



- Studie - Die Dichte von *Toluol* bei einer Temperaturänderung von 0.1 Grad

Eine Temperaturänderung von 0.1K ist an sich nicht besonders viel; gleichwohl genügt sie, um den Ausdehnungskoeffizienten von Toluol in etwa zu ermitteln. Dies ist dafür ausreichend, dass aufgrund der dabei gewonnenen Daten, die ausschlaggebende Messunsicherheit eingeschätzt werden kann.

Dichtemessgeräte werden in der Regel mit Wasser kalibriert. Wasser hat jedoch eine sehr viel geringere Wärmedehnung, als sie Kohlenwasserstoffe zeigen (z.B. Toluol, Kraftstoffe, Benzin). Aufwendige Validierungsmaßnahmen werden fraglich, weil bei organischen Flüssigkeiten durch die vier bis fünffach größere Wärmedehnung ein anderer Kontext greift. In der Regel ist bei hochauflösenden Dichtemessgeräten eben die Temperaturmessung das schwächste und somit bestimmende Glied. - Ein modernes Messgerät sollte seinem Anwender helfen! -- Misst man beispielsweise Essigsäure und Wasser bei 4°, dann erlaubt bei einem Aufbau, wie in diesem Bericht beschrieben, die Temperaturauflösung (0.01K) bei Essig 1.1E-5 g/cm³, aber bei Wasser 1.4E-8g/cm³ anzuzeigen.

In diesem Dokument wird ein automatisch erzeugter **imeter** -Prüfbericht vorgestellt. Die Ausführlichkeit ergibt sich aus der Forderung, dass alle Variablen einer Messung dargestellt werden sollen (können bzw. müssen). Variabel sind nicht nur die Messdaten - sondern auch Umstände und Abläufe und die Eigenschaften der Normale. Dazu passend verfügt **imeter** einerseits über eine Modelliersprache, um Mess- bzw. Steuerungsverfahren zu gestalten („was soll der Fall sein“) und andererseits über analytische Fähigkeiten, um zu bewerten, *was der Fall* ist und um darüber in Berichten Rückkopplung zu geben. - **imeter** befreit sehr viel kostbare Arbeitszeit, indem nicht nur das Messen/Steuern/Regeln sondern auch die beurteilungsreife Darstellung automatisiert ist.

Die Formatierungsvorgaben des Berichts bestimmen Art und Umfang der Informationsdarstellung. - Anhand eines vollständigen Berichts wird der Anwender (der Kunde oder wir) in die Lage versetzt, Plausibilität und Validität einer Messung detailliert zu überprüfen.

*Der **imeter**-Prüfbericht auf den folgenden Seiten enthält also Elemente, wie automatische Erläuterungen, auf deren Ausgabe man in der Routine natürlich verzichtet (und die leider wortreich den Fluss der Informationen bzw. das Layout beeinträchtigen).*

Bericht (58E2FCO16312B), imeter/MSB, Augsburg am 11.05.06

ID N° 216 - Fluid Dichte & Dilatation

ausgeführt am Freitag, 19 September 2003, von M.Breitwieser

Titel: Toluol, Temperaturabnahme 0.1K
 Bemerkung: Probe: Toluene, Sigma-Aldrich, 99.8% für die HPLC.
 Ergebnis: $\rho_{25,00^\circ\text{C}} = 0,86218\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$, $\kappa = 130\cdot 10^{-5}\text{K}^{-1}$

Bericht

• Vergleichsanalyse zu Toluol (Ref.1)

	Referenzwert	Messung	Abweichung absolut	relativ	Signifikanz
ρ	0,8623	0,8622	-0,0001g·cm ⁻³	0,1‰	6
$-\Delta\rho/\Delta T$	0,0009	0,0011	+0,0002g·cm ⁻³ ·K ⁻¹	20%	

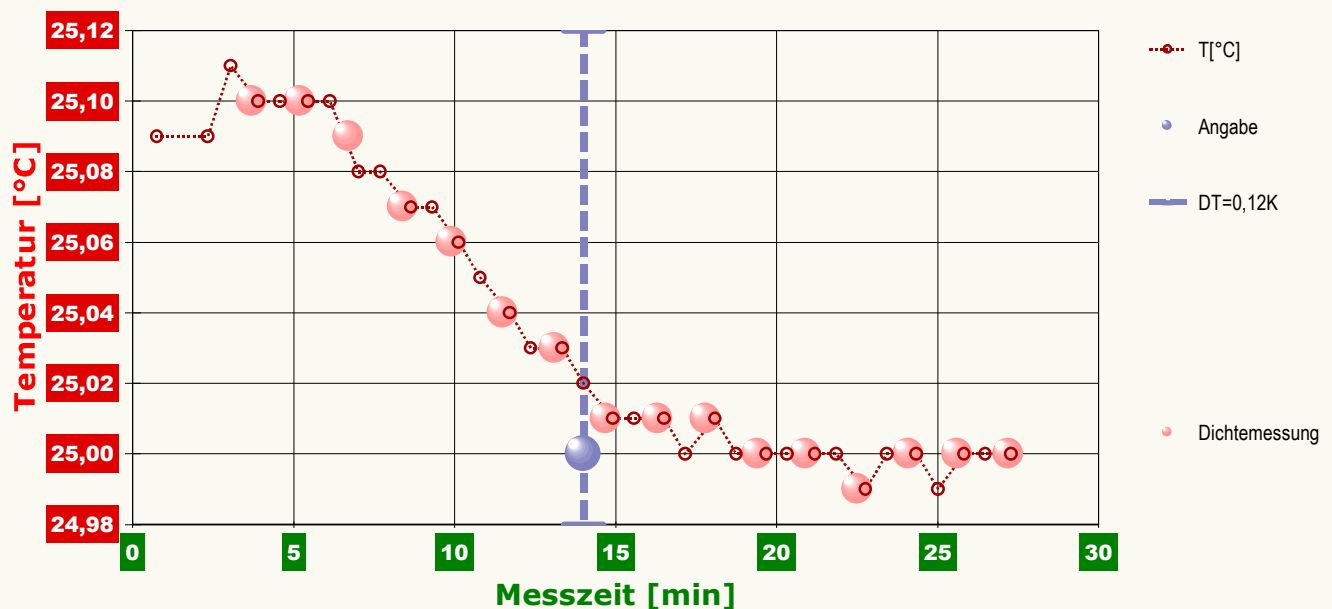
Referenz "Toluol (Ref.1)", Bezugstemperatur = 25,00°C. Zum Datenvergleich wurde das genauere Messergebnis auf die Präzision der Referenzangabe um eine Stelle gekappt. Die Datenbank liefert mit **Toluol (Ref.2)**, 0,86213g·cm⁻³, einen ähnlichen, ggf. geeigneteren Wert, der Unterschied zum Messwert beträgt hier absolut 0,0001g·cm⁻³.

Der Ergebnisvergleich mit den Angaben, die in der Referenzdatenbank zu 'TOLUOL (REF.1)' gefunden werden, stellt die Werteübereinstimmung unabhängig von der Temperatur dar. Der Unterschied wird als absolute Differenz "Probenwert Minus Referenzwert" und als relative Abweichung angegeben. Das Symbol ρ steht für die Messgröße, $-\Delta\rho/\Delta T$ für den Temperaturkoeffizienten; mit "Signifikanz" wird ausgedrückt, um wieviele Male die absolute Unsicherheit größer ist, als der Unterschied von Mess- und Referenzwert. Die Aussagefähigkeit der Signifikanz bei der Bewertung der Temperaturabhängigkeit hängt stark davon ab, dass ein hinreichend großes Temperaturintervall durchgemessen wird.

• 16 Dichtemesswerte

Gesamte Dauer 26,9 Minuten. Es lag eine unstetige Temperaturbewegung im Bereich von 24,99 bis 25,11°C vor.

Diagramm Temperaturprofil:



Im Diagramm "Temperaturprofil", oben, wird eine Übersicht zum zeitlichen Verlauf der Vorgänge und der jeweils aufgezeichneten Temperatur gezeigt. Die Grafik hat informativen Charakter - sie dient der Rückkopplung und Zusammenfassung. -- Zur Bedeutung der eingezeichneten Symbole: Die Kreismarkierungen zeigen Temperaturmesswerte an (der Temperaturfühler kann je nach Einsatz die Proben- oder Regeltemperatur oder die Umgebungstemperatur im Messraum dokumentieren) , die kugelförmigen Marken stehen für Zeitpunkt und Temperaturzuordnung von Auftriebsmesswerten.

• Ergebnisse

Akquisitionsperiode der 16 Messwerte im Messablauf: 4 bis 27min, Temperatur $\Delta T = 0,11\text{K}$

Angabewert: $\rho = 0,86218 \pm 0,000017 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (298,15K, 103,8kPa)

Streuung: $\pm 4,18\text{E-}6 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ absolute bzw. 4,8ppm relative Standardabweichung

Berechnung: lineare Regressionsgleichung, eindeutig temperaturabhängig

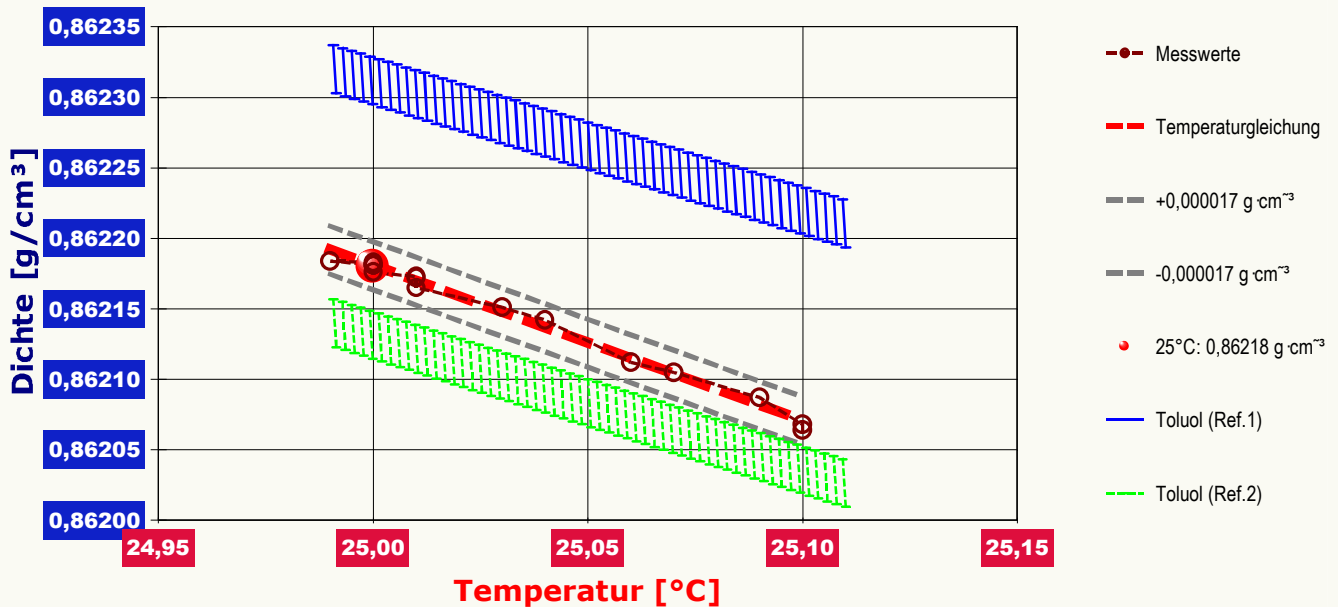
Der Temperaturkoeffizient der Dichte mit $110,0 \pm 20,9 [10^{-5}\cdot\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}\cdot\text{K}^{-1}]$ ist wesentlich größer als für Flüssigkeiten normal, wie auch der Ausdehnungskoeffizient κ mit $127,7 \pm 24,3 [10^{-5}\cdot\text{K}^{-1}]$, er bedeutet eine Dichte-Änderung von 1,3‰ pro Grad.

Temperaturabhängigkeit zwischen 24,99 und 25,10 °C:

$$\rho(T) = 0,88968 - 109,978 \cdot T[^\circ\text{C}]/1\text{E5} \quad r^2 = 0,9913 \quad s^2 = 1,75\text{E-}11$$

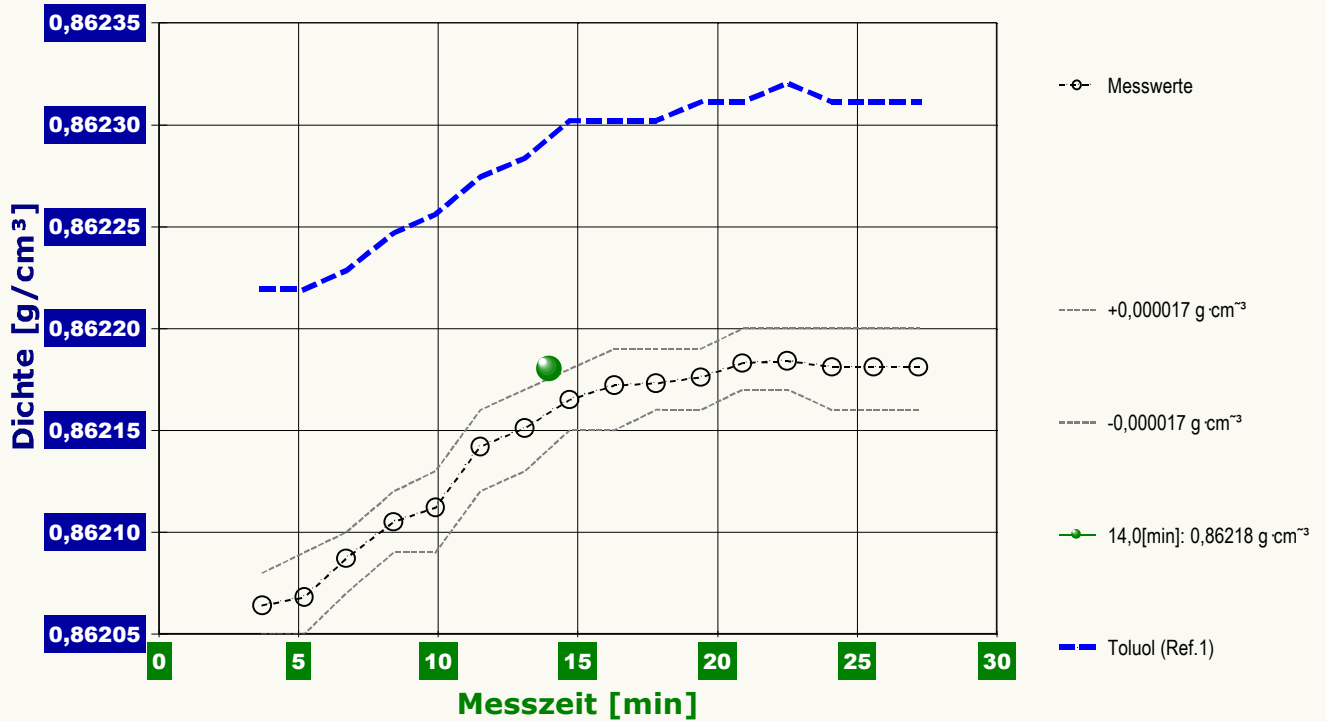
Das Ergebnis ρ der Dichtemessung wird mit der individuell berechneten Messunsicherheit angegeben (Einzelheiten dazu weiter unten) sowie die Temperatur in Kelvin und der anzugebende Druck (bei 50%r.H.) in Kilopascal. Dass die Messunsicherheit kleiner ist, als die Standardabweichung (Streuung), die im Bezug auf die Auswertemethode (lineare Regressionsgleichung) berechnet ist, bestätigt die Korrektheit der Messung. Die Messdaten werden automatisch analysiert. Ergebnis und ermittelte Zusammenhänge stellen Vorschläge dar, wobei aus den Daten evtl. auch andere Zusammenhänge gewonnen werden könnten. - Aus der Abwägung der Einflüsse werden formale Zusammenhänge für die Bewertung ermittelt und auch 'Qualitätsangaben' erzeugt. Bei kleinen Temperaturänderungen, die stärker ins Gewicht fallen, als Zeitabhängigkeiten oder Mittelwerte, ist die vorgenommene Interpretation wegen der geringen Anzahl von Messwerten bedingt. Der 'normale Bereich' Temperaturkoeffizient der Dichte reicht etwa von 44 bis 100 $10^{-5}\cdot\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}\cdot\text{K}^{-1}$. BEARBEITUNGSHINWEIS: Die Interpretation des Temperaturkoeffizienten erfolgt, um einen Eindruck von dieser, eher unbekanntem Größe zu geben. Der Vergleich zum 'Normal' wird über Mittelwert (72) und die Standardabweichung (± 28) der in der Referenzdatenbank gespeicherten Flüssigkeitsdaten hergestellt. Die Güte der angegebenen Gleichung wird durch den Korrelationskoeffizienten (r^2 , der 'befriedigend' ist) und die Varianz (s^2) der Messwerte gegen die Gleichung qualifiziert.

Diagramm 'Dichte-Temperaturverlauf':



Das Diagramm, "Dichte-Temperaturverlauf", oben, zeigt die 16 Dichtemesswerte als Kreissembolien in Temperaturabhängigkeit an. Es werden Messwerte bzw. der Angabewert mit einem Bereich der Unsicherheit in Form einer gestrichelten Linie eingefasst. Je nach Vorhandensein wird der Verlauf der Regressionsfunktion zu den Messwerten gezeigt, entsprechende Referenzwerte bzw. der Stoff mit der besten Übereinstimmung.

Diagramm 'zeitliche Entwicklung':



Im Diagramm, "zeitliche Entwicklung", oben, sind die einzelnen Messwerte als Kreissymbole in zeitlicher Sequenz abgebildet. Um die Ausgleichsfunktion bzw. die Messwerte ist der Unsicherheitsbereich eingezeichnet.

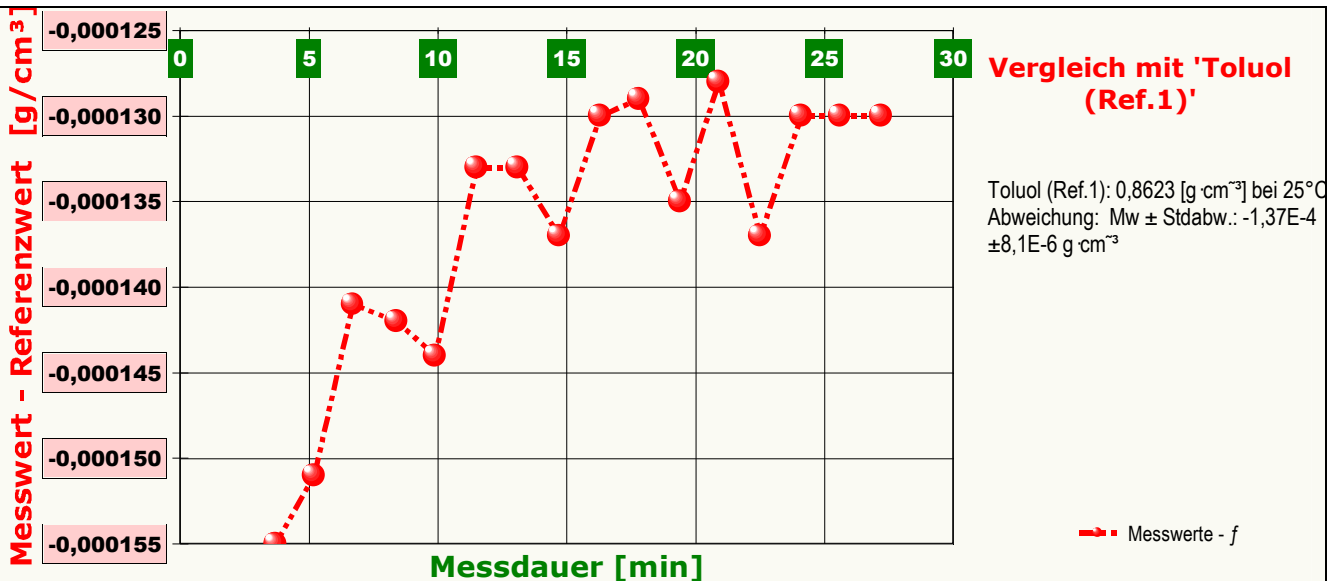
•Datentabelle

Die nachfolgende Aufstellung gibt die Daten zu den Einzelergebnissen an.

N°	t[min]	T[$^{\circ}\text{C}$]	ρ [$\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$]	$\Delta\rho$ [$\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$]	W [g]	ΔW [g]	Δt [s]	N
1.	3,7	25,10	0,862064	0,000000	53,7682	-	1,5	2
2.	5,2	25,10	0,862068	0,000000	53,7678	-	1,6	2
3.	6,7	25,09	0,862087	0,000000	53,7659	-	1,5	2
4.	8,4	25,07	0,862105	0,000000	53,7641	-	1,5	2
5.	9,9	25,06	0,862112	0,000000	53,7634	-	1,5	2
6.	11,5	25,04	0,862142	0,000000	53,7604	-	1,5	2
7.	13,1	25,03	0,862151	0,000000	53,7594	-	1,5	2
8.	14,7	25,01	0,862165	0,000000	53,7580	-	1,5	2
9.	16,3	25,01	0,862172	0,000000	53,7573	-	1,5	2
10.	17,8	25,01	0,862173	0,000000	53,7572	-	1,5	2
11.	19,4	25,00	0,862176	0,000000	53,7569	-	1,5	2
12.	20,9	25,00	0,862183	0,000000	53,7562	-	1,5	2
13.	22,5	24,99	0,862184	0,000000	53,7561	-	1,5	2
14.	24,1	25,00	0,862181	0,000000	53,7564	-	1,5	2
15.	25,6	25,00	0,862181	0,000000	53,7564	-	1,5	2
16.	27,2	25,00	0,862181	0,000000	53,7564	-	1,5	2

In der Tabelle gibt die Spalte 't' den Zeitpunkt des Messwertes, 'T', die Temperatur und 'p' den Dichtewert an. - In der Aufstellung werden auch diagnostische Daten ausgegeben: In der Kolumne ' $\Delta\rho$ ' wird ggf. die Änderung der Dichte während der Akquisitionszeit des Messwertes wiedergegeben; mit ' Δt ' wird die Messdauer der jeweiligen Beobachtung bezeichnet. Mit 'W' wird der Wäge-Endwert wiedergegeben - in der Dokumentation entspricht er dem Wert 'W2' an welchem für 'W2*' Korrekturen (Meniskus) vorgenommen werden. Die Rubrik ' ΔW ' gibt die zuvor eingetretene Änderung des Wägewertes wieder. Mit 'N' wird die Zahl der dabei aufgezeichneten Wägewerte angegeben. BEARBEITUNGSHINWEIS: Je nach 'Dokumentationszweck' kann die Stabilisier- oder Beobachtungsdauer, das Abklingen dynamischer Veränderungen anzeigen (Wärmeaustausch), die Stabilität des Messwertes dokumentieren, bzw. Störungen anzeigen. Im Normalfall, jedoch, deutet eine längere Spanne mit entsprechendem $\Delta\rho$ Probleme an, etwa, dass ein Wandkontakt auftritt, dass Strömungen wirken oder der Temperaturgradient zu groß ist und sich der Auftrieb spürbar ändert.

Diagramm 'Abweichung der Einzelwerte':



Das Chart, "Abweichung der Einzelwerte", zeigt die temperaturkompensierte Abweichungen der einzelnen Messwerte zum Referenzwert in der zeitlichen Sequenz der Messung. So können Trends, die bei Temperaturänderung sonst kaum sichtbar werden oder auch Unterschiede in der Wärmedehnung erkannt werden. - Das Diagramm löst den Wertebereich vollständig auf, dies führt mitunter dazu, dass auch Unterschiede weit unterhalb der Bestimmtheit von Ergebnis- oder Referenzwerten angezeigt werden. Die urteilende Betrachtung mag dabei die Y-Skalierung in Relation zur Messunsicherheit in die Erwägung miteinbeziehen.

• Messkörper

Eingesetzter Messkörper **Quarz-0703a**, Masse $140,9169 \pm 0,00015 \text{ g}$, Volumen^(25°C) $101,1026 \pm 0,00015 \text{ cm}^3$, kubischer Ausdehnungskoeffizient $1,41 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, Kompressionsmodul 0GPa <oder nicht gesetzt>. Die Druckangabe, die zur Vervollständigung des Ergebnisses oben angegeben ist, wird aus der Luftdichte bei der Angabetemperatur ermittelt ($\rho_L (r.H., 50\%) = 103,4 \text{ kPa}$) und aus dem hydrostatische Druck ($\rho_H = 0,38 \text{ kPa}$) der auf den Messkörper in der Eintauchtiefe von 45mm im Mittel wirkt.

• Messunsicherheit

Die Messauflösung der Wägeeinheit (0,1mg) erlaubt mit dem Messkörper und bei der Fluidichte die maximale Auflösung zu $0,000001 \text{ g/cm}^3$ (1,2ppm), die für die Messung angegebene Messunsicherheit der Wägung ($\pm 0,5 \text{ mg}$) bedeutet messkörperbezogen $\pm 5,0 \cdot 10^{-6} \text{ g/cm}^3$. Die Fehlerfortpflanzung der Messkörperdaten ergibt eine Unsicherheit von $\pm 2,0 \cdot 10^{-6} \text{ g/cm}^3$. Entscheidend ist jedoch die Unsicherheit durch die Temperaturmessung: Bezogen auf die Dichte und Wärmedehnung von *Toluol (Ref. 1)*, wie in dieser Messung bestimmt, erlaubt die Messauflösung des Temperatursensors (0,01K) die Auflösung der Dichte zu $\pm 1,1 \cdot 10^{-5} \text{ g/cm}^3$ anzugeben. Die einschränkend vorgegebene Unsicherheit der Temperaturmessung ($\pm 0,015 \text{ K}$) bedeutet demnach eine Unsicherheit von $\pm 1,6 \cdot 10^{-5} \text{ g/cm}^3$. Insgesamt wird somit die Messunsicherheit der Dichtemessung zu $\pm 1,7 \cdot 10^{-5} \text{ g/cm}^3$ bestimmt.

• Technisches Verfahren

Die Werte wurden mit der genauen Methode (Meniskuseliminierung, *imeter-Patentverfahren*) bestimmt, wodurch also die einzelnen Auftriebsmessungen voneinander unabhängig sind und systematische Fehler durch die Messkörperaufhängung/Phasengrenze sowie durch die Eintauchtiefe ausgeschlossen werden. -- Die Absenkung des Messbehälters vor der Auftriebsmessung von 3,199mm führt mit der Querschnittsfläche der Aufhängung ($\varnothing = 0,0707 \text{ mm}^2$) zu einer Korrektur der Auftriebskraft über das Volumen $0,226 \text{ mm}^3$ bei jeweiliger Flüssigkeitsdichte.

Anhand des dokumentierten Verfahrens, des Temperaturgangs, der Ausgabe der Tabelle, der Messkörperdaten sowie der evaluierten Unsicherheiten (insbesondere derer, die erst durch den Temperaturgang des Messgegenstand offenbar werden) werden in diesem Bericht Informationen ausgegeben, die die Überprüfung der Einzelwerte und Schlussfolgerungen ermöglichen. Ergebnisse in prinzipiell höherer Qualität zu erhalten, ist schlicht undenkbar.

• Datenbankvergleiche

1. Toluol (Ref.2) ¹	0,86213	0,0%
2. Toluol ¹	0,86209	0,0%
3. Toluol (Ref. 1) ¹	0,8623	0,0%
4. Toluol (DS2) ¹	0,86232	0,0%
5. Cyclohexylamin ²	0,8627	0,1%
6. Mesitylen ²	0,8614	0,1%
7. m-Xylol ¹	0,8608	0,2%
8. Cumol ²	0,8597	0,3%
9. Ethylbenzol ²	0,8654	0,4%
10. Piperidin ²	0,8578	0,5%
11. Isopentyl acetat ²	0,8666	0,5%

12. p-Tolol ¹	0,8577	0,5%
13. Dimethoxymethan ²	0,8538	1,0%
14. p-Cymen ²	0,8525	1,1%

¹: Für 25,00°C berechneter Referenzwert, ²: Tabellierter Referenzwert.
(Auswahl nur aus Referenzdaten, Stand 11.05.06)

Die Liste wird in fallender Reihenfolge der Übereinstimmung aus den besten Treffern in den Einträgen der Referenzdatenbank generiert. Die Vergleichsdaten werden in der Präzision der jeweiligen Eintragsangabe formatiert und die relative Abweichung zum Angabewert der Messung angegeben. **BEARBEITUNGSHINWEIS:** Die Herkunft bzw. Richtigkeit der jeweiligen Referenzdaten sowie ggf. Zusatzinformationen kann über den Vermerk zur Substanz in der Referenzdatenbank geprüft werden.

Berichtseinstellungen - aktivierte Ausgabeeinstellungen: Datenbankvorschläge anzeigen, Erläuterungstexte, Detaillierte Ergebnisse, Allgemeine Angaben, Vergleichsanalyse, Bearbeitungshinweise, formatierte Tabellen, Prüfmittelüberwachung, Online-Protokoll, Status und Ausführungshinweise, Berichtseinstellungen, Authentifizierungen.

Beschränkte Informationsausgabe durch negierte Optionen: Audit-Trail werden nicht angezeigt.

Form und Informationsfülle des Prüfberichts ist dadurch bedingt, dass Messdaten durch die zahlreichen Freiheitsgrade sehr vielgestaltig auftreten können. Die Variablen der Messung müssen vollständig dargestellt werden können und so verifizierbar sein. Vollständigkeit ist Voraussetzung für die Überprüfbarkeit und Haltbarkeit der Resultate sowie abgeleiteter Schlussfolgerungen. Nicht zuletzt erfordern einschlägige Bestimmungen (GxP, FDA cfr.11/21 etc.), zusammen mit schlicht zeitökonomischen Erwägungen, diesen hiermit großteils erledigten Aufwand. [Prüfberichte, wie dieser, werden dynamisch aus Metadaten erzeugt und benötigen daher sehr wenig Speicherplatz in der Datenbank]. Bei Routinemessungen und/oder für die evtl. parallel noch papieren geführte Ablage, sollten die Prüfberichte zur Ressourcenschonung durch entsprechende Einstellungen der Formatier- und Ausgabeoptionen auf das Wesentliche gekürzt werden. Das ganze 'File' inklusive der zu Grunde liegenden Rohdaten ist stets über die ID (hier Nummer 216, Datenbank imeter-Beispiele) auffindbar und als Referenz oder Vergleich nutzbar. Ggf. nachfolgende ausgegebene Informationen enthalten, je nach Einstellungen und Berichtsvorlage (Stil = 'bauhaus'), verschieden detaillierte Begleitinformationen, wie die Angaben zur Ausführung der Messung, den Audit-Trail und Hinweise zur Prüfmittelüberwachung.

Programm

Für diese Messung wurde das Messprogramm "**DichtemessungBayTou-2-F**" ausgeführt. Zeitraum der Messung, am 19.09.03 zwischen 10:43:31 und 11:10:48, Laufzeit 27,3 Minuten. Die Ablaufdokumentation zur Dokumentation aller Programmschritte wurde aufgezeichnet. Ein Protokoll wurde ebenfalls aufgezeichnet. Der Versuch wurde programmgemäß ausgeführt. Das Ergebnis wurde erstmals am 19.09.03 um 11:10 zur Ansicht gebracht

Prüfmittel

Die Wägeeinheit (BP221S) wurde zuletzt 1,5 Minuten nach dem Beginn dieser Messung von M.Breitwieser bei einem 0,2-Tage Intervall der Prüfmittelüberwachung justiert. Die letzte vollständige Überprüfung/Justierung der Positioniervorrichtung von **imeter** (ID081007074) erfolgte am 22.03.03. **Systemdaten:** Auflösung des Wägesystems 0,1mg, Messunsicherheit^{*)} 0,5mg, Dichte der Justiermasse^{*)} 8,000 g/cm³, Luftdichte^{*)} 1,201kg/m³, Umrechnungen von Masse nach Kraft mit dem Wert 9,80769m/sec² für die Fallbeschleunigung^{*)}. Die Messauflösung der Temperaturmessung beträgt 0,01K, die Unsicherheit^{*)} 0,015K.

^{*)}: Die gekennzeichneten Angaben der Systemdaten können nachträglich angepasst werden - etwa um individuelle Messunsicherheiten der Fühler wirksam werden zu lassen. Änderungen auch an diesen Daten werden im Audit-Log protokolliert und können zurückgenommen werden.

Kommentar: < Reines Toluol ist "hygroskopisch": die geringfügige Temperaturabnahme von 0,1K ist wird evtl. durch eine Feuchtigkeitsaufnahme überlagert (...=>.. Diagramm Messwerteabweichung)..., dadurch erscheint der Ausdehnungskoeffizient vergrößert. -- Der freie Gasaustausch der Probe ist durch die Abdeckung der Messzelle und den geschlossenen Raum im imeter behindert, kann es sein, dass die Dichtezunahme (Wasseraufnahme aus der Luft) im Verlauf nach 10-15min gebremst wird. > **Kommentar**

Per "Kommentar" können Dokumentationen frei mit beschreibenden Texten versehen werden. Hier eingebrachte Eingaben oder Änderungen werden nicht über das "Audit-Log" verwaltet. (Falls eine z.B. rechtlich wichtige Bemerkung mit Zeit und Name rechtlich verbindlich festgehalten werden sollte, dann sei diese über das 'Bemerkungsfeld' im Datenblatt eingetragen.)



Der automatische Bericht zeigt und interpretiert eine Datenlage – als Folge dessen, was in einer Messung geschieht und offenbart, wie Probe und Umstände interagieren. – Die Messung ist ein Vorgang dessen Ablauf und Randbedingungen in einem Messprogramm formuliert sind. Ein Unterschied zum klassischen Messen besteht darin, dass es nicht um Messwerte geht, sondern, was Messwerte zeigen sollen. (z.B. Identität, Ähnlichkeit, Reinheit, Temperatur-, Zeit-, Konzentrationseinflüsse...) Darum ging es immer schon; nur jetzt tut dies - imeter - ein Automat. Dass die Messtechnik extrem genau und unbeschränkt ist, hilft, – und auch die Ergebnisanzeige in Echtzeit.

Das Diagramm mit der Temperaturabhängigen Darstellung offenbart ein kleines Dilemma. Welche Referenzdaten sind korrekt? – Zu Toluol lassen sich durchaus verschiedene Referenzwerte finden. Wir können es letztendlich nicht klären, welche der Wahrheit am nächsten kommen, da der Aufwand zur Reinigung und Reinheitsvalidierung mit einer unabhängigen, 2. Methode, nennenswert ist. – Unsere Aktivitäten betreffen das Formale nicht Inhalt, Bedeutung, oder Schlussfolgerung.

Formal kann eine Abweichung jedenfalls bewertet werden. Wenn „Toluol Ref.2“ als wahrer Wert akzeptiert werden kann und die Annahme vertretbar ist, dass die Hauptverunreinigung Wasser sei ...



ID N° 216 - Fluid Dichte, Dilatation & Reinheit

Ergebnis: $\rho_{25,00^\circ\text{C}} = 0,86218\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$, $\kappa = 128\cdot 10^{-5}\text{K}^{-1}$
 $\sim c [\text{m}/\text{m}] = 99,957\% \text{ Toluol (Ref.2)}$

Bericht

- Vergleichsanalyse zu *Toluol (Ref.2)*

	Referenzwert	Messung	Abweichung absolut	relativ	Signifikanz
ρ	0,86213	0,86218	+0,00005g·cm ⁻³	60ppm	3
$-\Delta\rho/\Delta T$	0,0009%	0,00110	+0,00014g·cm ⁻³ ·K ⁻¹	10%	

Referenz "Toluol (Ref.2)", Bezugstemperatur = 25,00°C.

- Reinheit

		% m/m	% V/V
Toluol (Ref.2)	:	99,957	99,963
Wasser	:	0,043	0,037

Die Gehaltsbestimmung basiert auf vorliegenden Datenbankeinträgen und der Angabe zum $\phi_{1/2}$ -Koeffizient:

Toluol (Ref.2), ID10105.3: $\rho_1 = f(\zeta[^\circ\text{C}]) = 0.862131 - 9.559\text{E-}4 \cdot (\zeta - 25)$

Präzision: fünf gültige Dezimalen.

Ref.Anmerkungen: 'Dichte ist doch fraglich!'.

Wasser, ID10136.3:

$\rho_2 = f(\zeta[^\circ\text{C}]) = (6.5592063\text{E-}05 \cdot \zeta^5 - 1.1225639\text{E-}02 \cdot \zeta^4 + 1.0026530 \cdot \zeta^3 - 90.968893 \cdot \zeta^2 + 679.48991 \cdot \zeta + 9998425.9) / 1\text{E}7$

Präzision: sechs gültige Dezimalen.

Ref.Anmerkungen: 'Regression aus CRC-Handbook, GÜLTIGKEIT: 0 bis 40°C'.

$\phi_{1/2}$ -Koeffizient: nicht gesetzt bzw. Angabe für ideales Verhalten der Mischungsdichte.

Die Berechnung der Reinheit bzw. des Gehalts beruht auf der Beziehung: $\rho_{\text{Ges}} = (m_1 + m_2) / (m_1/\rho_1 + m_2/\rho_2)$. Dabei ist ρ_{Ges} der hier gemessene Dichtewert, dessen Verhältnis in der Summe der Massen ($m_1 + m_2$) und der Volumen ($V = m/\rho$) analysiert wird. Für ρ_1 wird die Dichte der Referenz 'Toluol (Ref.2)' eingesetzt. Der $\phi_{1/2}$ -Koeffizient, der bei relativ hoher Reinheit von "1" kaum verschieden ist und aus ermittelten Dichtewerten der Komponentenmischung dargestellt wird (er ist Konzentrations- und Temperaturabhängig), ist der Zahlenwert, der mit ρ_1 multipliziert wird und Schwund ($\phi_{1/2} > 1$) oder Expansion ($\phi_{1/2} < 1$) durch die Wirkung der Mischung auf die Gesamtdichte ausdrückt. Der Wert '1', wie angegeben, ist für ideale Dispersionen und Lösungen, Emulsionen und Schäume annehmbar sowie in der Regel bei geringfügigen Beimengungen.

Das wichtigste ist, richtig messen zu können. Dafür ist das Messgerät zuständig.
 Für die Bedeutung ist man Fachmann.