



Michael Letzgus (Autor)

# **Simulation und Messung der Spektroskopie und Moleküldynamik verbrennungsrelevanter Radikale in der Hochtemperatur-Gasphase**



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/1539>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentzsch-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>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Spezies in der Verbrennungschemie</b>	<b>9</b>
2.1	Das NO-Radikal . . . . .	11
2.2	Das OH-Radikal . . . . .	14
2.3	Das CH-Radikal . . . . .	15
2.4	Das C <sub>2</sub> -Molekül . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Spektroskopie zweiatomiger Moleküle</b>	<b>19</b>
3.1	Elektronische Struktur und Energiezustände . . . . .	19
3.1.1	Die Hundschen Kopplungsfälle . . . . .	19
3.1.2	Aufbauprinzipien der Quantenzahlen . . . . .	20
3.1.3	Benennung der Energieniveaus . . . . .	24
3.2	Übergänge und Auswahlregeln . . . . .	25
3.3	Elektronische Struktur wichtiger zweiatomiger Moleküle . . . . .	26
3.3.1	Elektronische Struktur von NO . . . . .	26
3.3.2	Elektronische Struktur von OH . . . . .	27
3.3.3	Elektronische Struktur von CH . . . . .	28
3.3.4	Elektronische Struktur von C <sub>2</sub> . . . . .	29
3.4	Stoßinduzierte Energietransferprozesse . . . . .	36
3.4.1	Die Fluoreszenzlöschung . . . . .	38
3.4.2	Der elektronische Energietransfer . . . . .	39
3.4.3	Der Rotationsenergietransfer . . . . .	39
3.4.4	Der Vibrationsenergietransfer . . . . .	42
3.4.5	Die Prädissoziation . . . . .	42
3.5	Linienformen . . . . .	43
3.6	Laserinduzierte Fluoreszenz . . . . .	45
3.7	Anisotropie und Polarisierung der Fluoreszenz . . . . .	47
3.8	Der Ramaneffekt . . . . .	49

<b>4</b>	<b>Experimentelles</b>	<b>51</b>
4.1	Das Pikosekunden-Lasersystem . . . . .	53
4.1.1	Funktionsweise des Titan:Saphir-Lasers . . . . .	53
4.1.2	Funktionsweise des Titan:Saphir-Verstärkers . . . . .	56
4.2	Der Ramanshifter . . . . .	60
4.3	Untersuchungsobjekte . . . . .	61
4.4	Das zeitauflösende Detektionssystem . . . . .	63
<b>5</b>	<b>Experimentelle Neuerungen und Erweiterungen</b>	<b>65</b>
5.1	Entwicklung der heizbaren Gasmesszelle für Studien des Quenchings . . .	65
5.2	Optimierung des Ramanshifters . . . . .	69
5.3	Messung langer Zeitintervalle mit der Streak-Kamera . . . . .	73
5.4	Erweiterung und Reparatur des Lasersystems . . . . .	75
<b>6</b>	<b>Entwicklung von LASKIN<math>\nu^2</math></b>	<b>79</b>
6.1	Struktur von LASKIN $\nu^2$ . . . . .	80
6.1.1	Objektorientierter-Ansatz . . . . .	82
6.1.2	Implementierung der Spektroskopie . . . . .	84
6.1.3	Implementierung der Spezies . . . . .	90
6.1.4	Implementierung der Energietransfermodelle . . . . .	94
6.1.5	Implementierung des Differentialgleichungssystems . . . . .	96
6.1.6	Implementierung der Schnittstelle zum DGL-Löser . . . . .	99
6.2	Lösen von Differentialgleichungen . . . . .	105
6.3	Präkonditionierung . . . . .	108
6.4	Berechnung der Linienbreiten . . . . .	111
6.5	Berücksichtigung der Polarisation . . . . .	111
6.5.1	Polarisation und Mehrfachanregung . . . . .	111
6.5.2	Polarisation und Sättigung . . . . .	112
6.6	Neue Energietransfer-Modelle und Erweiterungen . . . . .	113
6.6.1	Ein neues RET-Modell . . . . .	113
6.6.2	Ein neues VET-Modell . . . . .	114
6.6.3	Final States of Quenching . . . . .	115
6.7	Simulation von AE-Spektren mit Mehrfachanregung . . . . .	118
6.8	Simulation der Chemilumineszenz . . . . .	119
6.8.1	Überblick . . . . .	119
6.8.2	Simulation der Chemilumineszenz mit LASKIN $\nu^2$ . . . . .	122

<b>7</b>	<b>FINDfit – Fast Iterative Numerical Deconvolution</b>	<b>125</b>
7.1	Nichtlineare Fit-Algorithmen . . . . .	126
7.2	Faltung und Entfaltung . . . . .	129
7.3	Iterative Darstellung von Exponentialfunktionen . . . . .	131
7.4	Bestimmung der Fit-Qualität . . . . .	135
7.5	Analyse von Fehlern . . . . .	138
<b>8</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>141</b>
8.1	Energietransfer im C <sub>2</sub> -Molekül . . . . .	142
8.2	Entwicklung von LASKIN $\nu^2$ . . . . .	147
8.3	Simulation von Anregungs-Emissionsspektren . . . . .	151
8.3.1	LIF des CH-Radikals . . . . .	151
8.3.2	LIF des C <sub>2</sub> -Moleküls . . . . .	154
8.4	Simulation der Chemilumineszenz . . . . .	160
8.5	Simulation von Pump-Probe-Prozessen . . . . .	166
8.6	Datenanalyse und Fehlerbewertung . . . . .	171
<b>9</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>179</b>
	<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>185</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>187</b>
	<b>Index</b>	<b>207</b>