

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|------------|
| Symbolverzeichnis | iii |
| Abstract | 1 |
| 1 Einleitung | 3 |
| 2 Dynamik chemischer Reaktionssysteme | 7 |
| 2.1 Erhaltungsgleichungen | 7 |
| 2.2 Homogene chemische Reaktionssysteme | 10 |
| 3 Reduktion von Reaktionsmechanismen | 13 |
| 3.1 Einführung | 13 |
| 3.2 Mathematisches Konzept der ILDM-Methode | 17 |
| 3.3 Numerisches Verfahren | 20 |
| 3.4 Beispiele 1–und 2–dimensionaler ILDMs | 21 |
| 3.5 Simulation reaktiver Strömungen | 24 |
| 3.6 Zusammenfassung | 26 |
| 4 Mechanismenreduktion für CVD–Verfahren | 27 |
| 4.1 Einführung | 27 |
| 4.1.1 Zerfall von Monosilan | 28 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 4.2 | CVD-Reaktor | 31 |
| 4.2.1 | Mathematisches Modell | 32 |
| 4.2.2 | Ergebnisse | 34 |
| 4.3 | Analyse des Monosilan-Reaktionssystems | 35 |
| 4.3.1 | Charakteristische Zeitskalen | 37 |
| 4.3.2 | Sensitivitätsanalyse | 40 |
| 4.3.3 | Charakteristische Reaktionspfade | 44 |
| 4.4 | Reduzierte Si/H-Systeme | 46 |
| 4.4.1 | Relaxationsverhalten des Monosilan Systems | 47 |
| 4.4.2 | 1- und 2-dimensionale ILDMs | 48 |
| 4.5 | Schlussfolgerungen | 50 |
| 5 | Reduzierte Mechanismen für Verbrennungsprozesse | 55 |
| 5.1 | Einführung | 55 |
| 5.2 | Effiziente Berechnung von ILDMs | 58 |
| 5.3 | Behandlung des Bereichs langsamer Chemie | 63 |
| 5.4 | Projektion der Erhaltungsgleichungen | 66 |
| 5.5 | Implementierung | 72 |
| 5.6 | Flammenberechnungen und Ergebnisse | 75 |
| 5.6.1 | Freie Synthesegas/Luft-Flamme | 77 |
| 5.6.2 | Gestreckte Synthesegas/Luft-Flamme | 82 |
| 5.6.3 | Freie Methan/Luft-Flamme | 84 |
| 5.7 | Zusammenfassung der Ergebnisse | 96 |
| 6 | Zusammenfassung | 99 |