

1,2-Propylenglykol USP

Wassermischbares, schwerflüchtiges und geruchloses Löse- und Feuchthaltemittel von sehr hoher Reinheit.

Für nachfolgende genannte Anwendungsgebiete empfehlen wir 1,2-Propylenglykol-Marken des Unternehmensbereichs Feinchemie:

- 1,2-Propylenglykol Care für kosmetische und sanitäre Anwendungen
- 1,2-Propylenglykol Pharma für pharmazeutische Anwendungen
- 1,2-Propandiol USP für die Tierernährung

Chemische Bezeichnung

1,2-Propandiol	$\text{CH}_3\text{-CHOH-CH}_2\text{OH}$
Summenformel:	$\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_2$
CAS-Reg.-Nr.:	57-55-6

Lieferspezifikation

Spezifizierte Prüfung	Prüfmethode	Spezifikation
Identität	IR	entspricht
Reinheit	Kapillar-GC	min. 99,8 Flächen-%
Relative Dichte, 25/25°C		1,035 – 1,037
Brechungsindex, 20°C		1,431 – 1,433
Säurezahl		max. 0,019 mg KOH/ml
Wasser	KF-Titration	max. 0,2%
Sulfatasche		max. 70 mg/kg
Chlorid		max. 70 mg/kg
Sulfat		max. 60 mg/kg
Oxidierende Substanzen		entspricht
Reduzierende Substanzen		entspricht
Dimere und Polymere	Kapillar-GC	max. 0,1 g/100 g
1,3 Propandiol		max. 100 mg/kg
Organische Chlor- verbindungen als Cl		max. 1 mg/kg
Arsen		max. 3 mg/kg
Schwermetalle		max. 5 mg/kg

Eigenschaften

1,2-Propylenglykol USP ist eine klare, farblose Flüssigkeit, viskos, schwer flüchtig, geruchlos, neutral und hygroskopisch. Das Produkt ist mit Wasser, niederen Alkoholen, Estern und Ketonen in jedem Verhältnis mischbar. Nur begrenzt oder gar nicht mischbar ist es dagegen unter anderem mit Ethern, höheren Alkoholen, Kohlenwasserstoffen oder Chlorkohlenwasserstoffen.

1,2-Propylenglykol USP wirkt germizid und hat etwa die gleiche Wirkungsstärke wie Ethanol. In Lösungen unterdrückt es das Wachstum von Mikroorganismen, wobei die Konzentration von der Art der Organismen abhängt. Im allgemeinen erreicht man die gewünschte Wirkung mit 15 – 30 % 1,2-Propylenglykol USP in der Lösung.

1,2-Propylenglykol USP lässt sich als zweiwertiger Alkohol in der üblichen Weise in Ester und Ether überführen. Dabei reagiert die primäre Hydroxylgruppe etwas leichter mit den Komponenten als die sekundäre.

1,2-Propylenglykol USP entspricht den Reinheitsanforderungen der USP und des Europäischen Arzneibuches [1].

Physikalische Daten

Die folgenden Angaben über physikalische Daten beziehen sich auf das reine Lösemittel. Sie sind nicht verbindlich für unser Verkaufsprodukt.

In der Literatur [2-8] liegen für dieses Lösemittel vergleichsweise nur wenige übereinstimmende Daten vor. Fehlende Zahlenwerte - vor allem einige Werte der Temperaturabhängigkeit - wurden daher von uns nach anerkannten Methoden berechnet. Den Rechnungen wurden von uns kritisch bewertete Literaturangaben oder eigene Messungen zugrundegelegt. In die folgende Zusammenstellung wurden die Ergebnisse erst aufgenommen, nachdem sich beim Vergleich einzelner Literaturwerte mit den errechneten Werten eine zufriedenstellende Übereinstimmung gezeigt hatte.

Molare Masse	76,096 g/mol
Siedepunkt (bei 1013 mbar)	187,6 °C
Erstarrungspunkt (bei 1013 mbar)	-60 °C (Glaspunkt)

Dampfdruck [3]	T (°C)	P (mbar)
	0	0,031
	20	0,186
	40	0,873
	50	1,75
	60	3,36
	80	11,0
	100	31,5
	120	80,3
	140	186
	160	398
	180	793
	187,6	1013

Antoine Konstanten	$\ln P = A - B/(C+T)$ (P in mbar; T in °C)
	A = 20,8200
	B = 6091,95
	C = 250,700

Kritische Daten [2]

Kritische Temperatur (T_k)	352 °C
Kritischer Druck (p_k)	61,0 bar
Kritische Dichte (ρ_k)	0,321 g/cm ³
Kritische Kompressibilität (Z_k)	0,278

Dielektrizitätszahl (ϵ) bei 20 °C	32,0
Dipolmoment (μ)	3,63 D
Wasserlöslichkeit:	Mit Wasser in jedem Verhältnis mischbar.
Verdunstungszahl	ca. 1000

Angaben über Infrarot-, NMR- und Massenspektren sind z.B. bei Grasselli [9] zusammengefasst.

Binäre Azeotrope

1,2-Propylenglykol USP bildet mit einigen Lösemitteln azeotrope Gemische. Eine ausführliche Zusammenstellung - auch über Gemische, die kein Azeotrop bilden - bringt z.B. Horsley [10].

1,2-Propylenglykol (Massenanteil in g/100g)	Azeotrop mit	Massenanteil in %	KP (°C) (bei 1013 mbar)
43	Anilin	57	179,4
1,5	Toluol	98,5	110,5
40,38	Dipropylenglykol- methylether	59,62	183,7
10	o-Xylol	90	135,8
67	Dodecan	33	175

Kein Azeotrop bildet 1,2-Propylenglykol USP z. B. mit den folgenden Lösemitteln: 1-Methoxypropanol-2, p-Chlorphenol, n-Butylacetat, Dipropylenglykol, Benzol.

Lösevermögen

1,2-Propylenglykol USP ist bei Raumtemperatur in jedem Verhältnis mischbar mit

- Wasser,
- Alkoholen, wie Methanol, Ethanol, Propanolen, Butanolen,
- Phenolen,
- Phenylethylalkohol,
- Ameisensäure- und Essigsäureestern,
- Aceton,
- Benzaldehyd,
- Dimethylformamid,
- Methylenchlorid,
- Chloroform,
- zahlreichen etherischen Ölen und Riechstoffen.

Nicht oder nur schlecht mischbar ist das Produkt hingegen mit

- Tetrachlorkohlenwasserstoff,
- Benzol,
- Toluol,
- Schwefelkohlenstoff und anderen wenig polaren Lösemitteln.

Analytik

Gaschromatographie

Für die gaschromatographische Reinheitsprüfung haben sich in der Praxis die folgenden Bedingungen bewährt:

Säule:	CP Sil 5 CB
Länge:	50 m
Durchmesser:	0,53 mm
Filmdicke:	5,0 µm

Gaschromatographische Bedingungen:

a) Temperaturen	
Injektor:	250 °C
Detektor:	250 °C
Ofen:	90 °C – 200 °C, 10 °C/min
b) Detektor:	FID (Brenngas optimiert)
c) Injektor:	Splitinjektion
d) Trägergas:	Stickstoff
e) Probenaufgabe:	0,2 µl
f) Auswertung:	Flächenprozent

Anwendung

Im Hinblick auf die besonderen Forderungen der Tabakindustrie wird 1,2-Propylenglykol USP gezielt als hochreine, geruchfreie Qualität hergestellt. Im folgenden werden - ohne Anspruch auf Vollständigkeit - einige Anwendungsmöglichkeiten genannt.

1,2-Propylenglykol USP eignet sich beispielsweise

- als Lösemittel für Druck- und Stempelfarben, die mit Nahrungsmitteln in Berührung kommen;
- als Bestandteil von Klebstoffen, z. B. für Lebensmittelverpackungen;
- als Feuchthaltemittel für Korke, Zellglasfolien und Tabak;
- als Reinigungsmittel von Maschinen der Nahrungsmittelproduktion;
- als Schmiermittel für Maschinen, z. B. in der Nahrungsmittel-, Pharma- und Kosmetikindustrie;
- als Bestandteil von Kühlflüssigkeiten in der Getränkeindustrie, z. B. Brauereien.

Lagerung

Bei sachgemäßer Lagerung und in verschlossenen Originalgebinden ist das Produkt 1 Jahr lagerfähig. Das Produkt ist vor Lichteinwirkung zu schützen. Die Lagertemperatur sollte unter 40 °C liegen.

Für die Lagerung von 1,2-Propylenglykol USP empfiehlt es sich, Behälter aus Edelstahl, Aluminium oder lichtundurchlässigem Polyethylen hoher Dichte (HDPE) zu verwenden. Von verzinkten Behältern raten wir ab. [11]

In jedem Fall sollte der Zutritt von Luft verhindert werden, z. B. durch Überlagerung mit trockenem Stickstoff. Andernfalls bilden sich bei der Einwirkung von Luftsauerstoff Peroxide, die ihrerseits in Aldehyde und Säuren zerfallen und zu erheblichen Qualitätsänderungen führen. Durch Lichteinwirkung und Temperaturen über 40 °C kann es ebenfalls zu Zersetzungsreaktionen kommen. Typische Zerfallsprodukte sind Carbonylverbindungen und Dioxolan-Derivate.

Kleingebinde sollten dicht geschlossen gehalten und an einem gut gelüfteten Ort aufbewahrt werden.

Sicherheit

Für 1,2-Propylenglykol USP liegt ein Sicherheitsdatenblatt gemäß 91/155/EWG vor.

Zur Beachtung

Die Angaben in dieser Druckschrift basieren auf unseren derzeitigen Kenntnissen und Erfahrungen. Sie befreien den Verarbeiter wegen der Fülle möglicher Einflüsse bei Verarbeitung und Anwendung unseres Produktes nicht von eigenen Prüfungen und Versuchen. Eine Garantie bestimmter Eigenschaften oder die Eignung des Produktes für einen konkreten Einsatzzweck kann aus unseren Angaben nicht abgeleitet werden. Alle hierin vorliegenden Beschreibungen, Zeichnungen, Fotografien, Daten, Verhältnisse, Gewichte u. ä. können sich ohne Vorankündigung ändern und stellen nicht die vertraglich vereinbarte Beschaffenheit des Produktes dar. Etwaige Schutzrechte sowie bestehende Gesetze und Bestimmungen sind vom Empfänger unseres Produktes in eigener Verantwortung zu beachten.

Literatur

- [1] Aktuelle United States Pharmacopoeia und European Pharmacopoeia
- [2] Kirk-Othmer „Encyclopedia of Chemical Technology“, Band 10, 3. Aufl., 1966, Interscience Publ. Inc., New York, S. 649 f.
- [3] Gallant, R.W.; Hydrocarb. Process, 46 (5), 201 (1967).
- [4] Spencer, C.F. and Danner, R.P.; J. Eng. Chem. Data 17 (2), 236 (1972).
- [5] Thomas, L.H. and Meatyard, R.J.; Chem. Soc. (A), 1966, 92.
- [6] Thomas, L.H.; Meatyard, R.; Smith, H. and Davis, R.P.; J. Eng. Chem. Data 24, 161 (1979).
- [7] Mallan, G.M.; Michaelian, M.S. and Lockhart, F.J.; J. Chem. Eng. Data 17, 412 (1972).
- [8] Jamieson, D.T.; Irving, J.B. and Tudhope, J.S. „Liquid Thermal Conductivity: a data survey to 1973“, Edinburgh 1975.
- [9] Grasselli, J.G. „Atlas of Spectral Data and Physical Constants for Organic Compounds“, CRC Press, Cleveland/Ohio, 1973, Atlas No. p. 712.
- [10] Horsley, L.H. „Azeotropic Data III“, Advances in Chemistry Series Nr. 116, ACS, Washington, D.C., 1973.
- [11] Richtlinien für die Handhabung und Distribution von Propylenglykol USP/EP, 1999; veröffentlicht von der CEFIC-Fachgruppe Propylenoxid/Propylenglykole.

BASF SE
Petrochemicals
D-67056 Ludwigshafen

