

# Projekt „Modellierung von Verteilungskoeffizienten für organische Migranten zwischen Kunststoffrohren und Trinkwasser“

**Auftragnehmer:** FABES Innovations gGmbH, München  
**Wissenschaftliche Betreuung:** Dr. Otto Piringer, Dr. Monika Rüter  
**Finanzierung:** Forschungsgemeinschaft für Verpackungs- und Lebensmitteltechnik e.V. (FoGe), München  
**Berichtszeitraum:** 2014

## 1. Zielsetzung

Ziel des Forschungsprojektes ist die Bestimmung von Verteilungskoeffizienten relevanter Migranten zwischen Kunststoffrohren und Wasser bei verschiedenen Temperaturen zwischen 25 °C und 80 °C.

## 2. Ergebnisse und Schlussfolgerungen

Für den Migrationsbetrag eines Inhaltsstoffes aus Kunststoffrohren in Trinkwasser spielt der Verteilungskoeffizient,  $K_{p,w}$  des Stoffes zwischen dem entsprechenden Polymer und Wasser eine entscheidende Rolle. Wegen der in vielen Fällen äußerst geringen Löslichkeit solcher Stoffe in Wasser ist eine genaue Bestimmung von  $K_{p,w}$ -Werten mit erheblichem Zeitaufwand verbunden, da man Migrationskinetiken bis in die Nähe der Gleichgewichtseinstellung bei sehr geringen Konzentrationswerten messen muss. Aus diesem Grunde wurde im Rahmen des Projektes ein Permeationsverfahren entwickelt, bei dem die entsprechenden Stoffe mit bekannten Ausgangskonzentrationen in Wasser gelöst werden und diese Lösung in einer Glaszelle in direktem Kontakt mit dem zu untersuchenden Kunststoff, in Form einer Folie von 100-200 µm Dicke, bei der gewünschten Temperatur gebracht wird. Die andere Seite der Folie wird mit reinem Wasser bedeckt. Nach verschiedenen Kontaktzeiten werden aus diesem Wasser Proben entnommen und mittels Chromatographie (GC oder HPLC) und Massenspektrometrie (MS) analysiert. Auf diese Weise erhält man Permeationskinetiken, wie in Abbildung 1 am Beispiel mit 4-tert-Butylphenol dargestellt ist. Mit Hilfe der FABES-Software MIGRATEST Exp lassen sich aus solchen Kinetiken die Werte der Verteilungskoeffizienten bestimmen.

Ein Vorteil der Methode besteht in einem geringeren Zeitaufwand, da bei der Permeation nicht bis zur Gleichgewichtseinstellung in der Rezeptorphase Wasser gemessen werden muss. Ein weiterer Vorteil des Verfahrens liegt in der Möglichkeit gleichzeitiger Messungen von  $K_{p,w}$ -Werten mehrerer Stoffe, da bei den geringen Konzentrationen keine gegenseitige Beeinflussung zu befürchten ist.


Die Analytik mittels GC/MS ist sehr empfindlich, selektiv und genau.

Für die Validierung des Verfahrens wurde die Modellierung der Migration aus Kunststoffen in Wasser mittels MIGRATEST Exp verwendet. Es werden dafür die bereits aus anderen Versuchen bekannten Diffusionskoeffizienten  $D_p$  für die zu untersuchenden Kunststoffe sowie die mit obiger Methode bestimmten Verteilungskoeffizienten als Eingabedaten im Migrationsmodell eingesetzt und die zeitabhängigen Migrationswerte berechnet. Mit bereits früher gemessenen Migrationswerten konnte beispielsweise das oben erwähnte 4-tert-Butylphenol als Vergleichsmigrant herangezogen werden. Die Messwerte deckten sich im Rahmen der durch experimentelle und technologische Ursachen bedingten Streubreite.

Mit der im Rahmen des Projektes beschriebenen Methode werden systematisch  $K_{p,w}$ -Werte bestimmt, um daraus, in Abhängigkeit von den chemischen Strukturen, möglichst weitgehende Verallgemeinerungen ableiten und auch Abschätzungen von  $K_{p,w}$ -Werten ohne aufwendige Messungen durchführen zu können.

München, 28.01.2015

Fabes Innovations gemeinnützige GmbH

  
Dr. Otto Piringner  
Geschäftsführung

  
Dr. Monika Rüter  
Geschäftsführung

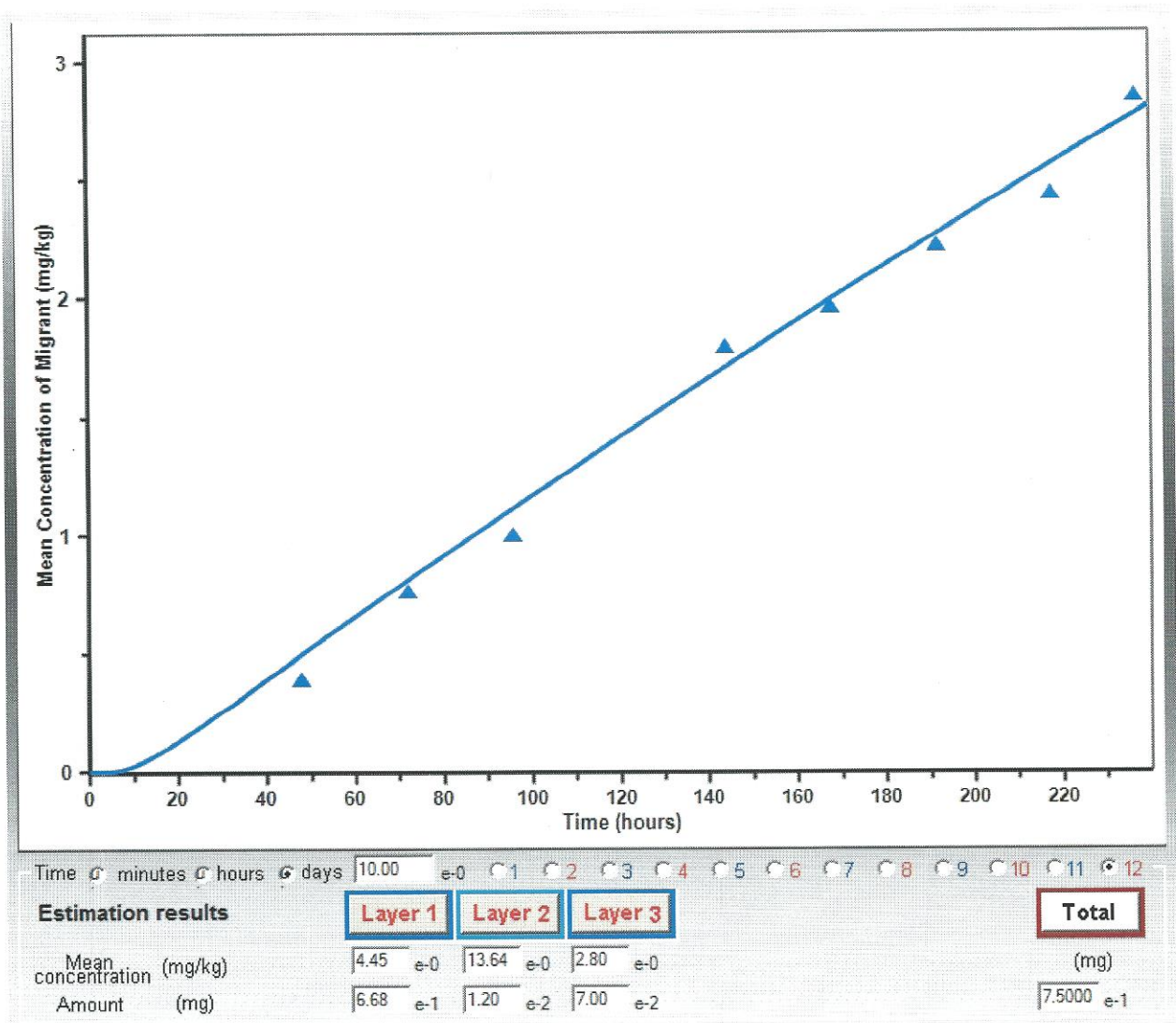
**Anlage:**

Abb. 1: Permeationskurve von 4-tert-Butylphenol durch PE in Wasser bei 60 °C