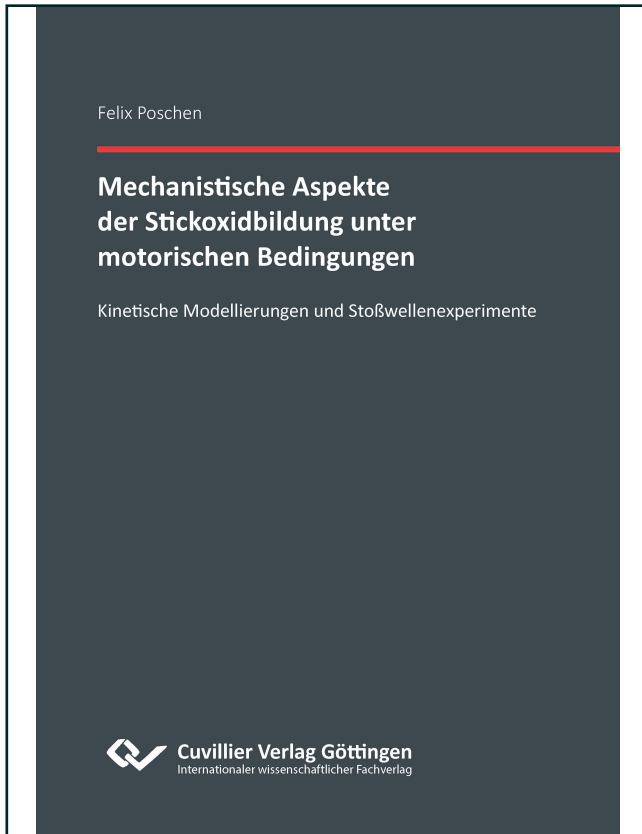




Felix Poschen (Autor)

**Mechanistische Aspekte der Stickoxidbildung unter motorischen Bedingungen Kinetische Modellierungen und Stoßwellenexperimente**



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/8914>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen, Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: [info@cuvillier.de](mailto:info@cuvillier.de), Website: <https://cuvillier.de>

# Inhaltsverzeichnis

<b>Abkürzungsverzeichnis .....</b>	<b>VII</b>
<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>IX</b>
<b>1 Einleitung .....</b>	<b>1</b>
<b>2 Theoretische Grundlagen .....</b>	<b>7</b>
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 $\lambda$ .....	15
2.3 Stickoxidbildung in Verbrennungsprozessen.....	17
2.3.1 Thermisches NO.....	17
2.3.2 Promptes NO .....	17
2.3.3 N <sub>2</sub> O-Mechanismus.....	19
2.3.4 NNH-Mechanismus.....	20
2.3.5 NO <sub>x</sub> aus Brennstoff-Stickstoff.....	20
2.3.6 NO <sub>2</sub> -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

<b>3</b>	<b>Experimentelles und Software.....</b>	<b>31</b>
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
<b>4</b>	<b>Modellierung der Verbrennung unter motorischen Bedingungen.....</b>	<b>43</b>
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 <sub>x</sub> .....	58
4.5.1	Modellbildung.....	59
4.5.2	Validierung anhand von Literaturdaten.....	60
4.6	Einfluss von $p$ , $T$ und $\lambda$ 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

<b>5</b>	<b>Kinetische Untersuchungen der Reaktion von NCN mit H-Atomen .....</b>	<b>73</b>
5.1	Stoßwellenexperimente (H-ARAS).....	73
5.1.1	H-Atom-Konzentrations-Zeit-Profile.....	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-Profile .....	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-Profile.....	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
<b>6</b>	<b>Fazit und Ausblick .....</b>	<b>111</b>
<b>A</b>	<b>Anhang.....</b>	<b>115</b>
	<b>Literaturverzeichnis .....</b>	<b>135</b>
	<b>Liste der Veröffentlichungen .....</b>	<b>147</b>