	300.0	5000.0	1	2	0	0	0
28. H2O2	34.01474	300.0	5000.0	2	2	0	0	0
29. C3H2	38.04939	150.0	4000.0	2	0	3	0	0
30. H2CCCH	39.05736	300.0	4000.0	3	0	3	0	0
31. C2H2OH	43.04561	300.0	3000.0	3	1	2	0	0
32. AR	39.94800	300.0	5000.0	0	0	0	0	1
33. C2O	40.02170	300.0	5000.0	0	1	2	0	0
34. HCCO	41.02967	300.0	4000.0	1	1	2	0	0
35. CH2CHCH2	41.07330	300.0	4000.0	5	0	3	0	0
36. CH3CCH2	41.07330	300.0	4000.0	5	0	3	0	0
37. CH3CHCH	41.07330	300.0	4000.0	5	0	3	0	0
38. CH2CO	42.03764	300.0	5000.0	2	1	2	0	0
39. HCCOH	42.03764	300.0	4000.0	2	1	2	0	0
40. OCHCHO	58.03704	300.0	3000.0	2	2	2	0	0
41. CH2HCO	43.04561	300.0	5000.0	3	1	2	0	0
42. C2H5OH	46.06952	200.0	6000.0	6	1	2	0	0
43. C2H4OH	45.06155	200.0	4000.0	5	1	2	0	0
44. CH3CH2O	45.06155	300.0	4000.0	5	1	2	0	0
45. CH3HCO	44.05358	300.0	5000.0	4	1	2	0	0
46. CH3CO	43.04561	300.0	5000.0	3	1	2	0	0
47. C2H5CHO	58.08067	273.1	5000.0	6	1	3	0	0
48. C2H5CO	57.07270	298.1	5000.0	5	1	3	0	0
49. HCOO	45.01792	300.0	5000.0	1	2	1	0	0
50. NO	30.00610	300.0	5000.0	0	1	0	1	0
51. HCN	27.02582	300.0	4000.0	1	0	1	1	0
52. C	12.01115	300.0	5000.0	0	0	1	0	0
53. NO2	46.00550	300.0	5000.0	0	2	0	1	0
54. NO3	62.00490	300.0	5000.0	0	3	0	1	0
55. HNO	31.01407	300.0	5000.0	1	1	0	1	0
56. HONO	47.01347	300.0	5000.0	1	2	0	1	0
57. H2NO	32.02204	300.0	4000.0	2	1	0	1	0
58. HNOH	32.02204	300.0	4000.0	2	1	0	1	0
59. NH3	17.03061	300.0	5000.0	3	0	0	1	0
60. NH2	16.02264	300.0	5000.0	2	0	0	1	0
61. NH	15.01467	300.0	5000.0	1	0	0	1	0
62. N	14.00670	300.0	5000.0	0	0	0	1	0
63. N2H2	30.02934	300.0	5000.0	2	0	0	2	0
64. NNH	29.02137	250.0	4000.0	1	0	0	2	0
65. N2O	44.01280	300.0	5000.0	0	1	0	2	0
66. CN	26.01785	300.0	5000.0	0	0	1	1	0
67. NCO	42.01725	300.0	4000.0	0	1	1	1	0
68. HNCO	43.02522	300.0	4000.0	1	1	1	1	0
69. HOCN	43.02522	300.0	4000.0	1	1	1	1	0
70. HCNO	43.02522	250.0	4000.0	1	1	1	1	0
71. C2N2	52.03570	300.0	5000.0	0	0	2	2	0

72. NCN	40.02455	300.0	4000.0	0 0 1 2 0
73. CH3CN	41.05291	300.0	3000.0	3 0 2 1 0
74. CH2CN	40.04494	300.0	3000.0	2 0 2 1 0
75. H2CN	28.03379	300.0	4000.0	2 0 1 1 0
76. CH3NO	45.04116	300.0	4000.0	3 1 1 1 0
77. HONO2	63.01287	300.0	4000.0	1 3 0 1 0
78. CH3CHOH	45.06155	300.0	4000.0	5 1 2 0 0
79. CH3O2	47.03386	200.0	6000.0	3 2 1 0 0
80. CH2CHCHCH2	54.09242	300.0	4000.0	6 0 4 0 0
81. CH2CHCHCH	53.08445	300.0	4000.0	5 0 4 0 0
82. C4H2	50.06054	300.0	5000.0	2 0 4 0 0
83. HCCHCCH	51.06851	300.0	4000.0	3 0 4 0 0
84. CH2CHCCH	52.07648	300.0	4000.0	4 0 4 0 0
85. CH2CHCCH2	53.08445	300.0	4000.0	5 0 4 0 0
86. H2CCCCH	51.06851	300.0	4000.0	3 0 4 0 0
87. C4H	49.05257	300.0	5000.0	1 0 4 0 0
88. H2CCCCCH	63.07966	300.0	4000.0	3 0 5 0 0
89. HCCCCHCCH	63.07966	300.0	4000.0	3 0 5 0 0
90. C6H2	74.08284	300.0	5000.0	2 0 6 0 0
91. H2C4O	66.05994	300.0	4000.0	2 1 4 0 0
92. C5H2	62.07169	300.0	5000.0	2 0 5 0 0
93. C5H5	65.09560	300.0	4000.0	5 0 5 0 0
94. C6H5O	93.10615	300.0	4000.0	5 1 6 0 0
95. C5H4OH	81.09500	300.0	5000.0	5 1 5 0 0
96. C5H4O	80.08703	300.0	5000.0	4 1 5 0 0
97. C5H5O	81.09500	300.0	5000.0	5 1 5 0 0
98. CH2*	14.02709	200.0	3500.0	2 0 1 0 0
99. C2H3O	43.04561	300.0	5000.0	3 1 2 0 0
100. C3H3	39.05736	300.0	4000.0	3 0 3 0 0
101. PC3H4	40.06533	300.0	5000.0	4 0 3 0 0
102. AC3H4	40.06533	300.0	5000.0	4 0 3 0 0
103. n-C4H3	51.06851	300.0	3000.0	3 0 4 0 0
104. i-C4H3	51.06851	300.0	3000.0	3 0 4 0 0
105. C4H4	52.07648	300.0	3000.0	4 0 4 0 0
106. n-C4H5	53.08445	300.0	3000.0	5 0 4 0 0
107. i-C4H5	53.08445	300.0	3000.0	5 0 4 0 0
108. C4H6	54.09242	300.0	5000.0	6 0 4 0 0
109. C4H612	54.09242	300.0	3000.0	6 0 4 0 0
110. C5H3	63.07966	300.0	5000.0	3 0 5 0 0
111. C6H	73.07487	300.0	5000.0	1 0 6 0 0
112. C6H3	75.09081	300.0	5000.0	3 0 6 0 0
113. l-C6H4	76.09878	300.0	3000.0	4 0 6 0 0
114. c-C6H4	76.09878	300.0	3000.0	4 0 6 0 0
115. n-C6H5	77.10675	300.0	3000.0	5 0 6 0 0
116. i-C6H5	77.10675	300.0	3000.0	5 0 6 0 0
117. l-C6H6	78.11472	300.0	3000.0	6 0 6 0 0
118. n-C6H7	79.12269	300.0	3000.0	7 0 6 0 0
119. i-C6H7	79.12269	300.0	3000.0	7 0 6 0 0
120. c-C6H7	79.12269	300.0	3000.0	7 0 6 0 0
121. C6H8	80.13066	300.0	3000.0	8 0 6 0 0
122. A1	78.11472	300.0	3000.0	6 0 6 0 0
123. A1-	77.10675	300.0	3000.0	5 0 6 0 0

124. C6H5OH	94.11412	300.0	5000.0	6	1	6	0	0
125. C5H6	66.10357	300.0	5000.0	6	0	5	0	0
126. n-A1C2H2	103.14499	300.0	3000.0	7	0	8	0	0
127. i-A1C2H2	103.14499	300.0	3000.0	7	0	8	0	0
128. A1C2H3	104.15296	300.0	3000.0	8	0	8	0	0
129. A1C2H3*	103.14499	300.0	3000.0	7	0	8	0	0
130. A1C2H	102.13702	300.0	3000.0	6	0	8	0	0
131. A1C2H*	101.12905	300.0	3000.0	5	0	8	0	0
132. A1C2H-	101.12905	300.0	3000.0	5	0	8	0	0
133. A1C2H)2	126.15932	300.0	3000.0	6	0	10	0	0
134. A2	128.17526	300.0	3000.0	8	0	10	0	0
135. A2-1	127.16729	300.0	3000.0	7	0	10	0	0
136. A2-2	127.16729	300.0	3000.0	7	0	10	0	0
137. naphthylene	126.15932	300.0	3000.0	6	0	10	0	0
138. A2C2HA	152.19756	300.0	3000.0	8	0	12	0	0
139. A2C2HB	152.19756	300.0	3000.0	8	0	12	0	0
140. A2C2HA*	151.18959	300.0	3000.0	7	0	12	0	0
141. A2C2HB*	151.18959	300.0	3000.0	7	0	12	0	0
142. A2C2H2	153.20553	300.0	3000.0	9	0	12	0	0
143. A2C2H)2	176.21986	300.0	3000.0	8	0	14	0	0
144. A3-1	177.22783	300.0	3000.0	9	0	14	0	0
145. A3-4	177.22783	300.0	3000.0	9	0	14	0	0
146. A3	178.23580	300.0	3000.0	10	0	14	0	0
147. A3C2H	202.25811	300.0	3000.0	10	0	16	0	0
148. A3C2H2	203.26608	300.0	3000.0	11	0	16	0	0
149. A4	202.25811	300.0	3000.0	10	0	16	0	0
150. P2	154.21350	300.0	3000.0	10	0	12	0	0
151. P2-	153.20553	300.0	3000.0	9	0	12	0	0
152. P2-H	155.22147	300.0	3000.0	11	0	12	0	0
153. A4-	201.25014	300.0	3000.0	9	0	16	0	0
154. A2R5	152.19756	300.0	3000.0	8	0	12	0	0
155. A2R5-	151.18959	300.0	3000.0	7	0	12	0	0

El modelo A utiliza las ecuaciones expuestas a continuación. Se muestran los valores de los parámetros de la ecuación de Arrhenius modificada (Ecuación D.1) que se utiliza para el cálculo de la constante de velocidad de reacción.

$$k = A * T * B + e^{\frac{-Ea}{R*T}} \quad \text{Ecuación D.1}$$

Donde:

A = Factor pre-exponencial (mol, cm, s, K).

β= Exponente de temperatura.

Ea= Energía de activación (cal/mol).

T = Temperatura (K).

R = Constante universal de los gases (1,989 cal/mol K).

REACCIONES		A	B	Ea	
1.	C2H3+O2=C2H2+HO2	1.34E+06	1.6	-383.5	
2.	C2H4+O2=CH2HCO+OH	2.00E+08	1.5	39000.0	
3.	C2H4+O2=C2H3+HO2	4.20E+13	0.0	57630.0	
4.	C2H2+O=HCCO+H	1.40E+07	2.0	1900.0	
5.	H+C2H2(+M)=C2H3(+M)	3.64E+10	1.1	2640.0	
Low	pressurelimit:	0.22540E+41	-0.72690E+01	0.65770E+04	
TROE	centering:	0.50000E+00	0.67500E+03	0.67500E+03	
H2	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO2	Enhanced by	3.000E+00			
H2O	Enhanced by	5.000E+00			
6.	CH3+CH3(+M)=C2H6(+M)	2.10E+16	-1.0	620.0	
Low	pressurelimit:	0.12600E+51	-0.96700E+01	0.62200E+04	
TROE	centering:	0.53250E+00	0.15100E+03	0.10380E+04	0.49700E+04
N2	Enhanced by	1.430E+00			
H2O	Enhanced by	8.590E+00			
H2	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO2	Enhanced by	3.000E+00			
7.	CH3+H(+M)=CH4(+M)	1.30E+16	-0.6	383.0	
Low	pressurelimit:	0.17500E+34	-0.47600E+01	0.24400E+04	
TROE	centering:	0.78300E+00	0.74000E+02	0.29410E+04	0.69640E+04
H2	Enhanced by	2.860E+00			
H2O	Enhanced by	8.570E+00			
CH4	Enhanced by	2.860E+00			
CO	Enhanced by	2.140E+00			
CO2	Enhanced by	2.860E+00			
C2H6	Enhanced by	4.290E+00			
N2	Enhanced by	1.430E+00			
8.	CH4+O2=CH3+HO2	7.90E+13	0.0	56000.0	
9.	CH4+H=CH3+H2	1.30E+04	3.0	8040.0	
10.	CH4+OH=CH3+H2O	1.60E+06	2.1	2460.0	
11.	CH4+O=CH3+OH	1.02E+09	1.5	8604.0	
12.	CH4+HO2=CH3+H2O2	1.80E+11	0.0	18700.0	
13.	CH3+HO2=CH3O+OH	8.00E+12	0.0	0.0	
14.	CH3+O=CH2O+H	8.00E+13	0.0	0.0	
15.	CH3+O2=CH3O+O	2.87E+13	0.0	30481.0	
16.	CH3+O2=CH2O+OH	1.85E+12	0.0	20315.0	
17.	CH2OH+H=CH3+OH	1.00E+14	0.0	0.0	
18.	CH3O+H=CH3+OH	1.00E+14	0.0	0.0	
19.	CH3+OH=CH2+H2O	7.50E+06	2.0	5000.0	
20.	CH3+HCO=CH4+CO	1.20E+14	0.0	0.0	
21.	CH3+H=CH2+H2	9.00E+13	0.0	15100.0	
22.	CH3+OH(+M)=CH3OH(+M)	6.30E+13	0.0	0.0	
Low	pressurelimit:	0.18900E+39	-0.63000E+01	0.31000E+04	
TROE	centering:	0.21050E+00	0.83500E+02	0.53980E+04	0.83700E+04
N2	Enhanced by	1.430E+00			
H2O	Enhanced by	8.580E+00			
CO2	Enhanced by	3.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
H2	Enhanced by	2.000E+00			
23.	CH3OH+O=CH2OH+OH	3.88E+05	2.5	3080.0	
24.	CH2O+H(+M)=CH3O(+M)	5.40E+11	0.5	2600.0	
Low	pressurelimit:	0.15400E+31	-0.48000E+01	0.55600E+04	
TROE	centering:	0.75800E+00	0.94000E+02	0.15550E+04	0.42000E+04

N2	Enhanced	by	1.430E+00			
H2O	Enhanced	by	8.580E+00			
CO	Enhanced	by	2.000E+00			
H2	Enhanced	by	2.000E+00			
CO2	Enhanced	by	3.000E+00			
25.	H+CH2O(+M)=CH2OH(+M)		5.40E+11	0.5	3600.0	
Low	pressurelimit:	0.91000E+32	-0.48200E+01	0.65300E+04		
TROE	centering:	0.71870E+00	0.10300E+03	0.12910E+04	0.41600E+04	
N2	Enhanced	by	1.430E+00			
H2O	Enhanced	by	8.580E+00			
CO	Enhanced	by	2.000E+00			
CO2	Enhanced	by	3.000E+00			
H2	Enhanced	by	2.000E+00			
26.	CH3O+H=CH2O+H2		2.00E+13	0.0	0.0	
27.	CH3O+OH=CH2O+H2O		1.00E+13	0.0	0.0	
28.	CH2OH+OH=CH2O+H2O		1.00E+13	0.0	0.0	
29.	CH3O+O=CH2O+OH		1.00E+13	0.0	0.0	
30.	CH3O+O2=CH2O+HO2		6.30E+10	0.0	2600.0	
31.	CH2OH+O2=CH2O+HO2		1.57E+15	-1.0	0.0	
Declared	duplicate	reaction...				
32.	CH2OH+O2=CH2O+HO2		7.23E+13	0.0	3577.0	
Declared	duplicate	reaction...				
33.	CH2+H=CH+H2		1.00E+18	-1.6	0.0	
34.	CH2+OH=CH+H2O		1.13E+07	2.0	3000.0	
35.	CH2+OH=CH2O+H		2.50E+13	0.0	0.0	
36.	CH+O2=HCO+O		3.30E+13	0.0	0.0	
37.	CH+O=CO+H		5.70E+13	0.0	0.0	
38.	CH+OH=HCO+H		3.00E+13	0.0	0.0	
39.	CH+CO2=HCO+CO		3.40E+12	0.0	690.0	
40.	CH+H2O=CH2O+H		5.72E+12	0.0	-751.0	
41.	CH+CH2O=CH2CO+H		9.46E+13	0.0	-515.0	
42.	CH+C2H2=C3H2+H		1.00E+14	0.0	0.0	
43.	CH+CH2=C2H2+H		4.00E+13	0.0	0.0	
44.	CH+CH3=C2H3+H		3.00E+13	0.0	0.0	
45.	CH+CH4=C2H4+H		6.00E+13	0.0	0.0	
46.	CH2+CO2=CH2O+CO		1.10E+11	0.0	1000.0	
47.	CH2+O=CO+H+H		5.00E+13	0.0	0.0	
48.	CH2+O=CO+H2		3.00E+13	0.0	0.0	
49.	CH2+O2=CO+H2O		2.20E+22	-3.3	2867.0	
50.	CH2+O2=CO2+H+H		3.29E+21	-3.3	2867.0	
51.	CH2+O2=CH2O+O		3.29E+21	-3.3	2867.0	
52.	CH2+O2=CO2+H2		2.63E+21	-3.3	2867.0	
53.	CH2+O2=CO+OH+H		1.64E+21	-3.3	2867.0	
54.	CH2+CH2=C2H2+H+H		4.00E+13	0.0	0.0	
55.	CH2+HCCO=C2H3+CO		3.00E+13	0.0	0.0	
56.	CH2+C2H2=H2CCCH+H		1.20E+13	0.0	6600.0	
57.	CH2+CH4=CH3+CH3		4.30E+12	0.0	10030.0	
58.	CH2O+OH=HCO+H2O		3.43E+09	1.2	-447.0	
59.	CH2O+H=HCO+H2		1.30E+08	1.6	2166.0	
60.	CH2O+M=HCO+H+M		3.31E+16	0.0	81000.0	
H2	Enhanced	by	2.000E+00			
CO	Enhanced	by	2.000E+00			
CO2	Enhanced	by	3.000E+00			
H2O	Enhanced	by	5.000E+00			
61.	CH2O+O=HCO+OH		1.80E+13	0.0	3080.0	
62.	CH2O+CH3=HCO+CH4		7.80E-08	6.1	1967.0	
63.	CH2O+HO2=HCO+H2O2		3.00E+12	0.0	13000.0	

64.	CH2O+O2=HCO+HO2		6.00E+13	0.0	40660.0	
65.	HCO+OH=H2O+CO		1.00E+14	0.0	0.0	
66.	HCO+M=H+CO+M		3.48E+17	-1.0	17010.0	
CO	Enhanced	by	1.870E+00			
H2	Enhanced	by	1.870E+00			
CH4	Enhanced	by	2.810E+00			
CO2	Enhanced	by	3.000E+00			
H2O	Enhanced	by	5.000E+00			
67.	HCO+H=CO+H2		1.19E+13	0.3	0.0	
68.	HCO+O=CO+OH		3.00E+13	0.0	0.0	
69.	HCO+O=CO2+H		3.00E+13	0.0	0.0	
70.	HCO+O2=HO2+CO		7.58E+12	0.0	406.0	
71.	CO+O+M=CO2+M		6.17E+14	0.0	3000.0	
H2	Enhanced	by	2.000E+00			
CO	Enhanced	by	2.000E+00			
CO2	Enhanced	by	3.000E+00			
H2O	Enhanced	by	1.600E+01			
72.	CO+OH=CO2+H		1.51E+07	1.3	-758.0	
73.	CO+O2=CO2+O		2.53E+12	0.0	47688.0	
74.	HO2+CO=CO2+OH		1.57E+05	2.2	17900.0	
75.	C2H4+H=C2H3+H2		5.42E+14	0.0	14902.0	
76.	C2H4+O=CH3+HCO		8.10E+06	1.9	180.0	
77.	C2H4+O=CH2CO+H2		6.80E+05	1.9	180.0	
78.	C2H4+OH=C2H3+H2O		2.02E+13	0.0	5955.0	
79.	C2H4+CH3=C2H3+CH4		5.00E+11	0.0	15000.0	
80.	CH2+CH3=C2H4+H		4.00E+13	0.0	0.0	
81.	C2H4+H(+M)=C2H5(+M)		1.08E+12	0.5	1822.0	
Low	pressurelimit:	0.11120E+35	-0.50000E+01	0.44480E+04		
TROE	centering:	0.50000E+00	0.95000E+02	0.95000E+02	0.20000E+03	
H2	Enhanced	by	2.000E+00			
CO	Enhanced	by	2.000E+00			
CO2	Enhanced	by	3.000E+00			
H2O	Enhanced	by	5.000E+00			
82.	C2H3+H=C2H2+H2		4.00E+13	0.0	0.0	
83.	C2H3+O=CH2CO+H		3.00E+13	0.0	0.0	
84.	C2H3+O2=CH2O+HCO		4.58E+16	-1.4	1015.0	
85.	C2H3+OH=C2H2+H2O		2.00E+13	0.0	0.0	
86.	C2H3+C2H=C2H2+C2H2		3.00E+13	0.0	0.0	
87.	C2H3+CH3=C2H2+CH4		2.10E+13	0.0	0.0	
88.	C2H3+CH2O=C2H4+HCO		5.40E+03	2.8	5860.0	
89.	C2H3+HCO=C2H4+CO		9.00E+13	0.0	0.0	
90.	C2H3+C2H3=H2CCCH+CH3		1.80E+13	0.0	0.0	
91.	C2H3+C2H3=C2H4+C2H2		6.30E+13	0.0	0.0	
92.	C2H3+CH=CH2+C2H2		5.00E+13	0.0	0.0	
93.	OH+C2H2=C2H+H2O		3.37E+07	2.0	14000.0	
94.	OH+C2H2=HCCOH+H		5.04E+05	2.3	13500.0	
95.	OH+C2H2=CH2CO+H		2.18E-04	4.5	-1000.0	
96.	OH+C2H2=CH3+CO		4.83E-04	4.0	-2000.0	
97.	HCCOH+H=HCCO+H2		3.00E+07	2.0	1000.0	
98.	HCCOH+OH=HCCO+H2O		1.00E+07	2.0	1000.0	
99.	HCCOH+O=HCCO+OH		2.00E+07	3.0	1900.0	
100.	C2H2+O=C2H+OH		3.16E+15	-0.6	15000.0	
101.	C2H2OH+O=OCHCHO+H		5.00E+13	0.0	0.0	
102.	C2H2OH+O2=OCHCHO+OH		1.00E+12	0.0	5000.0	
103.	OCHCHO+M=HCO+HCO+M		1.00E+17	0.0	25000.0	
104.	OCHCHO+H=CH2O+HCO		3.00E+13	0.0	0.0	
105.	CH2CO+O=CO2+CH2		1.75E+12	0.0	1350.0	

106.	CH ₂ CO+H=CH ₃ +CO	5.93E+06	2.0	1300.0	
107.	CH ₂ CO+H=HCCO+H ₂	3.00E+07	2.0	10000.0	
108.	CH ₂ CO+O=HCCO+OH	2.00E+07	2.0	10000.0	
109.	CH ₂ CO+OH=HCCO+H ₂ O	1.00E+07	2.0	3000.0	
110.	CH ₂ CO+OH=CH ₂ OH+CO	7.20E+12	0.0	0.0	
111.	CH ₂ CO+OH=CH ₃ +CO ₂	3.00E+12	0.0	0.0	
112.	CH ₂ +CO(+M)=CH ₂ CO(+M)	8.10E+11	0.5	4510.0	
Low	pressurelimit:	0.18800E+34	-0.51100E+01	0.70950E+04	
TROE	centering:	0.59070E+00	0.27500E+03	0.12260E+04	0.51850E+04
H ₂	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO ₂	Enhanced by	3.000E+00			
H ₂ O	Enhanced by	8.580E+00			
N ₂	Enhanced by	1.430E+00			
113.	C ₂ H+O ₂ =CO+CO+H	2.52E+13	0.0	0.0	
114.	C ₂ H+CH ₄ =CH ₃ +C ₂ H ₂	7.23E+12	0.0	976.0	
115.	CH+CO(+M)=HCCO(+M)	5.00E+13	0.0	0.0	
Low	pressurelimit:	0.18800E+29	-0.37400E+01	0.19360E+04	
TROE	centering:	0.57570E+00	0.23700E+03	0.16520E+04	0.50690E+04
N ₂	Enhanced by	1.430E+00			
H ₂ O	Enhanced by	8.580E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO ₂	Enhanced by	3.000E+00			
H ₂	Enhanced by	2.000E+00			
116.	HCCO+C ₂ H ₂ =H ₂ CCCH+CO	1.00E+11	0.0	3000.0	
117.	H+HCCO=CH ₂ (S)+CO	1.00E+14	0.0	0.0	
118.	O+HCCO=H+CO+CO	1.00E+14	0.0	0.0	
119.	HCCO+O ₂ =CO ₂ +CO+H	1.40E+07	1.7	1000.0	
120.	HCCO+O ₂ =CO+CO+OH	2.88E+07	1.7	1000.0	
121.	CH+HCCO=C ₂ H ₂ +CO	5.00E+13	0.0	0.0	
122.	HCCO+HCCO=C ₂ H ₂ +CO+CO	1.00E+13	0.0	0.0	
123.	HCCO+OH=C ₂ O+H ₂ O	6.00E+13	0.0	0.0	
124.	C ₂ O+H=CH+CO	1.00E+13	0.0	0.0	
125.	C ₂ O+O=CO+CO	5.00E+13	0.0	0.0	
126.	C ₂ O+OH=CO+CO+H	2.00E+13	0.0	0.0	
127.	C ₂ O+O ₂ =CO+CO+O	2.00E+13	0.0	0.0	
128.	C ₂ H+O=CH+CO	5.00E+13	0.0	0.0	
129.	C ₂ H+OH=HCCO+H	2.00E+13	0.0	0.0	
130.	C ₂ H+OH=C ₂ +H ₂ O	4.00E+07	2.0	8000.0	
131.	C ₂ +H ₂ =C ₂ H+H	4.00E+05	2.4	1000.0	
132.	C ₂ +O ₂ =CO+CO	5.00E+13	0.0	0.0	
133.	C ₂ +OH=C ₂ O+H	5.00E+13	0.0	0.0	
134.	C ₂ H ₂ +O ₂ =HCO+HCO	2.00E+08	1.5	30100.0	
135.	C ₂ H ₂ +M=C ₂ H+H+M	9.08E+30	-3.7	127138.0	
H ₂	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO ₂	Enhanced by	3.000E+00			
H ₂ O	Enhanced by	5.000E+00			
136.	C ₂ H ₄ +M=C ₂ H ₂ +H ₂ +M	3.50E+16	0.0	71500.0	
N ₂	Enhanced by	1.500E+00			
H ₂ O	Enhanced by	1.000E+01			
137.	C ₂ H ₃ +H(+M)=C ₂ H ₄ (+M)	6.10E+12	0.3	280.0	
Low	pressurelimit:	0.98000E+30	-0.38600E+01	0.33200E+04	
TROE	centering:	0.78200E+00	0.20750E+03	0.26630E+04	0.60950E+04
H ₂	Enhanced by	2.850E+00			
CO	Enhanced by	2.100E+00			
CO ₂	Enhanced by	2.850E+00			

H2O	Enhanced	by	7.140E+00		
CH4	Enhanced	by	2.850E+00		
C2H6	Enhanced	by	4.290E+00		
N2	Enhanced	by	1.430E+00		
138.	O+OH=O2+H		2.00E+14	-0.4	0.0
139.	O+H2=OH+H		5.00E+04	2.7	6290.0
140.	OH+H2=H2O+H		2.10E+08	1.5	3450.0
141.	2OH=O+H2O		4.30E+03	2.7	-2486.0
142.	H+H+M=H2+M		1.00E+18	-1.0	0.0
H2O	Enhanced	by	0.000E+00		
143.	H+H+H2O=H2+H2O		6.00E+19	-1.3	0.0
144.	H+O+M=OH+M		6.20E+16	-0.6	0.0
H2O	Enhanced	by	5.000E+00		
145.	H+OH+M=H2O+M		1.60E+22	-2.0	0.0
H2O	Enhanced	by	5.000E+00		
146.	O+O+M=O2+M		1.90E+13	0.0	-1788.0
H2O	Enhanced	by	5.000E+00		
147.	H+O2+M=HO2+M		8.00E+17	-0.8	0.0
H2O	Enhanced	by	2.000E+01		
N2	Enhanced	by	0.000E+00		
CO2	Enhanced	by	4.000E+00		
148.	H+O2+N2=HO2+N2		6.70E+19	-1.4	0.0
149.	H+HO2=H2+O2		4.30E+13	0.0	1411.0
150.	H+HO2=2OH		1.70E+14	0.0	874.0
151.	H+HO2=O+H2O		3.00E+13	0.0	1721.0
152.	O+HO2=O2+OH		3.30E+13	0.0	0.0
153.	OH+HO2=H2O+O2		1.90E+16	-1.0	0.0
154.	HO2+HO2=H2O2+O2		4.20E+14	0.0	11982.0
Declared	duplicate	reaction...			
155.	HO2+HO2=H2O2+O2		1.30E+11	0.0	-1629.0
Declared	duplicate	reaction...			
156.	H2O2+M=OH+OH+M		1.30E+17	0.0	45500.0
H2O	Enhanced	by	5.000E+00		
157.	H2O2+H=HO2+H2		1.70E+12	0.0	3755.0
158.	H2O2+H=OH+H2O		1.00E+13	0.0	3576.0
159.	H2O2+O=OH+HO2		6.60E+11	0.0	3974.0
160.	H2O2+OH=H2O+HO2		7.80E+12	0.0	1330.0
Declared	duplicate	reaction...			
161.	H2O2+OH=H2O+HO2		5.80E+14	0.0	9560.0
Declared	duplicate	reaction...			
162.	CH2(S)+H2=CH3+H		7.20E+13	0.0	0.0
163.	CH2(S)+H2O=CH3+OH		3.00E+15	-0.6	0.0
164.	CH2(S)+N2=CH2+N2		1.30E+13	0.0	430.0
165.	CH2(S)+AR=CH2+AR		1.50E+13	0.0	884.0
166.	CH2(S)+H=CH2+H		2.00E+14	0.0	0.0
167.	CH2(S)+H2O=CH2+H2O		3.00E+13	0.0	0.0
168.	CH2(S)+H=CH+H2		3.00E+13	0.0	0.0
169.	CH2(S)+O=CO+H+H		3.00E+13	0.0	0.0
170.	CH2(S)+OH=CH2O+H		3.00E+13	0.0	0.0
171.	CH2(S)+O2=CO+OH+H		7.00E+13	0.0	0.0
172.	CH2(S)+CO2=CH2O+CO		3.00E+12	0.0	0.0
173.	CH2(S)+CH4=CH3+CH3		4.30E+13	0.0	0.0
174.	CH2(S)+CH3=C2H4+H		2.00E+13	0.0	0.0
175.	CH2(S)+CH2CO=C2H4+CO	1.60E+14	0.0	0.0	
176.	CH2(S)+C2H6=CH3+C2H5	1.20E+14	0.0	0.0	
177.	CH+H=C+H2	1.50E+14	0.0	0.0	
178.	CH+OH=C+H2O	4.00E+07	2.0	3000.0	

179.	C+OH=CO+H	5.00E+13	0.0	0.0
180.	C+O2=CO+O	2.00E+13	0.0	0.0
181.	C+CH3=C2H2+H	5.00E+13	0.0	0.0
182.	C+CH2=C2H+H	5.00E+13	0.0	0.0
183.	CH2OH+O2=CH2O+HO2	1.60E+15	-1.0	0.0
Declared duplicate reaction...				
184.	CH2OH+O2=CH2O+HO2	7.20E+13	0.0	3577.0
Declared duplicate reaction...				
185.	C2H6+H=C2H5+H2	5.40E+02	3.5	5210.0
186.	C2H6+O=C2H5+OH	3.00E+07	2.0	5115.0
187.	C2H6+OH=C2H5+H2O	7.20E+06	2.0	864.0
188.	C2H6+HO2=C2H5+H2O2	1.30E+13	0.0	20460.0
189.	C2H6+O2=C2H5+HO2	5.00E+13	0.0	55000.0
190.	C2H6+CH3=C2H5+CH4	5.50E-01	4.0	8300.0
191.	C2H5+H(+M)=C2H6(+M)	5.20E+17	-1.0	1580.0
Low pressure	limit:	0.20000E+42	-0.70800E+01	0.66850E+04
TROE centering:		0.84220E+00	0.12500E+03	0.22190E+04 0.68820E+04
N2	Enhanced by	1.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
AR	Enhanced by	7.000E-01		
192.	C2H5+H=CH3+CH3	4.90E+12	0.3	0.0
193.	C2H5+O=CH3+CH2O	4.20E+13	0.0	0.0
194.	C2H5+O=CH3HCO+H	5.30E+13	0.0	0.0
195.	C2H5+O=C2H4+OH	3.00E+13	0.0	0.0
196.	C2H5+OH=C2H4+H2O	2.40E+13	0.0	0.0
197.	C2H5+O2=C2H4+HO2	1.00E+10	0.0	-2190.0
198.	C2H5+CH2O=C2H6+HCO	5.50E+03	2.8	5860.0
199.	C2H5+HCO=C2H6+CO	1.20E+14	0.0	0.0
200.	C2H5+CH3=C2H4+CH4	1.10E+12	0.0	0.0
201.	C2H5+C2H5=C2H6+C2H4	1.50E+12	0.0	0.0
202.	C2H4+O=CH2HCO+H	4.70E+06	1.9	180.0
203.	C2H4+HO2=CH3HCO+OH	2.20E+12	0.0	17200.0
204.	C2H3+O2=CH2HCO+O	3.03E+11	-0.3	10.7
205.	H2+C2H=C2H2+H	4.10E+05	2.4	864.0
206.	C2H2+O=CH2+CO	6.10E+06	2.0	1900.0
207.	OH+C2H2(+M)=C2H2OH(+M)	1.50E+08	1.7	1000.0
Low pressure	limit:	0.18100E+24	-0.20000E+01	0.00000E+00
H2	Enhanced by	2.000E+00		
CO	Enhanced by	2.000E+00		
CO2	Enhanced by	3.000E+00		
H2O	Enhanced by	5.000E+00		
208.	CH3HCO=CH3+HCO	7.10E+15	0.0	81280.0
209.	CH3HCO+H=CH3CO+H2	4.10E+09	1.2	2400.0
210.	CH3HCO+O=CH3CO+OH	5.80E+12	0.0	1800.0
211.	CH3HCO+OH=CH3CO+H2O	2.30E+10	0.7	-1110.0
212.	CH3HCO+HO2=CH3CO+H2O2	3.00E+12	0.0	12000.0
213.	CH3HCO+O2=CH3CO+HO2	3.00E+13	0.0	39000.0
214.	CH3HCO+CH3=CH3CO+CH4	2.00E-06	5.6	2464.0
215.	CH2HCO=CH3+CO	1.00E+13	0.0	42000.0
216.	CH2HCO+H=CH3+HCO	1.00E+14	0.0	0.0
217.	CH2HCO+H=CH3CO+H	3.00E+13	0.0	0.0
218.	CH2HCO+O=CH2O+HCO	5.00E+13	0.0	0.0
219.	CH2HCO+OH=CH2CO+H2O	2.00E+13	0.0	0.0
220.	CH2HCO+OH=CH2OH+HCO	1.00E+13	0.0	0.0
221.	CH2HCO+O2=CH2O+CO+OH	2.20E+11	0.0	1500.0
222.	CH2HCO+CH3=C2H5CHO	5.00E+13	0.0	0.0
223.	CH2HCO+CH2=C2H4+HCO	5.00E+13	0.0	0.0

224.	CH ₂ HCO+CH=C ₂ H ₃ +HCO	1.00E+14	0.0	0.0
225.	C ₂ H ₅ +HCO=C ₂ H ₅ CHO	1.80E+13	0.0	0.0
226.	C ₂ H ₅ CHO+H=C ₂ H ₅ CO+H ₂	8.00E+13	0.0	0.0
227.	C ₂ H ₅ CHO+O=C ₂ H ₅ CO+OH	7.80E+12	0.0	1730.0
228.	C ₂ H ₅ CHO+OH=C ₂ H ₅ CO+H ₂ O	1.20E+13	0.0	0.0
229.	C ₂ H ₅ +CO=C ₂ H ₅ CO	1.50E+11	0.0	4800.0
230.	C ₂ H ₂ OH+H=CH ₂ HCO+H	5.00E+13	0.0	0.0
231.	CH ₃ CO(+M)=CH ₃ +CO(+M)	2.80E+13	0.0	17100.0
Low pressure	limit:	0.21000E+16	0.00000E+00	0.14000E+05
TROE	centering:	0.50000E+00	0.10000E-29	0.10000E+31
H ₂	Enhanced by	2.000E+00		
CO	Enhanced by	2.000E+00		
CO ₂	Enhanced by	3.000E+00		
H ₂ O	Enhanced by	5.000E+00		
232.	CH ₃ CO+H=CH ₃ +HCO	2.10E+13	0.0	0.0
233.	CH ₃ CO+H=CH ₂ CO+H ₂	1.20E+13	0.0	0.0
234.	CH ₃ CO+O=CH ₃ +CO ₂	1.50E+14	0.0	0.0
235.	CH ₃ CO+O=CH ₂ CO+OH	4.00E+13	0.0	0.0
236.	CH ₃ CO+OH=CH ₂ CO+H ₂ O	1.20E+13	0.0	0.0
237.	H+NO+M=HNO+M	4.00E+20	-1.8	0.0
H ₂ O	Enhanced by	1.000E+01		
O ₂	Enhanced by	1.500E+00		
H ₂	Enhanced by	2.000E+00		
CO ₂	Enhanced by	3.000E+00		
N ₂	Enhanced by	0.000E+00		
238.	H+NO+N ₂ =HNO+N ₂	7.00E+19	-1.5	0.0
239.	NO+O+M=NO ₂ +M	7.50E+19	-1.4	0.0
N ₂	Enhanced by	1.700E+00		
O ₂	Enhanced by	1.500E+00		
H ₂ O	Enhanced by	1.000E+01		
240.	OH+NO+M=HONO+M	5.10E+23	-2.5	-68.0
H ₂ O	Enhanced by	5.000E+00		
241.	HO ₂ +NO=NO ₂ +OH	2.10E+12	0.0	-479.0
242.	NO ₂ +H=NO+OH	8.40E+13	0.0	0.0
243.	NO ₂ +O=NO+O ₂	3.90E+12	0.0	-238.0
244.	NO ₂ +O(+M)=NO ₃ (+M)	1.30E+13	0.0	0.0
Low pressure	limit:	0.10000E+29	-0.40800E+01	0.24700E+04
N ₂	Enhanced by	1.500E+00		
O ₂	Enhanced by	1.500E+00		
H ₂ O	Enhanced by	1.860E+01		
245.	NO ₂ +NO ₂ =NO+NO+O ₂	1.60E+12	0.0	26123.0
246.	NO ₂ +NO ₂ =NO ₃ +NO	9.60E+09	0.7	20900.0
247.	NO ₃ +H=NO ₂ +OH	6.00E+13	0.0	0.0
248.	NO ₃ +O=NO ₂ +O ₂	1.00E+13	0.0	0.0
249.	NO ₃ +OH=NO ₂ +HO ₂	1.40E+13	0.0	0.0
250.	NO ₃ +HO ₂ =NO ₂ +O ₂ +OH	1.50E+12	0.0	0.0
251.	NO ₃ +NO ₂ =NO+NO ₂ +O ₂	5.00E+10	0.0	2940.0
252.	HNO+H=H ₂ +NO	4.50E+11	0.7	655.0
253.	HNO+O=NO+OH	1.00E+13	0.0	0.0
254.	HNO+OH=NO+H ₂ O	3.60E+13	0.0	0.0
255.	HNO+O ₂ =HO ₂ +NO	1.00E+13	0.0	25000.0
256.	HNO+NO ₂ =HONO+NO	6.00E+11	0.0	2000.0
257.	HNO+HNO=N ₂ O+H ₂ O	9.00E+08	0.0	3100.0
258.	HNO+NH ₂ =NH ₃ +NO	3.63E+06	1.6	-1252.0
259.	H ₂ NO+M=HNO+H+M	2.50E+15	0.0	50000.0
H ₂ O	Enhanced by	5.000E+00		
N ₂	Enhanced by	2.000E+00		

260.	H2NO+H=HNO+H2	3.00E+07	2.0	2000.0
261.	H2NO+H=NH2+OH	5.00E+13	0.0	0.0
262.	H2NO+O=HNO+OH	3.00E+07	2.0	2000.0
263.	H2NO+O=NH2+O2	2.00E+14	0.0	0.0
264.	H2NO+OH=HNO+H2O	2.00E+07	2.0	1000.0
265.	H2NO+NO=HNO+HNO	2.00E+04	2.0	13000.0
266.	H2NO+NO2=HNO+HONO	6.00E+11	0.0	2000.0
267.	HONO+H=H2+NO2	1.20E+13	0.0	7352.0
268.	HONO+O=OH+NO2	1.20E+13	0.0	5961.0
269.	HONO+OH=H2O+NO2	4.00E+12	0.0	0.0
270.	NH3+M=NH2+H+M	2.20E+16	0.0	93470.0
271.	NH3+H=NH2+H2	6.40E+05	2.4	10171.0
272.	NH3+O=NH2+OH	9.40E+06	1.9	6460.0
273.	NH3+OH=NH2+H2O	2.00E+06	2.0	566.0
274.	NH3+HO2=NH2+H2O2	3.00E+11	0.0	22000.0
275.	NH2+H=NH+H2	4.00E+13	0.0	3650.0
276.	NH2+O=HNO+H	6.60E+14	-0.5	0.0
277.	NH2+O=NH+OH	6.80E+12	0.0	0.0
278.	NH2+OH=NH+H2O	4.00E+06	2.0	1000.0
279.	NH2+HO2=H2NO+OH	5.00E+13	0.0	0.0
280.	NH2+HO2=NH3+O2	1.00E+13	0.0	0.0
281.	NH2+NO=NNH+OH	8.90E+12	-0.3	0.0
282.	NH2+NO=N2+H2O	1.30E+16	-1.3	0.0
Declared duplicate reaction...				
283.	NH2+NO=N2+H2O	*****	-0.3	0.0
Declared duplicate reaction...				
284.	NH2+NO2=N2O+H2O	3.20E+18	-2.2	0.0
285.	NH2+NO2=H2NO+NO	3.50E+12	0.0	0.0
286.	NH2+H2NO=NH3+HNO	3.00E+12	0.0	1000.0
287.	HONO+NH2=NO2+NH3	7.11E+01	3.0	-4941.0
288.	NH2+NH2=N2H2+H2	8.50E+11	0.0	0.0
289.	NH2+NH=N2H2+H	5.00E+13	0.0	0.0
290.	NH2+N=N2+H+H	7.20E+13	0.0	0.0
291.	NH+H=N+H2	3.00E+13	0.0	0.0
292.	NH+O=NO+H	9.20E+13	0.0	0.0
293.	NH+OH=HNO+H	2.00E+13	0.0	0.0
294.	NH+OH=N+H2O	5.00E+11	0.5	2000.0
295.	NH+O2=HNO+O	4.60E+05	2.0	6500.0
296.	NH+O2=NO+OH	1.30E+06	1.5	100.0
297.	NH+NO=N2O+H	2.90E+14	-0.4	0.0
Declared duplicate reaction...				
298.	NH+NO=N2O+H	*****	-0.2	0.0
Declared duplicate reaction...				
299.	NH+NO=N2+OH	2.20E+13	-0.2	0.0
300.	NH+NO2=N2O+OH	1.00E+13	0.0	0.0
301.	NH+NH=N2+H+H	2.50E+13	0.0	0.0
302.	NH+N=N2+H	3.00E+13	0.0	0.0
303.	N+OH=NO+H	3.80E+13	0.0	0.0
304.	N+O2=NO+O	6.40E+09	1.0	6280.0
305.	N+NO=N2+O	3.30E+12	0.3	0.0
306.	N2H2+M=NNH+H+M	5.00E+16	0.0	50000.0
H2O	Enhanced by	1.500E+01		
O2	Enhanced by	2.000E+00		
N2	Enhanced by	2.000E+00		
H2	Enhanced by	2.000E+00		
307.	N2H2+H=NNH+H2	5.00E+13	0.0	1000.0
308.	N2H2+O=NH2+NO	1.00E+13	0.0	0.0

309.	N2H2+O=NNH+OH	2.00E+13	0.0	1000.0
310.	N2H2+OH=NNH+H2O	1.00E+13	0.0	1000.0
311.	N2H2+NO=N2O+NH2	3.00E+12	0.0	0.0
312.	N2H2+NH2=NH3+NNH	1.00E+13	0.0	1000.0
313.	N2H2+NH=NNH+NH2	1.00E+13	0.0	1000.0
314.	NNH=N2+H	1.00E+07	0.0	0.0
315.	NNH+H=N2+H2	1.00E+14	0.0	0.0
316.	NNH+O=N2+OH	8.00E+13	0.0	0.0
317.	NNH+O=N2O+H	1.00E+14	0.0	0.0
318.	NNH+O=NH+NO	5.00E+13	0.0	0.0
319.	NNH+OH=N2+H2O	5.00E+13	0.0	0.0
320.	NNH+O2=N2+HO2	2.00E+14	0.0	0.0
321.	NNH+O2=N2+O2+H	5.00E+13	0.0	0.0
322.	NNH+NO=N2+HNO	5.00E+13	0.0	0.0
323.	NNH+NH2=N2+NH3	5.00E+13	0.0	0.0
324.	NNH+NH=N2+NH2	5.00E+13	0.0	0.0
325.	N2O+M=N2+O+M	4.00E+14	0.0	56100.0
N2	Enhanced by	1.700E+00		
O2	Enhanced by	1.400E+00		
H2O	Enhanced by	1.200E+01		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	3.000E+00		
326.	N2O+H=N2+OH	3.30E+10	0.0	4729.0
Declared	duplicate	reaction...		
327.	N2O+H=N2+OH	4.40E+14	0.0	19254.0
Declared	duplicate	reaction...		
328.	N2O+O=NO+NO	6.60E+13	0.0	26630.0
329.	N2O+O=N2+O2	1.00E+14	0.0	28000.0
330.	N2O+OH=N2+HO2	1.30E-02	4.7	36561.0
331.	N2O+OH=HNO+NO	1.20E-04	4.3	25081.0
332.	N2O+NO=NO2+N2	5.30E+05	2.2	46281.0
333.	CN+H2=HCN+H	3.00E+05	2.5	2237.0
334.	HCN+O=NCO+H	1.40E+04	2.6	4980.0
335.	HCN+O=NH+CO	3.50E+03	2.6	4980.0
336.	HCN+O=CN+OH	2.70E+09	1.6	29200.0
337.	HCN+OH=CN+H2O	3.90E+06	1.8	10300.0
338.	HCN+OH=HOCN+H	5.90E+04	2.4	12500.0
339.	HCN+OH=HNCO+H	2.00E-03	4.0	1000.0
340.	HCN+OH=NH2+CO	7.80E-04	4.0	4000.0
341.	HCN+CN=C2N2+H	1.50E+07	1.7	1530.0
342.	CN+O=CO+N	7.70E+13	0.0	0.0
343.	CN+OH=NCO+H	4.00E+13	0.0	0.0
344.	CN+O2=NCO+O	7.50E+12	0.0	-389.0
345.	CN+CO2=NCO+CO	3.70E+06	2.2	26884.0
346.	CN+NO2=NCO+NO	5.30E+15	-0.8	344.0
347.	CN+NO2=CO+N2O	4.90E+14	-0.8	344.0
348.	CN+NO2=N2+CO2	3.70E+14	-0.8	344.0
349.	CN+HNO=HCN+NO	1.80E+13	0.0	0.0
350.	CN+HONO=HCN+NO2	1.20E+13	0.0	0.0
351.	CN+N2O=NCN+NO	3.90E+03	2.6	3696.0
352.	CN+HNCO=HCN+NCO	1.50E+13	0.0	0.0
353.	CN+NCO=NCN+CO	1.80E+13	0.0	0.0
354.	HNCO=NH+CO	1.10E+16	0.0	86000.0
355.	HNCO+H=NH2+CO	2.20E+07	1.7	3800.0
356.	HNCO+O=HNO+CO	1.50E+08	1.6	44012.0
357.	HNCO+O=NH+CO2	9.80E+07	1.4	8524.0
358.	HNCO+O=NCO+OH	2.20E+06	2.1	11425.0

359.	$\text{HNCO} + \text{OH} = \text{NCO} + \text{H}_2\text{O}$	6.40E+05	2.0	2563.0
360.	$\text{HNCO} + \text{HO}_2 = \text{NCO} + \text{H}_2\text{O}_2$	3.00E+11	0.0	22000.0
361.	$\text{HNCO} + \text{O}_2 = \text{HNO} + \text{CO}_2$	1.00E+12	0.0	35000.0
362.	$\text{HNCO} + \text{NH}_2 = \text{NH}_3 + \text{NCO}$	5.00E+12	0.0	6200.0
363.	$\text{HNCO} + \text{NH} = \text{NH}_2 + \text{NCO}$	3.00E+13	0.0	23700.0
364.	$\text{HOCN} + \text{H} = \text{NCO} + \text{H}_2$	2.00E+07	2.0	2000.0
365.	$\text{HOCN} + \text{O} = \text{NCO} + \text{OH}$	1.50E+04	2.6	4000.0
366.	$\text{HOCN} + \text{OH} = \text{NCO} + \text{H}_2\text{O}$	6.40E+05	2.0	2563.0
367.	$\text{HCNO} + \text{H} = \text{HCN} + \text{OH}$	1.00E+14	0.0	12000.0
368.	$\text{HCNO} + \text{O} = \text{HCO} + \text{NO}$	2.00E+14	0.0	0.0
369.	$\text{HCNO} + \text{OH} = \text{CH}_2\text{O} + \text{NO}$	4.00E+13	0.0	0.0
370.	$\text{NCO} + \text{M} = \text{N} + \text{CO} + \text{M}$	3.10E+16	-0.5	48000.0
371.	$\text{NCO} + \text{H} = \text{NH} + \text{CO}$	5.00E+13	0.0	0.0
372.	$\text{NCO} + \text{O} = \text{NO} + \text{CO}$	4.70E+13	0.0	0.0
373.	$\text{NCO} + \text{OH} = \text{NO} + \text{HCO}$	5.00E+12	0.0	15000.0
374.	$\text{NCO} + \text{O}_2 = \text{NO} + \text{CO}_2$	2.00E+12	0.0	20000.0
375.	$\text{NCO} + \text{H}_2 = \text{HNCO} + \text{H}$	7.60E+02	3.0	4000.0
376.	$\text{NCO} + \text{HCO} = \text{HNCO} + \text{CO}$	3.60E+13	0.0	0.0
377.	$\text{NCO} + \text{NO} = \text{N}_2\text{O} + \text{CO}$	6.20E+17	-1.7	763.0
378.	$\text{NCO} + \text{NO} = \text{N}_2 + \text{CO}_2$	7.80E+17	-1.7	763.0
379.	$\text{NCO} + \text{NO}_2 = \text{CO} + \text{NO} + \text{NO}$	2.50E+11	0.0	-707.0
380.	$\text{NCO} + \text{NO}_2 = \text{CO}_2 + \text{N}_2\text{O}$	3.00E+12	0.0	-707.0
381.	$\text{NCO} + \text{HNO} = \text{HNCO} + \text{NO}$	1.80E+13	0.0	0.0
382.	$\text{NCO} + \text{HONO} = \text{HNCO} + \text{NO}_2$	3.60E+12	0.0	0.0
383.	$\text{NCO} + \text{N} = \text{N}_2 + \text{CO}$	2.00E+13	0.0	0.0
384.	$\text{NCO} + \text{NCO} = \text{N}_2 + \text{CO} + \text{CO}$	1.80E+13	0.0	0.0
385.	$\text{C}_2\text{N}_2 + \text{O} = \text{NCO} + \text{CN}$	4.60E+12	0.0	8880.0
386.	$\text{C}_2\text{N}_2 + \text{OH} = \text{HOCN} + \text{CN}$	1.90E+11	0.0	2900.0
387.	$\text{NCN} + \text{O} = \text{CN} + \text{NO}$	1.00E+14	0.0	0.0
388.	$\text{NCN} + \text{OH} = \text{HCN} + \text{NO}$	5.00E+13	0.0	0.0
389.	$\text{NCN} + \text{H} = \text{HCN} + \text{N}$	1.00E+14	0.0	0.0
390.	$\text{NCN} + \text{O}_2 = \text{NO} + \text{NCO}$	1.00E+13	0.0	0.0
391.	$\text{H} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{HCN} + \text{CH}_3$	4.00E+07	2.0	2000.0
392.	$\text{H} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_2\text{CN} + \text{H}_2$	3.00E+07	2.0	1000.0
393.	$\text{O} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{NCO} + \text{CH}_3$	1.50E+04	2.6	4980.0
394.	$\text{OH} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_2\text{CN} + \text{H}_2\text{O}$	2.00E+07	2.0	2000.0
395.	$\text{CH}_2\text{CN} + \text{O} = \text{CH}_2\text{O} + \text{CN}$	1.00E+14	0.0	0.0
396.	$\text{CN} + \text{CH}_2\text{OH} = \text{CH}_2\text{CN} + \text{OH}$	5.00E+13	0.0	0.0
397.	$\text{H}_2\text{CN} + \text{M} = \text{HCN} + \text{H} + \text{M}$	3.00E+14	0.0	22000.0
398.	$\text{CO} + \text{NO}_2 = \text{CO}_2 + \text{NO}$	9.00E+13	0.0	33779.0
399.	$\text{CO} + \text{N}_2\text{O} = \text{N}_2 + \text{CO}_2$	3.20E+11	0.0	20237.0
400.	$\text{CO}_2 + \text{N} = \text{NO} + \text{CO}$	1.90E+11	0.0	3400.0
401.	$\text{CH}_2\text{O} + \text{NCO} = \text{HNCO} + \text{HCO}$	6.00E+12	0.0	0.0
402.	$\text{CH}_2\text{O} + \text{NO}_2 = \text{HCO} + \text{HONO}$	8.00E+02	2.8	13730.0
403.	$\text{HCO} + \text{NO} = \text{HNO} + \text{CO}$	7.20E+12	0.0	0.0
404.	$\text{HCO} + \text{NO}_2 = \text{CO} + \text{HONO}$	1.20E+23	-3.3	2355.0
405.	$\text{HCO} + \text{NO}_2 = \text{H} + \text{CO}_2 + \text{NO}$	8.40E+15	-0.8	1930.0
406.	$\text{HCO} + \text{HNO} = \text{CH}_2\text{O} + \text{NO}$	6.00E+11	0.0	2000.0
407.	$\text{CH}_4 + \text{CN} = \text{CH}_3 + \text{HCN}$	6.20E+04	2.6	-437.0
408.	$\text{NCO} + \text{CH}_4 = \text{CH}_3 + \text{HNCO}$	9.80E+12	0.0	8120.0
409.	$\text{CH}_3 + \text{NO} = \text{HCN} + \text{H}_2\text{O}$	1.50E-01	3.5	3950.0
410.	$\text{CH}_3 + \text{NO} = \text{H}_2\text{CN} + \text{OH}$	1.50E-01	3.5	3950.0
411.	$\text{CH}_3 + \text{N} = \text{H}_2\text{CN} + \text{H}$	7.10E+13	0.0	0.0
412.	$\text{CH}_3 + \text{CN} = \text{CH}_2\text{CN} + \text{H}$	1.00E+14	0.0	0.0
413.	$\text{CH}_3 + \text{HOCN} = \text{CH}_3\text{CN} + \text{OH}$	5.00E+12	0.0	2000.0
414.	$\text{CH}_2 + \text{NO} = \text{HCN} + \text{OH}$	2.20E+12	0.0	-378.0
415.	$\text{CH}_2 + \text{NO} = \text{HCNO} + \text{H}$	1.30E+12	0.0	-378.0

416.	CH ₂ +NO ₂ =CH ₂ O+NO	5.90E+13	0.0	0.0
417.	CH ₂ +N=HCN+H	5.00E+13	0.0	0.0
418.	CH ₂ +N ₂ =HCN+NH	1.00E+13	0.0	74000.0
419.	H ₂ CN+N=N ₂ +CH ₂	2.00E+13	0.0	0.0
420.	CH ₂ (S)+NO=HCN+OH	2.00E+13	0.0	0.0
421.	CH ₂ (S)+NO=CH ₂ +NO	1.00E+14	0.0	0.0
422.	CH ₂ (S)+HCN=CH ₃ +CN	5.00E+13	0.0	0.0
423.	CH+NO ₂ =HCO+NO	1.00E+14	0.0	0.0
424.	CH+NO=HCN+O	4.80E+13	0.0	0.0
425.	CH+NO=HCO+N	3.40E+13	0.0	0.0
426.	CH+NO=NCO+H	1.90E+13	0.0	0.0
427.	CH+N=CN+H	1.30E+13	0.0	0.0
428.	CH+N ₂ =HCN+N	3.70E+07	1.4	20723.0
429.	CH+N ₂ O=HCN+NO	1.90E+13	0.0	-511.0
430.	C+NO=CN+O	2.00E+13	0.0	0.0
431.	C+NO=CO+N	2.80E+13	0.0	0.0
432.	C+N ₂ =CN+N	6.30E+13	0.0	46019.0
433.	C+N ₂ O=CN+NO	5.10E+12	0.0	0.0
434.	C ₂ H ₆ +CN=C ₂ H ₅ +HCN	1.20E+05	2.8	-1788.0
435.	C ₂ H ₆ +NCO=C ₂ H ₅ +HNCO	1.50E-09	6.9	-2910.0
436.	C ₂ H ₄ +CN=C ₂ H ₃ +HCN	5.90E+14	-0.2	0.0
437.	C ₂ H ₃ +NO=C ₂ H ₂ +HNO	1.00E+12	0.0	1000.0
438.	C ₂ H ₃ +N=HCN+CH ₂	2.00E+13	0.0	0.0
439.	C ₂ H ₂ +NCO=HCCO+HCN	1.40E+12	0.0	1815.0
440.	C ₂ H+NO=CN+HCO	2.10E+13	0.0	0.0
441.	CH ₂ CO+CN=HCCO+HCN	2.00E+13	0.0	0.0
442.	HCCO+NO=HCNO+CO	7.20E+12	0.0	0.0
443.	HCCO+NO=HCN+CO ₂	1.60E+13	0.0	0.0
444.	HCCO+NO ₂ =HCNO+CO ₂	1.60E+13	0.0	0.0
445.	HCCO+N=HCN+CO	5.00E+13	0.0	0.0
446.	C ₂ H ₅ OH(+M)=CH ₂ OH+CH ₃ (+M)	5.90E+23	-1.7	91163.0
Low	pressure	limit:	0.29000E+86	-0.18900E+02 0.10991E+06
TROE	centering:	0.50000E+00	0.20000E+03	0.89000E+03 0.46000E+04
H ₂ O	Enhanced	by	5.000E+00	
H ₂	Enhanced	by	2.000E+00	
CO	Enhanced	by	2.000E+00	
CO ₂	Enhanced	by	3.000E+00	
447.	C ₂ H ₅ OH(+M)=C ₂ H ₅ +OH(+M)	1.20E+23	-1.5	96005.0
Low	pressure	limit:	0.32000E+86	-0.18800E+02 0.11493E+06
TROE	centering:	0.50000E+00	0.30000E+03	0.90000E+03 0.50000E+04
H ₂ O	Enhanced	by	5.000E+00	
H ₂	Enhanced	by	2.000E+00	
CO	Enhanced	by	2.000E+00	
CO ₂	Enhanced	by	3.000E+00	
448.	C ₂ H ₅ OH(+M)=C ₂ H ₄ +H ₂ O(+M)	2.80E+13	0.1	66136.0
Low	pressure	limit:	0.26000E+84	-0.18800E+02 0.86452E+05
TROE	centering:	0.70000E+00	0.35000E+03	0.80000E+03 0.38000E+04
H ₂ O	Enhanced	by	5.000E+00	
449.	C ₂ H ₅ OH(+M)=CH ₃ HCO+H ₂ (+M)	7.20E+11	0.1	91007.0
Low	pressure	limit:	0.45000E+88	-0.19400E+02 0.11559E+06
TROE	centering:	0.90000E+00	0.90000E+03	0.11000E+04 0.35000E+04
H ₂ O	Enhanced	by	5.000E+00	
450.	C ₂ H ₅ OH+OH=C ₂ H ₄ OH+H ₂ O	1.70E+11	0.3	600.0
451.	C ₂ H ₅ OH+OH=CH ₃ CHOH+H ₂ O	4.60E+11	0.1	0.0
452.	C ₂ H ₅ OH+OH=CH ₃ CH ₂ O+H ₂ O	7.50E+11	0.3	1634.0
453.	C ₂ H ₅ OH+H=C ₂ H ₄ OH+H ₂	1.20E+07	1.8	5098.0
454.	C ₂ H ₅ OH+H=CH ₃ CHOH+H ₂	2.60E+07	1.6	2827.0

455.	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{H} = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	1.50E+07	1.6	3038.0
456.	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{O} = \text{C}_2\text{H}_4\text{OH} + \text{OH}$	9.40E+07	1.7	5459.0
457.	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{O} = \text{CH}_3\text{CHOH} + \text{OH}$	1.90E+07	1.9	1824.0
458.	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{O} = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	1.60E+07	2.0	4448.0
459.	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{CH}_3 = \text{C}_2\text{H}_4\text{OH} + \text{CH}_4$	2.20E+02	3.2	9622.0
460.	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{CH}_3 = \text{CH}_3\text{CHOH} + \text{CH}_4$	7.30E+02	3.0	7948.0
461.	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{CH}_3 = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_4$	1.40E+02	3.0	7649.0
462.	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{C}_2\text{H}_4\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2$	1.20E+04	2.5	15750.0
463.	$\text{C}_2\text{H}_4\text{OH} + \text{O}_2 = \text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	6.00E+10	0.0	24500.0
464.	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{CH}_3\text{CHOH} + \text{H}_2\text{O}_2$	8.20E+03	2.5	10750.0
465.	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}_2$	2.50E+12	0.0	24000.0
466.	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O} + \text{M} = \text{CH}_3\text{HCO} + \text{H} + \text{M}$	1.20E+35	-5.9	25274.0
467.	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O} + \text{M} = \text{CH}_3 + \text{CH}_2\text{O} + \text{M}$	1.30E+38	-7.0	23800.0
468.	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O} + \text{CO} = \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CO}_2$	4.70E+02	3.2	5380.0
469.	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O} + \text{O}_2 = \text{CH}_3\text{HCO} + \text{HO}_2$	4.00E+10	0.0	1100.0
470.	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O} + \text{H} = \text{CH}_3 + \text{CH}_2\text{OH}$	3.00E+13	0.0	0.0
471.	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O} + \text{H} = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O}$	3.00E+13	0.0	0.0
472.	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} = \text{CH}_3\text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$	1.00E+13	0.0	0.0
473.	$\text{CH}_3\text{CHOH} + \text{O}_2 = \text{CH}_3\text{HCO} + \text{HO}_2$	4.80E+14	0.0	5017.0
Declared duplicate reaction...				
474.	$\text{CH}_3\text{CHOH} + \text{O}_2 = \text{CH}_3\text{HCO} + \text{HO}_2$	8.40E+15	-1.2	0.0
Declared duplicate reaction...				
475.	$\text{CH}_3\text{CHOH} + \text{O} = \text{CH}_3\text{HCO} + \text{OH}$	1.00E+14	0.0	0.0
476.	$\text{CH}_3\text{CHOH} + \text{H} = \text{CH}_3 + \text{CH}_2\text{OH}$	3.00E+13	0.0	0.0
477.	$\text{CH}_3\text{CHOH} + \text{H} = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O}$	3.00E+13	0.0	0.0
478.	$\text{CH}_3\text{CHOH} + \text{HO}_2 = \text{CH}_3\text{HCO} + \text{OH} + \text{OH}$	4.00E+13	0.0	0.0
479.	$\text{CH}_3\text{CHOH} + \text{OH} = \text{CH}_3\text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$	5.00E+12	0.0	0.0
480.	$\text{CH}_3\text{CHOH} + \text{M} = \text{CH}_3\text{HCO} + \text{H} + \text{M}$	1.00E+14	0.0	25000.0
481.	$\text{HCO} + \text{HCO} = \text{CO} + \text{CH}_2\text{O}$	3.00E+13	0.0	0.0
482.	$\text{CH}_3\text{OH} (+\text{M}) = \text{CH}_2\text{OH} + \text{H} (+\text{M})$	2.70E+16	-0.1	98940.0
Low pressure limit: 0.23400E+41 -0.63300E+01 0.10310E+06				
TROE centering: 0.77300E+00 0.69300E+03 0.53330E+04				
483.	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{H} = \text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2$	1.70E+07	2.1	4868.0
484.	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{H} = \text{CH}_3\text{O} + \text{H}_2$	4.20E+06	2.1	4868.0
485.	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{OH} = \text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2\text{O}$	1.40E+06	2.0	-3510.0
486.	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{OH} = \text{CH}_3\text{O} + \text{H}_2\text{O}$	6.30E+06	2.0	6300.0
487.	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2$	1.00E+12	0.0	10040.0
488.	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{O}_2 = \text{CH}_2\text{OH} + \text{HO}_2$	2.10E+13	0.0	44900.0
489.	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{CH}_3 = \text{CH}_2\text{OH} + \text{CH}_4$	3.20E+01	3.2	7170.0
490.	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{CH}_3 = \text{CH}_3\text{O} + \text{CH}_4$	1.50E+01	3.1	6940.0
491.	$\text{CH}_3\text{O} + \text{HO}_2 = \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}_2$	3.00E+11	0.0	0.0
492.	$\text{CH}_3\text{O} + \text{CO} = \text{CH}_3 + \text{CO}_2$	1.60E+13	0.0	11800.0
493.	$\text{CH}_3\text{O} + \text{CH}_3 = \text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_4$	2.40E+13	0.0	0.0
494.	$\text{CH}_3\text{O} + \text{CH}_2\text{O} = \text{CH}_3\text{OH} + \text{HCO}$	1.00E+11	0.0	3000.0
495.	$\text{CH}_3\text{O} + \text{HCO} = \text{CH}_3\text{OH} + \text{CO}$	9.00E+13	0.0	0.0
496.	$\text{CH}_3\text{O} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH} + \text{CH}_2\text{OH}$	3.00E+11	0.0	4100.0
497.	$\text{CH}_3\text{O} + \text{CH}_3\text{O} = \text{CH}_3\text{OH} + \text{CH}_2\text{O}$	6.00E+13	0.0	0.0
498.	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{H} = \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	4.80E+13	0.0	0.0
499.	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{O} = \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	6.50E+13	0.0	-700.0
500.	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{O}_2 = \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$	1.60E+15	-1.0	0.0
Declared duplicate reaction...				
501.	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{O}_2 = \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$	7.20E+13	0.0	3577.0
Declared duplicate reaction...				
502.	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}_2$	3.60E+13	0.0	0.0
503.	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{HCO} = \text{CH}_3\text{OH} + \text{CO}$	1.20E+14	0.0	0.0
504.	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{HCO} = \text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_2\text{O}$	1.80E+14	0.0	0.0
505.	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{CH}_2\text{O} = \text{CH}_3\text{OH} + \text{HCO}$	5.50E+03	2.8	5860.0

506.	CH2OH+CH2OH=CH3OH+CH2O	5.00E+12	0.0	0.0
507.	CH2OH+CH3O=CH3OH+CH2O	2.40E+12	0.0	0.0
508.	HONO2+OH=NO3+H2O	1.00E+10	0.0	-1240.0
509.	H2NO+O2=HNO+HO2	3.00E+12	0.0	25000.0
510.	HONO+HONO=>NO+NO2+H2O	3.50E-01	3.6	12100.0
511.	H2NO+HO2=HNO+H2O2	2.90E+04	2.7	1600.0
512.	HNOH+H=NH2+OH	4.00E+13	0.0	0.0
513.	HNOH+H=HNO+H2	4.80E+08	1.5	378.0
514.	HNOH+O=HNO+OH	7.00E+13	0.0	0.0
Declared duplicate reaction...				
515.	HNOH+O=HNO+OH	3.30E+08	1.5	-358.0
Declared duplicate reaction...				
516.	HNOH+OH=HNO+H2O	2.40E+06	2.0	-1192.0
517.	HNOH+NH2=NH3+HNO	1.80E+06	1.9	-1152.0
518.	HNOH+HO2=HNO+H2O2	2.90E+04	2.7	-1600.0
519.	HNOH+M=HNO+H+M	2.00E+24	-2.8	58934.0
H2O Enhanced by 1.000E+01				
520.	HNOH+O2=HNO+HO2	3.00E+12	0.0	25000.0
521.	HNOH+NO2=HONO+HNO	6.00E+11	0.0	2000.0
522.	CH3OH+NO2=CH2OH+HONO	3.70E+11	0.0	21400.0
523.	CH2OH+NO=CH2O+HNO	1.30E+12	0.0	0.0
524.	CH2OH+NO2=CH2O+HONO	5.00E+12	0.0	0.0
525.	CH2OH+HNO=CH3OH+NO	3.00E+12	0.0	0.0
526.	CH3O+NO=CH2O+HNO	1.30E+14	-0.7	0.0
527.	CH3O+NO2=CH2O+HONO	6.00E+12	0.0	2285.0
528.	CH3O+HNO=CH3OH+NO	3.20E+13	0.0	0.0
529.	CH3+NO(+M)=CH3NO(+M)	9.00E+12	0.0	119.0
Low pressure limit: 0.32000E+24 -0.18700E+01 0.00000E+00				
H2O Enhanced by 1.000E+01				
N2 Enhanced by 1.500E+00				
530.	CH3+NO2=CH3O+NO	4.00E+13	-0.2	0.0
531.	CH3+HONO=CH4+NO2	1.00E+12	0.0	0.0
532.	CH3NO=HCN+H2O	3.00E+13	0.0	50000.0
533.	CH3+O2(+M)=CH3O2(+M)	7.80E+08	1.2	0.0
Low pressure limit: 0.58000E+26 -0.33000E+01 0.00000E+00				
534.	CH3O2+O=CH3O+O2	2.59E+13	0.0	0.0
535.	CH3O2+H=CH3O+OH	9.64E+13	0.0	0.0
536.	CH3O2+NO=CH3O+NO2	3.10E+12	0.0	-358.0
537.	CH3O2+CH3=CH3O+CH3O	3.24E+13	0.0	0.0
538.	CH2CO+H=C2H3O	5.40E+11	0.5	1820.0
539.	C2H3O+H=CH2CO+H2	1.00E+13	0.0	0.0
540.	C2H3O+O=CH2O+HCO	9.60E+06	1.8	220.0
541.	C2H3O+O=CH2CO+OH	1.00E+13	0.0	0.0
542.	C2H3O+OH=CH2CO+H2O	5.00E+12	0.0	0.0
543.	CH3+HCCO=C2H4+CO	5.00E+13	0.0	0.0
544.	CH3+C2H=C3H3+H	2.41E+13	0.0	0.0
545.	C2H2+CH2=C3H3+H	2.40E+13	0.0	6620.0
546.	C2H2+CH2*=C3H3+H	4.00E+13	0.0	0.0
547.	C2H2+CH3=AC3H4+H	5.72E+20	-2.4	31500.0
548.	C2H2+CH3=PC3H4+H	2.72E+18	-2.0	20200.0
549.	C2H2+C2H=n-C4H3	4.50E+37	-7.7	7100.0
550.	C2H2+C2H=i-C4H3	2.60E+44	-9.5	14650.0
551.	C2H2+C2H3=C4H4+H	2.00E+18	-1.7	10600.0
552.	C2H2+C2H3=n-C4H5	9.30E+38	-8.8	12000.0
553.	C2H2+C2H3=i-C4H5	1.60E+46	-11.0	18600.0
554.	C2H4+C2H=C4H4+H	1.20E+13	0.0	0.0
555.	C2H4+C2H3=C4H6+H	2.80E+21	-2.4	14720.0

556.	C2H2+HCCO=C3H3+CO	1.00E+11	0.0	3000.0	
557.	C2H3+H2O2=C2H4+HO2	1.21E+10	0.0	-596.0	
558.	C2H3+C2H3=C4H6	1.50E+42	-8.8	12483.0	
559.	C2H3+C2H3=i-C4H5+H	1.20E+22	-2.4	13654.0	
560.	C2H3+C2H3=n-C4H5+H	2.40E+20	-2.0	15361.0	
561.	C3H2+CH=C4H2+H	5.00E+13	0.0	0.0	
562.	C3H3+H(+M)=AC3H4(+M)	3.00E+13	0.0	0.0	
Low	pressure	limit:	0.14000E+32	-0.50000E+01	-0.60000E+04
TROE	centering:	0.50000E+00	0.20000E+04	0.10000E+02	0.10000E+05
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
H2O	Enhanced	by	6.000E+00		
CH4	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	1.500E+00		
CO2	Enhanced	by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00		
AR	Enhanced	by	7.000E-01		
563.	C3H3+H(+M)=PC3H4(+M)	3.00E+13	0.0	0.0	
Low	pressure	limit:	0.14000E+32	-0.50000E+01	-0.60000E+04
TROE	centering:	0.50000E+00	0.20000E+04	0.10000E+02	0.10000E+05
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
H2O	Enhanced	by	6.000E+00		
CH4	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	1.500E+00		
CO2	Enhanced	by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00		
AR	Enhanced	by	7.000E-01		
564.	C3H3+O=CH2O+C2H	2.00E+13	0.0	0.0	
565.	C3H3+OH=C3H2+H2O	2.00E+13	0.0	0.0	
566.	C3H3+OH=C2H3+HCO	4.00E+13	0.0	0.0	
567.	C3H3+O2=CH2CO+HCO	3.00E+10	0.0	2878.0	
568.	C3H3+HO2=AC3H4+O2	1.00E+12	0.0	0.0	
569.	C3H3+HO2=PC3H4+O2	1.00E+12	0.0	0.0	
570.	C3H3+HCO=AC3H4+CO	2.50E+13	0.0	0.0	
571.	C3H3+HCO=PC3H4+CO	2.50E+13	0.0	0.0	
572.	C3H3+CH=i-C4H3+H	5.00E+13	0.0	0.0	
573.	C3H3+CH2=C4H4+H	2.00E+13	0.0	0.0	
574.	i-C4H5+H=C3H3+CH3	2.00E+13	0.0	2000.0	
575.	C3H3+CH3(+M)=C4H612(+M)	1.50E+13	0.0	0.0	
Low	pressure	limit:	0.26000E+59	-0.11940E+02	0.97700E+04
TROE	centering:	0.17500E+00	0.13406E+04	0.60000E+05	0.97698E+04
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
H2O	Enhanced	by	6.000E+00		
CH4	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	1.500E+00		
CO2	Enhanced	by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00		
AR	Enhanced	by	7.000E-01		
576.	C3H3+C3H3=>A1	5.00E+12	0.0	0.0	
577.	AC3H4+H=C3H3+H2	5.75E+07	1.9	7530.0	
578.	AC3H4+O=CH2CO+CH2	2.00E+07	1.8	1000.0	
579.	AC3H4+OH=C3H3+H2O	5.30E+06	2.0	2000.0	
580.	AC3H4+C2H=C2H2+C3H3	1.00E+13	0.0	0.0	
581.	PC3H4+H=C3H3+H2	1.15E+08	1.9	7530.0	
582.	PC3H4+OH=C3H3+H2O	3.54E+06	2.1	870.0	
583.	PC3H4+C2H=C2H2+C3H3	1.00E+13	0.0	0.0	
584.	C4H+C2H2=C6H2+H	9.60E+13	0.0	0.0	
585.	C4H+O=C2H+C2O	5.00E+13	0.0	0.0	

586.	$C_4H+O_2=HCCO+C_2O$	5.00E+13	0.0	1500.0
587.	$C_4H_2+H=n-C_4H_3$	1.10E+42	-8.7	15300.0
588.	$C_4H_2+H=i-C_4H_3$	1.10E+30	-4.9	10800.0
589.	$C_4H_2+C_2H=C_6H_3$	4.50E+37	-7.7	7100.0
590.	$H_2C_4O+H=C_2H_2+HCCO$	5.00E+13	0.0	3000.0
591.	$H_2C_4O+OH=CH_2CO+HCCO$	1.00E+07	2.0	2000.0
592.	$H_2C_4O+O=CH_2CO+C_2O$	2.00E+07	1.9	200.0
593.	$n-C_4H_3=i-C_4H_3$	4.10E+43	-9.5	53000.0
594.	$n-C_4H_3+H=i-C_4H_3+H$	2.50E+20	-1.7	10800.0
595.	$n-C_4H_3+H=C_2H_2+C_2H_2$	6.30E+25	-3.3	10014.0
596.	$i-C_4H_3+H=C_2H_2+C_2H_2$	2.80E+23	-2.5	10780.0
597.	$n-C_4H_3+H=C_4H_4$	2.00E+47	-10.3	13070.0
598.	$i-C_4H_3+H=C_4H_4$	3.40E+43	-9.0	12120.0
599.	$n-C_4H_3+H=C_4H_2+H_2$	1.50E+13	0.0	0.0
600.	$i-C_4H_3+H=C_4H_2+H_2$	3.00E+13	0.0	0.0
601.	$n-C_4H_3+OH=C_4H_2+H_2O$	2.50E+12	0.0	0.0
602.	$i-C_4H_3+OH=C_4H_2+H_2O$	5.00E+12	0.0	0.0
603.	$i-C_4H_3+O_2=HCCO+CH_2CO$	7.86E+16	-1.8	0.0
604.	$n-C_4H_3+C_2H_2=l-C_6H_4+H$	2.50E+14	-0.6	10600.0
605.	$n-C_4H_3+C_2H_2=n-C_6H_5$	2.70E+36	-7.6	16200.0
606.	$n-C_4H_3+C_2H_2=A_1-$	9.60E+70	-17.8	31300.0
607.	$n-C_4H_3+C_2H_2=c-C_6H_4+H$	6.90E+46	-10.0	30100.0
608.	$C_4H_4+H=n-C_4H_5$	1.30E+51	-11.9	16500.0
609.	$C_4H_4+H=i-C_4H_5$	4.90E+51	-11.9	17700.0
610.	$C_4H_4+H=n-C_4H_3+H_2$	6.65E+05	2.5	12240.0
611.	$C_4H_4+H=i-C_4H_3+H_2$	3.33E+05	2.5	9240.0
612.	$C_4H_4+OH=n-C_4H_3+H_2O$	3.10E+06	2.0	3430.0
613.	$C_4H_4+OH=i-C_4H_3+H_2O$	1.55E+06	2.0	430.0
614.	$C_4H_4+O=PC_3H_4+CO$	3.00E+13	0.0	1808.0
615.	$C_4H_4+C_2H_3=l-C_6H_6+H$	2.80E+21	-2.4	14720.0
616.	$n-C_4H_5=i-C_4H_5$	1.50E+67	-16.9	59100.0
617.	$n-C_4H_5+H=i-C_4H_5+H$	3.10E+26	-3.4	17423.0
618.	$C_4H_6=i-C_4H_5+H$	5.70E+36	-6.3	112353.0
619.	$C_4H_6=n-C_4H_5+H$	5.30E+44	-8.6	123608.0
620.	$n-C_4H_5+H=C_4H_4+H_2$	1.50E+13	0.0	0.0
621.	$i-C_4H_5+H=C_4H_4+H_2$	3.00E+13	0.0	0.0
622.	$n-C_4H_5+OH=C_4H_4+H_2O$	2.50E+12	0.0	0.0
623.	$i-C_4H_5+OH=C_4H_4+H_2O$	5.00E+12	0.0	0.0
624.	$n-C_4H_5+O_2=>C_2H_4+CO+HCO$	4.16E+10	0.0	2500.0
625.	$i-C_4H_5+O_2=CH_2CO+C_2H_3O$	7.86E+16	-1.8	0.0
626.	$n-C_4H_5+C_2H_2=n-C_6H_7$	1.10E+14	-1.3	2900.0
627.	$n-C_4H_5+C_2H_2=c-C_6H_7$	5.00E+24	-5.5	4600.0
628.	$n-C_4H_5+C_2H_2=l-C_6H_6+H$	5.80E+08	1.0	10900.0
629.	$n-C_4H_5+C_2H_2=A_1+H$	1.60E+16	-1.3	5400.0
630.	$C_4H_6+H=n-C_4H_5+H_2$	1.33E+06	2.5	12240.0
631.	$C_4H_6+H=i-C_4H_5+H_2$	6.65E+05	2.5	9240.0
632.	$C_4H_6+OH=n-C_4H_5+H_2O$	6.20E+06	2.0	3430.0
633.	$C_4H_6+OH=i-C_4H_5+H_2O$	3.10E+06	2.0	430.0
634.	$C_4H_6+C_2H_3=C_6H_8+H$	2.80E+21	-2.4	14720.0
635.	$C_4H_6I_2+H=C_4H_6+H$	2.00E+13	0.0	4000.0
636.	$C_4H_6I_2+H=i-C_4H_5+H_2$	1.70E+05	2.5	2490.0
637.	$C_4H_6I_2+H=AC_3H_4+CH_3$	8.00E+13	0.0	1000.0
638.	$C_4H_6I_2+O=CH_2CO+C_2H_4$	1.20E+08	1.6	327.0
639.	$C_4H_6I_2+O=i-C_4H_5+OH$	1.80E+11	0.7	5880.0
640.	$C_4H_6I_2+OH=i-C_4H_5+H_2O$	3.10E+06	2.0	-298.0
641.	$C_5H_2+OH=>C_4H_2+H+CO$	2.00E+13	0.0	0.0
642.	$C_5H_2+CH=C_6H_2+H$	5.00E+13	0.0	0.0

643.	C5H2+O2=H2C4O+CO		1.00E+12	0.0	0.0
644.	C5H3+OH=C5H2+H2O		1.00E+13	0.0	0.0
645.	C5H3+CH=C6H2+H+H		5.00E+13	0.0	0.0
646.	C5H3+CH2=I-C6H4+H		5.00E+13	0.0	0.0
647.	C5H3+O2=H2C4O+HCO		1.00E+12	0.0	0.0
648.	C6H+H(+M)=C6H2(+M)		1.00E+17	-1.0	0.0
Low	pressure	limit:	0.37500E+34	-0.48000E+01	0.19000E+04
TROE	centering:	0.64640E+00	0.13200E+03	0.13150E+04	0.55660E+04
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
H2O	Enhanced	by	6.000E+00		
CH4	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	1.500E+00		
CO2	Enhanced	by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00		
AR	Enhanced	by	7.000E-01		
649.	C6H2+H=C6H3		1.10E+30	-4.9	10800.0
650.	C6H+O=C4H+C2O		5.00E+13	0.0	0.0
651.	C6H+H2=H+C6H2		4.90E+05	2.5	560.0
652.	C6H2+O=C5H2+CO		2.70E+13	0.0	1720.0
653.	C6H2+OH=>C2H+C2H2+C2O		6.60E+12	0.0	-410.0
654.	C6H2+OH=C6H+H2O		3.37E+07	2.0	14000.0
655.	C6H3+H=C4H2+C2H2		2.80E+23	-2.5	10780.0
656.	C6H3+H=I-C6H4		3.40E+43	-9.0	12120.0
657.	C6H3+H=C6H2+H2		3.00E+13	0.0	0.0
658.	C6H3+OH=C6H2+H2O		5.00E+12	0.0	0.0
659.	C6H3+O2=>CO+C3H2+HCCO		5.00E+11	0.0	0.0
660.	I-C6H4+H=n-C6H5		5.90E+39	-8.3	15600.0
661.	I-C6H4+H=A1-		1.70E+78	-19.7	31400.0
662.	I-C6H4+H=c-C6H4+H		1.40E+54	-11.7	34500.0
663.	I-C6H4+H=C6H3+H2		6.65E+06	2.5	9240.0
664.	I-C6H4+OH=C6H3+H2O		3.10E+06	2.0	430.0
665.	c-C6H4+H=A1-		2.40E+60	-13.7	29500.0
666.	n-C6H5=A1-		5.10E+54	-13.1	35700.0
667.	n-C6H5=c-C6H4+H		1.30E+59	-13.6	62000.0
668.	n-C6H5+H=i-C6H5+H		2.50E+20	-1.7	10800.0
669.	n-C6H5+H=C4H4+C2H2		6.30E+25	-3.3	10014.0
670.	i-C6H5+H=C4H4+C2H2		2.80E+23	-2.5	10780.0
671.	n-C6H5+H=I-C6H6		2.00E+47	-10.3	13070.0
672.	i-C6H5+H=I-C6H6		3.40E+43	-9.0	12120.0
673.	n-C6H5+H=I-C6H4+H2		1.50E+13	0.0	0.0
674.	i-C6H5+H=I-C6H4+H2		3.00E+13	0.0	0.0
675.	n-C6H5+OH=I-C6H4+H2O		2.50E+12	0.0	0.0
676.	i-C6H5+OH=I-C6H4+H2O		5.00E+12	0.0	0.0
677.	n-C6H5+O2=>C4H4+CO+HCO		4.16E+10	0.0	2500.0
678.	i-C6H5+O2=>CH2CO+CH2CO+C2H		7.86E+16	-1.8	0.0
679.	I-C6H6+H=n-C6H7		1.50E+16	-1.7	1600.0
680.	I-C6H6+H=c-C6H7		4.70E+27	-6.1	3800.0
681.	I-C6H6+H=A1+H		2.00E+18	-1.7	4500.0
682.	I-C6H6+H=n-C6H5+H2		6.65E+05	2.5	12240.0
683.	I-C6H6+H=i-C6H5+H2		3.33E+05	2.5	9240.0
684.	I-C6H6+OH=n-C6H5+H2O		6.20E+06	2.0	3430.0
685.	I-C6H6+OH=i-C6H5+H2O		3.10E+06	2.0	430.0
686.	n-C6H7=c-C6H7		1.20E+31	-8.0	8900.0
687.	n-C6H7=A1+H		3.20E+26	-5.0	15500.0
688.	n-C6H7+H=i-C6H7+H		2.40E+49	-10.7	15100.0
689.	i-C6H7+H=C6H8		1.80E+39	-7.6	11000.0
690.	n-C6H7+H=C6H8		5.60E+48	-10.5	14700.0

691.	n-C6H7+H=I-C6H6+H2		1.50E+13	0.0	0.0
692.	i-C6H7+H=I-C6H6+H2		3.00E+13	0.0	0.0
693.	n-C6H7+OH=I-C6H6+H2O		2.50E+12	0.0	0.0
694.	i-C6H7+OH=I-C6H6+H2O		5.00E+12	0.0	0.0
695.	n-C6H7+O2=>C4H6+CO+HCO		4.16E+10	0.0	2500.0
696.	i-C6H7+O2=>CH2CO+CH2CO+C2H3		7.86E+16	-1.8	0.0
697.	C6H8+H=n-C6H7+H2		1.33E+06	2.5	12240.0
698.	C6H8+H=i-C6H7+H2		6.65E+05	2.5	9240.0
699.	C6H8+OH=n-C6H7+H2O		6.20E+06	2.0	3430.0
700.	C6H8+OH=i-C6H7+H2O		3.10E+06	2.0	430.0
701.	A1+H=c-C6H7		1.40E+51	-11.9	16100.0
702.	A1+H=A1-+H2		2.50E+14	0.0	16000.0
703.	A1+OH=A1-+H2O		1.60E+08	1.4	1450.0
704.	A1-+H(+M)=A1(+M)		1.00E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit:	0.66000E+76	-0.16300E+02	0.70000E+04
TROE	centering:	0.10000E+01	0.10000E+00	0.58490E+03	0.61130E+04
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
H2O	Enhanced	by	6.000E+00		
CH4	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	1.500E+00		
CO2	Enhanced	by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00		
705.	n-C4H3+C4H2=A1C2H-		9.60E+70	-17.8	31300.0
706.	A1+C2H=A1C2H+H		5.00E+13	0.0	0.0
707.	A1-+C2H2=n-A1C2H2		7.00E+38	-8.0	16400.0
708.	A1-+C2H2=A1C2H+H		3.30E+33	-5.7	25500.0
709.	A1C2H+H=n-A1C2H2		3.00E+43	-9.2	15272.0
710.	A1C2H+H=i-A1C2H2		3.00E+43	-9.2	15272.0
711.	A1C2H+H=A1C2H*+H2		2.50E+14	0.0	16000.0
712.	A1C2H+H=A1C2H-+H2		2.50E+14	0.0	16000.0
713.	A1C2H+OH=A1C2H*+H2O		1.60E+08	1.4	1450.0
714.	A1C2H+OH=A1C2H-+H2O		1.60E+08	1.4	1450.0
715.	A1C2H-+H(+M)=A1C2H(+M)		1.00E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit:	0.66000E+76	-0.16300E+02	0.70000E+04
TROE	centering:	0.10000E+01	0.10000E+00	0.58490E+03	0.61130E+04
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
H2O	Enhanced	by	6.000E+00		
CH4	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	1.500E+00		
CO2	Enhanced	by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00		
716.	A1C2H*+H(+M)=A1C2H(+M)		1.00E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit:	0.66000E+76	-0.16300E+02	0.70000E+04
TROE	centering:	0.10000E+01	0.10000E+00	0.58490E+03	0.61130E+04
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
H2O	Enhanced	by	6.000E+00		
CH4	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	1.500E+00		
CO2	Enhanced	by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00		
717.	A1+C2H3=A1C2H3+H		7.90E+11	0.0	6400.0
718.	A1-+C2H4=A1C2H3+H		2.51E+12	0.0	6190.0
719.	A1-+C2H3=A1C2H3		1.20E+27	-4.2	7235.0
720.	A1-+C2H3=i-A1C2H2+H		8.50E-02	4.7	18424.0
721.	A1-+C2H3=n-A1C2H2+H		9.40E+00	4.1	23234.0
722.	A1C2H3=i-A1C2H2+H		5.30E+27	-3.6	109332.0
723.	A1C2H3=n-A1C2H2+H		1.10E+32	-4.8	119483.0

724.	A1C2H3+H=A1C2H3*+H2	2.50E+14	0.0	16000.0
725.	A1C2H3+OH=A1C2H3*+H2O	1.60E+08	1.4	1450.0
726.	A1C2H3*+H(+M)=A1C2H3(+M)	1.00E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit: 0.66000E+76	-0.16300E+02	0.70000E+04
TROE	centering:	0.10000E+01	0.10000E+00	0.58490E+03 0.61130E+04
H2	Enhanced	by 2.000E+00		
H2O	Enhanced	by 6.000E+00		
CH4	Enhanced	by 2.000E+00		
CO	Enhanced	by 1.500E+00		
CO2	Enhanced	by 2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by 3.000E+00		
727.	A1C2H3+H=n-A1C2H2+H2	6.65E+06	2.5	12240.0
728.	A1C2H3+H=i-A1C2H2+H2	3.33E+05	2.5	9240.0
729.	A1C2H3+OH=n-A1C2H2+H2O	3.10E+06	2.0	3430.0
730.	A1C2H3+OH=i-A1C2H2+H2O	1.55E+06	2.0	430.0
731.	n-A1C2H2+H=A1C2H+H2	1.50E+13	0.0	0.0
732.	i-A1C2H2+H=A1C2H+H2	3.00E+13	0.0	0.0
733.	n-A1C2H2+H=i-A1C2H2+H	9.90E+04	3.4	22040.0
734.	n-A1C2H2+OH=A1C2H+H2O	2.50E+12	0.0	0.0
735.	i-A1C2H2+OH=A1C2H+H2O	5.00E+12	0.0	0.0
736.	A1C2H*+C2H2=A2-1	2.20E+62	-14.6	33100.0
737.	A1C2H*+C2H2=A1C2H)2+H	1.80E+19	-1.7	18800.0
738.	A1C2H*+C2H2=naphthyne+H	5.70E+64	-14.4	57000.0
739.	A1C2H)2+H=A2-1	1.40E+64	-14.6	29900.0
740.	A1C2H)2+H=naphthyne+H	1.90E+73	-16.3	60900.0
741.	naphthyne+H=A2-1	4.90E+52	-12.4	33000.0
742.	A1C2H+C2H=A1C2H)2+H	5.00E+13	0.0	0.0
743.	A1C2H3*+C2H2=A2+H	1.60E+16	-1.3	6600.0
744.	n-A1C2H2+C2H2=A2+H	1.60E+16	-1.3	5400.0
745.	A2+H=A2-1+H2	2.50E+14	0.0	16000.0
746.	A2+H=A2-2+H2	2.50E+14	0.0	16000.0
747.	A2+OH=A2-1+H2O	1.60E+08	1.4	1450.0
748.	A2+OH=A2-2+H2O	1.60E+08	1.4	1450.0
749.	A2-1+H(+M)=A2(+M)	1.00E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit: 0.38000+128	-0.31434E+02	0.18676E+05
TROE	centering:	0.20000E+00	0.12280E+03	0.47840E+03 0.54119E+04
H2	Enhanced	by 2.000E+00		
H2O	Enhanced	by 6.000E+00		
CH4	Enhanced	by 2.000E+00		
CO	Enhanced	by 1.500E+00		
CO2	Enhanced	by 2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by 3.000E+00		
750.	A2-2+H(+M)=A2(+M)	1.00E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit: 0.95000+130	-0.32132E+02	0.18782E+05
TROE	centering:	0.87000E+00	0.49270E+03	0.11790E+03 0.56520E+04
H2	Enhanced	by 2.000E+00		
H2O	Enhanced	by 6.000E+00		
CH4	Enhanced	by 2.000E+00		
CO	Enhanced	by 1.500E+00		
CO2	Enhanced	by 2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by 3.000E+00		
751.	A2-1+H=A2-2+H	2.40E+24	-1.8	45281.0
752.	A2+C2H=A2C2HA+H	5.00E+13	0.0	0.0
753.	A2+C2H=A2C2HB+H	5.00E+13	0.0	0.0
754.	A2-1+C2H2=A2C2H2	1.70E+43	-9.1	21100.0
755.	A2-1+C2H2=A2C2HA+H	1.30E+24	-3.1	22600.0
756.	A2C2HA+H=A2C2H2	5.90E+46	-10.0	19100.0

757.	A2C2H2+H=A2C2HA+H2	1.50E+13	0.0	0.0
758.	A2C2H2+OH=A2C2HA+H2O	2.50E+12	0.0	0.0
759.	A2C2HA+H=A2C2HA*+H2	2.50E+14	0.0	16000.0
760.	A2C2HB+H=A2C2HB*+H2	2.50E+14	0.0	16000.0
761.	A2C2HA+OH=A2C2HA*+H2O	1.60E+08	1.4	1450.0
762.	A2C2HB+OH=A2C2HB*+H2O	1.60E+08	1.4	1450.0
763.	A2C2HB*+H(+M)=A2C2HB(+M)	1.00E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit:	0.38000+128	-0.31434E+02 0.18676E+05
TROE	centering:	0.20000E+00	0.12280E+03	0.47840E+03 0.54119E+04
H2	Enhanced	by	2.000E+00	
H2O	Enhanced	by	6.000E+00	
CH4	Enhanced	by	2.000E+00	
CO	Enhanced	by	1.500E+00	
CO2	Enhanced	by	2.000E+00	
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00	
764.	A2C2HA*+H(+M)=A2C2HA(+M)	1.00E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit:	0.95000+130	-0.32132E+02 0.18782E+05
TROE	centering:	0.87000E+00	0.49270E+03	0.11790E+03 0.56520E+04
H2	Enhanced	by	2.000E+00	
H2O	Enhanced	by	6.000E+00	
CH4	Enhanced	by	2.000E+00	
CO	Enhanced	by	1.500E+00	
CO2	Enhanced	by	2.000E+00	
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00	
765.	A2C2HB*+C2H2=A3-1	1.10E+62	-14.6	33100.0
766.	A2C2HB*+C2H2=A2C2H)2+H	1.80E+19	-1.7	18800.0
767.	A2C2H)2+H=A3-1	6.90E+63	-14.6	29900.0
768.	A2C2HA*+C2H2=A3-4	1.10E+62	-14.6	33100.0
769.	A2C2HA*+C2H2=A2C2H)2+H	1.80E+19	-1.7	18800.0
770.	A2C2H)2+H=A3-4	6.90E+63	-14.6	29900.0
771.	A2C2HA+C2H=A2C2H)2+H	5.00E+13	0.0	0.0
772.	A2C2HB+C2H=A2C2H)2+H	5.00E+13	0.0	0.0
773.	A3+H=A3-1+H2	2.50E+14	0.0	16000.0
774.	A3+H=A3-4+H2	2.50E+14	0.0	16000.0
775.	A3+OH=A3-1+H2O	1.60E+08	1.4	1450.0
776.	A3+OH=A3-4+H2O	1.60E+08	1.4	1450.0
777.	A3-1+H(+M)=A3(+M)	1.00E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit:	0.40000+149	-0.37505E+02 0.20551E+05
TROE	centering:	0.10000E+01	0.53630E+03	0.14490E+03 0.56328E+04
H2	Enhanced	by	2.000E+00	
H2O	Enhanced	by	6.000E+00	
CH4	Enhanced	by	2.000E+00	
CO	Enhanced	by	1.500E+00	
CO2	Enhanced	by	2.000E+00	
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00	
778.	A3-4+H(+M)=A3(+M)	1.00E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit:	0.21000+140	-0.34803E+02 0.18378E+05
TROE	centering:	0.10000E-02	0.17140E+03	0.17140E+03 0.49928E+04
H2	Enhanced	by	2.000E+00	
H2O	Enhanced	by	6.000E+00	
CH4	Enhanced	by	2.000E+00	
CO	Enhanced	by	1.500E+00	
CO2	Enhanced	by	2.000E+00	
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00	
779.	A3-1+H=A3-4+H	3.80E+40	-6.3	61782.0
780.	A1-+C4H4=A2+H	3.30E+33	-5.7	25500.0
781.	A2-1+C4H4=A3+H	3.30E+33	-5.7	25500.0

782.	A2-2+C4H4=A3+H		3.30E+33	-5.7	25500.0
783.	A2R5+H=A2R5-+H2		2.50E+14	0.0	16000.0
784.	A2R5+OH=A2R5-+H2O		1.60E+08	1.4	1450.0
785.	A2R5-+H(+M)=A2R5(+M)		1.00E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit:	0.66000E+76	-0.16300E+02	0.70000E+04
TROE	centering:		0.10000E+01	0.10000E+00	0.58490E+03
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
H2O	Enhanced	by	6.000E+00		
CH4	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	1.500E+00		
CO2	Enhanced	by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00		
786.	A2-1+C2H2=A2R5+H		9.70E+30	-5.3	21600.0
787.	A2C2HA+H=A2R5+H		4.60E+37	-7.0	23100.0
788.	A2C2H2=A2R5+H		1.56E+46	-10.3	41300.0
789.	A1C2H*+A1=A3+H		1.10E+23	-2.9	15890.0
790.	A1-+A1C2H=A3+H		1.10E+23	-2.9	15890.0
791.	A3+C2H=A3C2H+H		5.00E+13	0.0	0.0
792.	A3-4+C2H2=A3C2H2		8.00E+61	-14.5	34800.0
793.	A3-4+C2H2=A3C2H+H		1.20E+26	-3.4	30200.0
794.	A3-4+C2H2=A4+H		6.60E+24	-3.4	17800.0
795.	A3C2H+H=A3C2H2		1.90E+64	-15.1	29300.0
796.	A3C2H+H=A4+H		9.00E+38	-7.4	20700.0
797.	A3C2H2=A4+H		2.00E+63	-15.3	43200.0
798.	A4+H=A4-+H2		2.50E+14	0.0	16000.0
799.	A4+OH=A4-+H2O		1.60E+08	1.4	1450.0
800.	A4-+H=A4		1.00E+14	0.0	0.0
801.	A1+A1-=P2+H		1.10E+23	-2.9	15890.0
802.	A1+A1-=P2-H		3.70E+32	-6.7	9870.0
803.	P2-H=P2+H		3.80E+37	-8.0	27880.0
804.	A1-+A1-=P2		2.00E+19	-2.0	2900.0
805.	A1-+A1-=P2-+H		2.30E-01	4.6	28950.0
806.	P2=P2-+H		1.10E+25	-2.7	114270.0
807.	P2+H=P2-+H2		2.50E+14	0.0	16000.0
808.	P2+OH=P2-+H2O		1.60E+08	1.4	1450.0
809.	P2-+C2H2=A3+H		4.60E+06	2.0	7300.0
810.	A1+O=C6H5O+H		2.20E+13	0.0	4530.0
811.	A1+OH=C6H5OH+H		1.30E+13	0.0	10600.0
812.	A1-+O2=C6H5O+O		2.10E+12	0.0	7470.0
813.	C6H5O=CO+C5H5		2.50E+11	0.0	43900.0
814.	C6H5O+H=CO+C5H6		3.00E+13	0.0	0.0
815.	C6H5O+O=HCO+2C2H2+CO		3.00E+13	0.0	0.0
816.	C6H5O+H(+M)=C6H5OH(+M)		2.50E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit:	0.10000E+95	-0.21840E+02	0.13880E+05
TROE	centering:		0.43000E-01	0.30420E+03	0.60000E+05
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
H2O	Enhanced	by	6.000E+00		
CH4	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	1.500E+00		
CO2	Enhanced	by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00		
817.	C6H5OH+H=C6H5O+H2		1.15E+14	0.0	12400.0
818.	C6H5OH+O=C6H5O+OH		2.80E+13	0.0	7352.0
819.	C6H5OH+OH=C6H5O+H2O		6.00E+12	0.0	0.0
820.	C5H5+H(+M)=C5H6(+M)		1.00E+14	0.0	0.0
Low	pressure	limit:	0.44000E+81	-0.18280E+02	0.12994E+05
TROE	centering:		0.68000E-01	0.40070E+03	0.41358E+04

H2	Enhanced	by	2.000E+00		
H2O	Enhanced	by	6.000E+00		
CH4	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	1.500E+00		
CO2	Enhanced	by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced	by	3.000E+00		
821.	C5H5+O=n-C4H5+CO		1.00E+14	0.0	0.0
822.	C5H5+OH=C5H4OH+H		5.00E+12	0.0	0.0
823.	C5H5+HO2=C5H5O+OH		3.00E+13	0.0	0.0
824.	C5H6+H=C5H5+H2		2.20E+08	1.8	3000.0
825.	C5H6+O=C5H5+OH		1.80E+13	0.0	3080.0
826.	C5H6+OH=C5H5+H2O		3.43E+09	1.2	-447.0
827.	C5H5O=n-C4H5+CO		2.50E+11	0.0	43900.0
828.	C5H5O+H=CH2O+2C2H2		3.00E+13	0.0	0.0
829.	C5H5O+O=CO2+n-C4H5		3.00E+13	0.0	0.0
830.	C5H4OH=C5H4O+H		2.10E+13	0.0	48000.0
831.	C5H4OH+H=CH2O+2C2H2		3.00E+13	0.0	0.0
832.	C5H4OH+O=CO2+n-C4H5		3.00E+13	0.0	0.0
833.	C5H4O=CO+C2H2+C2H2		1.00E+15	0.0	78000.0
834.	C5H4O+O=CO2+2C2H2		3.00E+13	0.0	0.0
835.	A1C2H+OH=>A1-+CH2CO		2.18E-04	4.5	-1000.0
836.	A1C2H)2+OH=>A1C2H-+CH2CO		2.18E-04	4.5	-1000.0
837.	A2C2HA+OH=>A2-1+CH2CO		2.18E-04	4.5	-1000.0
838.	A2C2HB+OH=>A2-2+CH2CO		2.18E-04	4.5	-1000.0
839.	A3C2H+OH=>A3-4+CH2CO		2.18E-04	4.5	-1000.0
840.	A1C2H+OH=>C6H5O+C2H2		1.30E+13	0.0	10600.0
841.	A1C2H3+OH=>C6H5O+C2H4		1.30E+13	0.0	10600.0
842.	A1C2H)2+OH=>C4H2+C6H5O		1.30E+13	0.0	10600.0
843.	A2+OH=>A1C2H+CH2CO+H		1.30E+13	0.0	10600.0
844.	A2C2HA+OH=>A1C2H+H2C4O+H		1.30E+13	0.0	10600.0
845.	A2C2HB+OH=>A1C2H+H2C4O+H		1.30E+13	0.0	10600.0
846.	A3+OH=>A2C2HB+CH2CO+H		6.50E+12	0.0	10600.0
847.	A3+OH=>A2C2HA+CH2CO+H		6.50E+12	0.0	10600.0
848.	A3C2H+OH=>A2C2HA+H2C4O+H		6.50E+12	0.0	10600.0
849.	A3C2H+OH=>A2C2HB+H2C4O+H		6.50E+12	0.0	10600.0
850.	A4+OH=>A3-4+CH2CO		1.30E+13	0.0	10600.0
851.	A1C2H+O=>HCCO+A1-		2.04E+07	2.0	1900.0
852.	A1C2H)2+O=>HCCO+A1C2H-		2.04E+07	2.0	1900.0
853.	A1C2H3+O=>A1-+CH3+CO		1.92E+07	1.8	220.0
854.	A2C2HA+O=>HCCO+A2-1		2.04E+07	2.0	1900.0
855.	A2C2HB+O=>HCCO+A2-2		2.04E+07	2.0	1900.0
856.	A1C2H+O=>C2H+C6H5O		2.20E+13	0.0	4530.0
857.	A1C2H3+O=>C2H3+C6H5O		2.20E+13	0.0	4530.0
858.	A1C2H)2+O=>C6H5O+C4H		2.20E+13	0.0	4530.0
859.	A2+O=>CH2CO+A1C2H		2.20E+13	0.0	4530.0
860.	A2C2HA+O=>A1C2H)2+CH2CO		2.20E+13	0.0	4530.0
861.	A2C2HB+O=>A1C2H)2+CH2CO		2.20E+13	0.0	4530.0
862.	A3+O=>A2C2HA+CH2CO		1.10E+13	0.0	4530.0
863.	A3+O=>A2C2HB+CH2CO		1.10E+13	0.0	4530.0
864.	A3C2H+O=>A2C2HA+H2C4O		1.10E+13	0.0	4530.0
865.	A3C2H+O=>A2C2HB+H2C4O		1.10E+13	0.0	4530.0
866.	A4+O=>A3-4+HCCO		2.20E+13	0.0	4530.0
867.	A1C2H*+O2=>I-C6H4+CO+HCO		2.10E+12	0.0	7470.0
868.	A1C2H-+O2=>I-C6H4+CO+HCO		2.10E+12	0.0	7470.0
869.	A1C2H3*+O2=>I-C6H6+CO+HCO		2.10E+12	0.0	7470.0
870.	n-A1C2H2+O2=>A1-+CO+CH2O		1.00E+11	0.0	0.0
871.	A2-1+O2=>A1C2H+HCO+CO		2.10E+12	0.0	7470.0

872.	A2-2+O2=>A1C2H+HCO+CO	2.10E+12	0.0	7470.0
873.	A2C2HA*+O2=>A2-1+CO+CO	2.10E+12	0.0	7470.0
874.	A2C2HB*+O2=>A2-2+CO+CO	2.10E+12	0.0	7470.0
875.	A3-4+O2=>A2C2HB+HCO+CO	2.10E+12	0.0	7470.0
876.	A3-1+O2=>A2C2HA+HCO+CO	2.10E+12	0.0	7470.0
877.	A4-+O2=>A3-4+CO+CO	2.10E+12	0.0	7470.0

El **modelo cinético B** es un mecanismo de reacción compuesto por:

- Mecanismo cinético propuesto por Skjøth-Rasmussen y cols. (2004), para la oxidación de C₂H₂ con O₂, actualizado por Alzueta y cols. (2008) Este modelo mejora las reacciones vinculadas a la química del C₂H₂. Es un mecanismo de 773 reacciones y 159 especies.
- Modelo cinético propuesto por Alzueta y Hernández (2002), para la descomposición de etanol en etileno, acetileno, CO y CO₂. Es un mecanismo de 500 reacciones y 73 especies.
- Mecanismo cinético propuesto por Glarborg y cols. (1998), para la interacción entre hidrocarburos gaseosos y NO. Es un mecanismo de 447 reacciones elementales y 68 especies.

El modelo resultante es la unión de los respectivos modelos cinéticos, suprimiendo las especies y reacciones químicas repetidas.

El modelo B se compone de las siguientes especies químicas, detallando su peso molecular (PM), su temperatura mínima y máxima y la composición de sus elementos.

ESPECIE	PM	T		ELEMENTOS					
		Min	Max	H	O	C	N	Ar	
1. CO	28.01055	300.0	5000.0	0	1	1	0	0	
2. CO2	44.00995	300.0	5000.0	0	2	1	0	0	
3. H2	2.01594	300.0	5000.0	2	0	0	0	0	
4. C2H4	28.05418	300.0	5000.0	4	0	2	0	0	
5. CH4	16.04303	300.0	5000.0	4	0	1	0	0	
6. C2H6	30.07012	300.0	4000.0	6	0	2	0	0	
7. C2H2	26.03824	300.0	5000.0	2	0	2	0	0	
8. CH2O	30.02649	300.0	5000.0	2	1	1	0	0	
9. H	1.00797	300.0	5000.0	1	0	0	0	0	
10. CH	13.01912	300.0	5000.0	1	0	1	0	0	
11. CH2	14.02709	300.0	4000.0	2	0	1	0	0	
12. CH2(S)	14.02709	300.0	4000.0	2	0	1	0	0	
13. CH3	15.03506	300.0	5000.0	3	0	1	0	0	
14. O	15.99940	300.0	5000.0	0	1	0	0	0	
15. OH	17.00737	300.0	5000.0	1	1	0	0	0	
16. H2O	18.01534	300.0	5000.0	2	1	0	0	0	
17. C2	24.02230	300.0	5000.0	0	0	2	0	0	
18. C2H	25.03027	300.0	4000.0	1	0	2	0	0	
19. C2H3	27.04621	300.0	4000.0	3	0	2	0	0	
20. HCO	29.01852	300.0	5000.0	1	1	1	0	0	

21. N2	28.01340	300.0	5000.0	0	0	0	2	0
22. C2H5	29.06215	300.0	4000.0	5	0	2	0	0
23. CH2OH	31.03446	250.0	4000.0	3	1	1	0	0
24. CH3O	31.03446	300.0	3000.0	3	1	1	0	0
25. O2	31.99880	300.0	5000.0	0	2	0	0	0
26. CH3OH	32.04243	300.0	5000.0	4	1	1	0	0
27. HO2	33.00677	300.0	5000.0	1	2	0	0	0
28. H2O2	34.01474	300.0	5000.0	2	2	0	0	0
29. C3H2	38.04939	150.0	4000.0	2	0	3	0	0
30. H2CCCH	39.05736	300.0	4000.0	3	0	3	0	0
31. C2H2OH	43.04561	300.0	3000.0	3	1	2	0	0
32. AR	39.94800	300.0	5000.0	0	0	0	0	1
33. C2O	40.02170	300.0	5000.0	0	1	2	0	0
34. HCCO	41.02967	300.0	4000.0	1	1	2	0	0
35. CH2CHCH2	41.07330	300.0	4000.0	5	0	3	0	0
36. CH3CCH2	41.07330	300.0	4000.0	5	0	3	0	0
37. CH3CHCH	41.07330	300.0	4000.0	5	0	3	0	0
38. CH2CO	42.03764	300.0	5000.0	2	1	2	0	0
39. HCCOH	42.03764	300.0	4000.0	2	1	2	0	0
40. OCHCHO	58.03704	300.0	3000.0	2	2	2	0	0
41. CH2HCO	43.04561	300.0	5000.0	3	1	2	0	0
42. C2H5OH	46.06952	200.0	6000.0	6	1	2	0	0
43. C2H4OH	45.06155	200.0	4000.0	5	1	2	0	0
44. CH3CH2O	45.06155	300.0	4000.0	5	1	2	0	0
45. CH3HCO	44.05358	300.0	5000.0	4	1	2	0	0
46. CH3CO	43.04561	300.0	5000.0	3	1	2	0	0
47. C2H5CHO	58.08067	273.1	5000.0	6	1	3	0	0
48. C2H5CO	57.07270	298.1	5000.0	5	1	3	0	0
49. HCOO	45.01792	300.0	5000.0	1	2	1	0	0
50. NO	30.00610	300.0	5000.0	0	1	0	1	0
51. HCN	27.02582	300.0	4000.0	1	0	1	1	0
52. C	12.01115	300.0	5000.0	0	0	1	0	0
53. NO2	46.00550	300.0	5000.0	0	2	0	1	0
54. NO3	62.00490	300.0	5000.0	0	3	0	1	0
55. HNO	31.01407	300.0	5000.0	1	1	0	1	0
56. HONO	47.01347	300.0	5000.0	1	2	0	1	0
57. H2NO	32.02204	300.0	4000.0	2	1	0	1	0
58. HNOH	32.02204	300.0	4000.0	2	1	0	1	0
59. NH3	17.03061	300.0	5000.0	3	0	0	1	0
60. NH2	16.02264	300.0	5000.0	2	0	0	1	0
61. NH	15.01467	300.0	5000.0	1	0	0	1	0
62. N	14.00670	300.0	5000.0	0	0	0	1	0
63. N2H2	30.02934	300.0	5000.0	2	0	0	2	0
64. NNH	29.02137	250.0	4000.0	1	0	0	2	0
65. N2O	44.01280	300.0	5000.0	0	1	0	2	0
66. CN	26.01785	300.0	5000.0	0	0	1	1	0
67. NCO	42.01725	300.0	4000.0	0	1	1	1	0
68. HNCO	43.02522	300.0	4000.0	1	1	1	1	0
69. HOCN	43.02522	300.0	4000.0	1	1	1	1	0
70. HCNO	43.02522	250.0	4000.0	1	1	1	1	0
71. C2N2	52.03570	300.0	5000.0	0	0	2	2	0
72. NCN	40.02455	300.0	4000.0	0	0	1	2	0

73. CH3CN	41.05291	300.0	3000.0	3	0	2	1	0
74. CH2CN	40.04494	300.0	3000.0	2	0	2	1	0
75. H2CN	28.03379	300.0	4000.0	2	0	1	1	0
76. CH3NO	45.04116	300.0	4000.0	3	1	1	1	0
77. HONO2	63.01287	300.0	4000.0	1	3	0	1	0
78. CH3CHOH	45.06155	300.0	4000.0	5	1	2	0	0
79. CH3O2	47.03386	200.0	6000.0	3	2	1	0	0

El **modelo B** utiliza las ecuaciones expuestas a continuación.

REACCIONES		A	B	Ea	
1.	C2H3+O2=C2H2+HO2	1.34E+06	1.6	-383.5	
2.	C2H4+O2=CH2HCO+OH	2.00E+08	1.5	39000.0	
3.	C2H4+O2=C2H3+HO2	4.20E+13	0.0	57630.0	
4.	C2H2+O=HCCO+H	1.40E+07	2.0	1900.0	
5.	H+C2H2(+M)=C2H3(+M)	3.64E+10	1.1	2640.0	
Low	pressurelimit:	0.22540E+41	-0.72690E+01	0.65770E+04	
TROE	centering:	0.50000E+00	0.67500E+03	0.67500E+03	
H2	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO2	Enhanced by	3.000E+00			
H2O	Enhanced by	5.000E+00			
6.	CH3+CH3(+M)=C2H6(+M)	2.10E+16	-1.0	620.0	
Low	pressurelimit:	0.12600E+51	-0.96700E+01	0.62200E+04	
TROE	centering:	0.53250E+00	0.15100E+03	0.10380E+04	0.49700E+04
N2	Enhanced by	1.430E+00			
H2O	Enhanced by	8.590E+00			
H2	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO2	Enhanced by	3.000E+00			
7.	CH3+H(+M)=CH4(+M)	1.30E+16	-0.6	383.0	
Low	pressurelimit:	0.17500E+34	-0.47600E+01	0.24400E+04	
TROE	centering:	0.78300E+00	0.74000E+02	0.29410E+04	0.69640E+04
H2	Enhanced by	2.860E+00			
H2O	Enhanced by	8.570E+00			
CH4	Enhanced by	2.860E+00			
CO	Enhanced by	2.140E+00			
CO2	Enhanced by	2.860E+00			
C2H6	Enhanced by	4.290E+00			
N2	Enhanced by	1.430E+00			
8.	CH4+O2=CH3+HO2	7.90E+13	0.0	56000.0	
9.	CH4+H=CH3+H2	1.30E+04	3.0	8040.0	
10.	CH4+OH=CH3+H2O	1.60E+06	2.1	2460.0	
11.	CH4+O=CH3+OH	1.02E+09	1.5	8604.0	
12.	CH4+HO2=CH3+H2O2	1.80E+11	0.0	18700.0	
13.	CH3+HO2=CH3O+OH	8.00E+12	0.0	0.0	
14.	CH3+O=CH2O+H	8.00E+13	0.0	0.0	
15.	CH3+O2=CH3O+O	2.87E+13	0.0	30481.0	
16.	CH3+O2=CH2O+OH	1.85E+12	0.0	20315.0	
17.	CH2OH+H=CH3+OH	1.00E+14	0.0	0.0	
18.	CH3O+H=CH3+OH	1.00E+14	0.0	0.0	
19.	CH3+OH=CH2+H2O	7.50E+06	2.0	5000.0	
20.	CH3+HCO=CH4+CO	1.20E+14	0.0	0.0	

21.	CH3+H=CH2+H2	9.00E+13	0.0	15100.0	
22.	CH3+OH(+M)=CH3OH(+M)	6.30E+13	0.0	0.0	
Low	pressurelimit:	0.18900E+39	-0.63000E+01	0.31000E+04	
TROE	centering:	0.21050E+00	0.83500E+02	0.53980E+04	0.83700E+04
N2	Enhanced	by	1.430E+00		
H2O	Enhanced	by	8.580E+00		
CO2	Enhanced	by	3.000E+00		
CO	Enhanced	by	2.000E+00		
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
23.	CH3OH+O=CH2OH+OH	3.88E+05	2.5	3080.0	
24.	CH2O+H(+M)=CH3O(+M)	5.40E+11	0.5	2600.0	
Low	pressurelimit:	0.15400E+31	-0.48000E+01	0.55600E+04	
TROE	centering:	0.75800E+00	0.94000E+02	0.15550E+04	0.42000E+04
N2	Enhanced	by	1.430E+00		
H2O	Enhanced	by	8.580E+00		
CO	Enhanced	by	2.000E+00		
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
CO2	Enhanced	by	3.000E+00		
25.	H+CH2O(+M)=CH2OH(+M)	5.40E+11	0.5	3600.0	
Low	pressurelimit:	0.91000E+32	-0.48200E+01	0.65300E+04	
TROE	centering:	0.71870E+00	0.10300E+03	0.12910E+04	0.41600E+04
N2	Enhanced	by	1.430E+00		
H2O	Enhanced	by	8.580E+00		
CO	Enhanced	by	2.000E+00		
CO2	Enhanced	by	3.000E+00		
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
26.	CH3O+H=CH2O+H2	2.00E+13	0.0	0.0	
27.	CH3O+OH=CH2O+H2O	1.00E+13	0.0	0.0	
28.	CH2OH+OH=CH2O+H2O	1.00E+13	0.0	0.0	
29.	CH3O+O=CH2O+OH	1.00E+13	0.0	0.0	
30.	CH3O+O2=CH2O+HO2	6.30E+10	0.0	2600.0	
31.	CH2OH+O2=CH2O+HO2	1.57E+15	-1.0	0.0	
Declared	duplicate	reaction...			
32.	CH2OH+O2=CH2O+HO2	7.23E+13	0.0	3577.0	
Declared	duplicate	reaction...			
33.	CH2+H=CH+H2	1.00E+18	-1.6	0.0	
34.	CH2+OH=CH+H2O	1.13E+07	2.0	3000.0	
35.	CH2+OH=CH2O+H	2.50E+13	0.0	0.0	
36.	CH+O2=HCO+O	3.30E+13	0.0	0.0	
37.	CH+O=CO+H	5.70E+13	0.0	0.0	
38.	CH+OH=HCO+H	3.00E+13	0.0	0.0	
39.	CH+CO2=HCO+CO	3.40E+12	0.0	690.0	
40.	CH+H2O=CH2O+H	5.72E+12	0.0	-751.0	
41.	CH+CH2O=CH2CO+H	9.46E+13	0.0	-515.0	
42.	CH+C2H2=C3H2+H	1.00E+14	0.0	0.0	
43.	CH+CH2=C2H2+H	4.00E+13	0.0	0.0	
44.	CH+CH3=C2H3+H	3.00E+13	0.0	0.0	
45.	CH+CH4=C2H4+H	6.00E+13	0.0	0.0	
46.	CH2+CO2=CH2O+CO	1.10E+11	0.0	1000.0	
47.	CH2+O=CO+H+H	5.00E+13	0.0	0.0	
48.	CH2+O=CO+H2	3.00E+13	0.0	0.0	
49.	CH2+O2=CO+H2O	2.20E+22	-3.3	2867.0	
50.	CH2+O2=CO2+H+H	3.29E+21	-3.3	2867.0	
51.	CH2+O2=CH2O+O	3.29E+21	-3.3	2867.0	
52.	CH2+O2=CO2+H2	2.63E+21	-3.3	2867.0	
53.	CH2+O2=CO+OH+H	1.64E+21	-3.3	2867.0	
54.	CH2+CH2=C2H2+H+H	4.00E+13	0.0	0.0	

55.	CH2+HCCO=C2H3+CO	3.00E+13	0.0	0.0	
56.	CH2+C2H2=H2CCCH+H	1.20E+13	0.0	6600.0	
57.	CH2+CH4=CH3+CH3	4.30E+12	0.0	10030.0	
58.	CH2O+OH=HCO+H2O	3.43E+09	1.2	-447.0	
59.	CH2O+H=HCO+H2	1.30E+08	1.6	2166.0	
60.	CH2O+M=HCO+H+M	3.31E+16	0.0	81000.0	
H2	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO2	Enhanced by	3.000E+00			
H2O	Enhanced by	5.000E+00			
61.	CH2O+O=HCO+OH	1.80E+13	0.0	3080.0	
62.	CH2O+CH3=HCO+CH4	7.80E-08	6.1	1967.0	
63.	CH2O+HO2=HCO+H2O2	3.00E+12	0.0	13000.0	
64.	CH2O+O2=HCO+HO2	6.00E+13	0.0	40660.0	
65.	HCO+OH=H2O+CO	1.00E+14	0.0	0.0	
66.	HCO+M=H+CO+M	3.48E+17	-1.0	17010.0	
CO	Enhanced by	1.870E+00			
H2	Enhanced by	1.870E+00			
CH4	Enhanced by	2.810E+00			
CO2	Enhanced by	3.000E+00			
H2O	Enhanced by	5.000E+00			
67.	HCO+H=CO+H2	1.19E+13	0.3	0.0	
68.	HCO+O=CO+OH	3.00E+13	0.0	0.0	
69.	HCO+O=CO2+H	3.00E+13	0.0	0.0	
70.	HCO+O2=HO2+CO	7.58E+12	0.0	406.0	
71.	CO+O+M=CO2+M	6.17E+14	0.0	3000.0	
H2	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO2	Enhanced by	3.000E+00			
H2O	Enhanced by	1.600E+01			
72.	CO+OH=CO2+H	1.51E+07	1.3	-758.0	
73.	CO+O2=CO2+O	2.53E+12	0.0	47688.0	
74.	HO2+CO=CO2+OH	1.57E+05	2.2	17900.0	
75.	C2H4+H=C2H3+H2	5.42E+14	0.0	14902.0	
76.	C2H4+O=CH3+HCO	8.10E+06	1.9	180.0	
77.	C2H4+O=CH2CO+H2	6.80E+05	1.9	180.0	
78.	C2H4+OH=C2H3+H2O	2.02E+13	0.0	5955.0	
79.	C2H4+CH3=C2H3+CH4	5.00E+11	0.0	15000.0	
80.	CH2+CH3=C2H4+H	4.00E+13	0.0	0.0	
81.	C2H4+H(+M)=C2H5(+M)	1.08E+12	0.5	1822.0	
Low	pressurelimit:	0.11120E+35	-0.50000E+01	0.44480E+04	
TROE	centering:	0.50000E+00	0.95000E+02	0.95000E+02	0.20000E+03
H2	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO2	Enhanced by	3.000E+00			
H2O	Enhanced by	5.000E+00			
82.	C2H3+H=C2H2+H2	4.00E+13	0.0	0.0	
83.	C2H3+O=CH2CO+H	3.00E+13	0.0	0.0	
84.	C2H3+O2=CH2O+HCO	4.58E+16	-1.4	1015.0	
85.	C2H3+OH=C2H2+H2O	2.00E+13	0.0	0.0	
86.	C2H3+C2H=C2H2+C2H2	3.00E+13	0.0	0.0	
87.	C2H3+CH3=C2H2+CH4	2.10E+13	0.0	0.0	
88.	C2H3+CH2O=C2H4+HCO	5.40E+03	2.8	5860.0	
89.	C2H3+HCO=C2H4+CO	9.00E+13	0.0	0.0	
90.	C2H3+C2H3=H2CCCH+CH3	1.80E+13	0.0	0.0	0.0
91.	C2H3+C2H3=C2H4+C2H2	6.30E+13	0.0	0.0	
92.	C2H3+CH=CH2+C2H2	5.00E+13	0.0	0.0	

93.	OH+C2H2=C2H+H2O	3.37E+07	2.0	14000.0	
94.	OH+C2H2=HCCOH+H	5.04E+05	2.3	13500.0	
95.	OH+C2H2=CH2CO+H	2.18E-04	4.5	-1000.0	
96.	OH+C2H2=CH3+CO	4.83E-04	4.0	-2000.0	
97.	HCCOH+H=HCCO+H2	3.00E+07	2.0	1000.0	
98.	HCCOH+OH=HCCO+H2O	1.00E+07	2.0	1000.0	
99.	HCCOH+O=HCCO+OH	2.00E+07	3.0	1900.0	
100.	C2H2+O=C2H+OH	3.16E+15	-0.6	15000.0	
101.	C2H2OH+O=OCHCHO+H	5.00E+13	0.0	0.0	
102.	C2H2OH+O2=OCHCHO+OH	1.00E+12	0.0	5000.0	
103.	OCHCHO+M=HCO+HCO+M	1.00E+17	0.0	25000.0	
104.	OCHCHO+H=CH2O+HCO	3.00E+13	0.0	0.0	
105.	CH2CO+O=CO2+CH2	1.75E+12	0.0	1350.0	
106.	CH2CO+H=CH3+CO	5.93E+06	2.0	1300.0	
107.	CH2CO+H=HCCO+H2	3.00E+07	2.0	10000.0	
108.	CH2CO+O=HCCO+OH	2.00E+07	2.0	10000.0	
109.	CH2CO+OH=HCCO+H2O	1.00E+07	2.0	3000.0	
110.	CH2CO+OH=CH2OH+CO	7.20E+12	0.0	0.0	
111.	CH2CO+OH=CH3+CO2	3.00E+12	0.0	0.0	
112.	CH2+CO(+M)=CH2CO(+M)	8.10E+11	0.5	4510.0	
Low	pressurelimit:	0.18800E+34	-0.51100E+01	0.70950E+04	
TROE	centering:	0.59070E+00	0.27500E+03	0.12260E+04	0.51850E+04
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	2.000E+00		
CO2	Enhanced	by	3.000E+00		
H2O	Enhanced	by	8.580E+00		
N2	Enhanced	by	1.430E+00		
113.	C2H+O2=CO+CO+H	2.52E+13	0.0	0.0	
114.	C2H+CH4=CH3+C2H2	7.23E+12	0.0	976.0	
115.	CH+CO(+M)=HCCO(+M)	5.00E+13	0.0	0.0	
Low	pressurelimit:	0.18800E+29	-0.37400E+01	0.19360E+04	
TROE	centering:	0.57570E+00	0.23700E+03	0.16520E+04	0.50690E+04
N2	Enhanced	by	1.430E+00		
H2O	Enhanced	by	8.580E+00		
CO	Enhanced	by	2.000E+00		
CO2	Enhanced	by	3.000E+00		
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
116.	HCCO+C2H2=H2CCCH+CO	1.00E+11	0.0	3000.0	
117.	H+HCCO=CH2(S)+CO	1.00E+14	0.0	0.0	
118.	O+HCCO=H+CO+CO	1.00E+14	0.0	0.0	
119.	HCCO+O2=CO2+CO+H	1.40E+07	1.7	1000.0	
120.	HCCO+O2=CO+CO+OH	2.88E+07	1.7	1000.0	
121.	CH+HCCO=C2H2+CO	5.00E+13	0.0	0.0	
122.	HCCO+HCCO=C2H2+CO+CO	1.00E+13	0.0	0.0	0.0
123.	HCCO+OH=C2O+H2O	6.00E+13	0.0	0.0	
124.	C2O+H=CH+CO	1.00E+13	0.0	0.0	
125.	C2O+O=CO+CO	5.00E+13	0.0	0.0	
126.	C2O+OH=CO+CO+H	2.00E+13	0.0	0.0	
127.	C2O+O2=CO+CO+O	2.00E+13	0.0	0.0	
128.	C2H+O=CH+CO	5.00E+13	0.0	0.0	
129.	C2H+OH=HCCO+H	2.00E+13	0.0	0.0	
130.	C2H+OH=C2+H2O	4.00E+07	2.0	8000.0	
131.	C2+H2=C2H+H	4.00E+05	2.4	1000.0	
132.	C2+O2=CO+CO	5.00E+13	0.0	0.0	
133.	C2+OH=C2O+H	5.00E+13	0.0	0.0	
134.	C2H2+O2=HCO+HCO	2.00E+08	1.5	30100.0	
135.	C2H2+M=C2H+H+M	9.08E+30	-3.7	127138.0	

H2	Enhanced	by	2.000E+00			
CO	Enhanced	by	2.000E+00			
CO2	Enhanced	by	3.000E+00			
H2O	Enhanced	by	5.000E+00			
136.	C2H4+M=C2H2+H2+M		3.50E+16	0.0	71500.0	
N2	Enhanced	by	1.500E+00			
H2O	Enhanced	by	1.000E+01			
137.	C2H3+H(+M)=C2H4(+M)		6.10E+12	0.3	280.0	
Low	pressurelimit:		0.98000E+30	-0.38600E+01	0.33200E+04	
TROE	centering:		0.78200E+00	0.20750E+03	0.26630E+04	0.60950E+04
H2	Enhanced	by	2.850E+00			
CO	Enhanced	by	2.100E+00			
CO2	Enhanced	by	2.850E+00			
H2O	Enhanced	by	7.140E+00			
CH4	Enhanced	by	2.850E+00			
C2H6	Enhanced	by	4.290E+00			
N2	Enhanced	by	1.430E+00			
138.	O+OH=O2+H		2.00E+14	-0.4	0.0	
139.	O+H2=OH+H		5.00E+04	2.7	6290.0	
140.	OH+H2=H2O+H		2.10E+08	1.5	3450.0	
141.	2OH=O+H2O		4.30E+03	2.7	-2486.0	
142.	H+H+M=H2+M		1.00E+18	-1.0	0.0	
H2O	Enhanced	by	0.000E+00			
143.	H+H+H2O=H2+H2O		6.00E+19	-1.3	0.0	
144.	H+O+M=OH+M		6.20E+16	-0.6	0.0	
H2O	Enhanced	by	5.000E+00			
145.	H+OH+M=H2O+M		1.60E+22	-2.0	0.0	
H2O	Enhanced	by	5.000E+00			
146.	O+O+M=O2+M		1.90E+13	0.0	-1788.0	
H2O	Enhanced	by	5.000E+00			
147.	H+O2+M=HO2+M		8.00E+17	-0.8	0.0	
H2O	Enhanced	by	2.000E+01			
N2	Enhanced	by	0.000E+00			
CO2	Enhanced	by	4.000E+00			
148.	H+O2+N2=HO2+N2		6.70E+19	-1.4	0.0	
149.	H+HO2=H2+O2		4.30E+13	0.0	1411.0	
150.	H+HO2=2OH		1.70E+14	0.0	874.0	
151.	H+HO2=O+H2O		3.00E+13	0.0	1721.0	
152.	O+HO2=O2+OH		3.30E+13	0.0	0.0	
153.	OH+HO2=H2O+O2		1.90E+16	-1.0	0.0	
154.	HO2+HO2=H2O2+O2		4.20E+14	0.0	11982.0	
Declared	duplicate	reaction...				
155.	HO2+HO2=H2O2+O2		1.30E+11	0.0	-1629.0	
Declared	duplicate	reaction...				
156.	H2O2+M=OH+OH+M		1.30E+17	0.0	45500.0	
H2O	Enhanced	by	5.000E+00			
157.	H2O2+H=HO2+H2		1.70E+12	0.0	3755.0	
158.	H2O2+H=OH+H2O		1.00E+13	0.0	3576.0	
159.	H2O2+O=OH+HO2		6.60E+11	0.0	3974.0	
160.	H2O2+OH=H2O+HO2		7.80E+12	0.0	1330.0	
Declared	duplicate	reaction...				
161.	H2O2+OH=H2O+HO2		5.80E+14	0.0	9560.0	
Declared	duplicate	reaction...				
162.	CH2(S)+H2=CH3+H		7.20E+13	0.0	0.0	
163.	CH2(S)+H2O=CH3+OH		3.00E+15	-0.6	0.0	
164.	CH2(S)+N2=CH2+N2		1.30E+13	0.0	430.0	
165.	CH2(S)+AR=CH2+AR		1.50E+13	0.0	884.0	

166.	CH2(S)+H=CH2+H	2.00E+14	0.0	0.0	
167.	CH2(S)+H2O=CH2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0	
168.	CH2(S)+H=CH+H2	3.00E+13	0.0	0.0	
169.	CH2(S)+O=CO+H+H	3.00E+13	0.0	0.0	
170.	CH2(S)+OH=CH2O+H	3.00E+13	0.0	0.0	
171.	CH2(S)+O2=CO+OH+H	7.00E+13	0.0	0.0	
172.	CH2(S)+CO2=CH2O+CO	3.00E+12	0.0	0.0	
173.	CH2(S)+CH4=CH3+CH3	4.30E+13	0.0	0.0	
174.	CH2(S)+CH3=C2H4+H	2.00E+13	0.0	0.0	
175.	CH2(S)+CH2CO=C2H4+CO	1.60E+14	0.0	0.0	
176.	CH2(S)+C2H6=CH3+C2H5	1.20E+14	0.0	0.0	
177.	CH+H=C+H2	1.50E+14	0.0	0.0	
178.	CH+OH=C+H2O	4.00E+07	2.0	3000.0	
179.	C+OH=CO+H	5.00E+13	0.0	0.0	
180.	C+O2=CO+O	2.00E+13	0.0	0.0	
181.	C+CH3=C2H2+H	5.00E+13	0.0	0.0	
182.	C+CH2=C2H+H	5.00E+13	0.0	0.0	
183.	CH2OH+O2=CH2O+HO2	1.60E+15	-1.0	0.0	
Declared duplicate reaction...					
184.	CH2OH+O2=CH2O+HO2	7.20E+13	0.0	3577.0	
Declared duplicate reaction...					
185.	C2H6+H=C2H5+H2	5.40E+02	3.5	5210.0	
186.	C2H6+O=C2H5+OH	3.00E+07	2.0	5115.0	
187.	C2H6+OH=C2H5+H2O	7.20E+06	2.0	864.0	
188.	C2H6+HO2=C2H5+H2O2	1.30E+13	0.0	20460.0	
189.	C2H6+O2=C2H5+HO2	5.00E+13	0.0	55000.0	
190.	C2H6+CH3=C2H5+CH4	5.50E-01	4.0	8300.0	
191.	C2H5+H(+M)=C2H6(+M)	5.20E+17	-1.0	1580.0	
Low	pressurelimit:	0.20000E+42	-0.70800E+01	0.66850E+04	
TROE	centering:	0.84220E+00	0.12500E+03	0.22190E+04	0.68820E+04
N2	Enhanced by	1.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
192.	C2H5+H=CH3+CH3	4.90E+12	0.3	0.0	
193.	C2H5+O=CH3+CH2O	4.20E+13	0.0	0.0	
194.	C2H5+O=CH3HCO+H	5.30E+13	0.0	0.0	
195.	C2H5+O=C2H4+OH	3.00E+13	0.0	0.0	
196.	C2H5+OH=C2H4+H2O	2.40E+13	0.0	0.0	
197.	C2H5+O2=C2H4+HO2	1.00E+10	0.0	-2190.0	
198.	C2H5+CH2O=C2H6+HCO	5.50E+03	2.8	5860.0	
199.	C2H5+HCO=C2H6+CO	1.20E+14	0.0	0.0	
200.	C2H5+CH3=C2H4+CH4	1.10E+12	0.0	0.0	
201.	C2H5+C2H5=C2H6+C2H4	1.50E+12	0.0	0.0	
202.	C2H4+O=CH2HCO+H	4.70E+06	1.9	180.0	
203.	C2H4+HO2=CH3HCO+OH	2.20E+12	0.0	17200.0	
204.	C2H3+O2=CH2HCO+O	3.03E+11	-0.3	10.7	
205.	H2+C2H=C2H2+H	4.10E+05	2.4	864.0	
206.	C2H2+O=CH2+CO	6.10E+06	2.0	1900.0	
207.	OH+C2H2(+M)=C2H2OH(+M)	1.50E+08	1.7	1000.0	
Low	pressurelimit:	0.18100E+24	-0.20000E+01	0.00000E+00	
H2	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO2	Enhanced by	3.000E+00			
H2O	Enhanced by	5.000E+00			
208.	CH3HCO=CH3+HCO	7.10E+15	0.0	81280.0	
209.	CH3HCO+H=CH3CO+H2	4.10E+09	1.2	2400.0	
210.	CH3HCO+O=CH3CO+OH	5.80E+12	0.0	1800.0	

211.	CH3HCO+OH=CH3CO+H2O	2.30E+10	0.7	-1110.0
212.	CH3HCO+HO2=CH3CO+H2O2	3.00E+12	0.0	12000.0
213.	CH3HCO+O2=CH3CO+HO2	3.00E+13	0.0	39000.0
214.	CH3HCO+CH3=CH3CO+CH4	2.00E-06	5.6	2464.0
215.	CH2HCO=CH3+CO	1.00E+13	0.0	42000.0
216.	CH2HCO+H=CH3+HCO	1.00E+14	0.0	0.0
217.	CH2HCO+H=CH3CO+H	3.00E+13	0.0	0.0
218.	CH2HCO+O=CH2O+HCO	5.00E+13	0.0	0.0
219.	CH2HCO+OH=CH2CO+H2O	2.00E+13	0.0	0.0
220.	CH2HCO+OH=CH2OH+HCO	1.00E+13	0.0	0.0
221.	CH2HCO+O2=CH2O+CO+OH	2.20E+11	0.0	1500.0
222.	CH2HCO+CH3=C2H5CHO	5.00E+13	0.0	0.0
223.	CH2HCO+CH2=C2H4+HCO	5.00E+13	0.0	0.0
224.	CH2HCO+CH=C2H3+HCO	1.00E+14	0.0	0.0
225.	C2H5+HCO=C2H5CHO	1.80E+13	0.0	0.0
226.	C2H5CHO+H=C2H5CO+H2	8.00E+13	0.0	0.0
227.	C2H5CHO+O=C2H5CO+OH	7.80E+12	0.0	1730.0
228.	C2H5CHO+OH=C2H5CO+H2O	1.20E+13	0.0	0.0
229.	C2H5+CO=C2H5CO	1.50E+11	0.0	4800.0
230.	C2H2OH+H=CH2HCO+H	5.00E+13	0.0	0.0
231.	CH3CO(+M)=CH3+CO(+M)	2.80E+13	0.0	17100.0
Low pressurelimit:	0.21000E+16	0.00000E+00	0.14000E+05	
TROE centering:	0.50000E+00	0.10000E-29	0.10000E+31	
H2	Enhanced by	2.000E+00		
CO	Enhanced by	2.000E+00		
CO2	Enhanced by	3.000E+00		
H2O	Enhanced by	5.000E+00		
232.	CH3CO+H=CH3+HCO	2.10E+13	0.0	0.0
233.	CH3CO+H=CH2CO+H2	1.20E+13	0.0	0.0
234.	CH3CO+O=CH3+CO2	1.50E+14	0.0	0.0
235.	CH3CO+O=CH2CO+OH	4.00E+13	0.0	0.0
236.	CH3CO+OH=CH2CO+H2O	1.20E+13	0.0	0.0
237.	H+NO+M=HNO+M	4.00E+20	-1.8	0.0
H2O	Enhanced by	1.000E+01		
O2	Enhanced by	1.500E+00		
H2	Enhanced by	2.000E+00		
CO2	Enhanced by	3.000E+00		
N2	Enhanced by	0.000E+00		
238.	H+NO+N2=HNO+N2	7.00E+19	-1.5	0.0
239.	NO+O+M=NO2+M	7.50E+19	-1.4	0.0
N2	Enhanced by	1.700E+00		
O2	Enhanced by	1.500E+00		
H2O	Enhanced by	1.000E+01		
240.	OH+NO+M=HONO+M	5.10E+23	-2.5	-68.0
H2O	Enhanced by	5.000E+00		
241.	HO2+NO=NO2+OH	2.10E+12	0.0	-479.0
242.	NO2+H=NO+OH	8.40E+13	0.0	0.0
243.	NO2+O=NO+O2	3.90E+12	0.0	-238.0
244.	NO2+O(+M)=NO3(+M)	1.30E+13	0.0	0.0
Low pressurelimit:	0.10000E+29	-0.40800E+01	0.24700E+04	
N2	Enhanced by	1.500E+00		
O2	Enhanced by	1.500E+00		
H2O	Enhanced by	1.860E+01		
245.	NO2+NO2=NO+NO+O2	1.60E+12	0.0	26123.0
246.	NO2+NO2=NO3+NO	9.60E+09	0.7	20900.0
247.	NO3+H=NO2+OH	6.00E+13	0.0	0.0
248.	NO3+O=NO2+O2	1.00E+13	0.0	0.0

249.	NO3+OH=NO2+HO2	1.40E+13	0.0	0.0
250.	NO3+HO2=NO2+O2+OH	1.50E+12	0.0	0.0
251.	NO3+NO2=NO+NO2+O2	5.00E+10	0.0	2940.0
252.	HNO+H=H2+NO	4.50E+11 0.7	655.0	
253.	HNO+O=NO+OH	1.00E+13 0.0	0.0	
254.	HNO+OH=NO+H2O	3.60E+13	0.0	0.0
255.	HNO+O2=HO2+NO	1.00E+13	0.0	25000.0
256.	HNO+NO2=HONO+NO	6.00E+11	0.0	2000.0
257.	HNO+HNO=N2O+H2O	9.00E+08	0.0	3100.0
258.	HNO+NH2=NH3+NO	3.63E+06	1.6	-1252.0
259.	H2NO+M=HNO+H+M	2.50E+15	0.0	50000.0
H2O	Enhanced by	5.000E+00		
N2	Enhanced by	2.000E+00		
260.	H2NO+H=HNO+H2	3.00E+07	2.0	2000.0
261.	H2NO+H=NH2+OH	5.00E+13	0.0	0.0
262.	H2NO+O=HNO+OH	3.00E+07	2.0	2000.0
263.	H2NO+O=NH2+O2	2.00E+14	0.0	0.0
264.	H2NO+OH=HNO+H2O	2.00E+07	2.0	1000.0
265.	H2NO+NO=HNO+HNO	2.00E+04	2.0	13000.0
266.	H2NO+NO2=HNO+HONO	6.00E+11	0.0	2000.0
267.	HONO+H=H2+NO2	1.20E+13	0.0	7352.0
268.	HONO+O=OH+NO2	1.20E+13	0.0	5961.0
269.	HONO+OH=H2O+NO2	4.00E+12	0.0	0.0
270.	NH3+M=NH2+H+M	2.20E+16	0.0	93470.0
271.	NH3+H=NH2+H2	6.40E+05 2.4	10171.0	
272.	NH3+O=NH2+OH	9.40E+06 1.9	6460.0	
273.	NH3+OH=NH2+H2O	2.00E+06	2.0	566.0
274.	NH3+HO2=NH2+H2O2	3.00E+11	0.0	22000.0
275.	NH2+H=NH+H2	4.00E+13 0.0	3650.0	
276.	NH2+O=HNO+H	6.60E+14 -0.5	0.0	
277.	NH2+O=NH+OH	6.80E+12 0.0	0.0	
278.	NH2+OH=NH+H2O	4.00E+06	2.0	1000.0
279.	NH2+HO2=H2NO+OH	5.00E+13	0.0	0.0
280.	NH2+HO2=NH3+O2	1.00E+13	0.0	0.0
281.	NH2+NO=NNH+OH	8.90E+12	-0.3	0.0
282.	NH2+NO=N2+H2O	1.30E+16	-1.3	0.0
Declared	duplicate	reaction...		
283.	NH2+NO=N2+H2O	*****	-0.3	0.0
Declared	duplicate	reaction...		
284.	NH2+NO2=N2O+H2O	3.20E+18	-2.2	0.0
285.	NH2+NO2=H2NO+NO	3.50E+12	0.0	0.0
286.	NH2+H2NO=NH3+HNO	3.00E+12	0.0	1000.0
287.	HONO+NH2=NO2+NH3	7.11E+01	3.0	-4941.0
288.	NH2+NH2=N2H2+H2	8.50E+11	0.0	0.0
289.	NH2+NH=N2H2+H	5.00E+13	0.0	0.0
290.	NH2+N=N2+H+H	7.20E+13	0.0	0.0
291.	NH+H=N+H2	3.00E+13	0.0	0.0
292.	NH+O=NO+H	9.20E+13	0.0	0.0
293.	NH+OH=HNO+H	2.00E+13	0.0	0.0
294.	NH+OH=N+H2O	5.00E+11	0.5	2000.0
295.	NH+O2=HNO+O	4.60E+05	2.0	6500.0
296.	NH+O2=NO+OH	1.30E+06	1.5	100.0
297.	NH+NO=N2O+H	2.90E+14	-0.4	0.0
Declared	duplicate	reaction...		
298.	NH+NO=N2O+H	***** -0.2	0.0	
Declared	duplicate	reaction...		
299.	NH+NO=N2+OH	2.20E+13	-0.2	0.0

300.	NH+NO2=N2O+OH	1.00E+13	0.0	0.0
301.	NH+NH=N2+H+H	2.50E+13	0.0	0.0
302.	NH+N=N2+H	3.00E+13	0.0	0.0
303.	N+OH=NO+H	3.80E+13	0.0	0.0
304.	N+O2=NO+O	6.40E+09	1.0	6280.0
305.	N+NO=N2+O	3.30E+12	0.3	0.0
306.	N2H2+M=NNH+H+M	5.00E+16	0.0	50000.0
H2O	Enhanced by	1.500E+01		
O2	Enhanced by	2.000E+00		
N2	Enhanced by	2.000E+00		
H2	Enhanced by	2.000E+00		
307.	N2H2+H=NNH+H2	5.00E+13	0.0	1000.0
308.	N2H2+O=NH2+NO	1.00E+13	0.0	0.0
309.	N2H2+O=NNH+OH	2.00E+13	0.0	1000.0
310.	N2H2+OH=NNH+H2O	1.00E+13	0.0	1000.0
311.	N2H2+NO=N2O+NH2	3.00E+12	0.0	0.0
312.	N2H2+NH2=NH3+NNH	1.00E+13	0.0	1000.0
313.	N2H2+NH=NNH+NH2	1.00E+13	0.0	1000.0
314.	NNH=N2+H	1.00E+07	0.0	0.0
315.	NNH+H=N2+H2	1.00E+14	0.0	0.0
316.	NNH+O=N2+OH	8.00E+13	0.0	0.0
317.	NNH+O=N2O+H	1.00E+14	0.0	0.0
318.	NNH+O=NH+NO	5.00E+13	0.0	0.0
319.	NNH+OH=N2+H2O	5.00E+13	0.0	0.0
320.	NNH+O2=N2+HO2	2.00E+14	0.0	0.0
321.	NNH+O2=N2+O2+H	5.00E+13	0.0	0.0
322.	NNH+NO=N2+HNO	5.00E+13	0.0	0.0
323.	NNH+NH2=N2+NH3	5.00E+13	0.0	0.0
324.	NNH+NH=N2+NH2	5.00E+13	0.0	0.0
325.	N2O+M=N2+O+M	4.00E+14	0.0	56100.0
N2	Enhanced by	1.700E+00		
O2	Enhanced by	1.400E+00		
H2O	Enhanced by	1.200E+01		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	3.000E+00		
326.	N2O+H=N2+OH	3.30E+10	0.0	4729.0
Declared	duplicate	reaction...		
327.	N2O+H=N2+OH	4.40E+14	0.0	19254.0
Declared	duplicate	reaction...		
328.	N2O+O=NO+NO	6.60E+13	0.0	26630.0
329.	N2O+O=N2+O2	1.00E+14	0.0	28000.0
330.	N2O+OH=N2+HO2	1.30E-02	4.7	36561.0
331.	N2O+OH=HNO+NO	1.20E-04	4.3	25081.0
332.	N2O+NO=NO2+N2	5.30E+05	2.2	46281.0
333.	CN+H2=HCN+H	3.00E+05	2.5	2237.0
334.	HCN+O=NCO+H	1.40E+04	2.6	4980.0
335.	HCN+O=NH+CO	3.50E+03	2.6	4980.0
336.	HCN+O=CN+OH	2.70E+09	1.6	29200.0
337.	HCN+OH=CN+H2O	3.90E+06	1.8	10300.0
338.	HCN+OH=HOCN+H	5.90E+04	2.4	12500.0
339.	HCN+OH=HNCO+H	2.00E-03	4.0	1000.0
340.	HCN+OH=NH2+CO	7.80E-04	4.0	4000.0
341.	HCN+CN=C2N2+H	1.50E+07	1.7	1530.0
342.	CN+O=CO+N	7.70E+13	0.0	0.0
343.	CN+OH=NCO+H	4.00E+13	0.0	0.0
344.	CN+O2=NCO+O	7.50E+12	0.0	-389.0
345.	CN+CO2=NCO+CO	3.70E+06	2.2	26884.0

346.	CN+NO2=NCO+NO	5.30E+15	-0.8	344.0
347.	CN+NO2=CO+N2O	4.90E+14	-0.8	344.0
348.	CN+NO2=N2+CO2	3.70E+14	-0.8	344.0
349.	CN+HNO=HCN+NO	1.80E+13	0.0	0.0
350.	CN+HONO=HCN+NO2	1.20E+13	0.0	0.0
351.	CN+N2O=NCN+NO	3.90E+03	2.6	3696.0
352.	CN+HNCO=HCN+NCO	1.50E+13	0.0	0.0
353.	CN+NCO=NCN+CO	1.80E+13	0.0	0.0
354.	HNCO=NH+CO	1.10E+16	0.0	86000.0
355.	HNCO+H=NH2+CO	2.20E+07	1.7	3800.0
356.	HNCO+O=HNO+CO	1.50E+08	1.6	44012.0
357.	HNCO+O=NH+CO2	9.80E+07	1.4	8524.0
358.	HNCO+O=NCO+OH	2.20E+06	2.1	11425.0
359.	HNCO+OH=NCO+H2O	6.40E+05	2.0	2563.0
360.	HNCO+HO2=NCO+H2O2	3.00E+11	0.0	22000.0
361.	HNCO+O2=HNO+CO2	1.00E+12	0.0	35000.0
362.	HNCO+NH2=NH3+NCO	5.00E+12	0.0	6200.0
363.	HNCO+NH=NH2+NCO	3.00E+13	0.0	23700.0
364.	HOCN+H=NCO+H2	2.00E+07	2.0	2000.0
365.	HOCN+O=NCO+OH	1.50E+04	2.6	4000.0
366.	HOCN+OH=NCO+H2O	6.40E+05	2.0	2563.0
367.	HCNO+H=HCN+OH	1.00E+14	0.0	12000.0
368.	HCNO+O=HCO+NO	2.00E+14	0.0	0.0
369.	HCNO+OH=CH2O+NO	4.00E+13	0.0	0.0
370.	NCO+M=N+CO+M	3.10E+16	-0.5	48000.0
371.	NCO+H=NH+CO	5.00E+13	0.0	0.0
372.	NCO+O=NO+CO	4.70E+13	0.0	0.0
373.	NCO+OH=NO+HCO	5.00E+12	0.0	15000.0
374.	NCO+O2=NO+CO2	2.00E+12	0.0	20000.0
375.	NCO+H2=HNCO+H	7.60E+02	3.0	4000.0
376.	NCO+HCO=HNCO+CO	3.60E+13	0.0	0.0
377.	NCO+NO=N2O+CO	6.20E+17	-1.7	763.0
378.	NCO+NO=N2+CO2	7.80E+17	-1.7	763.0
379.	NCO+NO2=CO+NO+NO	2.50E+11	0.0	-707.0
380.	NCO+NO2=CO2+N2O	3.00E+12	0.0	-707.0
381.	NCO+HNO=HNCO+NO	1.80E+13	0.0	0.0
382.	NCO+HONO=HNCO+NO2	3.60E+12	0.0	0.0
383.	NCO+N=N2+CO	2.00E+13	0.0	0.0
384.	NCO+NCO=N2+CO+CO	1.80E+13	0.0	0.0
385.	C2N2+O=NCO+CN	4.60E+12	0.0	8880.0
386.	C2N2+OH=HOCN+CN	1.90E+11	0.0	2900.0
387.	NCN+O=CN+NO	1.00E+14	0.0	0.0
388.	NCN+OH=HCN+NO	5.00E+13	0.0	0.0
389.	NCN+H=HCN+N	1.00E+14	0.0	0.0
390.	NCN+O2=NO+NCO	1.00E+13	0.0	0.0
391.	H+CH3CN=HCN+CH3	4.00E+07	2.0	2000.0
392.	H+CH3CN=CH2CN+H2	3.00E+07	2.0	1000.0
393.	O+CH3CN=NCO+CH3	1.50E+04	2.6	4980.0
394.	OH+CH3CN=CH2CN+H2O	2.00E+07	2.0	2000.0
395.	CH2CN+O=CH2O+CN	1.00E+14	0.0	0.0
396.	CN+CH2OH=CH2CN+OH	5.00E+13	0.0	0.0
397.	H2CN+M=HCN+H+M	3.00E+14	0.0	22000.0
398.	CO+NO2=CO2+NO	9.00E+13	0.0	33779.0
399.	CO+N2O=N2+CO2	3.20E+11	0.0	20237.0
400.	CO2+N=NO+CO	1.90E+11	0.0	3400.0
401.	CH2O+NCO=HNCO+HCO	6.00E+12	0.0	0.0
402.	CH2O+NO2=HCO+HONO	8.00E+02	2.8	13730.0

403.	HCO+NO=HNO+CO	7.20E+12	0.0	0.0	
404.	HCO+NO2=CO+HONO	1.20E+23	-3.3	2355.0	
405.	HCO+NO2=H+CO2+NO	8.40E+15	-0.8	1930.0	
406.	HCO+HNO=CH2O+NO	6.00E+11	0.0	2000.0	
407.	CH4+CN=CH3+HCN	6.20E+04	2.6	-437.0	
408.	NCO+CH4=CH3+HNCO	9.80E+12	0.0	8120.0	
409.	CH3+NO=HCN+H2O	1.50E-01	3.5	3950.0	
410.	CH3+NO=H2CN+OH	1.50E-01	3.5	3950.0	
411.	CH3+N=H2CN+H	7.10E+13	0.0	0.0	
412.	CH3+CN=CH2CN+H	1.00E+14	0.0	0.0	
413.	CH3+HOCN=CH3CN+OH	5.00E+12	0.0	2000.0	
414.	CH2+NO=HCN+OH	2.20E+12	0.0	-378.0	
415.	CH2+NO=HCNO+H	1.30E+12	0.0	-378.0	
416.	CH2+NO2=CH2O+NO	5.90E+13	0.0	0.0	
417.	CH2+N=HCN+H	5.00E+13	0.0	0.0	
418.	CH2+N2=HCN+NH	1.00E+13	0.0	74000.0	
419.	H2CN+N=N2+CH2	2.00E+13	0.0	0.0	
420.	CH2(S)+NO=HCN+OH	2.00E+13	0.0	0.0	
421.	CH2(S)+NO=CH2+NO	1.00E+14	0.0	0.0	
422.	CH2(S)+HCN=CH3+CN	5.00E+13	0.0	0.0	
423.	CH+NO2=HCO+NO	1.00E+14	0.0	0.0	
424.	CH+NO=HCN+O	4.80E+13	0.0	0.0	
425.	CH+NO=HCO+N	3.40E+13	0.0	0.0	
426.	CH+NO=NCO+H	1.90E+13	0.0	0.0	
427.	CH+N=CN+H	1.30E+13	0.0	0.0	
428.	CH+N2=HCN+N	3.70E+07	1.4	20723.0	
429.	CH+N2O=HCN+NO	1.90E+13	0.0	-511.0	
430.	C+NO=CN+O	2.00E+13	0.0	0.0	
431.	C+NO=CO+N	2.80E+13	0.0	0.0	
432.	C+N2=CN+N	6.30E+13	0.0	46019.0	
433.	C+N2O=CN+NO	5.10E+12	0.0	0.0	
434.	C2H6+CN=C2H5+HCN	1.20E+05	2.8	-1788.0	
435.	C2H6+NCO=C2H5+HNCO	1.50E-09	6.9	-2910.0	
436.	C2H4+CN=C2H3+HCN	5.90E+14	-0.2	0.0	
437.	C2H3+NO=C2H2+HNO	1.00E+12	0.0	1000.0	
438.	C2H3+N=HCN+CH2	2.00E+13	0.0	0.0	
439.	C2H2+NCO=HCCO+HCN	1.40E+12	0.0	1815.0	
440.	C2H+NO=CN+HCO	2.10E+13	0.0	0.0	
441.	CH2CO+CN=HCCO+HCN	2.00E+13	0.0	0.0	
442.	HCCO+NO=HCNO+CO	7.20E+12	0.0	0.0	
443.	HCCO+NO=HCN+CO2	1.60E+13	0.0	0.0	
444.	HCCO+NO2=HCNO+CO2	1.60E+13	0.0	0.0	
445.	HCCO+N=HCN+CO	5.00E+13	0.0	0.0	
446.	C2H5OH(+M)=CH2OH+CH3(+M)	5.90E+23	-1.7	91163.0	
Low	pressurelimit:	0.29000E+86	-0.18900E+02	0.10991E+06	
TROE	centering:	0.50000E+00	0.20000E+03	0.89000E+03	0.46000E+04
H2O	Enhanced	by	5.000E+00		
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	2.000E+00		
CO2	Enhanced	by	3.000E+00		
447.	C2H5OH(+M)=C2H5+OH(+M)	1.20E+23	-1.5	96005.0	
Low	pressurelimit:	0.32000E+86	-0.18800E+02	0.11493E+06	
TROE	centering:	0.50000E+00	0.30000E+03	0.90000E+03	0.50000E+04
H2O	Enhanced	by	5.000E+00		
H2	Enhanced	by	2.000E+00		
CO	Enhanced	by	2.000E+00		
CO2	Enhanced	by	3.000E+00		

448.	C2H5OH(+M)=C2H4+H2O(+M)	2.80E+13	0.1	66136.0	
Low	pressurelimit:	0.26000E+84	-0.18800E+02	0.86452E+05	
TROE	centering:	0.70000E+00	0.35000E+03	0.80000E+03	0.38000E+04
H2O	Enhanced by	5.000E+00			
449.	C2H5OH(+M)=CH3HCO+H2(+M)	7.20E+11	0.1	91007.0	
Low	pressurelimit:	0.45000E+88	-0.19400E+02	0.11559E+06	
TROE	centering:	0.90000E+00	0.90000E+03	0.11000E+04	0.35000E+04
H2O	Enhanced by	5.000E+00			
450.	C2H5OH+OH=C2H4OH+H2O	1.70E+11	0.3	600.0	
451.	C2H5OH+OH=CH3CHOH+H2O	4.60E+11	0.1	0.0	
452.	C2H5OH+OH=CH3CH2O+H2O	7.50E+11	0.3	1634.0	
453.	C2H5OH+H=C2H4OH+H2	1.20E+07	1.8	5098.0	
454.	C2H5OH+H=CH3CHOH+H2	2.60E+07	1.6	2827.0	
455.	C2H5OH+H=CH3CH2O+H2	1.50E+07	1.6	3038.0	
456.	C2H5OH+O=C2H4OH+OH	9.40E+07	1.7	5459.0	
457.	C2H5OH+O=CH3CHOH+OH	1.90E+07	1.9	1824.0	
458.	C2H5OH+O=CH3CH2O+OH	1.60E+07	2.0	4448.0	
459.	C2H5OH+CH3=C2H4OH+CH4	2.20E+02	3.2	9622.0	
460.	C2H5OH+CH3=CH3CHOH+CH4	7.30E+02	3.0	7948.0	
461.	C2H5OH+CH3=CH3CH2O+CH4	1.40E+02	3.0	7649.0	
462.	C2H5OH+HO2=C2H4OH+H2O2	1.20E+04	2.5	15750.0	
463.	C2H4OH+O2=CH2O+CH2O+OH	6.00E+10	0.0	24500.0	
464.	C2H5OH+HO2=CH3CHOH+H2O2	8.20E+03	2.5	10750.0	
465.	C2H5OH+HO2=CH3CH2O+H2O2	2.50E+12	0.0	24000.0	
466.	CH3CH2O+M=CH3HCO+H+M	1.20E+35	-5.9	25274.0	
467.	CH3CH2O+M=CH3+CH2O+M	1.30E+38	-7.0	23800.0	
468.	CH3CH2O+CO=C2H5+CO2	4.70E+02	3.2	5380.0	
469.	CH3CH2O+O2=CH3HCO+HO2	4.00E+10	0.0	1100.0	
470.	CH3CH2O+H=CH3+CH2OH	3.00E+13	0.0	0.0	
471.	CH3CH2O+H=C2H4+H2O	3.00E+13	0.0	0.0	
472.	CH3CH2O+OH=CH3HCO+H2O	1.00E+13	0.0	0.0	
473.	CH3CHOH+O2=CH3HCO+HO2	4.80E+14	0.0	5017.0	
Declared	duplicate reaction...				
474.	CH3CHOH+O2=CH3HCO+HO2	8.40E+15	-1.2	0.0	
Declared	duplicate reaction...				
475.	CH3CHOH+O=CH3HCO+OH	1.00E+14	0.0	0.0	
476.	CH3CHOH+H=CH3+CH2OH	3.00E+13	0.0	0.0	
477.	CH3CHOH+H=C2H4+H2O	3.00E+13	0.0	0.0	
478.	CH3CHOH+HO2=CH3HCO+OH+OH	4.00E+13	0.0	0.0	
479.	CH3CHOH+OH=CH3HCO+H2O	5.00E+12	0.0	0.0	
480.	CH3CHOH+M=CH3HCO+H+M	1.00E+14	0.0	25000.0	
481.	HCO+HCO=CO+CH2O	3.00E+13	0.0	0.0	
482.	CH3OH(+M)=CH2OH+H(+M)	2.70E+16	-0.1	98940.0	
Low	pressurelimit:	0.23400E+41	-0.63300E+01	0.10310E+06	
TROE	centering:	0.77300E+00	0.69300E+03	0.53330E+04	
483.	CH3OH+H=CH2OH+H2	1.70E+07	2.1	4868.0	
484.	CH3OH+H=CH3O+H2	4.20E+06	2.1	4868.0	
485.	CH3OH+OH=CH2OH+H2O	1.40E+06	2.0	-3510.0	
486.	CH3OH+OH=CH3O+H2O	6.30E+06	2.0	6300.0	
487.	CH3OH+HO2=CH2OH+H2O2	1.00E+12	0.0	10040.0	
488.	CH3OH+O2=CH2OH+HO2	2.10E+13	0.0	44900.0	
489.	CH3OH+CH3=CH2OH+CH4	3.20E+01	3.2	7170.0	
490.	CH3OH+CH3=CH3O+CH4	1.50E+01	3.1	6940.0	
491.	CH3O+HO2=CH2O+H2O2	3.00E+11	0.0	0.0	
492.	CH3O+CO=CH3+CO2	1.60E+13	0.0	11800.0	
493.	CH3O+CH3=CH2O+CH4	2.40E+13	0.0	0.0	
494.	CH3O+CH2O=CH3OH+HCO	1.00E+11	0.0	3000.0	

495.	CH3O+HCO=CH3OH+CO	9.00E+13	0.0	0.0
496.	CH3O+CH3OH=CH3OH+CH2OH	3.00E+11	0.0	4100.0
497.	CH3O+CH3O=CH3OH+CH2O	6.00E+13	0.0	0.0
498.	CH2OH+H=CH2O+H2	4.80E+13	0.0	0.0
499.	CH2OH+O=CH2O+OH	6.50E+13	0.0	-700.0
500.	CH2OH+O2=CH2O+HO2	1.60E+15	-1.0	0.0
Declared duplicate reaction...				
501.	CH2OH+O2=CH2O+HO2	7.20E+13	0.0	3577.0
Declared duplicate reaction...				
502.	CH2OH+HO2=CH2O+H2O2	3.60E+13	0.0	0.0
503.	CH2OH+HCO=CH3OH+CO	1.20E+14	0.0	0.0
504.	CH2OH+HCO=CH2O+CH2O	1.80E+14	0.0	0.0
505.	CH2OH+CH2O=CH3OH+HCO	5.50E+03	2.8	5860.0
506.	CH2OH+CH2OH=CH3OH+CH2O	5.00E+12	0.0	0.0
507.	CH2OH+CH3O=CH3OH+CH2O	2.40E+12	0.0	0.0
508.	HONO2+OH=NO3+H2O	1.00E+10	0.0	-1240.0
509.	H2NO+O2=HNO+HO2	3.00E+12	0.0	25000.0
510.	HONO+HONO=>NO+NO2+H2O	3.50E-01	3.6	12100.0
511.	H2NO+HO2=HNO+H2O2	2.90E+04	2.7	1600.0
512.	HNOH+H=NH2+OH	4.00E+13	0.0	0.0
513.	HNOH+H=HNO+H2	4.80E+08	1.5	378.0
514.	HNOH+O=HNO+OH	7.00E+13	0.0	0.0
Declared duplicate reaction...				
515.	HNOH+O=HNO+OH	3.30E+08	1.5	-358.0
Declared duplicate reaction...				
516.	HNOH+OH=HNO+H2O	2.40E+06	2.0	-1192.0
517.	HNOH+NH2=NH3+HNO	1.80E+06	1.9	-1152.0
518.	HNOH+HO2=HNO+H2O2	2.90E+04	2.7	-1600.0
519.	HNOH+M=HNO+H+M	2.00E+24	-2.8	58934.0
H2O Enhanced by 1.000E+01				
520.	HNOH+O2=HNO+HO2	3.00E+12	0.0	25000.0
521.	HNOH+NO2=HONO+HNO	6.00E+11	0.0	2000.0
522.	CH3OH+NO2=CH2OH+HONO	3.70E+11	0.0	21400.0
523.	CH2OH+NO=CH2O+HNO	1.30E+12	0.0	0.0
524.	CH2OH+NO2=CH2O+HONO	5.00E+12	0.0	0.0
525.	CH2OH+HNO=CH3OH+NO	3.00E+12	0.0	0.0
526.	CH3O+NO=CH2O+HNO	1.30E+14	-0.7	0.0
527.	CH3O+NO2=CH2O+HONO	6.00E+12	0.0	2285.0
528.	CH3O+HNO=CH3OH+NO	3.20E+13	0.0	0.0
529.	CH3+NO(+M)=CH3NO(+M)	9.00E+12	0.0	119.0
Low pressurelimit: 0.32000E+24 -0.18700E+01 0.00000E+00				
H2O Enhanced by 1.000E+01				
N2 Enhanced by 1.500E+00				
530.	CH3+NO2=CH3O+NO	4.00E+13	-0.2	0.0
531.	CH3+HONO=CH4+NO2	1.00E+12	0.0	0.0
532.	CH3NO=HCN+H2O	3.00E+13	0.0	50000.0
533.	CH3+O2(+M)=CH3O2(+M)	7.80E+08	1.2	0.0
Low pressurelimit: 0.58000E+26 -0.33000E+01 0.00000E+00				
534.	CH3O2+O=CH3O+O2	2.59E+13	0.0	0.0
535.	CH3O2+H=CH3O+OH	9.64E+13	0.0	0.0
536.	CH3O2+NO=CH3O+NO2	3.10E+12	0.0	-358.0
537.	CH3O2+CH3=CH3O+CH3O	3.24E+13	0.0	0.0

ANEXO E: RESULTADOS SIMULACIONES

En el siguiente anexo se exponen los resultados obtenidos en la realización de las simulaciones mediante el software CHEMKIN utilizando las condiciones experimentales.

Los resultados se presentan en tablas, separadas por el tipo de óxido de nitrógeno utilizado como aditivo y el mecanismo utilizado. Los mecanismos están detallados en el anexo D.

Tabla E.1: Mecanismo A NO.

Simulación		1.1	1.2	1.3	1.4	1.5
Concentración inicial NO (ppm)		12000	5000	1000	500	5000
Temperatura de reacción		1200	1200	1200	1200	1100
Fórmula	Nombre	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)
CO ₂	Dióxido de carbono	138	26	1,4	0	12
C ₂ H ₄	Etileno	176	211	225	227	658
C ₂ H ₂	Acetileno	15700	19600	21600	21800	21900
C ₂ H ₆	Etano	0	0	0	0	0
H ₂	Hidrógeno	33900	32500	31400	31300	30400
CH ₄	Metano	74	106	155	164	175
CO	Monóxido de carbono	9230	4000	819	411	1270
C ₆ H ₆	Benceno	0	0	0	0	0
HCN	Cianuro de hidrógeno	9480	4120	847	425	1370
C ₄ H ₂	Diacetileno	445	756	967	995	819
NO	Óxido nítrico	1800	649	119	59	3460
Simulación		1.6	1.7	1.8	1.9	
Concentración inicial NO (ppm)		5000	5000	5000	5000	
Temperatura de reacción		1000	900	800	700	
Fórmula	Nombre	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	
CO ₂	Dióxido de carbono	1	0	0	0	
C ₂ H ₄	Etileno	2290	20300	29800	30000	
C ₂ H ₂	Acetileno	21600	7390	205	8	
C ₂ H ₆	Etano	0	17	0	0	
H ₂	Hidrógeno	27700	9340	207	8	
CH ₄	Metano	285	63	0	0	
CO	Monóxido de carbono	148	2	0	0	
C ₆ H ₆	Benceno	0	0	0	0	
HCN	Cianuro de hidrógeno	183	9,33	0	0	
C ₄ H ₂	Diacetileno	835	72,9	0	0	
NO	Óxido nítrico	4680	4940	5000	5000	

Tabla E.2: Mecanismo B NO.

Simulación		1.1	1.2	1.3	1.4	1.5
Concentración inicial NO (ppm)		12000	5000	1000	500	5000
Temperatura de reacción		1200	1200	1200	1200	1100
Fórmula	Nombre	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)
CO ₂	Dióxido de carbono	98	18	0,974	0	23
C ₂ H ₄	Etileno	196	245	269	271	735
C ₂ H ₂	Acetileno	17600	24100	27800	28300	25300
C ₂ H ₆	Etano	0	0	0	0	0
H ₂	Hidrógeno	33400	30500	29000	28800	29100
CH ₄	Metano	234	265	220	200	295
CO	Monóxido de carbono	10900	4560	916	455	2800
C ₆ H ₆	Benceno	0	0	0	0	0
HCN	Cianuro de hidrógeno	11100	4680	934	463	3010
NO	Óxido nítrico	214	73	29,2	20	1760
Simulación		1.6	1.7	1.8	1.9	
Concentración inicial NO (ppm)		5000	5000	5000	5000	
Temperatura de reacción		1000	900	800	700	
Fórmula	Nombre	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	
CO ₂	Dióxido de carbono	2	0	0	0	
C ₂ H ₄	Etileno	2500	25600	29800	30000	
C ₂ H ₂	Acetileno	26300	4240	205	8	
C ₂ H ₆	Etano	0	0	0	0	
H ₂	Hidrógeno	26400	4240	205	8	
CH ₄	Metano	256	0	0	0	
CO	Monóxido de carbono	265	0	0	0	
C ₆ H ₆	Benceno	0	0	0	0	
HCN	Cianuro de hidrógeno	306	0,697	0	0	
NO	Óxido nítrico	4550	4980	5000	5000	

Tabla E.3: MECANISMO B N₂O.

Simulación		2.1	2.2	2.3	2.4	2.5
Concentración inicial N ₂ O (ppm)		12000	5000	1000	500	5000
Temperatura de reacción		1200	1200	1200	1200	1100
Fórmula	Nombre	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)
CO ₂	Dióxido de carbono	602	141	9,81	3	306
C ₂ H ₄	Etileno	186	227	261	266	648
C ₂ H ₂	Acetileno	25200	26900	28200	28400	26800
C ₂ H ₆	Etano	0	0	0	0	0
H ₂	Hidrógeno	21800	25200	27700	28100	24000
CH ₄	Metano	1970	1480	728	523	1600
CO	Monóxido de carbono	4210	2100	582	328	1410
C ₆ H ₆	Benceno	0	0	0	0	0
HCN	Cianuro de hidrógeno	542	186	24,9	10	143
N ₂ O	Óxido nitroso	0	0,164	0	0	7,57
Simulación		2.6	2.7	2.8	2.9	
Concentración inicial N ₂ O (ppm)		5000	5000	5000	5000	
Temperatura de reacción		1000	900	800	700	
Fórmula	Nombre	ppm	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	
CO ₂	Dióxido de carbono	603	1030	398	30	
C ₂ H ₄	Etileno	2050	6270	18200	29000	
C ₂ H ₂	Acetileno	25300	20900	10500	909	
C ₂ H ₆	Etano	0	25	9820	33	
H ₂	Hidrógeno	22300	18300	9820	863	
CH ₄	Metano	1880	2140	728	49	
CO	Monóxido de carbono	964	420	100	16	
C ₆ H ₆	Benceno	0	0	0	0	
HCN	Cianuro de hidrógeno	98	53	4,69	0,0228	
N ₂ O	Óxido nitroso	7,5	3,68	3540	4900	

Tabla E.4: MECANISMO B NO₂.

Simulación		3.1	3.2	3.3	3.4	3.5
Concentración inicial NO ₂ (ppm)		12000	5000	1000	500	5000
Temperatura de reacción		1200	1200	1200	1200	1100
Fórmula	Nombre	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)
CO ₂	Dióxido de carbono	1530	341	24,8	8	223
C ₂ H ₄	Etileno	143	211	260	267	630
C ₂ H ₂	Acetileno	16100	23200	27600	28200	24700
C ₂ H ₆	Etano	0	0	0	0	0
H ₂	Hidrógeno	26600	27200	28200	28400	25500
CH ₄	Metano	752	660	340	269	348
CO	Monóxido de carbono	12200	5480	1160	586	3560
C ₆ H ₆	Benceno	0	0	0	0	0
HCN	Cianuro de hidrógeno	10800	4680	940	466	3370
NO ₂	Dióxido de nitrógeno	47,3	26,9	21,9	16,7	1390
Simulación		3.6	3.7	3.8	3.9	
Concentración inicial NO ₂ (ppm)		5000	5000	5000	5000	
Temperatura de reacción		1000	900	800	700	
Fórmula	Nombre	ppm	Salida (ppm)	Salida (ppm)	Salida (ppm)	
CO ₂	Dióxido de carbono	66	57	91	143	
C ₂ H ₄	Etileno	2130	13200	23800	25400	
C ₂ H ₂	Acetileno	26200	16000	5770	4220	
C ₂ H ₆	Etano	0	20	15	0	
H ₂	Hidrógeno	22600	11900	1700	170	
CH ₄	Metano	258	75,2	0	0	
CO	Monóxido de carbono	798	352	301	229	
C ₆ H ₆	Benceno	0	0	0	0	
HCN	Cianuro de hidrógeno	527	51,9	17,3	8,04	
NO ₂	Dióxido de nitrógeno	4310	4850	4940	4970	

