



Modellering og Kemisk Reaktion

Statusrapport: Reaktionskinetisk database/
Den kemisk kinetiske model

Peter Glarborg & Sven Hadvig
Danmarks Tekniske Højskole



Nordisk Gasteknisk Center

Nordic Gas Technology Centre

MODELLERING OG KEMISK REAKTION

**Statusrapport:
Reaktionskinetisk database/Den kemisk kinetiske model**

Peter Glarborg & Sven Hadvig
Laboratoriet for Varme- & Klimateknik
Danmarks Tekniske Højskole

NGC-rapport
Forbrændingsteknik & Miljø
Juli 1989

NGC's projekter "Modellering af forbrændingsprocesser" og "Reburning".

Der fokuseres i disse år på mulighederne for at reducere emissionen af kvælstofoxider, NO_x , fra forbrændingsprocesser. Naturgas, der er et meget rent brændsel, kan generelt forbrændes med lav emission af forurenende stoffer, men dog ikke uden dannelse af en vis mængde kvælstofilter.

Nordisk Gasteknisk Center gennemfører med start primo 1989 og slutning ultimo 1990 to projekter, der skal lede til en bedre forståelse af dannelsen af NO_x og dermed skabe bedre muligheder for at nedbringe emissionen af NO_x fra forbrændingsprocesser. De to projekters titler er

Modellering af forbrændingsprocesser

og

Reburning.

1. Modellering af forbrændingsprocesser.

Projektet "Modellering af forbrændingsprocesser" har til formål at udvikle en EDB-model, der ved integration af flow- og forbrændingsmodeller samt en detaljeret beskrivelse af de reaktioner, der leder til dannelse af kvælstofilter, kan anvendes til udvikling af forbrændingsprocesser med lav NO_x -emission. Programmet skal i detaljer muliggøre studier af for eksempel brænderudformning, forbrændingsrummets størrelse og udformning samt driftsforhold. Projektet afsluttes med et antal scenarier, hvor mulighederne for at opnå lavere NO_x -emission vurderes.

Projektet udføres af

Sintef, Trondheim
Afdeling for Varmeteknikk

Danmarks Tekniske Højskole, Lyngby
Laboratoriet for Varme- og Klimateknik

Åbo Akademi, Åbo
Kemisk Tekniska Fakulteten.

2. Reburning.

Reburning er en proces, hvor naturgas anvendes som et additiv, der ved tilsætning til røggas fra for eksempel forbrænding af kul, reducerer røggassens indhold af kvælstofilter.

Naturgas injiceres efter den primære forbrændingszone, hvorved der skabes en zone med reducerende forhold, den såkaldte reburningszone. Her nedbrydes kvælstofilterne af reaktionsvillige kulbrinteradikaler. Efter reburningszonen tilledes luft, sådan at uforbrændt naturgas oxideres før røggassen går til kedlens konvektionspart.

Ved laboratorie- og pilotskalaforsøg er det vist, at reduktion af kvælstofiltereemissionen på over 50% er mulig med processen, men betydningen af procesparametre som primært og sekundært luftoverskud, temperaturforhold, opholdstid og tilsat mængde naturgas er endnu ikke fuldstændigt beskrevet.

Disse faktorer undersøges i dette projekt. Under anvendelse af det ovenfor beskrevne beregningsværktøj, der modificeres til også at beskrive reburningsforhold er det formålet at optimere reburningprocessen, blandt andet under inddragelse af

resultater fra afsluttede og igangværende demonstrationsprojekter i anden regi.

Projektet udføres af

Sintef, Trondheim
Afdeling for Varmeteknik

Danmarks Tekniske Højskole, Lyngby
Laboratoriet for Varme- og Klimateknik

Åbo Akademi, Åbo
Kemisk Tekniska Fakulteten

Kungliga Tekniska Högskolan
Institutionen för Värme- och Ugnsteknik.

3. Publicering af projektresultater.

Resultaterne fra de to projekter beskrives i en række rapporter, som udarbejdes af de enkelte projektdeltagere, efterhånden som arbejdet skrider frem. Disse rapporter tjener flere formål, blandt andet skal de sikre formidlingen af resultater mellem de enkelte deltagere. Da rapporterne vil indeholde den nyeste viden på området, og da Nordisk Gasteknisk Center ønsker at udbrede kendskabet til nye anvendelsesområder for naturgassen, offentliggøres projektrapporterne efterhånden som de udfærdiges.

Det skal bemærkes, at rapporterne udgives af NGC, men optrykkes uændret, som de er udarbejdet af de enkelte konsulenter. Rapporterne giver altså ikke nødvendigvis udtryk for holdninger, der kan tillægges NGC. Det er vort håb, at der må være interesse for disse udgivelser.

Resumé

Denne statusrapport beskriver de igangværende bestræbelser på at opstille en pålidelig kemisk kinetisk model for forbrænding af naturgas, herunder dannelse og nedbrydning af uønskede forbrændingsprodukter såsom NO_x . Projektet er et delprojekt under NGC-projektet *Modellering og kemisk reaktion*.

Delprojektet indeholder følgende faser: 1) opbygning af en reaktionskinetisk database for forbrænding af naturgas, 2) opstilling af kemisk kinetisk model på grundlag af databasen, og 3) verifikation og revision af model og delmekanismer gennem test mod udvalgte eksperimentelle data.

Omfang og format for databasen diskuteres, og en preliminær udgave af databasen gengives i appendiks A. Der gøres status for den kemisk kinetiske model og vises eksempler på sammenligninger mellem modelberegninger og eksperimentelle data. En foreløbig anbefalet reaktionsmekanisme til beskrivelse af kvælstofkemien ved naturgasfyring, f.eks. i forbindelse med simulering af reburning, er listet i appendiks B. Dele af den kinetiske model, der kræver yderligere forskningsindsats, identificeres.

Abstract

This status report describes the ongoing efforts to develop a reliable chemical kinetic model for combustion of natural gas, including formation and destruction of pollutants such as NO_x . The project is part of the NGC-project *Modelling of Chemically Reactive Turbulent Flow*.

This part of the project contains the following phases: 1) collection of a chemical kinetic database for combustion of natural gas, 2) development of a chemical kinetic model, using the data base, and 3) verification and revision of model and submechanisms through test against selected experimental data.

The scope and the format of the data base is discussed, and a preliminary version of the database is listed in appendix A. A status is made for the chemical kinetic model and examples of comparison between predictions and experimental data are shown. A preliminary recommended reaction mechanism describing the nitrogen chemistry in natural gas combustion that can be used to simulate e.g. reburning is shown in appendix B. Parts of the kinetic model that require further research are identified.

Indholdsfortegnelse

1. Indledning	1
1.1 Baggrund	1
1.2 Strategi for opstilling af kinetisk model	2
2. Databasen	4
2.1 Organisation og omfang	5
2.2 Kilder	11
2.3 Status	13
3. Den kemisk kinetiske model	14
4. Referencer	15
Appendiks A: Databasen	17
Appendiks B: Den kemisk kinetiske model	52

1 INDLEDNING

Denne rapport er en statusrapport for en af delaktiviteterne i NGC-projektet *Modellering og kemisk reaktion*: udvikling og verifikation af en kemisk kinetisk model, der kan beskrive gasfasekemien ved forbrænding af naturgas, herunder dannelse og nedbrydning af uønskede forbrændingsprodukter såsom NO_x .

Delprojektet indeholder følgende faser:

- Opbygning af en reaktionskinetisk database for forbrænding af naturgas.
- Opstilling af kemisk kinetisk model på grundlag af databasen.
- Verifikation og revision af model og delmekanismer gennem test mod udvalgte eksperimentelle data.

Disse tre faser gennemføres ikke kronologisk; snarere kører de sideløbende hen gennem projektet. Dette er beskrevet i afsnit 1.2.

1.1 Baggrund

I de kommende år vil der blive stillet stadig større miljømæssige krav til forbrændingsprocesser. For at imødekomme disse krav bliver det nødvendigt at optimere forbrændingsprocesserne med henblik på at minimere emissionen af uønskede forbrændingsprodukter. Dette er baggrunden for, at der gøres en stor indsats for at udvikle modeller til beskrivelse af forbrændingsprocessen. Ved hjælp af disse modeller vil det blive muligt at få et overblik over, hvorledes forskellige forbrændingsparametre påvirker sammensætningen af forbrændingsprodukterne, herunder indholdet af NO_x og andre uønskede emittanter.

For kvantitativt at kunne beregne sammensætningen af forbrændingsprodukterne er det nødvendigt at beskrive selve forbrændingsprocessen på elementært reaktionsniveau. Dette sker med en kemisk kinetisk model. Kemisk

kinetisk modellering hænger som forskningsområde tæt sammen med forbrænding. Forskningen indenfor området blev sat igang af usædvanlige forbrændingsfænomener såsom eksplosionsgrænser, antændingsforsinkelse og inhibering. Disse fænomener kan kun forklares ud fra samspillet mellem de elementære gasreaktioner, som gradvist er blevet identificeret gennem mange års forskning.

Anvendelsen af kemisk kinetisk modellering er et relativt nyt fænomen i de nordiske lande. Det er også først i disse år, at forskningen har nået et niveau, der medfører praktiske anvendelsesmuligheder. At man er kommet så langt skyldes bl.a. udviklingen af kraftige computere og udviklingen af bedre måleteknikker baseret på laserteknologi. Den kinetiske modellering har især vist sig nyttig indenfor energiomdannelsessystemer, men begynder også at få anvendelse indenfor vurdering af sikkerhedsfaktorer ved oplagring, transport og brug af flydende og gasformige brændsler. Indenfor forskning i forbrændingsmotorer bruges denne type modellering bl.a. til at analysere årsagerne til bankning (knock) og til at vurdere effekten af potentielle antiknock-tilsætningsstoffer. Indenfor udvikling af stationære forbrændingssystemer anvendes kinetisk modellering bl.a. til at analysere dannelsen af uønskede kemiske komponenter, såsom NO_x , PAH, klorinerede kulbrinter og sod. Det vigtigste anvendelsesområde har denne type modellering måske haft i forbindelse med udviklingen og brugen af selektive ikke-katalytiske NO_x -reduktionsteknikker, såsom termisk de- NO_x (traditionel SNR med ammoniak) og rapre- NO_x (SNR med cyanursyre).

I øjeblikket sker der en omfattende anvendelse af kinetiske modeller i forbindelse med udvikling og optimering af lav- NO_x -teknikken *reburning*. Dette stiller imidlertid meget store krav til den kinetiske model. Reburning er kemisk en meget kompliceret proces, idet den er styret af dannelse og nedbrydning af kulbrinte- og kvælstofradikaler, som er meget reaktive og kun tilstede i sporkoncentrationer. Gennem dette arbejde forsøger vi at udvikle en kinetisk model, der opfylder disse krav.

1.2 Strategi for opstilling af kinetisk model

Opdelingen af overordnede processer i en række af elementære reaktioner medfører en række vanskeligheder. Under processen dannes og nedbrydes

en række intermedieære komponenter, hvoraf mange er særdeles reaktive, kun tilstede i sporkoncentrationer og med en kort levetid — og alligevel med stor indflydelse på forbrændingsprocessen og forbrændingsprodukterne. Dette kan gøre det til en særdeles vanskelig opgave at opnå en detaljeret forståelse af et sådant system.

Opgaven kan imidlertid simplificeres betydeligt ved at opdele systemet i delsystemer, som kan analyseres på et simpere niveau. Kemisk kinetiske reaktionsmekanismer er strengt hierarkisk opbygget, idet mekanismerne for forbrænding af mere komplekse brændsler indeholder delmekanismer for simple brændselsmolekyler. Således indeholder mekanismen for oxidation af CO i fugtig luft som et delsystem kinetikken for H_2/O_2 -systemet. Den resulterende $CO/H_2/O_2$ -mekanisme er en del af kinetikken for oxidation af CH_2O , som igen er en delmekanisme ved CH_4 -forbrænding.

Denne hierarkiske proces kan videreføres til de større kulbrinter, hvor hver ny mekanisme bygger på mekanismer for simple molekyler. En reaktionsmekanisme kan derfor udvikles systematisk, ved at begynde med de simpleste komponenter og reaktioner, og derefter gradvist at indarbejde mere komplekse specier. På hvert niveau er det kun den sidst tilføjede del af mekanismen, der kræver en grundig undersøgelse.

Opbygningen af en reaktionsmekanisme for et givet system sker så vidt muligt udfra eksperimentelle resultater. Man kan skelne imellem to typer kemisk kinetiske eksperimenter. Den første type kan betegnes *reaktions-specifik* og består af eksperimenter, som er designet til at isolere og måle hastighedskoefficienter for bestemte elementære kemiske reaktioner. Den anden type, *ikke-reaktions-specifik*, kan kun give oplysninger om bestemte blandinger af brændsel og oxidant. Fortolkning af sidstnævnte type eksperimenter, f.eks. kompositionsprofiler for lavtryksflammer, flammehastigheder eller induktionstider ved shock-tube eksperimenter, kræver normalt en kompleks kemisk kinetisk model. Metoden til at opstille en reaktionsmekanisme for et givet system er at fortolke en række ikke-reaktions-specifikke eksperimenter udfra alle til rådighed værende reaktionsspecifikke data.

Databasen, der opbygges i projektet, indeholder så vidt muligt den tilgængelige reaktionsspecifikke information. På grundlag af databasen opstilles en kinetisk model. Modellen testes mod udvalgte ikke-reaktions-specifikke eksperimentelle data. Følsomhedsanalyse og rate-of-production analyse

viser hvilke reaktioner og delmekanismer, der har størst betydning. Viser databasen, at der er stor usikkerhed på de pågældende reaktionshastigheder, søges yderligere reaktionsspecifikt materiale for disse reaktioner samtidig med, at pågældende delmekanismer testes mod egnede eksperimentelle data. På basis af dette revideres modellen, hvorefter proceduren kan gentages.

2 DATABASEN

Databasen skal fungere som basis for opstilling af kemisk kinetiske modeller, der kan beskrive gasfasekemi ved forbrænding af naturgas, herunder dannelse og nedbrydning af uønskede forbrændingsprodukter såsom NO_x .

I litteraturen findes allerede adskillige databaser, som indeholder omfattende samlinger af elementære hastighedskoefficienter. Hvorfor opbygge endnu een? Dette skyldes to forhold:

- *De publicerede databaser er utilstrækkelige.* I litteraturen findes databaser for reaktioner i $C/H/O$ -systemet og $N/H/O$ -systemet. Imidlertid dækker ingen publicerede databaser hele $H/C/N/O$ -systemet inkl. reaktioner mellem kulbrinter og kvælstofforbindelser og oxidation af cyanidforbindelser. Disse reaktioner er nødvendige for at kunne beskrive dannelse og nedbrydning af NO ved forbrænding af naturgas.
- *De publicerede databaser må ajourføres.* Vidensopbygningen indenfor dette område sker så hurtigt, at en database forældes i løbet af ganske kort tid, ofte 1-2 år. Kun få elementære reaktionshastigheder er bestemt eksperimentelt med så stor sikkerhed, at det overflødig gør nye data. For langt hovedparten af reaktionerne indenfor $H/C/N/O$ -systemet er der stadig betydelige usikkerheder med hensyn til reaktionshastighed og i nogle tilfælde tillige produktkanaler. Det er derfor vigtigt fortløbende at opdatere databaser og derudfra de kinetiske modeller.

2.1 Organisation og omfang

Skulle databasen dække alle aspekter af forbrændingskemi ved naturgasfyring, ville den komme til at omfatte over hundrede komponenter og over tusind elementære reaktioner. Dette ligger klart udenfor rammerne af nærværende projekt. Det har været nødvendigt at foretage en afgrænsning. I første omgang har vi valgt at afgrænse omfanget af databasen på følgende måde:

- Databasen dækker kun reaktioner og komponenter, der har betydning ved forbrænding af naturgas.
- Databasen dækker fortrinsvis C_1 - og C_2 -kulbrinter og kvælstofholdige komponenter. For at kunne beskrive understøkiometrisk forbrænding tilfredsstillende er der dog medtaget enkelte specier indeholdende mere end to kulstofatomer.
- Databasen dækker fortrinsvis reaktioner af betydning i temperaturområdet 1300–2500K.

Der er således lagt vægt på at dække forbrændingskemi for de komponenter, der har betydning for selve forbrændingsprocessen, samt kvælstofkemi, der har interesse af miljømæssige grunde. Dannelse af tungere kulbrinter, herunder *PAH*, dækkes ikke af databasen i dens nuværende form.

Med disse begrænsninger omfatter databasen følgende delsystemer og komponenter:

C/H/O-systemet:

- H_2/O_2 -systemet:
 - $H, O, OH, H_2, O_2, H_2O, HO_2, H_2O_2$
- $CO/H_2/O_2$ -systemet: ovenstående plus
 - CO, CO_2
- CH_4/O_2 -systemet: ovenstående plus

- $CH_4, CH_3, CH_3O, CH_2OH, CH_2O, HCO$
 $CH_2, CH_2(s), CH, C$
- C_2H_6/O_2 -systemet: ovenstående plus
 - $C_2H_6, C_2H_5, C_2H_4, C_2H_3, C_2H_2, CH_2CO, HCCO, C_2H, C_2$
- reaktioner for udvalgte C_3 - og C_4 -specier:
 - $C_4H_3, C_4H_2, C_3H_4, C_3H_3, C_3H_2$

$H/C/N/O$ -systemet:

- NH_3/O_2 -systemet: H_2/O_2 -systemet plus
 - $NH_3, NH_2, NH, N,$
 $N_2H_4, N_2H_3, N_2H_2, NNH, N_2$
 NO, HNO, NO_2, N_2O
- HCN/O_2 -systemet: NH_3/O_2 -systemet og $CO/H_2/O_2$ -systemet plus
 - $HCN, CN, NCO, HCNO, HOCN, HNCO,$
 H_2CN, C_2N_2, NCN
- reaktioner mellem kulbrinter og kvælstofforbindelser
- samt resten af $H/C/O$ -systemet

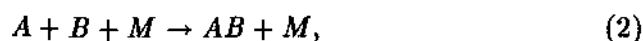
Databasen er organiseret efter ovennævnte struktur. Hastighedskoefficienter præsenteres først for H_2/O_2 -systemet, dernæst for reaktioner med CO og CO_2 og så kulbrintereaktioner ordnet efter størrelse fra C_1 til C_4 . Dernæst følger reaktionshastigheder fra $N/H/O$ -systemet, reaktioner med cyanider og til slut reaktioner mellem kulbrinte- og kvælstofspecier, organiseret efter kulbrinterne.

Hastighedskoefficienter er givet som Arrhenius-udtryk på formen

$$k = AT^\beta \exp(-E/RT), \quad (1)$$

Den temperaturuafhængige del, A , af den præeksponentielle faktor er givet i enheden $(\text{cm}^3/\text{mol})^{n-1}\text{s}^{-1}$, som er afhængig af reaktionsordenen n . Eksponenten β er dimensionsløs, og aktiveringsenergien E er givet i enheden cal/mol. I tilfælde af, at en reaktionshastighed kun er målt ved een temperatur eller er uafhængig af temperatur, gælder $A = k$. Enheder og form er valgt i overensstemmelse med det krævede input til det amerikanske programbibliotek CHEMKIN (Kee *et al.* 1980). CHEMKIN kan betragtes som et højniveau computersprog til løsning af kemisk kinetiske problemer.

For de trykafhængige reaktioner er det målet at medtage hastighedsudtryk for både højtryksgrænsen og lavtryksgrænsen i det omfang, de er tilgængelige. Ved lavtryksgrænsen,



beskrives reaktionen ved hastighedsudtrykket

$$k_0 = A_0 T^{\beta_0} \exp(-E_0/RT), \quad (3)$$

mens der ved højtryksgrænsen,



gælder udtrykket

$$k_\infty = A_\infty T^{\beta_\infty} \exp(-E_\infty/RT). \quad (5)$$

I mellem højtryks- og lavtryksgrænsen, i fall-off området, gælder ingen af de to hastighedsudtryk. Dette er illustreret på figur 1, hvor k_0 og k_∞ er tegnet ind på et logaritmisk plot. Den fuldt optrukne kurve viser den observerede fall-off opførsel.

En måde at beskrive trykafhængigheden på matematisk er at benytte et 6-parameterudtryk af Lindemann-formen. Her beregnes den aktuelle hastighed ved udtrykket

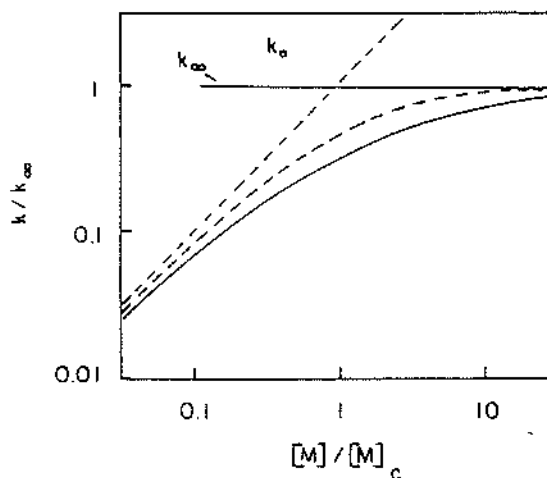


Figure 1: Fall-off-kurve for dissociations- eller rekombinations-reaktion. Den punkterede kurve er beregnet ud fra en 6-parameter-tilnærmelse (Lindemann), mens den fuldt optrukne kurve viser den observerede fall-off-opførsel. (Gardiner & Troe 1984).

$$k = \frac{k_{\infty}}{(1 + \alpha/[M])}. \quad (6)$$

Her er α givet ved

$$\alpha = \frac{A_{\infty}}{A_0} T^{\beta_{\infty} - \beta_0} \exp((E_{\infty} - E_0)/RT), \quad (7)$$

og $[M]$ beregnes af

$$[M] = \frac{P}{RT}. \quad (8)$$

På figur 1 er vist en sammenligning mellem den observerede fall-off kurve (fuldt optrukken) og fall-off kurven beregnet ved Lindemann-udtrykket (punkteret). For små molekyler giver Lindemann-udtrykket normalt en tilstrækkelig god beskrivelse af trykafhængigheden. Her vil afvigelsen typisk

være mindre end 30%. For større molekyler bliver den beregnede hastighed imidlertid ofte uacceptabelt høj i fall-off-området og her kan det være nødvendigt med en bedre tilnærmelse.

For de reaktioner, hvor Lindemann-udtrykket ikke er tilstrækkeligt nøjagtigt, er det muligt at anvende et 9-parameterudtryk til at beskrive reaktionshastigheden i fall-off området. Udtryk af denne type er opstillet af hhv. Troe (1977, 1979, 1983) og SRI International (Stewart *et al.* 1988). I denne tilnærmelse antager man, at den unimolekylære reaktionshastighed kan repræsenteres som funktion af tryk og temperatur ved et udtryk, hvori indgår k_0 , k_∞ og en "centerkorrektionsparameter", F_c . F_c er et mål for afvigelsen af den beregnede eller eksperimentelt bestemte hastighedskonstant fra den værdi, der forudsiges ud fra Lindemann-udtrykket ved centrum af fall-off kurven, dvs. ved det tryk, hvor $k_0 = k_\infty$. I SRI's version finder man, at

$$k = k_\infty \frac{k_0/k_\infty}{1 + k_0/k_\infty} F_c^X, \quad (9)$$

hvor

$$X = \frac{1}{1 + \log^2(k_0/k_\infty)}. \quad (10)$$

F_c udtrykkes som funktion af temperaturen som

$$F_c = a \exp(-b/T) + \exp(-T/c). \quad (11)$$

Beklageligvis kan hverken 6- eller 9-parameterudtrykkene bruges som input i standardversionen af CHEMKIN, kun det traditionelle Arrhenius udtryk. For de reaktioner, der er i fall-off området under de aktuelle temperatur- og trykforhold er man således nødt til at opstille et tilnærmet Arrhenius udtryk.

For en række af de trykafhængige reaktioner i lavtryksområdet er der rapporteret kollisionseffektiviteter (third body effektiviteter). Disse angives i

databasen i det omfang, de er tilgængelige. Hvor intet er anført, gælder reaktionshastigheden for en inert third body (A_r eller N_2).

De i databasen citerede reaktionshastigheder kan være fremkommet ud fra reaktionsspecifikke eksperimenter eller ud fra teoretiske analyser såsom RRKM. De kan endvidere være estimeret (f.eks. ud fra analogi med andre reaktioner) eller afledt af ikke-reaktionsspecifikke eksperimenter. For at give et indtryk af pålideligheden af de refererede data er det tanken, at tabellerne skal indeholde oplysninger om, hvordan reaktionshastigheden er fremkommet. Er den eksperimentelt bestemt skal der være en kort beskrivelse af den anvendte eksperimentelle teknik, dvs. *reaktortype*, *kilde* til de reaktive komponenter, og *analysemetode* til produkter/reaktionshastighed. Følgende forkortelser vil her blive anvendt:

REACTOR TYPE

SR statisk reaktor

ST shock tube

FR flow reaktor

FL flamme

RADIKAL PRODUKTION

TH termisk

DI discharge

PH photolysis

FP flash photolysis

HG *Hg* sensitization

PR pulse radiolysis

ANALYSE

GC gaschromatographi
UA uv absorption
UE uv emission
UE ir emission
RA resonans absorption
RF resonans fluorescence
LF laserinduceret fluorescence
P tryk måling
MS masse spektrometri
LS laser schlieren
ES elektron spin resonans
LM laser magnetisk resonans
SC mætningsstrøm (saturation current)
CP katalytisk probe
CL chemiluminescence

2.2 Kilder

Den foreliggende database er opbygget på grundlag primært af tilgængelige samlinger af elementære hastighedskoefficienter i litteraturen. Disse indbefatter:

- Baulch, D.L., Drysdale, D.D., Horne, D.G., & Lloyd, A.C., *Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions, Vol. 1*, CRC Press, Cleveland, 1973
- Baulch, D.L., Drysdale, D.D., Horne, D.G., & Lloyd, A.C., *Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions, Vol. 2*, CRC Press, Cleveland, 1973

- Baulch, D.L., Drysdale, D.D., Duxbury, J., & Grant, S.J., *Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions, Vol. 3*, Butterworth, London, 1976
- Cohen, N., & Westberg, K., "Chemical Kinetic Data Sheets for High Temperature Chemical Reactions", *J.Phys.Chem.Ref.Data* **12**, 531, 1983
- Warnatz, J., "Rate Coefficients in the C/H/O System", *Combustion Chemistry* (W.C. Gardiner, Jr., ed.), Springer-Verlag, New York, 1984
- Hanson, R.K., & Salimian, S., "Survey of Rate Constants in the N/H/O System", *Combustion Chemistry* (W.C. Gardiner, Jr., ed.), Springer-Verlag, New York, 1984
- CODATA: "Evaluated Kinetic and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry: Supplement II. CODATA Task Group on Gas Phase Chemical Kinetics", *J.Phys.Chem.Ref.Data* **13**, 1259, 1984
- Tsang, W., & Hampson, R.F., "Chemical Kinetic Data Base for Combustion Chemistry. Part 1. Methane and Related Compounds", *J.Phys.Chem.Ref.Data*, **15**, **3**, 1087, 1986
- Herron, J.T., "Evaluated Chemical Kinetic Data for the Reactions of Atomic Oxygen $O(^3P)$ with Saturated Organic Compounds in the Gas Phase", *J.Phys.Chem.Ref.Data*, **17**, **3**, 967, 1988

Disse kilder er suppleret med hastighedsdata publiceret i litteraturen. En systematisk gennemgang af hele litteraturen ligger udenfor rammerne af dette projekt. I stedet udvælges en række relevante kilder, fortrinsvis tidsskrifter for fysisk kemi. Imidlertid vil også organer, som primært beskæftiger sig med forbrænding, kunne indeholde hastighedsdata for kemiske reaktioner. Tidsskrifter og konferenceproceedings, der offentliggør denne type data, inkluderer:

- *ACS Symposium Series*
- *Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie, Berichte*
- *Chemical Physics*

- *Chemical Physics Letters*
- *Combustion & Flame*
- *Combustion Science and Technology*
- *International Journal of Chemical Kinetics*
- *Journal of Chemical Physics*
- *Journal of Physical Chemistry*
- *Journal of Physical and Chemical Reference Data*
- *Journal of the American Chemical Society*
- *Journal of the Chemical Society Faraday Transactions*
- *Progress in Energy and Combustion Science*
- *Review of Chemical Intermediates*
- *Symposium (International) on Combustion*
- *Symposium on Shock Tubes and Waves*

2.3 Status

En preliminær udgave af databasen er gengivet i appendiks A. Format og indhold skal defineres nærmere af projektdeltagerne og NGC. Dette må naturligvis ske under hensyntagen til, at der kun er afsat begrænsede ressourcer til arbejdet med databasen.

Databasen i sin nuværende form er ufuldstændig. Således er kilder kun angivet med forfatter/år; de nøjagtige referencer er endnu ikke lagt ind. Det valgte (foreløbige) format er ikke gennemført konsekvent endnu. Trods sine mangler indeholder databasen imidlertid allerede nu vigtig information, hvilket har været baggrunden for at inkludere den i hele sin udstrækning i denne statusrapport.

Der er ikke i databasen givet anbefalinger for de enkelte reaktioner, men i appendiks B gives en preliminær liste med anbefalede hastighedskoefficienter for en række vigtige reaktioner (se næste sektion).

3 DEN KEMISK KINETISKE MODEL

En preliminær version af den kemisk kinetiske model er listet i appendiks B. Denne model tager primært sigte på at kunne beskrive kvælstofkemien ved NO_x -reduktion gennem reburning med naturgas. Modellen er hovedsaglig baseret på mekanismen af Glarborg *et al.* (1986). Imidlertid er modellen blevet revideret ud fra arbejdet med databasen. Endvidere er inkorporeret en del ændringer foreslået af Miller & Bowman (1989) i deres nylige review af kvælstofkemien ved forbrænding.

De eksperimentelle data, der fortløbende anvendes til at teste den kinetiske model indbefatter:

- Koncentrationsprofiler fra lavtryks-, laminare flammer
- Data fra shock tube forsøg
- Data fra flow reaktor forsøg
- Data fra mixed-flow reaktor forsøg

Således er $H/C/O$ -reaktionsmekanismen blevet testet mod bl.a. koncentrationsprofiler for CH_i -komponenter og fri radikaler i flammer (se $CH_4/O_2/Ar$ -flammen vist på figur 2) og H - og O -atomprofiler fra shock-tube eksperimenter med forskellige blandinger inkl. CH_4/Ar , C_2H_6/Ar , $CH_4/O_2/Ar$ og $C_2H_6/O_2/Ar$. Beregning af koncentrationsprofiler for radikaler og kulbrinte-fragmenter er en langt mere krævende test end modellering af profilerne for de mere stabile komponenter såsom CH_4 , O_2 , CO , etc. i laminare flammer.

Hele $H/C/N/O$ -systemet er blevet testet mod data fra laminare flammer, flow-reaktorer og mixed-flow-reaktorer.

På grundlag bl.a. af disse beregninger har det været muligt at udpege nogle delområder af den kinetiske model, der skal forbedres. Disse indbefatter:

- $H/C/O$ -systemet:
 - Under brændselsrige forhold (luftoverskudstal < 0.80)

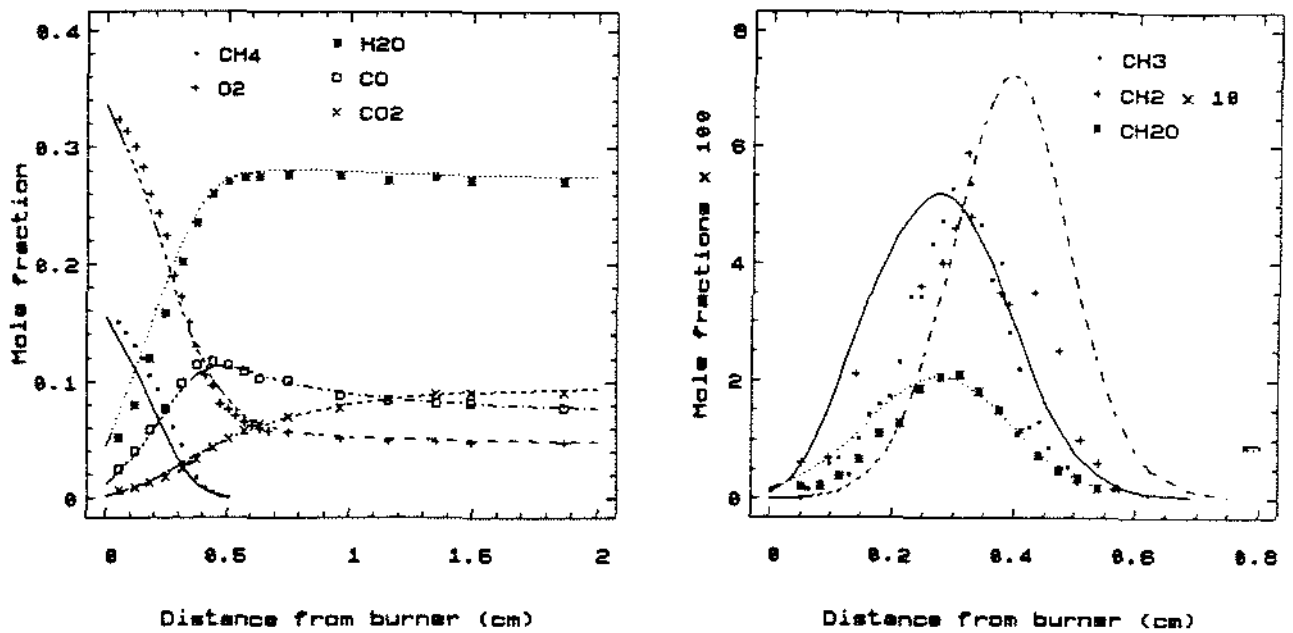


Figure 2: Sammenligning mellem målte (Hennesey *et al.* 1986) og beregnede (kurver) koncentrationsprofiler for en lavtryks-, brænder-stabiliseret $CH_4/O_2/Ar$ flamme.

- I middeltemperaturområdet (1200-1800K)

- CH_i -reaktioner
- Kulbrinte+kvælstof reaktioner
- $H/N/O$ -systemet, specielt HNO -reaktioner

4 Referencer

- Gardiner, W.C., Jr., & Troe, J., (1984); "Rate Coefficients of Thermal Dissociation, Isomerization and Recombination Reactions", *Combustion Chemistry* (W.C. Gardiner, Jr., ed.), Springer-Verlag, New York, 1984

- Glarborg, P., Miller, J.A., & Kee, R.J., (1986); *Comb.Flame* **65**, 177
- Hennesey, R.J., Robinson, R., & Smith, D.B., (1986); *21. Symp. (Int.) Comb.*, p. 761, 1986
- Kee, R.J., Miller, J.A., & Jefferson, T.H., (1980); "CHEMKIN: A General Purpose, Problem-Independent, Transportabel FORTRAN Chemical Kinetics Code Package", Sandia Report SAND80-8003, Sandia National Laboratories, Livermore, CA 94550, USA
- Miller, J.A., & Bowman, C.T., (1989); *Prog.Energy & Comb.Sci.*, under udgivelse
- Stewart, P.H., Rothem, T., & Golden, D.M., (1988); *22. Symp. (Int.) Comb.*, under udgivelse
- Troe, J., (1977); *J.Chem.Phys.* **66**, 4758
- Troe, J., (1979); *J.Phys.Chem.* **83**, 114
- Troe, J., (1983); *Ber.Bunsenges.Phys.Chem.* **87**, 161

Appendiks A: Database

REACTION	source	method	Arrhenius expression	temp. (K)	est. max. rel. dev.
H+H+M = H2+M					
	Tsang & Hampson 1985	review	N2 5.40E18 -1.3 0	77-2000	2
plm	Dixon-Lewis 1981	FL TH	1.00E18 -1.0 0		
			H2,H2O,CO2/0/		
plm	Dixon-Lewis 1981	FL TH	H2 9.20E16 -0.6 0		
plm	Dixon-Lewis 1981	FL TH	H2O 6.00E19 -1.25 0		
plm	Dixon-Lewis 1981	FL TH	CO2 5.50E20 -2.00 0		
H2+M = H+H+M					
	Tsang & Hampson 1985	review	N2 4.60E19 -1.4 104430	300-2500	3
	Baulch ea 1972	review	2.20E14 0 96000	2500-5000	
H+O+M = OH+M	H2O/5/				
m	Dixon-Lewis 1986	FL TH	6.20E16 -0.6 0		
	Tsang & Hampson 1985	review	4.70E18 -1.0 0	300-2500	10
	Westbrook & Dryer 84	review	1.00E16 0 0		
H+OH+M = H2O+M					
m	Dixon-Lewis 1986	FL TH	1.60E22 -2.0 0		
			H2O\5\		
	Tsang & Hampson 1985	review	2.20E22 -2.0 0	300-3000	2
pl	Miller & Kee 1977	review	7.50E23 -2.6 0		
	Baulch 1972	review	1.40E22 -2.0 0	1000-3000	
H2O+M = H+OH+M					
	Tsang & Hampson 1985	review	3.50E15 0 105100	2000-6000	1.5
H+O2 = OH+O					
l	Fujii ea 1988	ST TH	8.80E14 0.0 23890		
	Glarborg 1987	review	1.40E14 0.0 16240		
	Dixon-Lewis 1986	FL TH	4.20E15 -0.46 16790		
	Frank & Just 1985	ST TH RA tot	2.44E14 0 17270	1700-2500	
	Cohen & Westberg 1983	review	1.69E17 -0.9 17386	300-1250	2.0-1.3
	Miller ea 1981	review	5.10E16 -0.82 16510		
	Chiang & Skinner 1979	ST TH	1.10E14 0 16100	925-1825	
	Bowman 1975	ST TH	6.00E14 0 16790	1875-2240	
	Schott 1973	ST TH	1.20E17 -0.91 16550	1250-2500	
	Baulch ea 1972	review	2.20E14 0 16790	700-2500	
OH+O = H+O2					
m	Miller		4.00E14 -0.5 0		
	Cobos ea 1985	the/rev	1.70E13 0 0	300-2500	
	Warnatz 1984	review	1.80E13 0.0 0	300-2500	
	Cohen & Westberg 1983	review	4.52E14 -0.5 60	200-2500	1.4
	Brune ea 1983	FR	1.90E13 . .	300	
	Baulch ea 1972	review	2.30E13 . .	300	
H+O2+M = HO2+M					
m	Dixon-Lewis 1986	FL TH	Ar 3.61E17 -0.72 0		
			H2O/18.6/ CO2/4.2/ H2/2.86/ CO/2.11/ N2/1.26/		
	Tsang & Hampson 1985	review	O2 6.40E18 -1.0 0	300-2500	
	Tsang & Hampson 1985	review	N2 6.40E18 -1.0 0	300-2500	
	Warnatz 1984	review	Ar 7.00E17 -0.8 0	300-2000	
			CH4/18.6/ H2O/18.6/ CO2/4.2/ H2/2.86/ CO/2.11/ N2/		
pl	Slack 1977		2.10E18 -1.0 0		
			O2,N2/0/		
pl	Slack 1977		O2 6.70E19 -1.42 0		
pl	Slack 1977		N2 6.70E19 -1.42 0		
	Baulch ea 1972	review	Ar 1.50E15 0 -1000	300-2000	
O+O+M = O2+M					
m	Tsang & Hampson 1985	review	1.89E13 0 -1788	200-4000	1.3
O2+M = O+O+M					
	Tsang & Hampson 1985	review	1.80E18 -1.0 118000	300-2500	2

	Warnatz 1984	review		1.20E14	0	108000	2000-10000	
pl	Miller 1981	review		1.90E11	0.5	95560		
	Baulch ea 1976	review		1.80E18	-1.0	118000	3000-18000	
O+OH+M = HO2+M								
	Westbrook & Dryer 84	review	Ar	1.00E17	0	0		
O+H2 = OH+H								
	Dixon-Lewis 1986	FL TH		1.80E05	2.5	6560		
	Sutherland ea 1986	ST FP		1.86E14	0.0	13620	880-2495	
	Sutherland ea 1986	SR FP RF		4.32E13	0.0	10430	504- 923	
ml	Sutherland ea 1986	review		5.00E04	2.67	6290	297-2495	
	Frank & Just 1985	ST TH RA		1.85E14	0.0	13850	1700-2500	
	Warnatz 1984	review		1.50E07	2.0	7550	300-2500	
	Cohen & Westberg 1983	review		1.08E04	2.8	5921	400-1600	1.6-2.0
p	Baulch ea 1972	review		1.80E10	1.0	8900	400-2000	
OH+OH = H2O+O								
	Harding & Wagner 1988	the/rev		1.23E04	2.62	1880	300-2500	
	Cohen & Westberg 1983	review		2.11E08	1.4	-400	300-2000	2
plm	Cohen & Westberg 1979	review		6.00E08	1.3	0		
	Baulch ea 1972	review		6.30E12	0	1100	300-2000	
OH+H2 = H2O+H								
	Frank & Just 1985	ST TH RA		4.74E13	0	6090	1700-2500	
	Warnatz 1984	review		1.00E08	1.6	3300	300-2500	
	Cohen & Westberg	review		6.38E06	2.0	2961	240-2400	1.4-3.0
plm	Dixon-Lewis 1977,1986	FL TH		1.10E09	1.3	3630		
	Baulch ea 1972	review		2.20E13	0	5130	300-2500	
H2+O2 = OH+OH								
plm	Miller & Kee 1977	review		1.70E13	0	47780		
HO2+H = (a): H2+O2 (b): OH+OH (c): H2O+O								
m	Dixon-Lewis 1986	FL TH	a	1.20E13	0	0		
	Tsang & Hampson 1985	review	a	6.62E13	0	2126	298- 773	2
	Warnatz 1984	review	a	2.50E13	0	700	300-1000	
pl	Lloyd 1974	review	a	2.50E13	0	700		
	Baulch 1972	review	a	2.50E13	0	700	300- 800	
m	Dixon-Lewis 1986	FL	b	1.40E14	0	1073		
	Warnatz 1984	review	b	1.50E14	0	1000	300-1000	
pl	Lloyd 1974	review	b	2.50E14	0	1900		
	Baulch ea 1972	review	b	2.50E14	0	1890	300- 800	
	Westbrook & Dryer 84	review	c	5.00E13	0	1000		
HO2+O = OH+O2								
m	Dixon-Lewis 1986	FL TH		1.40E14	0	1073		
	CODATA 1984	review		1.75E13	0	-397	200- 400	1.25
	Warnatz 1984	review		2.00E13	0	0	300-1000	
	Brune ea 1983	FR		3.10E13	.	.	300	
	Baulch ea 1976	review		6.30E13	0	700	300- 800	
pl	Lloyd 1974	review		4.80E13	0	1000		
HO2+OH = H2O+O2								
m	Dixon-Lewis 1986	FL TH		6.50E12	0	0		
	Tsang & Hampson 1985	rev/est		1.44E16	-1.0	1000		2
	Warnatz 1984	review		2.00E13	0	0	300-2000	
pl	Lloyd 1974	review		5.00E13	0	1000		
HO2+HO2 = H2O2+O2								
	Tsang & Hampson 1985	review		1.80E12	0	0		3
	Warnatz 1984	review		2.00E12	0	0	300-1200	

	Baulch ea 1972	review		2.00E12	0	0	300	
a	Troe 1969	ST		2.00E12	0	0	1200	
	H2O2+M = OH+OH+M							
	Cole ea 1989	review		1.29E33	-4.86	53200		
	Tsang & Hampson 1985	review		1.30E33	-4.86	53200	500-2500	2
a	Baulch ea 1972	review		1.20E17	0	45500	700-1500	
	H2O2+H = (a): HO2+H2							
	= (b): H2O+OH							
	Tsang & Hampson 1985	rev/est	a	4.82E13	0	7948	300-1000	1.2-5.0
a	Baulch ea 1972	review	a	1.70E12	0	3750	300- 800	
	Tsang & Hampson 1985	rev/est	b	2.41E13	0	3974	300-1000	1.2-5.0
	Westbrook & Dryer 84	review	b	3.20E14	0	8900		
	H2O2+O = HO2+OH							
	Tsang & Hampson 1985	review		9.63E06	2.0	3974		3
	H2O2+OH = H2O+HO2							
	Tsang & Hampson 1985	review		1.75E12	0	318	460-2500	1.25-3.0
a	Baulch ea 1972	review		1.00E13	0	1800	300- 800	

REACTION	source	method	Arrhenius expression			temp.	est.max.	
						(K)	rel.dev.	
CO+O+M = CO2+M								
	Cole ea 1989	review	2.36E15	0	4340			
pl	Hardy ea 1979	ST TH	3.20E13	0	-4200	1300-2200		
m	Tsang & Hampson 1985	review	N2 6.10E14	0	3000	300-2500	2.5	
CO+OH = CO2+H								
	Cole ea 1989	review	5.47E00	3.14	-4970			
	Warnatz 1984	review	4.40E06	1.5	-740	300-2000		
plm	Baulch ea 1976	review	1.50E07	1.3	-760	250-3000		
CO+O2 = CO2+O								
pl	Baulch ea 1976	review	2.50E12	0	47700	1500-3000	2	
m	Brabbs ea 1971	ST TH	1.60E13	0	41000			
CO+HO2 = CO2+OH								
	Vandocren ea 1986	FL TH	3.50E12	0	8250			
	Westbrook & Dryer 84	review	1.50E14	0	23600			
	Atri ea 1977	SR	1.90E07	.	.	773		
plm	Atri ea 1977	review?	5.80E13	0	22930	700- 900	1.5	
CH4+M = CH3+H+M								
	Tabayashi&Bauer 1979	ST TH	1.00E17	0	85700	1950-2770		
	Heffington ea 1977	ST TH	2.20E17	0	90000	2000-2800		
	Bowman 1975	ST TH	2.00E17	0	88400	1875-2240		
l	Roth & Just 1975	ST TH	4.70E17	0	93100	1700-2300		
p	Hartig ea 1971	ST TH	1.00E17	0	87900	1850-2500		
CH4=CH3+H								
	Tsang & Hampson 1985	review	3.70E15	0	103800	300-2500	1.5	
	Chen & Back 1976	SR	2.80E16	0	107700	995-1103		
	Hartig ea 1971	ST TH	1.30E15	0	104000	1850-2500		
CH3+H+M = CH4+M								
m	Stewart ea 1988		6.00E16	-1.0	0			
			low: 8.0E26/-3.0/0.0	SRI: 0.45/797/979				
			H2\2.0\, CO\2.0\, CO2\3.0\, H2O\5.0\					
CH4+H = CH3+H2								
	Tsang & Hampson 1985	review	2.20E04	3.0	8750	300-2500	1.3-3.0	
a	Clark & Dove 1973	review	2.20E04	3.0	8750	300-1800		
	Roth & Just 1975	ST TH	7.20E14	0	15050	1700-2300		
CH3+H2 = CH4+H								
	Moller ea 1986	ST TH	2.00E13	0	14300	1000-2300		
CH4+O = CH3+OH								
	Herron 1988	review	6.90E08	1.56	8484	400-2500	1.3	
l	Glarborg 1987	review	3.70E07	1.85	7430			
	Tsang & Hampson 1985	review	1.00E09	1.5	8600	300-2500	1.25	
	Roth & Just 1977	ST TH	4.10E14	0	14000			
p	Roth & Just 1977	review	1.20E07	2.1	7620	1500-2250		
CH4+OH = CH3+H2O								
	Zabielaky & Seery 88	FL	9.80E05	2.1	2530	1100-2200		
	Madronich & Felder 84	SR FP	1.60E07	1.83	2770	300-1500		
	Cohen & Westberg 1983	review	1.93E05	2.4	2110	240-2000	1.4	
m	Tully&Ravishankara 80	SR FP	1.60E06	2.1	2460	300-1020		
lp	Zellner&Steinert 1976	SR FP	3.50E03	3.08	2000	300- 900		
CH4+O2 = CH3+HO2								
	Tsang & Hampson 1985	review	4.00E13	0	56910		5	
m	Westbrook & Dryer 84	review	7.90E13	0.0	56000			

CH4+H2O = CH3+H2O2									
m	Tsang & Hampson 1985	est		1.80E11	0	18700			5
	Westbrook & Dryer 84	review		2.00E13	0	18000			
CH4+CH2 = CH3+CH3									
l	Glarborg 1987	rev/est		8.70E07	2.0	11000			
	Bohland ea 1985	FR	tot	4.30E12	0	10030	413-	707	
p	Dobe ea 1985	SR FP	tot	1.30E13	0	9540	296-	705	
	Laufer 1981	review	tot	<2.00E05				300	
CH4+CH2(s) = CH3+CH3									
m	Tsang & Hampson 1985	review		4.30E13	0	0			
l	Langford ea 1983	SR		4.20E13	.	.		300	
CH4+CH = C2H4+H									
plm	Butler ea 1981	SR FP	tot	6.00E13	.	.		300	
CH4+C = CH3+CH									
pl	Glarborg ea 1986	est		5.00E13	0	24000			
CH3+M = CH2+H+M									
l	Glarborg 1987	rev/inf		9.00E15	0	88000			
	Bhaskaran ea 1979	ST TH		6.10E15	0	89200	1700-	2300	
p	Roth ea 1979	ST TH		1.90E16	0	91600	2150-	2850	
CH3+M = CH+H2+M									
	Frank ea 1986	ST TH		3.00E16	0	96430			
CH3+H = (a): CH2+H2									
(b): CH2(s)+H2									
pm	Just 1981	ST TH	tot	9.00E13	0	15100			
	Bhaskaran ea 1979	ST TH	tot	1.80E14	0	15050	1700-	2300	
	Olson&Gardiner 1978	ST TH	tot	7.20E14	0	15000	1800-	2700	
l	Benson ea 1975	est	tot	1.50E13	0	11540			
CH2+H2 = CH3+H									
	Wolff & Wagner 1988	rev/est		5.00E12	0	10000			
	Laufer 1981	review		<3.0E09				300	
	Benson ea 1975	est		3.00E12	0	7000			
CH2(s)+H2 = CH3+H									
m	Tsang & Hampson 1985	review		7.20E13	0	0			1.3
l	Langford ea 1983	SR		8.80E13	0	0			
CH3+O = (a): CH2O+H									
(b): CH2+OH									
	Herron 1988	review	a	8.40E13	0	0	300-	2000	1.5
	Slagle ea 1987	FR	a	8.40E13	0	0	294-	900	
	Warnatz 1984	review	a	7.00E13	0	0	300-	2500	
m	Bhaskaran ea 1979	ST TH	a	8.00E13	0	0	1700-	2300	
pl	Olson&Gardiner 1978	ST TH	a	6.80E13	0	0	1800-	2700	
	Tsuboi 1976	ST TH	a	6.00E13	0	0	1500-	2200	
pl	Glarborg ea 1986	est	b	5.00E13	0	12000			
CH3+OH = (a): CH3OH									
(b): CH3O+H									
(c): CH2OH+H									
(d): CH2+H2O									
(e): CH2(s)+H2O									
(f): CH2O+H2									
	Sworski ea 1980		tot	5.60E13	.	.		300	
	Cole ea 1989	review	b+c	5.40E13	0	0			
	Woods & Haynes 1988	PL TH	b+c	2.20E13	.	.		1840	
	Roth & Just 1984	ST TH	b+c	9.00E14	0	15400			
	Bhaskaran ea 1979	ST TH	b+c	2.00E16	0	27470	1700-	2300	
pl	Glarborg ea 1986	est	d	1.50E13	0	5000			
m	Miller	est	d	7.50E07	2.0	5000			

Woods & Haynes	FL TH	f	1.20E13	.	.	1840	
pl Glarborg ea 1986	est	f	1.00E12	0	0		
CH3O+H = CH3+OH							
m Miller	est	-b	1.00E14	0	0		
CH2OH+H = CH3+OH							
m Miller	est	-c	1.00E14	0	0		
CH2(s)+H2O = CH3+OH							
Hack, Wagner, ea 1988	SR LP	-e	6.50E13	.	.	300	
CH3+O2 = (a): CH3O+O							
(b): CH2O+OH							
m Tsang & Hampson 1985	review	a	2.05E18	-1.57	29229		
Saito ea 1986	ST TH	a	2.20E14	0	33700	1430-2150	
Hsu ea 1983	ST TH	a	1.00E14	0	30800	1150-1560	
p Bhaskaran ea 1979	ST TH	a	7.00E12	0	25600	1700-2300	
l Brabbs & Brokaw 1975	ST TH	a	2.40E13	0	28660	1200-1800	
l Saito ea 1986	ST TH	b	3.20E11	0	9000	1430-2150	
p Bhaskaran ea 1979	ST TH	b	5.20E13	0	34600	1700-2300	
Tsuboi 1976	ST TH	b	8.90E11	0	11940		
CH3+HO2 = CH3O+OH							
Tsang & Hampson 1985	review		2.00E13	0	0	1035-1115	3
Westbrook & Dryer 84	review		2.00E13	0	5000		
CH3+CH3 = (a): C2H6							
(b): C2H5+H							
= (c): C2H4+H2							
p see Miller ea 1984		a	1.60E13	0	-306		
Baulch&Duxbury 1980	review	a	2.40E13	0	0	250- 420	
m see Miller&Bowman 88 (+M)			9.03E16	-1.18	654		
low: 3.18E41/-7.03/2762 Troe: 0.604/6927/32							
l Glarborg 1987	review	b	1.00E12	0	11270		
Frank & Braun-U. 1986	ST TH	b	1.40E13	0	11250	1350-2300	
Kiefer&Budach 1984	review	b	7.80E11	0	13040		
Chiang&Skinner 1981	ST TH	b	1.50E11	.	.	1700	
Just 1981	ST TH	b	8.00E14	0	26630		
Roth & Just 1979	ST TH	b	8.00E14	0	26630	1650-2100	
Saito ea 1986	ST TH	c	6.30E15	0	43000		
Just 1981	ST TH	c	2.10E14	0	19250		
Roth & Just 1979	ST TH	c	1.00E16	0	32000	1650-2100	
CH3+CH3+M = C2H6+M							
Cole ea 1989	review		1.87E32	-4.74	0		
C2H6 = CH3+CH3							
l Saito ea 1986	ST TH	-a	5.80E13	0	75000		
Tsang & Hampson 1985	review	-a	3.20E22	-1.79	91000	800-2500	1.5
Chiang & Skinner 1981	ST TH	-a	2.80E15	0	84240	2-3 bar	
Baulch&Duxbury 1980	review	-a	2.40E16	0	87400	700-1500	
Bhaskaran ea 1979	ST TH	-a	8.00E12	0	70340	2000, 1bar	
C2H5+H = CH3+CH3							
Tsang & Hampson 1985	review	-b	3.60E13	0	0	300- 800	3
p Warnatz 1984	review	-b	4.00E13	0	0	300-1500	
m Miller	est	-b	1.00E14	0	0		
CH3+CH2O = CH4+HCO							
Tsang & Hampson 1985	review		5.50E03	2.81	5860	300-2500	2-3
Westbrook & Dryer 84	review		1.00E10	0.60	6000		
CH3+HCO = (a): CH4+CO							
Baggott ea 1987	SR FP	tot	7.80E13	.	.	300	
Tsang & Hampson 1985	review		1.20E14	0	0	300- 500	2
CH3+CH2 = C2H4+H							
Tsang & Hampson 1985	review		4.20E13	0	0		2
Warnatz 1984	review		4.00E13	0	0	300-2500	

	Laufer 1981	review	4.20E13	.	.	300	
	Bhaskaran ea 1979	ST TH	2.00E13	0	0	1700-2200	
l	Laufer ea 1975	SR FP	6.00E13	.	.	300	
pm	Pilling&Robertson 75	SR FP	3.00E13	.	.	300	
CH3+CH2(s) = C2H4+H							
	Wolff & Wagner 1988	est	1.80E14	0	0	1850-2150	3
	Tsang & Hampson 1985	est	2.00E13	0	0		
CH3+CH = C2H3+H							
plm	Glarborg ea 1986	est	3.00E13	0	0		
CH3+C = C2H2+H							
pl	Glarborg ea 1986	est	5.00E13	0	0		
CH3O+M = CH2O+H+M							
plm	Warnatz 1984	review	1.00E14	0	25000	1000-2200	
CH3O+H = CH2O+H2							
	Tsang & Hampson 1985	review	2.00E13	0	0	300-2500	3
plm	Hoyerermann 1981	FR	2.00E13	0	0	298	
CH3O+O = CH2O+OH							
	Herron 1988	review	2.00E13	0	0	300-2000	3
	Tsang & Hampson 1985	est	6.00E12	0	0	300-2500	5
plm	Miller ea 1982	est	1.00E13	0	0		
	Hoyerermann 1981	FR	<5.00E12	.	.	298	
CH3O+OH = CH2O+H2O							
	Tsang & Hampson 1985	est	2.00E13	0	0		5
plm	Miller ea 1982	est	1.00E13	0	0		
CH3O+O2 = CH2O+HO2							
	Tsang & Hampson 1985	review	6.60E10	0	2600		5
	Warnatz 1984	review	1.00E13	0	7200		
plm	Gutman ea 1982		6.30E10	0	2600	298- 630	
CH3O+HO2 = CH2O+H2O2							
	Tsang & Hampson 1985	est	3.00E11	0	0		10
CH2OH+M = CH2O+H+M							
m	Warnatz 1984	review	1.00E14	0	25000	1000-2200	
CH2OH+H = CH2O+H2							
m	Hoyerermann ea 1981	FR	3.00E13	.	.	298	
	Warnatz 1984	review	3.00E13	0	0	300-2500	
CH2OH+O = CH2O+OH							
	Herron 1988	review	5.00E13	0	0	300-2000	5
CH2OH+OH = CH2O+H2O							
m	Miller ea 1982	est	1.00E13	0	0		
CH2OH+O2 = CH2O+HO2							
	CODATA 1984	review	1.20E12	.	.	300	
m	Miller & Bowman 1989	rev/est	1.48E13	0	1500		
CH2O+M = (a): HCO+H+M							
(b): CO+H2+M							
l	Glarborg 1987	review	a	1.00E16	0	80270	
	Saito ea 1985	ST TH	a	3.20E15	0	75000	2200-2650
	Warnatz 1984	review	a	5.00E16	0	76400	1000-3000
	Forst 1983	the/rev	a	3.40E16	0	81400	
	Rimpel & Just 1980	ST TH	a	1.80E16	0	80270	

pm	Dean ea 1980	ST TH	a	3.30E16	0	81000	1600-3000	
	Bhaskaran ea 1979	ST TH	a	1.30E16	0	70700	1700-2300	
	Vandooren ea 1986	FL TH	b	2.50E14	0	28500		
	Saito ea 1985	ST TH	b	<3.20E15	0	75000	2200-2650	
	Forst 1983	the/rev	b	7.80E15	0	71200		
1	Rimpel & Just 1980	ST TH	b	8.30E15	0	69550		
CH2O+H = HCO+H2								
	Dixon-Lewis 1986	FL TH		1.00E04	3.0	1390		
	Vandooren ea 1986	FL TH		1.00E14	0	4950		
pm	Tsang & Hampson 1985	review		2.20E08	1.77	3000		3
	Saito ea 1985	ST TH		9.10E13	0	7900		
	Warnatz 1984	review		2.50E13	0	4000	300-2500	
1	Hsu ea 1983	the/rev		2.50E09	1.27	2630		
	Dean ea. 1980	ST TH		3.30E14	0	10500	1600-3000	
	Klemm 1979	SR FP		2.00E13	0	3700	250- 500	
	Dean ea 1979	ST TH		2.50E13	0	3800	1700-2710	
CH2O+O = (a): HCO+OH (pm)								
(b): CO2+H+H								
	Herron 1988	review	tot	1.80E13	0	3066	250- 800	1.5
	Herron 1988	review	tot	3.30E07	1.94	1040	800-2000	2.5
	Vandooren ea 1986	FL TH	tot	6.00E13	0	3800		
	Warnatz 1984	review	tot	3.50E13	0	3500	300-2500	
pm	Klemm ea 1980	FR	tot	1.80E13	0	3080	250- 750	
1	Hsu ea 1983	the/rev	a	1.70E06	2.32	1480		
1	Hsu ea 1983	the/rev	b	3.50E05	2.42	1360		
CH2O+OH = HCO+H2O								
	Dixon-Lewis 1986	FL TH		3.00E13	0.0	1190		
	Vandooren ea 1986	FL TH		1.80E13	0	440		
pm	Tsang & Hampson 1985	review		3.40E09	1.18	-447	298-1600	2
	Temps ea 1984	FR		4.90E12	.	.	300	
	Warnatz 1984	review		3.00E13	0	1200	300-2500	
1	Hsu ea 1983	the/rev		6.90E04	2.65	-1910		
	Atkinson & Pitts 1978	SR FP		7.50E12	0	170	298- 426	
CH2O+HO2 = HCO+H2O								
	Westbrook & Dryer 84	review		1.00E12	0	8000		
	Walker 1975	review		2.00E12	0	1170		3
CH2O+CH2(s) = CH3+HCO								
	Tsang & Hampson 1985	est		4.00E13	0	0		3
CH2O+CH = CH2CO+H								
lm	Zabarnick ea 1986	SR LP		9.50E13	0	-517	297- 670	
HCO+M = CO+H+M								
	Miller & Bowman 1988?			2.50E14	0	16802		
	CH4/2.8/, CO/1.9/, CO2/3.0/, H2/1.9/, H2O/5.0/							
HCO+H = CO+H2								
	Timonen ea 1987	FR	tot	same as Harding & Wagner				
m	Harding & Wagner 1986	the/rev		1.19E13	0.25	0		
	Dixon-Lewis 1986	FL TH		2.20E14	0	0		
	Tsang & Hampson 1985	review		1.20E14	0	0		2
	Warnatz 1984	review		2.00E14	0	0	300-2500	
pl	Dixon-Lewis 1981	FL TH		4.00E13	0	0		
HCO+O = (a): CO+OH								
(b): CO2+H								
	Herron 1988	review	tot	6.00E13	0	0	300-2000	3
	Dixon-Lewis 1986	FL TH	a	5.00E13	0	0		
	Tsang & Hampson 1985	est	a	3.00E13	0	0		3

	Warnatz 1984	review	a	3.00E13	0	0	300-2000	
pml	Browne ea 1969	FL TH	a	3.00E13	0	0	1000-1700	
	Tsang & Hampson 1985	est	b	3.00E13	0	0		3
pml	Warnatz 1984	review	b	3.00E13	0	0	300-2000	
HCO+OH = CO+H2O								
	Dixon-Lewis 1986	FL TH		1.00E14	0	0		
	Tsang & Hampson 1985	est		3.00E13	0	0		
m	Temps ea 1984	FR		1.10E14	.	.	300	
pl	Dixon-Lewis 1981	FL TH		5.00E12	0	0		
HCO+O2 = CO+HO2								
	Timonen ea 1988	FR		7.60E12	0	400	295- 713	
	Vandooren ea 1986	FL TH		2.70E13	0	1200		
	Tsang & Hampson 1985	review		5.10E13	0	1700	300-1500	1.5-5.0
	Temps & Wagner 1984	FR		3.10E12	.	.	300	
	Warnatz 1984	review		3.00E12	0	0	300-2000	
plm	Veyret & Lesclaux 81	SR FP		3.30E13	-0.4	0	296- 503	
HCO+HO2 = OH+H+CO2								
	Tsang & Hampson 1985	est		3.00E13	0	0		5
HCO+HCO = CH2O+CO								
	Tsang & Hampson 1985	review		1.80E13	0	0		1.5
l	Temps & Wagner 1984	fr		2.70E13	.	.	300	
HCO+CH2 = CH3+CO								
	Tsang & Hampson 1985	est		2.00E13	0	0		3
HCO+CH2(s) = CH3+CO								
	Tsang & Hampson 1985	est		2.00E13	0	0		3
CH2+H = CH+H2								
	Cole ea 1989	review		6.19E17	-1.45	0		
m	Miller & Bowman 1988	rev/inf		1.00E18	-1.56	0		
l	Glarborg ea 1987	rev/inf		8.30E17	-1.5	0		
p	Glarborg ea 1986	rev/inf		7.30E17	-1.56	0		
	Zabarnick ea 1986	(reverse)		2.80E14	0	735	372- 675	
	Zabarnick ea 1986	RRKM		3.84E09	1.54	-854	300-2500	
	Bohland ea 1986 (ref.Z.)			1.10E14	.	.	300	
	Frank ea 1986	ST TH		<8.00E12	0	0	2100-2700	
	Frank ea 1984	ST TH		<7.00E12	0	0	1650-2500	
	Bohland ea 1984	FR DI		1.60E14	.	.	300	
	Homann&Schweinfurth81	FR		6.50E13	0	155	295-1000	
	Grebe & Homann 1982	FR		5.00E13	.	.	300	
	Lohr & Roth 1981	ST TH		3.00E13	0	0		
CH+H2 = products								
	Becker ea 1988	FR LP		1.20E12	.	.	295	
	Bohland ea 1987	FR DI		1.10E14	.	.	300	
	Zabarnick ea 1986	SR LP		1.40E14	0	3500	372- 675	
	Butler ea 1981	SR FP		1.60E13	.	.	300	
	Bosnali & Perner 1971	ST TH		1.00E13	.	.	298	
CH2+O = (a): CO+H+H								
(b): CO+H2								
(c): CH+OH								
	Herron 1988	review	tot	8.00E13	0	0	300-2000	2
	Bohland ea 1984	fr	tot	8.10E13	.	.	300	
	Laufer 1981	review	tot	1.14E13	.	.	300	
m	Miller & Bowman	review	a	5.00E13	0	0		
l	Glarborg ea 1987	review	a	7.60E13	0	0		
	Frank ea 1986	ST TH	a	8.00E13	0	0	1500-2500	
p	Frank ea 1984	ST TH	a	3.00E13	0	0		
	Homann&Schweinfurt81	FR	a	5.00E13	0	0	295-1000	

	Lohr & Roth 1981	ST TH	a	low			
	Vinckier&Debruyyn 79	FR	a	7.80E13	0	0	295- 600
m	Miller & Bowman 1988	review	b	3.00E13	0	0	
	Frank ea 1986	ST TH	b	4.00E13	0	0	1500-2500
p	Frank ea 1984	ST TH	b	5.00E13	0	0	
	Lohr & Roth 1981	ST TH	b	9.00E13	0	0	
	Glarborg 1987	rev/est	c	6.00E13	0	1500	
p	Glarborg ea 1986	est	c	5.00E13	0	12000	
	Grebe & Homann 1982	FR	c	low			300
	Bradley & Tse 1968	FR	c	6% of tot			300

CH2+OH = (a): CH2O+H
(b): CH+H2O

plm	Glarborg ea 1986	est	a	3.00E13	0	0	
pl	Glarborg ea 1986	est	b	4.50E13	0	3000	
m	Miller & Bowman 1988	est	b	1.13E07	2.0	3000	

CH2+O2 = (a): CH2O+O
(b): CO2+H+H
(c): CO2+H2
(d): CO+H2O
(e): CO+OH+H
(f): HCO+OH

	Bohland ea 1984	FR	tot	2.00E12	.	.	300
	Laufer 1981	review	tot	8.40E12	.	.	300
	Vinckier&Debruyyn 79	FR	tot	1.20E13	0	1500	295- 600
m	Miller & Bowman 88	est	a	5.00E13	0	9000	
l	Glarborg 1987	est	a	4.50E13	0	6000	
p	Glarborg ea 1986	est	a	2.00E13	0	9000	
	Frank ea 1984	ST TH	a	5.0-8.0E12			1650-2800
	Frank ea 1984	ST TH	b	4.0-7.0E12			1650-2800
plm	Miller ea 1982	rev/est	b	1.60E12	0	1000	
plm	Miller ea 1982	rev/est	c	6.90E11	0	500	
	Cole ea 1989	review	d	3.90E12	0	1400	
	Tsang & Hampson 1985	review	d	2.50E11	0	0	
plm	Miller ea 1982	rev/est	d	1.90E10	0	-1000	
	Cole ea 1989	review	e	9.10E12	0	1400	
	Tsang & Hampson 1985	review	e	5.90E11	0	0	
plm	Miller ea 1982	rev/est	e	8.60E10	0	-500	
plm	Miller ea 1982	rev/est	f	4.30E10	0	-500	

CH2+CO = products

	Laufer 1981	review		<6.00E08			300
--	-------------	--------	--	----------	--	--	-----

CH2+CO2 = CO+CH2O

	Laufer 1981	review	tot	2.30E10			300
pml	Glarborg ea 1986	rev/est	a	1.10E11	0	1000	

CH2+CH2 = (a): C2H2+H+H
(b): C2H2+H2 (pm)
(c): C2H3+H

	Laufer 1981	review	tot	3.20E13	.	.	300
pm	Braun ea 1970	SR FP	tot	3.20E13	.	.	300
l	Frank ea 1986	ST TH	a	1.00E14	0	0	2100-2700
	Prey & Walsh 1985	SR FP	a	3.20E13	.	.	300
	Frank ea 1984	ST TH	a	8.00E13	0	0	2100-2700
	Westbrook & Dryer 84	review	c	5.00E12	0	0	

CH2+CH = C2H2+H

pml	Braun ea 1970			4.00E13	0	0	
-----	---------------	--	--	---------	---	---	--

CH2+C = C2H+H

plm	Glarborg ea 1986	est		5.00E13	0	0	
-----	------------------	-----	--	---------	---	---	--

CH2(s)+M = CH2+M (a): M = N2									
(b): M = H									
	Bohland ea 1985	FR DI	tot	4.00E13	.	.	300		
l	Langford ea 1983	SR	tot	5.80E12	.	.	300		
m	Miller & Bowman 1988	rev/adj	a	1.00E13	0	0			
	Tsang & Hampson 1985	review	a	6.00E12	0	0			
m	Miller & Bowman 1988	est	b	2.00E14	0	0			
CH2(s)+H = CH+H2									
	Tsang & Hampson 1985	est		3.00E13	0	0			3
CH2(s)+O = (a): CO+2H									
(b): CO+H2									
	Tsang & Hampson 1985	est	a	3.00E13	0	0			3
	Tsang & Hampson 1985	est	b	3.00E13	0	0			3
CH2(s)+OH = CH2O+H									
	Tsang & Hampson 1985	est		3.00E13	0	0			3
CH2(s)+O2 = CO+OH+H									
m	Tsang & Hampson 1985	review		3.10E13	0	0			
l	Langford ea 1983	SR	tot	4.40E13	.	.	300		
CH2(s)+HO2 = CH2O+OH									
	Tsang & Hampson 1985	est		3.00E13	0	0			
CH2(s)+CO2 = CH2O+CO									
	Tsang & Hampson 1985	est		3.00E12	0	0			5
CH2(s)+CH2(s) = C2H2+2H									
	Wolff & Wagner 1988	est		5.60E14	.	.	1850-2150		
	Tsang & Hampson 1985	est		3.00E13	0	0			
CH+H = C+H2									
	Becker ea 1988	FR LP		8.40E12	.	.	295		
plm	Glarborg ea 1986	est		1.50E14	0	0			
	Homann&Schweinf.81	FR		3.00E13	0	0	295-1000		
	Grebe&Homann 1982	FR		3.00E13	.	.	300		
CH+O = CO+H									
	Schofield 1989	review		3.30E12	0.5	0	1500-2500		
	Herron 1988	review		6.00E13	0	0	300-2000		3
l	Frank ea 1986	ST TH		1.00E14	0	0	1500-2500		
	Homann&Schwenf.81	FR		2.00E13	0	0	295-1000		
pm	Messing ea 1981	FR		5.70E13	.	.	300		
CH+OH = HCO+H									
plm	Glarborg ea 1986	est		3.00E13	0	0			
CH+O2 = HCO+O									
	Schofield 1989	review	tot	2.40E13	0	0	297- 676		
	Becker ea 1988	FR LP	tot	2.80E13	.	.	295		
	Seeker 1985	review	tot	2.00E13	0	0			
	Warnatz 1984	review	tot	2.00E13	0	0			
pml	Berman ea 1981,82	SR FP	tot	3.25E13	0	0	298- 673		
	Butler ea 1981	SR FP	tot	3.60E13	.	.	300		
	Messing ea 1979	SR FP	tot	2.00E13	.	.	300		
CH+H2O = CH2O+H									
	Schofield&Steinberg88	est		1.50E13	0.5	17000			
l	Zabarnick ea 1986	lp		5.70E12	0	-755	297- 670		
m	Miller & Bowman 88	r/e		1.17E15	-0.75	0			
CH+CO = products									

Schofield&Steinberg88	est		1.50E13	0.5	26000		
Berman ea 1981,82	SR FP		2.77E11	0	1713	298-	673
Butler ea 1981	SR FP		1.30E13				300
CH+CO2 = HCO+CO							
plm Berman ea 1981,82	SR FP	tot	3.43E12	0	686	298-	673
Butler ea 1981	SR FP	tot	1.10E12	.	.		300
C+OH = CO+H							
pml Glarborg ea 1986	est		5.00E13	0	0		
C+O2 = CO+O							
Becker ea 1988	FR LP		2.80E13	.	.		295
pl Husain & Newton 82	review		1.57E13	.	.		300
m Braun ea 1969			2.00E13	.	.		300
C+CO2 = CO+CO							
pl Husain & Newton 82	review		<6.00E08	.	.		300

REACTION	source	method	Arrhenius expression	temp. (K)	est. max. (K)	rel. dev. 300K 1000K
C2H6 = C2H5+H						
1	Chiang & Skinner 1981	ST TH	1.00E15 0 104000			
C2H6+H = C2H5+H2						
plm	Clark & Dove 1973	review	5.40E02 3.5 5200	300-1800		3
C2H6+O = C2H5+OH						
	Herron 1988	review	1.10E14 0 7850	400-1100		1.3
	Herron 1988	review	2.70E06 2.4 5840	1100-2000		2.5
	Cohen & Westberg 1984	review	1.20E12 0.6 7310			2
m	Warnatz 1984	review	3.00E07 2.0 5115			
pl	Herron & Huie 1973		2.50E13 0 6360			
	Huie & Herron 1975	review	3.00E13 0 5800			
C2H6+OH = C2H5+H2O						
pml	Tully ea 1984		8.70E09 1.05 1810	297- 800		2
	Warnatz 1984	review	6.30E06 2.0 650	300-2000		
C2H6+O2 = C2H5+HO2						
	Tsang & Hampson 1985	rev/est	4.00E13 0 50870			5
	Westbrook & Dryer 84	review	1.00E13 0 51000			
C2H6+HO2 = C2H5+H2O2						
	Walker 1976	review	3.00E11 0 14940			3
C2H6+C2H = C2H2+C2H5						
	Tsang & Hampson 1985	review	3.90E12 0 0	300-2500		1.3-3.0
C2H6+CH3 = CH4+C2H5						
	Moller ea 1987	ST TH	2.00E13 0 13500	1100-1400		
	Tsang & Hampson 1985	review	5.50E-01 4.0 8280	300-2500		1.3-3.0
pml	Clark & Dove 1973	review	5.50E-01 4.0 8280	300-1800		
C2H6+CH2 = products						
	Bohland ea 1985	FR	6.50E12 0 7900	413- 707		
pl	Dobe ea 1985	FR	2.20E13 0 8660	296- 705		
C2H6+CH2(s) = CH3+C2H5						
m	Tsang & Hampson 1985	review	1.10E14 0 0			2
C2H6+CH = P						
pl	Butler ea 1981	SR FP	2.40E14 . .	300		
C2H5+M = C2H4+H+M						
	Cole ea 1989	review	4.11E39 -7.05 39700			
	Warnatz 1984	review	1.00E17 0 31000			
C2H4+H(+M) = C2H5(+M)						
	Miller & Bowman 1988		2.21E13 0 2066			
	low: 6.37E27/-2.6/-54		H2/2/ CO/2/ CO2/3/ H2O/5/			
C2H5+O = (a): CH3CHO						
	(b): CH2O+CH3					
	Herron 1988	review	tot 1.30E14 0 0	300-2000		1.5
	Tsang & Hampson 1985	review	a 8.00E13 0 0			2
	Tsang & Hampson 1985	review	b 1.60E13 0 0			2
	Westbrook & Dryer 84	review	b 5.00E13 0 0			
C2H5+OH = (a): C2H4+H2O						
	(b): CH3+CH2O+H					
	(c): C2H5OH					

	Tsang & Hampson 1985	est	a	2.40E13	0	0		4
	Tsang & Hampson 1985	est	b	2.40E13	0	0		4
C2H5+O2 = C2H4+HO2								
m	Tsang & Hampson 1985	review		8.43E11	0	3875		
	Warnatz 1984	review		2.00E12	0	5000		
pl	Cooke&Williams 1971	ST TH		3.20E12	0	5020	1700-2400	
C2H5+HO2 = C2H4+H2O2								
	Tsang & Hampson 1985	est		3.00E11	0	0		2
C2H5+CH3 = (a): C3H8 (b): CH4+C2H4								
	Tsang & Hampson 1985	review		4.90E14	-0.5	0		
	Tsang & Hampson 1985	review		1.10E12	0	0		
C2H5+HCO = products								
	Baggott ea 1987	sr/fp		4.30E13	.	.	300	
	Tsang & Hampson 1985	est		1.20E14	0	0		3
C2H5+CH2(s) = (a): CH3+C2H4 (b): C3H6+H								
	Tsang & Hampson 1985	est	a	2.00E13	0	0		2
	Tsang & Hampson 1985	est	b	2.00E13	0	0		2
C2H5+C2H3 = (a): 1-C4H8 (b): C3H5+CH3 (c): C2H4+C2H4 (d): C2H2+C2H6								
	Tsang & Hampson 1985	review	c	4.80E11	0	0		3
	Tsang & Hampson 1985	review	d	4.80E11	0	0		3
C2H5+C2H = (a): C2H2+C2H4 (b): C3H3+CH3								
	Tsang & Hampson 1985	est	a	2.00E12	0	0		3
	Tsang & Hampson 1985	est	b	2.00E13	0	0		3
C2H4+M = C2H2+H2+M								
lm	Kiefer ea 1983	ST TH		1.50E15	0	55440	2300-3200	
	Tanzawa&Gardiner 80	ST TH		3.00E17	0	81200	2000-2540	
p	Just ea 1977	ST TH		2.60E17	0	79350	1700-2200	
C2H4+M = C2H3+H+M								
lm	Kiefer ea 1983	ST TH		1.40E16	0	81820	2300-3200	
	Tanzawa&Gardiner 80	ST TH		3.10E17	0	95500	2000-2540	
p	Just ea 1977	ST TH		2.60E17	0	96600	1700-2200	
C2H4+H = C2H3+H2								
	Tsang & Hampson 1985	review		1.30E06	2.53	12240	1700-2000	1.5
	Warnatz 1984	review		1.50E14	0	10200	700-2000	
	Just ea 1977	ST TH		7.60E15	0	24840	1700-2000	
pml	Peeters&Mahnen 1973	FL TH		1.10E14	0	8500	1200-1700	
C2H4+O = (a): C2H3O (b): CH3+HCO (c): CH2+CH2O								
	Bley,Wagner,ea 1988		a	50%		300		
	Bley,Wagner,ea 1988		b	44%		300		
	Bley,Wagner,ea 1988		c	6%		300		
	Tsang & Hampson 1985	review	tot	1.30E08	1.55	430	230- 940	1.2
p	Warnatz 1984	review		1.60E09	1.2	746	300-2000	
	Westbrook & Dryer 84	review	c	2.50E13	0	5000		
C2H4+OH = (a): CH2O+CH3 (b): C2H3+H2O								

	Klemm ea 1988	ST FP	a	5.60E12	0	1500		
	Warnatz 1984	review	a	3.00E13	0	3000	500-2000	
pl	Westbrook ea 1982	FR	a	2.00E12	0	960		
	Klemm ea 1988	ST FP	b	9.00E13	0	6860		
m	Tully 1987 (see m)		b	2.02E13	0	5955		
	Tsang & Hampson 1985	review	b	1.56E04	2.75	4170		10
pl	Westbrook ea 1982	FR	b	4.80E12	0	1230		
	C2H4+O2 = C2H3+HO2							
	Tsang & Hampson 1985	est		4.20E13	0	58000		10
	C2H4+CH3 = C2H3+CH4							
	Tsang & Hampson 1985	review		6.60E00	3.7	9500	350- 650	
l	Kiefer & Budach 1984	ST TH		4.40E-4	5.0	8300		
	C2H4+CH2 = products							
	Laufer 1981	review		<1.80E10	.	.	300	
	C2H4+CH2(s) = C3H6							
	Tsang & Hampson 1985	review		9.00E13	0	0		2
l	Langford ea 1983	sr		9.00E13	.	.	300	
	C2H4+CH = products							
pl	Butler ea 1981	SR FP		1.30E14	.	.	300	
	C2H4+C2H3 = C4H6+H							
	Tsang & Hampson 1985	review		5.00E11	0	7300		10
	C2H4+C2H = C4H4+H							
	Tsang & Hampson 1985	est		1.20E13	0	0		3
	C2H4+C2 = products							
l	Reisler ea 1979	SR LP		2.00E14	.	.	300	
	C2H4+C2(t) = products							
l	Reisler ea 1980	SR LP		8.64E13	.	.	300	
l	Reisler ea 1979	SR LP		1.00E14	.	.	300	
	C2H3+M = C2H2+H+M							
	Cole ea 1989	review		3.06E44	-8.25	49600		
	Warnatz 1984	review		3.00E15	0	32000	500-2500	
	Kiefer ea 1983	ST TH		7.60E11	0	5000	2300-3200	
pl	Benson&Haugen 1967	ST TH		8.00E14	0	31550	1200-1700	
	C2H2+H(+M) = C2H3(+M)							
m	Miller & Bowman 1986			5.50E12	0	2410		
	low: 2.67E27/-3.5/2410 R2/2/ CO/2/ CO2/3/ H2O/5/							
	C2H3+H = C2H2+H2							
	Tsang & Hampson 1985	est		9.60E13	0	0		2.5
	Warnatz 1984	review		2.00E13	0	0	300-2500	
plm	Hoyermann 1981			4.00E13	0	0		
	C2H3+O = (a): CH2CO+H							
	(b): CH2+CO+H							
	Tsang & Hampson 1985	est	a	9.60E13	0	0		3
plm	Hoyermann 1981	fr	a	3.30E13	.	.	298	
	Homann&Wellmann 1983	fr	b	2.00E13	0	0	295-1000	
	C2H3+OH = C2H2+H2O							
	Tsang & Hampson 1985	est		3.00E13	0	0		3
plm	Miller ea 1982	est		5.00E12	0	0		
	C2H3+O2 = C2H2+HO2							
	Tsang & Hampson 1985	est		1.20E11	0	0		5

plm Slagle ea 1984			4.00E12	0	-250		
Westbrook & Dryer 84	review		1.00E12	0	10000		
C2H3+CH3 = (a): C2H2+CH4							
(b): C3H5+H							
Tsang & Hampson 1985	est	a	3.90E11	0	0		3
C2H3+HCO = C2H4+CO							
Tsang & Hampson 1985	est		9.00E13	0	0		3
C2H3+CH2 = C2H2+CH3							
plm Miller ea 1982	est		3.00E13	0	0		
C2H3+CH2(s) = CH3+C2H2							
Tsang & Hampson 1985	est		2.00E13	0	0		3
C2H3+CH = C2H2+CH2							
m Miller & Bowman 1989	est		5.00E13	0	0		
C2H3+C2H3 = (a): C4H6							
(b): C2H4+C2H2							
(c): C4H5+H							
Tsang & Hampson 1985	review	b	1.00E12	0	0		
C2H3+C2H = C2H2+C2H2							
plm Miller ea 1982	est		3.00E13	0	0		
C2H2+M = C2H+H+M							
Frank & Just 1980	ST TH		3.60E16	0	106500	1850-3000	
plm Tanzawa&Gardiner 1980	ST TH		4.20E16	0	107000	1700-3400	
C2H2+H = C2H+H2							
Warnatz 1984	review		6.00E13	0	23650		
Frank & Just 1980	ST TH		7.70E14	0	26000		
C2H+H2 = C2H2+H							
Stephens ea 1987	SR FP		2.90E11	.	.	300	
Kiefer ea 1983			7.40E12	0	0		
plm Harding ea 1982	the/rev		4.10E05	2.39	860		
Koike&Morinaga 1981	ST TH		7.50E12	0	0	1800-2500	
Laufer & Bass 1979	SR		9.10E10	.	.	298	
Lange & Wagner 1975	FR		1.00E11	.	.	320	
C2H2+O = (a): CH2+CO							
(b): HCCO+H							
(c): C2H+OH							
Mahmoud & Fontijn 87	SR FP	tot	6.60E04	2.6	660	290-1300	
Mahmoud & Fontijn 87	review	tot	2.20E04	2.8	500	290-2600	
m Miller & Bowman 1988	rev	a	1.02E07	2.0	1900		
l Glarborg 1987	review	a	1.70E08	1.6	2210		
Frank ea 1986	ST TH	a	1.60E14	0.0	9885	1500-2500	
Harding & Wagner 1986	the	a	30%				
Warnatz 1984	review	a	4.10E08	1.5	1700	300-2500	
p Miller ea 1982	rev/est	a	2.20E10	1.0	2580		
Roth & Lohr 1981	ST TH	a	1.20E14	0	6560	1500-2750	
Blumenberg ea 1977	FR	a	95%		300		
Bradley & Tse 1968	FR	a	1.10E11	.	.	300	
m Miller & Bowman 1988	review	b	1.02E07	2.00	1900		
l Glarborg 1987	review	b	2.50E08	1.60	2210		
Frank ea 1986	ST TH	b	4.00E14	0.0	10660	1500-2500	
Harding&Wagner 1986	the	b	70%				
Peeters ea 1986	FR	b	59-64%			287- 535	
p Miller ea 1982	rev/est	b	3.60E04	2.7	1390		
Roth & Lohr 1981	ST TH	b	4.30E14	0	12120	1500-2570	
pm Browne ea 1969		c	3.20E15	-0.60	15000		

$C_2H_2+OH = (a): CH_2CO+H$
 (b): C_2H+H_2O
 (c): $HCCOH+H$
 (d): CH_3+CO

m	Miller (22.)	the/rev	a	2.18E-4	4.5	-1000	
	Woods & Haynes 1988	FL TH	a	2.20E12	.	.	1840
pl	Vandooren&Tiggelen 77		a	3.20E11	0	200	
m	Miller (22.)	the/rev	b	3.37E07	2.0	14000	
pl	Browne ea 1969		b	6.00E12	0	7000	
m	Miller (22.)	the/rev	c	5.04E05	2.3	13500	
m	Miller (22.)	the/rev	d	4.83E-4	4.0	-2000	

$C_2H_2+O_2 = (a): HCCO+OH$
 (b): C_2H+HO_2

m	Miller ea 1982	est	a	2.00E08	1.5	30100	
	Tsang & Hampson 1985	est	b	1.20E13	0	75000	

$C_2H_2+CH_2 = (a): C_3H_2+H_2$
 (b): C_3H_3+H (lm)
 (c): C_3H_4

lm	Bohland ea 1986	FR DI	tot	1.20E13	0	6600	296- 700
	Laufer 1981	review	tot	3.50E12	.	.	300
	Homann&Schweinf.81	FR	a	1.10E12	0	1510	295-1000
	Homann&Schweinf.81	FR	b	4.80E12	0	590	295-1000
	Vinckier&Debruyrn 79	FR	b	7.80E11	.	.	295
	Lohr & Roth 1981	ST TH	c	9.00E12	0	0	

$C_2H_2+CH_2(=) = (a): C_3H_3+H$
 (b): C_3H_4

m	Miller & Bowman 1988	est	a	3.00E13	0	0	
l	Glarborg 1987	est	a	1.00E14	0	0	
	Hack, Wagner, ea 88	SR LP	b	1.70E14	.	.	300
	Tsang & Hampson 1985	est	b	6.00E13	0	0	

$C_2H_2+CH = (a): C_3H_2+H$
 (b): C_3H_3

	Becker ea 1988	FR /lp	tot	8.40E13	.	.	295
	Butler ea 1981	SR FP	tot	1.30E14	.	.	300
	Homann&Wellmann 83	FR	a	4.60E13	0	850	295-1000
	Homann&Wellmann 83	FR	b	1.90E13	0	0	295-1000

$C_2H_2+C_2H_2 = (a): C_2H_3+C_2H$
 (b): C_4H_3+H

	Tsang & Hampson 1985	review	a	1.00E13	0	85000	
	Tanzawa&Gardiner 80	ST TH	b	2.00E12	0	45900	

$C_2H+C_2H_3 = C_2H_2+C_2H_2$
 Tsang & Hampson 1985 est -a 1.00E12 0 0 3

$C_2H_2+HCCO = C_3H_3+CO$

l	Homann&Wellmann 1983	FR		1.00E10	0	0	295-1000
---	----------------------	----	--	---------	---	---	----------

$C_2H_2+C_2H = C_4H_2+H$

	Stephens ea 1987	SR PP		9.00E13	.	.	300
	Frank & Just 1980	ST TH		4.00E13	0	0	2300-2700
	Laufer & Bass 1979	SR PH		1.90E13	.	.	298
l	Tanzawa&Gardiner 79	ST TH		4.00E13	0	0	1700-3400
m	Lange & Wagner 1975	FR		3.00E13	.	.	320

$C_2H_2+C_2 = \text{products}$

l	Reisler ea 1980	SR LP		2.60E14	.	.	300
---	-----------------	-------	--	---------	---	---	-----

$C_2H_2+C_2(t) = \text{products}$

l	Reisler ea 1980	SR LP		5.80E13	.	.	300
---	-----------------	-------	--	---------	---	---	-----

HCCOH+H = CH₂CO+H
m Miller & Bowman 1989 est 1.00E13 0 0

CH₂CO+M = (a): CH₂+CO+M
(b): HCCO+H+M
l Frank ea 1986 ST TH a 2.30E15 0 57600 1650-1850
p Wagner & Zabel 1971 ST TH a 3.60E15 0 59300 1300-2000
l Glarborg 1987 rev/est b 1.00E15 0 65000
Frank ea 1986 ST TH b 4.00E08 . 2200
Frank ea 1984 ST TH b 5.10E16 0 78490
CH₂CO(+M) = (a): CH₂+CO(+M)
m jam a 3.00E14 0 70980
low: 3.6E15/0/59270

CH₂CO+H = (a): CH₃+CO
(b): HCCO+H₂
l Glarborg 1987 review a 2.00E07 1.9 1990 300-2000
Frank ea 1986 ST TH a 1.2-2.50E13 1650-1850
Warnatz 1984 review a 7.00E12 0 3000
pm Michael ea 1979 SR FP a 1.10E13 0 3430 300- 500
plm Miller ea 1982 est b 5.00E13 0 8000

CH₂CO+O = (a): CH₂+CO₂
(b): CH₂O+CO
(c): HCCO+H
Bohland ea 1989 FR DI a 75% 300
Warnatz 1984 review a 2.00E13 0 2300
ml Washida ea 1983 SR PR a 1.50E12 0 1350 230- 449
Washida ea 1983 SR PR b 2.50E11 0 1350 230- 449
p Miller ea 1982 est b 2.00E13 0 0
pm Miller ea 1982 est c 1.00E13 0 8000

CH₂CO+OH = (a): CH₂O+HCO
(b): HCCO+H₂O
se Hack ea 1988 tot 1.40E12 . 300
pl Vandooren&Tiggelen 77 FL TH a 2.80E13 0 0 480-1000
plm Miller ea 1982 est b 7.50E12 0 3000

CH₂CO+CH₂ = C₂H₄+CO
Frank ea 1986 ST TH <1.00E12 . 2200
Laufer 1981 review 6.00E07 . 300

CH₂CO+CH₂(s) = C₂H₄+CO
Hack,.,Wagner 1988 tot 1.60E14 . 300
l Langford ea 1983 SR 2.70E14 . 300

CH₂CO+CH = (a): C₂H₂+H+CO
= (b): C₂H₃+CO
Frey & Walsh 1985 SR FP a 1.10E14 . 300
Frey & Walsh 1985 SR FP b 2.00E13 . 300

HCCO+M = CH+CO+M
l Frank ea 1986 ST TH 6.00E15 0 58820 1500-2500

HCCO+H = CH₂(s)+CO
l Frank ea 1986 ST TH 1.50E14 0 0 1500-2500
pm Vinckier ea 1985 FR 1.40E14 0 0 300- 600
Roth & Lohr 1981 ST TH 3.00E13 0 0
CH₂(s)+CO = products
Tsang & Hampson 1985 review 3.10E13 0 0 1.4

HCCO+O = CO+CO+H

Frank ea 1986	ST TH	1.00E14	0	0	1500-2500	
plm Vinckier ea 1985	FR	1.10E14	0	0	300- 600	
HCCO+OH = HCO+CO+H						
pl Miller ea 1982	review	1.00E13	0	0		
HCCO+O2 = CO+CO+OH						
lm Peeters ea 1986		1.60E12	0	854		
p Miller ea 1982	review	1.50E12	0	2500		
HCCO+CH2 = (a): C2H+CH2O						
(b): C2H3+CO						
pl Miller ea 1982	est	1.00E13	0	2000		
plm Miller ea 1982	est	3.00E13	0	0		
HCCO+CH = C2H2+CO						
m Miller & Bowman 1988	est	5.00E13	0	0		
HCCO+HCCO = C2H2+CO+CO						
plm Miller ea 1982	est	1.00E13	0	0		
C2H+M = C2+H+M						
Dean,.,Bowman 1988	est	1.00E14	0	50000		
i Mitchell 1981		4.70E16	0	124000		
Frank & Just 1980	ST TH	4.50E15	0	113800		
C2H+O = CH+CO						
Tsang & Hampson 1985	est	tot 2.00E13	0	0		3
Homann&Wellmann 1983	fr	1.00E13	0	0	295-1000	
plm Browne ea 1969		5.00E13	0	0		
C2H+H = C2+H2						
Dean,.,Bowman 1988	est	5.00E14	0	12000		
Colket 1986	ST TH	1.00E12	0	23000		
Tsang & Hampson 1985	est	3.60E13	0	28300		10
C2+H2 = C2H+H						
Schofield 1989	review	tot 1.10E14	0	2920	300- 500	
Reisler ea 1980	SR LP	tot 6.40E11	.	.	300	
C2(t)+H2 = C2H+H						
Reisler ea 1980	SR LP	tot<3.00E09	.	.	300	
C2H+OH = HCCO+H						
Tsang & Hampson 1985	est	tot 2.00E13	0	0		10
plm Miller ea 1982	est	2.00E13	0	0		
C2H+O2 = (a): HCCO+O						
(b): HCO+CO (m)						
(c): CH+CO2						
(d): C2O+OH						
Stephens ea 1987	SR FP	tot 2.50E13	.	.	300	
m Warnatz 1984	review	tot 5.00E13	0	1500		
Lange & Wagner 1975	SR FP	tot 3.30E12	.	.	320	
pl Laufer&Lechleider 84		a 6.00E11	0	0		1.3-10
pl Laufer&Lechleider 84		b 2.40E12	0	0		1.3-10
C2H+CH4 = C2H2+CH3						
Tsang & Hampson 1985	review	7.20E11	0	0	300-2500	1.3-10
C2H+CH3 = C3H3+H						
Tsang & Hampson 1985	est	2.40E13	0	0		3
C2H+HCO = CO+C2H2						
Tsang & Hampson 1985	est	6.00E13	0	0		3

C2H+CH2 = CH+C2H2						
	Tsang & Hampson 1985 est	2.00E13	0	0		3
C2H+CH2(s) = CH+C2H2						
	Tsang & Hampson 1985 est	2.00E13	0	0		3
C2H+C2H = (a): C4H2						
	(b): C4H+H					
	(c): C2H2+C2					
	Tsang & Hampson 1985 est	2.00E12	0	0		3
C2+OH = CH+CO						
	Schofield&Steinberg88 est	1.50E13	0.5	0		
1	Bulewicz ea 1970 FL TH	4.80E12	.	.	2200	
C2+O2 = products (equilibrated C2(s) and C2(t))						
1	Mangir ea 1980 SR LP	1.80E12	.	.		300
C2+H2O = products						
	Reisler ea 1980 SR LP	<2.00E10	.	.		300
C2+CO2 = products						
	Reisler ea 1980 SR LP	<2.00E10	.	.		300
C2+CH4 = products						
1	Reisler ea 1980 SR LP	1.10E13	.	.		300
C2(t)+O2 = C2+O2 (intersystem crossing)						
	Mangir ea 1980 SR LP	1.60E13	.	.		300
C2(t)+H2O = products						
	Reisler ea 1980 SR LP	<2.00E10	.	.		300
C2(t)+CO2 = products						
	Reisler ea 1980 SR LP	<2.00E10	.	.		300
C2(t)+CH4 = products						
1	Reisler ea 1980 SR LP	<6.00E07	.	.		300

REACTION source	method	Arrhenius expression			temp. est.	est.max. (K)	rel.dev.
C4H3+M = C4H2+H+M ml Tanzawa&Gardiner 1980	ST TH	1.00E16	0	59700			
C4H2+H = C4H3 Warnatz 1984	review	6.50E12	0	1000	>300		
Kiefer ea 1983	ST TH	2.00E13	0	0			
C4H2 = C4H+H l Kiefer ea 1983	ST TH	7.80E14	0	120000			
Frank & Just 1980	ST TH	2.20E14	0	116600	1850-3000		
C4H2+O = C3H2+CO l Warnatz 1984	review	2.70E13	0	1700	300-1000		
m Miller ea 1982	review	1.00E12	0	0			
C4H2+OH = (a): C3H2+HCO Warnatz 1984	review tot	3.00E13	0	0	300-2000		
C4H2+CH2 = products Bohland ea 1986	FR DI	1.50E13	0	4400	296- 700		
C3H3+H = C3H4 Homann & Wellmann 83	FR	2.00E13	0	0	(fall off)		
C3H4+H = C3H5 Warnatz 1984	review	2.00E13	0	2400	300- 500		
Warnatz 1984	review	1.20E13	0	2100	300- 500		
C3H4+O = products Warnatz 1984	review	1.50E13	0	2100	300-2000		
C3H4+OH = products Warnatz 1984	review	5.00E12	0	1300	>300		
Warnatz 1984	review	2.70E11	.	.	300		
C3H4 (allene) + C2 = products l Reisler ea 1980	SR LP	2.80E14	.	.	300		
C3H4 (allene)+C2(t) = products l Reisler ea 1980	SR LP	1.60E14	.	.	300		
C3H3+O = CH2O+C2H m jam	est	2.00E13	0	0			
C3H3+OH = C3H2+H2O m jam	est	2.00E13	0	0			
C3H3+O2 = CH2CO+HCO m Gutman 21.		3.00E10	0	2868			
l Miller ea 1982		3.60E12	0	11200			
C3H2+H = C3H3 Homann&Wellmann 1983	FR	6.00E12	0	0	295-1000		
C3H2+O = C2H+CO+H Homann&Wellmann 1983	FR	6.80E13	0	0	295-1000		
C3H2+O2 = HCCO+HCO lm Miller ea 1982	est	1.00E13	0	0			

REACTION	source	method	Arrhenius expression			temp.	est.max.
						(K)	rel.dev.
NH ₃ +M = (a): NH ₂ +H+M (b): NH+H ₂ +M							
	Lyon 1987	rev/inf	a	4.80E16	0	93900	
	Hanson & Salimian 84	review	a	2.50E16	0	93800	
pl	Miller ea 1981	review	a	1.40E16	0	90600	
	Roose 1980	ST TH	a	2.50E16	0	93800	2200-3450
	Hanson & Salimian 84	review	b	6.30E14	0	93400	
NH ₃ +H = NH ₂ +H ₂							
	Marshall&Pontijn 1986	SR		3.30E14	0	17170	660-1140
	Michael ea 1986	SR FP		1.82E14	0	16030	750-1777
plm	Michael ea 1985	review		6.36E05	2.39	10171	
	Hanson&Salimian 1984	review		1.30E14	0	21500	1500-2500
NH ₃ +O = NH ₂ +OH							
	Lyon 1987	rev/inf		3.30E12	0	2100	
plm	Perry 1984	SR FP		2.10E13	0	9000	448- 841
	Salimian ea 1984	ST TH		2.20E13	0	8880	1750-2060
	Hanson&Salimian 1984	review		2.20E13	0	8880	1000-2100
NH ₃ +OH = NH ₂ +H ₂ O							
	Jeffries & Smith 1986	SR LP		9.57E06	1.8	500	840-1425
plm	Salimian ea 1984	review		2.04E06	2.04	566	
	Salimian ea 1984			8.10E13	0	8375	1750-2060
	Hanson&Salimian 1984	review		5.80E13	0	8060	900-2100
NH ₂ +H ₂ O = NH ₃ +OH							
	Batz,...,Wagner 1988	FR DI		6.00E09	.	.	1000
NH ₃ +HO ₂ = NH ₂ +H ₂ O ₂							
	Hanson & Salimian 84	est		2.50E12	0	24000	
NH ₃ +NH ₂ = N ₂ H ₃ +H ₂							
	Dove & Nip 1979	est		8.00E11	0.5	21560	
NH ₂ +M = NH+H+M							
	Hanson & Salimian 84	est		3.20E23	-2.0	91400	
NH+H+M = NH ₂ +M							
	Miller ea 1981			2.00E16	-0.5	0	
NH ₂ +H = NH+H ₂							
	Hanson&Salimian 1984	review		1.90E13	0	0	2450-3020
plm	Miller ea 1983	review		6.90E13	0	3650	
NH ₂ +O = (a): HNO+H (b): NH+OH							
plm	Glarborg ea 1986	review	a	7.90E14	-0.5	0	
	Dransfeld ea 1984	FR DI	a	4.60E13	.	.	296
	Temps ea 1982	FR DI	a	6.63E14	-0.5	0	
	Lyon 1987	rev/inf	b	1.70E13	0	1000	
plm	Dransfeld ea 1984	FR DI	b	7.00E12	.	.	296
	Temps ea 1982	FR DI	b	6.75E12	0	0	
NH ₂ +OH = NH+H ₂ O							
m	Miller & Bowman 1988	review		4.00E06	2.0	1000	
	Lyon 1987	rev/inf		5.50E10	0.7	1300	
	Hanson & Salimian 84	est		5.00E11	0.5	2000	
pl	Branch ea 1982			4.50E12	0	2200	
NH ₂ +O ₂ = (a): NH ₂ O+O (b): NO+H ₂ O							

(c): HNO+OH
(d): NH2O2
(e): NH+HO2

Hack ea 1985	FR	tot	low		286- 543
Fujii ea 1981	ST TH	tot	1.80E12	0	15000 1550-1800
Bozzelli & Dean 1988	the	a	dominating		for T>1350
Bozzelli & Dean 1988	the	b	dominating		for 800<T<1350
Lyon 1987	rev/inf	c	5.10E13	0	30000
Hanson & Salimian 84	review	c	1.80E12	0	15000
Dean ea 1981	FR	c?	5.00E08	.	1300
Hanson & Salimian 84	est	e	1.00E14	0	50000

NH2+HO2 = (a): NH2O+OH
(b): NH3+O2
(c): NH+H2O2

Bozzelli & Dean 1988	the	a	2.30E14	-0.31	298	200-1900
Cheskis&Sarsikov 1979	?	b	1.50E13	0	0	
Hanson & Salimian 84	est	c	1.00E13	0	2000	

NH2+NH2 = (a): NH3+NH
(b): N2H2+H2

Dransfeld ea 1984	FR	a	<2.00E09	.	.	296
Miller ea 1981	review	a	5.00E12	0	10000	
Silver & Kolb 1980	?	a	1.70E11	0.63	3000	
Michel 1965		a	6.30E12	0	10000	
1 Khe ea 1977	?	b	5.00E11	0	0	
Michel 1965		b	4.00E13	0	12000	

NH2+NH = N2H2+H

l Dransfeld ea 1984	FR	tot	8.00E13	.	.	296
p Miller ea 1983	est		5.00E13	0	0	

NH2+N = N2+H+H

pl Whyte & Phillips 83,84			7.20E13	0	0	
---------------------------	--	--	---------	---	---	--

NH+M = N+H+M

Mertens, Bowman, ea 88	ST TH		2.65E14	0	75500	
Hanson & Salimian 84	est		3.20E21	-2.0	84000	

NH+H = N+H2

Miller & Bowman 1988	review		1.00E14	0	0	
Hanson&Salimian 1984	r/e		5.00E13	0	2000	
pl Morley 1981	review		3.00E13	0	0	

NH+O = (a): NO+H
(b): N+OH

pl Miller ea 1983	est	a	2.00E13	0	0	
Benson ea 1975	est	a	6.30E11	0.5	0	
1 Miller ea 1981	est	b	1.00E12	0.5	100	
Benson ea 1975	est	b	6.30E11	0.5	4000	

NH+OH = (a): HNO+H
(b): N+H2O

Hanson&Salimian 1984	est	a	1.00E12	0.5	2000	
plm Miller ea 1983	est	a	2.00E13	0	0	
Hanson&Salimian 1984	est	b	5.00E11	0.5	2000	
plm Miller ea 1981	est	b	5.00E11	0.5	2000	

NH+O2 = (a): HNO+O
(b): NO+OH

plm Miller ea 1983	review	a	1.00E13	0	12000	
m Hack ea 1985	FR	b	7.60E10	0	1530	286- 543
pl Miller ea 1983	review	b	1.40E11	0	2000	

NH+HO2 = N+H2O2							
	Hanson & Salimian 84	est		1.00E13	0	2000	
NH+NH = (a): NNH+H							
(b): NH2+N							
	Mertens, Bowman, ea 88	ST TH	tot	4.50E13	0	0	2070-2730
	Seeker ea 1985	review	a	3.60E11	0.6	1900	
	Hanson & Salimian 84	est	a	8.00E11	0.5	1000	
1	?Kajimoto ea 1979		a	2.54E13	0	0	
	Hanson & Salimian 84	est	b	2.00E11	0.5	2000	
NH+N = N2+H							
plm	Miller ea 1983	est		3.00E13	0	0	
	Benson ea 1975	est		6.30E11	0.5	0	
N+OH = NO+H							
plm	Miller ea 1983	review		3.80E13	0	0	
	Brune ea 1983	FR		2.50E13	0	0	
NO+H = N+OH							
	Hanson & Salimian 84	review		1.70E14	0	48800	
N+O2 = NO+O							
plm	Baulch ea 1973	review		6.40E09	1.0	6280	
NO+O = N+O2							
	Hanson & Salimian 84	review		3.80E09	1.0	41400	1500-5000
N+HO2 = (a): NO+OH							
(b): NH+O2							
	Brune ea 1983	FR	tot	1.30E13	.	.	300
	Hanson & Salimian 84	est	a	1.00E13	0	2000	
	Hanson & Salimian 84	est	b	1.00E13	0	2000	
N2H4+M = (a): NH2+NH2							
(b): N2H3+H							
	Baulch ea 1973	review	a	4.00E15	0	41000	
	Salimian & Hanson 84	est	b	1.00E15	0	64000	
N2H4+H = (a): N2H3+H2							
(b): NH3+NH2							
	Baulch ea 1973		a	1.30E13	0	2500	
	Gehring ea 1971		b	4.50E09	0	3100	
N2H4+O = (a): N2H2+H2O							
(b): N2H3+OH							
	Gehring ea 1973		a	6.50E13	0	1200	
	Hanson & Salimian 84	est	b	2.50E12	0	1200	
N2H4+OH = N2H3+H2O							
	Harris ea 1979			4.00E13	0	0	
N2H4+HO2 = N2H3+H2O2							
	Hanson & Salimian 84	est		4.00E13	0	2000	
N2H4+NH2 = NH3+N2H3							
	Hanson & Salimian 84	est		4.00E11	0.5	2000	
	Gehring ea 1973			3.90E12	0	1500	
N2H4+NH = NH2+N2H2							
	Hanson & Salimian 84	est		1.00E12	0.5	1000	
N2H4+N2H2 = N2H3+N2H3							
	Hanson & Salimian 84	est		2.50E10	0.5	30000	
N2H3+M = (a): N2H2+H+M							

(b): NH ₂ +NH+M					
Hanson & Salimian 84	est	a	1.00E16	0	50000
Roose 1981		a	3.50E16	0	46000
Hanson & Salimian 84	est	b	1.00E16	0	42000
N ₂ H ₃ +H = (a): NH ₂ +NH ₂					
(b): NH ₃ +NH					
(c): N ₂ H ₂ +H ₂					
Gehring ea 1971		a	1.60E12	0	0
Hanson & Salimian 84	est	b	1.00E11	0	0
Hanson & Salimian 84	est	c	1.00E12	0	2000
N ₂ H ₃ +O = (a): N ₂ H ₂ +OH					
(b): NH ₂ +HNO					
(c): NNH+H ₂ O					
Hanson & Salimian 84	est	a	3.20E11	0.5	0
Miller ea 1983	est	a	5.00E12	0	5000
Miller ea 1983	est	b	1.00E13	0	0
Hanson & Salimian 84	est	c	3.20E11	0.5	0
N ₂ H ₃ +OH = (a): N ₂ H ₂ +H ₂ O					
(b): NH ₃ +HNO					
Hanson & Salimian 84	est	a	1.00E13	0	1000
Miller ea 1983	est	a	1.00E13	0	1000
Miller ea 1983	est	b	1.00E12	0	15000
N ₂ H ₃ +HO ₂ = N ₂ H ₂ +H ₂ O ₂					
Hanson & Salimian 84	est		1.00E13	0	2000
N ₂ H ₃ +NH ₂ = NH ₃ +N ₂ H ₂					
Hanson & Salimian 84	est		1.00E11	0.5	0
N ₂ H ₃ +NH = NH ₂ +N ₂ H ₂					
Miller ea 1983	est		2.00E13	0	0
N ₂ H ₃ +N ₂ H ₂ = NNH+N ₂ H ₄					
Hanson & Salimian 84	est		1.00E13	0	10000
N ₂ H ₂ +M = (a): NNH+H+M					
(b): NH+NH+M					
Hanson & Salimian 84	est	a	1.00E16	0	50000
pl Miller ea 1983	est	a	5.00E16	0	50000
Hanson & Salimian 84	est	b	3.20E16	0	100000
N ₂ H ₂ +H = NNH+H ₂					
Hanson & Salimian 84	est		1.00E13	0	1000
pl Miller ea 1983	est		5.00E13	0	1000
N ₂ H ₂ +O = (a): NNH+OH					
(b): NO+NH ₂					
Hanson & Salimian 84	est	a	1.00E11	0.5	0
1 Miller ea 1983	est	a	2.00E13	0	1000
1 Miller ea 1983	est	a	1.00E13	0	0
N ₂ H ₂ +OH = NNH+H ₂ O					
Hanson & Salimian 84	est		1.00E13	0	2000
1 Miller ea 1983	est		1.00E13	0	1000
N ₂ H ₂ +HO ₂ = NNH+H ₂ O ₂					
Hanson & Salimian 84	est		1.00E13	0	2000
N ₂ H ₂ +NH ₂ = (a): NH ₃ +NNH					
Hanson & Salimian 84	est		1.00E13	0	4000
1 Miller ea 1983	est		1.00E13	0	0

N2H2+NH = NH2+NNH						
	Hanson & Salimian 84	est		1.00E13	0	1000
l	Miller ea 1983	est		1.00E13	0	0
NNH+M = (a): N2+H+M						
(b): NH+N+M						
	Mertens, Bowman, ea	est	a	1.00E14	0	3000
	Lyon 1987	est/inf	a	2.00E14	0	30000
	Hanson & Salimian 84	est	a	2.00E14	0	20000
pl	Branch ea 1982	est	a	2.00E14	0	20000
	Hanson & Salimian 84	est	b	1.00E15	0	70000
NNH = N2+H (a)						
m	Miller & Bowman 1988	review	a	1.00E04	0	0
NNH+H = N2+H2						
m	Miller & Bowman 1988	est		1.00E14	0	0
	Hanson & Salimian 84	est		4.00E13	0	3000
pl	Miller ea 1981	est		3.70E13	0	3000
NNH+O = (a): N2+OH						
(b): N2O+H						
l	Miller ea 1981	est	a	1.00E13	0	3000
m	Miller & Bowman 1988	est	b	1.00E14	0	0
l	Miller ea 1981	est	b	1.00E13	0	5000
NNH+OH = N2+H2O						
	Miller & Bowman 1988	est		5.00E13	0	0
	Lyon 1987	est/inf		3.00E13	0	0
	Miller ea 1981	est		3.00E13	0	0
NNH+O2 = N2+HO2						
	Miller ea 1981	est		2.00E12	0	9000
NNH+HO2 = N2+H2O2						
	Hanson & Salimian 84	est		1.00E13	0	2000
NNH+NH2 = NH3+N2						
	Miller ea 1981	est		1.00E13	0	0
NNH+NH = N2+NH2						
m	Miller & Bowman 1988	est		5.00E13	0	0
	Hanson & Salimian 84	est		2.00E11	0.5	2000
NNH+N = NH+N2						
	Hanson & Salimian 84	est		3.20E13	0	2000
N2+M = N+N+M						
	Baulch ea 1973	review		3.70E21	-1.5	225000
NO+M = N+O+M (M=Ar)						
	Thielen ea 1984	ST TH		9.60E14	0	150000
	Wray & Tears 1962			4.00E20	-1.5	150000
NO+HO2 = (a): NO2+OH						
(b): HNO+O2						
	Lyon 1987	rev/inf	a	3.40E12	0	-300
	Hanson & Salimian 84	review	a	2.10E12	0	-480 1000-2000
plm	Howard 1980		a	2.10E12	0	-480
	Hanson & Salimian 84	est	b	2.00E11	0	2000
	Miller ea 1983	est	b	5.00E11	0	15000
NO+NH2 = (a): N2+H2O						
(b): NNH+OH						

(c): N2O+H2						
	Hanson&Salimian 1984	review	tot	1.20E20	-2.46	1860 294-1200
	Silver 1981	FR	tot	1.20E20	-2.46	1860 294-1200
	Roose 1981	ST TH	tot	4.00E13	0	15900 1560-2850
	Hack ea 1977	FR	tot	2.70E17	-1.85	0 209- 505
m	Miller & Bowman 1988	review	a	6.20E15	-1.25	0
	Lyon 1987	rev/inf	a	9.10E19	-2.48	1870
pl	Miller ea 1983	review	a	3.80E15	-1.25	0
	Silver & Kolb 1980	FR	a	3.50E19	-2.46	1876
m	Miller & Bowman 1988	review	b	6.40E15	-1.25	0
	Lyon 1987	rev/inf	a	6.10E19	-2.48	1870
pl	Miller ea 1983	review	b	8.80E15	-1.25	0
	Silver & Kolb 1980	FR	b	8.20E19	-2.46	1876
l	Roose 1981	ST TH	c	5.00E13	0	24640
NO+NH = N2O+H						
m	Miller & Bowman 1988	review		2.40E15	-0.8	0
pl	Miller ea 1983	review		4.30E14	-0.5	0
	Hanson & Salimian 84	review		1.10E12	0	450
N2O+H = NH+NO						
	Cattolica ea 1982			3.80E14	0	34500
NO+N = N2+O						
plm	Miller ea 1984	review		3.30E12	0.3	0
O+N2 = N+NO						
	Thielen ea 1984	ST TH		1.80E14	0	76100
	Hanson & Salimian 84	review		1.80E14	0	76240
NO+N2H2 = N2O+NH2						
l	Gehring ea 1971			3.00E12	0	0
NO+NNE = N2+HNO						
	Lyon 1987	est/inf		9.10E11	0	0
plm	Miller ea 1981	est		5.00E13	0	0
NO+N2O = N2+NO2						
	Hanson & Salimian 84	est		1.00E14	0	50000
HNO+M = H+NO+M H2O/10/ O2/2/ N2/2/ H2/2/						
plm	Baulch ea 1973	review		1.80E16	0	48680
HNO+H = NO+H2						
	Hanson & Salimian 84	est		1.30E13	0	4000
plm	Baulch ea 1973	review		5.00E12	0	0
HNO+O = NO+OH						
	Hanson & Salimian 84	est		5.00E11	0.5	2000
l	Miller ea 1981	est		1.00E11	0	0
HNO+OH = NO+H2O						
	Hanson & Salimian 84	est		1.30E12	0.5	1000
plm	Baulch ea 1973	review		3.60E13	0	0
HNO+HO2 = NO+H2O2						
	Hanson & Salimian 84	est		3.20E11	0.5	2000
HNO+NH2 = NH3+NO						
	Lyon 1987	est/inf		1.80E14	0	1000
	Hanson&Salimian 1984	est		3.00E11	0.5	1000
lm	Miller ea 1983	est		2.00E13	0	1000
HNO+N = NO+NH						
	Hanson & Salimian 84	est		1.00E13	0	2000

NO ₂ +M = NO+O+M							
plm	Baulch ea 1973	review	1.10E16	0	66000		
NO ₂ +H = NO+OH							
plm	Baulch ea 1973	review	3.50E14		1500		
NO ₂ +O = NO+O ₂							
plm	Baulch ea 1973	review	1.00E13	0	600		
NO ₂ +NH ₂ = N ₂ O+H ₂ O							
	Hack ea 1977	FR	1.90E20	-3.0	0	209-	505
NO ₂ +NH = HNO+NO							
	Hanson & Salimian 84	est	1.00E11	0.5	4000		
NO ₂ +N = (a): NO+NO							
	(b): N ₂ O+O						
	Philips & Schiff 1965	a	4.00E12	0	0		
	Philips & Schiff 1965	b	5.00E12	0	0		
NO ₂ +NO ₂ = NO+NO+O ₂							
	Baulch ea 1973	review	2.00E12	0	27000		
N ₂ O+M = N ₂ +O+M							
l	Glarborg 1987	review	4.50E24	-2.59	70005		
	Frank & Just 1985	ST TH	9.30E14	0	59420		
	Hanson & Salimian 84	review	6.90E23	-2.5	65000		
pm	Miller ea 1981	review	1.60E14	0	51600		
	Dean ea 1977	ST TH	2.70E14	0	54100		
	Baulch ea 1973	review	5.00E15	0	58000		
N ₂ O+H = N ₂ +OH							
l	Frank ea 1986	ST TH	1.90E06	2.42	13500		
	Hanson & Salimian 84	review	7.60E13	0	15200	700-	2500
pm	Baulch ea 1973	review	7.60E13	0	15200	700-	2500
N ₂ O+O = (a): NO+NO							
	(b): N ₂ +O ₂						
	Hanson & Salimian 84	review	a	6.90E13	0	26600	1200-4100
plm	Baulch ea 1973	review	a	1.00E14	0	28200	
	Hanson & Salimian 84	review	b	1.00E14	0	28200	1200-3200
plm	Baulch ea 1973	review	b	1.00E14	0	28200	
NO+NO = N ₂ O+O							
	Thielen ea 1984	ST TH	9.00E12	0	69500	2400-	6200
N ₂ O+OH = N ₂ +HO ₂							
	Hanson & Salimian 84	est	6.30E11	0	10000		
m	Miller ea 1983	est	1.00E12	0	10000		
N ₂ O+NH = N ₂ +HNO							
	Hanson & Salimian 84	est	2.00E12	0	6000		
l	Miller ea 1981	est	1.00E11	0.5	3000		
N ₂ O+N = N ₂ +NO							
	Hanson & Salimian 84	est	1.00E13	0	20000		

REACTION	source	method	Arrhenius expression			temp. est.max. (K)	rel.dev.
HCN+M = H+CN+M							
	Roth & Just 1976	ST TH	5.70E16	0	117000	2200-2700	
CN+H2 = HCN+H							
	Jacobs,Wolfrum,ea 88	SR LP	2.10E13	0	4710	295-1000	
	Balla&Casleton 1988	SR LP	4.00E13	0.0	5170	368-1333	
	Juan,Veyret,ea 1987	SR LP	1.47E10	.	.	300	
	Balla & Pasternack 87	SR LP	1.56E10	.	.	300	
	Natarajan & Roth 1986	ST TH	1.80E14	0.0	7950	2050-2590	
plm	Wagner & Bair 1985	the/rev	3.00E05	2.45	2237	250-3500	
	Miller ea 1984	review	5.50E11	0.7	4890		
	Lichtin & Lin 1985		2.90E10	.	.	300	
	Li ea 1984		9.60E09	.	.	300	
	Schacke,Wolfrum,ea 77		8.70E09	.	.	300	
HCN+O = (a): NCO+H (b): CN+OH (c): NH+CO							
	Perry 1984	SR FP	tot 5.90E12	0	8000	540- 900	
plm	Thorne ea 1986	review	a 1.40E04	2.64	4980		
	Perry 1984	SR FP	a 1.20E04	2.64	4980		
	Roth ea 1980	ST TH	a 7.30E13	0	14800	1800-2500	
plm	Perry 1984	SR FP	b 2.70E09	1.58	26600		
	?Szekely ea 1984	ST TH	b <6.00E11	.	.	2000-2500	
	Roth ea 1980	ST TH	b 0.6*(a)	.	.	1800-2500	
plm	Thorne ea 1986	review	c 3.50E03	2.64	4980		
	Perry 1984	SR FP	c 5.20E03	2.64	4980		
	?Szekely ea 1984	ST TH	c 2.20E13	0	15380	1800-2600	
HCN+OH = (a): CN+H2O (b): HOCN+H (c): HNCO+H (d): NH2+CO							
	Jacobs,Wolfrum,ea 88	(-a)	a 7.70E12	0	8270	518-1027	
plm	Miller & Melius 1986	t/r	a 1.50E13	0	10929	500-2500	
	Fritz ea 1982		a 4.40E12	0	9000	500- 700	
	Cole ea 1989	rev/inf	b 4.60E12	0	15000		
m	Miller & Bowman 1988	review	b 5.85E04	2.4	12500		
pl	Miller & Melius 1986	the/rev	b 9.20E12	0	15000	500-2500	
m	Miller & Bowman 1988	review	c 1.98E-3	4.0	1000		
pl	Miller & Melius 1986	the/rev	c 4.80E11	0	11000	500-2500	
m	Miller & Bowman 1988	review	d 7.83E-4	4.0	4000		
CN+H2O = HCN+OH							
	Jacobs,Wolfrum,ea 88	SR LP	-a 8.00E12	0	7450	518-1027	
CN+M = C+N+M							
	Mozzhukin,.,Roth 89	ST TH	2.50E14	0	140000	4060-6060	
CN+O = CO+N							
plm	Louge & Hanson 1984	ST TH	1.80E13	0	0		
	Schmatjko&Wolfrum 77	DI FR	1.10E13	.	.	295	
CN+OH = NCO+H							
	Perry 1984	SR FP	5.00E13	0	0		
plm	Haynes 1977	FL TH	6.00E13	0	0		
CN+O2 = NCO+O							
	Burmeister,Roth,ea 88	ST TH	7.00E12	0	0	1928-3100	
	Juan,..,Veyret 1987	SR LP	1.12E13	.	.	300	
	Lichtin & Lin 1985		1.50E13	.	.	300	

plm Louge & Hanson 1984	ST TH	5.60E12	0	0	
Li ea 1984		1.20E13	.	.	300
Whyte & Phillips 1983		8.10E12	.	.	300
Schmatjko&Wolfrum 78		6.60E12	.	.	300
Bullock & Cooper 1972		6.70E12	.	.	300
CN+NH3 = HCN+NH2					
Juan,..,Veyret 1987	SR LP	1.50E13	.	.	300
Bullock ea 1972		1.26E13	.	.	300
CN+NO = (a): NCO+N					
(b): CO+N2					
Schacke & Schmajko 73		tot<1.00E12	.	.	298
Natarajan & Roth 1986	ST TH	a 1.40E14	0	42100	2480-3160
1 Colket 1984	ST TH	a 1.40E14	0	42100	
?Li 1985		b 9.60E10	.	.	300
Colket 1984	ST TH	b low			
?Beer 1978		b 4.80E11	.	.	1727
Phillips 1976		b 1.08E14	0	8030	
Mulvihill&Phillips 75		b 7.30E12	.	.	1500
Boden & Trush 1968		b 3.00E11	.	.	687
Lam ea 1966		b 2.20E10	.	.	300
Setser & Trush 1965		b 1.20E13	.	.	500
CN+NO2 = NCO+NO					
plm Thorne ea 1986	est	3.00E13	0	0	
CN+N2O = NCO+N2					
plm Thorne ea 1986	est	1.00E13	0	0	
NCO+M = N+CO+M					
Higashihara ea 1985	ST TH	6.30E13	0	37970	1680-2550
Louge & Hanson 1984	ST TH	6.30E16	-0.5	47700	2150-2400
pml Louge & Hanson 1984	ST TH	3.10E16	-0.5	47700	
NCO+H = CO+NH					
plm Miller ea 1984	rev/est	5.00E13	0	0	
Louge & Hanson 1984	ST TH	5.40E13	.	.	1490
Louge & Hanson 1984	ST/est	1.05E14	0	2000	
NCO+O = NO+CO					
m Miller & Bowman 1988	review	2.00E13	0	0	
Higashihara ea 1985	ST TH	3.20E13	0	0	1680-2550
pl Louge & Hanson 1984	ST TH	5.60E13	.	.	1450
NCO+OH = NO+CO+H					
plm Miller ea 1984	est	1.00E13	0	0	
NCO+H2 = HNCO+H					
plm Perry 1984	SR FP	8.60E12	0	9000	448- 841
Louge & Hanson 1984	ST TH	1.26E12	.	.	1490
Louge & Hanson 1984	ST/est	1.70E13	0	8000	
NCO+N = N2+CO					
plm Miller ea 1984	est	2.00E13	0	0	
NCO+NO = N2O+CO					
plm Perry 1984	SR FP	tot 1.00E13	0	-390	448- 841
HCNO+H = HCN+OH					
m Miller & Bowman 1988	est	1.00E14	0	12000	
pl Glarborg ea 1986	est	5.00E13	0	12000	
HOCN+H = HNCO+H					

plm Glarborg ea 1986	est		1.00E13	0	0	
HNCO+M = (a): NH+CO+M, M=Ar						
(b): NCO+H+M						
Mertens, Bowman, ea 88	ST TH	a	9.84E15	0	85400	1830-3340
Mertens, Bowman, ea 88	est	b	5.00E15	0	120000	
HNCO+H = (a): NH2+CO						
(b): NH+NCO						
Mertens, Bowman, ea 88	ST TH	a	1.10E14	0	12720	
plm Miller ea 1984	est	a	2.00E13	0	3000	
Mertens, Bowman, ea 88	est	b	4.00E13	0	36000	
HNCO+NH2 = NCO+NH3						
Mertens, Bowman, ea 88	est		8.00E12	0	7000	
HNCO+NH = NCO+NH2						
Mertens, Bowman, ea 88	est		2.00E13	0	24000	
HNCO+O = (a): NCO+OH						
(b): HNO+CO						
Tully ea 1988	SR LP	tot	3.20E12	0	10300	
HNCO+OH = NCO+H2						
Tully ea 1988	SR LP	tot	2.60E12	0	5540	
H2CN+M = HCN+H+M						
m Miller & Bowman 1988	est		3.00E14	0	22000	
C2N2+M = CN+CN+M						
Szekely ea 1984			6.30E16	0	99430	
Colket 1984	ST TH		4.10E16	0	93670	
1 Fuenc ea 1973			6.30E16	0	99430	
C2N2+H = CN+HCN						
Natarajan & Roth 1986	ST TH		5.16E13	0	3180	2050-2590
Louge & Hanson 1984	ST TH		3.16E14	0	8000	
HCN+CN = C2N2+H						
plm Szekely ea 1985			2.00E13	0	0	
C2N2+O = (a): CN+NCO						
(b): CO+NCN						
plm Louge & Hanson 1984	ST TH	a	4.60E12	0	8822	
1 Roth ea 1986	ST TH	b	1.40E14	0	14980	1780-2285
C2N2+OH = HOCN+CN						
plm Phillips 1979			1.90E11	0	2900	
C2N2+N = CN+NCN						
1 Roth ea 1986	est		4.60E12	0	8822	
NCN+M = CN+N+M						
1 Roth ea 1986	est		6.00E13	-0.5	89400	
NCN+O = (a): CN+NO						
(b): NCO+N						
1 Roth ea 1986	est	a	2.40E13	0	0	
1 Roth ea 1986	est	b	2.40E13	0	0	
NCN+N = CN+N2						
1 Roth ea 1986	est		2.40E13	0	0	

REACTION	source	method	Arrhenius expression			temp.	est.max.
						(K)	rel.dev.
CO+NO2 = NO+CO2							
1	Milks ea 1979	ST TH	3.20E13	0	32000	950-1500	
CO+N2O = CO2+N2							
1	Loirat ea 1986	SR	5.00E13	0	44000	1076-1228	
CO2+N = NO+CO							
plm	Avramenko & Krasn. 67		1.90E11	0	3400		
CO2+CN = NCO+CO							
	Jacobs, Wolfrum, ea 88	SR LP	<1.00E09	.	.	1000	
CH4+NH2 = CH3+NH3							
1	Hack ea 1986	FR	7.70E12	0	13760	743-1023	
CH4+N = CH3+NH							
pl	Glarborg ea 1986	est	1.00E13	0	24000		
CH4+CN = products							
	Balla & Pasternack	SR LP	4.70E11	.	.	300	
HCO+NO = HNO+CO							
1	Veyret & Lesclaux 81	SR FP	7.20E14	-0.4	0	298- 503	
HCO+NO2 = products							
	Timonen ea 1988	FR	1.50E13	0	-430	294- 713	
CH3+N = H2CN+H							
m	Miller & Bowman 1988	est	3.00E13	0	0		
pl	Glarborg ea 1986	est	5.00E13	0	0		
CH3+NO = (a): HCN+H2O							
	(b): H2CN+OH						
	Wolff & Wagner 1988	ST TH	tot 2.00E10	.	.	1900	
	Wolff & Wagner 1988	ST/est	tot 4.30E12	0	20300		
m	Miller & Bowman 1988	est	a 1.00E11	0	15000		
m	Miller & Bowman 1988	est	b 1.00E11	0	15000		
CH2+NH = H2CN+H							
	Glarborg ea 1986	est	3.00E13	0	0		
CH2+N = HCN+H							
plm	Glarborg ea 1986	est	5.00E13	0	0		
CH2+N2 = (a): HCN+NH							
	(b): H2CN+N						
	(c): CH2N2						
	Laufer 1981	rev	tot <6.00E07	.	.	300	
plm	Glarborg ea 1986	est	a 1.00E13	0	74000		
	Benson ea 1975	est	a 1.00E14	0	60000		
H2CN+N = CH2+N2							
m	Miller & Bowman 1988	est	-b 2.00E13	0	0		
CH2+NO = (a): HCNO+H (plm)							
	(b): HCN+OH						
	Laufer 1981	review	tot 7.80E12	.	.	300	
plm	Vinckier & Debruyne 79	FR	tot 1.40E12	0	-1100	295- 600	
	Cole ea 1989	rev/inf	a 4.96E12	0	-1100		
	se Wolff & Wagner 88		b 2.30E13	0	0		

CH2(s)+NO = HCN+OH					
m	Miller & Bowman 1988	est	2.00E13	0	0
	Langford ea 1988	SR	1.00E14	.	300
CH+NH3 = products (insertion)					
l	Zabarnick ea 1986	SR LP	4.80E13	0	-460 298- 671
CH+NH2 = H2CN+H					
pl	Glarborg ea 1986	est	3.00E13	0	0
CH+NH = HCN+R					
pl	Glarborg ea 1986	est	5.00E13	0	0
CH+N = CN+H					
plm	Messing ea 1981	FR	1.26E13	.	300
CH+N2 = HCN+N					
	Cole ea 1989	rev/inf	1.49E12	0	13600
	Dean, . . , Bowman 1988	ST TH	2.10E12	0	16700 2700-3700
	Becker ea 1988	FR LP	4.80E10	.	295
lm	Glarborg 1987	est/inf	3.00E11	0	13600
	Glarborg ea 1986	est/inf	1.90E11	0	13600
	Matsui & Yuuki 1985	FL TH	1.20E12	0	13600
	Matsui&Nomaquchi 1978	FL TH	4.00E11	0	13600
	Blauwens ea 1976	FL TH	8.00E11	0	11000
CH+NO = (a): HCN+O (plm)					
(b): HCO+N					
	Lichtin ea 1984	SR FP	tot 1.50E14	.	298
plm	Berman ea 1982	SR FP	tot 1.14E14	0	298- 673
	Butler ea 1981	SR FP	tot 1.75E14	.	300
	Cole ea 1989	rev/inf	a 1.00E14	0	0
	Shaub & Bauer 1978	a	1.00E13	.	<2500
	Cole ea 1989	rev/inf	b 1.00E14	0	0
	Shaub & Bauer 1978	b	1.00E14	.	<2500
CH+N2O = products					
	Becker ea 1988	FR LP	4.10E12	.	295
C+N2 = CN+N					
l	Glarborg 1987	review	1.40E14	0	46140
CN+N = C+N2					
	Mozzhukin, . , Roth 89	ST/est	2.20E13	0	9000 4000-6000
m	Miller & Bowman 1988	review	1.04E15	-0.5	0
	Natarajan&Roth 1986	ST TH	<4.40E14	0	9000 2480-3160
	Whyte & Phillips 83		6.00E13	.	300
	Slack 1976	ST TH	4.40E14	0	9000
C+NO = CN+O					
	Becker ea 1988	FR LP	9.60E12	.	295
	Husain & Young 1975		2.90E13	.	300
	Husain & Kirsch 1971		4.40E13	.	300
plm	Braun ea 1969		6.60E13	.	300
C+N2O = CN+NO					
pl	Husain & Newton 1982	review	1.00E13	.	300
	Husain & Young 1975		7.80E12	.	300
	Husain & Kirsch 1971		1.50E13	.	300
C+CN = C2+N					
	Slack 1976	ST TH	3.00E14	0	36000
C2H5+NO = (a): C2H5NO					
(b): C2H4+HNO					

Esser & Laidler 1970	a	2.40E09	.	.	300
Esser & Laidler 1970	b	2.50E08	.	.	300
C2H3+N = HCN+CH2					
m Miller & Bowman 1988	est	2.00E13	0	0	
C2H2+NH2 = products					
Hack ea 1977	FR	1.40E16	-2.7	0	209-505
HCCO+N = HCN+CO					
plm Thorne ea 1986	est	5.00E13	0	0	
HCCO+NO = HCNO+CO					
m Miller & Bowman 1988	est	2.00E13	0	0	
C2H+NO = products					
Stephens ea 1987	SR FP	2.10E13	.	.	300
C2+N2 = products					
Reisler ea 1980		<6.00E09	.	.	300
CN+CN = C2+N2					
Mozzhukin, ., Roth 89	st/est	6.30E11	0	0	4000-6000
C2+NO = products					
Reisler ea 1980		1.26E14	.	.	300
C2(t)+N2 = products					
Reisler ea 1980		<6.00E09	.	.	300
C2(t)+NO = products					
Reisler ea 1979		4.50E13	.	.	300
C3H3+N = HCN+C2H2					
m Miller & Bowman 1988	est	1.00E14	0	0	

Appendiks B: Kemisk kinetisk model

Reaction	A	β	E_0	Kilde
1. $H + H + M \rightleftharpoons H_2 + M^a$	1.0E18	-1.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
2. $H + H + H_2 \rightleftharpoons H_2 + H_2$	9.2E16	-0.60	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
3. $H + H + H_2O \rightleftharpoons H_2 + H_2O$	6.0E19	-1.25	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
4. $H + H + CO_2 \rightleftharpoons H_2 + CO_2$	5.5E20	-2.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
5. $H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M^b$	7.5E23	-2.60	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
6. $O + OH \rightleftharpoons H + O_2$	4.5E14	-0.50	60	Cohen & Westberg 1983
7. $H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M^c$	7.0E17	-0.80	0	Warnatz 1984
8. $O + O + M \rightleftharpoons O_2 + M$	1.9E13	0.00	-1788	Tsang & Hampson 1985
9. $O + H_2 + O \rightleftharpoons H + OH$	5.0E04	2.67	6290	Sutherland <i>et al.</i> 1986
10. $OH + OH \rightleftharpoons H_2O + O$	2.1E08	1.40	-400	Cohen & Westberg 1983
11. $OH + H_2 \rightleftharpoons H_2O + H$	6.4E06	2.00	2961	Cohen & Westberg 1983
12. $H_2 + O_2 \rightleftharpoons OH + OH$	1.7E13	0.00	47780	Glarborg <i>et al.</i> 1986
13. $HO_2 + H \rightleftharpoons H_2 + O_2$	2.5E13	0.00	700	Glarborg <i>et al.</i> 1986
14. $HO_2 + H \rightleftharpoons OH + OH$	2.5E14	0.00	1900	Glarborg <i>et al.</i> 1986
15. $HO_2 + O \rightleftharpoons OH + H_2$	4.8E13	0.00	1000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
16. $HO_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + O_2$	5.0E13	0.00	1000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
17. $HO_2 + HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + O_2$	2.0E12	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
18. $H_2O_2 + M \rightleftharpoons OH + OH + M$	1.2E17	0.00	45500	Glarborg <i>et al.</i> 1986
19. $H_2O_2 + H \rightleftharpoons HO_2 + H_2$	1.7E12	0.00	3750	Glarborg <i>et al.</i> 1986
20. $H_2O_2 + O \rightleftharpoons HO_2 + OH$	9.6E06	2.00	3974	Tsang & Hampson 1985
21. $H_2O_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + HO_2$	1.0E13	0.00	1800	Glarborg <i>et al.</i> 1986
22. $CO + O + M \rightleftharpoons CO_2 + M$	6.2E14	0.00	3000	Tsang & Hampson 1985
23. $CO + OH \rightleftharpoons CO_2 + H$	1.5E07	1.30	-760	Glarborg <i>et al.</i> 1986
24. $CO + O_2 \rightleftharpoons CO_2 + O$	2.5E12	0.00	47700	Glarborg <i>et al.</i> 1986
25. $CO + HO_2 \rightleftharpoons CO_2 + OH$	5.8E13	0.00	22930	Glarborg <i>et al.</i> 1986
26. $CH_3 + H(+M) \rightleftharpoons CH_4(+M)^d$	6.0E16	-1.00	0	Miller & Bowman 1989
27. $CH_4 + H \rightleftharpoons CH_3 + H_2$	2.2E04	3.00	8750	Glarborg <i>et al.</i> 1986
28. $CH_4 + O \rightleftharpoons CH_3 + OH$	1.0E09	1.50	8600	Tsang & Hampson 1985
29. $CH_4 + OH \rightleftharpoons CH_3 + H_2O$	1.9E05	2.40	2110	Cohen & Westberg 1983
30. $CH_4 + O_2 \rightleftharpoons CH_3 + HO_2$	4.0E13	0.00	56910	Tsang & Hampson 1985
31. $CH_4 + HO_2 \rightleftharpoons CH_3 + H_2O_2$	1.8E11	0.00	18700	Tsang & Hampson 1985
32. $CH_4 + CH_2 \rightleftharpoons CH_3 + CH_3$	4.3E12	0.00	10030	Böhland <i>et al.</i> 1985
33. $CH_4 + CH_2(s) \rightleftharpoons CH_3 + CH_3$	4.3E13	0.00	0	Tsang & Hampson 1985
34. $CH_4 + CH \rightleftharpoons C_2H_4 + H$	6.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
35. $CH_3 + M \rightleftharpoons CH_2 + H + M$	1.9E16	0.00	91600	Glarborg <i>et al.</i> 1986
36. $CH_2 + H_2 \rightleftharpoons CH_3 + H$	5.0E12	0.00	10000	Wolff & Wagner 1988 est
37. $CH_2(s) + H_2 \rightleftharpoons CH_3 + H$	7.2E13	0.00	0	Tsang & Hampson 1985
38. $CH_3 + O \rightleftharpoons CH_2O + H$	8.4E13	0.00	0	Slagle <i>et al.</i> 1987
39. $CH_3 + OH \rightleftharpoons CH_2 + H_2O$	7.5E07	2.00	5000	Miller & Bowman 1989 est
40. $CH_3 + OH \rightleftharpoons CH_2(s) + H_2O$	2.0E13	0.00	0	Hack <i>et al.</i> 1988, est

Reaction	A	β	E ₀	Kilde
41. $CH_3 + O_2 \rightleftharpoons CH_3O + O$	2.1E18	-1.57	29229	Tsang & Hampson 1985
42. $CH_3 + HO_2 \rightleftharpoons CH_3O + OH$	2.0E13	0.00	0	Tsang & Hampson 1985
43. $CH_3 + CH_3(+M) \rightleftharpoons C_2H_6(+M)^e$	9.0E16	-1.18	654	Miller & Bowman 1989
44. $C_2H_6 + H \rightleftharpoons CH_3 + CH_3$	2.3E12	0.50	0	review
45. $CH_3 + CH_2O \rightleftharpoons CH_4 + HCO$	5.5E03	2.81	5860	Tsang & Hampson 1985
46. $CH_3 + HCO \rightleftharpoons CH_4 + CO$	1.2E14	0.00	0	Tsang & Hampson 1985 est
47. $CH_3 + CH_2 \rightleftharpoons C_2H_4 + H$	4.2E13	0.00	0	Tsang & Hampson 1985
48. $CH_3 + CH \rightleftharpoons C_2H_3 + H$	3.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
49. $CH_3 + C \rightleftharpoons C_2H_2 + H$	5.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986 est
50. $CH_3O + M \rightleftharpoons CH_2O + H + M$	1.0E14	0.00	25000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
51. $CH_3O + H \rightleftharpoons CH_2O + H_2$	2.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
52. $CH_3O + O \rightleftharpoons CH_2O + OH$	1.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
53. $CH_3O + OH \rightleftharpoons CH_2O + H_2O$	1.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
54. $CH_3O + O_2 \rightleftharpoons CH_2O + HO_2$	6.3E10	0.00	2600	Glarborg <i>et al.</i> 1986
55. $CH_2OH + M \rightleftharpoons CH_2O + H + M$	1.0E14	0.00	25000	Warnatz 1984
56. $CH_2OH + H \rightleftharpoons CH_2O + H_2$	3.0E13	0.00	0	Warnatz 1984
57. $CH_2OH + O \rightleftharpoons CH_2O + OH$	1.0E13	0.00	0	est
58. $CH_2OH + OH \rightleftharpoons CH_2O + H_2O$	1.0E13	0.00	0	est
59. $CH_2OH + O_2 \rightleftharpoons CH_2O + HO_2$	1.5E13	0.00	1500	Miller & Bowman 1989
60. $CH_2O + M \rightleftharpoons HCO + H + M$	1.0E16	0.00	80270	Rimpel & Just 1980, adj.
61. $CH_2O + M \rightleftharpoons CO + H_2 + M$	8.3E15	0.00	69550	Rimpel & Just 1980
62. $CH_2O + H \rightleftharpoons HCO + H_2$	2.2E08	1.77	3000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
63. $CH_2O + O \rightleftharpoons HCO + OH$	1.7E06	2.32	1480	Hsu <i>et al.</i> 1983
64. $CH_2O + O \rightleftharpoons CO_2 + H + H$	3.5E05	2.42	1360	Hsu <i>et al.</i> 1983
65. $CH_2O + OH \rightleftharpoons HCO + H_2O$	3.4E09	1.18	-447	Glarborg <i>et al.</i> 1986
66. $CH_2O + CH \rightleftharpoons CH_2CO + H$	9.5E13	0.00	-517	Zabarnick <i>et al.</i> 1986
67. $HCO + M \rightleftharpoons CO + H + M^j$	2.5E14	0.00	16802	Miller & Bowman 1989
68. $HCO + H \rightleftharpoons CO + H_2$	1.2E13	0.25	0	Harding & Wagner 1986
69. $HCO + O \rightleftharpoons CO + OH$	3.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
70. $HCO + O \rightleftharpoons CO_2 + H$	3.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
71. $HCO + OH \rightleftharpoons CO + H_2O$	1.1E14	0.00	0	Temps <i>et al.</i> 1984
72. $HCO + O_2 \rightleftharpoons CO + HO_2$	3.3E13	-0.40	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
73. $HCO + CH_2 \rightleftharpoons CH_3 + CO$	2.0E13	0.00	0	Tsang & Hampson 1985 est
74. $CH_2 + H \rightleftharpoons CH + H_2$	1.0E17	-1.20	0	review
75. $CH_2 + O \rightleftharpoons CO + H + H$	1.7E13	0.20	0	review
76. $CH_2 + O \rightleftharpoons CO + H_2$	9.0E12	0.20	0	review
77. $CH_2 + OH \rightleftharpoons CH_2O + H$	3.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
78. $CH_2 + OH \rightleftharpoons CH + H_2O$	1.1E07	2.00	3000	Miller & Bowman 1989 est
79. $CH_2 + O_2 \rightleftharpoons CH_2O + O$	5.0E13	0.00	9000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
80. $CH_2 + O_2 \rightleftharpoons CO_2 + H + H$	1.6E12	0.00	1000	Glarborg <i>et al.</i> 1986

	Reaction	A	β	E_0	Kilde
81.	$CH_2 + O_2 \rightleftharpoons CO_2 + H_2$	6.9E11	0.00	500	Glarborg <i>et al.</i> 1986
82.	$CH_2 + O_2 \rightleftharpoons CO + H_2O$	1.9E10	0.00	-1000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
83.	$CH_2 + O_2 \rightleftharpoons CO + OH + H$	8.6E10	0.00	-500	Glarborg <i>et al.</i> 1986
84.	$CH_2 + O_2 \rightleftharpoons HCO + OH$	4.3E10	0.00	-500	Glarborg <i>et al.</i> 1986
85.	$CH_2 + CO_2 \rightleftharpoons CO + CH_2O$	1.1E11	0.00	1000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
86.	$CH_2 + CH_2 \rightleftharpoons C_2H_2 + 2H$	1.0E12	0.60	0	review
87.	$CH_2 + CH \rightleftharpoons C_2H_2 + H$	4.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
88.	$CH_2 + C \rightleftharpoons C_2H + H$	5.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986 est
89.	$CH_2(s) + M \rightleftharpoons CH_2 + M^{\ddagger}$	1.0E13	0.00	0	Miller & Bowman 1989
90.	$CH_2(s) + H \rightleftharpoons CH_2 + H$	2.0E14	0.00	0	Miller & Bowman 1989
91.	$CH_2(s) + O_2 \rightleftharpoons CO + OH + H$	3.1E13	0.00	0	Tsang & Hampson 1985
92.	$CH + H \rightleftharpoons C + H_2$	1.5E14	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986 est
93.	$CH + O \rightleftharpoons CO + H$	1.0E13	0.30	0	review
94.	$CH + OH \rightleftharpoons HCO + H$	5.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986, adj.
95.	$CH + O_2 \rightleftharpoons HCO + O$	3.3E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
96.	$CH + H_2O \rightleftharpoons CH_2O + H$	5.7E12	0.00	-755	Zabarnick <i>et al.</i> 1986
97.	$CH + CO_2 \rightleftharpoons HCO + CO$	3.4E12	0.00	686	Glarborg <i>et al.</i> 1986
98.	$C + OH \rightleftharpoons CO + H$	5.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
99.	$C + O_2 \rightleftharpoons CO + O$	2.0E13	0.00	0	Braun <i>et al.</i> 1969
100.	$C_2H_6 + H \rightleftharpoons C_2H_5 + H_2$	5.4E02	3.50	5200	Glarborg <i>et al.</i> 1986
101.	$C_2H_6 + O \rightleftharpoons C_2H_5 + OH$	1.2E12	0.60	7310	Cohen & Westberg 1983
102.	$C_2H_6 + OH \rightleftharpoons C_2H_5 + H_2O$	8.7E09	1.05	1810	Glarborg <i>et al.</i> 1986
103.	$C_2H_6 + CH_3 \rightleftharpoons C_2H_5 + CH_4$	5.5E-01	4.00	8280	Glarborg <i>et al.</i> 1986
104.	$C_2H_4 + H(+M) \rightleftharpoons C_2H_5(+M)^h$	2.2E13	0.00	2066	Miller & Bowman 1989
105.	$C_2H_5 + O_2 \rightleftharpoons C_2H_4 + HO_2$	8.4E11	0.00	3875	Tsang & Hampson 1985
106.	$C_2H_4 + M \rightleftharpoons C_2H_2 + H_2 + M$	1.5E15	0.00	55440	Kiefer <i>et al.</i> 1983
107.	$C_2H_4 + M \rightleftharpoons C_2H_3 + H + M$	1.4E16	0.00	81280	Kiefer <i>et al.</i> 1983
108.	$C_2H_4 + H \rightleftharpoons C_2H_3 + H_2$	1.3E06	2.53	12240	Tsang & Hampson 1985
109.	$C_2H_4 + OH \rightleftharpoons CH_2O + CH_3$	5.6E12	0.00	1500	Klemm <i>et al.</i> 1988
110.	$C_2H_4 + OH \rightleftharpoons C_2H_3 + H_2O$	9.0E13	0.00	6860	Klemm <i>et al.</i> 1988
111.	$C_2H_4 + CH_3 \rightleftharpoons C_2H_3 + CH_4$	6.6E00	3.70	9500	Tsang & Hampson 1985
112.	$C_2H_2 + H(+M) \rightleftharpoons C_2H_3(+M)^i$	5.5E12	0.00	2410	Miller & Bowman 1989
113.	$C_2H_3 + H \rightleftharpoons C_2H_2 + H_2$	4.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
114.	$C_2H_3 + O \rightleftharpoons CH_2CO + H$	3.3E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
115.	$C_2H_3 + OH \rightleftharpoons C_2H_2 + H_2O$	5.0E12	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
116.	$C_2H_3 + O_2 \rightleftharpoons C_2H_2 + HO_2$	4.0E12	0.00	-250	Glarborg <i>et al.</i> 1986
117.	$C_2H_2 + M \rightleftharpoons C_2H + H + M$	4.2E16	0.00	107000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
118.	$C_2H + H_2 \rightleftharpoons C_2H_2 + H$	4.1E05	2.39	860	Glarborg <i>et al.</i> 1986
119.	$C_2H_2 + O \rightleftharpoons CH_2 + CO$	1.7E08	1.60	2210	review
120.	$C_2H_2 + O \rightleftharpoons HCCO + H$	2.5E08	1.60	2210	review

	Reaction	A	β	E ₀	Kilde
121.	$C_2H_2 + OH \rightleftharpoons CH_2CO + H$	2.2E-04	4.50	-1000	Miller & Bowman 1989
122.	$C_2H_2 + OH \rightleftharpoons C_2H + H_2O$	3.4E07	2.00	14000	Miller & Bowman 1989
123.	$C_2H_2 + CH_2 \rightleftharpoons C_3H_3 + H$	1.2E13	0.00	6600	Böhland <i>et al.</i> 1985
124.	$C_2H_2 + CH_2(s) \rightleftharpoons C_3H_3 + H$	1.7E14	0.00	0	Hack <i>et al.</i> 1988
125.	$C_2H_2 + CH \rightleftharpoons C_3H_2 + H$	8.4E13	0.00	0	Becker <i>et al.</i> 1988
126.	$C_2H_2 + C_2H \rightleftharpoons C_4H_2 + H$	4.0E13	0.00	0	Frank & Just 1980
127.	$CH_2CO(+M) \rightleftharpoons CH_2 + CO(+M)^j$	3.0E14	0.00	70980	Miller & Bowman 1989
128.	$CH_2CO + H \rightleftharpoons CH_3 + CO$	1.1E13	0.00	3430	Glarborg <i>et al.</i> 1986
129.	$CH_2CO + H \rightleftharpoons HCCO + H_2$	5.0E13	0.00	8000	Miller & Bowman 1989
130.	$CH_2CO + O \rightleftharpoons CH_2O + CO$	1.5E12	0.00	1350	Washida <i>et al.</i> 1983
131.	$CH_2CO + O \rightleftharpoons HCCO + OH$	1.0E13	0.00	8000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
132.	$CH_2CO + OH \rightleftharpoons HCCO + H_2O$	7.5E12	0.00	3000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
133.	$HCCO + H \rightleftharpoons CH_2(s) + CO$	1.4E14	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
134.	$HCCO + O \rightleftharpoons CO + CO + H$	1.1E14	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
135.	$HCCO + OH \rightleftharpoons HCO + CO + H$	1.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
136.	$HCCO + O_2 \rightleftharpoons CO + CO + OH$	1.6E12	0.00	850	Peeters <i>et al.</i> 1986
137.	$HCCO + CH_2 \rightleftharpoons C_2H_3 + CO$	3.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
138.	$HCCO + CH \rightleftharpoons C_2H_2 + CO$	5.0E13	0.00	0	Miller & Bowman 1989
139.	$HCCO + HCCO \rightleftharpoons C_2H_2 + 2CO$	1.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
140.	$C_2H + O \rightleftharpoons CH + CO$	5.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
141.	$C_2H + OH \rightleftharpoons HCCO + H$	2.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
142.	$C_2H + O_2 \rightleftharpoons CO + HCO$	5.0E13	0.00	1500	Warnatz 1984
143.	$C_4H_2 + O \rightleftharpoons C_3H_2 + CO$	2.7E13	0.00	1700	Warnatz 1984
144.	$C_4H_2 + OH \rightleftharpoons C_3H_2 + HCO$	3.0E13	0.00	0	Warnatz 1984
145.	$C_3H_3 + O \rightleftharpoons CH_2O + C_2H$	2.0E13	0.00	0	Miller & Bowman 1989
146.	$C_3H_3 + OH \rightleftharpoons C_3H_2 + H_2O$	2.0E13	0.00	0	Miller & Bowman 1989
147.	$C_3H_3 + O_2 \rightleftharpoons CH_2CO + HCO$	3.0E10	0.00	2868	Gutman <i>et al.</i> 1986
148.	$C_3H_2 + O_2 \rightleftharpoons HCCO + HCO$	1.0E13	0.00	0	Miller & Bowman 1989
149.	$NH_3 + M \rightleftharpoons NH_2 + H + M$	1.4E16	0.00	90600	Glarborg <i>et al.</i> 1986
150.	$NH_3 + H \rightleftharpoons NH_2 + H_2$	6.4E05	2.39	10171	Glarborg <i>et al.</i> 1986
151.	$NH_3 + O \rightleftharpoons NH_2 + OH$	2.1E13	0.00	9000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
152.	$NH_3 + OH \rightleftharpoons NH_2 + H_2O$	2.0E06	2.04	566	Glarborg <i>et al.</i> 1986
153.	$NH_2 + H \rightleftharpoons NH + H_2$	6.9E13	0.00	3650	Glarborg <i>et al.</i> 1986
154.	$NH_2 + O \rightleftharpoons HNO + H$	7.9E14	-0.50	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
155.	$NH_2 + O \rightleftharpoons NH + OH$	7.0E12	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
156.	$NH_2 + OH \rightleftharpoons NH + H_2O$	4.0E06	2.00	1000	Miller & Bowman 1989
157.	$NH + H \rightleftharpoons N + H_2$	1.0E14	0.00	0	Miller & Bowman 1989
158.	$NH + O \rightleftharpoons NO + H$	2.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
159.	$NH + OH \rightleftharpoons HNO + H$	2.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
160.	$NH + OH \rightleftharpoons N + H_2O$	5.0E11	0.50	2000	Glarborg <i>et al.</i> 1986

	Reaction	A	β	E_0	Kilde
161.	$NH + O_2 \rightleftharpoons HNO + O$	1.0E13	0.00	12000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
162.	$NH + O_2 \rightleftharpoons NO + OH$	7.6E10	0.00	1530	Hack <i>et al.</i> 1985
163.	$N + OH \rightleftharpoons NO + H$	3.8E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
164.	$N + O_2 \rightleftharpoons NO + O$	6.4E09	1.00	6280	Glarborg <i>et al.</i> 1986
165.	$NNH \rightleftharpoons N_2 + H$	1.0E04	0.00	0	Miller & Bowman 1989
166.	$NNH + H \rightleftharpoons N_2 + H_2$	1.0E14	0.00	0	Miller & Bowman 1989
167.	$NNH + O \rightleftharpoons N_2O + H$	1.0E14	0.00	0	Miller & Bowman 1989
168.	$NNH + OH \rightleftharpoons N_2 + H_2O$	5.0E13	0.00	0	Miller & Bowman 1989
169.	$NO + HO_2 \rightleftharpoons NO_2 + OH$	2.1E12	0.00	-480	Glarborg <i>et al.</i> 1986
170.	$NO + NH_2 \rightleftharpoons N_2 + H_2O$	6.2E15	-1.25	0	Miller & Bowman 1989
171.	$NO + NH_2 \rightleftharpoons NNH + OH$	6.4E15	-1.25	0	Miller & Bowman 1989
172.	$NO + NH \rightleftharpoons N_2O + H$	2.4E15	-0.80	0.00	Miller & Bowman 1989
173.	$NO + N \rightleftharpoons O + N_2$	3.3E12	0.30	0.00	Glarborg <i>et al.</i> 1986
174.	$NO + NNH \rightleftharpoons N_2 + HNO$	5.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
175.	$HNO + M \rightleftharpoons H + NO + M^{\ddagger}$	1.5E16	0.00	48680	Glarborg <i>et al.</i> 1986
176.	$HNO + H \rightleftharpoons H_2 + NO$	5.0E12	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
177.	$HNO + OH \rightleftharpoons NO + H_2O$	3.6E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
178.	$NO_2 + M \rightleftharpoons NO + O + M$	1.1E16	0.00	66000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
179.	$NO_2 + H \rightleftharpoons NO + OH$	3.5E14	0.00	1500	Glarborg <i>et al.</i> 1986
180.	$NO_2 + O \rightleftharpoons NO + O_2$	1.0E13	0.00	600	Glarborg <i>et al.</i> 1986
181.	$N_2O + M \rightleftharpoons N_2 + O + M$	9.3E14	0.00	59300	Frank <i>et al.</i> 1986
182.	$N_2O + H \rightleftharpoons N_2 + OH$	1.9E06	2.42	13500	Frank <i>et al.</i> 1986
183.	$N_2O + O \rightleftharpoons NO + NO$	1.0E14	0.00	28200	Glarborg <i>et al.</i> 1986
184.	$N_2O + O \rightleftharpoons N_2 + O_2$	1.0E14	0.00	28200	Glarborg <i>et al.</i> 1986
185.	$N_2O + OH \rightleftharpoons N_2 + HO_2$	2.0E12	0.00	10000	Miller & Bowman 1989
186.	$CN + H_2 \rightleftharpoons HCN + H$	3.0E05	2.45	2237	Glarborg <i>et al.</i> 1986
187.	$HCN + O \rightleftharpoons NCO + H$	1.4E04	2.64	4980	Glarborg <i>et al.</i> 1986
188.	$HCN + O \rightleftharpoons NH + CO$	3.5E03	2.64	4980	Glarborg <i>et al.</i> 1986
189.	$HCN + O \rightleftharpoons CN + OH$	2.7E09	1.58	26600	Glarborg <i>et al.</i> 1986
190.	$HCN + OH \rightleftharpoons CN + H_2O$	1.5E13	0.00	10929	Glarborg <i>et al.</i> 1986
191.	$HCN + OH \rightleftharpoons HOCN + H$	5.9E04	2.40	12500	Miller & Bowman 1989
192.	$HCN + OH \rightleftharpoons HNCO + H$	2.0E-03	4.00	1000	Miller & Bowman 1989
193.	$HCN + OH \rightleftharpoons NH_2 + CO$	7.8E-03	4.00	4000	Miller & Bowman 1989
194.	$CN + O \rightleftharpoons CO + N$	1.8E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
195.	$CN + OH \rightleftharpoons NCO + H$	6.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
196.	$CN + O_2 \rightleftharpoons NCO + O$	5.6E12	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
197.	$NCO + M \rightleftharpoons N + CO + M$	3.1E16	-0.50	47700	Glarborg <i>et al.</i> 1986
198.	$NCO + H \rightleftharpoons NH + CO$	5.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
199.	$NCO + O \rightleftharpoons NO + CO$	3.2E13	0.00	0	Higashihara <i>et al.</i> 1985
200.	$NCO + OH \rightleftharpoons NO + CO + H$	1.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986

	Reaction	A	β	E_0	Kilde
201.	$NCO + H_2 \rightleftharpoons HNCO + H$	8.6E12	0.00	9000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
202.	$NCO + N \rightleftharpoons N_2 + CO$	2.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
203.	$NCO + NO \rightleftharpoons N_2O + CO$	1.0E13	0.00	-390	Glarborg <i>et al.</i> 1986
204.	$HCNO + H \rightleftharpoons HCN + OH$	1.0E14	0.00	12000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
205.	$HOCN + H \rightleftharpoons HNCO + H$	1.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
206.	$HNCO + H \rightleftharpoons NH_2 + CO$	1.1E14	0.00	12270	Mertens <i>et al.</i> 1988
207.	$HNCO + O \rightleftharpoons NCO + OH$	3.2E12	0.00	10300	Tully <i>et al.</i> 1988
208.	$HNCO + OH \rightleftharpoons NCO + H_2$	2.6E12	0.00	5540	Tully <i>et al.</i> 1988
209.	$H_2CN + M \rightleftharpoons HCN + H + M$	3.0E14	0.00	22000	Miller & Bowman 1989
210.	$CO_2 + N \rightleftharpoons NO + CO$	1.9E11	0.00	3400	Glarborg <i>et al.</i> 1986
211.	$CH_3 + N \rightleftharpoons H_2CN + H$	3.0E13	0.00	0	Miller & Bowman 1989
212.	$CH_3 + NO \rightleftharpoons HCN + H_2O$	5.3E11	0.00	15000	review
213.	$CH_3 + NO \rightleftharpoons H_2CN + OH$	5.3E11	0.00	15000	review
214.	$CH_2 + N \rightleftharpoons HCN + H$	5.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
215.	$CH_2 + N_2 \rightleftharpoons HCN + NH$	1.0E13	0.00	74000	Glarborg <i>et al.</i> 1986
216.	$CH_2 + NO \rightleftharpoons HCNO + H$	1.4E12	0.00	-1100	Glarborg <i>et al.</i> 1986
217.	$CH_2(s) + NO \rightleftharpoons HCN + OH$	1.0E14	0.00	0	Langford <i>et al.</i> 1988
218.	$CH + N \rightleftharpoons CN + H$	1.3E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
219.	$CH + N_2 \rightleftharpoons HCN + N$	3.0E11	0.00	13600	Glarborg <i>et al.</i> 1986
220.	$CH + NO \rightleftharpoons HCN + O$	1.1E14	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
221.	$CN + N \rightleftharpoons C + N_2$	1.9E15	-0.60	0	review
222.	$C + NO \rightleftharpoons CN + O$	3.7E13	0.00	0	Husain & Newton 1982
223.	$C_2H_3 + N \rightleftharpoons HCN + CH_2$	2.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
224.	$HCCO + N \rightleftharpoons HCN + CO$	5.0E13	0.00	0	Glarborg <i>et al.</i> 1986
225.	$HCCO + NO \rightleftharpoons HCNO + CO$	2.0E13	0.00	0	Miller & Bowman 1989 est.

^a Third body effektiviteter: $H_2=0, H_2O=0, CO_2=0$

^b Third body effektivitet: $H_2O=5$

^c Third body effektiviteter: $H_2O=18.6, CO_2=4.2, H_2=2.86, CO=2.11, N_2=1.26$

^d $k_0=8.0E26T^{-3.0}$, centerkorrektionsparametre (SRI): 0.45, 797.0, 979.0

Third body effektiviteter: $H_2=2$

^e $k_0=3.18E41T^{-7.03}\exp(-2762/RT)$, centerkorrektionsparametre (Troe): 0.604
6927 32979.0

^f Third body effektiviteter: $CH_4=2.8, H_2O=5.0, CO_2=3.0, H_2=1.9, CO=1.9$

^g Third body effektivitet: $H=0$

^h $k_0=6.37E27T^{-2.6}\exp(-54/RT)$

Third body effektiviteter: $H_2=2, CO=2, CO_2=3, H_2O=5$

ⁱ $k_0=2.67E27T^{-3.5}\exp(-2410/RT)$

Third body effektiviteter: $H_2=2, CO=2, CO_2=3, H_2O=5$

^j $k_0=3.6E15\exp(-59270/RT)$

^k Third body effektiviteter: $H_2O=10, O_2=2, H_2=2, N_2=2$