

DIN 6146

ICS 71.040.40

Ersatz für
die 2005-06 zurückgezogene
Norm
DIN ISO 6146:1983-04

**Gasanalyse –
Herstellung von Kalibriergasen –
Manometrisches Verfahren**

Gas analysis –
Preparation of calibration gas mixtures –
Manometric method

Analyse des gaz –
Préparation des mélanges de gaz pour étalonnage –
Méthode par voie manométrique

Gesamtumfang 35 Seiten

DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP)
DIN-Normenausschuss Gastechnik (NAGas)

Inhalt

	Seite
Vorwort	3
1 Anwendungsbereich.....	4
2 Normative Verweisungen	4
3 Begriffe	4
4 Symbole und Abkürzungen	5
5 Beschreibung des Verfahrens	7
5.1 Allgemeines	7
5.2 Beschreibung einer Füllanlage zur Herstellung von Kalibriergasen	7
5.3 Durchführung des Verfahrens mit Mischkammer.....	8
5.3.1 Vorbereitung	8
5.3.2 Füllschritt 1.....	8
5.3.3 Füllschritt 2.....	9
5.4 Vorsichtsmaßnahmen.....	9
5.4.1 Allgemeines	9
5.4.2 Besondere Vorkehrungen für bestimmte Gasarten.....	10
6 Berechnungen.....	10
6.1 Eingangsdaten.....	10
6.1.1 Kennwerte der Ausgangsgase	10
6.1.2 Betriebsparameter der Füllschritte	12
6.2 Vorbereitende Rechnungen.....	13
6.2.1 Bestimmung der Rezeptur	13
6.2.2 Berechnung der maximal zulässigen Fülldrücke.....	13
6.2.3 Bestimmung der Zielwerte für die Fülldrücke	14
6.3 Berechnung der Zusammensetzung	15
6.3.1 Allgemeines	15
6.3.2 Berechnung mit Virialkoeffizienten	15
6.3.3 Übersichtsrechnung nach dem Idealen Gasgesetz	16
6.4 Berechnung der Unsicherheit der Zusammensetzung	17
6.4.1 Allgemeines	17
6.4.2 Unsicherheitsbeitrag der Zusammensetzung der Ausgangsgase	17
6.4.3 Unsicherheitsbeitrag der Stoffmengen der Ausgangsgase.....	17
Anhang A (informativ) Stoffdaten	19
Anhang B (normativ) Berechnung von Realgasfaktoren	20
B.1 Reine Gase	20
B.2 Gasgemische	21
B.3 Berücksichtigung von Verunreinigungen der Reingase.....	22
Anhang C (informativ) Beispiele.....	24
C.1 Vorbemerkung.....	24
C.2 Binäres Gemisch: 10 % CO ₂ in N ₂	24
C.3 Binäres Gemisch unter Verwendung eines Vorgemisches: 1 000 ppm C ₃ H ₈ in N ₂	27
C.4 Ternäres Gasgemisch: 1 % C ₃ H ₈ und 1 % CO ₂ in N ₂	29
Anhang D (informativ) Ergänzungen zur Berechnung der Stoffmengenanteile der Ausgangsgase	33
Literaturhinweise.....	35

Vorwort

Dieses Dokument wurde vom Arbeitsausschuss NA 062-05-73 AA „Gasanalyse und Gasbeschaffenheit“ im DIN-Normenausschusses Materialprüfung (NMP) ausgearbeitet.

Es wird auf die Möglichkeit hingewiesen, dass einige Elemente dieses Dokuments Patentrechte berühren können. DIN ist nicht dafür verantwortlich, einige oder alle diesbezüglichen Patentrechte zu identifizieren.

Änderungen

Gegenüber der 2005-06 zurückgezogenen Norm DIN ISO 6146:1983-04 wurden folgende Änderungen vorgenommen:

- a) vollständige Überarbeitung der Berechnung der Zusammensetzung (Umstellung auf Virialkoeffizienten);
- b) Unsicherheitsberechnung nach GUM;
- c) Einschränkung des maximalen Drucks des Gemischs auf etwa 40 bar;
- d) Erweiterung der Informationen über Mischgefäße.

Frühere Ausgaben

DIN ISO 6146: 1983-04

1 Anwendungsbereich

Dieses Dokument legt ein absolutes manometrisches und statisches Verfahren zur Herstellung von Kalibriergasen fest. Bei der Berechnung der Zusammensetzung der Kalibriergase und der Unsicherheit der Zusammensetzung wird das Realgasverhalten berücksichtigt. Dabei wird der Realgasfaktor der auftretenden Gase und Gasgemische nach DIN EN ISO 14912 aus den Virialkoeffizienten berechnet. Die maximal zulässigen Fülldrücke mit etwa 40 bar für die Gültigkeit dieser Näherung begrenzen den Anwendungsbereich dieses Verfahrens.

Das beschriebene Verfahren ist nur bei homogenen und stabilen Gasgemischen anwendbar. Deshalb müssen die betrachteten Zustandsbedingungen mit deutlichem Abstand außerhalb der Kondensationsgebiete der Gasgemische liegen. Dies gilt auch für die während des Herstellungsprozesses vorliegenden Ausgangs- und Prozessgase.

Die Kalibriergase, die mit dem in dieser Norm beschriebenen Verfahren hergestellt werden, dienen der sofortigen Verwendung. Bei längerer Aufbewahrung sollten entsprechende Stabilitätsuntersuchungen durchgeführt werden.

2 Normative Verweisungen

Die folgenden Dokumente, die in diesem Dokument teilweise oder als Ganzes zitiert werden, sind für die Anwendung dieses Dokuments erforderlich. Bei datierten Verweisungen gilt nur die in Bezug genommene Ausgabe. Bei undatierten Verweisungen gilt die letzte Ausgabe des in Bezug genommenen Dokuments (einschließlich aller Änderungen).

DIN 51898-1, *Gasanalyse — Absolutes volumetrisches Verfahren zur dynamischen Herstellung von Kalibriergasen — Teil 1: Herstellung aus reinen Gasen, mit CD-ROM*

DIN EN ISO 6142-1, *Gasanalyse — Herstellung von Kalibriergasen — Teil 1: Wägeverfahren für Gemische der Klasse I*

DIN EN ISO 14912, *Gasanalyse — Umrechnung von Zusammensetzungsangaben für Gasgemische*

ISO 19229, *Gas analysis — Purity analysis and the treatment of purity data*

3 Begriffe

Für die Anwendung dieses Dokuments gelten die Begriffe nach DIN EN ISO 14912 und die folgenden Begriffe.

3.1

Ausgangsgas

Reingas oder Gasgemisch, das bei der Herstellung des Kalibriergases eingesetzt wird

3.3

Prozessgas

Gas bzw. Gasgemisch, das nach einem Füllschritt im Mischgefäß vorliegt

3.2

Grundgas

Matrixgas

Ausgangsgas mit dem größten Stoffmengenanteil

3.4

Komponente

Messkomponente

<Gasgemisch> Bestandteil (reine Substanz) des Kalibriergases, der bei der Anwendung benutzt wird

4 Symbole und Abkürzungen

Die in dieser Norm verwendeten Symbole und Abkürzungen werden in Tabelle 1 erläutert.

Die Ausgangsgase werden in der Reihenfolge 1, 2, ... N der Füllschritte nummeriert. Als Index werden Kleinbuchstaben verwendet. Die Prozessgase (die Gase, die nach den Füllschritten 1, 2, ... N im Mischgefäß vorliegen) werden mit den Symbolen [1], [2], ..., [N] gekennzeichnet. Als Index werden Kleinbuchstaben in eckigen Klammern verwendet. Als Index für die Komponenten des Kalibriergases werden Großbuchstaben verwendet. Soweit möglich und zweckmäßig, werden Reingase und deren Hauptkomponente (Hauptbestandteil) mit gleichen Buchstaben bezeichnet: k ist das Gas mit der Hauptkomponente K ; umgekehrt ist K die Hauptkomponente des Gases k .

Der zweite Druck-Virialkoeffizient wird kurz als Virialkoeffizient bezeichnet. Abweichend von DIN EN ISO 14912 wird das Symbol B statt B' verwendet.

Tabelle 1 — Symbole und Abkürzungen

Symbol	Bedeutung	SI-Einheit
N	Anzahl der Füllschritte/Nummer des letzten Ausgangsgases	—
x_A	Stoffmengenanteil der Komponente A im Kalibriergas	mol/mol
x_{Ak}	Stoffmengenanteil der Komponente A im k -ten Ausgangsgas	mol/mol
$x_{Ak,max}$	Höchstwert für den Stoffmengenanteil der Komponente A als Verunreinigung im Reingas k (für Reingase als Ausgangsgas)	mol/mol
$x_{Kk,min}$	Mindestwert für den Stoffmengenanteil der Hauptkomponente K (des Hauptbestandteils K) im Reingas k (für Reingase als Ausgangsgas)	mol/mol
$y_{A[i]}$	Stoffmengenanteil der Komponente A im Prozessgas [i]	mol/mol
x_k	Stoffmengenanteil des k -ten Ausgangsgases im Kalibriergas	mol/mol
$y_{k[i]}$	Stoffmengenanteil des k -ten Ausgangsgases im Prozessgas [i]	mol/mol
n_k	Stoffmenge des k -ten Ausgangsgases im Mischgefäß	mol
$n_{[i]}$	Stoffmenge des Gases im Mischgefäß nach dem i -ten Füllschritt	mol
$p_{[i]}$	Gleichgewichtsdruck im Mischgefäß (Fülldruck) nach dem i -ten Füllschritt	Pa
$p_{[0]}$	Restdruck im Mischgefäß nach dem Evakuieren	Pa
$T_{[i]}$	Gleichgewichtstemperatur im Mischgefäß nach dem i -ten Füllschritt	K
T	einheitlicher Wert für die Gleichgewichtstemperatur im Mischgefäß	K
ϑ	Zahlenwert der Celsiusstemperatur, die der Temperatur T entspricht	1
R	allgemeine Gaskonstante	Pa · m ³ /(mol · K)
V	Volumen des Mischgefäßes	m ³
Z_A	Realgasfaktor der Komponente A	1
Z_k	Realgasfaktor des k -ten Ausgangsgases	1
$Z_{[i]}$	Realgasfaktor des Prozessgases [i]	1

Symbol	Bedeutung	SI-Einheit
B_A	Virialkoeffizient der Komponente A	1/Pa
B_k	Virialkoeffizient des k -ten Ausgangsgases	1/Pa
B_0	Tabellenwert für den Virialkoeffizienten bei 0 °C	1/Pa
B_{30}	Tabellenwert für den Virialkoeffizienten bei 30 °C	1/Pa
$u(B_{\text{dat}})$	gemeinsame Standardunsicherheit der Tabellenwerte B_0 und B_{30}	1/Pa
f	Mischungsfaktor eines Gasgemischs	1
$T_{\text{krit},k}$	kritische Temperatur des k -ten Ausgangsgases	K
$T_{\text{krit},[i]}$	kritische Temperatur des Prozessgases $[i]$	K
$p_{\text{krit},k}$	kritischer Druck des k -ten Ausgangsgases	Pa
$p_{\text{krit},[i]}$	kritischer Druck des Prozessgases $[i]$	Pa
$p_{\text{max},[i]}$	maximal zulässiger Fülldruck für den i -ten Füllschritt ohne Berücksichtigung möglicher Kondensation	Pa
$p_{d,A}$	Dampfdruck der Komponente A	Pa
$p_{\tau,[i]}$	Taudruck des Prozessgases $[i]$	Pa
$p_{\text{kond},[i]}$	Kondensationsdruck des Prozessgases $[i]$	Pa
$p_{\text{max},[i]}^{\#}$	maximal zulässiger Fülldruck für den i -ten Füllschritt bei Berücksichtigung möglicher Kondensation	Pa
$u(.)$	Standardunsicherheit einer Größe	—
$u_{\text{rel}}(.)$	relative Standardunsicherheit einer Größe	—
$u^2(.)$	Varianz (quadrierte Standardunsicherheit) einer Größe	—
$u_{\text{rel}}^2(.)$	relative Varianz (quadrierte relative Standardunsicherheit) einer Größe	—

5 Beschreibung des Verfahrens

5.1 Allgemeines

Bei dem beschriebenen Verfahren werden die Ausgangsgase nacheinander in einen zuvor evakuierten Behälter überführt. Nach jedem Füllschritt wird der Druck im Behälter gemessen. Aus den gemessenen Drücken und der Zusammensetzung der Ausgangsgase wird die Zusammensetzung des Kalibriergases berechnet. Für diesen Zweck werden zwei Rechenverfahren angegeben:

- Überschlagsrechnung nach dem Idealen Gasgesetz;
- Berechnung mit Realgasfaktoren/Virialkoeffizienten.

Vorzugsweise wird als Behälter eine thermostatisierte Mischkammer mit aktiver Homogenisierung verwendet, bei der Druck und Temperatur des Gases fortlaufend gemessen werden.

Alternativ kann ein handelsüblicher Druckgasbehälter (Gasflasche) verwendet werden. Dann muss jedoch aufgrund der vergleichsweise schwächeren Kontrolle des Mischprozesses nach den einzelnen Füllschritten (Homogenisierung, Einstellung des Gleichgewichtsdrucks, Einstellung der Gleichgewichtstemperatur) mit erheblich größeren Unsicherheiten gerechnet werden.

5.2 Beschreibung einer Füllanlage zur Herstellung von Kalibriergasen

Ein Beispiel einer manometrischen Füllanlage mit Mischkammer ist in Bild 1 schematisch dargestellt. Die Mischkammer hat ein Volumen, das ausreicht, um die erforderliche Kalibriergasmenge für die vorgesehenen Kalibrierungen zu liefern. Sie ist aus einem Werkstoff gefertigt, der gegenüber sämtlichen Bestandteilen des Kalibriergases inert ist, ebenso das Leitungssystem.

Die Mischkammer wird thermostatisiert. Die Temperatur muss so gewählt werden, dass der Temperaturanstieg durch das Einleiten der Gase kompensiert wird (z. B. 30 °C). Die Mischkammer ist mit Sensoren ausgerüstet, mit denen Druck und Temperatur des Gases fortlaufend gemessen werden können.

ANMERKUNG Bei kleinen Gehalten wird die erreichbare Genauigkeit zunehmend von der Unsicherheit der Druckmessung beeinflusst.

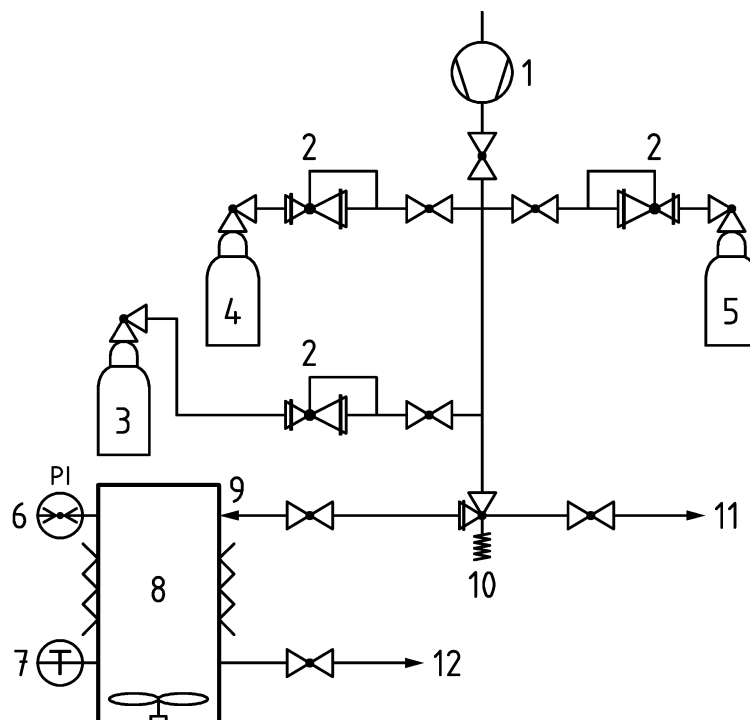
Die Mischkammer verfügt über eine Vorrichtung zur Homogenisierung des Gases nach den einzelnen Füllschritten. Für diesen Zweck eignen sich z. B. ein Ventilator oder ein Magnetrührstab.

Alle Teile der Füllanlage sind für den höchsten Druck, der auftreten kann, auszulegen bzw. entsprechend abzusichern. Dies gilt insbesondere für die Manometer und die Vakuumeinrichtungen.

Bei Verwendung eines handelsüblichen Druckgasbehälters (Gasflasche) anstelle einer Mischkammer gelten die gleichen Anforderungen bezüglich Werkstoffverträglichkeit und Druckauslegung der Füllanlage.

In diesem Fall kann die Homogenisierung durch Verwendung von Tauchrohren oder durch Rollen der Gasflasche gefördert werden.

Anstelle der Temperatur des Gases kann behelfsweise die Temperatur der Flaschenwandung gemessen werden.



Legende

1	Vakuumpumpe	7	Temperaturmessung in der Mischkammer
2	Druckregler	8	Mischkammer
3	Ausgangsgas	9	Gaseingang der Mischkammer
4	Ausgangsgas	10	Überdruckventil
5	Ausgangsgas	11	Spülgasausgang
6	Druckmessung	12	Gasausgang der Mischkammer

Bild 1 — Beispiel einer manometrischen Füllanlage mit Mischkammer

5.3 Durchführung des Verfahrens mit Mischkammer

5.3.1 Vorbereitung

Vor dem ersten Füllschritt werden die Mischkammer und das Leitungssystem vorzugsweise mit dem Ausgangsgas 1 gespült, andernfalls mit dem Grundgas. Anschließend werden Mischkammer und Leitungssystem evakuiert und der Restdruck $p_{[0]}$ gemessen. Bei Spülung mit dem Grundgas muss der Restdruck deutlich kleiner sein als die Messunsicherheit für den Druck nach dem ersten Füllschritt [$p_{[0]} \ll u(p_{[1]})$]. Bei Spülung mit dem Ausgangsgas 1 entfällt diese Bedingung. Nach dem Evakuieren ist zu kontrollieren, dass der Druck konstant bleibt, nachdem das Pumpensystem abgesperrt ist.

5.3.2 Füllschritt 1

Das Ausgangsgas 1 wird in die evakuierte Mischkammer eingeleitet. Dabei sollte der Druck langsam ansteigen (Druckstöße vermeiden), um größere Änderungen der Temperatur in der Mischkammer zu verhindern. Gefüllt wird bis zum Zielwert des Fülldrucks. Anschließend werden alle Ventile geschlossen und das Leitungssystem erneut evakuiert. Druck und Temperatur in der Mischkammer werden fortlaufend gemessen, bis sich konstante Werte einstellen. Die Gleichgewichtswerte $p_{[1]}$ und $T_{[1]}$ werden notiert.

5.3.3 Füllschritt 2

Das Ausgangsgas 2 wird in die Füllleitung eingeleitet. Dabei muss der Druck höher sein als der Druck in der Mischkammer. Anschließend wird das Ausgangsgas 2 in die Mischkammer eingeleitet. Gefüllt wird bis zum Zielwert des Fülldrucks. Anschließend werden alle Ventile geschlossen. Druck und Temperatur in der Mischkammer werden fortlaufend gemessen, bis sich konstante Werte einstellen. Die Gleichgewichtswerte $p_{[2]}$ und $T_{[2]}$ werden notiert. Soll ein weiteres Ausgangsgas gefüllt werden, so wird das Leitungssystem erneut evakuiert.

Die ggf. weiteren Füllschritte werden wie Füllschritt 2 durchgeführt.

Die Druckdifferenz zwischen aufeinander folgenden Füllschritten sollte mindestens 100 mbar betragen.

Verdünnungen in der Größenordnung von 1/500 sind erreichbar.

Bei Verwendung eines handelsüblichen Druckgasbehälters (Gasflasche) anstelle einer Mischkammer müssen zwischen den einzelnen Füllschritten aus praktischen Erfahrungen abgeleitete Wartezeiten für die Gleichgewichtseinstellung eingehalten werden. Das betrifft:

- die Homogenisierung;
- die Einstellung des Gleichgewichtsdrucks;
- den Angleich der Gastemperatur an die (als Gleichgewichtstemperatur verwendete) Umgebungstemperatur.

In Anbetracht der vergleichsweise schwächeren Kontrolle des Mischprozesses nach den einzelnen Füllschritten (Homogenisierung, Einstellung des Gleichgewichtsdrucks, Einstellung der Gleichgewichtstemperatur) wird empfohlen, die Herstellung mit handelsüblichen Druckgasbehältern (Gasflaschen) auf die 1-stufige Verdünnung eines Reingases oder eines Vorgemischs zu beschränken.

5.4 Vorsichtsmaßnahmen

5.4.1 Allgemeines

Der Enddruck des Kalibriergasgemisches bei einer festgelegten Temperatur darf nicht den angegebenen maximalen Arbeitsdruck der Gasmischkammer bzw. der Zielgasflasche überschreiten. Auf die gasartspezifische Eignung der Dichtungen und deren sauberen und unversehrten Zustand ist zu achten. Es muss eine Sicherheitseinrichtung gegen unzulässige Drucküberschreitung verwendet werden. Um eine unbeabsichtigte Einleitung eines Ausgangsgases in ein zweites Ausgangsgas zu verhindern, müssen entsprechende Maßnahmen getroffen werden.

Vor der Herstellung eines Gemischs sollte eine schriftliche Herstellungsanweisung erstellt werden. Die Anweisung sollte mindestens Folgendes enthalten:

- den Druck des fertigen Gemisches;
- die Reihenfolge, in der die Ausgangsgase gefüllt werden;
- die Fülldrücke aller Ausgangsgase.

Gasgemische, die zu gefährlichen Reaktionen fähig sind, müssen aus Sicherheitsgründen ausgeschlossen werden.

ANMERKUNG Eine Anleitung ist in dem Dokument des Europäischen Industriegasverbandes (en: European Industrial Gases Association, EIGA) IGC 39 „Sichere Herstellung von Gasgemischen“ enthalten.

5.4.2 Besondere Vorkehrungen für bestimmte Gasarten

Wenn brennbare mit brandfördernden Ausgangsgasen gemischt werden, ist auszuschließen, dass der Zündbereich durchlaufen wird.

Bei der Verwendung von Sauerstoff ist auf die Eignung aller Ausrüstungsteile für den Sauerstoffeinsatz zu achten. Das Flaschenventil der Sauerstoffflasche ist immer sehr langsam zu öffnen, um plötzliche Druckstöße zu vermeiden, die einen Sauerstoffausbrand einleiten können. Es ist auf einen einwandfreien, sauberen sowie öl- und fettfreien Zustand sämtlicher Bauteile, die für den Füllprozess benötigt werden, zu achten.

6 Berechnungen

6.1 Eingangsdaten

6.1.1 Kennwerte der Ausgangsgase

6.1.1.1 Allgemeines

Für die Berechnungen werden folgende Kennwerte der Ausgangsgase k benötigt:

- die Stoffmengenanteile x_{Ak} aller spezifizierten Komponenten A des Kalibriergases;
- die Standardunsicherheiten $u(x_{Ak})$ der Stoffmengenanteile aller spezifizierten Komponenten (ggf. bis auf die Matrixkomponente).

Die Kennwerte der Ausgangsgase (Gasgemische, Reingase) werden nach 6.1.1.2 oder 6.1.1.3 bestimmt.

6.1.1.2 Gasgemische

Die Werte für die Stoffmengenanteile der Komponenten und deren Standardunsicherheit werden dem Zertifikat des Gasgemischs entnommen. Dabei müssen ggf. erweiterte Unsicherheiten oder relative Unsicherheitsangaben in absolute Standardunsicherheiten umgerechnet werden.

Für Komponenten A , die nicht im Ausgangsgas k enthalten sind, wird $x_{Ak} = 0$ und $u(x_{Ak}) = 0$ gesetzt.

Üblicherweise wird bei Gasgemischen keine Angabe für den Gehalt der Matrixkomponente M gemacht. Dann kann der Stoffmengenanteil als Differenz nach Gleichung (1) berechnet werden.

$$x_{Mk} = 1 - \sum_{A \neq M} x_{Ak} \quad (1)$$

Wenn für den Gehalt der Matrixkomponente im Kalibriergas keine Angabe gemacht werden soll, sind die Unsicherheiten $u(x_{Mk})$ entbehrlich. Andernfalls können sie nach Gleichung (2) berechnet werden:

$$u^2(x_{Mk}) = \sum_{A \neq M} u^2(x_{Ak}) \quad (2)$$

ANMERKUNG Diese Berechnung ist streng genommen nur bei Gasgemischen mit analytisch bestimmter Zusammensetzung gültig, kann jedoch behelfsweise auch bei anderen Gasgemischen als Abschätzung benutzt werden.

Üblicherweise werden bei Gasgemischen keine Angaben zu Verunreinigungen gemacht. Die Verunreinigungen werden stillschweigend der Matrixkomponente zugeschlagen. Querverunreinigungen mit spezifizierten Spurenkomponenten des Kalibriergases können jedoch signifikante Auswirkungen haben. Deshalb müssen in derartigen Fällen beim Hersteller Informationen über kritische Verunreinigungen eingeholt werden.

6.1.1.3 Reingase

Reingase enthalten stets Verunreinigungen und sind somit Gasgemische. Für die rechnerische Behandlung von Reingasen werden nachfolgend zwei Ansätze beschrieben.

- Bei dem Ansatz nach DIN 51898-1 werden die Reingase als absolut rein behandelt. Die Verunreinigungen werden ausschließlich bei der Unsicherheitsberechnung berücksichtigt, wobei ausschließlich Querverunreinigungen betrachtet werden.
- Bei dem Ansatz nach ISO 19229 werden die Verunreinigungen mit Stoffmengenanteilen geführt, wobei neben den Querverunreinigungen auch andere relevante Verunreinigungen betrachtet werden.

Im Vergleich zum DIN-Ansatz ist der ISO-Ansatz bei der Berechnung von Kenngrößen der Prozessgase (Virialkoeffizienten, Realgasfaktoren, Unsicherheit der Realgasfaktoren) und der Stoffmengenanteile der Ausgangsgase erheblich aufwändiger, wobei die Ergebnisse nicht wesentlich genauer sind. Deshalb beschränkt sich die Verwendung des ISO-Ansatzes auf die Berechnung der Stoffmengenanteile der Komponenten und deren Unsicherheit. Bei Verwendung des ISO-Ansatzes können zusätzlich zum Gehalt der spezifizierten Komponenten auch relevante Verunreinigungsgehalte berechnet werden.

Bei dem Stoffmengenanteil der spezifizierten Komponenten stimmen die Rechenergebnisse im Rahmen der Unsicherheit überein. Bei der Unsicherheit des Stoffmengenanteils können sich die Ergebnisse bei „sehr unsauberen“ Reingasen ($\leq 99\%$) unterscheiden.

Bei der Beschreibung der beiden Ansätze werden Reingase und deren Hauptbestandteil mit gleichen Buchstaben bezeichnet: K ist die Hauptkomponente des Reingases k .

a) Ansatz nach DIN 51898-1

Der Ansatz geht davon aus, dass für alle Reingase k folgende Daten vorliegen:

- der Mindestwert $x_{Kk,\min}$ für den Stoffmengenanteil des Hauptbestandteils K (Reinheit);
- die Höchstwerte $x_{Ak,\max}$ für den Stoffmengenanteil sämtlicher Querverunreinigungen A (aller anderen spezifizierten Komponenten des Kalibriergases).

Falls solche Daten fehlen, müssen sie beim Hersteller erfragt oder durch ergänzende Reinheitsanalysen bestimmt werden.

ACHTUNG — Gelegentlich sind Reinheitsangaben nicht mehr als ein allgemeines „Qualitätslabel“. Deshalb sollte der Anwender sich vergewissern, dass die Reinheitsangaben des Herstellers tatsächlich den Mindestgehalt des Hauptbestandteils darstellen.

Für den Hauptbestandteil K und die Querverunreinigungen $A \neq K$ eines Reingases k werden Schätzwerte für den Stoffmengenanteil und dessen Standardunsicherheit nach den Gleichungen (3) und (4) angesetzt.

$$x_{Kk} = 1 \quad ; \quad u(x_{Kk} = 1) = \frac{1 - x_{Kk,\min}}{\sqrt{3}} \quad (3)$$

$$x_{Ak} = 0 \quad ; \quad u(x_{Ak} = 0) = \frac{1 - x_{Ak,\min}}{\sqrt{3}} \quad (4)$$

Sind zu einer Querverunreinigung Informationen nicht zu beschaffen, so muss vorsichtshalber mit $x_{Ak,\max} = 1 - x_{Kk,\min}$ gerechnet werden.