

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