

## Technical Note テクニカルノート SML\_06/1 2021(draft)

### Title: SML6 の計算設定条件カテゴリーは3段階あります。

SML6を使ってFCM（食品接触材料）から食品疑似溶媒の溶出量(移行量)を算出する場合。計算に必要なファクターとして**A：拡散定数**と**B：分配係数**の2項目があります。

A,項目にはA\_1、A\_2、A\_3、B項目にはB\_1、B\_2、B\_3のレベルがあることとなります。

A) FCM（ポリマー）に含まれる添加剤など化学物質のポリマー内での拡散定数は

**A\_1：ポリマー特定係数 Ap Value (Piringer定数) から拡散係数を算出。**

A\_2：ポリマー特定係数が存在しない場合 →ガラス転移点温度TgからAp\_Valueを推定。

A\_3：（実測値から拡散係数を求める方法）

B) ポリマーと食品疑似溶媒の境界面における分配係数Kpは通常は1~1000の範囲になります。

**B\_1：オクタノール・水の分配係数Powから化学物質と疑似溶媒間のKp値を算出。**

B\_2：ポリマー中の化学物質の溶解度と疑似溶媒中の化学物質の溶解度の比からKp値を算出。

B\_3：Kp値(1~1,000)をなんらかの知見から推定して設定する場合。

大方のSML6ユーザにとってはA\_1、A\_2とB\_1,B\_3の4通りの使い方になります。

言い換えるとSML6ユーザは下段の3通りの使い方になることとなります。

#### A\_1とB\_1の組合せで計算条件が設定可能な場合 簡単に移行量計算の条件設定が可能



A\_1：多くの実験データから算出されたAp値から妥当性のある拡散係数

B\_1：化学物質データベースに収録されているPowと疑似溶媒データベースに登録された計算式から妥当性のある分配係数が得られる。

移行量としてUpper、Realisticの2種類の値が得られる。

#### A\_2とB\_1の組合せで計算条件を設定する場合 簡単に条件設定が可能ですが予測精度に少し難あり



A\_2：Ap値とガラス転移点温度の関係から精度は低下するがAp値を推定（Ap値が得られない場合のSML6が提案する打開策）

B\_1：化学物質データベースに収録されているPowと疑似溶媒データベースに登録された計算式から妥当性のある分配係数が得られる。

移行量としてUpper、Realisticの2種類の値が得られる。

#### A\_1,A\_2とB\_3の組合せで計算条件を設定する場合 Kp値の設定には情報収集が不可欠です。



A\_1：多くの実験データから算出されたAp値から妥当性のある拡散係数

B\_3：疑似溶媒によってはPowの計算ができない場合


それぞれの溶解度が得られるならばKp値の設定可能

Kp値(1~1,000)をなんらかの知見から推定して設定する場合。

## Technical Note テクニカルノート SML\_06/2 2021(draft)

Title: SML6 の計算設定条件カテゴリーは3段階あります。

A\_1 カテゴリーの簡単に移行量計算の条件設定が可能な“AP\_Value のあるポリマー”

略称	カタカナ Japanese	English name	CAS No
PE	ポリエチレン	POLYETHYLENE	
LDPE	低密度ポリエチレン	POLYETHYLENE,low density	0009002-88-4
	ポリエチレンワックス	POLYETHYLENE WAX	0009002-88-4
HDPE	高密度ポリエチレン	POLYETHYLENE,high density	0009002-88-4
LLDPE	直鎖状低密度ポリエチレン	POLYETHYLENE,linear low density	0009002-88-4
UHPE	超高分子量ポリエチレン	Ultra High Molecular Weight Polyethylene	
PP	ポリプロピレン	POLYPROPYLENE	
		POLYPROPYLENEGLYCOL AZELATE	0029408-67-1
		POLYPROPYLENEGLYCOL POLYOXYETHYLATED	0009003-11-6
		POLYPROPYLENE WAX	0009003-07-0
		POLYPROPYLENE, isotactic	0009003-07-0
		POLYPROPYLENE, rubbery	0009003-07-0
		POLYPROPYLENE, random	0009003-07-0
	1-ブテン・プロピレン共重合物	1-BUTIEN-ETHYLENE-PROPYLENE,COPOLYMER	0025895-47-0
PS	ポリスチレン	POLYSTYRENE	009003-53-6
		POLYSTYRENE,high impact	009003-53-6
AS	AS樹脂	ACRYLONITRILE-STYRENE,COPOLYMER	009003-54-7
ABS	ABS樹脂	ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE COPOLYMER	009003-56-9
PA	ナイロン	Nylon	
		POYAMIDES(MW>6000	
		MODIFIED POLYAMIDE RESIN	0977139-89-1
		POYAMIDE 11	0025035-04-5
		POLYAMIDE 12	0024937-16-4
		POLYAMIDE 6	0025038-54-4
		POLYAMIDE 66	0032131-17-2
		POLYAMIDE 6,12	0026098-55-5
		POLYAMIDE 6,10	0009011-52-3
PB-1	ポリブテン	POLYBUTENE	0009003-29-6
PET	ポリエチレンテレフタレート	Polyethylene terephthalate	0025038-59-9
PVA	ポリビニルアルコール	POLYVINYL ALCOHOLS	0009002-89-5
POM	ポリアセタール	Polyoxymethylene copolymer produced from the reaction of trioxane and 1,3-dioxolane	0024969-26-4
PAN	ポリアクリロニトリル	POLYACRYLONITRILE	0025014-41-9
E/NB	エチレン・2_ノルボルネン樹脂	ETHYLENE AND 2-NORBORNENE COPOLYMERS	0026007-43-2

# Technical Note テクニカルノート SML\_06/3 2021(draft)

**Title: SML6 の計算設定条件カテゴリーは3段階あります。**

A\_2カテゴリー：Ap\_Valueがないポリマーはガラス転移点温度からAp\_Valueを推定する。

下段の表はAp\_Valueのないポリマーです。

ただしガラス転移点温度の情報は欠落があり、完成した表ではありません。  
ガラス転移点温度はSML6のポリマーデータベースに掲載されていない場合があります。この場合は別途、移行計算の対象となるポリマーについて調査をお願いします。

移行量計算の対象となるポリマーでデータベース（1958件）とは別途、自前のデータベースを作成されることをお勧めします。  
後日、SML6のUserDBに書き込み、編集すれば効率的に入力作業ができるようになります。



A\_3とB\_3の組合せカテゴリーではSML6ユーザはどのように対応できるでしょうか？  
足後の手段は最小限の実測値からFitting\_moduleオプションソフトウェアにより拡散係数と分配係数（Ap\_ValueとKpf）を算出します。

略称	カタカナ Japanese	English name	CAS No
PMMA	メタクリル樹脂	Polymethyl Methacrylate (Tg105°C)	009003-56-9
PMP	ポリメチルペンテン	polymethylpentene	
BDR	1,3-ブタジエン樹脂	POLYBUTADIENE (Tg -102°C)	0009003-17-2
PC	ポリカーボネート	polycarbonate	0025037-45-0
PPE	ポリフェニレンエーテル	Polyphenyleneether (Tg -126°C)	0009016-00-6
FR	ふっ素樹脂	fluorocarbon polymers	
PBT	ポリブチレンテレフタレート	polybutylene terephthalate (Tg 17°C)	26062-94-2
MS	ポリメタクリルスチレン		
PASF	ポリアリルサルホン	polyarylsulfone	
PAR	ポリアリレート	Poly Arylate	
HBP	ヒドロキシ安息香酸ポリエステル	Hydroxybenzoic acid polyester	
PEI	ポリエーテルイミド	Polyetherimide (Tg215°C)	0061128-46-9
PCT	ポリシクロヘキシレンジ メチレンテレフタレート		
PEN	ポリエチレンナフタレート	Polyethylene naphthalate	
PPC	ポリエステルカーボネート	Polyestercarbonate	
E/TD	エチレン・テトラシクロドデセン・コポリマー		
PLA	ポリ乳酸	polylactic acid, polylactide	
PBS	ポリブチレンサクシネート		



溶解度に関する情報はSML6のデータベースには含まれていません。

PalMetrics 株式会社パルメトリクス  
〒350-1328 埼玉県飯能市仲町12-9YKS飯能駅前ビル  
電話 042-978-8655 FAX 042-978-8664

# Technical Note テクニカルノート SML\_06/4 2021(draft)

**Title: SML6 の計算設定条件カテゴリーは3段階あります。**

さまざまな組み合わせカテゴリーで移行量の結果を報告書として出力したとき、報告書には設定条件が詳細に記録されています。下記報告書の赤字部分を参照してください。

09/04/21 Page 2 of 4

SML v 6.2 **Compliance Certificate**

### 2.3 Article

Article : PS - ethanol 50% (Pow)  
 Layers : 2  
 Chemicals : 1  
 Contact medium : Contact Medium : Ethanol 50%

### 2.4 Structure

N°	Layer name	Sim. type	Thickn.(um)	Density(g/cm3)	Polymer
0	PS	Upper limit	1.000E+03	1.050E+00	POLYSTYRENE (PS)
1	Contact Medium	Upper limit	1.419E+04	9.100E-01	-

ポリマー (PS) の拡散係数はAp値をベースとし、上限値を採用

ポリマーと疑似溶媒エタノール50%の分配係数は上限値を採用

09/04/21 Page 3 of 4

SML v 6.2 **Compliance Certificate**

### 2.5 Substances

#### 2-(2'-HYDROXY-5'-METHYLPHENYL)BENZOTRIAZOLE

CAS number : 0002440-22-4  
 FCM Number : 444  
 Molecular weight : 2.253E+02  
 Density : 1.302E+00  
 POW : SML6のデータベースからPow値を設定したことを示す表記 4.310E+00

#### Initial concentration

Layer	Concentration (mg/kg)
PS	5.000E+03
Contact Medium	0.000E+00

#### Partition coef.

Layer	Type	Partition
PS	-	-
Contact Medium	疑似溶媒と化学物質のKp値は POW based	5.297E-01

#### Diffusion coef

Layer	Type	Diffusion (cm2/s)
PS	ポリマーの拡散係数はAp値をベース Piringer based	1.590E-14
Contact Medium	Known	1.000E-04



解析条件はSML6解析画面からも読み取れますが、報告書にも詳細に記録されます。