

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. EINLEITUNG .....</b>	<b>7</b>
<b>2. GRUNDLAGEN DER FTIR-SPEKTROSKOPIE .....</b>	<b>14</b>
<b>2.1. Wichtige Begriffe innerhalb der FTIR-Spektroskopie .....</b>	<b>14</b>
2.1.1. Destruktive Interferenz .....	14
2.1.2. Diffuse Reflexion (DRIFT) .....	15
2.1.3. fingerprint-Bereich .....	15
2.1.4. Infrarot - Spektrum .....	16
2.1.5. Interferenz .....	16
2.1.6. Konstruktive Interferenz .....	16
2.1.7. Mirror Displacement (MD) .....	17
2.1.8. Optical Path Difference .....	17
2.1.9. Resonanzbedingung .....	17
2.1.10. Wellenzahl .....	18
2.1.11. Zero Path Difference (ZPD) .....	18
<b>2.2. Theoretische Grundlagen .....</b>	<b>19</b>
2.2.1. Grundlegendes aus der physikalischen Optik .....	19
2.2.2. Interaktionen zwischen IR - Strahlung & funktionellen Gruppen .....	20
2.2.2.1. Valenzschwingungen .....	21
2.2.2.2. Deformationsschwingungen .....	22
2.2.2.3. Valenz- und Deformationsschwingungen im IR-Spektrum .....	22
2.2.2.4. Bedingungen für das Auftreten von sichtbaren Signalen .....	23
<b>2.3. Komponenten eines FTIR - Spektroskops .....</b>	<b>24</b>
2.3.1. IR - Strahlenquelle .....	24
2.3.2. Der Strahlenteiler .....	26
2.3.3. Der Detektor .....	27
2.3.4. Das Interferometer .....	28
2.3.5. Helium-Neon-Laser (He-Ne-Laser) .....	29
2.3.6. Analog-Digital-Wandler (ADW) .....	29
<b>2.4. Bestandteile des Bruker Tensor 27 mit Zusatzmodul HTS-XT .....</b>	<b>30</b>
2.4.1. IR - Strahlenquelle .....	30
2.4.2. Strahlenteiler .....	30
2.4.3. Interferometer .....	31
2.4.4. Detektor und A/D-Wandler .....	32
<b>2.5. Darstellung des Strahlenganges innerhalb des Messgerätes .....</b>	<b>32</b>
<b>2.6. Vom Interferogramm zum IR-Spektrum .....</b>	<b>34</b>
2.6.1. Theoretisches zum Interferogramm .....	35
2.6.2. Fourier - Transformation .....	37
<b>2.7. Bodenkundliche Untersuchungsgebiete der FTIR-Spektroskopie .....</b>	<b>38</b>
<b>2.8. Vorteile der FTIR-Spektroskopie .....</b>	<b>41</b>

<b>3. EINFÜHRUNG IN DIE TECHNOGENEN SUBSTRATE</b> .....	<b>42</b>
<b>3.1. Die Hauptkomponentengruppe Schlacke</b> .....	<b>42</b>
3.1.1. Hochofenschlacken .....	44
3.1.2. Stahlwerkschlacken.....	47
3.1.3. Gießereischlacken.....	49
3.1.4. Wälzofenschlacken .....	50
<b>3.2. Die Hauptkomponentengruppe Asche</b> .....	<b>51</b>
<b>3.3. Zusammenfassende Charakterisierung</b> .....	<b>55</b>
<b>4. MATERIAL UND METHODEN</b> .....	<b>57</b>
<b>4.1. Charakterisierung der verwendeten Proben</b> .....	<b>57</b>
<b>4.2. Vorbereitung der Proben</b> .....	<b>59</b>
<b>4.3. Konfiguration des FTIR-Spektroskops</b> .....	<b>61</b>
<b>4.4. Messung der Proben - Die Spektrengewinnung</b> .....	<b>63</b>
<b>4.5. Visuelle Analyse der gewonnenen Spektren</b> .....	<b>67</b>
<b>4.6. Statistische Auswertung der Spektren</b> .....	<b>68</b>
4.6.1. Vorbehandlung der Spektren.....	68
4.6.2. Hauptkomponentenberechnung .....	70
4.6.3. Klassifikation der Spektren.....	74
4.6.4. Verbesserung der PCA-Modelle durch Auswertung der Discrimination Power .....	77
4.6.5. Kreuzvalidierung der zweiten SIMCA-Klassifikationsergebnisse.....	79
<b>4.7. Mineralogische Auswertung der Spektren</b> .....	<b>81</b>
<b>5. ERGEBNISSE</b> .....	<b>82</b>
<b>5.1. Darstellung der Substratspektren</b> .....	<b>82</b>
<b>5.2. Ergebnisse der Hauptkomponentenanalyse für alle Spektren</b> .....	<b>83</b>
<b>5.3. Ergebnisse der ersten Klassifikation</b> .....	<b>84</b>
5.3.1. Ergebnisse der ersten Hauptkomponentenberechnung .....	84
5.3.2. Ergebnisse der ersten SIMCA-Klassifikation .....	85
5.3.3. Ergebnisse der Wellenzahlanalyse mittels Discrimination Power.....	88
<b>5.4. Ergebnisse der zweiten Klassifikation</b> .....	<b>90</b>
5.4.1. Ergebnisse der zweiten Hauptkomponentenberechnung .....	90
5.4.2. Ergebnisse der zweiten SIMCA-Klassifikation.....	91
<b>5.5. Ergebnisse der Modellvalidierung</b> .....	<b>93</b>

---

<b>6. DISKUSSION</b> .....	<b>94</b>
6.1. Das Probenmaterial.....	94
6.2. Mineralogie des Probenmaterials .....	100
6.3. Wahl des Klassifizierungsverfahrens .....	103
6.4. Prozess der Methodenentwicklung .....	104
6.4.1. Diskussion - Ergebnisse Hauptkomponentenanalysen .....	106
6.4.2. Diskussion - Distance between models (DBM).....	106
6.4.3. Diskussion - Discrimination Power (DP).....	108
6.4.4. Diskussion - Class membership .....	108
6.4.5. Diskussion - Ergebnisse Kreuzvalidierung .....	109
<b>7. ZUSAMMENFASSUNG</b> .....	<b>113</b>
<b>8. AUSBLICK</b> .....	<b>114</b>
<b>LITERATURVERZEICHNIS</b> .....	<b>116</b>
<b>ABBILDUNGSVERZEICHNIS</b> .....	<b>122</b>
<b>TABELLENVERZEICHNIS</b> .....	<b>123</b>
<b>FORMELVERZEICHNIS</b> .....	<b>124</b>