

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	VII
Zusammenfassung	IX
1 Einleitung	1
2 Theoretische Grundlagen	7
2.1 Reaktionskinetik.....	7
2.1.1 Grundlegende Begriffe	7
2.1.2 Temperaturabhängigkeit von Geschwindigkeitskonstanten	8
2.1.3 Druckabhängigkeit von Geschwindigkeitskonstanten	8
2.2 Kinetische Simulationen.....	10
2.2.1 Reaktionsmechanismen	10
2.2.2 Rate-of-Production-Analyse	11
2.2.3 Sensitivitätsanalyse	12
2.2.4 Reaktormodelle und Randbedingungen	12
2.2.5 Luftzahl λ	15
2.3 Stickoxidbildung in Verbrennungsprozessen.....	17
2.3.1 Thermisches NO.....	17
2.3.2 Promptes NO	17
2.3.3 N ₂ O-Mechanismus.....	19
2.3.4 NNH-Mechanismus.....	20
2.3.5 NO _x aus Brennstoff-Stickstoff.....	20
2.3.6 NO ₂ -Bildung.....	20
2.4 Stoßwellentechnik.....	21
2.5 Atom-Resonanz-Absorptions-Spektroskopie	27
2.5.1 Lichtquelle.....	27
2.5.2 Absorption.....	28
2.5.3 Detektion.....	28
2.5.4 Kalibrierung.....	29

3	Experimentelles und Software.....	31
3.1	Experimenteller Aufbau	31
3.1.1	Stoßrohr	31
3.1.2	Atom-Resonanz-Absorptions-Spektroskopie-Aufbau.....	32
3.1.3	Mischsystem	35
3.2	Aufbereitung der Mischungen	36
3.3	Cyanazid-Synthese.....	37
3.4	Durchführung der Experimente.....	38
3.5	Programmpakete.....	39
3.5.1	OpenSMOKE++	39
3.5.2	laminarSMOKE	41
3.6	Fehlerquellen	41
4	Modellierung der Verbrennung unter motorischen Bedingungen	43
4.1	Experimentelle Befunde am Magergasmotor	43
4.2	Simulationen verschiedener Reaktoren	43
4.2.1	Nulldimensionaler diskontinuierlicher Reaktor.....	43
4.2.2	Eindimensionale Flamme	51
4.2.3	Zweidimensionaler idealisierter motorischer Brennraum.....	54
4.3	Vergleich von Experiment und Simulationen	56
4.4	Experimentelle Befunde am Oxymethylenether-betriebenen Dieselmotor.....	58
4.5	Reaktionskinetisches Modell n-Heptan/OME mit NO _x	58
4.5.1	Modellbildung.....	59
4.5.2	Validierung anhand von Literaturdaten.....	60
4.6	Einfluss von p , T und λ auf die Schadstoffbildung.....	63
4.7	Qualitative Betrachtung der Formaldehydbildung während der Oxymethylenether-Verbrennung.....	66
4.8	Simulation der Nacheinspritzung	66
4.9	Semi-quantitativer Vergleich von Modell und Experiment	71

5	Kinetische Untersuchungen der Reaktion von NCN mit H-Atomen	73
5.1	Stoßwellenexperimente (H-ARAS).....	73
5.1.1	H-Atom-Konzentrations-Zeit-Profilе.....	75
5.1.2	Reaktionskinetische Modelle	79
5.1.3	Geschwindigkeitskonstante $\text{NCN} + \text{H} \rightarrow \text{Produkte}$	81
5.1.4	Aussagekraft der H-Atom-Konzentrations-Zeit-Profilе	89
5.2	Vergleich mit NCN-Pyrolyse (C-ARAS)	93
5.3	Nebenreaktion $\text{NCN} + \text{I}$ (I-ARAS).....	96
5.4	Absorption durch andere Spezies	97
5.5	Stoßwellenexperimente N-ARAS und N-/H-ARAS.....	100
5.5.1	Simultane Messung von H- und N-Atomen	101
5.5.2	N-Atom-Konzentrations-Zeit-Profilе.....	102
5.5.3	Geschwindigkeitskonstante $\text{NCN} + \text{H} \rightarrow \text{HCN} + \text{N}$	103
5.5.4	Absorption durch Ethyliodid.....	104
5.5.5	Literaturvergleich	106
5.5.6	Verzweigungsverhältnis.....	108
5.6	Zusammenfassung	109
6	Fazit und Ausblick	111
A	Anhang.....	115
	Literaturverzeichnis	135
	Liste der Veröffentlichungen	147