

Inhalt

1	Einleitung — 1
1.1	Zur Definition — 1
1.1.1	Die Spektrometrie zur Werkstoffanalytik für Forschung und Produktion — 2
1.2	Zur Geschichte der Atom-Emissions-Spektrometrie — 3
1.2.1	Erste Beobachtungen von Atom-Emissions-Spektren — 3
1.2.2	Grundlegende Arbeiten zur Atom-Emissions-Spektrometrie durch Bunsen und Kirchhoff — 4
1.2.3	Entwicklung der Atom-Emissions-Spektrometrie zur quantitativen Analytik — 4
1.2.4	Entwicklung der Atom-Emissions-Spektrometrie mit Anregung durch elektrische Bögen — 7
1.2.5	Atom-Emissions-Spektrometrie mit Funkenanregung — 8
	Literatur — 9
2	Grundlagen der Atom-Emissions-Spektrometrie — 11
2.1	Erforschung des Wasserstoffspektrums im neunzehnten Jahrhundert — 11
2.2	Wasserstoffspektrum und Bohrsches Atommodell — 12
2.3	Schrödingergleichung und Quantenzahlen — 13
2.4	Quantenmechanisch begründetes Wasserstoff-Grobspektrum — 15
2.5	Die Feinstruktur des Wasserstoffatomspektrums — 20
2.5.1	Aufspaltung der Energieniveaus — 20
2.5.2	Entstehung des spektralen Untergrundes — 22
2.6	Das Spektrum von Mehrelektronen-Atomen — 22
2.6.1	Wasserstoffähnliche Atome und Ionen — 24
2.6.2	Atome mit mehreren Außenelektronen — 25
2.6.3	Auswahlregeln und metastabile Zustände — 28
2.7	Russell-Saunders Termsymbole — 29
2.8	Charakteristik emittierter spektraler Signale — 30
	Literatur — 33
3	Hardware von Funken- und Bogenspektrometern — 34
3.1	Aufbau von Emissions-Spektrometern zur Analyse fester Stoffe — 36
3.2	Anregungsgeneratoren — 43
3.2.1	Bogenanregung und Bogengeneratoren — 43
3.2.2	Funkenanregung und Funkenerzeuger — 61
3.2.3	Der Laser als Anregungsquelle — 79

3.3	Stative für Bogen- und Funkenspektrometer — 86
3.3.1	Funkenstände — 87
3.3.2	Stative für Bogengeräte — 91
3.3.3	Rotroden-Stative — 92
3.4	Betriebsgas-Systeme — 94
3.4.1	Handelsübliche Betriebsgase — 94
3.4.2	Argon-Lieferformen und Transport des Gases zum Spektrometer — 95
3.4.3	Systeme zur Argon-Reinigung — 97
3.4.4	Das interne Argonsystem des Spektrometers — 98
3.4.5	Abgas-System — 100
3.5	Spektrometer-Optiken — 101
3.5.1	Rowlandkreis-Konkavgitteroptiken mit Photomultipliern (PMT) als Strahlungsempfänger — 104
3.5.2	Optiken mit Rowlandkreis-Gittern und Registrierung über Sensorarrays — 111
3.5.3	Optiken mit korrigierten Konkavgittern — 114
3.5.4	Echelle-Optiken mit zweidimensionalen Sensor-Arrays — 116
3.5.5	Optische Komponenten — 118
3.5.6	Die Bedeutungen absoluter Intensitäts-Niveaus — 130
3.6	Optoelektronische Detektoren für Atom-Emissions-Spektrometer — 131
3.6.1	Photomultiplier-Röhren — 131
3.6.2	Sensorarrays auf Halbleiterbasis — 137
3.7	Messelektronik — 151
3.7.1	Messelektronik für Photomultiplier-Röhren — 152
3.7.2	Messelektronik für Multikanal-Halbleitersensoren — 157
3.8	Übergeordneter Rechner — 159
3.9	Spektrometer-Software — 159
3.9.1	Berechnung der Linienintensitäten aus den Spektren — 160
3.9.2	Wellenlängenkalibration und Profilierung — 162
3.9.3	Untergrundkorrektur — 163
3.9.4	Bildung von Intensitätsverhältnissen — 164
3.9.5	Berechnung der Kalibrierfunktionen — 164
3.9.6	Rekalibration — 170
3.9.7	Linienumschaltung — 182
3.9.8	100 %-Rechnung — 183
3.9.9	Errechnung der Konzentrationen aus Spektren bzw. PMT-Rohintensitäten — 183
	Literatur — 184
4	Probenahme und Probenvorbereitung — 188
4.1	Grundsätzliche Anforderungen an Spektrometer-Proben — 188
4.2	Probenahme aus flüssigen Schmelzen — 189

4.2.1	Probenahme aus Roheisen — 190
4.2.2	Probenahme aus flüssigem Stahl — 191
4.2.3	Probenahme aus flüssigem Gusseisen — 192
4.2.4	Probenahme aus Aluminiumschmelzen und anderen Metallbasen — 195
4.3	Probenvorbereitung — 196
	Literatur — 198
5	Analytische Leistungsfähigkeit für die wichtigsten Metalle — 199
	Bemerkungen zu den Messbereichs-Obergrenzen — 199
	Bemerkungen zu den Messbereichs-Untergrenzen — 200
5.1	Analyse von Eisenbasis-Materialien — 202
5.1.1	Besonderheiten bei der Analyse von Stählen — 204
5.1.2	Besonderheiten bei der Analyse von Gusseisen — 205
5.2	Analyse von Aluminiumbasis-Materialien — 207
5.3	Analyse von Kupferbasis-Metallen — 209
5.4	Analyse von Nickel und Nickellegierungen — 211
5.5	Analyse von Zink und Zinklegierungen — 212
5.6	Analyse von Blei und Bleibasis-Legierungen — 214
5.7	Analyse von Zinn und Zinnbasis-Legierungen — 215
5.8	Analyse von Titanbasis-Legierungen — 216
5.9	Analyse von Magnesiumbasis-Legierungen — 217
5.10	Analyse von Kobaltbasis-Legierungen — 219
5.11	Analyse von Edelmetallen — 219
5.12	Sonstige Metalle — 220
	Refraktärmetalle — 220
	Niedrigschmelzende Schwermetalle — 221
	Literatur — 221
6	Mobile Spektrometer — 224
6.1	Anregungsgeneratoren in Mobilspektrometern — 227
6.1.1	Besonderheiten der Zündung — 228
6.1.2	Bogengeneratoren für Mobilspektrometer — 229
6.1.3	Funkengeneratoren für Mobilspektrometer — 230
6.1.4	Laserquellen für Handgeräte — 232
6.2	Abfunksonden — 235
6.3	Sondenschlauch — 239
6.4	Optiksysteme für Mobilspektrometer — 242
6.4.1	Über Lichtleiter angekoppelte Optiken — 243
6.4.2	Optiksysteme für Handgeräte — 244
6.4.3	Sondenoptiken für den VUV-Spektralbereich — 248
6.5	Gehäuse, Transportwagen und Akkumulatoren — 249

6.6	Schutzgas-Systeme in Mobilspektrometern — 252
6.7	Software für Mobilspektrometer — 254
6.7.1	Der Analysenmodus — 254
6.7.2	Gehaltsberechnung mit Hilfe von Fingerprint-Algorithmen — 256
6.7.3	Kontrolle der Analyse auf Übereinstimmung mit Soll-Werkstoff — 258
6.7.4	Werkstoff-Identifikation — 259
6.7.5	Verwechslungsprüfung — 264
6.8	Kalibration, Probenvorbereitung und Beprobung — 268
6.8.1	Probenvorbereitung und Auswahl der Messposition — 268
6.8.2	Messungen im Funkenmodus — 272
6.8.3	Messungen im Bogenmodus — 274
	Literatur — 281
7	Statistik und Qualitätssicherung — 283
7.1	Statistische Kenngrößen und deren Ermittlung — 284
7.1.1	Arbeitsbereich — 284
7.1.2	Nachweisgrenze eines Verfahrens — 284
7.1.3	Bestimmungsgrenze — 286
7.1.4	Genauigkeit — 286
7.1.5	Präzision — 287
7.1.6	Richtigkeit — 291
7.1.7	Wiederfindungsrate — 292
7.1.8	Selektivität / Spezifität — 292
7.1.9	Robustheit — 293
7.1.10	Linearität — 293
7.1.11	Messunsicherheit — 294
7.2	Referenzmaterialien — 296
7.3	Qualitätsregelkarten — 298
7.4	Validierung — 300
7.5	Qualitätsmanagementsysteme — 303
7.6	Akkreditierung — 306
	Literatur — 308
	Index — 311