

7. Chemisches Rechnen

7.2 Umrechnung der Messwerte (pro Liter) in die Konzentration in der Umweltprobe (pro kg)

Dana Zimmer, Rhena Schumann

Am ICP-OES wird die elementtypische Lichtintensität gemessen und über die im Vorfeld gemessene, die im ICP-OES berechnete Kalibrationsgerade in P-Konzentrationen pro Liter umgerechnet und so ausgegeben. Auch die Molybdänblaumethode misst immer eine Konzentration in wässrigem Milieu. Normalerweise werden die Konzentrationen in μg oder in mg pro Liter angegeben. In der folgenden Beispielrechnung wird von mg L^{-1} in mg kg^{-1} umgerechnet. Für andere Einheiten ist analog zu verfahren. Es sind in allen Fällen auch die Einheiten der Einwaage und des Extraktvolumens zu beachten. Vor der Umrechnung der P-Konzentrationen der Proben von pro Liter in pro kg ist der Mittelwerte der Blindwerte von den Probenkonzentrationen zu subtrahieren.

Beim Extraktvolumen handelt es sich entweder um das zugegebene Extraktionsmittelvolumen, wenn nach der Extraktion nicht auf ein definiertes Volumen aufgefüllt wurde oder um das Volumen, auf welches nach der Extraktion die Probe aufgefüllt wurde. Es handelt sich nicht um das Teilvolumen, welches zur Messung des Analyten abgenommen wurde.

Auflistung der gegebenen Größen und der gesuchten Größe

Beispiel

gegeben:

Aufschluss einer Bodenprobe mit Königswasser

Einwaage: 0,500 g

Extraktionsmittel: 6 ml konz. HCl + 2 ml konz. HNO₃

Extraktvolumen: 100 ml

Konzentration des Analyten in mg P L^{-1} Bsp. 2,635 mg P L^{-1}

gesucht:

Konzentration des Analyten in $\text{mg P pro kg Material}$

Lösungsweg zum Finden der Gleichung

1. Frage: Welche Menge des Analyten befindet sich im Extraktvolumen?

Dies errechnet sich mittels einer Verhältnisgleichung aus der Konzentration des Analyten im Extrakt und dem Extraktvolumen. Da das Extraktvolumen in ml angegeben ist, wird auch für die Konzentration in ml gerechnet.

gegeben:

Konzentration: $x \text{ mg P pro } 10^3 \text{ ml}$ Bsp.: $2,635 \text{ mg P } 10^{-3} \text{ ml}^{-1}$
 Extraktvolumen: $a \text{ ml}$ 100 ml

gesucht:

mg P pro Extraktvolumen: y_1

Verhältnisgleichung:

$$\frac{x \text{ mg}}{10^3 \text{ ml}} = \frac{y_1 \text{ mg}}{a \text{ ml}} \qquad \text{Bsp.} \quad \frac{2,635 \text{ mg P}}{10^3 \text{ ml}} = \frac{y_1 \text{ mg}}{100 \text{ ml}}$$

Umstellen der Gleichung nach $y_1 \text{ mg}$ ergibt:

$$\frac{x \text{ mg} \times a \text{ ml}}{10^3 \text{ ml}} = y_1 \text{ mg} \qquad \text{Bsp.} \quad \frac{2,635 \text{ mg P} \times 100 \text{ ml}}{10^3 \text{ ml}} = 0,2635 \text{ mg P}$$

In unserem Beispiel befinden sich also 0,2635 mg P in 100 ml. Da sich im Extraktvolumen (100 ml) das gesamte P aus dem eingewogenen Material befindet, entspricht das P im Extraktvolumen dem P in der Einwaage. Es befinden sich demnach 0,2635 mg P in 0,5 g Boden.

2. Frage: Wenn sich $y_1 \text{ mg P}$ in der eingewogenen Menge Materials befinden, wie viel mg P sind dann in 1 kg des Materials?

Die wird wieder mittels Verhältnisgleichung errechnet. Dabei ist zu beachten, dass die Einwaage in g und der Massenbezug des Materials in kg erfolgt. Daher wird für das Material mit 10^3 g (statt 1 kg) gerechnet.

gegeben:

$y_1 \text{ mg P in } b \text{ g Einwaage}$ Bsp.: $0,2635 \text{ mg P in } 0,5 \text{ g Boden}$

gesucht:

$y_2 \text{ mg P in } 10^3 \text{ g Material}$

Verhältnisgleichung:

$$\frac{y_1 \text{ mg}}{b \text{ g Einwaage}} = \frac{y_2 \text{ mg}}{10^3 \text{ g Material}} \quad \text{Bsp.} \quad \frac{0,2635 \text{ mg P}}{0,5 \text{ g Einwaage}} = \frac{y_2 \text{ mg}}{10^3 \text{ g Boden}}$$

Umstellen der Gleichung nach y_2 mg ergibt:

$$\frac{10^3 \text{ g} \times y_1 \text{ mg}}{b \text{ g Einwaage}} = y_2 \text{ mg} \quad \text{Bsp.} \quad \frac{10^3 \text{ g} \times 0,2635 \text{ mg P}}{0,5 \text{ g Einwaage}} = 527 \text{ mg P}$$

In unserem Beispiel hat der Boden eine P-Konzentration von 527 mg kg⁻¹.

Um nicht immer derart schrittweise zu rechnen, kann die nach y_1 umgestellte Formel auch in die nach y_2 umgestellte anstelle von y_1 eingesetzt werden.

Die Formel $\frac{x \text{ mg} \times a \text{ ml}}{10^3 \text{ ml}} = y_1 \text{ mg}$

wird also in die Formel $\frac{10^3 \text{ g} \times y_1 \text{ mg}}{b \text{ g Einwaage}} = y_2 \text{ mg}$

anstelle von y_1 eingesetzt. Damit ergibt sich folgende Formel:

$$\frac{10^3 \text{ g} \times x \text{ mg} \times a \text{ ml Extraktvolumen}}{10^3 \text{ ml} \times b \text{ g Einwaage}} = y_2 \text{ mg P kg}^{-1} \text{ Material}$$

Die beiden 10³ kürzen sich weg. Wird also die P-Konzentration in (mg) pro Liter gemessen, die Einwaage in g eingesetzt und das Extraktvolumen in ml, so ergibt sich die P-Konzentration in der Umweltprobe in (mg) pro kg Material nach folgender Formel:

$$\frac{x \text{ mg} \times a \text{ ml Extraktvolumen}}{b \text{ g Einwaage}} = y_2 \text{ mg P kg}^{-1} \text{ Material}$$

Für unser Beispiel ergibt sich daher gekürzt:

$$\frac{2,635 \text{ mg P} \times 100 \text{ ml Extraktvolumen}}{0,5 \text{ g Boden}} = 527 \text{ mg P kg}^{-1} \text{ Boden}$$

Wurde der Extrakt verdünnt, muss natürlich der sogenannte Verdünnungsfaktor (VF) berücksichtigt werden. Dieser wird entsprechend als Multiplikator in die Formel eingesetzt, da ohne Verdünnung eine entsprechend höhere Konzentration im Extrakt gemessen worden wäre.

$$\frac{x \text{ mg} \times a \text{ ml Extraktvolumen} \times VF}{b \text{ g Einwaage}} = y_2 \text{ mg P kg}^{-1} \text{ Material}$$

Wäre in unserem Beispiel ein Teil Bodenextrakt mit einem Teil Wasser verdünnt (= gemischt) worden, wäre der VF 2; bei einem Teil Bodenextrakt und zwei Teilen Wasser entsprechend VF 3. Die P-Konzentration würde statt 527 mg P bei VF 2 also 1054 mg P und 1581 mg pro kg Boden betragen. Näheres zu Verdünnungen und Mischungen findet sich in Kapitel 7.1 Verdünnungen und Mischungen.

In einer Exceltabelle könnte die Spaltenabfolge wie folgt aussehen. Wurden weitere Elemente am ICP-OES bestimmt, werden die entsprechenden Parameter für die anderen Elemente entsprechend zwischen den einzelnen Spalten eingefügt.

Tabelle 7.2-1 Abfolge der Spalten zur Berechnung der P-Konzentration in einer Umweltprobe aus der OCP-OES Messung der P-Konzentration

Spalte	Inhalt der Spalte
A	Identifikation(snummer) der Probe
B	Messwert vom ICP-OES, z. B. mg P pro Liter
C	Extraktvolumen in ml
D	Einwaage in g
E	Verdünnungsfaktor
F	Mittelwert der Blindwerte, z. B. in mg P pro Liter
G	Messwert minus Mittelwert der Blindwerte
H	Berechnung der P-Konzentration in der Umweltprobe mit folgender Formel: Spalte G * Spalte C * Spalte E / Spalte D
I	bei Bedarf weitere Umrechnung der P-Konzentration, z. B. von mg pro kg in g pro kg oder mol pro kg

For citation: Zimmer D, Schumann R (*year of download*) Kapitel 7.2 Umrechnung der Messwerte (pro Liter) in die Konzentration in der Umweltprobe (pro kg) (Version 1.0) in Zimmer D, Baumann K, Berthold M, Schumann R: Handbuch zur Auswahl der Aufschluss- und Bestimmungsverfahren für Gesamtphosphor in Umweltproben. DOI: 10.12754/misc-2018-0001