

Inhaltsverzeichnis

Danksagung	III
Abkürzungsverzeichnis	V
Zusammenfassung	IX
1 Einleitung	1
2 Kinetisches Modell	5
2.1 Grundlagen Reaktionskinetik	5
2.1.1 Geschwindigkeitskonstanten von Elementarreaktionen.....	5
2.1.2 Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten.....	8
2.1.3 Druckabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten	9
2.2 Kinetische Simulation von Reaktionsmechanismen	12
2.2.1 Simulationssoftware OpenSMOKE.....	12
2.2.2 Reaktionsflussanalysen.....	15
2.2.3 Rate-of-Production-Analysen.....	16
2.2.4 Sensitivitätsanalysen.....	17
2.3 Aufstellung des Reaktionsmechanismus	19
2.3.1 <i>n</i> -Heptan-Oxidationsmechanismus.....	19
2.3.2 NO _x -Submechanismus	20
2.3.3 Verknüpfungsreaktionen	23
2.4 Reduktion des NO _x -Mechanismus.....	24
3 Simulationsergebnisse	29
3.1 Literaturvergleiche	29
3.1.1 Zündverzugszeiten.....	29
3.1.2 Stickoxidbildung.....	31
3.1.3 Zusammenhang zwischen CO _x und NO _x	37
3.2 NO-NO ₂ -Gleichgewicht	41
3.3 Bildungswege für NO und NO ₂	44
3.4 Einfluss wichtiger Kenngrößen auf die NO _x -Bildung	52
3.4.1 Einfluss der Luftfeuchte	53
3.4.2 Einfluss der Gemischbildung (Druck und Temperatur)	54
3.4.3 Einfluss der Ladungsverdünnung (Luftzahl und AGR-Rate).....	56
3.4.4 Allgemeine Zusammenhänge zwischen NO und NO ₂	61
3.5 Vergleiche mit Messergebnissen am Motorprüfstand.....	66
3.6 NH ₃ -Oxidation im Abgasstrang	70
4 Stoßwellenexperimente	75
4.1 Theoretische Grundlagen	75

4.1.1	Stoßwellen.....	75
4.1.1.1	Erzeugung von Stoßwellen	75
4.1.1.2	Berechnung von Zustandsdaten	76
4.1.2	Massenspektrometrie.....	80
4.1.2.1	Elektronenstoßionisation.....	82
4.1.2.2	Flugzeitmassenspektrometrie.....	85
4.1.2.3	Mikrokanalplatten	87
4.2	Experimenteller Aufbau	87
4.2.1	Mischsystem.....	88
4.2.2	Stoßrohr.....	89
4.2.3	Flugzeitmassenspektrometer	91
4.2.4	Messelektronik, Messprogramm und Datenauswertung	93
4.3	Mögliche Einflüsse bei Hochtemperaturmessungen.....	97
4.4	Untersuchte Reaktionssysteme.....	110
4.4.1	Pyrolyse von NO	111
4.4.2	Thermische NO-Bildung.....	114
4.4.3	Pyrolyse von NO ₂	117
4.4.4	Copyrolyse von NO und C ₂ H ₆	124
4.4.5	Pyrolyse von NH ₃	132
4.4.6	Copyrolyse von NO und NH ₃	138
5	Ausblick	143
A	Anhang	147
A.1	NO _x -Submechanismus.....	147
A.2	Bedeutung motorischer Fachbegriffe.....	167
A.3	Verwendete Messdaten des IFKM.....	168
A.4	Verweilzeiten der Messungen am ITCP	172
A.5	Einstellungen am Massenspektrometer.....	173
A.6	Verwendete Substanzen bei Stoßrohrmessungen.....	174
A.7	Kalibrierpolynome	175
A.8	Verwendete Kalibrierfaktoren.....	176
A.9	Schwingungsfrequenzen	177
A.10	Referenzmassenspektren aus der Literatur.....	178
A.11	Messbedingungen Stoßrohrmessungen.....	181
A.11.1	Messungen zur N ₂ -Dissoziation.....	181
A.11.2	Messungen zur O ₂ -Dissoziation.....	182
A.11.3	Messungen zur Pyrolyse von NO.....	183
A.11.4	Messungen zur thermischen NO-Bildung.....	184
A.11.5	Messungen zur Pyrolyse von NO ₂	186
A.11.6	Messungen zur Copyrolyse von NO und C ₂ H ₆	188
A.11.7	Messungen zur Pyrolyse von NH ₃	189
A.11.8	Messungen zur Copyrolyse von NO und NH ₃	191

Literaturverzeichnis	193
Publikationsliste	205