

# Inhalt

<b>1</b>	<b>Einleitung — 1</b>
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
<b>2</b>	<b>Grundlagen der Atom-Emissions-Spektrometrie — 11</b>
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-Großspektrum — 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
<b>3</b>	<b>Hardware von Funken- und Bogenspektrometern — 34</b>
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

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

- 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 Optiksysteeme für Mobilspektrometer — 242
    - 6.4.1 Über Lichtleiter angekoppelte Optiken — 243
    - 6.4.2 Optiksysteeme 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