

AMMONIAK IN WASSER

**Ableitung einer Formel zur Berechnung
von Ammoniak in wäßrigen Lösungen**



AMMONIAK IN WASSER

Ableitung einer Formel zur Berechnung von Ammoniak in wäßrigen Lösungen

UBA-BE-076

Wien, November 1996

Bundesministerium für Umwelt, Jugend und Familie



Autor: Gerhard Hobiger

Impressum:

Medieninhaber und Herausgeber: Umweltbundesamt, 1090 Wien, Spittelauer Lände 5

© Umweltbundesamt, Wien, November 1996

Alle Rechte vorbehalten
ISBN 3-85457-345-6

INHALTSVERZEICHNIS

1.	Einleitung	1
2.	Gesetzliche Regelungen und Richtlinien	2
3.	Das chemische Gleichgewicht von Ammoniak in verdünnten wäßrigen Lösungen	4
3.1.	Allgemeine Angaben	4
3.2.	Mathematische Beziehungen aus dem Ammonium-Ammoniak-Gleichgewicht	5
3.3.	Zusammenhang der Säurekonstante K_A von Ammonium, der korrespondierenden Säure von Ammoniak mit der Basenkonstante K_B von Ammoniak	9
3.4.	Berechnung des vorhandenen freien Ammoniaks in der Lösung	10
3.5.	Temperaturabhängigkeit von pK_A	11
3.6.	Berechnung des Ammoniak-Gehaltes aus dem Gesamtammoniumgehalt bei einer bestimmten Temperatur und einem bestimmten pH-Wert	14
3.7.	Beispiel	15
4.	Zusammenfassung der wichtigsten Formeln	17
5.	Literatur	19

INHALTSVERZEICHNIS

Anhang A 1		
	Berechnung der Reaktionsenthalpie aus der Steigung der Gl. (37) und dessen Vergleich mit Daten aus thermodynamischen Tabellen	20
Anhang A 2		
	Temperatur- und pH-abhängige Faktoren zur Berechnung des Ammoniakgehaltes aus der Gesamtammonium-Konzentration	23
Anhang A 3		
	Konzentration des Gesamtammoniums, bei der die Konzentration von Ammoniak bei gegebenem pH-Wert und gegebener Temperatur 0,005 mg/l beträgt	28
Anhang A 4		
	Konzentration des Gesamtammoniums, bei der die Konzentration von Ammoniak bei gegebenem pH-Wert und gegebener Temperatur 0,025 mg/l beträgt	34
Anhang A 5		
	Temperatur- und pH-abhängige Faktoren zur Berechnung des molaren Ammoniakgehaltes aus der molaren Gesamtammonium-Konzentration	39
Anhang A 6		
	3D-Graphik der Gleichung (35b) im Bereich von 0 °C bis 40 °C und pH-Wert von 6 bis 9	44

1. EINLEITUNG

Die relevanten Stickstoffverbindungen im Wasser sind die Abbau- bzw. Zersetzungsprodukte von organischen stickstoffhaltigen Substanzen, vor allem von Proteinen und Harnstoff. Diese werden zunächst zu Ammonium abgebaut, das im chemischen Gleichgewicht mit Ammoniak steht. Bei steigender Temperatur und steigendem pH-Wert nimmt der Ammoniak-Gehalt im Wasser stark zu.

Das nichtionisierte Ammoniak diffundiert leichter durch biologische Membranen als das Ammoniumion, wodurch die hohe Toxizität des Ammoniaks resultiert. Die letale Dosis liegt für Fische bei ca. 1 mg/l Ammoniak (bei 15 °C) und führt zu Kiemennekrose mit Erstickungstod. Für Fischbrut sind bereits 0,2 - 0,3 mg/l Ammoniak tödlich. 0,03 - 0,05 mg/l Ammoniak führen zu chronischen Schäden, wobei besonders Forellen empfindlich sind (HÜTTER, 1990).

Ammoniak selbst kann nicht chemisch nachgewiesen werden, sondern wird nach Bestimmung des Gesamtammoniums, der Wassertemperatur und des pH-Wertes mit Hilfe folgender Formel berechnet:

$$\{NH_3\} = \frac{0,94412\{NH_4\}_{Ges}}{1 + 10^{pK_A - pH}}$$

$$pK_A = 0,0925 + \frac{2728,795}{t + 273,15}$$

wobei: $\{NH_4\}_{Ges}$... Gesamtammoniumgehalt (aus analytischer Bestimmung) in mg/l

$\{NH_3\}$ Ammoniakgehalt in mg/l

t Temperatur in °C

pH pH-Wert

Im Anhang A 2 ist eine für die Praxis verwendbare Tabelle, mit der auch ohne der obigen Formel Ammoniakkonzentrationen ermittelt werden können. Daneben wurden in den Anhängen A 3 und A 4 noch Tabellen erstellt, in denen die Gesamtammonium-Konzentration ersichtlich ist, bei der der Richt- bzw. Grenzwert nach der EU-Richtlinie für Fischereigewässer (78/659/EWG) erreicht wird.

2. GESETZLICHE REGELUNGEN UND RICHTLINIEN

In einigen Verordnungen und Richtlinien betreffend die Wasserqualität sind Richt- bzw. Grenzwerte für Ammoniak (nichtionisiertes Ammonium) und Ammonium angeführt, z. B.:

- Vorläufige Richtlinie für die Begrenzung von Immissionen in Fließgewässern (ImRL, BMLF, Februar 1987):

Ammoniak-Stickstoff (mg/l)	Summe aus Ammoniak-Stickstoff und Ammonium-Stickstoff (mg/l)
0,05	0,5

- Richtlinie des Rates 78/659/EWG vom 18. Juli 1978:

	Nichtionisiertes Ammonium (mg/l NH ₃)		Ammonium insgesamt (mg/l NH ₄)	
	Salmoniden- gewässer	Cypriniden- gewässer	Salmoniden- gewässer	Cypriniden- gewässer
RW *	≤ 0,005	≤ 0,005	≤ 0,04	≤ 0,2
IW **	≤ 0,025	≤ 0,025	≤ 1	≤ 1

* RW = Richtwert

** IW = imperativer Wert

- Entwurf für eine Immissionsverordnung, BMLF, Stand Juli 1993:

Berglandgewässer		Flachlandgewässer	
Ammoniak-Stickstoff (mg/l)	Ammonium-Stickstoff (mg/l)	Ammoniak-Stickstoff (mg/l)	Ammonium-Stickstoff (mg/l)
0,02	0,3	0,02	0,5

- Verordnung über die Begrenzung von Abwasseremissionen aus Gerbereien, Lederfabriken und Pelzzurichtungen (BMLF, BGBl. 184/1991):

Einleitung in ein Fließgewässer		Einleitung in eine öffentliche Kanalisation
Ammoniak-Stickstoff (mg/l)	Ammonium-Stickstoff (mg/l)	Ammoniak-Stickstoff (mg/l)
0,5	15 (1.5.-31.10.)	20
--	30 (1.11.-30.4.)	--

- Verordnung des Bundesministers für Land- und Forstwirtschaft über die allgemeine Begrenzung von Abwasseremissionen in Fließgewässer und öffentliche Kanalisationen (AAEV) (BGBl.: 186/1996):

Einleitung in ein Fließgewässer
Ammonium (mg/l)
10

3. DAS CHEMISCHE GLEICHGEWICHT VON AMMONIAK IN VERDÜNNTEN WÄSSRIGEN LÖSUNGEN

3.1. Allgemeine Angaben

Bei der Ableitung folgender Formeln wird als Vereinfachung anstelle der Aktivität die Konzentration der einzelnen Spezies verwendet. Daher sind alle Gleichungen nur für verdünnte Lösungen, in denen der Aktivitätskoeffizient nahezu 1 ist, anwendbar. Für konzentriertere Lösungen sowie für Lösungen mit höheren Gehalten an zusätzlichen anderen Ionen müssen die Konzentrationen durch die Aktivitäten ersetzt werden.

Eine weitere Bedingung für die Gültigkeit dieser Ableitung ist, daß sich die betrachteten Lösungen im thermodynamischen Gleichgewicht befinden.

[...].....molare Konzentration im thermodynamischen Gleichgewicht (z.B. mol/l)

{...}.....Massenkonzentration im thermodynamischen Gleichgewicht (z.B. g/l)

[...]_{Ges}.....molare Gesamtkonzentration (z.B. mol/l)

{...}_{Ges}.....Gesamtmassenkonzentration (z.B. g/l)

Eingesetzte Werte: $M_N = 14,0067 \text{ g / mol}$ rel. Atommasse von Stickstoff

$M_{NH_3} = 17,0304 \text{ g / mol}$..rel. molekulare Masse von Ammoniak

$M_{NH_4} = 18,0383 \text{ g / mol}$..rel. molekulare Masse vom Ammoniumion

$R = 8,31451 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$... universelle Gaskonstante

Zur einfacheren Darstellung der mathematischen Gleichungen werden die Ladungen der Hydroxylionen (OH^-) und Ammoniumionen (NH_4^+) in den mathematischen Ableitungen weggelassen.

3.2. Mathematische Beziehungen aus dem Ammonium-Ammoniak-Gleichgewicht

Die Definition der Basenkonstante von Ammoniak lautet:

$$K_B = \frac{[NH_4][OH]}{[NH_3]} \quad (1)$$

Nach Logarithmieren und Einsetzen der Definitionen von pOH Gl. (3) und pK_B Gl. (4) und anschließendem Umformen folgt:

$$pK_B = pOH + \lg[NH_3] - \lg[NH_4] \quad (2)$$

$$pOH = -\lg[OH] \quad (3)$$

$$pK_B = -\lg K_B \quad (4)$$

Setzt man die logarithmierte Form Gl. (6a) des Ionenproduktes von Wasser Gl. (6), die Definition des pH-Wertes Gl. (7) und Definition des pK_w -Wertes Gl. (6b) in Gl. (2) ein, ergibt sich:

$$pK_B = pK_w - pH + \lg[NH_3] - \lg[NH_4] \quad (5)$$

$$[H^+][OH] = K_w \quad (6)$$

$$pH + pOH = pK_w \quad (6a)$$

$$pK_w = -\lg K_w \quad (6b)$$

$$pH = -\lg[H^+] \quad (7)$$

Nach Umformung von Gl. (5) erhält man:

$$\lg[\text{NH}_3] = \text{p}K_{\text{B}} - \text{p}K_{\text{W}} + \text{pH} + \lg[\text{NH}_4] \quad (8)$$

Wird die Gl. (8) entlogarithmiert, so bekommt man eine mathematische Beziehung für die Konzentration von Ammoniak in Abhängigkeit vom pH-Wert und Ammoniumkonzentration:

$$[\text{NH}_3] = 10^{\text{p}K_{\text{B}} + \text{pH} - \text{p}K_{\text{W}}} [\text{NH}_4] \quad (9)$$

bzw. nach $[\text{NH}_4]$ aufgelöst:

$$[\text{NH}_4] = 10^{\text{p}K_{\text{W}} - \text{pH} - \text{p}K_{\text{B}}} [\text{NH}_3] \quad (10)$$

Für die Umrechnung von molaren Konzentrationen auf Massenkonzentrationen gilt für Ammonium:

$$[\text{NH}_4] = \frac{\{\text{NH}_4\}}{M_{\text{NH}_4}} \quad (11)$$

Analog gilt für Ammoniak:

$$[\text{NH}_3] = \frac{\{\text{NH}_3\}}{M_{\text{NH}_3}} \quad (11\text{a})$$

Nun wird Gl. (11) in Gl. (9) eingesetzt:

$$[\text{NH}_3] = 10^{\text{p}K_{\text{B}} + \text{pH} - \text{p}K_{\text{W}}} \frac{\{\text{NH}_4\}}{M_{\text{NH}_4}} \quad (12)$$

Um zur Massenkonzentration von NH_3 zu kommen wird die Gl. (12) mit der rel. molekularen Masse von NH_3 multipliziert:

$$[\text{NH}_3] M_{\text{NH}_3} = 10^{pK_B + pH - pK_W} \frac{\{\text{NH}_4\}}{M_{\text{NH}_4}} M_{\text{NH}_3} \quad (13)$$

Mit Gl. (11a) erhält man daher:

$$\{\text{NH}_3\} = 10^{pK_B + pH - pK_W} \{\text{NH}_4\} \frac{M_{\text{NH}_3}}{M_{\text{NH}_4}} \quad (14)$$

Nach Einsetzen der Zahlenwerte für M_{NH_3} und für M_{NH_4} erhält man:

$$\{\text{NH}_3\} = 10^{pK_B + pH - pK_W} \{\text{NH}_4\} 0,94412 \quad (15)$$

Um den NH_3 -N Gehalt zu bekommen wird die Gl. (14) mit dem Faktor M_N/M_{NH_3} multipliziert.

$$\{\text{NH}_3\} \frac{M_N}{M_{\text{NH}_3}} = 10^{pK_B + pH - pK_W} \{\text{NH}_4\} \frac{M_{\text{NH}_3}}{M_{\text{NH}_4}} \frac{M_N}{M_{\text{NH}_3}} \quad (16)$$

Zwischen der Massenkonzentration von Ammoniak und der entsprechenden Ammoniak-Stickstoff-Konzentration besteht folgender Zusammenhang:

$$\{\text{NH}_3\} = \{\text{NH}_3 - \text{N}\} \frac{M_{\text{NH}_3}}{M_N} \quad (17)$$

Aus Gl. (16) folgt nach Kürzen und Berücksichtigung von Gl. (17):

$$\{\text{NH}_3 - \text{N}\} = 10^{pK_B + pH - pK_W} \{\text{NH}_4\} \frac{M_N}{M_{\text{NH}_4}} \quad (18)$$

Werden die Zahlenwerte für M_N bzw. M_{NH_4} eingesetzt, so ergibt sich folgende Gleichung:

$$\{NH_3 - N\} = 10^{pK_B + pH - pK_W} \{NH_4\} 0,7765 \quad (19)$$

Soll statt der NH_4 -Konzentration der Gehalt an NH_4 -N eingesetzt werden, so muß in Gl. (18) der analoge Zusammenhang wie für Ammoniak (Gl. (17)) berücksichtigt werden:

$$\{NH_4\} = \{NH_4 - N\} \frac{M_{NH_4}}{M_N} \quad (20)$$

Mit Gl. (20) ergibt nun Gl. (18) nach Kürzen:

$$\{NH_3 - N\} = 10^{pK_B + pH - pK_W} \{NH_4 - N\} \quad (21)$$

Aus Gl. (21) folgt weiters:

$$\{NH_4 - N\} = 10^{pK_W - pH - pK_B} \{NH_3 - N\} \quad (22)$$

Wird Gl. (17) in Gl. (22) eingesetzt, so folgt:

$$\{NH_4 - N\} = 10^{pK_W - pH - pK_B} \{NH_3\} \frac{M_N}{M_{NH_3}} \quad (23)$$

Setzt man wieder für M_N und M_{NH_3} die entsprechenden Zahlenwerte ein, erhält man:

$$\{NH_4 - N\} = 10^{pK_W - pH - pK_B} \{NH_3\} 0,8225 \quad (24)$$

3.3. Zusammenhang der Säurekonstante K_A von Ammonium, der korrespondierenden Säure von Ammoniak mit der Basenkonstante K_B von Ammoniak

Allgemein gilt auf Grund der chemischen Gleichung der Neutralisation, daß das Produkt der Basenkonstante mit der korrespondierenden Säurekonstante das Ionenprodukt von Wasser ergibt. Es gilt daher:

$$K_A = \frac{[H^+][NH_3]}{[NH_4]} \quad (25)$$

$$K_A K_B = K_w \quad (26)$$

Nach Logarithmieren von Gl. (26) folgt:

$$\lg K_A + \lg K_B = \lg K_w \quad (27)$$

Analog zum pK_B -Wert ist auch der pK_A -Wert definiert:

$$pK_A = -\lg K_A \quad (28)$$

Setzt man Gl. (4), Gl. (6b) und Gl. (28) in Gl. (27) ein, so erhält man:

$$pK_A + pK_B = pK_w \quad (29)$$

Wird diese mathematische Beziehung (29) in Gl. (9) eingesetzt, folgt ein Zusammenhang zwischen der Konzentration von Ammonium, Ammoniak, pH und der Säurekonstante von Ammonium K_A :

$$[NH_3] = 10^{-pK_A + pH} [NH_4] \quad (30)$$

bzw. nach $[NH_4]$ aufgelöst:

$$[NH_4] = 10^{pK_A - pH} [NH_3] \quad (30a)$$

3.4. Berechnung des vorhandenen freien Ammoniaks in der Lösung

Wird ein Ammoniumsalz in Wasser aufgelöst, so dissoziiert es in Ammoniumionen und die entsprechenden Anionen. Im weiteren Schritt wird je nach pH-Wert und Temperatur eine entsprechende Konzentration an freiem Ammoniak gebildet. Wieviel freies Ammoniak (in mol/l) im thermodynamischen Gleichgewicht in der Lösung vorhanden ist, beschreibt die Gl. (30). Zu beachten dabei ist, daß Gl. (30) nur für **molare** Konzentrationen gilt. Die Gesamtmenge an eingesetztem Ammonium(salz) ist die Summe der im thermodynamischen Gleichgewicht vorhandenen **molaren** Konzentrationen an Ammoniumionen **und** freiem Ammoniak. Es gilt daher:

$$[\text{NH}_4]_{\text{Ges}} = [\text{NH}_3] + [\text{NH}_4] \quad (31)$$

wobei $[\text{NH}_4]_{\text{Ges}}$ die Gesamtkonzentration (in mol/l) an Ammonium in der Lösung ist. Auch Gl. (31) ist **nur** für **molare** Größen gültig. Bezieht man das freie Ammoniak auf den Gesamtgehalt $[\text{NH}_4]_{\text{Ges}}$, so ergibt sich folgende Gleichung:

$$\frac{[\text{NH}_3]}{[\text{NH}_4]_{\text{Ges}}} = \frac{[\text{NH}_3]}{[\text{NH}_3] + [\text{NH}_4]} \quad (32)$$

Mit Gl. (30) folgt:

$$\frac{[\text{NH}_3]}{[\text{NH}_4]_{\text{Ges}}} = \frac{[\text{NH}_3]}{[\text{NH}_3] + 10^{pK_a - pH} [\text{NH}_3]} \quad (33)$$

Nach Kürzen ergibt sich für den Bruchteil an freiem Ammoniak bezogen auf den Gesamtammoniumgehalt:

$$\frac{[\text{NH}_3]}{[\text{NH}_4]_{\text{Ges}}} = \frac{1}{1 + 10^{pK_a - pH}} \quad (34)$$

Oder als %-Anteil in Bezug auf die molare Gesamtammonium-Konzentration $[\text{NH}_4]_{\text{Ges}}$:

$$[\% \text{NH}_3] = \frac{100}{1 + 10^{pK_a - pH}} \quad (35)$$

Bemerkung:

Es sei noch einmal darauf hingewiesen, daß die Gln. (30) bis (35) nur für molare Größen gelten.

Die selbe Gleichung findet sich in der Publikation vom Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft (R. HOFER et al., 1993) und in dem Buch „Fischtoxikologie“ (R. HOFER & R. LACKNER, 1995).

Einen entsprechenden Ausdruck für die **Massen %** an NH_3 erhält man, wenn in Gl. (34) die für die Gesamtammonium-Konzentration entsprechende Gl. (11) und für die Ammoniakkonzentration die Gl. (11a) berücksichtigt werden:

$$\{\% \text{NH}_3\} = \frac{100}{1 + 10^{pK_A - pH}} \frac{M_{\text{NH}_3}}{M_{\text{NH}_4}} \quad (35a)$$

oder nach Einsetzen der Zahlenwerte von M_{NH_3} und M_{NH_4} und ausmultiplizieren:

$$\{\% \text{NH}_3\} = \frac{94,4124}{1 + 10^{pK_A - pH}} \quad (35b)$$

3.5. Temperaturabhängigkeit von pK_A

Aus der chemischen Thermodynamik ergibt sich, daß die Temperaturabhängigkeit der Gleichgewichtskonstante folgende Form haben muß (KORTÜM & LACHMANN, 1981, siehe auch Anhang A1):

$$pK \div -\lg K = a + \frac{b}{T} \quad (36)$$

T... absolute Temperatur

a ... Achsenabschnitt

b ... Steigung

Dieser Zusammenhang gilt allerdings nur für kleine Temperaturintervalle. Trägt man den dekadischen Logarithmus der Gleichgewichtskonstante (entspricht dem negativen pK - Wert) gegen den Reziprokwert der absoluten Temperatur auf, so entsteht ein linearer Zusammenhang. Dies soll am Beispiel des Ammoniaks gezeigt werden. Dazu sind in folgender Tabelle die Temperatur, Basenkonstante, Ionenprodukt des Wassers und die daraus folgende Säurekonstante des Ammoniaks gegenübergestellt:

Tabelle 1: Temperaturabhängigkeit der negativen dekadischen Logarithmen des Ionenproduktes von Wasser sowie der Basen- und Säurekonstanten von Ammoniak (pK_B) bzw. Ammonium (pK_A) (aus: HANDBOOK, 1979)

t in °C	T in Kelvin	1/T	pK_w	pK_B	$pK_A = pK_w - pK_B$
0	273,15	0,00366099	14,9435	4,8620	10,0815
5	278,15	0,00359518	14,7338	4,8300	9,9038
10	283,15	0,00353117	14,5346	4,8041	9,7305
15	288,15	0,00347041	14,3463	4,7820	9,5643
20	293,15	0,00341122	14,1669	4,7670	9,3999
25	298,15	0,00335402	13,9965	4,7510	9,2455
30	303,15	0,00329870	13,833	4,7399	9,0931
35	308,15	0,00324517	13,6801	4,7331	8,9470
40	313,15	0,00319336	13,5348	4,7300	8,8048
45	318,15	0,00314317	13,396	4,7261	8,6699
50	323,15	0,00309454	13,2617	4,7231	8,5386

In der folgenden Abbildung ist die Temperaturabhängigkeit von pK_A graphisch dargestellt:

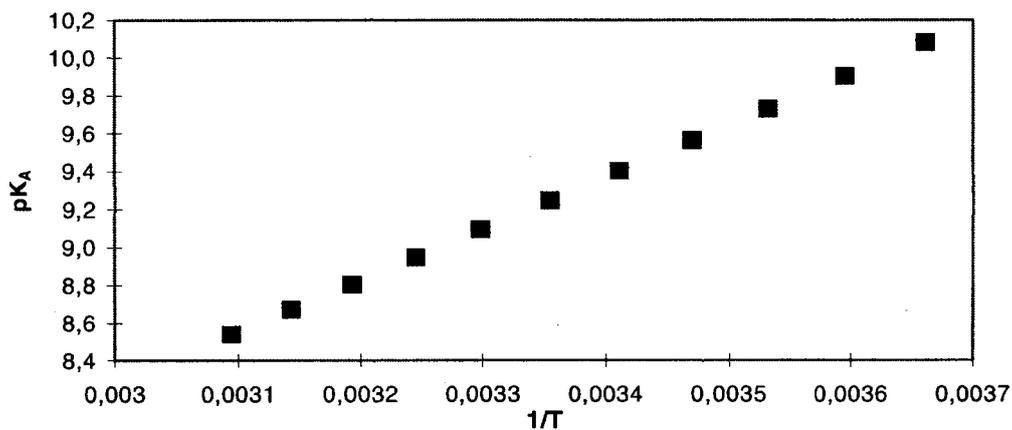


Abbildung 1: Temperaturabhängigkeit von pK_A von Ammonium

Wie aus der Abbildung 1 erkennbar, ist ein guter linearer Zusammenhang im betrachteten Temperaturintervall gegeben.

Wird nun eine lineare Regression durchgeführt, so ergeben sich folgenden Regressionsdaten:

Achsenabschnitt: $a = 0,0925$
Steigung: $b = 2728,795 \text{ K}$
Korrelationskoeffizient: $\varphi = 0,999997$

Werden diese Werte in Gl. (36) eingesetzt, so erhält man für die Temperaturabhängigkeit von pK_A :

$$pK_A = 0,0925 + \frac{2728,795}{T} \quad (37)$$

Vergleicht man die Gl. (37) mit den Gleichungen, die in der Publikation vom Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft (R. HOFER et al., 1993) und in dem Buch „Fischtoxikologie“ (R. HOFER und R. LACKNER, 1995) angegeben sind, so zeigt sich, daß es bis auf Rundungsfehler die identische Beziehung ist (siehe auch Anhang A1).

Zwischen der absoluten Temperatur und Celsiusskala gilt folgende Beziehung:

$$T = t + 273,15 \quad (37a)$$

Dabei ist T in Kelvin und t in °C anzugeben.

Wird Gl. (37a) in Gl. (37) eingesetzt erhält man:

$$pK_A = 0,0925 + \frac{2728,795}{t + 273,15} \quad (37b)$$

Mit Gl. (30) folgen analoge Beziehungen zu den Gln. (10) bis (24), die nun lauten:

$$\{NH_3 - N\} = 10^{pH - pK_A} \{NH_4\} 0,7765 \quad (38)$$

$$\{NH_4 - N\} = 10^{pK_A - pH} \{NH_3 - N\} \quad (39)$$

$$\{NH_4 - N\} = 10^{pK_A - pH} \{NH_3\} 0,8225 \quad (40)$$

Die Temperaturabhängigkeit ist über die Gl. (37) in pK_A enthalten.

3.6. Berechnung des Ammoniak-Gehaltes aus dem Gesamtammoniumgehalt bei einer bestimmten Temperatur und einem bestimmten pH-Wert

Ausgegangen wird von der Gl. (34):

$$\frac{[NH_3]}{[NH_4]_{Ges}} = \frac{1}{1 + 10^{pK_A - pH}} \quad (34)$$

Durch Umformen erhält man:

$$[NH_3] = \frac{[NH_4]_{Ges}}{1 + 10^{pK_A - pH}} \quad (41)$$

Um die entsprechenden Massenanteile zu erhalten, werden wieder die entsprechenden Beziehungen zwischen molaren Größen und Massen (Gln. (11) und (11a)) berücksichtigt:

$$\{NH_3\} = \frac{\{NH_4\}_{Ges} M_{NH_3}}{1 + 10^{pK_A - pH} M_{NH_4}} \quad (42)$$

Nach Einsetzen der Zahlenwerte für M_{NH_3} und M_{NH_4} ergibt sich:

$$\{NH_3\} = \frac{0,94412 \{NH_4\}_{Ges}}{1 + 10^{pK_A - pH}} \quad (43)$$

In der Tabelle im Anhang A 2 ist der hundertfache Faktor $\frac{0,94412}{1 + 10^{pK_A - pH}}$ zu den verschiedenen Temperaturen und pH-Werten aufgelistet. Durch die Multiplikation mit 100 wurden für die Tabelle gut handhabbare Zahlengrößen und die Übereinstimmung mit Gl. (35b) erreicht.

Bei der Bestimmung der Ammoniumkonzentration wird, bedingt durch die Stabilisierung bei der Probenahme (Ansäuern der Probe mit Schwefelsäure auf $pH = 0$), stets das Gesamtammonium $\{NH_4\}_{Ges}$ bestimmt. (Dies folgt unmittelbar aus Gl. (42), wenn für $pH = 0$ eingesetzt wird, wodurch sich eine vernachlässigbare Konzentration an Ammoniak $\{NH_3\}$ ergibt). Durch Einsetzen der vor Ort gemessenen Temperatur, des pH-Wertes und des durch Messung erhaltenen Gesamtammoniumgehaltes erhält man die Ammoniakkonzentration des zu untersuchenden Gewässers.

Im Anhang sind Tabellen von Gesamtammoniumgehalten angeführt, in denen ersichtlich ist, bei welchem pH-Wert und Temperatur die Konzentration an Ammoniak 0,005 mg/l bzw. 0,025 mg/l ist. Die beiden Werte wurden auf Grund der EU-Richtlinie „78/659/EWG vom 18. Juli 1978 über die Qualität von Süßwasser, das schutz- oder verbesserungsbedürftig ist, um das Leben von Fischen zu erhalten“, gewählt, da in dieser Richtlinie diese Werte als Richtwert bzw. als imperativer Wert angeführt sind.

3.7. Beispiel

Es soll die Massenkonzentration an Ammoniak $\{NH_3\}$ in einem Gewässer berechnet werden. Analytisch wurde ein Gesamtammoniumgehalt $\{NH_4\}_{Ges}$ von 0,2 mg/l bestimmt. Vor Ort wurde eine Temperatur des Gewässers von 18 °C und ein pH-Wert von 7,7 gemessen.

1. Mit Hilfe der Formel:

Zunächst wird mit Gl. (37b) der pK_A -Wert berechnet:

$$\text{Gleichung (37b): } pK_A = 0,0925 + \frac{2728,795}{t + 273,15}$$

Durch Einsetzen für $t = 18$ °C ergibt sich: $pK_A = 9,46$

Im nächsten Schritt wird in Gl. (43) der erhaltene Wert für $pK_A = 9,46$, die analytisch bestimmte Gesamtammonium-Konzentration $\{NH_4\}_{Ges} = 0,2$ mg/l und der vor Ort gemessene pH-Wert = 7,7 eingesetzt:

$$\text{Gleichung (43): } \{NH_3\} = \frac{0,94412 \{NH_4\}_{Ges}}{1 + 10^{pK_A - pH}}$$

Nach Einsetzen der Werte und berechnen erhält man einen Ammoniakgehalt $\{NH_3\}$ von 0,0032 mg/l.

2. Mit Hilfe der Tabelle 2:

In der Tabelle 2 (Tabelle mit Massen% Ammoniak) wird der Wert bei der Temperatur $t = 18 \text{ °C}$ und $pH = 7,7$ abgelesen:

Tabellenwert ($t=18\text{°C}$, $pH=7,7$) = 1,595

Anschließend wird der Tabellenwert mit dem analytisch bestimmten Gesamtammoniumgehalt multipliziert und durch 100 dividiert. Es gilt also:

$$\{NH_3\} = \text{Tabellenwert}(t, pH) * \{NH_4\}_{Ges} / 100$$

Eingesetzt ergibt sich: $1,595 * 0,2/100 = 0,00319 \text{ mg/l} \cong 0,0032 \text{ mg/l}$

4. ZUSAMMENFASSUNG DER WICHTIGSTEN FORMELN

In der folgenden Zusammenfassung sind noch einmal die wichtigsten Gleichungen angeführt.

$$[\text{NH}_4]_{\text{Ges}} = [\text{NH}_3] + [\text{NH}_4] \quad (31)$$

Die Gl. (31) besagt, daß sich die **molare** Gesamtammonium-Konzentration (in mol/l) in der Lösung aus den im thermodynamischen Gleichgewicht vorhandenen **molaren** Konzentrationen an Ammoniak (nichtionisiertes Ammonium) und Ammonium zusammensetzt.

$$[\% \text{NH}_3] = \frac{100}{1 + 10^{pK_A - pH}} \quad (35)$$

Bei gegebener Temperatur und gegebenem pH-Wert gibt die Gl. (35) den **molaren** Anteil des Ammoniaks in % bezogen auf den **molaren** Gesamtammoniumgehalt $[\text{NH}_4]_{\text{Ges}}$ an (siehe Tabelle im Anhang A 5).

$$\{\% \text{NH}_3\} = \frac{94,4124}{1 + 10^{pK_A - pH}} \quad (35b)$$

Gl. (35b) gibt den Bruchteil des Massenanteils von Ammoniak in %, bezogen auf die Gesamtmassenkonzentration von Ammonium $\{\text{NH}_4\}_{\text{Ges}}$ an (siehe Tabelle im Anhang A 2). Eine graphische Darstellung der Gleichung (35b) ist im Anhang A 6 abgebildet.

$$pK_A = 0,0925 + \frac{2728,795}{t + 273,15} \quad (37b)$$

Um den pK_A -Wert bei einer gegebenen Temperatur zu berechnen wird Gl. (37b) verwendet. Die Temperatur ist in °C einzusetzen.

$$\{\text{NH}_3\} = \frac{0,94412 \{\text{NH}_4\}_{\text{Ges}}}{1 + 10^{pK_A - pH}} \quad (43)$$

Mit Gl. (43) errechnet man die Massenkonzentration (z. B. in mg/l) von Ammoniak $\{\text{NH}_3\}$ im Wasser bei Kenntnis der Gesamtammonium-Konzentration $\{\text{NH}_4\}_{\text{Ges}}$ (z. B. in mg/l), des pH-Wertes und der Temperatur. Die Temperatur wird zur Berechnung des pK_A -Wertes mit Gl. (37b) benötigt.

$$\{NH_3 - N\} = 10^{pH - pK_A} \{NH_4\} 0,7765 \quad (38)$$

$$\{NH_4 - N\} = 10^{pK_A - pH} \{NH_3 - N\} \quad (39)$$

$$\{NH_4 - N\} = 10^{pK_A - pH} \{NH_3\} 0,8225 \quad (40)$$

Die letzten drei Gleichungen (Gln. (38) bis (40)) werden zur Umrechnung von Ammonium, Ammoniak in Ammonium-Stickstoff bzw. Ammoniak-Stickstoff benötigt.

5. LITERATUR

R. Hofer et al., Wirkung von Abwässern aus Kläranlagen auf Fische, Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Wasserwirtschaftskataster, Wien, 1993

R. Hofer und R. Lackner, Fischtoxikologie, Theorie und Praxis, Gustav Fischer Verlag Jena, Stuttgart, 1995

G. Kortüm, H. Lachmann, Einführung in die chemische Thermodynamik, Verlag Chemie, Vandenhoeck & Ruprecht, 1981

Handbook of Chemistry and Physics, CRC Press, Florida, 1979 - 1980

L. A. Hütter, Wasser und Wasseruntersuchung, Verlag Salle und Sauerländer, 1990

Richtlinie des Rates 78/659/EWG vom 18. Juli 1978 über die Qualität von Süßwasser, das schutz- oder verbesserungsbedürftig ist, um das Leben von Fischen zu erhalten

Vorläufige Richtlinie für die Begrenzung von Immissionen in Fließgewässern (ImRL), BMLF, Februar 1987

Verordnung über die Begrenzung von Abwasseremissionen aus Gerbereien, Lederfabriken und Pelzzurichtungen (BMLF, BGBl. 184/1991)

Verordnung des Bundesministers für Land- und Forstwirtschaft über die allgemeine Begrenzung von Abwasseremissionen in Fließgewässer und öffentliche Kanalisationen (AAEV) (BGBl.: 186/1996)

ANHANG A 1

Berechnung der Reaktionsenthalpie aus der Steigung der Gl. (37) und dessen Vergleich mit Daten aus thermodynamischen Tabellen

Anmerkung:

In diesem Anhang soll mit einem zweiten unabhängigen Verfahren die Richtigkeit der Gl. (37) gezeigt werden. Dazu wird aus der Steigung des mathematischen Zusammenhanges zwischen der Temperatur und des pK_A -Wertes die Reaktionsenthalpie der zugehörigen chemischen Reaktion errechnet und mit der Reaktionsenthalpie, die aus thermodynamischen Tabellen ermittelt wurde, verglichen.

In Kapitel 5 ist die Temperaturabhängigkeit von pK_A nach Gl. (36) definiert. Die exakte Gleichung aus der Thermodynamik lautet (KORTÜM & LACHMANN, 1981):

$$\ln K = -\frac{\Delta H}{RT} + C \quad (\text{A1.1})$$

Es bedeutet dabei: KGleichgewichtskonstante

ΔH ...molare Reaktionsenthalpie (J mol^{-1})

Runiverselle Gaskonstante ($8,31451 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$)

Tabsolute Temperatur (K)

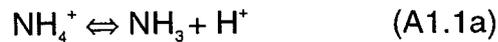
CIntegrationskonstante

Zum Beweis der Richtigkeit von Gl. (37) wird nun aus der Steigung die Reaktionsenthalpie ermittelt und mit den Daten aus thermodynamischen Tabellen verglichen. Dabei wird angenommen, daß die Reaktionsenthalpie im betrachteten Temperaturintervall konstant und gleich der Reaktionsenthalpie unter Standardbedingungen ($25 \text{ }^\circ\text{C}$) ist.

Gl. (25) definiert die Säurekonstante K_A von Ammonium wie folgt:

$$K_A = \frac{[H^+][NH_3]}{[NH_4^+]} \quad (25)$$

Die zugehörige chemische Reaktionsgleichung lautet daher:



Mit Gl. (A1.1) ergibt sich :

$$\ln K_A = -\frac{\Delta H_{\text{NH}_4}}{RT} + C \quad (\text{A1.2})$$

Dabei ist ΔH_{NH_4} die molare Reaktionsenthalpie der chemischen Reaktion (A1.1a).

Die Umrechnung auf dekadische Logarithmen erfolgt durch Multiplikation mit dem dekadischen Logarithmus von e der Basis der natürlichen Logarithmen:

$$\ln K_A \lg e = -\frac{\Delta H_{\text{NH}_4} \lg e}{RT} + C \lg e \quad (\text{A1.3})$$

Mit $\ln K \lg e = \lg K$ folgt:

$$\lg K_A = -\frac{\Delta H_{\text{NH}_4} \lg e}{RT} + C \lg e \quad (\text{A1.4})$$

Um zu $\text{p}K_A$ zu kommen wird die gesamte Gl. (A1.4) mit (-1) multipliziert:

$$-\lg K_A = \frac{\Delta H_{\text{NH}_4} \lg e}{RT} - C \lg e \quad (\text{A1.5})$$

Wird die Definition von $\text{p}K_A$ Gl. (28) berücksichtigt folgt:

$$\text{p}K_A = \frac{\Delta H_{\text{NH}_4} \lg e}{RT} - C \lg e \quad (\text{A1.6})$$

Dies ist die exakte Temperaturabhängigkeit der Säurekonstante des Ammoniums K_A .

Vergleicht man die Koeffizienten der Gl. (A1.6) mit der Gl. (37) ergibt sich für die Steigung, wenn als Abszisse $1/T$ gewählt wird:

$$\frac{\Delta H_{NH_4} \lg e}{R} = 2728,795 \text{ K} \quad (\text{A1.7})$$

Daraus folgt:

$$\Delta H_{NH_4} = 52242 \text{ J mol}^{-1} = 52,24 \text{ kJ mol}^{-1} \quad (\text{A1.8})$$

Aus thermodynamischen Tabellen folgt die molare Reaktionsenthalpie unter Standardbedingungen indem die Summe der Standardbildungsenthalpien der Ausgangsstoffe von der Summe der Standardbildungsenthalpien der Reaktionsprodukte abgezogen wird:

$$\Delta H_{NH_4} = \Delta H_{NH_3, aq}^B + \Delta H_{H^+, aq}^B - \Delta H_{NH_4, aq}^B \quad (\text{A1.9})$$

Der Index „aq“ bedeutet, daß diese Spezies solvatisiert vorliegen.

Mit den Zahlenwerten aus dem Handbook ergibt sich:

$$\Delta H_{NH_4} = (-80889) + 0 - (-132889) \text{ J mol}^{-1} \quad (\text{A1.10})$$

$$\Delta H_{NH_4} = 52000 \text{ J mol}^{-1} = 52,00 \text{ kJ mol}^{-1} \quad (\text{A1.11})$$

Vergleicht man die beiden Ergebnisse Gl. (A1.8) und Gl. (A1.11), so erkennt man eine gute Übereinstimmung, woraus die Richtigkeit der Beziehung (37) folgt.

ANHANG A 2

Temperatur- und pH-abhängige Faktoren zur Berechnung des Ammoniakgehaltes aus der Gesamtammonium-Konzentration

Die Tabelle dieses Anhangs dient zur Berechnung des Ammoniakgehaltes aus dem analytisch bestimmten Gesamtammoniumgehalt $\{\text{NH}_4\}_{\text{Ges}}$. Als Konzentrationsangaben sind Massenkonzentrationen (z.B. mg/l) zu verwenden. Der Tabellenwert ist der hundertfache Faktor, mit der die Gesamtammonium-Konzentration zu multiplizieren ist, um den Ammoniakgehalt zu erhalten. Durch die Multiplikation mit 100 wurden gut handhabbare Zahlengrößen in der Tabelle und die Übereinstimmung mit Gl. (35b) erreicht.

Ein Beispiel soll die Verwendung der Tabelle erläutern:

Die Gesamtammonium-Konzentration $\{\text{NH}_4\}_{\text{Ges}}$ eines Wasser beträgt 0,6 mg/l. Bei der Probenahme wurde vor Ort die Temperatur des Wassers zu 23 °C und ein pH-Wert von 8,4 gemessen. Wie hoch ist der Ammoniakgehalt in mg/l des untersuchten Wassers?

Dazu wird der Tabellenwert der Temperatur von 23 °C und dem pH-Wert von 8,4 (= 10,412) mit dem Gesamtammoniumgehalt multipliziert und durch 100 dividiert:

$$\text{mg/l NH}_3 = 10,412 \cdot 0,6 / 100 = 0,062472 \cong 0,0625$$

Das untersuchte Wasser enthält somit 0,0625 mg/l NH_3

Anmerkung:

Zum Vergleich ergibt die Rechnung mit der Formel 0,06247 mg/l NH_3 .

Bemerkung:

Die in der Tabelle angeführten Dezimalstellen sind als reine Rechengrößen zu verstehen und müssen je nach Genauigkeitsanspruch gerundet werden.

Tabelle 2: Temperatur- und pH-abhängige Faktoren zur Berechnung des Ammoniakgehaltes (NH_3) aus der Gesamtammonium-Konzentration $(NH_4)_{\text{Ges}}$ (Gl. (35b))

pH-Wert	0°C	1°C	2°C	3°C	4°C	5°C	6°C	7°C	8°C	9°C	10°C
6	0,008	0,008	0,009	0,010	0,011	0,012	0,013	0,014	0,015	0,016	0,018
6,1	0,010	0,011	0,012	0,013	0,014	0,015	0,016	0,017	0,019	0,020	0,022
6,2	0,012	0,013	0,015	0,016	0,017	0,019	0,020	0,022	0,024	0,026	0,028
6,3	0,016	0,017	0,018	0,020	0,022	0,024	0,026	0,028	0,030	0,032	0,035
6,4	0,020	0,021	0,023	0,025	0,027	0,030	0,032	0,035	0,038	0,041	0,044
6,5	0,025	0,027	0,029	0,032	0,034	0,037	0,040	0,044	0,047	0,051	0,056
6,6	0,031	0,034	0,037	0,040	0,043	0,047	0,051	0,055	0,060	0,065	0,070
6,7	0,039	0,043	0,046	0,050	0,054	0,059	0,064	0,069	0,075	0,081	0,088
6,8	0,049	0,054	0,058	0,063	0,069	0,074	0,081	0,087	0,095	0,102	0,111
6,9	0,062	0,067	0,073	0,080	0,086	0,094	0,102	0,110	0,119	0,129	0,140
7	0,078	0,085	0,092	0,100	0,109	0,118	0,128	0,138	0,150	0,162	0,176
7,1	0,098	0,107	0,116	0,126	0,137	0,148	0,161	0,174	0,189	0,204	0,221
7,2	0,124	0,134	0,146	0,159	0,172	0,187	0,202	0,219	0,237	0,257	0,278
7,3	0,155	0,169	0,184	0,200	0,217	0,235	0,255	0,276	0,299	0,323	0,350
7,4	0,196	0,213	0,231	0,251	0,272	0,296	0,320	0,347	0,376	0,407	0,440
7,5	0,246	0,268	0,291	0,316	0,343	0,372	0,403	0,437	0,473	0,511	0,553
7,6	0,310	0,337	0,366	0,397	0,431	0,468	0,507	0,549	0,594	0,643	0,695
7,7	0,390	0,424	0,460	0,500	0,542	0,588	0,637	0,690	0,747	0,808	0,873
7,8	0,490	0,533	0,579	0,628	0,682	0,739	0,801	0,867	0,938	1,015	1,097
7,9	0,616	0,670	0,727	0,789	0,856	0,928	1,006	1,089	1,178	1,274	1,377
8	0,774	0,841	0,914	0,992	1,076	1,166	1,263	1,367	1,479	1,598	1,727
8,1	0,973	1,057	1,147	1,245	1,350	1,463	1,584	1,714	1,854	2,003	2,164
8,2	1,221	1,327	1,440	1,562	1,693	1,834	1,986	2,148	2,322	2,508	2,708
8,3	1,532	1,664	1,806	1,958	2,122	2,298	2,486	2,688	2,905	3,136	3,384
8,4	1,921	2,085	2,262	2,452	2,656	2,875	3,109	3,360	3,628	3,915	4,221
8,5	2,406	2,610	2,830	3,066	3,319	3,591	3,881	4,191	4,522	4,876	5,253
8,6	3,009	3,263	3,536	3,828	4,141	4,476	4,834	5,216	5,624	6,058	6,519
8,7	3,757	4,071	4,408	4,769	5,155	5,567	6,006	6,474	6,972	7,501	8,063
8,8	4,681	5,069	5,484	5,927	6,399	6,903	7,439	8,009	8,613	9,253	9,931
8,9	5,818	6,294	6,801	7,342	7,917	8,529	9,178	9,866	10,593	11,361	12,171
9	7,210	7,789	8,405	9,060	9,755	10,492	11,271	12,093	12,959	13,870	14,827

24
Ableitung einer Formel zur Berechnung von Ammoniak in wässrigen Lösungen / Ammoniak in Wasser /

Fortsetzung zu Tab. 2: Temperatur- und pH-abhängige Faktoren zur Berechnung des Ammoniakgehaltes (NH_3) aus der Gesamtammonium-Konzentration $\{\text{NH}_4\}_{\text{Ges}}$ (Gl. (35b))

pH-Wert	11°C	12°C	13°C	14°C	15°C	16°C	17°C	18°C	19°C	20°C
6	0,019	0,021	0,022	0,024	0,026	0,028	0,030	0,032	0,035	0,037
6,1	0,024	0,026	0,028	0,030	0,033	0,035	0,038	0,041	0,044	0,047
6,2	0,030	0,033	0,035	0,038	0,041	0,044	0,048	0,051	0,055	0,059
6,3	0,038	0,041	0,044	0,048	0,052	0,056	0,060	0,065	0,069	0,075
6,4	0,048	0,052	0,056	0,060	0,065	0,070	0,075	0,081	0,087	0,094
6,5	0,060	0,065	0,070	0,076	0,082	0,088	0,095	0,102	0,110	0,118
6,6	0,076	0,082	0,088	0,095	0,103	0,111	0,119	0,129	0,139	0,149
6,7	0,095	0,103	0,111	0,120	0,129	0,140	0,150	0,162	0,174	0,188
6,8	0,120	0,129	0,140	0,151	0,163	0,176	0,189	0,204	0,219	0,236
6,9	0,151	0,163	0,176	0,190	0,205	0,221	0,238	0,256	0,276	0,297
7	0,190	0,205	0,221	0,239	0,258	0,278	0,299	0,323	0,347	0,373
7,1	0,239	0,258	0,279	0,301	0,324	0,350	0,377	0,406	0,437	0,470
7,2	0,300	0,325	0,350	0,378	0,408	0,440	0,474	0,510	0,549	0,591
7,3	0,378	0,408	0,441	0,476	0,513	0,553	0,596	0,641	0,690	0,742
7,4	0,475	0,513	0,554	0,598	0,645	0,695	0,749	0,806	0,867	0,933
7,5	0,598	0,645	0,697	0,752	0,810	0,873	0,941	1,012	1,089	1,171
7,6	0,751	0,811	0,875	0,944	1,018	1,097	1,181	1,271	1,367	1,470
7,7	0,944	1,019	1,100	1,186	1,278	1,377	1,482	1,595	1,715	1,843
7,8	1,185	1,279	1,380	1,488	1,603	1,727	1,858	1,999	2,149	2,308
7,9	1,487	1,605	1,731	1,866	2,010	2,164	2,328	2,503	2,689	2,887
8	1,864	2,011	2,169	2,337	2,516	2,708	2,912	3,129	3,360	3,607
8,1	2,335	2,518	2,714	2,923	3,146	3,384	3,637	3,906	4,192	4,496
8,2	2,921	3,149	3,392	3,651	3,927	4,221	4,533	4,865	5,217	5,591
8,3	3,648	3,930	4,230	4,550	4,891	5,253	5,637	6,044	6,476	6,932
8,4	4,547	4,895	5,265	5,658	6,076	6,519	6,988	7,485	8,010	8,564
8,5	5,654	6,080	6,533	7,014	7,523	8,062	8,632	9,233	9,867	10,535
8,6	7,009	7,529	8,080	8,664	9,280	9,930	10,616	11,337	12,095	12,890
8,7	8,658	9,287	9,952	10,654	11,393	12,170	12,986	13,842	14,738	15,673
8,8	10,646	11,401	12,196	13,031	13,908	14,826	15,787	16,789	17,833	18,918
8,9	13,023	13,918	14,857	15,840	16,866	17,936	19,050	20,206	21,404	22,642
9	15,830	16,878	17,972	19,111	20,294	21,522	22,791	24,102	25,451	26,838

Fortsetzung zu Tab. 2: Temperatur- und pH-abhängige Faktoren zur Berechnung des Ammoniakgehaltes $[NH_3]$ aus der Gesamtammonium-Konzentration $[NH_4]_{\text{Ges}}$ (Gl. (35b))

pH-Wert	21°C	22°C	23°C	24°C	25°C	26°C	27°C	28°C	29°C	30°C
6	0,040	0,043	0,047	0,050	0,054	0,058	0,062	0,066	0,071	0,076
6,1	0,051	0,055	0,059	0,063	0,068	0,073	0,078	0,083	0,089	0,096
6,2	0,064	0,069	0,074	0,079	0,085	0,091	0,098	0,105	0,112	0,120
6,3	0,080	0,086	0,093	0,100	0,107	0,115	0,123	0,132	0,141	0,151
6,4	0,101	0,109	0,117	0,126	0,135	0,145	0,155	0,166	0,178	0,191
6,5	0,127	0,137	0,147	0,158	0,170	0,182	0,195	0,209	0,224	0,240
6,6	0,160	0,172	0,185	0,199	0,213	0,229	0,245	0,263	0,282	0,302
6,7	0,202	0,217	0,233	0,250	0,268	0,288	0,309	0,331	0,355	0,380
6,8	0,254	0,273	0,293	0,315	0,338	0,362	0,388	0,416	0,446	0,477
6,9	0,319	0,343	0,369	0,396	0,425	0,456	0,488	0,523	0,561	0,600
7	0,402	0,432	0,464	0,498	0,534	0,573	0,614	0,658	0,705	0,754
7,1	0,505	0,543	0,583	0,626	0,671	0,720	0,772	0,827	0,885	0,948
7,2	0,635	0,682	0,733	0,786	0,844	0,905	0,970	1,039	1,112	1,190
7,3	0,798	0,857	0,921	0,988	1,060	1,136	1,217	1,304	1,396	1,493
7,4	1,002	1,077	1,156	1,240	1,330	1,426	1,528	1,636	1,750	1,872
7,5	1,258	1,351	1,451	1,556	1,669	1,788	1,915	2,050	2,193	2,345
7,6	1,579	1,695	1,819	1,951	2,091	2,240	2,398	2,566	2,744	2,933
7,7	1,979	2,124	2,279	2,443	2,618	2,803	3,000	3,208	3,429	3,663
7,8	2,478	2,659	2,851	3,055	3,272	3,502	3,746	4,004	4,277	4,566
7,9	3,099	3,323	3,561	3,814	4,082	4,367	4,667	4,986	5,322	5,677
8	3,868	4,146	4,440	4,752	5,082	5,432	5,802	6,192	6,604	7,038
8,1	4,818	5,160	5,522	5,905	6,310	6,738	7,189	7,665	8,166	8,692
8,2	5,987	6,406	6,848	7,316	7,809	8,329	8,876	9,451	10,055	10,688
8,3	7,415	7,925	8,463	9,029	9,625	10,251	10,909	11,597	12,318	13,072
8,4	9,149	9,765	10,412	11,092	11,806	12,553	13,334	14,150	15,001	15,887
8,5	11,236	11,973	12,744	13,552	14,396	15,277	16,195	17,149	18,139	19,166
8,6	13,723	14,593	15,502	16,450	17,436	18,459	19,521	20,619	21,754	22,923
8,7	16,649	17,665	18,720	19,815	20,948	22,119	23,326	24,569	25,844	27,152
8,8	20,045	21,211	22,417	23,660	24,940	26,254	27,600	28,978	30,383	31,813
8,9	23,920	25,235	26,587	27,971	29,387	30,832	32,302	33,795	35,307	36,836
9	28,260	29,713	31,196	32,705	34,237	35,789	37,356	38,936	40,525	42,119

Fortsetzung zu Tab. 2: Temperatur- und pH-abhängige Faktoren zur Berechnung des Ammoniakgehaltes (NH_3) aus der Gesamtammonium-Konzentration (NH_4)_{Gas} (Gl. (35b))

pH-Wert	31°C	32°C	33°C	34°C	35°C	36°C	37°C	38°C	39°C	40°C
6	0,081	0,087	0,093	0,100	0,106	0,114	0,121	0,129	0,138	0,147
6,1	0,102	0,110	0,117	0,125	0,134	0,143	0,153	0,163	0,174	0,185
6,2	0,129	0,138	0,147	0,158	0,168	0,180	0,192	0,205	0,219	0,233
6,3	0,162	0,173	0,186	0,198	0,212	0,226	0,242	0,258	0,275	0,293
6,4	0,204	0,218	0,233	0,250	0,267	0,285	0,304	0,324	0,346	0,369
6,5	0,257	0,275	0,294	0,314	0,335	0,358	0,382	0,408	0,435	0,464
6,6	0,323	0,346	0,369	0,395	0,422	0,450	0,481	0,513	0,547	0,583
6,7	0,406	0,435	0,465	0,497	0,530	0,566	0,605	0,645	0,688	0,733
6,8	0,511	0,546	0,584	0,624	0,667	0,712	0,760	0,811	0,864	0,921
6,9	0,642	0,687	0,734	0,785	0,838	0,895	0,955	1,018	1,085	1,157
7	0,807	0,863	0,923	0,986	1,053	1,123	1,199	1,278	1,362	1,451
7,1	1,014	1,084	1,159	1,238	1,321	1,410	1,504	1,603	1,709	1,820
7,2	1,273	1,361	1,454	1,553	1,657	1,768	1,886	2,010	2,141	2,280
7,3	1,597	1,707	1,823	1,946	2,077	2,215	2,362	2,516	2,680	2,852
7,4	2,001	2,138	2,284	2,437	2,600	2,772	2,954	3,146	3,349	3,563
7,5	2,506	2,677	2,857	3,048	3,250	3,464	3,689	3,927	4,178	4,442
7,6	3,133	3,345	3,569	3,806	4,056	4,319	4,598	4,891	5,200	5,525
7,7	3,911	4,173	4,449	4,741	5,049	5,374	5,716	6,076	6,454	6,852
7,8	4,871	5,194	5,534	5,892	6,270	6,667	7,085	7,524	7,984	8,467
7,9	6,052	6,447	6,863	7,300	7,760	8,243	8,750	9,280	9,836	10,417
8	7,494	7,975	8,480	9,010	9,566	10,148	10,757	11,393	12,057	12,750
8,1	9,245	9,825	10,433	11,069	11,735	12,430	13,154	13,909	14,694	15,509
8,2	11,351	12,044	12,769	13,525	14,313	15,132	15,983	16,867	17,782	18,728
8,3	13,858	14,678	15,531	16,418	17,338	18,291	19,277	20,295	21,345	22,425
8,4	16,808	17,764	18,754	19,779	20,836	21,927	23,050	24,203	25,385	26,596
8,5	20,228	21,324	22,455	23,619	24,814	26,039	27,293	28,573	29,878	31,206
8,6	24,127	25,363	26,629	27,925	29,248	30,596	31,967	33,357	34,766	36,189
8,7	28,489	29,853	31,243	32,655	34,087	35,536	37,000	38,475	39,958	41,446
8,8	33,266	34,739	36,228	37,731	39,244	40,765	42,289	43,814	45,336	46,852
8,9	38,378	39,929	41,487	43,046	44,605	46,159	47,706	49,241	50,763	52,267
9	43,714	45,307	46,893	48,470	50,034	51,581	53,110	54,616	56,097	57,551

Anhang A 3

Konzentration des Gesamtammoniums, bei der die Konzentration von Ammoniak bei gegebenem pH-Wert und gegebener Temperatur 0,005 mg/l beträgt

In diesem Anhang ist eine Tabelle, mit der die Gesamtammonium-Konzentration $\{\text{NH}_4\}_{\text{Ges}}$ (in mg/l) ermittelt werden kann, die einem NH_3 -Gehalt im Wasser (bei gegebener Temperatur und gegebenem pH-Wert) von 0,005 mg/l entspricht. Dieser Wert ist in der EU-Richtlinie 78/659/EWG (Fischereigewässer) als **Richtwert** angegeben. Folgende Fragestellungen können mit Hilfe dieser Tabelle beantwortet werden:

Beispiel 1:

Wie hoch darf der Gesamtammoniumgehalt $\{\text{NH}_4\}_{\text{Ges}}$ eines Wassers sein, damit bei einer Temperatur von 13 °C und einem pH-Wert von 8,5 der Richtwert von 0,005 mg/l NH_3 nicht überschritten wird ?

Dazu wird in der Tabelle der Wert von $\text{pH} = 8,5$ und $t = 13$ °C gesucht. Er lautet: 0,0765 mg/l $\text{NH}_4 \cong 0,077$ mg/l NH_4

Im Wasser mit der Temperatur von 13 °C und einem pH-Wert von 8,5 dürfen maximal 0,077 mg/l Gesamtammonium $\{\text{NH}_4\}_{\text{Ges}}$ enthalten sein um den Richtwert von 0,005 mg/l NH_3 nicht zu überschreiten.

Beispiel 2:

Ist in einem Wasser mit dem Gesamtammoniumgehalt von 3 mg/l, einem pH-Wert von 6,8 und einer Temperatur von 12 °C der Richtwert von 0,005 mg/l NH_3 überschritten?

Dazu wird der Wert aus der Tabelle bei $\text{pH} = 6,8$ und der Temperatur $t = 12$ °C (= 3,8612 mg/l NH_4) mit dem Gesamtammoniumgehalt des zu untersuchenden Wassers verglichen. Ist der Gesamtammoniumgehalt des Wassers größer als der Tabellenwert, ist der Richtwert von 0,005 mg/l NH_3 überschritten, ist er jedoch kleiner, dann wird die Ammoniakkonzentration von 0,005 mg/l nicht erreicht.

In unserem Beispiel ist der Tabellenwert: 3, 8612 mg/l NH_4 .

Die Gesamtammonium-Konzentration des zu untersuchenden Wassers (3 mg/l NH_4) ist kleiner als der Tabellenwert, daher wird der Richtwert von 0,005 mg/l NH_3 nicht erreicht.

Anmerkung:

Wird der Ammoniakgehalt unseres Beispiels mit der Formel bzw. der Tabelle 2 ermittelt so erhält man eine Ammoniakkonzentration von 0,0039 mg/l NH_3 .

Beispiel 3:

Ab welchem pH-Wert wird der Richtwert von 0,005 mg/l NH_3 bei einer Gesamtammoniumkonzentration von 0,9 mg/l und einer Temperatur von 4 °C überschritten ?

Dazu wird in der Tabellenspalte von 4 °C der Wert gesucht der gerade größer ist als 0,9.

In unserem Fall ist dies bei pH = 7,7 (Tabellenwert = 0,9223) der Fall. Das heißt, der Richtwert wird bei einer Gesamtammonium-Konzentration von 0,9 mg/l NH_4 und einer Temperatur von 4 °C bei einem pH-Wert zwischen 7,7 und 7,8 überschritten.

Anmerkung :

Die genaue Rechnung ergibt einen pH-Wert von 7,71

Beispiel 4:

Ab welcher Temperatur wird der Richtwert von 0,005 mg/l NH_3 bei einer Gesamtammonium-Konzentration von 2 mg/l und einem pH-Wert von 6,7 überschritten ?

Dazu wird in der Tabellenzeile von pH = 6,7 der Wert gesucht der gerade größer als 2 ist.

In unserem Beispiel ist dies bei einer Temperatur von 23 °C (Tabellenwert = 2,1466) der Fall. Da der Tabellenwert von 24 °C gleich 1,9990 ist, wird in diesem Fall der Richtwert bei der Temperatur von etwas unter 24 °C genau erreicht.

Anmerkung :

Die genaue Rechnung ergibt eine Temperatur von 23,99 °C

Bemerkung:

Die in der Tabelle angeführten Dezimalstellen sind als reine Rechengrößen zu verstehen und müssen je nach Genauigkeitsanspruch gerundet werden.

Tabelle 3: Konzentration des Ges.-NH₄ (NH₄)_{ges} (in mg/l), bei der die Konzentration von NH₃ bei gegebenem pH-Wert und gegebener Temperatur 0,005 mg/l beträgt.

pH-Wert	0°C	1°C	2°C	3°C	4°C	5°C	6°C	7°C	8°C	9°C	10°C
6	64,0580	58,9029	54,1957	49,8947	45,9626	42,3654	39,0725	36,0564	33,2922	30,7574	28,4314
6,1	50,8842	46,7893	43,0502	39,6339	36,5105	33,6531	31,0375	28,6417	26,4461	24,4325	22,5850
6,2	40,4198	37,1672	34,1971	31,4834	29,0024	26,7327	24,6550	22,7520	21,0079	19,4085	17,9410
6,3	32,1077	29,5240	27,1648	25,0093	23,0385	21,2356	19,5853	18,0737	16,6883	15,4178	14,2521
6,4	25,5052	23,4528	21,5789	19,8666	18,3012	16,8691	15,5582	14,3575	13,2571	12,2479	11,3219
6,5	20,2606	18,6303	17,1418	15,7817	14,5383	13,4007	12,3594	11,4057	10,5316	9,7300	8,9944
6,6	16,0946	14,7997	13,6173	12,5370	11,5492	10,6457	9,8185	9,0609	8,3666	7,7299	7,1456
6,7	12,7855	11,7569	10,8177	9,9596	9,1750	8,4572	7,8002	7,1984	6,6469	6,1411	5,6771
6,8	10,1570	9,3399	8,5939	7,9122	7,2890	6,7189	6,1970	5,7190	5,2809	4,8792	4,5105
6,9	8,0691	7,4201	6,8275	6,2860	5,7910	5,3381	4,9236	4,5439	4,1959	3,8768	3,5839
7	6,4106	5,8951	5,4243	4,9942	4,6010	4,2413	3,9120	3,6104	3,3340	3,0805	2,8479
7,1	5,0932	4,6837	4,3098	3,9682	3,6558	3,3701	3,1085	2,8689	2,6494	2,4480	2,2633
7,2	4,0468	3,7215	3,4245	3,1531	2,9050	2,6780	2,4703	2,2800	2,1056	1,9456	1,7989
7,3	3,2155	2,9572	2,7212	2,5057	2,3086	2,1283	1,9633	1,8121	1,6736	1,5466	1,4300
7,4	2,5553	2,3501	2,1627	1,9914	1,8349	1,6917	1,5606	1,4405	1,3305	1,2296	1,1370
7,5	2,0308	1,8678	1,7189	1,5829	1,4586	1,3448	1,2407	1,1453	1,0579	0,9778	0,9042
7,6	1,6142	1,4847	1,3665	1,2585	1,1597	1,0693	0,9866	0,9109	0,8414	0,7778	0,7193
7,7	1,2833	1,1805	1,0865	1,0007	0,9223	0,8505	0,7848	0,7246	0,6695	0,6189	0,5725
7,8	1,0205	0,9388	0,8642	0,7960	0,7337	0,6767	0,6245	0,5767	0,5329	0,4927	0,4558
7,9	0,8117	0,7468	0,6875	0,6334	0,5839	0,5386	0,4971	0,4592	0,4244	0,3924	0,3632
8	0,6458	0,5943	0,5472	0,5042	0,4649	0,4289	0,3960	0,3658	0,3382	0,3128	0,2896
8,1	0,5141	0,4731	0,4357	0,4016	0,3703	0,3418	0,3156	0,2917	0,2697	0,2496	0,2311
8,2	0,4094	0,3769	0,3472	0,3201	0,2953	0,2726	0,2518	0,2328	0,2153	0,1993	0,1847
8,3	0,3263	0,3005	0,2769	0,2553	0,2356	0,2176	0,2011	0,1860	0,1721	0,1594	0,1478
8,4	0,2603	0,2398	0,2210	0,2039	0,1883	0,1739	0,1608	0,1488	0,1378	0,1277	0,1185
8,5	0,2078	0,1915	0,1767	0,1631	0,1506	0,1393	0,1288	0,1193	0,1106	0,1025	0,0952
8,6	0,1662	0,1532	0,1414	0,1306	0,1207	0,1117	0,1034	0,0959	0,0889	0,0825	0,0767
8,7	0,1331	0,1228	0,1134	0,1048	0,0970	0,0898	0,0832	0,0772	0,0717	0,0667	0,0620
8,8	0,1068	0,0986	0,0912	0,0844	0,0781	0,0724	0,0672	0,0624	0,0581	0,0540	0,0503
8,9	0,0859	0,0794	0,0735	0,0681	0,0632	0,0586	0,0545	0,0507	0,0472	0,0440	0,0411
9	0,0693	0,0642	0,0595	0,0552	0,0513	0,0477	0,0444	0,0413	0,0386	0,0360	0,0337

Fortsetzung zu Tab. 3: Konzentration des Ges.-NH₄ {NH₄}_{ges} (in mg/l), bei der die Konzentration von NH₃ bei gegebenem pH-Wert und gegebener Temperatur 0,005 mg/l beträgt.

pH-Wert	11°C	12°C	13°C	14°C	15°C	16°C	17°C	18°C	19°C	20°C
6	26,2960	24,3342	22,5311	20,8728	19,3468	17,9419	16,6476	15,4547	14,3546	13,3396
6,1	20,8887	19,3305	17,8982	16,5809	15,3688	14,2528	13,2248	12,2772	11,4034	10,5971
6,2	16,5936	15,3558	14,2181	13,1718	12,2090	11,3225	10,5059	9,7532	9,0591	8,4186
6,3	13,1818	12,1987	11,2949	10,4638	9,6990	8,9949	8,3462	7,7483	7,1970	6,6883
6,4	10,4718	9,6908	8,9730	8,3128	7,7053	7,1460	6,6307	6,1558	5,7179	5,3138
6,5	8,3191	7,6988	7,1286	6,6042	6,1216	5,6773	5,2681	4,8908	4,5429	4,2220
6,6	6,6092	6,1165	5,6635	5,2470	4,8637	4,5108	4,1857	3,8860	3,6097	3,3547
6,7	5,2510	4,8596	4,4998	4,1689	3,8644	3,5841	3,3259	3,0879	2,8684	2,6658
6,8	4,1721	3,8612	3,5754	3,3126	3,0707	2,8481	2,6429	2,4539	2,2795	2,1186
6,9	3,3151	3,0681	2,8411	2,6324	2,4403	2,2634	2,1004	1,9503	1,8118	1,6840
7	2,6344	2,4382	2,2579	2,0920	1,9395	1,7990	1,6695	1,5502	1,4402	1,3387
7,1	2,0936	1,9378	1,7946	1,6629	1,5416	1,4300	1,3272	1,2325	1,1451	1,0645
7,2	1,6641	1,5403	1,4266	1,3219	1,2257	1,1370	1,0554	0,9801	0,9107	0,8466
7,3	1,3230	1,2246	1,1343	1,0511	0,9747	0,9043	0,8394	0,7796	0,7245	0,6736
7,4	1,0519	0,9738	0,9021	0,8360	0,7753	0,7194	0,6678	0,6203	0,5766	0,5361
7,5	0,8367	0,7746	0,7176	0,6652	0,6169	0,5725	0,5316	0,4938	0,4591	0,4270
7,6	0,6657	0,6164	0,5711	0,5295	0,4911	0,4558	0,4233	0,3934	0,3657	0,3402
7,7	0,5299	0,4907	0,4547	0,4217	0,3912	0,3632	0,3374	0,3136	0,2916	0,2713
7,8	0,4220	0,3909	0,3623	0,3360	0,3118	0,2896	0,2691	0,2502	0,2327	0,2166
7,9	0,3363	0,3116	0,2889	0,2680	0,2488	0,2311	0,2148	0,1998	0,1859	0,1732
8	0,2682	0,2486	0,2306	0,2140	0,1987	0,1847	0,1717	0,1598	0,1488	0,1386
8,1	0,2141	0,1985	0,1842	0,1711	0,1589	0,1478	0,1375	0,1280	0,1193	0,1112
8,2	0,1712	0,1588	0,1474	0,1370	0,1273	0,1185	0,1103	0,1028	0,0958	0,0894
8,3	0,1371	0,1272	0,1182	0,1099	0,1022	0,0952	0,0887	0,0827	0,0772	0,0721
8,4	0,1100	0,1022	0,0950	0,0884	0,0823	0,0767	0,0716	0,0668	0,0624	0,0584
8,5	0,0884	0,0822	0,0765	0,0713	0,0665	0,0620	0,0579	0,0542	0,0507	0,0475
8,6	0,0713	0,0664	0,0619	0,0577	0,0539	0,0504	0,0471	0,0441	0,0413	0,0388
8,7	0,0578	0,0538	0,0502	0,0469	0,0439	0,0411	0,0385	0,0361	0,0339	0,0319
8,8	0,0470	0,0439	0,0410	0,0384	0,0360	0,0337	0,0317	0,0298	0,0280	0,0264
8,9	0,0384	0,0359	0,0337	0,0316	0,0296	0,0279	0,0262	0,0247	0,0234	0,0221
9	0,0316	0,0296	0,0278	0,0262	0,0246	0,0232	0,0219	0,0207	0,0196	0,0186

Fortsetzung zu Tab. 3: Konzentration des Ges.-NH₃ (NH₃)_{ges.} (in mg/l), bei der die Konzentration von NH₃ bei gegebenem pH-Wert und gegebener Temperatur 0,005 mg/l beträgt.

pH-Wert	21°C	22°C	23°C	24°C	25°C	26°C	27°C	28°C	29°C	30°C
6	12,4025	11,5370	10,7371	9,9976	9,3135	8,6803	8,0940	7,5508	7,0474	6,5805
6,1	9,8527	9,1652	8,5299	7,9424	7,3990	6,8961	6,4304	5,9989	5,5990	5,2282
6,2	7,8274	7,2813	6,7766	6,3100	5,8784	5,4788	5,1089	4,7662	4,4485	4,1540
6,3	6,2186	5,7848	5,3839	5,0133	4,6704	4,3531	4,0592	3,7870	3,5347	3,3007
6,4	4,9407	4,5961	4,2777	3,9833	3,7109	3,4589	3,2255	3,0092	2,8088	2,6229
6,5	3,9256	3,6519	3,3990	3,1651	2,9488	2,7486	2,5632	2,3914	2,2322	2,0846
6,6	3,1193	2,9019	2,7010	2,5152	2,3434	2,1844	2,0371	1,9006	1,7742	1,6569
6,7	2,4789	2,3062	2,1466	1,9990	1,8625	1,7362	1,6192	1,5108	1,4104	1,3172
6,8	1,9701	1,8329	1,7062	1,5890	1,4805	1,3802	1,2873	1,2012	1,1214	1,0474
6,9	1,5660	1,4570	1,3564	1,2632	1,1771	1,0974	1,0236	0,9552	0,8918	0,8331
7	1,2450	1,1585	1,0785	1,0045	0,9361	0,8728	0,8142	0,7598	0,7095	0,6628
7,1	0,9900	0,9213	0,8578	0,7990	0,7447	0,6944	0,6478	0,6047	0,5647	0,5276
7,2	0,7875	0,7329	0,6824	0,6358	0,5926	0,5527	0,5157	0,4814	0,4496	0,4202
7,3	0,6266	0,5832	0,5432	0,5061	0,4718	0,4401	0,4107	0,3835	0,3582	0,3348
7,4	0,4988	0,4644	0,4325	0,4031	0,3759	0,3507	0,3273	0,3057	0,2856	0,2671
7,5	0,3973	0,3700	0,3447	0,3213	0,2996	0,2796	0,2611	0,2439	0,2280	0,2132
7,6	0,3167	0,2950	0,2749	0,2563	0,2391	0,2232	0,2085	0,1948	0,1822	0,1705
7,7	0,2527	0,2354	0,2194	0,2047	0,1910	0,1784	0,1667	0,1558	0,1458	0,1365
7,8	0,2018	0,1881	0,1754	0,1637	0,1528	0,1428	0,1335	0,1249	0,1169	0,1095
7,9	0,1614	0,1505	0,1404	0,1311	0,1225	0,1145	0,1071	0,1003	0,0940	0,0881
8	0,1293	0,1206	0,1126	0,1052	0,0984	0,0920	0,0862	0,0808	0,0757	0,0710
8,1	0,1038	0,0969	0,0905	0,0847	0,0792	0,0742	0,0695	0,0652	0,0612	0,0575
8,2	0,0835	0,0781	0,0730	0,0683	0,0640	0,0600	0,0563	0,0529	0,0497	0,0468
8,3	0,0674	0,0631	0,0591	0,0554	0,0519	0,0488	0,0458	0,0431	0,0406	0,0382
8,4	0,0547	0,0512	0,0480	0,0451	0,0424	0,0398	0,0375	0,0353	0,0333	0,0315
8,5	0,0445	0,0418	0,0392	0,0369	0,0347	0,0327	0,0309	0,0292	0,0276	0,0261
8,6	0,0364	0,0343	0,0323	0,0304	0,0287	0,0271	0,0256	0,0242	0,0230	0,0218
8,7	0,0300	0,0283	0,0267	0,0252	0,0239	0,0226	0,0214	0,0204	0,0193	0,0184
8,8	0,0249	0,0236	0,0223	0,0211	0,0200	0,0190	0,0181	0,0173	0,0165	0,0157
8,9	0,0209	0,0198	0,0188	0,0179	0,0170	0,0162	0,0155	0,0148	0,0142	0,0136
9	0,0177	0,0168	0,0160	0,0153	0,0146	0,0140	0,0134	0,0128	0,0123	0,0119

Fortsetzung zu Tab. 3: Konzentration des Ges.- $\text{NH}_4\{\text{NH}_4\}_{\text{Gas}}$ (in mg/l), bei der die Konzentration von NH_3 bei gegebenem pH-Wert und gegebener Temperatur 0,005 mg/l beträgt.

pH-Wert	31°C	32°C	33°C	34°C	35°C	36°C	37°C	38°C	39°C	40°C
6	6,1473	5,7453	5,3719	5,0251	4,7026	4,4028	4,1239	3,8643	3,6225	3,3973
6,1	4,8841	4,5647	4,2682	3,9926	3,7365	3,4984	3,2768	3,0706	2,8786	2,6997
6,2	3,8807	3,6270	3,3914	3,1726	2,9691	2,7799	2,6039	2,4401	2,2876	2,1455
6,3	3,0836	2,8821	2,6950	2,5211	2,3595	2,2093	2,0695	1,9394	1,8182	1,7053
6,4	2,4505	2,2904	2,1418	2,0037	1,8753	1,7560	1,6449	1,5416	1,4453	1,3557
6,5	1,9476	1,8204	1,7024	1,5927	1,4907	1,3959	1,3077	1,2256	1,1492	1,0779
6,6	1,5481	1,4471	1,3533	1,2662	1,1852	1,1099	1,0398	0,9746	0,9139	0,8573
6,7	1,2308	1,1506	1,0761	1,0069	0,9425	0,8827	0,8271	0,7753	0,7270	0,6821
6,8	0,9787	0,9150	0,8559	0,8009	0,7498	0,7023	0,6580	0,6169	0,5786	0,5429
6,9	0,7785	0,7279	0,6809	0,6372	0,5967	0,5589	0,5238	0,4911	0,4607	0,4323
7	0,6195	0,5793	0,5420	0,5073	0,4750	0,4450	0,4172	0,3912	0,3670	0,3445
7,1	0,4932	0,4612	0,4316	0,4040	0,3784	0,3546	0,3324	0,3118	0,2926	0,2747
7,2	0,3928	0,3675	0,3439	0,3220	0,3017	0,2828	0,2652	0,2488	0,2335	0,2193
7,3	0,3131	0,2930	0,2743	0,2569	0,2407	0,2257	0,2117	0,1987	0,1866	0,1753
7,4	0,2498	0,2338	0,2189	0,2051	0,1923	0,1804	0,1693	0,1589	0,1493	0,1403
7,5	0,1995	0,1868	0,1750	0,1640	0,1538	0,1444	0,1355	0,1273	0,1197	0,1126
7,6	0,1596	0,1495	0,1401	0,1314	0,1233	0,1158	0,1088	0,1022	0,0962	0,0905
7,7	0,1278	0,1198	0,1124	0,1055	0,0990	0,0930	0,0875	0,0823	0,0775	0,0730
7,8	0,1026	0,0963	0,0904	0,0849	0,0797	0,0750	0,0706	0,0665	0,0626	0,0591
7,9	0,0826	0,0776	0,0729	0,0685	0,0644	0,0607	0,0571	0,0539	0,0508	0,0480
8	0,0667	0,0627	0,0590	0,0555	0,0523	0,0493	0,0465	0,0439	0,0415	0,0392
8,1	0,0541	0,0509	0,0479	0,0452	0,0426	0,0402	0,0380	0,0359	0,0340	0,0322
8,2	0,0440	0,0415	0,0392	0,0370	0,0349	0,0330	0,0313	0,0296	0,0281	0,0267
8,3	0,0361	0,0341	0,0322	0,0305	0,0288	0,0273	0,0259	0,0246	0,0234	0,0223
8,4	0,0297	0,0281	0,0267	0,0253	0,0240	0,0228	0,0217	0,0207	0,0197	0,0188
8,5	0,0247	0,0234	0,0223	0,0212	0,0202	0,0192	0,0183	0,0175	0,0167	0,0160
8,6	0,0207	0,0197	0,0188	0,0179	0,0171	0,0163	0,0156	0,0150	0,0144	0,0138
8,7	0,0176	0,0167	0,0160	0,0153	0,0147	0,0141	0,0135	0,0130	0,0125	0,0121
8,8	0,0150	0,0144	0,0138	0,0133	0,0127	0,0123	0,0118	0,0114	0,0110	0,0107
8,9	0,0130	0,0125	0,0121	0,0116	0,0112	0,0108	0,0105	0,0102	0,0098	0,0096
9	0,0114	0,0110	0,0107	0,0103	0,0100	0,0097	0,0094	0,0092	0,0089	0,0087

Anhang A 4

Konzentration des Gesamtammoniums, bei der die Konzentration von Ammoniak bei gegebenem pH-Wert und gegebener Temperatur 0,025 mg/l beträgt

In diesem Anhang ist eine Tabelle, mit der die Gesamtammonium-Konzentration $\{\text{NH}_4\}_{\text{Ges}}$ ermittelt werden kann, die einem NH_3 -Gehalt im Wasser (bei gegebener Temperatur und gegebenem pH-Wert) von 0,025 mg/l entspricht. Der Wert 0,025 mg/l NH_3 ist in der EU-Richtlinie 78/659/EWG (Fischereigewässer) als **imperativer Wert** angegeben. Mit Hilfe dieser Tabelle können analoge Fragestellungen wie sie bei der Tabelle im Anhang A 3 angeführt sind beantwortet werden. Ein Beispiel soll das verdeutlichen:

Wie hoch darf der Gesamtammoniumgehalt $\{\text{NH}_4\}_{\text{Ges}}$ eines Wassers sein, damit bei einer Temperatur von 24 °C und einem pH-Wert von 7,3 der imperative Wert von 0,025 mg/l NH_3 nicht überschritten wird ?

Dazu wird in der Tabelle der Wert von pH = 7,3 und t = 24 °C gesucht. Er lautet: 2,5305 mg/l $\text{NH}_4 \cong 2,53 \text{ mg/l } \text{NH}_4$.

Im Wasser mit der Temperatur von 24 °C und einem pH-Wert von 7,3 dürfen maximal 2,53 mg/l Gesamtammonium enthalten sein um den imperativen Wert von 0,025 mg/l NH_3 nicht zu überschreiten.

Bemerkung:

Die in der Tabelle angeführten Dezimalstellen sind als reine Rechengrößen zu verstehen und müssen je nach Genauigkeitsanspruch gerundet werden.

Tabelle 4: Konzentration des Ges.-NH₄ (NH₄)_{ges.} (in mg/l), bei der die Konzentration von NH₃ bei gegebenem pH-Wert und gegebener Temperatur 0,025 mg/l beträgt.

pH-Wert	0°C	1°C	2°C	3°C	4°C	5°C	6°C	7°C	8°C	9°C	10°C
6	320,2902	294,5144	270,9783	249,4737	229,8130	211,8268	195,3625	180,2822	166,4612	153,7868	142,1572
6,1	254,4210	233,9466	215,2512	198,1695	182,5524	168,2655	155,1874	143,2087	132,2303	122,1627	112,9249
6,2	202,0992	185,8358	170,9855	157,4171	145,0120	133,6635	123,2752	113,7602	105,0397	97,0427	89,7049
6,3	160,5386	147,6201	135,8241	125,0463	115,1925	106,1781	97,9264	90,3684	83,4414	77,0892	71,2606
6,4	127,5258	117,2642	107,8944	99,3332	91,5061	84,3457	77,7912	71,7876	66,2853	61,2396	56,6097
6,5	101,3028	93,1517	85,7090	78,9086	72,6914	67,0036	61,7972	57,0283	52,6578	48,6498	44,9721
6,6	80,4731	73,9985	68,0865	62,6848	57,7462	53,2283	49,0927	45,3047	41,8330	38,6493	35,7281
6,7	63,9275	58,7845	54,0885	49,7978	45,8749	42,2862	39,0011	35,9922	33,2346	30,7057	28,3853
6,8	50,7849	46,6997	42,9695	39,5612	36,4452	33,5946	30,9852	28,5951	26,4046	24,3959	22,5527
6,9	40,3453	37,1003	34,1373	31,4300	28,9549	26,6906	24,6178	22,7193	20,9794	19,3838	17,9197
7	32,0529	29,4753	27,1217	24,9712	23,0051	21,2065	19,5601	18,0521	16,6700	15,4025	14,2395
7,1	25,4659	23,4185	21,5490	19,8408	18,2791	16,8504	15,5426	14,3447	13,2469	12,2401	11,3163
7,2	20,2338	18,6074	17,1224	15,7655	14,5250	13,3902	12,3514	11,3998	10,5278	9,7281	8,9943
7,3	16,0777	14,7858	13,6062	12,5285	11,5431	10,6416	9,8165	9,0607	8,3680	7,7328	7,1499
7,4	12,7764	11,7503	10,8133	9,9572	9,1744	8,4584	7,8029	7,2026	6,6524	6,1478	5,6848
7,5	10,1541	9,3390	8,5947	7,9147	7,2930	6,7242	6,2035	5,7267	5,2896	4,8888	4,5210
7,6	8,0711	7,4237	6,8325	6,2923	5,7985	5,3467	4,9331	4,5543	4,2071	3,8888	3,5966
7,7	6,4166	5,9023	5,4327	5,0036	4,6113	4,2525	3,9239	3,6231	3,3473	3,0944	2,8624
7,8	5,1023	4,6938	4,3208	3,9800	3,6684	3,3833	3,1223	2,8833	2,6643	2,4634	2,2791
7,9	4,0584	3,7339	3,4376	3,1668	2,9193	2,6929	2,4856	2,2958	2,1218	1,9622	1,8158
8	3,2291	2,9714	2,7360	2,5210	2,3243	2,1445	1,9798	1,8290	1,6908	1,5641	1,4478
8,1	2,5704	2,3657	2,1787	2,0079	1,8517	1,7089	1,5781	1,4583	1,3485	1,2478	1,1555
8,2	2,0472	1,8846	1,7361	1,6004	1,4763	1,3628	1,2590	1,1638	1,0766	0,9966	0,9233
8,3	1,6316	1,5024	1,3845	1,2767	1,1781	1,0880	1,0055	0,9299	0,8606	0,7971	0,7388
8,4	1,3015	1,1989	1,1052	1,0195	0,9413	0,8697	0,8041	0,7441	0,6891	0,6386	0,5923
8,5	1,0392	0,9577	0,8833	0,8153	0,7531	0,6963	0,6442	0,5965	0,5528	0,5127	0,4759
8,6	0,8309	0,7662	0,7071	0,6531	0,6037	0,5585	0,5171	0,4793	0,4445	0,4127	0,3835
8,7	0,6655	0,6141	0,5671	0,5242	0,4850	0,4491	0,4162	0,3861	0,3586	0,3333	0,3101
8,8	0,5341	0,4932	0,4559	0,4218	0,3907	0,3622	0,3361	0,3122	0,2903	0,2702	0,2517
8,9	0,4297	0,3972	0,3676	0,3405	0,3158	0,2931	0,2724	0,2534	0,2360	0,2201	0,2054
9	0,3467	0,3210	0,2974	0,2759	0,2563	0,2383	0,2218	0,2067	0,1929	0,1802	0,1686

Fortsetzung zu Tab. 4: Konzentration des Ges.-NH₄ (NH₄)_{Ges} (in mg/l), bei der die Konzentration von NH₃ bei gegebenem pH-Wert und gegebener Temperatur 0,025 mg/l beträgt.

pH-Wert	11°C	12°C	13°C	14°C	15°C	16°C	17°C	18°C	19°C	20°C
6	131,4798	121,6712	112,6556	104,3640	96,7342	89,7094	83,2381	77,2735	71,7730	66,6978
6,1	104,4436	96,6523	89,4909	82,9047	76,8441	71,2642	66,1238	61,3860	57,0168	52,9854
6,2	82,9679	76,7791	71,0906	65,8590	61,0449	56,6126	52,5295	48,7661	45,2955	42,0932
6,3	65,9092	60,9933	56,4747	52,3191	48,4951	44,9744	41,7311	38,7417	35,9849	33,4413
6,4	52,3590	48,4541	44,8649	41,5640	38,5265	35,7299	33,1536	30,7791	28,5893	26,5688
6,5	41,5957	38,4939	35,6429	33,0209	30,6081	28,3867	26,3403	24,4541	22,7147	21,1098
6,6	33,0461	30,5823	28,3176	26,2349	24,3184	22,5538	20,9283	19,4301	18,0484	16,7735
6,7	26,2549	24,2978	22,4989	20,8446	19,3222	17,9206	16,6294	15,4393	14,3418	13,3291
6,8	20,8604	19,3059	17,8770	16,5629	15,3536	14,2403	13,2146	12,2693	11,3975	10,5932
6,9	16,5755	15,3406	14,2056	13,1618	12,2013	11,3169	10,5022	9,7513	9,0588	8,4199
7	13,1718	12,1910	11,2894	10,4602	9,6973	8,9948	8,3476	7,7512	7,2011	6,6936
7,1	10,4682	9,6891	8,9729	8,3143	7,7082	7,1502	6,6362	6,1624	5,7255	5,3224
7,2	8,3206	7,7017	7,1329	6,6097	6,1283	5,6851	5,2768	4,9004	4,5534	4,2332
7,3	6,6148	6,1232	5,6713	5,2557	4,8733	4,5213	4,1969	3,8980	3,6223	3,3680
7,4	5,2597	4,8692	4,5103	4,1802	3,8765	3,5968	3,3392	3,1017	2,8828	2,6807
7,5	4,1834	3,8732	3,5881	3,3259	3,0846	2,8625	2,6579	2,4692	2,2953	2,1348
7,6	3,3284	3,0821	2,8556	2,6473	2,4557	2,2792	2,1167	1,9668	1,8287	1,7012
7,7	2,6493	2,4536	2,2737	2,1083	1,9561	1,8159	1,6868	1,5678	1,4580	1,3567
7,8	2,1099	1,9544	1,8115	1,6801	1,5592	1,4479	1,3453	1,2508	1,1636	1,0831
7,9	1,6814	1,5579	1,4444	1,3400	1,2440	1,1555	1,0741	0,9990	0,9297	0,8658
8	1,3410	1,2429	1,1528	1,0699	0,9936	0,9233	0,8586	0,7990	0,7439	0,6932
8,1	1,0707	0,9927	0,9211	0,8553	0,7947	0,7389	0,6875	0,6401	0,5964	0,5561
8,2	0,8559	0,7940	0,7371	0,6848	0,6367	0,5923	0,5515	0,5139	0,4792	0,4471
8,3	0,6853	0,6361	0,5910	0,5494	0,5112	0,4760	0,4435	0,4136	0,3861	0,3606
8,4	0,5498	0,5108	0,4749	0,4419	0,4115	0,3835	0,3578	0,3340	0,3121	0,2919
8,5	0,4422	0,4112	0,3826	0,3564	0,3323	0,3101	0,2896	0,2708	0,2534	0,2373
8,6	0,3567	0,3320	0,3094	0,2886	0,2694	0,2518	0,2355	0,2205	0,2067	0,1940
8,7	0,2888	0,2692	0,2512	0,2347	0,2194	0,2054	0,1925	0,1806	0,1696	0,1595
8,8	0,2348	0,2193	0,2050	0,1918	0,1798	0,1686	0,1584	0,1489	0,1402	0,1321
8,9	0,1920	0,1796	0,1683	0,1578	0,1482	0,1394	0,1312	0,1237	0,1168	0,1104
9	0,1579	0,1481	0,1391	0,1308	0,1232	0,1162	0,1097	0,1037	0,0982	0,0932

Fortsetzung zu Tab. 4: Konzentration des Ges.-NH₃ (NH₃)_{Gas} (in mg/l), bei der die Konzentration von NH₃ bei gegebenem pH-Wert und gegebener Temperatur 0,025 mg/l beträgt.

pH-Wert	21°C	22°C	23°C	24°C	25°C	26°C	27°C	28°C	29°C	30°C
6	62,0124	57,6848	53,6856	49,9879	46,5673	43,4015	40,4699	37,7541	35,2368	32,9025
6,1	49,2637	45,8261	42,6494	39,7122	36,9952	34,4805	32,1519	29,9946	27,9950	26,1408
6,2	39,1370	36,4064	33,8831	31,5500	29,3918	27,3942	25,5446	23,8310	22,2427	20,7698
6,3	31,0930	28,9241	26,9197	25,0665	23,3521	21,7655	20,2962	18,9351	17,6734	16,5035
6,4	24,7035	22,9807	21,3886	19,9165	18,5547	17,2944	16,1273	15,0461	14,0440	13,1146
6,5	19,6282	18,2597	16,9950	15,8257	14,7440	13,7429	12,8158	11,9570	11,1610	10,4228
6,6	15,5966	14,5096	13,5050	12,5762	11,7170	10,9218	10,1854	9,5032	8,8709	8,2846
6,7	12,3943	11,5308	10,7329	9,9951	9,3126	8,6809	8,0960	7,5541	7,0519	6,5861
6,8	9,8506	9,1647	8,5309	7,9448	7,4027	6,9010	6,4363	6,0059	5,6069	5,2370
6,9	7,8300	7,2852	6,7818	6,3162	5,8856	5,4871	5,1180	4,7761	4,4592	4,1653
7	6,2251	5,7923	5,3924	5,0226	4,6806	4,3640	4,0708	3,7992	3,5475	3,3141
7,1	4,9502	4,6064	4,2888	3,9951	3,7233	3,4719	3,2390	3,0233	2,8233	2,6379
7,2	3,9375	3,6645	3,4121	3,1788	2,9630	2,7633	2,5783	2,4069	2,2481	2,1008
7,3	3,1331	2,9162	2,7158	2,5305	2,3590	2,2004	2,0535	1,9173	1,7912	1,6742
7,4	2,4942	2,3219	2,1627	2,0155	1,8793	1,7533	1,6366	1,5284	1,4282	1,3353
7,5	1,9866	1,8498	1,7233	1,6064	1,4982	1,3981	1,3054	1,2195	1,1399	1,0661
7,6	1,5835	1,4748	1,3743	1,2815	1,1955	1,1160	1,0424	0,9742	0,9109	0,8523
7,7	1,2633	1,1769	1,0971	1,0233	0,9551	0,8919	0,8334	0,7792	0,7290	0,6824
7,8	1,0089	0,9403	0,8769	0,8183	0,7641	0,7139	0,6675	0,6244	0,5845	0,5475
7,9	0,8068	0,7524	0,7020	0,6555	0,6124	0,5725	0,5356	0,5014	0,4698	0,4404
8	0,6463	0,6031	0,5631	0,5261	0,4919	0,4602	0,4309	0,4038	0,3786	0,3552
8,1	0,5189	0,4845	0,4527	0,4233	0,3962	0,3710	0,3477	0,3262	0,3062	0,2876
8,2	0,4176	0,3903	0,3650	0,3417	0,3201	0,3002	0,2817	0,2645	0,2486	0,2339
8,3	0,3371	0,3155	0,2954	0,2769	0,2597	0,2439	0,2292	0,2156	0,2029	0,1912
8,4	0,2733	0,2560	0,2401	0,2254	0,2118	0,1992	0,1875	0,1767	0,1667	0,1574
8,5	0,2225	0,2088	0,1962	0,1845	0,1737	0,1636	0,1544	0,1458	0,1378	0,1304
8,6	0,1822	0,1713	0,1613	0,1520	0,1434	0,1354	0,1281	0,1212	0,1149	0,1091
8,7	0,1502	0,1415	0,1335	0,1262	0,1193	0,1130	0,1072	0,1018	0,0967	0,0921
8,8	0,1247	0,1179	0,1115	0,1057	0,1002	0,0952	0,0906	0,0863	0,0823	0,0786
8,9	0,1045	0,0991	0,0940	0,0894	0,0851	0,0811	0,0774	0,0740	0,0708	0,0679
9	0,0885	0,0841	0,0801	0,0764	0,0730	0,0699	0,0669	0,0642	0,0617	0,0594

Fortsetzung zu Tab. 4: Konzentration des Ges.-NH₃ (NH₃)_{ges.} (in mg/l), bei der die Konzentration von NH₃ bei gegebenem pH-Wert und gegebener Temperatur 0,025 mg/l beträgt.

pH-Wert	31°C	32°C	33°C	34°C	35°C	36°C	37°C	38°C	39°C	40°C
6	30,7367	28,7265	26,8597	25,1253	23,5132	22,0141	20,6194	19,3213	18,1126	16,9866
6,1	24,4205	22,8237	21,3408	19,9632	18,6826	17,4918	16,3840	15,3529	14,3928	13,4984
6,2	19,4033	18,1349	16,9571	15,8628	14,8456	13,8997	13,0197	12,2007	11,4381	10,7276
6,3	15,4181	14,4105	13,4749	12,6057	11,7977	11,0464	10,3474	9,6968	9,0910	8,5267
6,4	12,2524	11,4521	10,7090	10,0185	9,3767	8,7799	8,2247	7,7079	7,2267	6,7784
6,5	9,7379	9,1022	8,5119	7,9634	7,4536	6,9796	6,5385	6,1280	5,7458	5,3897
6,6	7,7405	7,2356	6,7667	6,3310	5,9261	5,5495	5,1992	4,8731	4,5695	4,2867
6,7	6,1540	5,7529	5,3804	5,0343	4,7127	4,4136	4,1353	3,8763	3,6351	3,4105
6,8	4,8937	4,5751	4,2793	4,0044	3,7489	3,5113	3,2902	3,0845	2,8929	2,7145
6,9	3,8927	3,6396	3,4046	3,1862	2,9833	2,7946	2,6190	2,4556	2,3034	2,1616
7	3,0975	2,8965	2,7098	2,5364	2,3752	2,2252	2,0858	1,9560	1,8351	1,7225
7,1	2,4659	2,3062	2,1579	2,0201	1,8921	1,7730	1,6622	1,5591	1,4631	1,3737
7,2	1,9642	1,8373	1,7195	1,6101	1,5084	1,4138	1,3258	1,2439	1,1676	1,0966
7,3	1,5656	1,4649	1,3713	1,2844	1,2036	1,1285	1,0586	0,9935	0,9329	0,8765
7,4	1,2491	1,1690	1,0947	1,0257	0,9615	0,9018	0,8463	0,7946	0,7465	0,7017
7,5	0,9976	0,9341	0,8750	0,8202	0,7692	0,7218	0,6777	0,6366	0,5984	0,5628
7,6	0,7979	0,7474	0,7005	0,6569	0,6164	0,5788	0,5438	0,5111	0,4808	0,4525
7,7	0,6392	0,5991	0,5619	0,5273	0,4951	0,4652	0,4374	0,4115	0,3873	0,3649
7,8	0,5132	0,4813	0,4518	0,4243	0,3987	0,3750	0,3529	0,3323	0,3131	0,2953
7,9	0,4131	0,3878	0,3643	0,3425	0,3222	0,3033	0,2857	0,2694	0,2542	0,2400
8	0,3336	0,3135	0,2948	0,2775	0,2613	0,2464	0,2324	0,2194	0,2073	0,1961
8,1	0,2704	0,2545	0,2396	0,2258	0,2130	0,2011	0,1901	0,1797	0,1701	0,1612
8,2	0,2202	0,2076	0,1958	0,1848	0,1747	0,1652	0,1564	0,1482	0,1406	0,1335
8,3	0,1804	0,1703	0,1610	0,1523	0,1442	0,1367	0,1297	0,1232	0,1171	0,1115
8,4	0,1487	0,1407	0,1333	0,1264	0,1200	0,1140	0,1085	0,1033	0,0985	0,0940
8,5	0,1236	0,1172	0,1113	0,1058	0,1008	0,0960	0,0916	0,0875	0,0837	0,0801
8,6	0,1036	0,0986	0,0939	0,0895	0,0855	0,0817	0,0782	0,0749	0,0719	0,0691
8,7	0,0878	0,0837	0,0800	0,0766	0,0733	0,0704	0,0676	0,0650	0,0626	0,0603
8,8	0,0752	0,0720	0,0690	0,0663	0,0637	0,0613	0,0591	0,0571	0,0551	0,0534
8,9	0,0651	0,0626	0,0603	0,0581	0,0560	0,0542	0,0524	0,0508	0,0492	0,0478
9	0,0572	0,0552	0,0533	0,0516	0,0500	0,0485	0,0471	0,0458	0,0446	0,0434

Ableitung einer Formel zur Berechnung von Ammoniak in wäßrigen Lösungen

Ammoniak in Wasser /

ANHANG A 5

Temperatur- und pH-abhängige Faktoren zur Berechnung des molaren Ammoniakgehaltes aus der molaren Gesamtammonium-Konzentration

Diese Tabelle dient dazu, wenn in molaren Größen gerechnet werden soll. Sie beinhaltet den **molaren** Bruchteil des Ammoniaks zum Gesamtammonium in % (Gl. 35). Der Tabellenwert ist der hundertfache Faktor, mit der die molare Gesamtammonium-Konzentration zu multiplizieren ist, um den molaren Ammoniakgehalt zu erhalten. Durch die Multiplikation mit 100 wurden gut handhabbare Zahlengrößen in der Tabelle und die Übereinstimmung mit Gl. (35) erreicht.

Beispiel:

Wieviel mmol/l NH_3 sind in einem Wasser mit einem Gesamtammoniumgehalt von 0,03 mmol/l bei einer Temperatur von 10 °C und einem pH-Wert von 8,3 ?

Dazu wird in der Tabelle der Wert von pH = 8,3 und der Temperatur $t = 10$ °C gesucht (= 3,584), mit der Gesamtammonium-Konzentration multipliziert und durch 100 dividiert.

$$\text{mmol/l NH}_3 = 3,584 \cdot 0,03 / 100 = 0,0010752 \cong 0,0011$$

Es sind daher in einem Wasser mit einem Gesamtammoniumgehalt von 0,03 mmol/l, einem pH-Wert von 8,3 und einer Temperatur von 10 °C 0,0011 mmol/l NH_3 .

Bemerkung:

Die in der Tabelle angeführten Dezimalstellen sind als reine Rechengrößen zu verstehen und müssen je nach Genauigkeitsanspruch gerundet werden.

Tabelle 5: Temperatur- und pH-abhängige Faktoren zur Berechnung des molaren Ammoniakgehaltes $[NH_3]$ aus der molaren Gesamtammonium-Konzentration $[NH_4]_{Ges}$ (Gl. (35))

pH-Wert	0°C	1°C	2°C	3°C	4°C	5°C	6°C	7°C	8°C	9°C	10°C
6	0,008	0,009	0,010	0,011	0,012	0,013	0,014	0,015	0,016	0,017	0,019
6,1	0,010	0,011	0,012	0,013	0,015	0,016	0,017	0,018	0,020	0,022	0,023
6,2	0,013	0,014	0,015	0,017	0,018	0,020	0,021	0,023	0,025	0,027	0,030
6,3	0,016	0,018	0,019	0,021	0,023	0,025	0,027	0,029	0,032	0,034	0,037
6,4	0,021	0,023	0,025	0,027	0,029	0,031	0,034	0,037	0,040	0,043	0,047
6,5	0,026	0,028	0,031	0,034	0,036	0,040	0,043	0,046	0,050	0,054	0,059
6,6	0,033	0,036	0,039	0,042	0,046	0,050	0,054	0,058	0,063	0,069	0,074
6,7	0,041	0,045	0,049	0,053	0,058	0,063	0,068	0,074	0,080	0,086	0,093
6,8	0,052	0,057	0,062	0,067	0,073	0,079	0,085	0,093	0,100	0,109	0,117
6,9	0,066	0,071	0,078	0,084	0,091	0,099	0,108	0,117	0,126	0,137	0,148
7	0,083	0,090	0,098	0,106	0,115	0,125	0,135	0,147	0,159	0,172	0,186
7,1	0,104	0,113	0,123	0,133	0,145	0,157	0,170	0,185	0,200	0,216	0,234
7,2	0,131	0,142	0,155	0,168	0,182	0,198	0,214	0,232	0,252	0,272	0,294
7,3	0,165	0,179	0,195	0,211	0,229	0,249	0,270	0,292	0,316	0,342	0,370
7,4	0,207	0,225	0,245	0,266	0,289	0,313	0,339	0,368	0,398	0,431	0,466
7,5	0,261	0,284	0,308	0,335	0,363	0,394	0,427	0,462	0,501	0,542	0,586
7,6	0,328	0,357	0,388	0,421	0,457	0,495	0,537	0,581	0,629	0,681	0,736
7,7	0,413	0,449	0,487	0,529	0,574	0,623	0,675	0,731	0,791	0,856	0,925
7,8	0,519	0,564	0,613	0,665	0,722	0,783	0,848	0,918	0,994	1,075	1,162
7,9	0,652	0,709	0,770	0,836	0,907	0,983	1,065	1,153	1,248	1,349	1,458
8	0,820	0,891	0,968	1,050	1,139	1,235	1,337	1,448	1,566	1,693	1,829
8,1	1,030	1,119	1,215	1,319	1,430	1,550	1,678	1,816	1,964	2,122	2,292
8,2	1,293	1,405	1,525	1,655	1,794	1,943	2,103	2,275	2,460	2,657	2,868
8,3	1,623	1,762	1,913	2,074	2,248	2,434	2,634	2,848	3,077	3,322	3,584
8,4	2,035	2,209	2,396	2,597	2,813	3,045	3,293	3,559	3,843	4,146	4,471
8,5	2,548	2,765	2,998	3,248	3,516	3,803	4,111	4,439	4,790	5,165	5,564
8,6	3,187	3,456	3,745	4,055	4,386	4,741	5,120	5,525	5,957	6,416	6,905
8,7	3,979	4,312	4,669	5,051	5,460	5,896	6,362	6,858	7,385	7,945	8,540
8,8	4,958	5,369	5,808	6,277	6,778	7,312	7,879	8,483	9,123	9,801	10,519
8,9	6,163	6,666	7,204	7,776	8,386	9,034	9,721	10,449	11,220	12,033	12,891
9	7,637	8,250	8,903	9,597	10,333	11,113	11,938	12,808	13,726	14,691	15,705

Forts. zu Tab. 5: Temperatur- und pH-abhängige Faktoren zur Berechnung des molaren Ammoniakgehaltes $[NH_3]$ aus der molaren Gesamtammonium-Konzentration $[NH_4]_{Ges}$ (Gl. (35))

pH-Wert	11°C	12°C	13°C	14°C	15°C	16°C	17°C	18°C	19°C	20°C
6	0,020	0,022	0,024	0,025	0,027	0,030	0,032	0,034	0,037	0,040
6,1	0,025	0,027	0,030	0,032	0,034	0,037	0,040	0,043	0,046	0,050
6,2	0,032	0,034	0,037	0,040	0,043	0,047	0,050	0,054	0,058	0,063
6,3	0,040	0,043	0,047	0,051	0,055	0,059	0,063	0,068	0,074	0,079
6,4	0,051	0,055	0,059	0,064	0,069	0,074	0,080	0,086	0,093	0,100
6,5	0,064	0,069	0,074	0,080	0,087	0,093	0,101	0,108	0,117	0,125
6,6	0,080	0,087	0,094	0,101	0,109	0,117	0,127	0,136	0,147	0,158
6,7	0,101	0,109	0,118	0,127	0,137	0,148	0,159	0,172	0,185	0,199
6,8	0,127	0,137	0,148	0,160	0,172	0,186	0,200	0,216	0,232	0,250
6,9	0,160	0,173	0,186	0,201	0,217	0,234	0,252	0,272	0,292	0,314
7	0,201	0,217	0,235	0,253	0,273	0,294	0,317	0,342	0,368	0,396
7,1	0,253	0,273	0,295	0,318	0,344	0,370	0,399	0,430	0,462	0,498
7,2	0,318	0,344	0,371	0,401	0,432	0,466	0,502	0,540	0,582	0,626
7,3	0,400	0,432	0,467	0,504	0,543	0,586	0,631	0,679	0,731	0,786
7,4	0,503	0,544	0,587	0,633	0,683	0,736	0,793	0,854	0,919	0,988
7,5	0,633	0,684	0,738	0,796	0,858	0,925	0,996	1,072	1,154	1,240
7,6	0,796	0,859	0,927	1,000	1,078	1,162	1,251	1,346	1,448	1,557
7,7	0,999	1,079	1,165	1,256	1,354	1,458	1,570	1,689	1,816	1,952
7,8	1,255	1,355	1,462	1,576	1,698	1,829	1,968	2,117	2,276	2,445
7,9	1,575	1,700	1,833	1,976	2,129	2,292	2,465	2,651	2,848	3,058
8	1,975	2,130	2,297	2,475	2,665	2,868	3,084	3,314	3,559	3,820
8,1	2,473	2,667	2,875	3,096	3,332	3,584	3,852	4,137	4,440	4,762
8,2	3,094	3,335	3,592	3,867	4,159	4,470	4,801	5,153	5,526	5,922
8,3	3,864	4,162	4,481	4,820	5,180	5,563	5,970	6,402	6,859	7,343
8,4	4,816	5,184	5,576	5,993	6,435	6,904	7,402	7,928	8,484	9,071
8,5	5,989	6,440	6,920	7,429	7,969	8,540	9,143	9,780	10,451	11,158
8,6	7,424	7,975	8,559	9,176	9,829	10,518	11,244	12,008	12,811	13,653
8,7	9,170	9,837	10,541	11,284	12,067	12,890	13,755	14,661	15,610	16,601
8,8	11,277	12,076	12,918	13,803	14,731	15,704	16,721	17,783	18,888	20,038
8,9	13,794	14,742	15,736	16,777	17,864	18,998	20,177	21,401	22,670	23,982
9	16,766	17,877	19,035	20,242	21,495	22,795	24,140	25,528	26,958	28,427

Forts. zu Tab. 5: Temperatur- und pH-abhängige Faktoren zur Berechnung des molaren Ammoniakgehaltes $[NH_3]$ aus der molaren Gesamtammonium-Konzentration $[NH_4]_{Ges}$ (Gl. (35))

pH-Wert	21°C	22°C	23°C	24°C	25°C	26°C	27°C	28°C	29°C	30°C
6	0,043	0,046	0,049	0,053	0,057	0,061	0,065	0,070	0,075	0,080
6,1	0,054	0,058	0,062	0,067	0,072	0,077	0,082	0,088	0,095	0,101
6,2	0,068	0,073	0,078	0,084	0,090	0,097	0,104	0,111	0,119	0,127
6,3	0,085	0,092	0,098	0,106	0,113	0,122	0,130	0,140	0,150	0,160
6,4	0,107	0,115	0,124	0,133	0,143	0,153	0,164	0,176	0,189	0,202
6,5	0,135	0,145	0,156	0,167	0,180	0,193	0,207	0,221	0,237	0,254
6,6	0,170	0,182	0,196	0,211	0,226	0,242	0,260	0,279	0,298	0,320
6,7	0,214	0,230	0,247	0,265	0,284	0,305	0,327	0,351	0,375	0,402
6,8	0,269	0,289	0,310	0,333	0,358	0,384	0,411	0,441	0,472	0,506
6,9	0,338	0,363	0,390	0,419	0,450	0,483	0,517	0,554	0,594	0,636
7	0,425	0,457	0,491	0,527	0,566	0,607	0,650	0,697	0,746	0,799
7,1	0,535	0,575	0,617	0,663	0,711	0,763	0,818	0,876	0,938	1,004
7,2	0,672	0,723	0,776	0,833	0,894	0,958	1,027	1,100	1,178	1,260
7,3	0,845	0,908	0,975	1,046	1,122	1,203	1,290	1,381	1,478	1,582
7,4	1,062	1,140	1,224	1,314	1,409	1,510	1,618	1,732	1,854	1,983
7,5	1,333	1,431	1,537	1,648	1,767	1,894	2,028	2,171	2,323	2,484
7,6	1,672	1,795	1,927	2,066	2,215	2,373	2,540	2,718	2,907	3,107
7,7	2,096	2,250	2,414	2,588	2,772	2,969	3,177	3,398	3,632	3,880
7,8	2,625	2,816	3,020	3,236	3,465	3,709	3,967	4,241	4,530	4,836
7,9	3,282	3,520	3,772	4,040	4,324	4,625	4,944	5,281	5,637	6,013
8	4,097	4,391	4,703	5,033	5,383	5,754	6,145	6,558	6,994	7,454
8,1	5,103	5,466	5,849	6,255	6,684	7,137	7,615	8,119	8,649	9,206
8,2	6,341	6,785	7,254	7,749	8,271	8,822	9,401	10,010	10,650	11,320
8,3	7,854	8,394	8,964	9,564	10,195	10,858	11,554	12,284	13,047	13,846
8,4	9,691	10,343	11,029	11,749	12,504	13,296	14,123	14,988	15,889	16,827
8,5	11,901	12,681	13,499	14,354	15,248	16,181	17,153	18,163	19,213	20,300
8,6	14,535	15,457	16,420	17,423	18,467	19,552	20,676	21,839	23,041	24,280
8,7	17,634	18,710	19,828	20,988	22,188	23,428	24,707	26,023	27,374	28,758
8,8	21,231	22,467	23,743	25,060	26,416	27,808	29,234	30,692	32,181	33,696
8,9	25,336	26,729	28,160	29,627	31,126	32,656	34,214	35,795	37,397	39,016
9	29,932	31,472	33,042	34,641	36,263	37,907	39,567	41,241	42,924	44,612

Forts. zu Tab. 5: Temperatur- und pH-abhängige Faktoren zur Berechnung des molaren Ammoniakgehaltes $[NH_3]$ aus der molaren Gesamtammonium-Konzentration $[NH_4]_{Ges}$ (Gl. (35)3)

pH-Wert	31°C	32°C	33°C	34°C	35°C	36°C	37°C	38°C	39°C	40°C
6	0,086	0,092	0,099	0,105	0,113	0,120	0,128	0,137	0,146	0,156
6,1	0,108	0,116	0,124	0,133	0,142	0,151	0,162	0,172	0,184	0,196
6,2	0,136	0,146	0,156	0,167	0,178	0,191	0,203	0,217	0,232	0,247
6,3	0,172	0,184	0,197	0,210	0,224	0,240	0,256	0,273	0,291	0,311
6,4	0,216	0,231	0,247	0,264	0,282	0,302	0,322	0,344	0,366	0,391
6,5	0,272	0,291	0,311	0,333	0,355	0,379	0,405	0,432	0,461	0,491
6,6	0,342	0,366	0,391	0,418	0,447	0,477	0,509	0,543	0,579	0,618
6,7	0,430	0,460	0,492	0,526	0,562	0,600	0,640	0,683	0,728	0,776
6,8	0,541	0,579	0,619	0,661	0,706	0,754	0,805	0,858	0,915	0,975
6,9	0,680	0,728	0,778	0,831	0,888	0,948	1,011	1,078	1,150	1,225
7	0,855	0,914	0,977	1,044	1,115	1,190	1,270	1,354	1,443	1,537
7,1	1,074	1,148	1,227	1,311	1,399	1,493	1,593	1,698	1,810	1,928
7,2	1,348	1,441	1,540	1,645	1,755	1,873	1,997	2,129	2,268	2,415
7,3	1,691	1,808	1,931	2,062	2,200	2,347	2,501	2,665	2,838	3,021
7,4	2,120	2,265	2,419	2,582	2,754	2,936	3,129	3,332	3,547	3,774
7,5	2,654	2,835	3,026	3,229	3,443	3,669	3,907	4,159	4,425	4,705
7,6	3,319	3,543	3,780	4,031	4,296	4,575	4,870	5,180	5,508	5,852
7,7	4,142	4,420	4,713	5,022	5,348	5,692	6,054	6,435	6,836	7,257
7,8	5,160	5,501	5,861	6,241	6,641	7,062	7,504	7,969	8,457	8,968
7,9	6,410	6,828	7,269	7,732	8,219	8,731	9,267	9,830	10,418	11,033
8	7,938	8,447	8,982	9,543	10,132	10,749	11,394	12,068	12,771	13,504
8,1	9,792	10,407	11,051	11,725	12,429	13,165	13,933	14,732	15,563	16,427
8,2	12,023	12,757	13,525	14,325	15,160	16,028	16,929	17,865	18,834	19,836
8,3	14,679	15,547	16,451	17,390	18,364	19,374	20,418	21,496	22,608	23,752
8,4	17,803	18,815	19,864	20,949	22,070	23,225	24,414	25,635	26,888	28,170
8,5	21,425	22,586	23,784	25,016	26,282	27,580	28,908	30,264	31,647	33,053
8,6	25,554	26,864	28,205	29,578	30,979	32,407	33,858	35,332	36,823	38,331
8,7	30,175	31,620	33,092	34,587	36,104	37,639	39,190	40,752	42,323	43,899
8,8	35,235	36,795	38,372	39,964	41,567	43,177	44,792	46,407	48,019	49,625
8,9	40,649	42,292	43,942	45,594	47,245	48,891	50,529	52,156	53,767	55,361
9	46,301	47,988	49,668	51,339	52,995	54,634	56,253	57,848	59,417	60,957

Anhang A 6

3D-Graphik der Gleichung (35b) im Bereich von 0 °C bis 40 °C und pH-Wert von 6 bis 9

In diesem Anhang ist eine 3D-Graphik der Gl. (35b) abgebildet. Sie soll die Tabelle im Anhang A 2 veranschaulichen. Es zeigt sich dabei sehr gut die starke Zunahme der Ammoniakkonzentration mit steigendem pH-Wert und steigender Temperatur. Weiters zeigt sich, daß die Temperaturabhängigkeit nicht so stark ist, als die pH-Abhängigkeit.