

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen der Thermoanalyse	5
2.1	Allgemeines	5
2.2	Thermogravimetrie	8
2.3	Differenzthermoanalyse	10
2.3.1	Der DTA - Effekt	12
2.3.2	Auswertung der DTA - Kurve	14
2.4	Dynamische Differenzkalorimetrie	19
2.5	Kopplung Thermoanalytischer Verfahren	21
3	Grundlagen der Massenspektrometrie	23
3.1	Allgemeines	23
3.2	Prinzip der Massenspektrometrie	24
3.3	Quadrupolmassenspektrometer	27
3.4	Druckeinfluß bei der Messung mit dem QMG	31
4	Rechnereinsatz in der Analytik	33
4.1	Allgemeine Entwicklung	33
4.2	Meßwerterfassung mit Computern	35
4.3	Computerankopplung	36
5	Das Kopplungssystem	39
5.1	Simultane Thermoanalyse - Netzsch STA 429	42
5.2	Quadrupolmassenspektrometer - Balzers QMG 511	43
5.3	Microcomputer - Digital Equipment PDP 11/23 Plus	45
6	Modifikationen des Kopplungssystems	47
6.1	Die automatische Druckregulierung	49
6.2	Die automatische Temperaturerfassung	58
7	Modifizierung der Software	62

7.1	Steuer- und Datenerfassungsprogramm	64
7.1.1	Allgemeines	65
7.1.2	Das Hauptprogramm	66
7.1.3	Die Unterprogramme	67
7.1.3.1	Programmsegment SUB01	68
7.1.3.2	Programmsegment SUB02	69
7.1.3.3	Programmsegment SUB03	69
7.1.3.4	Programmsegment SUB04	70
7.1.3.5	Programmsegment SUB05	70
7.1.3.6	Programmsegment SUB06	71
7.1.3.7	Programmsegment SUB07	72
7.1.3.8	Programmsegmente SUB08 und SUB09	72
7.2	Auswerteprogramm	76
7.2.1	Allgemeines	76
7.2.2	Das Hauptprogramm	77
7.2.3	Die Unterprogramme	79
7.2.3.1	Programmsegment SPECTR	79
7.2.3.2	Programmsegment CURRNT	80
7.2.3.3	Programmsegment DIFFER	80
8	Automatische TA/MS Messungen	84
8.1	Untersuchungen an Kohlen	84
8.1.1	Allgemeines	84
8.1.2	Untersuchungen in Luft	89
8.1.3	Untersuchungen in Anlehnung an die Kohle	
	Kurzanalyse	96
8.1.4	Quantitative Betrachtungen	110
8.1.4.1	Voruntersuchungen	110
8.2	Untersuchungen an Pestiziden	113
8.2.1	Allgemeines	114
8.2.2	Thermoanalytische Untersuchungen	122

8.2.2.1	Dichlobenil	122
8.2.2.2	Metoxuron	123
8.2.2.3	2,4 D, MCPA und 2,4,5 T	124
8.2.2.4	Atrazin, Metamitron und Metribuzin	125
8.2.2.5	Ethephon und Glyphosat	127
8.2.2.6	Disulfoton, Etrimfos, Fenitrothion, Parathionethyl, Propetamphos und Thiometon	130
8.2.2.7	DSC - Untersuchungen	134
8.2.3	Massenspektrometrische Untersuchungen	135
8.2.3.1	Dichlobenil	136
8.2.3.2	Metoxuron	139
8.2.3.3	2,4 D, MCPA und 2,4,5 T	142
8.2.3.4	Atrazin, Metamitron und Metribuzin	144
8.2.3.5	Ethephon und Glyphosat	150
8.2.3.6	Disulfoton, Etrimfos, Fenitrothion, Parathionethyl, Propetamphos und Thiometon	153
9	Zusammenfassung und Diskussion	157
10	Experimenteller Teil	160
10.1	Der Rechner PDP 11/23 Plus	160
10.2	TA / MS Messungen	161
10.3	DSC - Messungen	163
10.4	Materialien	164
11	Anhang	165
12	Literaturverzeichnis	170