

Analytische Chemie

Entwicklung eines IR-Kohlenmonoxidsensors

Inaugural-Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades

der Naturwissenschaften im Fachbereich Chemie und Pharmazie

der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

vorgelegt von

Dipl.-Chem. Holger Geuking

aus Coesfeld

-2007-

Dekanin/Dekan:	Prof. Dr. F. E. Hahn
Erster Gutachter:	Prof. Dr. K. Cammann
Zweiter Gutachter:	Prof. Dr. U. Karst
Tag der mündlichen Prüfung:	<u>21.03.2007</u>
Tag der Promotion:	<u>21.03.2007</u>

Ein Mann mit einer Uhr weiß, wie spät es ist.

Ein Mann mit zwei Uhren ist sich nie sicher.

(Segal's Gesetz)

Ingrid und meiner Familie

Kurzzusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein Computerprogramm entwickelt, welches durch Simulationsrechnungen an dreidimensionalen Modellen eine Vorhersage über die Eigenschaften reflektiv arbeitender optischer Systeme treffen kann. Um dieses Programm optimal nutzen zu können und eine schnelle visuelle Verifizierung der Simulationsergebnisse zu ermöglichen, wurde ein zweites Computerprogramm entwickelt, welches sowohl beliebige Modelle von Gasmesszellen, als auch errechnete Strahlengänge in perspektivischer Ansicht grafisch darstellen kann. Beide Programme wurden vom Verfasser dieser Arbeit in der Programmiersprache Delphi erstellt.

Auf der Grundlage eines theoretischen Modells wurde dann unter Zuhilfenahme von Simulationsrechnungen und Vergleichsmessungen an bestehenden optischen Systemen eine neuartige, miniaturisierte Langwegmesszelle entwickelt. Diese zeichnet sich besonders durch ihre einfache Bauweise und eine hohe Strahlenausbeute aus. Die zu 100 Prozent vom Verfasser dieser Arbeit gemachte Erfindung wird vorläufig „spiralförmige Gassensoroptik“ genannt und wurde durch die Westfälische Wilhelms-Universität Münster zum Patent angemeldet.

Einige Prototypen der spiralförmigen Gassensoroptik, deren Konstruktionsparameter auf den Analyten Kohlenmonoxid ausgelegt sind, wurden durch Gasmessungen experimentell charakterisiert. Es zeigte sich, dass unter Verwendung des für diese Arbeit zur Verfügung stehenden einfachen Messsystems bereits gute Ergebnisse bei der Kohlenmonoxidbestimmung auf Basis von IR-Absorption erzielt werden können. Es wird jedoch auch herausgestellt, dass noch ein hohes Verbesserungspotenzial für das entwickelte Sensorsystem besteht.

Wegen der beobachteten Querempfindlichkeit der Sensoren gegenüber Kohlendioxid, welches bei Verbrennungsprozessen organischen Materials quasi immer neben Kohlenmonoxid auftritt, ist in Zukunft eine Ausführung des Systems als Doppelgassensor besonders sinnvoll.

1. Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Ziel der Arbeit	2
2. Der Analyt Kohlenmonoxid	3
3. Theoretischer Teil.....	7
3.1 Grundlagen der IR-Absorptionsspektroskopie.....	7
3.2 Absorptionmessungen zur quantitativen Analyse	18
3.3 Visualisierung dreidimensionaler Modelle	25
3.3.1 Aufbau von Modellen.....	26
3.3.2 Funktionsweise der virtuellen Kamera.....	28
3.4 Das Strahlensimulationsprogramm	33
3.4.1 Grundlagen der Reflexionsberechnung.....	33
3.4.2 Reflexion bei Vorhandensein mehrerer Flächen.....	38
3.4.3 Die Aufgabe des Strahlensimulationsprogramms	39
3.4.4 Benutzung des Strahlensimulationsprogramms	46
3.4.5 Grenzen des Modells.....	48
3.5 Parabolspiegel	50
4. Apparativer und Experimenteller Teil.....	61
4.1 Das Messsystem	61
4.2 Datenauswertung.....	77
4.3 Experimente und Simulationen	89
4.3.1 Abschätzung des Reflexionskoeffizienten metallischer Oberflächen.....	89
4.3.2 Abschätzung der Mindestweglänge	92
4.3.3 Charakterisierung und Miniaturisierung von Sensoroptiken	98
4.3.4 Die Erfindung der spiralförmigen Gassensoroptik	106
4.3.5 Bau der spiralförmigen Gassensoroptik	123
4.3.6 Messungen mit der spiralförmigen Gassensoroptik.....	125
4.4 Qualitätssteigerung durch Verbesserung der Messelektronik.....	137
5. Zusammenfassung.....	141
6. Ausblick.....	143
7. Anhang	145
7.1 Verifizierung von Gleichung 45 aus Kapitel 3.5.....	145
7.2 Graphische Analyse der Zeichnung D aus Abbildung 24.....	151
7.3 Demonstration der FFT-Filterung	152
7.4 Literaturverzeichnis.....	157

1. Einleitung

1.1 Motivation

Die Gasanalyse hat in den vergangenen Jahren, vor allem im Bereich der Emissionsüberwachung, immer mehr an Bedeutung gewonnen. Die zunehmende Sensibilisierung der Bevölkerung gegenüber Belästigung und Gefährdung durch gasförmige Schadstoffe schlägt sich mehr und mehr in der Gesetzgebung nieder. Beispiele hierfür sind die Aktualisierung des Bundes-Immissionsschutzgesetzes [1] bezüglich einiger Grenzwerte zum 1. Januar 2005 oder die Einführung der Abgasuntersuchung für Krafträder [2] zum 1. April 2006. Dementsprechend werden zur Überwachung der gesetzlichen Bestimmungen in vielen Bereichen, wie z. B. der Sicherheitstechnik, der Umweltmesstechnik, der industriellen Prozessführung oder der Branddetektion zuverlässige Sensoren benötigt, die eine quantitative Analyse eines oder mehrerer Gase in einem Gasgemisch ermöglichen. Zu den wichtigsten Analyten gehört hier das Kohlenmonoxid, da es nicht nur bei fast allen Verbrennungsvorgängen (Heizung, KFZ, Industrieanlagen, Tabakgenuss etc.) als Nebenprodukt auftritt, sondern auch ein besonders hohes Gefährdungspotenzial für den Menschen aufweist. Obwohl die Möglichkeit der quantitativen Analyse von Kohlenmonoxid mittels IR-Absorption seit langem bekannt ist, hat sich diese Bestimmungsmethode bisher nur bei großen Standgeräten, z. B. für den Laborbedarf, durchgesetzt [3]. Bei tragbaren Kohlenmonoxidmessgeräten dominieren momentan elektrochemische Sensoren und Halbleitersensoren [4] den Markt, da eine einfache und kostengünstige Miniaturisierung von IR-Langwegmesszellen bisher nicht realisiert werden konnte. Genau dieses ist jedoch der Schlüssel zu einem miniaturisierten IR-Kohlenmonoxidsensor, da dieser Analyt im Vergleich zu anderen Gasen wie Methan oder Kohlendioxid, die klassisch nach dem IR-Absorptionsverfahren bestimmt werden, eine deutlich erhöhte Anforderung an die optische Weglänge in einem Sensor stellt. Für Gase mit vergleichsweise hohem Extinktionskoeffizienten existiert bereits eine Vielzahl miniaturisierter Messgeräte, die kostengünstig aus herkömmlichen Elektronikbauteilen hergestellt werden können und gute Eigenschaften in Bezug auf das Auflösungsvermögen, die Langzeitstabilität, die Querempfindlichkeit und den Energiebedarf aufweisen. Obwohl die meisten dieser Geräte prinzipiell zur Messung aller IR-aktiven Gase geeignet sind, wird jedoch aufgrund der Konstruktion der Gasmesszellen bei Gasen mit relativ geringem Extinktionskoeffizienten, wie Kohlenmonoxid, häufig nur eine unbefriedigende Auflösung erzielt.

Unter weitgehender Beibehaltung der Geräteaufbauten sollten durch eine Verbesserung des optischen Systems daher auch schwieriger durch IR-Absorption zu bestimmende Gase für die quantitative Analyse zugänglich werden. An dieser Stelle setzt die vorliegende Arbeit an.

1.2 Ziel der Arbeit

Die Konstruktion von Gasmesszellen soll zunächst im dreidimensionalen Computermodell erfolgen. Hierfür soll ein Programm erstellt werden, mit welchem beliebige Anordnungen von Reflexionsflächen im dreidimensionalen Raum modelliert werden können. Zusätzlich soll das Computerprogramm die erstellten Modelle in perspektivischer Ansicht visualisieren können, um die Übereinstimmung des theoretischen Modells mit der geplanten Ausführung schnell verifizieren (oder falsifizieren) zu können. Zur Beurteilung der optischen Eigenschaften der Modelle von Gasmesszellen soll ein weiteres Computerprogramm entwickelt werden, welches den Fluss der Lichtenergie durch das optische System simulieren kann. Die berechneten Strahlengänge sollen ebenfalls visualisiert werden können, um einen Überblick über die Lichtverteilung in einer Gasmesszelle zu ermöglichen. Durch eine Simulation realer Gasmesszellen und Vergleich der Rechenergebnisse mit realen Messungen sollen die Voraussagen des Simulationsprogramms auf deren Plausibilität überprüft werden. Anhand von theoretischen Überlegungen und Vergleichen von Simulationsrechnungen für verschiedene Sensoraufbauten soll letztlich eine Langwegmesszelle [5] entwickelt werden, die einfach zu bauen ist und die Anforderungen für eine befriedigend genaue Kohlenmonoxidmessung erfüllt. Das erfundene Modell der Gasmesszelle soll anschließend baulich realisiert und durch Messungen in Bezug auf seine Eigenschaften charakterisiert werden.

2. Der Analyt Kohlenmonoxid

Kohlenmonoxid, chemische Formel CO, ist ein farb-, geruch- und geschmackloses, brennbares und vor allem giftiges Gas. Gerade die Unfähigkeit des Menschen, es mit seinen eigenen Sinnesorganen wahrzunehmen, macht das Kohlenmonoxid sehr gefährlich. Anders als bei stechend riechenden oder gar farbigen Gasen treten bei einer Exposition keinerlei alarmierende Warnwirkungen auf, so dass eine Vergiftung häufig vom Opfer, und auch Umstehenden, die ebenfalls potenziell gefährdet sind, gar nicht bemerkt wird [6]. Kohlenmonoxid wird daher als „silent killer“ bezeichnet. Dieses ist ein zwingender Grund, in allen Bereichen in Industrie und Privathaushalten, in denen Kohlenmonoxid auftreten kann, technische Sensoren einzusetzen, die vor einer Überdosis an Kohlenmonoxid warnen können. Die Giftwirkung des Kohlenmonoxids beruht auf der reversiblen Blockierung des Hämoglobins für den Sauerstofftransport. Es handelt sich also um ein Blut- bzw. Atemgift. Da die Affinität des Kohlenmonoxids zum roten Blutfarbstoff ca. 200 bis 300 mal größer ist als diejenige des Sauerstoffs, wird der eigentliche Atemvorgang, die Bindung des Sauerstoffs an das Hämoglobin, verhindert. Stattdessen bildet sich das sogenannte CO-Hämoglobin. Eine Kohlenmonoxidvergiftung weist daher ähnliche Symptome wie eine Erstickung auf [7]. Je nach Anteil des blockierten Hämoglobins im Blut treten folgende Wirkungen auf: 2 – 5%: Beeinträchtigung der Sehleistung, psychomotorische Störungen, 10 – 20%: leichter Kopfschmerz, Mattigkeit, Unwohlsein, Kurzatmigkeit, Herzklopfen, 20 – 30%: Schwindel, Bewusstseinsbeschränkung, Gliederschläffheit und -lähmung, 30 – 40%: Bewusstseinschwund, verflachte Atmung, Kreislaufkollaps, > 40%: tiefe Bewusstlosigkeit, unter Umständen mit Todesfolge [8]. Da das Blut im menschlichen Körper durch die Atmung mit der Zeit stets mit der Umgebungsluft equilibriert, steht der CO-Hämoglobingehalt des Blutes über das Henrysche Gesetz im direkten Zusammenhang mit der Kohlenmonoxidkonzentration in der Atemluft [9]. Die folgende Tabelle, welche die Symptome verschieden starker Kohlenmonoxidvergiftungen in Abhängigkeit von dessen Konzentration in der Atemluft beschreibt, wurde u. a. von der Firma Ahlborn Mess- und Regelungstechnik GmbH, Holzkirchen veröffentlicht [10].

CO-Konzentration in der Luft:	Inhalationszeit und toxische Symptomentwicklung:
30 ppm (0,003%)	= MAK-Wert (Maximale Arbeitsplatzkonzentration bei 8-stündiger Arbeitszeit) gültig für die BRD
200 ppm (0,02%)	Leichte Kopfschmerzen innerhalb von 2 - 3 Stunden
400 ppm (0,04%)	Kopfschmerz im Stirnbereich innerhalb von 1 - 2 Stunden, breitet sich innerhalb von 2,5 - 3,5 Stunden im ganzen Kopfbereich aus
800 ppm (0,08%)	Schwindel, Übelkeit und Gliederzucken innerhalb von 45 Minuten. Bewusstlosigkeit innerhalb von 2 Stunden
1600 ppm (0,16%)	Kopfschmerz, Schwindel und Übelkeit innerhalb von 20 Minuten. Tod innerhalb von 2 Stunden
3200 ppm (0,32%)	Kopfschmerz, Übelkeit und Schwindel innerhalb von 5 - 10 Minuten. Tod innerhalb von 30 Minuten
6400 ppm (0,64%)	Kopfschmerz und Schwindel innerhalb von 1 - 2 Minuten. Tod innerhalb von 10 - 15 Minuten
12800 ppm (1,28%)	Tod innerhalb von 1 - 3 Minuten

Tabelle 1: Wirkungen verschiedener Kohlenmonoxidkonzentrationen in der Atemluft auf den menschlichen Körper.

Wie aus Tabelle 1 zu entnehmen ist, reicht bereits ein Kohlenmonoxidgehalt von ca. 1% in der Atemluft aus, um innerhalb weniger Minuten den Tod herbeizuführen. Aus diesem Grunde waren (und sind) Suizidversuche mit Hilfe von Autoabgasen häufig „erfolgreich“, wobei heutzutage durch die Verwendung von Katalysatoren der Kohlenmonoxidgehalt im Autoabgas meistens auf eine nicht letale Dosis reduziert werden kann. Die meisten Krafträder sind heute jedoch noch nicht mit einem Katalysator ausgerüstet [11]. Neben dieser bewussten Exposition treten in der Bundesrepublik Deutschland jährlich durchschnittlich ca. 1500 bis 2000 (hohe Dunkelziffer) Todesfälle durch Kohlenmonoxidvergiftung auf, die auf Unfälle zurückzuführen sind. Kohlenmonoxid ist somit in den Industrieländern die häufigste tödliche Vergiftungsursache [12]. Im Privatbereich sind hierfür vielmals defekte Gasleitungen, schlecht ziehende Öfen oder der unsachgemäße Gebrauch von Gaskochern (Campingausrüstung) verantwortlich [13]. Auch bei Schwel- und Wohnungsbränden wird im allgemeinen eine große Menge Kohlenmonoxid frei gesetzt (Rauchgasvergiftung). Da Kohlenmonoxid etwas leichter als Luft ist, kann ein Kohlenmonoxidsensor auch als sinnvoller Bestandteil von Rauchmeldern, die meistens an der Zimmerdecke angebracht sind, eingesetzt werden, um eine möglichst frühzeitige Branddetektion zu ermöglichen.

In früheren Zeiten waren auch im Bergbau Kohlenmonoxidvergiftungen („böse Wetter“) sehr gefürchtet. Als Sensor, auch für Methan, diente hier schon früh der berühmte Kanarienvogel im Käfig [14], der von den Bergleuten mit in den Schacht genommen wurde und dessen eventuelles plötzliches Verstummen oder gar Ableben den Menschen als Alarmgeber diente.

Neben einigen natürlichen Quellen (Vulkanaktivität, Vegetation und deren Brände, Weltmeere etc.) stammen die Emissionen von Kohlenmonoxid heutzutage hauptsächlich aus anthropogenen Quellen [15] (Verkehr, Haushalte, Kraftwerke usw.). Kohlenmonoxid tritt allgemein überall dort auf, wo organisches Material unvollständig, oder bei hoher Temperatur verbrannt wird, also z. B. auch beim Tabakrauchen [16].

Zur Bestimmung von Kohlenmonoxid eignen sich verschiedene Verfahren, wie z. B. die elektrochemische Bestimmung, die Gaschromatographie oder die IR-Absorptionsspektroskopie. Während sich letztere in großen Labor- und Analysegeräten bereits durchgesetzt hat [17], stehen dieser Methode für den Einsatz in kleinen Sensoren einige Hindernisse im Weg. Im Vergleich zu Kohlendioxid, bei welchem die nichtdispersive IR-Absorptionsspektroskopie bereits erfolgreich in miniaturisierten Sensoren eingesetzt wird [18], besitzt Kohlenmonoxid einen sehr geringen Absorptionskoeffizienten. Ein weiteres Problem besteht darin, dass kleine thermische Quellen für IR-Strahlung (z. B. Glühbirnen) zumeist durch eine Glashülle geschützt werden müssen. Glas hat jedoch die Eigenschaft, IR-Strahlung im Bereich der Absorptionsbande von Kohlenmonoxid teilweise zu absorbieren, so dass in diesem Wellenlängenbereich nur eine geringe Grundintensität an Strahlung emittiert werden kann. Abbildung 1 zeigt einen kleinen Bereich der IR-Spektren von Kohlendioxid, Kohlenmonoxid und einer Glasprobe von einer Glühbirne.

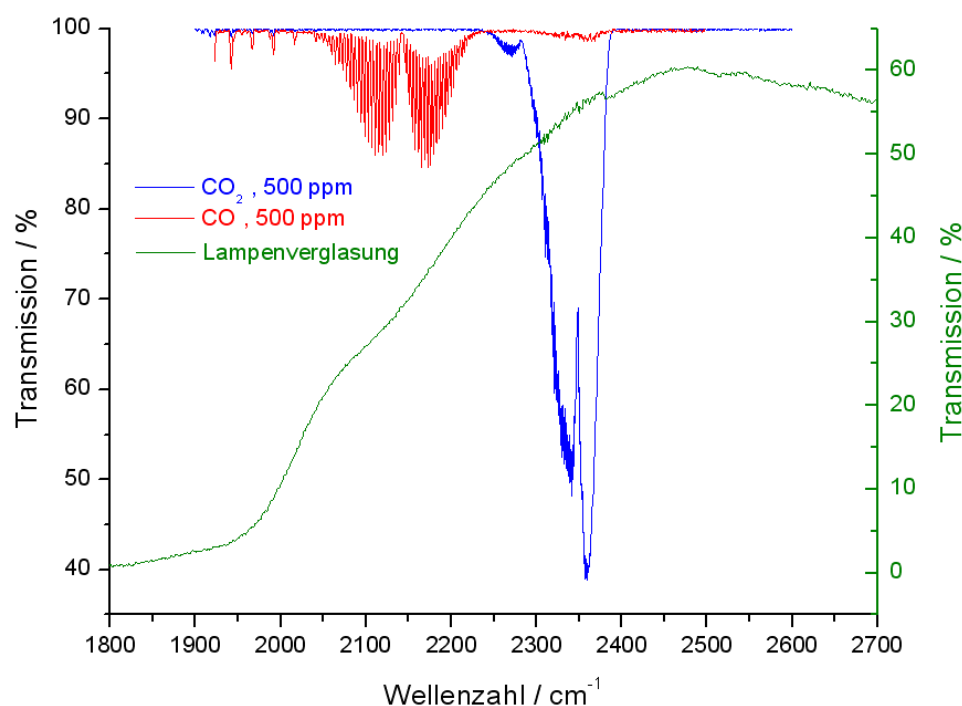


Abb. 1: IR-Spektren von Kohlendioxid, Kohlenmonoxid (jeweils 500 ppm) und einer Probe aus einer Glühlampenverglasung.

Die in Abbildung 1 dargestellten Spektren wurden mit einem FT-IR-Spektrometer vom TYP Nicolait 210 aufgenommen. Das Spektrum für die Lampenverglasung ist für einen größeren Wellenlängenbereich auch beim Lampenhersteller einzusehen [19]. Wie aus Abbildung 1 ersichtlich wird, weist Kohlendioxid bei gleicher Konzentration eine deutlich ausgeprägtere Absorptionsbande auf als Kohlenmonoxid. Eine numerische Auswertung der von den Absorptionsbanden eingeschlossenen Flächen ergibt ein Verhältnis der Extinktionskoeffizienten der beiden Gase von 13,5 : 1. Einer anderen Literaturstelle [20] ist diesbezüglich ein Verhältnis von 13,2 : 1 zu entnehmen. Kohlenmonoxid absorbiert also etwa zehn mal schwächer als das Vergleichsgas Kohlendioxid. Die Transmission von Glas fällt unterhalb einer Wellenzahl von ca. 2300 cm^{-1} stark ab (vgl. Abbildung 1). Im Bereich der Absorptionsbande von Kohlenmonoxid ist daher nur etwa die Hälfte der emittierten Strahlungsenergie einer Miniaturglühlampe nutzbar, als dies für Kohlendioxid der Fall ist. Ein weiteres Hemmnis für die Realisierung von Kohlenmonoxidsensoren auf IR-Basis gegenüber denjenigen für Kohlendioxid besteht darin, dass die real auftretenden Konzentrationen der beiden Gase sich um eine Größenordnung unterscheiden.

Während für Kohlenmonoxid der MAK-Wert bei nur 30 ppm liegt (vgl. Tabelle 1), beträgt der Kohlendioxidgehalt der Atmosphäre zur Zeit bereits schon (Tendenz steigend) über 360 ppm [21, 22]. Bei der Luftüberwachung ist für die Kohlenmonoxidmessung daher eine wesentlich geringere Nachweisgrenze erforderlich als bei der Bestimmung von Kohlendioxid. Insgesamt muss aus den genannten Gründen das Messsystem eines IR-Gassensors für Kohlenmonoxid also eine deutlich (ca. Faktor 200) höhere Sensitivität aufweisen, als dies zur Kohlendioxidbestimmung notwendig ist. In der vorliegenden Arbeit wird deshalb versucht, diesem Ziel näher zu kommen.

3. Theoretischer Teil

3.1 Grundlagen der IR-Absorptionsspektroskopie

Die Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie bildet die Grundlage fast aller qualitativen und quantitativen spektroskopischen Analyseverfahren [23]. Je nach Energie der elektromagnetischen Strahlung können unterschiedlichste physikalische Wechselwirkungen mit einem Analyten auftreten. Das Spektrum der elektromagnetischen Strahlung umfasst dabei einen weiten Energiebereich, der von der extrem kurzwelligen γ -Strahlung bis hin zu sehr langwelligen Radiowellen reicht. Tabelle 2 enthält eine Übersicht über die in verschiedenen Spektralbereichen elektromagnetischer Strahlung stattfindenden Wechselwirkungen mit Materie.

Elektromagnetische Strahlung	Wellenlänge (nm)	Frequenz (Hz)	Wellenzahl (cm^{-1})	Energie (eV)	Wechselwirkungsart
Radiowellen	10^{10}	$3 \cdot 10^7$	10^{-3}	$1,2 \cdot 10^{-7}$	Anregung von magnetischen Übergängen der Atomkerne ($I > 0$)
Kurzwellen	10^8	$3 \cdot 10^9$	10^{-1}	$1,2 \cdot 10^{-5}$	Anregung ungepaarter Elektronen
Mikrowellen 0,1-10cm					Rotationen von Molekülen
IR 0,78- $10^3 \mu\text{m}$ IR C 3000- 10^6 nm	10^6	$3 \cdot 10^{11}$	10	$1,2 \cdot 10^{-3}$	Raman Anregung von Molekülschwingungen
IR B 1400-3000 nm IR A 780-1400 nm	10^4	$3 \cdot 10^{13}$	10^3	$1,2 \cdot 10^{-1}$	
VIS 380-780 nm UV 200-400 nm UV A 315-400 nm UV B 280-315 nm UV C 200-280 nm VUV 100-200 nm	10^2	$3 \cdot 10^{15}$	10^5	12,4	Anregung von Elektronenübergängen
Röntgenstrahlung 0,01-10 nm	1	$3 \cdot 10^{17}$	10^7	$1,2 \cdot 10^3$	Entfernung der Elektronen aus inneren Energieniveaus
γ -Absorption	10^{-2}	$3 \cdot 10^{19}$	10^9	$1,2 \cdot 10^5$	Resonanzabsorption der Kerne
γ -Strahlung	10^{-4}	$3 \cdot 10^{21}$	10^{11}	$1,2 \cdot 10^7$	Kernumwandlungen

VUV : Vakuum UV

Tabelle 2: Energetische Eigenschaften verschiedener Bereiche des elektromagnetischen Spektrums und mögliche Wechselwirkungen mit Materie [24, 25].

Die eindeutige Beschreibung elektromagnetischer Strahlung kann über vier gebräuchliche Kenngrößen erfolgen, nämlich die Wellenlänge λ , die Frequenz ν , die Wellenzahl $\tilde{\nu}$ oder die Energie ΔE (pro Lichtquant) (vgl. Tabelle 2). Die Wellenlänge λ gibt den Abstand zweier benachbarter Elongationsmaxima des oszillierenden elektrischen oder magnetischen Vektors an. Dabei bewegt sich die Lichtwelle mit Lichtgeschwindigkeit durch den Raum. Die elektrische und magnetische Oszillation erfolgen jeweils orthogonal zur Ausbreitungsrichtung des Lichtstrahls und verlaufen senkrecht zueinander.

Wie aus Abbildung 2 zu entnehmen ist, besteht zwischen der elektrischen und der magnetischen Schwingung keine Phasendifferenz.

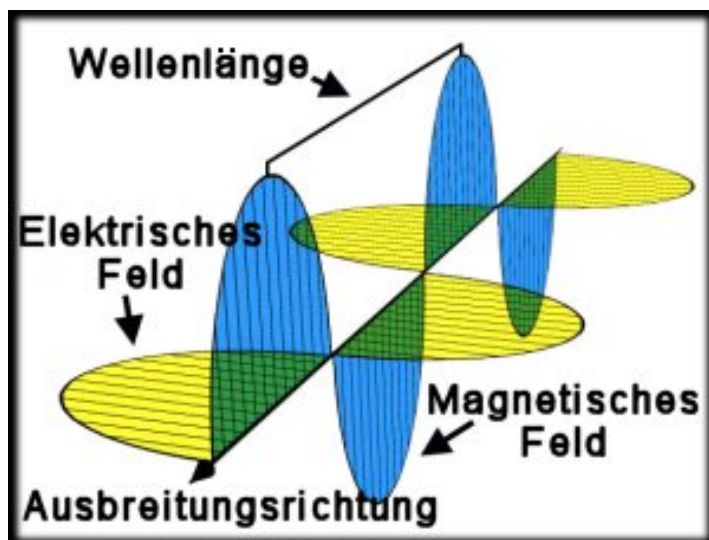


Abb. 2: Modell einer elektromagnetischen Welle [26].

Die Frequenz ν , welche die Anzahl der Schwingungen pro Zeiteinheit angibt, ist nach Gleichung 1 mit der Wellenlänge über die Lichtgeschwindigkeit verknüpft:

$$\nu = \frac{c_n}{\lambda} \quad ; \quad \text{mit } c_n = \frac{c_0}{n} \quad \text{und } c_0 = 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s} \quad [27]$$

(Gleichung 1)

In Gleichung 1 beschreibt c_n die Lichtgeschwindigkeit im durchstrahlten Medium. Bei n handelt es sich um den Brechungsindex des Mediums und bei c_0 um die Vakuum-Lichtgeschwindigkeit. Da für Messungen geringer Gaskonzentrationen in Luft der Brechungsindex $n = 1,00027$ [28] nur minimal vom Wert eins abweicht, wird im folgenden diese Abweichung vernachlässigt und die Lichtgeschwindigkeit einfach mit c bezeichnet.

Speziell in der IR-Spektroskopie hat sich die Charakterisierung von Strahlung mit Hilfe der Wellenzahl $\tilde{\nu}$ durchgesetzt. Diese ist der reziproke Wert der Wellenlänge (vgl. Gleichung 2) und wird üblicherweise in der Einheit cm^{-1} angegeben. Somit bezeichnet sie die Anzahl von Wellenlängen, die auf einer Strecke von 1 cm nebeneinander Platz finden.

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda[\text{cm}]} = \frac{10^4}{\lambda[\mu\text{m}]}$$

(Gleichung 2)

Die Energie der Lichtquanten der elektromagnetischen Strahlung lässt sich mit Hilfe der Naturkonstanten c und h (Plancksches Wirkungsquantum) jeweils direkt aus den Größen λ , ν oder $\tilde{\nu}$ berechnen:

$$\Delta E = h \cdot \nu = \frac{h \cdot c}{\lambda} = h \cdot c \cdot \tilde{\nu}$$

(Gleichung 3)

Um die Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie analytisch nutzen zu können, muss der betrachtete Analyt Strahlung einer bestimmten Energie absorbieren (oder nach eventueller Anregung emittieren). Bei der Absorption von Lichtenergie durch ein Atom oder Molekül des Analyten wird dieses in einen energetisch angeregten Zustand versetzt. Auf der Ebene atomarer bzw. molekularer Größen kann Energie jedoch nicht wie bei makroskopischen Betrachtungen kontinuierlich zugeführt werden, sondern nur in gequantelten Portionen. Die möglichen Energiezustände eines Atoms bzw. Moleküls sind daher diskret, und Übergänge zwischen Energieniveaus müssen quantenmechanisch betrachtet werden [23]. Die Absorptionswellenlängen von Molekülschwingungen von Gasen liegen vorwiegend im infraroten Spektralbereich. Daher kann für die optische Analyse von Gasen besonders gut die IR-Absorptionsspektroskopie verwendet werden, speziell im Bereich des mittleren Infrarot (2,5 – 50 μm).

Im folgenden wird zunächst die Schwingung eines zweiatomigen Moleküls betrachtet. Wird das Molekül in erster Näherung als harmonischer Oszillator aufgefasst, so ist die potenzielle Energie V nach der klassischen Mechanik gegeben durch [29]:

$$V = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (r - r_0)^2$$

(Gleichung 4)

Hierbei ist k die Kraftkonstante der Bindung, r_0 der Gleichgewichtsabstand der beiden Atome, und r der bei der Schwingung variierende Atomabstand.

Die Schrödingergleichung [30] für die Bewegung zweier Atome mit den Massen m_1 und m_2 bei dem gegebenen parabolischen Potenzial lautet:

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot \mu} \cdot \frac{d^2 \Psi}{dr^2} + V \cdot \Psi = E \cdot \Psi \quad ; \quad \text{mit} \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

(Gleichung 5)

In Gleichung 5 beschreibt \hbar den Wert $\hbar/2\pi$, μ die reduzierte Masse der beiden Atome, E die Gesamtenergie des Schwingungssystems, und Ψ die Wellenfunktion eines beide Atome repräsentierenden Teilchens der Masse μ in harmonischer Oszillation.

Die Lösung der Schrödingergleichung liefert die diskreten Energielevel, die das Molekül bei Vibrationen annehmen kann:

$$E_\nu = \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar \cdot \omega \quad ; \quad \text{mit } \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \text{und } \nu = 0, 1, 2, \dots$$

(Gleichung 6)

Die energetisch möglichen Schwingungszustände des Moleküls werden durch die Schwingungsquantenzahl ν beschrieben und eingeschränkt, da diese nur die Werte natürlicher Zahlen und null annehmen kann. Die Formel für die Grundfrequenz ω der Vibration ergibt sich dagegen analog zur klassischen Mechanik des harmonischen Oszillators (vgl. Gleichung 6).

Da speziell in der IR-Spektroskopie (gequantelte) Energiegrößen vorzugsweise in Form der Wellenzahl dargestellt werden, wird Gleichung 6 durch den Term $h \cdot c$ dividiert (vgl. Gleichung 3). Daraus ergeben sich die Vibrationsterme der Molekülschwingung, die mit dem Buchstaben G bezeichnet werden:

$$G(\nu) = \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \cdot \tilde{\nu} \quad ; \quad \text{mit } \tilde{\nu} = \frac{\omega}{2 \cdot \pi \cdot c}$$

(Gleichung 7)

Nicht alle zweiatomigen Moleküle sind zur Bestimmung mittels IR-Absorptionsspektroskopie geeignet. Die Hauptauswahlregel für die Wechselwirkungsmöglichkeit mit IR-Strahlung zur Anregung von Molekülschwingungen ist, dass sich das Dipolmoment des Moleküls während der Schwingung ändert [31]. Nur in diesem Fall kann das bei der Schwingung oszillierende elektromagnetische Feld, das durch die beiden Atome aufgebaut wird, mit dem elektromagnetischen Feld der Strahlung in Wechselwirkung treten.

Es ist allerdings nicht prinzipiell notwendig, dass ein Molekül ein permanentes Dipolmoment aufweist, um durch Strahlungsabsorption zur Oszillation angeregt werden zu können. Die Auswahlregel verlangt lediglich eine Änderung des Dipolmoments bei der Schwingung, welches im Grundzustand auch null sein darf. Vibrationen, die keine zeitliche Variation des Dipolmoments eines Moleküls hervorrufen, sind IR-inaktiv. Aus diesem Grunde lassen sich homonukleare zweiatomige Moleküle nicht durch IR-Strahlung in Schwingung versetzen, weil hier das Dipolmoment unabhängig von der Elongation der Schwingung ist. Gase wie z. B. N_2 sind daher für die IR-Absorptionsspektroskopie unzugänglich.

Die spezifische quantenmechanische Auswahlregel für Vibrationsübergänge ist $\Delta\nu = \pm 1$. Der Übergang eines Moleküls von einem Vibrationsterm in den nächst höheren durch Absorption eines Lichtquants wird durch $\Delta\nu = 1$ gekennzeichnet.

Die Emission eines Lichtquants wird dementsprechend durch einen Übergang mit $\Delta v = -1$ beschrieben. Nach dem Modell des harmonischen Oszillators beträgt der Energie- bzw. Wellenzahlunterschied zwischen zwei benachbarten Vibrationstermen stets genau den Wert der stoff- bzw. schwingungsspezifischen Wellenzahl $\tilde{\nu}$. Ein IR-aktives, zweiatomiges Molekül sollte also eine einzige, scharfe Absorptionslinie bei dieser Wellenzahl aufweisen (bei Außerachtlassung eventuell auftretender Absorptionen durch Rotationsanregung). In der Realität wird dies jedoch nicht bestätigt, es treten für höher angeregte Zustände weitere Linien auf, die gegenüber der Grundschiwingung verschoben sind [30]. Diese sind jedoch aufgrund ihrer hohen Energie oft nur durch Emissionsmessungen zugänglich. Weitere Schwächen des Modells des harmonischen Oszillators für ein zweiatomiges Molekül sind die Tatsachen, dass das Molekül nicht dissoziieren kann, und dass sich die Atome durcheinander hindurch bewegen können.

Aus diesen Gründen muss die Oszillation entlang einer Molekülbindung anharmonisch verlaufen. Im Jahr 1929 schlug der amerikanische Physiker P. McCord Morse eine empirische Formel vor, durch welche der reale Potenzialverlauf in einem zweiatomigen Molekül besser angenähert wird [32]:

$$V = h \cdot c \cdot D_e \cdot \left[1 - e^{-a(R-R_0)} \right]^2 ; \text{ mit } a = \sqrt{\frac{\mu}{2 \cdot h \cdot c \cdot D_e}} \cdot \omega$$

(Gleichung 8)

Hierbei beschreibt die Größe D_e die Tiefe des Potentialminimums. Die Lösung der Schrödingergleichung für das Morsepotenzial liefert die diskreten Vibrationsterme des Oszillators:

$$G(v) = \left(v + \frac{1}{2} \right) \cdot \tilde{\nu} - \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \cdot x_e \cdot \tilde{\nu} ; \text{ mit } x_e = \frac{a^2 \cdot \hbar}{2 \cdot \mu \cdot \omega} = \frac{\tilde{\nu}}{4 \cdot D_e}$$

(Gleichung 9)

Der Parameter x_e wird als Anharmonizitätskonstante bezeichnet. Mit steigender Vibrationsquantenzahl v gewinnt der anharmonische Term in Gleichung 9 immer mehr an Gewicht gegenüber dem harmonischen Term, so dass die Energiedifferenz zwischen zwei benachbarten Schwingungszuständen immer geringer wird. Die Vibrationsterme konvergieren daher, und ihre mögliche Anzahl ist endlich. Die begrenzte Anzahl der Vibrationsterme ergibt sich aus der Tatsache, dass ein höher angeregter Zustand stets energiereicher sein muss, als der darunter liegende. Gleichung 9 lässt aber auch Fälle zu, wo dieses Prinzip verletzt wird. Demnach ergibt sich die maximal zulässige Schwingungsquantenzahl aus folgender Ungleichung:

$$G(\nu+1) \leq G(\nu)$$

$$\Rightarrow \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \cdot \tilde{\nu} - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 \cdot x_e \cdot \tilde{\nu} \leq \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \cdot \tilde{\nu} - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 \cdot x_e \cdot \tilde{\nu}$$

$$\Rightarrow \nu \geq \frac{1}{2 \cdot x_e} - 1$$

$$\nu_{\max} = \text{int}\left(\frac{1}{2 \cdot x_e} - 1\right)$$

(Gleichung 10)

Da die Vibrationsquantenzahl ν nur ganzzahlige Werte annehmen kann, muss das Ergebnis der Ungleichung abgerundet werden. Abbildung 3 zeigt das Termschema des HCl-Moleküls nach dem Modell des Morsepotenzials unter Verwendung thermodynamischer Daten [30].

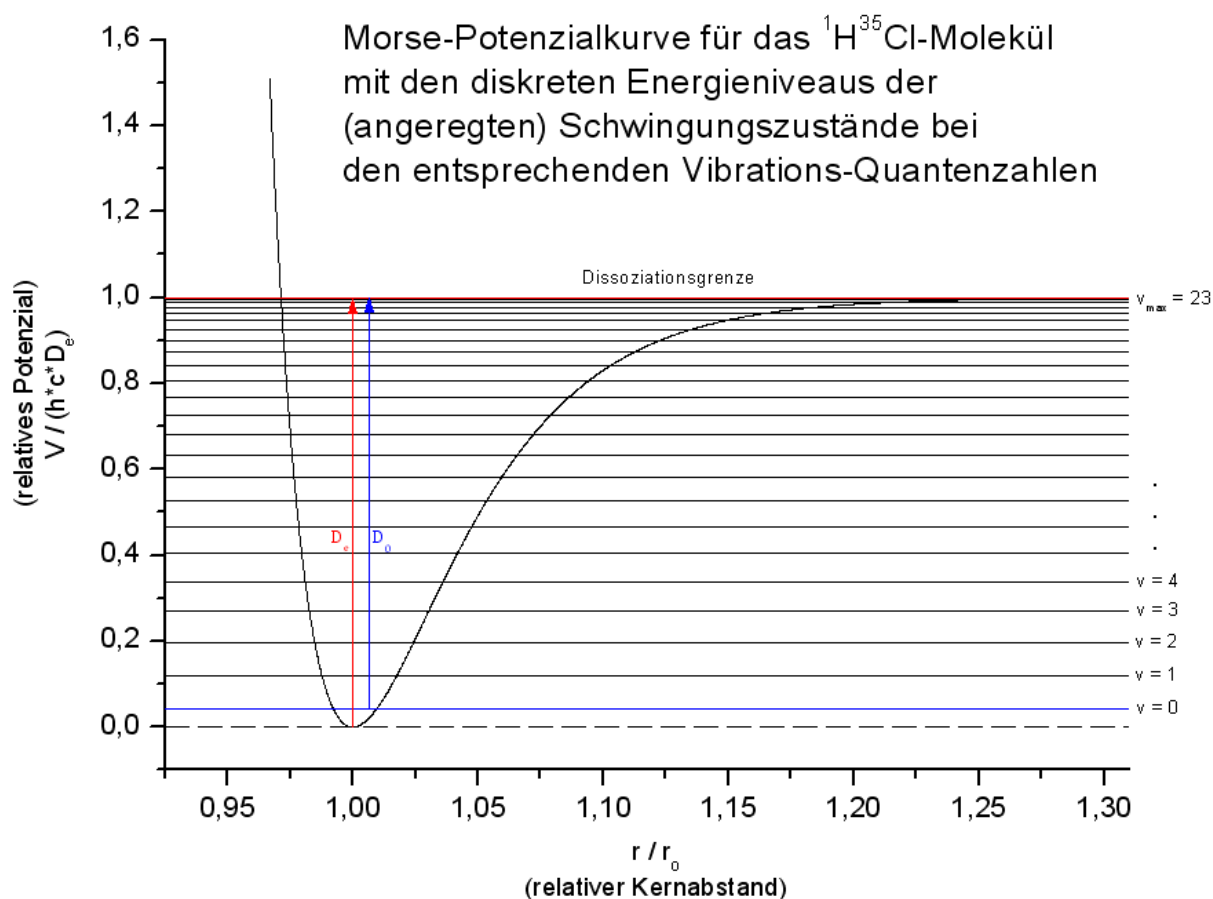


Abb. 3: Morse-Potenzialkurve und Vibrationsterme am Beispiel des HCl-Moleküls

Wie aus Abbildung 3 und Gleichung 9 zu entnehmen ist, weist der Schwingungsgrundzustand ($\nu = 0$) eines zweiatomigen Moleküls eine von null verschiedene Energie auf, die auch Nullpunktenergie E_0 genannt wird. Ihr Betrag ist gleich dem Ergebnis aus Gleichung 9 für $\nu = 0$, welches $E_0 \approx 0,5 \cdot \tilde{\nu}$ liefert. Die Größe D_0 gibt die Dissoziationsenergie des Moleküls an.

So wie sich die Höhe einer Leiter durch die Summation der Höhenunterschiede zwischen den einzelnen Sprossen berechnen lässt, kann D_0 als Summe der Energieunterschiede zwischen jeweils zwei benachbarten Vibrationstermen aufgefasst werden:

$$D_0 = \sum_v \Delta G_{v+\frac{1}{2}}$$

(Gleichung 11)

Diese Gleichung ist die Grundlage der Birge-Sponer-Extrapolation [30], mit deren Hilfe sowohl die Dissoziationsenergie eines Moleküls, als auch die maximal mögliche Schwingungsquantenzahl abgeschätzt werden können. Hierbei werden die Energiedifferenzen jeweils zweier benachbarter Schwingungsterme (Messwerte) gegen die Quantenzahl aufgetragen, und die Auftragung für hohe Quantenzahlen linear extrapoliert. Wohingegen nach Gleichung 9 ein linearer Verlauf dieser Auftragung zu erwarten wäre, liegen die Werte in der Realität jedoch für höhere Quantenzahlen (ab ca. $v \geq 15$) nicht mehr auf einer Geraden, sondern fallen stärker mit der Quantenzahl ab. Der durch die Extrapolation abgeschätzte Wert für die Dissoziationsenergie (Dieser entspricht der Fläche unter der extrapolierten Kurve.) liegt somit immer etwas höher als der reale Wert von D_0 . Zudem ist die Absorption aufgrund von Vibrationsübergängen für hohe Quantenzahlen experimentell schwierig zu bestimmen, da hoch angeregte Vibrationszustände eine extrem geringe Besetzungswahrscheinlichkeit aufweisen (Boltzmann-Verteilung, vgl. Gleichung 13). Die Intensität der Absorptionslinien ist dementsprechend niedrig. Durch die Birge-Sponer-Extrapolation können jedoch auch die experimentell unzugänglichen Bereiche des Spektrums abgeschätzt werden.

Die Tatsache, dass experimentell bestimmte Spektren von denjenigen, die nach dem Modell des Morsepotentials vorhergesagt werden, abweichen, führt zu dem Schluss, dass das Morsepotential nur eine relativ grobe Annäherung an die Realität darstellt.

Um die Vibrationsterme genauer berechnen zu können, wird heute eine empirische Formel verwendet, die Gleichung 9 um beliebig viele Parameter erweitert:

$$G(v) = \left(v + \frac{1}{2}\right) \cdot \tilde{\nu} - \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \cdot x_e \cdot \tilde{\nu} + \left(v + \frac{1}{2}\right)^3 \cdot y_e \cdot \tilde{\nu} - \dots$$

(Gleichung 12)

Die Parameter x_e, y_e, \dots stellen hierbei empirische Konstanten dar. Die spezifische quantenmechanische Auswahlregel für Vibrationsübergänge $\Delta v = \pm 1$ ist sogar von einem noch einfacheren Modell für ein oszillierendes Molekül abgeleitet, nämlich dem harmonischen Oszillator. Da dieser nur eine Näherung an die Realität ist, ist dementsprechend auch die daraus abgeleitete quantenmechanische Auswahlregel nur eine Näherung. In der Realität treten in Spektren so genannte Obertöne auf.

Diese entsprechen Übergängen von z. B. $\Delta v = 2$ oder $\Delta v = 3$. Finden diese Übergänge aus dem Grundzustand heraus statt, spricht man vom ersten bzw. zweiten Oberton. Die Intensität der Obertöne nimmt allerdings mit steigender Quantenzahldifferenz schnell ab [33].

Generell hängt die Intensität einer Absorptionslinie von den Besetzungswahrscheinlichkeiten der beiden Vibrationszustände ab, zwischen denen der Übergang stattfindet. Diese sind gegeben durch die Boltzmann-Verteilung [34]:

$$\frac{n_i}{N} = \frac{e^{-\frac{E_i}{k \cdot T}}}{\sum_j e^{-\frac{E_j}{k \cdot T}}}$$

(Gleichung 13)

Für die Vibrationsenergien E_i bzw. E_j sind hier die nach Gleichung 12 bzw. Gleichung 9 berechneten Werte, jeweils multipliziert mit $h \cdot c$, einzusetzen.

Ein Vibrationsübergang ist nur dann als Absorptionslinie messbar, wenn die Besetzungswahrscheinlichkeit des energetisch höherliegenden Schwingungszustandes wesentlich geringer ist als die Besetzungswahrscheinlichkeit des Vibrationszustandes, aus welchem die Anregung erfolgt. Andernfalls läge keine Nettoabsorption, sondern eine Nettoemission vor. Da diese Bedingung im allgemeinen für Vibrationsübergänge im IR-Bereich erfüllt ist, hängt die Intensität einer Absorptionslinie hauptsächlich von der Besetzungswahrscheinlichkeit des Ausgangszustandes ab. Löst man Gleichung 13 für die nach Gleichung 9 erhaltenen Werte des HCl-Moleküls, ergibt sich, dass annähernd 100% der Moleküle bei 25 °C im Vibrationsgrundzustand ($v = 0$) vorliegen. Die bei Raumtemperatur vorhandene thermische Energie ($k \cdot T / h \cdot c \approx 200 \text{ cm}^{-1}$) ist viel geringer, als die Energie der Grundschiwingung ($\tilde{\nu} \approx 2990 \text{ cm}^{-1}$) des Moleküls, und reicht daher nicht aus, um die Moleküle in größerem Ausmaß in Oszillation zu versetzen. Die bei weitem höchste Intensität ist also für die Grundschiwingung zu erwarten, die dem Übergang von $v = 0$ nach $v = 1$ entspricht. Die entsprechende Absorptionslinie ist daher für quantitativ analytische Zwecke am interessantesten.

Da die zur Anregung von Molekülrotationen benötigte Energie wesentlich geringer ist, als die Vibrationsenergie (vgl. Tabelle 2), treten bei Anregung von Molekülschwingungen stets auch Molekülrotationen auf. So entsteht bei zweiatomigen Molekülen mit permanentem Dipolmoment eine Absorptionsbande, die aus einer Vielzahl von Absorptionslinien besteht, und deren Zentrum die Absorptionslinie des Oszillationsüberganges bildet. Linien, die zu höheren Wellenzahlen hin verschoben sind, entsprechen hierbei Übergängen des Moleküls in energetisch höher gelegene Rotationszustände und bilden den so genannten R-Zweig der Absorptionsbande. Analog bildet sich auch der P-Zweig der Absorptionsbande, der durch Rotationsübergänge von höheren zu niedrigeren Energieniveaus entsteht. In seltenen Fällen, wie z. B. bei NO, bildet sich im Zentrum der Bande noch der so genannte Q-Zweig, der Vibrationsübergängen ohne Änderung des Rotationszustandes entspricht.

Im allgemeinen besitzen zweiatomige Moleküle jedoch kein Trägheitsmoment entlang der Molekülachse, so dass die Absorptionsbande der Grundschiwingung nur aus R- und P-Zweig besteht.

Abbildung 4 zeigt die Absorptionsbande der Grundschiwingung des Kohlenmonoxidmoleküls im Bereich von 2030 cm^{-1} bis 2260 cm^{-1} , die mit einem Nicolait 210 FT-IR Spektrometer mit spezieller Gasmesszelle bei einem Kohlenmonoxidgehalt des Messgases von 500 ppm aufgenommen wurde.

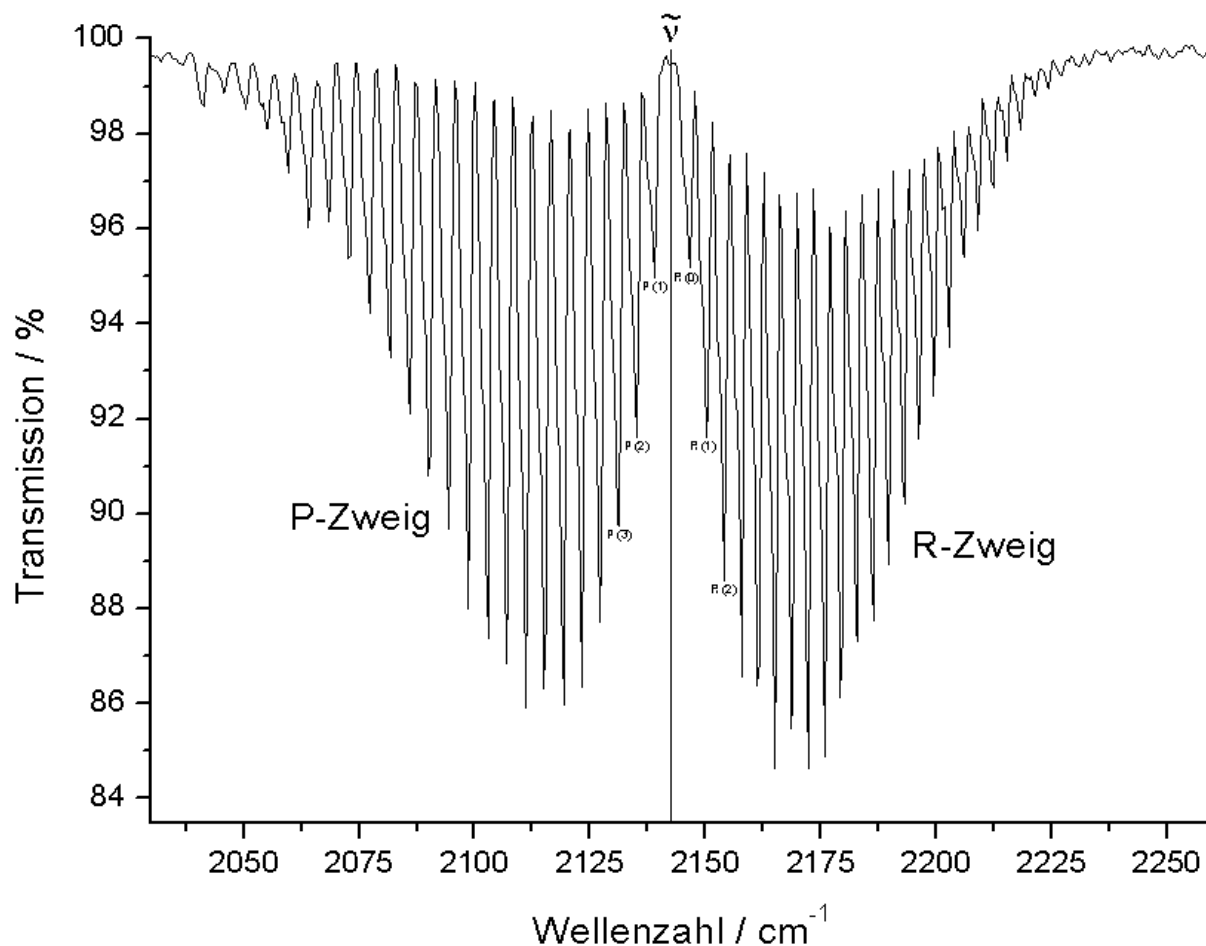


Abb. 4: IR-Absorptionsbande von Kohlenmonoxid. Die Zahlen an den Absorptionslinien geben jeweils die Rotationsquantenzahl des Ausgangszustandes an, aus welchem der Rotationsübergang erfolgt.

Wie aus Abbildung 4 zu entnehmen ist, können die Absorptionslinien der entsprechenden Rotationsübergänge einzeln aufgelöst werden. Es liegt keine kontinuierliche Energieverteilung vor, da die möglichen Rotationszustände eines Moleküls, ebenso wie die Vibrationszustände, gequantelt sind. Aus dem Modell des starren Rotators für ein lineares Molekül ergeben sich die mit F bezeichneten quantenmechanischen Rotationsterme analog zu Gleichung 7 zu:

$$F(J) = B \cdot J \cdot (J + 1) \quad ; \quad \text{mit} \quad B = \frac{\hbar}{4 \cdot \pi \cdot c \cdot I}$$

(Gleichung 14)

Die Rotationskonstante B hat wie $\tilde{\nu}$ die Dimension einer Wellenzahl und ergibt sich aus dem Trägheitsmoment I des Moleküls orthogonal zur Rotationsachse. Die Rotationsquantenzahl J kann wie die Schwingungsquantenzahl ν nur die Werte natürlicher Zahlen und null annehmen. Bei Molekülen, die mehrere, betreffend des Trägheitsmomentes unterscheidbare Rotationsachsen aufweisen, ist für jede Drehachse eine separate Rotationskonstante zu formulieren. Je nach Komplexität des Moleküls ergeben sich dann für die Rotationsterme kompliziertere Gleichungen mit mehreren Quantenzahlen [35]. Hier soll jedoch nur der einfache Fall linearer Moleküle behandelt werden. Wie auch bei der Betrachtung der Vibrationszustände muss die vom einfachen Modell abgeleitete Gleichung 14 zur genaueren Beschreibung der Realität erweitert werden. Rotierende Moleküle verhalten sich nicht wie starre Rotatoren, da chemische Bindungen elastisch sind und durch die Zentrifugalkraft der Rotation gedehnt werden. Unter Berücksichtigung der zentrifugalen Verzerrungskonstanten D_J erhält man eine genauere Quantifizierung der Rotationsterme:

$$F(J) = B \cdot J \cdot (J + 1) - D_J \cdot J^2 \cdot (J + 1)^2$$

(Gleichung 15)

Neben der Voraussetzung, dass ein Molekül ein permanentes Dipolmoment besitzen muss, um durch IR- bzw. Mikrowellenstrahlung zur Rotation angeregt werden zu können, gilt die quantenmechanische Auswahlregel: $\Delta J = \pm 1$.

Im Mikrowellen-Bereich des elektromagnetischen Spektrums sind reine Rotationsspektren von Molekülen beobachtbar, im IR-Bereich dagegen überlagern sich Rotation und Vibration (vgl. Abbildung 4). Die zusammengesetzten Vibrations-Rotations-Terme S ergeben sich als Summe der Terme G und F :

$$S(\nu, J) = G(\nu) + F(J)$$

(Gleichung 16)

Unter Vernachlässigung von Schwingungsanharmonizitäten und zentrifugaler Verzerrung bei der Rotation ergeben sich die Zustandsterme zweiatomiger Moleküle zu:

$$S(\nu, J) = \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \cdot \tilde{\nu} + B \cdot J \cdot (J + 1)$$

(Gleichung 17)

Bei genauerer Betrachtung wäre hier auch die Abhängigkeit der Rotationskonstanten B von der Schwingungsquantenzahl ν zu berücksichtigen, da das Molekül durch die Anregung einer Vibration verzerrt wird, und sich somit sein Trägheitsmoment leicht ändert.

Zur Erklärung der Form des in Abbildung 4 dargestellten, real beobachteten Spektrums reicht jedoch die Näherungsgleichung 17 vollkommen aus.

Alle Absorptionslinien gehören zu dem Vibrationsübergang von $\nu = 0$ nach $\nu = 1$. Der Rotationsübergang mit $\Delta J = 0$ ist für das Kohlenmonoxidmolekül quantenmechanisch verboten, so dass die Regel $\Delta J = \pm 1$ gilt.

Der R-Zweig des Spektrums wird durch Rotationsübergänge mit $\Delta J = +1$ hervorgerufen. Die Lage der einzelnen Absorptionslinien kann somit wie folgt errechnet werden:

$$\tilde{\nu}_R(J) = S(\nu + 1, J + 1) - S(\nu, J) = \tilde{\nu} + 2 \cdot B \cdot (J + 1)$$

(Gleichung 18)

Die Linien des R-Zweiges liegen jeweils um ganzzahlige Vielfache von $2 \cdot B$ gegenüber der Grundschwingung $\tilde{\nu}$ zu höheren Wellenzahlen hin verschoben. Die Linien des P-Zweiges, für den $\Delta J = -1$ gilt, liegen jeweils um ganzzahlige Vielfache von $2 \cdot B$ zu niedrigeren Wellenzahlen hin verschoben.

$$\tilde{\nu}_P(J) = S(\nu + 1, J - 1) - S(\nu, J) = \tilde{\nu} - 2 \cdot B \cdot J$$

(Gleichung 19)

Der Abstand zweier benachbarter Absorptionslinien im P- bzw. R-Zweig des Spektrums beträgt also stets den Wert von $2 \cdot B$ (Durch Ausmessen der Linienabstände lässt sich somit die Rotationskonstante des Moleküls bestimmen.). Im Rahmen der Messgenauigkeit, mit welcher das in Abbildung 4 dargestellte Spektrum aufgenommen wurde, trifft diese Aussage zu. In sehr hoch aufgelösten Spektren ist dagegen zu erkennen, dass die Linien des R-Zweiges leicht konvergieren, während die Absorptionslinien des P-Zweiges leicht divergieren [36], was auf die bereits genannten Abweichungen von den idealisierten Modellen des harmonischen Oszillators und des starren Rotators zurückzuführen ist. Die Intensitäten der einzelnen Linien hängen leicht von der Rotationsquantenzahl J und dem Quadrat des Dipolmoments des Moleküls ab [30]. Hauptsächlich werden die Intensitäten jedoch durch die Boltzmann-Verteilung der Rotationsterme, unter Berücksichtigung der Entartung [37], bestimmt.

Molekülrotationen sind bei Raumtemperatur bereits stark thermisch angeregt (B liegt in der Regel in der Größenordnung von 1 bis 50 cm^{-1}), so dass sich nur ein recht geringer Anteil der Moleküle im Rotationsgrundzustand befindet.

Während bei zweiatomigen Molekülen eine Oszillation prinzipiell nur entlang ihrer Bindung stattfinden kann, tritt bei mehratomigen Molekülen unter Umständen eine Vielzahl von Grundschwingungen auf. Diese können unterschiedlicher Natur sein. Bei der bereits besprochenen Valenzschwingung findet eine periodische Änderung der Bindungslängen statt, bei einer Deformationsschwingung ändern sich dagegen die Bindungswinkel periodisch. Für die Beurteilung, ob eine Vibration IR-aktiv ist, gilt auch hier allgemein, dass sich das Dipolmoment des Moleküls während der Schwingung ändern muss.

Die Anzahl der möglichen Schwingungen wird bestimmt durch die Anzahl N der Atome, aus denen ein Molekül besteht. Sei A_{vib} die Anzahl der möglichen Grundschrwingungen, so gilt für nichtlineare Moleküle:

$$A_{\text{vib}} = 3 \cdot N - 6 \quad (\text{nichtlineare Moleküle})$$

(Gleichung 20)

Lineare Moleküle weisen eine Oszillationsmöglichkeit mehr auf, so dass hierfür gilt:

$$A_{\text{vib}} = 3 \cdot N - 5 \quad (\text{lineare Moleküle})$$

(Gleichung 21)

Die Gleichungen 20 und 21 ergeben sich aus folgender Überlegung: Jedes Atom eines Moleküls kann sich in allen drei Raumrichtungen bewegen, so dass ein Molekül aus N Atomen $3 \cdot N$ Freiheitsgrade der Translation besitzt. Bewegt sich das Molekül als ganzes, ohne seine Form zu ändern, was einer Bewegung des Massenschwerpunktes entspricht, so kann dieses ebenfalls in allen drei Raumrichtungen geschehen. Auf die Translation des Gesamtmoleküls entfallen also drei Freiheitsgrade, so dass $3 \cdot N - 3$ Freiheitsgrade für Molekülschwingungen verbleiben. Weitere drei Freiheitsgrade entfallen auf die Rotation des Gesamtmoleküls, da sich jede Rotation energetisch in drei Komponenten entlang drei jeweils zueinander orthogonal stehenden Achsen aufspalten lässt. Somit verbleiben im allgemeinen $3 \cdot N - 6$ Freiheitsgrade zur Ausführung von Molekülschwingungen. Lineare Moleküle können jedoch zur Rotation längs um die Molekülachse keine Energie aufnehmen, so dass hier nur zwei Freiheitsgrade auf die Rotation des Gesamtmoleküls entfallen. Damit verbleiben bei linearen Molekülen $3 \cdot N - 5$ Freiheitsgrade für die Ausführung von Molekülschwingungen [38].

3.2 Absorptionsmessungen zur quantitativen Analyse

IR-Spektren umfassen üblicherweise den Wellenzahlbereich von 400 cm^{-1} bis 4000 cm^{-1} . Als das IR-Spektrum einer Probe bezeichnet man die Auftragung der Transmission der Probe gegen die Wellenzahl. Moderne IR-Spektrometer bedienen sich zur Messung des dazu erforderlichen Datensatzes der Fourier-Transformationstechnik, mit deren Hilfe die Spektren in wenigen Sekunden und mit hoher Auflösung aufgenommen werden können [39]. Bis in die 1990er Jahre waren jedoch auch noch dispersiv arbeitende Spektrometer gebräuchlich, bei denen das Funktionsprinzip der Messung direkt ersichtlich ist. Üblicherweise waren die Geräte als klassische Zweistrahl-IR-Spektrometer ausgeführt, deren schematischer Aufbau in Abbildung 5 dargestellt ist.

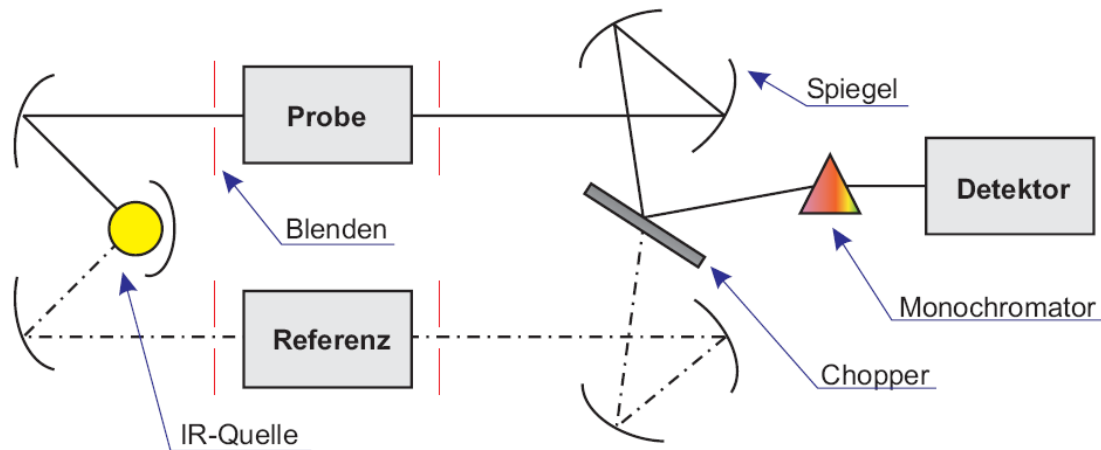


Abb. 5: Schematischer Aufbau eines klassischen Zweistrahl-IR-Spektrometers [40]

Als Emittor dient häufig ein sogenannter Nernststift (ein wenige cm langer Stift aus ca. 85% ZrO_2 und 15% Y_2O_3), der im IR-Bereich besonders günstige Emissionseigenschaften aufweist. Das von der IR-Quelle ausgehende Licht wird mit Hilfe eines Spiegel- und Blenden-systems in zwei Strahlenbündel geteilt, von denen eines durch die Probe geleitet wird, während das andere eine der Probenküvette möglichst baugleiche Referenzküvette durchläuft. Je nach Art und Aggregatzustand der zu vermessenden Probe wird die Referenzküvette z. B. mit Luft oder reinem Lösungsmittel befüllt; sie enthält im Normalfall keine Probensubstanz. Beide Lichtbündel treffen anschließend auf den mit ca. 5 Hz rotierenden Chopper, der Mess- und Referenzstrahl abwechselnd und exklusiv zum Monochromator weiterleitet. Bei dem in Abbildung 5 gezeigten Ausführungsmodell handelt es sich bei dem Chopper um einen halbdurchlässigen Spiegel, in anderen Spektrometermodellen werden auch Lochblenden oder (Loch-) Spiegel eingesetzt. Der Monochromator besteht aus einem Prisma oder einem Beugungsgitter und zerlegt die polychromatische Strahlung in einzelne Spektrallinien bzw. schmale Spektralbanden. Durch Drehung des Monochromators kann gezielt Strahlung einer bestimmten Wellenzahl auf den Detektor geleitet werden. Die Aufnahme eines Spektrums erfolgt dann durch schrittweise Drehung des Monochromators. Diese Vorgehensweise wird auch scannen genannt.

Der Detektor registriert jeweils die Intensität der einfallenden Strahlung und wandelt deren Größe in ein elektrisches Signal um. Als einfache Detektoren eignen sich z. B. bereits Thermoelemente aus Kupfer-Konstantan. Mit Hilfe einer angeschlossenen Messelektronik wird für jede eingestellte Wellenzahl das Intensitätsverhältnis zwischen Mess- und Referenzstrahl ermittelt, welches auch als Transmission T bezeichnet wird. Die Auftragung der Transmissionswerte gegen die Wellenzahl liefert dann das gesuchte IR-Spektrum der Probe. Die Aufnahme eines solchen Spektrums nimmt ca. 10 Minuten in Anspruch. In der qualitativen chemischen Analyse spielen IR-Spektren, besonders zur Identifizierung von Substanzen, eine große Rolle [41], wobei die Spektren prinzipiell auch zur quantitativen Analyse herangezogen werden können.

Zur quantitativen Bestimmung einer ausgewählten Substanz in einer Probe ist es jedoch sinnvoll, den untersuchten Spektralbereich auf eine stoffspezifische Absorptionsbande des Analyten zu beschränken (nichtdispersive Messung). Das Ausmaß der Strahlungsabsorption durch den Analyten bei der ausgewählten Wellenzahl bzw. im ausgewählten schmalbandigen Wellenzahlbereich, ist ein Maß für die Konzentration c des Analyten. Der mathematische Zusammenhang zwischen der Analytkonzentration und der gemessenen Transmission T ist für monochromatische Strahlung gegeben durch das Lambert-Beersche Gesetz [42], welches nach Gleichung 22 formuliert werden kann:

$$I = I_0 \cdot e^{-\varepsilon \cdot c \cdot d} \quad ; \quad \text{mit} \quad T = \frac{I}{I_0}$$

(Gleichung 22)

Der Parameter ε bezeichnet den Extinktionskoeffizienten des Analyten bei der betrachteten Wellenzahl. Die Größe d gibt die Länge des Lichtwegs durch die Probe an. Die Intensität des teilweise vom Analyten absorbierten Lichts ist mit I bezeichnet, während I_0 die Intensität des Lichts ohne Abschwächung durch die Probe bzw. die Intensität des Referenzstrahls bezeichnet. Die Gleichung 22 ist zurückzuführen auf Beobachtungen von Lambert (1760) und Beer (1852), welche die Abnahme der Lichtintensität $-dI$ bei Durchstrahlung einer analytgefüllten Schicht der Dicke d in Abhängigkeit von der eingestrahnten Strahlungsintensität (Lambert) bzw. in Abhängigkeit von der Analytkonzentration (Beer) untersuchten. Beide stellten eine direkte Proportionalität zwischen der Intensitätsabnahme $-dI$ und der von ihnen betrachteten Messgröße fest. Zudem besteht eine Proportionalität zwischen der Intensitätsabnahme und der Schichtdicke. Sei ds ein infinitesimal dünner Abschnitt der Schicht, so gilt in differentieller Schreibweise:

$$\begin{aligned} -dI &\propto I \cdot c \cdot ds \\ \rightarrow dI &= -\varepsilon \cdot I \cdot c \cdot ds \\ \frac{dI}{I} &= -\varepsilon \cdot c \cdot ds \end{aligned}$$

(Gleichung 23)

Die Integration von Gleichung 23 in den Grenzen von I_0 bis I , bzw. von 0 bis d und anschließende Delogarithmierung führt dann zu Gleichung 22.

Aufgrund der vorangegangenen Überlegungen ist es nun möglich, den prinzipiellen Aufbau eines nichtdispersiven quantitativen IR-Gassensors abzuleiten. Als einfachste Ausführungsform ergibt sich der Einstrahlgassensor, dessen Aufbauschema in Abbildung 6 wiedergegeben ist.

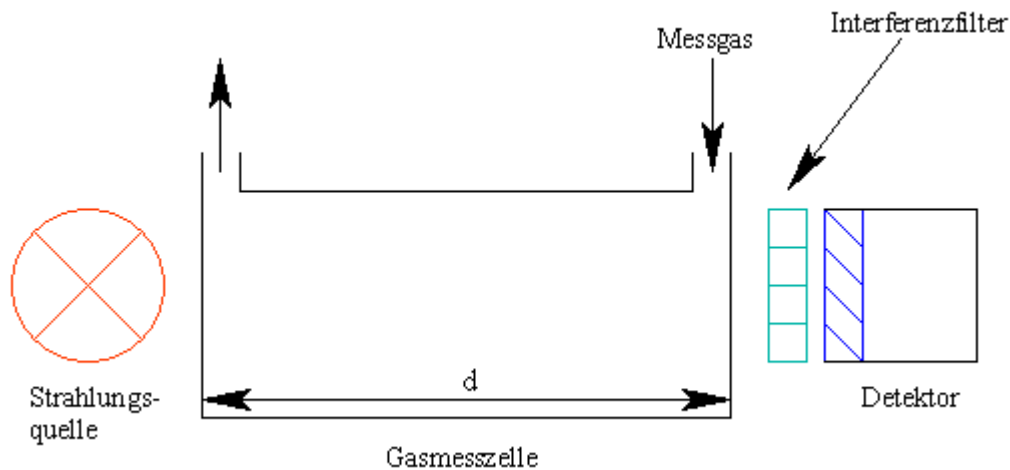


Abb. 6: Prinzipieller Aufbau eines IR-Einstrahlungssensors.

Wenn Gleichung 22 die Kalibrierungsfunktion [43] des Sensors darstellen soll, ergeben sich daraus die apparativen Mindestanforderungen an den Sensor. Die Intensität I als abhängige Variable muss gemessen werden können, daher ist ein IR-Detektor erforderlich. Zudem muss die Lichtintensität (I_0) zunächst erzeugt werden, wodurch eine Strahlungsquelle notwendig wird. Da Gleichung 22 speziell für monochromatisches Licht gilt, ist ein Bandpassfilter erforderlich, der aus der polychromatischen Strahlung den eng begrenzten Wellenzahlenbereich mit der Absorptionsbande des Analyten herausfiltert. Hierzu werden üblicherweise Interferenzfilter eingesetzt, die auch in den Detektor integriert sein können. Letztlich muss die Weglänge d der Strahlung durch die Probe mit dem Analyten größer als null sein, was das Vorhandensein einer Gasmesszelle voraussetzt. Diese vier Komponenten sind dann in geeigneter Weise zu einem Sensor zusammenzufügen, wie in Abbildung 6 skizziert ist.

Der Detektor wandelt die auftreffende Lichtintensität I in ein elektrisches Signal Y um, welches die eigentliche Messgröße darstellt. Da kein Referenzstrahl vorhanden ist, muss das der Grundintensität I_0 entsprechende Detektorsignal Y_0 durch Messung des Detektorsignals bei Befüllung der Gasmesszelle mit synthetischer Luft oder reinem Stickstoff ermittelt werden. Das Produkt aus Extinktionskoeffizient ϵ und Lichtweglänge d (vgl. Gleichung 22) ist für einen einmal zusammengesetzten Sensor für alle Messungen konstant, so dass es zu einer neuen Konstanten λ zusammengefasst werden kann. Die Korrelation zwischen dem Detektorsignal Y und der Analytkonzentration c ergibt sich somit entsprechend Gleichung 22 zu:

$$Y = Y_0 \cdot e^{-\lambda \cdot c}$$

(Gleichung 24)

Um durch eine Messung des Detektorsignals Y über Gleichung 24 auf eine in der Gasmesszelle befindliche, unbekannte Konzentration des Analyten (z. B. Kohlenmonoxid) schließen zu können, ist die Kenntnis des Parameters λ notwendig.

Prinzipiell ist dieser zwar durch thermodynamische Daten und die Größe der Gasmesszelle gegeben, da jedoch im Realfall die Strahlungsquelle keine Parallelstrahlen emittiert, ergibt sich für alle auf den Detektor gelangenden Strahlen eine mittlere Weglänge, die von der vorgegebenen Messzellenlänge d (nach oben) abweicht. Somit ist der Parameter λ als Gerätekonstante aufzufassen, die durch eine Kalibration des Sensors, d. h. durch Beaufschlagung mit verschiedenen, bekannten Messgaskonzentrationen, ermittelt werden muss.

Die Auftragung der Größe $\ln(Y/Y_0)$ gegen die eingestellte Messgaskonzentration c sollte nach Gleichung 24 eine Gerade mit der Steigung $-\lambda$ ergeben. In der Praxis erweist sich jedoch, dass dies nicht generell der Fall ist, sondern dass besonders bei Sensoren mit gekrümmter Gasmesszelle (vgl. Kapitel 4.3.6) keine direkte Proportionalität der beiden Größen mehr vorliegt. Die Auftragung des Detektorsignals Y gegen die Messgaskonzentration c besitzt zwar auch in diesem Fall die Form einer abfallenden Exponentialfunktion, jedoch konvergiert diese nicht, wie von Gleichung 24 gefordert, gegen null, sondern gegen einen Grenzwert Y_{\min} . Dieses wird unter anderem durch die Detektion von nichtinformativen Lichtstrahlen verursacht, deren Lichtweglänge von der Quelle zum Detektor weit unterhalb der mittleren Strahlungsweglänge liegt (vgl. Kapitel 4.3.4). Diese Strahlen werden durch den Analyten, besonders wenn dieser einen sehr geringen Extinktionskoeffizienten aufweist, kaum in ihrer Intensität abgeschwächt, so dass sie annähernd unabhängig von der Analytkonzentration ständig eine gewisse Strahlungs-Grundintensität auf den Detektor transportieren.

Unter Berücksichtigung dieser Tatsache ist eine Näherung für die Kalibrierungsfunktion eines IR-Einstrahlungssensor besser durch eine Erweiterung von Gleichung 24 zu formulieren:

$$Y \approx Y_{\min} + Y_0 \cdot e^{-\lambda \cdot c}$$

(Gleichung 25)

Diese allgemeine Gleichung für einen exponentiellen Abfall erster Ordnung kann als Fittingfunktion von Sensor-Kalibrationskurven verwendet werden.

Die der Gleichung 25 entsprechende Analysenfunktion [43] des Sensors ergibt sich als Umkehrfunktion der Kalibrierungsfunktion zu:

$$c = -\frac{1}{\lambda} \cdot \ln\left(\frac{Y - Y_{\min}}{Y_0}\right)$$

(Gleichung 26)

Obwohl allgemein Kalibrierungsfunktionen, die den physikalischen Zusammenhang zwischen abhängiger und unabhängiger Variable wiedergeben, für das Verständnis des Messprinzips von Vorteil sind, werden in der Praxis auch Kalibrierungsfunktionen verwendet, welche nicht in Zusammenhang mit den physikalischen Grundlagen der Messung stehen. Beispielsweise kann die Kalibrierungsfunktion eines Abstandssensors innerhalb eines begrenzten Messbereiches auch als Polynom angenähert werden [44].

Auch kann die Kalibrierungsfunktion eines Temperatursensors abschnittsweise linear definiert sein [45]. Fitting-Funktionen in Form eines Polynoms oder einer anderen einfachen Gleichung sind besonders dann hilfreich, wenn der nichtlineare physikalische Zusammenhang zwischen den Messgrößen unbekannt ist oder durch die alternative mathematische Beschreibung stark vereinfacht werden kann. Abschnittsweise linear definierte Kalibrierungsfunktionen sind generell verwendbar. Die einzige Voraussetzung für die Umkehrbarkeit zur eindeutigen Analysenfunktion ist, dass die Messwerte streng monoton mit der zu messenden Größe fallen bzw. steigen. Da Fittingparameter für nichtlineare Funktionen, in Abhängigkeit von der Qualität der zu fittenden Messwerte, unter Umständen stark fehlerbehaftet sein können (vgl. Kapitel 4.3.3), und daher eine Extrapolation dieser Kalibrierungsfunktionen auf Gaskonzentrationen außerhalb des vermessenen Bereichs kritisch ist, wurden im Rahmen dieser Arbeit abschnittsweise linear definierte Analysenfunktionen verwendet.

Obgleich das beschriebene Prinzip der Konzentrationsbestimmung durch Absorptionsmessung allen quantitativen IR-Gasdetektoren zugrunde liegt, findet das einfache Modell des IR-Einstrahlgassensors in der Technik kaum Anwendung. Allgemein besteht bei dem in Abbildung 6 schematisch dargestellten IR-Einstrahlgassensor das Problem, dass bei dauerhaftem Betrieb (z. B. über Monate) die Strahlungsquelle einem quantitativ schwer vorauszu sehenden Alterungsprozess unterworfen ist. Dies führt auf lange Sicht zu einer Drift des Detektorsignals und macht somit eine häufige Rekalibrierung des Gerätes erforderlich. Abbildung 7 zeigt die zeitlichen Verläufe der Signalintensitäten von fünf im Einstrahl-Modus betriebenen Kohlendioxiddetektoren, die dauerhaft mit synthetischer Luft beaufschlagt wurden, und deren Strahlungsquellen aus baugleichen Miniaturglühlampen bestehen.

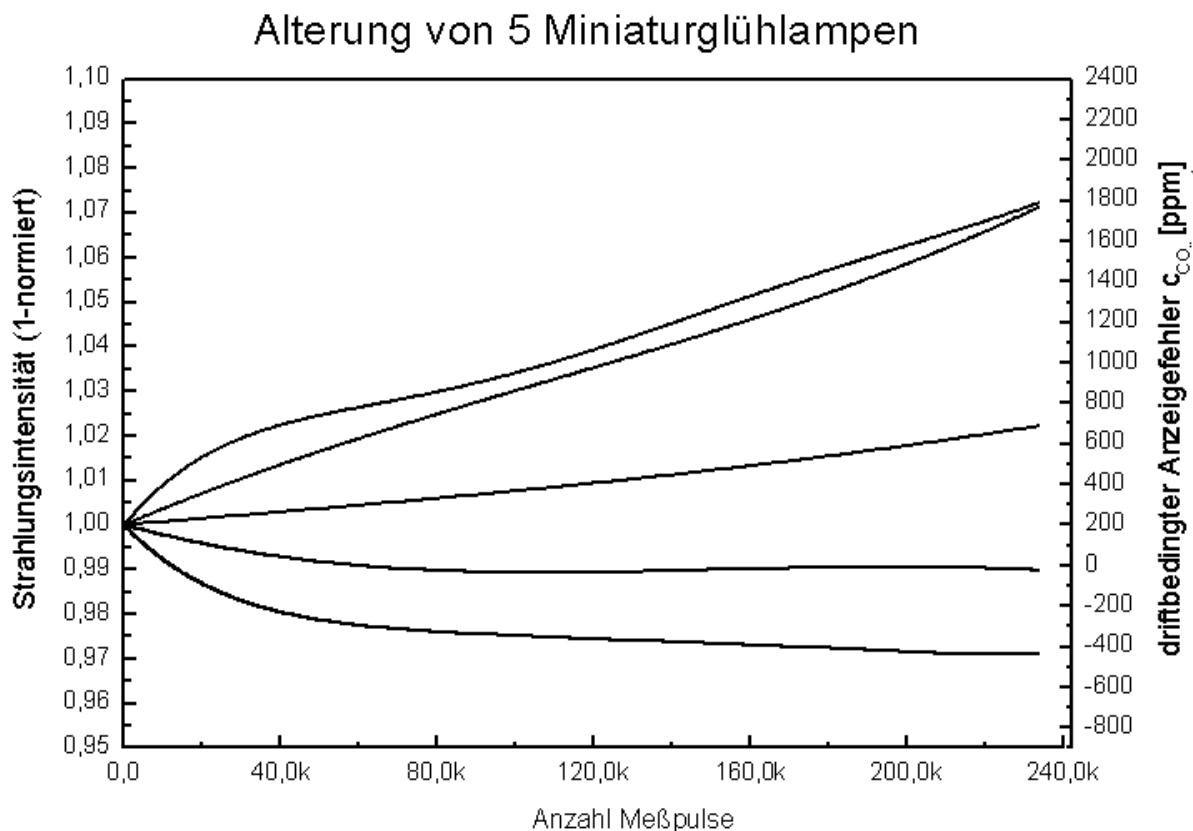


Abb. 7: Alterungskurven verschiedener baugleicher Miniaturglühlampen [25, 46]. Die Temperatur wurde bei der Messung konstant gehalten (25° C).

Aus Abbildung 7 wird ersichtlich, dass die emittierte Strahlungsintensität von Glühlampen im Dauerbetrieb mit der Zeit sowohl ansteigen wie auch abfallen kann, was eine Verallgemeinerung für die Extrapolation von Alterungskurven unmöglich macht.

Da eine betriebsbedingte Alterung für keine verfügbare Strahlungsquelle auszuschließen ist, muss zur Erreichung der Langzeitstabilität eines IR-Gassensors das Problem der Intensitätsdrift gelöst werden. Hierzu existieren bereits einige technisch umgesetzte Lösungen, welche die Alterung der Strahlungsquelle weitgehend kompensieren. Apparativ kann dieses häufig durch eine Erweiterung des IR-Einstrahlungssensors erreicht werden. Eine Möglichkeit ist z. B. die Verwendung eines zweiten Detektors, welcher mit einem Interferenzfilter ausgestattet ist, der nur eine geeignete Referenzwellenlänge (z. B. 4,0 μm , da hier in der Regel keine Absorptionsbanden von eventuell bei der Analyse zu erwartenden Gasen liegen) passieren lässt. Da das Signal des Referenzdetektors nur von der Strahlungsintensität des Emitters abhängt, lässt sich dieses bzw. dessen zeitliche Änderung dann zum mathematischen Ausgleich eines eventuell auftretenden Alterungsprozesses der Strahlungsquelle verwenden. Im Grunde ergibt sich durch diese Ergänzung des Einstrahlsensors somit ein Doppelstrahlsensor. Das gleiche Prinzip kann jedoch auch unter Beibehaltung des Einstrahlensystems (Die Optik der Gasmesszelle muss dann nicht geändert werden.) realisiert werden, indem anstelle eines normalen Silizium- oder Saphir- Interferenzfilters mit fester Durchlasswellenlänge ein abstimmbarer Interferenzfilter eingesetzt wird.

Dieser kann dann abwechselnd bzw. wahlweise auf die Referenzwellenlänge und die Absorptionswellenlänge des Analyten eingestellt werden. Der Vorteil dieser Methode ist, dass durch die Verwendung desselben Lichtwegs für beide Messungen auch eine alterungsbedingte Änderung in der geometrischen Abstrahlcharakteristik des Emitters kompensiert werden kann. Außerdem wirken sich bei Verwendung ein und desselben Detektors für beide Messungen dessen Temperaturabhängigkeit und möglicherweise vorhandene Empfindlichkeitsdrift gleichermaßen auf beide Messungen aus und können gegebenenfalls kompensiert werden.

Eine weitere Möglichkeit zur Erreichung einer Langzeitstabilität von IR-Gassensoren besteht in der von Schmale [25] publizierte Methode der Referenzierung zwischen zwei Strahlungsquellen. Hierbei werden zwei baugleiche Miniaturglühlampen verwendet, deren Strahlung über zwei optisch weitgehend getrennte, aber möglichst ähnliche Lichtwege auf ein und denselben Detektor (mit Interferenzfilter) fällt. Die eine der beiden Miniaturglühlampen dient als Samplelampe und wird dauerhaft zur Bestimmung der Analytkonzentration benutzt. Soweit handelt es sich bei dem System also um einen gebräuchlichen Einstrahlsensor. Die zweite Strahlungsquelle dient als Referenzlampe und wird nur sehr selten betrieben. Dadurch wird deren Alterungsprozess stark verzögert. In regelmäßigen, aber zeitlich relativ langen Abständen werden dann die vom Detektor gemessenen Signale der beiden Lampen verglichen. Somit wird die Drift der Samplelampe gegenüber der als konstant betrachteten Referenzlampe quantifizierbar. Mit Hilfe des beobachteten Intensitätsverhältnisses der beiden Lampen lässt sich so die Alterung der Samplelampe kompensieren.

3.3 Visualisierung dreidimensionaler Modelle

Da innerhalb dieser Arbeit verschiedene Sensoraufbauten entwickelt und mit Hilfe von Computersimulationen beurteilt werden sollen, müssen deren geometrische Bauformen auf ein mathematisches Modell übertragen werden. Die mathematischen Modelle müssen zudem in eine digitale Datenform überführt werden, um eine universelle Verarbeitung durch ein Computerprogramm zu ermöglichen. Dabei werden Datensätze erzeugt, die in Form von Zahlenreihen alle Informationen über die Geometrie der Sensormodelle enthalten. Da diese Datensätze sehr abstrakt sind, und unter Umständen auch eine beträchtliche Größe erreichen können (je nach Komplexität des Modells), ist z. B. zur Verifizierung der Übereinstimmung von Computermodell und geplanter Bauform eine Visualisierung der Computermodelle erforderlich. Durch die Visualisierung werden die Informationen in den Datensätzen für den Menschen schnell erfassbar.

3.3.1 Aufbau von Modellen

Die Delphi-Unit „Kamera.pas“ bzw. „Kamera.dcu“ wurde vom Verfasser dieser Arbeit ohne Zuhilfenahme vorgefertigter Programmstrukturen persönlich programmiert. Sie dient allgemein der Konstruktion und Visualisierung dreidimensionaler Objekte.

Diese können beliebig geformt und beliebig im Raum angeordnet und orientiert sein. Die mathematische Beschreibung der Modelle in Form digitaler Datensätze ist für den Menschen jedoch nur schwer interpretierbar. Der folgende Datensatz beschreibt beispielsweise einen relativ einfach aufgebauten Körper, der aus neun Flächen besteht:

```
15461355 ; 14145495 ; 3 ; 0 ; -5 ; -5 ; -5 ; 5 ; -5 ; -5 ; 5 ; 5 ; -5 ; -5 ; 5 ; -5
5072383 ; 3756523 ; 3 ; 0 ; -5 ; -5 ; -5 ; 5 ; -5 ; -5 ; 5 ; -5 ; 5 ; -5 ; -5 ; 5
2395391 ; 1079531 ; 3 ; 0 ; -5 ; 5 ; -5 ; 5 ; 5 ; -5 ; 5 ; 5 ; 5 ; -5 ; 5 ; 5
10746188 ; 9430328 ; 3 ; 0 ; -5 ; -5 ; -5 ; -5 ; -5 ; 5 ; -5 ; 5 ; 5 ; -5 ; 5 ; -5
16753206 ; 15437346 ; 3 ; 0 ; 5 ; -5 ; -5 ; 5 ; -5 ; 5 ; 5 ; 5 ; 5 ; 5 ; 5 ; -5
9630830 ; 8314970 ; 3 ; 0 ; 0 ; 0 ; 12.5 ; 5 ; -5 ; 5 ; 5 ; 5 ; 5 ; 5
5308415 ; 3992555 ; 3 ; 0 ; 0 ; 0 ; 12.5 ; 5 ; 5 ; 5 ; -5 ; 5 ; 5
15445311 ; 14129451 ; 3 ; 0 ; 0 ; 0 ; 12.5 ; -5 ; 5 ; 5 ; -5 ; -5 ; 5
16740028 ; 15424168 ; 3 ; 0 ; 0 ; 0 ; 12.5 ; -5 ; -5 ; 5 ; 5 ; -5 ; 5
```

Jede Zeile beschreibt eine Körperfläche und enthält über diese die folgenden Informationen:

Die erste Zahl ist der Farbcode der Fläche. Dieser legt fest, welche Farbe die darzustellende Fläche aufweist. Da Farben im Computer stets als Mischung der Grundfarben rot, grün und blau interpretiert werden, berechnet sich der Farbcode nach der Formel:

$F = \text{rot} + 256 * \text{grün} + 65536 * \text{blau}$, wobei die Variablen rot, grün und blau jeweils Werte zwischen einschließlich null und einschließlich 255 annehmen können. Diese Formel gilt für eine Farbtiefe von 32 bit.

Die zweite Zahl ist der Farbcode der Flächenumrandung und die dritte Zahl die Breite (in Pixeln) der Flächenumrandung.

Die vierte Zahl ist optional und legt fest, ob die darzustellende Fläche von beiden Seiten (Wert 0) sichtbar sein soll, oder etwa nur aus Richtung der positiven bzw. negativen Flächennormale (Werte 1 oder 2).

Darauf folgen jeweils die x-, y- und z-Koordinaten derjenigen Punkte, durch welche die Fläche aufgespannt bzw. begrenzt wird.

So lässt sich z. B. aus der neunten Zeile des Datensatzes ablesen, dass es sich bei der Fläche um ein violettetes Dreieck mit den Eckpunkten A(0 / 0 / 12.5), B(-5 / -5 / 5) und C(5 / -5 / 5) handelt.

Trotz der eindeutigen und vollständigen Informationen aus dem Datensatz dürfte es für die meisten Menschen äußerst schwierig sein, sich den beschriebenen Körper nun bildlich vorzustellen, selbst wenn die Farbgebung der Flächen außer Acht gelassen wird.

Betrachtet man dagegen die Visualisierung des Körpers (Abb. 8), so wird die Anordnung der Körperflächen sofort begreiflich.

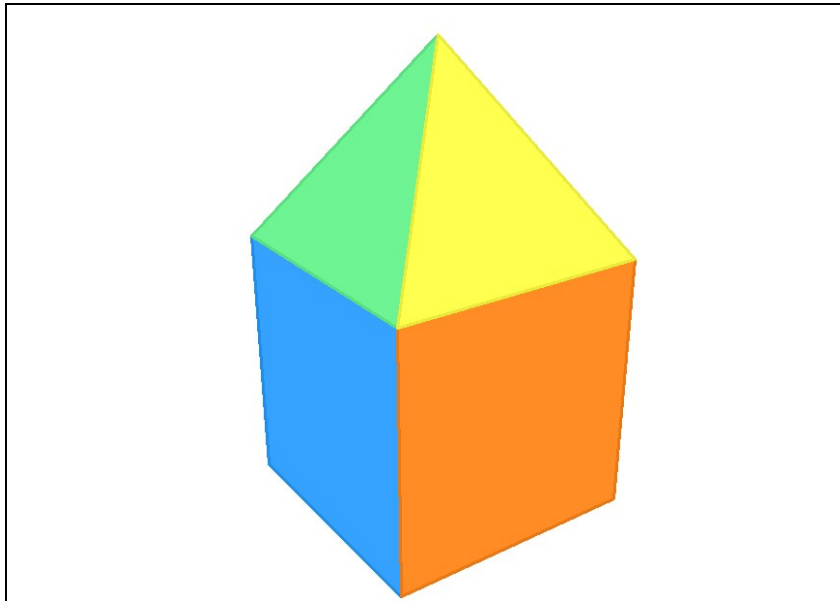


Abb. 8: Visualisierung des oben angegebenen Datensatzes mit Hilfe der Delphi-Unit „Kamera.dcu“

Es handelt sich um einen Würfel mit aufgesetzter Pyramide. Die obere Deckfläche des Würfels sowie die Grundfläche der Pyramide (beide sind hier identisch) wurden weggelassen, da diese im Inneren des Körpers liegen.

Durch die Visualisierung lässt sich also sehr schnell optisch verifizieren, ob der Computer z. B. bei der Erstellung eines Modells richtig gerechnet hat, und ob das Modell mit der Vorstellung übereinstimmt.

Selbstverständlich müssen umgekehrt alle 3d-Modelle, die mit der Unit dargestellt werden sollen, im oben beschriebenen Format vorliegen. So muss z. B. eine Kugel, die nur eine einzige Oberfläche besitzt, welche jedoch nicht durch endlich viele Punkte begrenzt wird, als Summe vieler Einzelflächen approximiert werden. Hierzu wird jeweils eine Anzahl von Punkten, die alle auf der Kugeloberfläche liegen und miteinander eine Ebene bilden, zu einem Polygon zusammengefasst. Je kleiner diese Einzelflächen werden, desto besser wird dann das Modell an die Kugel angenähert. Bei weniger gleichmäßig gekrümmten Flächen muss immer eine Approximation durch Dreiecke durchgeführt werden, da nur bei einem Dreieck gesichert ist, dass alle Punkte in einer Ebene liegen.

Grundsätzlich lassen sich alle Flächen als Summe von Dreiecken darstellen [47]. Auf diese Weise werden beliebige dreidimensionale Strukturen für die Darstellung zugänglich. Unter anderem bietet die Unit die Möglichkeit der Modellierung abschnittsweise definierter dreidimensionaler Flächenfunktionen der Form $z = f(x, y, a, b, c)$, wobei es sich bei a, b und c um frei wählbare Parameter handelt. Die Funktion kann als Text eingegeben werden und wird intern mit Hilfe einer Parserroutine interpretiert.

Abbildung 9 zeigt z. B. die Funktion $z = \sin(x) + \sin(y)$ in den Grenzen von $(x = 0 / y = 0)$ bis $(x = 10 / y = 10)$ mit einer Auflösung von $(dx = 0.2 / dy = 0.2)$.

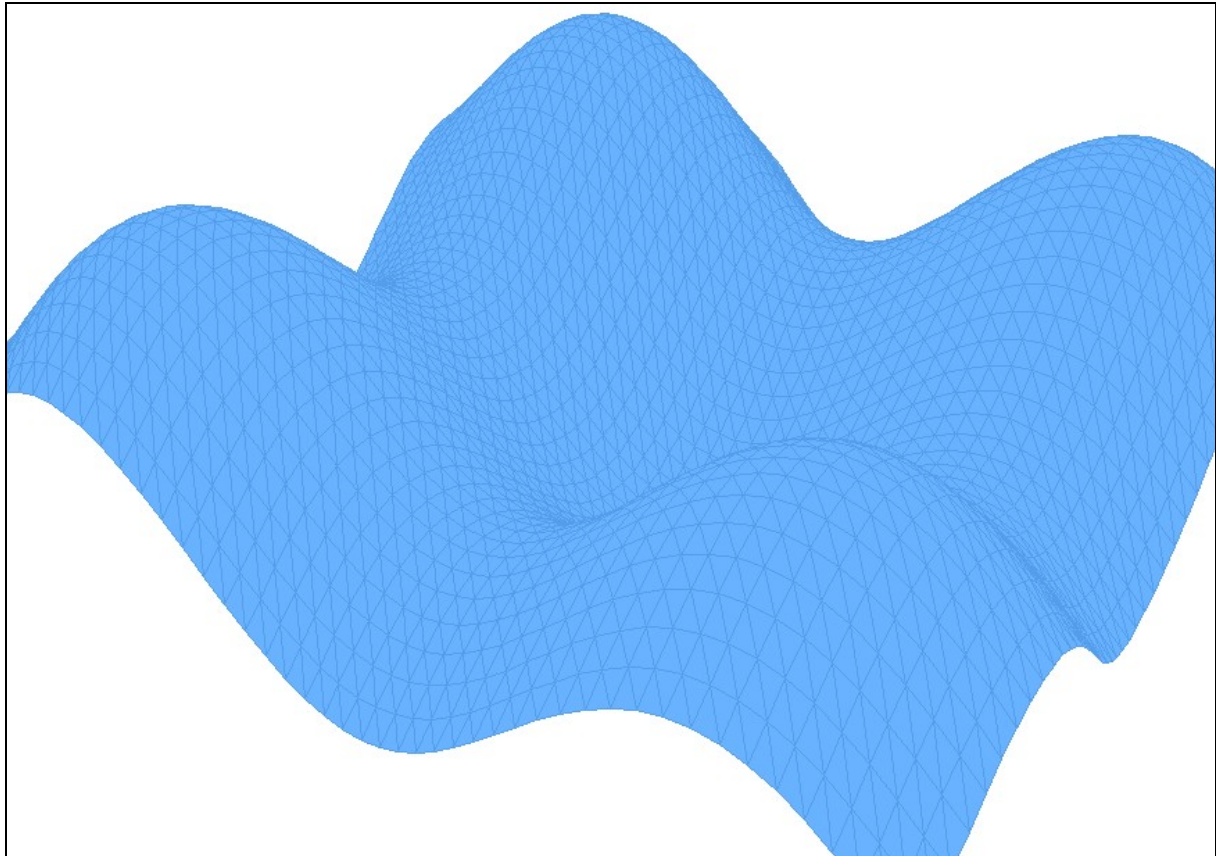


Abb. 9: Modell eines Ausschnitts der Flächenfunktion $z = \sin(x) + \sin(y)$

Alle Modelle können nach ihrer Konstruktion beliebig verschoben, rotiert, gespiegelt werden etc., wofür die Unit die entsprechenden Funktionen bereit stellt. Ebenso stehen Funktionen zur einfachen Konstruktion verschiedener Körper wie Kegel, Zylinder, Ellipsoide usw. zur Verfügung. Als Ergebnis liefert das Programm jeweils einen Datensatz mit oben beschriebener Formatierung, der einfach als Textdatei abgespeichert werden kann. Zudem ist es möglich, manuell mit Hilfe eines Texteditors Modelle zu erstellen, die anschließend vom Programm eingelesen werden können.

3.3.2 Funktionsweise der virtuellen Kamera

Da dreidimensionale Objekte auf dem Computerbildschirm oder auf Papier nur zweidimensional dargestellt werden können, bedarf es einer Projektion der virtuellen 3d-Modelle auf die Ebene des Monitors. Dieses ist die Hauptaufgabe der Unit „Kamera.dcu“, die wie die meisten 3d-engines mit einem Kameramodell arbeitet.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, dreidimensionale Modelle perspektivisch zu projizieren [48]; die Unit „Kamera.dcu“ verwendet die einfache Fluchtpunktsprojektion. Die Projektion erfolgt in zwei Schritten. Zunächst müssen die dreidimensionalen Raumkoordinaten der Modelle in zweidimensionale Kamerakoordinaten umgerechnet werden. Die Kamerakoordinaten eines Raumpunktes sind dabei abhängig von dessen (relativer) Stellung zur Kamera. Da sowohl die Modelle, als auch die Kamera im Raum frei beweglich sind, muss die Projektion für jede Momentaufnahme (und für jeden einzelnen Raumpunkt) neu berechnet werden. Wegen des damit verbundenen erheblichen Rechenaufwandes (abhängig von der Anzahl der darzustellenden Raumpunkte) wurden große Teile der Unit nicht in Object-Pascal, sondern in Assembler programmiert, um die Rechenzeit zu verkürzen.

Der zweite Schritt ist dann die Umrechnung der erhaltenen (zweidimensionalen) Kamerakoordinaten in ebenfalls zweidimensionale Bildschirmkoordinaten. Somit wird jedem Raumpunkt (x, y, z) ein Bildschirmpunkt bzw. Pixel (x, y) zugeordnet. Dabei handelt es sich bei den dreidimensionalen Raumkoordinaten um Fließkommazahlen, während die Bildschirmkoordinaten durch Integer-Werte beschrieben werden. In die Berechnung der Bildschirmkoordinaten fließt neben den Kamerakoordinaten und der Bildschirmgröße auch der Zoomfaktor der virtuellen Kamera ein. Abbildung 10 ist ebenso wie die beiden vorangegangenen Abbildungen ein Screenshot der virtuellen Kamera bei Ansicht verschiedener 3d-Modelle. Die Abbildung zeigt die Projektion eines Würfels auf die Kameraebene einer (zweiten) virtuellen Kamera.

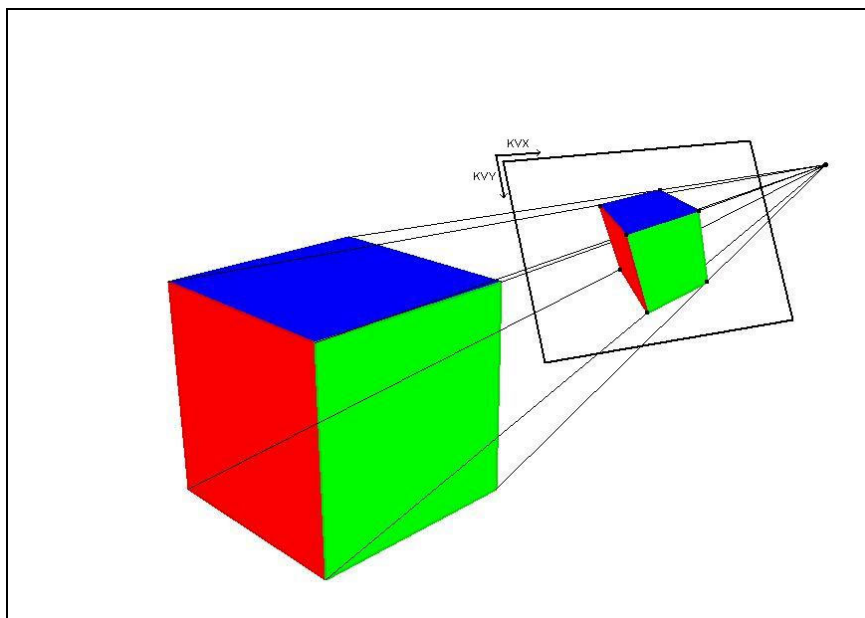


Abb. 10: Projektion von Raumpunkten auf die Kameraebene und Entstehung von projizierten Flächen.

Das in Abbildung 10 dargestellte Rechteck bezeichnet die Begrenzung der Kameraebene, die letztendlich durch die Größe der Monitorabbildung bestimmt wird. Zur Ermittlung der Kamerakoordinaten eines Raumpunktes wird von der Verbindungsgeraden dieses Punktes mit dem Fluchtpunkt der Kamera ausgegangen.

Die Schnittpunkte der Verbindungsgeraden (der relevanten Raumpunkte) mit der Kameraebene sind in Abbildung 10 als schwarze Quadrate gekennzeichnet. Alle diese Schnittpunkte liegen logischerweise in ein und derselben Ebene, der Kameraebene. Der perspektivische Effekt der Projektion wird dadurch erreicht, dass Punkte, welche im dreidimensionalen Raum eine Fläche bilden, auch in der Projektion zu einer Fläche kombiniert werden. Die projizierten Flächen werden also durch die Schnittpunkte der entsprechenden Verbindungsgeraden mit der Kameraebene begrenzt. Bei den errechneten Schnittpunkten handelt es sich jedoch immer noch um dreidimensionale Raumpunkte, da die Kameraebene beliebig im Raum orientiert sein kann. Bezeichnet man die senkrechte Projektion des Fluchtpunktes auf die Kameraebene als Kameraposition (das ist bildlich der Mittelpunkt des in Abb. 10 dargestellten Rechtecks), so ergibt sich die Blickrichtung der virtuellen Kamera als Richtungsvektor vom Fluchtpunkt zur Kameraposition. Der Abstand vom Fluchtpunkt zur Kameraebene lässt sich als Objektivlänge der virtuellen Kamera interpretieren.

Im Normalfall (die virtuelle Kamera lässt sich auch um ihre eigene Achse rotieren) ist das in Abb. 10 dargestellte Rechteck so angeordnet, dass es der Breite nach waagrecht, d.h. parallel zur XY-Ebene steht. Der Vektor parallel zur Breitseite des Rechtecks wird als X-Vektor (K_{VX}) der Kamera bezeichnet, derjenige parallel zur (im vorliegenden Fall diagonal durch den Raum verlaufenden) Rechteckshöhe als Y-Vektor (K_{VY}) der Kamera. Die Vektoren Blickrichtung, X-Vektor und Y-Vektor stehen normalerweise jeweils senkrecht zueinander und werden alle in Einheitsvektoren angegeben.

Die Kamerakoordinaten eines Raumpunktes ergeben sich schließlich als Komponenten des Differenzvektors von Projektionspunkt und Kameraposition in Richtung des X- bzw. Y-Vektors der virtuellen Kamera (Skalarprodukte). Bei der Berechnung der Kamerakoordinaten (und auch bei anderen Berechnungen im dreidimensionalen Raum) erwiesen sich die einfachen Methoden der linearen Algebra als deutlich schneller als die von einigen Autoren für diese Kalkulationen empfohlene Matrizenrechnung [49, 50]. Nach der Berechnung der Kamerakoordinaten folgt anschließend nur noch die relativ einfache Proportionalumrechnung auf Bildschirmkoordinaten.

Die in der Unit „Kamera.dcu“ verwendete Assembler-Funktion „Screenkoordinaten_norm“ benötigt zur Bewältigung dieser Aufgabe (Berechnung von Bildschirmkoordinaten aus Raumkoordinaten) gerade einmal 80 Rechentakte des Coprozessors (FPU).

Neben der Koordinatentransformation ist die Beurteilung von Flächenlagen für eine perspektivische Darstellung dreidimensionaler Modelle von großer Bedeutung. Flächen, die weiter von der virtuellen Kamera entfernt liegen, können z. B. ganz oder teilweise von davor liegenden Flächen verdeckt werden. Daher müssen alle Flächen vor dem Zeichnen nach ihrem Abstand zur virtuellen Kamera sortiert werden, um eine korrekte Darstellung zu gewährleisten. Obwohl dieses Verfahren in den meisten Fällen befriedigende Resultate liefert, können dennoch Fälle auftreten, in denen die Sortierung der Flächen nicht ausreicht, um die Modelle ansichtsgetreu abzubilden.

Abbildung 11 zeigt jeweils die gleichen zwei Flächen, von denen je nach Kamerastellung einmal die eine und einmal die andere Fläche nach der Sortierung vorne zu liegen kommt. Der Grund dafür ist, dass sich die beiden Flächen schneiden und sich somit gegenseitig teilweise verdecken.

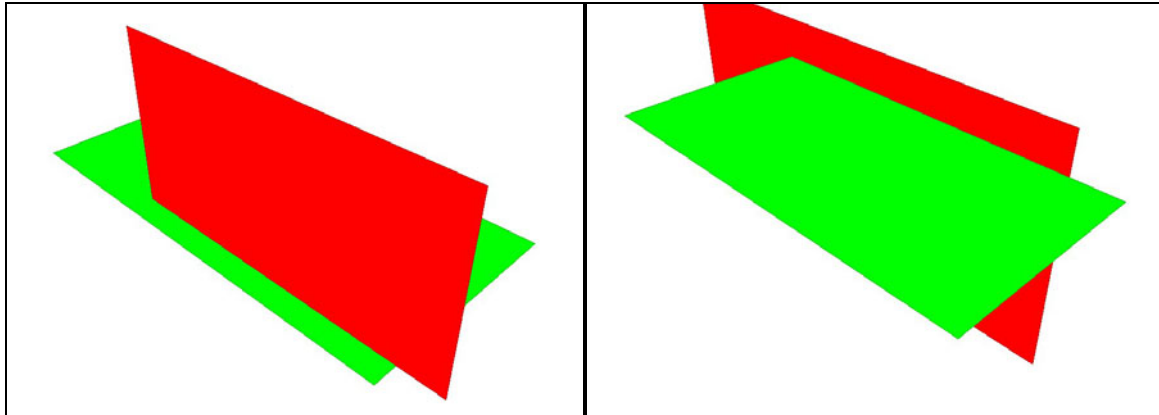


Abb. 11: Falsche Darstellung zweier sich schneidender Rechtecke. Im linken Bild erscheint die rote Fläche vorne, während rechts die grüne Fläche vorne zu liegen scheint.

Die Lösung dieses Problems wird dadurch erreicht, dass der von der virtuellen Kamera abzubildende Raum mitsamt der darin befindlichen Modelle in zur Kameraebene parallele Scheiben geschnitten wird. Die Dicke dieser Scheiben ist einstellbar und würde im idealen Grenzfall infinitesimal klein werden. Die Qualität der Abbildung steigt also mit kleiner werdender Scheibendicke, allerdings wächst damit auch der Rechenaufwand rasant an.

Nach der Einteilung in Scheiben werden diese dann in abfallender Reihenfolge ihrer Entfernung zur Kamera gezeichnet. Abbildung 12 stellt das Prinzip dieses Verfahrens grafisch dar. Zur Erreichung einer besseren Übersichtlichkeit wurde hier als Richtungsvektor des Zuschnitts allerdings nicht die aktuelle Blickrichtung der Kamera gewählt, sondern ein dazu windschiefer Zufallsvektor.

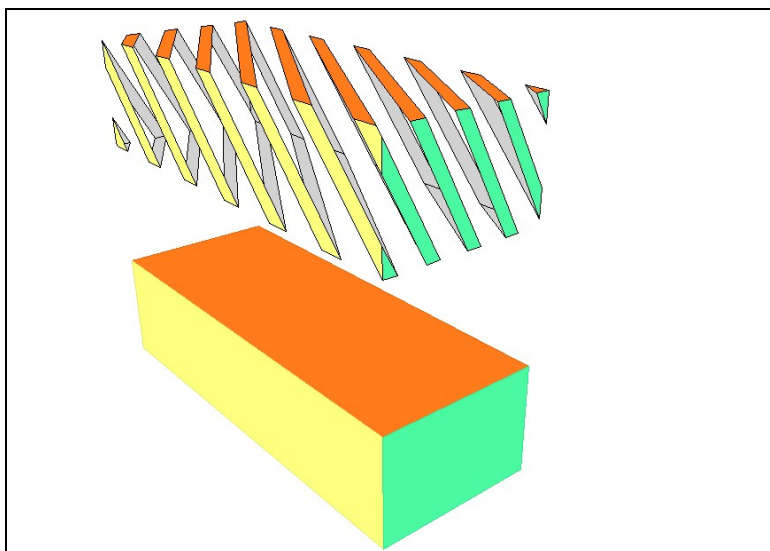


Abb. 12: Quader und dessen Scheibenschnitt in zufällig gewählter Richtung, bei einer Scheibendicke von einer Längeneinheit. Zur besseren Übersichtlichkeit wurde nur jede dritte Scheibe eingezeichnet.

Wendet man diesen Algorithmus nun auf die in Abbildungen 11 falsch dargestellten Rechtecke an, so ergibt sich eine treffendere Abbildung der Modelle, wie in Abbildung 13 zu sehen ist.

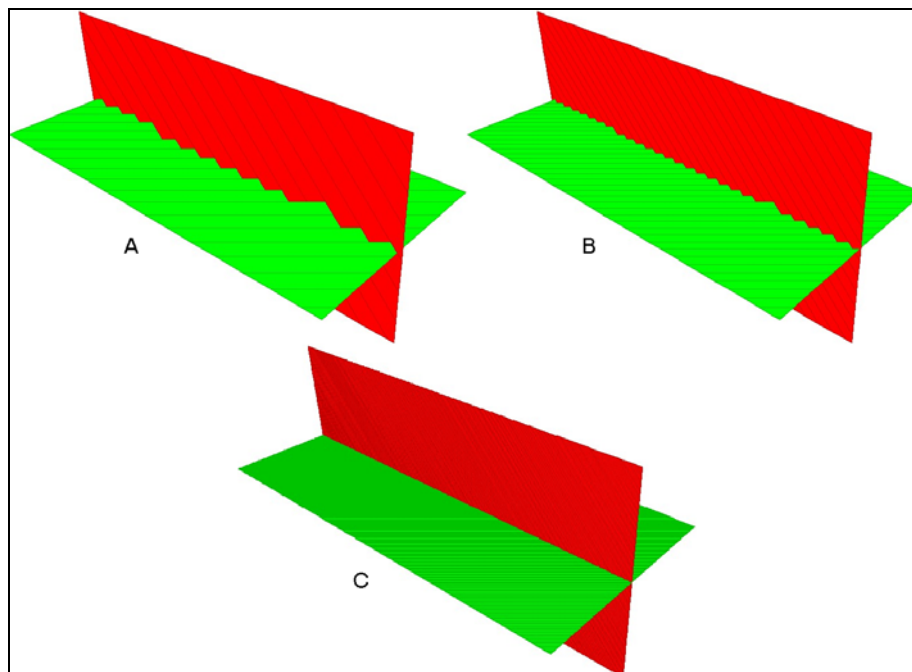


Abb. 13: Darstellungen zweier sich schneidender Rechtecke mit von Fall A zu Fall C kleiner werdender Scheibendicke der Kameraschnitte.

Ein weiterer Arbeitsschritt der Visualisierung ist die Filterung bzw. Beschneidung von Flächen vor der eigentlichen Zeichenroutine. Dadurch kann unter Umständen eine erhebliche Reduzierung des Rechenaufwandes bei der Kamerakoordinatenberechnung erzielt werden, da grundsätzlich nur die Flächen bzw. Flächenteile gezeichnet werden müssen, die sich innerhalb des Sichtvolumens der virtuellen Kamera befinden. Wird eine maximale Sichtweite für die Kamera definiert, so ergibt sich als Sichtvolumen ein Pyramidenstumpf. Dessen Form und Größe werden durch die Objektivlänge und die Sichtweite der virtuellen Kamera sowie durch die Größe der Zeichenfläche bestimmt. Die beiden Winkel zwischen jeweils zwei gegenüberliegenden Seitenflächen des Pyramidenstumpfes sind die Öffnungswinkel der virtuellen Kamera in x- und y-Richtung. Diese Öffnungswinkel werden auch fov (field of view) [51] genannt und können in der Unit „Kamera.dcu“ über die Funktionen „fov_x“ und „fov_y“ abgerufen werden.

Da der beschriebene Algorithmus in seiner Gesamtheit einen großen Rechenaufwand mit sich bringt, wurden die wichtigsten Teilprozeduren in Assembler programmiert. Bei moderater Speicherbelegung (diese wird bestimmt durch die Anzahl, die Größe und die Komplexität der darzustellenden Modelle) erzielt die Kamera auf modernen Rechnern eine recht gute Performance, d.h., die Rechenzeit für eine Speicherabbildung ist sehr kurz. Für die Darstellung der Szene in Abbildung 12 benötigt die Kamera auf einem Athlon64 X2 4800 z. B. 15 ms.

Das bedeutet, in einer Sekunde können rund 66 Bilder dargestellt werden. Die Performance der Kamera wäre hier also mit 66 fps (frames per second) [52] zu beziffern.

3.4 Das Strahlensimulationsprogramm

Das Strahlensimulationsprogramm „3dStrahler.exe“ wurde vom Verfasser dieser Arbeit persönlich und ohne Zuhilfenahme vorgefertigter Programmstrukturen in der Hochsprache Delphi programmiert. Die Ergebnisse des Strahlensimulationsprogramms dienen der Beurteilung und Optimierung von Sensoraufbauten. Da die Planung der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimente größtenteils auf den Ergebnissen von Simulationsrechnungen beruht (vgl. Kapitel 4) und somit dem Simulationsprogramm eine entscheidende Bedeutung bei der Entwicklung eines neuartigen optischen Systems zukommt, werden die Funktionsweise und der logische Aufbau des Strahlensimulationsprogramms im folgenden kurz erläutert.

3.4.1 Grundlagen der Reflexionsberechnung

Bei dem für diese Arbeit programmierten Strahlensimulationsprogramm „3dStrahler.exe“ wird von dem physikalischen Prinzip ausgegangen, dass Lichtstrahlen sich geradlinig durch den Raum bewegen. Das heißt, so lange die Ausbreitungsrichtung eines Lichtstrahl nicht durch irgendeinen physikalischen Vorgang (Brechung, Beugung, Reflexion usw.) verändert wird, lässt sich ein Lichtstrahl mathematisch durch die Gleichung einer Geraden beschreiben. In der linearen Algebra wird eine Gerade g im Raum durch einen dreidimensionalen Ortsvektor $O \rightarrow$ und einen dreidimensionalen Richtungsvektor $R \rightarrow$ definiert [53]:

$$g : \vec{r} = \vec{O} + \lambda \cdot \vec{R} \quad \text{oder} \quad g : \begin{pmatrix} r_x \\ r_y \\ r_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} O_x \\ O_y \\ O_z \end{pmatrix} + \lambda \cdot \begin{pmatrix} R_x \\ R_y \\ R_z \end{pmatrix}$$

(Gleichung 27)

Während bei einer Geraden die Orientierung des Richtungsvektors irrelevant ist, kommt dieser bei der Beschreibung eines Lichtstrahls eine physikalische Bedeutung zu. Sie ist ein entscheidender Parameter bei der Beschreibung der Flugrichtung des Strahles. Ebenso besitzt auch der Ortsvektor bei der Definition eines Lichtstrahls eine physikalische Bedeutung. Er gibt den Ausgangspunkt des Strahles an. Dieser kann entweder ein Emitter sein oder der Flächenschnittpunkt einer voran gegangenen Reflexion.

Im Gegensatz zu einer einfachen Geraden, bei welcher der Ortsvektor frei aus allen Punkten gewählt werden kann, welche die Geradengleichung erfüllen, ist der Ortsvektor bei der Beschreibung eines Lichtstrahls ein Fixpunkt.

Im Programm „3dStrahler.exe“ wird in Bezug auf eine mögliche Richtungsänderung eines Lichtstrahls nur der physikalische Vorgang der Reflexion behandelt.

Eine Reflexion findet dann statt, wenn ein Lichtstrahl auf eine spiegelnde Fläche trifft. Unter einer Fläche ist dabei ein rundum begrenzter Ausschnitt einer Ebene zu verstehen. Für die Berechnung der Reflexion muss daher zunächst von der Ebene ausgegangen werden, in der die betreffende Fläche liegt. In der linearen Algebra kann eine Ebene E im Raum durch einen dreidimensionalen Ortsvektor \vec{O} und einen dreidimensionalen Normalenvektor \vec{N} definiert werden [54]:

$$E: \vec{N} \cdot (\vec{r} - \vec{O}) = 0 \quad \text{oder} \quad E: \begin{pmatrix} N_x \\ N_y \\ N_z \end{pmatrix} \cdot \left(\begin{pmatrix} r_x \\ r_y \\ r_z \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} O_x \\ O_y \\ O_z \end{pmatrix} \right) = 0$$

(Gleichung 28)

Wird der Normalenvektor \vec{N} in den Einheitsvektor \vec{N}_0 umgerechnet und das Skalarprodukt in Gleichung 28 ausmultipliziert, so ergibt sich die Hessesche Normalform [55] der Ebene:

$$E: \vec{N}_0 \cdot \vec{r} - d = 0; \quad \text{mit} \quad |\vec{N}_0| = 1 \quad \text{und} \quad \vec{N}_0 \perp E$$

(Gleichung 29)

Durch den Parameter d , der gleich dem Skalarprodukt des zunächst gewählten Ortsvektors mit dem auf Einheitslänge gebrachten Normalenvektor ist, wird die Ebenengleichung unabhängig von einem Ortsvektor. Dieses ist sinnvoll, da ohnehin jeder in der Ebene befindliche Punkt als Ortsvektor dienen könnte. Der Wert von d gibt bildlich gesehen den (minimalen) Abstand der Ebene vom Ursprung des kartesischen Koordinatensystems an.

Die erste Voraussetzung für die Reflexion eines Lichtstrahls an einer Fläche ist, dass sich die den Strahl beschreibende Gerade mit der die Fläche beschreibenden Ebene schneidet. Dies ist immer dann der Fall, wenn der Richtungsvektor \vec{R} der Geraden nicht senkrecht zu dem Normalenvektor \vec{N}_0 der Ebene steht (Andernfalls verlief die Gerade parallel zur Ebene oder könnte sogar in der Ebene selbst liegen.). Zudem dürfen weder \vec{R} noch \vec{N}_0 der Nullvektor sein (In einem solchen Fall wären die Gerade, bzw. die Ebene gar nicht definiert.). Ein Schnittpunkt existiert also immer dann, wenn das Skalarprodukt von \vec{R} und \vec{N}_0 ungleich null ist. Ist diese Voraussetzung erfüllt, wird sinnvoller Weise auch der Richtungsvektor \vec{R} der Geraden in den Einheitsvektor \vec{R}_0 umgerechnet. So lässt sich direkt der Abstand A des Ortsvektors der Geraden (Ausgangspunkt des Lichtstrahls.) vom Schnittpunkt zwischen Gerade und Ebene (vermeintlicher Auftreffpunkt des Lichtstrahls auf die Fläche.) berechnen.

Dies geschieht durch Einsetzen der modifizierten Geradengleichung (vgl. Gleichung 27) in die Ebenengleichung (vgl. Gleichung 29):

$$\begin{aligned} \vec{N}_0 \cdot (\vec{O} + A \cdot \vec{R}_0) - d &= 0 \\ \Rightarrow A &= \frac{d - \vec{N}_0 \cdot \vec{O}}{\vec{N}_0 \cdot \vec{R}_0} \end{aligned}$$

(Gleichung 30)

Die zweite Voraussetzung für eine Reflexion ist, dass der Wert von A (vgl. Gleichung 30) größer als null ist, da andernfalls der Schnittpunkt der Geraden mit der Ebene nicht in Flugrichtung des betrachteten Lichtstrahls liegen würde.

Falls die ersten beiden Reflexionsbedingungen erfüllt sind, lässt sich der Auftreffpunkt SP^{\rightarrow} des Lichtstrahls auf die betreffende Ebene durch Einsetzen des Wertes A in die modifizierte Geradengleichung berechnen:

$$\vec{SP} = \vec{O} + A \cdot \vec{R}_0$$

(Gleichung 31)

Die dritte Voraussetzung für eine tatsächliche Reflexion eines Lichtstrahls an einer Fläche ergibt sich aus dem Unterschied zwischen Ebenen und Flächen. Nach der mathematischen Formulierung einer Ebene (vgl. Gleichung 29) sind Ebenen im Raum unendlich groß und besitzen keine definierte Form. Flächen dagegen sind rundum begrenzte Ausschnitte aus Ebenen und weisen klar definierte Formen wie z. B. ein Rechteck oder ein Dreieck u. ä. auf. Somit ist auch definiert, ob ein Punkt der Ebene innerhalb der Begrenzungen einer Fläche liegt oder nicht. Zur Beurteilung, ob ein Punkt innerhalb einer Fläche liegt bzw., ob ein Strahl eine bestimmte Fläche trifft, lassen sich verschiedene mathematische Verfahren anwenden. Das Programm „3dStrahler.exe“, bei dem alle Flächen als Dreiecke dargestellt werden, verwendet einen sehr schnellen Algorithmus, der diese Aufgabe über die Beurteilung der relativen Lage des fraglichen Punktes (Auftreffpunkt SP^{\rightarrow}) zu den Begrenzungsgraden des betrachteten Dreiecks löst.

Falls alle drei Voraussetzungen für eine physikalisch sinnvolle Reflexion erfüllt sind, lässt sich die Geradengleichung des an einer Fläche reflektierten Lichtstrahls berechnen. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass die für einen idealen Spiegel allgemein gültige Regel der Reflexion: „Einfallswinkel = Ausfallswinkel“ (wobei Winkel immer zum Lot hin gemessen werden) speziell für die Berechnung im dreidimensionalen Raum mathematisch nicht hinreichend ist. Hinzu kommen hier die Bedingungen, dass 1.) die senkrechte Projektion des Lichtstrahls auf die Ebene bei der Reflexion keine Richtungsänderung erfahren darf und 2.) der reflektierte Lichtstrahl auf derselben Seite der Ebene verlaufen muss, wie der einfallende Strahl.

Im Prinzip kann die Berechnung der Reflexion, unter Einhaltung der oben genannten Bedingungen, so erfolgen, dass der einfallende Lichtstrahl um 180° rotiert wird.

Die Drehachse wird dabei vom Auftreffpunkt (als Ortsvektor) und dem Normalenvektor der Flächenebene (als Richtungsvektor) gebildet.

Der Richtungsvektor des reflektierten Lichtstrahls ergibt sich dann als Differenzvektor zwischen dem rotierten Ortsvektor des einfallenden Lichtstrahls und dem vorher berechneten Ortsvektor des reflektierten Strahls (Auftrittspunkt SP^{\rightarrow}).

Da bei der Reflexionsberechnung die Rotation des einfallenden Lichtstrahls stets um den Winkel 180° bzw. π erfolgt, was einen Spezialfall darstellt, verwendet das Programm „3dStrahler.exe“ einen Algorithmus, der eine der Rotation äquivalente Spiegelung [56] durchführt. Diese Vorgehensweise führt direkter zum gleichen Ergebnis und benötigt eine geringere Rechenzeit. Abbildung 14 veranschaulicht den vom Programm verwendeten Algorithmus.

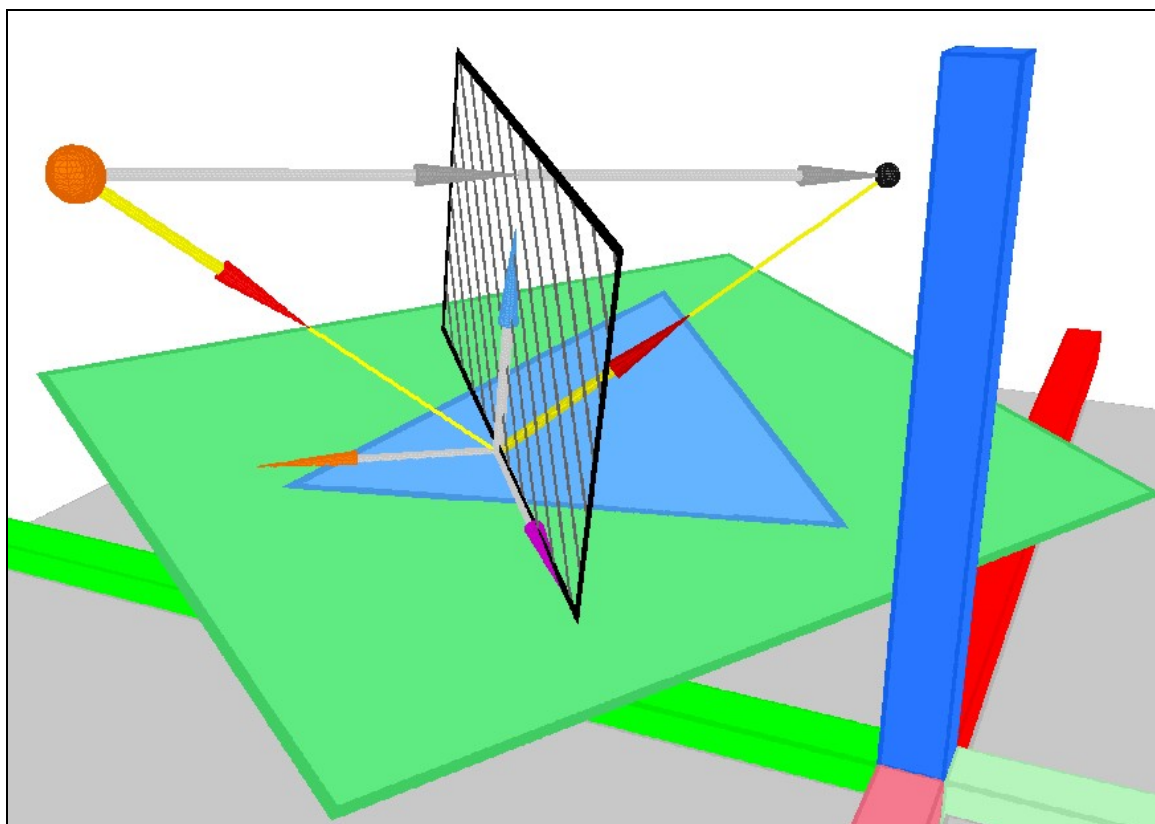


Abb. 14: Reflexion eines Lichtstrahls an einer Dreiecksfläche (hellblau). Das hellgrüne Rechteck stellt die Flächenebene dar. Die schwarz schraffierte Fläche bezeichnet die Ebene, an welcher der Ortsvektor des einfallenden Strahls (Emitter, orangefarbene Kugel) gespiegelt wird. Die schwarze Kugel markiert die Position des gespiegelten Emitters. Die Strahlen werden jeweils durch Pfeile mit roter Spitze und gelbe Geraden dargestellt. Es gilt „Einfallswinkel = Ausfallswinkel“. Die Strahlen liegen in einer Ebene mit dem Normalenvektor der Flächenebene (Pfeil mit hellblauer Spitze). Der linke der beiden Pfeile mit grauer Spitze zeigt den Hilfsvektor, der die Position des Emitters senkrecht auf die Spiegelebene projiziert und parallel zum Projektionsvektor (orangefarbene Spitze) verläuft. Der zweite graue Pfeil ist nach Länge und Richtung identisch mit dem ersten und fußt genau an dessen Spitze; somit zeigt er exakt auf die gespiegelte Emitterposition. Die Punkte Emitterposition, gespiegelte Emitterposition und Auftreffpunkt bilden ein gleichschenkeliges Dreieck, dessen zentrale Höhe parallel zum Flächennormalenvektor liegt, und betraglich gleich dem Abstand des Emitters von der Ebene ist. Die Vektoren mit hellblauer, orangefarbener und magentafarbener Spitze schließen untereinander jeweils Winkel von 90° ein und bilden somit ein Rechtssystem.

Der in Abbildung 14 eingezeichnete Vektorpfeil mit magentafarbener Spitze trage die Bezeichnung $\overrightarrow{QV_0}$ (für Quervektor). Dieser ergibt sich aus dem Kreuzprodukt [57] des Richtungsvektors des einfallenden Strahls mit dem Normalenvektor der Ebene bzw. Fläche:

$$\overrightarrow{QV_0} = \frac{\overrightarrow{R_0} \times \overrightarrow{N_0}}{|\overrightarrow{R_0} \times \overrightarrow{N_0}|}$$

(Gleichung 32)

Der in Abbildung 14 dargestellte Vektorpfeil mit der orangefarbenen Spitze erhält im folgenden die Bezeichnung $\overrightarrow{PV_0}$ (für Projektionsvektor). Dieser wird wie folgt berechnet:

$$\overrightarrow{PV_0} = \overrightarrow{QV_0} \times \overrightarrow{N_0}$$

(Gleichung 33)

Der Projektionsvektor braucht nicht auf Einheitslänge gebracht zu werden, da er das Kreuzprodukt zweier zueinander senkrecht stehender Einheitsvektoren ist und somit ohnehin immer den Betrag eins hat. Mit dem berechneten Auftreffpunkt \overrightarrow{SP} des Lichtstrahls auf die Fläche und dem Normalenvektor $\overrightarrow{PV_0}$ wird nach Gleichung 28 diejenige Ebene definiert, an welcher der Ortsvektor des einfallenden Strahls gespiegelt werden muss. Wird für den Richtungsvektor \overrightarrow{R} einer Geraden nun ebenfalls der Vektor $\overrightarrow{PV_0}$ eingesetzt, und als Ortsvektor der Ausgangspunkt \overrightarrow{O} des einfallenden Lichtstrahls gewählt (vgl. Gleichung 27), so kann die Position des gespiegelten Raumpunktes $\overrightarrow{O_{SP}}$ wie folgt berechnet werden:

$$\begin{aligned} \overrightarrow{O_{SP}} &= \overrightarrow{O} + 2 \cdot \left(\frac{\overrightarrow{SP} \cdot \overrightarrow{PV_0} - \overrightarrow{PV_0} \cdot \overrightarrow{O}}{\overrightarrow{PV_0} \cdot \overrightarrow{PV_0}} \right) \cdot \overrightarrow{PV_0} ; \text{ mit } \overrightarrow{PV_0} \cdot \overrightarrow{PV_0} = 1 \\ \Rightarrow \overrightarrow{O_{SP}} &= \overrightarrow{O} + 2 \cdot \left(\overrightarrow{SP} \cdot \overrightarrow{PV_0} - \overrightarrow{PV_0} \cdot \overrightarrow{O} \right) \cdot \overrightarrow{PV_0} \end{aligned}$$

(Gleichung 34)

Der Richtungsvektor $\overrightarrow{R_{R,0}}$ des reflektierten Lichtstrahls ergibt sich damit zu:

$$\overrightarrow{R_{R,0}} = \frac{\overrightarrow{O_{SP}} - \overrightarrow{SP}}{|\overrightarrow{O_{SP}} - \overrightarrow{SP}|}$$

(Gleichung 35)

Als Ortsvektor für den reflektierten Lichtstrahl wird der zuvor berechnete Auftreffpunkt \overrightarrow{SP} eingesetzt.

In dem Fall, dass ein Strahl senkrecht auf eine Reflexionsfläche trifft, ist bereits Gleichung 32 nicht definiert, da es zu einer Division durch Null kommen würde. Diese Möglichkeit wird vom Programm abgefangen und gegebenenfalls dem Richtungsvektor $\overrightarrow{R_{R,0}}$ der Vektor $-\overrightarrow{R_0}$ zugewiesen.

Sollte bei einer Reflexionsberechnung die Verifizierung der Reflexionsbedingungen nicht erfolgreich sein, wird das für diese Berechnungen zuständige Unterprogramm mit negativem Ergebnis abgebrochen.

3.4.2 Reflexion bei Vorhandensein mehrerer Flächen

Mit Hilfe der bisher beschriebenen Grundlagen der Reflexionsberechnung kann die Reflexion, falls diese auftritt, eines beliebigen Lichtstrahls an einer beliebig im Raum orientierten Fläche berechnet werden. Sind mehrere Flächen im Raum vorhanden, kann jedoch der Fall auftreten, dass mehr als eine Fläche alle Reflexionsbedingungen erfüllt. Daher dürfen diese Flächen nicht unabhängig voneinander betrachtet werden. Die Reflexion wird immer an derjenigen Fläche stattfinden, die zuerst vom betrachteten Lichtstrahl getroffen wird. Aus diesem Grunde stellt sich dem Programm also die Aufgabe, aus all denjenigen Flächen, an denen eine Reflexion stattfinden kann, diejenige zu selektieren, auf die der Strahl als erstes auftrifft. Die anderen Flächen werden dann von ersterer abgeschirmt, da sie quasi im Schatten der tatsächlichen Reflexionsfläche liegen. Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass der für jede Fläche nach Gleichung 30 ermittelte Wert von A jeweils die Weglänge des einfallenden Lichtstrahls bis zum Reflexionspunkt angibt, ist die Selektion der richtigen Reflexionsfläche recht einfach. Die Fläche, welche die kleinste Weglänge, welche aber größer als null sein muss, aufweist, ist die, an der die Reflexion stattfindet. Ist einmal für eine Fläche nach Gleichung 30 ein gültiger (Erfüllung aller Reflexionsbedingungen) Wert für A ermittelt worden, braucht für jede weitere zu überprüfende Fläche die ganze Prozedur der Reflexionsberechnung nur dann weiter geführt zu werden, wenn deren ermittelte Weglänge zum Auftreffpunkt kleiner ist als der bisher errechnete, minimale Wert von A . Sollte dies der Fall sein und die betrachtete Fläche ebenfalls alle Reflexionsbedingungen erfüllen, so wird dem Vergleichswert für A die neue Weglänge zugewiesen.

Die Berechnungen für alle weiteren Flächen werden dann mit diesem neuen Wert verglichen, bis entweder eine Fläche noch eher vom Lichtstrahl getroffen wird, was wiederum zu einem neuen Minimalwert führen würde, oder die Berechnungen für alle Flächen abgeschlossen sind. Als Ergebnis der Berechnungen liegt anschließend entweder die Geradengleichung des reflektierten Strahls vor oder aber das Programm signalisiert, dass keine im virtuellen Raum befindliche Fläche vom Strahl getroffen wird.

Unter der Voraussetzung, dass eine gültige Geradengleichung für den reflektierten Lichtstrahl ermittelt werden konnte, kann mit diesem anschließend genauso verfahren werden wie mit dem ursprünglich vom Emitter ausgesendeten Strahl. Das heißt, alle Berechnungen (für alle betrachteten Flächen) werden mit der neuen Geradengleichung wiederholt. Der reflektierte Strahl wird also nun als einfallender Strahl betrachtet und erneut die nächstfolgende Reflexion errechnet.

Dieses Verfahren wird so lange wiederholt, bis der zuletzt betrachtete Strahl keine Reflexion mehr hervorruft (Das heißt, er verschwindet in der Unendlichkeit des virtuellen Raumes.), oder ein anderes mögliches physikalisches Ereignis eintritt, auf die im folgenden noch eingegangen werden wird. Abbildung 15 zeigt eine mit dem Strahlensimulationsprogramm errechnete Mehrfachreflexion eines Lichtstrahls im Raum, der vier Modellflächen enthält.

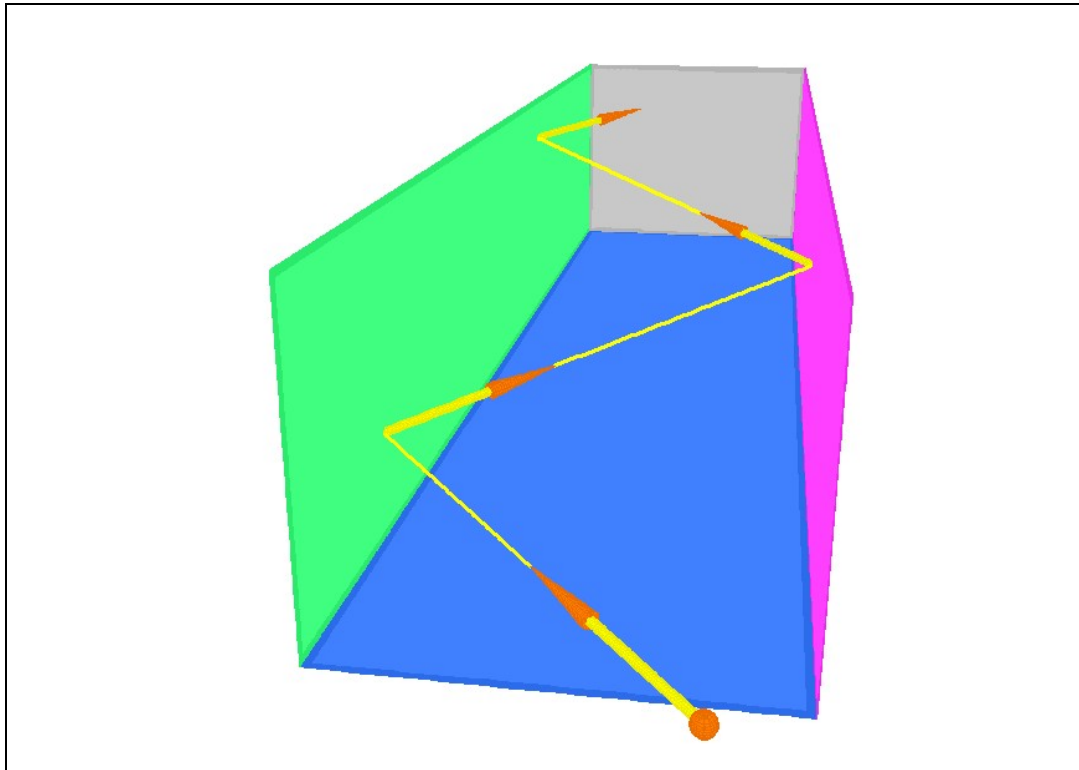


Abb. 15: Der vom Emitter (orangefarbene Kugel) ausgesendete Lichtstrahl wird abwechselnd an der grünen und an der pinken Fläche reflektiert, bis er letztendlich aus dem dargestellten nach oben und vorne geöffneten Quader entweicht.

Mit dem Programm „3dStrahler.exe“ ist es also möglich, den Weg eines Lichtstrahles durch den virtuellen Raum, der mit dem Modell eines optischen Systems gefüllt ist, zu berechnen.

3.4.3 Die Aufgabe des Strahlensimulationsprogramms

Bei der Berechnung von Strahlengängen führt das Programm neben der Bestimmung des Lichtweges selbst noch andere Berechnungen durch, die für die Beurteilung eines optischen Systems zur Gasmessung relevant sind.

Das Ziel eines optischen Aufbaus mit einem Emitter, einer irgendwie gearteten Gasmesszelle und einem Detektor besteht darin, die Intensität des vom Emitter ausgesendeten Lichtes nach Durchgang durch das zu messende Gas mit Hilfe des Detektors zu bestimmen.

Aus dieser Größe lässt sich dann auf die Konzentration des im Gasraum befindlichen Analyten zurückschließen (vgl. Kapitel 3.2).

Das wichtigste physikalische Ereignis, das bei der Berechnung eines Strahlenganges auftreten kann, ist somit das Eintreffen des Lichtstrahls am Detektor. Das Programm zählt jeden auf die Detektorfläche auftreffenden Strahl als Treffer.

Zur Beurteilung, ob ein Treffer auch tatsächlich zur chemischen Informationsgewinnung beiträgt, muss das Strahlensimulationsprogramm jedoch noch andere Eigenschaften des eingetroffenen Lichtstrahls berücksichtigen.

Eine dieser Eigenschaften ist die insgesamt zurückgelegte Wegstrecke eines Strahls. Das Programm vergleicht diese mit einer vorher einzugebenden Mindestweglänge und registriert den Strahl nur dann als informativ, wenn dieser die Mindestweglänge erreicht bzw. überschritten hat. Die Mindestweglänge hängt dabei stark vom Extinktionskoeffizienten und der Konzentration des zu bestimmenden Analyten ab (vgl. Kapitel 3.2). Der Test auf die Mindestweglänge soll sicherstellen, dass der Strahl genug Möglichkeiten hatte, mit dem Analyten physikalisch in Wechselwirkung zu treten.

Die zurückgelegte Weglänge wird zudem auch mit einem benutzerdefinierten Maximalwert verglichen und der betreffende Strahl nur dann als informationshaltig gewertet, wenn dieser die maximal zulässige Weglänge nicht überschritten hat. Der Grund dafür liegt darin, dass unter Umständen die Wechselwirkung des Lichtes mit dem Analyten so stark sein könnte, dass diese zu einer Totalabsorption der Absorptionswellenlänge führen würde. Die Information über die Konzentration des Analyten im Gasraum wäre damit getilgt. Dieses Problem ist allerdings praktisch kaum von Bedeutung.

Eine weitere wichtige Eigenschaft eines Lichtstrahls ist dessen (relative) Intensität. Zum einen erleidet jeder Lichtstrahl einen erwünschten Intensitätsverlust durch Wechselwirkung mit dem Analyten, zum anderen können aber auch unerwünschte Intensitätsverluste auftreten. Diese passieren z. B. dann, wenn eine Reflexion stattfindet. Nur im Idealfall werden bei einer Reflexion 100% der auftreffenden Lichtenergie reflektiert; im Realfall ist der Reflexionsgrad stark von der Art und der Beschaffenheit der Reflexionsfläche (und der Wellenlänge des auftreffenden Lichtes [58]) abhängig. Um dem Rechnung zu tragen, wird im Simulationsprogramm jeder Fläche bzw. jedem Modell ein anzugebender Reflexionskoeffizient zugeordnet, welcher in der Regel Werte zwischen null und eins annimmt. Ein hochreflektierender Silberspiegel könnte z. B. durch den Wert 0,99 repräsentiert werden, eine matte Aluminiumoberfläche z. B. durch den Wert 0,3. Auf diese Weise kann auch der Effekt der Streuung Berücksichtigung finden, indem für den Reflexionskoeffizienten ein niedrigerer Wert angesetzt wird. Im allgemeinen wird beim Simulationsprogramm jedoch lediglich davon ausgegangen, dass bei jeder Reflexion eine Teilabsorption des Lichtstrahls durch die Reflexionsfläche stattfindet. Somit wird die Intensität des Strahls bei jeder Reflexion um einen gewissen Prozentsatz vermindert. Bei Austritt des Lichtstrahls aus dem Emitter wird dem Strahl zunächst der (relative) Intensitätswert eins zugeordnet.

Wird der Strahl dann z. B. dreimal von Flächen mit einem jeweiligen Reflexionskoeffizienten von 0,95 reflektiert, und trifft danach auf den Detektor, so registriert dieser den Strahl mit einer Restintensität von $0,95^3 \approx 0,857$, also 85,7%. Ob der Strahl vom Programm als informativ gewertet wird, hängt vom Vergleich der ankommenden Intensität mit einer vom Benutzer anzugebenden Mindestintensität ab.

Diese wiederum wird sinnvoller Weise bestimmt durch die erwartete Sensitivität des verwendeten Detektors. Liegt die Intensität des am Detektor eintreffenden Strahls höher als die Mindestintensität, so wird dem absoluten Informationsgehalt des Strahls der Wert seiner Restintensität zugeordnet.

Bei Strahlen, die bereits während ihrer Reise durch den virtuellen Raum bei Reflexionen soviel an Intensität verloren haben, dass diese unter die vorgegebene Mindestintensität fällt, wird die Berechnung des Strahlenganges abgebrochen. Der betreffende Strahl wird dann als „verhungert“ gewertet. Dasselbe gilt auch für Strahlen, bei denen die Anzahl der Reflexionen einen vom Benutzer vorgegebenen Maximalwert überschreitet. Dieses ist deswegen sinnvoll, weil sich mit dem Programm auch der Idealfall von einhundertprozentiger Reflexion simulieren lässt. Durch den Maximalwert an erlaubten Reflexionen wird so verhindert, dass z. B. ein Strahl, der unendlich oft zwischen zwei Flächen hin und her geworfen würde, zu einer Endlosschleife im Programm führt.

Ein weiteres physikalisches Phänomen, welches einem Lichtstrahl widerfahren kann, ist die Absorption an einer Fläche. Rechnerisch gesehen wird dies durch den Spezialfall simuliert, dass eine Fläche den Reflexionskoeffizienten null zugewiesen bekommt. Während die Intensität eines Strahls bei Reflexionskoeffizienten größer null und kleiner eins rein mathematisch nie auf den Wert null absinken kann, wird dieses durch einen echten Absorber erzwungen. Die Auswirkungen auf die weitere Berechnung des Strahlengangs sind identisch mit dem oben beschriebenen Fall von mehrmaliger Teilabsorption, wodurch die Intensität unter die Mindestintensität sank. Absorbierte Strahlen werden allerdings gesondert gezählt.

Einen Sonderfall der Absorption stellt die Selbstabsorption durch den Emitter dar. Dieser wird immer durch eine Kugel dargestellt (Punktquelle), deren Radius vom Benutzer anzugeben ist (entsprechend der Größe der Glühbirne, LED oder sonstiger Lichtquelle). Besonders bei Analyten, die auf einer Wellenlänge absorbieren, die auch von Glas absorbiert wird (vgl. Kapitel 2), darf diese mögliche Störung des Lichtweges nicht vernachlässigt werden. In anderen Fällen kann zur Abschaltung dieses Programmpunktes für den Radius des Emitters einfach ein sehr kleiner Wert gewählt werden.

Zusammenfassend ist zu sagen, dass das Programm „3dStrahler.exe“ berechnen kann, ob in einem simulierten optischen System ein Strahl auf den Detektor trifft oder nicht. Falls es sich um einen Treffer handelt, beurteilt das Programm, ob der Lichtstrahl eine Information über die Konzentration des Analyten enthält. Dieses geschieht durch eine Auswertung der Weglänge und der Intensität des Lichtstrahls.

Falls der Strahl nicht den Detektor erreicht, kann das verschiedene Ursachen haben, die jeweils vom Programm benannt werden. Der Strahl kann a) in der Unendlichkeit des Raumes verschwunden sein, b) absorbiert worden sein, c) vom Emitter selbstabsorbiert worden sein oder d) verhungert sein. Für den Fall d) gibt es wiederum unterschiedliche Ursachen. Der Strahl kann 1.) zuviel Intensität verloren haben, 2.) zu oft reflektiert worden sein oder 3.) eine zu große Wegstrecke zurück gelegt haben.

Die eigentliche Aufgabe des Simulationsprogramms besteht darin, die Brauchbarkeit von optischen Systemen für die Gasanalyse zu beurteilen. Da der Bau realer optischer Systeme teuer und zeitaufwendig ist, und die Beurteilung von deren Brauchbarkeit im Realfall letztlich nur durch ebenfalls teure und zeitaufwendige Messungen möglich ist, kann durch die quasi kostenlose und schnelle Simulation viel Zeit und Geld eingespart werden. Die Aussagekraft der Simulationsergebnisse ist selbstverständlich abhängig von der realgetreuen Modellierung der Systeme.

Um ein optisches System quantitativ beurteilen zu können, reicht die Berechnung der Informationsgewinnung aus einem einzigen Lichtstrahl logischerweise nicht aus. Bei jedem Aufleuchten sendet ein kugelförmiger Emitter unendlich viele Lichtstrahlen in alle erdenklichen Raumrichtungen ab. Zur Erfassung des (Licht-) Energieflusses vom Emitter zum Detektor des optischen Systems wird daher vom Simulationsprogramm quasi eine numerische Integration über sehr viele Lichtstrahlen durchgeführt, welche den bzw. die gesamten Raumwinkel in endlichen Schritten abtasten. Für diese Scanning-Routine ist es vorteilhaft, die Richtungsvektoren der emittierten Lichtstrahlen zunächst in Polarkoordinaten (Kugelkoordinaten) [59] zu definieren. Auf diese Weise kann leicht eine geschachtelte Programmschleife durchlaufen werden, in welcher die beiden Raumwinkel vom Wert null an schrittweise inkrementiert werden, bis jeweils die Werte 180° (für Alpha) bzw. 360° (für Phi) erreicht bzw. überschritten werden. Der Raumwinkel Alpha bezeichnet hierbei den Winkel, den die Projektion des betrachteten Strahls auf die XY-Ebene mit der X-Achse bildet. Der Winkel Phi gibt den Winkel zwischen dem Strahl und der XY-Ebene an. Der Polarkoordinatenradius wird stets mit dem Wert eins initialisiert, um bei der folgenden Umrechnung des Strahls auf kartesische Koordinaten für dessen Richtungsvektor direkt einen Einheitsvektor zu erhalten.

Für jede einzelne Einstellung von Alpha und Phi wird dann der Strahlengang des dazugehörigen Lichtstrahls nach dem oben beschriebenen Algorithmus berechnet. Die Daten aller Strahlen werden gesammelt und ausgewertet, um schließlich eine statistische Aussage über die Qualität des optischen Systems treffen zu können.

Die Winkelschrittweiten $d\alpha$ und $d\varphi$, mit welcher die Raumwinkel bei dieser Prozedur inkrementiert werden, sind vom Benutzer einzustellen. Die Abbildungen 16a und 16b zeigen jeweils den gleichen Emitter und Abschnitte aller aus dieser Lichtquelle austretenden Strahlen, deren Lichtweg vom Simulationsprogramm dann weiter berechnet wird. In Abbildung 16a betragen die Winkelschrittweiten jeweils 5° , in Abbildung 16b jeweils 2° .

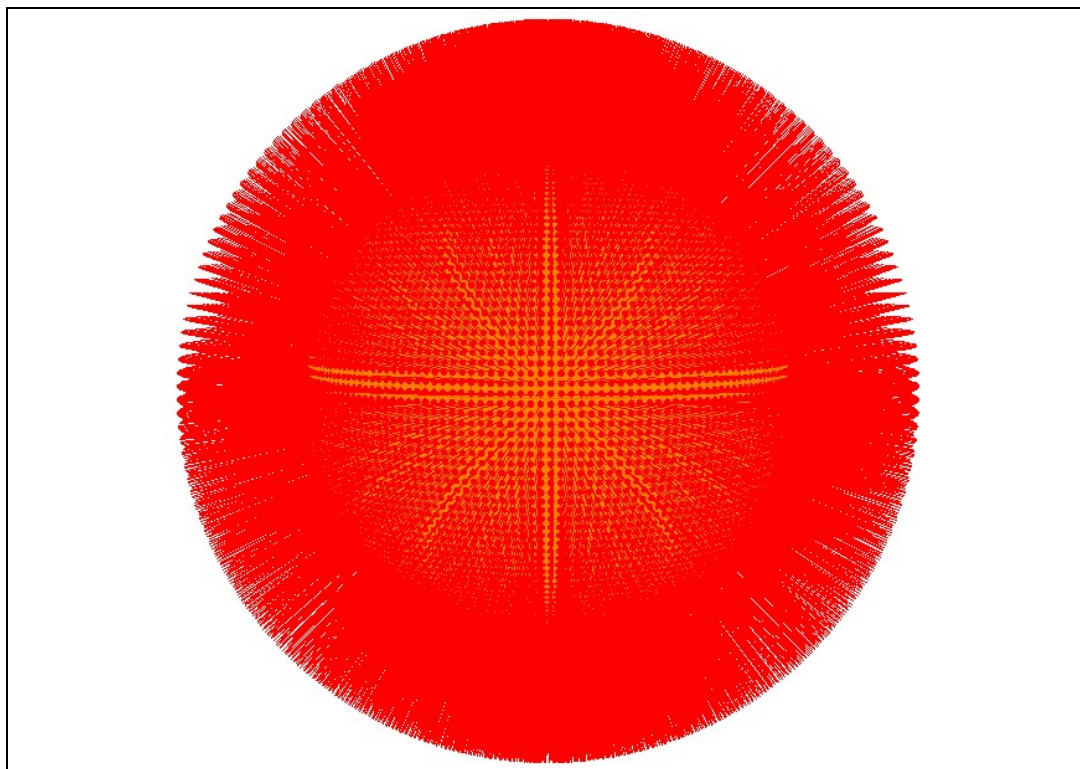
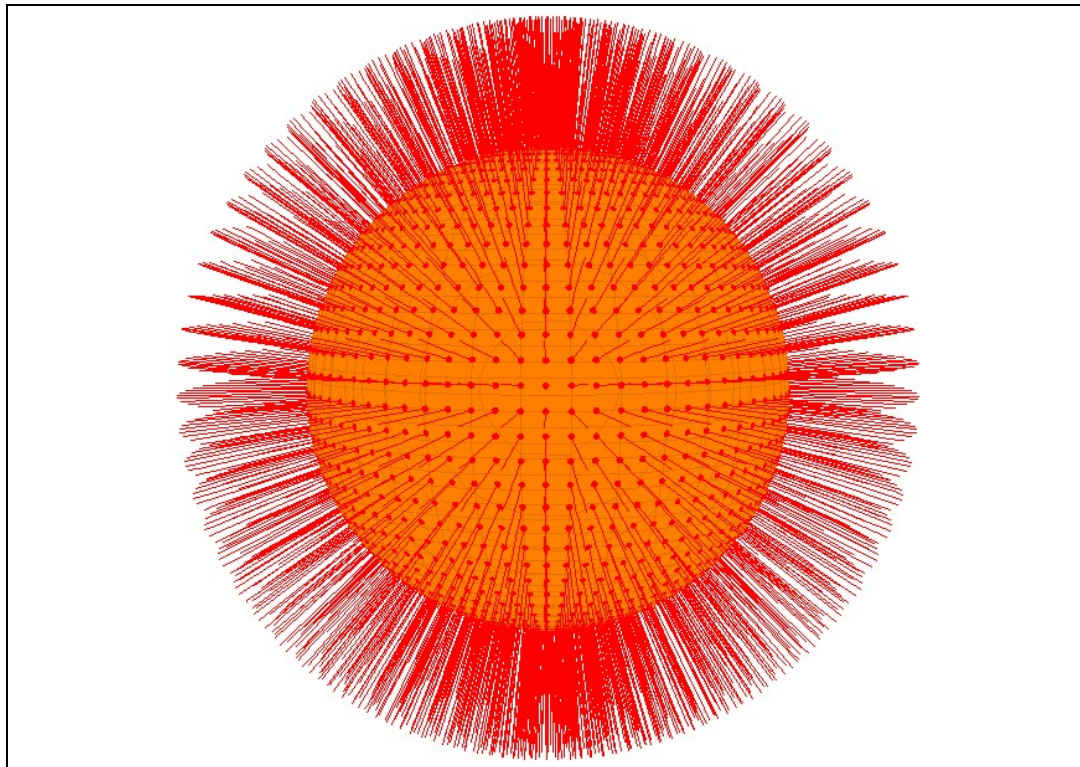


Abb. 16a und 16b: Modelle einer Punktquelle bei unterschiedlicher Strahlungsdichte.

Wie aus den Abbildungen 16a und 16b zu entnehmen ist, steigt die simulierte Strahlungsdichte aus dem Emitter mit kleiner werdenden Winkelschrittweiten in der Computerschleife stark an, was dementsprechend auch die Genauigkeit der Simulation erhöht. Mit wachsender Strahlungsdichte, d.h. mit wachsender Anzahl zu berechnender Strahlen, nehmen selbstverständlich jedoch auch der Rechenaufwand und damit die Rechenzeit zu.

Abbildung 17 zeigt ein Beispiel für ein einfaches optisches System und eine begrenzte Anzahl der mit dem Simulationsprogramm berechneten Lichtstrahlen. Die Summe aller Strahlen stellt den Fluss der Lichtenergie durch das System dar. Zur Veranschaulichung des Energieverlustes bei Reflexion dient die Farbe der einzelnen Lichtstrahlen. Die Strahlen sind zunächst rot und werden nach jeder Reflexion etwas dunkler dargestellt. So ist insgesamt zu erkennen, dass die Lichtstrahlen in der Nähe des Emitters (orangefarbene Kugel) noch volle Intensität besitzen, die Lichtenergie aber zum Detektor (grüne Fläche) hin abfällt. In dem in Abbildung 17 dargestellten Beispiel wurde mit einem Reflexionskoeffizienten von 0,98 für die Innenfläche des gebogenen Rohres (hellblau, transparent) gerechnet. Bei einem niedrigeren Reflexionsvermögen der Oberfläche wäre der Intensitätsverlust entsprechend höher.

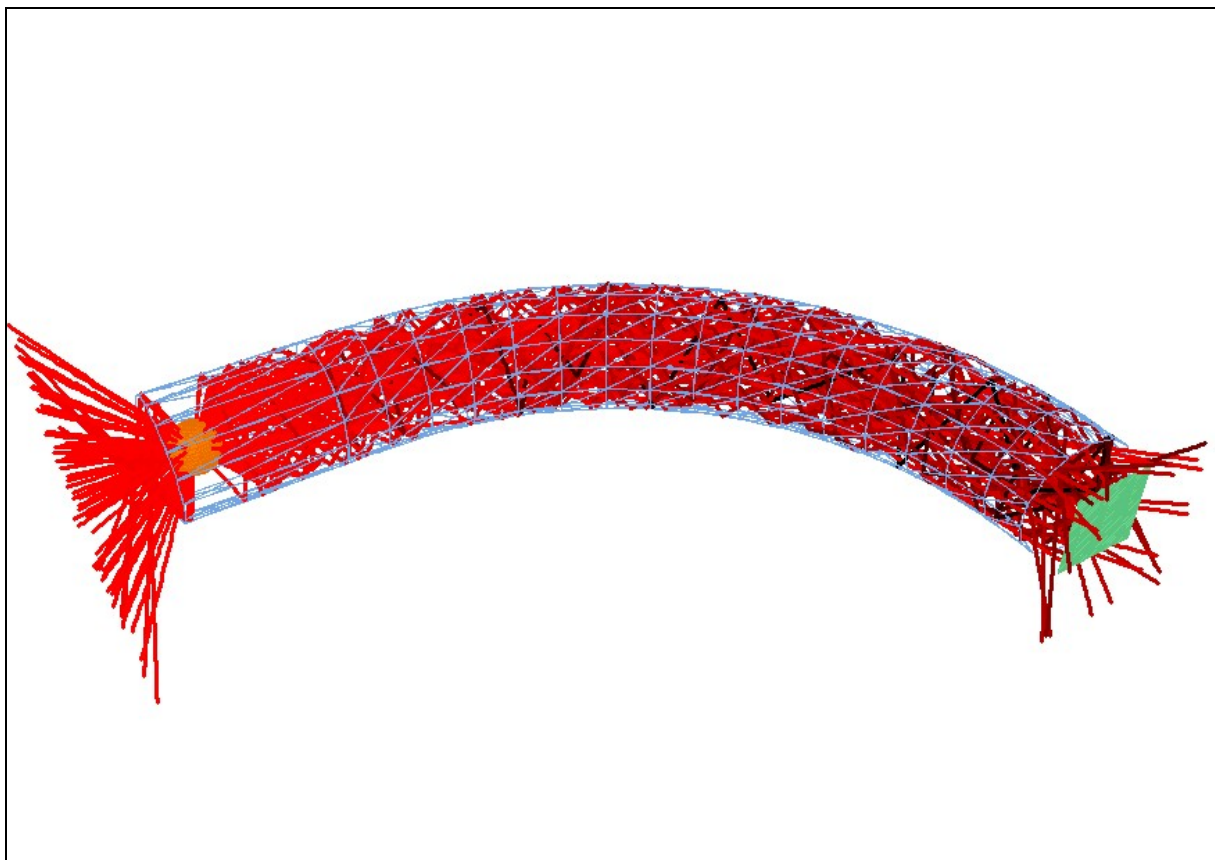


Abb. 17: Simulation eines optischen Systems aus Emitter (orangefarbene Kugel), Messzelle (gebogenes Rohr, hellblau transparent) und Detektor (grünes Rechteck). Die zum offenen Rohrende hin emittierten Strahlen, wie auch diejenigen, die am Detektor vorbei fliegen, verschwinden in der Unendlichkeit. Viele Strahlen treffen den Detektor und werden dort mit ihrer Restintensität registriert. Vom Emitter selbst absorbierte, so wie „verhungerte“ Strahlen sind nicht eingezeichnet. Zur Wahrung der Übersichtlichkeit wurden nur begrenzte Anzahlen der Trefferstrahlen und der verschwundenen Lichtstrahlen in der Zeichnung berücksichtigt.

Die Ergebnisse der Simulation (Die einzelnen Strahlengänge können auf Wunsch abgespeichert werden.), welche vom Strahlensimulationsprogramm in einer Textdatei abgespeichert werden, bestehen aus folgenden Werten:

- 1.) Anzahl der emittierten Strahlen
- 2.) Anzahl der vom Emitter selbstabsorbierten Strahlen
- 3.) Anzahl der im Unendlichen verschwundenen Strahlen
- 4.) Anzahl der „verhungerten“ Strahlen
(separiert nach dem Grund des Strahlengangabbruchs)
- 5.) Anzahl der absorbierten Strahlen
- 6.) Anzahl der Treffer (auf den Detektor)
- 7.) Prozentanteil der Treffer an der Anzahl aller Strahlen

Die weiteren Werte beziehen sich nur auf die Treffer, d.h., auf diejenigen Strahlen, die tatsächlich vom Detektor registriert worden sind. Für diese wird eine interne Statistik geführt.

- 8.) durchschnittliche Anzahl von Reflexionen
- 9.) durchschnittliche Weglänge
- 10.) durchschnittliche Intensität
- 11.) Prozentanteil der detektierten Intensität von der emittierten Intensität
- 12.) Anzahl der informationshaltigen Strahlen
- 13.) Prozentanteil der informationshaltigen Strahlen von der Gesamtanzahl der emittierten Strahlen
- 14.) Prozentanteil der informationshaltigen Strahlen an der Anzahl der Treffer
- 15.) Prozentanteil der detektierten Intensität nur informationshaltiger Strahlen von der insgesamt emittierten Intensität (gesamter Informationsgehalt)
- 16.) Prozentanteil der detektierten Intensität nur informationshaltiger Strahlen von der detektierten Intensität (relativer Informationsgehalt)

Anhand der errechneten Werte können dann unterschiedliche optische Systeme miteinander verglichen werden. Entscheidende Bedeutung haben hierbei die Simulationsergebnisse Nr. 9, 11 und 15 (vgl. Kapitel 4.3).

Letztendlich liegt die Entscheidung, ob ein optisches System zur Gasanalyse geeignet ist oder nicht, beim Experimentator; das Strahlensimulationsprogramm kann jedoch im Vorhinein entscheidende Beurteilungskriterien für oder gegen ein bestimmtes System liefern. Besonders beim theoretischen Vergleich zweier Systeme ist das Simulationsprogramm hilfreich. So können z. B. kleine Veränderungen an einem System auf ihre Auswirkung auf die detektierbare Intensität untersucht werden. Zu beachten bleibt aber, dass das Simulationsprogramm im Prinzip nur relative Werte liefert, da z. B. die Gesamtenergie, die ein Emitter abstrahlt, in der Praxis stark von dessen Betriebsspannung abhängt.

3.4.4 Benutzung des Strahlensimulationsprogramms

Wie bereits im vorangegangenen Kapitel beschrieben, verlangt das Programm „3dStrahler.exe“ einige Benutzerangaben, um eine Simulation realitätsnah durchführen zu können. Das Programm besitzt eine Benutzeroberfläche, auf welcher die notwendigen Eingaben gemacht werden können, sowie einige Einstellungen zum Ablauf des Rechenalgorithmus. Das wichtigste für die Simulation ist selbstverständlich das Modell des optischen Systems. Dieses wird in Form von Dateien angegeben, welche vom Simulationsprogramm eingelesen werden. Alle Modelle müssen so aufgebaut sein wie in Kapitel 3.3.1 für die Modelle der Unit „Kamera.dcu“ beschrieben wurde. Der Unterschied ist allerdings, dass die Modelle nur aus Dreiecksflächen bestehen dürfen und die Informationen über die Farbgebung und die Orientierung der Flächen weggelassen werden müssen. Die Unit „Kamera.dcu“ bietet hier die Möglichkeit, Modelle von dem einen in das andere Format (und umgekehrt) umzukonvertieren. Beliebige Modelle, die mit der Unit „Kamera.dcu“ erstellt wurden, dürfen auch höhere Polygone als Flächen enthalten, da diese bei der Umkonvertierung automatisch in Dreiecke zerlegt werden.

Sobald alle Angaben auf der Benutzeroberfläche gemacht sind, kann die Simulationsrechnung gestartet werden. Anschließend fordert das Programm zum Speichern der Ergebnisdatei auf. Für das in Abbildung 17 dargestellte Beispiel eines optischen Systems sieht die Ergebnisdatei (für eine eingestellte Mindestweglänge von 80 LE (mm) und eine minimale Intensität von 0,1) wie folgt aus:

emittierte Strahlen: 16200
selfabsorbed: 4659
vanished: 9077
verhungert: 634
wg Anzahl Reflexionen: 0
wg Weglaenge: 0
wg Intensitaet: 634
(Mehrfachnennungen moeglich !)
absorbiert: 0
Treffer: 1830
Prozentsatz Treffer: 11.296
Kontrollsumme: ok
durchschnittliche Anzahl von Reflexionen: 9.775
durchschnittliche Weglaenge: 95.061
durchschnittliche Intensitaet: 0.828
Gesamtanteil der detektierten Intensitaet (%) : 9.351
Anzahl informationshaltiger Strahlen: 1005
ges. Anteil informationshaltiger Strahlen (%) : 6.204
rel. Anteil informationshaltiger Strahlen (%) : 54.918
ges. Informationsgehalt (%) : 4.715
relativer Informationsgehalt (%) : 50.419

Die Gesamtlänge des gebogenen Rohres beträgt in dem Beispiel 60 LE (mm), der Innendurchmesser acht LE. Der Durchmesser des Emitters, der zwei LE weit in das Rohr eingeschoben ist, liegt bei 3,3 LE. Die Detektorfläche, die sich zwei LE hinter dem Rohrausgang befindet, ist 5,5 x 5,5 LE groß.

Wird dasselbe System mit einem Parabolspiegel ausgestattet (D.h., es wird noch eine weitere Modelldatei mit einem entsprechenden Datensatz hinzugefügt, die ebenfalls einen Reflexionskoeffizienten von 0,98 zugewiesen bekommt.), welcher einen Großteil der Emitterstrahlen in Richtung des Rohreinganges parallelisiert, bringt die Simulation folgende Ergebnisdatei hervor:

emittierte Strahlen: 16200
selfabsorbed: 2
vanished: 10162
verhungert: 0
wg Anzahl Reflexionen: 0
wg Weglaenge: 0
wg Intensitaet: 0
(Mehrfachnennungen moeglich !)
absorbiert: 0
Treffer: 6036
Prozentsatz Treffer: 37.259
Kontrollsumme: ok
durchschnittliche Anzahl von Reflexionen: 4.86
durchschnittliche Weglaenge: 71.024
durchschnittliche Intensitaet: 0.908
Gesamtanteil der detektierten Intensitaet (%) : 33.817
Anzahl informationshaltiger Strahlen: 664
ges. Anteil informationshaltiger Strahlen (%) : 4.099
rel. Anteil informationshaltiger Strahlen (%) : 11.001
ges. Informationsgehalt (%) : 3.305
relativer Informationsgehalt (%) : 9.772

Der Vergleich der beiden Simulationsergebnisse zeigt, dass sich durch den Einbau des Parabolspiegels die auf den Detektor treffende Lichtintensität um mehr als das Dreifache erhöht (von 9,35% auf 33,82%). Da die parallelisierten Strahlen jedoch mit viel weniger Reflexionen (durchschnittlich 4,86 gegenüber durchschnittlich 9,77) durch das gebogene Rohr gelangen, verringert sich auch die mittlere Weglänge der Strahlen (von 95,06 auf 71,02 LE).

Aufgrund der Tatsache, dass die Mindestweglänge für einen informationshaltigen Lichtstrahl jedoch auf 80 LE festgelegt wurde, sinkt in diesem Fall der vom Simulationsprogramm als „gesamter Informationsgehalt“ angegebene Wert von 4,71% auf 3,3%. Die folgerichtige Entscheidung für den Experimentator wäre also hier einen Parabolspiegel zu benutzen, das Rohr (am Eingang) aber um einige Millimeter zu verlängern.

Solche Veränderungen lassen sich dann erneut simulieren und die Simulationsergebnisse der verschiedenen Setups können für die Entscheidungsfindung herangezogen werden.

Zur Veranschaulichung der Strahlenparallelisierung zeigt Abbildung 18 ein Modell des Emitters mit Parabolspiegel, sowie einige emittierte (und parallelisierte) Lichtstrahlen. Das Modell des Parabolspiegels weist in der Zeichnung allerdings eine niedrigere Auflösung auf, als in der Simulation verwendet wurde.

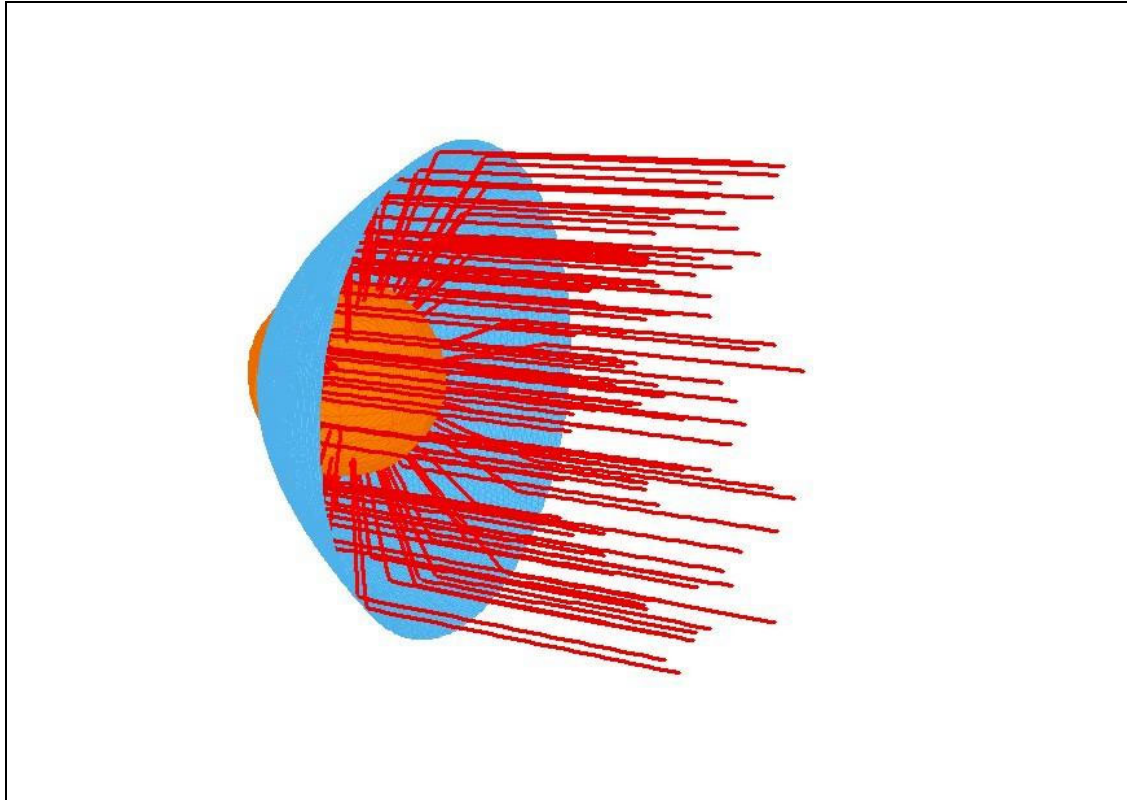


Abb. 18: Sofern ein Emitter (orangefarbene Kugel) im Brennpunkt eines Parabolspiegels (hellblau) steht, werden emittierte Strahlen, die auf den Reflektor treffen, in Richtung der Längsachse des Parabolspiegels parallelisiert.

3.4.5 Grenzen des Modells

Die realen Abläufe in einem nicht dispersiven optischen System zur Gasmessung lassen sich natürlich nicht mit einhundertprozentiger Präzision simulieren. Es sind einige Näherungen und Vereinfachungen notwendig, um eine Simulationsrechnung in akzeptabler Rechenzeit bewältigen zu können.

Das Programm „3dStrahler.exe“ simuliert z. B. den Emitter als Punktstrahler. In der Realität werden als Emitter häufig Glühbirnen eingesetzt, deren Strahlung von stromdurchflossenen Glühfäden emittiert wird. Je nach Wicklung und Anordnung dieser Glühfäden weicht die Glühbirne dann mehr oder weniger vom Modell eines Punktstrahlers ab.

Die meisten realen Emittier besitzen zudem eine Schutzhülle aus Glas oder Kunststoff, um die Strahlungsquelle vor äußeren Einflüssen zu schützen. An diesen Schutzhüllen wird für die meisten Strahlen eine Richtungsänderung durch Lichtbrechung auftreten, deren Ausmaß auch noch abhängig von der Wellenlänge der Strahlung ist. Auch können Glühbirnen gleicher Bauart und aus derselben Charge in der Dicke ihrer Glasumhüllungen variieren [60, 25]. Dasselbe gilt für die exakte Anordnung und Länge der Glühfäden bzw. des Glühfadens.

Eine weitere Näherung des Simulationsprogramms besteht in der diskontinuierlichen Verteilung der emittierten Lichtstrahlen (vgl. Abbildung 18), die bereits behandelt wurde. Im Prinzip führt das Programm eine Berechnung für monochromatische Strahlung durch, wobei diese Annahme eine sehr hohe Qualität des dispergierenden Elementes im optischen System voraussetzt (Es wird davon ausgegangen, dass ein Interferenzfilter im Detektor integriert ist.). Das Strahlensimulationsprogramm benutzt für die Berechnung des Intensitätsabfalls bei einer Reflexion geschätzte Reflexionskoeffizienten für die reflektierenden Flächen. Die angenommene Größenordnung für diese Koeffizienten zwischen 0,95 und 0,99 wird für den Fall von IR-Strahlung und Metalloberflächen von der Literatur bestätigt [61, 58]. Eine eventuelle Winkelabhängigkeit der Reflexionskoeffizienten wird jedoch nicht berücksichtigt.

Auch die Auftreffwinkel, unter denen die detektierten Lichtstrahlen auf die Detektorfläche fallen, werden vom Strahlensimulationsprogramm nicht berücksichtigt. Je nachdem, um welche Art Detektor es sich handelt, könnte dessen Sensitivität aber vom Auftreffwinkel des einfallenden Lichtes abhängig sein.

Das Strahlensimulationsprogramm geht von den idealisierten Bedingungen aus, dass der Gasraum staubfrei ist und alle Reflektionsflächen sauber und unverkratzt sind. Da die Berechnung diffuser Reflexionen mit dem Programm nicht möglich ist, können abweichende Bedingungen lediglich durch die Einstellung der Simulationsparameter (Herabsetzen der maximalen Weglänge und der Reflexionskoeffizienten) teilweise kompensiert werden.

Gekrümmte Reflexionsflächen können mit dem Programm „3dStrahler.exe“ nur durch Annäherung als Summe von Dreiecken modelliert werden. Zur optimalen Simulation wäre eine Aufteilung der betrachteten Fläche in unendlich viele, infinitesimal kleine Dreiecke notwendig. Eine weitere Grenze des Modells ergibt sich also aus der zwar sehr großen, aber dennoch begrenzten Größe des Arbeitsspeichers, in dem die Daten der einzelnen Flächen abgelegt werden müssen.

Die Aussagekraft der Simulationsergebnisse bleibt letztlich mit dem Vergleich durch Experimente zu überprüfen. Bei starken Abweichungen der realen Messergebnisse von denen durch das Simulationsprogramm vorausgesagten, relativen Verhältnisse verschiedener optischer Systeme, wäre dann über ein Upgrade des Programms, bzw. über eine Verfeinerung der Modelle nachzudenken. Die Aussage, dass eine Simulation immer von vereinfachten und idealisierten Bedingungen ausgehen muss, behält jedoch, egal wie detailliert eine Simulation durchgeführt wird, stets ihre Gültigkeit.

3.5 Parabolspiegel

Als sehr häufig in optischen Systemen eingesetzte Komponenten gehören (symmetrische) Parabolspiegel zu den am weitest verbreiteten Reflektortypen. Sie sind in verschiedenen Ausführungen und Preisklassen im Handel erhältlich. Da auch innerhalb dieser Arbeit Parabolspiegel in Sensorsystemen verwendet werden, und diese Sensorsysteme mit Hilfe des Strahlensimulationsprogramms beurteilt werden sollen, ist eine genaue Kenntnis der Geometrie dieser Reflektoren unerlässlich. Die folgenden theoretischen Überlegungen beschäftigen sich daher eingehend mit der Modellierung und den optischen Eigenschaften von Parabolspiegeln mit unterschiedlichen Konstruktionsparametern.

Parabolspiegel können als Rotationskörper von zweidimensionalen Parabelfunktionen aufgefasst werden (vgl. Abbildung 18 in Kapitel 3.4.4). Zur Charakterisierung eines Parabolspiegels bezüglich seiner Fähigkeit, durch jeweils einmalige Reflexion Strahlen, die von seinem Brennpunkt ausgehen, zu parallelisieren, genügt daher eine zweidimensionale Betrachtung. Die daraus gewonnenen Erkenntnisse lassen sich dann aufgrund der Rotationssymmetrie des Körpers auf alle Rotationsebenen und damit auf den dreidimensionalen Raum übertragen.

Der Brennpunkt einer zweidimensionalen Parabel befindet sich im Ursprung eines zweidimensionalen, kartesischen Koordinatensystems. Die Parallelisierung der vom Brennpunkt ausgehenden Lichtstrahlen soll in Richtung der positiven Y-Achse erfolgen. Da die ganzzahlige Funktion zweiten Grades wegen der geforderten Rotationssymmetrie achsensymmetrisch zur Y-Achse sein muss, dürfen in ihrer Gleichung nur gerade Exponenten von x auftreten [62]. Diese Forderungen führen zu folgender Gleichung:

$$Y(x) = a \cdot x^2 - b \quad ; \quad \text{mit } a > 0 \quad \text{und} \quad b > 0$$

(Gleichung 36)

Der Strahl, der den Brennpunkt in Richtung der positiven X-Achse verlässt, muss von der Parabel so reflektiert werden, dass er anschließend in Richtung der positiven Y-Achse verläuft. Dieser Strahl muss bei der Reflexion also einen Knick um 90° erfahren, was nur dadurch möglich ist, dass er auf ein reflektierendes Hindernis trifft, welches im 45° -Winkel verläuft. Mit $\tan(45^\circ) = 1$ bedeutet dies, dass die Steigung der gesuchten Funktion an ihrer rechtsseitigen Nullstelle gleich eins sein muss. Die rechtsseitige Nullstelle x_0 der Funktion ergibt sich nach:

$$\begin{aligned} a \cdot x_0^2 - b &= 0 \\ \Rightarrow x_0 &= \sqrt{\frac{b}{a}} \end{aligned}$$

(Gleichung 37)

Die Steigung der Funktion an jeder beliebigen Stelle ist gegeben durch die Ableitung der Funktion, welche durch Gleichung 38 formuliert wird.

$$Y'(x) = 2 \cdot a \cdot x$$

(Gleichung 38)

Mit der Forderung $Y'(x_0) = 1$ ergibt sich:

$$2 \cdot a \cdot \sqrt{\frac{b}{a}} = 1$$

$$\Rightarrow b = \frac{1}{4 \cdot a}$$

(Gleichung 39)

Somit wird eine Kurvenschar erhalten, die alle symmetrischen Parabeln beschreibt, deren Brennpunkt jeweils im Koordinatenursprung liegt, und welche vom Brennpunkt ausgehende Strahlen in Richtung der positiven Y-Achse reflektieren:

$$Y_a(x) = a \cdot x^2 - \frac{1}{4 \cdot a} \quad ; \quad \text{mit } a > 0$$

(Gleichung 40)

Während die Kurvenschar mathematisch gesehen für alle Werte von x zwischen $-\infty$ und $+\infty$ definiert ist, ergibt sich in der Praxis die Einschränkung, dass ein realer Parabolspiegel nur eine endliche Größe aufweisen kann. Sei d der Öffnungsdurchmesser des Parabolspiegels, so kann x in der Formel nur noch Werte zwischen $-d/2$ und $d/2$ annehmen. Der Öffnungsdurchmesser kann bei der Konstruktion eines Parabolspiegels z. B. dadurch vorgegeben sein, dass dieser möglichst passend in ein Rohr mit entsprechendem Innendurchmesser eingeschoben werden soll.

Eine zweite Einschränkung ergibt sich daraus, dass ein im Brennpunkt der Parabel befindlicher kugel- bzw. kreisförmiger Emitter in der Realität stets einen endlichen Radius r_E besitzt, der größer als null ist. Alle vom Brennpunkt ausgehenden Strahlen, welche bei x -Werten, die dem Betrag nach kleiner als r_E sind, auf die Parabel treffen, und von dort in Richtung der positiven Y-Achse reflektiert werden, treffen anschließend unweigerlich wieder auf den Emitter. Dieser Vorgang wurde in Kapitel 3.4.3 unter der Bezeichnung Selbstabsorption behandelt. In der Praxis weisen käufliche Parabolspiegel in der Regel ohnehin kreisförmige Löcher auf, durch welche der Emitter von hinten in den Parabolspiegel eingeschoben werden kann; man denke dabei z. B. an den Aufbau einer Taschenlampe oder eines Autoscheinwerfers. Fakt ist, dass die Reflexionsfläche an diesen Löchern, deren Radius mindestens so groß sein muss wie der Emitterradius, unterbrochen wird.

Zusammen mit der Berücksichtigung der Selbstabsorption bedeutet dies für den zweidimensionalen Fall, dass eine Parabel nach Gleichung 40 nur für x -Werte, die dem Betrag nach größer oder gleich r_E sind, zu definieren ist.

Mit den beiden technischen Vorgaben des Öffnungsdurchmessers d und des Emitterradius r_E ergibt sich der Definitionsbereich einer parallelisierenden Parabel nach Gleichung 40 zu:

$$r_E \leq |x| \leq \frac{d}{2}$$

(Gleichung 41)

Selbst mit der nach Gleichung 41 definierten Einschränkung für eine technische Vorgabe von Öffnungsdurchmesser und Emitterradius sind nach Gleichung 40 unendlich viele Parabeln konstruierbar, die alle den Zweck erfüllen, vom Brennpunkt ausgehende Strahlen zu parallelisieren. Diese Parabeln unterscheiden sich jedoch in ihrer Charakteristik, welchen Anteil der emittierten Strahlung sie zu parallelisieren vermögen.

In der zweidimensionalen Betrachtung sendet der im Brennpunkt befindliche Emitter über einen Gesamtwinkel von 360° in jede beliebige Richtung Strahlen aus. Wegen der Achsensymmetrie der Parabeln wird im folgenden nur der Winkelbereich von -90° bis 90° betrachtet, wobei der Winkel von der positiven X -Achse aus abgetragen wird, und eine Drehung gegen den Uhrzeigersinn einem positiven Winkel entspricht. Die Betrachtung des von der Y -Achse aus gesehen linksseitigen Winkelbereichs liefert analoge Ergebnisse.

Der Mindestwinkel, unter welchem eine Reflexion erfolgen kann, sei α . Dieser ist dadurch gekennzeichnet, dass das Auftreffen des betreffenden Strahles auf die Parabel an der Stelle geschieht, wo $x = r_E$ ist. Alle Strahlen, die in einem kleineren Winkel abgestrahlt werden, verschwinden entweder im Unendlichen oder werden vom Emitter selbstabsorbiert, da sie der in Gleichung 41 definierten Voraussetzung nicht genügen. Der Mindestwinkel α ist frei wählbar zwischen Werten, die größer als -90° und kleiner als 90° sind. Durch die Auswahl von α wird eine Parabel der Schar gemäß Gleichung 40 eindeutig festgelegt. Es gilt dann:

$$\tan \alpha = \frac{Y_a(r_E)}{r_E} = \frac{a \cdot r_E^2 - \frac{1}{4 \cdot a}}{r_E}$$

$$\Rightarrow a^2 - \frac{\tan \alpha}{r_E} \cdot a - \frac{1}{4 \cdot r_E^2} = 0$$

(Gleichung 42)

Gleichung 42 stellt eine normalisierte quadratische Gleichung dar, die mit Hilfe der p-q-Formel [63] gelöst werden kann. Im betrachteten Fall ergeben sich auf diese Weise zwar immer zwei Lösungen der quadratischen Gleichung, die Eindeutigkeit der Lösung ist jedoch dadurch sicher gestellt, dass stets $a > 0$ gelten muss (vgl. Gleichung 40). Somit ergibt sich der Funktionsparameter a zu:

$$a = \frac{\tan \alpha + \sqrt{\tan^2 \alpha + 1}}{2 \cdot r_E} = \frac{\tan \alpha + \frac{1}{\cos \alpha}}{2 \cdot r_E} ; \text{ mit } 1 + \tan^2 \alpha = \frac{1}{\cos^2 \alpha}$$

(Gleichung 43)

Nach der Berechnung von a kann nun auch der Maximalwinkel β bestimmt werden, bis zu welchem noch eine Reflexion an der Parabel stattfinden kann. Alle Strahlen, die in einem größeren Winkel als β abgestrahlt werden, können nicht mehr auf die Parabel treffen, da diese aufgrund ihrer Durchmesser-Beschränkung zwangsläufig auch einer Längen-Beschränkung unterliegt. Der Maximalwinkel β ist gegeben durch die Stelle der Parabel, an der $x = d/2$ ist. Dort gilt:

$$\tan \beta = \frac{Y_a\left(\frac{d}{2}\right)}{\frac{d}{2}} = \frac{a \cdot \left(\frac{d}{2}\right)^2 - \frac{1}{4 \cdot a}}{\frac{d}{2}}$$

$$\Rightarrow \beta = \arctan \frac{Y_a\left(\frac{d}{2}\right)}{\frac{d}{2}}$$

(Gleichung 44)

Für die technischen Vorgaben $r_E = 1,65$ mm (Dies ist eine typische Größe für eine Miniaturglühlampe oder eine LED.) und $d = 8$ mm (Das ist der Innendurchmesser der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten elektropolierten Edelstahlrohre.) zeigt Abbildung 19 als Anschauungsbeispiele die Parabeln mit den Mindestwinkeln von $\alpha = -30^\circ$ ($\beta = 18,9^\circ$) und $\alpha = 15^\circ$ ($\beta = 54,9^\circ$), die in der Zeichnung um 90° gedreht dargestellt sind.

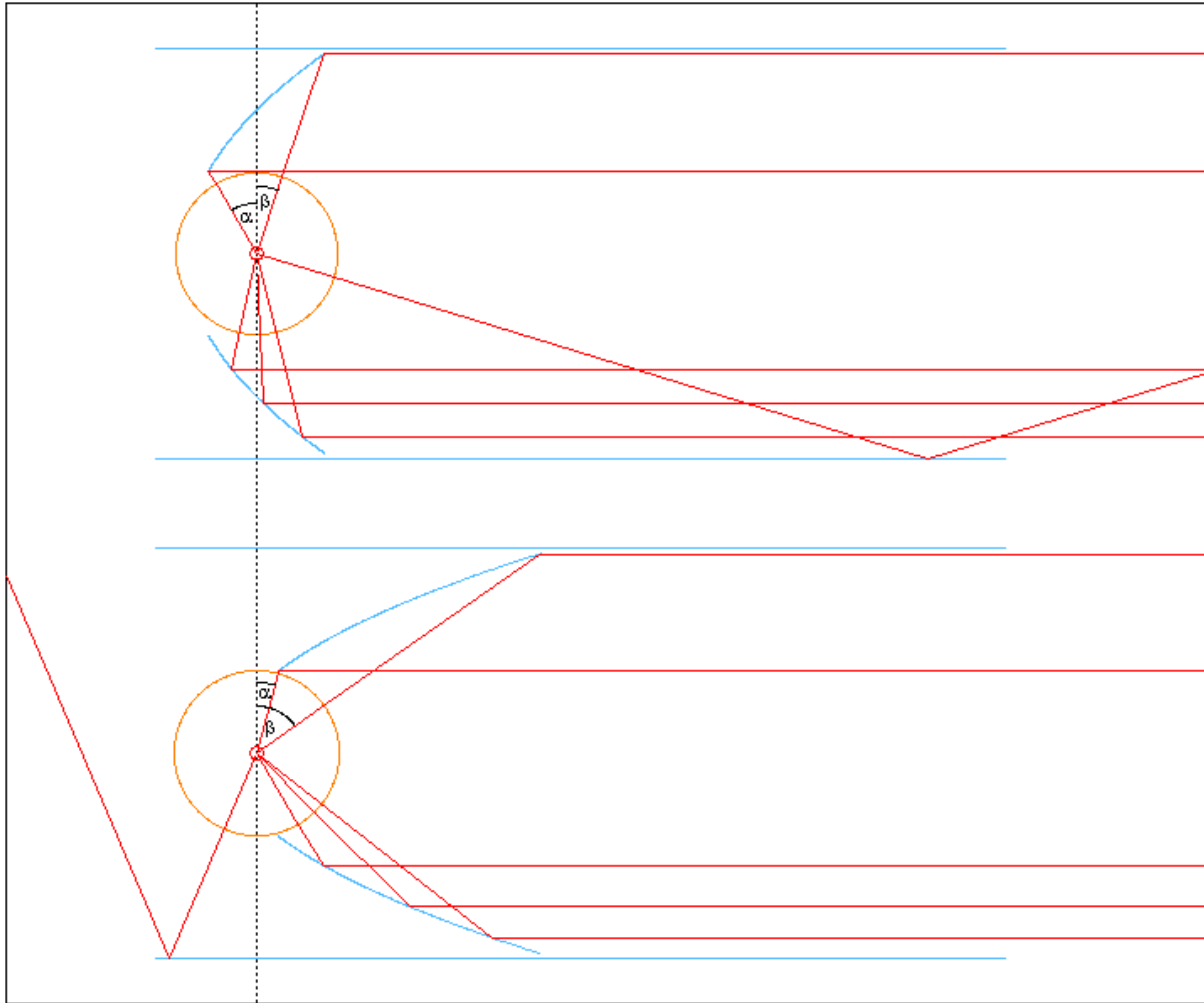


Abb. 19: Die horizontalen, hellblauen Geraden stellen jeweils die reflektierenden Innenwände eines Rohres mit einem Innendurchmesser von 8 mm dar. Zur besseren Übersichtlichkeit wurden diese auf der Y-Achse leicht versetzt eingezeichnet. Die Reflexionsflächen der Parabeln sind (in der Aufsicht) ebenfalls hellblau dargestellt. Die orangefarbenen Kreise repräsentieren jeweils einen Emittor mit einem Radius von 1,65 mm. Die roten Linien stellen Strahlen dar, die von den Emittoren in verschiedene Richtungen abgestrahlt werden. Die Parabel oben weist einen Mindestwinkel von -30° auf, die untere wurde mit einem Mindestwinkel von $\alpha = 15^\circ$ berechnet. Die Winkel sind jeweils von der gestrichelt eingezeichneten vertikalen Geraden abzutragen. Jeweils im oberen Teil der beiden Beispielparabeln sind die Strahlen eingezeichnet, die jeweils den beiden Grenzwinkeln α und β zugeordnet sind. In den unteren Teilen sind je drei Strahlen im Winkelbereich zwischen α und β eingezeichnet, um die Parallelisierung der Strahlen zu verdeutlichen. Bei jeder Reflexion wird die Bedingung: Einfallswinkel = Ausfallswinkel erfüllt. Im oberen Beispiel ist im unteren Teil zusätzlich noch ein Strahl eingezeichnet, der einem Winkel größer als Beta entspricht und der dementsprechend nicht (bezüglich der X-Achse) parallelisiert werden kann. Im unteren Beispiel ist außerdem ein Strahl dargestellt, der einen Abstrahlwinkel kleiner als Alpha aufweist, und daher ebenfalls nicht auf die Parabel trifft, so dass auch hier keine Parallelisierung durch Reflexion an der Parabel stattfinden kann.

Wie aus Abbildung 19 ersichtlich wird, unterscheiden sich die beiden Beispielparabeln deutlich in ihrer Form und Länge. Die obere, gestauchte Parabel parallelisiert die Strahlen, die vorwiegend mit vertikaler Komponente abgestrahlt werden. Hier wird auch noch ein Teil der Strahlung parallelisiert, der vom Emittor aus gesehen nach hinten (links) emittiert wird.

Die untere Parabel vermag nur einen Teil der Strahlung zu parallelisieren, die nach vorne (rechts) emittiert wird. Dafür ist hier der Öffnungswinkel der Strahlung, die zwar nicht parallelisiert, aber nach vorne abgestrahlt wird, wesentlich kleiner als bei der oberen Parabel. Dieser Öffnungswinkel beträgt nach Abbildung 19 gleich $180^\circ - 2 \cdot \beta$.

Unabhängig davon lässt sich der Parallelisierungswinkel einer Parabel nun als Differenz zwischen den Grenzwinkeln Beta und Alpha quantifizieren (Man beachte, dass im oberen Beispiel in Abbildung 19 der Winkel α negativ abzutragen ist.). Abbildung 20 zeigt die Auftragung des Parallelisierungswinkels gegen den eingestellten Mindestwinkel α für die oben genannten technischen Vorgaben.

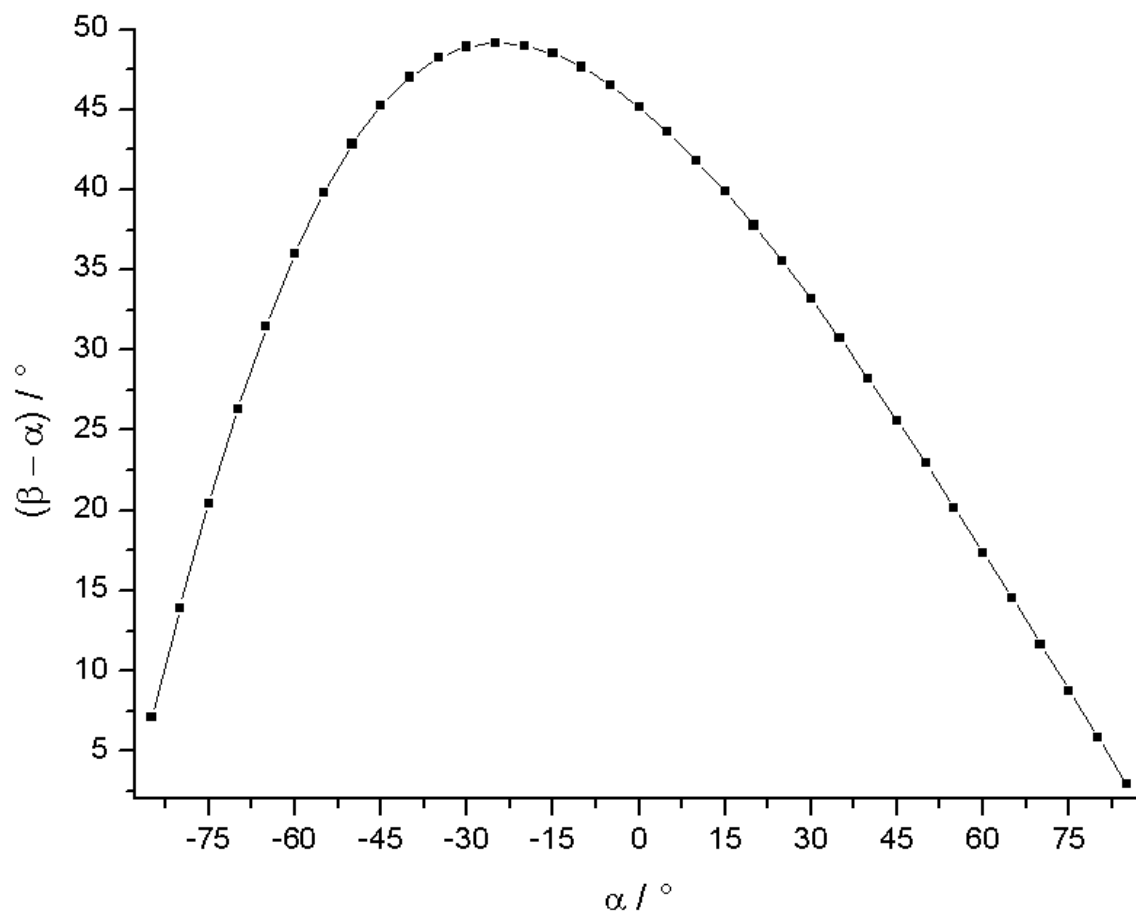


Abb. 20: Auftragung des Parallelisierungswinkels $(\beta - \alpha)$ gegen den Mindestwinkel α für die technischen Vorgaben $r_E = 1,65 \text{ mm}$ und $d = 8 \text{ mm}$, und Definition der Parabelschar nach Gleichung 40.

In Abbildung 20 ist zu erkennen, dass der Parallelisierungswinkel offensichtlich ein Maximum durchläuft. Dieses liegt für die gegebenen Einstellungen bei $\alpha \approx -25^\circ$. Mit dem dazugehörigen Wert des maximalen Parallelisierungswinkels von ca. $49,15^\circ$ bedeutet dies, dass für den betrachteten Fall der maximal durch einen Parabolspiegel erreichbare Parallelisierungsgrad $\approx 49,15^\circ / 180^\circ \approx 0,273 = 27,3\%$ beträgt. Zur weiteren Deutung dieses Ergebnisses zeigt Abbildung 21 für den betrachteten Fall die Auftragung des Maximalwinkels β gegen den Mindestwinkel α .

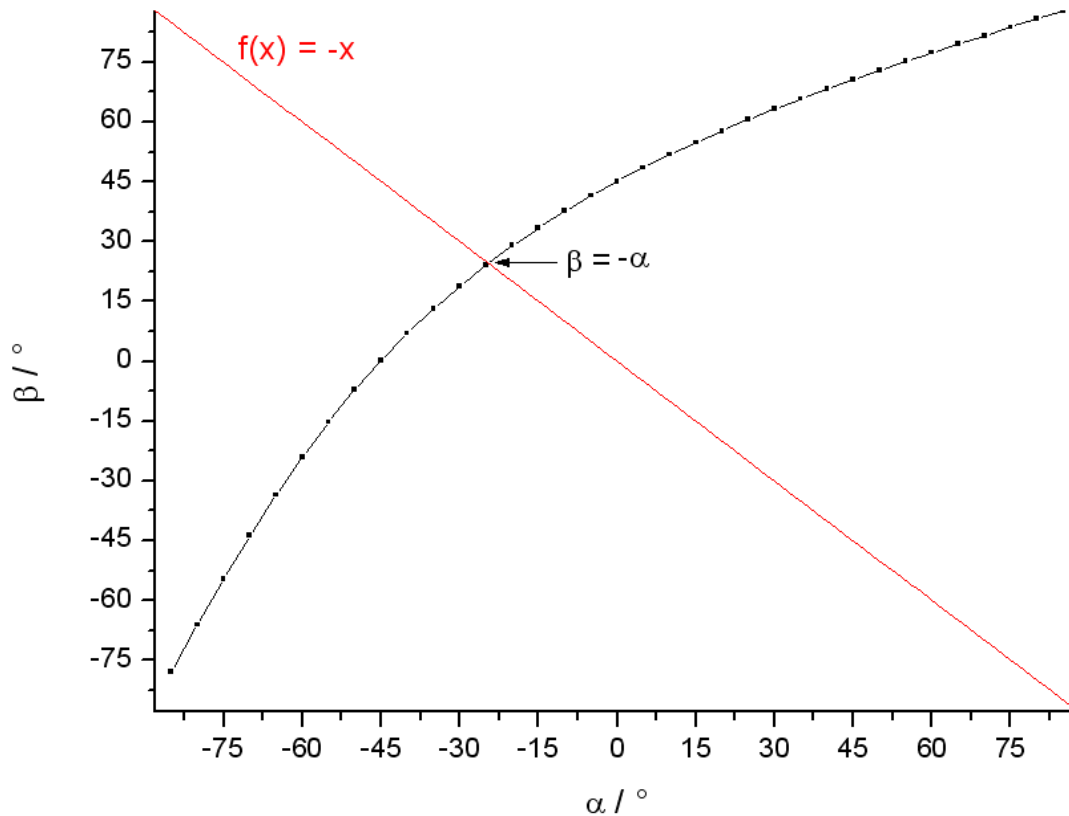


Abb. 21: Auftragung des Maximalwinkels β gegen den Mindestwinkel α und Schnitt mit der Funktion $f(x) = -x$. Die der Auftragung zugrunde liegenden Werte sind dieselben wie in Abbildung 20.

Der in Abbildung 21 eingezeichnete Schnittpunkt der linear interpolierten Auftragung mit dem Graphen der Funktion $f(x) = -x$ liegt annähernd an der gleichen Stelle auf der X-Achse wie das Maximum in Abbildung 20. Diese Beobachtung legt den Schluss nahe, dass die maximal parallelisierende Parabel nach Gleichung 40 durch diejenige Einstellung von a erhalten wird, bei der $\beta = -\alpha$ gilt (vgl. Gleichungen 43 und 44).

Mit der trigonometrischen Beziehung $\tan(-\varphi) = -\tan \varphi$ und den Gleichungen 42 und 44 ergibt sich aus dieser Maximalbedingung:

$$\frac{a \cdot \left(\frac{d}{2}\right)^2 - \frac{1}{4 \cdot a}}{\frac{d}{2}} = -\frac{a \cdot r_E^2 - \frac{1}{4 \cdot a}}{r_E} \Rightarrow a_{\max} = \sqrt{\frac{\frac{1}{2} \cdot d + r_E}{d^2 \cdot r_E + 2 \cdot d \cdot r_E^2}} = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot r_E \cdot d}}$$

(Gleichung 45)

Die Lösung der Gleichung für die betrachteten technischen Vorgaben liefert $a_{\max} \approx 0,195$ und damit $\alpha = -\beta \approx -24,58^\circ$. Der ideale Parabolspiegel weist daher eher Ähnlichkeit mit der in Abbildung 19 dargestellten gestauchten Parabel auf als mit der gestreckten Version in derselben Abbildung.

Die durch Gleichung 45 formulierte, vermutete Bedingung für den maximalen Parallelisierungsgrad einer Parabel nach Gleichung 40 lässt sich mit Hilfe der Differenzialrechnung beweisen. Dafür ist der Parallelisierungswinkel ($\beta - \alpha$) in Abhängigkeit vom Parameter a zu formulieren. Die Auffindung des Maximums ist dann durch Bildung der Ableitung bezüglich a und die Bestimmung von deren Nullstelle möglich, welche bei Richtigkeit der Vermutung identisch zu a_{\max} (vgl. Gleichung 45) sein muss. Da eine Nullstellen-Bestimmung nicht immer trivial ist, kann der Beweis umgekehrt auch dadurch erbracht werden, indem gezeigt wird, dass es sich bei a_{\max} tatsächlich um die Nullstelle der errechneten Ableitung handelt. Der Rechenweg des so geführten mathematischen Beweises ist im Anhang 7.1 dargelegt. Zur Veranschaulichung des Sachverhaltes zeigt Abbildung 22 die Auftragung des Parallelisierungswinkels gegen den Funktionsparameter a , sowie die entsprechende numerische Ableitung (vgl. Kapitel 4.2) nach a .

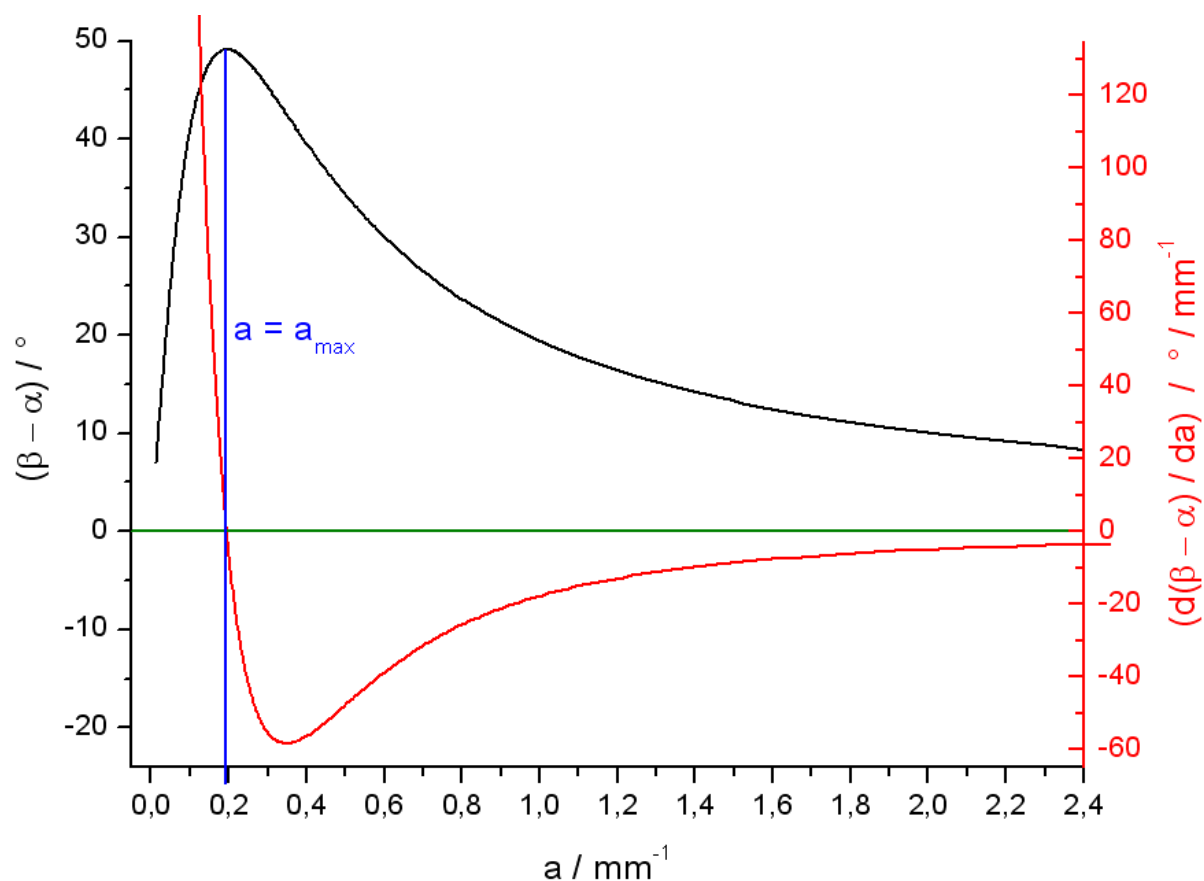


Abb. 22: Auftragung des Parallelisierungswinkels (schwarz) und dessen Differenzierung (rot) nach a gegen den Funktionsparameter a . Es gelten die oben genannten technischen Vorgaben. An der Stelle a_{\max} befinden sich sowohl das Maximum des schwarzen Graphen als auch die Nullstelle des roten Graphen. Der Wert von a_{\max} stimmt mit dem nach Gleichung 45 errechneten Wert überein. Die Ableitung weist nur eine einzige Nullstelle auf, der Graph konvergiert mit zunehmendem a gegen null (vgl. Anhang 1). Hierzu sei jedoch darauf hingewiesen, dass nach Gleichung 43 a in dem Definitionsbereich liegen muss, der von $\alpha > -90^\circ$ und $\alpha < 90^\circ$ begrenzt wird.

Wie aus den Abbildungen 20 und 22 ersichtlich wird, können unter gegebenen technischen Voraussetzungen Parabolspiegel von unterschiedlicher Qualität bezüglich ihres Parallelisierungsvermögens konstruiert werden, wobei ein großer Parallelisierungswinkel eine gute Zweckerfüllung des Parabolspiegels bedeutet. Die optimale Konstruktion eines Parabolspiegels nach Gleichung 40 wird diesbezüglich durch die Erfüllung von Gleichung 45 erreicht, die den dafür zu wählenden Funktionsparameter a_{\max} als Funktion der technischen Vorgaben darstellt.

Käufliche Parabolspiegel, die den technischen Vorgaben $d \leq 8 \text{ mm}$ und $r_E \geq 1,65 \text{ mm}$ genügen, sind in einer großen Zahl unterschiedlicher Variationen im Handel erhältlich. Die meisten dieser Reflektoren sind von der oben beschriebenen Art, dass der Emittor von hinten in den Parabolspiegel eingeschoben werden muss. Dies wirft das Problem auf, dass die Glühlampe oder LED exakt im (normalerweise unbekanntem) Brennpunkt des Parabolspiegels platziert werden muss, um eine Teilparallelisierung der Strahlung zu gewährleisten. Abbildung 23 zeigt die in Abbildung 19 dargestellten Parabelmodelle mit jeweils um einen Millimeter nach links bzw. rechts vom Brennpunkt verschobenem Emittor.

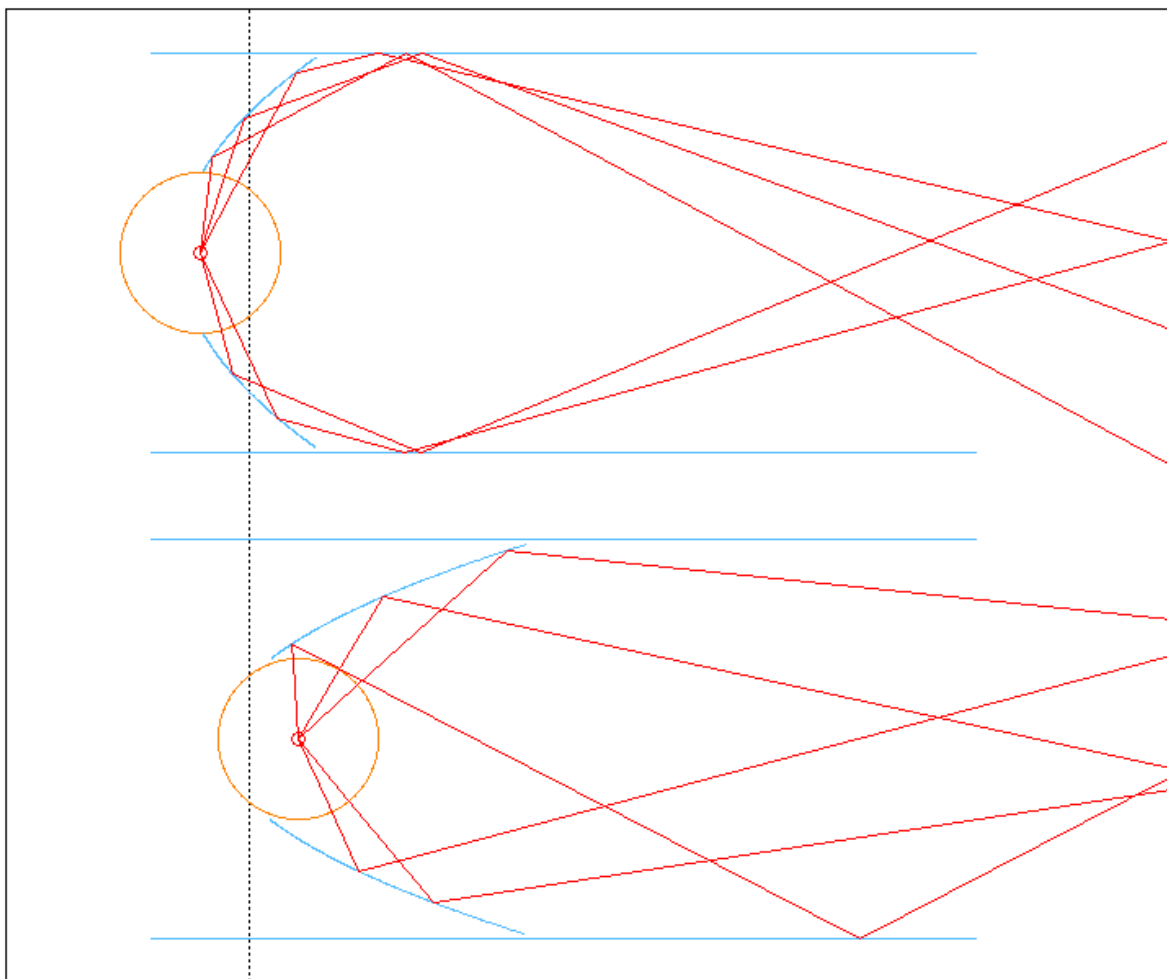
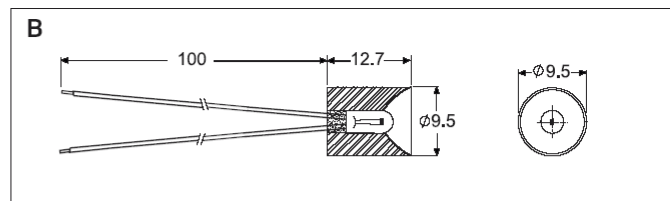


Abb. 23: Parabeln (vgl. Abbildung 19) mit entlang der jeweiligen Rotationsachse verschobenen Emittoren. Eine Verschiebung nach links (oberes Beispiel) führt zur Reflexion der Strahlen nach außen, während eine Verschiebung des Emittors nach rechts (unteres Beispiel) zu Reflexionen in Richtung der Rotationsachse führt.

Wie aus Abbildung 23 ersichtlich wird, führt eine Positionierung des Emitters an einer Stelle, die nicht dem Brennpunkt der Parabel entspricht, zur Aufhebung der Parallelisierungsfähigkeit eines Parabolspiegels. Wird der Emitter nicht (nur) entlang der Rotationsachse verschoben, sondern findet (zudem) eine Deplatzierung gegenüber dem Brennpunkt auf der Y-Achse (bezogen auf Abbildung 19) statt, so wird die Strahlung zudem auch noch unsymmetrisch reflektiert. Um dieses Problem für den Anwender auszuschließen, bietet z. B. die Firma Gilway Technical Lamp Systeme an, bei denen der Emitter bereits in den Parabolspiegel integriert geliefert wird. Abbildung 24 zeigt einen Ausschnitt aus dem Online-Katalog [64] der genannten Firma.



MR3 Reflector Lamp Assemblies

Line No.	Part No.	Volts	Amps	M.S.C.P.	Life Hours	Filament Type	Vacuum or Gas	Reflector Finish	Drawing
3	MR3-4115	5.0	0.115	.150	40,000	CC-6	V	Polished Aluminum	B
4	MR3-1600	5.0	0.060	.050	100,000	CC-6	V	Polished Aluminum	B
5	MR3-1150	5.0	0.115	.150	40,000	CC-6	V	Polished Aluminum	B
6	MR3-1088	5.0	0.140	.200	18,000	CC-6	V	Polished Aluminum	B
7	MR3-1089	5.0	0.150	.350	5,000	CC-6	V	Polished Aluminum	B

These assemblies are also available with Gold Coated Reflector, Ellipsoidal Reflector or Custom Lead Length.

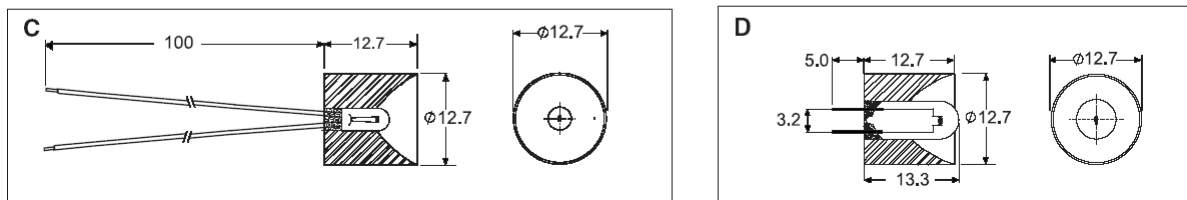


Abb. 24: Ausschnitt aus dem Online-Katalog der Firma Gilway Technical Lamp.

Abbildung 24 ist zu entnehmen, dass auch im Handel Parabolspiegel sowohl von eher gestreckter (Zeichnung C, Emitterposition nahe dem Scheitelpunkt der Parabel) als auch von eher gestauchter (Zeichnung D, Emitterposition zentral) Natur erhältlich sind, deren Charakteristika in Abbildung 19 verdeutlicht wurden. Unter der Annahme, dass diese Parabolspiegel den Zweck der Lichtparallelisierung erfüllen sollen, muss hier allerdings davon ausgegangen werden, dass die in den Zeichnungen dargestellten Parabeln nicht maßstabsgerecht gezeichnet sind, da vor allem von der in Zeichnung D dargestellten Version sicherlich keine hohe Parallelisierungsfähigkeit zu erwarten wäre.

Eine graphische Analyse der Zeichnung D (vgl. Anhang 2) ergibt, dass das dort dargestellte System eher Ähnlichkeit mit dem zweiten Beispiel aus Abbildung 23 aufweist, bei welchem die Strahlung in Richtung der Rotationsachse reflektiert wird, anstatt parallelisiert zu werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Modell MR3-1089 verwendet, welches mit Hilfe eines einfachen Adapters an die verwendeten Edelstahlrohre angeschlossen werden kann.

Unter den Voraussetzungen, dass in der technischen Ausführung des Herstellers der Emitter sich tatsächlich im Brennpunkt des Reflektors befindet, und dass dieser tatsächlich den Zweck der Strahlenparallelisierung erfüllt (Das Gerät ist sehr teuer: 12,48 \$ pro Stück), kann die dem Parabolspiegel zugrunde liegende zweidimensionale Parabel als Funktion nach Gleichung 40 eingeordnet werden. Dies ist notwendig, um das System für das Strahlensimulationsprogramm (vgl. Kapitel 3.4) möglichst realitätsnah modellieren zu können. Dazu wird anhand eines gelieferten Gerätes abgeschätzt, dass der Startwinkel α ca. -36° beträgt und dementsprechend der Winkel β bei ca. 12° liegt, was bezüglich der Parallelisierungsfähigkeit einer optimal parallelisierenden Parabel beachtlich nahe kommt (vgl. Abbildung 20). Über Gleichung 43 kann dann aus dem Startwinkel α der Funktionsparameter a für Gleichung 40 zu $a \approx 0,1544 \text{ mm}^{-1}$ berechnet werden. In denen durch Gleichung 41 gegebenen Grenzen kann somit der Datensatz der dem Reflektor zugrunde liegenden zweidimensionalen Parabel beliebig genau berechnet werden. Aus diesem wird dann durch die Konstruktion des Rotationskörpers als Summe sehr kleiner Dreiecke (vgl. Kapitel 3.3.1) das dreidimensionale Modell des Parabolspiegels erhalten (vgl. Abbildung 18). Das in den Simulationen verwendete Modell besteht hierbei aus 146.880 Dreiecken, so dass eine sehr genaue Annäherung an den realen Körper erzielt wird.

4. Apparativer und Experimenteller Teil

4.1 Das Messsystem

Die elementaren Grundbestandteile eines IR-Einstrahlungssensors wurden bereits in Kapitel 3.2 herausgearbeitet. Um mit einem Sensor jedoch Gasmessungen zum Zweck seiner Charakterisierung durchführen zu können, ist ein Aufbau erforderlich, in welchem alle dazu notwendigen Komponenten zu einem Messsystem zusammengeführt werden. Abbildung 25 zeigt den prinzipiellen Aufbau des im Rahmen dieser Arbeit zusammengestellten Messsystems.

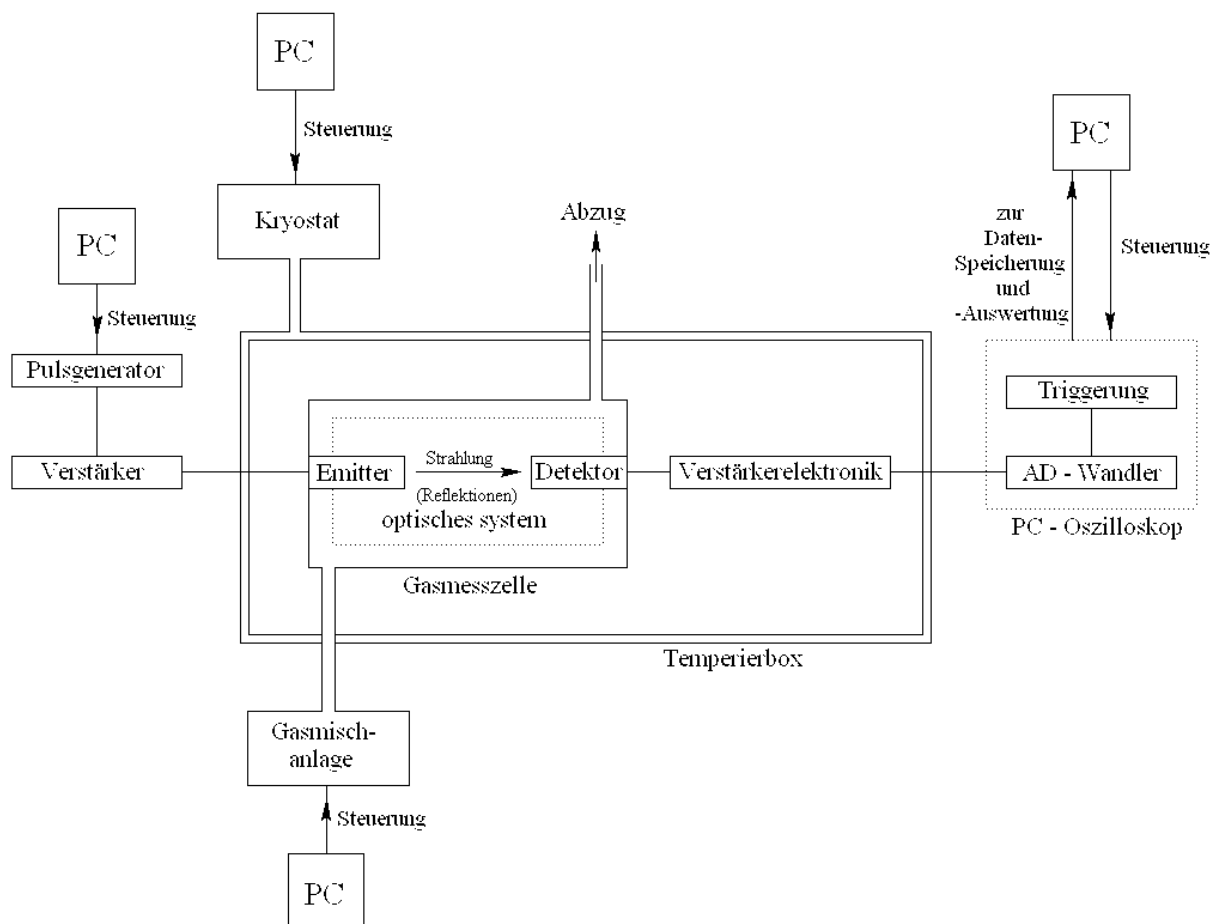


Abb. 25: Aufbau eines Messsystems zum Betrieb von IR-Einstrahlungssensoren.

Abgesehen von der Temperiereinrichtung und der Anlage zur Prüfgasgenerierung, welche der definierten Einstellung von Messbedingungen dienen und im eigentlichen Sinne nicht zum Sensorsystem gehören, bilden die in Abbildung 25 dargestellten Komponenten zusammen ein Gasmessgerät. Das Kernstück des Messaufbaus ist dabei die Gasmesszelle, in welche hier alle Komponenten eines IR-Einstrahlungssensors integriert sind.

Bei dem Detektor handelt es sich um einen pyroelektrischen Detektor vom Typ LIE 316 der Firma InfraTec, der intern temperaturkompensiert ist. Abbildung 26 zeigt das Aufbau- und Beschaltungsschema dieses speziellen Detektors.

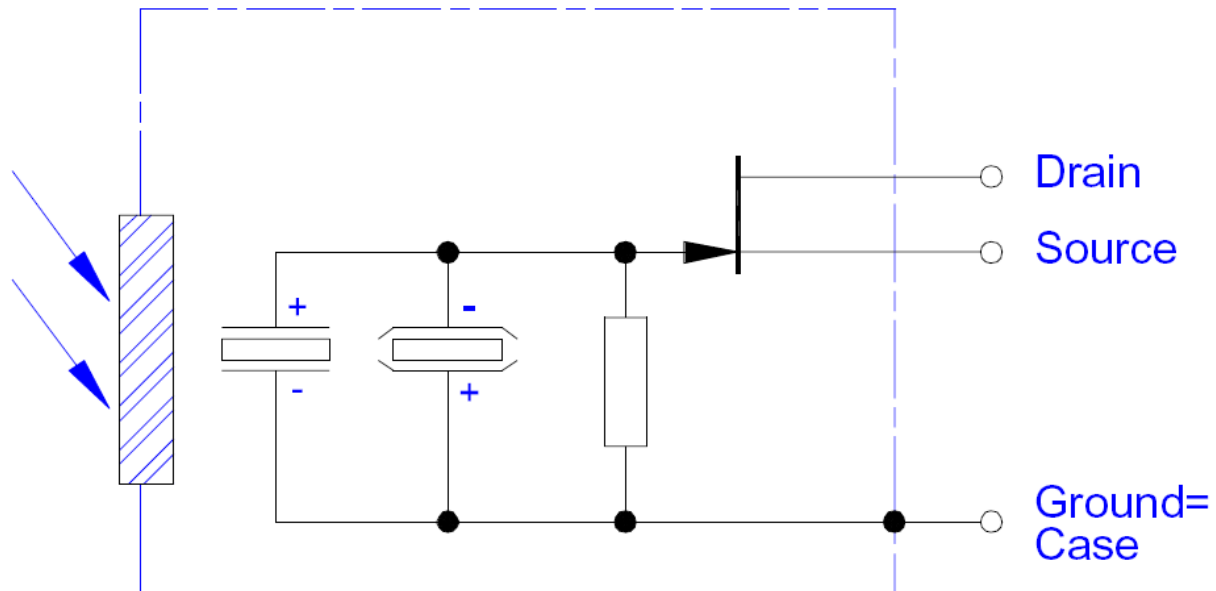


Abb. 26: Aufbau des pyroelektrischen Detektors LIE 316 der Firma InfraTec [65]

Wie in Abbildung 26 zu erkennen ist, besitzt der Detektor zwei licht-sensitive Elemente (Kondensatoren), von denen eines von der Bestrahlung abgeschirmt wird, um die Temperaturabhängigkeit der Ausgangsspannung zu kompensieren. Die Funktionsweise der licht- bzw. wärmesensitiven Elemente beruht darauf, dass sich innerhalb des Kondensators ein pyroelektrisches Material (hier LiTaO_3) befindet, in dessen Kristallstruktur die Schwerpunkte der positiven und der negativen Ladung nicht zusammenfallen, so dass eine spontane, permanente Polarisation vorliegt [66]. Ändert sich die Temperatur des Pyroelektrikums, z. B. durch IR-Strahlung, so ändert sich auch dessen Polarisation. Dieses wiederum löst einen messbaren Stromfluss aus, der zu einem Ladungsausgleich auf den Kondensatorplatten führt. Da der Kondensator dadurch wieder in den Gleichgewichtszustand versetzt wird, ist mit einem pyroelektrischen Detektor die Messung konstanter Strahlung nicht möglich [25]; es kann immer nur eine Änderung der Strahlungsintensität detektiert werden. Dementsprechend ist also eine Modulation der Strahlung erforderlich, was im verwendeten Messsystem durch den computer-gesteuerten Pulsgenerator (vgl. Abbildung 25) geleistet wird. Auf diese Weise kann auf eine mechanische Modulation (Chopper) verzichtet werden.

Das in Abbildung 26 verzeichnete Eintrittsfenster für die Strahlung (links) ist mit einem Interferenzfilter versehen, der auf die Absorptionswellenlänge von Kohlenmonoxid zugeschnitten ist. Abbildung 27 zeigt ein Transmissionsspektrum des Interferenzfilters, das vom Hersteller aufgenommen wurde.

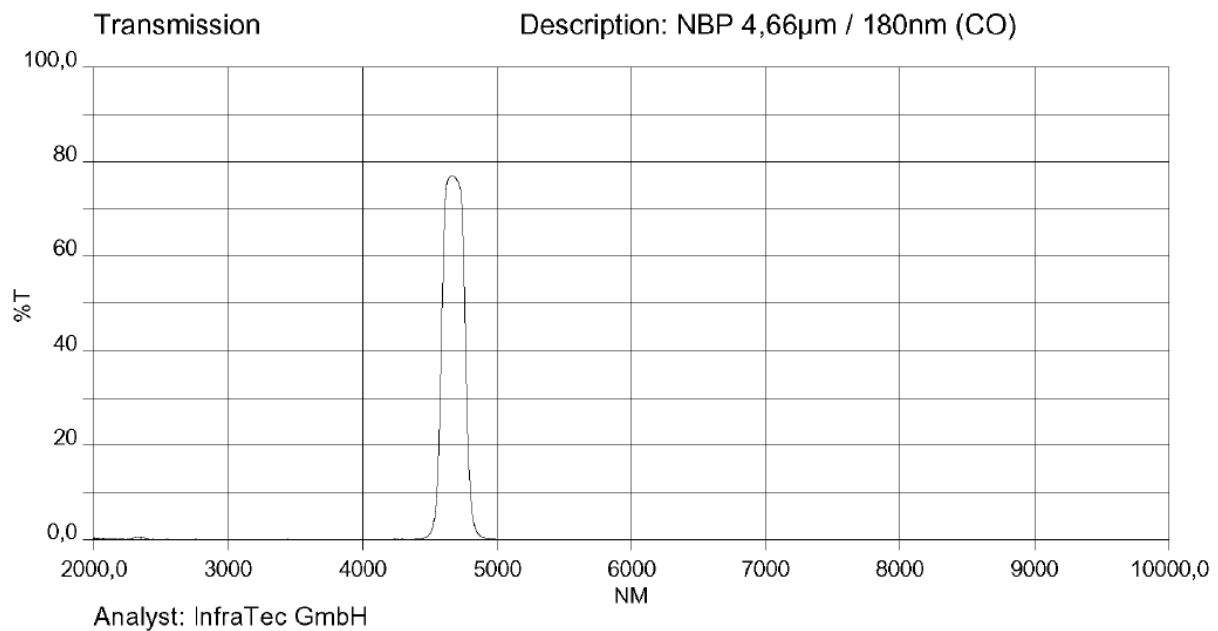


Abb. 27: Transmissionsspektrum des eingesetzten Interferenzfilters für Kohlenmonoxid [67].

Das Zentrum der Transmissionsbande in Abbildung 27 liegt bei einer Wellenlänge von 4,66 μm , was einer Wellenzahl von ca. 2146 cm^{-1} entspricht. Ein Vergleich mit Abbildung 4 in Kapitel 3.1 zeigt, dass dies auch ungefähr der Wellenzahl im Zentrum der Absorptionsbande von Kohlenmonoxid entspricht ($\approx 2142,5 \text{ cm}^{-1}$). Die Breite der Transmissionsbande des Interferenzfilters wird durch die sogenannte „half power bandwidth (HPBW)“ definiert, die vom Hersteller zu 180 nm ($\pm 20 \text{ nm}$) angegeben wird.

Interferenzfilter beruhen auf dem Prinzip des klassischen Fabry-Pérot-Interferometers [68]. Die Filterwirkung wird durch Vielstrahlinterferenz von Lichtwellen innerhalb einer dünnen optischen Schicht erreicht, wobei alle Wellenlängen, die nicht der durch die Schichtdicke definierten Durchlasswellenlänge entsprechen (Resonanzbedingung), durch destruktive Interferenz ausgelöscht werden [69]. Ein einfaches Beispiel für ein nicht abstimmbares Fabry-Pérot-Interferometer ist das Etalon, welches im einfachsten Fall aus einer Glasplatte der Dicke d bestehen kann. Abbildung 28 zeigt den Strahlengang eines einzelnen einfallenden Lichtstrahls auf solch ein optisches System.

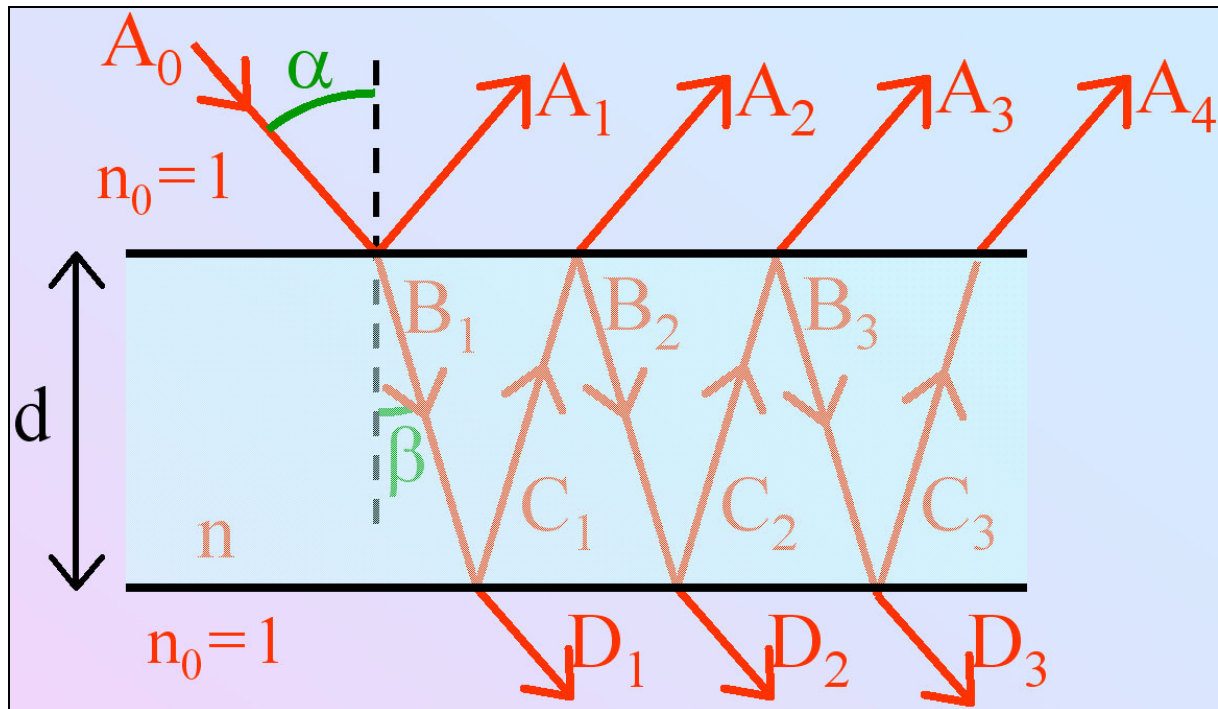


Abb. 28: Strahlengang in einem Etalon der Dicke d [70]. Der Brechungsindex n des optischen Mediums, aus welchem die Platte besteht, ist im abgebildeten Fall gegenüber dem Brechungsindex n_0 von Luft erhöht.

Beide Oberflächen der in Abbildung 28 dargestellten Platte sind teildurchlässig, so dass jeweils ein Teil eines auftreffenden Lichtstrahls reflektiert wird, während der andere Teil gebrochen wird und so durch die entsprechende Oberfläche hindurchtritt. Die Art der Interferenz (konstruktiv oder destruktiv) zweier interferierender Strahlen (z. B. D_1 und D_2) wird durch das Verhältnis von deren Gangunterschied zur Wellenlänge (Phasendifferenz) bestimmt. Der Gangunterschied wird seinerseits durch die Plattendicke d , den Einfallswinkel α und den Brechungsindex n bestimmt. Die Durchlasswellenlänge eines Etalons ist dementsprechend auch vom Einfallswinkel abhängig.

Ein durchstimmbarer Interferenzfilter besteht aus zwei planparallelen, teildurchlässigen Spiegeln, deren Abstand durch das Anlegen einer elektrischen Spannung variiert werden kann. Auf diese Weise kann dann die Durchlasswellenlänge des Filters eingeregelt werden. Bei eingestelltem Abstand handelt es sich damit um ein Etalon mit $n = n_0$ (vgl. Abbildung 28).

Interferenzfilter mit fester Wellenlänge bestehen häufig aus mehreren hintereinander geschalteten Etalons, wobei die einzelnen Schichten auch unterschiedliche Brechungsindizes aufweisen können, um eine besonders gute Monochromatisierung zu erreichen [69].

Das Signal des im Spannungsmodus betriebenen Detektors wird durch die Verstärkungselektronik (vgl. Abbildung 25), deren Schaltplan in Abbildung 29 wiedergegeben ist, analog verstärkt.

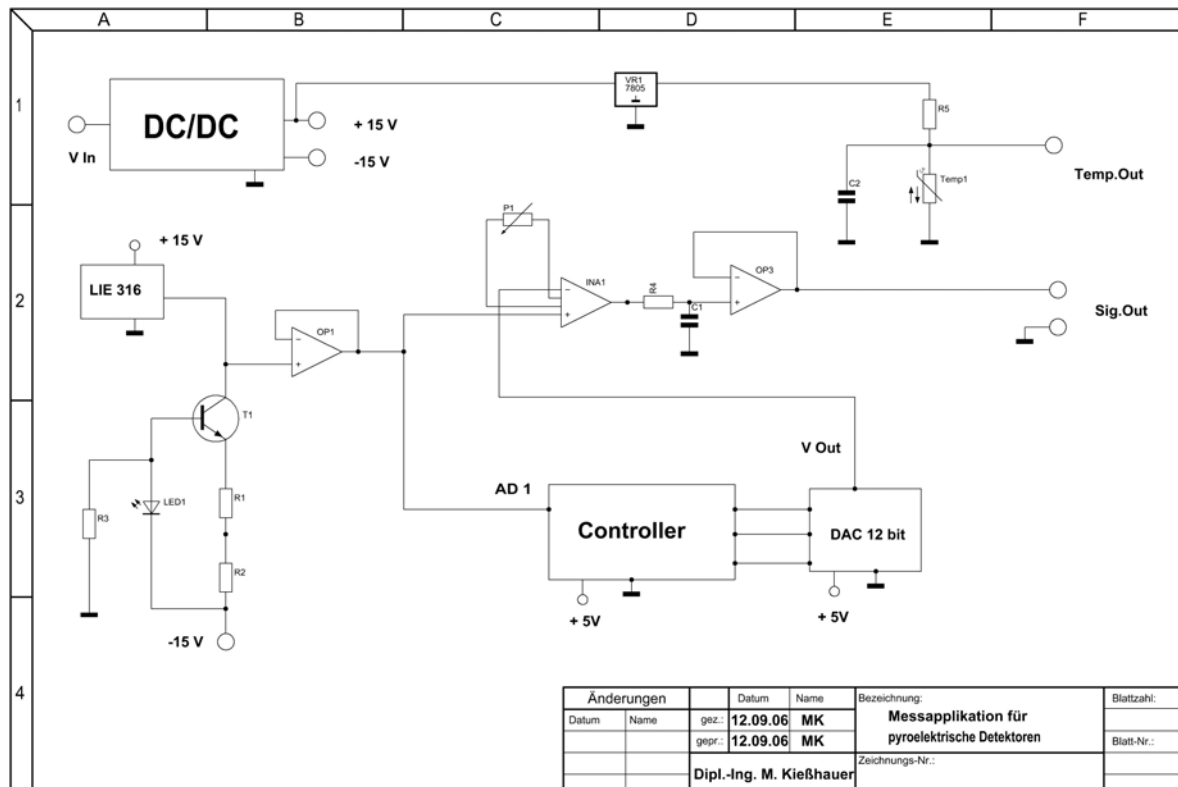


Abb. 29: Schaltplan der Verstärkerelektronik zum Auslesen pyroelektrischer Detektoren [71].

Die Offsetspannung des Detektors (vgl. Kapitel 4.2) wird selbstständig durch die Verstärkerelektronik teilweise kompensiert. Der Faktor der Verstärkung kann über den regelbaren potenziellen Widerstand (P1) in Abbildung 29 eingestellt werden, um die Elektronik auf die einfallende Lichtintensität anzupassen.

Die Digitalisierung des Detektorsignals erfolgt dann innerhalb des zur Messung eingesetzten PC-Oszilloskops (vgl. Abbildung 25). Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein PC-Oszilloskop des Typs ADC 216 von der Firma Pico Technology Ltd. verwendet, welches im folgenden in Übereinstimmung mit der Herstellerbezeichnung „Picoskop“ genannt wird.

Die Verstärkerelektronik und das Picoskop bilden zusammen die Messelektronik, mit welcher das Detektorsignal ausgelesen und schließlich am PC weiterverarbeitet werden kann (vgl. Kapitel 4.2). Ein großer Schwachpunkt der verwendeten Messelektronik besteht darin, dass das verstärkte Detektorsignal analog von der Verstärkerelektronik zum Picoskop übertragen wird (vgl. Abbildung 25).

Aus apparativen Gründen müssen hier recht lange Kabelverbindungen (ca. 1,5 m) verwendet werden, die das System wegen ihrer Antennenwirkung sehr anfällig gegenüber Störfrequenzen aus der Umgebung (Netzfrequenz, Computerstrahlung etc.) machen. Aus diesem Grund ist das digital am Computer eingehende Detektorsignal stets relativ stark verrauscht und muss softwaremäßig von Störfrequenzen gefiltert werden (vgl. Kapitel 4.2).

Eine effektive Verbesserungsmöglichkeit bestünde hier z. B. darin, eine integrierte Mess-elektronik zu verwenden, die sowohl die Signalverstärkung als auch die Digitalisierung übernimmt.

Zwischen dem Emittor und dem Detektor befindet sich das optische System des Messaufbaus (vgl. Abbildung 25), in welches bei denen im Rahmen dieser Arbeit untersuchten IR-Einstrahlungssensoren beide genannten Bauteile integriert sind. Das optische System legt durch die Anordnung von Reflexionsflächen den Lichtweg der Strahlung vom Emittor zum Detektor fest. Zur Realisierung von optischen Systemen, insbesondere von Langwegmesszellen, wie z. B. die White-Zelle [72] oder die Herriott-Zelle [73], gibt es prinzipiell unbegrenzt viele Möglichkeiten. Die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Anordnungen werden im Kapitel 4.3 näher beschrieben.

Die vom Pulsgenerator erzeugte, zeitlich variierende Betriebsspannung für die Strahlungsquelle kann nicht direkt auf den Emittor gegeben werden, weil durch die Leistungsaufnahme der Glühlampe ein Spannungsabfall auftreten würde, der den Pulsgenerator überlasten würde. Daher ist zwischen dem Pulsgenerator und dem Emittor ein Stromverstärker integriert (vgl. Abbildung 25), dessen Schaltbild durch Abbildung 30 wiedergegeben wird.

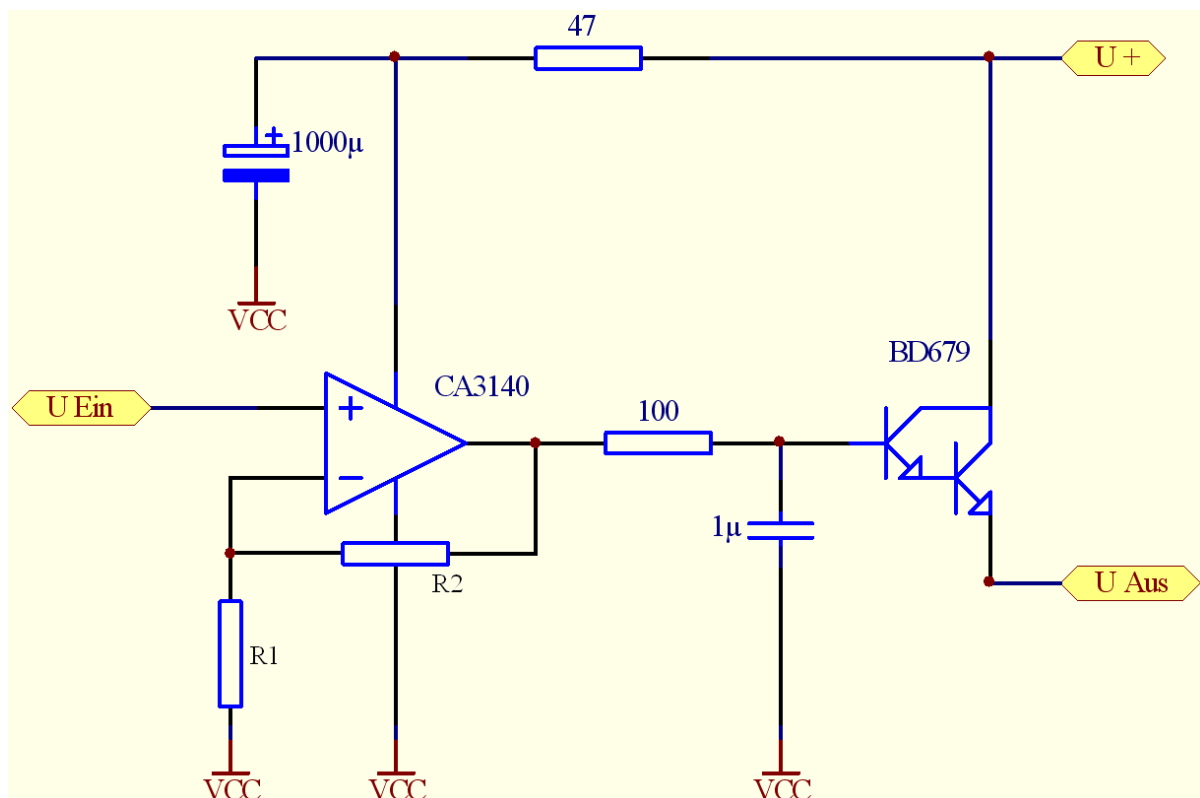


Abb. 30: Schaltplan des Stromverstärkers für die Betriebsspannung des Emitters [74].

Mit Hilfe des Stromverstärkers kann die vom Pulsgenerator vorgegebene Spannung auch bei einer Stromentnahme durch die Glühlampe ständig aufrecht erhalten werden, so dass eine gleichmäßige Pulsung des Emitters möglich ist.

Durch Einstellung des Verhältnisses der ohmschen Widerstände R_2 und R_1 (vgl. Abbildung 30) kann die vom Pulsgenerator erzeugte Spannung zudem um einen konstanten Faktor verstärkt werden. Der Stromverstärker kann also gleichzeitig auch als Spannungsverstärker eingesetzt werden. Der Verstärkungsgrad v_U für die Spannung ergibt sich nach der Formel:

$$v_U = 1 + \frac{R_2}{R_1}$$

(Gleichung 46)

Da sowohl der Pulsgenerator als auch der Strom- bzw. Spannungsverstärker kalibriert werden müssen, um eine genaue Kenntnis der an der Glühlampe anliegenden Betriebsspannung zu erlangen, wurde eine Kalibrierung für die Kombination beider Komponenten vorgenommen. Abbildung 31 zeigt eine Auftragung der vom Stromverstärker ausgegebenen Spannung gegen die am Pulsgenerator eingestellte Spannung. Die Messung erfolgte mit Hilfe eines Oszilloskops vom Typ TDS 210 der Firma Tektronix.

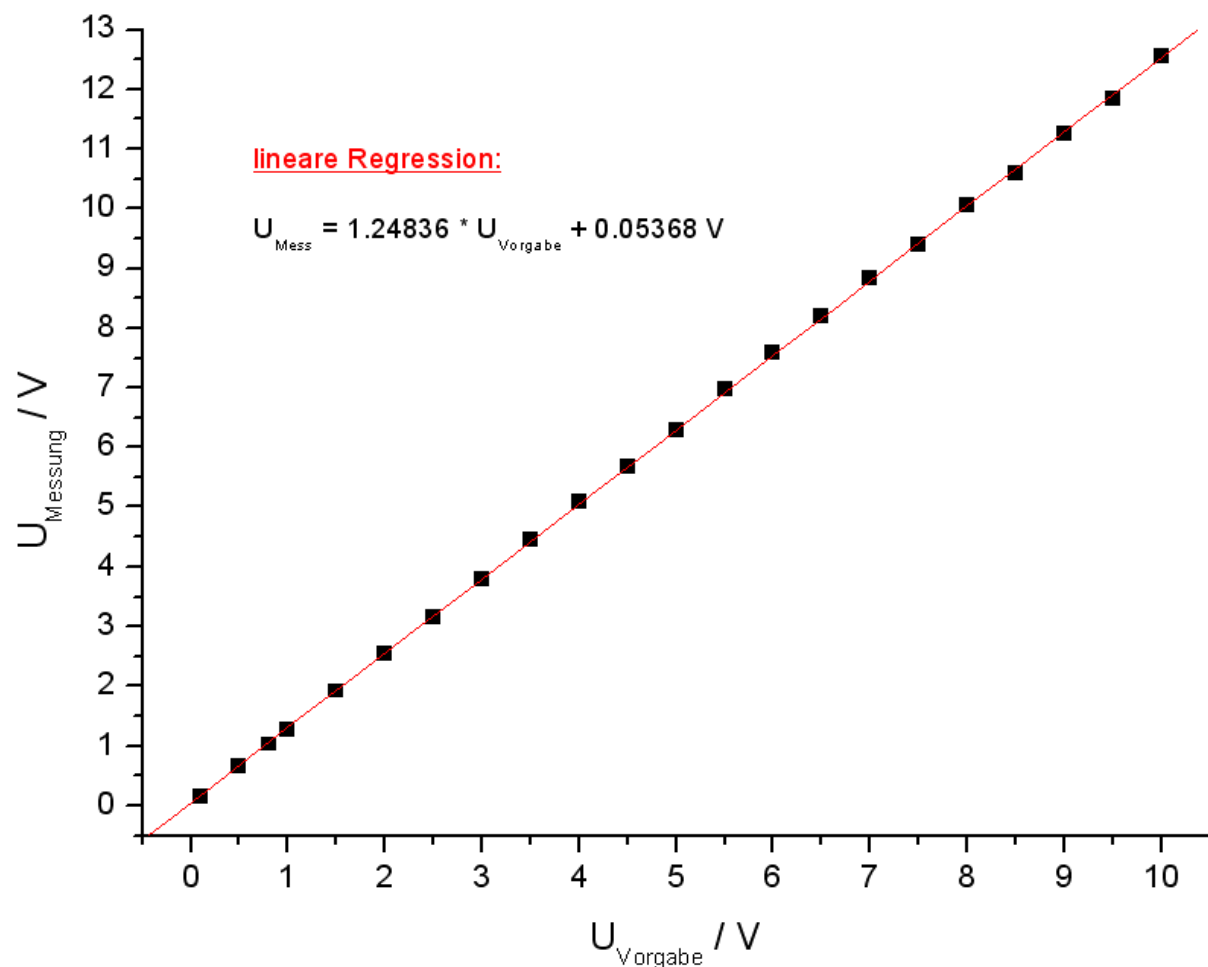


Abb. 31: Kalibrierungsdaten des eingesetzten Stromverstärkers bei einer Einstellung von $R_2 = 180 \text{ k}\Omega$ und $R_1 = 100 \text{ k}\Omega$. Die Sollspannung wurde vom verwendeten Pulsgenerator vorgegeben.

Wie aus Abbildung 31 ersichtlich wird, besteht ein linearer Zusammenhang zwischen den aufgetragenen Spannungen. Unter Berücksichtigung der Kalibrierungsfunktion ist somit nahezu jede beliebige (im betrachteten Bereich befindliche) Betriebsspannung für die Strahlungsquelle am Pulsgenerator einstellbar.

Als Pulsgenerator diente ein K8016 der Firma Velleman, der mit Hilfe der mitgelieferten Betriebssoftware durch einen PC gesteuert werden kann und die Erzeugung frei programmierbarer, periodischer Spannungskurven ermöglicht. Zum Betrieb der Strahlungsquelle wurde eine Rechteckspannung benutzt, wie sie in Abbildung 32 zu sehen ist.

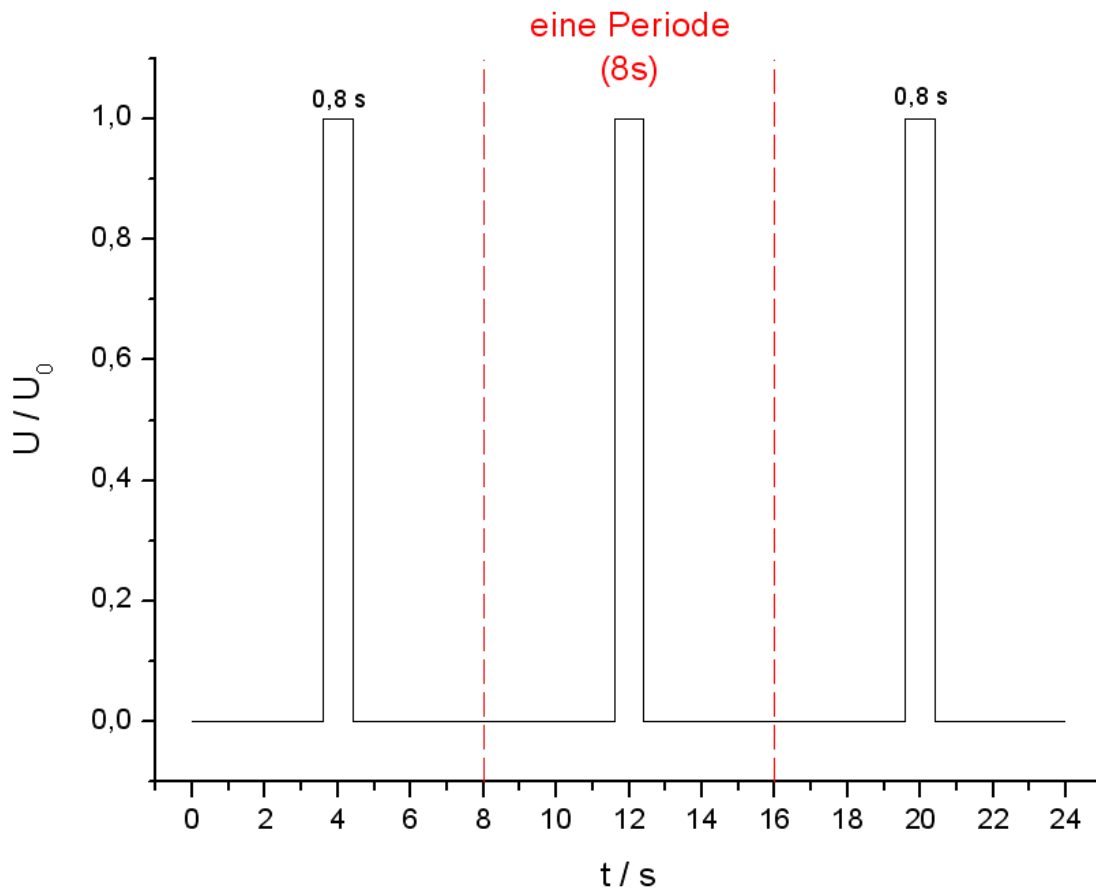


Abb. 32: Spannungskurve für die Pulsung des Emitters bei einer Frequenz von 0,125 Hz.

Die Betriebsspannung U_0 kann durch Wahl der Schwingungsamplitude eingestellt werden und wird so gewählt, dass am Ausgang des Stromverstärkers (vgl. Abbildung 25) die gewünschte Spannung von z. B. 5 V anliegt.

Bei der als Emitter verwendeten Glühlampe handelt es sich um eine typische thermische Strahlungsquelle. Da für die Messung von Kohlenmonoxid (und auch anderer IR-aktiver Gase) nur der emittierte Spektralbereich bei der entsprechenden Absorptionsbande interessant ist, wird hier ausgenutzt, dass die eigentlich zu Beleuchtungszwecken hergestellte Glühlampe nur eine sehr geringe Lichtausbeute η im sichtbaren Bereich aufweist:

$$\eta = \frac{\text{emittierte sichtbare Lichtleistung}}{\text{aufgewandte elektrische Leistung}} \ll 1$$

(Gleichung 47)

Das Maximum der Lichtemission liegt dagegen im IR-Bereich des Spektrums, wie im folgenden gezeigt wird. Nach dem Kirchhoffschen Strahlungsgesetz müssen unter Annahme eines thermodynamischen Gleichgewichts der Emissionsgrad ε und der Absorptionsgrad A eines Körpers bei gleicher Wellenlänge und Temperatur gleich sein:

$$\varepsilon(\lambda, T) = A(\lambda, T)$$

(Gleichung 48)

Beim Modell des schwarzen Strahlers ist der Absorptionskoeffizient A für alle Wellenlängen gleich eins. Aus diesem Modell leitete Max Planck im Jahre 1900 das Plancksche Strahlungsgesetz ab (Nebenbei legte er damit den Grundstein für die Quantentheorie.), welches wie folgt für die spektrale spezifische Ausstrahlung M formuliert werden kann [75]:

$$M(\lambda, T) = \frac{2 \cdot \pi \cdot h \cdot c^2}{\lambda^5 \cdot \left(\exp\left(\frac{h \cdot c}{\lambda \cdot k \cdot T}\right) - 1 \right)}$$

(Gleichung 49)

In Gleichung 49 bezeichnen h das Plancksche Wirkungsquantum, c die Lichtgeschwindigkeit, k die Boltzmannkonstante, T die Temperatur und λ die Wellenlänge des emittierten Lichtes. Durch eine Integration von Gleichung 49 über alle Wellenlängen wird das Stefan-Boltzmann-Gesetz [76] erhalten, das die spezifische Ausstrahlung eines schwarzen Körpers beschreibt, und somit eine Gleichung für die insgesamt emittierte Strahlungsleistung bei einer bestimmten Temperatur darstellt:

$$M_0(T) = \sigma \cdot T^4 \quad ; \quad \text{mit} \quad \sigma = \frac{2 \cdot \pi^5 \cdot k^4}{15 \cdot h^3 \cdot c^2}$$

(Gleichung 50)

Die Konstante σ hat einen Wert von ca. $5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$.

Umgekehrt führt eine Differenzierung von Gleichung 49 nach der Wellenlänge zum Wienschen Verschiebungsgesetz, nach welchem sich die Wellenlänge λ_{\max} berechnen lässt, bei welcher das Maximum der emittierten Strahlungsenergie auftritt:

$$\lambda_{\max} = \frac{2898 [\mu\text{m} \cdot \text{K}]}{T}$$

(Gleichung 51)

Reale Strahler besitzen einen Absorptionskoeffizienten, der ungleich eins ist (vgl. Gleichung 48), und auch von der Wellenlänge abhängig sein kann. Für eine Glühlampe kann von dem Modell des grauen Strahlers ausgegangen werden, bei welchem der Absorptionsgrad zwar kleiner als eins ist, über einen größeren Spektralbereich jedoch als konstant angesehen werden kann. Bei einem grauen Strahler ist zur Ermittlung der spektralen spezifischen Ausstrahlung M die Gleichung 49 mit dem konstanten Faktor des Absorptionskoeffizienten zu multiplizieren [77]. Da die emittierte Lichtintensität so um einen konstanten Faktor gemindert wird, bleibt das Ergebnis von Gleichung 51 davon unberührt, so dass diese Gleichung auch direkt auf graue Strahler anzuwenden ist. Bei der Berechnung der gesamten Abstrahlleistung nach Gleichung 50 ist jedoch für einen grauen Strahler der Absorptionskoeffizient als Faktor zu berücksichtigen.

Bei der Annahme einer Temperatur des Glühdrahtes einer Strahlungsquelle von z. B. 2500 K ergibt sich das Intensitätsmaximum der emittierten Strahlung nach Gleichung 51 bei einer Wellenlänge von $\lambda_{\max} \approx 1,16 \mu\text{m}$ und liegt damit im IR-Bereich des elektromagnetischen Spektrums. Abbildung 33 stellt die Aussagen der Gleichungen 49 bis 51 grafisch dar.

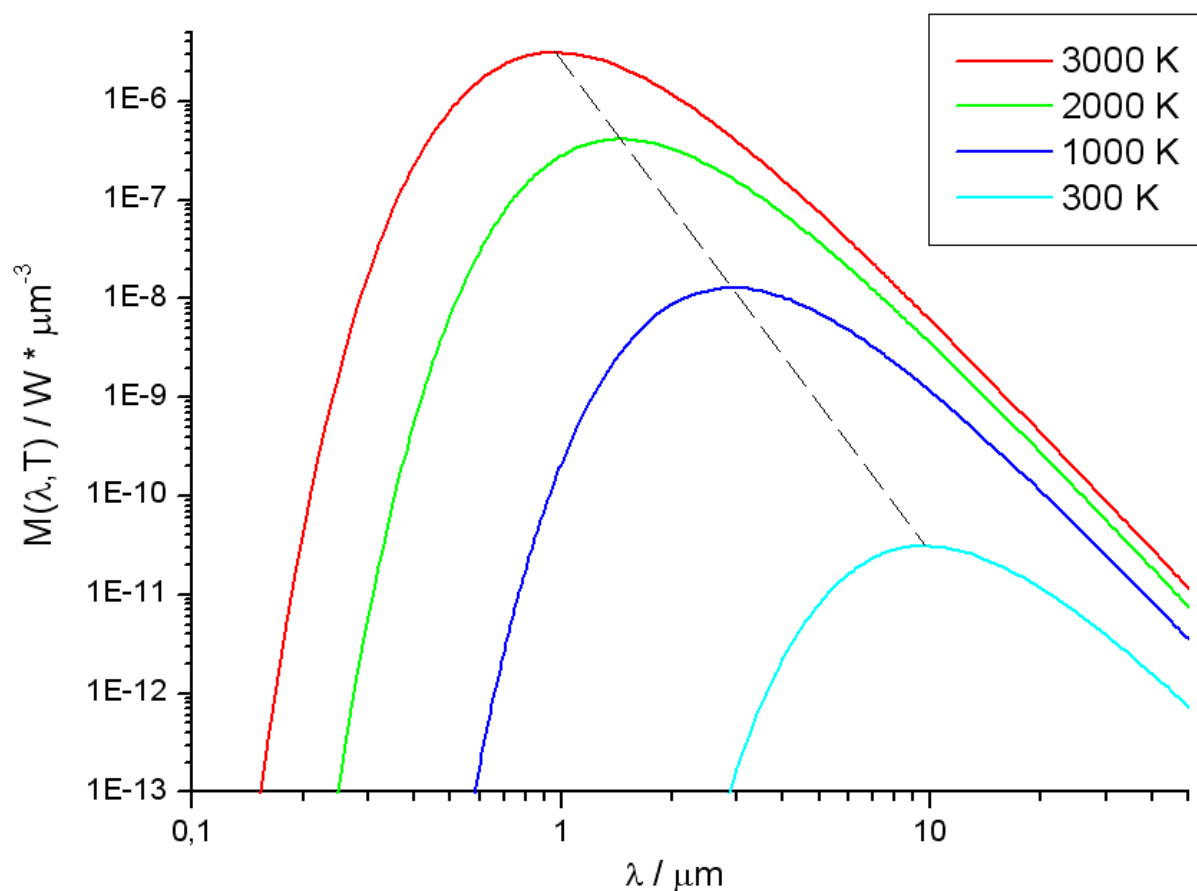


Abb. 33: Auftragung der spektralen spezifischen Ausstrahlung M eines schwarzen Strahlers (vgl. Gleichung 49) gegen die Wellenlänge λ bei verschiedenen Temperaturen. Sowohl die X- als auch die Y-Achse sind logarithmisch eingeteilt.

Wie in Abbildung 33 zu erkennen ist, nimmt die Strahlungsleistung eines schwarzen Körpers mit steigender Temperatur stark zu. Die gesamte Strahlungsleistung bei einer bestimmten Temperatur (vgl. Gleichung 50) ist in Abbildung 33 als Fläche unter den jeweiligen Kurven zu interpretieren. Das Maximum der Strahlungsleistung verschiebt sich bei steigender Temperatur zu kürzeren Wellenlängen, wie durch Gleichung 51 beschrieben wird. Die gestrichelt eingezeichnete Linie in Abbildung 33 dient zur Veranschaulichung des Wienschen Verschiebungsgesetzes. Die abgebildeten Kurven weisen über den gesamten Wellenlängenbereich von $0 < \lambda < \infty$ keine Schnittpunkte auf. Zur Beschreibung eines grauen Strahlers müssten die dargestellten Kurven jeweils mit einem dem Absorptionsgrad entsprechenden Faktor von $0 < A < 1$ multipliziert werden.

Bei dem zur Einstellung der Temperatur in der Temperierbox (ICB-Eigenbau) eingesetzten Kryostaten (vgl. Abbildung 25) handelt es sich um einen Haake C25, der mit Hilfe eines externen Temperaturfühlers (Pt 100) computergesteuert die gewünschte, konstante Temperatur (z. B. 25°C) in der Messeinrichtung einregeln kann. Ebenso ist auch das Abfahren von Temperaturrampen innerhalb gewisser Grenzen möglich.

Für die Kalibrierung und Charakterisierung von Gassensoren ist eine Gasmischanlage (vgl. Abbildung 25) erforderlich, die es erlaubt, Gasströme mit verschiedenen Konzentrationen an Analytgas definiert und reproduzierbar herzustellen [78]. Die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Gasmischanlage basiert auf dem Prinzip, Gasströme unterschiedlicher Größe und Zusammensetzung in einem einzigen Volumenstrom zu vereinigen, welcher dann der Gasmesszelle zugeführt wird. Hierbei wird davon ausgegangen, dass Gasvolumina additiv sind und dass die Vermischung der Gase instantan abläuft. Da der Gesamtstrom und auch die einzelnen Gasströme mit dem Außendruck im Gleichgewicht stehen, sind bei dieser Mischmethode keine Expansionseffekte der Gase zu erwarten.

Die verwendete Gasmischanlage kann bis zu drei unterschiedliche Gasströme vermischen. Ihr schematischer Aufbau ist in Abbildung 34 dargestellt.

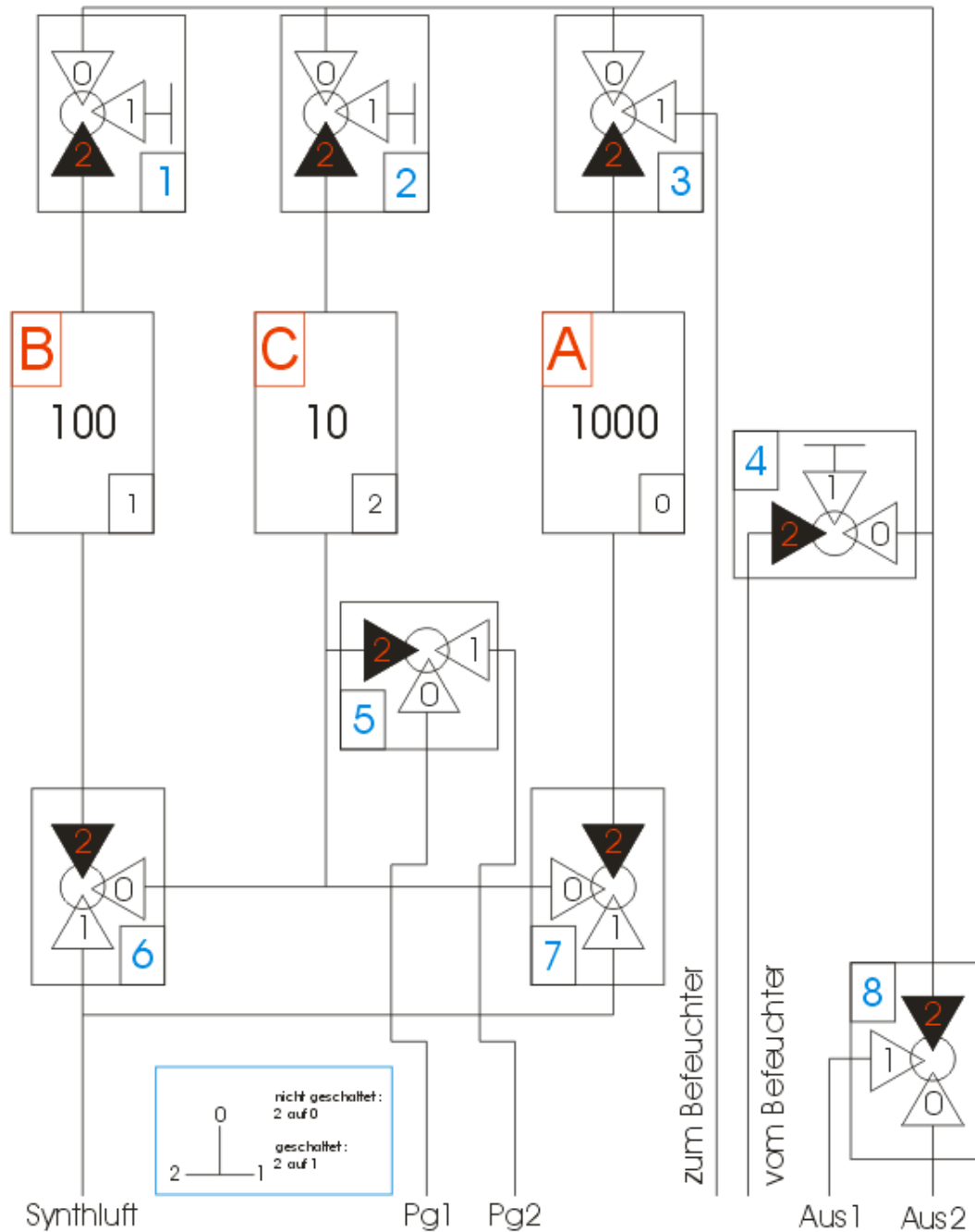


Abb. 34: Schematischer Aufbau der Gasmischanlage. Die schwarzen Linien stellen die Gasleitungen zwischen den Komponenten dar. Die Abkürzungen Pg1 und Pg2 stehen für die zur Verfügung stehenden Prüfgase mit zertifiziertem Kohlenmonoxid- bzw. Kohlendioxidgehalt. Die Bezeichnungen Aus1 und Aus2 kennzeichnen die beiden Gasleitungen, durch die das fertig gemischte Messgas dem Verbrauch zugeführt werden kann. Durch passende Schaltung der Ventile Nr. 3 und Nr. 4 könnte ein Teilgasstrom zusätzlich noch über einen Gasbefeuchter (nicht eingezeichnet) z. B. mit Wasser angereichert werden.

Das Herzstück der Anlage bilden die drei Massenflussregler A bis C (vgl. Abbildung 34), mit unterschiedlichen maximalen Durchflussvolumina (in der Abbildung in ml / min angegeben). Massenflussregler sind regelbare Ventile, die in Abhängigkeit von der angelegten Regelspannung einen definierten Gasstrom durchlassen. Die verwendeten Massenflussregler des Typs DFC-2901 sind vom Werk aus auf Stickstoff kalibriert.

Als Mischgase werden synthetische Luft und Prüfgase aus synthetischer Luft mit 500 ppm bzw. 10000 ppm Kohlenmonoxid bzw. 7130 ppm Kohlendioxid bei Standarddruck verwendet. Es kann jedoch aufgrund der Herstellerangaben davon ausgegangen werden, dass der tatsächliche Volumenfluss von dem gewünschten um nicht mehr als $\pm 1\%$ vom Maximalfluss des Massenflussreglers abweicht [79]. Die für die Steuerung der Massenflussregler benötigte analoge Spannung wird von einem am Institut für Chemo- und Biosensorik e. V. Münster entwickelten Gasmischprogramm über einen PC mit A/D – Wandlerkarte geregelt.

Neben den Massenflussreglern werden die Dreiwege-Magnetventile 1 bis 8 (vgl. Abbildung 34) zur Schaltung der Prüfgase verwendet. Über eine Relaiskarte können diese ebenfalls elektronisch über das Gasmischprogramm gesteuert werden. Bei Nichtbenutzung einzelner Ventile werden diese jeweils auf Absperrung der Gasleitungen eingestellt, um Totvolumina und das Einsaugen von Raumluft auszuschließen. Der Durchgang des Gases kann jeweils von Anschluss Nr.2 zu Anschluss Nr.0 oder von Anschluss Nr.2 zu Anschluss Nr.1 (vgl. Abbildung 34, kleiner Zeichnungsausschnitt) erfolgen; eine Verbindung von Anschluss Nr.1 zu Anschluss Nr.0 ist nicht vorhanden.

Die Gasleitungen bestehen aus Edelstahlkapillaren mit 4 mm Innendurchmesser, welche über Swagelok-Verbindungen gasdicht an die Massenflussregler und die Ventile angeschlossen sind. Ebenso sind alle T-Verbindungen zwischen den Leitungen über gasdichte Swagelok-Verbindungen montiert.

Bei denen im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Gasmessungen wurden jeweils nur die beiden Massenflussregler A und B (vgl. Abbildung 34) verwendet. Diese wurden zunächst kalibriert, um eine genaue Kenntnis über die Größe der vermischten Gasströme zu erhalten. Die Abbildungen 35 und 36 zeigen die Kalibrationskurven der beiden Massenflussregler im Bereich der für die Messungen relevanten Durchflussraten.

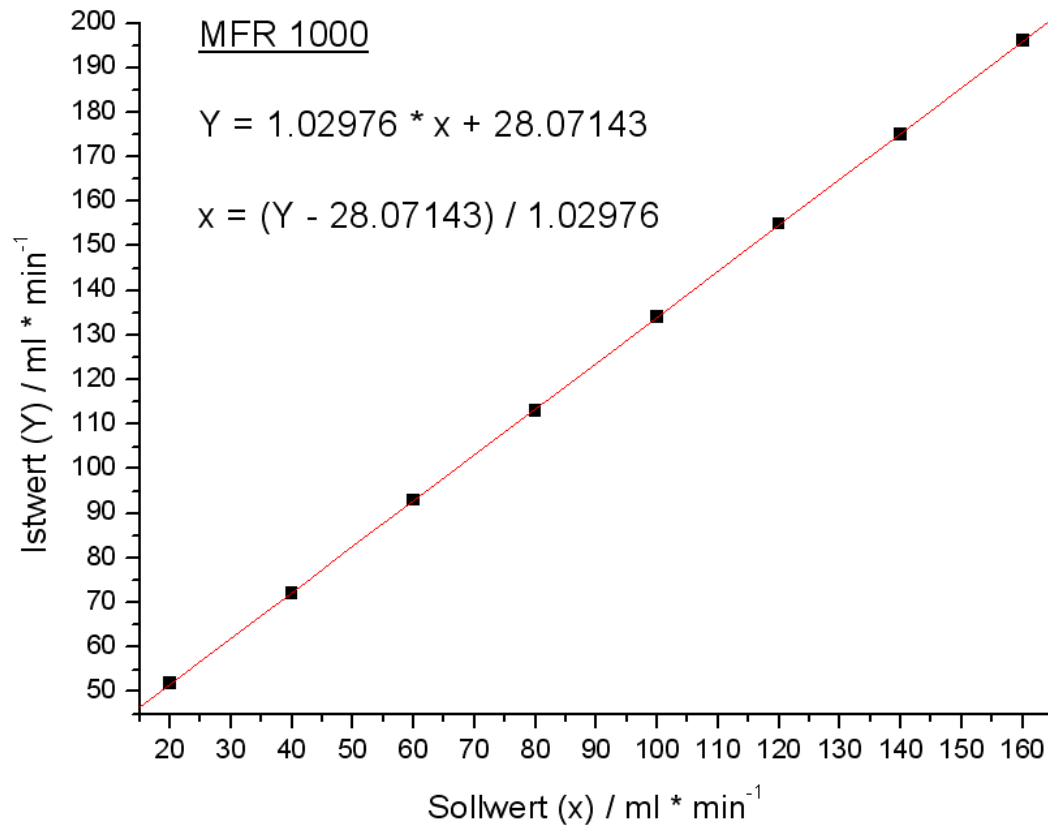


Abb. 35: Kalibrierungsdaten des Massenflussreglers A. Die rote Gerade stellt die lineare Regression der Messdaten dar, deren Parameter in der Abbildung angegeben sind.

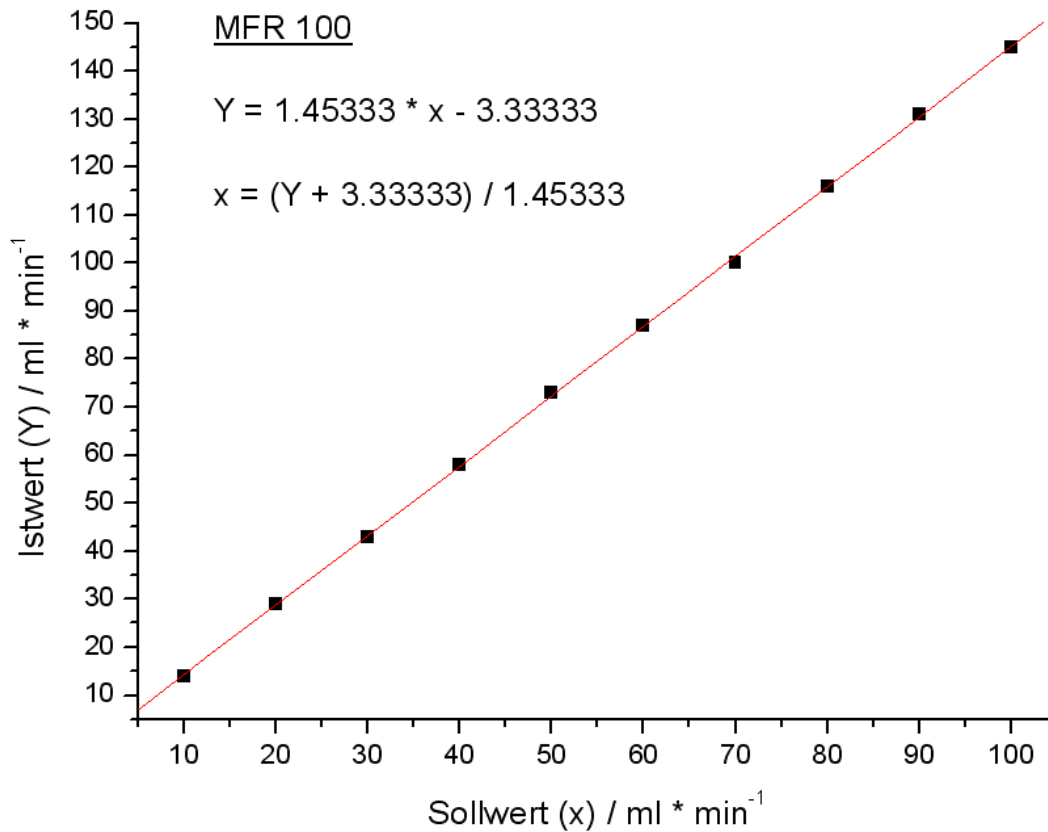


Abb. 36: Kalibrierungsdaten des Massenflussreglers B. Die rote Gerade stellt die lineare Regression der Messdaten dar, deren Parameter in der Abbildung angegeben sind.

Wie aus den Abbildungen 35 und 36 ersichtlich wird, weisen beide Massenflussregler annähernd lineare Kalibrationskurven auf, so dass unter Berücksichtigung der Funktionsparameter für die lineare Regression jeweils eine gewünschte Durchflussrate eingestellt werden kann. Die Messung der tatsächlichen Volumenströme erfolgte mit Hilfe eines Massenflussmessgerätes vom Typ Analyt GFM 171, welches eine Auflösung von ± 1 ml/min besitzt.

In dem Fall, dass durch den Massenflussregler A synthetische Luft geleitet wird und das Prüfgas den Massenflussregler B passiert (Hierzu sind die Magnetventile der Gasmischanlage entsprechend zu schalten.), also eine definierte Verdünnung des Prüfgases mit synthetischer Luft stattfindet, ergibt sich die Analytkonzentration im hergestellten Messgas wie folgt (vgl. Abbildung 34):

Seien a und b die Volumenströme durch die Massenflussregler A und B, und x_{PG} die Konzentration bzw. der Molenbruch des betrachteten Analyten im Prüfgas, so ergibt sich die Analytkonzentration x im Messgas zu:

$$x = \frac{b}{a+b} \cdot x_{PG}$$

(Gleichung 52)

Mit den partiellen Ableitungen der Messgaskonzentration nach den Größen, von denen diese abhängig ist (Gleichungen 53 bis 55):

$$\frac{\partial x}{\partial a} = -\frac{b}{(a+b)^2} \cdot x_{PG}$$

(Gleichung 53)

$$\frac{\partial x}{\partial b} = \frac{a}{(a+b)^2} \cdot x_{PG}$$

(Gleichung 54)

$$\frac{\partial x}{\partial x_{PG}} = \frac{b}{a+b}$$

(Gleichung 55)

ergibt sich nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz [80] der absolute Fehler Δx der Messgaskonzentration zu:

$$\Delta x = \sqrt{\left(-\frac{b}{(a+b)^2} \cdot x_{PG} \cdot \Delta a\right)^2 + \left(\frac{a}{(a+b)^2} \cdot x_{PG} \cdot \Delta b\right)^2 + \left(\frac{b}{a+b} \cdot \Delta x_{PG}\right)^2}$$

(Gleichung 56)

Die Größen Δa , Δb und Δx_{PG} bezeichnen hier jeweils die (maximalen) absoluten Fehler der betreffenden Größen a , b und x_{PG} . Der relative Fehler der Konzentration des Analyten im zusammen gemischten Messgas kann aufgrund des Verhältnisses der Größe Δa zum betrachteten Bereich des Gasflusses jedoch auch sinnvoll nach dem vereinfachten Fehlerfortpflanzungsgesetz berechnet werden:

$$\frac{\Delta x}{x} \approx \frac{\Delta \left(\frac{b}{a+b} \right)}{\frac{b}{a+b}} + \frac{\Delta x_{PG}}{x_{PG}}$$

(Gleichung 57)

Mit

$$\frac{\Delta \left(\frac{b}{a+b} \right)}{\frac{b}{a+b}} \approx \frac{\Delta b}{b} + \frac{\Delta(a+b)}{a+b} \approx \frac{\Delta b}{b} + \frac{\Delta a + \Delta b}{a+b}$$

(Gleichung 58)

und den Werten für die verwendete Apparatur von $\Delta a = \pm 10$ ml/min, $\Delta b = \pm 1$ ml/min und $\Delta x_{PG}/x_{PG} = 0,01$ ergibt sich somit der relative Fehler der Analytkonzentration im Messgas zu:

$$\frac{\Delta x}{x} \approx \frac{1}{b} + \frac{11}{a+b} + 0,01$$

(Gleichung 59)

In Gleichung 59 sind hierbei nur noch die Zahlenwerte für die Gasströme a und b einzusetzen. Die Einstellung der Gasströme bei einer Sensorkalibrierung sollte nach Möglichkeit so erfolgen, dass bei allen eingestellten Analytkonzentrationen der Gesamtfluss des Messgases weitgehend konstant bleibt. Auf diese Weise wird die Kompensation einer eventuellen Auswirkung der Gasströmung auf irgendwelche Komponenten des Messsystems (z. B. eine Kühlung der Glühlampe) überflüssig, da stets unter konstanten Bedingungen gemessen wird. Tabelle 3 zeigt einige typische Einstellungen der Gasmischanlage, die im Rahmen dieser Arbeit bei Messungen verwendet wurden. Als Prüfgas wird hier von 500 ppm Kohlenmonoxid in synthetischer Luft ausgegangen, das durch weitere synthetische Luft verdünnt wird. Für den Fall einer Beaufschlagung der zu vermessenden Sensoren mit reinem Prüfgas wird dieses durch den Massenflussregler A geleitet, während der Massenflussregler B unbenutzt bleibt (vgl. Abbildung 34). In diesem Fall findet also gar keine Vermischung statt, so dass sowohl die Prüfgaskonzentration als auch deren relativer Fehler erhalten bleibt.

Bei der Applikation reiner synthetischer Luft gilt selbstverständlich dasselbe, wobei hier beide Werte gleich null sind.

Sollwert A (ml / min)	Istwert A (ml / min)	Sollwert B (ml / min)	Istwert B (ml / min)	Gesamtfluss (ml / min)	Konzentration (ppm)	rel. Fehler (%)
200	234,02	0	0	234,02	0	0
180	213,43	20	25,73	239,16	54	9,49
150	182,54	41	56,25	238,79	118	7,38
100	131,05	77	108,57	239,62	227	6,51
200	234,02	0	0	234,02	500	1

Tabelle 3: Einige typische Einstellungen der Gasmischanlage mit den dazugehörigen Konzentrationen an Kohlenmonoxid und deren relativen Fehlern.

Mit Hilfe des Gasmischprogramms kann zeitlich gesteuert zwischen den verschiedenen Einstellungen der Gasmischanlage hin- und her geschaltet werden, so dass mit der Zeit verschiedene Stufen von Kohlenmonoxidkonzentrationen auf die Messzelle gegeben werden können.

4.2 Datenauswertung

Das primäre Messsignal bei einem IR-Einstrahlgassensor ist das elektrische Signal des Detektors, welches durch dessen Bestrahlung hervorgerufen wird (vgl. Kapitel 3.2). Das Detektorsignal, bzw. dessen zeitlicher Verlauf, ist neben der Bestrahlungsintensität und der Bestrahlungsfrequenz auch abhängig vom Detektortyp. Im Rahmen dieser Arbeit wurden in allen vermessenen Gassensoren pyroelektrische Detektoren vom Typ LIE 316 der Firma InfraTec verwendet, die jeweils mit einem Interferenzfilter für Kohlenmonoxid (4,66 μm) ausgestattet waren. Bei allen beschriebenen und untersuchten Sensoren weist das durch die Pulsung der Lampe hervorgerufene Detektorsignal (nach Verstärkung) bei kontinuierlicher Aufzeichnung die in Abbildung 37 dargestellte typische Kurvenform auf (Bei anderen pyroelektrischen Detektoren kann der Signalausschlag auch negativ ausfallen.).

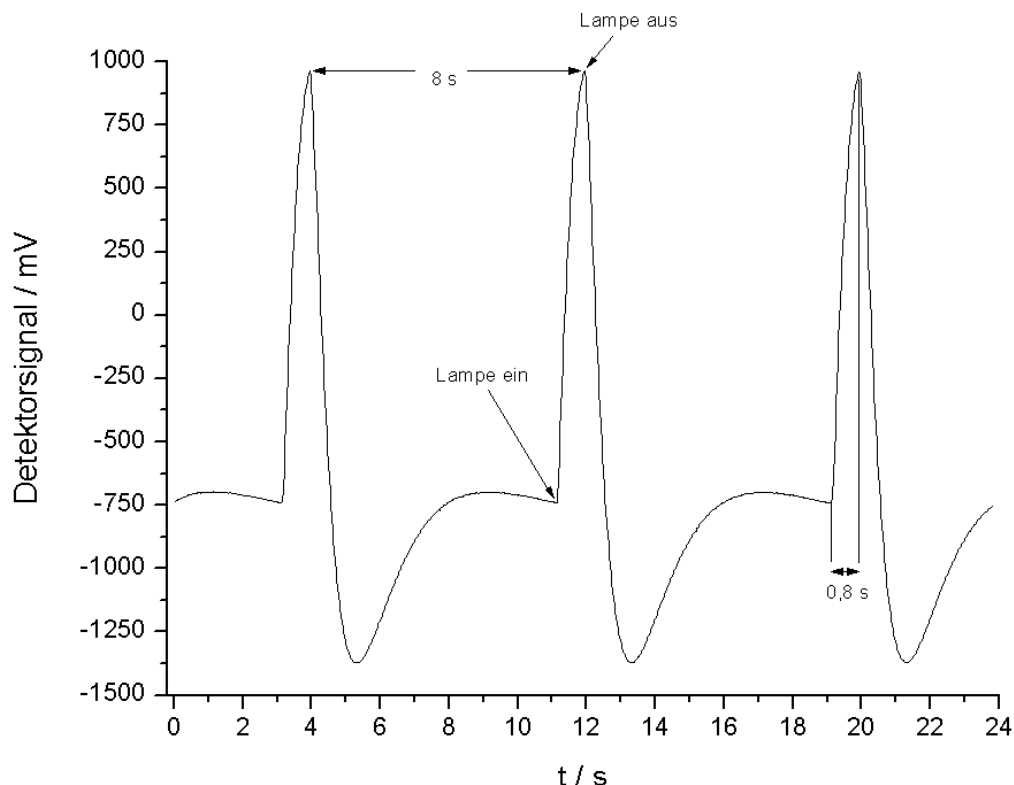


Abb. 37: Zeitabhängiges Detektorsignal bei einer Lampenpulsung mit 0,125 Hz und einer jeweiligen Betriebszeit von 800 ms (vgl. Abbildung 32).

Zur Quantifizierung des Detektorsignals als Einzelwert für jeden Lampenpuls bieten sich verschiedene Methoden der Signalauswertung an. Allgemein gilt, dass der Ausschlag des Detektorsignals bei hohen Gaskonzentrationen geringer ist als bei niedrigeren, da ein Teil des einfallenden Lichtes durch den Analyten absorbiert wird (vgl. Kapitel 3.2).

Um die Signale der einzelnen Lampenpulse voneinander zu trennen, wurde bei denen dieser Arbeit zugrunde liegenden Messungen das Detektorsignal mit Hilfe des Picoskops getriggert und jeweils mit hoher Messfrequenz (ca. 10 bis 20 kHz) aufgezeichnet. Die so erhaltenen digitalen Datensätze für jeden Lampenpuls können dann direkt mit dem Computer weiterverarbeitet werden, so dass online gemessen werden kann. Eine naheliegende Möglichkeit der Quantifizierung des jeweiligen Detektorsignals ist z. B. die Differenzbildung zwischen den Maximal- und Minimalwerten eines Datensatzes. Eine andere Möglichkeit ist die Differenzbildung zwischen Flächen, welche die Kurve in bestimmten Intervallen einschließt. Die von Öztekin [81] vorgeschlagene Methode ist die Ermittlung des Maximalwertes der Ableitung des Detektorsignals, was zu einem besonders günstigen Signal- Rauschverhältnis führt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine spezielle, auf das vorliegende Messsystem angepasste Methode der Signalauswertung entwickelt, die im folgenden beschrieben wird. Zunächst wird jedoch kurz auf die Filterung von Daten im Frequenzraum (FT-Filterung) eingegangen, da dies in der Auswertung implementiert ist.

Im Jahre 1822 erkannte der französische Physiker und Mathematiker Jean-Baptiste Joseph Fourier, dass sich Funktionen als Summe von Sinus- und Cosinusfunktionen mit unterschiedlicher Amplitude und Frequenz darstellen lassen. Im komplexen Zahlenraum ergibt sich daraus eine gleichwertige Darstellung einer reellen Funktion, die als Frequenzabhängigkeit von Real- und Imaginärteil der komplexen Funktion beschrieben werden kann. Durch die Fourier-Transformation kann ein zeitkontinuierliches, periodisches Signal $x(t)$ mittels Gleichung 60 in den Frequenzraum transformiert werden. Die Retransformation des daraus resultierenden komplexen Frequenzspektrums $X(\omega)$ erfolgt über Gleichung 61 [59].

$$X(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) \cdot e^{-i\omega t} dt$$

(Gleichung 60)

$$x(t) = \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} X(\omega) \cdot e^{i\omega t} d\omega$$

(Gleichung 61)

Zur Berechnung der komplexen Exponentialfunktion wird hierbei die Eulersche Formel verwendet, die auf die Polarkoordinaten-Darstellung komplexer Zahlen in der Gaußschen Zahlenebene zurück geht:

$$e^{i\varphi} = \cos(\varphi) + i \cdot \sin(\varphi)$$

(Gleichung 62)

Da die mit dem Picoskop gemessenen Datensätze $x(n)$ zwangsläufig begrenzt und zeitdiskret sind, muss zur Ermittlung von deren Transformation $X(k)$ mit einer Fourier-Reihe gerechnet werden. Die diskrete Fouriertransformation (DFT) für einen Datensatz der Länge N ist definiert als [82]:

$$X(k) = \frac{1}{N} \cdot \sum_{n=0}^{N-1} x(n) \cdot e^{-i \cdot k \cdot n \cdot \frac{2\pi}{N}} \quad ; \quad k = 0, 1, \dots, N-1$$

(Gleichung 63)

Die entsprechende Retransformation wird über Gleichung 64 berechnet.

$$x(n) = \sum_{k=0}^{N-1} X(k) \cdot e^{i \cdot k \cdot n \cdot \frac{2\pi}{N}} \quad ; \quad n = 0, 1, \dots, N-1$$

(Gleichung 64)

Durch den Algorithmus der schnellen Fouriertransformation (fast fourier transformation, FFT) wird die extrem rechenaufwendige Bestimmung der DFT stark beschleunigt [83].

Dieser in der Delphi-Unit „fft.dcu“ (programmiert vom Verfasser dieser Arbeit) implementierte, rekursiv arbeitende Algorithmus nutzt die Symmetrieeigenschaften und die Periodizität der komplexen Exponentialfunktion aus. Dazu wird ein Datensatz der Länge N in zwei Datensätze der Länge $N/2$ aufgespalten, die jeweils die Daten mit gerader, bzw. ungerader Nummer enthalten. Mit den zwei erhaltenen Datensätzen wird jeweils genauso weiter verfahren, bis die Länge eines Datensatzes nicht mehr durch zwei teilbar ist. Dann werden die DFTs der nun kleinen Datensätze berechnet, und jeweils zwei zusammengehörige DFTs über die Formel

$$X(k) = X_1(k) + W^k \cdot X_2(k) \quad ; \quad 0 \leq k < \frac{N}{2}$$

$$X\left(k + \frac{N}{2}\right) = X_1(k) - W^k \cdot X_2(k) \quad ; \quad 0 \leq k < \frac{N}{2}$$

(Gleichung 65)

zur DFT desjenigen Datensatzes verknüpft, aus dem die beiden kleineren Datensätze durch Aufspaltung hervorgegangen sind. Der Parameter W in Gleichung 65 hat dabei den Wert $\exp(-2\pi/N)$, wobei N die Länge der zusammen gesetzten DFT angibt. Auf diese Weise wird mit allen erhaltenen DFTs weiter verfahren, bis schließlich die DFT des ursprünglichen Datensatzes zusammengesetzt ist. Die Retransformation des komplexen Frequenzspektrums zu einem Datensatz wird nach einem analogen Algorithmus berechnet.

Durch gezielte Manipulation des komplexen Frequenzspektrums eines Datensatzes vor der Retransformation kann ein Datensatz z. B. von hochfrequenten Schwingungsanteilen gereinigt werden, wodurch eine Glättung des Datensatzes erreicht wird. Hierzu wird die DFT des Datensatzes mit einer Tiefpass-Funktion multipliziert, sodass die hochfrequenten Anteile der DFT ausgefiltert werden. Es gibt eine Vielzahl von Tiefpass-Funktionen, wie z. B. den einfachen Rechteck-Tiefpass oder den Gaußschen Tiefpass. Zum Zweck der Rauschunterdrückung in Datensätzen hat sich im Rahmen dieser Arbeit der Butterworth-Tiefpass [84] als besonders günstig erwiesen, dessen frequenzabhängige Funktion $B(f)$ durch Gleichung 66 gegeben ist.

$$B(f) = \frac{1}{1 + \left(\frac{f}{f_B}\right)^{2 \cdot N_B}}$$

(Gleichung 66)

Der Parameter N_B in Gleichung 66 gibt die Ordnung des Tiefpassfilters an, während f_B diejenige Frequenz bezeichnet, ab welcher die Frequenzanteile in der DFT unterdrückt werden sollen. Der Funktionswert von $B(f)$ ist dabei für $f = f_B$ immer gleich 0,5.

Nach dem Nyquist-Shannonschen Abtasttheorem sind allerdings nur Filterfrequenzen f_B sinnvoll, die unterhalb der halben Messfrequenz liegen, mit welcher der entsprechende Datensatz aufgezeichnet wurde [85].

Werden die einzelnen diskreten Daten eines Datensatzes bzw. der entsprechenden DFT von $i = 0$ bis $i = N-1$ durchnummeriert, so ergibt sich die der jeweiligen Nummer i entsprechende Frequenz f_i zu:

$$f_i = \frac{i}{N} \cdot F_M$$

(Gleichung 67)

In Gleichung 67 bezeichnen F_M die Messfrequenz und N die Anzahl der Daten im Datensatz. Mit Hilfe der Gleichungen 66 und 67 kann somit für jede Einstellung der Parameter N , F_M , f_B und N_B der gewünschte diskrete Datensatz eines Butterworth-Tiefpasses errechnet werden, mit welchem die DFT des Datensatzes dann zwecks Filterung zu multiplizieren ist. Aufgrund des Nyquist-Shannonschen Abtasttheorems und der Symmetrie der DFT muss der Datensatz $B(i)$ der diskreten Butterworth-Funktion allerdings abschnittsweise definiert werden (vgl. Gleichung 65):

$$B(i) = \frac{1}{1 + \left(\frac{f_i}{f_B}\right)^{2 \cdot N_B}} ; 0 \leq i < \frac{N}{2}$$

$$B(N-1-i) = B(i) ; 0 \leq i < \frac{N}{2}$$

(Gleichung 68)

Nach der Multiplikation der DFT des Datensatzes mit der Filterfunktion wird die Retransformation der neuen DFT in die Zeitdomäne durchgeführt, und so der entsprechend gefilterte Datensatz erhalten. Eine Demonstration der Funktionalität dieser Vorgehensweise befindet sich im Anhang 3.

Aufgrund der voran gegangenen Überlegungen ist es sinnvoll, die Länge N der Datensätze so zu wählen, dass N möglichst oft glatt durch zwei teilbar ist, damit der Algorithmus der schnellen Fourier-Transformation (FFT) effektiv arbeiten kann, und die Filterfunktion nach Gleichung 68 eindeutig definiert ist.

Abbildung 38 zeigt einen typischen Messdatensatz, der mit einer Messfrequenz von ca. 20,8 kHz aufgezeichnet wurde, und aus 30720 ($= 15 \cdot 2^{11}$) Daten besteht. Der darauf (im Frequenzraum) angewendete Butterworth-Tiefpass der Ordnung 6 weist eine Filterfrequenz von 25 Hz auf.

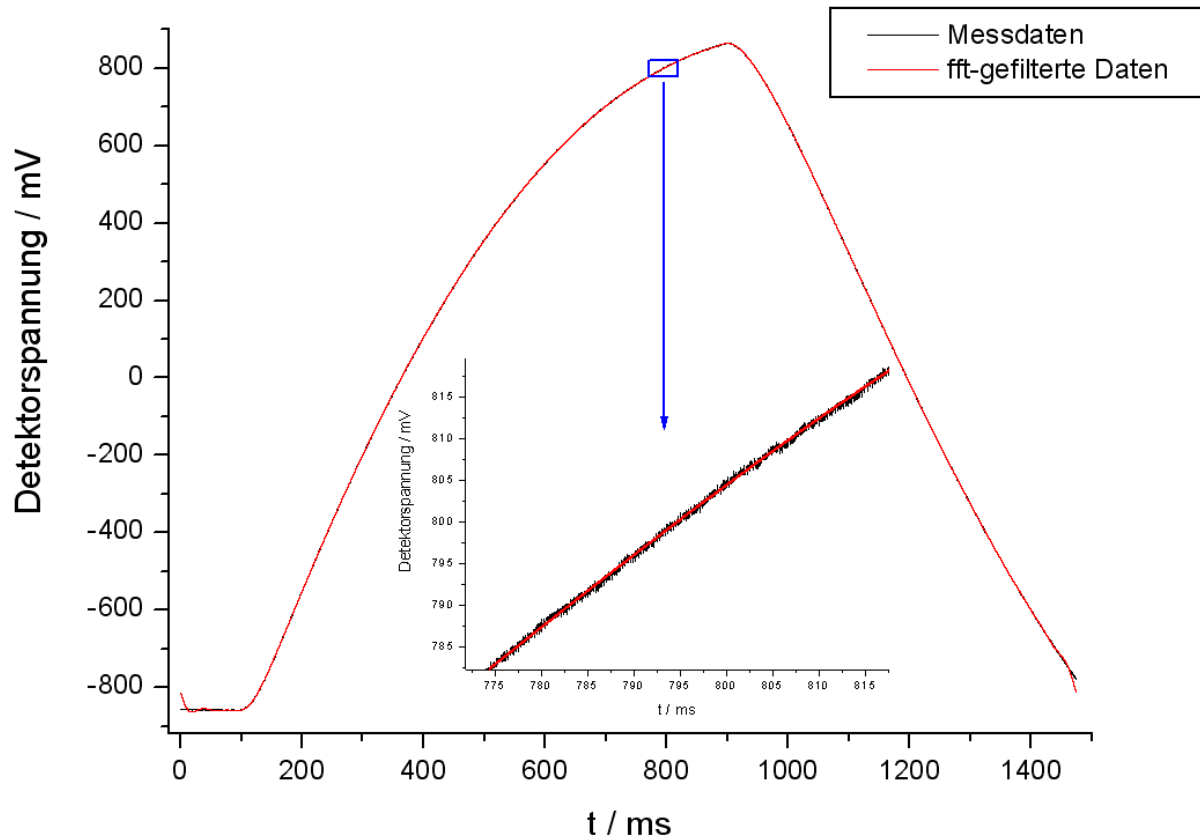


Abb. 38: Typisches getriggertes Detektorsignal (schwarz) und der dazugehörige gefilterte Signalverlauf (rot). Der kleine Graph zeigt den durch das blaue Rechteck markierten Ausschnitt der Messkurve an.

Wie in Abbildung 38 zu erkennen ist, behält die Messkurve durch die Filterung weitgehend ihre Form bei. Durch die Filterung wird jedoch erreicht, dass das bei digitalen Messungen auftretende Bitrauschen, so wie andere hochfrequente Störeinflüsse unterdrückt werden (vgl. Abbildung 38, kleiner Graph).

Die so erreichte Glättung der Messkurve ist notwendig, um diese sinnvoll numerisch ableiten zu können. Hochfrequente Schwingungen auf dem Signal führen zu kleinen Auf- und Abwärtssprüngen der Messkurve, so dass deren Ableitung dauernd zwischen positiven und negativen Werten alterniert, was eine Analyse der Ableitungskurve unmöglich macht. Der Frequenzfilter kann auch direkt auf die Ableitung selbst angewendet werden. Abbildung 39 zeigt die ungefilterte und die gefilterte Ableitung des in Abbildung 38 dargestellten Datensatzes.

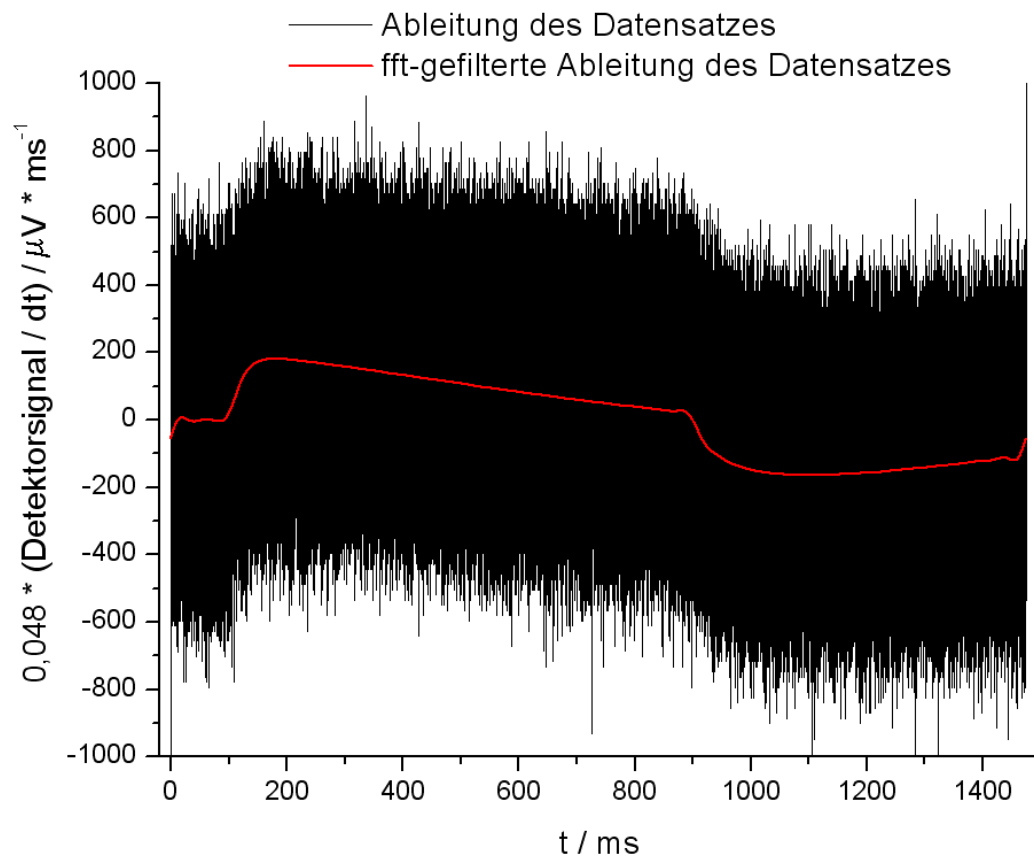


Abb. 39: Die gefilterte (rot) und ungefilterte (schwarz) numerische Ableitung des Datensatzes aus Abbildung 38.

Aus Abbildung 39 ist zu entnehmen, dass bei der ungefilterten Ableitungskurve (schwarz) eine Bestimmung der Extremalwerte sinnlos ist, weil die Funktionswerte von einem starken statistischen Rauschen überlagert sind, so dass der Kurvenverlauf nur grob zu erahnen ist. Durch die Filterung im Frequenzraum ergibt sich jedoch eine interpretierbare Kurve (rot), die einen plausiblen Verlauf der Ableitung des Datensatzes aus Abbildung 38 wieder gibt.

Die numerische Ableitung einer Funktion $f(x)$ kann als zentraler Differenzenquotient [86] definiert werden:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + \delta) - f(x_0 - \delta)}{2 \cdot \delta} ; \delta > 0$$

(Gleichung 69)

Im Falle eines diskreten, äquidistanten Datensatzes D ergibt sich aus Gleichung 69 die allgemeine Rechenvorschrift zur Ermittlung der numerischen Ableitung an einer Stelle i des Datensatzes zu:

$$D'(i) = \frac{D(i+1) - D(i-1)}{2}$$

(Gleichung 70)

Für die beiden Fälle $i = 0$ und $i = N-1$ muss mit dem rechtsseitigen, bzw. mit dem linksseitigen Differenzenquotienten gerechnet werden, was jeweils einer linearen Extrapolation des Datensatzes mit anschließender Berechnung nach Gleichung 70 entspricht.

Der in Abbildung 39 an der Y-Achse auftretende Faktor von 0,048 rührt daher, dass in der allgemeinen Gleichung (70) für die Differenzierung äquidistanter, diskreter Datensätze der konstante Abstand (auf der X-Achse) zwischen zwei benachbarten Werten nicht enthalten ist. Da der betrachtete Datensatz mit einer Messfrequenz von ca. 20,8 kHz aufgezeichnet wurde, beträgt der zeitliche Abstand zwischen zwei aufeinander folgenden Daten stets 0,048 ms. Bei einer Berechnung nach Gleichung 69 hätte also noch durch diesen Wert geteilt werden müssen. Somit enthalten die nach Gleichung 70 berechneten Werte der Ableitung stets einen Faktor, der dem Betrag des äquidistanten Punktabstandes im Datensatz entspricht.

Die Datenauswertung für einen IR-Einstrahlgassensor verfolgt das Ziel, dem Detektorsignal, welches aus einer großen Anzahl von Spannungswerten (Datensatz) besteht, einen einzigen Zahlenwert für die einfallende Lichtintensität zuzuordnen. Somit wird das Detektorsignal in das entsprechend der Datenauswertung resultierende Sensorsignal umgerechnet. Das Sensorsignal wird dann zur Kalibration des IR-Einstrahlgassensors, so wie zur Bestimmung der Gaskonzentration mittels dieses Sensors heran gezogen (vgl. Kapitel 3.2). Ein IR-Einstrahlgassensor kann daher nur dann effektiv zur quantitativen Gasanalyse eingesetzt werden, wenn dessen Sensorsignal in Abhängigkeit von der vorliegenden Analytkonzentration (möglichst stark und gleichmäßig) variiert. Die Datenauswertung muss also besonders diejenigen Abschnitte des Detektorsignals berücksichtigen, die deutlich messbar durch die Analytkonzentration beeinflusst werden.

Keinen Sinn würde es dagegen machen, z. B. nur das Detektorsignal kurz vor dem Einschalten der Strahlungsquelle (vgl. Abbildung 37) zu bestimmen, da sich dieses „Dunkelsignal“ des Detektors, welches auch als dessen Offsetspannung [87] bezeichnet werden kann, nahezu unabhängig von der Analytkonzentration verhält.

Wie bereits beschrieben (s. o.), bieten sich verschiedene mathematische Methoden zur Datenauswertung für das Detektorsignal an. Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Vorgehensweise beruht auf einer Kombination der von Öztekin [81] vorgeschlagenen Bestimmung des Maximums der Ableitung des Detektorsignals mit einer Flächenauswertung. Zunächst wird dazu wie beschrieben die numerische Ableitung jedes Datensatzes gebildet, und diese dann einer FFT-Filterung unterworfen (vgl. Abbildung 39). Abbildung 40 zeigt die Auftragungen dieser FFT-gefilterten Ableitungen des Detektorsignals eines IR-Einstrahlgassensors (Rohrsensor, 300 mm) im Bereich von deren Maxima, für verschiedene Kohlenmonoxidkonzentrationen innerhalb der Gasmesszelle.

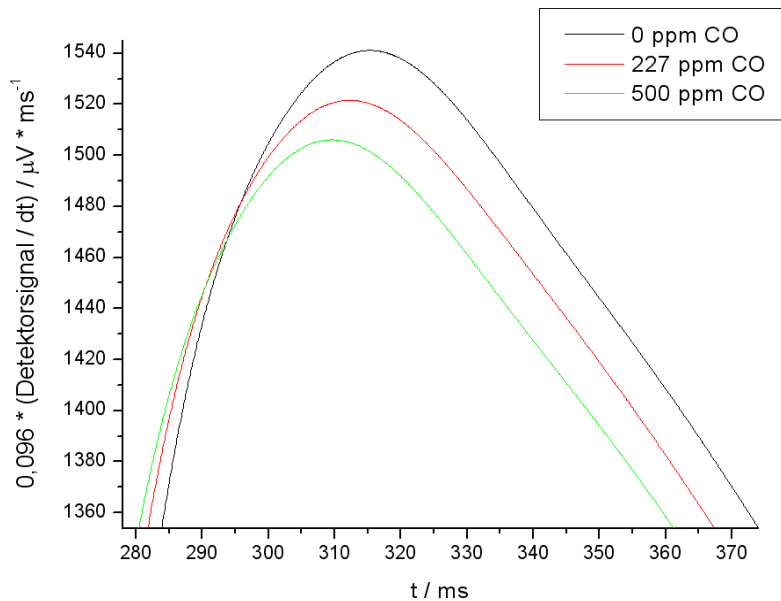


Abb. 40: Graphen der FFT-gefilterten Ableitungen des Detektorsignals bei verschiedenen Kohlenmonoxidkonzentrationen im Bereich von deren Maximalwerten. Die Messfrequenz betrug ca. 10 kHz.

Wie aus Abbildung 40 ersichtlich wird, hängen die Höhen der betrachteten Ableitungsmaxima stark von der im Sensor vorliegenden Analytkonzentration ab. Diese Größe eignet sich daher gemäß den oben genannten Anforderungen gut für die Quantifizierung des Sensorsignals aus dem Detektorsignal (s. o.). Es zeigt sich jedoch, dass neben den Ableitungsmaxima auch die Ableitungsminima der Detektorsignale eine Abhängigkeit von der Analytkonzentration aufweisen. Hierbei wird die Tiefe der Ableitungsminima betrachtet, deren Variation mit der Analytkonzentration allerdings nicht ganz so hoch ausfällt, wie bei der Höhe der Ableitungsmaxima. Abbildung 41 zeigt die Auftragungen der bereits in Abbildung 40 dargestellten Graphen im Bereich von deren Minimalwerten.

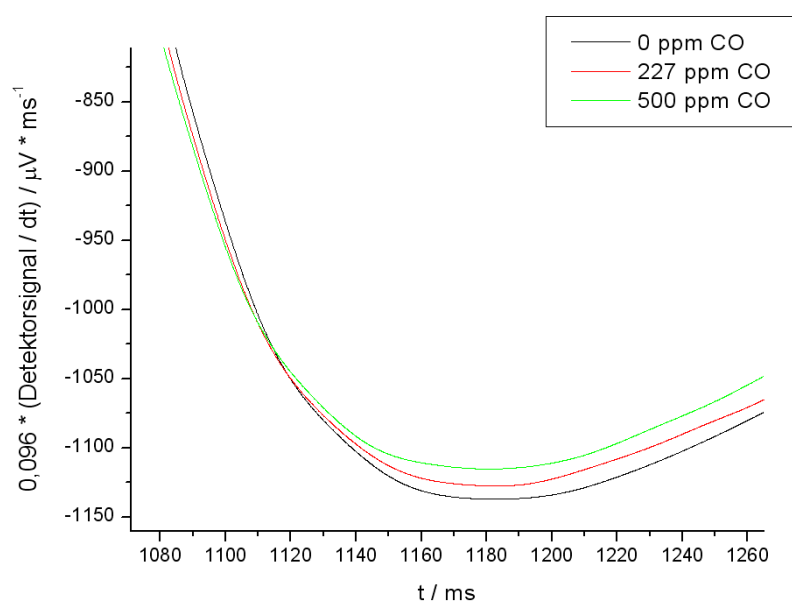


Abb. 41: Graphen der FFT-gefilterten Ableitungen des Detektorsignals bei verschiedenen Kohlenmonoxidkonzentrationen im Bereich von deren Minimalwerten.

Da, wie in Abbildung 41 zu erkennen ist, auch die Minimalwerte der FFT-gefilterten Ableitungen der Detektorsignale von der Analytkonzentration abhängig sind, ist für die Differenz von Ableitungsmaximum und Ableitungsminimum eine besonders starke Abhängigkeit von der Analytkonzentration gegeben. Hierbei addieren sich die Effekte, dass das Ableitungsmaximum (positiver Wert) mit zunehmender Analytkonzentration abfällt, während das Ableitungsminimum (negativer Wert) bei steigender Gaskonzentration größer wird.

Da bei den Messungen der Datensätze das Detektorsignal mit Hilfe des Picoskops getriggert wird, liegt keine für alle Messungen konstante Zeitspanne zwischen dem jeweiligen Start der Pulsung der Lichtquelle und dem Beginn der jeweiligen Datenaufzeichnung. Aus diesem Grunde ist eine Einbeziehung der Lage der Ableitungsextrema bezüglich der X- (Zeit-) Achse (vgl. Abbildung 40) in die Datenauswertung nicht sinnvoll. Ein aufgrund einer hohen Analytkonzentration schwächer ausfallendes Detektorsignal wird unter Umständen einige Millisekunden später getriggert, als ein starkes Detektorsignal bei geringer Analytkonzentration. Zusammen mit dem Rauschen des Detektorsignals führt dieses zwar zu einer leichten, aber schwer exakt voraus zu sagenden Verschiebung des gesamten Datensatzes entlang der Zeitachse. Hinzu kommt, dass bei dem Triggerverfahren eine geringe Änderung der Offsetspannung des Detektors zur entsprechenden Verschiebung aller weiterer Datensätze führt, da sich dadurch insgesamt die Differenz der Offsetspannung zum eingestellten Triggerlevel verändert. Hierbei ist zudem auch die anliegende Offsetspannung des Detektors einem statistischen Rauschen unterworfen. Die Information über die Analytkonzentration, die in der Lage der Ableitungsextrema bezüglich der X-Achse enthalten ist, ist daher von einem sehr starken Rauschen (Fehlerfortpflanzung) überlagert, und auch nicht driftbeständig.

Dagegen sind die Y-Werte der (gefilterten) Ableitungsextrema weitgehend unabhängig von der Offsetspannung des Detektors, da diese aus der zeitlichen Änderung des Detektorsignals resultieren. Das Rauschen der Extremalwerte der FFT-gefilterten Ableitungen ist also nur durch die Wiederholbarkeit [88] der Datenmessung mit anschließender Ableitung und Filterung gegeben. Hier kann ausgenutzt werden, dass die Messungen mit hoher Frequenz aufgezeichnet werden, so dass durch eine Mittelung über mehrere Werte im Bereich der Ableitungsextrema eine weitere, statistische Rauschunterdrückung vorgenommen werden kann. Abbildung 42 stellt den kompletten Graphen der FFT-gefilterten numerischen Ableitung eines Messdatensatzes aus 20480 Spannungswerten dar.

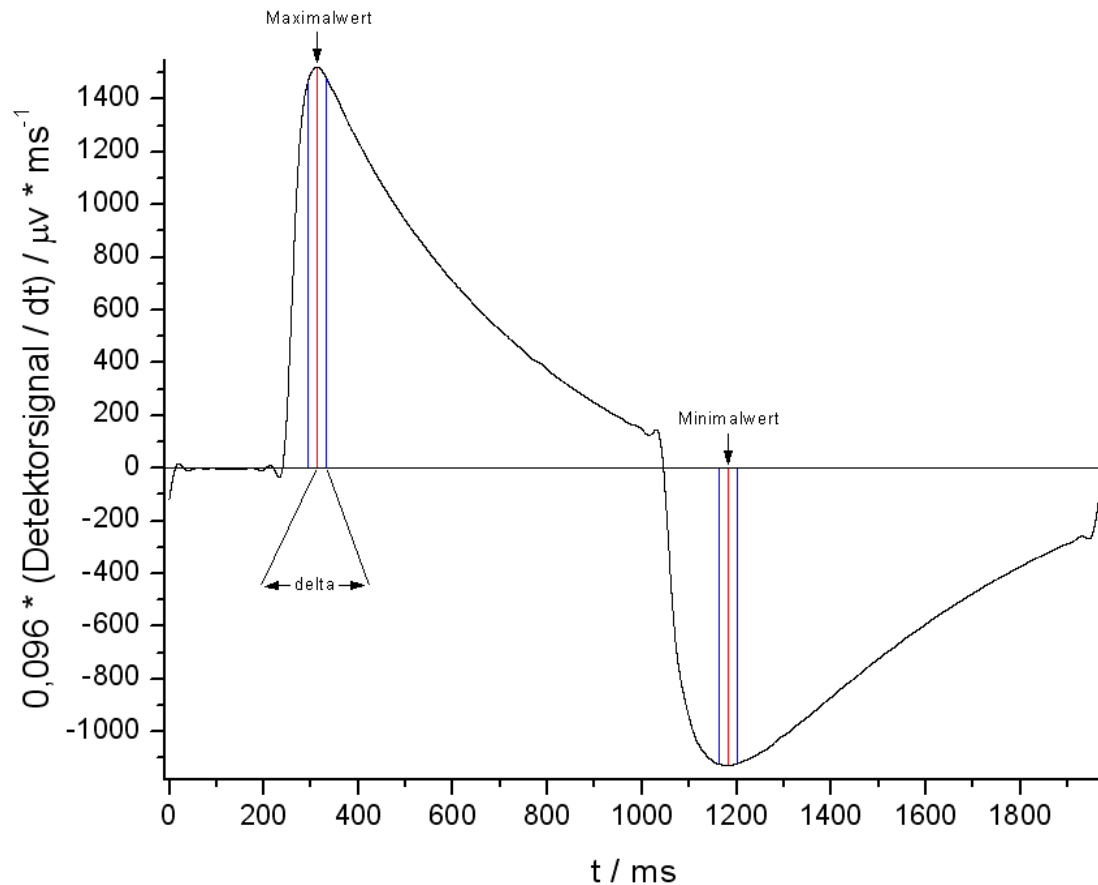


Abb. 42: FFT-gefilterte numerische Ableitung eines mit ca. 10 kHz aufgenommenen Messdatensatzes.

Da die Messfrequenz des verwendeten Picoskopes konstant ist, haben benachbarte Datenpunkte $D'(i)$ des Graphen in Abbildung 42 äquidistante Abstände zueinander. Die eingezeichnete, konstante Zeitspanne „delta“, die jeweils nach links und rechts von den Extremalwerten abgetragen wird, kann also auch als Anzahl A von Datenpunkten ausgedrückt werden. Hierdurch wird ein Intervall der Breite $2 \cdot A + 1$ festgelegt, innerhalb dessen jeweils über die Daten $D'(i)$ gemittelt wird (blaue Begrenzungslinien in Abbildung 42). Nach der numerischen Bestimmung der X -Werte i_{\max} und i_{\min} der Ableitungsextrema wird das Sensorsignal Y für die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Datenauswertung dann wie folgt definiert:

$$Y = \frac{\sum_{i_{\max}-A}^{i_{\max}+A} D'(i) - \sum_{i_{\min}-A}^{i_{\min}+A} D'(i)}{2 \cdot A + 1}$$

(Gleichung 71)

Würde in Gleichung 71 nicht durch die Intervallgröße geteilt werden, so entspräche das Sensorsignal der Summe der in Abbildung 42 durch die blauen Begrenzungslinien definierten Flächen unter, bzw. über der Ableitungskurve (Analogie zur Flächenauswertung).

Der Auswertungsparameter A wird zweckmäßigerweise so gewählt, dass über das gesamte betrachtete Intervall die Ableitungskurven von Messungen bei unterschiedlichen Analytkonzentrationen deutlich voneinander unterscheidbar sind.

Abbildung 43 zeigt die der Abbildung 42 analoge Auftragung von Ableitungskurven bei unterschiedlicher Gaskonzentration.

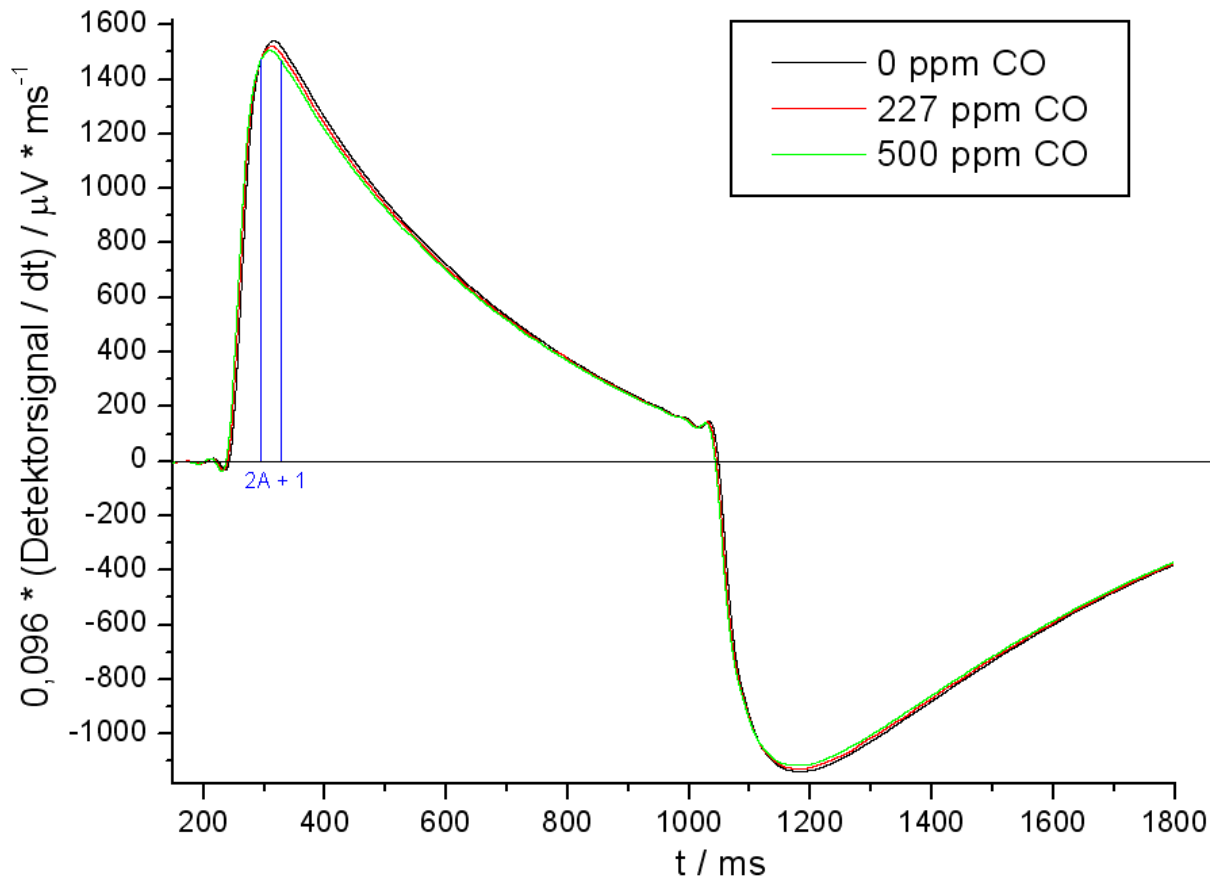


Abb. 43: FFT-gefilterte numerische Ableitungen von Messdatensätzen, die bei unterschiedlichen Kohlenmonoxidkonzentrationen aufgenommen wurden.

In Abbildung 43 ist am Maximum der grünen Messkurve in blau ein Vorschlag für die Auswertungsintervallgröße eingezeichnet. Wie ersichtlich ist, würde eine Erweiterung des Intervalls nach links kaum noch Informationen über die Analytkonzentration erbringen, da die Messkurven sich dort einander angleichen. Der Maximale Unterschied der Messkurven, bezogen auf deren Y-Werte, ist jeweils durch die Extremalwerte selbst gegeben, so dass in dieser Hinsicht das Auswertungsintervall möglichst klein gewählt werden sollte.

Andererseits ist eine große Intervallbreite wünschenswert, um einen statistisch möglichst sicher definierten Mittelwert nach Gleichung 71 zu erhalten. Bei der Wahl des Auswertungsparameters A besteht also eine auf das Signal-Rauschverhältnis einer Gasmessung bezogene Optimierungsmöglichkeit. Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen mit ca. 20 kHz hat sich ein Wert von $A = 1300$ („delta“ ≈ 65 ms) als günstig erwiesen. Ebenso bestehen bezüglich der Qualität einer Gasmessung bei dem beschriebenen Auswertungsverfahren Optimierungsmöglichkeiten bei der Wahl der Filterfrequenz, der Filterordnung (s. o.), so wie der Messfrequenz, wobei diese jedoch gerätebedingt limitiert ist. Die Filterparameter wurden üblicherweise zu $f_B = 5$ Hz und $N_B = 6$ gewählt.

4.3 Experimente und Simulationen

Für alle vorgenommenen Messungen wurde der in Kapitel 4.1 beschriebene Messaufbau verwendet, wobei die Temperatur, soweit nicht anders angegeben, stets auf 25° C eingestellt wurde. Im Rahmen dieser Arbeit soll besonders der Einfluss der Gasmesszelle, also des optischen Systems, auf die Qualität von Gassensoren untersucht werden. Da es sich bei Kohlenmonoxid um ein recht schwer auf IR-Basis zu bestimmendes Gas handelt (vgl. Kapitel 2), soll hierfür eine angepasste Gasmesszelle entwickelt werden. Die hierbei angestrebte Optimierung des Lichtweges soll mit Hilfe von Simulationsrechnungen auf ein theoretisches Modell übertragen werden (vgl. Kapitel 3.4). Zudem werden die Eigenschaften realer Gasmesszellen im theoretischen Modell beurteilt. Die Vorhersagen aus dem theoretischen Modell sollen dann mit den Ergebnissen realer Messungen verglichen werden.

Die Einflüsse der anderen (nicht optischen) Komponenten des Messsystems auf die Qualität der damit durchgeführten Kohlenmonoxidmessungen sind weitgehend technischer Natur. Obwohl es hier zahlreiche Ansatzmöglichkeiten zur Optimierung gibt (vgl. Kapitel 4.1), können im Rahmen der hier durchgeführten Experimente diese Einflüsse lediglich möglichst konstant gehalten werden. Die getroffenen Aussagen beziehen sich daher stets auf die vorliegende technische Ausführung des gesamten Messsystems. Hierbei ist davon auszugehen, dass eine technische Verbesserung einzelner Komponenten (vor allem der Verstärkungselektronik und/oder der Aufzeichnungselektronik) zu einer großen Qualitätssteigerung des gesamten Messsystems führt. Bei einem anders gestalteten Messsystem wären also die Simulationsparameter (vor allem die Mindestweglänge; vgl. Kapitel 3.4.3) entsprechend anzupassen.

4.3.1 Abschätzung des Reflexionskoeffizienten metallischer Oberflächen

Um optische Systeme, in denen Reflexionen stattfinden, mit dem Strahlensimulationsprogramm simulieren zu können, muss den reflektierenden Oberflächen ein Reflexionskoeffizient (vgl. Kapitel 3.4.3) zugewiesen werden. Zunächst wurden als Gasmesszellen elektropolierte Edelstahlrohre der Firma Dockweiler mit einem Innendurchmesser von 8 mm verwendet.

Die einfachste Ausführung eines optischen Systems aus Strahlungsquelle, Gasmesszelle und Detektor ergibt sich dann analog zum klassischen IR-Einstrahlgassensor. Abbildung 44 zeigt den nicht maßstabgerechten Aufbau der so erhaltenen optischen Systeme.

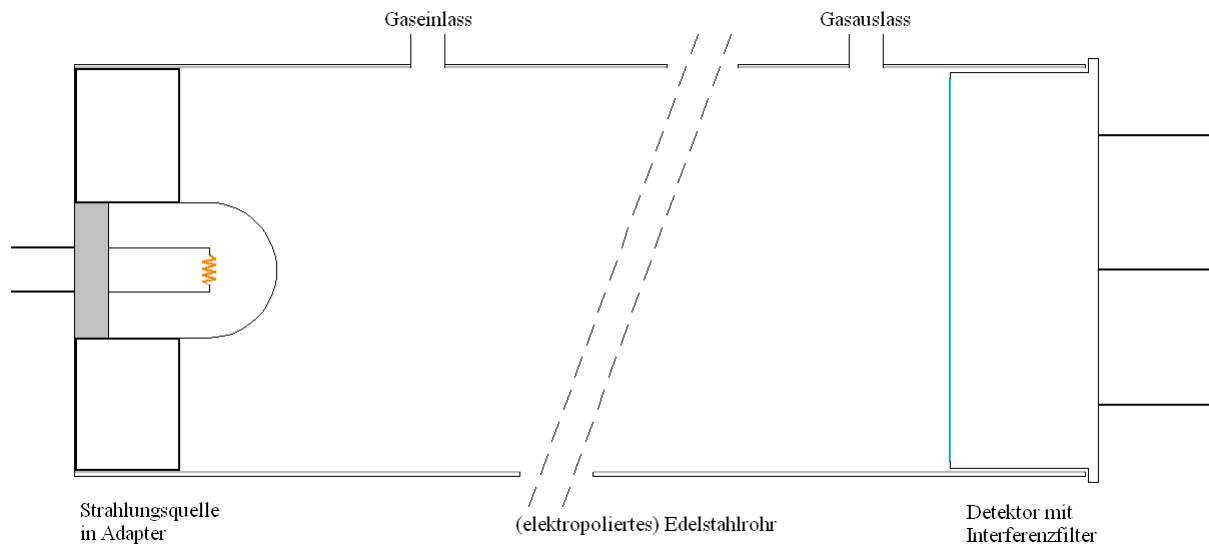


Abb. 44: einfachste Ausführung eines IR-Einstrahlungssensors in Rohrform. Die gestrichelt gezeichneten diagonalen Linien deuten an, dass die Rohrlänge u. U. tatsächlich erheblich größer ist, als durch die Proportionen der Zeichnung dargestellt wird. Ein kleiner Teil der emittierten Strahlung fällt direkt auf den Detektor; die meisten Strahlen werden jedoch zuvor mehrmals an den Rohrwänden reflektiert.

Als Strahlungsquelle diente eine Glühlampe vom Typ 1089 der Firma Gilway, die mit einer Betriebsspannung von 5 V nach dem üblichen Pulsprogramm (vgl. Kapitel 4.1) betrieben wurde. Als Detektor diente wie üblich ein pyroelektrischer Detektor vom Typ LIE 316 der Firma Infratec, mit Interferenzfilter bei $4,66 \mu\text{m}$. Die Messreihe zur Ermittlung des Reflexionskoeffizienten der elektropolierten Rohrwandfläche wurde so durchgeführt, dass jeweils Rohre unterschiedlicher Länge eingesetzt wurden, und bei gleicher Verstärkung das entsprechende Sensorsignal ermittelt wurde. Dabei wurden die Rohre ständig mit synthetischer Luft gespült.

Daneben wurden für verschiedene Reflexionskoeffizienten Simulationsrechnungen für die optischen Systeme mit allen eingesetzten Rohrlängen durchgeführt. Die errechneten Intensitäten wurden dann für jeden Reflexionskoeffizienten auf die Intensität des kürzesten Rohres (100 mm) normiert. Ebenso wurden die gemessenen Sensorsignale auf das Signal bei der kürzesten Rohrlänge normiert. Abbildung 45 zeigt die Auftragung der normierten Intensitäten gegen die Rohrlänge sowohl für die durchgeführte Messreihe, als auch für die Simulationen mit verschiedenen Reflexionskoeffizienten.

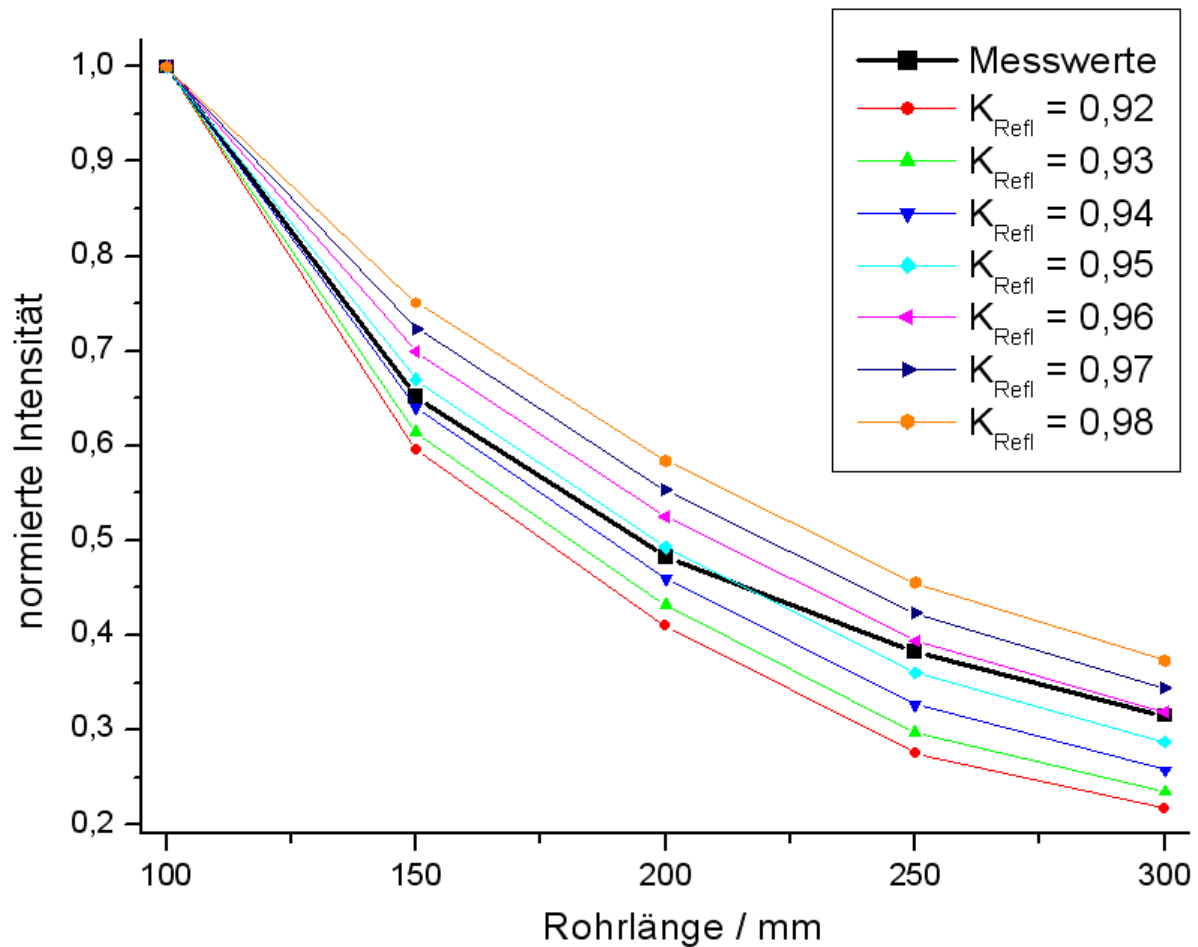


Abb. 45: Verlauf der normierten Intensität in Abhängigkeit von der Rohrlänge. Die schwarze Kurve stellt die Werte der durchgeführten Messreihe dar, die anderen Kurven zeigen den berechneten Intensitätsverlauf bei verschiedenen, angenommenen Reflexionskoeffizienten.

Wie aus Abbildung 45 ersichtlich wird, weisen die berechneten Kurven und die gemessene Kurve weitgehend die gleiche Form auf. Da die gemessenen Werte durchgehend zwischen den Simulationskurven für Reflexionskoeffizienten von 0,94 und 0,96 liegen, kann abgeschätzt werden, dass der tatsächliche Reflexionskoeffizient der elektropolierten Metalloberfläche (für $4,66 \mu\text{m}$) bei ungefähr 95% liegt. Das scheinbare Anwachsen des gemessenen Reflexionskoeffizienten mit zunehmender Rohrlänge kann dadurch erklärt werden, dass das Simulationsprogramm von einer Punktquelle ausgeht, dieses Modell von der realen Strahlungsquelle jedoch nur annähernd erfüllt wird.

4.3.2 Abschätzung der Mindestweglänge

Da bei den in Abbildung 45 dargestellten optischen Systemen bei einer Rohrlänge von z. B. 300 mm und einem Reflexionskoeffizienten von 0,95 nach den Berechnungen mit dem Strahlensimulationsprogramm nur ca. 3% der emittierten Strahlungsintensität auf den Detektor gelangt, sind diese Aufbauten nur begrenzt (bei kleiner Rohrlänge) sinnvoll für die quantitative Gasanalyse einsetzbar.

Eine Verbesserung der Strahlungsausbeute kann hier durch den Einsatz eines Parabolspiegels erreicht werden, der für eine Teilparallelisierung der emittierten Strahlen in Richtung der Rohrachse sorgt. Dadurch wird auch die effektive Lichtweglänge der Strahlung ähnlicher zur Rohrlänge, da dann deutlich weniger Reflexionen an der Rohrwand stattfinden. Die Realisierung dieses verbesserten optischen Systems wurde durch den Einsatz des in Kapitel 3.5 beschriebenen Lampen-Reflektor-Systems der Firma Gilway durchgeführt. Abbildung 46 zeigt den schematischen Aufbau der verbesserten Optik der IR-Einstrahlungssensoren mit Parabolspiegel.

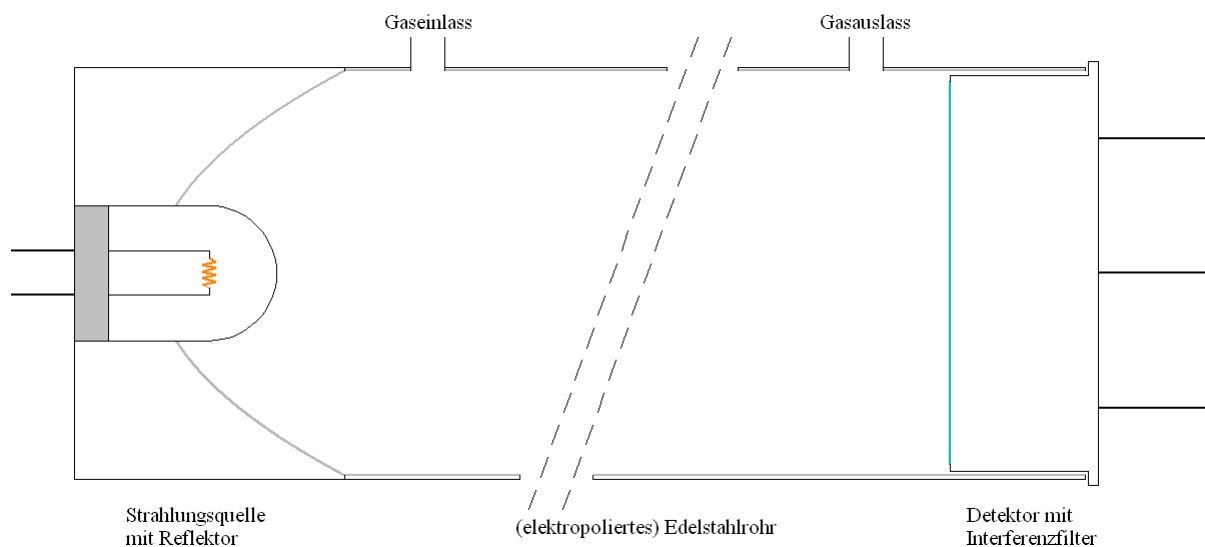


Abb. 46: schematischer Aufbau der Optik von IR-Einstrahlungssensoren mit Parabolspiegel in Rohrform (nicht maßstäblich).

Drei solcher Rohr-Sensoren mit Rohrlängen von 100, 200 und 300 mm wurden dann mit Messgas verschiedener Kohlenmonoxidkonzentration beaufschlagt, und jeweils das Sensorsignal (vgl. Kapitel 4.2) ermittelt und aufgezeichnet. Abbildung 47 zeigt die grafische Auftragung der auf null normierten Sensorsignale gegen die Zeit und in Abhängigkeit von der vorliegenden Kohlenmonoxidkonzentration.

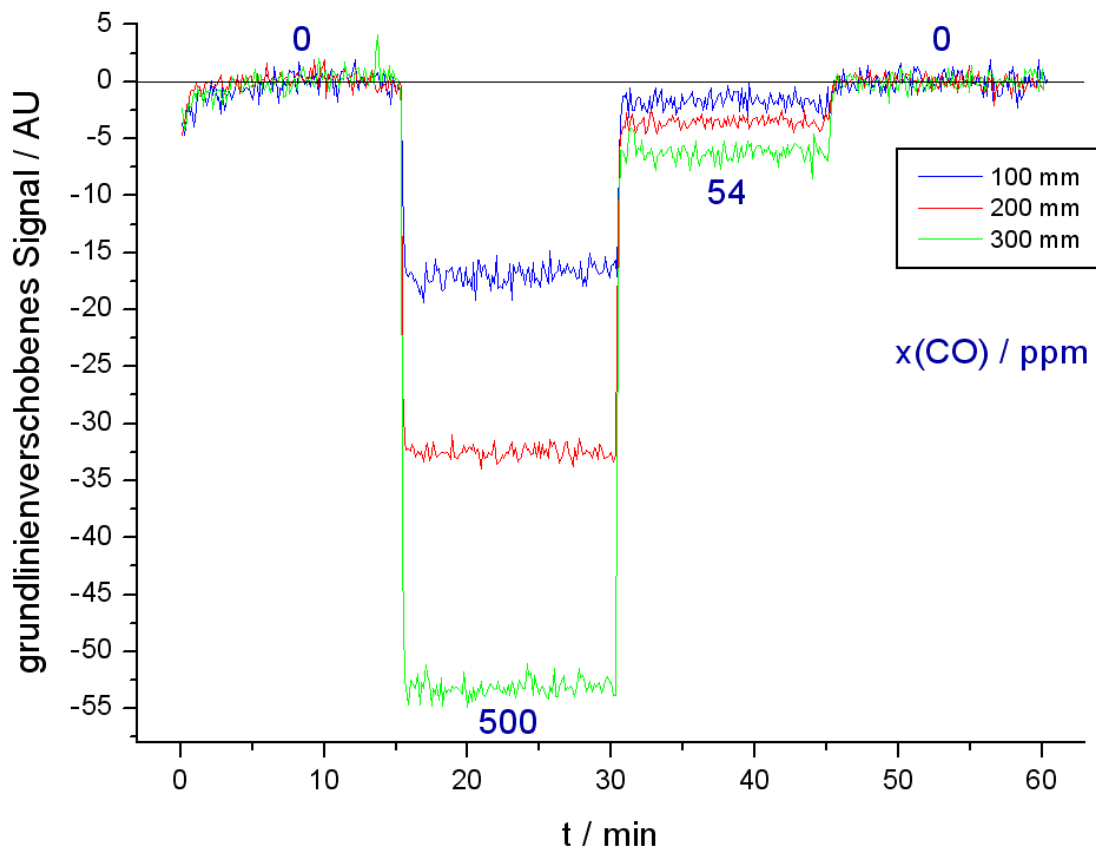


Abb. 47: Auf null verschobene Sensorsignale verschieden langer Rohr-Sensoren bei Beaufschlagung mit verschiedenen Kohlenmonoxidkonzentrationen in synthetischer Luft. Die Zahlen an den Kurven geben jeweils die eingestellte Kohlenmonoxidkonzentration im betreffenden Zeitintervall (Stufen) an.

An dieser Stelle sei bemerkt, dass die Einheit ppm (parts per million) eigentlich den Molenbruch x einer Komponente in einem Gasgemisch bezeichnet, sich diese Einheit jedoch in der Gasanalyse zur Quantifizierung von Gaskonzentrationen eingebürgert hat. IR-Einstrahlungssensoren messen im Grunde genommen den Partialdruck der betrachteten Komponente. Unter der Annahme idealen Verhaltens ist nach dem Dalton-Gesetz der Molenbruch jedoch direkt proportional zur Konzentration und zum Partialdruck des Gases [30]. Da das Messgas in der Regel mit dem Aussendruck im Gleichgewicht steht, beträgt der Proportionalitätsfaktor zwischen Molenbruch und Partialdruck unter Normalbedingungen den Wert des Standarddrucks von einem bar. Da die Schwankungen des äußeren Luftdrucks relativ gering sind, und für eine zeitlich begrenzte Messung ohnehin nur die Konstanz des Aussendrucks während dieser Zeit relevant ist, stellt daher der Molenbruch ein gutes Maß für die Gaskonzentration dar. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass Messungen mit IR-Einstrahlungssensoren prinzipiell druckabhängig sind.

Wie aus Abbildung 47 ersichtlich wird, nimmt der Signalhub der Sensoren zwischen synthetischer Luft und der Maximalkonzentration an Kohlenmonoxid (500 ppm) mit steigender Rohrlänge zu. Entscheidend für die Qualität einer Messung ist daneben aber auch die Wiederholbarkeit der Messergebnisse bei (während einer Stufe) konstanter Gaskonzentration.

Die Kombination dieser beiden Größen führt zum Beurteilungskriterium des Rauschens, bzw. des Signal-Rausch-Verhältnisses [89] einer Messung.

Bei einer Erhöhung der Rohrlänge im beschriebenen optischen System treten zwei in Bezug auf die Qualität der Messung gegensätzliche Effekte auf. Einerseits wird die Lichtweglänge erhöht, wodurch der Analyt mehr Möglichkeiten erhält, mit der emittierten Strahlung in Wechselwirkung zu treten. Dieser Effekt wirkt sich positiv auf die Signaldifferenz bei unterschiedlichen Analytkonzentrationen aus. Andererseits sinkt die am Detektor eintreffende Gesamtintensität der Strahlung, da diese zum Teil bei Reflexionen im Rohrrinneren absorbiert wird. Dieser Effekt wirkt sich, abhängig von der Sensitivität des Detektors, im allgemeinen negativ auf die Stabilität des Sensorsignals aus. Bei Annahme eines Reflexionskoeffizienten von 0,95 für alle Metalloberflächen betragen die Anteile der am Detektor registrierten Intensität nach Berechnungen mit dem Strahlensimulationsprogramm für das 100 mm Rohr 34,9%, für das 200 mm Rohr 27,6% und für das 300 mm Rohr 22,1%. Da bei der Messung im 100 mm Rohr offenbar die Signalstabilität nicht besser ist, als bei den längeren Sensoraufbauten (vgl. Abbildung 47), ist anzunehmen, dass der Detektor hier bereits in die Sättigung [90] lief. Bei allen drei Messungen wurde die Lichtquelle mit einer Betriebsspannung von 5 V gepulst. Die Verstärkung des Detektorsignals wurde jedoch an die Signalstärke angepasst.

Um das Rauschen der Gassensoren in Bezug auf die Gaskonzentration abschätzen zu können, werden zunächst die Kalibrationskurven aus den Messungen errechnet, welche in Abbildung 48 dargestellt sind.

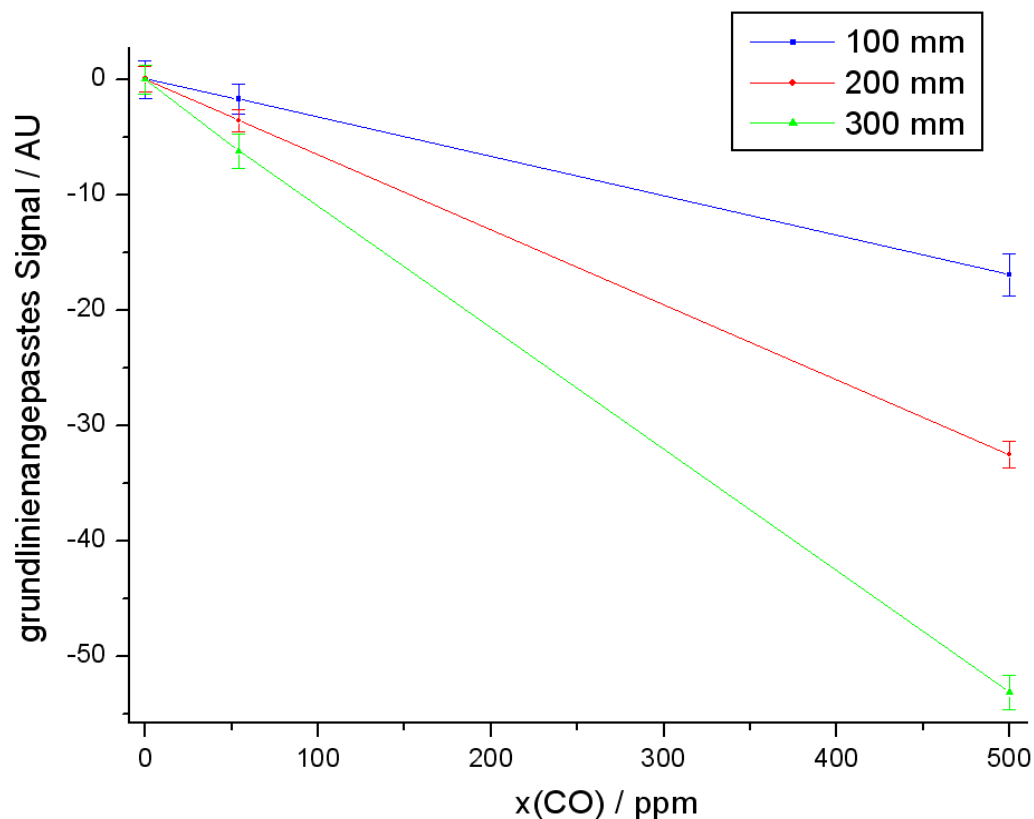


Abb. 48: Kalibrationskurven der Messungen aus Abbildung 47. Alle Sensoren zeigen eine quasi lineare Abhängigkeit des Sensorsignals von der Kohlenmonoxidkonzentration. Dieses besitzt allerdings nur geringe Aussagekraft, da die Kurven jeweils aus nur drei Messpunkten bestehen.

Die Messwerte für die jeweiligen Gaskonzentrationen in Abbildung 48 wurden jeweils durch Mittelwertbildung aus den Werten der Sensorsignale, die im Zeitbereich der entsprechenden Gasstufe liegen (vgl. Abbildung 47), gewonnen. Hierbei wurden 80% der Werte im gegebenen Zeitbereich ausgewertet, die (zeitlich) ersten und letzten 10% der Messwerte wurden nicht berücksichtigt. Die Fehlerbalken ergeben sich jeweils aus dem doppelten Wert der Standardabweichung im ausgewerteten Zeitintervall. Unter der Annahme eines statistischen Rauschens des Sensorsignals wird so sichergestellt, dass ca. 95% aller Messwerte in dem durch die Fehlerbalken begrenzten Bereich liegen [59].

Mit Hilfe der abschnittsweise linear definierten Analysenfunktionen aus den Kalibrationskurven der Sensoren lassen sich anschließend die den Daten in Abbildung 47 entsprechenden Gasmesskurven der verwendeten Sensoren berechnen. Diese sind in Abbildung 49 dargestellt.

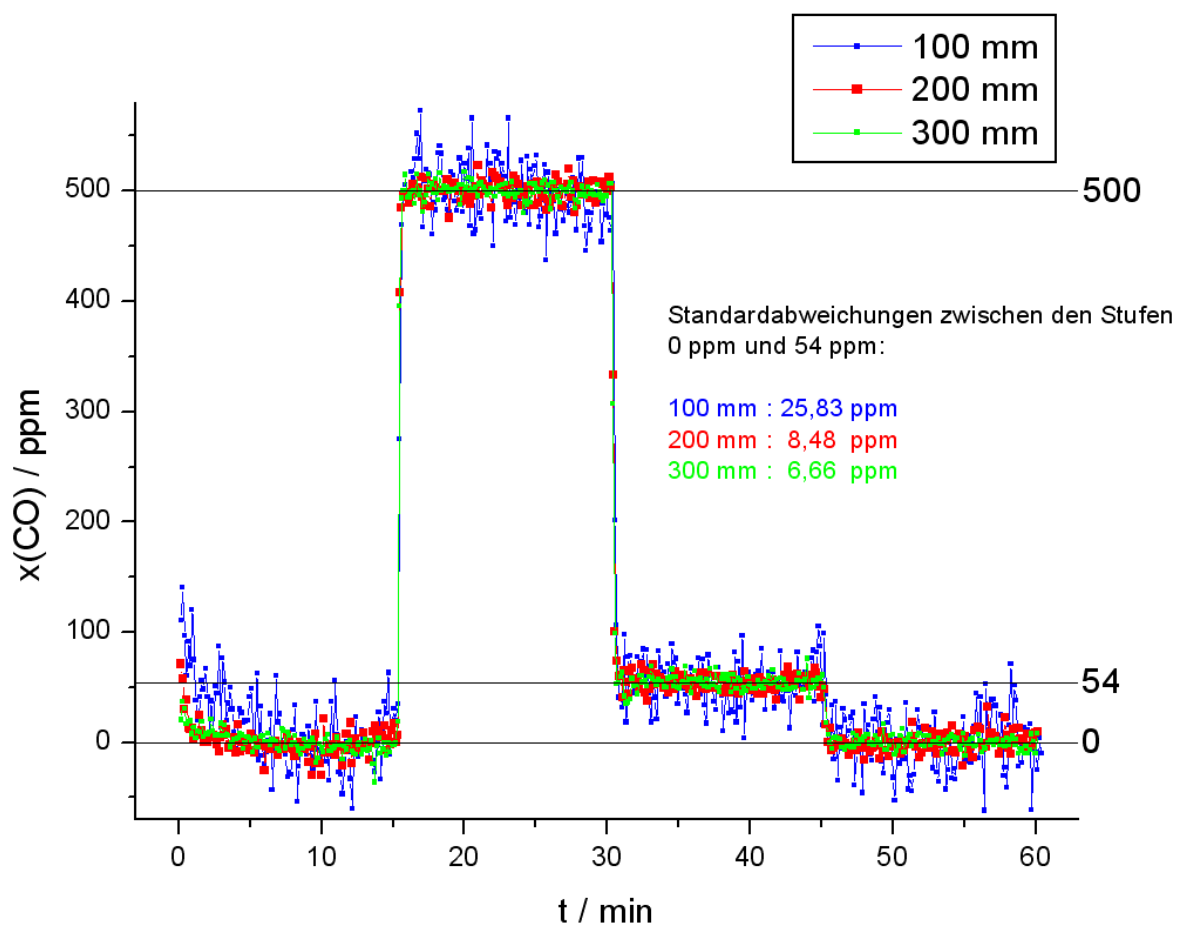


Abb. 49: Gasmesskurven der drei Rohrsensoren mit den Längen 100, 200 und 300 mm (mit Parabolspiegel). Die schwarzen Geraden geben die im entsprechenden Zeitintervall jeweils tatsächlich vorhandene Gaskonzentration an.

Wie in Abbildung 49 zu erkennen ist, weist der IR-Einstrahlungssensor mit einer Rohrlänge von 300 mm das geringste Rauschen auf (ca. $\pm 13,5$ ppm), während der kürzeste Gassensor mit 100 mm Rohrlänge um ca. ± 52 ppm rauscht. Die in Abbildung 49 angegebenen Standardabweichungen zwischen den Gasstufen von 0 ppm und 54 ppm betragen jeweils den Wert der Standardabweichung des Sensorsignals bei der 0 ppm-Stufe, falls diese Standardabweichung größer ist als bei der 54 ppm-Stufe.

Ansonsten wird der Wert der Standardabweichung des Sensorsignals bei der 54 ppm-Stufe gewählt, um jeweils den maximalen Messfehler zu erfassen. Das Rauschen der Gassensoren ergibt sich dann für den Bereich kleiner Kohlenmonoxidkonzentrationen als doppelter Wert der maximalen Standardabweichung zwischen den beiden Gaskonzentrationen von 0 ppm und 54 ppm.

Die Nachweisgrenze [91] einer Messmethode ist definiert als dreifacher Wert der Standardabweichung des Messsignals im Bereich kleiner Konzentrationen, womit diese für die drei Gassensoren zu etwa 80, 25 und 20 ppm beziffert werden kann.

Die in Abbildung 49 dargestellten Messkurven der IR-Einstrahlungssensoren ordnen jedem Lampenpuls (vgl. Kapitel 4.2) einen Messwert der Kohlenmonoxidkonzentration zu. Bei der üblichen Pulsung der Strahlungsquelle mit 0,125 Hz bedeutet dies, dass der betreffende Sensor alle acht Sekunden einen Messwert ausgeben kann. Bei den qualitativen Anforderungen an einen Kohlenmonoxidsensor orientiert sich diese Arbeit jedoch am europäischen Standard EN50291 [92] für Kohlenmonoxidmessgeräte. Dieser schreibt unter anderem vor, dass das Auftreten von Kohlenmonoxidkonzentrationen von mehr als 300 ppm innerhalb von drei Minuten, also 180 s, detektiert werden muss. Dieses ist die kürzeste von einigen im Standard EN50291 vorgeschriebenen Zeitspannen. Unter der Voraussetzung, dass die wahre Ansprechzeit eines Sensors weit unterhalb dieser Zeitspanne liegt (Aus Abbildung 49 lassen sich hierzu Ansprechzeiten von maximal 24 s ablesen.), ist es also ausreichend, wenn ein Sensor z. B. nur alle 40 s einen Wert ausgibt. Dieses kann genutzt werden, um das Sensorsignal auf statistischem Wege zu stabilisieren. Anstatt alle 8 s einen Messwert zu generieren, können so bei den vermessenen IR-Einstrahlungssensoren zunächst ohne Wertausgabe vier Messwerte zwischengespeichert oder aufsummiert werden, bevor nach Erfassung des fünften Wertes die Ausgabe als Durchschnittswert über die letzten 40 s getätigt wird. Abbildung 50 zeigt die jeweils über fünf Werte gemittelten Messkurven der drei betrachteten Gassensoren.

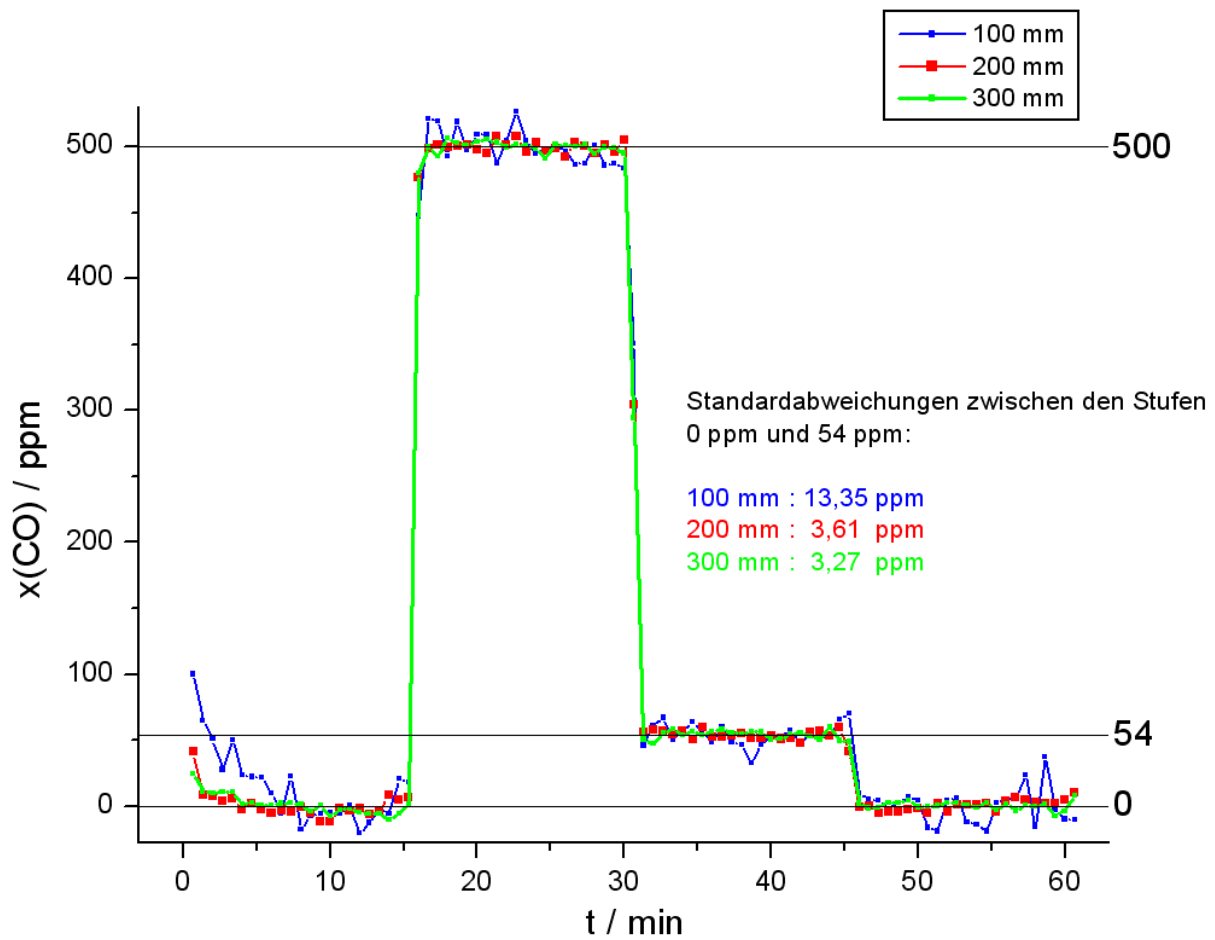


Abb. 50: Gasmesskurven der drei vermessenen Rohrsensoren bei einer Werteausgabe im Zeitintervall von 40 s (vgl. Abbildung 49).

Wie bei dem Vergleich der beiden Abbildungen 49 und 50 deutlich wird, wird durch die Mittelung über jeweils fünf aufeinander folgende Gasmesswerte für alle Sensoren das beobachtete Rauschen des Ausgabewertes beträchtlich reduziert.

Der europäische Standard EN50291 stellt selbstverständlich auch qualitative Anforderungen an das Auflösungsvermögen von Kohlenmonoxidsensoren. Bereits nach diesem Standard zertifizierte Geräte weisen in der Regel im Bereich kleiner Kohlenmonoxidkonzentrationen ein Rauschen von etwa ± 15 bis ± 20 ppm auf [93]. Bei einer Orientierung an dieser Vorgabe bedeutet dies für die drei vermessenen Rohrsensoren mit Parabolspiegel, dass derjenige Gassensor mit einer Rohrlänge von 100 mm nur unbefriedigend genaue Analyseergebnisse für die Kohlenmonoxidkonzentration liefert (vgl. Abbildung 50). Die beiden Gassensoren mit längerem Lichtweg erweisen sich mit Messunsicherheiten von jeweils ca. ± 7 ppm jedoch als brauchbar.

Nach den Berechnungen mit dem Strahlensimulationsprogramm betragen die durchschnittlichen Lichtweglängen in den 200 mm und 300 mm langen Rohrsensoren ungefähr 234,5 mm und 325,5 mm (Im Vergleich dazu betragen die entsprechenden durchschnittlichen Lichtweglängen ohne Parabolspiegel 279,8 mm und 368,5 mm.).

Da der Gassensor mit einer Rohrlänge von 200 mm bereits befriedigende Ergebnisse liefert, der 300 mm lange Gassensor jedoch noch genauere Messungen zulässt (vgl. Abbildung 50), wird die für einen mit dem im Rahmen dieser Arbeit gegebenen Messaufbau ausgestatteten Gassensor erforderliche Mindestweglänge auf 250 mm abgeschätzt. Dieser Wert ist etwas größer als die tatsächlich im 200 mm langen Rohrsensor mit Parabolspiegel auftretende durchschnittliche Lichtweglänge.

4.3.3 Charakterisierung und Miniaturisierung von Sensoroptiken

Zunächst soll der bereits beschriebene Rohrsensor mit Parabolspiegel von 300 mm Länge genauer charakterisiert werden, und zwar sowohl im Hinblick auf seine Kalibrationskurve, als auch anhand der durchgeführten Simulationsrechnung an seinem virtuellen Modell mit Hilfe des Strahlensimulationsprogramms. Abbildung 51 zeigt eine im Vergleich zu Abbildung 48 detailliertere Kalibrationskurve dieses IR-Einstrahlgassensors.

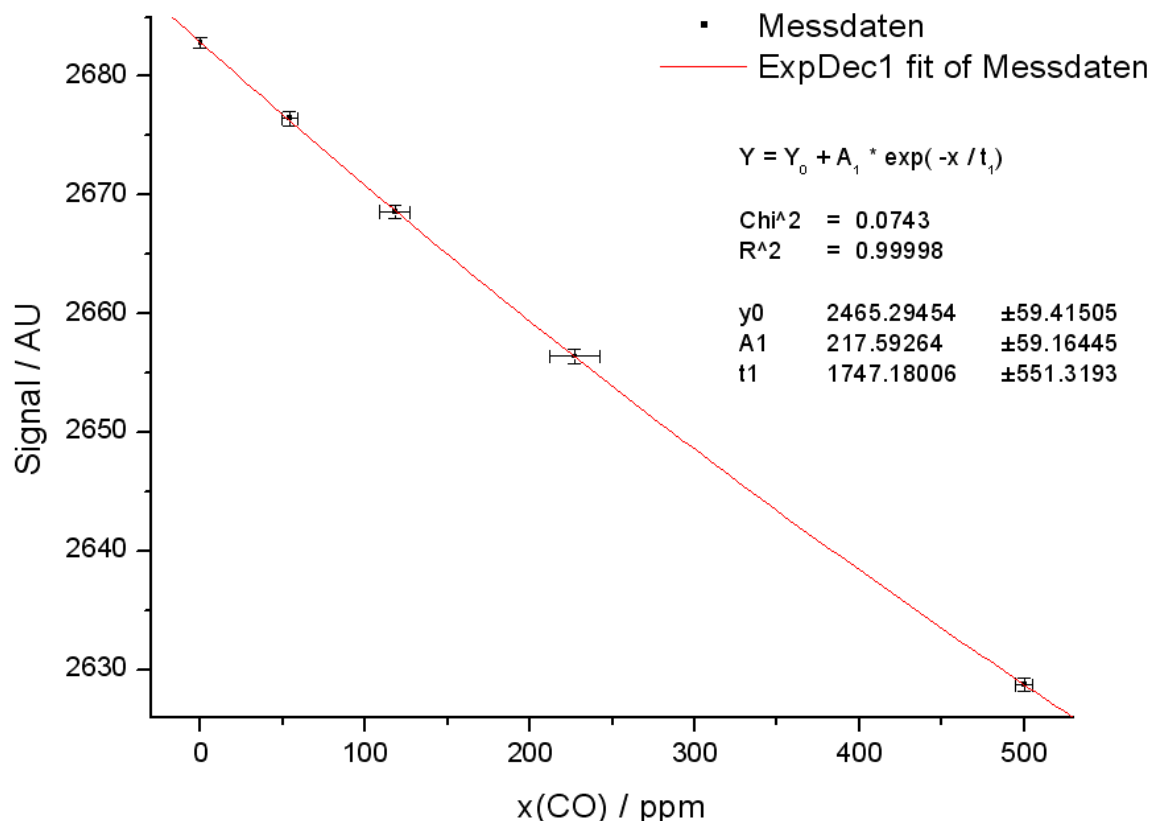


Abb. 51: Kalibrierungsdaten des Rohrsensors mit Parabolspiegel von 300 mm Länge aus Messungen bei fünf verschiedenen Kohlenmonoxidkonzentrationen. Die Fehlerbalken bezüglich der Y-Achse ergeben sich aus den doppelten Standardabweichungen der Sensorsignale im Zeitbereich der jeweils vorliegenden Gaskonzentration (s. o.). Die Fehlerbalken entlang der X-Achse sind durch die Maximalfehler der verwendeten Gasmischanlage gegeben (vgl. Kapitel 4.1). Die rote Kurve stellt die Fittingfunktion nach dem Modell des exponentiellen Abfalls erster Ordnung (vgl. Kapitel 3.2) dar. Das effektive Messintervall betrug 40 s.

Obwohl die in Abbildung 51 dargestellte rote Kalibrierungsfunktion nach dem in Kapitel 3.2 abgeleiteten Modell eines exponentiellen Abfalls erster Ordnung annähernd linear zu verlaufen scheint, besteht bei diesem Modell eine deutlich bessere Korrelation zu den Messwerten, als dies bei einer linearen Regression der Daten erreicht würde. Es wurde jedoch bereits darauf hingewiesen, dass die errechneten Fitting-Parameter, bei deren Ermittlung im übrigen nur die Fehler bezüglich der Y-Achse berücksichtigt werden, stark fehlerbehaftet sind. Die Sensitivität [94, 95] des Sensors, welche im vorliegenden Fall als Absolutwert der Ableitung der Kalibrierungsfunktion definiert ist, ist wegen des quasi linearen Funktionsverlaufs über den gesamten Messbereich annähernd konstant. Daher ist zu erwarten, dass der Sensor über den gesamten Konzentrationsbereich von 0 ppm Kohlenmonoxid bis 500 ppm Kohlenmonoxid ein gleichmäßig geringes Rauschen aufweist.

Abbildung 52 zeigt die Auftragung der Ausgabewerte des Sensors gegen die Zeit bei stufenweise erfolgender Beaufschlagung mit verschiedenen Kohlenmonoxidkonzentrationen und einem Ausgabeintervall von 40 s (Mittelung über fünf Messwerte).

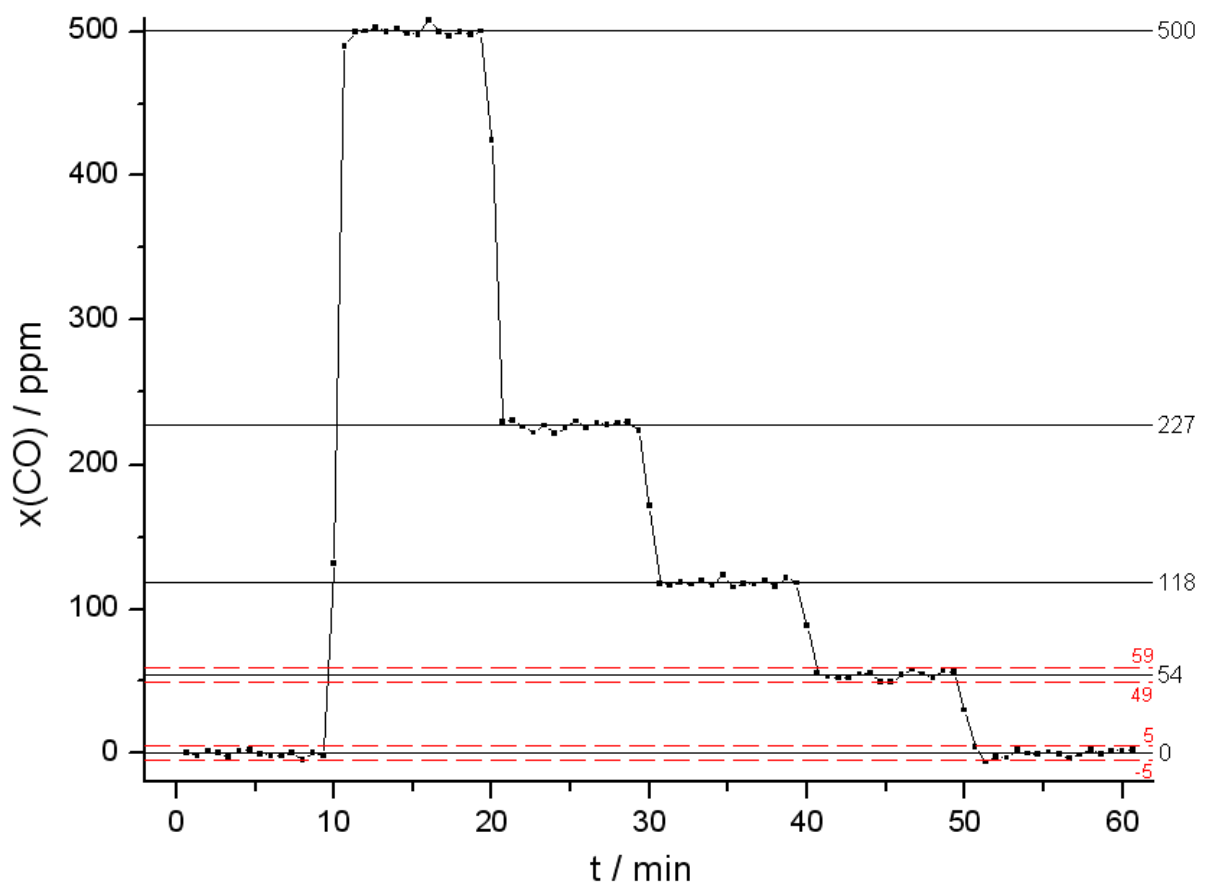


Abb. 52: Messkurve des 300 mm langen Rohrsensors mit Parabolspiegel bei stufenweise erfolgender Beaufschlagung mit verschiedenen Kohlenmonoxidkonzentrationen. Die schwarzen Geraden geben jeweils die im entsprechenden Zeitbereich tatsächlich vorliegenden Konzentrationen von Kohlenmonoxid im Messgas an. Die rot gestrichelten Geraden markieren 10 ppm breite Bereiche um die Stufen von 0 ppm und 54 ppm, um das Rauschen des Sensors von ± 5 ppm im Bereich kleiner Kohlenmonoxidkonzentrationen zu visualisieren.

Wie aus Abbildung 52 ersichtlich wird, weist der Sensor über den gesamten Messbereich der Kohlenmonoxidkonzentration sowohl eine hohe Präzision (Rauschen $< \pm 10$ ppm), als auch eine gute Richtigkeit [23] auf. Über den betrachteten kurzen Zeitraum der Messung zeigt der Sensor keine Drift. Um diesbezüglich eine Beurteilung zu ermöglichen, wurde der Sensor jeweils zu Anfang und zum Ende der Messung mit synthetischer Luft beaufschlagt (0 ppm-Stufen). Mit diesem IR-Einstrahlungssensor wird also eine befriedigende Genauigkeit bei Kohlenmonoxidmessungen erreicht.

Um andere optische Systeme in der Theorie an diesem Standard messen zu können, werden die mit dem Strahlensimulationsprogramm für das dreidimensionale Modell dieser Sensoroptik ermittelten Werte herangezogen. Unter Berücksichtigung der geometrischen Abmessungen der Glühlampe, des Parabolspiegels, des elektropolierten Edelstahlrohres, sowie der Detektoroberfläche liefert das Strahlensimulationsprogramm bei einem für alle reflektierenden Flächen angenommenen Reflexionskoeffizienten von 0,95 und einer Mindestweglänge von 250 mm (s. o.) folgende Ergebnisse (vgl. Kapitel 3.4.3):

emittierte Strahlen: 16200
selfabsorbed: 4
vanished: 8049
verhungert: 3342
 wg Anzahl Reflexionen: 0
 wg Weglaenge: 0
 wg Intensitaet: 3342
 (Mehrfachnennungen moeglich !)
absorbiert: 0
Treffer: 4805
Prozentsatz Treffer: 29.66
Kontrollsumme: ok
durchschnittliche Anzahl von Reflexionen: 9.027
durchschnittliche Weglaenge: 325.5
durchschnittliche Intensitaet: 0.745
Gesamtanteil der detektierten Intensitaet (%) : 22.085
Anzahl informationshaltiger Strahlen: 4805
ges. Anteil informationshaltiger Strahlen (%) : 29.66
rel. Anteil informationshaltiger Strahlen (%) : 100
ges. Informationsgehalt (%) : 22.085
relativer Informationsgehalt (%) : 100

Besondere Bedeutung kommt den Werten des gesamten und des relativen Informationsgehaltes zu. Nach der vorliegenden Berechnung treffen ca. 22,09% der (bei $4,66 \mu\text{m}$) emittierten Strahlungsintensität auf den Detektor. Der hohe Wert für den berechneten gesamten Informationsgehalt spiegelt die gute Präzision des Sensors wieder. Da das Edelstahlrohr länger als die geforderte Mindestweglänge für einen Informationsbeitrag ist, liegt der relative Informationsgehalt naturgemäß bei 100%.

Die Sensitivität des Detektors auf Änderung der Strahlungsintensität aufgrund von Absorption durch den Analyten wird somit nicht durch eventuelle Störstrahlung beeinträchtigt.

Ein hoher relativer Informationsgehalt wirkt sich also ebenfalls positiv auf die Präzision eines Gassensors aus. Da keine nicht informativen Strahlen auf den Detektor gelangen, ist wie in Kapitel 3.2 beschrieben eine lineare Abhängigkeit der Größe $\ln(Y/Y_0)$ von der Kohlenmonoxidkonzentration zu erwarten. In diesem Fall bezeichnet Y den Wert eines gemessenen Sensorsignals, während Y_0 den Wert des Sensorsignals bei 0 ppm Kohlenmonoxid angibt. Abbildung 53 zeigt die entsprechende Auftragung für den betrachteten IR-Einstrahlgassensor.

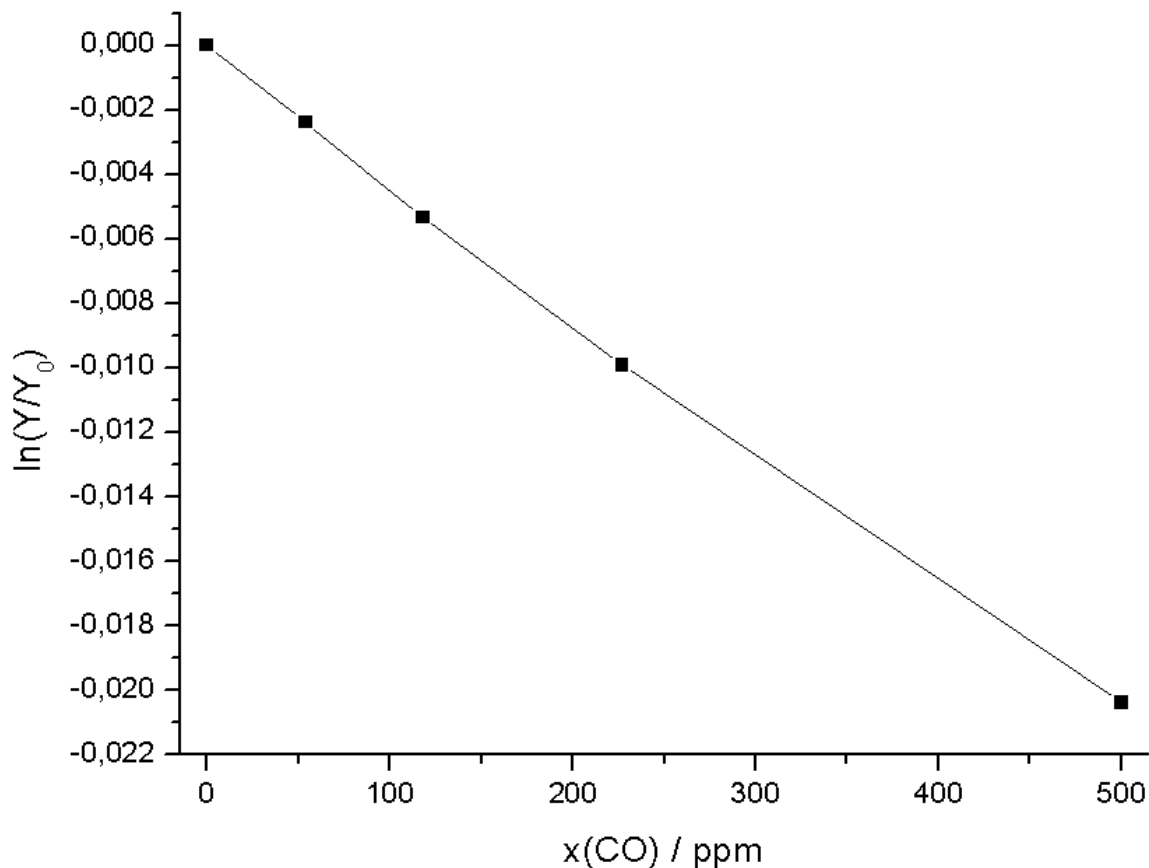


Abb. 53: Auftragung des logarithmierten relativen Sensorsignals gegen die Kohlenmonoxidkonzentration.

Wie zu erkennen ist, verläuft der in Abbildung 53 dargestellte Graph tatsächlich annähernd linear. Dieses ist unter anderem auch der Tatsache zu verdanken, dass durch die Strahlenparallelisierung mit Hilfe des Parabolspiegels die Lichtweglängen der auf den Detektor gelangenden Strahlen relativ gleichmäßig sind. Die mit dem Strahlensimulationsprogramm berechnete durchschnittliche Weglänge von ca. 325,5 mm liegt weniger als 10% über der Rohrlänge des Sensors.

Wie gezeigt wurde, besitzt der 300 mm lange IR-Einstrahlgassensor mit Parabolspiegel ausgezeichnete Eigenschaften für die Gasanalyse, was auch aus den dargelegten theoretischen Überlegungen folgt, und durch Simulationsrechnungen quantifizierbar ist.

Ein Problem besteht jedoch darin, dass ein Sensor mit einer Länge von 30 cm extrem unhandlich ist, und wohl kaum in größerem Umfang im Haushalt oder in der Industrie eingesetzt würde. Hinzu kommt, dass sowohl elektropolierte Edelstahlrohre als auch qualitativ hochwertige Parabolspiegel recht hochpreisige Komponenten darstellen. In erster Linie muss also ausgehend vom bestehenden optischen System das Ziel der Miniaturisierung verfolgt werden. Sekundär ist auch die Einsatzmöglichkeit kostengünstigerer optischer Komponenten erstrebenswert.

Da für den für diese Arbeit verwendeten, bestehenden Messaufbau (vgl. Kapitel 4.1) die Mindestweglänge der Strahlung auf 250 mm abgeschätzt wurde (s. o.), ist durch eine einfache Verkürzung der Rohrlänge keine signifikante Miniaturisierung der Sensoroptik zu erreichen. Die einzige Möglichkeit hierzu besteht also darin, den Strahlengang innerhalb des optischen Systems irgendwie durch Mehrfach-Reflexionen zu knicken oder zu falten, so dass die erforderliche Weglänge auf kleinerem Raum untergebracht werden kann.

Hierzu soll zunächst untersucht werden, ob ein einfaches, funktionsfähiges optisches System realisiert werden kann, bei welchem der direkte Strahlungsweg von der Lichtquelle zum Detektor ausgeschlossen ist. Eine naheliegende Idee ist hier, das Edelstahlrohr quasi aufzuwickeln, um die äußeren Abmessungen des optischen Systems gering halten zu können. Ob ein Sensor, der gänzlich auf direkte Einstrahlung auf den Detektor verzichtet, befriedigende Ergebnisse liefern kann, wird an einem System mit lediglich einer halben Wicklung untersucht. Auf diese Weise ergibt sich als Gasmesszelle ein U-Rohr. Zu dessen Herstellung wurde ein 250 mm langes elektropoliertes Edelstahlrohr mit einem Biegeradius von 30 mm um insgesamt 180° verbogen. Dieses wurde durch die Feinmechanikerwerkstatt des Anorganisch-Chemischen Instituts der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster durchgeführt. Es zeigte sich jedoch, dass die elektropolierte Innenfläche des Rohres durch den Biegevorgang in Mitleidenschaft gezogen wurde. Aus diesem Grund musste zunächst ein dem oben beschriebenen Experiment zur Bestimmung des Reflexionskoeffizienten ähnlicher Versuch durchgeführt werden, um den verminderten Reflexionskoeffizienten im U-Rohr quantifizieren zu können.

Hierzu wurden dieselbe Lampe und derselbe Detektor, wie in Abbildung 44 gezeigt, nacheinander an ein gerades elektropoliertes Edelstahlrohr von 250 mm Länge und an das U-Rohr angeschlossen, und bei identischer Pulsung und Signalverstärkung unter Spülen mit synthetischer Luft die jeweiligen Sensorsignale ermittelt. Das Verhältnis der so ermittelten Signalintensitäten liefert den experimentellen Vergleichswert, welchem durch Simulationsrechnungen mit unterschiedlichen Reflexionskoeffizienten der anzunehmende Reflexionskoeffizient im U-Rohr zuzuordnen ist. Bei der Simulation wird zunächst das gerade Rohr betrachtet und die Berechnung für einen Reflexionskoeffizienten von 0,95 durchgeführt.

Der errechnete Gesamtanteil der detektierten Intensität kann dann als analog zum Sensorsignal des geraden Rohres betrachtet werden.

Für das U-Rohr werden mehrere Simulationen mit unterschiedlichen Reflexionskoeffizienten durchgeführt. Auch hierbei wird jeweils der berechnete Gesamtanteil der detektierten Intensität in Analogie zum Sensorsignal bei der Vermessung des U-Rohrs gesetzt. Der Quotient aus der berechneten Intensität für das Urohr und der berechneten Intensität für das gerade Rohr gibt somit das berechnete erwartete Intensitätsverhältnis der beiden Sensorsignale für einen bestimmten Reflexionskoeffizienten der Urohr-Innenfläche an. Da dieser nicht direkt berechnet werden kann, muss quasi durch Ausprobieren der simulierte Reflexionskoeffizient im Urohr so lange variiert werden, bis das berechnete Intensitätsverhältnis dem experimentellen Wert entspricht. Diese Prozedur kann jedoch stark abgekürzt werden, indem in der Auftragung des durch die Simulationsrechnungen gewonnenen Intensitätsverhältnisses gegen den für das Urohr eingesetzten Reflexionskoeffizienten einfach die Stelle ermittelt wird, an welcher der Graph den Verhältnis-Wert aus dem Experiment annimmt. Abbildung 54 stellt diese Vorgehensweise grafisch dar.

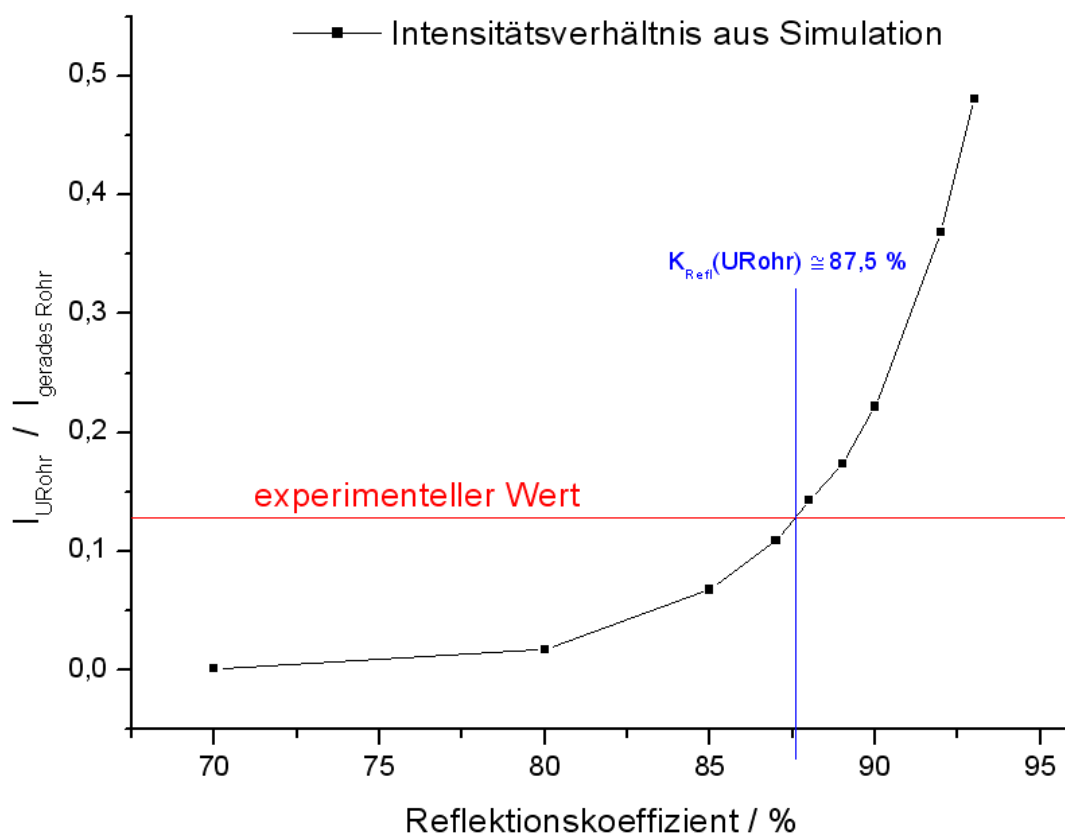


Abb. 54: Auftragung des aus der Simulation gewonnenen Intensitätsverhältnisses der Sensorsignale von U-Rohr und geradem Rohr gegen den für die Innenfläche des U-Rohrs eingesetzten Reflexionskoeffizienten.

Wie aus Abbildung 54 zu entnehmen ist, schneidet die den experimentellen Wert repräsentierende horizontale Gerade (rot) den Graphen der dargestellten Auftragung bei einem X-Wert von ungefähr 87,5 (blau eingezeichnet).

Somit wird für folgende Berechnungen der Reflexionskoeffizient der U-Rohrinnenfläche zu durchschnittlich 0,875 abgeschätzt.

Trotz der verminderten Qualität der Metalloberfläche wurde das U-Rohr nach Abbildung 46 anschließend mit einem Parabolspiegel ausgerüstet und eine Gasmessung durchgeführt. Hierbei wurde genauso verfahren, wie es bereits für die geraden Rohrsensoren beschrieben wurde. Nur die Verstärkung des Detektorsignals wurde an die neuen optischen Gegebenheiten angepasst. Die Auswertung der Daten erfolgte nach der bereits bekannten Vorgehensweise. Abbildung 55 zeigt die mit dem U-Rohr-Sensor erhaltene Messkurve (vgl. Abbildung 52).

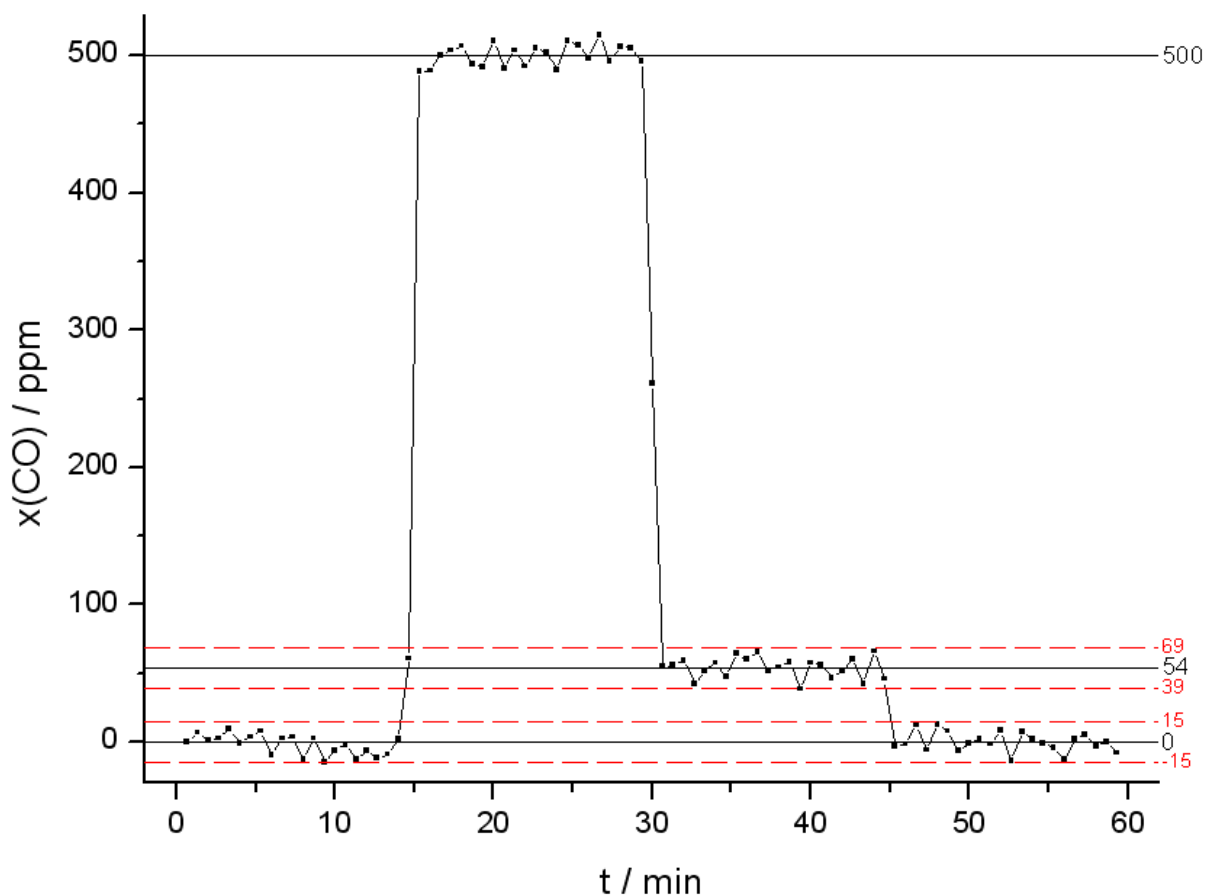


Abb. 55: Messkurve des U-Rohr-Sensors bei stufenweise erfolgreicher Beaufschlagung mit drei verschiedenen Kohlenmonoxidkonzentrationen. Die schwarzen Geraden geben jeweils die im entsprechenden Zeitbereich tatsächlich vorliegenden Konzentrationen von Kohlenmonoxid im Messgas an. Die rot gestrichelten Geraden markieren 30 ppm breite Bereiche um die Stufen von 0 ppm und 54 ppm, um das Rauschen des Sensors von ± 15 ppm im Bereich kleiner Kohlenmonoxidkonzentrationen zu visualisieren.

Ein Vergleich der beiden Abbildungen 52 und 55 zeigt, dass das Rauschen des U-Rohr-Sensors dreimal höher ausfällt als bei dem zuvor betrachteten geraden Rohrsensor von 300 mm Länge. Dies wird annähernd auch durch die Simulation der Modelle wiedergegeben. Die Simulationsrechnung für den U-Rohr-Sensor liefert folgende Ergebnisse:

emittierte Strahlen: 16200
selfabsorbed: 0
vanished: 5324
verhungert: 5905
wg Anzahl Reflexionen: 0
wg Weglaenge: 0
wg Intensitaet: 5905
(Mehrfachnennungen moeglich !)
absorbiert: 0
Treffer: 4971
Prozentsatz Treffer: 30.685
Kontrollsumme: ok
durchschnittliche Anzahl von Reflexionen: 10.804
durchschnittliche Weglaenge: 270.448
durchschnittliche Intensitaet: 0.273
Gesamtanteil der detektierten Intensitaet (%) : 8.374
Anzahl informationshaltiger Strahlen: 4971
ges. Anteil informationshaltiger Strahlen (%) : 30.685
rel. Anteil informationshaltiger Strahlen (%) : 100
ges. Informationsgehalt (%) : 8.374
relativer Informationsgehalt (%) : 100

Der berechnete gesamte Informationsgehalt beträgt für den U-Rohr-Sensor nur noch ca. 8,37%, was einer Verschlechterung gegenüber dem geraden Sensor um einen Faktor von etwa 2,64 entspricht. Die real gemessene Verschlechterung der Sensorgenauigkeit fällt noch etwas höher aus, da zum einen die durchschnittliche Weglänge der Strahlen niedriger ist (ca. 270 mm), und zum anderen die berechnete durchschnittliche Intensität der auf den Detektor treffenden Strahlen beim Urohr-Sensor wesentlich geringer ist, als beim geraden Rohrsensor (ca. 0,27 gegenüber ca. 0,74), was eine negative Auswirkung auf den relativen Fehler des Detektorsignals mit sich führt.

Um den letzteren Effekt auszugleichen, also die Strahlungsintensität auf den Detektor zu erhöhen, wurde ansatzweise versucht, die Glühlampe bei einer höheren Spannung (8 V) zu betreiben und somit die Grundintensität des Lichts im optischen System zu erhöhen. Dies hatte zwar insofern Erfolg, dass das relative Rauschen des Sensorsignals stark verringert werden konnte, jedoch trat sofort eine schnelle Sensordrift in Folge der stark beschleunigten Lampenalterung (vgl. Kapitel 3.2) auf, so dass keine brauchbare Kalibrationskurve erhalten werden konnte. Schließlich führte dieser Versuch innerhalb von zwei Stunden zur Zerstörung (Durchbrennen) der Strahlungsquelle, weil diese durch den Betrieb bei der erhöhten (vom Hersteller nicht mehr empfohlenen) Spannung überlastet wurde.

Insgesamt kann trotz der Unterlegenheit gegenüber dem geraden Sensor die Messung der Kohlenmonoxidkonzentration mit dem U-Rohr-Sensor als erfolgreich bewertet werden. Das auftretende Rauschen des Ausgabewertes im Bereich kleiner Kohlenmonoxidkonzentrationen (vgl. Abbildung 55) beträgt auch hier nicht mehr als die angestrebten ± 15 ppm.

Da die Aufwicklung des Edelstahlrohres bei einer halben Wicklung jedoch bereits zu einer deutlichen Abnahme der Messgenauigkeit führt, verspricht diese Idee zur Miniaturisierung der Sensoren keinen Erfolg. Dazu müsste der Reflexionskoeffizient im aufgewickelten Edelstahlrohr, welches ohnehin schon sehr schwierig herzustellen wäre, da keine Knicke auftreten dürfen, deutlich erhöht werden. Eine nachträgliche Elektropolitur wäre allerdings, falls überhaupt sinnvoll durchführbar, extrem teuer. Hinzu kommt, dass der durch den Parabolspiegel erreichte Effekt der Strahlenparallelisierung nach Durchlaufen einer bestimmten Länge des gekrümmten Rohres durch die vielen auftretenden Reflexionen vollständig nivelliert würde. Daher wäre bei einer Erhöhung der Wicklungsanzahl, selbst bei einem verbesserten Reflexionskoeffizienten, auch ein rapider Abfall der auf den Detektor gelangenden Lichtintensität zu erwarten. Ohne Verwendung eines Parabolspiegels würde z. B. bereits beim U-Rohr-Sensor nach Simulationsberechnungen bei einem Reflexionskoeffizienten von 0,95 nur ein Anteil von ca. 3,2% der emittierten Lichtintensität auf den Detektor fallen. Eine Aufwicklung der Gasmesszelle ist daher nur in sehr begrenztem Umfang möglich. Somit kann durch diese Vorgehensweise keine wesentliche Miniaturisierung der Sensoren erreicht werden. Die berechneten Eigenschaften des Urohr-Sensors können allerdings als Grundlage für die Minimalanforderungen an ein optisches System für einen IR-Einstrahlgassensor (in Bezug auf den Analyten Kohlenmonoxid) dienen.

4.3.4 Die Erfindung der spiralförmigen Gassensoroptik

Obwohl die folgenden größtenteils theoretischen Ausführungen auch in einem eigenen Kapitel behandelt werden könnten, werden diese hier vorgestellt, da sie in engem Zusammenhang mit den experimentell durchgeführten Messungen und den entsprechenden Simulationsrechnungen an den bisher behandelten Sensormodellen stehen.

Aus den vorangegangenen Überlegungen folgt, dass ein optisches System für einen Gassensor einen möglichst hohen Anteil des von der Strahlungsquelle emittierten Lichtes auf den Detektor leiten sollte. Zusätzlich muss hierbei eine große Lichtweglänge erreicht werden, um ein gutes Auflösungsvermögen des Sensors bezüglich der Analytkonzentration zu gewährleisten. Diesen Anforderungen kann technisch recht einfach Genüge geleistet werden, wie bei dem Beispiel des geraden Rohrsensors mit Parabolspiegel gezeigt wurde. Hier tritt allerdings das Problem der insgesamt zu großen Abmessungen des optischen Systems auf. Da z. B. durch eine Aufwicklung der Gasmesszelle, wie gezeigt, keine wesentliche Miniaturisierung ohne erheblichen Qualitätsverlust bei den Messungen erreicht werden kann, soll hier ein völlig neues optisches System entwickelt werden.

Hierzu gibt es sicherlich eine enorme Anzahl von Ansatzmöglichkeiten. Die Grundlagen der hier verfolgten Idee werden im folgenden erläutert.

Aufgrund der für Kohlenmonoxidmessungen ungünstigen Absorptionseigenschaften von Glas im infraroten Wellenlängenbereich (vgl. Kapitel 2) muss ein erneutes Auftreffen der emittierten Strahlung auf die Lichtquelle (Selbstabsorption) möglichst vermieden werden. Gleichzeitig soll ein möglichst hoher Anteil der emittierten Strahlung auf die Detektoroberfläche geleitet werden, d. h., es soll ein möglichst großer Raumwinkel der vom Emitter ausgesendeten Strahlung erfasst werden. Ähnlich wie bei der Analyse der Reflexionseigenschaften von Parabolspiegeln (vgl. Kapitel 3.5) soll hier zunächst eine zweidimensionale Betrachtung erfolgen. Senkrecht zur Papieroberfläche stehende, metallische Reflexionsflächen können dann anhand ihres Grundrisses als zweidimensionale Geraden, bzw. Kurven dargestellt werden. Analog dazu wird bezüglich der Abstrahlung durch den Emitter zunächst nur der Raumwinkel von 360° innerhalb der Papierebene betrachtet. Das kugelförmige Emittermodell wird so auf einen zweidimensionalen Kreis mit Mittelpunkt im Koordinatenursprung reduziert. Mit dem auch in der zweidimensionalen Betrachtung gültigen Reflexionsprinzip: Einfallswinkel = Ausfallswinkel können dann Strahlengänge innerhalb der Papierebene konstruiert werden. Abbildung 56 zeigt den Ansatz für eine Konstruktion von Reflexionsflächen, bei welcher eine direkte Selbstabsorption für alle Strahlen in Richtung jedes beliebigen (zweidimensionalen) Raumwinkels ausgeschlossen wird.

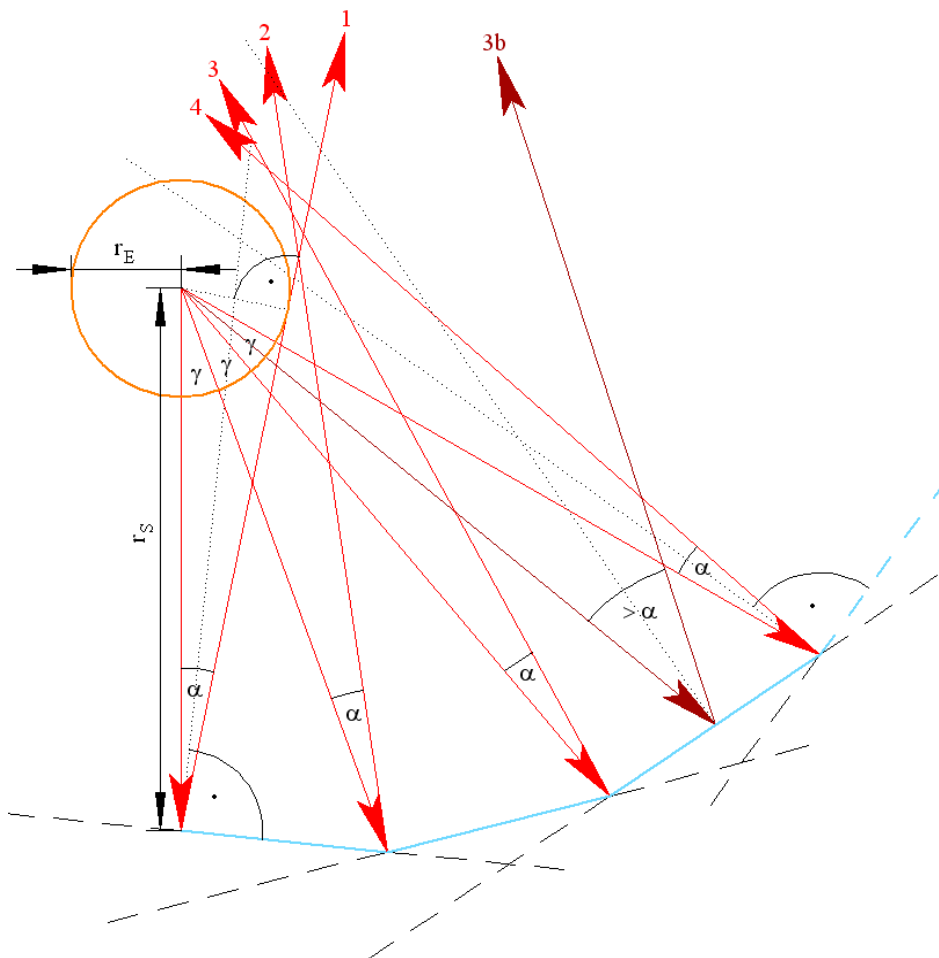


Abb. 56: Grundidee der spiralförmigen Gassensoroptik. Der orange Kreis stellt den Emitter dar, die hellblauen Linien repräsentieren die senkrecht zur Papierebene stehende(n) Reflexionsfläche(n). Einige Strahlengänge sind in rot eingezeichnet.

Im folgenden wird der Emitterradius mit r_E bezeichnet; die Abtragung des Raumwinkels für die Strahlenemittierung erfolgt von der negativen Y-Achse aus, wobei positive Winkel gegen den Uhrzeigersinn laufen. Der Abstand der ersten (also in Richtung des Raumwinkels von 0°) Reflexionsfläche vom Emitter wird mit r_S (für Startradius) bezeichnet, welcher für das Modell frei wählbar ist.

Die Konstruktion beginnt mit dem in Abbildung 56 vertikal nach unten emittierten Strahl Nr. 1. Im Abstand r_S vom Emitter soll dieser auf eine Reflexionsfläche treffen, die den Strahl so reflektiert, dass dieser anschließend mit einem Mindestabstand von r_E (tangential) am Emitter vorbei geleitet wird.

Bei der Reflexion muss der Strahl also um den Winkel α im Uhrzeigersinn gekippt werden. Die Flächennormale der Reflexionsfläche ist somit durch die Winkelhalbierende des Winkels Alpha an der Auftreffstelle des Strahls auf die Reflexionsfläche gegeben (gepunktet eingezeichnet). Für den Winkel Alpha gilt hierbei die trigonometrische Beziehung:

$$\sin \alpha = \frac{r_E}{r_S}$$

(Gleichung 72)

Dadurch ist der erste Abschnitt der Reflexionsfläche mathematisch definiert. In der zweidimensionalen Darstellung ist die linksseitige Begrenzung der reflektierenden Geraden durch den Auftreffpunkt des Strahls Nr. 1 auf diese Gerade gegeben. Insgesamt wird der Verlauf dieser Geraden in Abbildung 56 als gestrichelte schwarze Linie dargestellt. Nur der letztlich innerhalb der sich ergebenden Begrenzungen liegende Teil der Gerade ist hellblau und durchgezogen gezeichnet. Die rechtsseitige Begrenzung des Geradenabschnitts ergibt sich aus dem Schnittpunkt der zuerst konstruierten Geraden mit dem Strahl Nr. 2. Dieser ist so konstruiert, dass er einer Abstrahlung in Richtung des um den Winkelschritt γ gedrehten Strahls Nr. 1 entspricht. Wird der Strahl Nr. 2 bei einer Reflexion am Schnittpunkt mit der ersten Gerade ebenfalls um den Winkel α im Uhrzeigersinn gekippt, so ist der Abstand des reflektierten Strahls zum Emitter zwangsläufig größer, als dies noch beim Strahl Nr. 1 der Fall war, da die Entfernung des Emitters zum betrachteten Schnittpunkt nun größer als r_S ist. Ausgehend vom berechneten Schnittpunkt wird nun eine neue Gerade konstruiert, die den Strahl Nr. 2 so reflektieren würde, dass dieser bei einer Reflexion um den Winkel α im Uhrzeigersinn gekippt würde. Die Normale der neuen Geraden ergibt sich dabei wiederum als Winkelhalbierende des Winkels α . Dieses Verfahren kann dann mit weiteren um den Winkelschritt γ gedrehten Strahlen durchgeführt werden, bis der gesamte Raumwinkel von 360° abgefahren ist. In Abbildung 56 ist dies für vier Strahlen durchgeführt worden. Wie zu erkennen ist, wächst dabei mit zunehmendem Abstrahlwinkel der Abstand der reflektierten Strahlen zum Emitter, so dass dieser niemals von einem reflektierten Strahl getroffen werden kann.

Für Strahlen, die jeweils zwischen zwei durch den Winkelschritt γ ausgesuchten Strahlen (Nr. 1,2,3,4 etc.) emittiert werden, ist dieser Effekt des Wegleitens der Reflexion vom Emitter noch stärker ausgeprägt, wie beispielhaft am Strahlengang des als 3b bezeichneten Strahles zu sehen ist. Die Modellparameter in Abbildung 56 betragen $r_E = 10$ mm, $r_S = 50$ mm und $\gamma = 20^\circ$.

Bei einer Betrachtung des Gesamtwinkels von 360° ergibt sich als abschnittsweise definierte Reflexionsfläche nach der beschriebenen Konstruktionsweise eine Spiralform. Abbildung 57 zeigt die Aufsicht auf die so berechneten Reflexionsflächen bei verschiedenen Einstellungen des Winkelschritts γ und konstanten Werten für r_E und r_S .

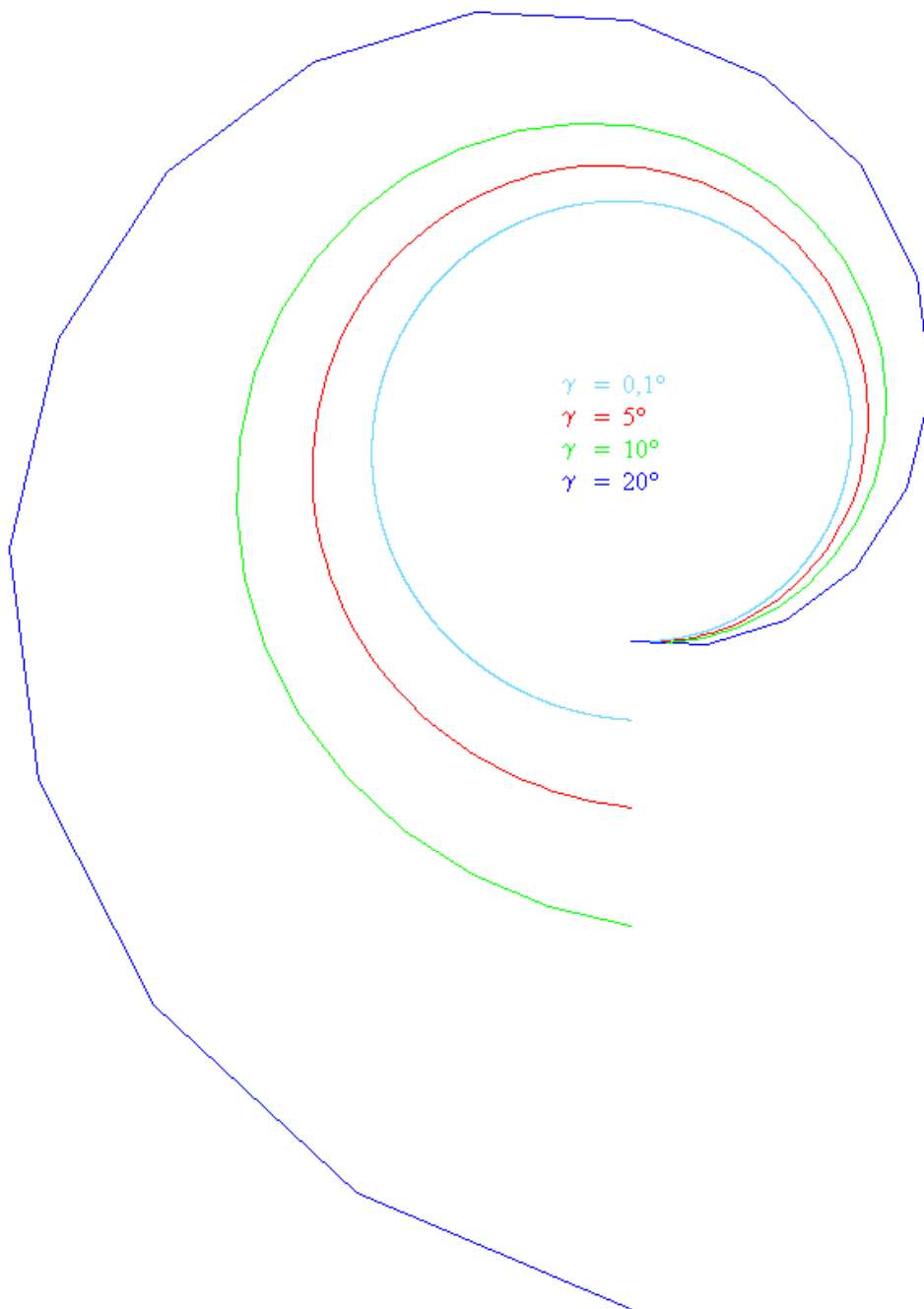


Abb. 57: Auf oben beschriebene Weise (vgl. Abbildung 56) mit dem Computer berechnete Spiralförmigkeiten für unterschiedlich gewählte Winkelschrittweiten.

Die Stützpunkte für die Datensätze der Spiralkurven sind jeweils durch die Schnittpunkte der betrachteten Strahlen (Raumwinkel = $n \cdot \gamma$) mit den jeweils durch den vorherigen Strahl (Raumwinkel = $(n-1) \cdot \gamma$) gegebenen Geraden definiert. Wie aus Abbildung 57 ersichtlich wird, geht die berechnete, abschnittsweise definierte Reflexionsfläche mit abnehmender Winkelschrittweite von einer Aneinanderreihung von Geradenabschnitten (blau) in eine quasi kontinuierliche Spiralform (himmelblau) über.

Eine ideale (lineare) Spirale kann so definiert werden, dass der Radius mit jeder 360° Drehung um einen konstanten Wert Δr anwächst. Mathematisch kann dies für den zweidimensionalen Fall in der Parameterdarstellung wie folgt beschrieben werden:

$$\text{a) } r = r_s + \frac{\Delta r}{360} \cdot \varphi$$

$$\text{b) } x = r \cdot \cos \varphi$$

$$\text{c) } y = r \cdot \sin \varphi$$

(Gleichung 73)

Der Winkel φ bezeichnet hier den betrachteten Raumwinkel innerhalb der X-Y-Ebene.

Die berechneten (konstruierten), diskreten Datensätze der Spiralkurven in Abbildung 57 besitzen logischerweise eine unterschiedlich Anzahl von Stützpunkten. Da bei allen Modellen ein Raumwinkel von $0^\circ \leq \varphi \leq 360^\circ$ durchgescannt wurde und 360° jeweils glatt durch die Winkelschrittweite γ teilbar ist, ergeben sich die entsprechenden Datensatzlängen N zu:

$$N = \frac{360^\circ}{\gamma} + 1$$

(Gleichung 74)

Werden die einzelnen Punkte der Datensätze mit $i = 0$ bis $i = N-1$ durchnummeriert, so ergibt sich hier die Bahnbreite Δr der Spiralkonstruktionen jeweils zu:

$$\Delta r = r(N-1) - r(0) \quad ; \quad \text{mit}$$

$$r(i) = \sqrt{x(i)^2 + y(i)^2}$$

(Gleichung 75)

Zum Vergleich der konstruierten Spiralen mit einer linearen Spirale können die Datensätze nun folgendermaßen normiert werden:

$$r_{rel}(i) = \frac{r(i) - r_s}{\Delta r} \quad \text{und}$$

$$n_{rel}(i) = \frac{i}{N-1}$$

(Gleichung 76)

Eine Auftragung des normierten Radius r_{rel} gegen die normierte Nummer n_{rel} ergibt für eine ideale Spirale stets eine Gerade mit der Steigung eins und dem Achsenabschnitt null. Abbildung 58 zeigt die entsprechenden Auftragungen für die in Abbildung 57 dargestellten Spiralenmodelle.

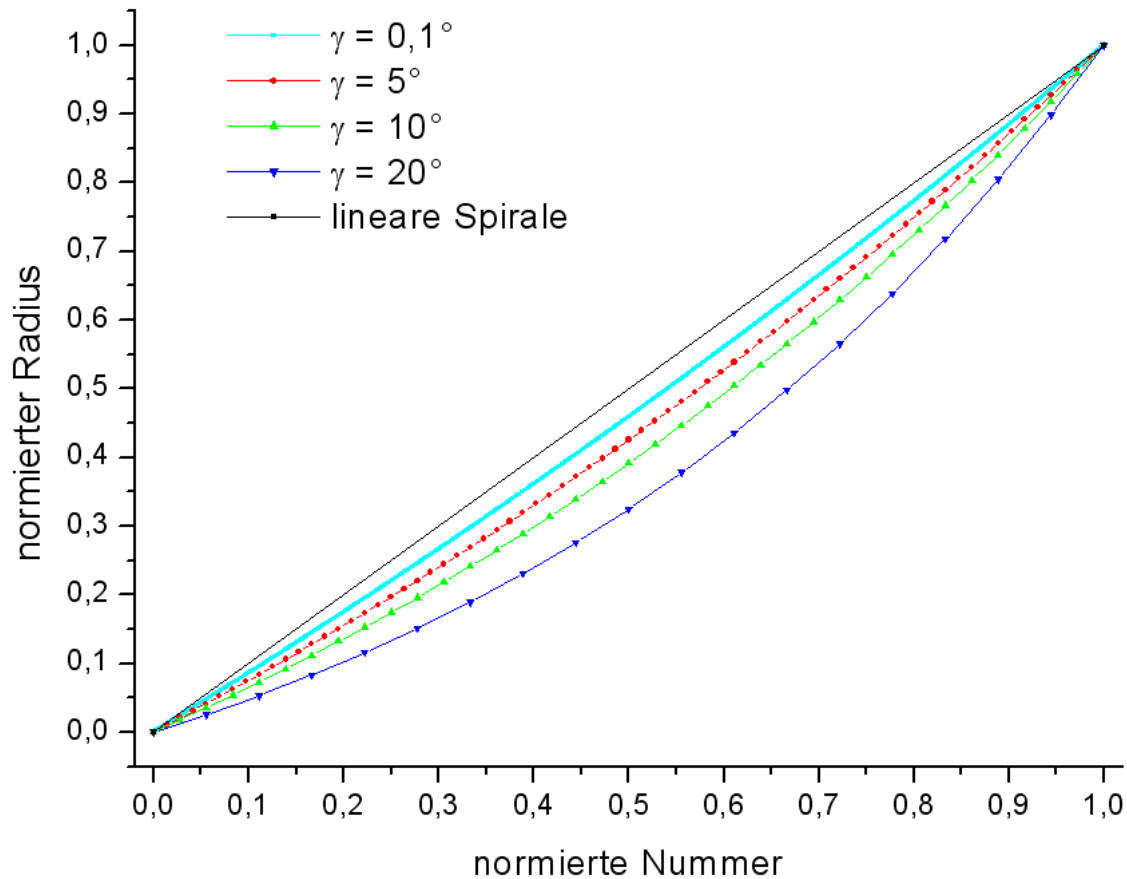


Abb. 58: Auftragung der normierten Radien gegen die normierten Nummern der Datensätze von Spiralenmodellen mit unterschiedlichen Konstruktions-Winkelschrittweiten γ (vgl. Abbildung 57).

Wie Abbildung 58 zu entnehmen ist, weichen die konstruierten Modelle umso stärker von der linearen Spirale ab, je größer die Winkelschrittweite γ bei der Konstruktion gewählt wird.

Mit kleiner werdender Winkelschrittweite konvergiert das Modell jedoch nicht, wie vielleicht anzunehmen wäre, gegen das ideale Modell, sondern es verbleibt stets eine Abweichung, die durch das Verhältnis vom gegebenen Emitterradius r_E zum gewählten Startradius r_S ($\sin\alpha$) bestimmt wird.

Im Prinzip wäre auch eine Fortsetzung der Spiralkurven über die 360° hinaus denkbar. Da der Lichtweg im optischen System jedoch auf den durch die Spiralkurve begrenzten Raum konzentriert werden soll, und eine Expansion der Spiralen auf mehrere Wicklungen zum einen technisch schwierig zu realisieren wäre, und zum anderen eine negative Auswirkung auf die Intensitätsausbeute hätte (Hier läge eine Analogie zur oben beschriebenen Aufwicklung einer geraden Gasmesszelle vor.), wird die Konstruktion nach Abschreitung eines vollen Winkels abgebrochen. Der Abgriff der Strahlung durch den Detektor muss dann am Ausgang der Spirale erfolgen.

Da die Maße des Detektors normalerweise technisch vorgegeben sind, ist bei der Konstruktion der Reflexionsfläche die Bahnbreite Δr der Spirale an die Ausmaße des Detektors anzupassen. Auch der Radius r_E des Emitters ist technisch vorgegeben, so dass als Variablen bei der Konstruktion noch die Parameter r_S und γ verbleiben.

Wie aus Abbildung 57 ersichtlich wird, kann bei vorgegebenem Emitterradius die Bahnbreite der Spirale weitgehend durch die Wahl der Winkelschrittweite γ eingestellt werden. Bei einer Modellierung als lineare Spirale kann die Größe Δr auch direkt entsprechend der Detektorgröße gewählt werden. Je nach Wahl des technischen Verfahrens zum Bau der Gasmesszelle kann die Länge des entsprechenden Datensatzes, bzw. die Genauigkeit der anzugebenden einzelnen Stützpunkte jedoch limitiert sein.

Die Gesamtgröße der Spiralkurve, und damit die resultierende durchschnittliche Lichtweglänge im optischen System kann unter anderem durch die Einstellung des Startradius r_S geregelt werden. Abbildung 59 zeigt Spiralkurven mit den Einstellungen $r_E = 1,65 \text{ mm}$ und $\gamma = 0,1^\circ$ für verschiedene Startradien.

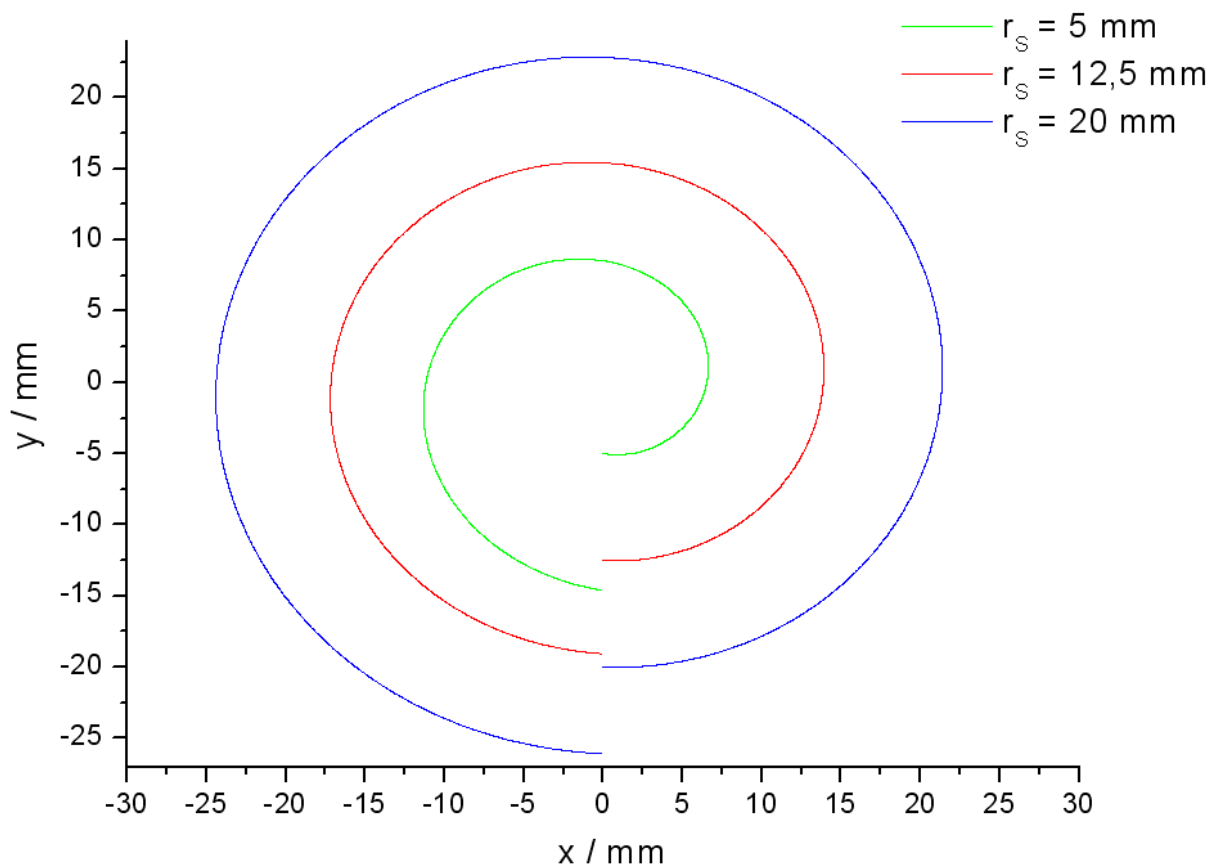


Abb. 59: Nichtlineare Spiralkurven für verschiedene Einstellungen des Startradius r_S .

Wie aus Abbildung 59 ersichtlich wird, hat der Startradius r_S eine sehr direkte Auswirkung auf die Größe der von der Spiralkurve eingeschlossenen Fläche. Daneben wird in gewissem Maße auch die Bahnbreite Δr durch den Startradius beeinflusst. Abbildung 60 stellt dieses grafisch dar.

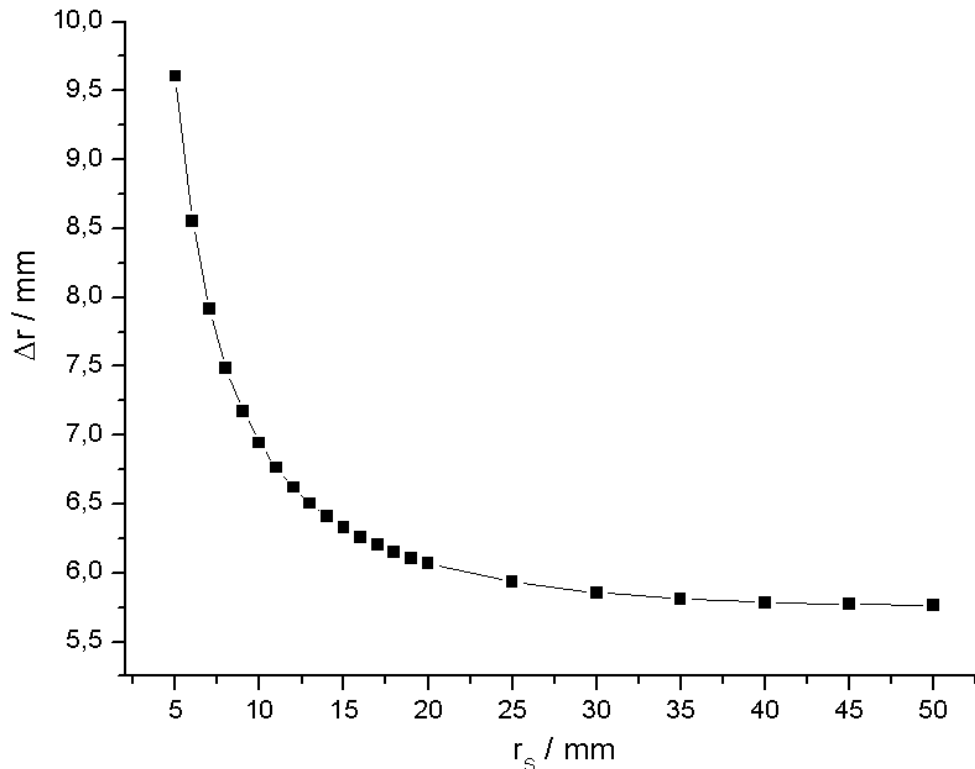


Abb. 60: Auftragung der Bahnbreite Δr der konstruierten Spiralkurve gegen den gewählten Startradius r_s mit $r_E = 1,65 \text{ mm}$ und $\gamma = 0,1^\circ$. Bei einer Betrachtung eines weiter ausgedehnten Bereichs von r_s zeigt sich, dass die Kurve nicht konvergiert, sondern ein Minimum durchläuft. Der Quotient $\Delta r/r_s$ wird jedoch mit wachsendem Startradius immer kleiner.

Bei der geometrischen Konstruktion der Spiralform (vgl. Abbildung 56) sind, im Gegensatz zum linearen Spiralmodell (vgl. Gleichung 73), die Größen r_s und Δr also nicht komplett unabhängig voneinander festzulegen. Mit steigendem Startradius r_s gleicht sich die auf geometrischem Weg konstruierte Kurvenform jedoch der linearen Spiralform an.

Neben der bei der beschriebenen Konstruktionsmethode verfolgten Intention, eine Selbstabsorption der emittierten Lichtstrahlen durch den Emitter bei der jeweils ersten Reflexion zu vermeiden, besteht die Aufgabe der Sensoroptik darin, möglichst viel Strahlungsintensität auf den Detektor zu leiten. Dieses ist selbstverständlich nur dann möglich, wenn auch folgende Strahlungsreflexionen nicht zur Selbstabsorption führen. Auch dies wird durch die spiralförmige Gassensoroptik gewährleistet, was im folgenden gezeigt wird.

Da reale Detektoren naturgemäß dreidimensionale Abmessungen besitzen und damit bei der Positionierung Platz benötigen, kann aus bautechnischen Gründen die Detektion der Strahlung nicht direkt am Spiralen Ausgang (vgl. Abbildungen 57 und 59) erfolgen. Hier ist eine Art Adapter erforderlich, mit welchem sich der Detektor in das optische System integrieren lässt. Bei der im Rahmen dieser Arbeit realisierten technischen Ausführung der spiralförmigen Gassensoroptik wurde daher die Spiralform an deren Ausgang um ein 10 mm langes, horizontal verlaufendes Ansatzstück verlängert.

Der sich dadurch zwangsläufig innerhalb der Form ausbildende Steg sollte dabei möglichst dünn gehalten werden, um eine Beeinträchtigung der optischen Eigenschaften des Systems weitgehend zu vermeiden. Andererseits ist dieser Steg zur Stabilisierung des Bauteils unverzichtbar. Bei der technischen Ausführung des Bauteils aus Edelstahl wurde seine maximale Dicke zu 0,5 mm gewählt. Abbildung 61 zeigt die Aufsicht auf das Kernstück der spiralförmigen Gassensoroptik, welches z. B. aus einer Metallplatte herausgeschnitten werden kann, oder alternativ mit dem Spritzgussverfahren hergestellt werden kann. Zur Veranschaulichung der Funktionsweise ist beispielhaft auch ein typischer Strahlengang durch das optische System dargestellt.

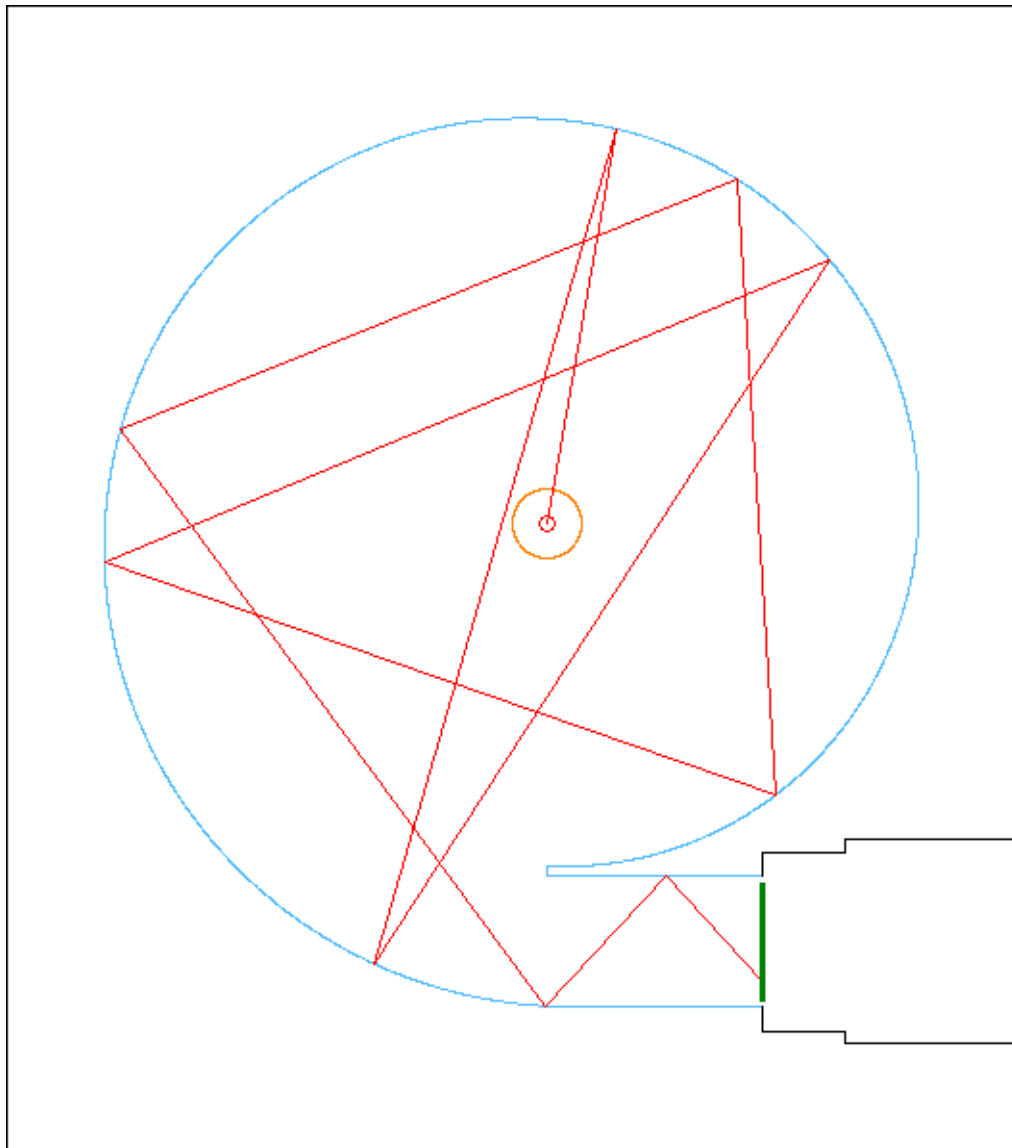


Abb. 61: Modell der spiralförmigen Gassensoroptik in der Aufsicht. Der orange Kreis stellt den Emitter dar. Reflektierende Flächen sind himmelblau gezeichnet, die Detektoroberfläche ist als grüne Linie dargestellt. Der in rot dargestellte Lichtstrahl trifft nach neun Reflexionen und Zurücklegen einer im Verhältnis zur Bauteilgröße sehr langen Strecke auf die Detektorfläche. Die schwarzen Linien kennzeichnen die möglichen Begrenzungen des Bauteils mit dem integrierten Adapter für den Detektor. Die dem Modell zugrunde liegenden Einstellungen bei der Berechnung sind: $r_E = 1,7$ mm, $r_S = 15,8$ mm und $\gamma = 0,1^\circ$ (vgl. Abbildung 56).

Wie aus Abbildung 61 ersichtlich ist, kann die senkrecht zur Papierebene stehende Reflexionsfläche in der Aufsicht durch einen einzigen, durchgehenden Linienzug dargestellt werden.

In der zweidimensionalen Betrachtung des in Abbildung 61 dargestellten Modells erreichen nach Simulationsrechnungen über 92% der emittierten Strahlen den Spiralen Ausgang.

Bei einer äquivalenten Konstruktion der Spiralförmigkeit nach dem Modell der linearen Spirale wären dies ca. 89%, was ebenso eine enorm hohe Strahlenausbeute kennzeichnet (vgl. Kapitel 3.5). Könnte bei der technischen Konstruktion der spiralförmigen Gassensoroptik auf den Steg in der Spirale verzichtet werden, so wäre in der zweidimensionalen Betrachtung bei beiden Modellen sogar die Nutzung von 100% des Abstrahlwinkels (s. o.) möglich. Der Grund dafür liegt darin, dass bei jedem beliebigen Strahl der Reflexionswinkel mit jeder Reflexion größer (stumpfer) wird. Auf diese Weise werden mit zunehmender Anzahl von Reflexionen auf die Dauer alle emittierten Strahlen auf eine Bahn tangential, bzw. parallel zur Begrenzungslinie der Spirale gezwungen. Gleichzeitig nimmt der Abstand der den Strahl repräsentierenden Gerade vom Emitter nach jeder Reflexion stetig zu, so dass eine Selbstabsorption durch den Emitter absolut ausgeschlossen wird. Die immer weiter außen in der Spirale verlaufenden Strahlen erreichen so schließlich zwangsläufig den Spiralen Ausgang, wo sie vom Detektor registriert werden können. Alle emittierten Strahlen umlaufen also gegen den Uhrzeigersinn mit steigendem Abstand den Emitter, bis sie nach einer gewissen Anzahl von Umläufen, welche hier als rationale Zahl definiert werden muss, aus der Spiralkurve entweichen. Die durchschnittliche Anzahl von Umläufen wird dabei bei gegebenen Emitterradius durch die Größen r_s und Δr bestimmt. Die Reflexionswinkel (Das ist hier der bei einer Reflexion zwischen einfallendem und ausfallendem Strahl eingeschlossenen Winkel.) betragen für den in Abbildung 61 dargestellten Strahlengang in chronologischer Reihenfolge ca. $6,2^\circ$, $16,8^\circ$, $34,4^\circ$, $41,6^\circ$, $67,4^\circ$, $71,6^\circ$, $75,6^\circ$, $79,2^\circ$ und $85,5^\circ$. Anhand dieser Werte lässt sich die beschriebene Aufweitung der Reflexionswinkel gut belegen. Der durch die Spiralkurve begrenzte Raumbereich wird wegen der Mehrfachreflexion von fast allen Strahlen mehrfach durchquert, so dass diese eine große Weglänge zum Detektor zurücklegen. Da die Strahlen, je nach Winkel der Emittierung, jedoch alle unterschiedlich verlaufen, unterscheiden sich die Weglängen der Strahlen untereinander allerdings recht deutlich.

Um für das optische System der spiralförmigen Gassensoroptik die geeigneten Maße zu finden und es nach den Kriterien beurteilen zu können, die auch bei den vorher behandelten Gassensoren zugrunde gelegt wurden, ist eine dreidimensionale Betrachtung unumgänglich. Hierbei kommt noch der Parameter der Höhe der spiralförmigen Reflexionsfläche hinzu, der im Prinzip ebenfalls frei wählbar ist.

Letztendlich soll die gesamte Gasmesszelle aus der vertikal stehenden spiralförmigen Fläche bestehen und nach oben und unten durch zwei planparallele Spiegelflächen begrenzt werden.

Abbildung 62 zeigt ein dreidimensionales Modell der geplanten Apparatur mit einem Strahlengang innerhalb der X-Y-Ebene.

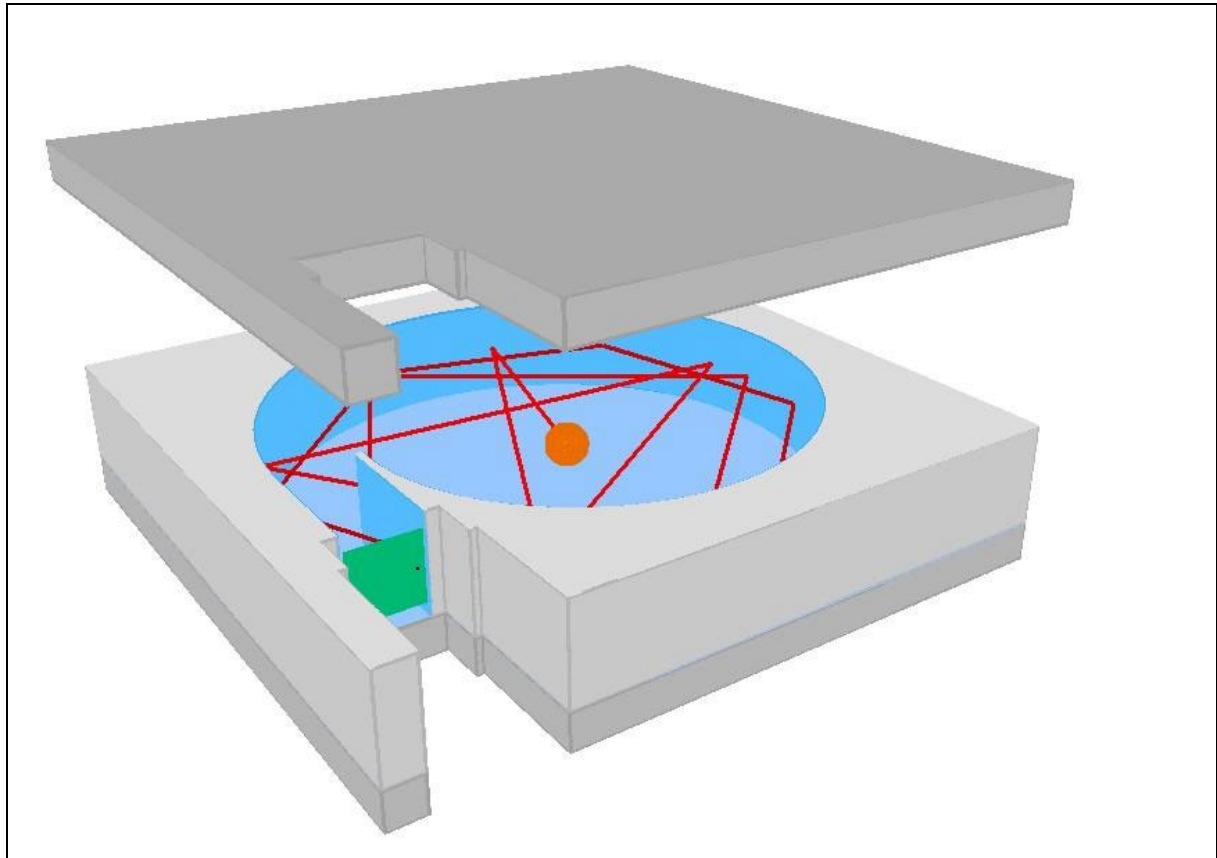


Abb. 62: Dreidimensionales Modell der spiralförmigen Gassensoroptik (mit angehobenem Deckel). Die blau gezeichneten Flächen stellen Reflexionsflächen dar, wobei die dunklere Fläche die vertikal stehende Fläche markiert. Die hellere Fläche repräsentiert die Spiegelfläche des Bodens. In der Abbildung nicht zu sehen ist die an der Unterseite des Deckels befindliche, dazu planparallele Reflexionsfläche. Der Emitter ist als orangefarbene Kugel dargestellt, die Detektoroberfläche als grünes Quadrat. Innerhalb der X-Y-Ebene ist in rot ein berechneter Strahlengang eingezeichnet, wobei das Dunklerwerden der Farbe den Intensitätsverlust des Lichtstrahls durch die stattfindenden Reflexionen visualisieren soll. Der Auftreffpunkt des Lichtstrahls auf die Detektorfläche ist als kleiner Fleck erkennbar. Die Löcher für den Gas-Ein- und -Auslass sind nicht eingezeichnet.

Strahlen, die nicht innerhalb der X-Y-Ebene verlaufen, behalten bezüglich der Sicht entlang der Z-Achse ihren Strahlengang so bei, wie in der zweidimensionalen Darstellung (vgl. Abbildung 61) für deren Projektion auf diese Ebene berechnet werden kann. Da diese Strahlen mit Komponente entlang der Z-Achse mehrfach zwischen den beiden planparallelen Spiegeln hin- und her reflektiert werden, sind die in der Aufsicht beobachtbaren Geraden jedoch in äquidistante, durch Reflexionspunkte definierte Teilstücke zu zerlegen.

Bei einer Blickrichtung orthogonal zur projizierten Ausbreitungsrichtung und zur Z-Achse wäre daher ein sägezahnförmiger Strahlenverlauf zu beobachten. Die Steilheit der Sägezahnkurve ist dabei durch den Abstrahlwinkel bezüglich der X-Y-Ebene gegeben.

Abbildung 63 zeigt das Modell aus Abbildung 62 mit dem Lichtweg eines Strahls, der mit einer Komponente in Z-Richtung emittiert wird.

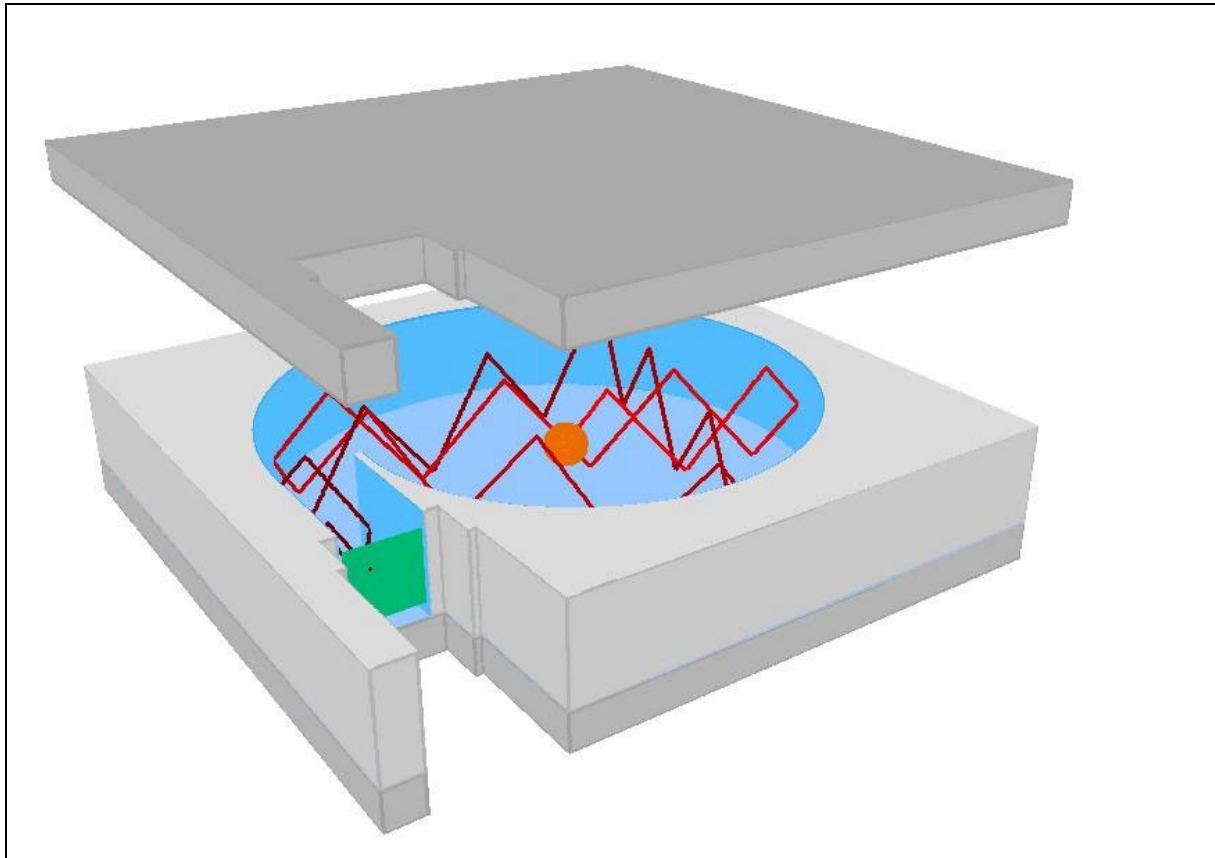


Abb. 63: Modell der spiralförmigen Gassensoroptik mit dem Strahlengang eines aus der X-Y-Ebene heraustretenden Strahles. Die Reflexionsberechnungen wurden bei geschlossenem Deckel durchgeführt.

Obwohl der in Abbildung 63 dargestellte Strahlengang aufgrund der Vielzahl der Reflexionen und der eingeschränkten Sicht auf das Innere der Gasmesszelle insgesamt recht unübersichtlich wirkt, ist stellenweise deutlich der sägezahnförmige Verlauf des Lichtwegs zwischen Boden und Deckel zu erkennen. Da, in Bezug auf die X-Y-Ebene, in sehr steiler Richtung emittierte Strahlen extrem häufig zwischen den planparallelen Spiegelflächen reflektiert werden, wäre hier noch eine starke Verbesserung des Modells in Bezug auf die Intensitätsausbeute am Detektor möglich. Dazu müsste lediglich am Deckel (und/oder Boden) des Modells, senkrecht über dem Emitter, ein ebenfalls reflektierender Kegel angebracht werden, der mit der Spitze auf die Lichtquelle zeigt und die betreffenden Strahlen durch (ausschließliche) Beeinflussung von deren Z-Komponente auf eine günstigere (flachere) Bahn lenkt. Dies wurde bisher jedoch noch nicht realisiert. Bei dem bestehenden Modell werden sehr steile Strahlen daher entweder nach der ersten Reflexion vom Emitter selbst absorbiert, oder werden auf ihrem Weg durch das optische System so häufig reflektiert, dass sie einen für die Detektion zu großen Intensitätsverlust erleiden (verhungern). Da der Großteil aller emittierten Strahlen mehrfach zwischen der Boden- und der Deckelfläche reflektiert wird, spielt die Höhe des optischen Systems eine wesentliche Rolle für die auf den Detektor treffende Lichtintensität.

Abbildung 64 zeigt die Queransicht auf einen bezüglich der X-Y-Ebene im 45° Winkel emittierten Strahl, wobei die Systemhöhe einmal 8 mm und einmal 6 mm beträgt.



Abb. 64: Strahlengang zwischen den Deckplatten der spiralförmigen Gassensoroptik in der Queransicht. Im oberen Fall beträgt der Plattenabstand 8 mm, im unteren Fall 6 mm. Die Entfernung zwischen dem Emittor und der grün eingezeichneten Detektorfläche beträgt in beiden Fällen 120 mm. Die Höhe der Detektorfläche hat einen Wert von 5,5 mm.

Der in Abbildung 64 dargestellte Strahl wird bei einer Systemhöhe von 8 mm vor dem Auftreffen auf den Detektor nur 15 mal reflektiert, während bei einem Deckflächenabstand von 6 mm 20 Reflexionen stattfinden. Die insgesamt zurückgelegte Weglänge ist in beiden Fällen gleich; die verbleibende Strahlungsintensität ist jedoch, je nach Reflexionskoeffizient, bei dem 8 mm hohen System größer. Andererseits ist die Wahrscheinlichkeit für das Auftreffen eines Lichtstrahls auf den Detektor im flacheren System höher, da hier fast die gesamte Systemhöhe von der Höhe der Detektorfläche abgedeckt wird. Wie aus der oberen Zeichnung in Abbildung 64 ersichtlich wird, bestehen im 8 mm hohen System viel mehr Möglichkeiten, dass ein Strahl oberhalb oder unterhalb der Detektorfläche aus dem System entweichen kann. In wieweit sich diese gegensätzlichen Effekte auf die Eigenschaften des optischen Systems auswirken, kann mit Hilfe von Simulationsrechnungen abgeschätzt werden.

Für Konstruktionsparameter der Spiralförmigkeit von $r_E = 1,7$ mm, $r_S = 15,8$ mm und $\gamma = 0,1^\circ$ und einem angenommenen Reflexionskoeffizienten von generell 95% erhält man mit dem Strahlensimulationsprogramm für Systemhöhen von 6 mm bzw. 8 mm folgende Ergebnisse:

Systemhöhe 6 mm:

emittierte Strahlen: 64800

selfabsorbed: 12118

vanished: 3029

verhungert: 28526

wg Anzahl Reflexionen: 0

wg Weglänge: 0

wg Intensität: 28526

(Mehrfachnennungen möglich !)

absorbiert: 0

Treffer: 21127

Prozentsatz Treffer: 32.603

Kontrollsumme: ok

durchschnittliche Anzahl von Reflexionen: 25.465

durchschnittliche Weglaenge: 298.267
durchschnittliche Intensitaet: 0.306
Gesamtanteil der detektierten Intensitaet (%) : 9.973
Anzahl informationshaltiger Strahlen: 15849
ges. Anteil informationshaltiger Strahlen (%) : 24.458
rel. Anteil informationshaltiger Strahlen (%) : 75.018
ges. Informationsgehalt (%) : 6.929
relativer Informationsgehalt (%) : 69.476

Systemhöhe 8 mm:

emittierte Strahlen: 64800
selfabsorbed: 9200
vanished: 10560
verhungert: 26229
wg Anzahl Reflexionen: 0
wg Weglaenge: 0
wg Intensitaet: 26229
(Mehrfachnennungen moeglich !)
absorbiert: 0
Treffer: 18811
Prozentsatz Treffer: 29.029
Kontrollsumme: ok
durchschnittliche Anzahl von Reflexionen: 24.876
durchschnittliche Weglaenge: 312.273
durchschnittliche Intensitaet: 0.314
Gesamtanteil der detektierten Intensitaet (%) : 9.119
Anzahl informationshaltiger Strahlen: 14847
ges. Anteil informationshaltiger Strahlen (%) : 22.912
rel. Anteil informationshaltiger Strahlen (%) : 78.927
ges. Informationsgehalt (%) : 6.548
relativer Informationsgehalt (%) : 71.8

Insgesamt gelangt bei dem 6 mm hohen System mehr Strahlungsintensität auf den Detektor und auch der errechnete gesamte Informationsgehalt ist hier höher als bei einer Systemhöhe von 8 mm. Die durchschnittliche Intensität der einzelnen Strahlen ist, wie erwartet, aufgrund der durchschnittlich geringeren Anzahl von Reflexionen bei der höheren Gasmesszelle jedoch größer als bei dem flacheren System. Aus diesem Grund ist bei dem 8 mm hohen System, bei welchem auch eine etwas größere durchschnittliche Weglänge erreicht wird, der relative Informationsgehalt größer als bei der 6 mm hohen Gasmesszelle.

Eine detaillierte Analyse aller berechneten, auf den Detektor treffenden Strahlen lässt eine Auftragung der detektierten Intensität in Abhängigkeit von der zurückgelegten Lichtweglänge zu. Zur Veranschaulichung des beschriebenen Sachverhaltes stellt Abbildung 65 diese Auftragung grafisch dar.

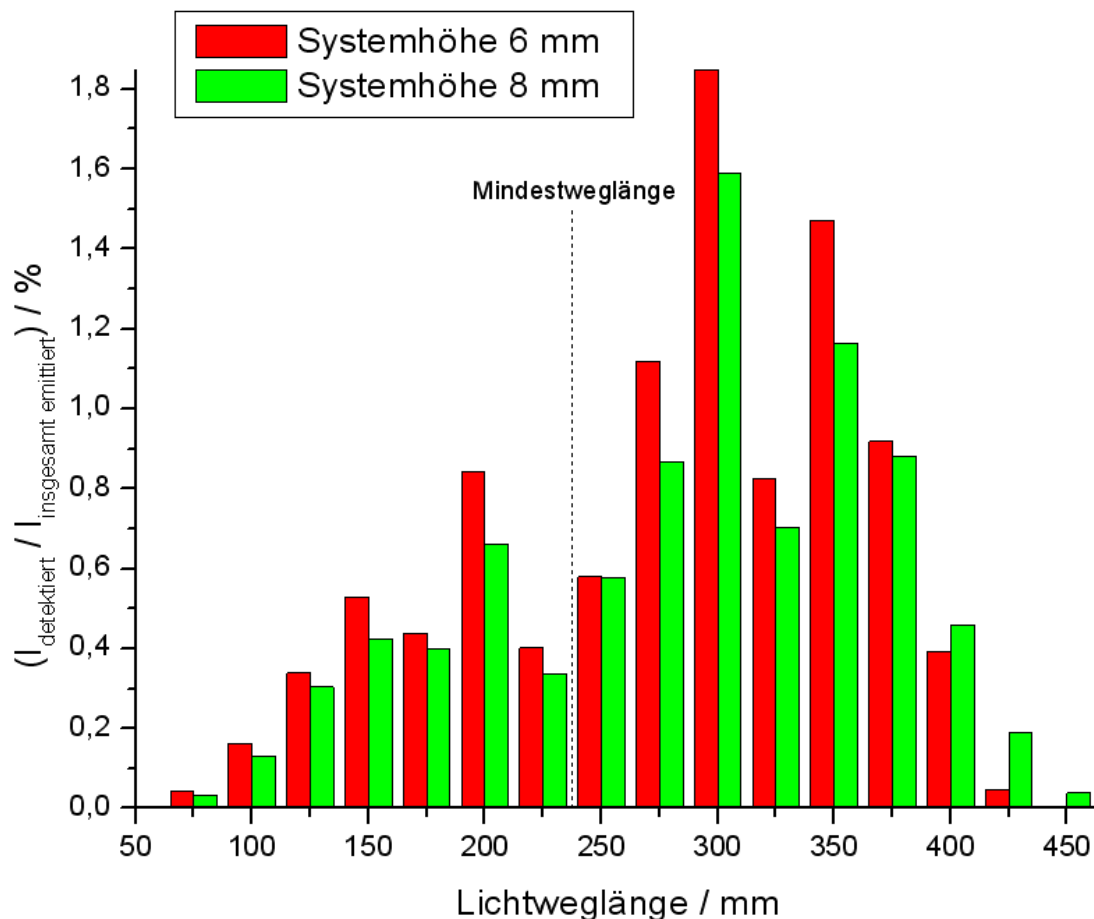


Abb. 65: Balkendiagramme der auf den Detektor treffenden Lichtintensität in Abhängigkeit von der Lichtweglänge für zwei unterschiedlich hohe Ausführungen der spiralförmigen Gassensoroptik. Jeder Balken repräsentiert ein Längenintervall von 25 mm, über welche die Intensität der einzelnen Strahlen jeweils aufsummiert wurde.

Die Summe der Balken in Abbildung 65 entspricht jeweils dem Gesamtanteil der detektierten Intensität bei der Simulationsrechnung. In beiden Fällen wird die Hauptintensität durch Lichtstrahlen geliefert, die eine Weglänge zwischen 275 mm und 375 mm zurückgelegt haben. Balken, die im Diagramm links von der Mindestweglänge liegen, repräsentieren nicht informative Strahlen. Besonders diejenige Lichtintensität, die nach Zurücklegen einer recht kurzen Weglänge auf den Detektor trifft, kann als Störstrahlung bezeichnet werden, da das Detektorsignal dadurch zwar angehoben wird, hierin aber kaum Information über die Analytkonzentration enthalten ist. Der relative Informationsgehalt gibt das Verhältnis der Summe der Balken rechts von der Mindestweglänge zum gesamten Informationsgehalt an.

Insgesamt sind die Balken in Abbildung 65 für das 8 mm hohe optische System zwar niedriger als bei dem flacheren System, jedoch liegt hier ein größerer Intensitätsanteil im Weglängenbereich oberhalb der Mindestweglänge (vgl. durchschnittliche Weglänge).

Da der Informationsgehalt von Strahlung mit geringer Weglänge mit zunehmender Analytkonzentration ansteigt, ist zu erwarten, dass das 6 mm hohe System aufgrund der höheren Gesamtintensität bei hohen Kohlenmonoxidkonzentrationen Vorteile gegenüber dem höheren System aufweist.

Bei geringen Kohlenmonoxidkonzentrationen ist es aufgrund der berechneten relativen Informationsgehalte und der durchschnittlichen Strahlintensitäten jedoch nicht unwahrscheinlich, dass sich das 8 mm hohe optische System als geeigneter zur Gasanalyse erweist. Ein Vergleich der Simulationsergebnisse mit denen des oben beschriebenen U-Rohr-Sensors zeigt, dass die spiralförmige Gassensoroptik mit den verwendeten Einstellungen dem Urohr-Sensor bezüglich der Informationsgewinnung über die Analytkonzentration unterlegen ist. Da es sich bei der in den Simulationsrechnungen als (relative) Intensität bezeichneten Eigenschaft des Lichtes im Grunde um eine Energiegröße handelt, kann der berechnete, niedrigere gesamte Informationsgehalt jedoch prinzipiell durch eine Leistungserhöhung der Strahlungsquelle ausgeglichen werden. Mit der verwendeten Glühlampe der Firma Gilway wurde dies beim U-Rohr-Sensor, wie oben beschrieben, bereits erfolglos versucht. Daher wurde in der spiralförmigen Gassensoroptik eine andere Glühlampe mit höherer Leistungsaufnahme eingesetzt. Der Typ Wire Terminal T1 von der Firma Barthelme [96] nimmt nach Strommessungen bei einer Spannung von 14 V eine elektrische Leistung von 1,092 W auf, während das in den anderen Sensoren verwendete Lampen-Reflektor-System der Firma Gilway bei 5 V eine Leistungsaufnahme von 0,75 W aufweist. Mit dem sich daraus ergebenden Faktor von 1,456 sollte somit (unter Annahme einer ähnlichen Abstrahlungscharakteristik) die spiralförmige Gassensoroptik Kohlenmonoxidmessungen von vergleichbarer Qualität wie der U-Rohr-Sensor ermöglichen, und zwar bei wesentlich günstigeren geometrischen Abmessungen der Gasmesszelle. Bei einem maximalen Durchmesser der Spiralförmigkeit von etwa 41 mm wird eine durchschnittliche Lichtweglänge von ca. 300 mm erreicht, was eine bedeutende Miniaturisierung gegenüber einem vergleichbaren geraden Rohrsensor darstellt.

Die aus den Ergebnissen der Simulationsrechnungen ableitbaren optischen Eigenschaften der spiralförmigen Gassensoroptik sind systembedingt sehr stark abhängig von den Reflexionseigenschaften (-Koeffizienten) der Spiegelflächen, aus welchen das optische System gebildet wird (Spiralfläche, Bodenfläche, Deckfläche).

Würde der in den Simulationsrechnungen vorausgesetzte Reflexionskoeffizient von 95% signifikant unterschritten, bedeutete dies den Verlust der Funktionsfähigkeit des Systems. Andererseits könnte durch eine leichte Verbesserung des Reflexionskoeffizienten auch eine große Performancesteigerung der spiralförmigen Gassensoroptik erreicht werden. Hierzu besteht z. B. die Möglichkeit, die Reflexionsflächen zu vergolden. Würde auf diese Weise ein Reflexionskoeffizient von z. B. 98% realisiert werden, so würde dadurch der berechnete gesamte Informationsgehalt für das 6 mm hohe System auf ca. 16% gesteigert werden, was mehr als einer Verdopplung entspricht.

Die für die spiralförmige Gassensoroptik gewählten Konstruktionsparameter (s. o.) basieren auf der Auswertung einer Vielzahl von Simulationsrechnungen, die für verschiedene Parametereinstellungen durchgeführt wurden. Hierbei wurden möglichst plausible Annahmen über die Realität gemacht, und die technischen Gegebenheiten der verwendeten (verfügbaren) Bauteile sowie die Eigenschaften des gesamten eingesetzten Messsystems berücksichtigt.

Es wurde versucht, diejenige Parametereinstellung zu finden, welche bezüglich der durchschnittlichen Weglänge, des gesamten und relativen Informationsgehaltes, der mittleren Strahlenintensität und dem Gesamtanteil der detektierten Intensität insgesamt die beste Performance liefert. Hierbei wird jedoch nicht der Anspruch erhoben, das System bereits optimiert zu haben. Besonders die Abhängigkeit der Gesamtperformance von der Qualität der Messelektronik und der Sensitivität des Detektors legt nahe, dass eine Optimierung der Gasmesszelle eines IR-Einstrahlungssensors für jedes denkbare technische Setup separat und speziell durchzuführen ist. Bei der spiralförmigen Gassensoroptik wären zudem auch noch andere Konstruktionsmethoden für die Spiralform als die bisher beschriebenen denkbar. So könnte z. B. nach Abbildung 56 bei der Konstruktion der zweiten (und allen weiteren) Reflexionsgeraden nicht der Reflexionswinkel α konstant gehalten werden, sondern der Abstand des (ersten) reflektierten Strahls zum Emitter. Dadurch würde sich wiederum eine etwas andere Spiralform ergeben, die ihrerseits im Hinblick auf deren Konstruktionsparameter bezüglich der Strahlungsausbeute optimiert werden könnte. Aufgrund der unendlich vielen Möglichkeiten, eine spiralförmige Gassensoroptik zu konstruieren, ist bei keiner Parameterwahl gesichert, dass es sich tatsächlich um den optimalen Satz von Daten handelt. Zu dessen Ermittlung wäre vielmehr eine iterative Vorgehensweise geeignet, die anhand von Simulationsrechnungen und entsprechenden Messungen an verschiedenen Systemen zu einem optimierten Setup eines Gassensors führen könnte.

Da der Bau jedes Prototypen jedoch teuer und zeitaufwändig ist, konnte die Wahl der Konstruktionsparameter für die spiralförmige Gassensoroptik im Rahmen dieser Arbeit nur auf die durchgeführten Simulationsrechnungen gestützt werden. Hiervon ausgehend wurde dann lediglich der Prototyp gemäß der Abbildung 61 mit Systemhöhen von 6 mm und 8 mm hergestellt. Im Nachhinein kann vermutet werden, dass vor allem für andere (verbesserte) Messsysteme eine geringere Systemgröße vorteilhafter wäre, da zum einen die durchschnittliche Lichtweglänge in den ausgewählten Systemen weit oberhalb der Mindestweglänge liegt (Dies hat allerdings auch Vorteile (s. o.)), und zum anderen die Mindestweglänge selbst durch eine Verbesserung der Messelektronik stark reduziert werden könnte. Auch eine Vergütung der Reflexionsflächen könnte zur weiteren Miniaturisierung des Systems beitragen (s. o.).

Die Grundidee der spiralförmigen Gassensoroptik wurde durch die Westfälische Wilhelms-Universität Münster, in Zusammenarbeit mit der Patentverwertungsfirma Provendis in Mülheim a.d.R., unter der Nummer **DE 10 2006 030 788.7** (Fluidkonzentrationsmesssensor) [97] zum Patent angemeldet.

4.3.5 Bau der spiralförmigen Gassensoroptik

Die Prototypen der spiralförmigen Gassensoroptik (vgl. Abb. 63) wurden durch Herausschneiden der berechneten Form für die Mittelplatte aus Edelstahlplatten mit den Dicken 6 mm und 8 mm (7 mm Platten waren nicht verfügbar.) hergestellt (Für eine Massenproduktion wäre die Herstellung nach dem Spritzgussverfahren eine geeignete Option.). Die Herstellung der Boden- und Deckelplatten erfolgte aus 3 mm dicken Stahlblechen. Die Formen wurden aus terminlichen Gründen nicht CNC gefräst, sondern nach dem Drahterosionsverfahren in der Werkstatt des Instituts für Kernphysik der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster hergestellt. Das Erodierverfahren hat den Vorteil, dass hierbei gleichzeitig und sehr schnell mehrere (übereinander gestapelte) Metallplatten zugeschnitten werden können. In Bezug auf die Reflexionseigenschaften der geschnittenen Flächen hat es jedoch den Nachteil, dass diese von einer dunklen, matten Oxidschicht überzogen sind, so dass hieran quasi keine Reflexionen stattfinden können. Abbildung 66 zeigt eine Großaufnahme einer erodierten Metalloberfläche.

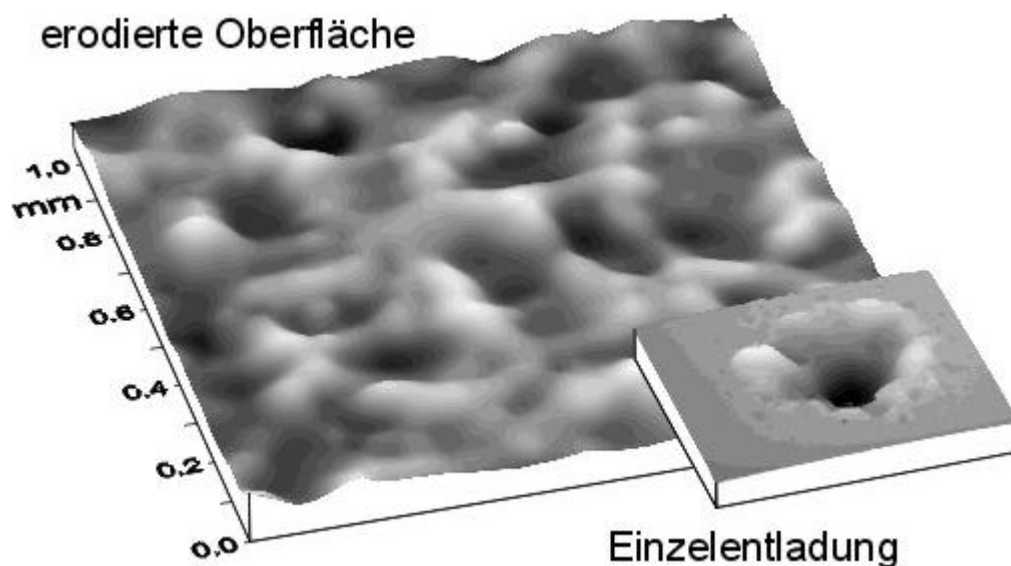


Abb. 66: Detailansicht einer erodierten Metalloberfläche [98].

Wie in Abbildung 66 zu erkennen ist, weisen erodierte Oberflächen herstellungsbedingt eine relativ große Ungleichmäßigkeit auf. Nachdem einige Versuche, die Spiralfäche durch Polieren mit einem Handschleifgerät reflexionsfähig zu machen, gescheitert waren (Das Material ist extrem hart, und auch nach ausgiebiger Politur blieben die Spiegelungseigenschaften der bearbeiteten Oberfläche unbefriedigend. Hinzu kommt, dass bei einer intensiven Bearbeitung von Hand immer eine Wölbung der polierten Oberfläche entsteht, da die Materialabtragung an den Rändern der Fläche stets größer ausfällt als in deren Zentrum.), wurde ein anderer Weg zur Oberflächenpräparation eingeschlagen. Die Firma Conrad Electronic SE, Hirschau, bietet unter der Artikelnummer 297550 – 62 eine Spiegelfläche aus metallbedampftem Polystyrol an.

Diese ist leicht zu bearbeiten und unter Wärmeeinwirkung beliebig verformbar. Da die Polystyrolplatte eine Dicke von 1 mm aufweist, eignet sich diese jedoch nicht zur direkten Aufbringung auf die vorgesehenen Reflexionsflächen. Daher wurde deren Dicke durch Abfräsen zunächst auf 0,4 mm (Dies stellte sich als die Grenze des technisch Machbaren heraus [99].) reduziert. Die so erhaltene Folie wurde dann auf die vertikale Spiralfäche aufgeklebt. Für die Deckplatten wurde direkt die Polystyrolspiegelplatte eingesetzt, welche mit Hilfe z. B. eines Cuttermessers leicht auf die Form der Deckplatten zuzuschneiden ist. Durch die Beaufschlagung der ausgeschnittenen Spiralfäche mit der 0,4 mm dicken Folie ändern sich selbstverständlich die optischen Eigenschaften des Systems. Nach angepassten Simulationsrechnungen ergibt sich für beide Systeme (Höhe 8 mm und 6 mm) dadurch ein Wert für den gesamten Informationsgehalt von ca. 6%.

Damit sollten nach den voran gegangenen Überlegungen quantitative Kohlenmonoxidmessungen mit dem gegebenen Messsystem möglich sein, obgleich die optischen Eigenschaften der Systeme nahe an denen durch den Urohr-Sensor spezifizierten Minimalbedingungen liegen.

Abbildung 67 zeigt links ein Foto des 8 mm hohen Prototypen und rechts eine Aufnahme der dazu passenden Deckplatte aus Spiegelpolystyrol. Obwohl deren Oberfläche auf dem Foto matt erscheint, besitzt diese dieselben Reflexionseigenschaften wie auch die Bodenplatte des Prototypen.

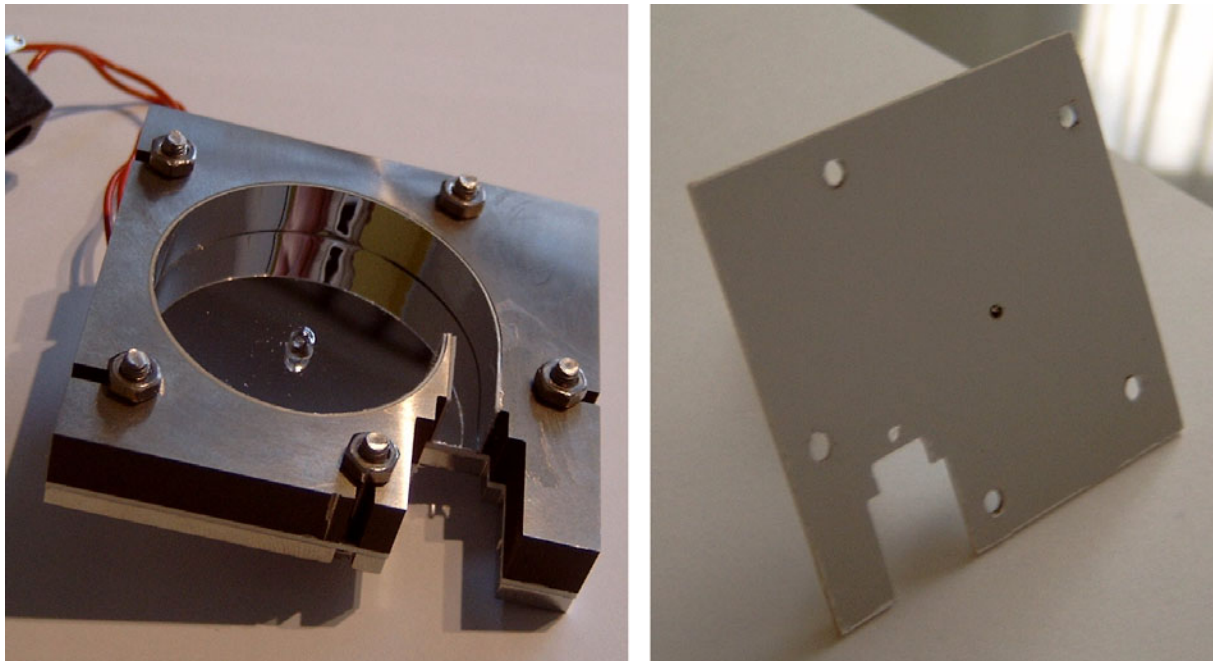


Abb. 67: Fotoaufnahmen eines (geöffneten) Prototypen der spiralförmigen Gassensoroptik mit installierter Glühlampe und des dazugehörigen Deckels (rechts). Der Deckel besitzt neben den Löchern für die Schraubverbindungen zwei zusätzliche Bohrungen, die der Gas-Zu- und -Ableitung dienen.

Auf dem linken Foto in Abbildung 67 ist die auf die Spiralfäche aufgeklebte Polystyrolspiegelfolie zu erkennen (weißer Rand). Die Beschaffenheit der erodierten Metallflächen ist bei den unbehandelten Seitenflächen (vorne) der Mittelplatte zu betrachten. Der Detektor kann z. B. durch wieder verwendbare Klebmasse am Spiralenaustrag fixiert werden.

4.3.6 Messungen mit der spiralförmigen Gassensoroptik

Mit dem 6 mm hohen Prototypen der spiralförmigen Gassensoroptik, im folgenden als Sensor A bezeichnet, wurden Messungen über einen großen Konzentrationsbereich von Kohlenmonoxid in synthetischer Luft durchgeführt. Abbildung 68 zeigt eine Auftragung des Sensorsignals gegen die Zeit bei stufenweise erfolgreicher Beaufschlagung des Sensors mit unterschiedlichen Kohlenmonoxidkonzentrationen.

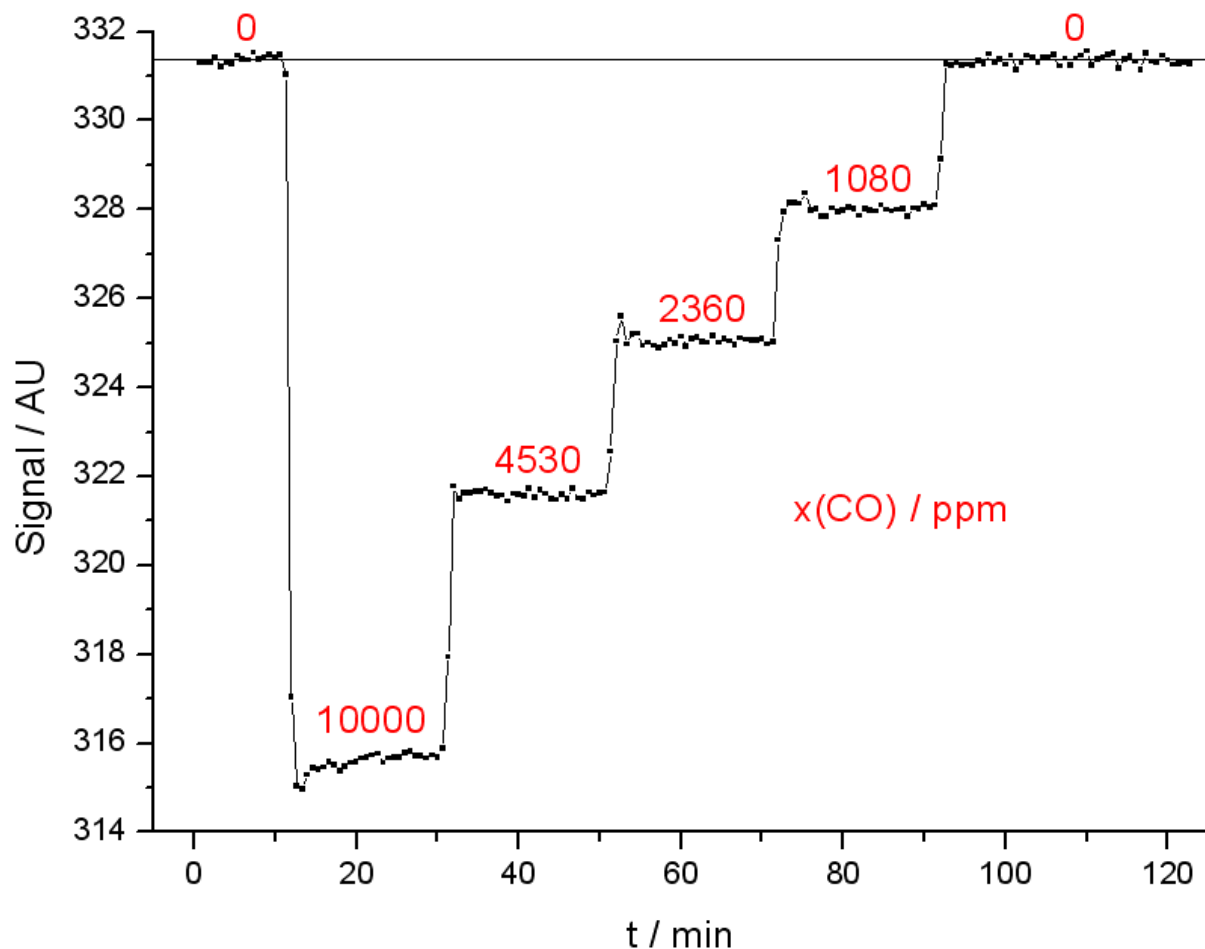


Abb. 68: Sensorsignal des Sensors A bei Beaufschlagung mit verschiedenen Kohlenmonoxidkonzentrationen in synthetischer Luft. Die Zahlen an den Kurven geben jeweils die eingestellte Kohlenmonoxidkonzentration im betreffenden Zeitintervall (Stufen) an.

Wie aus Abbildung 68 ersichtlich wird, lassen sich die vorgegebenen Stufen der Gaskonzentrationen in der Auftragung des Sensorsignals gegen die Zeit direkt erkennen. In Bezug auf den Analyten Kohlenmonoxid handelt es sich um relativ hohe Konzentrationen, wie sie z. B. bei (unvollständigen) Verbrennungsprozessen auftreten können.

Auch bei der Stufe mit der geringsten Kohlenmonoxidkonzentration von ca. 1000 ppm besteht für den Menschen bereits, je nach Expositionsdauer, Vergiftungs- und unter Umständen Lebensgefahr (vgl. Tabelle. 1). Quantitative Messungen im betrachteten Konzentrationsbereich sind daher in erster Linie für die Überwachung technischer Prozesse (z. B. Abgasuntersuchungen) interessant, bei Atemluftuntersuchungen wären sie lediglich zur Überwachung einer Alarmschwelle sinnvoll. Abbildung 69 zeigt die Kalibrationskurve des Sensors A.

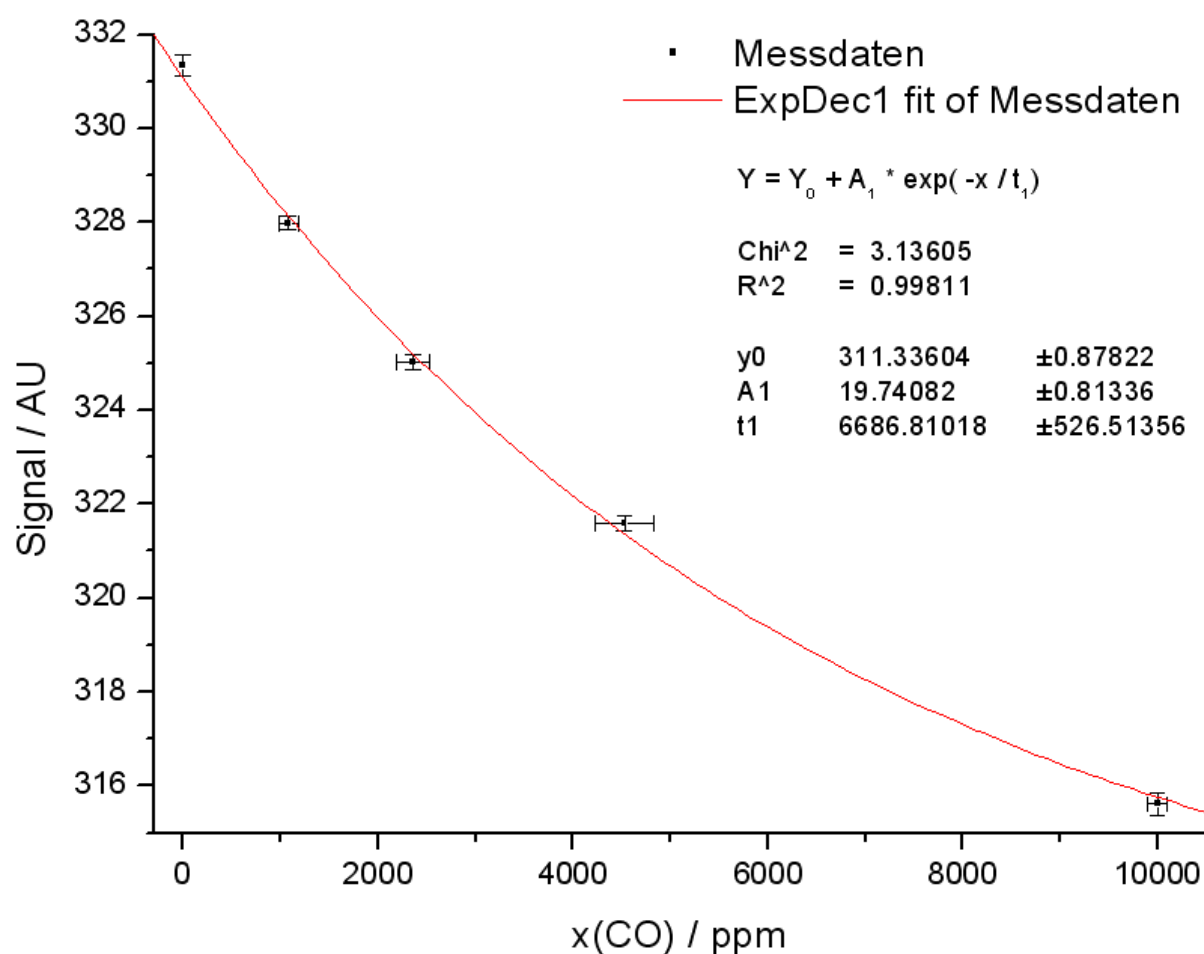


Abb. 69: Kalibrierungsdaten des Sensors A. Die rote Kurve stellt die Fittingfunktion nach dem Modell des exponentiellen Abfalls erster Ordnung (vgl. Kapitel 3.2) dar.

Wie in Abbildung 69 zu erkennen ist, weicht die Kalibrierungsfunktion des Sensors A deutlich von einem linearen Verlauf ab. In erster Linie ist dies auf die Größe des betrachteten Konzentrationsbereichs zurückzuführen, in welchem nach dem erweiterten Lambert-Beer'schen Gesetz (vgl. Kapitel 3.2) ein Verlauf der Kalibrierungsfunktion nach einer abfallenden Exponentialfunktion zu erwarten ist.

Jedoch liefert auch die logarithmische Auftragung der Größe Y/Y_0 gegen die Kohlenmonoxidkonzentration keinen linearen Zusammenhang, wie Abbildung 70 zu entnehmen ist.

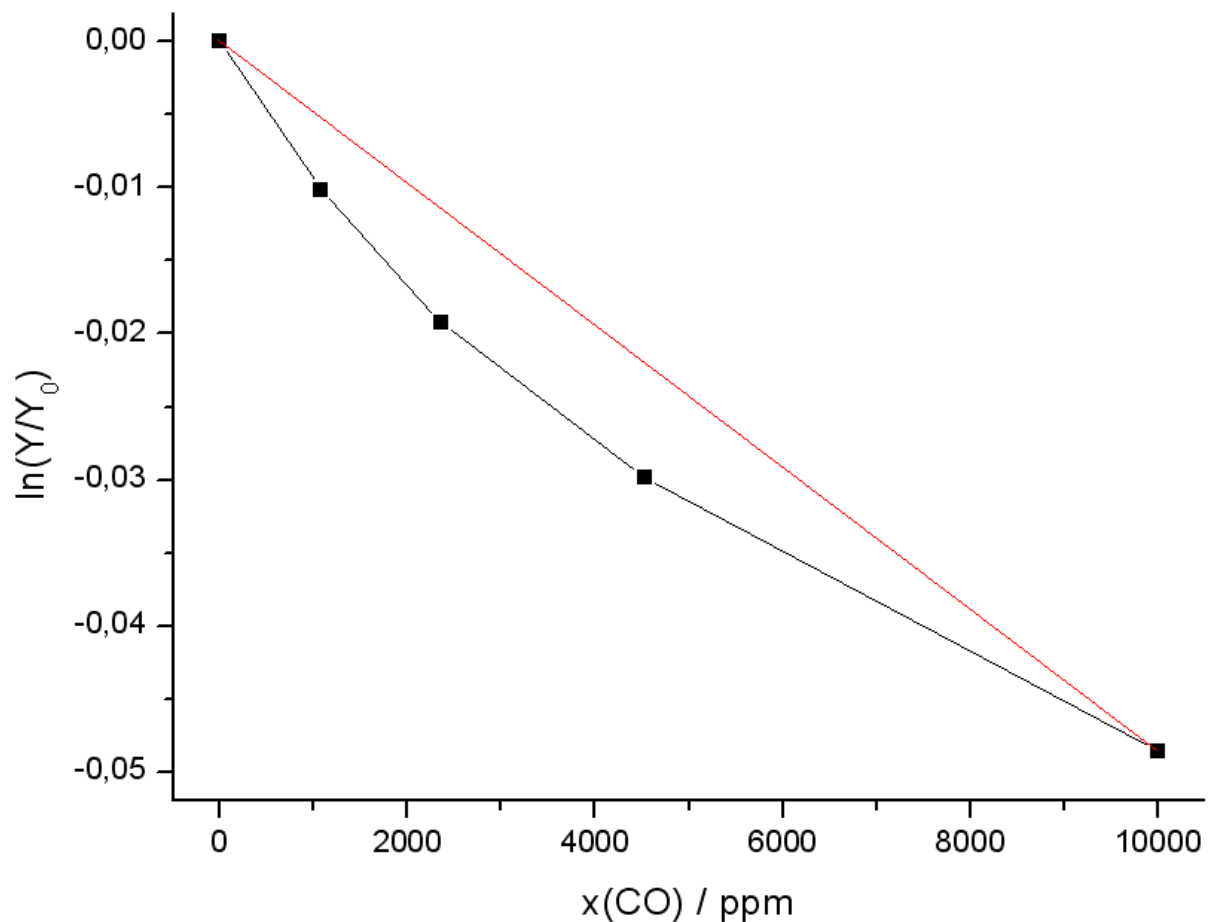


Abb. 70: Auftragung des logarithmierten relativen Sensorsignals gegen die Kohlenmonoxidkonzentration für den Sensor A. Die rote Gerade stellt den hypothetischen linearen Verlauf dar.

Die Abweichung der Kurve in Abbildung 70 vom linearen Verlauf ist nach den oben und in Kapitel 3.2 angestellten Überlegungen zum großen Teil auf die Uneinheitlichkeit der Lichtweglängen in der Gasmesszelle zurückzuführen. Insgesamt weist der Sensor A bei großen Analytkonzentrationen eine geringere Sensitivität auf als bei kleinen Kohlenmonoxidgehalten im Messgas, wobei aufgrund der auftretenden Störstrahlung auch die Sensitivität bei kleinen Analytkonzentrationen gegenüber derjenigen des U-Rohr-Sensors herabgesetzt ist. Bezogen auf den untersuchten Konzentrationsbereich liefert der Sensor A dennoch brauchbare Messergebnisse, wie durch Abbildung 71 dargestellt wird.

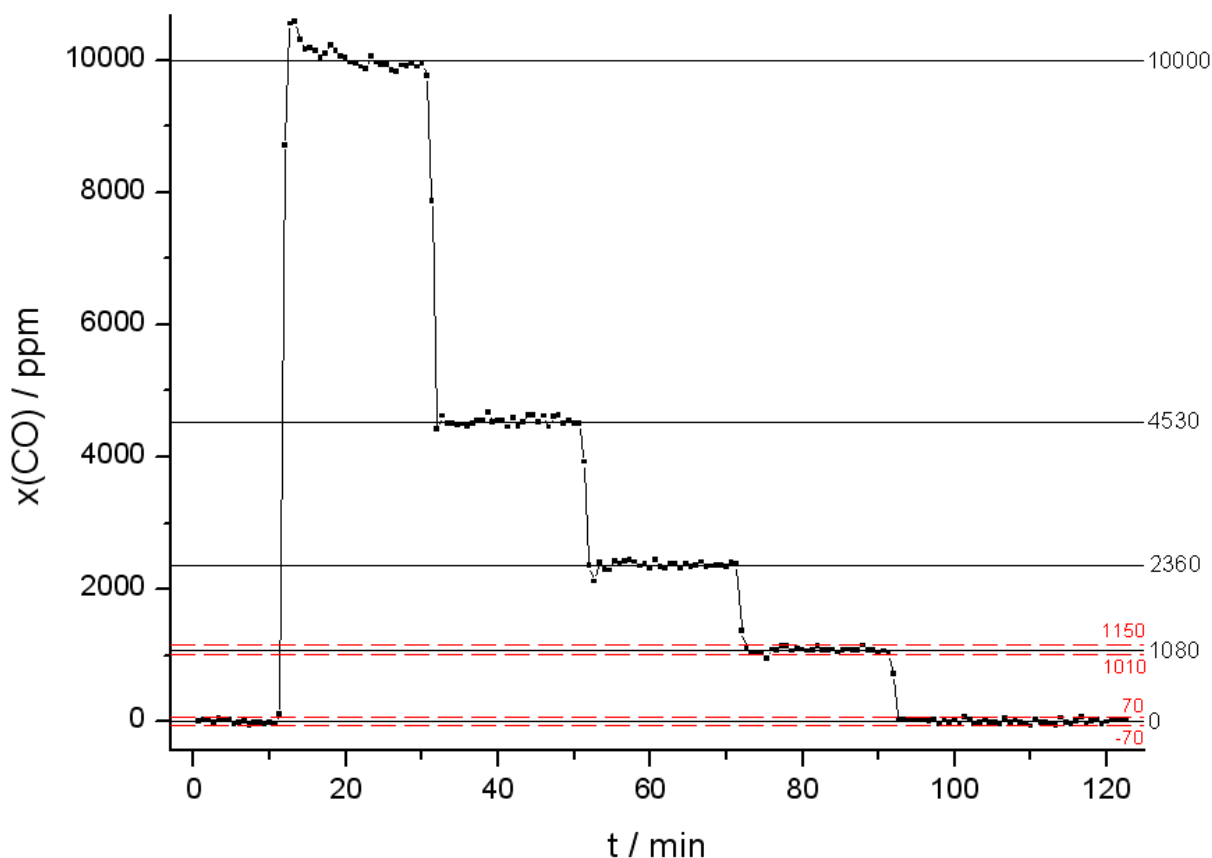


Abb. 71: Messkurve des Sensors A bei stufenweise erfolgreicher Beaufschlagung mit fünf verschiedenen Kohlenmonoxidkonzentrationen. Die schwarzen Geraden geben jeweils die im entsprechenden Zeitbereich tatsächlich vorliegenden Konzentrationen von Kohlenmonoxid im Messgas an. Die rot gestrichelten Geraden markieren 140 ppm breite Bereiche um die Stufen von 0 ppm und 1080 ppm, um das Rauschen des Sensors von ± 70 ppm im Bereich kleinerer Kohlenmonoxidkonzentrationen zu visualisieren. Das Messintervall beträgt 40 s.

Die durch das Rauschen des Sensors im Bereich kleinerer Kohlenmonoxidkonzentrationen definierte Nachweisgrenze des Sensors A beträgt ca. 200 ppm, was 2% der maximal eingesetzten Analytkonzentration entspricht. Insgesamt liegt die Auflösung des Sensors bei weniger als ± 100 ppm, also $\pm 0,01\%$ Vol, was für technische Anwendungen (z. B. Abgasuntersuchungen nach Genauigkeitsklasse I [100]) im allgemeinen ausreichend ist.

Die Kombination des Prototypen der spiralförmigen Gassensoroptik von 8 mm Höhe mit dem Messsystem wird im folgenden als Sensor B bezeichnet. Dieser wurde auf seine Funktionsfähigkeit zur Kohlenmonoxidmessung im Bereich von 0 ppm bis 500 ppm untersucht. Abbildung 72 zeigt wiederum eine Auftragung des Sensorsignals gegen die Zeit bei stufenweise erfolgreicher Beaufschlagung des Sensors mit unterschiedlichen Kohlenmonoxidkonzentrationen.

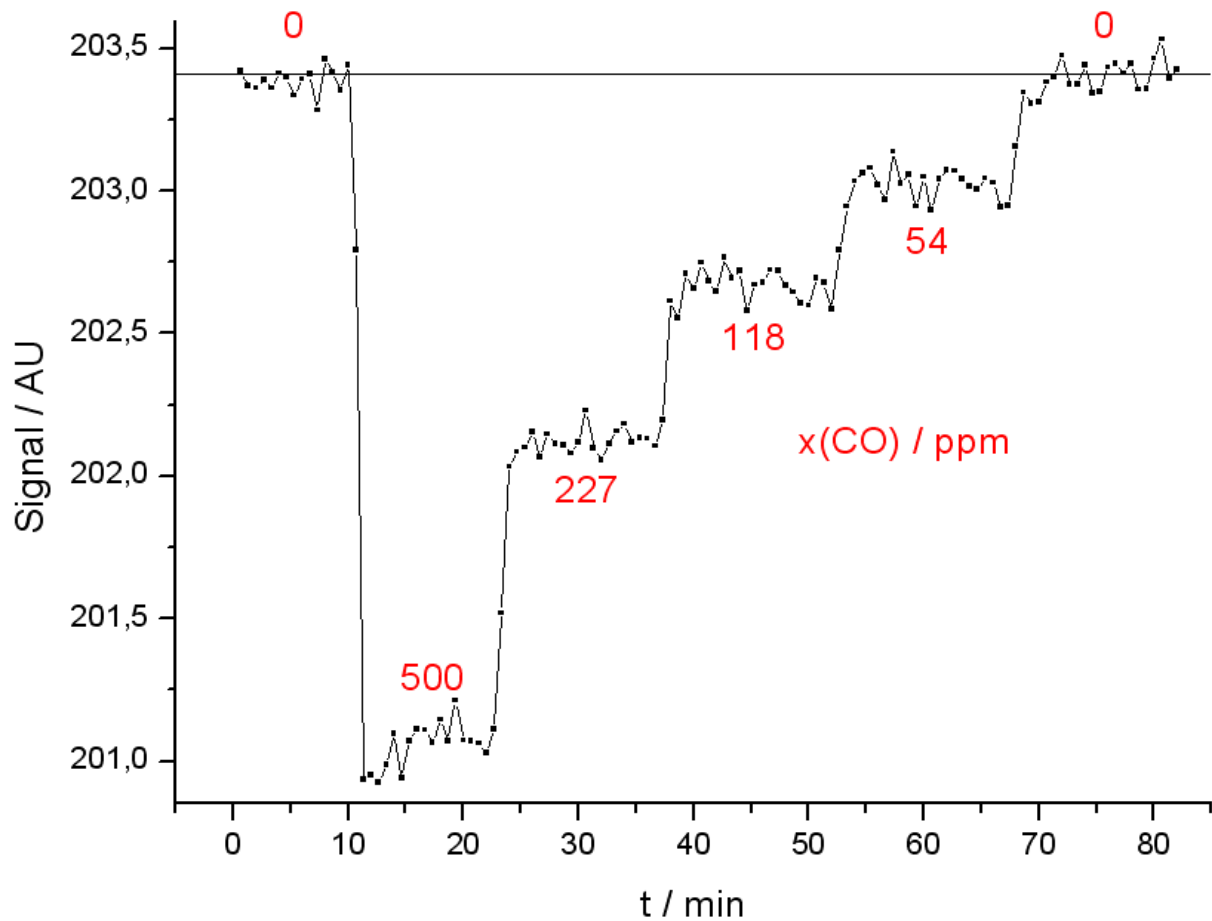


Abb. 72: Sensorsignal des Sensors B bei Beaufschlagung mit verschiedenen Kohlenmonoxidkonzentrationen in synthetischer Luft. Die Zahlen an den Kurven geben jeweils die eingestellte Kohlenmonoxidkonzentration im betreffenden Zeitintervall (Stufen) an.

Die aus den Daten der Auftragung in Abbildung 72 resultierende Kalibrationskurve des Sensors B ist in Abbildung 73 dargestellt.

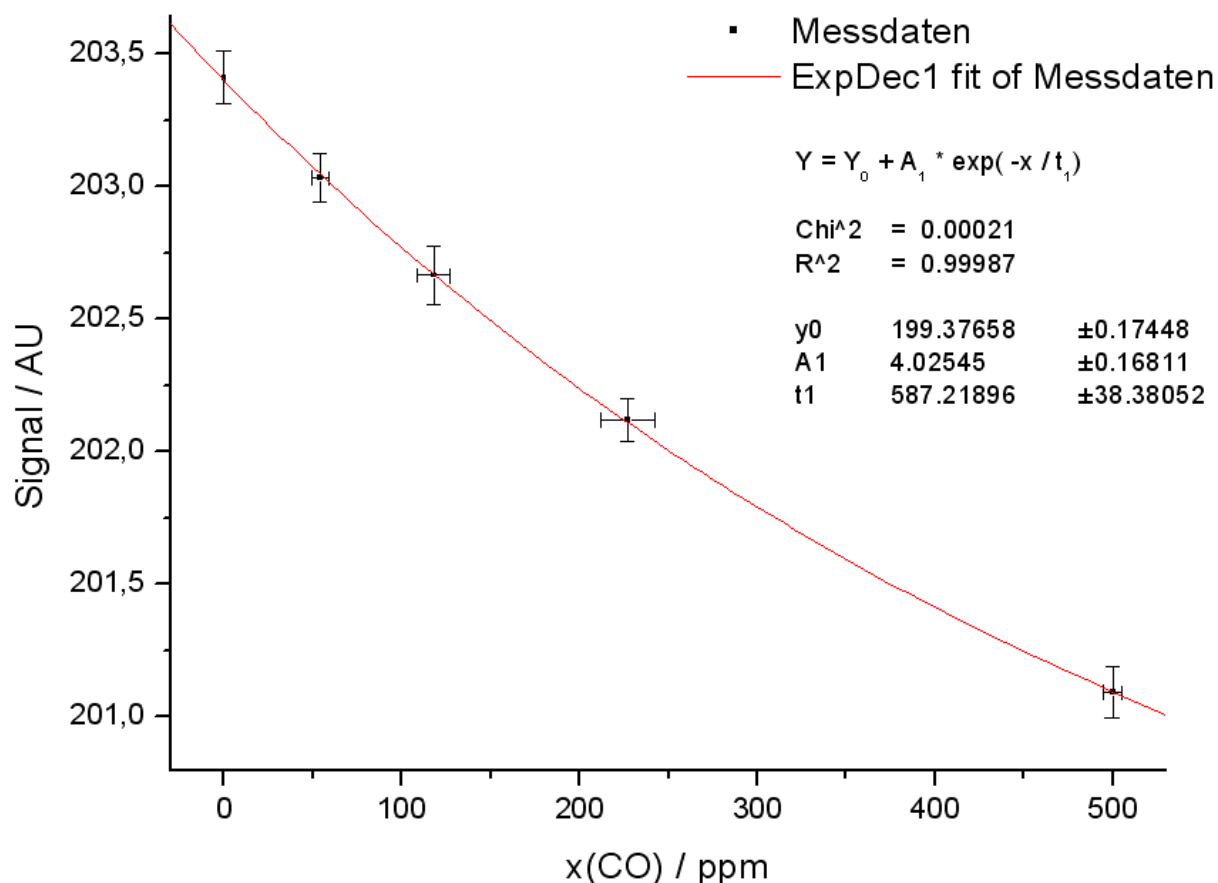


Abb. 73: Kalibrierungsdaten des Sensors B. Die rote Kurve stellt die Fittingfunktion nach dem Modell des exponentiellen Abfalls erster Ordnung (vgl. Kapitel 3.2) dar.

Im Unterschied zur Kalibrierungskurve des Sensors A ist die Abweichung der Kalibrierungsfunktion des Sensors B von der Linearität nicht durch die Ausdehnung des betrachteten Konzentrationsbereichs an Kohlenmonoxid zu erklären, da der gerade Rohrsensor im selben Bereich diesbezüglich Linearität zeigte (vgl. Abbildung 51). Die Sensitivität des Sensors B nimmt bereits bei einer leicht erhöhten Kohlenmonoxidkonzentration (500 ppm) geringfügig, aber messbar ab. Die Uneinheitlichkeit der Lichtweglängen und der Einfluss der Störstrahlung wirken sich hier also direkt auf das Sensorsignal aus. Dementsprechend zeigt auch die Auftragung des logarithmierten relativen Sensorsignals gegen die Analytkonzentration keinen linearen Zusammenhang, wie in Abbildung 74 zu erkennen ist.

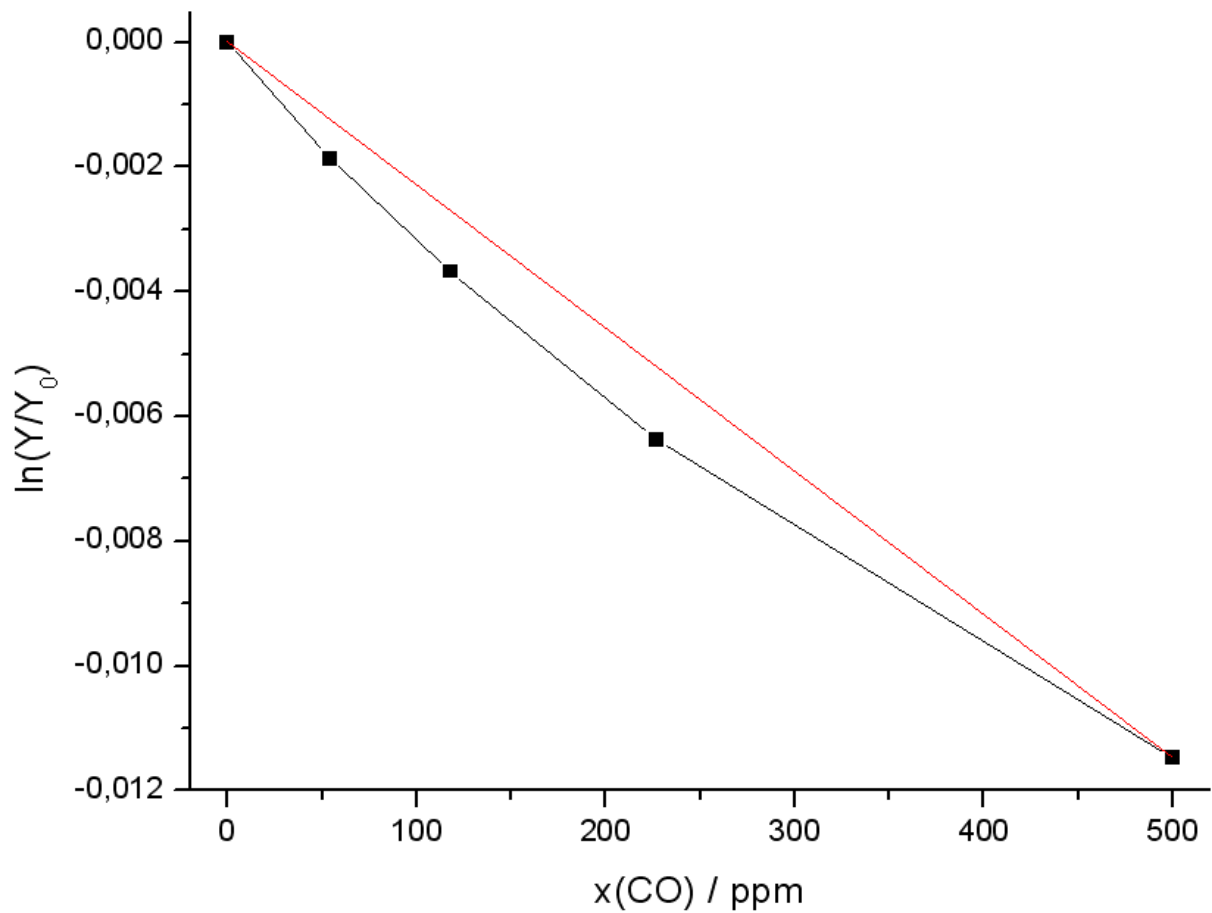


Abb. 74: Auftragung des logarithmierten relativen Sensorsignals gegen die Kohlenmonoxidkonzentration für den Sensor B. Die rote Gerade stellt den hypothetischen linearen Verlauf dar.

Die Messkurve des Sensors B ist in Abbildung 75 dargestellt.

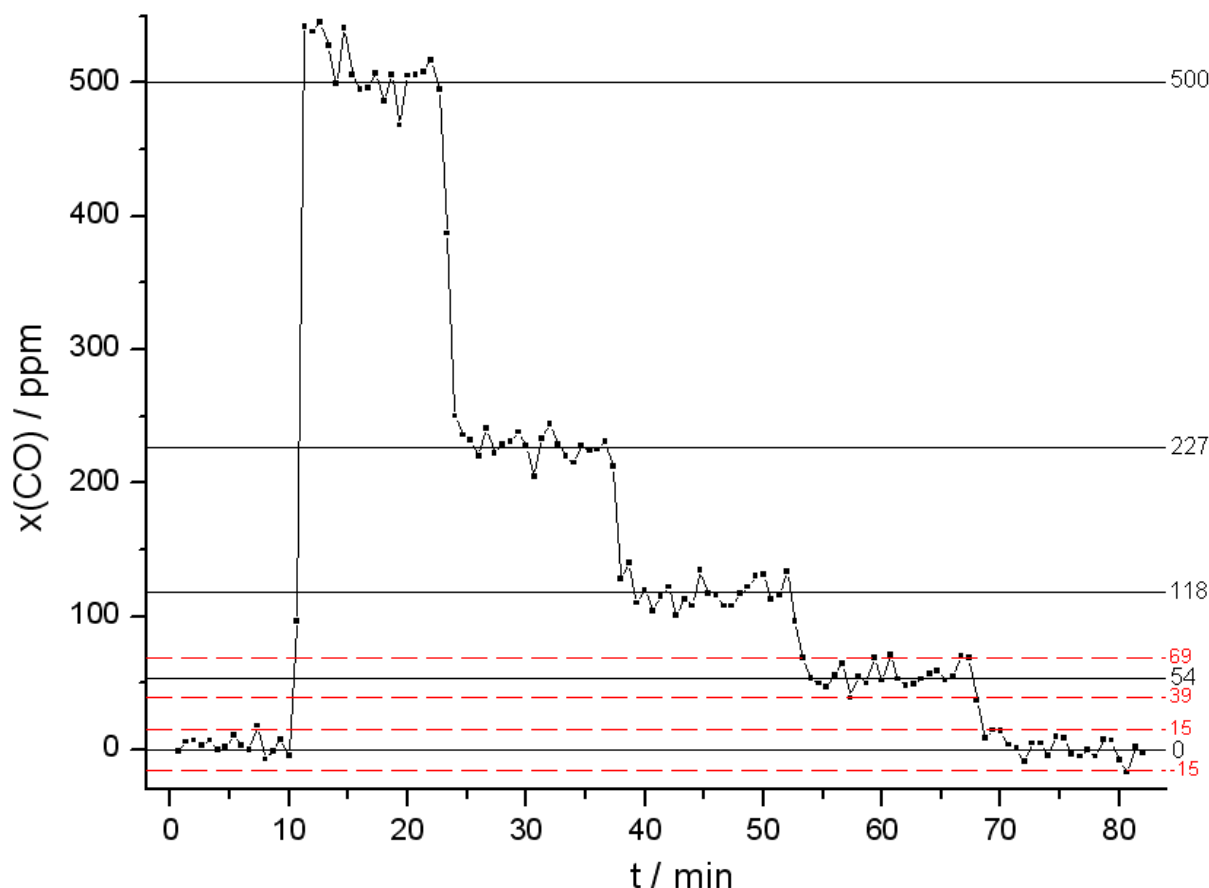


Abb. 75: Messkurve des Sensors B bei stufenweise erfolgreicher Beaufschlagung mit fünf verschiedenen Kohlenmonoxidkonzentrationen. Die schwarzen Geraden geben jeweils die im entsprechenden Zeitbereich tatsächlich vorliegenden Konzentrationen von Kohlenmonoxid im Messgas an. Die rot gestrichelten Geraden markieren 30 ppm breite Bereiche um die Stufen von 0 ppm und 54 ppm, um das Rauschen des Sensors von ± 15 ppm im Bereich kleiner Kohlenmonoxidkonzentrationen zu visualisieren.

Wie Abbildung 75 zu entnehmen ist, weist der Sensor B im Bereich kleiner Kohlenmonoxidkonzentrationen ein Rauschen auf, welches demjenigen des U-Rohr-Sensors (vgl. Abbildung 55) entspricht. Bei der 500 ppm Stufe rauscht das Sensorsignal um etwa 10%, was jedoch auch bei anderen, bereits nach dem europäischen Standard EN50291 zertifizierten Kohlenmonoxidsensoren der Fall ist [93]. Insgesamt kann der Sensor B in vorliegender Ausführung in Bezug auf die Messgenauigkeit bzw. Präzision also in etwa die Mindestanforderungen nach dem europäischen Standard EN50291 erfüllen.

Unter anderem, um zu ermitteln, ob die Polystyrolspiegelfolie in Wirklichkeit einen wesentlich höheren Reflexionskoeffizienten als polierter Edelstahl aufweist und damit alle Verbesserungsmöglichkeiten durch eine Oberflächenvergütung bereits ausgeschöpft wären, wurde ein dritter Prototyp der spiralförmigen Gassensoroptik (mit gleichen Maßen) angefertigt. Als Deckplatten dienten hier wiederum die Polystyrolspiegelflächen, jedoch wurde die Spiralfäche nicht beklebt, sondern durch die Firma DH-Oberflächentechnik GmbH in Pirna elektropoliert. Anschließend wurde die Reflexionsfläche durch leichte Handpolitur auf Hochglanz gebracht.

Dieser Prototyp, der wie der Sensor B eine Höhe von 8 mm besitzt, wird im folgenden Sensor C genannt. Der Sensor C zeigte im wesentlichen sehr ähnliche Eigenschaften wie der Sensor B; es wurde beim Sensor C lediglich eine minimal bessere Signalstabilität erreicht, wie es bei ähnlichen Reflexionskoeffizienten der Spiegelflächen auch zu erwarten wäre (vgl. Simulationsergebnisse). Eine merkliche Verbesserung der Messgenauigkeit ergibt sich daraus allerdings nicht. Diese kann jedoch dadurch erreicht werden, dass das Messintervall auf 56 s (Mittelung über sieben Werte) erhöht wird. Abbildung 76 zeigt eine Messkurve des Sensors C für den Bereich kleiner Kohlenmonoxidkonzentrationen bei einem Ausgabeintervall von 56 s.

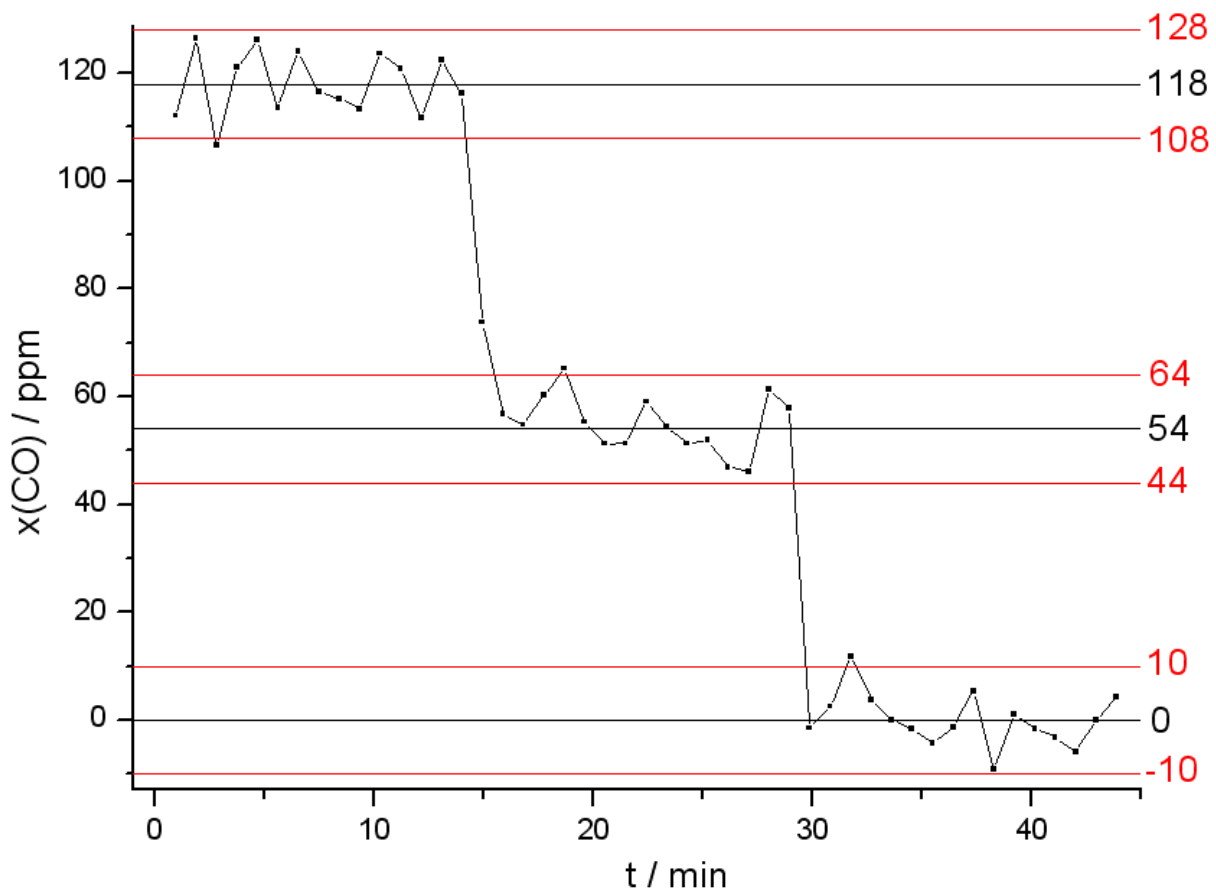


Abb. 76: Messkurve des Sensors C bei stufenweise erfolgender Beaufschlagung mit drei verschiedenen Kohlenmonoxidkonzentrationen. Die schwarzen Geraden geben jeweils die im entsprechenden Zeitbereich tatsächlich vorliegenden Konzentrationen von Kohlenmonoxid im Messgas an. Die roten Geraden markieren jeweils 20 ppm breite Bereiche um die Stufen von 0 ppm, 54 ppm und 118 ppm, um das Rauschen des Sensors von ± 10 ppm im Bereich kleiner Kohlenmonoxidkonzentrationen zu visualisieren. Das Messintervall beträgt 56 s.

Wie in Abbildung 76 zu erkennen ist, kann bei einer Werteausgabe im Zeitintervall von ca. einer Minute sehr deutlich zwischen Gaskonzentrationen von etwa 120 ppm, 55 ppm und 0 ppm differenziert werden. Das Rauschen beträgt hier nur ca. ± 10 ppm. Eine Verlängerung der Messdauer wirkt sich logischerweise bei allen beschriebenen Sensoren positiv auf deren Präzision aus. Bei einer Messdauer von einer Minute können immer noch alle Zeitvorgaben des europäischen Standards EN50291 für Kohlenmonoxidmessgeräte erfüllt werden.

Der Sensor A wurde auch im Hinblick auf seine Temperaturabhängigkeit und die Querempfindlichkeit gegenüber Kohlendioxid untersucht. Diese Messung wurde allerdings anders als die bisher beschriebenen Messungen durchgeführt. Die Werte der Sensorsignale wurden nicht online aufgezeichnet, sondern erst im Anschluss an die Messung nachträglich ermittelt. Der Grund dafür liegt darin, dass die Offsetspannung des Detektors (vgl. Kapitel 4.2) sehr stark temperaturabhängig ist, so dass bei Abfahren einer größeren Temperaturspanne der hardwaremäßig eingestellte Triggerlevel seine Funktion verlieren würde. Daher wurde das Detektorsignal kontinuierlich aufgezeichnet und anschließend per Software die Signale für die einzelnen Lampenpulse herausgefiltert. Die Messfrequenz lag bei nur ca. 40 Hz, so dass auch eine andere Auswertungsmethode für die Detektorsignale gewählt wurde. Das Sensorsignal wurde hier einfach als die Differenz aus dem Maximalwert und dem Minimalwert des Detektorsignals für einen Lampenpuls definiert, nachdem dieses nach der Methode des gleitenden Mittelwertes mit $n = 21$ geglättet worden war. Bei der Messung wurde sowohl die Gasmesszelle, als auch die angeschlossenen Verstärkungselektronik der Temperaturvariation unterworfen, so dass die ermittelte Temperaturabhängigkeit sich auf die Kombination von Detektor und Verstärker bezieht. Obwohl es sich bei dem pyroelektrischen Detektor LIE 316 um eine bereits intern temperaturkompensierte Detektorversion handelt, ist eine Temperaturabhängigkeit des Detektorsignals zu erwarten, da das gesamte Messprinzip für die IR-Strahlung letztlich auf einer Temperaturmessung beruht. Daneben ist nicht auszuschließen, dass sich der Verstärkungsgrad der Elektronik bei einer Temperaturvariation ändert, da z. B. die ohmschen Widerstände in der Schaltung eine Temperaturabhängigkeit aufweisen können. Abbildung 77 zeigt die Auftragung des nachträglich berechneten Sensorsignals gegen die Zeit, in welcher zunächst eine Temperaturrampe abgefahren wurde (6 h) und der Sensor anschließend mit verschiedenen Konzentrationen von (jeweils ausschließlich) Kohlenmonoxid und Kohlendioxid beaufschlagt wurde. Während der Temperaturrampe wurde der Sensor mit synthetischer Luft gespült, bei den Gasmessungen wurde die Temperatur auf konstant 25° C gehalten. Das Messintervall beträgt 8 s. Die teilweise auftretenden starken Signalausschläge an den Rändern der Gasstufen rühren vom starken elektromagnetischen Impuls her, der bei der Schaltung der Magnetventile in der Gasmischanlage ausgelöst wird. Bei den vorherigen Messungen war dies auch der Fall (vgl. z. B. Abbildung 71), jedoch fiel dort die Signalübersteuerung aufgrund des längeren Messintervalls (Mittelung) nicht so stark auf.

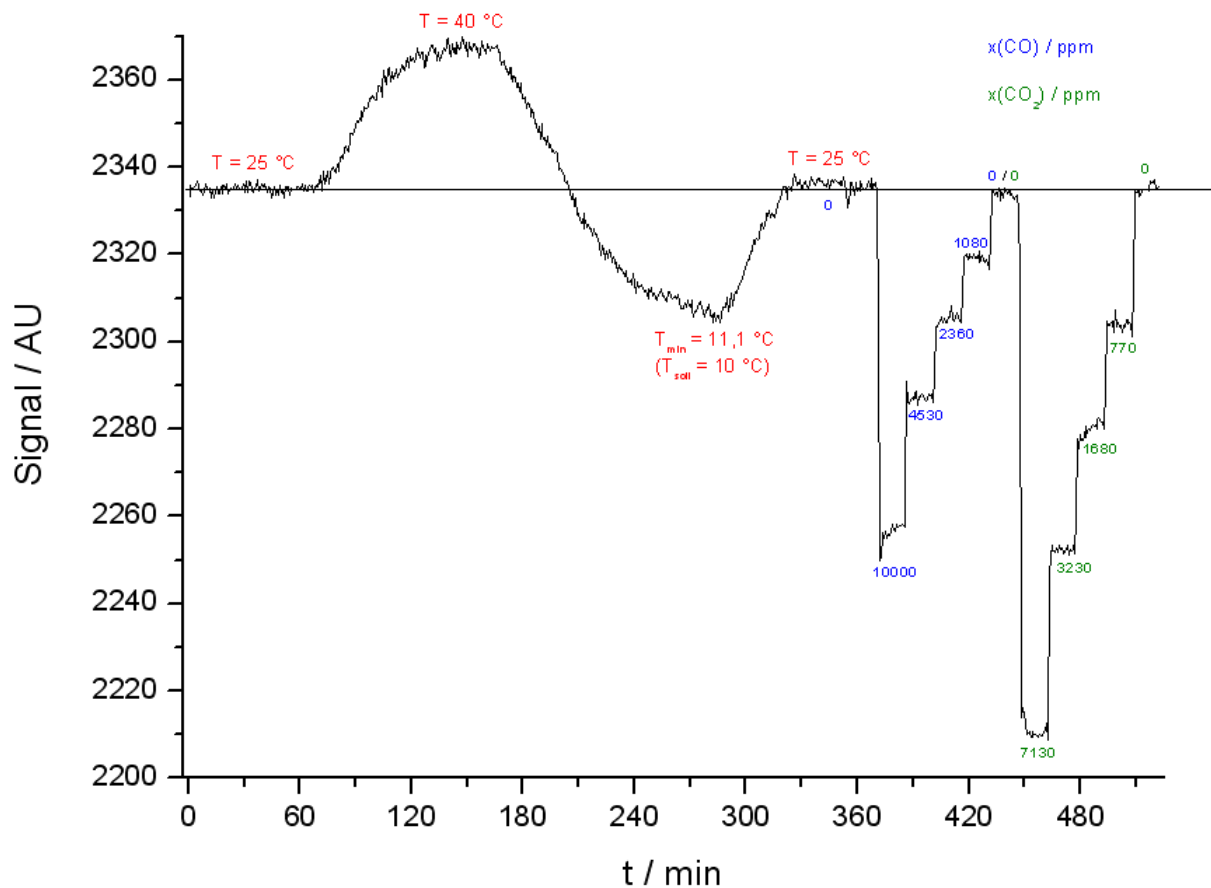


Abb. 77: Nachträglich aus einer kontinuierlichen Aufzeichnung berechnetes Sensorsignal des Sensors A bei Durchlaufen einer Temperaturrampe und Beaufschlagung mit verschiedenen Konzentrationen von Kohlenmonoxid und Kohlendioxid in synthetischer Luft.

Wie in Abbildung 77 zu erkennen ist, zeigt der Sensor in Anbetracht der geringen Messfrequenz und des kurzen Ausgabeintervalls eine erstaunlich gute Auflösung der einzelnen Gasstufen. Die Schwankung der Temperatur ist direkt am Verlauf des Sensorsignals abzulesen. Ein Vergleich der Größe der Signaländerung durch die Temperaturänderung mit derjenigen Signaländerung, die durch die Konzentrationsänderung an Kohlenmonoxid ausgelöst wird, ergibt, dass eine Temperaturänderung von einem Kelvin eine Änderung der Kohlenmonoxidkonzentration von ca. 150 ppm im Ausgabesignal vortäuschen würde. Aus diesem Grund muss im allgemeinen bei Messungen mit IR-Einstrahlungssensoren stets auch die Temperatur bestimmt werden, um deren Effekt auf das Sensorsignal kompensieren zu können. Hier bietet sich der Einsatz eines Temperaturfühlers im Sensor an, der bei jeder Gasmessung ebenfalls durch die Messelektronik ausgelesen werden kann.

Abbildung 78 zeigt die Kalibrationskurven des Sensors A in Bezug auf die Kohlenmonoxid- und Kohlendioxidkonzentration.

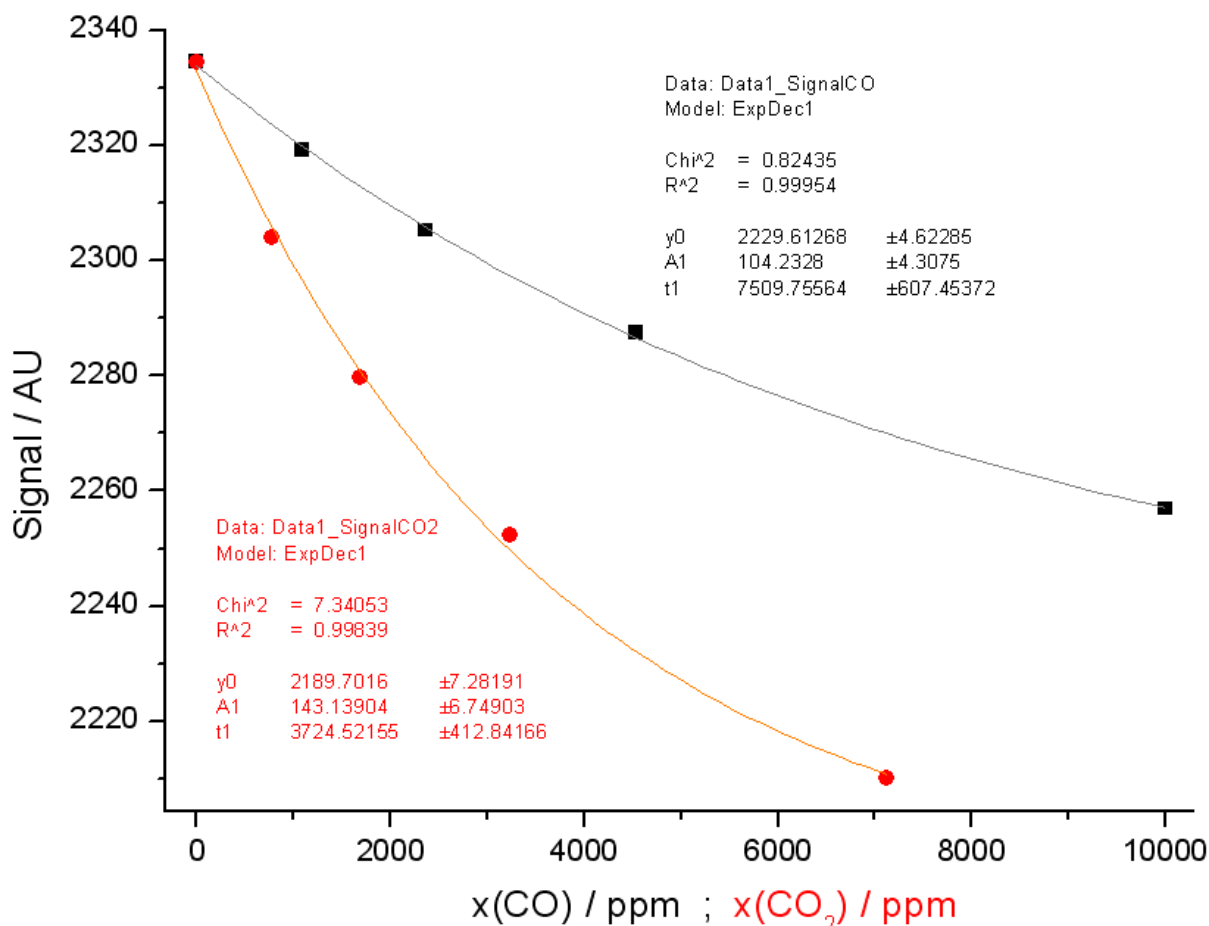


Abb. 78: Kalibrierungsdaten des Sensors A für Kohlenmonoxid (schwarz) und Kohlendioxid (rot). Die Kalibrierungsfunktionen wurden jeweils durch Fitting der Daten nach dem Modell des exponentiellen Abfalls erster Ordnung erhalten.

Wie aus Abbildung 78 zu entnehmen ist, zeigt der Sensor A sogar eine höhere Sensitivität gegenüber Kohlendioxid als in Bezug auf Kohlenmonoxid. Die Querempfindlichkeit ist also extrem stark ausgeprägt. Im Ausgabesignal würden 1000 ppm Kohlendioxid eine Kohlenmonoxidkonzentration von ca. 3000 ppm vortäuschen. Der eingesetzte Interferenzfilter ist also offenbar (zumindest für das verwendete optische System) zu breitbandig, so dass er auch Strahlung einer Wellenlänge passieren lässt, die im Bereich der Absorptionsbande von Kohlendioxid liegt. In diesem Punkt wäre also eine Verbesserung des Systems dringend notwendig.

Da umgekehrt die Bestimmung von Kohlendioxid mittels eines IR-Einstrahlungssensors quasi völlig unabhängig von der Kohlenmonoxidkonzentration durchgeführt werden kann [101], ist jedoch z. B. durch Einsatz eines Doppeldetektors eine Kompensierung der Kohlendioxidkonzentration möglich. Zur Bestimmung von Kohlenmonoxid neben Kohlendioxid bei variabler Temperatur wäre also eine Erfassung der Messgrößen Temperatur und Kohlendioxidkonzentration vor der eigentlichen Ermittlung der Kohlenmonoxidkonzentration vorzunehmen.

Dies könnte durch ein Dreikanal-Messsystem realisiert werden, welches Detektoren für die Temperatur, Kohlendioxid und Kohlenmonoxid enthält. Alternativ könnte auch ein IR-Detektor mit einstellbarem Interferenzfilter verwendet werden, mit welchem die beiden Gase im Wechsel gemessen werden können.

4.4 Qualitätssteigerung durch Verbesserung der Messelektronik

Zur Untersuchung der bereits mehrfach angesprochenen Möglichkeit, die Messgenauigkeit der Sensoren durch eine Verbesserung der Messelektronik zu steigern, war die Firma Gasbeetle GmbH in Münster-Roxel freundlicherweise bereit, zu Testzwecken eine integrierte Schaltung mit Verstärker, AD-Wandler und Mikroprozessor zur Verfügung zu stellen. Der genaue Schaltplan dieser Platine unterliegt allerdings der Geheimhaltung [102]. Das bestehende Messsystem wurde damit insofern abgeändert, dass die Verstärkungselektronik und das PC-Oszilloskop durch diese integrierte Schaltung ersetzt wurden (vgl. Abbildung 25). Die digitalisierten Daten des Detektorsignals wurden dann vom Mikroprozessor über die COM-Schnittstelle zur Auswertung an den Computer weitergeleitet. Die Datenaufzeichnung am Computer erfolgte kontinuierlich und mit einer Messfrequenz von ca. 1,5 kHz. Aufgrund der Art der durch die integrierte Schaltung vorgegebenen Datenaufzeichnung war hier allerdings keine online-Messung möglich, sondern das Detektorsignal musste nachträglich per Software getriggert werden. Auf diese Weise wurden dann Datensätze der Form erhalten, wie sie auch vom PC-Oszilloskop geliefert werden. Die Datenauswertung kann dann wie gehabt durchgeführt werden. Abbildung 79 zeigt die Auftragung des so ermittelten Ausgabesignals des geraden Rohrsensors von 300 mm Länge gegen die Zeit im Bereich kleiner Kohlenmonoxidkonzentrationen.

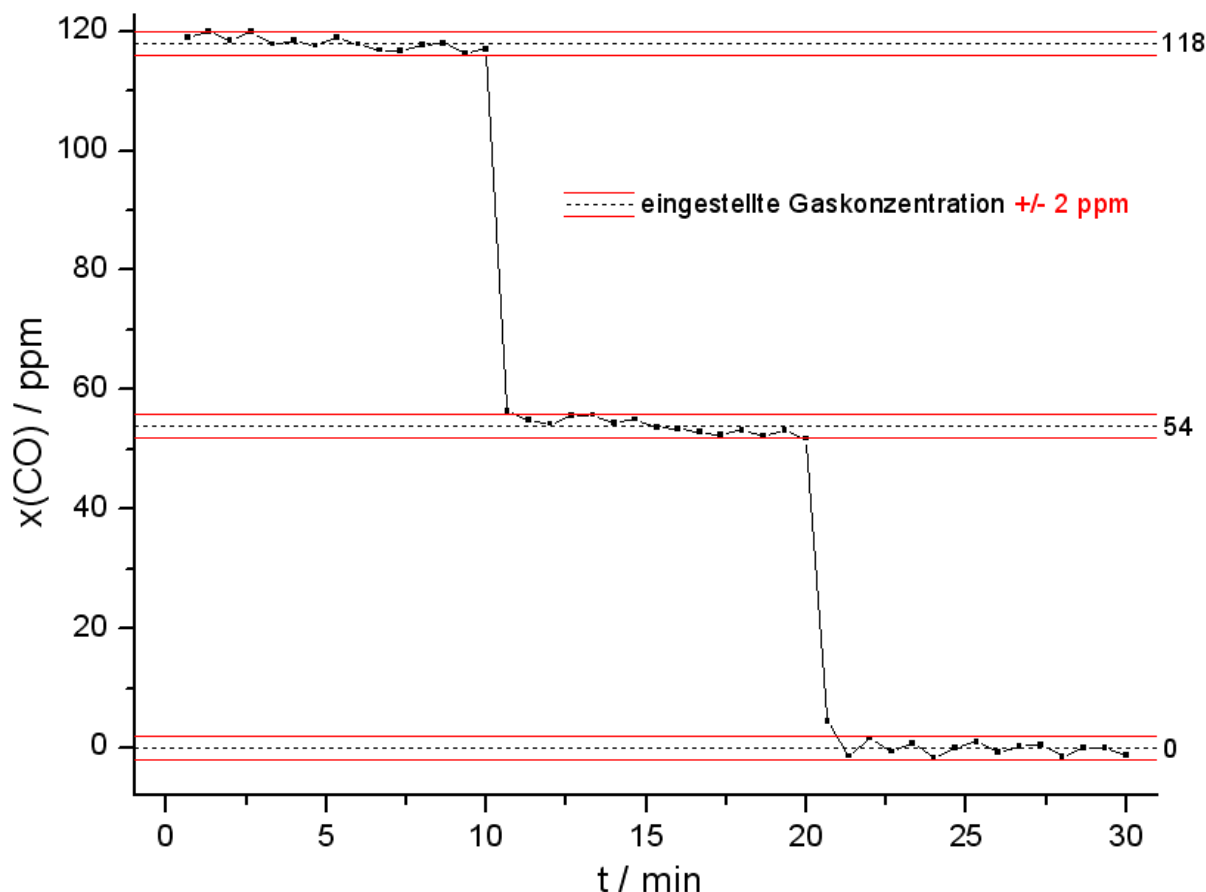


Abb. 79: Messkurve des geraden Rohrsensors von 300 mm Länge bei Verwendung einer integrierten Schaltung zur Signalaufnahme. Das Messintervall beträgt 40 s.

Ein Vergleich der Abbildungen 52 und 79 zeigt, dass durch den Einsatz einer verbesserten Messelektronik das Rauschen des Sensorsignals stark reduziert werden kann (hier von ± 5 ppm auf ± 2 ppm). Diese Aussage lässt sich auf alle durchgeführten Messungen übertragen, da durch die Messelektronik direkt das Signal-Rauschverhältnis des Detektorsignals beeinflusst wird. Eine Stabilisierung des (verstärkten) Detektorsignals führt wiederum zu einem gleichmäßigeren Sensorsignal und somit zu einem geringeren Rauschen der Ausgabewerte. Die Verbesserung der Messgenauigkeit wurde hier erreicht, obwohl es sich bei dem in der integrierten Schaltung verwendeten AD-Wandler nur um ein 12 Bit Gerät handelt, während im Picoskop ein 16 Bit AD-Wandler zum Einsatz kommt. Die Auflösung für das Detektorsignal ist bei der integrierten Schaltung also zwar wesentlich geringer als beim Picoskop ($\Delta U * 1/4096$ gegenüber $\Delta U * 1/65536$; wobei ΔU den Messbereich der Spannung angibt), jedoch ist die integrierte Schaltung deutlich unempfindlicher gegenüber Störeinflüssen aus der Umgebung. Dieses ist hier das entscheidende Kriterium, da auch die Messfrequenz bei der Messung mit der integrierten Schaltung um einen Faktor von ca. 13 gegenüber den Messungen mit dem Picoskop herabgesetzt war.

Durch eine digitale Datenübertragung lässt sich also eine wesentlich bessere Messgenauigkeit erreichen, als dies bei einem in diesem Punkt analog arbeitenden System möglich ist.

Die Langzeitstabilität der betrachteten IR-Einstrahlungssensoren wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht untersucht, jedoch ist davon auszugehen, dass infolge der Lampenalterung mit der Zeit eine Sensordrift auftreten würde. Bei der spiralförmigen Gassensoroptik stehen allerdings alle in Kapitel 3.2 beschriebenen Möglichkeiten zur Alterungskompensation offen. Auch eine Erweiterung des Systems auf zwei oder mehr Strahlungsquellen ist ohne Probleme möglich, indem diese übereinander im System angeordnet werden.

5. Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde erfolgreich ein Computerprogramm entwickelt, das durch Simulationsrechnungen an dreidimensionalen Modellen eine Vorhersage über die Eigenschaften reflektiv arbeitender optischer Systeme treffen kann. Daneben wurde ein Computerprogramm entwickelt, welches sowohl beliebige Modelle von Gasmesszellen, als auch errechnete Strahlengänge in perspektivischer Ansicht grafisch darstellen kann. Auf der Grundlage von theoretischen Überlegungen zu möglichen, optimierten Strahlengängen, entsprechenden Simulationsrechnungen an virtuellen Modellen und Vergleichsmessungen an verschiedenen realen Gasmesszellen wurde eine neuartige Langwegmesszelle entwickelt. Diese zeichnet sich dadurch aus, dass sie auf einem einfachen Bauplan beruht, eine in Relation zur eigenen Größe hohe durchschnittliche Lichtweglänge aufweist und einen großen Anteil der von der Lichtquelle emittierten Strahlung für die Gasanalyse nutzbar macht. Der Wirkungsgrad der Messzelle ist hierbei abhängig von den Reflexionseigenschaften der Oberflächen, durch welche das optische System begrenzt wird. Die Konstruktionsparameter für die gebauten Prototypen der spiralförmigen Gassensoroptik wurden auf das für diese Arbeit vorhandene Messsystem zugeschnitten. Mit diesem wurden dann Gasmessungen zur Charakterisierung der hergestellten Prototypen durchgeführt. Es wurde festgestellt, dass Messungen mit dem Prototyp A (Höhe 6 mm) im Bereich von Kohlenmonoxidkonzentrationen, die bei technischen Anwendungen (z. B. Abgasuntersuchungen an KFZ-Motoren; $10000 \text{ ppm} \cong 1\% \text{ Vol}$) auftreten können, eine befriedigende Genauigkeit von weniger als $\pm 0,01\% \text{ Vol}$ aufweisen. Eine Untersuchung der Temperaturabhängigkeit und der Querempfindlichkeit gegenüber Kohlendioxid führt jedoch zu der Erkenntnis, dass eine Realisierung als Kohlenmonoxidmessgerät in Form eines IR-Einstrahlgassensors nicht hinreichend ist. Da bei den meisten Abgasuntersuchungen ohnehin sowohl Kohlenmonoxid, als auch Kohlendioxid bestimmt werden (z. B. bei der Überprüfung von Heizungsanlagen durch den Schornsteinfeger), bietet sich also eine Konstruktion als Doppelgassensor mit Temperaturfühler an. Das gleiche gilt für den Prototyp B (Höhe 8 mm), mit dem Messungen im für die Sicherheit des Menschen relevanten Konzentrationsbereich von Kohlenmonoxid durchgeführt wurden. Die Qualitätsanforderungen an Kohlenmonoxidmessgeräte, die im Aufenthaltsbereich von Personen eingesetzt werden dürfen, werden durch den europäischen Standard EN50291 definiert. Die durchgeführten Messungen zeigen, dass mit der spiralförmigen Gassensoroptik die im genannten Standard gestellten Bedingungen prinzipiell erfüllt werden können.

Zudem besteht im Vergleich zu denen im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Kohlenmonoxidmessungen mit der spiralförmigen Gassensoroptik ein großes Verbesserungspotenzial bezüglich der bisher erreichten Messgenauigkeit.

Möglichkeiten zur Qualitätssteigerung ergeben sich hier vor allem durch die Verbesserung der Messelektronik, bzw. der Datenübertragung, die Vergütung der Reflexionsflächen sowie die weitere Optimierung der Konstruktionsparameter. Eine durch den technischen Fortschritt erzielte Verbesserung einzelner Systemkomponenten (Emitter, Detektor, Interferenzfilter) könnte ebenfalls zu einer Performancesteigerung bei den Gasmessungen beitragen.

Die vermessenen IR-Einstrahlgassensoren zeigen innerhalb der für die jeweiligen Messungen benötigten Zeitspannen keine nennenswerten Drifterscheinungen. Auf längere Sicht ist jedoch mit einer Alterung der Strahlungsquellen zu rechnen, so dass eine Methode zur Kompensierung dieses Effektes eingeplant werden muss. Hierzu können verschiedene Verfahren angewendet werden, wie z. B. der Einsatz einer Referenzlampe (die problemlos mit in die spiralförmige Gassensoroptik eingesetzt werden kann) oder die Intensitätsmessung auf einer Wellenlänge, die erwartungsgemäß von keinem auftretenden Gas absorbiert wird.

Die vom Verfasser dieser Arbeit erfundene spiralförmige Gassensoroptik wurde durch die Westfälische Wilhelms-Universität Münster in Zusammenarbeit mit der Patentverwertungsfirma Provendis in Mülheim a.d.R. unter der Nummer **DE 10 2006 030 788.7** (Fluidkonzentrationsmesssensor) zum Patent angemeldet.

6. Ausblick

Für die effektive und kommerzielle Nutzung der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten spiralförmigen Gassensoroptik ist die Integration einer oder mehrerer solcher Gasmesszellen in ein eigenständiges Messgerät erforderlich. Dieses Messgerät sollte nach Möglichkeit einen Mikrocontroller enthalten, der eigenständig die Pulsung der Strahlungsquelle(n), so wie die Aufnahme und Digitalisierung der Detektordaten steuert. Auf diese Weise kann gegenüber einem externen Dauerbetrieb eine große Energieeinsparung erreicht werden. Die Datenauswertung kann dann entweder direkt durch den Mikrocontroller erfolgen, oder aber durch einen PC, der z. B. über den USB-Port mit dem Messgerät verbunden werden kann. Das Messgerät sollte einen Temperatursensor und, bei einer Spezialisierung auf Kohlenmonoxid, mindestens zwei Gassensoren (für Kohlenmonoxid und für Kohlendioxid) enthalten. Auch für die Kompensation eines Alterungseffektes der Strahlungsquelle(n) muss hierbei gesorgt werden. Einige Möglichkeiten hierzu wurden bereits beschrieben. Die Nutzung des entwickelten optischen Systems ist selbstverständlich nicht auf den Analyten Kohlenmonoxid beschränkt, sondern dieses kann prinzipiell auch auf andere IR-aktive Gase angepasst werden. Für Kohlendioxid z. B. wäre aufgrund des großen Extinktionskoeffizienten eine deutliche Verkleinerung der Gasmesszelle möglich. Durch eine Kombination mehrerer Sensorsysteme wäre auch die Realisierung eines Multigassensors erstrebenswert. Die weitere Forschung sollte zudem die Einsatzmöglichkeit andersartiger IR-Detektoren (z. B. Thermopiles) überprüfen, um gegebenenfalls die Baukosten für ein integriertes Messgerät weiter abzusenken.

Da im Strahlensimulationsprogramm aufgrund der IR-Absorption durch Glas (im Bereich der Kohlenmonoxidbande) bisher auf eine Berücksichtigung der Lichtbrechung verzichtet werden konnte, bietet sich hier diesbezüglich ein Upgrade an. Damit könnte diese Software auch zur Beurteilung und Entwicklung von optischen Systemen genutzt werden, die lichtbrechende Elemente, wie z. B. Glaslinsen enthalten. Somit würde das Programm wesentlich universeller einsetzbar werden, und könnte auch auf anderen Gebieten der Optik zur Simulation und Optimierung von Strahlengängen verwendet werden.

7. Anhang

7.1 Verifizierung von Gleichung 45 aus Kapitel 3.5

Im Folgenden wird Bezug auf die in Kapitel 3.5 abgeleiteten Gleichungen und Sachverhalte genommen. Für den Parallelisierungswinkel $(\beta - \alpha)$ einer nach Gleichung 40 definierten achsensymmetrischen Parabel mit Brennpunkt im Koordinatenursprung gelten die Randbedingungen: $-90^\circ < \alpha < 90^\circ$, $-90^\circ < \beta < 90^\circ$ und $\beta > \alpha$. Wegen der strengen Monotonie der Tangensfunktion (Die Funktion ist steigend.) in dem für α und β geltenden Definitionsbereich (Außerhalb dieses Bereiches gilt Periodizität.) ist ein in der Auftragung des Parallelisierungswinkels gegen den Funktionsparameter a auftretendes relatives Maximum zwangsläufig an derselben Stelle auch in der Tangensfunktion des Parallelisierungswinkels zu finden. Der Definitionsbereich für den Funktionsparameter a ist dabei unter Berücksichtigung des Definitionsbereichs von α implizit durch Gleichung 43 gegeben. Da der Parallelisierungswinkel $(\beta - \alpha)$ nicht an den Definitionsbereich von α und β gebunden ist, sondern Werte zwischen (jeweils exklusiv) 0° und 180° annehmen kann, ist bei der Übertragung der Extremwertsuche auf die Tangensfunktion nur die Bestimmung des relativen Maximums sinnvoll. Daneben kann im betrachteten Intervall eine Polstelle mit Vorzeichenwechsel auftreten, an welcher die Tangensfunktion über jede vorgegebene Grenze hinaus wächst bzw. unter jede vorgegebene Grenze fällt. Unter Zurkenntnisnahme dieser Tatsache kann die Ermittlung des absoluten Maximums des Parallelisierungswinkels auf die Berechnung des relativen Maximums von dessen Tangensfunktion übertragen werden. Diese Vorgehensweise wird deshalb gewählt, weil die Tangensfunktionen der Winkel α und β durch die Gleichungen 42 und 44 gegeben sind und damit in direktem Zusammenhang mit dem Funktionsparameter a (vgl. Gleichung 40) stehen. Der Bezug zur Tangensfunktion des Parallelisierungswinkels wird über ein Additionstheorem für die Tangensfunktion [55] hergestellt:

$$\tan(\beta - \alpha) = \frac{\tan(\beta) - \tan(\alpha)}{1 + \tan(\beta) \cdot \tan(\alpha)}$$

(Gleichung 77)

Im folgenden wird die Vereinfachung: $r_R = d/2$ eingeführt. Dies führt unter Verwendung der Gleichungen 42 und 44 mit Gleichung 40 zu:

$$\tan(\beta) - \tan(\alpha) = \frac{a \cdot r_R^2 - \frac{1}{4 \cdot a}}{r_R} - \frac{a \cdot r_E^2 - \frac{1}{4 \cdot a}}{r_E} = \frac{4 \cdot a^2 \cdot (r_E \cdot r_R^2 - r_E^2 \cdot r_R) - r_E + r_R}{4 \cdot a \cdot r_E \cdot r_R}$$

(Gleichung 78)

Das Produkt der beiden Tangensfunktionen von α und β wird durch analoge Substitutionen erhalten:

$$\tan(\beta) \cdot \tan(\alpha) = \frac{a \cdot r_R^2 - \frac{1}{4 \cdot a}}{r_R} \cdot \frac{a \cdot r_E^2 - \frac{1}{4 \cdot a}}{r_E} = \frac{a^2 \cdot r_E^2 \cdot r_R^2 - \frac{1}{4} \cdot r_E^2 - \frac{1}{4} \cdot r_R^2 + \frac{1}{16 \cdot a^2}}{r_E \cdot r_R}$$

(Gleichung 79)

Der Nenner in Gleichung 77 ergibt sich somit zu:

$$\begin{aligned} 1 + \tan(\beta) \cdot \tan(\alpha) &= 1 + \frac{a^2 \cdot r_E^2 \cdot r_R^2 - \frac{1}{4} \cdot r_E^2 - \frac{1}{4} \cdot r_R^2 + \frac{1}{16 \cdot a^2}}{r_E \cdot r_R} \\ &= \frac{a^2 \cdot r_E^2 \cdot r_R^2 - \frac{1}{4} \cdot r_E^2 - \frac{1}{4} \cdot r_R^2 + r_E \cdot r_R + \frac{1}{16 \cdot a^2}}{r_E \cdot r_R} \end{aligned}$$

(Gleichung 80)

Gleichung 77 ist nun gegeben als Quotient von Gleichung 78 und Gleichung 80. Die Division führt zu:

$$\tan(\beta - \alpha) = \frac{4 \cdot a^2 \cdot (r_E \cdot r_R^2 - r_E^2 \cdot r_R) - r_E + r_R}{4 \cdot a \cdot \left(a^2 \cdot r_E^2 \cdot r_R^2 - \frac{1}{4} \cdot r_E^2 - \frac{1}{4} \cdot r_R^2 + r_E \cdot r_R + \frac{1}{16 \cdot a^2} \right)}$$

(Gleichung 81)

Gleichung 81 beschreibt die gesuchte Abhängigkeit der Tangensfunktion des Parallelisierungswinkels vom Funktionsparameter a .

Durch Bildung der arctan-Funktion könnte so auch direkt die Abhängigkeit des Parallelisierungswinkels einer Parabel vom Funktionsparameter a hergestellt werden (vgl. Abbildung 22 in Kapitel 3.5). Hierbei wäre jedoch zu beachten, dass die arctan-Funktion als Umkehrung der Tangensfunktion nur für den für α und β geltenden Monotoniebereich definiert ist. Die arctan-Funktion eines beliebigen reellen Argumentes liefert daher immer nur den kleinsten Winkel, dessen Tangens gleich diesem Argument ist. Mit n als ganzer Zahl gilt dies wegen der Periodizität der Tangensfunktion: $\tan(\varphi) = \tan(\varphi + n \cdot 180^\circ)$ jedoch für unendlich viele Winkel. Mit dem Definitionsbereich des Parallelisierungswinkels (s. o.) wäre daher unter Umständen das Ergebnis der arctan-Funktion aus Gleichung 81 um die Periode 180° zu korrigieren.

Um Gleichung 81 leichter nach dem Funktionsparameter a differenzieren zu können, werden Zähler und Nenner der Gleichung auf die Form ganzzahliger Funktionen gebracht. Die Ausmultiplizierung des Nenners ergibt zunächst:

$$4 \cdot a \cdot \left(a^2 \cdot r_E^2 \cdot r_R^2 - \frac{1}{4} \cdot r_E^2 - \frac{1}{4} \cdot r_R^2 + r_E \cdot r_R + \frac{1}{16 \cdot a^2} \right)$$

$$= \frac{16 \cdot a^4 \cdot r_E^2 \cdot r_R^2 + 4 \cdot a^2 \cdot (4 \cdot r_E \cdot r_R - r_E^2 - r_R^2) + 1}{4 \cdot a}$$

(Gleichung 82)

Durch Substitution des Nenners in Gleichung 81 durch Gleichung 82 wird die Tangensfunktion des Parallelisierungswinkels dann als echt gebrochen rationale Funktion des Parameters a erhalten:

$$\tan(\beta - \alpha) = \frac{16 \cdot a^3 \cdot (r_E \cdot r_R^2 - r_E^2 \cdot r_R) + 4 \cdot a \cdot (r_R - r_E)}{16 \cdot a^4 \cdot r_E^2 \cdot r_R^2 + 4 \cdot a^2 \cdot (4 \cdot r_E \cdot r_R - r_E^2 - r_R^2) + 1}$$

(Gleichung 83)

Abbildung 80 zeigt den Graphen der Funktion nach Gleichung 83 für die technischen Vorgaben $r_E = 1,65 \text{ mm}$ und $r_R = 4 \text{ mm}$.

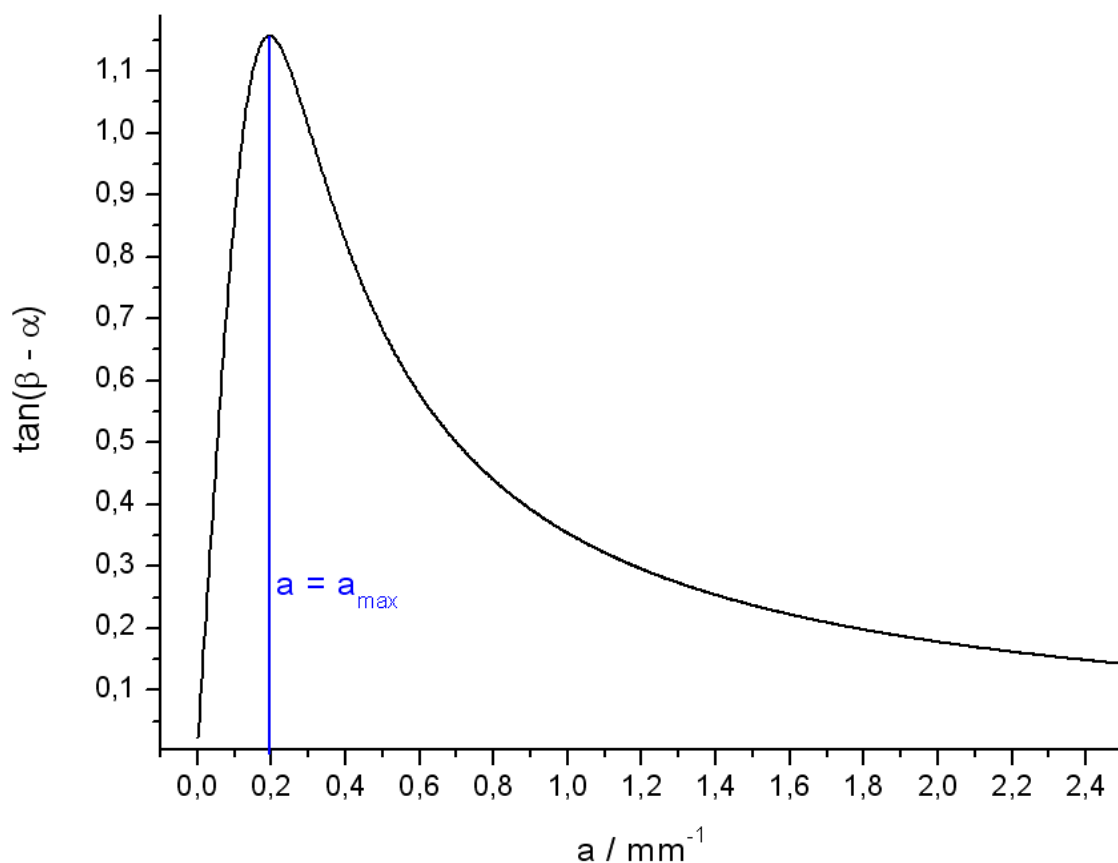


Abb. 80: Auftragung der Tangensfunktion des Parallelisierungswinkels einer Parabel gegen den Funktionsparameter a . Für den Fall der gewählten technischen Vorgaben tritt keine Polstelle auf.

Gebrochen rationale Funktionen wie Gleichung 83 können unter Anwendung der Quotientenregel [55] der Differentialrechnung abgeleitet werden. Die Quotientenregel wird üblicherweise wie folgt formuliert:

$$f(x) = \frac{u(x)}{v(x)} ; v(x) \neq 0$$

$$\rightarrow f'(x) = \frac{u'(x) \cdot v(x) - u(x) \cdot v'(x)}{(v(x))^2}$$

(Gleichung 84)

Mit

$$\frac{\partial(16 \cdot a^3 \cdot (r_E \cdot r_R^2 - r_E^2 \cdot r_R) + 4 \cdot a \cdot (r_R - r_E))}{\partial a} = 48 \cdot a^2 \cdot (r_E \cdot r_R^2 - r_E^2 \cdot r_R) + 4 \cdot (r_R - r_E)$$

(Gleichung 85)

und

$$\frac{\partial(16 \cdot a^4 \cdot r_E^2 \cdot r_R^2 + 4 \cdot a^2 \cdot (4 \cdot r_E \cdot r_R - r_E^2 - r_R^2) + 1)}{\partial a} = 64 \cdot a^3 \cdot r_E^2 \cdot r_R^2 + 8 \cdot a \cdot (4 \cdot r_E \cdot r_R - r_E^2 - r_R^2)$$

(Gleichung 86)

ergibt sich durch Einsetzen der Gleichungen 85 und 86 in Gleichung 84 die nach a differenzierte Tangensfunktion des Parallelisierungswinkels (vgl. Gleichung 83) nach einigen Umformungen zu:

$$\frac{\partial(\tan(\beta - \alpha))}{\partial a} = \frac{4 \cdot (r_R - r_E) \cdot Z}{[16 \cdot a^4 \cdot r_E^2 \cdot r_R^2 + 4 \cdot a^2 \cdot (4 \cdot r_E \cdot r_R - r_E^2 - r_R^2) + 1]^2} ; \text{ mit}$$

$$Z = a^6 \cdot (-64 \cdot r_E^3 \cdot r_R^3) + a^4 \cdot [-16 \cdot r_E \cdot r_R \cdot ((r_R - r_E)^2 + r_E \cdot r_R)] + a^2 \cdot [4 \cdot ((r_R - r_E)^2 + r_E \cdot r_R)] + 1$$

(Gleichung 87)

Für die technischen Vorgaben $r_E = 1,65$ mm und $r_R = 4$ mm weist Gleichung 87 den in Abbildung 81 dargestellten Kurvenverlauf auf.

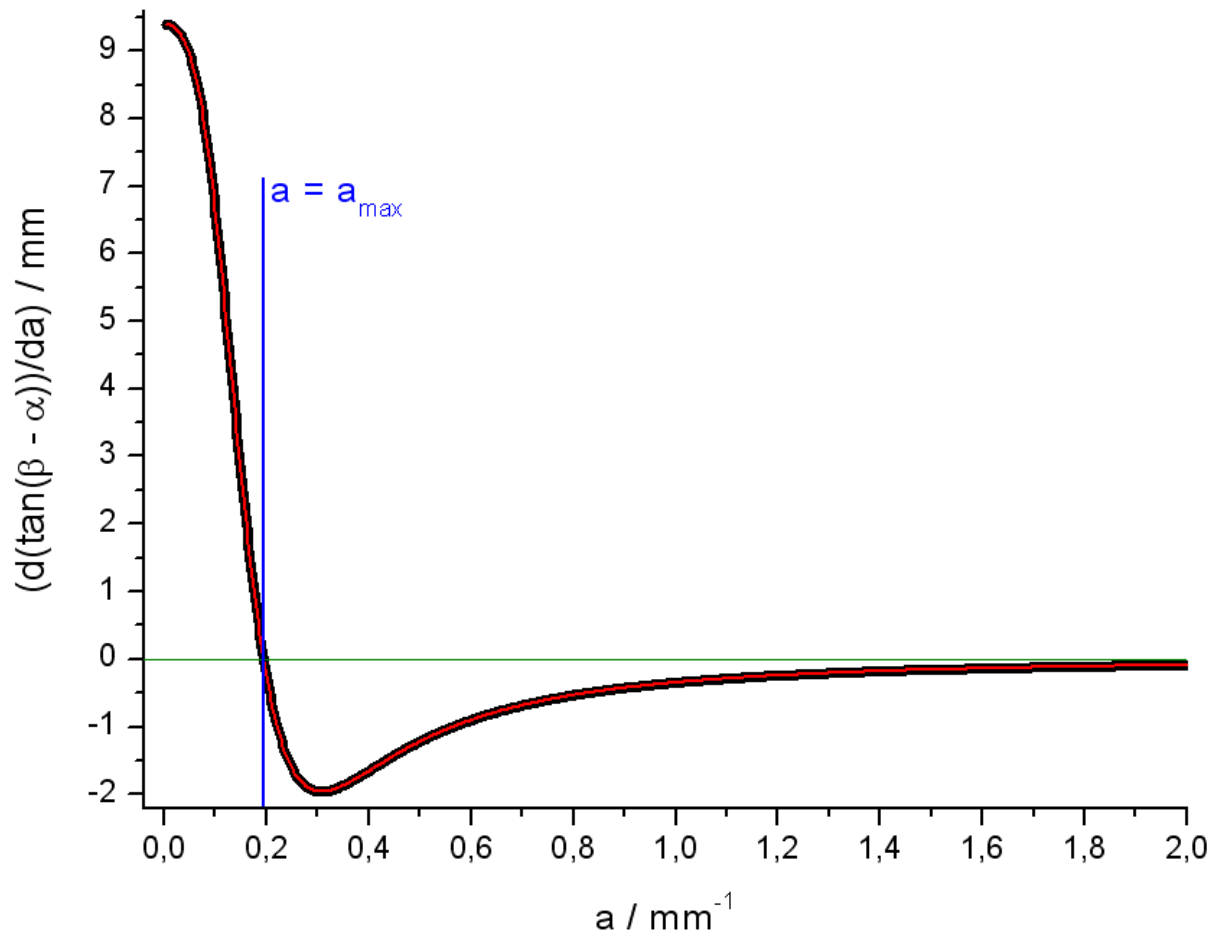


Abb. 81: Die rote Kurve zeigt die nach Gleichung 87 berechnete Ableitung der Tangensfunktion des Parallelisierungswinkels, während die fett gezeichnete schwarze Kurve zur Kontrolle die numerische Ableitung der Auftragung aus Abbildung 78 darstellt. Die Kurven sind im Rahmen der Rechengenauigkeit identisch. Da die maximal auftretende Potenz von a im Nenner der Gleichung 87 größer ist als diejenige im Zähler der Gleichung, konvergiert die gesamte Funktion mit wachsendem a gegen null.

Um die notwendige Bedingung für ein Extremum in der Tangensfunktion des Parallelisierungswinkels zu erfüllen, muss die Gleichung 87 den Wert null ergeben. Da ein Bruch genau dann gleich null ist, wenn dessen Zähler gleich null ist (unter der Voraussetzung, dass der Nenner ungleich null ist), und per Definition gilt, dass r_R größer als r_E ist (vgl. Gleichung 41 in Kapitel 3.5), kann dies nur dann eintreten, wenn die Substitutionsvariable Z gleich null ist.

Aufgrund der negativen Vorzeichen der Koeffizienten der Funktionsterme mit den hohen Exponenten von a in der Definitionsgleichung der Substitutionsvariablen Z ist zu erwarten, dass Z mit steigendem a sehr schnell gegen $-\infty$ geht. Abbildung 82 zeigt den Graphen von Z gegen a im Bereich der Nullstelle.

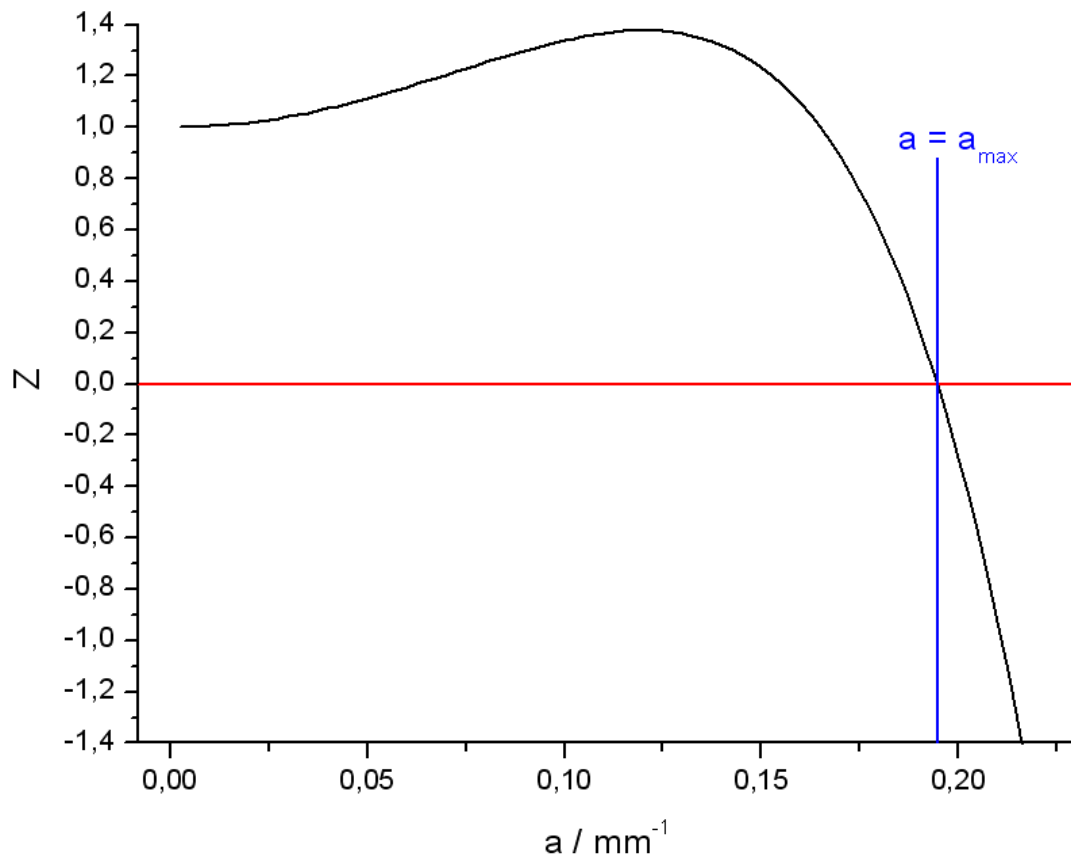


Abb. 82: Auftragung der Substitutionsvariablen Z gegen den Parameter a für die technischen Vorgaben $r_E = 1,65$ mm und $r_R = 4$ mm. Der Bereich auf der X-Achse umfasst nur etwa 1/10 des Bereiches aus Abbildung 81, da die Kurve rechts von der Nullstelle extrem steil abfällt. Die Darstellung eines größeren Bereiches auf der X-Achse würde bei linearer Skalierung der Achsen das Erkennen der geschwungenen Kurvenform im Bereich kleiner Werte von a stark behindern.

Da die Nullstelle der Funktion $Z(a)$ nicht ohne weiteres direkt bestimmt werden kann, und weder durch die grafische Lösung, noch durch die Bestimmung mit Hilfe des iterativen Bisektionsverfahrens [83], die Nullstelle als Funktion der technischen Vorgaben erhalten werden kann, kann eine Vermutung bezüglich der Lage der Nullstelle nur durch Einsetzen in die Funktion $Z(a)$ verifiziert, bzw. falsifiziert werden.

Die in Kapitel 3.5 unter Gleichung 45 formulierte Vermutung für die Maximalbedingung des Parallelisierungswinkels muss also beim Einsetzen in die Formel für Z den Wert null ergeben; ansonsten wäre die Annahme falsifiziert.

Mit der Vereinfachung $d = 2 \cdot r_R$ (s. o.) folgt aus Gleichung 45:

$$a_{\max}^2 = \frac{1}{4 \cdot r_E \cdot r_R}$$

$$\Rightarrow a_{\max}^4 = \frac{1}{16 \cdot r_E^2 \cdot r_R^2}$$

$$\Rightarrow a_{\max}^6 = a_{\max}^4 \cdot a_{\max}^2 = \frac{1}{64 \cdot r_E^3 \cdot r_R^3}$$

(Gleichung 88)

Das Einsetzen der Terme aus Gleichung 88 in die Definitionsgleichung von Z (vgl. Gleichung 87) liefert:

$$\begin{aligned} Z(a_{\max}) &= -\frac{64 \cdot r_E^3 \cdot r_R^3}{64 \cdot r_E^3 \cdot r_R^3} - \frac{16 \cdot r_E \cdot r_R \cdot ((r_R - r_E)^2 + r_E \cdot r_R)}{16 \cdot r_E^2 \cdot r_R^2} \\ &\quad + \frac{4 \cdot ((r_R - r_E)^2 + r_E \cdot r_R)}{4 \cdot r_E \cdot r_R} + 1 \\ &= -1 - \frac{(r_R - r_E)^2 + r_E \cdot r_R}{r_E \cdot r_R} + \frac{(r_R - r_E)^2 + r_E \cdot r_R}{r_E \cdot r_R} + 1 = 0 \end{aligned}$$

(Gleichung 89)

Mit diesem Ergebnis für Gleichung 89 ist somit die Gleichung 45 in Kapitel 3.5 verifiziert.

Da die Graphen der Funktionen nach den Gleichungen 83 und 87 bekannt sind (vgl. Abbildungen 80 und 81), wird hier auf die mathematische Verifizierung der hinreichenden Bedingung ($\partial^2(\tan(\beta - \alpha))/\partial a^2 < 0$) für das Vorliegen eines Maximums der Funktion $\tan(\beta - \alpha)$ an der Stelle $a = a_{\max}$ verzichtet. Die Steigung des Graphen der Ableitungsfunktion in Abbildung 81 ist an dessen Nullstelle eindeutig negativ, und in der Auftragung in Abbildung 80 ist klar ein Maximum an derselben Stelle zu erkennen.

7.2 Graphische Analyse der Zeichnung D aus Abbildung 24

Abbildung 83 zeigt die in Kapitel 3.5, Abbildung 24 dargestellte Zeichnung D einer Parabel mit Emitter in starker Vergrößerung. Zusätzlich sind in rot die mutmaßlichen Strahlengänge zweier vom Emitter ausgehender Strahlen eingezeichnet.

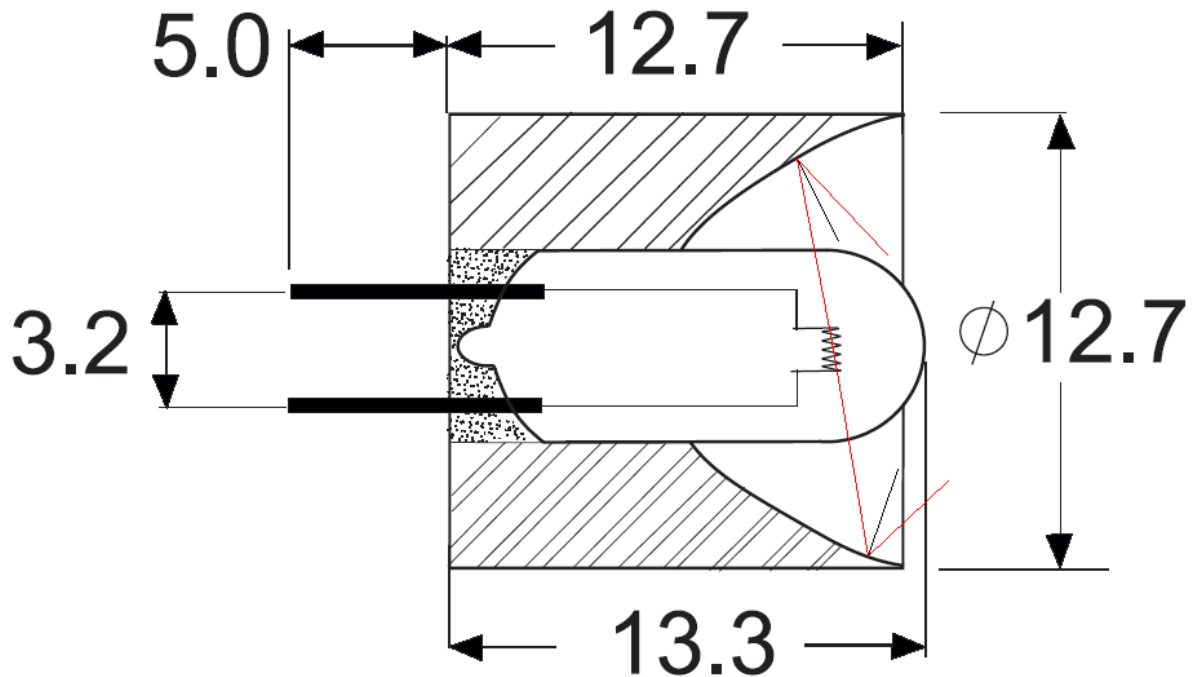


Abb. 83: Grafische Konstruktion der Strahlengänge zweier vom Mittelpunkt des Glühdrates ausgehender Strahlen (rot). Die schwarzen Geraden an den Auftreffpunkten der Strahlen auf den Parabolspiegel stellen die Lotrechten auf die Parabel dar. Die reflektierten Strahlen wurden unter der Reflexionsbedingung: Einfallswinkel = Ausfallswinkel von Hand konstruiert. Die Lichtbrechung der Strahlen am Glasgehäuse der Glühlampe wurde dabei vernachlässigt.

Obwohl sowohl die Strahlen als auch die Lotrechten in Abbildung 83 per Augenmaß mit einem Grafikprogramm eingefügt wurden und daher einer relativ hohen Ungenauigkeit unterliegen, wird deutlich, dass das abgebildete System keine Parallelstrahlen generiert. Selbst bei einem Fehler der Lotrechten und der reflektierten Strahlen von jeweils mehreren Winkelgraden wäre nicht mit der Reflexion eines Strahles auf die Richtung der Waagerechten zu rechnen. Die Gründe hierfür können sein, dass a) es sich nicht um eine ideale Parabel handelt und/oder b) der Emitter sich nicht im Brennpunkt der Parabel befindet.

7.3 Demonstration der FFT-Filterung

Zur Demonstration der Funktionsweise der FFT-Filterung wird zunächst ein Datensatz der Länge $N = 1000$ konstruiert, der mit einer Messfrequenz von $F_M = 1000$ Hz aufgezeichnet sein soll. Der Datensatz bestehe aus der Summe von fünf Sinusfunktionen, welche die Frequenzen 1, 3, 8, 20 und 50 Hz aufweisen und die Amplituden 1, 4, 0,2, 1,5 und 0,5 besitzen. Abbildung 84 zeigt die Graphen der fünf Sinusfunktionen.

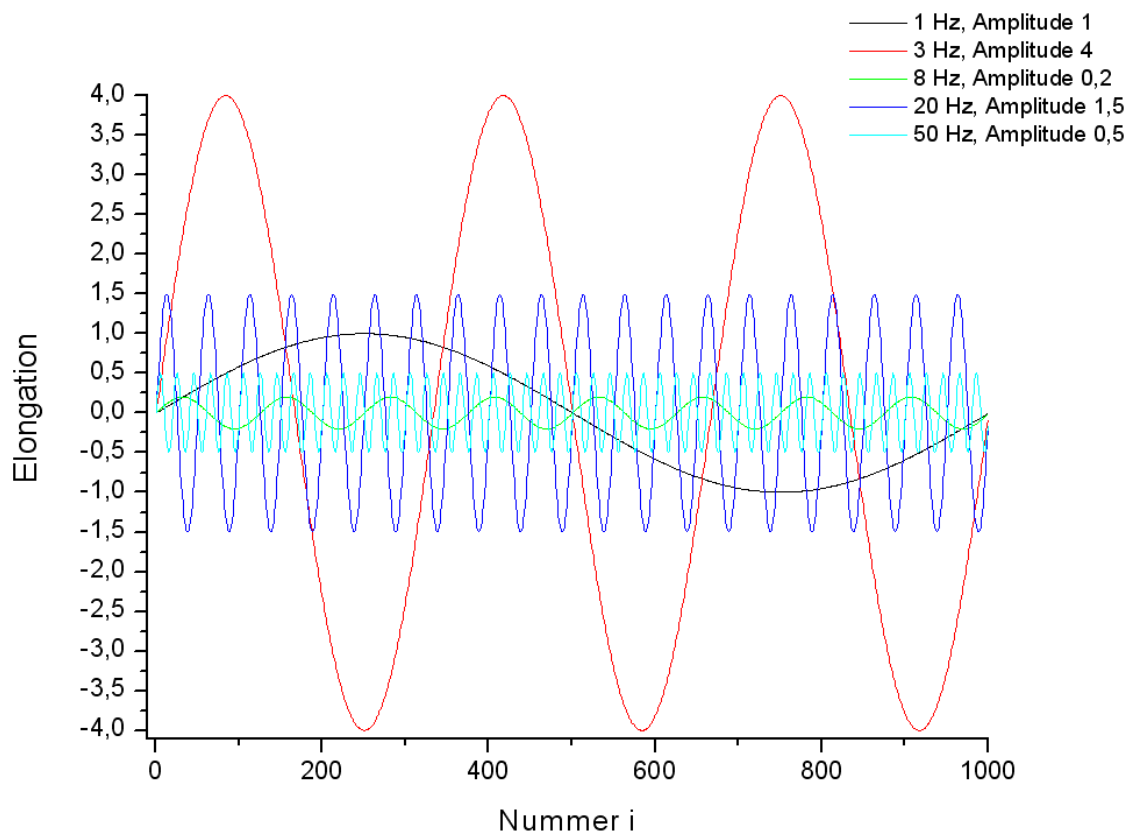


Abb. 84: Sinusfunktionen unterschiedlicher Frequenz und Amplitude über die Dauer von einer Sekunde.

Der Datensatz, als Summe der Teilfunktionen, ist in Abbildung 85 dargestellt.

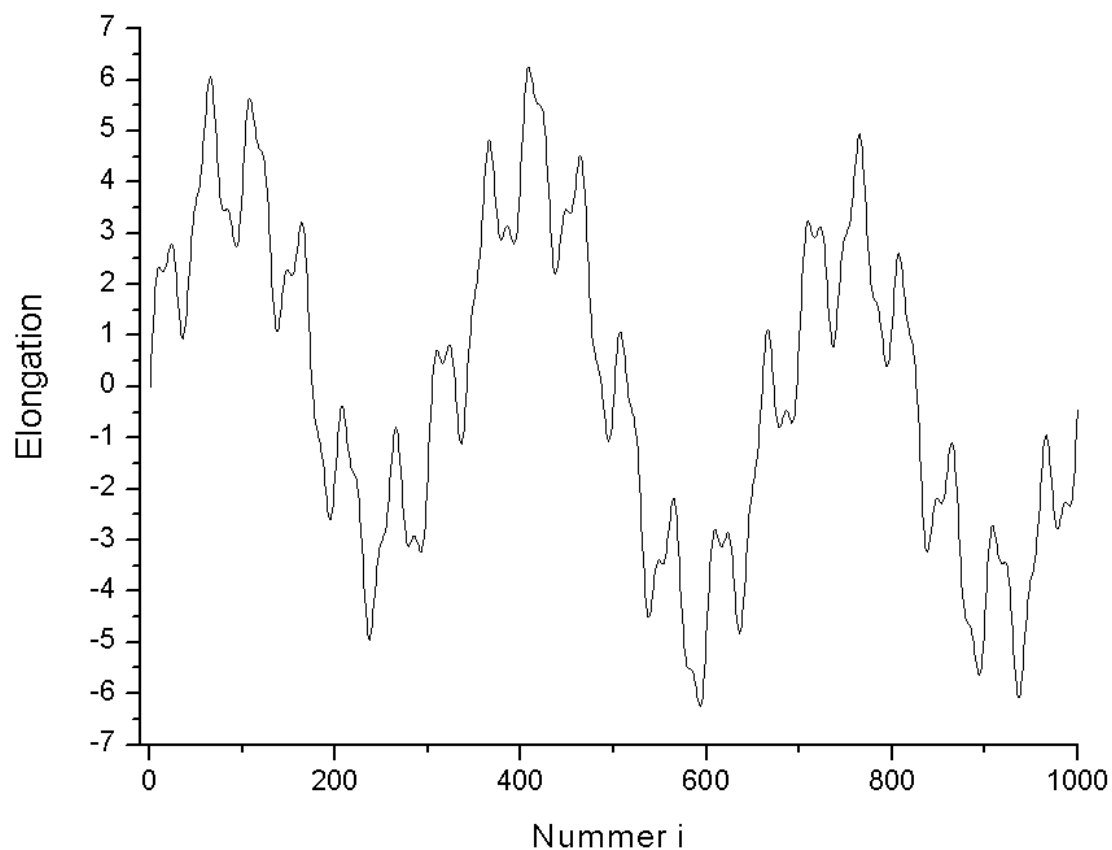


Abb. 85: Summe der fünf in Abbildung 84 dargestellten Sinusfunktionen.

Eine Ausfilterung aller Frequenzen oberhalb von 10 Hz kommt der Konstruktion eines Datensatzes gleich, der nur aus den Sinusfunktionen mit den Frequenzen 1, 3 und 8 Hz besteht (Die höherfrequenten Funktionen mit 20 und 50 Hz finden dann keine Berücksichtigung mehr.). Der so konstruierte Datensatz ist in Abbildung 86 dargestellt.

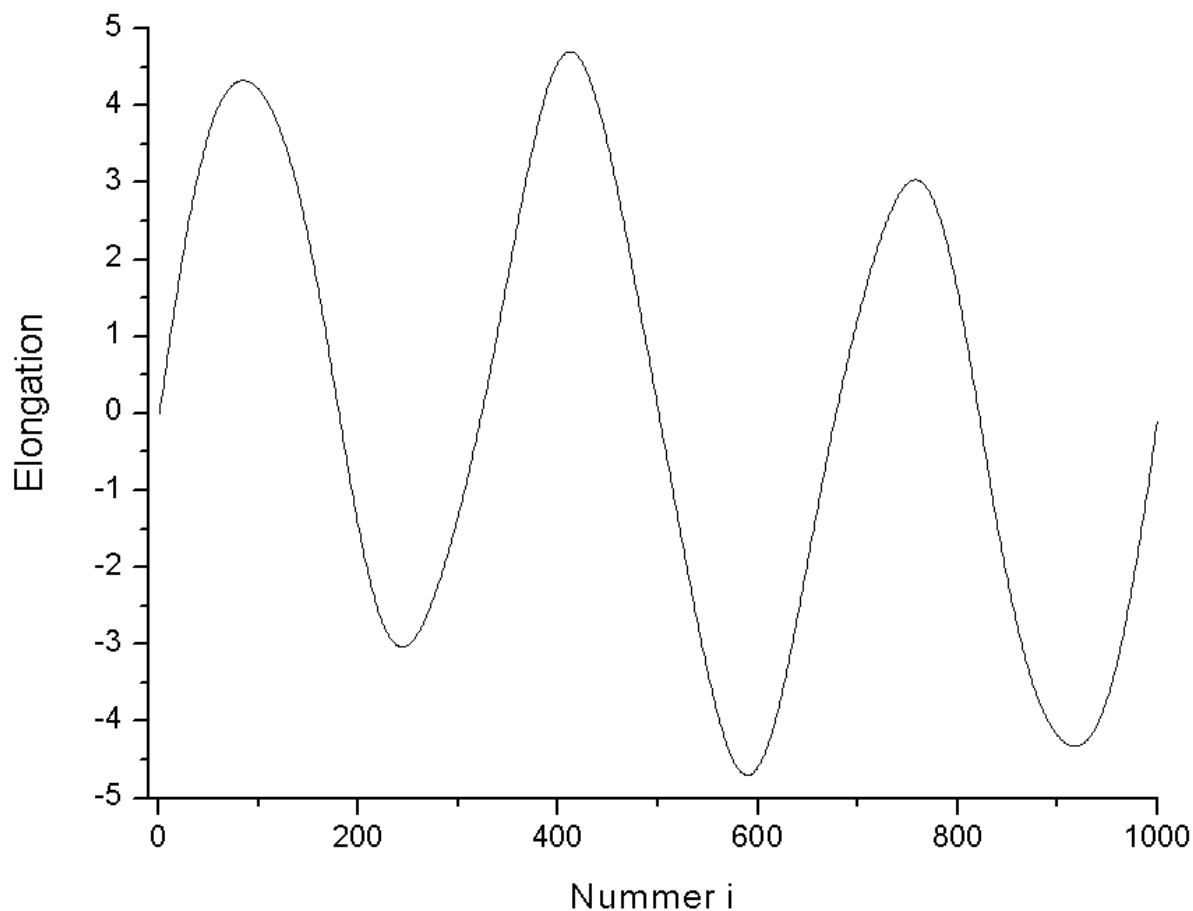


Abb. 86: Summe der in Abbildung 84 dargestellten Sinusfunktionen mit den Frequenzen 1, 3 und 8 Hz.

Der in Abbildung 86 dargestellte Signalverlauf sollte sich auch dann ergeben, wenn der ursprüngliche Datensatz aus Abbildung 85 tatsächlich im Frequenzraum entsprechend gefiltert wird. Dazu muss zunächst die (komplexe) DFT des Datensatzes berechnet werden. Am anschaulichsten kann der Prozess der Filterung dann anhand des durch die DFT zugänglichen Fourier- bzw. Amplitudenspektrums [57] demonstriert werden. Die Amplitude eines Wertes der DFT ist dabei definiert als die Wurzel aus der Summe der Quadrate von Real- und Imaginärteil. Abbildung 87 zeigt einen Teil des Amplitudenspektrums des Datensatzes aus Abbildung 85, sowie einen Teil der Werte des Butterworth-Tiefpasses mit einer Filterfrequenz von 10 Hz und der Ordnung 6.

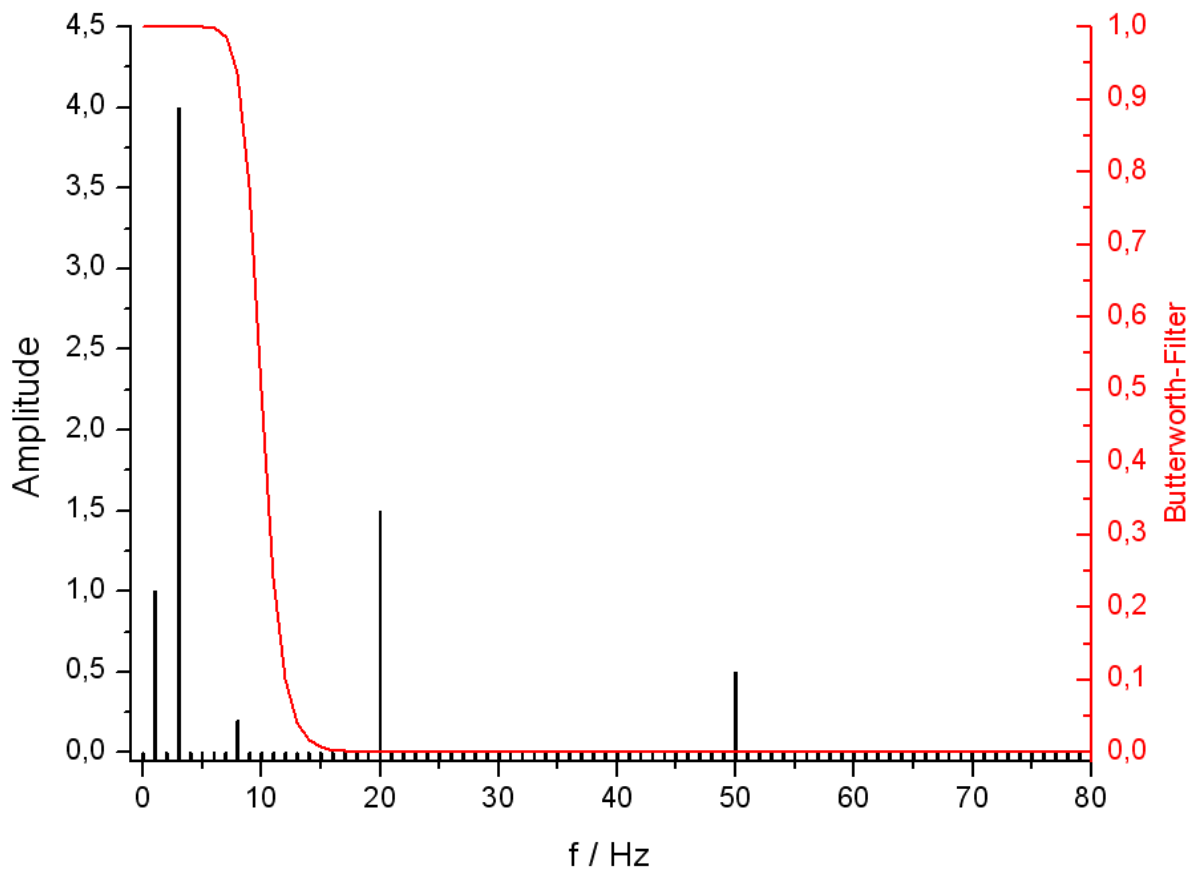


Abb. 87: Amplitudenspektrum des Datensatzes aus Abbildung 85 und die Kurve des Butterworth-Tiefpasses (rot).

Das Amplitudenspektrum in Abbildung 87 gibt die Amplituden der Teilfunktionen aus Abbildung 84 bei den entsprechenden Frequenzen exakt wieder. Durch die Multiplikation der DFT mit dem Tiefpass-Filter (rot) werden die Amplituden bei den Frequenzen 20 Hz und 50 Hz auf Werte sehr nahe an null gesetzt, während die Amplituden bei den Frequenzen 1, 3 und 8 Hz annähernd ihre Werte beibehalten. Grafisch gesehen werden so alle Amplituden oberhalb der Filterkurve abgeschnitten. Die anschließende Retransformation der DFT in die Zeitdomäne liefert dann den gefilterten Datensatz. In Abbildung 88 ist der bereits in Abbildung 86 gezeigte Datensatz schwarz abgebildet, während der im Frequenzraum gefilterte Datensatz rot eingezeichnet ist.

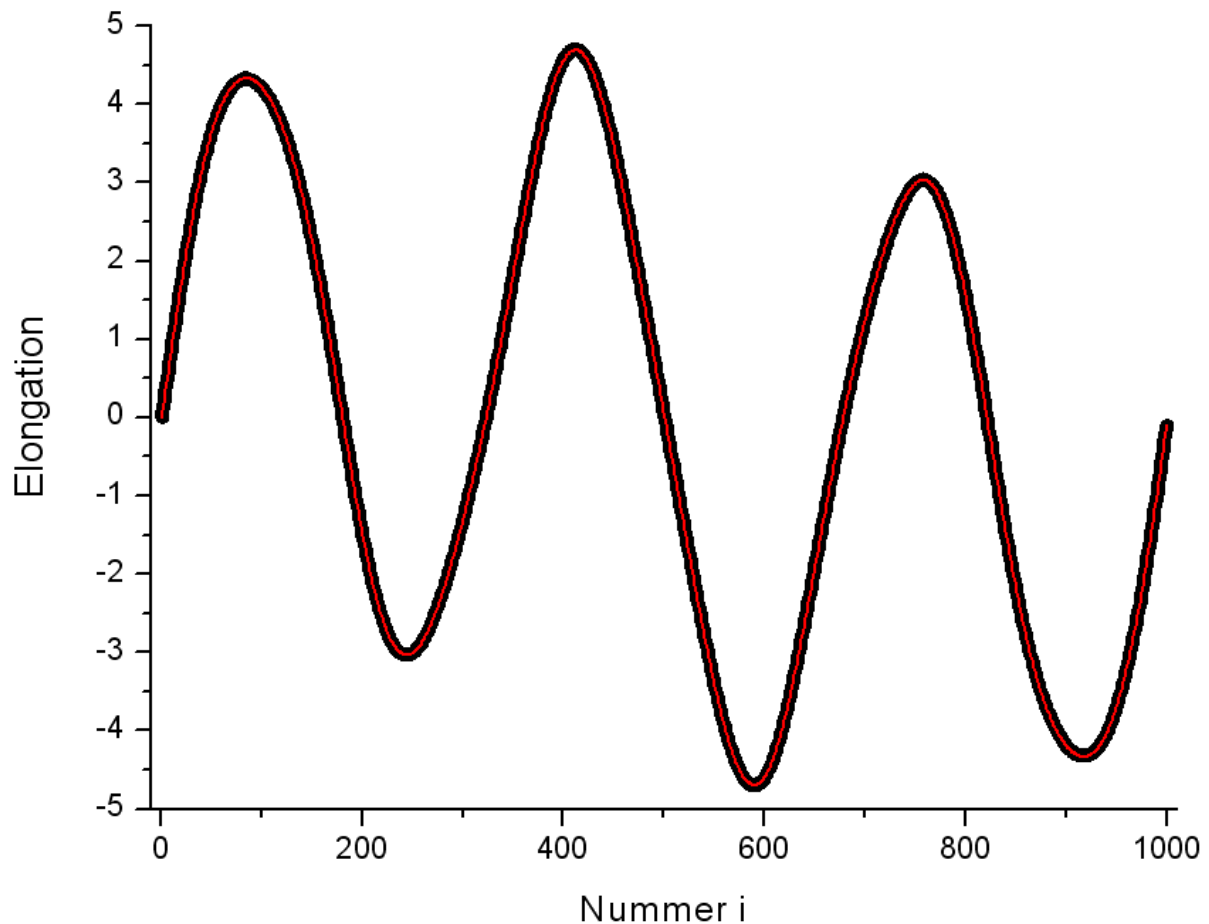


Abb. 88: Vergleich des konstruierten Datensatzes (schwarz) mit dem tatsächlich gefilterten Datensatz (rot). Für die Sichtbarkeit beider Datensätze wurde der konstruierte Datensatz fett gezeichnet.

Wie aus Abbildung 88 ersichtlich wird, stimmen die beiden Datensätze (bis mindestens auf die zweite Nachkommastelle) überein, was die Funktionalität des Filterungsalgorithmus belegt.

In Abbildung 89 ist der ursprüngliche Datensatz zusammen mit dem gefilterten Datensatz aufgetragen, um die Wirkung der Filterung für den betrachteten Fall zu visualisieren.

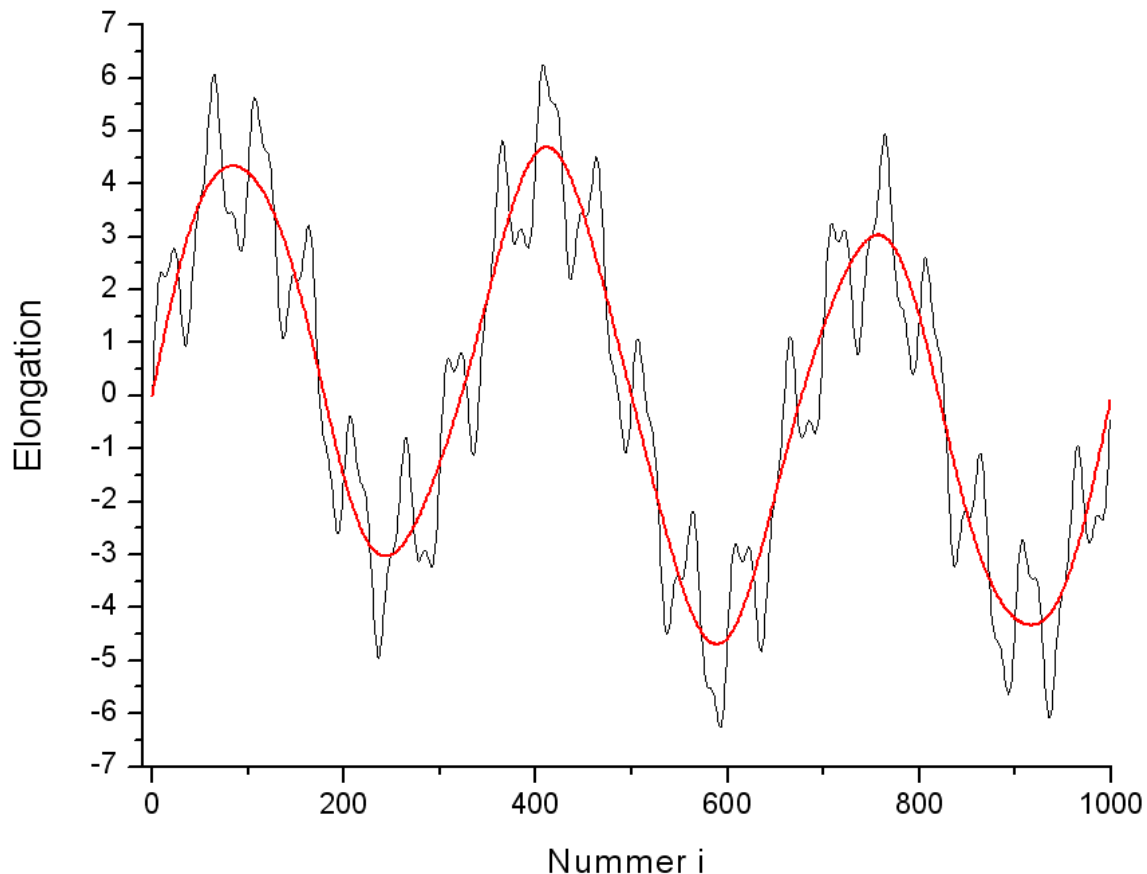


Abb. 89: Vergleich des ungefilterten Datensatzes (schwarz) mit dem im Frequenzraum gefilterten Datensatz (rot).

Der Abbildung 89 ist zu entnehmen, dass durch die im Frequenzraum durchgeführte Filterung eines Datensatzes dieser stark geglättet werden kann. Allgemein lassen sich Datenmanipulationen im Frequenzraum häufig einfacher durchführen, als dies in der normalen Darstellung möglich ist.

7.4 Literaturverzeichnis

- [1] Bundesministerium der Justiz, „BGBl, 2002, Nr. 66: Zweiundzwanzigste Verordnung zur Durchführung des Bundes-Immissionsschutzgesetzes“, Bundesanzeiger Verlagsgesellschaft mbH, Bonn, 2002
- [2] Bundesministerium der Justiz, „BGBl, 2006, Nr. 11: Einundvierzigste Verordnung zur Änderung straßenverkehrsrechtlicher Vorschriften“, Bundesanzeiger Verlagsgesellschaft mbH, Bonn, 2006

- [3] Fa. HORIBA Europe GmbH, Oberursel: Produktbeschreibung des Kohlenmonoxid-Analysators APMA-360 –
Fassung von 2003 –
URL: <http://www.horiba.de/produkteshow.asp?id=11> –
Zugriff am 23.10.2006
- [4] Bârsan, N.; Stetter, J. R.; Findlay, M., Jr; Göpel, W.: „High-Performance Gas Sensing of CO: Comparative Tests for Semiconducting (SnO₂-based) and for Amperometric Gas Sensors“, *Anal. Chem.* **1999**, 71, 2512-2517
- [5] Horn, D.; Pimentel, G. C.: „2.5-km Low-Temperature Multiple-Reflection Cell“, *Appl. Opt.* **1971**, 10, 1892-1898
- [6] Lipman, M. M.: „The night the cat died“, *Consum. Rep. Health* **2003**, 15, 11
- [7] Ryter, S. W.; Otterbein, L. E.: „Carbon monoxide in biology and medicine“, *BioEssays* **2004**, 26, 270-280
- [8] Fa. UMAD Umweltmesstechnik- und Datenverarbeitungsgesellschaft mbH, Berlin: Wirkungen von Luftschadstoffen –
Fassung vom (unbekannt) –
URL: <http://www.umad.de/infos/wirkungen/kohlenmonoxid.htm> –
Zugriff am 17.10.2006
- [9] Killick, E. M.: „Carbon monoxide anoxemia“, *Physiol. Rev.* **1940**, 20, 313-344
- [10] Fa. Ahlborn Mess- und Regelungstechnik GmbH, Holzkirchen: Gaskonzentrationen in Luft –
Fassung vom Januar 2005 –
URL: <http://www.ahlborn.com/sites/de/getfile.php?618.pdf> –
Zugriff am 17.10.2006
- [11] Landesamt für Umwelt, Messungen und Naturschutz - Baden-Württemberg: Verkehrsemissionen –
Fassung vom 01.07.1998 –
URL: <http://www2.lfu.baden-wuerttemberg.de/lfu/abt3/luft/verkehr/verkehrsemissionen/kraftfahrzeugverkehr/content.html> –
Zugriff am 24.10.2006
- [12] Spörri, R.: „Rauchgasintoxikation: Diagnose und Therapie“, *Rettungsdienst* **2004**, 4, 358-363
- [13] Zentralverband Deutscher Schornsteinfeger e. V.: „Wahre Lügen“, *Schornsteinfeger*, **2003**, 1

- [14] Glickman, L. T.: „Environmental Toxicologic Pathology – The canary went home”, *Toxicol. Pathol.*, **1997**, 25, 662-663
- [15] Mortimer, C. E., „Chemie“, Thieme, Stuttgart u.a., 1987
- [16] Bombick, D. W.; Bombick, B. R.; Ayres, P. H.; Putnam, K.; Avalos, J.; Borgerding M. F.; Doolittle, D. J.: „Evaluation of the Genotoxic and Cytotoxic Potential of Mainstream Whole Smoke and Smoke Condensate from a Cigarette Containing a Novel Carbon Filter”, *Fundam. Appl. Toxicol.*, **1997**, 39, 11-17
- [17] Amt für amtliche Veröffentlichungen der Europäischen Gemeinschaften, „Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften L 313: Richtlinie 2000/69/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. November 2000 über Grenzwerte für Benzol und Kohlenmonoxid in der Luft“, Verlag der Europäischen Union, Luxemburg, 2000
- [18] Wallis, D.; Kuzmicki, P., „Entwicklung eines IR-Gassensors“, Dortmund, Fachhochschule, Diplomarbeit, 2001
- [19] Fa. Gilway Technical Lamp, USA, Peabody, MA.: Katalog Nr. 169: T-1 Lamps, Visible-Infrared
- [20] Fa. Valvo Unternehmensbereich Bauelemente der Philips GmbH, „Pyroelektrische Infrarot-Detektoren“, Hüthig, Heidelberg, 1987
- [21] Wu, J. C.-S.; Sheen, J.-D.; Chen, S.-Y.; Fan, Y.-C.: „Feasibility of CO₂ Fixation via Artificial Rock Weathering”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **2001**, 40, 3902-3905
- [22] Schoen, D.: „Learning from Polar Ice Core Research”, *Environ. Sci. Technol. A-Pages*, **1999**, 33, 160 A-163 A
- [23] Cammann, K., „Instrumentelle Analytische Chemie“, Spektrum, Heidelberg [u. a.], 2001
- [24] Gauglitz, G., „Praktische Spektroskopie“, Atempo, Tübingen, 1983
- [25] Schmale, U., „Entwicklung eines langzeitstabilen Niedrigenergie-IR-Gassensors“, Aachen, Technische Universität, Inauguraldissertation, 2000
- [26] Dr. R. Freund, Hanau-Steinheim: Elektromagnetische Strahlung – Fassung vom 21.07.2006 –
URL: http://www.drfreund.net/astronomy_spektrum.htm –
Zugriff am 21.07.2006
- [27] Grehn, J., „Metzler Physik“, 2. Aufl., Schroedel, Stuttgart, 1991
- [28] Günzler, H.; Heise, H. M., „IR-Spektroskopie“, VCH, Weinheim, 1996

- [29] Stroppe, H., „Physik für Studenten der Natur- und Ingenieurwissenschaften“, 13. Aufl., Hanser, München u. a., 2005
- [30] Atkins, P. W., „Physical Chemistry“, 5th Edition, Oxford University Press, Oxford [u. a.], 1994
- [31] Coulson, C. A.: “Some theoretical considerations about vibrational band intensities”, *Spectr. A*, **1959**, 14, 161-180
- [32] Yuhnevich, G. V.: “On Application of the Morse Potential for Evaluating Anharmonic Vibrations of Polyatomic Molecules with XH_n -Complexes”, *Doklady Physics*, **2000**, 45, 201-204
- [33] Günzler, H.; Gremlich, H.-U., „IR Spectroscopy“, VCH, Weinheim, 2002
- [34] Wedler, G., „Lehrbuch der Physikalischen Chemie“, 5. Aufl., VCH, Weinheim, 2004
- [35] Atkins, P. W., „Quanten“, VCH, Weinheim u. a., 1993
- [36] Hollas, J. M., „Moderne Methoden in der Spektroskopie“, Vieweg, Braunschweig u. a., 1995
- [37] Moore, W. J., „Grundlagen der Physikalischen Chemie“, de Gruyter, Berlin u. a., 1990
- [38] Banwell, C. N.; McCash, E. M., „Molekülspektroskopie“, Oldenbourg, München u. a., 1999
- [39] Naumer, H.; Heller, W., „Untersuchungsmethoden in der Chemie“, 3. Aufl., Thieme, Stuttgart u. a., 1997
- [40] C. Merten; J. Willmann, Universität Bremen, Vorlesungsskript: Physikalische Grundlagen der Spektroskopie – Fassung vom Mai 2005 – URL: <http://www.merten-web.de/scripts/spektroskopie1.pdf> – Zugriff am 17.08.2006
- [41] Otto, M., „Analytische Chemie“, 2. Aufl., VCH, Weinheim u. a., 2000
- [42] Lu, H.; Gratzl, M.: “Optical Detection in Microscopic Domains. 1. Monitoring Chemical Manipulations with Absorption Microspectrometry”, *Anal. Chem.*, **2000**, 72, 1569-1575
- [43] Doerffel, K.; Geyer, R.; Müller, H., „Analytikum“, 9. Aufl., Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig u. a., 1994

- [44] Dr.-Ing. M. Juretzko, Universität Karlsruhe, Geodätisches Institut: Leistungsfähigkeit des reflektorlosen Distanzmessmoduls R300 der Tachymeterserie TPS1200 von Leica –
Fassung vom 08.08.2006 –
URL: http://www.gik.uni-karlsruhe.de/fileadmin/pool/www/files/publi2006/Juretzko_2006.pdf –
Zugriff am 25.10.2006
- [45] Fa. Conrad Electronic SE, Hirschau: Datenblatt zum NTC-Temperaturfühler FS-200N –
Fassung vom (unbekannt) –
URL: http://www2.produktinfo.conrad.com/datenblaetter/175000-199999/198453-da-01-en-NTC-TEMPERATURFUEHLER_FS-200N.pdf –
Zugriff am 23.10.2006
- [46] Im Juli 2001 von B. Krüsemann zur Verfügung gestellte Messdaten, die am Institut für Chemo- und Biosensorik e.V. Münster aufgenommen worden waren
- [47] Hjelle, Ø.; Daehlen, M., „Triangulations and Applications“, Springer, Berlin u. a., 2006
- [48] Darvas, G.: “Perspective as a Symmetry Transformation”, *Nexus Network Journal*, **2003**, 5, 9-21
- [49] Zeppenfeld, K., „Lehrbuch der Grafikprogrammierung“, Spektrum, Heidelberg u. a., 2004
- [50] H. Schwarz; M. Pilop, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Informatik: Seminar 3-D Grafik – Mathematische Grundlagen, Räume, Koordinatensysteme, Projektionen –
Fassung vom 20.11.2003 –
URL: <http://www2.informatik.hu-berlin.de/~pilop/3D-basics.pdf> –
Zugriff am 25.10.2006
- [51] Qureshi, F. Z.; Terzopoulos, D.: “Surveillance camera scheduling: a virtual vision approach”, *Multimedia Systems*, **2006**, 12, 269-283
- [52] Williams, J. J.; Rutledge, J. C.; Katsaggelos, A. K.; Garstecki, D. C.: “Frame Rate and Viseme Analysis for Multimedia Applications to assist Speechreading”, *Journal of VLSI Signal Processing*, **1998**, 20, 7-23
- [53] Knoche, I.; Knoche, N.; Krallmann, M. u. B.; Kneifel, D., „DUDEN-Abiturhilfen – Lineare Algebra und analytische Geometrie I“, Duden, Mannheim u. a., 1991

- [54] Knoche, I.; Knoche, N.; Krallmann, M. u. B.; Kneifel, D., „DUDEN-Abiturhilfen – Lineare Algebra und analytische Geometrie II“, Duden, Mannheim u. a., 1992
- [55] Eggs, H.; Neugart, G.; Raith, F., „Mathematische Formelsammlung – Begriffe und Sätze“, 2. Aufl., Diesterweg, Frankfurt a. M., 1993
- [56] Prof. Dr. C. Schiedermeier, Georg-Simon-Ohm-Fachhochschule Nürnberg, Fachbereich Informatik: Visualisierung – Fassung vom 30.09.2002 – URL: http://www.informatik.fh-nuernberg.de/Professors/Schiedermeier/SS_2002/Visualisierung/Vorlesung/Visualisierung.pdf – Zugriff am 26.10.2006
- [57] Stockhausen, M., „Mathematik für Chemiker“, 3. Aufl., Steinkopff, Darmstadt, 1995
- [58] Bright, R. J.; Jackson, D. A.; Kuhn, H.: “The Resolving Power and Intensity Relationships of the Fabry Perot Interferometer with Silvered Reflecting Surfaces”, *Proc. Phys. Soc. A*, **1949**, 62, 225-236
- [59] Stockhausen, M., „Mathematische Behandlung naturwissenschaftlicher Probleme“, 2. Aufl., Steinkopff, Darmstadt, 1987
- [60] Durch B. Krüsemann und H. Geuking am Institut für Chemo- und Biosensorik e. V. Münster im April 2001 durchgeführte Messungen mit einer digitalen Mikrometerschraube an einer Charge von Miniaturglühlampen der Firma SLI (jetzt CML Innovative Technologies)
- [61] Friebe, P., „Adsorption und Reduktion von Kohlendioxid an Übergangsmetallen“, Berlin, Freie Universität, Inauguraldissertation, 1998
- [62] Knoche, N.; Krallmann, M. u. B.; Kneifel, D., „DUDEN-Abiturhilfen – Analysis I“, Duden, Mannheim [u. a.], 1988
- [63] Zachmann, H. G., „Mathematik für Chemiker“, 5. Aufl., VCH, Weinheim [u. a.], 1994
- [64] Fa. Gilway Technical Lamp, USA, Peabody, MA., Katalog Nr. 169: Reflector Lamp Assemblies – Fassung vom (unbekannt) – URL: <http://www.ortodoxism.ro/datasheets/gilway/1150-3.pdf> – Zugriff am 15.08.2006

- [65] Fa. Electro Optical Components, Inc., USA, Santa Rosa, CA: LIE-316-# –
Fassung vom 13.12.2005 –
URL: <http://www.eoc-inc.com/infratec/pdf/lie316.pdf> –
Zugriff am 26.10.2006
- [66] Ghulghule, J. R.; Katpatal, A. G.: “Pyroelectric behaviour of pure and lanthanum-doped lead germanate single crystal”, *J. Phys. Chem. Solids*, **1999**, 60, 425-428
- [67] Fa. Laser Components GmbH, Olching, Datasheets: IR Filters and Windows –
Fassung vom 31.12.2005 –
URL: http://www.lasercomponents.com/de/fileadmin/user_upload/home/Datasheets/infratec/ir_filt_wind.pdf –
Zugriff am 15.07.2006
- [68] Fabry, C.; Pérot, A.: “Théorie et Applications d’une nouvelle Méthode de Spectroscopie Interférentielle”, *Ann. Chim. Phys.*, **1899**, 16, 115-146
- [69] Hecht, E., „Optik“, 3. Aufl., Oldenbourg, München u. a., 2001
- [70] Prof. Dr. T. Lohse, Humboldt-Universität Berlin, Fachbereich Physik,
Vorlesung im WS 2004/2005: Wellenoptik: Interferenz und Beugung –
Fassung vom 12.01.2005 –
URL: www.eep.physik.hu-berlin.de/~lohse/physik_3/kap3.ppt –
Zugriff am 16.09.2006
- [71] Zeichnung angefertigt im September 2006 durch Dipl.-Ing. M. Kießhauer,
Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Institut für Anorganische
und Analytische Chemie, Elektronikwerkstatt
- [72] White, J. U.: “Long Optical Paths of Large Aperture”, *J. Opt. Soc. Am.*,
1942, 32, 285-288
- [73] Herriott, D. R.; Schulte, H. J.: “Folded Optical Delay Lines”, *Appl. Opt.*, **1965**,
4, 883-889
- [74] Zeichnung im Original entworfen im November 2002 durch F. Hüppmeier, Institut
für Chemo- und Biosensorik e. V., Münster; Modifikation im Oktober 2006 durch
Dipl. Ing. C. Koetter, Gasbeetle GmbH, Münster-Roxel
- [75] Baehr, H. D.; Stephan, K., „Wärme- und Stoffübertragung“, 5. Aufl., Springer,
Berlin u. a., 2006
- [76] Lavenda, B. H.; Dunning-Davies, J.: “Stefan-Boltzmann Law for Black Bodies and
Black Holes”, *International Journal of Theoretical Physics*, **1990**, 29, 501-514

- [77] Dr.-Ing. P. Böhmer, Technische Universität Dresden, Institut für Thermodynamik und Technische Gebäudeausrüstung: Ausgewählte Grundlagen der Wärmeübertragung – Fassung vom 07.04.2006 – URL: http://www.thermo.tu-dresden.de/Individuelle%20Seiten/IS022_Boehmer/Folien%20Waermeuebertragung/Waermeue.pdf – Zugriff am 13.10.2006
- [78] Wiegran, K.: „Entwicklung eines coulometrischen Sensors für die Bestimmung von Gelöstkohlendioxid“, Münster, Westfälische Wilhelms-Universität, Diplomarbeit, 1998
- [79] Schlatt, B.: „Einsatz der multivarianten Datenanalyse zur Untersuchung von impedimetrischen Gassensoren und daraus gebildeten Multisensorsystemen“, Münster, Westfälische Wilhelms-Universität, Diplomarbeit, 1996
- [80] Bevington, P. R., „Data reduction and error analysis for the physical sciences“, McGraw-Hill, New York u. a., 1969
- [81] Öztekin, M.: „Entwicklung eines Meß- und Auswerteverfahrens zur intermittierenden optischen Gasmessung“, Bochum, Ruhr-Universität, Diplomarbeit, 1996, durchgeführt am Institut für Chemo- und Biosensorik e. V., Münster
- [82] Dr.-Ing. B. Feiten; Dr.-Ing. A. Röbel, Technische Universität Berlin, Fachgebiet Kommunikationswissenschaft: Diskrete Fourier-Transformation (DFT) – Fassung vom 26.07.2005 – URL: <http://www.kgw.tu-berlin.de/statisch/lehre/skript/ds/node35.html> – Zugriff am 22.08.2006
- [83] Faires, J. D.; Burden, R. L., „Numerische Methoden“, Spektrum, Heidelberg u. a., 1994
- [84] Piskorowski, J.: “Phase-Compensated Time-Varying Butterworth Filters”, *Analog Integrated Circuits and Signal Processing*, **2006**, 47, 233-241
- [85] Hinich, M. J.: “Sampling Dynamical Systems”, *Macroeconomic Dynamics*, **1999**, 3, 602-609
- [86] Hanke-Bourgeois, M., „Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens“, Teubner, Stuttgart u. a., 2002

- [87] Fa. Perkin Elmer Optoelectronics GmbH & CoKG, Wiesbaden, Datasheet: Pyroelectric Detector LHi 807TC / LHi 807 – Fassung vom 28.08.2003 – URL: <http://optoelectronics.perkinelmer.com/content/Datasheets/LHI807TC.pdf> – Zugriff am 21.09.2006
- [88] Tamim, N. M.; Bennet, L. W.; Shellem, T. A.; Doerr, J. A.: “High-Performance Liquid Chromatographic Determination of Biogenic Amines in Poultry Carcasses”, *J. Agric. Food Chem.*, **2002**, 50, 5012-5015
- [89] Vullev, V. I.; Wan, J.; Heinrich, V.; Landsman, P.; Bower, P. E.; Xia, B.; Millare, B.; Jones, G.: “Nonlithographic Fabrication of Microfluidic Devices”, *J. Am. Chem. Soc.*, **2006**, 128, 16062-16072
- [90] Yozgatli, H. P., „Unsicherheitsbilanzen in der quantitativen FT-IR-Spektroskopie“, Berlin, Humboldt-Universität, Inauguraldissertation, 2002
- [91] Linsinger, T.; Koomen, G.; Emteborg, H.; Roebben, G.; Kramer, G.; Lamberty, A.: “Validation of the European Union’s Reference Method for the Determination of Solvent Yellow 124 in Gas Oil and Kerosene”, *Energy Fuels*, **2004**, 18, 1851-1854
- [92] Deutsches Institut für Normung e. V., „DIN EN 50291:2001: Elektrische Geräte für die Detektion von Kohlenmonoxid in Wohnhäusern – Prüfverfahren und Anforderungen an das Betriebsverhalten“, Beuth, Berlin, 2002
- [93] Fa. Kidde Safety Europe Ltd, Colnbrook, GB: Battery Operated Carbon Monoxide Alarm - User’s Guide – Fassung vom August 2005 – URL: <http://www.kiddesafetyeurope.co.uk/utcfs/ws-401/Assets/CO%20Manuals/9CO5,%20900-0146.pdf> – Zugriff am 27.09.2006
- [94] de B. Harrington, P.; Urbas, A.; Wan, C.: “Evaluation of Neural Network Models with Generalized Sensitivity Analysis”, *Anal. Chem.*, **2000**, 72, 5004-5013
- [95] Saltelli, A.; Ratto, M.; Tarantola, S.; Campolongo, F.: “Sensitivity Analysis for Chemical Models”, *Chem. Rev.*, **2005**, 105, 2811-2827
- [96] Fa. Josef Barthelme KG, Dresden: Produktkatalog – Fassung vom (unbekannt) – URL: http://www.barthelme.de/produktseiten/pdf_download/Hauptkatalog2008.pdf – Zugriff am 06.09.2006

- [97] H. Geuking, nicht offengelegte Deutsche Patentanmeldung **DE 10 2006 030 788.7**: „Fluidkonzentrationsmesssensor“, 2006
- [98] Technische Universität Dresden, Institut für Produktionstechnik, CIMTT Zentrum für Produktionstechnik und Organisation: Das Erodieren – Fassung vom 28.08.2006 – URL: <http://mciron.mw.tu-dresden.de/cimtt/urum/pdf/BEI4.PDF> – Zugriff am 04.10.2006
- [99] Ergebnis aus Fräsungsversuchen im April 2006, durchgeführt durch M. Krause, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Feinmechanikerwerkstatt
- [100] Physikalisch-Technische Bundesanstalt, PTB-Anforderung PTB-A 18.10: „Messgeräte im Straßenverkehr“, PTB, Braunschweig, 2004
- [101] Fa. Dräger Safety AG & Co. KGaA, Lübeck, „Dräger Sensor[®] Smart IR CO₂ – 68 10 590, Datenblatt“, 3. Ausgabe, 2004
- [102] Mündliche Absprache vom Januar 2006 mit Dr. S. Degen, Gasbeetle GmbH, Münster-Roxel

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde im November 2001 am Institut für Chemo- und Biosensorik e. V., Münster (ICB), welches der Westfälischen Wilhelms-Universität angeschlossen war, begonnen. Ich danke Prof. Dr. Karl Cammann für die Betreuung und die interessante Aufgabenstellung und ich danke allen Mitarbeitern des ICB für ihre Unterstützung während der Anfangsphase der Forschungsarbeiten zu dieser Dissertation.

Aufgrund der Insolvenz des ICB im Oktober 2002 musste die Forschungsgruppe Gassensorik leider aufgelöst werden, so dass der zuvor durch das ICB bereitgestellte Arbeitsplatz für die Durchführung von Gasmessungen verloren ging. Nach einigen Monaten wagten dann drei Mitglieder der Gassensorik-Gruppe den Schritt in die Selbständigkeit und gründeten die Firma Gasbeetle GmbH mit Sitz in Münster-Roxel.

Mein ganz besonderer Dank gilt daher diesen drei Kollegen: Dr. Oleksandre Shulga, Dr. Stefan Degen und Dipl.-Ing. Christian Kötter, die mir in ihren Firmenräumlichkeiten einen Arbeitsplatz zur Verfügung gestellt haben und somit die Durchführung der für diese Arbeit erforderlichen Messungen erst ermöglicht haben. Ich möchte mich speziell bei Dipl.-Ing. Christian Kötter bedanken, der durch viele interessante und anregende Gespräche sowie durch seine Fachkenntnis im Bereich der Elektrotechnik zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat.

Mein Dank gilt auch Manfred Krause, dem Leiter der Feinmechanikwerkstatt am Institut für Anorganische und Analytische Chemie der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster, für seine Beratung und seine Mitwirkung am Bau der Sensor-Prototypen.

Ich danke auch Dipl.-Ing. Michael Kießhauer von der Elektronikwerkstatt desselben Instituts, für den Bau der Verstärkungselektronik, die im Rahmen dieser Arbeit zum Auslesen der pyroelektrischen Detektoren verwendet wurde.

Meinem Kollegen und Freund Dr. Uwe Gläsel danke ich für die kritische Durchsicht dieser Arbeit und für sein entscheidendes Mitwirken an der Patentanmeldung für die spiralförmige Gassensoroptik.

Ich danke meiner Familie, insbesondere meinen Eltern, die mich auf meinem Weg begleitet und stets liebevoll unterstützt haben.

Mein ganz besonders herzlicher Dank gebührt schließlich meiner Freundin, Ingrid Nienaber, für ihre Liebe, ihr Vertrauen und ihre unermüdliche Unterstützung, welche maßgeblich zum Erfolg dieser Arbeit beigetragen haben.

Lebenslauf

Name: Holger Geuking

Geburtsdatum: 17. Juni 1974

Geburtsort: Coesfeld

Staatsangehörigkeit: Deutsch

Eltern: Paul Geuking und Irene Geuking, geb. Schrejfer

Schulbildung

1980 – 1984 Laurentius-Grundschule Coesfeld

1984 – 1991 Heriburg-Gymnasium Coesfeld

1991 – 1993 Bischöfliche Canisiuschule Ahaus

14. Juni 1993 Erlangung der Allgemeinen Hochschulreife

Studium

1993 – 2001 Studium der Chemie an der Westfälischen Wilhelms-Universität
Münster

5. Juli 1996 Diplom-Chemiker-Vorprüfung

11. Oktober 2000 mündliche Diplom-Chemiker-Prüfung

Februar 2001 – Diplomarbeit in Analytischer Chemie: „Entwicklung eines
September 2001 optochemischen CO₂ - Sensors auf Indikatorbasis“

25. September 2001 Abschluss der Diplom-Chemiker-Prüfung und Verleihung des
akademischen Grades Diplom-Chemiker

Promotionsstudium

November 2001 Beginn der Dissertation am Institut für Chemo- und Biosensorik e. V.
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster, unter der Betreuung
von Prof. Dr. Karl Cammann

Berufstätigkeit

November 2000 – Studentische Hilfskraft am Institut für Chemo- und Biosensorik e. V.
September 2001 der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

November 2001 – Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Anorganische und
Oktober 2005 Analytische Chemie der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster