

1 Einleitung.....	7
2 Oxidation von Kohlenwasserstoffen in homogener Phase	10
2.1 Chemie der Verbrennung.....	10
2.2 Kinetik der Kohlenwasserstoff-Oxidation	14
2.3 Grundlagen der Zündprozesse	15
2.3.1 Zündung.....	15
2.3.2 Zündverzugszeit	17
2.4 Produktverteilungen	19
2.5 Simulation homogener Oxidationsreaktionen	21
2.5.1 Simulation homogener Gasphasenreaktionen.....	21
2.5.2 Niedertemperatur-Reaktionsmechanismus.....	23
3 Experimenteller Aufbau.....	24
3.1 Konzeption des Experiments	24
3.1.1 Anforderungen an das Experiment	24
3.1.2 Vergleich mit anderen Versuchskonzepten	26
3.1.2.1 Stoßwellenrohre.....	27
3.1.2.2 Strömungsreaktoren	27
3.2 Versuchsaufbau.....	28
3.2.1 Gesamtanlage	28
3.2.2 Datenerfassung und Steuerung	32
3.2.3 Zeitlicher Versuchsablauf	33
4 Verwendete Messtechniken	34
4.1 Druckmessungen.....	34
4.2 Volumenmessung.....	34
4.3 Temperaturmessung	35
4.4 Analyse der Gemischzusammensetzung.....	35
4.4.1 Prinzip der Gaschromatographie	36
4.4.2 Verwendeter Gaschromatograph	38
4.4.3 Qualitative und quantitative Analyse	42
4.4.3.1 Qualitative Analyse.....	42
4.4.3.2 Quantitative Analyse.....	43
5 Charakterisierung des Anlageverhaltens	46
5.1 Druckverläufe bei Kompression inerten Gase	46
5.1.1 Gasverluste durch Undichtigkeiten im Reaktor	47
5.1.2 Druckabfall durch Wärmeverlust.....	49
5.2 Simulation der Wandwärmeverluste	50
5.2.1 Verwendetes Wärmeverlust-Modell	50
5.2.1.1 Simulationsmodell in der Kompressionsphase	52
5.2.1.2 Simulationsmodell nach der Kompressionsphase	52
5.2.2 Modellierung der Rapid Compression Machine	56
5.2.3 Vergleich Simulation und Experiment von Inertgasen	58
6 Ergebnisse und Diskussion	63
6.1 Untersuchung von Zündverzugszeiten.....	63
6.1.1 Definition der Zündverzugszeit.....	63
6.1.2 Reproduzierbarkeit der Zündungen	65
6.1.3 Vergleiche mit Ergebnissen einer anderen RCM.....	66
6.1.4 Einfluss verschiedener Mechanismen auf die Simulationsergebnisse.....	67
6.1.5 Zündverhalten von Methan	69

6.1.5.1 Einfluss der Temperatur	70
6.1.5.2 Einfluss des Druckes	71
6.1.5.3 Einfluss der Inertgasart	74
6.1.5.4 Einfluss der Inertgaskonzentration	76
6.1.6 Zündverhalten von Propan	77
6.1.7 Zündverhalten von Butan	81
6.1.8 Zündverhalten von Propen	82
6.2 Untersuchungen der Oxidehydrierung von Propan	85
6.2.1 Reproduzierbarkeit von Produktentstehung und Speziesverteilung	86
6.2.1.1 Experimentelle Schwankungen der Spezieskonzentrationen	86
6.2.1.2 Experimentelle Schwankungen von Umsatz und Selektivität	89
6.2.1.3 Temperatursensitivität von Experiment und Simulation	90
6.2.1.4 Zeitliches Verhalten der Produktentstehung	93
6.2.1.5 Einfluss des Drucks auf Umsatz und Selektivität	96
6.2.2 Untersuchung der Oxidehydrierung fetter Propan-Gemische	98
6.2.2.1 Oxidehydrierung unter extrem fetten Bedingungen ($\Phi \approx 300$)	98
6.2.2.2 Oxidehydrierung unter fetten Bedingungen ($\Phi \approx 13$)	103
6.2.3 Simulationen zur technischen Anwendung des Verfahrens	105
6.2.3.1 Druckeinfluss auf Umsatz und Selektivität	106
6.2.3.2 Gemischeinfluss auf Umsatz und Selektivität	107
7 Zusammenfassung und Ausblick	111
7.1 Zusammenfassung	111
7.2 Ausblick	113
8 Literaturverzeichnis	114