

Numerische Lösung der Chemischen Mastergleichung

Die Berechnung der Geschwindigkeitskonstanten spielt eine entscheidende Rolle bei der Modellierung von chemischen Prozessen. Geschwindigkeitskonstanten haben sehr komplexe Abhängigkeiten von Systemparameter (wie z. B. Druck und Temperatur). Eine der Möglichkeiten zur Berechnung der Geschwindigkeitskonstanten ist die Lösung der chemischen Mastergleichung (CME). Die CME beschreibt die zeitliche Entwicklung der Besetzung von Schwingungs- und Rotationsenergieniveaus unter dem Einfluss der chemischen Reaktionen und der Energieübertragung durch Stöße (Abb. 2).

Obwohl für manche spezielle Bedingungen analytische Lösungen der CME existieren, wird in den meisten praktischen Fällen eine numerische Lösung mit einer Diskretisierung über einem großen aber finiten Energiebereich benötigt. Um eine ausreichende Genauigkeit zu erreichen, ist normalerweise eine ziemlich feine Diskretisierung erforderlich, was zu sehr großen diskreten Modellen führt.

In vielen Fällen ist eine detaillierte Kenntnis der zeitlichen Entwicklung der Besetzung von Energieniveaus für die Berechnung der Geschwindigkeitskonstante nicht nötig. Deswegen sucht man nach Möglichkeiten zur Reduktion des diskreten Modells und zur Verbesserung der Effizienz der numerischen Lösung. Hier wird als Testbeispiel der thermische Zerfall eines Radikals, das durch die H-Addition zum Kohlenstoff in der α -Position des Sauerstoffatoms in 2,5-Dimethylfuran (25DMF) entsteht (Abb. 1). 2,5-Dimethylfuran ist ein potentieller Bio-Brennstoff.

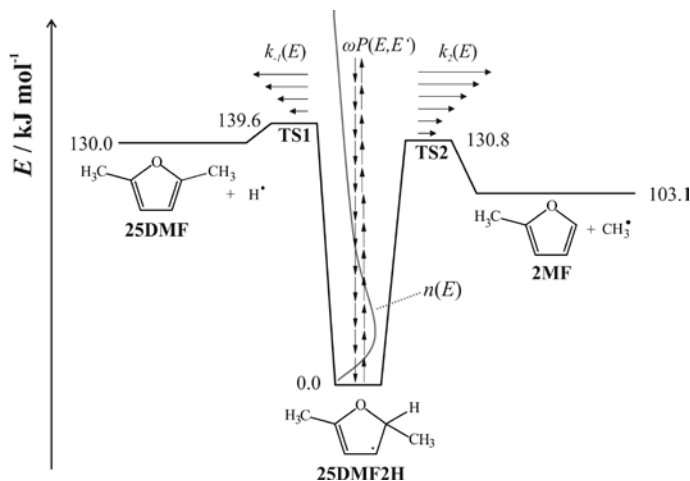


Abb. 1: Schematische Darstellung des unimolekularen Zerfalls von 25DMF2H

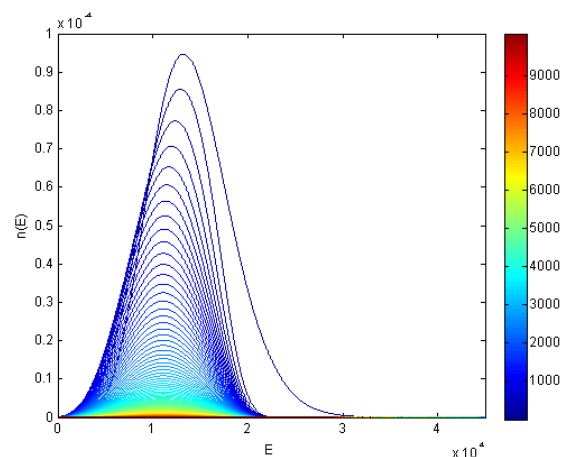


Abb. 2: Typische zeitliche Entwicklung der Besetzung von Energieniveaus eines Reaktants. Das Farbspektrum beschreibt die Zeit: blau $t=0$ und dunkelrot $t \rightarrow \infty$.

Ansprechpartner:

Andrey Koksharov, koksharov@kit.edu
KIT Campus Süd, Geb. 10.91, Raum 323