

DIN EN ISO 14912



ICS 71.040.40

**Gasanalyse –
Umrechnung von Zusammensetzungsangaben für Gasgemische
(ISO 14912:2003);
Deutsche Fassung EN ISO 14912:2006**

Gas analysis –

Conversion of gas mixture composition data (ISO 14912:2003);

German version EN ISO 14912:2006

Analyse des gaz –

Conversion des données de composition de mélanges gazeux (ISO 14912:2003);

Version allemande EN ISO 14912:2006

Gesamtumfang 65 Seiten

Normenausschuss Materialprüfung (NMP) im DIN
Normenausschuss Gastechnik (NAGas) im DIN
Fachausschuss Mineralöl- und Brennstoffnormung (FAM) des NMP

Nationales Vorwort

Diese Norm enthält die deutsche Übersetzung der Internationalen Norm ISO 14912:2003, die im Technischen Komitee ISO/TC 158 „Gasanalyse“, dessen Sekretariat vom NEN (Niederlande) gehalten wird, ausgearbeitet wurde.

Das zuständige deutsche Gremium ist der Arbeitsausschuss NA 062-05-73 AA „Gasanalyse und Gasbeschaffenheit“ des Normenausschusses Materialprüfung (NMP).

Zum informativen Anhang C „Daten für Gemischkomponenten“:

Im Rahmen der Übersetzung der ISO 14912:2003 ist aufgefallen, dass zu den Daten für die Standardunsicherheit der Molmassen (Spalte 4 der Tabelle C.1) Änderungsbedarf besteht. Es handelt sich dabei um Fehler, die bei der Rundung von Rechenergebnissen über mehrere Stellen aufgetreten sind. Bei der ISO wurde daraufhin ein Antrag auf Korrektur eingereicht. Sobald dieser veröffentlicht wird, wird auch die EN ISO 14912:2006 und somit auch die DIN EN ISO 14912 angepasst. Auskünfte erteilt der NA 062-05-73 AA.

Deutsche Fassung

**Gasanalyse —
Umrechnung von Zusammensetzungsangaben für Gasgemische
(ISO 14912:2003)**

Gas analysis —
Conversion of gas mixture composition data
(ISO 14912:2003)

Analyse des gaz —
Conversion des données de composition de mélanges
gazeux
(ISO 14912:2003)

Diese Europäische Norm wurde vom CEN am 21. Juli 2006 angenommen.

Die CEN-Mitglieder sind gehalten, die CEN/CENELEC-Geschäftsordnung zu erfüllen, in der die Bedingungen festgelegt sind, unter denen dieser Europäischen Norm ohne jede Änderung der Status einer nationalen Norm zu geben ist. Auf dem letzten Stand befindliche Listen dieser nationalen Normen mit ihren bibliographischen Angaben sind beim Management-Zentrum oder bei jedem CEN-Mitglied auf Anfrage erhältlich.

Diese Europäische Norm besteht in drei offiziellen Fassungen (Deutsch, Englisch, Französisch). Eine Fassung in einer anderen Sprache, die von einem CEN-Mitglied in eigener Verantwortung durch Übersetzung in seine Landessprache gemacht und dem Management-Zentrum mitgeteilt worden ist, hat den gleichen Status wie die offiziellen Fassungen.

CEN-Mitglieder sind die nationalen Normungsinstitute von Belgien, Dänemark, Deutschland, Estland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Irland, Island, Italien, Lettland, Litauen, Luxemburg, Malta, den Niederlanden, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, Rumänien, Schweden, der Schweiz, der Slowakei, Slowenien, Spanien, der Tschechischen Republik, Ungarn, dem Vereinigten Königreich und Zypern.



EUROPÄISCHES KOMITEE FÜR NORMUNG
EUROPEAN COMMITTEE FOR STANDARDIZATION
COMITÉ EUROPÉEN DE NORMALISATION

Management-Zentrum: rue de Stassart, 36 B-1050 Brüssel

Inhalt

	Seite
Vorwort	3
Einleitung.....	4
1 Anwendungsbereich	5
2 Begriffe	5
2.1 Größen für Zusammensetzungsangaben von Gasgemischen	5
2.2 Weitere bei der Umrechnung von Gasgemischzusammensetzungen auftretende Größen.....	6
3 Symbole und Einheiten	8
4 Allgemeine Grundlagen	10
4.1 Angabe der Zusammensetzung von Gasgemischen	10
4.2 Umrechnung zwischen verschiedenen Größen	12
4.3 Umrechnung zwischen verschiedenen Zustandsbedingungen	13
5 Grundlegende Verfahren.....	14
5.1 Umrechnung zwischen verschiedenen Zusammensetzungsgrößen	14
5.2 Umrechnung auf Referenzbedingungen	17
6 Praktische Umsetzung	17
6.1 Umrechnung zwischen Zusammensetzungsgrößen.....	17
6.2 Umrechnung einzelner Analytgehalte	18
6.3 Umrechnung vollständiger Zusammensetzungen	19
6.4 Umrechnung zwischen Zustandsbedingungen.....	19
6.5 Einfache Näherungsansätze für Umrechnungen	20
7 Eingangsdaten und ihre Unsicherheit.....	20
7.1 Daten für reine Gase.....	20
7.2 Daten für Gasgemische.....	23
7.3 Grobe Schätzwerte für Unsicherheiten	26
8 Umrechnungsunsicherheit	27
8.1 Allgemeines	27
8.2 Umrechnung einzelner Analytgehalte	27
8.3 Umrechnung vollständiger Zusammensetzungen	29
8.4 Unsicherheitsberechnung mittels numerischer Differentiation	31
8.5 Varianzen und Kovarianzen von Eingangsdaten der Zusammensetzung	32
9 Anwendungsempfehlungen.....	34
Anhang A (normativ) Beurteilung von Zustandsbedingungen	35
Anhang B (normativ) Summenbeziehungen für die Darstellung von Gemischeigenschaften	38
Anhang C (informativ) Daten für Gemischkomponenten	39
Anhang D (informativ) Beispiele	45
Anhang E (informativ) Computer-Umsetzung der empfohlenen Verfahren	61
Literaturhinweise	63

Vorwort

Der Text von ISO 14912:2003 wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 158 „Gasanalyse“ der Internationalen Organisation für Normung (ISO) erarbeitet und als EN ISO 14912:2006 durch das Technische Komitee CEN/SS N21 „Gaseous fuels and combustible gas“ übernommen, dessen Sekretariat vom CMC gehalten wird.

Diese Europäische Norm muss den Status einer nationalen Norm erhalten, entweder durch Veröffentlichung eines identischen Textes oder durch Anerkennung bis Februar 2007, und etwaige entgegenstehende nationale Normen müssen bis Februar 2007 zurückgezogen werden.

Entsprechend der CEN/CENELEC-Geschäftsordnung sind die nationalen Normungsinstitute der folgenden Länder gehalten, diese Europäische Norm zu übernehmen: Belgien, Dänemark, Deutschland, Estland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Irland, Island, Italien, Lettland, Litauen, Luxemburg, Malta, Niederlande, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, Rumänien, Schweden, Schweiz, Slowakei, Slowenien, Spanien, Tschechische Republik, Ungarn, Vereinigtes Königreich und Zypern.

Anerkennungsnotiz

Der Text von ISO 14912:2003 wurde vom CEN als EN ISO 14912:2006 ohne irgendeine Abänderung genehmigt.

Einleitung

Aufgabe der Gasanalyse ist die Bestimmung der Zusammensetzung von Gasgemischen. Qualitativ wird die Gasgemischzusammensetzung beschrieben durch Angabe der relevanten Gemischkomponenten, der so genannten Analyten, sowie des Komplementärgases. Quantitativ wird die Gasgemischzusammensetzung beschrieben durch Angabe der Menge eines jeden Analyten im Gemisch sowie der Zusammensetzung des Komplementärgases.

Zur Angabe der Menge eines Analyten in einem Gasgemisch werden verschiedene Größen verwendet. Diese Vielfalt ist darauf zurückzuführen, dass für unterschiedliche Anwendungen unterschiedliche Größen entscheidende Vorteile haben. Daher werden Verfahren zur Umrechnung zwischen diesen verschiedenen Größen benötigt.

Soweit diese Größen Gasvolumina — von Analyten oder dem Gasgemisch oder beiden — enthalten, hängen sie von den Zustandsbedingungen, d. h. von Druck und Temperatur des Gasgemischs, ab. Für alle derartigen Größen werden Verfahren zur Umrechnung zwischen verschiedenen Zustandsbedingungen benötigt.

Als grobe Näherung können alle derartigen Umrechnungen auf der Grundlage des idealen Gasgesetzes durchgeführt werden. Eine genaue Umrechnung erfordert jedoch in den meisten Fällen die Berücksichtigung des Realgasverhaltens des Analyten und des Gasgemischs. Insbesondere werden für viele Umrechnungen Werte des Realgasfaktors (oder der Dichte) des Gasgemischs benötigt.

Diese Internationale Norm enthält exakt gültige Umrechnungsverfahren, die auf grundlegenden Prinzipien beruhen und dem Realgasverhalten reiner Gase und Gasgemische in vollem Umfang Rechnung tragen. Zusätzlich dazu werden Näherungsverfahren für praktische Anwendungen beschrieben, ausgelegt für unterschiedliche Fälle betreffs Genauigkeitsniveau und verfügbare Daten. Diese Näherungen sind notwendig, weil für Gasgemische gemessene Realgasfaktoren (oder Dichten) nur selten verfügbar sind und daher aus Daten der Komponenten näherungsweise berechnet werden müssen. Die Ergebnisunsicherheit wird durch Kombination der mit den Näherungen verbundenen Unsicherheiten und der Unsicherheiten der Eingangsdaten ermittelt. Für Umrechnungen benötigte volumetrische Realgasdaten reiner Gase oder Gasgemische werden unter Verwendung von Realgasfaktoren dargestellt. Umrechnung der Realgasfaktoren in Dichten ergäbe eine äquivalente Darstellung.

1 Anwendungsbereich

Diese Internationale Norm definiert die folgenden Größen, die zur Angabe der Zusammensetzung von Gasgemischen verwendet werden:

- Stoffmengenanteil,
- Massenanteil,
- Volumenanteil

sowie

- Stoffmengenkonzentration,
- Massenkonzentration,
- Volumenkonzentration.

Für die genannten Zusammensetzungsgrößen legt diese Internationale Norm Verfahren fest zur

- Umrechnung zwischen verschiedenen Größen und
- Umrechnung zwischen verschiedenen Zustandsbedingungen.

Umrechnung zwischen verschiedenen Größen bedeutet: Berechnung des Zahlenwerts eines Analytgehalts in einer der oben genannten Größen aus dem Zahlenwert desselben Analytgehalts, gegeben in einer anderen dieser Größen, bei gleichem Druck und gleicher Temperatur des Gasgemischs. Umrechnung zwischen verschiedenen Zustandsbedingungen bedeutet: Berechnung des Zahlenwerts eines Analytgehalts in einer der oben genannten Größen bei einem Satz von Zustandsbedingungen aus dem Zahlenwert derselben Größe bei einem anderen Satz von Zustandsbedingungen, d. h. Druck und Temperatur des Gasgemischs. Durch Kombination dieser beiden Umrechnungsarten kann die Zusammensetzung von Gasgemischen zugleich zwischen verschiedenen Zusammensetzungsgrößen und verschiedenen Zustandsbedingungen umgerechnet werden.

Diese Internationale Norm ist nur bei homogenen und stabilen Gasgemischen anwendbar. Deshalb müssen die betrachteten Zustandsbedingungen mit deutlichem Abstand außerhalb der Kondensationsgebiete des Gasgemischs sowie jedes der angegebenen Analyten liegen (siehe Anhang A).

2 Begriffe

Für die Anwendung dieses Dokuments gelten die folgenden Begriffe.

ANMERKUNG Siehe auch Literaturhinweise [1] und [2].

2.1 Größen für Zusammensetzungsangaben von Gasgemischen

ANMERKUNG Nähere Informationen zu den in diesem Abschnitt definierten Begriffen enthält 4.1.

2.1.1

Stoffmengenanteil

x

Quotient aus der Stoffmenge einer gegebenen Komponente und der Summe der Stoffmengen aller Komponenten eines Gasgemischs

ANMERKUNG Der Stoffmengenanteil ist unabhängig von Druck und Temperatur des Gasgemischs.

2.1.2

Massenanteil

w

Quotient aus der Masse einer gegebenen Komponente und der Summe der Massen aller Komponenten eines Gasgemischs

ANMERKUNG Der Massenanteil ist unabhängig von Druck und Temperatur des Gasgemischs.

2.1.3

Volumenanteil

ϕ

Quotient aus dem Volumen einer gegebenen Komponente und der Summe der Volumina aller Komponenten eines Gasgemischs vor dem Mischen, wobei alle Volumina auf den Druck und die Temperatur des Gasgemischs bezogen werden

ANMERKUNG Der Volumenanteil ist nicht unabhängig von Druck und Temperatur des Gasgemischs. Deshalb müssen Druck und Temperatur angegeben werden.

2.1.4

Stoffmengenkonzentration

c

Quotient aus der Stoffmenge einer gegebenen Komponente und dem Volumen eines Gasgemischs

ANMERKUNG Die Stoffmengenkonzentration ist nicht unabhängig von Druck und Temperatur des Gasgemischs. Deshalb müssen Druck und Temperatur angegeben werden.

2.1.5

Massenkonzentration

β

Quotient aus der Masse einer gegebenen Komponente und dem Volumen eines Gasgemischs

ANMERKUNG Die Massenkonzentration ist nicht unabhängig von Druck und Temperatur des Gasgemischs. Deshalb müssen Druck und Temperatur angegeben werden.

2.1.6

Volumenkonzentration

σ

Quotient aus dem Volumen einer gegebenen Komponente und dem Volumen eines Gasgemischs

ANMERKUNG 1 Die Volumenkonzentration ist nicht unabhängig von Druck und Temperatur des Gasgemischs. Deshalb müssen Druck und Temperatur angegeben werden.

ANMERKUNG 2 Der Volumenanteil (2.1.3) und die Volumenkonzentration (2.1.6) nehmen denselben Wert an, wenn bei gleichen Zustandsbedingungen die Summe der Komponentenvolumina vor dem Mischen und das Volumen des Gemischs gleich sind. Da jedoch die Mischung von zwei oder mehr Gasen bei gleichen Zustandsbedingungen im Regelfall mit einer leichten Kontraktion oder seltener mit einer leichten Expansion einhergeht, ist das im Allgemeinen nicht der Fall.

2.2 Weitere bei der Umrechnung von Gasgemischzusammensetzungen auftretende Größen

2.2.1

Realgasfaktor

Z

Quotient aus dem Volumen einer beliebigen Gasmenge bei gegebenem Druck und gegebener Temperatur und dem nach dem idealen Gasgesetz berechneten Volumen derselben Gasmenge bei denselben Zustandsbedingungen

ANMERKUNG 1 Diese Definition gilt sowohl für reine Gase als auch für Gasgemische. Deshalb wird in der Definition der Begriff „Gas“ als Oberbegriff für reine Gase und Gasgemische verwendet.

ANMERKUNG 2 Definitionsgemäß ist der Realgasfaktor eines idealen Gases gleich 1. Bei Zimmertemperatur und Umgebungsdruck weicht der Realgasfaktor bei vielen Gasen nur mäßig von 1 ab.

2.2.2

Mischungsfaktor

f

Quotient aus dem Volumen einer beliebigen Menge eines Gasgemischs bei gegebenem Druck und gegebener Temperatur und der Summe der Volumina aller Gemischkomponenten vor dem Mischen bei denselben Zustandsbedingungen

ANMERKUNG Wenn die Komponentenvolumina sich strikt additiv verhalten, d. h., wenn die Summe der Komponentenvolumina vor dem Mischen gleich dem Volumen nach dem Mischen ist, ist der Mischungsfaktor gleich 1. Bei Zimmertemperatur und Umgebungsdruck weicht der Mischungsfaktor bei vielen Gasen nur geringfügig von 1 ab.

2.2.3

Dichte

ρ

Quotient aus der Masse einer beliebigen Gasmenge und dem Volumen des Gases bei gegebenem Druck und gegebener Temperatur

ANMERKUNG Diese Definition gilt sowohl für reine Gase als auch für Gasgemische. Deshalb wird in der Definition der Begriff „Gas“ als Oberbegriff für reine Gase und Gasgemische verwendet.

2.2.4

Molvolumen

V_{mol}

Quotient aus dem Volumen einer beliebigen Gasmenge bei gegebenem Druck und gegebener Temperatur und der Stoffmenge des Gases

ANMERKUNG 1 Diese Definition gilt sowohl für reine Gase als auch für Gasgemische. Deshalb wird in der Definition der Begriff „Gas“ als Oberbegriff für reine Gase und Gasgemische verwendet.

ANMERKUNG 2 Die Stoffmenge eines Gasgemischs ist gegeben durch die Summe der Stoffmengen seiner Komponenten.

2.2.5

Virialkoeffizienten

Koeffizienten in der Reihenentwicklung des Realgasfaktors nach Potenzen einer Zustandsgröße

ANMERKUNG In der Praxis werden nur die folgenden beiden Virialentwicklungen verwendet, bei denen die Zustandsgröße der Druck p bzw. der Kehrwert des Molvolumens $1/V_{\text{mol}}$ ist.

$$Z(V_{\text{mol}}, T) = 1 + \frac{B(T)}{V_{\text{mol}}} + \frac{C(T)}{V_{\text{mol}}^2} + \dots \quad (1)$$

$$Z(p, T) = 1 + B'(T)p + C'(T)p^2 + \dots \quad (2)$$

2.2.5.1

zweiter Molvolumen-Virialkoeffizient

B

Koeffizient von $1/V_{\text{mol}}$ in der Reihenentwicklung des Realgasfaktors nach inversen Potenzen des Molvolumens V_{mol}

2.2.5.2

dritter Molvolumen-Virialkoeffizient

C

Koeffizient von $1/V_{\text{mol}}^2$ in der Reihenentwicklung des Realgasfaktors nach inversen Potenzen des Molvolumens V_{mol}

2.2.5.3

zweiter Druck-Virialkoeffizient

B'

Koeffizient von p in der Reihenentwicklung des Realgasfaktors nach inversen Potenzen des Drucks p

2.2.5.4

dritter Druck-Virialkoeffizient

C'

Koeffizient von p^2 in der Reihenentwicklung des Realgasfaktors nach inversen Potenzen des Drucks p

3 Symbole und Einheiten

Symbol	Größe	SI-Einheit
α	Abkürzung für $p/(RT)$	mol/m^3
B	zweiter Molvolumen-Virialkoeffizient	m^3/mol
B'	zweiter Druck-Virialkoeffizient	$1/\text{Pa}$
β	Massenkonzentration	kg/m^3
c	Stoffmengenkonzentration	mol/m^3
C	dritter Molvolumen-Virialkoeffizient	m^6/mol^2
C'	dritter Druck-Virialkoeffizient	$1/\text{Pa}^2$
D	Verdünnungsfaktor	1
f	Mischungsfaktor	1
ϕ	Volumenanteil	1
i	Gasgemischkomponenten ($i = 1, 2, \dots, N$)	—
j, k	Gasgemischkomponenten (von 1 bis N), falls zusätzlich zu i notwendig	—
m	Masse	kg
M	molare Masse	kg/mol
n	Stoffmenge	mol
N	Anzahl der Gasgemischkomponenten	—
p	Druck	Pa
p_{vap}	Sättigungsdampfdruck	Pa
p_{dew}	Taudruck	Pa
R	molare Gaskonstante (8,314 510)	$\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$

Symbol	Größe	SI-Einheit
ρ	Dichte	kg/m ³
S	Gasgemisch (-probe)	—
σ	Volumenkonzentration	m ³ /m ³
t	Celsiustemperatur	°C
T	thermodynamische Temperatur	K
V	Volumen	m ³
V_{mol}	Molvolumen	m ³ /mol
w	Massenanteil	1
W	Gewicht (einer Druckgasflasche)	kg
x	Stoffmengenanteil	1
X_{ref}	Referenzwert einer Zustandsbedingung ($X = p, T$)	wie für X
X_{crit}	kritische Komponenteneigenschaft ($X = p, T, V, Z$)	wie für X
X_{pscrit}	pseudokritische Komponenteneigenschaft ($X = p, T$)	wie für X
Z	Realgasfaktor	1

Zusätzlich zu den vorstehend aufgeführten Symbolen werden die folgenden Symbole verwendet, um Objekte in allgemeinen mathematischen Ausdrücken zu bezeichnen.

Symbol	Größe
F	mathematische Funktion, die eine Umrechnung beschreibt
I	Eingangsgröße einer Umrechnung (Zusammensetzung)
O	Ausgangsgröße einer Umrechnung (Zusammensetzung)
Ω	Umrechnungsfaktor
K, L, P, Q, Y	allgemeine Variablen oder Größen
$\partial F / \partial P$	partielle Ableitung (Empfindlichkeitskoeffizient)
$r(P, Q)$	Korrelationskoeffizient der Größen P, Q
R	Korrelationsmatrix
$u(P)$	Standardunsicherheit der Größe P
$u^2(P)$	Varianz der Größe P
$u(P, Q)$	Kovarianz der Größen P, Q
U	Varianz/Kovarianz-Matrix
$v(P)$	relative Standardunsicherheit der Größe P

4 Allgemeine Grundlagen

4.1 Angabe der Zusammensetzung von Gasgemischen

Der allgemeine Begriff für die Menge einer Komponente in einem Gemisch ist „Gehalt“. Dieser Begriff ist nur rein deskriptiv oder für qualitative Angaben zu verwenden, da er ohne nähere Bestimmung für die quantitative Angabe der Menge einer Komponente ungeeignet ist.

Quantitative Aussagen erfordern die Angabe des Gehalts als Wert (Produkt aus Zahlenwert und Einheit) einer „Zusammensetzungsgröße“.

Für den vorliegenden Zweck werden in 2.1 sechs Zusammensetzungsgrößen definiert, unterteilt in zwei begrifflich verschiedene Familien, die so genannten Anteile und Konzentrationen. Wie der Begriff „Gehalt“ sind auch die Begriffe „Anteil“ und „Konzentration“ unvollständig und können nur bei näherer Bestimmung durch eines der Attribute „Stoffmengen-“, „Massen-“ oder „Volumen-“ für quantitative Angaben verwendet werden.

Bei quantitativen Angaben der Zusammensetzung von Gasgemischen muss die verwendete Größe, z. B. der Stoffmengenanteil oder die Massenkonzentration, in Verbindung mit dem Namen oder dem chemischen Symbol der Komponente verwendet werden.

BEISPIEL 1 Der Wasserstoffgehalt in einem Wasserstoff/Stickstoff-Gemisch, ausgedrückt als Stoffmengenanteil, beträgt $x(\text{H}_2) = 0,1$.

BEISPIEL 2 Der Schwefeldioxidgehalt in Luft bei 101,325 kPa und 25 °C, ausgedrückt als Massenkonzentration, beträgt $\beta(\text{SO}_2) = 1 \text{ mg/m}^3$.

Angaben über die Zusammensetzung von Gasgemischen beziehen sich entweder auf die Herstellung oder auf die Analyse von Gasgemischen. Im ersten Fall beschreibt die Zusammensetzung die Rezeptur für die Herstellung eines Gemischs. Dabei sind die Komponenten die Ausgangsgase, die miteinander gemischt werden. Das können technisch reine Gase oder definierte Gasgemische sein. Im zweiten Fall beschreibt die Zusammensetzung das Ergebnis einer Analyse. Dabei sind die Komponenten die Analyten (d. h. die verschiedenen chemischen Substanzen, die quantitativ bestimmt werden) und die Matrix (d. h. das Komplementärgas).

Anteile werden häufig zur Ergebnisangabe bei der Herstellung von Gasgemischen verwendet. Besteht ein Gasgemisch aus N Komponenten (1, 2, ..., N) und werden die Mengen der Komponenten im Gemisch als Stoffmengen $n_1, n_2, \dots, n_N$ quantifiziert, dann ist der Stoffmengenanteil x_i für jede Komponente i gegeben als

$$x_i = \frac{n_i}{\sum_k n_k} \quad (3)$$

Werden die Mengen der Komponenten im Gemisch als Massen $m_1, m_2, \dots, m_N$ quantifiziert, dann ist der Massenanteil w_i für jede Komponente i gegeben als

$$w_i = \frac{m_i}{\sum_k m_k} \quad (4)$$

Werden die Mengen der Komponenten im Gemisch als Volumina $V_1, V_2, \dots, V_N$ quantifiziert, dann ist der Volumenanteil ϕ_i für jede Komponente i gegeben als

$$\phi_i = \frac{V_i}{\sum_k V_k} \quad (5)$$

Konzentrationen werden häufig zur Ergebnisangabe bei der Analyse von Gasgemischen verwendet. Wird die Menge eines gegebenen Analyten i , der in der Analysenprobe gefunden wurde, als Stoffmenge n_i quantifiziert und ist V_S das Volumen der Probe bei gegebenen Bedingungen von Druck und Temperatur, so ist die Stoffmengenkonzentration c_i gegeben als

$$c_i = \frac{n_i}{V_S} \quad (6)$$

Wird die Analytmenge als Masse m_i quantifiziert, so ist die Massenkonzentration β_i gegeben als

$$\beta_i = \frac{m_i}{V_S} \quad (7)$$

Wird die Analytmenge als Volumen V_i quantifiziert, so ist die Volumenkonzentration σ_i gegeben als

$$\sigma_i = \frac{V_i}{V_S} \quad (8)$$

Bei den letzten Gleichungen ist zu beachten, dass das Probenvolumen von Druck und Temperatur abhängt. In der Gleichung für die Volumenkonzentration hängt auch das Analytvolumen von Druck und Temperatur ab. Für beide Volumina müssen die Zustandsbedingungen gleich sein.

Die Zusammensetzungsgrößen zeigen unterschiedliches Verhalten hinsichtlich der Abhängigkeit von Druck und Temperatur wie folgt:

- Stoffmengenkonzentrationen und Massenkonzentrationen hängen stark von den Zustandsbedingungen ab;
- Volumenanteile und Volumenkonzentrationen hängen schwach von den Zustandsbedingungen ab;
- Stoffmengenanteile und Massenanteile sind völlig unabhängig von den Zustandsbedingungen.

Die aufgeführten Größen sind vorrangig gedacht für die Beschreibung der Zusammensetzung von homogenen und stabilen Gasgemischen. Rein technisch betrachtet, könnten sie auch bei heterogenen und instabilen Gemischen eingesetzt werden, aber das ist nicht die bestimmungsgemäße Verwendung im Sinne dieser Internationalen Norm.

In Anbetracht der Beschränkung auf homogene Gasgemische ist die wichtigste Voraussetzung für die Anwendung dieser Norm, dass die Zustandsbedingungen (Druck und Temperatur) so beschaffen sein müssen, dass das Gemisch vollständig gasförmig ist. Diese Anforderung betrifft alle Zusammensetzungsgrößen. Zusätzlich gilt:

- a) Die Volumenkonzentration ist nur anwendbar, wenn die Zustandsbedingungen so beschaffen sind, dass die betreffende Komponente, für sich allein betrachtet vor dem Mischen, vollständig gasförmig ist.
- b) Der Volumenanteil ist nur anwendbar, wenn die Zustandsbedingungen so beschaffen sind, dass alle Komponenten, für sich allein betrachtet vor dem Mischen, vollständig gasförmig sind.

Der Ausdruck „vollständig gasförmig“ bedeutet bei einer einzelnen Komponente, dass der Druck deutlich unter dem Sättigungsdampfdruck bei der betreffenden Temperatur liegt oder dass die Temperatur deutlich über der kritischen Temperatur liegt. Für ein Gemisch lautet die entsprechende Bedingung, dass der Druck deutlich unter dem Taudruck bei der betreffenden Temperatur liegt oder dass die Temperatur deutlich über der kritischen Entmischungstemperatur liegt. Mit anderen Worten, die Zustandsbedingungen müssen mit deutlichem Abstand außerhalb der relevanten Kondensationsgebiete liegen. Methoden zur Beurteilung, ob ein Gemisch und seine Komponenten bei gegebenen Zustandsbedingungen vollständig gasförmig sind, werden in Anhang A beschrieben.

Ist die Beschränkung auf homogene und stabile Gemische nicht gewährleistet, so ist das weitere Vorgehen zwangsläufig kompliziert. Ist z. B. das Gasgemisch bei den relevanten Zustandsbedingungen nicht stabil, d. h., treten chemische Reaktionen zwischen Gemischkomponenten auf, so hängt die Zusammensetzung von der Zeit ab und muss entsprechend beschrieben werden (Alternative: entweder über die Zeit mitteln oder die Zeitabhängigkeit mit geeigneten Funktionen beschreiben). Entsprechend müssen bei inhomogenen Gasgemischen entweder räumliche Verteilungen oder räumliche Mittelwerte verwendet werden. Solche Situationen liegen jedoch außerhalb des Anwendungsbereichs dieser Internationalen Norm.

4.2 Umrechnung zwischen verschiedenen Größen

Bei der Umrechnung zwischen verschiedenen Zusammengrößen werden die grundlegenden Beziehungen — gültig sowohl für reine Gase als auch für Gasgemische — zwischen den folgenden Größen verwendet:

- Stoffmenge, n ;
- Masse, m ;
- Volumen, V .

Die Beziehung zwischen Stoffmenge und Masse ist durch Gleichung (9) gegeben:

$$n = \frac{m}{M} \quad (9)$$

Dabei ist M die Molmasse des Gases oder Gasgemischs.

Die Molmassen reiner Gase werden berechnet aus den Molmassen der Elemente (siehe 7.1.1). Die Molmassen von Gasgemischen werden aus der Zusammensetzung und den Molmassen der Komponenten berechnet (siehe 7.2.1).

Die Beziehung zwischen Stoffmenge und Volumen ist durch Gleichung (10) gegeben:

$$n = \frac{pV}{ZRT} \quad (10)$$

Dabei ist

- p der Druck des Gases oder Gasgemischs;
- T die Temperatur des Gases oder Gasgemischs;
- Z der Realgasfaktor des Gases oder Gasgemischs;
- R die molare Gaskonstante.

Gleichung (10) ist die allgemeine Zustandsgleichung für reale Gase. Der Realgasfaktor reiner Gase kann näherungsweise aus tabellierten Virialkoeffizienten berechnet werden (siehe 7.1.2). Der Realgasfaktor von Gasgemischen kann näherungsweise aus der Zusammensetzung und den Virialkoeffizienten der Komponenten berechnet werden (siehe 7.2.2).

Die Beziehung zwischen Masse und Volumen ist durch Gleichung (11) gegeben:

$$m = \rho V \quad (11)$$

Dabei ist ρ die Dichte des Gases oder Gasgemischs.

Durch Kombination der Gleichungen (9), (10) und (11) entsteht die folgende Beziehung zwischen den drei Größen M , Z und ρ :

$$\rho Z = \frac{Mp}{RT} \quad (12)$$

Somit sind nur zwei dieser Größen unabhängig. In dieser Internationalen Norm werden als Grundlage für die Umrechnung zwischen Zusammensetzungsgrößen bekannte Werte von M und Z verwendet.

Zusätzlich zu den vorausgegangenen Gleichungen werden für Umrechnungen zwischen Anteilen und Konzentrationen Beziehungen zwischen der Stoffmenge eines Gasgemischs und der Stoffmenge der Komponenten benötigt. Wenn die Probe eines Gasgemischs S aus N Komponenten, 1, 2, ..., N besteht, besteht die Stoffmenge n_S einer Gasgemischprobe aus der Summe der Stoffmengen der einzelnen Komponenten.

$$n_S = \sum_k n_k \quad (13)$$

Entsprechend ist die Masse m_S einer Gasgemischprobe gegeben durch die Summe der Massen ihrer Komponenten.

$$m_S = \sum_k m_k \quad (14)$$

Während Stoffmengen und Massen von Gemischkomponenten sich streng additiv verhalten, ist Additivität für die Volumina von Gemischkomponenten nur eine Näherung (allerdings zumeist eine sehr gute). Die Beziehung zwischen dem Volumen V_S der Gasgemischprobe und den Volumina der Komponenten bei identischen Zustandsbedingungen lautet wie folgt:

$$V_S = f_S \sum_k V_k \quad (15)$$

Dabei ist f_S der Mischungsfaktor des Gasgemischs S .

In den meisten Anwendungsfällen kann der Mischungsfaktor als eins angenommen werden (siehe 7.2.3).

4.3 Umrechnung zwischen verschiedenen Zustandsbedingungen

Wird die Zusammensetzung von Gasgemischen unter Verwendung von Größen ausgedrückt, die von Druck und Temperatur abhängen, so sind für Vergleichszwecke Referenzbedingungen erforderlich. Des Weiteren werden Verfahren zur Umrechnung einer derartigen Gemischzusammensetzung von gegebenen Zustandsbedingungen auf festgelegte Referenzbedingungen benötigt. Die grundlegende Beziehung für diese Umrechnungen ist die Beziehung zwischen dem Volumen $V(p,T)$ einer Probe eines Gases oder Gasgemischs bei gegebenen Zustandsbedingungen (p,T) und dem Volumen $V(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}})$ derselben Probe bei festgelegten Referenzbedingungen $(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}})$, die sich aus Gleichung (10) ergibt.

$$\frac{V(p,T)}{V(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}})} = \frac{p_{\text{ref}} T Z(p,T)}{p T_{\text{ref}} Z(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}})} \quad (16)$$

5 Grundlegende Verfahren

5.1 Umrechnung zwischen verschiedenen Zusammensetzungsgrößen

5.1.1 Umrechnung einzelner Analytgehalte

Die Umrechnung zwischen verschiedenen Zusammensetzungsgrößen bezieht sich auf gegebene Zustandsbedingungen (Druck p , Temperatur T) des jeweiligen Gasgemischs. Die Umrechnung erfolgt durch Multiplikation mit einem Umrechnungsfaktor. In den meisten Fällen ist das ein Quotient, der sich aus einer oder mehreren Größen der betrachteten Komponente i und des Gasgemischs S zusammensetzt. Beispielsweise werden Stoffmengenkonzentrationen c_i wie folgt in Massenanteile w_i umgerechnet:

$$w_i = \frac{RTZ_S}{pM_S} M_i c_i \quad (17)$$

Dabei ist

M_i und M_S die Molmassen der Komponente i und des Gemischs S ;

Z_S der Realgasfaktor des Gemischs S bei den gegebenen Zustandsbedingungen von p und T .

Je nachdem, welche zwei unter den drei abhängigen Größen Molmasse M , Realgasfaktor Z und Dichte ρ ausgewählt werden, können die Umrechnungsfaktoren unterschiedlich ausgedrückt werden. In dieser Internationalen Norm werden Umrechnungsfaktoren stets unter Verwendung von M und Z ausgedrückt. Werden Dichtewerte reiner Gase und Gasgemische verwendet, so müssen diese nach Gleichung (12) in Werte des Realgasfaktors umgerechnet werden.

Abschnitt 7 behandelt die Ermittlung der Eingangsdaten, die für Umrechnungen benötigt werden.

Mit Ausnahme der Umrechnung zwischen Stoffmengenanteilen und Massenanteilen ist die Umrechnung zwischen verschiedenen Zustandsgrößen nur dann zulässig, wenn die jeweiligen Zustandsbedingungen deutlich außerhalb des Kondensationsgebiets für das Gasgemisch sowie für jede der Komponenten liegen. Andernfalls sind grob falsche oder irreführende Ergebnisse zu erwarten. Ist beispielsweise eine der Komponenten bei den betrachteten Zustandsbedingungen nicht vollständig gasförmig, so kann der Gehalt dieser Komponente nicht als Volumenanteil oder Volumenkonzentration angegeben werden (siehe 2.1).

In Tabelle 1 wird ein vollständiger Satz von Umrechnungsfaktoren angegeben, ausgedrückt unter Verwendung von Molmassen und Realgasfaktoren der jeweiligen Komponente und des jeweiligen Gasgemischs. Um eine gewünschte Größe zu erhalten, wird die gegebene Größe genommen und mit dem entsprechenden Faktor aus Tabelle 1 multipliziert.

Tabelle 1 — Umrechnungsfaktoren zwischen Zusammensetzungsgrößen

Gewünschte Größe	Gegebene Größe x_i	Gegebene Größe ϕ_i	Gegebene Größe w_i	Gegebene Größe c_i	Gegebene Größe σ_i	Gegebene Größe β_i
x_i	1	$\frac{Z_S}{f_S Z_i}$	$\frac{M_S}{M_i}$	$\frac{Z_S}{\alpha}$	$\frac{Z_S}{Z_i}$	$\frac{Z_S}{\alpha M_i}$
ϕ_i	$\frac{f_S Z_i}{Z_S}$	1	$\frac{f_S M_S Z_i}{Z_S M_i}$	$\frac{f_S Z_i}{\alpha}$	f_S	$\frac{f_S Z_i}{\alpha M_i}$
w_i	$\frac{M_i}{M_S}$	$\frac{\alpha M_i}{f}$	1	$\frac{Z_S M_i}{\alpha M_S}$	$\frac{Z_S M_i}{M_S Z_i}$	$\frac{Z_S}{\alpha M_S}$

Tabelle 1 (fortgesetzt)

Gewünschte Größe	Gegebene Größe x_i	Gegebene Größe ϕ_i	Gegebene Größe w_i	Gegebene Größe c_i	Gegebene Größe σ_i	Gegebene Größe β_i
c_i	$\frac{\alpha}{Z_S}$	$\frac{\alpha}{f_S Z_i}$	$\frac{\alpha M_S}{Z_S M_i}$	1	$\frac{\alpha}{Z_i}$	$\frac{1}{M_i}$
σ_i	$\frac{Z_i}{Z_S}$	$\frac{1}{f_S}$	$\frac{M_S Z_i}{Z_S M_i}$	$\frac{Z_i}{\alpha}$	1	$\frac{Z_i}{\alpha M_i}$
β_i	$\frac{\alpha M_i}{Z_S}$	$\frac{\alpha M_i}{f_S Z_i}$	$\frac{\alpha M_S}{Z_S}$	M_i	$\frac{\alpha M_i}{Z_i}$	1
x_i ist der Stoffmengenanteil der Komponente i ϕ_i ist der Volumenanteil der Komponente i w_i ist der Massenanteil der Komponente i c_i ist die Stoffmengenkonzentration der Komponente i σ_i ist die Volumenkonzentration der Komponente i β_i ist die Massenkonzentration der Komponente i M_i ist die Molmasse der Komponente i Z_i ist der Realgasfaktor der Komponente i M_S ist die Molmasse des Gasgemischs S Z_S ist der Realgasfaktor des Gasgemischs S f_S ist der Mischungsfaktor des Gasgemischs S α ist die Abkürzung für den Quotienten $p/(RT)$						
ANMERKUNG Alle Größen beziehen sich auf die gegebenen Zustandsbedingungen (Druck p , Temperatur T) des jeweiligen Gasgemischs.						

5.1.2 Umrechnung vollständiger Zusammensetzungen

Ist für ein Gasgemisch die Zusammensetzung vollständig bekannt, d. h., ist der Gehalt aller Gemischkomponenten einschließlich des Komplementärgases bekannt, dann dürfen die Umrechnungsfaktoren weitgehend auf Komponentendaten zurückgeführt werden. Das erfolgt mit Hilfe von Summenbeziehungen, durch die einzelne oder zusammengesetzte Gemischkenngößen als Summe über Komponentendenngößen ausgedrückt werden. Beispielsweise gilt:

$$\frac{Z_S}{f_S} = \sum_k x_k Z_k \quad (18)$$

und

$$M_S = \sum_k x_k M_k \quad (19)$$

Werden Stoffmengenanteile in eine andere Zusammensetzungsgröße umgerechnet und ist die vollständige molare Zusammensetzung des betreffenden Gasgemischs bekannt, dann dürfen die Gleichungen (18) und (19) verwendet werden, um jeglichen benötigten Umrechnungsfaktor durch Komponentendaten auszudrücken: Stoffmengenanteile x_k , Molmassen M_k und Realgasfaktoren Z_k . Eine Ausnahme stellt der Mischungsfaktor f_S dar; er lässt sich nicht durch Komponentendaten ausdrücken und muss gesondert abgeschätzt werden.

In Tabelle 2 werden Umrechnungsfaktoren für die Umrechnung vollständiger Zusammensetzungen angegeben, die auf Summenbeziehungen für Gemischkenngößen beruhen. Die relevanten Summenbeziehungen sind in Anhang B angegeben. Die gegebene Zusammensetzung muss in Anteilen vorliegen. Für die gewünschte Zusammensetzung sind hingegen sowohl Anteile als auch Konzentrationen möglich. Um eine gewünschte Größe zu erhalten, wird die gegebene Größe genommen und mit dem entsprechenden Faktor aus Tabelle 2 multipliziert.

Grundsätzlich ist diese Vorgehensweise auch für die Umrechnung vollständiger Zusammensetzungen, die als Konzentrationen vorliegen, anwendbar. Der Anwendungsbereich derartiger Umrechnungen beschränkt sich jedoch auf Spezialfälle, denn Konzentrationen sind für die Angabe vollständiger Zusammensetzungen ungebräuchlich. Deshalb werden solche Umrechnungen in dieser Internationalen Norm nicht behandelt. Tabellen für die Umrechnung von Konzentrationen in Anteile sind in DIN 51896-1^[18] enthalten.

Tabelle 2 — Umrechnungsfaktoren zwischen Zusammensetzungsgrößen auf der Grundlage von Summenbeziehungen unter Verwendung von Realgasfaktoren

Gewünschte Größe	Gegebene Größe x_i	Gegebene Größe ϕ_i	Gegebene Größe w_i
x_i	1	$\frac{1/Z_i}{\sum \phi_k / Z_k}$	$\frac{1/M_i}{\sum w_k / M_k}$
ϕ_i	$\frac{Z_i}{\sum x_k Z_k}$	1	$\frac{Z_i / M_i}{\sum w_k Z_k / M_k}$
w_i	$\frac{M_i}{\sum x_k M_k}$	$\frac{M_i / Z_i}{\sum \phi_k M_k / Z_k}$	1
c_i	$\frac{\alpha}{f_S \sum x_k Z_k}$	$\frac{\alpha}{f_S Z_i}$	$\frac{\alpha / M_i}{f_S \sum w_k Z_k / M_k}$
σ_i	$\frac{Z_i}{f_S \sum x_k Z_k}$	$\frac{1}{f_S}$	$\frac{Z_i / M_i}{f_S \sum w_k Z_k / M_k}$
β_i	$\frac{\alpha M_i}{f_S \sum x_k Z_k}$	$\frac{\alpha M_i}{f_S Z_i}$	$\frac{\alpha}{f_S \sum w_k Z_k / M_k}$
$x_i (x_k)$ ist der Stoffmengenanteil der Komponente $i (k)$ $\phi_i (\phi_k)$ ist der Volumenanteil der Komponente $i (k)$ $w_i (w_k)$ ist der Massenanteil der Komponente $i (k)$ c_i ist die Stoffmengenkonzentration der Komponente i σ_i ist die Volumenkonzentration der Komponente i β_i ist die Massenkonzentration der Komponente i $M_i (M_k)$ ist die Molmasse der Komponente $i (k)$ $Z_i (Z_k)$ ist der Realgasfaktor der Komponente $i (k)$ f_S ist der Mischungsfaktor des Gasgemischs S α ist die Abkürzung für den Quotienten $p/(RT)$			
ANMERKUNG Alle Größen beziehen sich auf die gegebenen Zustandsbedingungen (Druck p , Temperatur T) des jeweiligen Gasgemischs.			

5.2 Umrechnung auf Referenzbedingungen

Von den sechs in dieser Internationalen Norm behandelten Zusammensetzungsgrößen sind nur der Stoffmengenanteil und der Massenanteil unabhängig von den Zustandsbedingungen (Druck und Temperatur) des Gasgemischs. Im Gegensatz dazu ändert sich bei dem Volumenanteil, der Stoffmengenkonzentration, der Massenkonzentration und der Volumenkonzentration der Wert bei Änderungen von Druck und Temperatur. Das Ausmaß dieser Änderungen hängt ab vom Ausmaß der Änderungen der Zustandsbedingungen, der Gasart und der jeweiligen Zusammensetzungsgröße (siehe 4.1).

Die Umrechnung dieser Größen von gegebenen Zustandsbedingungen (p, T) auf festgelegte Referenzbedingungen $(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}})$ erfolgt durch Multiplikation mit einem Umrechnungsfaktor wie folgt:

$$c_i(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}}) = \frac{p_{\text{ref}} T Z_S(p, T)}{p T_{\text{ref}} Z_S(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}})} c_i(p, T) \quad (20)$$

$$\beta_i(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}}) = \frac{p_{\text{ref}} T Z_S(p, T)}{p T_{\text{ref}} Z_S(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}})} \beta_i(p, T) \quad (21)$$

$$\sigma_i(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}}) = \frac{Z_S(p, T) Z_i(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}})}{Z_S(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}}) Z_i(p, T)} \sigma_i(p, T) \quad (22)$$

$$\phi_i(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}}) = \frac{f_S(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}}) Z_S(p, T) Z_i(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}})}{f_S(p, T) Z_S(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}}) Z_i(p, T)} \phi_i(p, T) \quad (23)$$

Alternativ zu den Gleichungen (20) bis (23) kann die Umrechnung auf andere Zustandsbedingungen auch über Stoffmengenanteile oder Massenanteile durchgeführt werden.

Die Umrechnung auf Referenzbedingungen ist nur dann zulässig, wenn die betreffenden Referenzbedingungen, Druck und Temperatur, deutlich außerhalb des Kondensationsgebiets für das Gasgemisch sowie für jede der Komponenten liegen. Andernfalls sind grob falsche oder irreführende Ergebnisse zu erwarten. Ist beispielsweise eine der Komponenten bei den betrachteten Referenzbedingungen nicht vollständig gasförmig, so kann der Gehalt dieser Komponente nicht als Volumenanteil oder Volumenkonzentration angegeben werden (siehe 2.1).

6 Praktische Umsetzung

6.1 Umrechnung zwischen Zusammensetzungsgrößen

Die Faktoren, mit denen die verschiedenen Zusammensetzungsgrößen in einander umgerechnet werden, können Daten für die betreffende Komponente i (die Molmasse M_i , der Realgasfaktor Z_i) und Daten für das gesamte Gemisch S (die Molmasse M_S , der Realgasfaktor Z_S , der Mischungsfaktor f_S) enthalten.

Sofern die benötigten Komponenten- und Gemischdaten vorhanden sind, lassen sich die in 5.1.1, Tabelle 1, angegebenen Umrechnungsfaktoren unmittelbar anwenden. In der Praxis sind die Realgasfaktoren der Komponenten häufig nicht bei den gerade anstehenden Zustandsbedingungen (Druck p , Temperatur T) verfügbar. Dann müssen diese Größen aus verfügbaren Daten, beispielsweise Virialkoeffizienten, berechnet werden (siehe 7.1).

Das Hauptproblem ist jedoch der Mangel an Daten für Gasgemische. Abgesehen von Luft, die praktisch wie ein gut charakterisiertes reines Gas behandelt werden kann, sind in der Regel weder die Molmasse noch die benötigten volumetrischen Eigenschaften (Realgasfaktor, Mischungsfaktor) bekannt, und die Messung dieser Größen ist in der Regel nicht praktikabel. Bei der Lösung dieses Problems werden in dieser Internationalen Norm die beiden folgenden Fälle unterschieden.

- a) Ist die vollständige Zusammensetzung des Gasgemischs in Stoffmengenanteilen, Massenanteilen oder Volumenanteilen vorhanden, dann können die relevanten Kombinationen von Gemischkenngrößen, die für die Umrechnung in andere Zusammensetzungsgrößen benötigt werden, nahezu vollständig durch gewichtete Mittelwerte von Komponentenkenngößen ausgedrückt werden. Auf der Grundlage dieser Summenbeziehungen kann die Umrechnung von Anteilen in andere Anteile oder in Konzentrationen mit den in Tabelle 2 angegebenen Umrechnungsfaktoren durchgeführt werden. Die Eingangsdaten, die für diese Umrechnungen benötigt werden, sind:

- Daten der vollständigen Gemischzusammensetzung;
- Daten der relevanten Komponentenkenngößen;
- ein Schätzwert für den Mischungsfaktor (nur bei Umrechnungen in Konzentrationen).

Diese Vorgehensweise ist in erster Linie anwendbar bei synthetischen Gemischen, bei denen die vollständige Zusammensetzung durch die Rezeptur der Gemischherstellung gegeben ist. Nähere Einzelheiten für Umrechnungen dieses Typs enthält 6.3.

Die Gemischkomponenten können reine Gase oder definierte Gasgemische sein. So ist es z. B. möglich, da trockene Luft ein gut charakterisiertes Gas mit bekannter Molmasse und bekanntem Realgasfaktor ist, ein Kalibriergasgemisch von SO_2 in trockener Luft der Einfachheit halber als 2-Komponenten-Gemisch statt als Gemisch von SO_2 , N_2 , O_2 , Ar, CO_2 usw. zu behandeln.

- b) Ist die Zusammensetzung des Gasgemischs nicht vollständig bekannt, so richtet sich die Vorgehensweise bei der näherungsweisen Bestimmung von Umrechnungsfaktoren nach der jeweiligen Zusammensetzungsgröße, der erforderlichen Genauigkeit der Umrechnung und der vorhandenen Information über die Zusammensetzung des Gemischs. Diese Vorgehensweise betrifft in erster Linie Gemischanalysen, bei denen im Regelfall nur ausgewählte Analyten quantitativ bestimmt werden, während die Zusammensetzung des Komplementärgases (Matrix) weniger gut bekannt ist.

Nähere Einzelheiten für Umrechnungen dieses Typs enthält 6.2.

Auch wenn die Zusammensetzung eines Gasgemischs nicht vollständig bekannt ist, lässt es sich als Gemisch aus den ausgewählten Analyten und einer halbquantitativ charakterisierten Matrix darstellen. Für Umrechnungen wird damit die Vorgehensweise nach a) anwendbar, wobei die relevanten Kenngrößen der Matrix mit entsprechender Unsicherheit aus den vorhandenen Informationen abgeschätzt werden.

Verfahren zur Umrechnung zwischen verschiedenen Zustandsbedingungen werden in 6.4 behandelt.

6.2 Umrechnung einzelner Analytgehalte

Besteht die Aufgabe darin, einzelne Analytgehalte umzurechnen, und sind Daten für die vollständige Gemischzusammensetzung nicht vorhanden, so ist der entsprechende Umrechnungsfaktor aus Tabelle 1 zu wählen. Als nächster Schritt wird für die Bestimmungsstücke des Umrechnungsfaktors geprüft, ob entsprechende Daten vorhanden sind oder aus vorhandenen Informationen wie folgt abgeschätzt werden können.

- Für M_i , die Molmasse des betreffenden Analyten, ist der Wert aus einer anerkannten Publikation zu verwenden oder nach 7.1.1 zu berechnen.
- Für Z_i , den Realgasfaktor des betreffenden Analyten bei den betreffenden Zustandsbedingungen (p, T), ist in der Regel kein Wert in publizierten Datensammlungen zu finden. Daher ist der Wert aus tabellierten Virialkoeffizienten nach 7.1.2 zu berechnen.