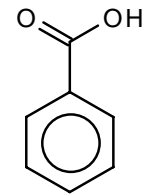


## Wirkstoffe



- Welche Eigenschaften hat Benzoesäure?
- Bei Benzoesäure beträgt der LD(50) - Wert 4 g/kg. Wie gross darf die Einnahme von Benzoesäure für eine Person von 50 kg maximal sein, wenn der LD(1) - Wert nicht überschritten werden darf? (Für  $a=1$ )
- Benzoesäure ist als Konservierungsmittel (EG Bezeichnung E 210) für Lebensmittel bis zu einer Konzentration von 0.01 g/kg (pro kg Lebensmittel !!) zugelassen. Es hat die Eigenschaft, dass es die Botulinusgefahr gewaltig verringert. Beurteilen Sie dieses Konservierungsmittel.
- wie gross ist der NEL ungefähr?
- Wie gross ist der pH - Wert bei dieser Konzentration in Wasser ( $pK_s=4.2$ ). Schreiben Sie die Reaktionsgleichung auf. Wie interpretieren Sie das Resultat?
- Schreiben Sie die Reaktionsgleichung für die Verbrennung auf (im Körper oder an der Luft).

### Antworten:

a)  $M=122.1$  g/mol, Smp.  $122.4$  °C, Kp.  $249$  °C → Festkörper bei RT, nicht sehr hart, da kein Kristall wie Diamant oder lange Moleküle wie ein Kunststoff, das Molekül ist planar, es werden sich Blättchen ausbilden, es hat keine Isomeren; farblos, schwach sauer (etwas stärker als Essigsäure), nicht sehr polar (Säuregruppe polar, Benzolring unpolar) daher schlecht wasserlöslich, bildet mit Basen Salze, schlecht oxidierbar, chemisch sonst

nicht sehr reaktiv (keine ungewöhnl. Oxidationszahlen, keine gespannten Verbindungen) brennbar bildet  $CO_2$  und  $H_2O$ , nicht sehr gut abbaubar, kann etwas angereichert werden, Akkumulation beschränkt möglich, Aufnahme im Magen, Ausscheidung über Niere, Blase, wenig Aufnahme über die Haut möglich, Verteilung in der Biosphäre nicht sehr gross, da genügend rasch abbaubar.

b) LD(50) = 4000 mg/kg; für eine Person mit 50 kg sind das 200'000 mg.

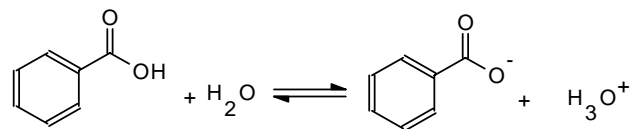
LD(1) = 40.4 mg/kg d.h. 2000 mg für 50 kg.

c) In Lebensmitteln sind 10 mg pro kg zugelassen. Ist eine Person also 1 kg dieses Lebensmittels, dann hat sie 1/200 der LD(1) erreicht. Benzoesäure ist also sicher nicht akut gefährlich. Eine gewisse Allergiegefahr wurde beobachtet. Benzoesäure ist gegen Oxidation mit Luftsauerstoff recht stabil.

d)  $NEL \approx ADI \cdot 100 = 10$  mg/kg  $\cdot 100 = 1000$  mg/kg

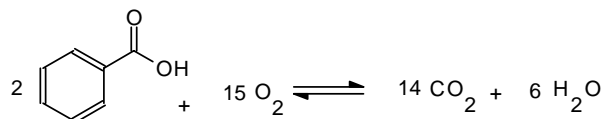
e) Reaktionsgleichung

Quadratische Gleichung:  $c = 0.01/122.1 = 8.19 \cdot 10^{-5}$  mol/l (1 kg entspricht als Annahme 1 Liter);  $[H_3O^+] = 4.696 \cdot 10^{-5}$  M → pH = 4.33



Falls die Säure durch das Lebensmittel selbst, Basen, nicht neutralisiert wird, verhindert der tiefe pH - Wert (<5) ein gutes Wachstum von Mikroorganismen.

f) Verbrennung:



### Beispiel: Saccharin

Süßkraft: theoretisch 550 mal süßer als Zucker

praktisch 300 mal süßer als Zucker

Eigenschaften von Saccharin?

[Farblos, fest, nicht ganz planar, keine Isomeren, lipophiler und hydrophiler Teil, eher lipophil, nicht sehr gut wasserlöslich, nicht reaktiv, leicht basisch (NH), physiologisch wirksam, wird eher im Darm aufgenommen, über die Leber z.T. über die Niere/ Blase ausgeschieden, könnte in geringem Masse gespeichert werden, gut abbaubar, wenig akkumulierbar, brennbar]

Saccharin wurde während einer gewissen Zeit von der amerikanischen Behörde (FDA) verboten, weil man eindeutig Blasenkrebs bei Versuchstieren nachweisen konnte. Die Fälle traten wie folgt auf:

LD(14) = 5 g/kg (täglich)

Diabetiker, die seit 1910 normale tägliche Dosen von 1.5 - 5 mg pro Tag eingenommen haben, zeigten weniger Krebsfälle als die Kontrollbevölkerung, die kein Saccharin, dafür aber Zucker zu sich nahm. [Diabetiker haben ein ganz anderes Verhalten als andere Personen, Vergleich schwierig!!]

- In welche Giftklasse gehört Saccharin [frei]

- Interpretieren Sie den obigen Sachverhalt (a=1)

[5 g/kg pro Tag bei 60 kg Körpergewicht entspr. 300 g/Tag Saccharin, bei der 300 fachen Süßkraft entspricht dies einem Zuckerbedarf von 90 kg/Tag, Körpergewicht = 60 kg;  $K_d=30.71 \text{ g/kg} = \text{LD}(50)$ ];

1.5 mg pro Tag =  $2.5 \cdot 10^{-2} \text{ mg/kg}$ ,

200'000 mal weniger als die LD(14),  $E/Em = 1.39 \cdot 10^{-8}$ ,

5 mg pro Tag =  $8.33 \cdot 10^{-2} \text{ mg/kg}$ ,  $E/Em = 2.71 \cdot 10^{-7}$ ]

## Saccharin

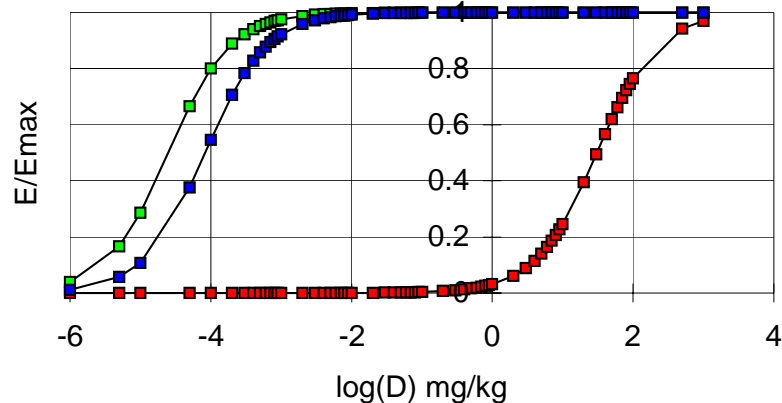


Abbildung 1: Erfahrungswerte von Saccharin im Dosis-Effekt-Modell (a=1)