

# Untersuchung auf chemische Unterschiede von Mineralwasser in Kunststoff- und Glasflaschen mittels GC/MS und HPLC<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>Studentisches Projekt im SS 2003: Amanuel Amare, Basir Baqi, Karin Blaschzyk, Katrin Pawlowski, Paul Rempel, Thomas Reschka (4. Sem. Chemie)

## Einleitung

Kunststoffflaschen werden in der Getränkeindustrie wegen ihrer höheren Wirtschaftlichkeit im Vergleich mit Glasflaschen verstärkt eingesetzt [1,2]. In PET-Flaschen werden jedoch z. T. Weichmacher und Stabilisatoren verwendet, die in das Getränk wandern und sich dort lösen können. Als Weichmacher werden häufig Phthalate eingesetzt. Wegen des Verdachts auf hormonelle und fruchtbarkeits-hemmende Nebenwirkungen sowie der Begünstigung östrogensensitiver Krebse durch Phthalate auf den menschlichen Organismus sind diese Stoffe im Getränk nicht erwünscht.

## Aufgabenstellung

Mineralwasser in Kunststoff- und Glasflaschen des gleichen Herstellers soll qualitativ auf unerwünschte Stoffe – insbesondere Phthalate - untersucht und verglichen werden.

## Methode

Die Additive werden durch Festphasenextraktion (SPE: Solid Phase Extraktion) extrahiert, aufkonzentriert und mittels GC/MS sowie HPLC gegen Vergleichssubstanzen identifiziert [3]. Die Extraktion mit der SPE wird für alle Flaschen auf die gleiche Weise durchgeführt. Es dürfen während der Probenvorbereitung keine phthalathaltigen Materialien mit der Probe in Berührung kommen, was durch Einsatz kunststofffreier Geräte, Verbindungen, Dichtungen etc. sichergestellt wird.

Jeweils 2 L Mineralwasser werden an einer LiChrolut EN (200 mg) SPE-Säule adsorbiert und anschließend mit 20mL Ethylacetat eluiert. Der Extrakt wird bei 35 °C im Vakuum auf 1 mL eingengt.

Je 10 µL Probe werden mittels GC/MS analysiert und die wichtigsten Substanzpeaks durch Spektrvergleich mit der Spektrenbibliothek NIST 98 identifiziert.

## Ergebnisse

Die Mineralwasserprobe aus der Glasflasche weist keine besonderen Auffälligkeiten auf. Das Chromatogramm der Mineralwasserprobe aus der PET-Flasche zeigt jedoch mehrere Substanzen an (Abb. 1): so lässt sich massenspektrometrisch im Signal mit RT= 41.25 min Diisooctylphthalat (DIOP) identifizieren (m/e = 167, 149, 104, 71, 57, 55, kein Molekülion). Das HPLC-Chromatogramm erhärtet diesen Nachweis (Abb. 2): das Signal bei RT= 5.77 min stimmt mit dem Signal von DIOP in einer Phthalate-Referenzmischung exakt überein. Hieraus lässt sich ableiten, dass unerwünschte Zusatzstoffe aus PET-Flaschen ins Getränk migrieren können.

## Ausblick

In einer anschließenden Projektarbeit soll eine quantitative Analyse der Extrakte durchgeführt werden, um herauszufinden, ob die Gehalte an Verunreinigungen gesetzliche Grenzwerte überschreiten und eine gesundheitliche Gefährdung vorliegen kann.

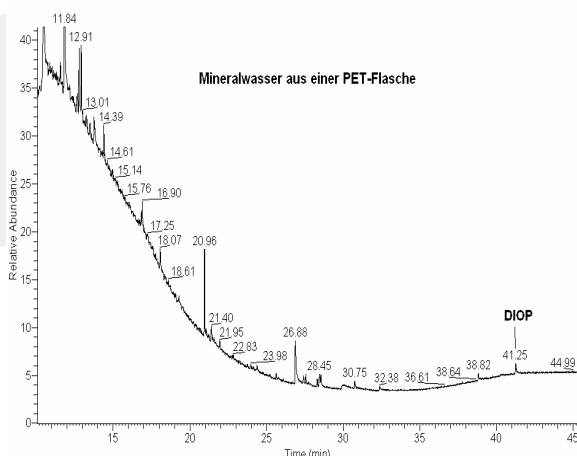


Abb. 1: GC/MS-TIC einer Mineralwasserprobe aus PET-Flasche

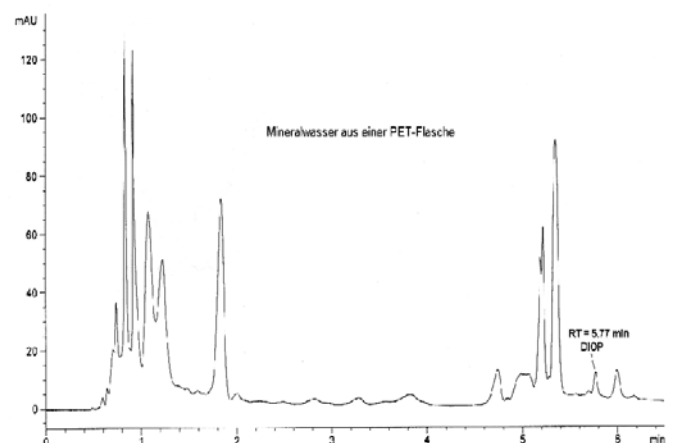


Abb. 2: HPLC-Chromatogramm einer Mineralwasserprobe aus PET-Flasche

## Literatur

- [1] Fachverband der chem. Industrie Österreichs-FCIO; [www.fcio.at](http://www.fcio.at)
- [2] G. Donnevert, N. Ladyzheva, GIT, 2002, 46(6), 702 - 705
- [3] M. Klotzek, G. Rösgen, S. Pelzer - Interdisziplinäres Projekt „Untersuchung von Kunststoff- und Glasflaschen auf chemische, ökonomische und ökologische Aspekte“, FH-Bonn-Rhein-Sieg, Rheinbach, 2002



Fachhochschule  
Bonn-Rhein-Sieg

## Ansprechpartner

Prof. Dr. Gerd Knupp, Dr. Peter Kusch  
Fachbereich Angewandte Naturwissenschaften  
Tel. 02241/865-533  
[gerd.knupp@fh-brs.de](mailto:gerd.knupp@fh-brs.de)