

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>11</b>
2.1	Flammenchemie . . . . .	11
2.1.1	Kenngößen von Vormischflammen: $\phi$ und C/O-Verhältnis . . . . .	11
2.1.2	Modellsystem: Laminare flache Flamme . . . . .	12
2.2	Massenspektrometrie in der Verbrennungsdiagnostik . . . . .	14
2.2.1	Molekularstrahlprobennahme . . . . .	15
2.2.2	Ionisation . . . . .	16
2.2.3	Time-of-Flight Massenanalysatoren . . . . .	17
2.2.3.1	Massenbegriff . . . . .	18
2.2.3.2	Grundlagen der Flugzeitmassenspektrometrie . . . . .	19
2.2.3.3	Auflösung und Signalverbreiterungen . . . . .	20
2.2.3.4	Reflektron und mehrstufige Extraktion . . . . .	21
<b>3</b>	<b>Quantifizierung der MBMS-Messungen</b>	<b>23</b>
3.1	Ionisationsprozesse . . . . .	23
3.1.1	Allgemeines . . . . .	23
3.1.2	Elektronenionisation . . . . .	24
3.2	Isomerspezifische Massenspektrometrie durch VUV-Photoionisation . . . . .	26
3.3	Massendiskriminierung . . . . .	26
3.4	Kalibrationsverfahren für EI-MBMS . . . . .	28
3.4.1	Kalibration über binäre Gasmischungen . . . . .	28
3.4.2	Berechnung der Hauptspezies-Molenbrüche . . . . .	29
3.4.3	Bestimmung von Kalibrationsfaktoren nach RICS-Methode . . . . .	30
3.4.4	Indirekte Kalibrierung über Querschnittssteigungen . . . . .	33
3.4.5	Bewertung der unterschiedlichen Kalibrationsmethoden . . . . .	34
<b>4</b>	<b>Aufbau einer Apparatur zur Molekularstrahlmassenspektrometrie</b>	<b>35</b>

4.1	Hintergrund . . . . .	35
4.1.1	Laserbasierte Verfahren zur Erzeugung von Vakuum-UV-Strahlung	36
4.1.2	Verfahren zur Erzeugung monochromatischer Elektronen . . . . .	38
4.2	Konzeption und Konstruktion . . . . .	39
4.2.1	Eigenschaften des Spektrometers . . . . .	39
4.2.2	Lasersystem . . . . .	40
4.2.3	Vakuumkammern . . . . .	42
4.2.4	Brennerkammer . . . . .	43
4.2.5	Peripherie . . . . .	45
4.3	Detaillierte Beschreibung des experimentellen Aufbaus . . . . .	46
4.4	Zusammenfassung . . . . .	47
<b>5</b>	<b>Probenentnahmeeffekte in der Molekularstrahlmassenspektrometrie</b>	<b>49</b>
5.1	Theoretische Grundlagen . . . . .	49
5.1.1	Probennahmesysteme in der massenspektrometrischen Flammenanalytik . . . . .	49
5.1.2	Übersicht über frühere Untersuchungen . . . . .	50
5.1.2.1	Einfluss auf Speziesprofile . . . . .	51
5.1.2.2	Einfluss auf Temperaturprofile . . . . .	53
5.2	Experimentelle Untersuchungen zu Probenentnahmeeffekten . . . . .	55
5.3	Ergebnisse der Parametervariationen . . . . .	56
5.3.1	Änderung des Öffnungsdurchmessers . . . . .	56
5.3.2	Änderung des Düse-Skimmer-Abstandes . . . . .	59
5.3.2.1	Einfluss auf die Signalintensität . . . . .	59
5.3.2.2	Einfluss auf die Massendiskriminierung . . . . .	62
5.3.3	Änderung des Düsenwinkels . . . . .	63
5.4	Zusammenfassung . . . . .	64
<b>6</b>	<b>Experimentelle Untersuchung der Niedertemperatur-Verbrennung</b>	<b>67</b>
6.1	Grundlagen der Niedertemperaturverbrennung . . . . .	67
6.1.1	Technischer Hintergrund und Arbeitshypothesen des SFB 686 . . . . .	67
6.1.2	Flammenchemie bei niedriger Temperatur – „cool flames“ . . . . .	69
6.1.3	Verbrennungsinstabilitäten bei der Niedertemperaturverbrennung von Methan . . . . .	72
6.2	Experimenteller Ansatz . . . . .	73
6.3	Niedertemperaturbrenner . . . . .	74

6.3.1	Entwicklung eines vorheizbaren Matrixbrenners . . . . .	74
6.3.2	Betrieb ohne Vorheizung . . . . .	77
6.3.3	Betrieb des vorheizbaren Matrixbrenners . . . . .	79
6.3.4	Erste Untersuchungsergebnisse . . . . .	80
6.3.4.1	Übersicht über die untersuchten Flammen . . . . .	81
6.3.4.2	Temperaturmessung . . . . .	81
6.3.4.3	Massenspektrometrische Untersuchungen . . . . .	84
6.3.5	Zusammenfassung und Ausblick . . . . .	86
6.4	Niedertemperatur-Strömungsreaktor . . . . .	88
6.4.1	Strömungsreaktor zur Kopplung an ein Quadrupol-Massenspektrometer und ein IR-Spektrometer . . . . .	88
6.4.1.1	Experimenteller Aufbau . . . . .	88
6.4.1.2	Auswertung der massenspektrometrischen Messungen . . . . .	90
6.4.1.3	Ergebnisse . . . . .	91
6.4.1.4	Zusammenfassung . . . . .	95
6.4.2	Strömungsreaktor zur Kopplung an ein TOF-MS . . . . .	96
6.4.2.1	Reaktoraufbau . . . . .	96
6.4.2.2	Messung der Abgaszusammensetzung . . . . .	96
6.4.2.3	Temperaturmessung . . . . .	99
6.4.2.4	Ergebnisse . . . . .	99
6.4.2.5	Zusammenfassung und Ausblick . . . . .	102
6.5	Zusammenfassung . . . . .	105
<b>7</b>	<b>Untersuchung von ethanoldotierten Propenflammen</b>	<b>107</b>
7.1	Theoretische Grundlagen zur Ethanoldotierung von Propenflammen . . . . .	109
7.1.1	Verbrennung von Ethanol . . . . .	109
7.1.2	Verbrennung von DME . . . . .	109
7.1.3	Benzol-Bildungsprozesse in Propenflammen . . . . .	110
7.2	Experimenteller Aufbau . . . . .	111
7.2.1	Flammenbedingungen . . . . .	111
7.2.2	Massenspektrometer zur Elektronenionisation . . . . .	112
7.3	Ergebnisse . . . . .	113
7.3.1	Benzolvorläufer . . . . .	114
7.3.2	Oxygenierte Spezies . . . . .	116
7.4	Diskussion und Vergleich zu Propen/DME-Mischflammen . . . . .	117
7.5	Zusammenfassung . . . . .	119

<b>8 Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>121</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>125</b>