

Dipl.-Ing. Andreas Daifß, Mannheim

**Modellierung heterogener
Reaktionen auf
Siliziumdioxidoberflächen
unter Berücksichtigung
von Verdünnungseffekten**

Reihe **7**: Strömungstechnik

Nr. **324**

Inhaltsverzeichnis

Symbolbedeutungen	VIII
1 Einleitung	1
1.1 Thematisches Umfeld der Arbeit	1
1.2 Motivation und Zielsetzung der Arbeit	2
2 Strömungen im thermochemischen Nichtgleichgewicht	4
2.1 Gültigkeit der Kontinuumsapproximation	7
2.2 Erhaltungsgleichungen in der Mehrtemperaturformulierung	8
2.3 Transportgrößen	13
2.4 Energie- und Speziesquellterme	14
2.5 Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen	15
2.5.1 Berechnung der reibungsfreien Flüsse	16
2.5.2 Berechnung der viskosen Flüsse	17
2.6 Lösung des diskretisierten Gleichungssystems	18
3 Gaskinetische Randgleichungen für die Navier-Stokes-Gleichungen	21
3.1 Flüsse der Erhaltungsgrößen an Grenzflächen	23
3.2 Geschwindigkeitsverteilungsfunktionen in Oberflächennähe	21

3.2.1	Massenflüsse	27
3.2.2	Tangential- und Normalimpulsflüsse	29
3.2.3	Energieflüsse	31
3.3	Festkörperrandgleichungen	33
4	Modellierung heterogener Prozesse auf Siliziumdioxidoberflächen	35
4.1	Elementarreaktionen auf monokristallinen Oberflächen	35
4.2	Reaktionsschema für Luftströmungen auf Siliziumdioxidoberflächen	38
4.3	Modellierung der Geschwindigkeitskoeffizienten	40
4.3.1	Annahmen und Modellierungskonzept	40
4.3.2	Adsorption und thermische Desorption	42
4.3.3	Eley-Rideal-Mechanismus und dissoziative Adsorption	47
4.3.4	Langmuir-Hinshelwood-Mechanismus	54
4.4	Berechnung der Massenquellterme heterogener Reaktionen	57
4.5	Energetischer Zustand rekombinierender Moleküle	58
5	Ergebnisse	64
5.1	Verifikation der gaskinetischen Randgleichungen	65
5.1.1	Stoßrohrexperiment von Vetter	65
5.1.2	Kugel mit Mach 35 Anströmung	70
5.1.3	Strömung um eine Doppellipse	73
5.1.4	Strömungen um Hyperboloide	77
5.2	Verifikation des Oberflächenchemiemodells	82
5.2.1	Anpassung der sterischen Faktoren	82

5.2.2	Einfluß von Gasphasenzustand und Oberflächentemperatur auf das katalytische Verhalten der Oberfläche	86
5.3	Strömungen um Shuttle-äquivalente Hyperboloide	91
5.4	MIRKA-Umströmung	100
6	Zusammenfassung	105
A	Gasketische Randgleichungen für rotationssymmetrische Oberflächen	108
B	Diskretisierung der Randgleichungen	111
C	Lösungsverfahren zur Berechnung der Oberflächenbelegung	113
D	Parameter für die heterogenen Prozesse	115