

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen und Entwicklung der NDIR-Spektroskopie	4
3	Grundlagen	11
3.1	Rotationsschwingungsspektren	12
3.1.1	Rotationsübergänge	12
3.1.2	Schwingungsübergänge	13
3.2	Funktionsweise und Signalverarbeitung beim opto-akustischen Empfänger	17
3.2.1	Signalverarbeitung mit Lock-in Verstärkern	27
3.2.2	Konzept der Zweikomponentenmessung mit Lock-in Verstärkern	28
4	Chemometrie	32
4.1	Regressionsmodelle	33
4.2	Bewertungs- und Auswerteverfahren für Datenanalysen	34
4.2.1	Validation von Regressionsfunktionen	34
4.2.2	Varianz	36
5	Mehrkomponentenanalyse in der NDIR-Spektroskopie: Ergebnisse und Diskussion	38
5.1	Verwendete Datensätze und Software	38
5.1.1	Datensätze für die Reingasuntersuchungen	39
5.1.2	Datensätze für die Untersuchungen der Mischungen	39
5.1.3	Software	41
5.2	Das System Kohlenmonoxid / Kohlendioxid	44
5.2.1	CO-Einkomponentensystem	44
5.2.2	CO ₂ -Einkomponentensystem	45
5.2.3	Das CO/CO ₂ -Zweikomponentensystem	47
5.3	Das System SO ₂ / H ₂ O ohne Berücksichtigung der Detektoralterung	58
5.3.1	SO ₂ -Einkomponentensystem	59
5.3.2	H ₂ O-Einkomponentensystem	60
5.3.3	SO ₂ /H ₂ O-Zweikomponentenanalyse	61

5.4	Das System SO ₂ / H ₂ O unter Berücksichtigung der Detektoralterung	64
5.4.1	SO ₂ -Einkomponentensystem beim ersten angenommenen Alterungsprozeß	65
5.4.2	H ₂ O-Einkomponentensystem beim ersten angenommenen Alterungsprozeß	68
5.4.3	SO ₂ -Einkomponentensystem beim zweiten angenommenen Alterungsprozeß	72
5.4.4	H ₂ O-Einkomponentensystem beim zweiten angenommenen Alterungsprozeß	73
5.4.5	Bestimmung des Detektorzustands über Ersatzgasmessungen	74
5.4.6	Das Zweikomponentensystem	89
5.4.7	Der Einfluß der Frequenz	95
6	Zusammenfassung	98
	Literaturverzeichnis	104
	Tabellenverzeichnis	113
	Abbildungsverzeichnis	121
	Abkürzungen	125
	Anhang	127
A	Simulationsparameter	127
B	Mathematische Verfahren	148
C	Makros	158
D	Tabellen	175
E	Abbildungen	287