

## Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Übersicht über die spektrometrischen Auswerteverfahren	3
3	Theoretische Betrachtung der iterativen Dekonvolution	6
3.1	Mathematische Beschreibung von Spektren durch die Konvolution	6
3.2	Herleitung der iterativen Dekonvolution	7
3.3	Konvergenzkriterien	9
4	Entfaltung eines Modellspektrums	12
4.1	Eine einzelne Gaußlinie ohne Störungen als Modell	12
4.1.1	Aufstellen des Algorithmus	12
4.1.2	Ergebnisse und Konvergenzverhalten	13
4.1.3	Beseitigung von Nebeneffekten	21
4.2	Gaußlinie mit Störungen	25
4.2.1	Beseitigung eines unverrauschten Untergrundes	25
4.2.2	Das Verhalten der Dekonvolution bei vorhandenem Rauschen	27
4.3	Entfaltung bei nicht exakt bekannter Linienbreite	32
5	Entfaltung mehrerer überlagerter Gaußlinien	35
5.1	Gaußdoublet mit gleichen Linien	35
5.1.1	Doublet ohne Störungen	35
5.1.2	Doublet mit Störungen	40
5.2	Gaußdoublet mit verschiedenen Höhen und Breiten	43
5.3	Entfaltung eines synthetisierten Spektrums	48

6	Steigerung der Auflösungsverbesserung	52
6.1	Auflösungsverbesserndes Digitalfilter als Bedingungsoperator	52
6.2	Modifikation der iterativen Dekonvolution	55
6.3	Unvereinbarkeit der modifizierten Dekonvolution mit dem auflösungsverbessernden Filter	61
6.4	Bewertung der verschiedenen Dekonvolutionsmethoden und Hinweise zur Programmierung	63
7	Anwendungen der iterativen Dekonvolution	71
7.1	Beispiel aus der ENDOR-Spektroskopie	71
7.2	Beispiel aus der Hochdruckphysik	79
8	Zusammenfassung	81
	Literaturverzeichnis	83