

## 数据拟合在软包装阻隔性测试中的应用

**摘要:** 对于食品、药品、化妆品等多数日化产品以及部分工业制品, 采用高阻隔性包装材料进行产品的包装对延长包装内容物的保质期及提高内容物保存质量都是非常有效的, 然而包装材料的阻隔性能会受环境因素的影响而变化, 以受温度的影响最为显著。同时由于不同的材料其分子结构存在差异, 因此材料的阻隔性能受温度影响而出现的变化也不相同, 因此每种材料都需要进行独立的温度影响分析, 而借鉴其他材料在特定温度点的阻隔性数据进行推断是不可行的。然而在进行阻隔性参数测试时, 在常规温度下(例如: 10°C~50°C)的阻隔性参数可通过直接试验的方式获得, 而要实际进行非常规温度下(如: 冷藏、高温消毒等温度)的阻隔性能不但需要特制耐热、耐寒性能卓越的设备而且也需要创造特殊温度的试验环境, 因此测试难度大大提高, 测试经济性大大降低。非常规温度下的阻隔性参数具有较强的实际应用意义, 仅参考常温测试数据而未考虑到特殊保存温度而引起的材料选择失误非常常见, 这有时会造成更加严重的经济损失。阻隔性数据拟合应用技术在软包装研究方面的应用可有效地解决上述矛盾。阻隔性数据拟合应用技术基于广泛应用的膜渗透理论模型, 通过对常规温度下的阻隔性测试数据进行拟合分析获得非常规温度下的阻隔性数据, 整个过程无需创造特殊的试验环境, 测试设备只需要在常温范围内进行试验, 因此非常规温度下阻隔性数据的获得就变得简单经济。通过大量实测数据证明阻隔性数据拟合应用技术是科学的、客观的。

**关键词:** 数据拟合, 阻隔性, 包装材料, 非常规温度, 软包装

众所周知, 氧气、水蒸气是导致食品、药品、化妆品变质失效的主要因素之一, 因此材料的阻隔性能是评价包装材料的一项关键指标。然而, 材料的阻隔性能与温度有着极为密切的联系, 温度的变化会显著影响材料的阻隔性能。因此, 在进行包装设计之前需要获得材料在实际使用温度下的阻隔性参数。但是, 很多材料的实际使用温度并不在实验室常规温度及设备可控的温度范围之内, 例如冷藏、高温消毒等温度, 我们将这些温度称为非常规温度。

在非常规温度下实际检测材料的阻隔性能会遇到很多困难, 例如, 高成本、低效率、操作不方便等等, Labthink 研发阻隔性数据拟合应用技术(Data Curve Fitting in Permeation, 简称 DCFP) 来解决这些难题。通过 DCFP 技术, 可以简单、方便、经济地获得材料在非常规温度下的材料阻隔性数据。

### 1. 温度对阻隔性能的影响

## 1.1 影响原因

温度升高对薄膜材料及渗透气体都会带来影响。对于薄膜, 当温度升高时, 聚合物内聚度下降, 会使聚合物自由体积增大, 这样渗透气体分子在聚合物内的扩散阻碍会有效减小, 扩散速度加快。对于渗透气体来讲, 温度升高, 气体分子能量增大, 使得它的能量更易达到在分子链间扩散所需要的能量值, 这样气体分子对聚合物的扩散系数就会变大。可见, 温度升高, 渗透变得容易, 表现为材料的阻隔性能降低。无机气体的渗透系数、扩散系数、溶解度系数与温度的关系均服从 Arrhenius 方程:

$$P = P_0 e^{-E_P / RT} \quad (1)$$

$$D = D_0 e^{-E_D / RT} \quad (2)$$

$$S = S_0 e^{-\Delta H / RT} \quad (3)$$

式中: P、D、S——渗透系数、扩散系数、溶解度系数

$P_0$ 、 $D_0$ 、 $S_0$ ——与气体—固体配偶有关的常数

$E_P$ 、 $E_D$ 、 $\Delta H$ ——透过活化能、扩散活化能、溶解热

R——摩尔气体常数, 8.31441J/mol·K

T——绝对温度

从 Arrhenius 方程我们可以看出, 温度变化, P、D、S 变化, 材料阻隔性能也随之变化。但材料阻隔性能受温度影响的程度存在差异性, 即不同材料受温度的影响并不一致。

## 1.2 影响程度

为了观察温度波动会给材料阻隔性能带来影响的程度, 现使用 Labthink VAC-V1 型压差法气体渗透仪, 在 0°C ~70°C 条件下, 进行 PC 膜 (125  $\mu\text{m}$ )、PET 膜 (25  $\mu\text{m}$ )、PP 膜 (200  $\mu\text{m}$ )、PVDC 膜 (30  $\mu\text{m}$ )、铝箔膜 (100  $\mu\text{m}$ ) 的氧气渗透性试验 (参见图 1)。

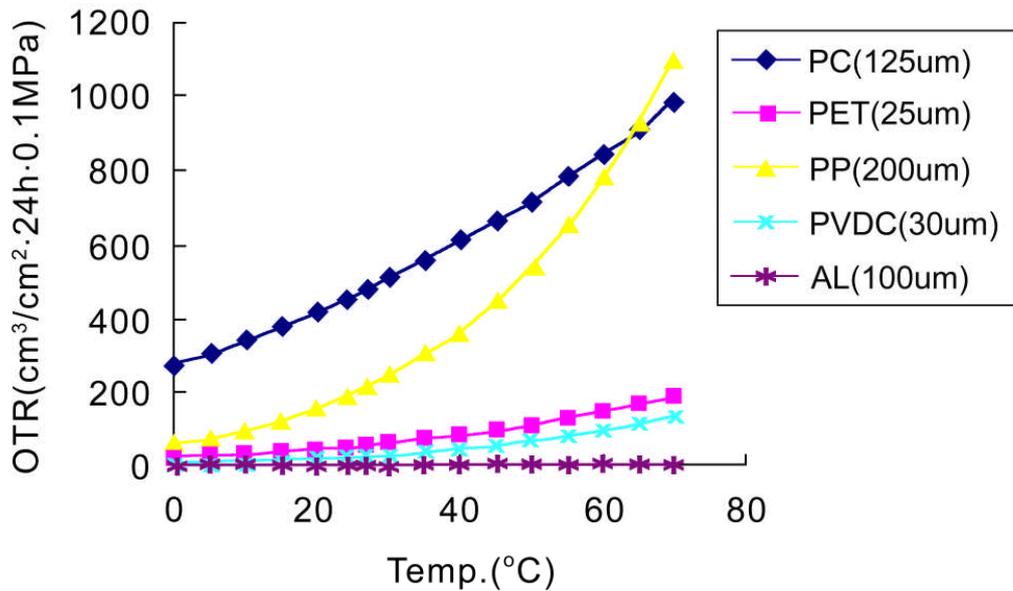


图 1. 温度对材料透氧量的影响

从图 1 可以看出,除铝箔试样外,测试温度对几种试样透氧量的影响都非常显著,但是影响程度并不一致。对于 PET 薄膜来讲,在 40°C 时的透氧量比在 30°C 时增长了 38%,PC 薄膜 40°C 时的透氧量比 30°C 时增长了 20%,PP 薄膜的增长幅度为 46%,PVDC 薄膜的增幅更是达到了 56%。随着温差的增大,材料的透氧量会继续增大,甚至会加速增长。

### 1.3 温度影响所导致的损失

产品在流通过程中所处的环境温度与材料的检测温度难以保证一致,而温度的变化会导致材料阻隔性能改变,由此引起的产品包装不能满足包装预期效果的情况经常发生。同时,如果用于包装的阻隔性材料选择不当,会给企业带来沉重的经济负担。而包装设计失败以及产品失效所带来的损失并不仅限于产品本身,给企业品牌以及企业形象所带来的负面影响更是难以衡量。

## 2. 最佳解决方案

### 2.1 阻隔性数据拟合应用技术 (Data Curve Fitting in Permeation)

在非常规温度下实际检测材料的阻隔性能会遇到很多困难。第一:结果精度低,误差难以控制;第二,设备制造难度大,测试成本很高;第三,测试效率低,操作不方便。然而阻隔性数据拟合应用技术(DCFP)却能很好地克服上述困难。简单的说,DCFP 是以 Fick 定律、Henry 定律、Arrhenius 方程等重要理论为依据,可通过常规条件

济南兰光机电技术有限公司

中国济南市无影山路 144 号(250031)

总机: (86) 0531 85068566

传真: (86) 0531 85062108

E-mail: [marketing@labthink.cn](mailto:marketing@labthink.cn)

网址: <http://www.labthink.cn>

下不同温度点的阻隔性数据获得任意温度下的气体渗透量、渗透系数、扩散系数以及溶解度系数的阻隔性分析技术。

使用 DCFP 技术时无需增加专用设备, 而且只需要很短的时间就可以完成。

## 2.2 应用试验

DCFP 使用方便, 大量的实测数据证明, 其实际应用效果好、拟合精度高。由于篇幅所限, 这里以对 PET 膜 (20  $\mu\text{m}$ )、PP 膜 (200  $\mu\text{m}$ )、PVDC 膜 (30  $\mu\text{m}$ ) 的测试为例进行介绍, 其他材料的测试情况在此就不再给予一一介绍。

Labthink 实验室试验采用 VAC-V1 压差法气体渗透仪, 常规测试范围在  $0.1 \text{ cm}^3/\text{m}^2 \cdot 24\text{h} \cdot 0.1\text{MPa} \sim 100000 \text{ cm}^3/\text{m}^2 \cdot 24\text{h} \cdot 0.1\text{MPa}$ , 真空分辨率达 0.1Pa, 测试腔真空度可保证在 20Pa 以下。可在室温到 50 $^{\circ}\text{C}$  范围内进行控温, 温控精度为  $\pm 0.2^{\circ}\text{C}$ 。使用设备组成: Labthink VAC-V1 压差法气体渗透仪, 数据计算处理系统, 真空泵 (最低真空 0.1Pa), 纯度为 99.9% 的氧气。实验设备如图 2 所示。



图 2. VAC-V1 压差法气体渗透仪

利用设备自身的温度控制功能, 分别在 23 $^{\circ}\text{C}$ 、25 $^{\circ}\text{C}$ 、30 $^{\circ}\text{C}$ 、33 $^{\circ}\text{C}$ 、35 $^{\circ}\text{C}$ 、37 $^{\circ}\text{C}$  等温度点下进行 5 次以上透氧量检测, 然后使用 DCFP 技术通过这些温度点下的透氧量数据获得高温以及低温下的材料透氧量。同时进行 18 $^{\circ}\text{C}$ 、40 $^{\circ}\text{C}$ 、43 $^{\circ}\text{C}$ 、45 $^{\circ}\text{C}$ 、47 $^{\circ}\text{C}$ 、以及 50 $^{\circ}\text{C}$  下的透氧量检测, 并将实测数据与拟合数据进行比较, 参见图 3 和表 1。

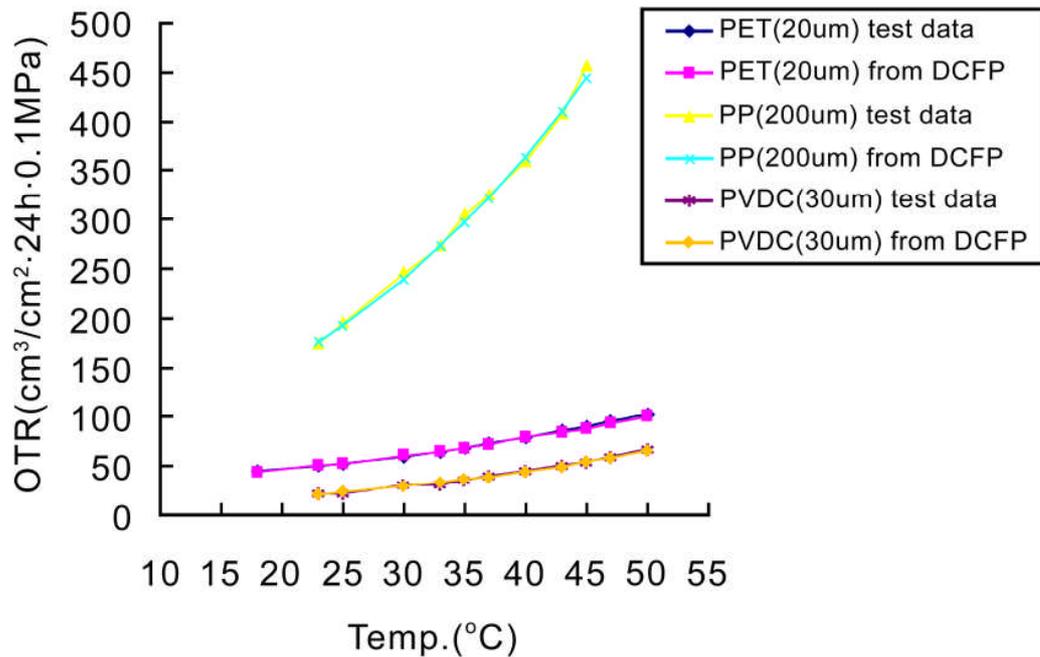


图 3. 高、低温度点的拟合数据及实际测试数据

表 1. PET 材料在高、低温度点的拟合数据及实际测试数据

试验温度 °C	透氧量 (平均值) cm <sup>3</sup> /m <sup>2</sup> ·24h·0.1 MPa	渗透系数 (平均值) E-12 cm <sup>3</sup> ·cm/cm <sup>2</sup> ·s·cmHg	拟合透氧量 cm <sup>3</sup> /m <sup>2</sup> ·24h·0.1 MPa	拟合渗透系数 E-12 cm <sup>3</sup> ·cm/cm <sup>2</sup> ·s·cmHg	误差
18	45.579	1.388	43.383	1.321	-4.83%
23	50.839	1.548	50.038	1.524	-1.55%
25	52.666	1.604	52.906	1.611	0.44%
30	59.369	1.808	60.621	1.846	2.10%
33	65.443	1.993	65.64	1.999	0.30%
35	68.884	2.098	69.156	2.106	0.38%
37	74.080	2.256	72.81	2.218	-1.68%

40	78.493	2.390	78.56	2.393	0.13%
43	86.194	2.625	84.643	2.578	-1.79%
45	89.987	2.741	88.887	2.707	-1.24%
47	95.632	2.912	93.288	2.841	-2.44%
50	102.181	3.112	100.188	3.052	-1.93%

图 3 中的曲线由 PET 膜、PP 膜、PVDC 膜在不同温度点下的透氧量组成，每一种薄膜有两条对应的曲线，一条（深蓝、明黄、紫色）是通过实际测试数据绘制的，另一条（淡紫、天蓝、褐色）是通过拟合数据绘制的，每一种薄膜的测试数据曲线与拟合数据曲线都重合地非常好。

通过 DCFP 技术可获得材料在非常规温度下（例如，超过 100°C 或者低于 0°C）的阻隔性数据也是非常方便的，图 4 就是通过 DCFP 技术得到的 PET（20 μm）透氧量在 -173°C 到 177°C 之间随温度变化的曲线。

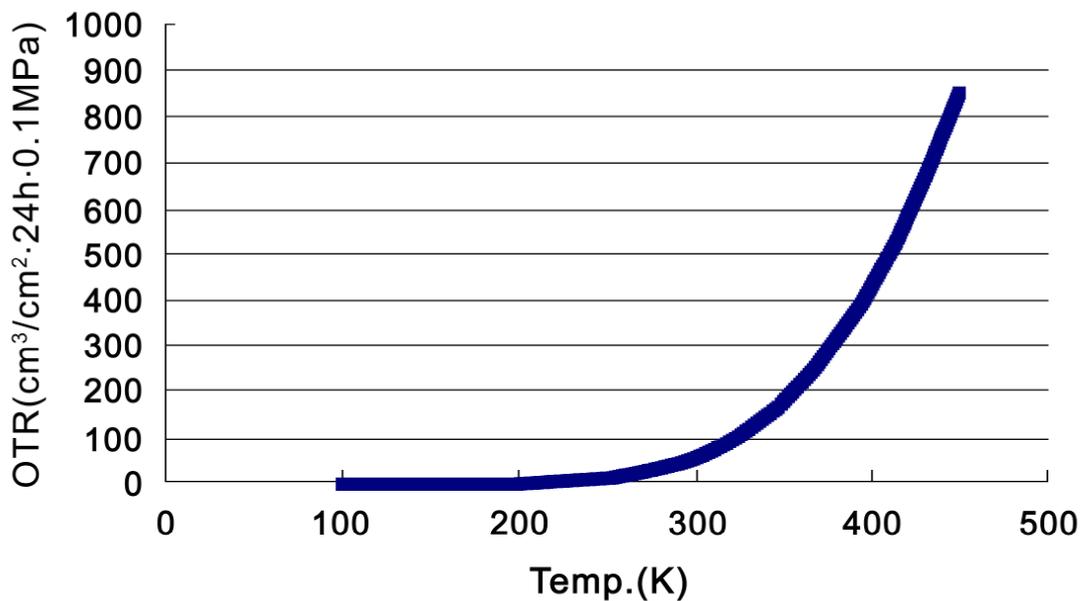


图 4. PET 薄膜的透氧量随温度变化的曲线

将 DCFP 技术用于获得不同温度点的材料阻隔性数据具有相当高的准确性，可以在保证材料阻隔性能的前提下为适当调整材料厚度达到最经济状态提供有效的解决方法。而且，DCFP 技术在应用和推广上还具有很多优势：第一，结果精度高；第二，成本低；第三，使用非常方便、快捷。

### 3. DCFP 技术的应用

济南兰光机电技术有限公司

中国济南市无影山路 144 号(250031)

总机: (86) 0531 85068566

传真: (86) 0531 85062108

E-mail: [marketing@labthink.cn](mailto:marketing@labthink.cn)

网址: <http://www.labthink.cn>

包装材料的阻隔性能受温度的影响非常显著,而每种材料的阻隔性能受温度的影响又各不相同,因此只有掌握了材料的温度特性,才能更好地将其应用于实际包装。通过 DCFP 技术可以准确、简单、方便、经济地获得材料在非常规温度下的阻隔性数据,它的应用能大大降低获得材料在实际使用温度点阻隔性数据的困难,可有效解决由于使用温度与测试温度不同而导致的产品损失。