

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	
Kurzfassung	i
Abstract	ii
Inhaltsverzeichnis	iii
Abkürzungsverzeichnis	vii
1 Einführung und Motivation	1
2 Grundlagen und Stand der Technik	5
2.1 Physikalische Chemie	5
2.1.1 Reaktionskinetik und -mechanismen	5
2.1.2 Oberflächen	7
2.1.3 Heterogene Katalyse und Vergiftung	10
2.1.4 Besonderheiten von Halbleiteroberflächen	13
2.2 Halbleitergassensoren	14
2.2.1 Funktionsweise	15
2.2.2 Einsatz von Katalysatoren	16
2.2.3 Modellbasierter temperaturzyklischer Betrieb	17
2.2.4 Vergiftung	20
2.3 Siloxane	21
2.3.1 Chemische und physikalische Eigenschaften	21
2.3.2 Analytik	22
2.3.3 Gefahr für Mensch und Umwelt und Richtwerte	23
2.4 Anwendungsfelder	24
2.4.1 Luftqualität	24
2.4.2 Grenzwertüberwachung einzelner Schadstoffe	28
2.4.3 Lebensmittel	30
2.4.4 Medizinische Diagnostik	30
2.4.5 Industrielle Anwendungsbeispiele	30
3 Experimenteller Aufbau und Methoden	33
3.1 Prüfgasbereitstellung	33
3.1.1 Gasmischlanlagen	33
3.1.2 Automatische Ablaufsteuerung	34
3.1.3 Randomisierte Gasgemische	35
3.2 Sensoren und Messaufbau	35

3.2.1	Messsysteme – elektrisch	35
3.2.2	Sensoren	35
3.2.3	Messsysteme – fluidisch.....	36
3.3	Datenauswertung	38
3.3.1	Methoden.....	38
3.3.2	Software DAV ³ E	39
3.4	Die Vergiftungsstudie.....	39
3.4.1	Sensoren und Betriebsmodi.....	40
3.4.2	Vergiftung	41
3.4.3	Gasmesstechnische Charakterisierungen	42
4	Optimierung der quantitativen Messung mittels DSR-Methode.....	47
4.1	Adaption der Merkmalsextraktion für hohe und niedrige Konzentrationen.....	47
4.1.1	Experimentelles	47
4.1.2	Zwei Methoden der Merkmalsextraktion	48
4.1.3	Ergebnisse	49
4.2	Adaption des Gas-Sensor-Interface zur Linearisierung des Sensorsignals	53
4.2.1	Experimentelles	53
4.2.2	Ergebnisse	54
4.3	Automatische Auswahl des Zeitfensters zur Merkmalsextraktion	58
4.3.1	Methoden.....	58
4.3.2	Ergebnisse	60
4.4	Quantifizierungseigenschaften unterschiedlicher Sensoren	62
4.4.1	Einzelgase.....	62
4.4.2	Innenraumluftqualität	67
4.4.3	Vergleich mit bei konstanter Temperatur betriebenen Sensoren	69
4.5	Diskussion und Zwischenfazit	72
4.5.1	Eigenschaften der DSR-Methode.....	72
4.5.2	Korrekte Berechnung der Reaktionsrate	74
4.5.3	Vergleich der Ergebnisse mit dem Sauerwald-Baur-Modell	77
4.5.4	Zwischenfazit	79
5	Auswirkungen der Vergiftung auf den TCO und insbesondere die DSR-Methode .	81
5.1	Übersicht.....	81
5.1.1	Basislinie	81

5.1.2	Dynamik der Zyklen.....	82
5.1.3	Sensorantwort auf OMCTS	84
5.2	Beschreibung des Vergiftungszustandes durch die Sensordaten.....	86
5.2.1	Analytische Berechnung von Geschwindigkeitskonstanten	86
5.2.2	Quantifizierung des Vergiftungszustandes durch trainierte Datenauswertung ..	92
5.3	Auswirkungen der Vergiftung auf die Sensitivität der DSR-Methode.....	92
5.3.1	Kennlinien für Einzelgase	93
5.3.2	Quantifizierung von TVOC.....	97
5.4	Auswirkungen der Vergiftung auf die Selektivität im Temperaturzyklus.....	99
5.4.1	Einfluss auf die Signalmuster der DSR-Methode	99
5.4.2	Einfluss auf die trainierte selektive Quantifizierung.....	101
5.4.3	Veränderung der Selektivität.....	105
5.5	Vergleich der Vergiftung bei konstanter und zyklisch varierter Temperatur.....	108
5.5.1	Stärke der Vergiftung quantifiziert mit Hilfe des DSO-Signals	108
5.5.2	Vergleich der Quantifizierungseigenschaften der Betriebsmodi.....	109
5.5.3	Vergleich der Selektivitäten der Betriebsmodi	112
5.6	Diskussion und Zwischenfazit.....	113
5.6.1	Vergleich der Sensoren	113
5.6.2	Vergiftungsmechanismus	118
5.6.3	Vergleich mit der Literatur.....	123
5.6.4	Bedeutung für die Verwendung der Sensoren in der Praxis	124
5.6.5	Zwischenfazit	125
6	Stabilitätsverbesserung gegen Vergiftung	127
6.1	Wahl der Betriebsparameter	127
6.1.1	Verminderung der Vergiftung.....	127
6.1.2	Erhaltung der Sensitivität	127
6.2	Diffusionsbegrenzung durch adaptiertes Gas-Sensor-Interface	128
6.2.1	Vergleich der Vergiftungszustände auf Basis des DSO-Signals.....	128
6.2.2	DSR-Kennlinien und Empfindlichkeiten	129
6.2.3	Quantifizierung von VOCs in Innenräumen	130
6.3	Datenbasierte Kompensation der Vergiftung	131
6.3.1	Korrektur der Einzelgaskennlinien durch Zeitkonstante der Oxidation.....	132
6.3.2	Korrektur der Merkmale für eine trainierte selektive Quantifizierung	135

6.3.3	Variation der Trainingsdaten und Merkmale für ein stabileres Modell	136
6.4	Stabilität in kommerziellen Sensoren mit integrierter Datenauswertung	138
6.4.1	IAQ-Auswertungen der Hersteller	139
6.4.2	Membran	140
6.5	Diskussion und Zwischenfazit	144
6.5.1	Bewertung und Vergleich der vorgestellten Methoden	144
6.5.2	Kombination von Methoden	146
6.5.3	Bedeutung für die Verwendung der Sensoren in der Praxis	148
6.5.4	Zwischenfazit	149
7	Anwendung von Selektivität und Vergiftungserkennung im Feld	151
7.1	Experimenteller Aufbau und Methoden	151
7.2	Wasserstoffselektive Messung mit Halbleitergassensoren	152
7.2.1	Konditionierung mit Siloxan	152
7.2.2	Mustererkennung	153
7.2.3	Vergleich und Kombination der Methoden	154
7.2.4	Kalibrierung der ausgewählten Sensoren für das Feld	156
7.3	Ergebnisse der wasserstoffselektiven Messung im Feld	158
7.4	Detektion der Vergiftung im Feld	163
7.5	Diskussion und Zwischenfazit	165
7.5.1	Okkupationserkennung, Wasserstoffquellen und Tagesverlauf	165
7.5.2	Trainierte und chemische Selektivität	166
7.5.3	Erkennung der Vergiftung	168
7.5.4	Zwischenfazit	168
8	Zusammenfassung und Ausblick	171
Literaturverzeichnis	vii	
Abbildungsverzeichnis	xxii	
Tabellenverzeichnis	xxxi	
Danksagung	xxxiii	
Anhang	xxxv	
A	Liste mit verwendeten Flaschengasen und Unsicherheiten	xxxv
B	Quantifizierung von Einzelgasen mit nur einem Merkmal	xxxvi
C	Logbuch der Feldtests	xxxvii