

 **OMNILAB**

KOMPETENZ IM LABOR



Wissen kompakt

Reinheiten von Chemikalien

In Zusammenarbeit mit


**PanReac
AppliChem**

FLEXIBEL. VERLÄSSLICH. PERSÖNLICH.

Wissen kompakt

Reinheiten von Chemikalien

In Zusammenarbeit mit



Die Reinheit von Stoffen bezeichnet in der Chemie allgemein das Verhältnis eines erwünschten Stoffes zum gesamten Stoffgemisch. Je nach Verwendungszweck ergeben sich ganz unterschiedliche Anforderungen an die Qualität einer Chemikalie. Anhand dieser leiten sich auch die Wertigkeit und der Preis des jeweiligen Stoffes ab.

Die genaue Spezifikation von Reinheiten ist abhängig vom Hersteller und Stoff. Die Reihenfolge ist nicht genormt und wird oft durch die Hersteller erweitert. Grundsätzlich lassen sich jedoch sechs Reinheitsstufen bzw. Qualitätsbezeichnungen unterscheiden.

1. Technisch

Produkte mit der Kennzeichnung „technisch“ enthalten grundsätzlich noch Verunreinigungen und werden aufgrund der schwankenden Reinheitsgrade nur für technische Zwecke eingesetzt. Sie werden hauptsächlich als Reinigungsmittel im Labor oder im Gewerbe verwendet.

2. Zur Synthese

4 Chemikalien zur Synthese enthalten fast immer kleine Mengen an Verunreinigungen, die jedoch in der Regel keine negativen Auswirkungen auf die Synthesen haben, da das Endprodukt der Synthese gereinigt und Verunreinigungen des Ausgangsproduktes dabei abgetrennt werden.

3. Rein (auch purum)

Bei Produkten mit chemisch reiner Qualität liegt der Mindestgehalt bei 97 %, sofern nicht anders angegeben. Diese Chemikalien sind zur Synthese geeignet, werden aber auch schon für Laborzwecke eingesetzt.

4. Reinst (auch purissimum)

Die Kennzeichnung „reinst“ weisen Chemikalien von höchster Reinheit auf, der Gehalt liegt hier bei mindestens 99 %. Die verbleibenden Verunreinigungen sind sehr gering und die Produkte können bereits für viele gängige Analysen sowie für alle Anwendungen der niedrigeren Qualitäten eingesetzt werden.

5. Zur Analyse (oder pro analysi)

Die Qualitäten dieser Stoffe sind so rein, dass sie für analytische Verfahren eingesetzt werden können. Der Mindestgehalt liegt bei 99 %. Um eventuelle Verunreinigungen bereits bei der Analyse berücksichtigen und so falsche Ergebnisse vermeiden zu können, sind die maximalen Gehalte an Verunreinigungen im Analysenzertifikat (siehe Abbildung rechts) angegeben. Hier liegt der Hauptunterschied zur „Reinst“ Qualität, bei der die Angaben zum Maximalgehalt an Verunreinigungen fehlen.



ANALYSENZERTIFIKAT

ARTIKELNUMMER: 131007 CHARGE: 0000900551

PRODUKT: Aceton (Reag. Ph. Eur.) zur Analyse, ACS, ISO

HERSTELLUNGSDATUM: 31/08/2016

HALTBARKEITSDATUM: 08/2022

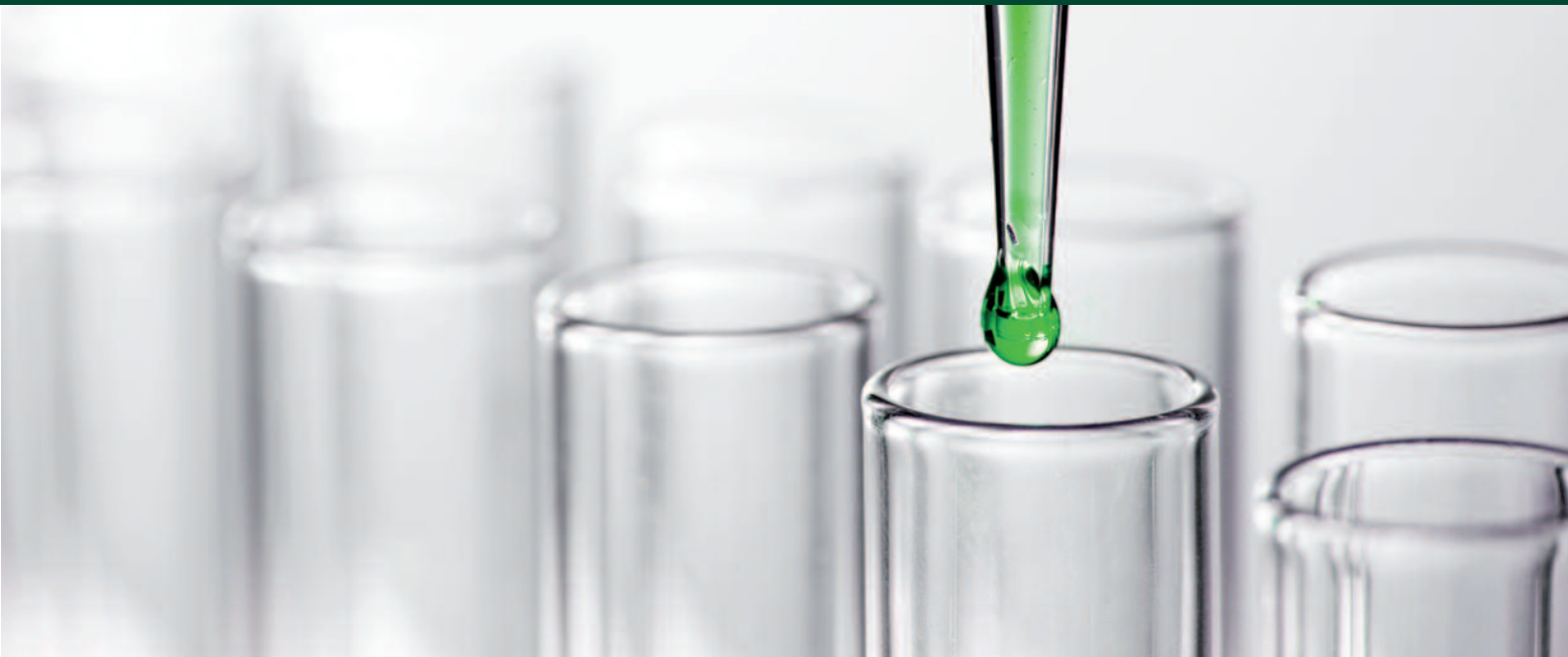
SPEZIFIKATION	GARANTIERTER WERT	TATSÄCHLICHER WERT
Minimaler Gehalt (GC)	99,5%	99,9%
Identität	IR entspricht	IR Entspricht
Dichte 20/20	0,790-0,793	0,791
Zwischenraum Sieden	<=1,5°C	1,5°C
Maximum der Verunreinigungen		
APHA Farbe	10	<10
Azidität	0,0003 meq/g	<0,0003 meq/g
Alkalität lösbar in H ₂ O	0,0005 meq/g	<0,0005 meq/g
Nichtflüchtige Anteile	entspricht	Entspricht
Widerstand zu KMnO ₄ (als O)	0,0002 %	0,0002 %
1-Propanol (GC)	0,05%	<0,05%
2-Propanol (GC)	0,05%	<0,05%
4-Hydroxy-4-Methyl-2-Pentanon (GC)	0,05%	<0,05%
Aldehyde (in HCHO)	0,002%	<0,002%
Ethanol (GC)	0,01%	<0,01%
Mesityloxid (GC)	0,05%	<0,05%
Methanol (GC)	0,05%	<0,05%
Wasser (H ₂ O)	0,2 %	0,04 %
Metalle ICP [mg/Kg (ppm)]		
Ag	0,05	<0,05
Al	0,5	<0,5
As	0,05	<0,05
Au	0,05	<0,05
B	0,02	<0,02
Ba	0,1	<0,1
Be	0,02	<0,02
Bi	0,05	<0,05
Ca	0,5	<0,5
Cd	0,05	<0,05
Co	0,02	<0,02
Cr	0,02	<0,02
Cu	0,02	<0,02
Fe	0,1	<0,1
Ga	0,02	<0,02
Ge	0,05	<0,05
Hg	0,05	<0,05
In	0,05	<0,05
K	0,1	<0,1
Li	0,05	<0,05
Mg	0,1	<0,1
Mn	0,02	<0,02
Mo	0,02	<0,02
Na	0,2	<0,2
Ni	0,02	<0,02
P	0,2	<0,2
Pb	0,1	<0,1
Pt	0,02	<0,02
S	0,2	<0,2
Sb	0,02	<0,02
Si	0,2	<0,2
Sn	0,1	<0,1
Sr	0,2	<0,2
Ti	0,02	<0,02
Tl	0,02	<0,02
V	0,02	<0,02
Zn	0,1	<0,1
Zr	0,02	<0,02

Panreac Química S.L.U.
C/ Garret, 2
Polígono Pis de la Bruguera
E-08211 Castellar del Valles
Barcelona, España
Tel: (+34) 937 489 400
Fax: (+34) 937 489 401
e-mail: info.es@itwreagents.com
www.itwreagents.com

Quality Assurance Director
Director de Garantía Calidad
P. Vergé

ARTIKELNUMMER: 131007 CHARGE: 0000900551

Abb. 1: Beispiel für ein Analysenzertifikat.



6. Ultrarein

Ultrareine Produkte sind für sehr spezifische Anwendungen, wie die Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC), Gaschromatographie (GC) oder auch für die Spuren- bzw. Ultrapurenanalytik (ppb und ppt Bereich), ausgelegt. Für diese Qualitäten sind die Spezifikationen sehr eng gefasst. Über das Analysenzertifikat werden die Maximalgehalte vieler Verunreinigungen benannt, zum Teil über mehrere Seiten.

Neben diesen gängigen Qualitätsbezeichnungen finden sich für einige Chemikalien noch zusätzliche Qualitäten, wie zum Beispiel PhEur oder ACC Reagenzien. Hierbei handelt es sich um Chemikalien, die entsprechend des europäischen oder amerikanischen Arzneibuchs spezifiziert sind und sich für die dort benannten Standardmethoden eignen.

Reagenzien mit der Kennzeichnung ACS erfüllen die Standards der American Chemical Society (ACS). Ferner finden sich weitere Abkürzungen wie ISO (International Organization for Standardization) oder DAB (Deutsches Arzneibuch). All diese und weitere Abkürzungen beziehen sich auf die individuellen Definitionen der einzelnen Organisationen und haben keinen direkten Bezug zur Reinheit der Chemikalien.

Von den ca. 80.000 im Markt verfügbaren Chemikalien gehören über 90 % zu den zuvor beschriebenen Qualitätsstufen 1 bis 4. Lediglich für die

gebräuchlichsten Chemikalien werden ultrareine Qualitäten angeboten. Für Klassiker, wie Methanol oder Essigsäure, finden sich mehr als zehn verschiedene Qualitäten.

Generell lässt sich sagen, dass Qualitäten immer nur nach unten kompatibel verwendbar sind, d.h. die höchste Qualität einer Chemikalie eignet sich in der Regel für alle Anwendungen und erfüllt die Spezifikationen aller Reinheitsgrade. Chemikalien von niedriger Qualität lassen sich dagegen nur für die spezifizierten Anwendungen verwenden und sind nicht nach oben kompatibel einsetzbar. Die Anforderungen höherer Reinheiten werden nicht erfüllt und eine Anwendung für höhere Spezifikation führt zu verfälschten Ergebnissen und kann, insbesondere bei Verwendung in Geräten, zu Schäden führen.

Qualität hat ihren Preis: der Preisfaktor zwischen der niedrigsten und der höchsten Qualität kann 10x und höher liegen. Der beträchtliche Unterschied ergibt sich unter anderem über die zusätzlichen Kosten für die Ermittlung aller Spezifikationsparameter, die Aufreinigung und die Chargengrößen - hohe Qualitäten werden oft in kleinen Chargen produziert.

Im folgenden Teil werden die Reinheiten detaillierter nach Einsatzzwecken erläutert.

Chemikalien zur Synthese

Die Synthese und die Aufreinigung von Verbindungen ist das Hauptziel von Laboren für Organische Chemie. Die Qualitätsanforderungen sind abhängig von den verschiedenen Phasen im Syntheseverfahren.

Reinheitsgrad	Beschreibung
Zur Synthese	Lösemittel für organische Synthesen. Die Mindestreinheit ist normalerweise höher als 99,5 %. Die nicht-flüchtigen Anteile und der Wasseranteil sind spezifiziert.
Trockene Lösemittel	Lösemittel mit extrem niedrigem Wassergehalt, die speziell für sehr feuchtigkeitssensitive Synthesen entwickelt wurden.
Für die Analyse mittels GC	Reagenzien, die sorgfältig durch GC-ECD und GC-FID kontrolliert wurden.
Für die IR Analyse	Reagenzien zum Gebrauch in der Infrarot-Spektroskopie.
Für UV, IR und HPLC	Lösemittel zum Gebrauch in der Spektroskopie und HPLC.

Analytische Reagenzien für allgemeine Anwendungen

In der Chemischen Analyse ist die Verwendung von Reagenzien entsprechender Qualitäten wesentlich für die geforderte Genauigkeit der Resultate.

Reinheitsgrad	Beschreibung
Technisch	Chemikalien angemessener Reinheit, die bezüglich des Mindestgehalts keinen offiziellen Qualitätsstandards folgen. In der Regel hat das Produkt eine Reinheit von mindestens 90 %.
Volumetrische Lösungen	Lösungen mit bekanntem Titer. Gebrauchsfertig. NIST-rückführbar.
Pufferlösungen	Gebrauchsfertige Pufferlösungen. NIST-rückführbar.
Reinst oder Reinst, Pharmaqualität	Produkte angemessener Reinheit zur Verwendung als Hilfsmittel in chemischen Analysen. Chemikalien, die die Reinheitsanforderungen der Pharmakopöe-Monographien erfüllen und somit in der Pharmaindustrie verwendet werden können.
Zur Analyse	Reagenzien, die speziell für allgemeine analytische Anwendungen geeignet sind.
Zur Analyse (Reag. Ph. Eur.), ACS, ISO	Reagenzien, die speziell für allgemeine analytische Anwendungen geeignet sind. Die Bezeichnung ACS bedeutet, dass das Produkt die durch die American Chemical Society festgelegten Anforderungen bezüglich analytischer Reagenzien erfüllt oder übersteigt. Die Bezeichnung ISO bedeutet, dass das Produkt die durch die Internationale Organisation für Normung festgelegten Anforderungen bezüglich analytischer Reagenzien erfüllt oder übersteigt. Die Bezeichnung "Reag.Ph.Eur" bedeutet, dass das Produkt die in dem Kapitel Analytische Reagenzien der Pharmacopoeia beschriebenen Anforderungen erfüllt.

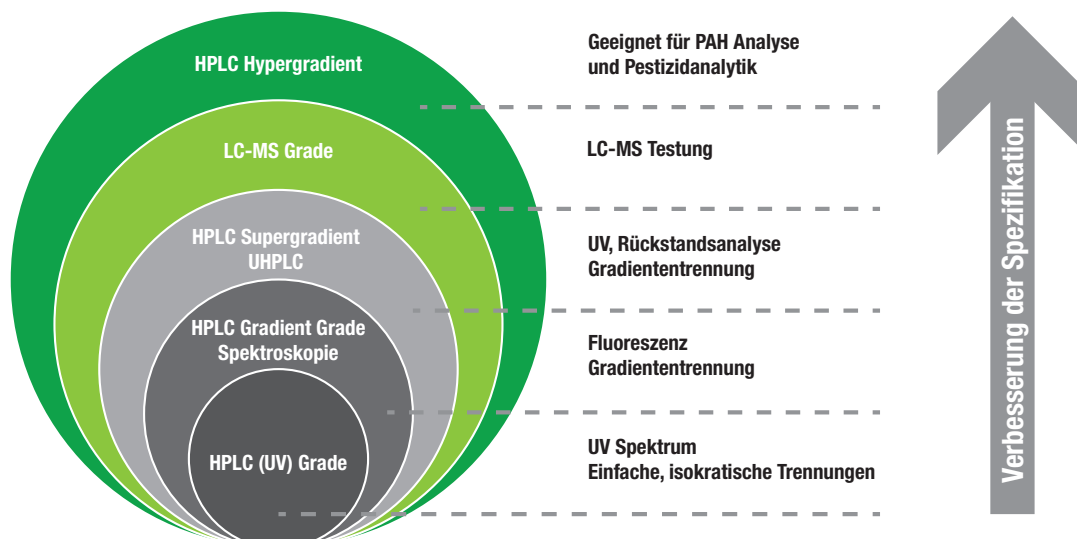
Reagenzien für die Flüssigchromatographie (HPLC)

Hochreine Lösungsmittel speziell entwickelt für die Verwendung in der HPLC, UHPLC, GPC, IC, GC.

Die Qualitätskontrolle beinhaltet die IR, UV, den Reinheitsgrad (die meisten Lösemittel liegen bei 99,9 %) sowie einen sehr niedrigen Abdampfgrad und Wassergehalt. All diese Lösemittel sind mikrofiliert (0.2 microns) und in Stickstoffatmosphäre abgefüllt. Andere Spezifikationen werden abhängig von der Qualität des Produktes hinzugefügt.

Reinheitsgrad	Beschreibung
Für UV, IR und HPLC	Lösemittel zum Gebrauch in der Spektrophotometrie und HPLC / UHPLC. Streng kontrolliert für den Gebrauch in PAHs und der Pestizidanalyse mittels HPLC. Sehr hohe Durchlässigkeit bei Fluoreszenz und UV Detektoren. Säuren mit einem sehr niedrigen Metallgehalt. Geeignet für die Analyse von Schwermetallen und anderer Elemente im ppm-Bereich. In den meisten Fällen liegt der Gehalt unter 0.1 ppb ($\mu\text{g} / \text{l}$).
Für HPLC / UHPLC	Lösemittel zum Gebrauch in der Spektroskopie und HPLC / UHPLC. Hoher Durchlassgrad in UV / Fluoreszenzdetektoren. Sehr niedriger nicht-flüchtiger Anteil.
Für LC-MS	Lösemittel zum Gebrauch in der LC-MS. Sehr niedrige Metallkonzentrationen und kontrolliert durch LC-MS.
Für PAHs und die Pestizidanalyse mittels HPLC / UHPLC	Lösemittel zum Gebrauch in der Spektrophotometrie und HPLC / UHPLC. Streng kontrolliert für den Gebrauch in PAHs und Pestizidanalyse mittels HPLC. Sehr hohe Durchlässigkeit bei Fluoreszenz und UV Detektoren.
Standards für IC	Anion- und Kationstandards, Einzelementstandard mit einer Konzentration von 1.000 g / l und Multielementstandards in verschiedenen Konzentrationen. NIST-rückführbar

Anwendungsleitfaden für die korrekte Auswahl von Qualitätslösemitteln für die HPLC



Reagenzien für die Gaschromatographie (GC)

Speziell entwickelt für die Verwendung in GC Geräten. Abhängig von der finalen Anwendung werden verschiedene Detektoren verwendet (ECD, FID oder MS). All diese Lösemittel sind mikrofiliert (0.2 microns) und in Stickstoffatmosphäre abgefüllt.

Reinheitsgrad	Beschreibung
Für die Pestizidanalyse mittels GC	Reagenzien zur Analyse von Pestizidrückständen in der Lebensmittelindustrie und im Umweltschutz. Sorgfältig kontrolliert durch GC-ECD und GC-FID.
Für Headspace GC	Lösemittel zum Gebrauch in der Headspace GC. Lösemittel mit maximaler Reinheit zur Verwendung in der Aufbereitung von Proben zur anschließenden Analyse mittels Headspace Gas Chromatographie. Zur Kontrolle von Lösungsmittelrückständen in Arzneimitteln (gemäß Ph. Eur und USP).
Derivatisierungsreagenzien	Reagenzien für die Gaschromatographie zum Derivatisieren anderer Verbindungen, um deren Volatilität, thermische Stabilität oder Nachweisempfindlichkeit durch GC Detektoren zu verbessern.

Reagenzien für die Atomspektroskopie

Hochreine Reagenzien für die Metallspurenanalyse in Umwelt-, Qualitäts- und Forschungslaboren.

Reinheitsgrad	Beschreibung
Zur Analyse, niedriger Quecksilbergehalt	Säuren mit besonders niedrigem Quecksilbergehalt. Geeignet für die Quecksilberbestimmung mittels AAS Kaltdampftechnik.
Für AAS	Säuren mit besonders niedrigem Metallgehalt. Geeignet für die Analyse von Schwermetallen und anderer Elemente im ppm-Bereich. Mehr als 30 Metalle werden spezifiziert. In den meisten Fällen liegt der Gehalt unter 0.005 ppm (mg / l).
Für die Metallspurenanalyse (ppb)	Säuren mit einem sehr niedrigen Metallgehalt. Geeignet für die Analyse von Schwermetallen und anderer Elemente im ppm-Bereich. Mehr als 60 Metalle werden spezifiziert. In den meisten Fällen liegt der Gehalt unter 0.1 ppb (µg / l).
Für die Metallspurenanalyse (ppt)	Säuren mit einem sehr niedrigen Metallgehalt. Geeignet für die Analyse von Schwermetalle und anderer Elemente im ppm-Bereich. Mehr als 60 Metalle werden spezifiziert. In den meisten Fällen liegt der Gehalt unter 10 ppt (ng / l).

Die Übersicht verdeutlicht, wie viele unterschiedliche Qualitäten Chemikalien aufweisen können und welchen Einfluss diese auf das Analyseergebnis haben. Gern beraten wir Sie auch bei der Auswahl der optimalen Reinheiten für Ihre individuellen Anwendungen.

7



Wissen kompakt

Weitere Themen
finden Sie auf
www.omnilab.de