

Electronic Supplementary Information

Direct measurements of the high temperature rate constants of the
reactions $\text{NCN} + \text{O}$, $\text{NCN} + \text{NCN}$, and $\text{NCN} + \text{M}$

J. Dammeier, N. Faßheber, G. Friedrichs

*Institut für Physikalische Chemie, Olshausenstr. 40, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel,
24098 Kiel, Germany*

Table 1: Experimental conditions and results of shock tube experiments without additional reaction partner.

T/K	p/mbar	$\rho/(\text{mol}/\text{cm}^3)$	$x(\text{NCN})/\text{ppm}$	$\frac{k_{\text{NCN}+\text{M}}}{\text{cm}^3/\text{mol s}}$	$\frac{k_{\text{NCN}+\text{NCN}}}{\text{cm}^3/\text{mol s}}$
$\rho \approx 1.9 \times 10^{-6} \text{ mol}/\text{cm}^3$, incident shock wave					
966	143	1.78×10^{-6}	59	-	1.0×10^{12}
1065	163	1.84×10^{-6}	56	-	3.0×10^{12}
1196	190	1.91×10^{-6}	67	-	1.0×10^{12}
1230	197	1.92×10^{-6}	130	-	1.2×10^{12}
1266	204	1.94×10^{-6}	60	-	2.0×10^{12}
1380	227	1.98×10^{-6}	59	-	1.0×10^{12}
1396	231	1.99×10^{-6}	61	-	1.5×10^{12}
1400	231	1.99×10^{-6}	59	-	1.5×10^{12}
1548	261	2.03×10^{-6}	67	-	2.0×10^{12}
$\rho \approx 3.8 \times 10^{-6} \text{ mol}/\text{cm}^3$, incident shock wave					
984	293	3.58×10^{-6}	21	-	1.5×10^{12}
1036	305	3.54×10^{-6}	21	-	2.0×10^{12}
1261	406	3.87×10^{-6}	28	-	2.0×10^{12}
1412	467	3.98×10^{-6}	50	-	2.0×10^{12}
$\rho \approx 4.1 \times 10^{-6} \text{ mol}/\text{cm}^3$, reflected shock wave					
1620	489	3.61×10^{-6}	14	-	3.0×10^{12}
1705	523	3.71×10^{-6}	15	-	5.0×10^{12}
1734	537	3.72×10^{-6}	50	-	5.0×10^{12}
1857	594	3.85×10^{-6}	64	-	3.0×10^{12}
2093	703	4.04×10^{-6}	60	2.5×10^8	-
2209	758	4.13×10^{-6}	65	6.0×10^8	-
2345	823	4.22×10^{-6}	30	1.4×10^9	-
2375	838	4.24×10^{-6}	65	2.2×10^9	-
2406	852	4.26×10^{-6}	65	1.9×10^9	-
2488	892	4.31×10^{-6}	130	3.9×10^9	-
2574	933	4.36×10^{-6}	60	4.0×10^9	-
2847	1066	4.50×10^{-6}	60	1.8×10^{10}	-
2886	1084	4.52×10^{-6}	64	2.0×10^{10}	-
3248	1262	4.61×10^{-6}	65	5.0×10^{10}	-
$\rho \approx 8.6 \times 10^{-6} \text{ mol}/\text{cm}^3$, reflected shock wave					
1042	475	5.48×10^{-6}	9	-	2.5×10^{12}
1159	364	8.41×10^{-6}	19	-	3.0×10^{12}
1325	710	6.45×10^{-6}	9	-	3.5×10^{12}
1361	741	6.55×10^{-6}	14	-	3.0×10^{12}
1494	857	6.90×10^{-6}	13	-	2.5×10^{12}
1495	859	6.91×10^{-6}	4	-	3.5×10^{12}

T/K	p/mbar	$\rho/(\text{mol}/\text{cm}^3)$	$x(\text{NCN})/\text{ppm}$	$\frac{k_{\text{NCN}+\text{M}}}{\text{cm}^3/\text{mol s}}$	$\frac{k_{\text{NCN}+\text{NCN}}}{\text{cm}^3/\text{mol s}}$
1517	961	7.62×10^{-6}	12	-	3.0×10^{12}
1642	990	7.25×10^{-6}	16	-	2.5×10^{12}
1665	1008	7.28×10^{-6}	12	-	4.0×10^{12}
1685	1020	7.28×10^{-6}	13	-	3.5×10^{12}
1763	1099	7.50×10^{-6}	17	-	3.0×10^{12}
1900	1227	7.77×10^{-6}	20	-	5.0×10^{12}
2012	1331	7.96×10^{-6}	19	1.4×10^8	-
2014	1334	7.97×10^{-6}	31	1.8×10^8	-
2024	1304	7.75×10^{-6}	20	2.0×10^8	-
2317	1619	8.41×10^{-6}	18	1.5×10^9	-
2357	1663	8.49×10^{-6}	22	1.2×10^9	-
2561	1854	8.71×10^{-6}	26	2.5×10^9	-
2924	2204	9.07×10^{-6}	50	2.5×10^{10}	-
$\rho \approx 1.3 \times 10^{-5} \text{ mol}/\text{cm}^3$, reflected shock wave					
1156	1134	1.18×10^{-5}	5	-	5.0×10^{12}
1322	1415	1.29×10^{-5}	5	-	5.0×10^{12}
1432	1599	1.34×10^{-5}	7	-	2.5×10^{12}
1588	1884	1.43×10^{-5}	7	-	3.0×10^{12}

Table 2: Experimental conditions and results of shock tube experiments with N_2O as an O atom precursor.

T/K	p/mbar	$\rho/(\text{mol}/\text{cm}^3)$	$x(\text{NCN})/\text{ppm}$	$x(\text{N}_2\text{O})/\text{ppm}$	$\frac{k_{\text{NCN}+\text{O}}}{\text{cm}^3/\text{mol s}}$
$\rho \approx 4.3 \times 10^{-6} \text{ mol}/\text{cm}^3$					
2099	709	4.06×10^{-6}	63	1052	8.0×10^{13}
2285	797	4.20×10^{-6}	63	1052	1.0×10^{14}
2438	870	4.29×10^{-6}	63	1052	6.0×10^{13}
2459	882	4.31×10^{-6}	58	700	8.0×10^{13}
2541	921	4.36×10^{-6}	63	1052	6.0×10^{13}
2580	939	4.38×10^{-6}	57	1275	7.0×10^{13}
2783	1040	4.50×10^{-6}	55	1948	8.0×10^{13}
$\rho \approx 8.2 \times 10^{-6} \text{ mol}/\text{cm}^3$					
1826	1176	7.75×10^{-6}	17	4280	6.0×10^{13}
1866	1198	7.72×10^{-6}	20	1080	6.0×10^{13}
1900	1232	7.79×10^{-6}	19	1080	8.0×10^{13}
1964	1289	7.89×10^{-6}	22	1080	7.0×10^{13}
1977	1305	7.94×10^{-6}	29	1068	6.5×10^{13}
2138	1454	8.18×10^{-6}	21	1080	6.5×10^{13}
2409	1713	8.55×10^{-6}	55	1046	6.0×10^{13}
2563	1861	8.76×10^{-6}	38	1977	9.0×10^{13}