



ELGA  VEOLIA

# Warum Reinstwasser Ihre Ergebnisse zuverlässiger macht

Fachinformation

ELGA LabWater | Veolia Water Technologies

**WATER TECHNOLOGIES**

Reinstwasser vom Typ I ist die mit Abstand reinste Substanz, die in einem Labor verwendet wird. Dieser Artikel beschäftigt sich mit dem hohen Reinheitsgrad von Reinstwasser im Vergleich zu anderen Reagenzien, der Bedeutung einer solchen Reinheit für Ihre Experimente und damit, wie dieser hohe Reinheitsgrad im Laboralltag erhalten werden kann.

Die in modernen Laboren durchgeführten Forschungen und Prüfungen sind im hohen Maße von der Verfügbarkeit von hochreinen Reagenzien wie etwa Reinstwasser abhängig. Werden weniger reine Reagenzien verwendet, können Elemente und Bestandteile aus dem Bereich parts per billion (ppb bzw. Teile pro Milliarde) oder darunter Anwendungen negativ beeinflussen, weil sie mit Proben, aktiven Bestandteilen und Systembestandteilen

interagieren. Hundertprozentig reines Wasser besteht ausschließlich aus Wassermolekülen mit einem Gleichgewicht aus Hydroxyd- und Wasserstoffionen ( $10^{-7}M$  bei  $25^{\circ}C$ ). Der charakteristische elektrische Widerstand dieser Mischung beträgt  $18,2 M\Omega\text{-cm}$ .

Die einzigartige Eigenschaft von Wasser besteht darin, nahezu jede chemische Verbindung bis zu einem gewissen Grad aufzulösen und nahezu jede Form von Leben zu unterstützen. Aus diesem Grund ist die Reinheit des Wassers permanent von fünf verschiedenen Arten an Verunreinigungen bedroht. Dazu gehören Schwebstoffe, anorganische Verbindungen, organische Moleküle, aufgelöste Gase und Mikroorganismen inklusive der dazugehörigen Biomoleküle.

## Inhalt

Reinstwasser im Vergleich zu anderen Reagenzien .....	3
Die Vorteile einer hohen Reinheit für Laboranwendungen .....	6
Den Reinheitsgrad erhalten .....	7
Fazit .....	10
Quellen .....	11
Über ELGA LabWater .....	11

## Reinstwasser im Vergleich zu anderen Reagenzien

Die nachgewiesenen Mengen an Verunreinigungen in Reinstwasser werden durch die Empfindlichkeit der zur Verfügung stehenden Messmethoden und die Umgebung eingeschränkt, in der die Untersuchung stattfindet. Auf Grundlage der derzeit verfügbaren Ultraspurenanalyse konnte festgestellt werden, dass die Menge von nicht-gasförmigen Verunreinigungen in Reinstwasser bei unter 1,5 µg/l (ppb) für organische Substanzen und bei unter 1,0 µg/l für andere Elemente und Ionen liegt. Das bedeutet, dass Reinstwasser zu mindestens 99,9999975 % rein ist.

	Methanol (Semiconductor grade Puranol™)	Acetonitril (TraceSELECT® Ultra)	Ethansäure (Trace SELECT®)	Reinstwasser (PURELAB flex)
Aluminium	<1.000	<1.000	<200	<1
Antimon	<500	<500	<50	<0,2
Arsen	<1.000	<1.000	<500	<2
Cadmium	<500	<500	<10	<0,5
Calcium	<30.000	<20.000	<1.000	<2
Chrom	<1.000	<1.000	<100	<1
Kupfer	<1.000	<1.000	<200	<2
Eisen	<1.000	<1.000	<500	<2
Blei	<500	<500	<10	<0,2
Magnesium	<5.000	<1.000	<100	<1
Mangan	<500	<500	<20	<0,5
Quecksilber	<200	<1.000	<1.000	<5
Nickel	<1.000	<1.000	<100	<2
Kalium	<10.000	<10.000	<500	<5
Natrium	<20.000	<20.000	<1.000	<2
Zinn	<500	<1	<100	<0,5
Titan	<1.000	<1.000	<50	<0,5
Vanadium	<500	<500	<10	<0,2
Zink	<10.000	<1.000	<200	<2
Bromid	<1.000	<2		<20
Chlorid	<25.000	<25.000		<20
Fluorid	<10.000	<5		<30
Nitrat	<25.000	<25.000		<20

*Tabelle 1: Vergleich zwischen dem elementaren Verunreinigungsgrad von Reinstwasser und dem höchsten Reinheitsgrad herkömmlicher Lösemittel*

In Tabelle 1 wird der elementare Verunreinigungsgrad von Reinstwasser mit dem höchsten Reinheitsgrad von drei handelsüblichen Lösungsmitteln verglichen, die in der analytischen Forschung und Prüfung weit verbreitet sind: Methanol, Acetonitril und Essigsäure. Bei der Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma (ICP-MS) wurde ermittelt, dass in Reinstwasser effektiv keine nicht-gasförmigen Elemente enthalten sind, wobei die Nachweisgrenze bei unter 1 ng/l (ppt) liegt. In dieser Größenordnung liegt der Verunreinigungsgrad des Reinstwassers unter dem der drei anderen Lösemittel. Die meisten anderen, in Laboren verwendeten Reagenzien weisen einen weit höheren Verunreinigungsgrad auf. Dieser liegt in der Regel im mg/l-Bereich.

	Ergebnis		Ergebnis
	µg/l (ppb)		µg/l (ppb)
Benzene	<0,05	1,3-Dichloropropane	<0,05
Bromobenzene	<0,05	2,2-Dichloropropane	<0,05
Bromochloromethane	<0,05	1,1-Dichloropropane	<0,05
Bromodichloromethane	<0,05	Cis-1,3-Dichloropropane	<0,05
Bromoform	<0,05	Trans-1,3-Dichloropropane	<0,05
Bromomethane	<0,05	Ethylbenzene	<0,05
2-Butanone (MEK)	<0,05	Hexachlorobutadiene	<0,05
N-Butylbenzene	<0,05	Hexane	<0,05
Sec-Butylbenzene	<0,05	Isopropylalcohol	<0,05
Tert-Butylbenzene	<0,05	Isopropylbenzene	<0,05
Carbon Tetrachloride	<0,05	Isopropyltoluene	<0,05
Chlorobenzene	<0,05	Methyltertbutylether	<0,05
Chlorodibromomethane	<0,05	Naphthalene	<0,05
Chloroethane	<0,05	N-Propylbenzene	<0,05
Chloroform	<0,05	Stryene	<0,05
Chloromethane	<0,05	1,1,1,2-Tetrachloroethane	<0,05
2-Chlorotoluene	<0,05	Tetrachloroethane	<0,05
4-Chlorotoluene	<0,05	Toluene	<0,05
1,2-Dibrom-3-Chloropropane	<0,05	1,2,3-Trichlorobenzene	<0,05
1,2-Dibromomethane (EDB)	<0,05	1,2,4-Trichlorobenzene	<0,05
Dibromomethane	<0,05	1,3,5-Trichlorobenzene	<0,05
1,2-Dichlorobenzene	<0,05	1,1,1-Trichloroethane	<0,05
1,3-Dichlorobenzene	<0,05	1,1,2-Trichloroethane	<0,05
1,4 Dichlorobenzene	<0,05	Trichloroethane	<0,05
Dichlorodifluoromethane	<0,05	Trichlorofluoromethane	<0,05
1,1-Dichloroethane	<0,05	1,2,3-Trichloropropane	<0,05
1,2-Dichloroethane	<0,05	1,2,4-Trimethylbenzene	<0,05
Cis-1,2-Dichloroethane	<0,05	1,2,5-Trimethylbenzene	<0,05
Trans-1,2-Dichloroethane	<0,05	Vinyl Chloride	<0,05
Dichloromethane	<0,05	O-Xylene	<0,05
1,2-Dichloropropane	<0,05	M-Xylene & P-Xylene	<0,05

*Tabelle 2: Flüchtige organische Verbindungen, ermittelt durch Purge & Trap GC-MS*

In Tabelle 2 und 3 sind die sehr geringen Konzentrationen von flüchtigen und halbflüchtigen organischen Verunreinigungen in Reinstwasser aufgeführt, die mit der Purge & Trap GC-MS- bzw. der Thermodesorption-GC-MS-Methode ermittelt wurden. Üblicherweise liegt der Verunreinigungsgrad unterhalb der Nachweisgrenze, die bei flüchtigen organischen Verbindungen bei <0,05 µg/l und bei halbflüchtigen organischen Verbindungen bei <0,025 µg/l liegt. Diese Mengen sind vereinbar mit einem TOC-Gehalt von weniger als 1µg/l (ppb), wobei der TOC-Gehalt als allgemeiner Hinweis auf die Verunreinigung von Reinstwasser durch organische Verbindungen gilt.

	Ergebnis		Ergebnis
	µg/l (ppb)		µg/l (ppb)
Acenaphthene	0,025	Hexachlorobutadiene	0,025
Acenaphthylene	0,025	Hexachlorocyclopentadiene	0,025
Anthracene	0,025	Hexachloroethane	0,025
Benzidine	0,025	Isophorone	0,025
Benzo (a) anthracene	0,025	2-Methylnaphthalene	0,025
Benzo (b) fluoranthene	0,025	Naphthalene	0,025
Benzo (k) fluoranthene	0,025	2-Nitroaniline	0,025
Benzylalcohol	0,025	3-Nitroaniline	0,025
Butylbenzylphthalate	0,025	4-Nitroaniline	0,025
Bis(2-Chloroethoxy)Methane	0,025	Nitrobenzene	0,025
Bis(2-Ethylhexyl)Phthalate	0,025	N-Nitrosodimethylaniline	0,025
Bis(2-Chloroisopropyl)Ether	0,025	N-Nitrosodiphenylaniline	0,025
Bisphenol A	0,025	Nonylphenol	0,025
4-Bromophenylphenylether	0,025	Phenanthrene	0,025
Carbazole	0,025	Pyrene	0,025
4-Chloroniline	0,025	Pyridine	0,025
2-Chloronaphthalene	0,025	1,2,4-Trichlorobenzene	0,025
4-Chlorophenylphenylether	0,025	Benzoic Acid	0,025
Chrysene	0,025	4-Chloro-3-Methylphenol	0,025
Dibenzofuran	0,025	2-Chlorophenol	0,025
1,2-Dichlorobenzene	0,025	Cresols	0,025
1,3-Dichlorobenzene	0,025	2,4-Dichlorophenol	0,025
1,4-Dichlorobenzene	0,025	2,4-Dimethylphenol	0,025
3,3-Dichlorobenzidine	0,025	2,4-Dinitrophenol	0,025
Diethylphthalate	0,025	4,6-Dinitro-2-Methylphenol	0,025
Dimethylphthalate	0,025	2-Methylphenol	0,025
Di-n-butylphthalate	0,025	4-Methylphenol	0,025
2,6-Dinitrotoluene	0,025	4-Nitrophenol	0,025
Di-n-octylphthalate	0,025	Pentachlorophenol	0,025
Fluoranthene	0,025	Phenol	0,025
Fluorene	0,025	2,4,5-Trichlorophenol	0,025
Hexachlorobenzene	0,025		0,025

Tabelle 3: Halbflüchtige Verbindungen, ermittelt durch Thermodesorptions-GC-MS

Der Anteil von gelöstem Sauerstoff und Stickstoff in Reinstwasser beträgt bei 25°C und einem atmosphärischen Druck von 1 bar circa 9 ppm bzw. 14 ppm. Sowohl Sauerstoff als auch Stickstoff könnten leicht durch eine Vakuumentgasung entfernt werden, dies ist jedoch für die meisten Laboranwendungen nicht nötig, da sich Sauerstoff und Stickstoff in dem Moment im Wasser auflösen, in dem das Reinstwasser in Kontakt mit der Luft kommt. Dabei würde das Reinstwasser die gleichen Konzentrationen aufweisen wie die Umgebungsluft.

Durch Umkehrosmose, Submikron- und/oder Ultrafiltration können alle Partikel und Bakterien aus dem Reinstwasser entfernt werden. Endotoxine können durch einen Ionenaustausch und ein geladenes Medium oder durch Ultrafiltration entfernt werden. Bei der Überprüfung der Bakterienkonzentration wurde festgestellt, dass Reinstwasser <1 Koloniebildende Einheit (CFU)/10ml enthält, was einem TOC-Gehalt von <0,1 µg/l entspricht.

## Die Vorteile einer hohen Reinheit für Laboranwendungen

Obwohl die Verwendung von Wasser mit einem so hohen Reinheitsgrad extrem erscheint, muss Reinstwasser frei von allen Verunreinigungen sein, um für alle analytischen und experimentellen Anwendungen zur Verfügung zu stehen. Die Verwendung von Reinstwasser hat oft auch einen ökonomischen Vorteil, da für den Einkauf und die laufenden Kosten nur ca. 11 Cent pro Liter Reinstwasser anfallen.

Da Wasser für verschiedene Stufen einer Analyse wie beispielsweise der Vorbereitung von Proben, Lösungen, Standards und Blindproben sowie als Eluationsmittel und zum Spülen der Instrumente benötigt wird, können vorhandene Verunreinigungen die Ergebnisse beeinflussen. In Abbildung 1 wird aufgezeigt, wie die verschiedenen Verunreinigungen auf unterschiedliche Art und Weise die Verlässlichkeit und Wiederholbarkeit von Ergebnissen einer Ionenchromatographie kurz- und langfristig beeinflussen können.

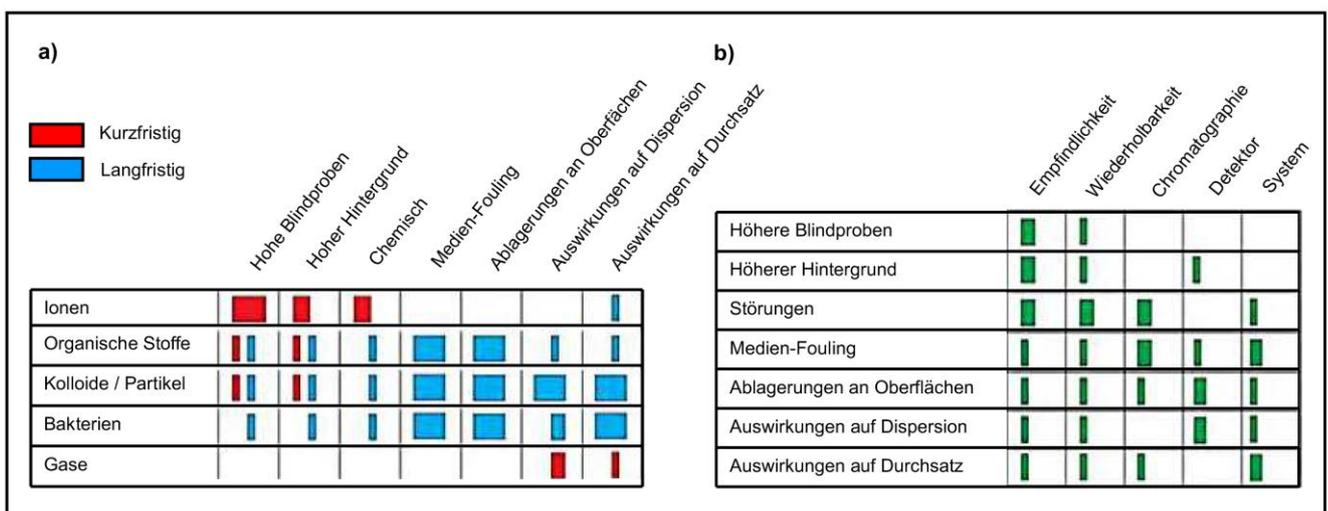


Abbildung 1: Die Auswirkungen von Wasserverunreinigungen auf die Ionenchromatographie: (a) Auswirkungen auf die Anlage und (b) die potentielle Beeinträchtigung der Versuchsergebnisse. Die Fläche des Feldes zeigt an, wie erheblich die Auswirkungen sind (qualitativ gesehen).

Für hochempfindliche Analyseverfahren wird Wasser mit einem besonders hohen Reinheitsgrad benötigt. Dies ist insbesondere dann von Bedeutung, wenn sehr geringe Konzentrationen direkt gemessen werden oder wenn nur sehr wenige Proben vorhanden sind, die dann vor der Analyse verdünnt werden müssen. Durch die Verwendung von Reinstwasser kann die Grundbelastung minimiert werden, so dass die Forscher bei einer Spurenanalyse hochempfindliche Ergebnisse erzielen können. Beispiele für eine Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) sind in Abbildung 2 (Quelle A) aufgeführt. In Abbildung 3 ist als Beispiel eine Ionenchromatographie dargestellt.

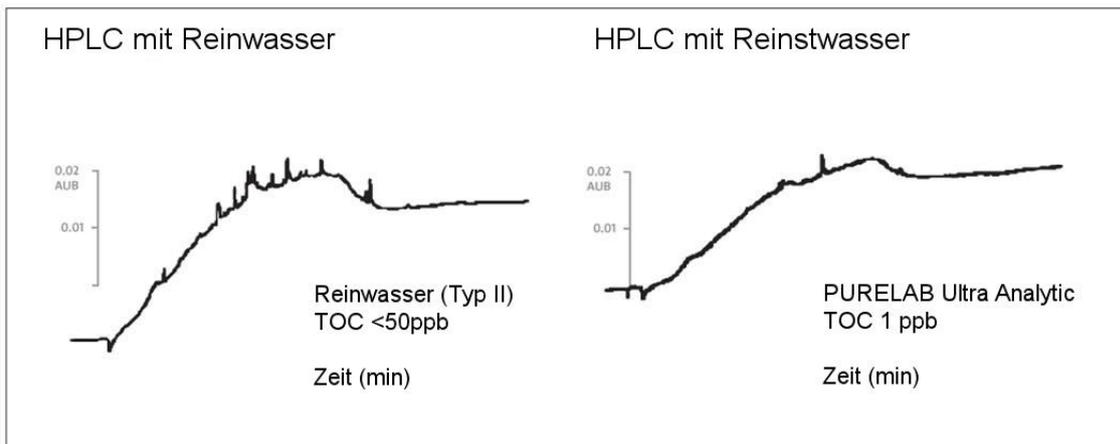


Abbildung 2: Verbesserte Hintergrundbedingungen für die HPLC mit UV-Detektor bei 210 nm unter Verwendung von Reinstwasser mit einem geringen TOC-Gehalt

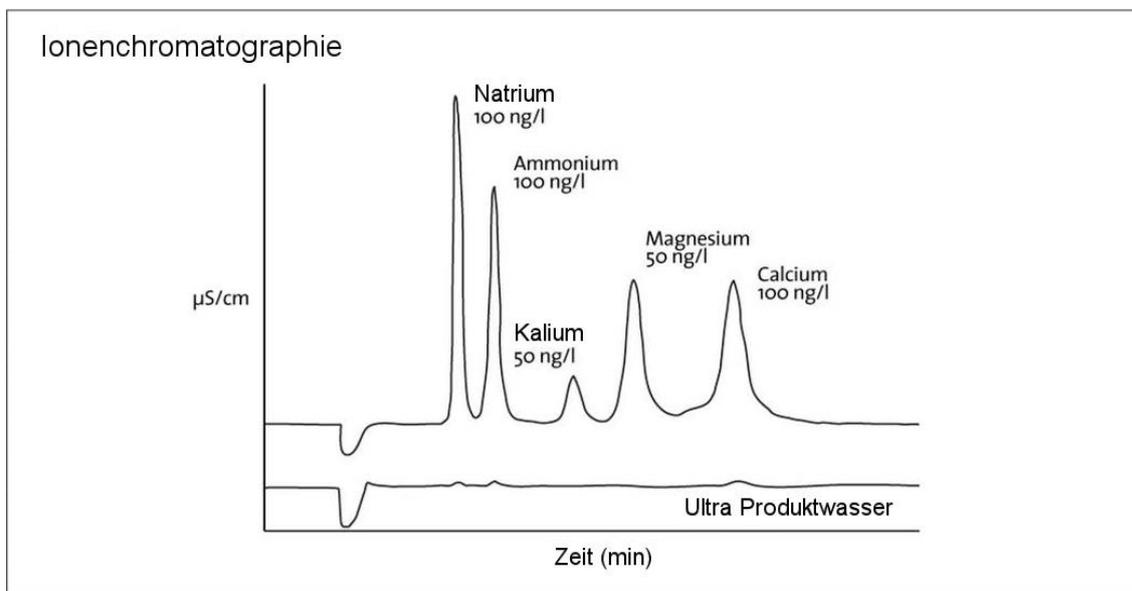


Abbildung 3: Vorkonzentrierung von 20 ml Proben für die Ultraspuren-Kationenanalyse

## Den Reinheitsgrad erhalten

Laborangestellte, die mit Reinwasser arbeiten, müssen sich darüber im Klaren sein, dass der Reinheitsgrad von Reinstwasser bereits vor der Nutzung gefährdet werden kann, wenn die Anlage nicht fachgerecht bedient oder das Wasser falsch verwendet wird.

Es ist daher unabdinglich, dass der Reinheitsgrad des Wassers bereits in der Wasseraufbereitungsanlage aufrechterhalten wird. Dazu ist der Wassertank durch einen Sterilfilter vor Verunreinigungen von außen zu schützen. Darüber hinaus ist das Wasser regelmäßig durch das abschließende Reinigungselement (Photo-Oxidation mittels UV-Licht, Adsorption oder Ionenaustausch) zu pumpen und keimfrei zu machen, um das Bakterienwachstum einzudämmen (Quelle B).

Für einige Anwendungen definieren spezielle Wasserqualitätsnormen die erforderliche Reinheit. Die drei wichtigsten internationalen Normen stammen von folgenden Organisationen:

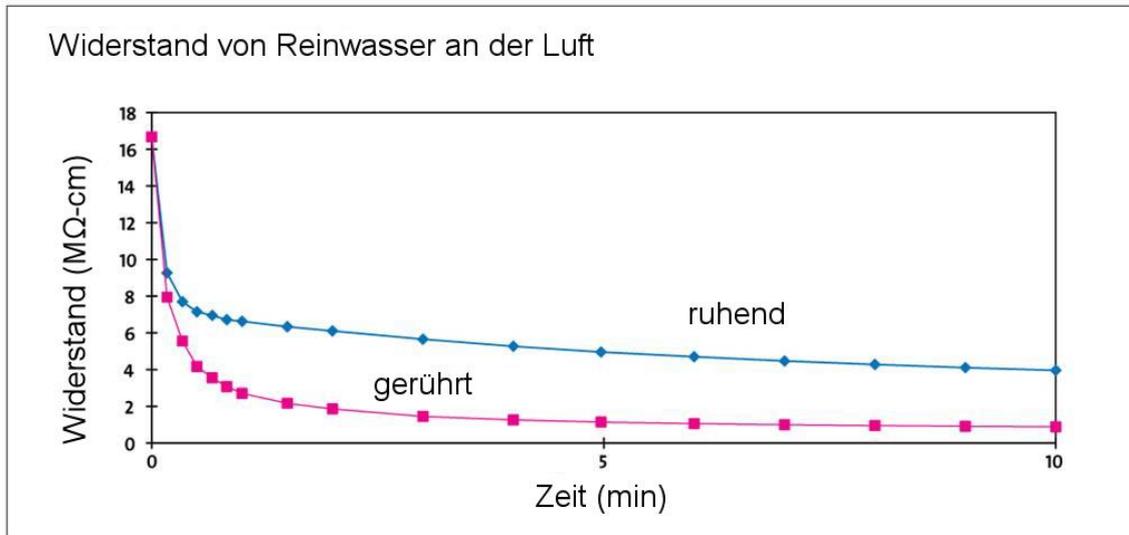


Abbildung 4: Auswirkungen von Luft auf den elektrischen Widerstand von Reinstwasser

Im Laboralltag wird das Wasser aus der Aufbereitungsanlage, beispielsweise PURELAB flex, in ein beliebiges Gefäß abgefüllt. Innerhalb von Sekunden beginnt das Wasser mit der Absorption von Kohlenstoffdioxid aus der Luft, wobei Kohlensäure gebildet und der elektrische Widerstand des Wassers von 18,2 MΩ-cm auf ungefähr 1,3 MΩ-cm gesenkt wird, siehe hierzu auch Abbildung 4. Die starke Leitfähigkeit von Wasserstoffionen aus der Säure ermöglicht es, dass sich der Widerstandswert bei einer CO<sub>2</sub>-Konzentration von gerade einmal 0,5 mg/l so stark ändert. Obwohl die Kohlensäure keinen negativen Einfluss auf die meisten Anwendungsgebiete hat, können die Auswirkungen auf den Widerstand den Umstand verschleiern, dass das Wasser von anderen Ionen verunreinigt wurde.

Für die meisten Anwendungen stellt das Risiko einer Verunreinigung während der Wasserdosierung ein weitaus größeres Problem dar. So kann das Wasser beispielsweise verunreinigt werden, wenn Plastikschläuche an die Wasseraufbereitungsanlage angeschlossen werden, um das Befüllen von Glasballons und anderen großen Behältnissen zu vereinfachen. In Abbildung 5 wird gezeigt, wie organische Trennmittel oder Weichmacher aus den Schläuchen in das Wasser gelangen: GC-MS-Analysen haben gezeigt, dass Reinstwasser, das durch PVC-Schläuche geflossen ist, mit N-Butylsulfonamid-Weichmachern verunreinigt ist. Darüber hinaus wurde bei einer Studie von Angestellten von Pharmaunternehmen festgestellt, dass die durchschnittliche Gesamtkeimzahl (TVC) von Wasser aus 22 Wasseraufbereitungsanlagen ohne angeschlossene Schläuche bei 0,7 CFU/ml lag. Bei sieben anderen Anlagen, an denen zusätzliche Schläuche angeschlossen wurden, lag die Gesamtkeimzahl im Durchschnitt jedoch bei 26 CFU/ml.

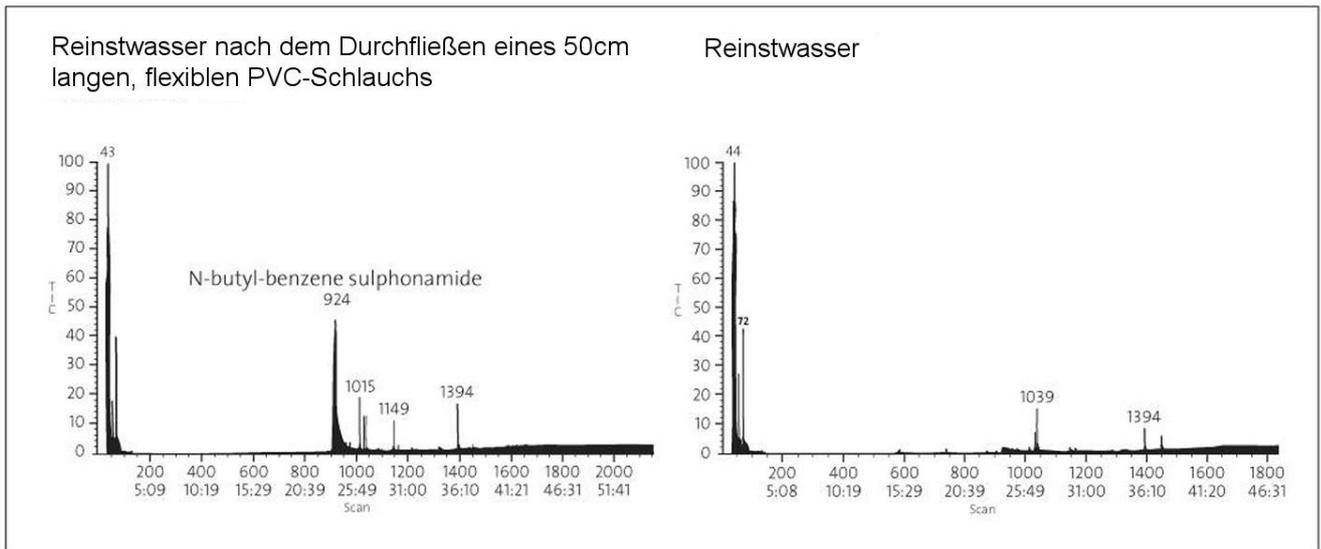


Abbildung 5: GC-MS von Reinstwasser: Auswirkungen von Weichmachern aus Schläuchen

Des Weiteren ist es wichtig, das Reinstwasser während der Dosierung nur so kurz wie möglich der Luft auszusetzen, da Verunreinigungen aus der Luft den Reinheitsgrad des Wassers verändern. In Abbildung 6 (Quelle C) wird die Verunreinigung von Wasser durch die Luft verglichen, wobei Wasserproben untersucht wurden, die zum einem in den Probenbehälter gespritzt wurden (untere Linie a) und die zum anderen langsam am Rand des Gefäßes in den Probenbehälter geflossen sind (obere Linie b). Bei einer Ionenchromatographie wurde festgestellt, dass die Konzentration negativer Ionen, insbesondere Nitritionen, bei den Proben deutlich höher war, die in das Gefäß gespritzt wurden.

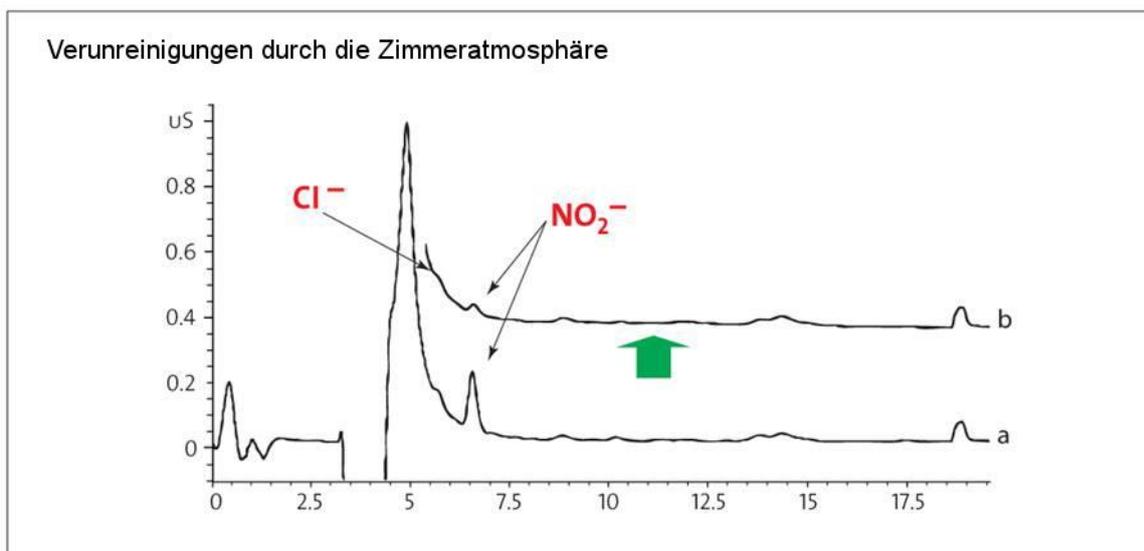


Abbildung 6: Negative Ionenchromatographie zum Nachweis der unterschiedlichen Verunreinigungsgrade durch die Atmosphäre bei Wasserproben, die auf unterschiedliche Art und Weise entnommen wurden: (a) in das Probengefäß gespritztes Wasser; (b) langsam an der Gefäßwand entlanggelaufenes Wasser ohne Spritzen.

Um den Reinheitsgrad zu maximieren, sollte Reinstwasser umgehend nach dem Abfüllen verwendet werden. In einer Studie zur Nutzung von Spritzflaschen hat Kuroki (Quelle D) festgestellt, dass über 80% der Nutzer ihre Spritzflaschen nicht täglich mit neuem Reinstwasser befüllen. Die Ergebnisse der Untersuchungen von Horikiri (Quelle E) weisen darauf hin, dass Glasflaschen für die Lagerung von Wasser besser geeignet sind als Plastikflaschen. Die Analyse von Reinstwasser durch LC-MS zeigt, dass nach einer Lagerzeit von zwei Tagen in einem der beiden Gefäße, neben anderen Verunreinigungen, Di-n-octylphthalat im ppb-Bereich gefunden wurde, wobei die Konzentration in der Glasflasche deutlich niedriger war als bei Wasser aus einer Plastikflasche, siehe Abbildung 7. Die untere Linie zeigt die Ergebnisse für Reinstwasser, das mit einer Standardlösung aus sechs verschiedenen Arten von Phtalatestern injiziert wurde. Ähnliche Verunreinigungen können auch auftreten, wenn in Flaschen abgefülltes Reinstwasser für hochempfindliche Analyseverfahren nach dem Öffnen gelagert und wiederverwendet wird.

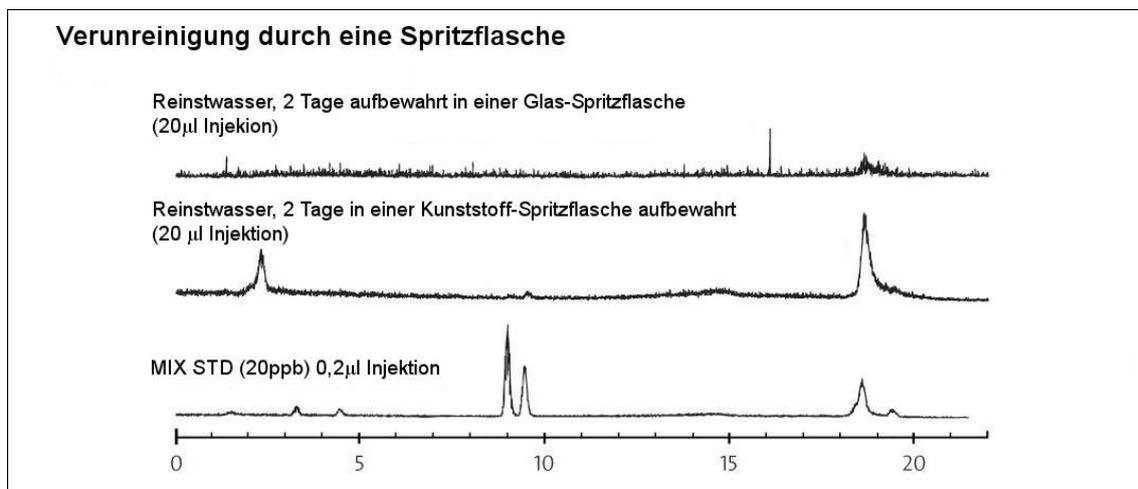


Abbildung 7: Beispiel einer Phtalatesterverunreinigung in Spritzflaschen (3).

## Fazit

Durch den sehr hohen Reinheitsgrad von Reinstwasser wird es Labormitarbeitern ermöglicht, bei hochempfindlichen Analyseverfahren genaue Ergebnisse zu erzielen. Die Genauigkeit der Analyse hängt jedoch stark von einem gut durchdachten Wasseraufbereitungssystem, mit dem der Reinheitsgrad des Wassers innerhalb des Systems erhalten und kontrolliert werden kann, einer einfachen Dosierung des Wassers und einem fachgerechten Umgang mit dem Wasser ab.

## Quellen

1. Suzuki, Kawaguchi, Enami and Kuroki: Abstract of Proceedings of 15th Environmental Chemistry Forum, 2006, 182-183. (3)
2. Clinical and Laboratory Standards Institute. Preparation and Testing of Reagent Water in the Clinical Laboratory; Approved Guideline-Fourth Edition. CLSI document C3-A4 (2006)
3. Kuroki: Chromatography, 27(3), 125-9 (2006)
4. Kuroki: Industrial Water, 2003, 541, 24-30. (2)
5. Horikiri S., Fujita N., Kuroki Y. and Enami T. Abstracts of Proceedings of 54th Mass Spectrometry Analysis General Forum, 2006, 458-459.

Alle Versuchsdaten, für die keine Quelle angegeben ist, wurden von der Forschungs- und Entwicklungsabteilung von ELGA ermittelt.



## Über ELGA LabWater

Wir hoffen, die Informationen in diesem Dokument helfen Ihnen dabei, genaue und verlässliche Ergebnisse zu erzielen. Wenn Sie mehr zum Thema Reinstwasser erfahren wollen oder Beratung wünschen, kontaktieren Sie uns gern. ELGA LabWater ist seit fast 80 Jahren spezialisiert auf die Entwicklung und Herstellung von Rein- und Reinstwassersystemen für den Einsatz in Laboren, der Forschung, der klinischen Diagnostik und im medizinischen Bereich. Wir unterstützen unsere Kunden bei der Auslegung und Planung Ihrer Anlage, übernehmen die Installation und bieten ein deutschlandweites Netz aus spezialisierten Servicetechnikern sowie eine kostenfreie Service-Hotline.

ELGA gehört zu Veolia Water Technologies, dem weltweit führenden Anbieter von Lösungen und Dienstleistungen für den gesamten Wasserkreislauf.

*Übrigens:* Mit unserem **Anlagen-Konfigurator** können Sie Ihr optimales Laborwassersystem online zusammenstellen. Einfach unverbindlich ausprobieren unter:

<http://buildyourchorus.elgalabwater.com/#/de/start>

