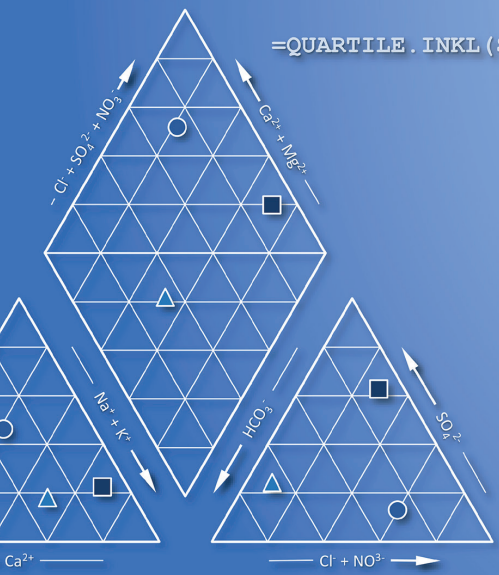
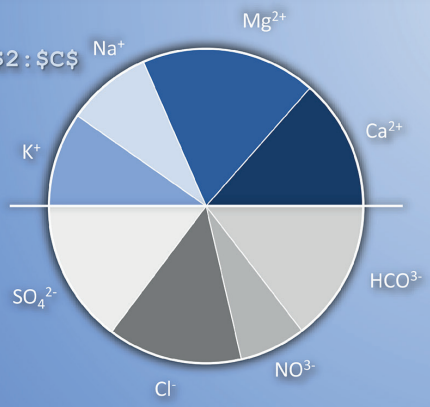
gwf edition

Wilhelm G. Coldewey, Dominik Wesche

Computergestützte Auswertung und Darstellung von Wasseranalysen




```
=QUARTILE.INKL($C$2:$C$
```



$$c(\mathrm{X}) = \frac{z \cdot \beta(\mathrm{X})}{M(\mathrm{X})}$$

$$\beta(\mathrm{X}) = c(\mathrm{X}) \cdot M(X)$$

```
=WENN(ISTZAHL('Analysen_mmol_l'!C2);
'Analysen_mmol_l'!C2/
'Analysen_mmol_l'!K2;"")
```

Vulkan Verlag

Prof. Dr. Wilhelm G. Coldewey, Dr.-Ing. Dominik Wesche

Computergestützte Auswertung und Darstellung von Wasseranalysen

Vulkan Verlag

Vorwort

Die Sammlung, Verwaltung und Aufbereitung der im Gelände und Labor untersuchten Messgrößen stellt das Handwerkszeug von Gutachtern und Sachverständigen im Bereich der Natur, Umwelt- und Ingenieurwissenschaften dar. Insbesondere die Darstellung umfangreicher Datensätze in Diagrammen ist ein unabdingbares Werkzeug in der Vermittlung von Untersuchungsergebnissen und komplexen chemischen Zusammenhängen.

In jüngster Zeit sind im deutschsprachigen Raum Arbeiten entstanden, die sich sowohl mit den hydrogeologischen Gelände- und Kartiermethoden (Coldewey & Göbel 2015) als auch der numerischen Modellierung aquatischer Systeme mit dem Computerprogramm PhreeqC (Merkel & Planer-Friedrich 2008, Wisotzky et al. 2017) befassen. Für die Erstellung von komplexen Diagrammen, z. B. Dreieck- oder Piper-Diagrammen, sind entweder spezielle Softwareprogramme oder Programmierkenntnis notwendig. Für die Bearbeitung und Auswertung hydrochemischer Analysen existieren heute noch keine Office-Anwendungen.

Im vorliegenden Buch wird aufgezeigt, wie sich die im Labor ermittelten Analysenwerte mit Hilfe des Programms Microsoft Excel™ auswerten und in unterschiedlichen Darstellungsweisen aussagekräftig präsentieren lassen[1]. Da hierbei die praktische Anwendung im Vordergrund steht, wird auf einen vertieften Einstieg in theoretischen Grundlagen der Chemie verzichtet. Das Anliegen dieses Buches ist es, dem Anwender mittels einfacher und nachvollziehbarer Anleitungen praktische Methoden für die selbstständige Bearbeitung von Wasseranalysen nahezubringen.

[1] Alle Beispiele wurden mit Microsoft® Excel® für Office 365 MSO (Version 16.0.11328.20156; Oktober 2018) und Microsoft® Windows 10 Home®-Betriebssystem erstellt. Abhängig von der verwendeten Version bzw. anderer Betriebssysteme können ggf. Abweichungen der Programmoberfläche auftreten, die sich der Kenntnis der Autoren entziehen.

Bedanken möchten wir uns für die Korrekturen des Textes und Anregungen bei Dipl.-Geol. Melanie Schwermann, M.Sc. Iris Hollenbeck und Dana Looschelders. Für die technische Betreuung bedanken wir uns bei Nico Hülsdau von der Vulkan-Verlag GmbH.

Trotz sorgfältiger Erarbeitung des Übungsdatensatzes und der Auswertungsmethoden sind Fehler nicht immer vermeidbar. Für die korrekte Umsetzung der gezeigten Verfahren und die Verwendung für eigene Wasseranalysen übernehmen weder der Verlag noch die Autoren Verantwortung. Für konstruktive Hinweise sind die Autoren dankbar.

Wilhelm G. Coldewey, Dominik Wesche

Inhaltsverzeichnis

1. Eigenschaften des Wassers 8

2. Chemische und physikalischchemische Grundlagen 9

2.1 Analysenumfang 9

2.1.1 Allgemeine Untersuchungen der Grundwasserbeschaffenheit 10

2.1.2 Untersuchungen bei Baumaßnahmen 11

2.2 Chemische Konzentrationsangaben 11

2.2.1 Stoffmenge 12

2.2.2 Stoffmengenkonzentration 13

2.2.3 Molare Masse 13

2.2.4 Massenkonzentration 14

2.2.5 Molalität 15

2.2.6 Volumenkonzentration 16

2.2.7 Volumenanteil 16

2.2.8 Äquivalentteilchen 17

2.2.9 Äquivalentkonzentration 17

2.2.10 Stoffmengenanteile der Äquivalente 18

2.2.11 Massenanteil 19

2.2.12 Wasserhärte 25

2.2.13 Angloamerikanische Einheiten 29

2.2.14 Ältere Einheiten 31

2.3 Physikalisch-chemische Analysemethoden 31

2.3.1 Elektrische Leitfähigkeit 31

2.3.2 Spektraler Absorptionskoeffizient 33

2.3.3 pH-Wert 34

3. Auswertung hydrochemischer Daten 37

3.1 Organisation der Wasseranalysen 37

3.2 Umrechnung von Massenkonzentrationen in Äquivalentkonzentrationen 57

3.3 Umrechnung von Analysenwerten in Stoffmengenanteile der Äquivalente 65

3.4 Ionenbilanz 71

3.5 Typisierung von Wässern 78

3.6 Auswertung und Darstellung von Untersuchungsergebnissen 81

3.6.1 Einzeldiagramme 81

3.6.1.1 Kreisdiagramm 82

3.6.1.2 Doppeltes Säulendiagramm 89

3.6.2 Sammeldiagramme 94

3.6.2.1 Säulendiagramm mehrerer Analysen 94

3.6.2.2 Viereckdiagramme 103

3.6.2.3 SCHOELLER-Diagramm 110

3.6.2.4 Boxplot-Diagramm 114

3.6.2.5 Dreieckdiagramme 124

3.6.2.6 PIPER-Diagramm 144

3.7 Aggressivität von Wässern und Böden 160

3.7.1 Betonaggressivität 160

3.7.2 Stahlaggressivität 177

4. Literaturverzeichnis 203

4.1 Monographien 203

4.2 Normen und Regelwerke 207

5. Stichwortverzeichnis 211

Einheiten und Größen

b(X)	Molalität (mol/kg)
c(X)	Stoffmengenkonzentration (mol/l)
$c\left(\frac{1}{z}X\right)$	Äquivalentkonzentration (mol/l)
lm	Lumen
M(X)	molare Masse (kg/mol)
m(X)	Masse (kg)
n(X)	Stoffmenge (mol)
v(X)	Volumen (l bzw. m³)
w(X)	Massenanteil (1)
$\chi\left(\frac{1}{z}X\right)$	Stoffmengenanteil der Äquivalente (%)
z(X)	stöchiometrische Wertigkeit (1)
β(X)	Massenkonzentration (kg/l)
σ(X)	Volumenkonzentration (1)
φ(X)	Volumenanteil (1)
°d	Grad deutscher Härte
°e	Grad englischer Härte
°f	Grad französischer Härte
°a	Grad amerikanischer Härte

1. Eigenschaften des Wassers

Wasser ist die chemische Verbindung aus den Elementen Sauerstoff und Wasserstoff. Wasser ist die einzige chemische Verbindung auf der Erde, die in flüssiger, fester und gasförmiger Phase vorkommt. Wasser stellt die Grundlage des Lebens auf der Erde dar, kommt allerdings selten rein vor, sondern enthält zahlreiche gelöste Anteile von Salzen, Gasen und organischen Verbindungen. Hinsichtlich seiner Eigenschaften weicht es aufgrund seiner molekularen Struktur von anderen verwandten Stoffen ab, so z. B. durch sein gutes Lösungsvermögen, seine hohe Oberflächenspannung, seine Dichteanomalie sowie seine hohe spezifische Wärmekapazität.

Da alle Lebewesen und Pflanzen aus Wasser bestehen, ist dieses lebensnotwendig. Somit spielt die Versorgung mit Trink- und Brauchwasser eine immense Rolle für die menschliche Gesellschaft, aber auch in der Landwirtschaft und der Industrie ist Wasser unverzichtbar. Aufgrund seines guten Lösungsvermögens sind viele Stoffe im Wasser enthalten. Zur Beurteilung der Nutzung unterscheidet man zwischen Trinkwasser, Mineralwasser, Heilwasser und Tafelwasser, im industriellen Bereich zwischen Prozesswasser, Nutzwasser, entmineralisiertem Wasser sowie auch Abwasser. Die Unterscheidung dieser verschiedenen Wassertypen aufgrund ihrer Inhaltsstoffe ist im Hinblick auf den Nutzen oder den Schaden daher unverzichtbar. Hierzu gilt es Analysen der verschiedenen Wassertypen zu erstellen und eine Kategorisierung aufgrund dieser Stoffe vorzunehmen. Diese Kategorisierung kann durch Auswertung der Ioneninhalte aber auch hinsichtlich von Grenz- und Richtwerten erfolgen. Im folgenden soll diese Auswertung der Analysen und die Bewertung nach den o. g. Kriterien mittels moderner Software dargestellt werden.

2. Chemische und physikalisch-chemische Grundlagen

2.1 Analysenumfang

Der Umfang einer Wasseranalyse richtet sich immer nach der Zielsetzung, mit der die Probe entnommen wurde. Auch die Grenzwerte sollten hierbei in Abhängigkeit der jeweiligen Fragestellung betrachtet und den jeweils aktuellen Richtlinien entnommen werden (siehe Anhang 2 bis Anhang 4).

Die hier vorgestellten Umrechnungen und graphischen Auswertemethoden können z. B. für folgende Zielsetzungen angewendet werden:

- Allgemeine Untersuchungen der Grundwasserbeschaffenheit,
- Untersuchungen bei Baumaßnahmen,
- Trinkwasseruntersuchungen,
- Mineralwasseruntersuchungen,
- Heilwasseruntersuchungen.

Im vorliegenden Buch wird insbesondere auf die ersten beiden Punkte eingegangen, wobei die Untersuchung von anorganischen chemischen Wasserinhaltsstoffen im Vordergrund steht. Eine Anwendung der Darstellungen auf organische bzw. mikrobielle Inhaltsstoffe ist prinzipiell möglich, wird aber hier nicht behandelt.

Regeln für die Entnahme von Wasserproben finden sich in der DIN EN ISO 22475-1, DIN 4030-2 sowie im DVGW-Merkblatt 112 (2001). Die Anzahl und Tiefe der zu entnehmenden Wasserproben sind von der geologischen und hydrogeologischen Situation sowie den weiteren lokalen Gegebenheiten (z. B. Nähe von Industrie, Deponien oder Altlasten) abhängig (Prinz & Strauss 2018).

2.1.1 Allgemeine Untersuchungen der Grundwasserbeschaffenheit

Für allgemeine ingenieurtechnische und geotechnische Fragestellungen sollte für die Beurteilung oder Kontrolle der Grundwasserbeschaffenheit ein Mindestumfang an Parametern untersucht werden. Neben den allgemeinen Identifizierungs- und Ordnungsangaben werden folgende Parameter für Wasseranalysen empfohlen (DVWK 1990):

- Sensorische Merkmale: Färbung, Trübung, Bodensatz, Geruch (ggf. Geschmack). Die Bewertung wird nach DIN 38402 - Teil 1 in die drei Gruppen 1.) nicht wahrnehmbar, 2.) wahrnehmbar und 3.) stark wahrnehmbar klassifiziert.

- Physikalische Messungen: Temperatur, pH-Wert, elektr. Leitfähigkeit, Absorptionskoeffizienten bei 254 nm/m und 436 nm/m.

- Laboruntersuchungen:

  Säurekapazität bis pH 4,3; Säurekapazität bis pH 8,2; Basekapazität bis pH 8,2; Gesamthärte; Karbonathärte; Kieselsäure; Oxidierbarkeit $Mn^{VII} \rightarrow Mn^{II}$;

  Gase: Sauerstoff, freie Kohlensäure, aggressive Kohlensäure;

  Kationen: Natrium (Na^{2+}), Kalium (K^{+}), Ammonium (NH_4^{+}), Calcium (Ca^{2+}), Magnesium (Mg^{2+}), gelöstes Gesamteisen (Fe^{2+}, Fe^{3+}), gelöstes Mangan (Mn^{2+});

  Anionen: Hydrogenkarbonat (HCO_3^{-}), Chlorid (Cl^{-}), Nitrat (NO_3^{-}), Nitrit (NO_2^{-}), Sulfat (SO_4^{2-}), Gesamtphosphor (PO_4^{3-}).

2.1.2 Untersuchungen bei Baumaßnahmen

Baustoffe wie Beton und Stahl können durch bestimmte Wasserinhaltsstoffe angegriffen werden. Daher sind bei Bauten, die in dauerndem oder zeitweiligem Kontakt mit Grundwasser stehen die sog. beton- bzw. stahlaggressiven Eigenschaften des Grundwassers zu untersuchen. Diese sind auch bereits beim Anmischen von Beton, als sog. Betonanmachwasser, zu beachten.

Nach DIN 4030-2 (2008) sind für die Beurteilung der betonangreifenden Eigenschaften von Wässern folgende Parameter zu betrachten:

Geruch, pH-Wert, Kaliumpermanganat-Verbrauch ($KMnO_4$), Ammonium, Magnesium, Chlorid, Sulfat, Sulfidschwefel, kalkaggressive Kohlensäure, Gesamthärte, Karbonathärte, Nichtkarbonathärte.

Die Untersuchungen auf Beton- und Stahlaggressivität werden ausführlich in Kapitel 3.7 erläutert.

2.2 Chemische Konzentrationsangaben

Für den chemischen Anwendungsbereich sind die in DIN 32625 (1989) genannten chemischen Größen und Einheiten maßgeblich. Die SI-Basisgröße Stoffmenge wird in dieser Norm definiert.

Die Bezugsgröße bei Wasseranalysen ist der Liter. Hiervon abweichend werden Heilwasseranalysen auf die Masseneinheit Kilogramm bezogen (Molalität b(X)), da diese Angabe weder druck- noch temperaturabhängig ist und daher auch bei Entgasungsvorgängen anwendbar ist.

In der Regel werden Konzentrationen in Wasseranalysen als Massenkonzentrationen mit den Einheiten z. B. g/l, mg/l, µg/l sowie als Stoffmengenkonzentrationen mit den Einheiten z. B. mol/l, mmol/l (entspricht mol/m³) angegeben.

Für die vergleichende Betrachtung von Wasseranalysen sind die Angaben der Äquivalentkonzentrationen in mol/l, mmol/l oder als Stoffmengenanteile der Äquivalente in % erforderlich. Das Verhältnis der Äquivalente der Ionen zueinander ist bestimmend für die chemischen Reaktionen in wässrigen Lösung.

2.2.1 Stoffmenge

Mit der Basisgröße Stoffmenge $n(X)$ wird die Quantität einer Stoffportion X oder der Portion eines ihrer Bestandteile auf der Grundlage der Anzahl der darin enthaltenen Teilchen bestimmter Art angegeben. Die SI-Basiseinheit der Stoffmenge ist das Mol (Einheitenzeichen: mol).

Das Mol ist die Stoffmenge eines Systems, das aus ebenso viel Einzelteilchen (Atome, Moleküle u. dgl.) besteht, wie Atome in 12 Gramm des Kohlenstoffnuklids ^{12}C enthalten sind.

Die Teilchenzahl, die ein Mol eines jeden Stoffs enthält, entspricht der Avogadro-Konstanten N_A = 6,022 x 10^{23} mol^{-1} (Gl. 1).

Es gilt:

$$N_A = \frac{N(X)}{n(X)} = 6{,}022 \cdot 10^{23}\,\text{mol}^{-1} \quad \text{bzw.} \qquad \text{Gl. 1}$$

$$n(X) = \frac{N(X)}{N_A}$$

wobei:

$n(X)$ = Stoffmenge des Stoffes X (mol),

N_A = Avogadro-Konstante (1/mol),

$N(X)$ = Teilchenzahl (1).

2.2.2 Stoffmengenkonzentration

Die Stoffmengenkonzentration $c(X)$ eines gelösten Stoffes X ist der Quotient aus der Stoffmenge $n(X)$ der gelösten Stoffportion und dem Volumen der Lösung $V(L)$:

$$c(X) = \frac{n(X)}{V(L)} \qquad \text{Gl. 2}$$

wobei:

$c(X)$ = Stoffmengenkonzentration des Stoffes X (mol/m³ bzw. mol/l),

$n(X)$ = Stoffmenge der gelösten Stoffportion X (mol),

$V(L)$ = Volumen der Lösung (m³ bzw. l).

Die SI-Einheit der Stoffmengenkonzentration $c(X)$ ist mol/m³. Üblicherweise wird aber mol/l bzw. mmol/l (entspricht mol/m³) verwendet.

2.2.3 Molare Masse

Die molare Masse $M(X)$ eines Stoffes X ist der Quotient aus seiner Masse $m(X)$ und seiner Stoffmenge $n(X)$:

$$M(\mathrm{X}) = \frac{m(\mathrm{X})}{n(\mathrm{X})} \qquad \text{Gl. 3}$$

wobei:

$M(\mathrm{X})$ = Molare Masse des Stoffes X (g/mol),

$m(\mathrm{X})$ = Masse des Stoffes X (g),

$n(\mathrm{X})$ = Stoffmenge des Stoffes X (mol).

2.2.4 Massenkonzentration

Die Massenkonzentration $\beta(\mathrm{X})$ (griech. *beta)* eines Stoffes X in einem Stoffgemisch ist der Quotient aus seiner Masse $m(\mathrm{X})$ und dem Volumen V des Stoffgemisches (DIN 1310:1984):

$$\beta(\mathrm{X}) = \frac{m(\mathrm{X})}{V} \qquad \text{Gl. 4}$$

wobei:

$\beta(\mathrm{X})$ = Massenkonzentration des Stoffes X (g/l),

$m(\mathrm{X})$ = Masse des Stoffes X (g),

V = Volumen des Stoffgemisches (l).

Die Massenkonzentation ist meist die Konzentrationsangabe, in der Labore ihre Untersuchungsergebnisse übermitteln.

Mit Hilfe der Massenkonzentration $\beta(\mathrm{X})$ und der molaren Masse $M(\mathrm{X})$ lässt sich die Stoffmengenkonzentration $c(\mathrm{x})$ berechnen, die angibt, wie viel Mol des Stoffes X der analytisch bestimmten Masse entsprechen.

$$c(\mathrm{X}) = \frac{\beta(\mathrm{X})}{M(\mathrm{X})} \qquad \text{Gl. 5}$$

wobei:

$c(\mathrm{X})$ = Stoffmengenkonzentration des Stoffes X (mol/l),

$\beta(\mathrm{X})$ = Massenkonzentration des Stoffes X (g/l),

$M(\mathrm{X})$ = Molare Masse des Stoffes X (g/mol).

Für die Bewertung von tatsächlich in einer wässrigen Lösung stattfindenden chemischen Reaktionen ist die auf die Wertigkeit der Ionen bezogene Stoffmengenangabe von größerer Aussagekraft. Diese als Äquivalentteilchen bezeichneten Reaktionsgrößen werden nachfolgend in Kapitel 2.2.8, die Berechnung der Äquivalentkonzentration in Kapitel 2.2.9 erläutert.

2.2.5 Molalität

Die Molalität $b(\mathrm{X})$ eines gelösten Stoffes X ist der Quotient aus seiner Stoffmenge $n(\mathrm{X})$ und der Masse $m(\mathrm{LM})$ des Lösungsmittels:

$$b(\mathrm{X}) = \frac{n(\mathrm{X})}{m(\mathrm{LM})} \qquad \text{Gl. 6}$$

wobei:

$b(\mathrm{X})$ = Molalität des Stoffes X (mol/kg),

$n(\mathrm{X})$ = Stoffmenge des Stoffes X (mol),

$m(\mathrm{LM})$ = Masse des Lösungsmittels (kg).

Die SI-Einheit der Molalität ist mol/kg.

2.2.6 Volumenkonzentration

Die Volumenkonzentration σ(X) (griech. sigma) eines Stoffes X in einem Stoffgemisch ist der Quotient aus seinem Volumen *V*(X) und dem Volumen V des Stoffgemisches:

$$\sigma(\mathrm{X}) = \frac{V(\mathrm{X})}{V} \qquad \text{Gl. 7}$$

wobei:

σ(X) = Volumenkonzentration des Stoffes X (1),

V(X) = Volumen des Stoffes X (l),

V = Volumen des Stoffgemisches (l).

2.2.7 Volumenanteil

Der Volumenanteil *φ*(X) (griech. phi) eines Stoffes X in einem Gemisch aus den Stoffen X und Y ist der Quotient aus seinem Volumen *V*(X) und der Summe der Volumina *V*(X) und *V*(Y) vor dem Mischvorgang (Wilhelm 2008, DIN 1310:1984):

$$\varphi(\mathrm{X}) = \frac{V(\mathrm{X})}{V(\mathrm{X}) + V(\mathrm{Y})} \qquad \text{Gl. 8}$$

wobei:

φ(X) = Volumenanteil des Stoffes X (1),

V(X) = Volumen des Stoffes X (l),

V(Y) = Volumen des Stoffes Y (l).

2.2.8 Äquivalentteilchen

Das Äquivalent $\frac{1}{z}X$ ist der gedachte Bruchteil $\frac{1}{z}$ eines Teilchens X im Sinne der Mol-Definition. Die stöchiometrische Wertigkeit *z* ergibt sich beim Ionenäquivalent durch die Ladungszahl des Ions (beim Neutralisationsäquivalent durch die Anzahl der H^+-Ionen oder OH^--Ionen), die es bindet oder ersetzt. Beim Redox-Äquivalent wird die stöchiometrische Wertigkeit durch die Anzahl der pro Teilchen abgegebenen oder aufgenommenen Elektronen bestimmt (Wilhelm 2008).

Unter der stöchiometrischen Wertigkeit bzw. der sog. Valenz eines Ions wird die Anzahl der elektrischen Ladungen verstanden. So besitzt beispielsweise das Calcium-Ion Ca^{2+} eine Wertigkeit z = 2 und ist somit zweiwertig. In diesem Fall ist die Äquivalentkonzentration doppelt so groß wie die Stoffmengenkonzentration. Für den Fall eines einwertigen Ions, wie z. B. Kalium (K^+) sind Stoffmengen- und Äquivalentkonzentrationen numerisch gleich.

2.2.9 Äquivalentkonzentration

Die Äquivalentkonzentration $c\left(\frac{1}{z}X\right)$ eines gelösten Stoffes X ist der Quotient aus der Stoffmenge $n\left(\frac{1}{z}X\right)$ des gelösten Äquivalents und dem entsprechenden Lösungsvolumen $V(L)$:

$$c\left(\frac{1}{z}X\right) = \frac{n\left(\frac{1}{z}X\right)}{V(L)} \qquad \text{Gl. 9}$$

wobei:

$c\left(\frac{1}{z}X\right)$ = Äquivalentkonzentration des gelösten Stoffes (mol/m³ bzw. mol/l),

$n\left(\frac{1}{z}X\right)$ = Stoffmenge des gelösten Äquivalents (mol),

$V(\mathrm{L})$ = Volumen der Lösung (m^3 bzw. l).

Die SI-Einheit der Äquivalentkonzentration $c\left(\frac{1}{z}\mathrm{X}\right)$ ist mol/m^3, üblicherweise wird mol/l bzw. mmol/l angegeben.

Stoffmengenkonzentration $c(\mathrm{X})$ und Äquivalentkonzentration $c\left(\frac{1}{z}\mathrm{X}\right)$ lassen sich nach folgender Gleichung umrechnen:

$$c\left(\frac{1}{z}\mathrm{X}\right) = z \cdot c(\mathrm{X}) = \frac{z \cdot \beta(\mathrm{X})}{M(\mathrm{X})} \qquad \text{Gl. 10}$$

wobei:

$c\left(\frac{1}{z}\mathrm{X}\right)$ = Äquivalentkonzentration des Stoffes X (mol/m^3),

z = Äquivalentzahl, Wertigkeit eines Ions (1),

$c(\mathrm{X})$ = Stoffmengenkonzentration des Stoffes X (mol/l),

$\beta(\mathrm{X})$ = Massenkonzentration des Stoffes X (g/l),

$M(\mathrm{X})$ = Molare Masse des Stoffes X (g/mol).

Die Äquivalentkonzentration eines Stoffes ist die bestimmende Größe bei der Auswertung von hydrochemischen Zusammensetzungen von Wasserproben sowie bei der Erstellung von Ionenbilanzen (Kapitel 3.4).

2.2.10 Stoffmengenanteile der Äquivalente

Der Stoffmengenanteil $\chi(\mathrm{X})$ (griech. chi) der Äquivalente $\chi\left(\frac{1}{z}\mathrm{X}\right)$ eines Stoffes X in einem Vielstoffgemisch ist der Quotient aus seiner Äquivalentkonzentration $c\left(\frac{1}{z}\mathrm{X}\right)$ und der Summe aller Äquivalentkonzentrationen multipliziert mit 100 % (Gl. 11):

$$\chi\left(\frac{1}{z}X\right) = \frac{c\left(\frac{1}{z}X\right)}{c\left(\frac{1}{z}X\right) + c\left(\frac{1}{z}Y\right) + \ldots + c\left(\frac{1}{z}Z\right)} \cdot 100\% \qquad \text{Gl. 11}$$

wobei:

$\chi\left(\frac{1}{z}X\right)$ = Stoffmengenanteil der Äquivalente des Stoffes X (%),

$c\left(\frac{1}{z}X\right)$ = Äquivalentkonzentration des Stoffes X (mol/l),

z = Wertigkeit des Ions (1).

In den hier vorgestellten graphischen Auswerteverfahren werden die Stoffmengenanteile der Äquivalente jeweils auf die Summe der Kationen bzw. Anionen bezogen. Die Berechnung des Stoffmengenanteils eines bestimmten Kations bzw. Anions bezogen auf die Summe der Stoffmengenanteile aller in einer Wasserprobe enthaltenen Ionen ist nicht zweckmäßig.

2.2.11 Massenanteil

Der Massenanteil $w(X)$ eines Stoffes X in einer Mischung ist der Quotient aus seiner Masse $m(X)$ und der Masse m eines Stoffgemisches (Wilhelm 2008):

$$w(X) = \frac{m(X)}{m} \qquad \text{Gl. 12}$$

wobei:

$w(X)$ = Massenanteil des Stoffes X (1),

$m(X)$ = Masse des Stoffes X (g),

m = Masse des Stoffgemisches (g).

Die Umrechnungsfaktoren zur Bestimmung von Massenkonzentration, Stoffmengenkonzentration und Äquivalentkonzentration sind in Tabelle 1 und Tabelle 2 zusammengestellt.

In Tabelle 3 wird beispielhaft die Umrechnung der Massenkonzentrationen einer Wasseranalyse in deren Stoffmengenkonzentration und Äquivalentkonzentration dargestellt.

Tabelle 1: Umrechnung zwischen Massenkonzentration (β(X)), Stoffmengenkonzentration (c(X)), Äquivalentkonzentration (c(1/z X)) und Deutschen Härtegraden (DVWK 1990, Küster & Thiel 2016).

Parameter	β(X) mg/l	c(X) mmol/l	$c\left(\frac{1}{z}X\right)$ mmol/l	Härtegrad °d
Gesamthärte	-	0,5000	1,0000	2,8
Karbonathärte	-	1,0000	1,0000	2,8
Sauerstoff (O_2)	1,0	0,0313	0,0313	-
Kohlensäure (CO_2)	1,0	0,0227	0,0227	-
Oxidierbarkeit als O_2	1,0	0,0313	0,0313	-
Natrium (Na^+)	1,0	0,0435	0,0435	-
Kalium (K^+)	1,0	0,0256	0,0256	-
Calcium (Ca^{2+})	1,0	0,0250	0,0499	0,14
Magnesium (Mg^{2+})	1,0	0,0411	0,0823	0,23
Eisen (Fe^{2+})	1,0	0,0179	0,0358	-
Mangan (Mn^{2+})	1,0	0,0182	0,0364	-
Ammonium (NH_4^+)	1,0	0,0554	0,0554	-
Hydrogenkarbonat (HCO_3^-)	1,0	0,0164	0,0164	0,046
Chlorid (Cl^-)	1,0	0,0282	0,0282	-
Schwefel (S)	1,0	0,0312	0,0312	-
Sulfat (SO_4^{2-})	1,0	0,0104	0,0208	-
Nitrat (NO_3^-)	1,0	0,0161	0,0161	-
Nitrit (NO_2^-)	1,0	0,0217	0,0217	-
Phosphat (HPO_4^{2-})	1,0	0,0104	0,0208	-
Kieselsäure (SiO_2)	1,0	0,0166	0,0166	-

Tabelle 2: Umrechnungstabelle für Wasseranalysen (Küster & Thiel 2016).

Element	Stoffmengen-konzentration c(X) mol/l	Äquivalente Molare Masse $M(X)$ g/mol	Äquivalent-konzentration $c\left(\frac{1}{z}X\right)$ mol/l
Kationen			
Aluminium (Al^{3+})	1	8,994	0,33
Ammonium (NH_4^+)	1	18,038	1,00
Arsen (As^{3+})	1	24,974	0,33
Arsen (As^{5+})	1	14,984	0,20
Barium (Ba^{2+})	1	68,664	0,50
Blei (Pb^{2+})	1	103,600	0,50
Bor (B^{3+})	1	3,600	0,33
Cadmium (Cd^{2+})	1	56,200	0,50
Calcium (Ca^{2+})	1	20,040	0,50
Chrom (Cr^{3+})	1	17,332	0,33
Chrom (Cr^{6+})	1	8,666	0,17
Eisen, gesamt (Fe^{2+})	1	27,923	0,50
Eisen (Fe^{3+})	1	18,616	0,33
Kalium (K^+)	1	39,098	1,00
Kupfer (Cu^{2+})	1	31,773	0,50
Lithium (Li^+)	1	6,941	1,00
Magnesium (Mg^{2+})	1	12,153	0,50
Mangan (Mn^{2+})	1	27,469	0,50
Natrium (Na^+)	1	22,990	1,00
Quecksilber (Hg^{2+})	1	100,295	0,50
Strontium (Sr^{2+})	1	43,810	0,50
Zink (Zn^{2+})	1	32,705	0,50