

## ANHANG ZUR MODELLIERUNGSLEITLINIE

### Beispiele

#### Übersicht der Beispiele

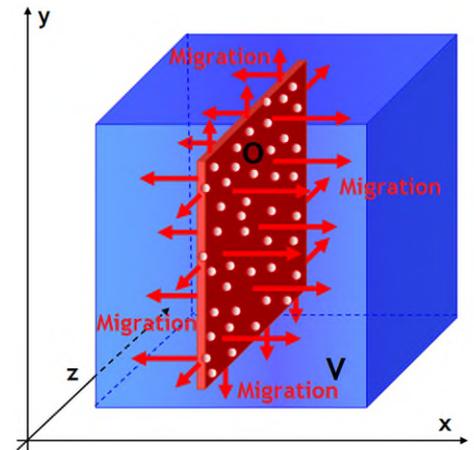
1	Kaltwasserprüfung einer Monokunststoffplatte.....	2
2	Kaltwasserprüfung einer Monoepoxidharzplatte .....	6
3	Kaltwasserprüfung einer Monoelastomerplatte.....	9
4	Kaltwasserprüfung eines Monokunststoffrohres .....	13
5	Kaltwasserprüfung eines Mehrschichtkunststoffrohres ...	17
6	Verlängerte Warmwasserprüfung eines Mehrschichtkunststoffrohres .....	21
7	Kaltwasserprüfung nach Lagerung eines Mehrschichtkunststoffrohres .....	26
8	Verlängerte Warmwasserprüfung nach Lagerung eines mehrschichtigen Kunststoffes .....	30

# 1 Kaltwasserprüfung einer Monokunststoffplatte

Es wird die Migration einer frisch produzierten Kunststoffplatte in der Kaltwasserprüfung bei einer Gesamtprüfzeit von 31 Tagen gemäß DIN EN 12873-1: 2014-09 berechnet.

Der Kunststoff ist ein Monokunststoff. Die Prüfung erfolgt stellvertretend für einen Ausrüstungsgegenstand. Der Migrant ist bei Prüfbeginn homogen in der ganzen Matrix des Kunststoffes verteilt. Die Kunststoffplatte wird vollständig in das Prüfwasser eingetaucht (Immersion).

Diese dreidimensionale Anordnung kann wie folgt in ein eindimensionales Szenario umgewandelt werden:



- ▶ Die gesamte Oberfläche wird berücksichtigt und als die Oberfläche einer homogenen Schicht definiert, aus der die Migration in eine Richtung erfolgt.
- ▶ Die gesamte Wassermenge wird als eine Schicht mit konstanter Dicke auf der oben definierten Probenoberfläche platziert.
- ▶ Die Schichtdicke der Probe wird mit den oben angegebenen geometrischen Definitionen so errechnet, dass sich das daraus ergebende Volumen dem realen Volumen entspricht.

Diese Annäherung ist vor allem für Proben mit geringer Dicke (wie in diesem Beispiel) mit einem nur sehr geringen Fehler behaftet.

Die Migrationsabläufe während der Spülungen bei der Vorbehandlung (jeweils 1 Stunde) der Kunststoffplatte werden nicht berücksichtigt.

**Tabelle 1-1 Eingabeparameter für Migrationsberechnung aus Monokunststoffplatte**

Eingabeparameter:	
Materialtyp, -funktion	Polypropylen (PP), Fitting
Abmessungen Kunststoffplatte	$L = 20 \text{ cm}, B = 20 \text{ cm}$
reale Dicke Kunststoffplatte	$d_p = 0,2 \text{ cm} = 2000 \mu\text{m}$
Dichte Kunststoff	$\rho_p = 0,905 \text{ g/cm}^3$
Kunststoff-Prüfwasser Kontaktfläche	$O = 2 \cdot (B \cdot L + (B + L) \cdot d_p) = 816 \text{ cm}^2$
Volumen Prüfwasser	$V = 1,632 \text{ Liter} = 1632 \text{ cm}^3$
Kontaktfläche/Prüfwasservolumen Verhältnis	$O/V = 8,16 \text{ dm}^2 / 1,632 \text{ dm}^3 = 5 \text{ dm}^{-1}$
„Dicke“ Prüfwasser	$d_w = V/O = 0,2 \text{ dm} = 2,0 \text{ cm} = 20000 \mu\text{m}$
Dichte Prüfwasser	$\rho_w = 1 \text{ g/cm}^3$
errechnete Dicke Kunststoffplatte	$d_p' = d_p \cdot B \cdot L / O = 0,09804 \text{ cm} = 980,4 \mu\text{m}$
<b>Migrant</b>	<b>Butylhydroxytoluol (BHT), CAS-Nr. 128-37-0</b>
Molekülmasse Migrant	$M = 220,35 \text{ g/mol}$
Wasserlöslichkeit des Migranten bei 20 bis 25°C (Referenzen 1-3)	$S = 0,4 \text{ bis } 1,1 \text{ mg/l}$
log Kow bei 25°C (Referenzen 4)	log Kow = 5,1

Eingabeparameter:	
Ausgangskonzentration des Migranten im Kunststoff	$C_{p0} = 1000 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migranten im Prüfwasser	$C_{w0} = 0 \text{ mg/kg}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Kunststoff bei 23°C	$D^*_{p} = 2,42 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Prüfwasser	$D^*_{w} = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$
Verteilungskoeffizient des Migranten bei 23°C	$K^*_{p/w} = 1750 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$

Anmerkungen:

Die obigen Diffusions- bzw. Verteilungskoeffizienten  $D^*_{p}$  bzw.  $K^*_{p/w}$  bei 23°C wurden mit der in Kapitel 5 zitierten Methoden abgeschätzt.

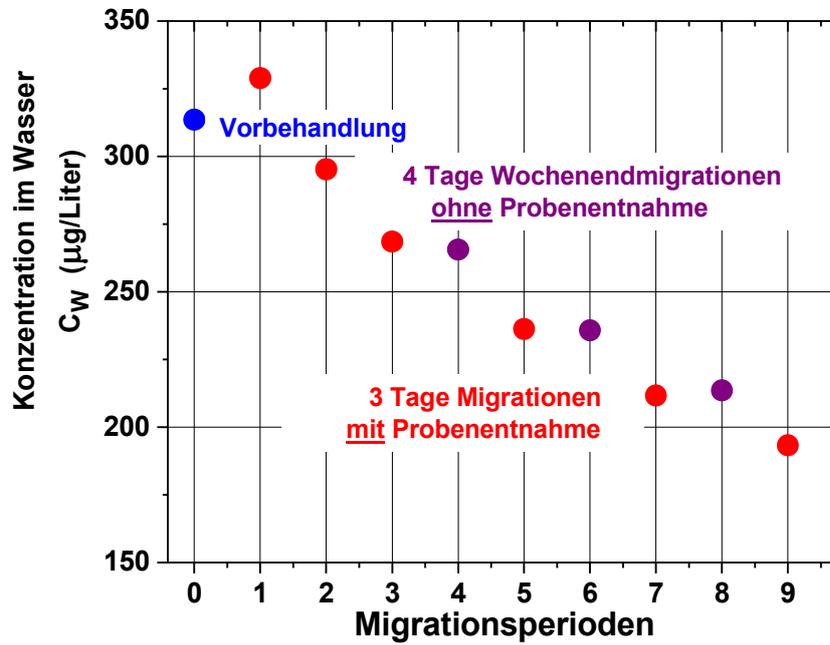
### Berechnung von Beispiel 1

Die berechneten Konzentrationen des Migranten im Prüfwasser - am Ende der Vorbehandlung und am Ende der darauffolgenden Migrationsperioden – sind in der letzten Spalte der Tabelle 1-2 und der Abbildung 1-1 zusammengefasst.

**Tabelle 1-2 Migrationszeiten und berechnete BHT-Konzentration im Migrationswasser bei der Kaltwasserprüfung einer Monokunststoffplatte**

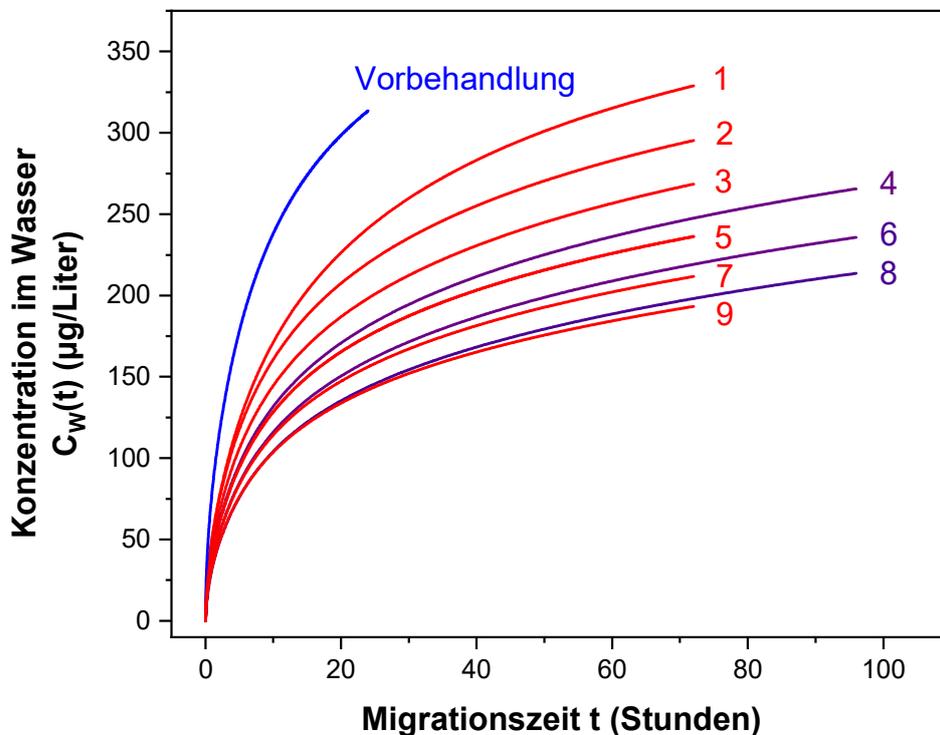
Migrationsprozesse	Migrationszeit t (Tage)	Gesamtkontaktzeit $t_{\text{ges}}$ (Tage)	Konzentration im Wasser $C_w(t)$ ( $\mu\text{g/l}$ )
Vorbehandlung	1	1	$3,136 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	4	$3,290 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	7	$2,953 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	10	$2,685 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	4	14	$2,656 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	17	$2,363 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	4	21	$2,358 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	24	$2,117 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	4	28	$2,136 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	31	$1,933 \cdot 10^2$

Abbildung 1-1 BHT-Konzentration im Migrationswasser bei der Kaltwasserprüfung einer Monokunststoffplatte



Die berechnete zeitabhängige Zunahme der Migrantenkonzentration,  $c_w(t)$ , im Prüfwasser während der Vorbehandlung und den darauffolgenden Migrationsperioden ist in der Abbildung 1-2 präsentiert.

**Abbildung 1-2 Zeitabhängige BHT-Konzentration der einzelnen Migrationswässer bei der Kaltwasserprüfung einer Monokunststoffplatte**



### Beurteilung der Modellierung von Beispiel 1

Beurteilungsrelevant ist die 3. Migrationsperiode oder bei der verlängerten Kaltwasserprüfung die 9. Migrationsperiode.

Die berechneten Konzentrationen sind in die Zapfhahnkonzentrationen  $c_{\text{tap}}$  umzurechnen:

$$c_{\text{tap}} = \frac{F_c \times c_{\text{gemessen}}}{O/V \times t}$$

Für Butylhydroxytoluen ergibt sich in der 3. Migrationsperiode folgender  $c_{\text{tap}}$ :

$$c_{\text{tap}} = \frac{4 \frac{\text{d}}{\text{dm}} \times 268,5 \frac{\mu\text{g}}{\text{l}}}{5 \text{ dm}^{-1} \times 3 \text{ d}} = 71,6 \mu\text{g/l}$$

Für die 9. Migrationsperiode ergibt sich  $c_{\text{tap}} = 51,5 \mu\text{g/l}$ .

Für die Einhaltung der Anforderung gilt:  $c_{\text{tap}} \leq \text{MTC}_{\text{tap}}$ .

Die Anforderung an BHT  $\text{MTC}_{\text{tap}} = 150 \mu\text{g/l}$  ist sowohl nach der 3. als auch der 9. Migrationsperiode eingehalten.

Die berechneten Migrationsergebnisse zeigen eine fallende Tendenz.

### Verwendete Referenzen für die Berechnung von Beispiel 1

1. KEMI – Swedish Chemicals Agency, <http://www.kemi.se/en>
2. <https://www.cdc.gov/niosh/npg/npgd0264.html>
3. [https://chemicalsafety.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p\\_lang=en&p\\_card\\_id=0841&p\\_version=2](https://chemicalsafety.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_lang=en&p_card_id=0841&p_version=2)

4. OECD-SIDS, Initial Assessment Report, SIAM 14, Paris, France 26-28 March 2002.
5. Mercea, P., Kalisch, A., Ulrich, M., Benz, H., Piringer, O., Tosa, V., Schuster, R. & Sejersen, P. (2018). Modelling migration of substances from into drinking water. Part 1 – Diffusion coefficient estimations. Polymer Testing 65: 176-188.
6. Mercea, P., Kalisch, A., Ulrich, M., Benz, H., Piringer, O., Tosa, V., Schuster, R., & Sejersen, P. (2019). Modelling migration of substances from polymers into drinking water. Part 2 – Partition coefficient estimations. Polymer Testing 76: 420-432

## 2 Kaltwasserprüfung einer Monoepoxidharzplatte

Es wird die Migration einer frisch produzierten Epoxidharzplatte in der Kaltwasserprüfung bei einer Gesamtprüfzeit von 31 Tagen gemäß DIN EN 12873-1:2014-09 berechnet.

Die Prüfung erfolgt stellvertretend für einen Behälter. Der Migrant ist homogen in der ganzen Matrix des Epoxidharzes bei Prüfbeginn verteilt. Die Epoxidharzplatte wird vollständig in das Prüfwasser eingetaucht (Immersion). Die Anpassung der Geometrie erfolgt analog zu Beispiel 1. Die Migrationsabläufe während der Spülungen bei der Vorbehandlung (jeweils 1 Stunde) der Epoxidharzplatte werden nicht berücksichtigt.

**Tabelle 2-1 Eingabeparameter für Migrationsberechnung aus Monoepoxidharzplatte**

<b>Eingabeparameter:</b>	
Materialtyp, -funktion	Epoxidharz (EP-H), Behälter
Abmessungen Epoxidharzplatte	L = 20 cm, B = 20 cm
reale Dicke Epoxidharzplatte	$d_P = 0,1 \text{ cm} = 1000 \mu\text{m}$
Dichte des Epoxidharzes	$\rho_P = 1,25 \text{ g/cm}^3$
Kunststoff-Prüfwasser Kontaktfläche	$O = 2 \cdot (B \cdot L + (B + L) \cdot d_P) = 808 \text{ cm}^2$
Volumen Prüfwasser	$V = 1,616 \text{ Liter} = 1616 \text{ cm}^3$
Kontaktfläche/Prüfwasservolumen Verhältnis	$O/V = 8,08 \text{ dm}^2/1,616 \text{ dm}^3 = 5 \text{ dm}^{-1}$
„Dicke“ Prüfwasser	$d_W = V/O = 0,2 \text{ dm} = 2,0 \text{ cm} = 20000 \mu\text{m}$
Dichte Prüfwasser	$\rho_W = 1 \text{ g/cm}^3$
errechnete Dicke Epoxidharzplatte	$d_P' = d_P \cdot B \cdot L / O = 0,04950 \text{ cm} = 495,0 \mu\text{m}$
<b>Migrant</b>	<b>Di-n-octylzinndilaurat, CAS-Nr. 3648-18-8</b>
Molekülmasse Migrant	$M = 743,77 \text{ g/mol}$
Wasserlöslichkeit des Migrants bei 23°C (Referenz 2)	Nicht löslich
Ausgangskonzentration des Migrants im Kunststoff	$C_{P0} = 200 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migrants im Prüfwasser	$C_{W0} = 0 \text{ mg/kg}$
Diffusionskoeffizient des Migrants im Kunststoff bei 23°C	$D^*_{P} = 1,0 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migrants im Prüfwasser bei 23°C	$D^*_{W} = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$
Verteilungskoeffizient des Migrants bei 23°C	$K^*_{P/W} = 10000 \text{ (g/cm}^3)/(\text{g/cm}^3)$

Anmerkungen:

Der obige Diffusionskoeffizient  $D^*_{P}$  bei 23°C wurde anhand von experimentellen Migrationsdaten in Acrylatpolymeren (siehe Referenzen 2 und 3) abgeschätzt.

Der obige Verteilungskoeffizient  $K^*_{P/W}$  bei 23°C wurde anhand der Unlöslichkeit des Migranten in Wasser abgeschätzt.

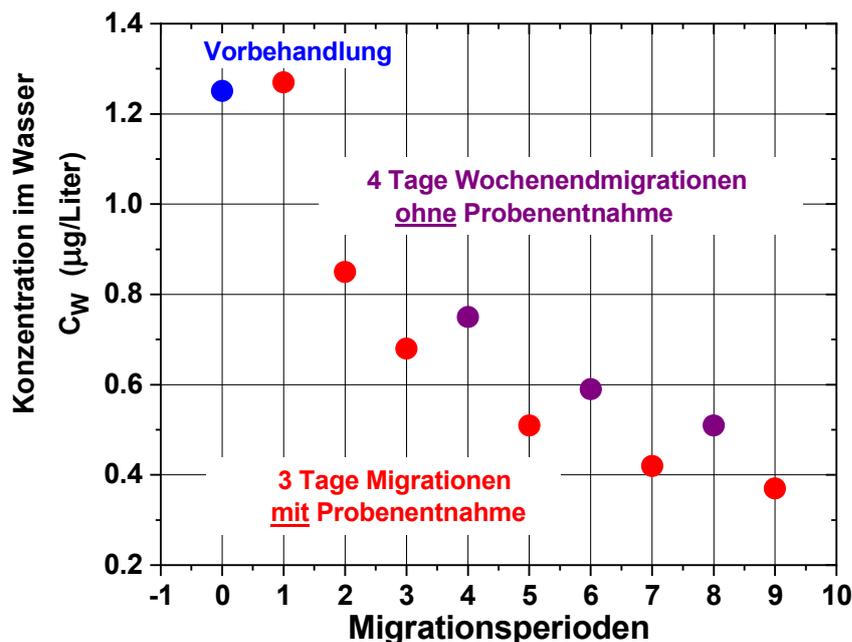
### Berechnung von Beispiel 2

Die berechneten Konzentrationen des Migranten im Prüfwasser - am Ende der Vorbehandlung und am Ende der darauffolgenden Migrationsperioden – sind in der letzten Spalte der Tabelle 2-2 und der Abbildung 2-1 zusammengefasst.

**Tabelle 2-2 Migrationszeiten und berechnete Konzentration von Di-n-octylzinndilaurat im Migrationswasser bei der Kaltwasserprüfung einer Monoepoxidharzplatte**

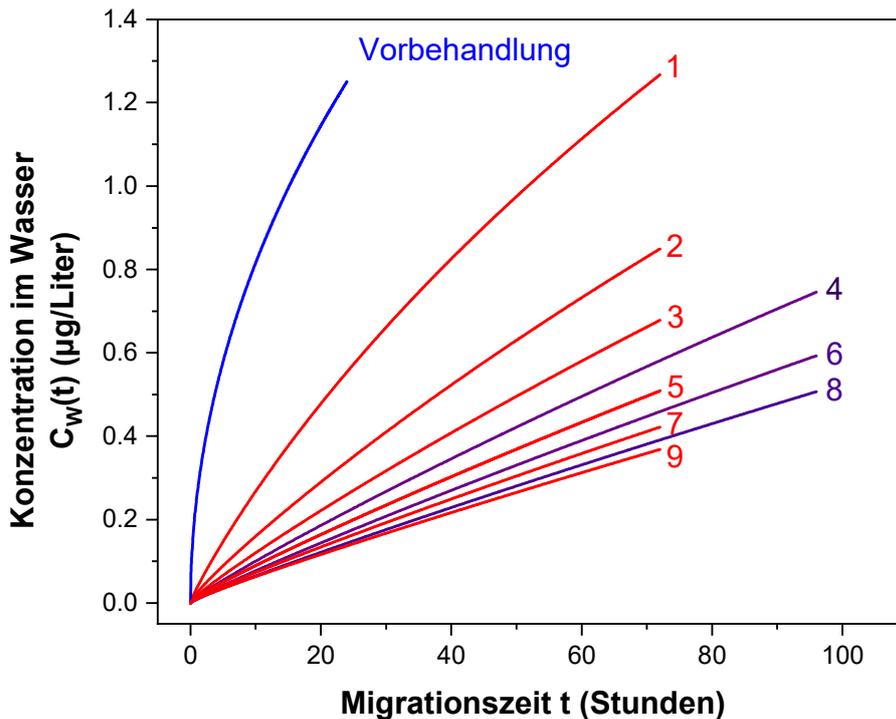
Migrationsprozesse	Migrationszeit t (Tage)	Gesamtkontaktzeit $t_{ges}$ (Tage)	Konzentration im Wasser $C_w(t)$ ( $\mu\text{g/l}$ )
Vorbehandlung	1	1	$1,251 \cdot 10^0$
Migrationsperiode	3	4	$1,267 \cdot 10^0$
Migrationsperiode	3	7	$8,493 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	3	10	$6,782 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	4	14	$7,457 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	3	17	$5,087 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	4	21	$5,931 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	3	24	$4,219 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	4	28	$5,070 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	3	31	$3,684 \cdot 10^{-1}$

**Abbildung 2-1 Konzentration von Di-n-octylzinndilaurat im Migrationswasser bei der Kaltwasserprüfung einer Monoepoxidharzplatte**



Die berechnete zeitabhängige Zunahme der Migrantenkonzentration,  $c_w(t)$ , im Prüfwasser während der Vorbehandlung und den darauffolgenden Migrationsperioden ist in Abbildung 2-2 präsentiert.

**Abbildung 2-2 Zeitabhängige Konzentration von Di-n-octylzinndilaurat in den einzelnen Migrationswässern bei der Kaltwasserprüfung einer Monoepoxidharzplatte**



### Beurteilung der Modellierung von Beispiel 2

Beurteilungsrelevant ist die 3. Migrationsperiode oder bei der verlängerten Kaltwasserprüfung die 9. Migrationsperiode.

Die berechneten Konzentrationen sind in die Zapfhahnkonzentrationen  $c_{\text{tap}}$  umzurechnen:

$$c_{\text{tap}} = \frac{F_c \times c_{\text{berechnet}}}{O/V \times t}$$

Für Di-n-octylzinndilaurat ergibt sich in der 3. Migrationsperiode folgender  $c_{\text{tap}}$

$$c_{\text{tap}} = \frac{1 \frac{\text{d}}{\text{dm}} \times 0,68 \frac{\mu\text{g}}{\text{l}}}{5 \text{ dm}^{-1} \times 3 \text{ d}} = 0,045 \mu\text{g/l}$$

Für die 9. Migrationsperiode ergibt sich  $c_{\text{tap}}=0,025 \mu\text{g/l}$ .

Berechnet als Zinn ergibt sich  $c_{\text{tap}} = 0,0072 \mu\text{g/l}$  (3. Migrationsperiode) bzw  $c_{\text{tap}} = 0,004 \mu\text{g/l}$  (9. Migrationsperiode).

Für die Einhaltung der Anforderung gilt:  $c_{\text{tap}} \leq \text{MTC}_{\text{tap}}$ .

Die Anforderung an Di-n-octylzinndilaurat  $\text{MTC}_{\text{tap}} = 0,3 \mu\text{g/l}$  berechnet als Zinn ist sowohl nach der 3. als auch der 9. Migrationsperiode eingehalten.

Die berechneten Migrationsergebnisse zeigen eine fallende Tendenz.

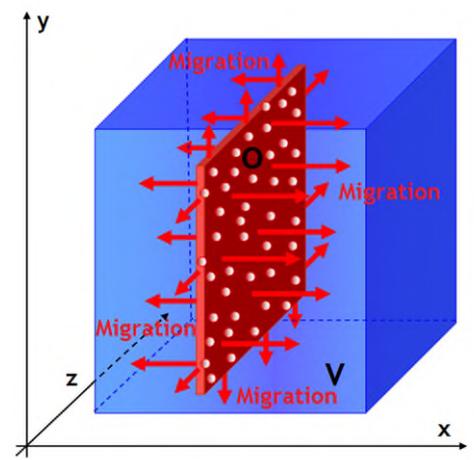
### Verwendete Referenzen für die Berechnung von Beispiel 2

1. [www.gelest.com/wp-content/uploads/product\\_msds/SND4430-msds.pdf](http://www.gelest.com/wp-content/uploads/product_msds/SND4430-msds.pdf)
2. Veniaminov, A.V. & Sedunov, Yu.N. (1996). Diffusion of Phenanthrenequinone in Poly(methyl methacrylate): Holographic Measurements. Polymer Science Series A, 38: 71.
3. Vezin, W.R., Florence, A.T. Diffusive Desorption of Small Solute Molecules from amorphous Polymers: Poly(Methyl methacrylate), Poly(Vinyl Acetate) and Poly(n-Alkyl 2-Cyanoacrylates). (1981) European Polymer Journal 17: 93.

## 3 Kaltwasserprüfung einer Monoelastomerplatte

Es wird die Migration einer frisch produzierten Monoelastomerplatte in der Kaltwasserprüfung bei einer Gesamtprüfzeit von 31 Tagen gemäß DIN EN 12873-1:2014-09 berechnet.

Die Prüfung erfolgt stellvertretend für eine Dichtung in der Hausinstallation. Der Migrant ist homogen in der ganzen Matrix des Elastomers bei Prüfbeginn verteilt. Die Elastomerplatte wird vollständig in das Prüfwasser eingetaucht (Immersion). Die Anpassung der Geometrie erfolgt analog zu Beispiel 1. Die Migrationsabläufe während der Spülungen bei der Vorbehandlung (jeweils 1 Stunde) der Elastomerplatte werden nicht berücksichtigt.



**Tabelle 3-1 Eingabeparameter für Migrationsberechnung aus einer Monoelastomerplatte**

Eingabeparameter:	
Materialtyp, -funktion	Ethylen-Propylen-Dien-Monomer (EPDM, CAS-Nr. 25038-36-2), Dichtung
Abmessungen der Platte	L = 20cm, B = 20cm
reale Dicke der Platte	$d_p = 0,2 \text{ cm} = 2000 \mu\text{m}$
Dichte des EPDM	$\rho_p = 1,095 \text{ g/cm}^3$
Elastomer-Prüfwasser Kontaktfläche	$O = 2 \cdot (B \cdot L + (B + L) \cdot d_p) = 816 \text{ cm}^2$
Volumen Prüfwasser	$V = 1,632 \text{ Liter} = 1632 \text{ cm}^3$
Kontaktfläche/Prüfwasservolumen Verhältnis	$O/V = 8,16 \text{ dm}^2 / 1,632 \text{ dm}^3 = 5 \text{ dm}^{-1}$
„Dicke“ Prüfwasser	$d_w = V/O = 0,2 \text{ dm} = 2,0 \text{ cm} = 20000 \mu\text{m}$
Dichte Prüfwasser	$\rho_w = 1 \text{ g/cm}^3$
errechnete Dicke Elastomerplatte	$d_p' = d_p \cdot B \cdot L / O = 0,09804 \text{ cm} = 980,4 \mu\text{m}$
<b>Migrant</b>	<b>Dicumylperoxid, CAS-Nr. 80-43-3</b>
Molekülmasse Migrant	$M = 270,37 \text{ g/mol}$
Wasserlöslichkeit des Migrants bei 20 °C (Referenz 1)	0,4-2,0 mg/l
log K <sub>ow</sub> bei 20 °C (Referenz 2)	log K <sub>ow</sub> = 5,6
Einsatzmenge des Migrants im Kunststoff	$C_{p0} = 20000 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migrants im Prüfwasser	$C_{w0} = 0 \text{ mg/kg}$

Eingabeparameter:	
Diffusionskoeffizient des Migranten im Kunststoff bei 23°C	$D^*p = 6,0 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Prüfwasser bei 23°C	$D^*w = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$
Verteilungskoeffizient des Migranten bei 23°C	$K^*_{p/w} = 15000 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$

Anmerkungen:

Der obige Diffusionskoeffizient  $D^*_p$  bei 23°C wurden anhand von experimentellen Migrationsdaten in EPDM-Kunststoffen (Referenzen 3-5) abgeschätzt.

Der obige Verteilungskoeffizienten  $K^*_{p/w}$  bei 23°C wurden anhand der Löslichkeitsunterschiede des Migranten im Elastomer und Wasser abgeschätzt.

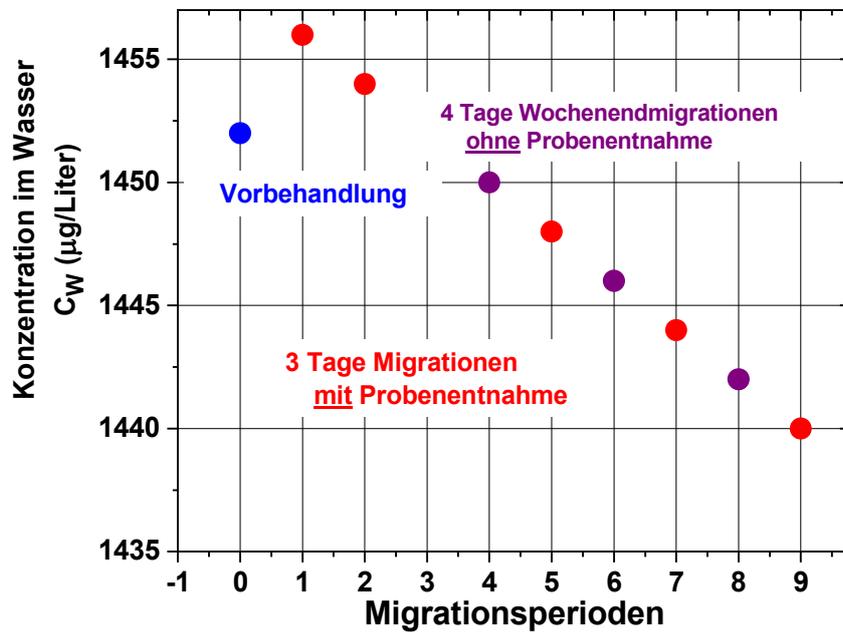
### Berechnung von Beispiel 3

Die berechneten Konzentrationen des Migranten im Prüfwasser - am Ende der Vorbehandlung und am Ende der darauffolgenden Migrationsperioden – sind in der letzten Spalte der Tabelle 3-2 und der Abbildung 3-1 zusammengefasst.

**Tabelle 3-2 Migrationszeiten und berechnete Konzentration von Dicumylperoxid im Migrationswasser bei der Kaltwasserprüfung einer Monoelastomerplatte**

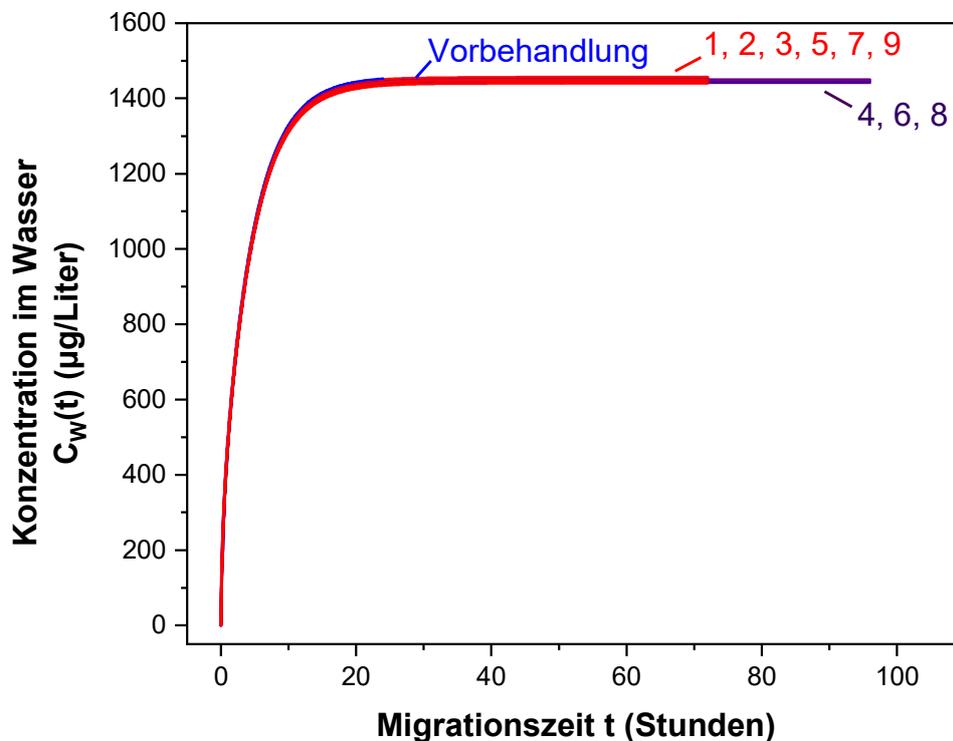
Migrationsprozesse	Migrationszeit t (Tage)	Gesamtkontaktzeit $t_{\text{ges}}$ (Tage)	Konzentration im Wasser $C_w(t)$ ( $\mu\text{g/l}$ )
Vorbehandlung	1	1	$1,452 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	3	4	$1,456 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	3	7	$1,454 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	3	10	$1,452 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	4	14	$1,450 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	3	17	$1,448 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	4	21	$1,446 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	3	24	$1,444 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	4	28	$1,442 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	3	31	$1,440 \cdot 10^3$

Abbildung 3-1 Konzentrationen von Dicumylperoxid im Migrationswasser bei der Kaltwasserprüfung einer Monoelastomerplatte



Die berechnete zeitabhängige Zunahme der Migrantenkonzentration,  $c_w(t)$ , im Prüfwasser während der Vorbehandlung und den darauffolgenden Migrationsperioden ist in Abbildung 3-2 präsentiert.

**Abbildung 3-2 Zeitabhängige Konzentration von Dicumylperoxid in den einzelnen Migrationswässern bei der Kaltwasserprüfung einer Monoelastomerplatte**



### Beurteilung der Modellierung von Beispiel 3

Beurteilungsrelevant ist die 3. Migrationsperiode oder bei der verlängerten Kaltwasserprüfung die 9. Migrationsperiode.

Die berechneten Konzentrationen sind in die Zapfhahnkonzentrationen  $c_{\text{tap}}$  umzurechnen:

$$c_{\text{tap}} = \frac{F_c \times c_{\text{gemessen}}}{O/V \times t}$$

Für Dicumylperoxid ergibt sich in der 3. Migrationsperiode folgender  $c_{\text{tap}}$ :

$$c_{\text{tap}} = \frac{0,4 \frac{\text{d}}{\text{dm}} \times 1452 \frac{\mu\text{g}}{\text{l}}}{5 \text{ dm}^{-1} \times 3 \text{ d}} = 38,7 \mu\text{g/l}$$

Für die 9. Migrationsperiode ergibt sich  $c_{\text{tap}} = 38,4 \mu\text{g/l}$ .

Für die Einhaltung der Anforderung gilt:  $c_{\text{tap}} \leq \text{MTC}_{\text{tap}}$ .

Die Anforderung an Dicumylperoxid  $\text{MTC}_{\text{tap}} = \text{„nicht nachweisbar“}$  ist sowohl nach der 3. als auch der 9. Migrationsperiode nicht eingehalten.

Die berechneten Migrationsergebnisse zeigen eine fallende Tendenz.

*Anmerkung: Dieses Beispiel zeigt, dass bei Stoffen, die bestimmungsgemäß reagieren, die Einsatzmengen nicht als Restgehalte angenommen werden können. Die gemessenen Restgehalte sind in der Regel deutlich niedriger. Daher ist es für die erfolgreiche Modellierung dieses*

Beispiels notwendig, dass der tatsächliche Restgehalt von Dicumylperoxid im Elastomer bekannt ist.

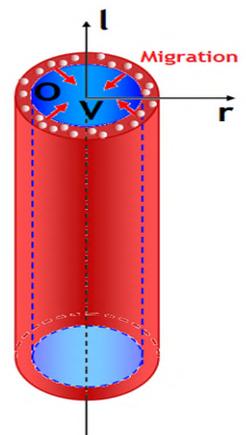
### Verwendete Referenzen für die Berechnung von Beispiel 3

1. GESTIS-Datenbank, DGUV-IFA, Sankt-Augustin, 1.02.2016 <https://gestis.dguv.de/>
2. GPS Safety Summary, Functional Additives, Luperox®DC, Dicumyl peroxide, 11.03.2013, [https://www.arkema.com/files/live/sites/shared\\_arkema/files/downloads/socialresponsability/safety-summaries/functional-additives-luperox-dc-dicumyl-peroxide-2013-03-11-v0.pdf](https://www.arkema.com/files/live/sites/shared_arkema/files/downloads/socialresponsability/safety-summaries/functional-additives-luperox-dc-dicumyl-peroxide-2013-03-11-v0.pdf)
3. Aminabhavi, T.M. & Munnolli, R.S. (1993). Sorption and Diffusion of Aldehydes and Ketones into Elastomers. Polymer International 32: 61.
4. Aminabhavi, T.M. & Munnolli, R.S. (1994) Investigation of the Molecular Transport of Aliphatic and Aromatic Esters into Engineering Polymer Membranes. Polymer International 34: 59.
5. Ouddane, M. & Rancourt, Y. (2001). Sorption and Diffusion of a Brake Fluid in EPDM Elastomers. Journal of Applied Polymer Science 79: 1178.

## 4 Kaltwasserprüfung eines Monokunststoffrohres

Es wird die Migration eines frisch produzierten Monokunststoffrohres in der Kaltwasserprüfung bei einer Gesamtprüfzeit von 31 Tagen gemäß DIN EN 12873-1:2014-09 berechnet.

Der Migrant ist homogen in der ganzen Matrix des Kunststoffes bei Prüfbeginn verteilt. Das Kunststoffrohr wird vollständig mit Prüfwasser gefüllt und beidseitig durch metallene Deckel/Stopfen – aus denen keine Migration stattfindet - abgedichtet. Die Migrationsabläufe während der Spülungen bei der Vorbehandlung (jeweils 1 Stunde) des Rohres werden nicht berücksichtigt.



**Tabelle 4-1 Eingabeparameter für Migrationsberechnung aus einem Monokunststoffrohr**

Eingabeparameter:	
Materialtyp, -funktion	dichtes Polyethylen (HDPE), Rohr
Innendurchmesser Rohr	$\phi_{\text{int}} = 1,2 \text{ cm}$
Außendurchmesser Rohr	$\phi_{\text{ext}} = 1,6 \text{ cm}$
Rohrlänge	$L = 100 \text{ cm}$
Wanddicke des Rohres	$d_P = (\phi_{\text{ext}} - \phi_{\text{int}}) / 2 = 0,2 \text{ cm} = 2000 \mu\text{m}$
Dichte Kunststoff	$\rho_P = 0,94 \text{ g/cm}^3$
Kunststoff-Prüfwasser Kontaktfläche	$O = \pi \cdot \phi_{\text{int}} \cdot L = 377 \text{ cm}^2$
Volumen Prüfwasser	$V = \pi \cdot \phi_{\text{int}}^2 / 4 \cdot L = 113,1 \text{ cm}^3$
Kontaktfläche/Prüfwasservolumen Verhältnis	$O/V = 3,77 \text{ dm}^2 / 0,1131 \text{ dm}^3 = 33,3 \text{ dm}^{-1}$
Dichte Prüfwasser	$\rho_W = 1 \text{ g/cm}^3$
Migrant	<b>Bumetrizol, CAS-Nr. 3896-11-5</b>
Molekülmasse Migrant	$M = 315,80 \text{ g/mol}$

Eingabeparameter:	
Wasserlöslichkeit des Migranten bei 20°C (Referenz 1)	$S = 0,68 \text{ mg/l}$ - sehr wenig löslich
log $K_{ow}$ bei 20°C (Referenz 1)	log $K_{ow} = 5.55$
Ausgangskonzentration des Migranten im Kunststoff	$C_{p0} = 1000 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migranten im Prüfwasser	$C_{w0} = 0 \text{ mg/kg}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Kunststoff bei 23°C	$D^*p = 1,3 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Prüfwasser bei 23°C	$D^*w = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$
Verteilungskoeffizient des Migranten bei 23°C	$K^*_{p/w} = 249 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$

*Anmerkungen:*

*Die obigen Diffusions- bzw. Verteilungskoeffizienten  $D^*p$  bzw.  $K^*_{p/w}$  bei 23°C wurden mit der in Referenzen 2 und 3 zitierten Methoden abgeschätzt.*

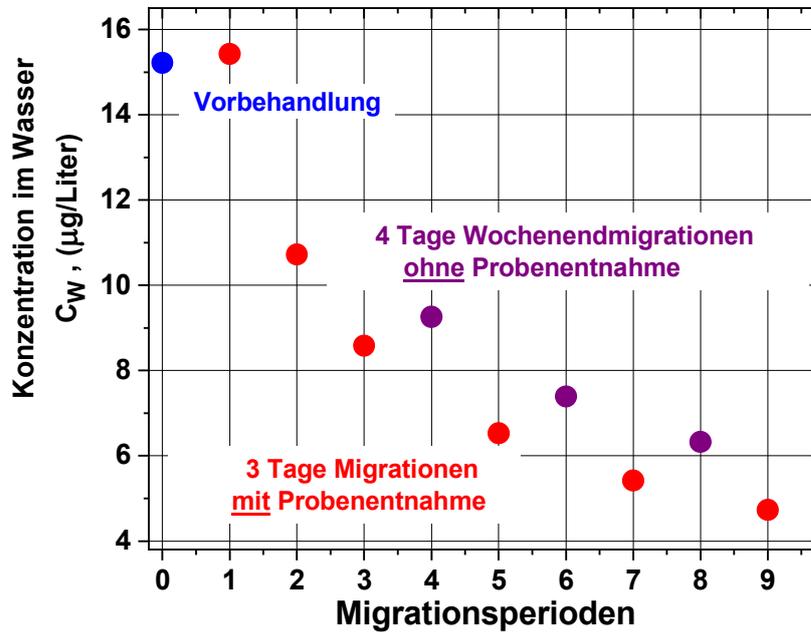
**Berechnung von Beispiel 4**

Die berechneten Konzentrationen des Migranten im Prüfwasser - am Ende der Vorbehandlung und am Ende der darauffolgenden Migrationsperioden – sind in der letzten Spalte der Tabelle 4-2 und der Abbildung 4-1 zusammengefasst.

**Tabelle 4-2 Migrationszeiten und berechnete Konzentration von Bumetrizol im Migrationswasser bei der Kaltwasserprüfung eines Monokunststoffrohres**

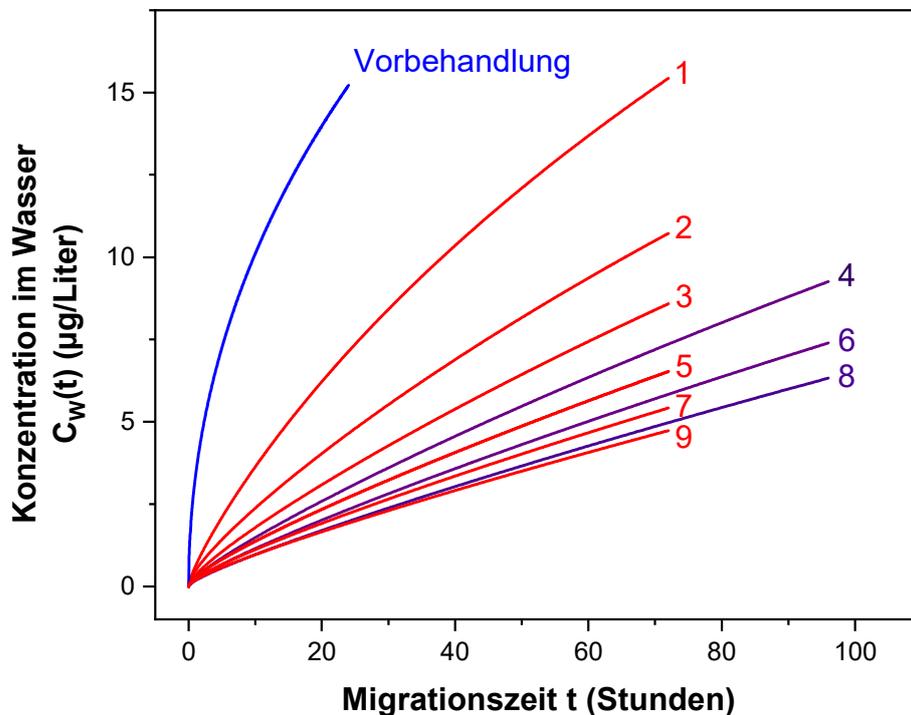
Migrationsprozesse	Migrationszeit t (Tage)	Gesamtkontaktzeit $t_{ges}$ (Tage)	Konzentration im Wasser $C_w(t)$ ( $\mu\text{g/l}$ )
Vorbehandlung	1	1	$2,025 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	3	4	$2,061 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	3	7	$1,789 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	3	10	$1,585 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	4	14	$1,569 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	3	17	$1,353 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	4	21	$1,357 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	3	24	$1,186 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	4	28	$1,207 \cdot 10^3$
Migrationsperiode	3	31	$1,066 \cdot 10^3$

Abbildung 4-1 Konzentration von Bumetrizol im Migrationswasser bei der Kaltwasserprüfung eines Monokunststoffrohrs



Die berechnete zeitabhängige Zunahme der Migrantenkonzentration,  $c_w(t)$ , im Prüfwasser während der Vorbehandlung und den darauffolgenden Migrationsperioden ist in Abbildung 4-2 präsentiert.

**Abbildung 4-2 Zeitabhängige Konzentration von Bumetrizol in den einzelnen Migrationswässern bei der Kaltwasserprüfung eines Monokunststoffrohres**



#### Beurteilung der Modellierung von Beispiel 4

Beurteilungsrelevant ist die 3. Migrationsperiode oder bei der verlängerten Kaltwasserprüfung die 9. Migrationsperiode.

Die berechneten Konzentrationen sind in die Zapfhahnkonzentrationen  $c_{\text{tap}}$  umzurechnen:

$$c_{\text{tap}} = \frac{F_c \times c_{\text{gemessen}}}{O/V \times t}$$

Für Bumetrizol ergibt sich in der 3. Migrationsperiode folgender  $c_{\text{tap}}$

$$c_{\text{tap}} = \frac{20 \frac{\text{d}}{\text{dm}} \times 1,585 \frac{\mu\text{g}}{\text{l}}}{33,3 \text{ dm}^{-1} \times 3 \text{ d}} = 317 \mu\text{g/l}$$

Für die 9. Migrationsperiode ergibt sich  $c_{\text{tap}} = 213 \mu\text{g/l}$ .

Für die Einhaltung der Anforderung gilt:  $c_{\text{tap}} \leq \text{MTC}_{\text{tap}}$ .

Die Anforderung an Bumetrizol  $\text{MTC}(T)_{\text{tap}} = 1500 \mu\text{g/l}$  ist sowohl nach der 3. als auch der 9. Migrationsperiode eingehalten.

Die berechneten Migrationsergebnisse zeigen eine fallende Tendenz.

#### Verwendete Referenzen für die Berechnung von Beispiel 4

1. EPIWEB4.1 -Suite, Environmental Protection Agency, Washington, DC, 2000-2012.



Eingabeparameter:	
Molekülmasse Migrant	$M = 98,06 \text{ g/mol}$
Wasserlöslichkeit des Migranten bei 20 °C (Referenz 1)	$S \approx 400 \text{ g/l}$ , gut löslich, Hydrolyse in Wasser
$\log K_{ow}$ (Referenz 1)	$\log K_{ow} = -2,86$
Ausgangskonzentration des Migranten in der Innenschicht (1)	$C_{P1,0} = 0 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migranten im Haftvermittler (2)	$C_{P2,0} = 100 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migranten in der Außenschicht (3)	$C_{P3,0} = 0 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migranten im Prüfwasser	$C_{W0} = 0 \text{ mg/kg}$
Diffusionskoeffizient des Migranten in der Innenschicht (1) bei 23°C	$D^*_{P1} = 4,58 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Haftvermittler (2) bei 23°C	$D^*_{P2} = 2,0 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten in der Außenschicht (3) bei 23°C	$D^*_{P3} = 5,0 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Prüfwasser bei 23°C	$D^*_W = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Innenschicht (1) und Wasser bei 23°C	$K^*_{P1/W} = 0,85 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Haftvermittler (2) und Innenschicht (1) bei 23°C	$K^*_{P2/P1} = 1,50 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Außenschicht (3) und Haftvermittler (2) bei 23°C	$K^*_{P3/P2} = 0,4 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$

#### Anmerkungen:

Die obigen Diffusionskoeffizienten  $D^*_{P1}$ ,  $D^*_{P2}$  und  $D^*_{P3}$  wurden anhand von Gleichungen aus Referenz 2 bzw. anhand von experimentellen Daten aus Referenz 4 bzw. Referenz 5 abgeschätzt.

Die obigen Verteilungskoeffizienten  $K^*_{P1/W}$ ,  $K^*_{P2/P1}$  und  $K^*_{P3/P2}$  bei 23°C wurden anhand von Gleichungen aus Referenz 3 bzw. des in Referenz 6 entwickelten Verfahren für Abschätzung von Verteilungskoeffizienten in Mehrschichtkunststoffen abgeschätzt.

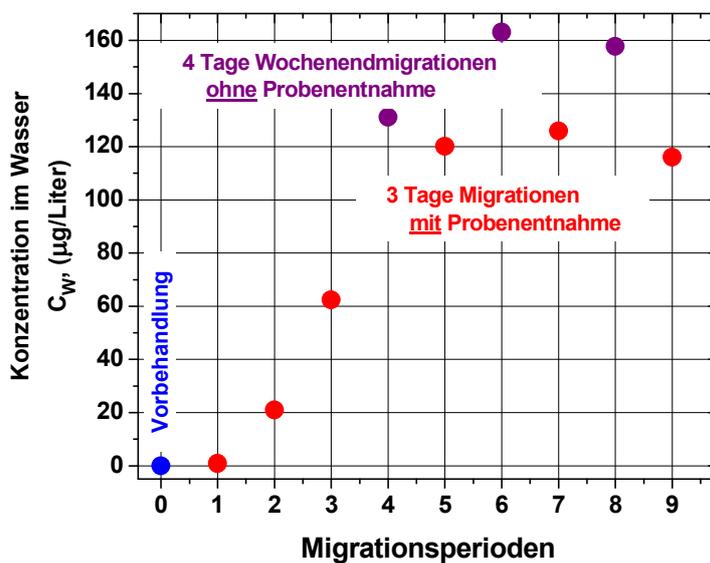
#### Berechnung von Beispiel 5

Die berechneten Konzentrationen des Migranten im Prüfwasser - am Ende der Vorbehandlung und am Ende der darauffolgenden Migrationsperioden – sind in der letzten Spalte der Tabelle 5-2 und der Abbildung 5-1 zusammengefasst.

**Tabelle 5-2 Migrationszeiten und berechnete Konzentration von Maleinsäureanhydrid im Migrationswasser bei der Kaltwasserprüfung eines Mehrschichtkunststoffrohres**

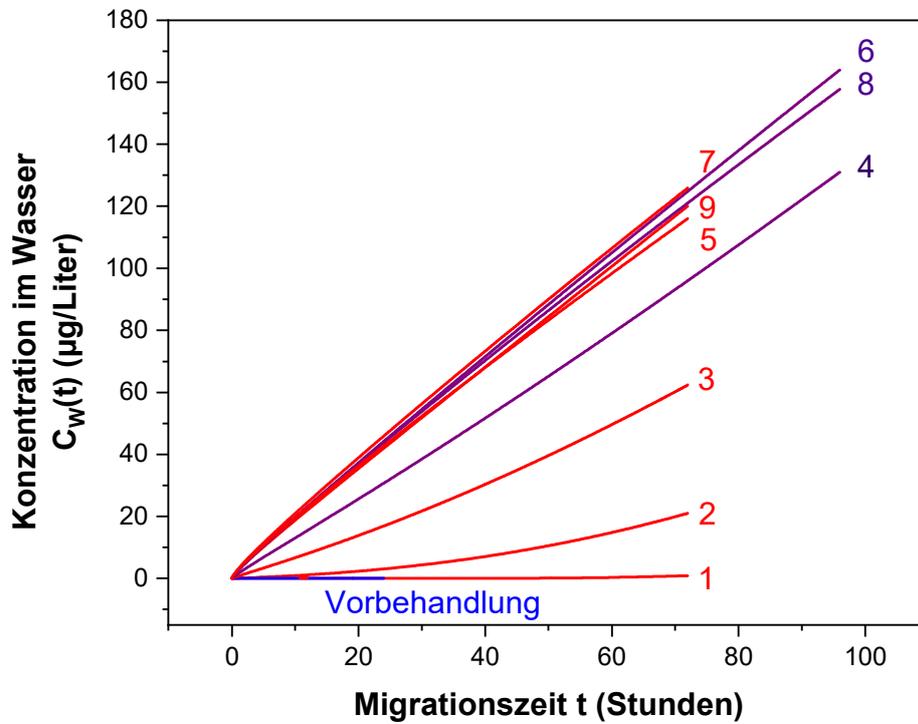
Migrationsprozesse	Migrationszeit t (Tage)	Gesamtkontaktzeit t <sub>ges</sub> (Tage)	Konzentration im Wasser C <sub>w</sub> (t) (µg/l)
Vorbehandlung	1	1	< 1,000·10 <sup>-3</sup>
Migrationsperiode	3	4	9,134·10 <sup>-1</sup>
Migrationsperiode	3	7	2,101·10 <sup>1</sup>
Migrationsperiode	3	10	6,237·10 <sup>1</sup>
Migrationsperiode	4	14	1,310·10 <sup>2</sup>
Migrationsperiode	3	17	1,201·10 <sup>2</sup>
Migrationsperiode	4	21	1,640·10 <sup>2</sup>
Migrationsperiode	3	24	1,259·10 <sup>2</sup>
Migrationsperiode	4	28	1,577·10 <sup>2</sup>
Migrationsperiode	3	31	1,116·10 <sup>2</sup>

**Abbildung 5-1 Konzentration von Maleinsäureanhydrid im Migrationswasser bei der Kaltwasserprüfung eines Mehrschichtkunststoffrohres**



Die berechnete zeitabhängige Zunahme der Migrantenkonzentration,  $c_w(t)$ , im Prüfwasser während der Vorbehandlung und den darauffolgenden Migrationsperioden ist in Abbildung 5-2 präsentiert.

**Abbildung 5-2 Zeitabhängige Konzentration von Maleinsäureanhydrid in den einzelnen Migrationswässern bei der Kaltwasserprüfung eines Mehrschichtkunststoffrohres**



### Beurteilung der Modellierung von Beispiel 5

Beurteilungsrelevant ist die 3. Migrationsperiode oder bei der verlängerten Kaltwasserprüfung die 9. Migrationsperiode.

Die berechneten Konzentrationen sind in die Zapfhahnkonzentrationen  $c_{\text{tap}}$  umzurechnen:

$$c_{\text{tap}} = \frac{F_c \times c_{\text{gemessen}}}{O/V \times t}$$

Für Maleinsäureanhydrid ergibt sich in der 3. Migrationsperiode folgender  $c_{\text{tap}}$ :

$$c_{\text{tap}} = \frac{20 \frac{\text{d}}{\text{dm}} \times 62,4 \frac{\mu\text{g}}{\text{l}}}{25,02 \text{ dm}^{-1} \times 3 \text{ d}} = 16,6 \mu\text{g/l}$$

Für die 9. Migrationsperiode ergibt sich  $c_{\text{tap}} = 29,7 \mu\text{g/l}$ .

Berechnet als Maleinsäure ergibt sich  $c_{\text{tap}} = 19,7 \mu\text{g/l}$  (3. Migrationsperiode) bzw.  $c_{\text{tap}} = 35,2 \mu\text{g/l}$  (9. Migrationsperiode).

Für die Einhaltung der Anforderung gilt:  $c_{\text{tap}} \leq \text{MTC}_{\text{tap}}$ .

Die Anforderung an Maleinsäureanhydrid  $\text{MTC}_{\text{tap}} = 1500 \mu\text{g/l}$  berechnet als Maleinsäure ist sowohl nach der 3. als auch der 9. Migrationsperiode eingehalten.

Die berechneten Migrationsergebnisse zeigen zunächst eine steigende Tendenz aufgrund der Zeitverzögerung, bis der Migrant durch die Innenschicht migriert ist. Ab der 6. Migrationsperiode zeigen die Migrationsergebnisse eine fallende Tendenz. Damit ist die

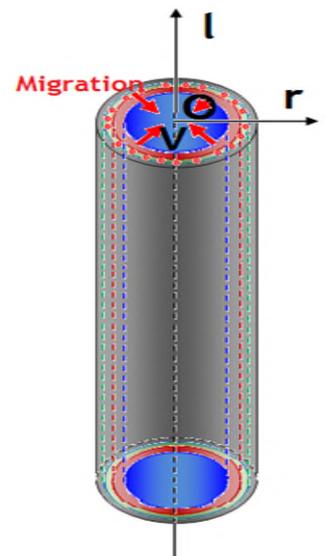
Anforderungen „keine steigende Tendenz“ erst bei der verlängerten Kaltwasserprüfung erfüllt.

### Verwendete Referenzen für die Berechnung von Beispiel 5

1. Product Stewardship Summary, Maleic Anhydride, [https://www.ashland.com/file\\_source/Ashland/Documents/Sustainability/rc%20maleic%20anhydride.pdf](https://www.ashland.com/file_source/Ashland/Documents/Sustainability/rc%20maleic%20anhydride.pdf)
2. Mercea, P., Kalisch, A., Ulrich, M., Benz, H., Piringer, O., Tosa, V., Schuster, R. & Sejersen, P. (2018). Modelling migration of substances from into drinking water. Part 1 – Diffusion coefficient estimations. *Polymer Testing* 65: 176-188.
3. Mercea, P., Kalisch, A., Ulrich, M., Benz, H., Piringer, O., Tosa, V., Schuster, R., & Sejersen, P. (2019). Modelling migration of substances from polymers into drinking water. Part 2 – Partition coefficient estimations. *Polymer Testing* 76: 420-432
4. Gonzales, M.A., Nematollahi, J., Guess, W.L. & Autian, J. (1967). Diffusion, permeation and solubility of selected agents in and through polyethylene. *Journal of Pharmaceutical Science* 56: 1288.
5. Strandburg, G., DeLassus, P.T. & Howell, B.A. (1990). Barrier Polymers and Structures. American Chemical Society. Chapter 18: 333.
6. Piringer, O. & Mercea, P. (2012). FACET-Software. FABES GmbH Dokumentation für Abschätzung der Verteilungskoeffizienten in Mehrschichtkunststoffen. München/Dublin.

## 6 Verlängerte Warmwasserprüfung eines Mehrschichtkunststoffrohres

Es wird die Migration eines frisch produzierten Mehrschichtkunststoffrohres in der verlängerten Warmwasserprüfung bei einer Gesamtprüfzeit von 31 Tagen gemäß DIN EN 12873-1:2014-09 berechnet. Das Rohr besteht aus 3 Schichten: Kunststoffschicht (Kontaktschicht), dem Haftvermittler und der Ethylen-Vinylalkohol-Copolymer-Schicht. Der Migrant ist homogen in dem Haftvermittler bei Prüfbeginn verteilt. Das mehrschichtige Kunststoffrohr wird vollständig mit Prüfwasser gefüllt und beidseitig durch metallene Deckel/Stopfen – aus denen keine Migration stattfindet - abgedichtet. Die Migrationsabläufe während der Spülungen bei der Vorbehandlung (jeweils 1 Stunde) des Rohres werden nicht berücksichtigt.



**Tabelle 6-1 Eingabeparameter für Migrationsberechnung aus einem Mehrschichtkunststoffrohr**

Eingabeparameter:	
Materialtyp, -funktion	Vernetztes Polyethylen (PE-Xa), Innenschicht (1)
Innendurchmesser Rohr	$\phi_{int} = 1,6 \text{ cm}$
Dicke Schicht (1)	$d_{p1} = 0,2 \text{ cm} = 2000 \mu\text{m}$
Materialtyp, -funktion	Modifiziertes Polyethylen (PE), Haftvermittler, Schicht (2)
Dicke Schicht (2)	$d_{p2} = 0,01 \text{ cm} = 100 \mu\text{m}$

Eingabeparameter:	
Materialtyp, -funktion	Ethylen Vinylalkohol Copolymer (EVOH), Außenschicht (3)
Dicke Schicht (3)	$d_{P3} = 0,01 \text{ cm} = 100 \text{ }\mu\text{m}$
Außendurchmesser Rohr	$\phi_{\text{ext}} \approx 2,0 \text{ cm}$
Rohrlänge	$L = 100 \text{ cm}$
Wanddicke des Rohres	$d_P = (\phi_{\text{ext}} - \phi_{\text{int}})/2 = 0,2 \text{ cm} = 2000 \text{ }\mu\text{m}$
Dichte Kunststoff Innenschicht (1)	$\rho_{P1} = 0,95 \text{ g/cm}^3$
Dichte Kunststoff Haftvermittler (2)	$\rho_{P2} = 0,925 \text{ g/cm}^3$
Dichte Kunststoff Außenschicht (3)	$\rho_{P3} = 1,15 \text{ g/cm}^3$
Kunststoff-Prüfwasser Kontaktfläche	$O = \pi \cdot \phi_{\text{int}} \cdot L = 502,6 \text{ cm}^2$
Volumen Prüfwasser	$V = \pi \cdot \phi_{\text{int}}^2 \cdot L / 4 = 201,1 \text{ cm}^3$
Kontaktfläche/Prüfwasservolumen Verhältnis	$O/V = 5,03 \text{ dm}^2 / 0,201 \text{ dm}^3 = 25,02 \text{ dm}^{-1}$
Dichte Prüfwasser	$\rho_W = 1 \text{ g/cm}^3$
<b>Migrant</b>	<b>Maleinsäureanhydrid, CAS-Nr. 108-31-6</b>
Molekülmasse Migrant	$M = 98,06 \text{ g/mol}$
Wasserlöslichkeit des Migrants bei 25°C (Referenz 1)	$S \approx 400 \text{ g/l}$ , gut löslich, Hydrolyse mit Wasser
log K <sub>ow</sub> (Referenz 1)	log K <sub>ow</sub> = -2,86
Ausgangskonzentration des Migrants in der Innenschicht (1)	$C_{P1,0} = 0 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migrants im Haftvermittler (2)	$C_{P2,0} = 100 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migrants in der Außenschicht (3)	$C_{P3,0} = 0 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migrants im Prüfwasser	$C_{W0} = 0 \text{ mg/kg}$
Diffusionskoeffizient des Migrants in der Innenschicht (1) bei 60°C	$D^*_{P1} = 9,18 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migrants im Haftvermittler (2) bei 60°C	$D^*_{P2} = 8,0 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migrants in der Außenschicht (3) bei 60°C	$D^*_{P3} = 4,0 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migrants im Prüfwasser	$D^*_W = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$
Verteilungskoeffizient des Migrants zwischen Innenschicht (1) und Wasser bei 60°C	$K^*_{P1/W} = 0,50 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$
Verteilungskoeffizient des Migrants zwischen Haftvermittler (2) und Innenschicht (1) bei 60°C	$K^*_{P2/P1} = 1,25 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$
Verteilungskoeffizient des Migrants zwischen Außenschicht (3) und Haftvermittler (2) bei 60°C	$K^*_{P3/P2} = 0,45 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$

#### Anmerkungen:

Die obigen Diffusionskoeffizienten  $D^*_{P1}$ ,  $D^*_{P2}$  und  $D^*_{P3}$  wurden anhand von Gleichungen aus Referenz 2 bzw. anhand von experimentellen Daten aus Referenz 4 bzw. Referenz 5 abgeschätzt.

Die obigen Verteilungskoeffizienten  $K^*_{P1/W}$ ,  $K^*_{P2/P1}$  und  $K^*_{P3/P2}$  bei 23°C wurden anhand von Gleichungen aus Referenz 3 bzw. des in Referenz 6 entwickelten Verfahrens für die Abschätzung von Verteilungskoeffizienten in Mehrschichtkunststoffen abgeschätzt.

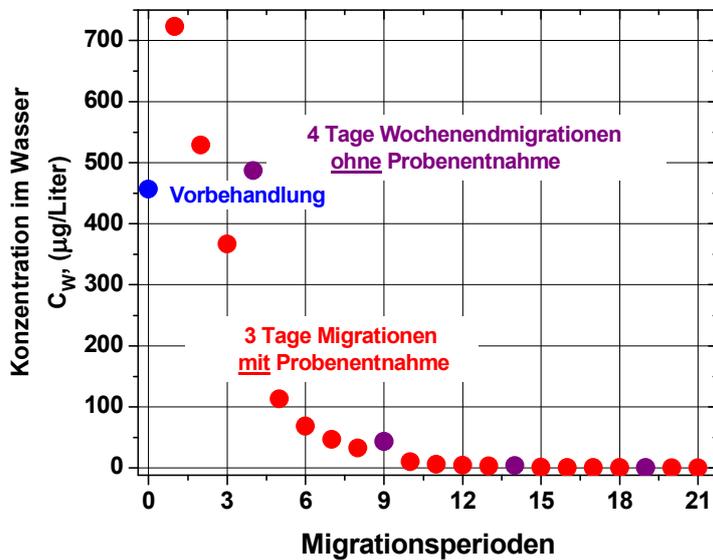
### Berechnung von Beispiel 6

Die berechneten Konzentrationen des Migranten im Prüfwasser - am Ende der Vorbehandlung und am Ende der darauffolgenden Migrationsperioden – sind in der letzten Spalte der Tabelle 6-2 und der Abbildung 3-1 zusammengefasst.

**Tabelle 6-2 Migrationszeiten und berechnete Konzentration von Maleinsäureanhydrid im Migrationswasser bei der Warmwasserprüfung eines Mehrschichtkunststoffrohres**

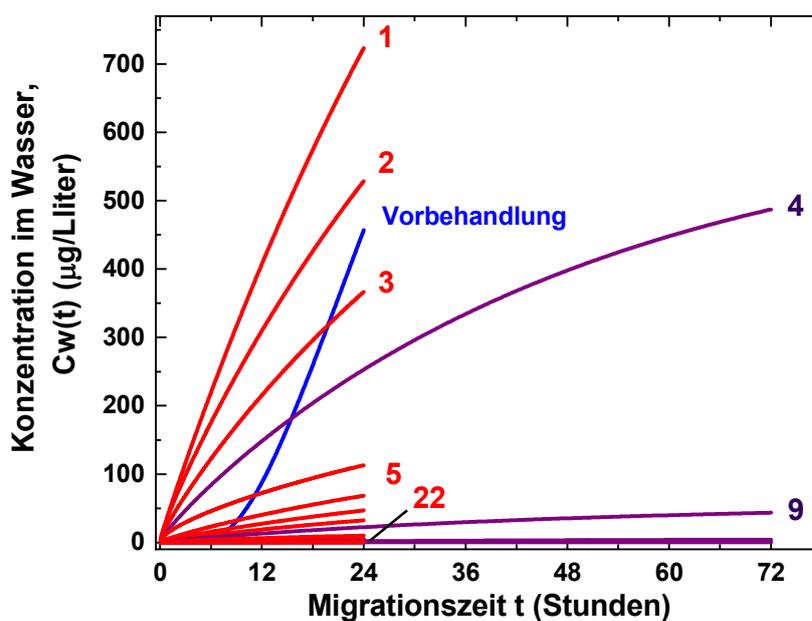
Migrationsprozesse	Migrationszeit t (Tage)	Gesamtkontaktzeit $t_{ges}$ (Tage)	Konzentration im Wasser $C_w(t)$ ( $\mu\text{g/l}$ )
Vorbehandlung	1	1	$4,565 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	1	2	$7,229 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	1	3	$5,287 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	1	4	$3,667 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	7	$4,878 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	1	8	$1,131 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	1	9	$6,864 \cdot 10^1$
Migrationsperiode	1	10	$4,702 \cdot 10^1$
Migrationsperiode	1	11	$3,256 \cdot 10^1$
Migrationsperiode	3	14	$4,367 \cdot 10^1$
Migrationsperiode	1	15	$1,023 \cdot 10^1$
Migrationsperiode	1	16	$6,273 \cdot 10^0$
Migrationsperiode	1	17	$4,345 \cdot 10^0$
Migrationsperiode	1	18	$3,050 \cdot 10^0$
Migrationsperiode	3	21	$4,247 \cdot 10^0$
Migrationsperiode	1	22	$1,044 \cdot 10^0$
Migrationsperiode	1	23	$6,705 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	1	24	$4,886 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	1	25	$3,649 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	3	28	$5,942 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	1	29	$1,730 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	1	30	$1,281 \cdot 10^{-1}$
Migrationsperiode	1	31	$1,065 \cdot 10^{-1}$

**Abbildung 6-1 Konzentrationen von Maleinsäureanhydrid im Migrationswasser bei der Warmwasserprüfung eines Mehrschichtkunststoffrohrs**



Die berechnete zeitabhängige Zunahme der Migrantenkonzentration,  $c_w(t)$ , im Prüfwasser während der Vorbehandlung und den darauffolgenden Migrationsperioden ist in Abbildung 6-2 präsentiert.

**Abbildung 6-2 Zeitabhängige Konzentration von Maleinsäureanhydrid in den einzelnen Migrationswässern bei der Warmwasserprüfung eines Mehrschichtkunststoffrohres**



## Beurteilung der Modellierung von Beispiel 6

Beurteilungsrelevant ist die 22. Migrationsperiode bei der verlängerten Warmwasserprüfung.

Die berechneten Konzentrationen sind in die Zapfhahnkonzentrationen  $c_{\text{tap}}$  umzurechnen:

$$c_{\text{tap}} = \frac{F_c \times c_{\text{gemessen}}}{O/V \times t}$$

Für Maleinsäureanhydrid ergibt sich in der 22. Migrationsperiode folgender  $c_{\text{tap}}$ :

$$c_{\text{tap}} = \frac{20 \frac{\text{d}}{\text{dm}} \times 0,13 \frac{\mu\text{g}}{\text{l}}}{25,02 \text{ dm}^{-1} \times 1 \text{ d}} = 0,085 \mu\text{g/l}$$

Berechnet als Maleinsäure ergibt sich  $c_{\text{tap}} = 0,10 \mu\text{g/l}$  (22. Migrationsperiode).

Für die Einhaltung der Anforderung gilt:  $c_{\text{tap}} \leq \text{MTC}_{\text{tap}}$ .

Die Anforderung an Maleinsäureanhydrid  $\text{MTC}_{\text{tap}} = 1500 \mu\text{g/l}$  berechnet als Maleinsäure ist eingehalten.

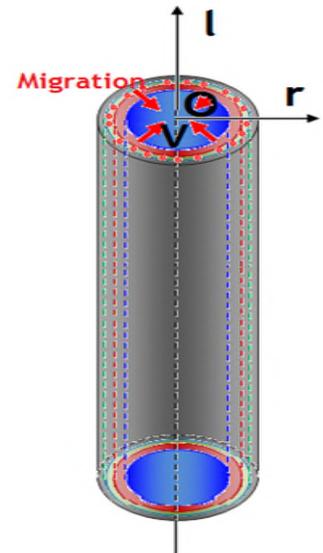
Die berechneten Migrationsergebnisse zeigen eine fallende Tendenz.

## Verwendete Referenzen für die Berechnung von Beispiel 6

1. Product Stewardship Summary, Maleic Anhydride, [https://www.ashland.com/file\\_source/Ashland/Documents/Sustainability/rc%20maleic%20anhydride.pdf](https://www.ashland.com/file_source/Ashland/Documents/Sustainability/rc%20maleic%20anhydride.pdf)
2. Mercea, P., Kalisch, A., Ulrich, M., Benz, H., Piringer, O., Tosa, V., Schuster, R. & Sejersen, P. (2018). Modelling migration of substances from into drinking water. Part 1 – Diffusion coefficient estimations. *Polymer Testing* 65: 176-188.
3. Mercea, P., Kalisch, A., Ulrich, M., Benz, H., Piringer, O., Tosa, V., Schuster, R., & Sejersen, P. (2019). Modelling migration of substances from polymers into drinking water. Part 2 – Partition coefficient estimations. *Polymer Testing* 76: 420-432
4. Gonzales, M.A., Nematollahi, J., Guess, W.L. & Autian, J. (1967). Diffusion, permeation and solubility of selected agents in and through polyethylene. *Journal of Pharmaceutical Science* 56: 1288.
5. Strandburg, G., DeLassus, P.T. & Howell, B.A. (1990). *Barrier Polymers and Structures*. American Chemical Society. Chapter 18: 333.
6. Piringer, O. & Mercea, P. (2012). FACET-Software. FABES GmbH Dokumentation für Abschätzung der Verteilungskoeffizienten in Mehrschichtkunststoffen. München/Dublin.

## 7 Kaltwasserprüfung nach Lagerung eines Mehrschichtkunststoffrohres

Es wird die Migration eines 30 Tage bei 18°C gelagerten Mehrschichtkunststoffrohres in der Kaltwasserprüfung bei einer Gesamtprüfzeit von 31 Tagen gemäß der DIN EN 12873-1:2014-09 berechnet. Das Rohr besteht aus 3 Schichten: Kunststoffschicht (Kontaktschicht), dem Haftvermittler und der Ethylen-Vinylalkohol-Copolymer-Schicht. Der Migrant ist vor der Lagerung homogen in dem Haftvermittler verteilt. Nach der Lagerung wird das mehrschichtige Kunststoffrohr vollständig mit Prüfwasser gefüllt und beidseitig durch metallene Deckel/Stopfen – aus denen keine Migration stattfindet - abgedichtet. Die Migrationsabläufe während der Spülungen bei der Vorbehandlung (jeweils 1 Stunde) des Rohres werden nicht berücksichtigt.



**Tabelle 7-1 Eingabeparameter für Migrationsberechnung aus einem vorgelagertem Mehrschichtkunststoffrohr**

Eingabeparameter:	
Materialtyp, -funktion	Vernetztes Polyethylen (PE-Xa), Innenschicht (1)
Innendurchmesser Rohr	$\phi_{\text{int}} = 1,6 \text{ cm}$
Dicke Schicht (1)	$d_{P1} = 0,2 \text{ cm} = 2000 \mu\text{m}$
Materialtyp, -funktion	Modifiziertes Polyethylen (PE), Haftvermittler Schicht (2)
Dicke Schicht (2)	$d_{P2} = 0,01 \text{ cm} = 100 \mu\text{m}$
Materialtyp, -funktion,	Ethylen Vinylalkohol Copolymer (EVOH), Außenschicht (3)
Dicke Schicht (3)	$d_{P3} = 0,01 \text{ cm} = 100 \mu\text{m}$
Außendurchmesser Rohr	$\phi_{\text{ext}} \approx 2,0 \text{ cm}$
Rohrlänge	$L = 100 \text{ cm}$
Wanddicke des Rohres	$d_P = (\phi_{\text{ext}} - \phi_{\text{int}}) / 2 = 0,2 \text{ cm} = 2000 \mu\text{m}$
Dichte Kunststoff Innenschicht (1)	$\rho_{P1} = 0,95 \text{ g/cm}^3$
Dichte Kunststoff Haftvermittler (2)	$\rho_{P2} = 0,925 \text{ g/cm}^3$
Dichte Kunststoff Außenschicht (3)	$\rho_{P3} = 1,15 \text{ g/cm}^3$
Kunststoff-Prüfwasser Kontaktoberfläche	$O = \pi \cdot \phi_{\text{int}} \cdot L = 502,6 \text{ cm}^2$
Volumen Prüfwasser	$V = \pi \cdot \phi_{\text{int}}^2 \cdot L / 4 = 201,1 \text{ cm}^3$
Kontaktoberfläche/Prüfwasservolumen Verhältnis	$O/V = 5,03 \text{ dm}^2 / 0,201 \text{ dm}^3 = 25,02 \text{ dm}^{-1}$
Dichte Prüfwasser	$\rho_{\text{PW}} = 1 \text{ g/cm}^3$
<b>Migrant</b>	<b>Maleinsäureanhydrid, CAS-Nr. 108-31-6</b>
Molekülmasse Migrant	$M = 98,06 \text{ g/mol}$
Wasserlöslichkeit des Migrants bei 25°C (Referenz 1)	$S \approx 400 \text{ g/l}$ , gut löslich, Hydrolyse mit Wasser
log K <sub>ow</sub> (Referenz 1)	log K <sub>ow</sub> = -2,86
Zwischenlagerungszeit nach Herstellung	$t_0 = 30 \text{ Tage}$
Lagerungstemperatur	$T_0 = 18^\circ\text{C}$

Eingabeparameter:	
Ausgangskonzentration des Migranten in der Innenschicht (1)	$C_{P1,0} = 0 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migranten im Haftvermittler (2)	$C_{P2,0} = 100 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migranten in der Außenschicht (3)	$C_{P3,0} = 0 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migranten im Prüfwasser	$C_{W0} = 0 \text{ mg/kg}$
Diffusionskoeffizient des Migranten in der Innenschicht (1) bei 18°C	$D^*_{P1} = 2,87 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten in der Innenschicht (1) bei 23°C	$D^*_{P1} = 4,58 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Haftvermittler (2) bei 18°C	$D^*_{P2} = 1,0 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Haftvermittler (2) bei 23°C	$D^*_{P2} = 2,0 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten in der Außenschicht (3) bei 18°C	$D^*_{P3} = 3,75 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten in der Außenschicht (3) bei 23°C	$D^*_{P3} = 5,0 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Prüfwasser	$D^*_W = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Innenschicht (1) und Wasser bei 23°C	$K^*_{P1/W} = 0,85 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Haftvermittler (2) und Innenschicht (1) bei 18°C	$K^*_{P2/P1} = 1,85 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Haftvermittler (2) und Innenschicht (1) bei 23°C	$K^*_{P2/P1} = 1,50 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Außenschicht (3) und Haftvermittler (2) bei 18°C	$K^*_{P3/P2} = 0,52 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Außenschicht (3) und Haftvermittler (2) bei 23°C	$K^*_{P3/P2} = 0,4 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$

#### Anmerkungen:

Die obigen Diffusionskoeffizienten  $D^*_{P1}$ ,  $D^*_{P2}$  und  $D^*_{P3}$  bei 18 °C bzw. 23°C wurden anhand von Gleichungen aus Referenz 2 bzw. anhand von experimentellen Daten aus Referenz 4 bzw. Referenz 5 abgeschätzt.

Die obigen Verteilungskoeffizienten  $K^*_{P1/W}$  bei 23°C und  $K^*_{P2/P1}$  und  $K^*_{P3/P2}$  bei 18 °C bzw. 23°C wurden anhand von Gleichungen aus Referenz 3 bzw. des in Referenz 6 entwickelten Verfahrens für die Abschätzung von Verteilungskoeffizienten in Mehrschichtkunststoffen abgeschätzt.

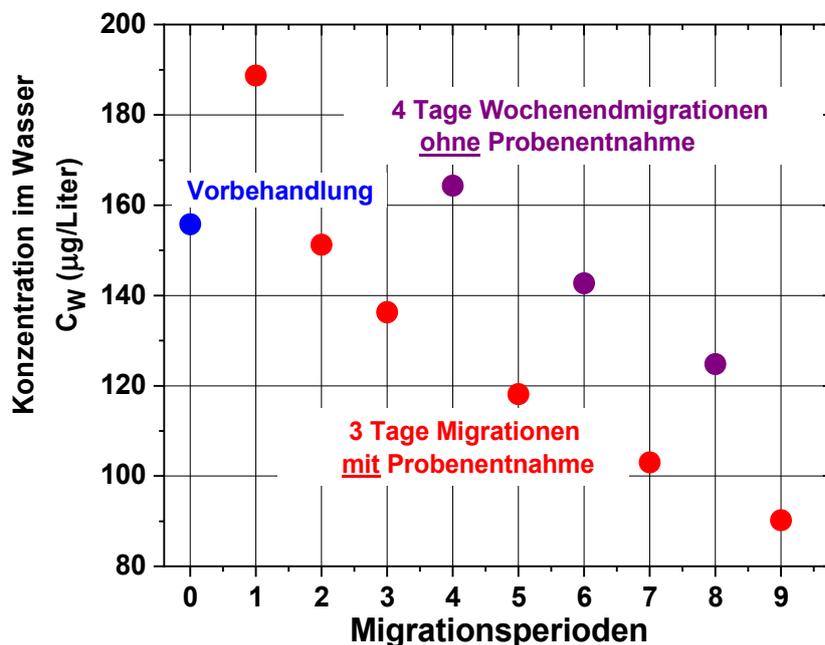
#### Berechnung von Beispiel 7

Die berechneten Konzentrationen des Migranten im Prüfwasser - am Ende der Vorbehandlung und am Ende der darauffolgenden Migrationsperioden – sind in der letzten Spalte der Tabelle 7-2 und der Abbildung 7-1 zusammengefasst.

**Tabelle 7-2 Migrationszeiten und berechnete Konzentration von Maleinsäureanhydrid im Migrationswasser bei der Kaltwasserprüfung eines vorgelagerten Mehrschichtkunststoffrohres**

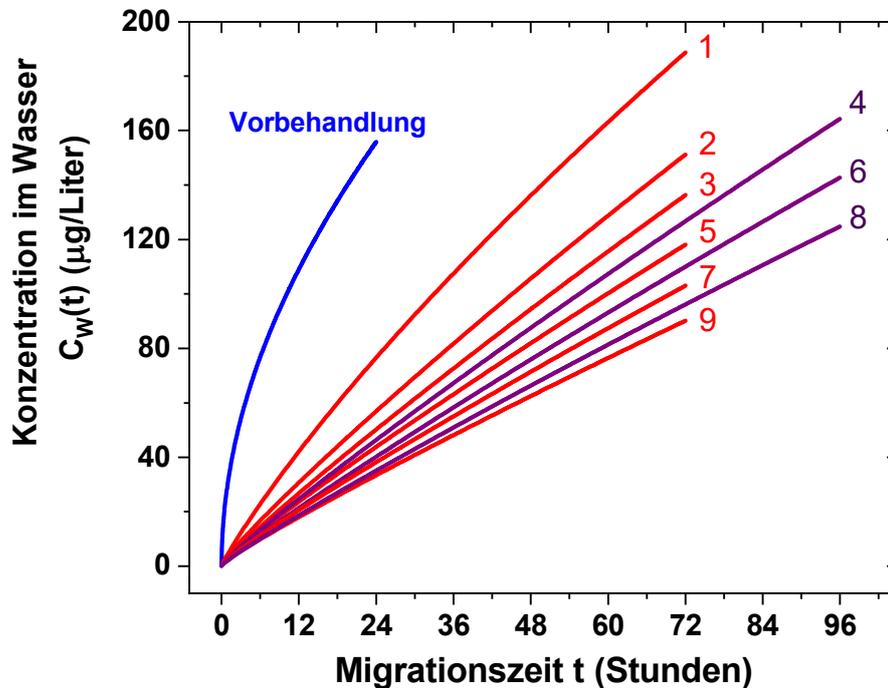
Migrationsprozesse	Migrationszeit t (Tage)	Gesamtkontaktzeit $t_{ges}$ (Tage)	Konzentration im Wasser $C_w(t)$ ( $\mu\text{g/Liter}$ )
Vorbehandlung	1	1	$1,558 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	4	$1,887 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	7	$1,512 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	10	$1,363 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	4	14	$1,642 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	17	$1,181 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	4	21	$1,427 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	24	$1,030 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	4	28	$1,247 \cdot 10^2$
Migrationsperiode	3	31	$9,015 \cdot 10^1$

**Abbildung 7-1 Konzentration von Maleinsäureanhydrid Bei der Kaltwasserprüfung eines vorgelagerten Mehrschichtkunststoffrohres**



Die berechnete zeitabhängige Zunahme der Migrantenkonzentration,  $c_w(t)$ , im Prüfwasser während der Vorbehandlung und den darauffolgenden Migrationsperioden ist in Abbildung 7-2 präsentiert.

**Abbildung 7-2 Zeitabhängige Konzentration von Maleinsäureanhydrid in den einzelnen Migrationswässern bei der Kaltwasserprüfung eines vorgelagerten Mehrschichtkunststoffrohres**



### Beurteilung der Modellierung von Beispiel 7

Beurteilungsrelevant ist die 3. Migrationsperiode oder bei der verlängerten Kaltwasserprüfung die 9. Migrationsperiode.

Die berechneten Konzentrationen sind in die Zapfhahnkonzentrationen  $c_{\text{tap}}$  umzurechnen:

$$c_{\text{tap}} = \frac{F_c \times c_{\text{gemessen}}}{O/V \times t}$$

Für Maleinsäureanhydrid ergibt sich in der 3. Migrationsperiode folgender  $c_{\text{tap}}$ :

$$c_{\text{tap}} = \frac{20 \frac{\text{d}}{\text{dm}} \times 136,3 \frac{\mu\text{g}}{\text{l}}}{25,02 \text{ dm}^{-1} \times 3 \text{ d}} = 36,3 \mu\text{g/l}$$

Für die 9. Migrationsperiode ergibt sich  $c_{\text{tap}} = 24,0 \mu\text{g/l}$ .

Berechnet als Maleinsäure ergibt sich  $c_{\text{tap}} = 43,0 \mu\text{g/l}$  (3. Migrationsperiode) bzw.  $c_{\text{tap}} = 28,4 \mu\text{g/l}$  (9. Migrationsperiode).

Für die Einhaltung der Anforderung gilt:  $c_{\text{tap}} \leq \text{MTC}_{\text{tap}}$ .

Die Anforderung an Maleinsäureanhydrid  $\text{MTC}_{\text{tap}} = 1500 \mu\text{g/l}$  berechnet als Maleinsäure ist sowohl nach der 3. als auch der 9. Migrationsperiode eingehalten.

Die berechneten Migrationsergebnisse zeigen eine fallende Tendenz. Durch die Vorlagerung migriert der Migrant bereits in die Innenschicht, daher tritt die Zeitverzögerung nicht auf (siehe Beispiel 5).



Eingabeparameter:	
Dicke Schicht (3)	$d_{P3} = 0,01 \text{ cm} = 100 \text{ }\mu\text{m}$
Außendurchmesser Rohr	$\phi_{\text{ext}} \approx 2,0 \text{ cm}$
Rohrlänge	$L = 100 \text{ cm}$
Wanddicke des Rohres	$d_P = (\phi_{\text{ext}} - \phi_{\text{int}})/2 = 0,2 \text{ cm} = 2000 \text{ }\mu\text{m}$
Dichte Kunststoff Innenschicht (1)	$\rho_{P1} = 0,95 \text{ g/cm}^3$
Dichte Kunststoff Haftvermittler (2)	$\rho_{P2} = 0,925 \text{ g/cm}^3$
Dichte Kunststoff Außenschicht (3)	$\rho_{P3} = 1,15 \text{ g/cm}^3$
Kunststoff-Prüfwasser Kontaktfläche	$O = \pi \cdot \phi_{\text{int}} \cdot L = 502,6 \text{ cm}^2$
Volumen Prüfwasser	$V = \pi \cdot \phi_{\text{int}}^2 \cdot L / 4 = 201,1 \text{ cm}^3$
Kontaktfläche/Prüfwasservolumen Verhältnis	$O/V = 5,03 \text{ dm}^2 / 0,201 \text{ dm}^3 = 25,02 \text{ dm}^{-1}$
Dichte Prüfwasser	$\rho_W = 1 \text{ g/cm}^3$
<b>Migrant</b>	<b>Maleinsäureanhydrid, CAS-Nr. 108-31-6</b>
Molekülmasse Migrant	$M = 98,06 \text{ g/mol}$
Wasserlöslichkeit des Migranten bei 25°C (Referenz 1)	$S \approx 400 \text{ g/l}$ , gut löslich, Hydrolyse mit Wasser
log K <sub>ow</sub> (Referenz 1)	log K <sub>ow</sub> = -2,86
Zwischenlagerungszeit nach Herstellung	$t_0 = 30 \text{ Tage}$
Lagerungstemperatur	$T_0 = 18^\circ\text{C}$
Ausgangskonzentration des Migranten in der Innenschicht (1)	$C_{P1,0} = 0 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migranten im Haftvermittler (2)	$C_{P2,0} = 100 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migranten in der Außenschicht (3)	$C_{P3,0} = 0 \text{ mg/kg}$
Ausgangskonzentration des Migranten im Prüfwasser	$C_{W0} = 0 \text{ mg/kg}$
Diffusionskoeffizient des Migranten in der Innenschicht (1) bei 18°C	$D^*_{P1} = 2,87 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten in der Innenschicht (1) bei 60°C	$D^*_{P1} = 9,18 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Haftvermittler (2) bei 18°C	$D^*_{P2} = 1,0 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Haftvermittler (2) bei 60°C	$D^*_{P2} = 8,0 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten in der Außenschicht (3) bei 18°C	$D^*_{P3} = 3,75 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten in der Außenschicht (3) bei 60°C	$D^*_{P3} = 4,0 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{s}$
Diffusionskoeffizient des Migranten im Prüfwasser	$D^*_W = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Innenschicht (1) und Wasser bei 60°C	$K^*_{P1/W} = 0,50 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Haftvermittler (2) und Innenschicht (1) bei 18°C	$K^*_{P2/P1} = 1,85 \text{ (g/cm}^3\text{)/(g/cm}^3\text{)}$

Eingabeparameter:	
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Haftvermittler (2) und Innenschicht (1) bei 60°C	$K^*_{P2/P1} = 1,25 \text{ (g/cm}^3\text{)}/\text{(g/cm}^3\text{)}$
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Außenschicht (3) und Haftvermittler (2) bei 18°C	$K^*_{P3/P2} = 0,52 \text{ (g/cm}^3\text{)}/\text{(g/cm}^3\text{)}$
Verteilungskoeffizient des Migranten zwischen Außenschicht (3) und Haftvermittler (2) bei 60°C	$K^*_{P3/P2} = 0,45 \text{ (g/cm}^3\text{)}/\text{(g/cm}^3\text{)}$

#### Anmerkungen:

Die obigen Diffusionskoeffizienten  $D^*_{P1}$ ,  $D^*_{P2}$  und  $D^*_{P3}$  bei 18 °C bzw. 60 °C wurden anhand von Gleichungen aus Referenz 2 oder anhand von experimentellen Daten aus Referenz 4 bzw. Referenz 5 abgeschätzt.

Die obigen Verteilungskoeffizienten  $K^*_{P1/W}$  bei 60 °C und  $K^*_{P2/P1}$  und  $K^*_{P3/P2}$  bei 18 °C bzw. 60 °C wurden anhand von Gleichungen aus Referenz 3 bzw. des in Referenz 6 entwickelten Verfahrens für die Abschätzung von Verteilungskoeffizienten in Mehrschichtkunststoffen abgeschätzt.

#### Berechnung von Beispiel 8

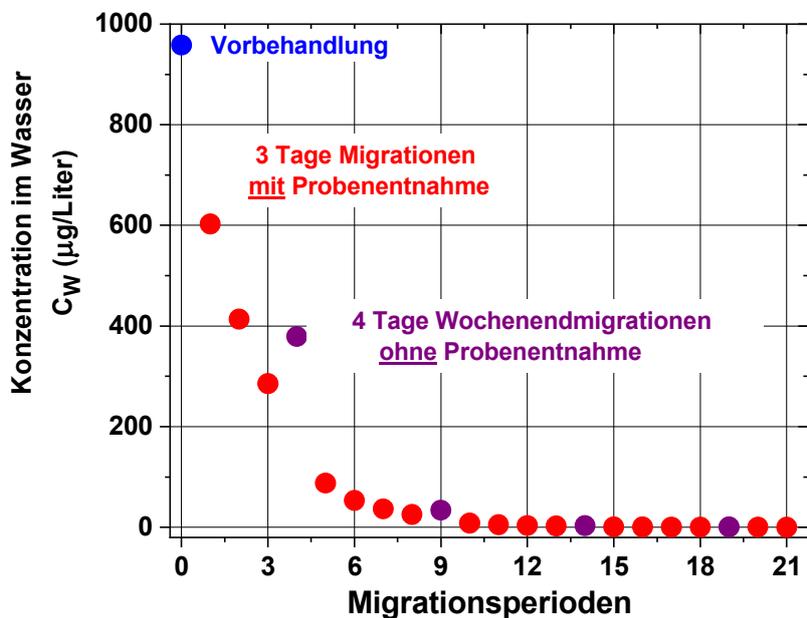
Die berechneten Konzentrationen des Migranten im Prüfwasser - am Ende der Vorbehandlung und am Ende der darauffolgenden Migrationsperioden – sind in der letzten Spalte der Tabelle 8-2 und der Abbildung 8-1 zusammengefasst.

**Tabelle 8-2 Migrationszeiten und berechnete Konzentration von Maleinsäureanhydrid im Migrationswasser bei der Warmwasserprüfung eines vorgelagerten Mehrschichtkunststoffrohres**

Migrationsprozesse	Migrationszeit t (Tage)	Gesamtkontaktzeit t <sub>ges</sub> (Tage)	Konzentration im Wasser C <sub>w</sub> (t) (µg/Liter)
Vorbehandlung	1	1	$9,574 \cdot 10^2$
1. Migrationsperiode	1	2	$6,024 \cdot 10^2$
2. Migrationsperiode	1	3	$4,135 \cdot 10^2$
3. Migrationsperiode	1	4	$2,854 \cdot 10^2$
4. Migrationsperiode	3	7	$3,795 \cdot 10^2$
5. Migrationsperiode	1	8	$8,802 \cdot 10^1$
6. Migrationsperiode	1	9	$5,342 \cdot 10^1$
7. Migrationsperiode	1	10	$3,660 \cdot 10^1$
8. Migrationsperiode	1	11	$2,535 \cdot 10^1$
9. Migrationsperiode	3	14	$3,402 \cdot 10^1$
10. Migrationsperiode	1	15	$7,977 \cdot 10^0$
11. Migrationsperiode	1	16	$7,893 \cdot 10^0$
12. Migrationsperiode	1	17	$3,392 \cdot 10^0$
13. Migrationsperiode	1	18	$2,383 \cdot 10^0$
14. Migrationsperiode	3	21	$3,328 \cdot 10^0$
15. Migrationsperiode	1	22	$8,206 \cdot 10^{-1}$
16. Migrationsperiode	1	23	$5,289 \cdot 10^{-1}$

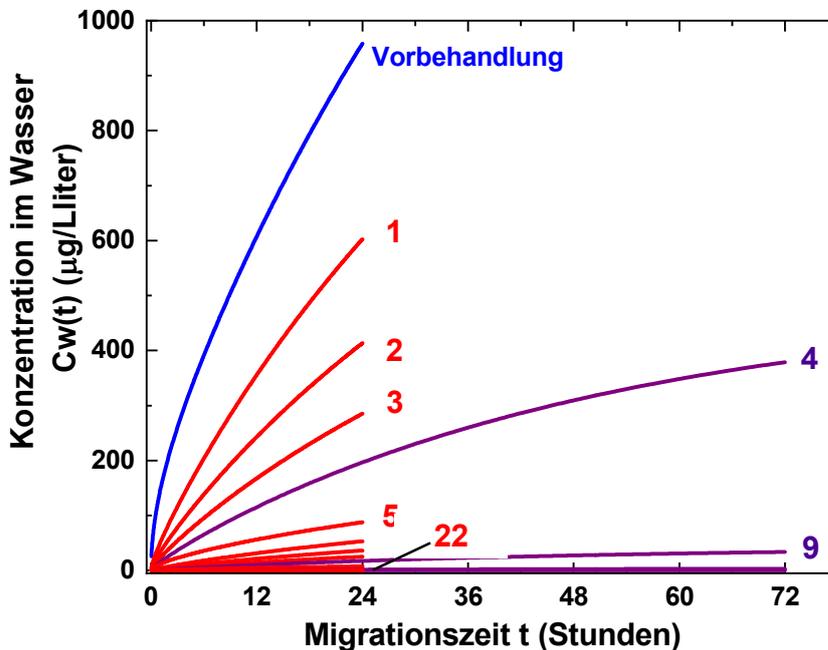
Migrationsprozesse	Migrationszeit t (Tage)	Gesamtkontaktzeit t <sub>ges</sub> (Tage)	Konzentration im Wasser C <sub>w</sub> (t) (µg/Liter)
17. Migrationsperiode	1	24	3,867·10 <sup>-1</sup>
18. Migrationsperiode	1	25	2,899·10 <sup>-1</sup>
19. Migrationsperiode	3	28	4,764·10 <sup>-1</sup>
20. Migrationsperiode	1	29	1,399·10 <sup>-1</sup>
21. Migrationsperiode	1	30	1,042·10 <sup>-1</sup>
22. Migrationsperiode	1	31	8,704·10 <sup>-2</sup>

**Abbildung 8-1** Konzentration von Maleinsäureanhydrid im Migrationswasser bei der Warmwasserprüfung eines vorgelagerten Mehrschichtkunststoffrohrs



Die berechnete zeitabhängige Zunahme der Migrantenkonzentration,  $c_w(t)$ , im Prüfwasser während der Vorbehandlung und den darauffolgenden Migrationsperioden ist in Abbildung 8-2 präsentiert.

**Abbildung 8-2 Zeitabhängige Konzentration von Maleinsäureanhydrid in den einzelnen Migrationswässern bei der Kaltwasserprüfung eines vorgelagerten Mehrschichtkunststoffrohres**



### Beurteilung der Modellierung von Beispiel 8

Beurteilungsrelevant ist die 22. Migrationsperiode bei der verlängerten Warmwasserprüfung.

Die berechneten Konzentrationen sind in die Zapfhahnkonzentrationen  $c_{\text{tap}}$  umzurechnen:

$$c_{\text{tap}} = \frac{F_c \times c_{\text{gemessen}}}{O/V \times t}$$

Für Maleinsäureanhydrid ergibt sich in der 22. Migrationsperiode folgender  $c_{\text{tap}}$ :

$$c_{\text{tap}} = \frac{20 \frac{\text{d}}{\text{dm}} \times 0,087 \frac{\mu\text{g}}{\text{l}}}{25,02 \text{ dm}^{-1} \times 1 \text{ d}} = 0,070 \mu\text{g/l}$$

Berechnet als Maleinsäure ergibt sich  $c_{\text{tap}} = 0,082 \mu\text{g/l}$ .

Für die Einhaltung der Anforderung gilt:  $c_{\text{tap}} \leq \text{MTC}_{\text{tap}}$ .

Die Anforderung an Maleinsäureanhydrid  $\text{MTC}_{\text{tap}} = 1500 \mu\text{g/l}$  berechnet als Maleinsäure ist eingehalten.

Die berechneten Migrationsergebnisse zeigen eine fallende Tendenz.

Die Vorlagerung spielt in diesem Fall bei der verlängerten Warmwasserprüfung keine so große Rolle wie bei der Kaltwasserprüfung (siehe Beispiel 5).

### Verwendete Referenzen für die Berechnung von Beispiel 8

1. Product Stewardship Summary, Maleic Anhydride, [https://www.ashland.com/file\\_source/Ashland/Documents/Sustainability/rc%20maleic%20anhydride.pdf](https://www.ashland.com/file_source/Ashland/Documents/Sustainability/rc%20maleic%20anhydride.pdf)

2. Mercea, P., Kalisch, A., Ulrich, M., Benz, H., Piringer, O., Tosa, V., Schuster, R. & Sejersen, P. (2018). Modelling migration of substances from into drinking water. Part 1 – Diffusion coefficient estimations. *Polymer Testing* 65: 176-188.
3. Mercea, P., Kalisch, A., Ulrich, M., Benz, H., Piringer, O., Tosa, V., Schuster, R., & Sejersen, P. (2019). Modelling migration of substances from polymers into drinking water. Part 2 – Partition coefficient estimations. *Polymer Testing* 76: 420-432
4. Gonzales, M.A., Nematollahi, J., Guess, W.L. & Autian, J. (1967). Diffusion, permeation and solubility of selected agents in and through polyethylene. *Journal of Pharmaceutical Science* 56: 1288.
5. Strandburg, G., DeLassus, P.T. & Howell, B.A. (1990). *Barrier Polymers and Structures*. American Chemical Society. Chapter 18: 333.
6. Piringer, O. & Mercea, P. (2012). FACET-Software. FABES GmbH Dokumentation für Abschätzung der Verteilungskoeffizienten in Mehrschichtkunststoffen. München/Dublin.