

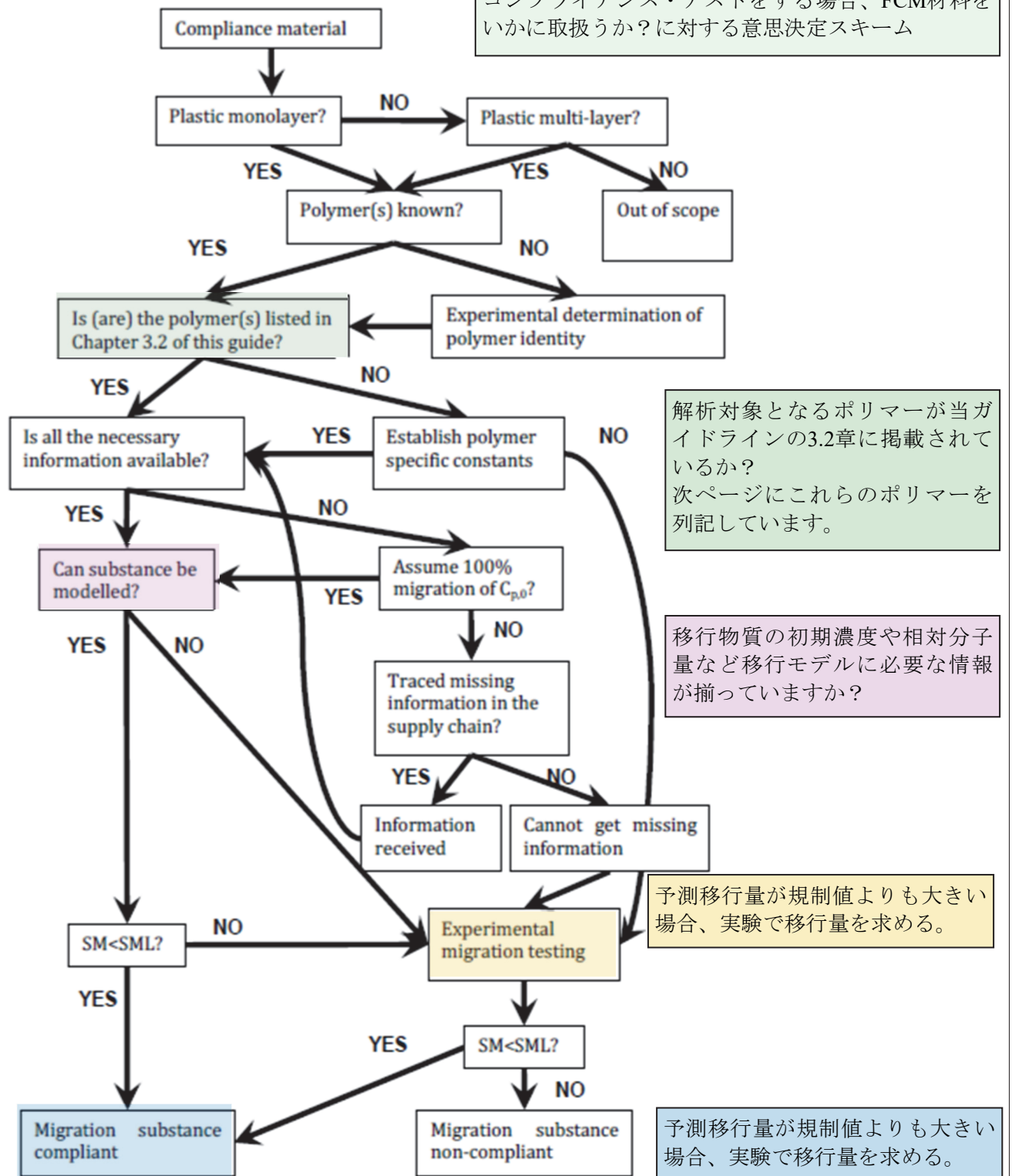
Technical Note テクニカルノート SML_05/1 2021_04

Title: 欧州JRC「特定移行の推定のための移行モデル化の適用に関する実用ガイドライン」

下図に見る通り、材料の適合性決定への終点は実験による移行試験である。この意味は、実際に実験上の移行試験が（規制当局に認証される）その食品接触材料が適法か否か決定するため利用可能でなければならないことを意味する。

結論として移行モデル化は、とくに食品接触材料に関し必要な全情報を予め評価している人に対して時間とコストの節約になりうる。

コンプライアンス・テストをする場合、FCM材料をいかに取扱うか？に対する意思決定スキーム



Technical Note テクニカルノート SML_05/2 2021_04

Title: 欧州JRC「特定移行の推定のための移行モデル化の適用に関する実用ガイドライン

Table1からTable6に記載されたポリマーであればSML6を使って移行モデルにより溶出量を求め、求める溶出量が準拠しておれば、コンプライアンスに準拠する適合宣言書(DoC)とすることができます。

移行モデル (SML6) を使うとしても適用可能な温度範囲、移行物質の相対分子量など入力パラメータの範囲がこのガイドラインに沿ったものである必要があります。PETのようにガラス転移温度の前後の試験温度によってポリマー特定定数を選択変えたり。PA6、PA12では疑似溶媒が特定されたり、PVCでは濃度範囲に制限があったりします。

いずれにせよSML6を使う場合には JRC Technical report In support of Regulation (EU)

In support of Regulation (EU) No 10/2011 on plastic food contact materials

“Practical guidelines on the application of migration modelling for the estimation of specific migration”

欧州JRC「特定移行の推定のための移行のモデル化の適用に関する実用ガイドライン」を手元に置いて必要に応じて参照することが必要です。

このガイドライン文書は当社HPのテクニカルノート・コーナーからダウンロードできます。

SML- SPECIFIC MIGRATION LIMITS Software

Prediction of Migration Rate of Species
from Packaging Materials to Packed Goods

Table 1 Parameter ranges for the applicability of the migration model for selected PO.

Polymer	T (°C)	M _r (g mol ⁻¹)	A _P [*]	τ (K)
LDPE	≤ 80	30 - 2000	11.5	0
LLDPE	≤ 100	30 - 2000	11.5	0
HDPE	≤ 90	30 - 2000	14.5	1577
PP (homo + random)	≤ 120	30 - 2000	13.1	1577
PP (blockcopolymer)	≤ 100	30 - 2000	11.5	0

Table 2 Ranges of parameters for the applicability of the migration model for PS, HIPS and SBS.

Polymer	T (°C)	M _r (g mol ⁻¹)	A _P [*]	τ (K)
PS	≤ 70	104 - 647	-1	0
HIPS	≤ 70	104 - 430	1.0	0
SBS	≤ 70	84 - 689	10.5	0
PS/SBS blend [#]	≤ 70	84 - 689	A _P [*] (blend) = -1 + 0.115·%SBS	0

[#] blending PS with SBS results in a linear relationship of A_P^{*} value as a function of the percentage of SBS (% SBS) added to PS. The upper bound A_P^{*} value for a blend of PS with SBS can be described by the given relationship



欧州JRC「特定移行の推定のための移行のモデル化の適用に関する実用ガイドライン 参照

Technical Note テクニカルノート SML_05/3 2021_04

Title: 欧州JRC「特定移行の推定のための移行モデル化の適用に関する実用ガイドライン

他の拡散モデルの入力パラメーターの初期濃度についてはガイドラインの5章に以下のように記載されてる。

付属書10にリストされた全物質の初期濃度($C_{p,0}$)は1%を超えてはならない。

1%超のレベルは、予件のポリマーで可塑化作用が生じる可能性があり、拡散モデルは使用できない。もし可塑化効果が観察されたら、移行モデルの使用は、可塑化効果を考慮した A_p 値と見極める実験とともに初めて可能になる。

Table 3 Ranges of parameters for the applicability of the migration model for PET and PEN

Polymer	T (°C)	M_r (g mol ⁻¹)	$A_p'^*$	τ (K)
PET	70<T≤175	>32	6.4	1577
PET	≤70	<50	6.4	1577
PET	≤70	≥50	3.1	1577
PEN	≤175	>32	5.0	1577

Table 4 Ranges of parameters for the applicability of the migration model for polyamides[#]

Polymer	T (°C)	M_r (g mol ⁻¹)	$A_p'^*$	τ (K)
PA6	≤100	113 [@]	0	0
PA6,6	≤100	32-587	2.0	0
PA12	≤100	197 ^{\$}	2.6	0

[#] use of parameters limited to simulant D2 and isooctane. PA was previously equilibrated with air at room temperature, within an approximate range of 40-65% relative humidity. [@] caprolactam. ^{\$} lauro lactam

Table 5 Ranges of parameters for the applicability of the migration model for rigid PVC

Polymer	T (°C)	M_r (g mol ⁻¹)	$A_p'^*$	τ (K)
PVC (rigid)	≤70	>225	-1.0	0

Table 6 Ranges of parameters for the applicability of the migration model for plasticised PVC. plast, plasticiser

Polymer	T (°C)	M_r (g mol ⁻¹)	$A_p'^*$	τ (K)
PVC (plasticised)	≤70	370-419	$A_p'^*(PVC) = -1 + 0.52 \cdot \%plast$	0



詳しくは

Technical Note テクニカルノート SML_05/4 2021_04

Title: 欧州JRC「特定移行の推定のための移行モデル化の適用に関する実用ガイドライン

3.2章に含まれない他のポリマーについて、どのような取扱いになるか？という質問が数多く寄せられます。3.26章で述べているように拡散式が認知され検証手続きにしたがって決定されれば対象となるポリマーが広がる可能性があります。今後の進展を期待したいところですが、これらの仕事はかなり大掛かりな国家的プロジェクトによる成果を待つ必要があることを意味します。

3.2章以外のポリマーについて短期間で A_p Valueが設定されるのは今後の大きな課題です。

3.2.6 Other polymers, migrants and other parameter range

For other polymers and parameter ranges not listed in this chapter, migration modelling can be used for compliance purpose provided that it is demonstrated that the mass transfer (migration process) from the plastic into the food or food simulant follows the law of diffusion and that the parameters (A_p^{*} and τ) were determined according to recognised and validated procedures. Such procedures may be described in future guidelines. These guidelines should demonstrate how D_p values are generated and how they are translated into A_p^{*} -values based on the range of applicability in terms of contact conditions and molecular mass range. Furthermore the documentation should bring conclusive proof that the use of the model in that particular case leads necessarily to an overestimation in the 95th percentile of all applicable cases.

3.2.6 他のポリマー、移行物及び他のパラメーターの範囲

この章にリストされていない他のポリマーやパラメーターについては、移行のモデル化が、プラスチックから食品または食品疑似溶媒への質量移動（移行プロセス）が拡散の法則に従い、パラメーター（ A_p^{*} や τ ）が認知され、検証された手続きに従い決定される限り、適合目的に使用できる。こうした手続きは今後のガイダンス・ドキュメントで記述される。これらガイドラインは、 D_p 値がどのように作成され、それらがどのように A_p^{*} 値に変換されるか、あるいは食品接触条件や分子量の範囲が適用範囲に基づき証明しなければならない。さらに文書として移行モデルを体系立てるとき、特定ケースでの移行モデルの使用においても、必然的にすべて適用させるケースの95%において過大評価に導く決定的な証拠がもたらされなければならない。



JRC TECHNICAL REPORTS



欧州JRC「特定移行の推定のための移行のモデル化の適用に関する実用ガイドライン 参照

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_05/5 2021_04

Title: 欧州JRC「特定移行の推定のための移行モデル化の適用に関する実用ガイドライン

10 付属書

ー改訂規則 (EU) No 10/2011のPLからの物質リスト、それらの移行のモデル化の可能性を含め。

この付属書は、規則 (EU) No 10/2011付属書 I 表1の各改訂をフォローし改訂される必要があるとき、別ドキュメントして公表される。

11 付属書 ーポリマーに使用されるいくつかの添加剤のPM/REF-番号、化学物質名、分子量、SML値
 および 最大濃度%

解析事例 (初期濃度) が示されているので、SML6でのSML予測値との関連が点検できる。

1.1 Polyolefines.

PM/REF	Chemical name	M _r	SML (mg/kg)	C _{P,0} (%)
38560	2,5-bis(5-tert-butyl-2-benzoxazolyl)thiophene	431	0.6	
38800	N,N'-bis(3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionyl)-hydrazide	553	15	HDPE 0.2
38820	Bis(2,4-di-tert-butylphenyl)penta-erythritol diphosphite	605	0.6	PP 0.1; LDPE 0.06
38840	Bis(2,4-dicumylphenyl)pentaerythritol diphosphite	853	5	LDPE 0.06
39890	Bis(methylbenzylidene) sorbitol	386	60	
46480	Dibenzylidene sorbitol	358	60	
46640	2,6-Di-tert-butyl-p-cresol (BHT)	220	3	PP 0.2
48640	2,4-Dihydroxybenzophenone	214	6	
48720	4,4'-Dihydroxybenzophenone	214	6	
48880	2,2'-Dihydroxy-4-methoxy benzophenone	244	6	
53670	Ethylenglycol-bis(3,3-bis(3-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)butyrate)	795	6	PP 0.2; HDPE 0.1
54300	2,2'-Ethylidene-bis(4,6-di-tert-butyl-phenyl)-fluorophosphonite	487	6	PP 0.1; LDPE 0.06
60320	2-(2-Hydroxy-3,5-bis(1,1-dimethylbenzyl)phenyl)benzo-triazole	448	1.5	
60400	2-(2'-Hydroxy-3'-tert-butyl-5'-methyl-phenyl)-5-chlorobenzotriazole	316	30	PP 0.4; HDPE 0.3
60480	2-(2'-Hydroxy-3,5'-di-tert-butylphenyl)-5-chlorobenzotriazole	358	30	PP 0.5
61600	2-Hydroxy-4-n-octylbenzophenone	326	6	PP 0.5; HDPE 0.3; LDPE 0.5
68320	Octadecyl 3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate	531	6	PP 0.2; HDPE 0.1; LDPE 0.3
71680	Pentaerythritol tetrakis[3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)-propionate]	1178	60	PP 0.2; HDPE 0.25; LDPE 0.03
74010	Phosphorous acid, bis(2,4-di-tert-butyl-6-methylphenyl) ethyl ester	514	5	PP 0.1; HDPE 0.05; LDPE 0.06
74240	Phosphorous acid, tris(2,4-di-tert-butylphenyl)ester	647	60	PP 0.1; HDPE 0.5; LDPE 0.12
80480	Poly(6-morpholino-1,3,5-triazine-2,4-diyl)-[(2,2,6,6-tertamethyl-4-piperidyl)imino]-hexamethylene-[(2,2,6,6-tertamethyl-4-piperidyl)-imino]	2600 -	1.8	PP 0.5

Technical Note テクニカルノート SML_05/6 2021_04

Title: 欧州JRC「特定移行の推定のための移行モデル化の適用に関する実用ガイドライン

ポリオレフィン ポリマー

81200	Poly[6-[(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-amino]-1,3,5-triazine-2,4-diyl]-[(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]-hexamethylene-[(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]	2000-3100	3	PP 0.5; HDPE 0.2; LDPE 0.5
81220	Poly-[[6-[N-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)-n-butylamino]-1,3,5-triazine-2,4-diyl][(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]-1,6-hexanedyl[(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]]-alpha-[N,N,N',N'-	2600-3400	5	PP 0.2; HDPE 0.1; LDPE 0.1
	tetrabutyl-N''-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)-N''-[6-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidylamino)-hexyl]-[1,3,5-triazine-2,4,6-triamine]-omega-N,N,N',N'-tetrabutyl-1,3,5-triazine-2,4-diamine]			
83595	Reaction product of di-tert-butyl phosphonite with biphenyl, obtained by condensation of 2,4 di-tert-butylphenol with Friedel-Crafts reaction product of phosphorus trichloride and biphenyl	991	18	PP 0.1; HDPE 0.05 ; LDPE 0.06
92880	Thiodiethanol-bis(3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate)	643	2.4	
93120	Thiodipropionic acid, didodecyl ester	515	5	PP 0.1 – 0.5
93280	Thiodipropionic acid, dioctadecyl ester	683	5	PP 0.5
93520	Alpha-Tocopherol	431	60	
94960	1,1,1-Trimethylol-propane	134	6	
95200	1,3,5-Trimethyl-2,4,6-tris(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxybenzyl)benzene	775	60	PP 0.2; HDPE 0.1
95270	2,4,6-Tris(tert-butyl)phenyl 2-butyl-2-ethyl-1,3-propanediol phosphite	450	2	HDPE 0.05;LDPE 0.06
95360	1,3,5-Tris(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxybenzyl)-1,3,5-triazine-2,4,6-(1H,3H,5H)-trione	784	5	PP 0.1; HDPE 0.1
95600	1,1,3-Tris(2-methyl-4-hydroxy-5-tert-butylphenyl)butane	545	5	PE 0.1

PM/REF, PM/REF-numbers; M_r, molecular mass; C_{P,0}, highest concentrations in polymer



欧州JRC「特定移行の推定のための移行のモデル化の適用に関する実用ガイドライン 参照

Technical Note テクニカルノート SML_05/7 2021_04

Title: 欧州JRC「特定移行の推定のための移行モデル化の適用に関する実用ガイドライン

非ポリオレフィン系 ポリマー

1.2 Non-polyolefines

PM/ REF	Chemical name	M _r	SML (mg/kg)	C _{P,0} (%)
PS				
40020	2,4-Bis(octylthiomethyl)-6-methyl-phenol	425	6	0.2
61440	2-(2'-Hydroxy-5'-methylphenyl)benzotri-azole	225	30	0.25
61600	2-Hydroxy-4-n-octylbenzophenone	326	6	0.2
68320	Octadecyl 3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxy-phenyl)propionate	531	6	0.15
74240	Phosphorous acid, tris(2,4-di-tert-butylphenyl)ester	646	60	0.2
83595	Reaction product of di-tert-butyl phosphonite with biphenyl, obtained by condensation of 2,4 di-tert-butylphenol with Friedel-Crafts reaction product of phosphorus trichloride and biphenyl	595	18	0.2
94400	Triethyleneglycol-bis[3-(3-tert-butyl-4-hydroxy-5-methylphenyl) propionate]	587	18	0.2
95600	1,1,3-Tris(2-methyl-4-hydroxy-5-tert-butylphenyl) butane	545	5	0.2
HIPS				
31520	Acrylic acid, 2-tert-butyl-6-(3-tert-butyl-2-hydroxy-5-methylbenzyl)-4-methyl-phenyl ester	395	6	0.5
38560	2,5-bis(5-tert-butyl-2-benzoxazolyl)thiophene	431	0.6	0.05
40000	2,4-Bis(octylmercapto)-6-(4-hydroxy-3,5-di-tert-butylanilino)-1,3,5-triazine	589	30	0.1
40020	2,4-Bis(octylthiomethyl)-6-methyl-phenol	425	6	0.2
61440	2-(2'-Hydroxy-5'-methylphenyl)benzotri-azole	225	30	0.4
68320	Octadecyl 3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxy-phenyl)propionate	531	6	0.5
94400	Triethyleneglycol-bis[3-(3-tert-butyl-4-hydroxy-5-methylphenyl) propionate]	587	3	0.04
PEN				
51700	2-(4,6Diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-5-(hexyloxy)phenol)	425	0.05	0.5
60320	2-(2-Hydroxy-3,5-bis(1,1-dimethylbenz-yl)phenyl)benzo-triazole	448	1.5	0.5
71680	Pentaerythritol tetrakis[3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)-propionate]	1178	60	0.1
74240	Phosphorous acid, tris(2,4-di-tert-butylphenyl)ester	647	60	0.1
94400	Triethyleneglycol-bis[3-(3-tert-butyl-4-hydroxy-5-methylphenyl) propionate]	587	3	0.1
PET				
51700	2-(4,6Diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-5-(hexyloxy)phenol)	425	0.05	0.2
60320	2-(2-Hydroxy-3,5-bis(1,1-dimethylbenz-yl)phenyl)benzo-triazole	448	1.5	0.2
60480	2,2'-Methylenebis(4-methyl-6-tert-butyl-phenol)	358	30	0.2
71680	Pentaerythritol tetrakis[3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)-propionate]	1178	60	0.08

Technical Note テクニカルノート SML_05/8 2021_04

Title: 欧州JRC「特定移行の推定のための移行モデル化の適用に関する実用ガイドライン

1.2 Non-polyolefines 非ポリオレフィン系 ポリマー

PM/REF	Chemical name	M _r	SML (mg/kg)	C _{P,0} (%)
PA				
38820	Bis(2,4-di-tert-butylphenyl)penta-erythritol diphosphite	605	0.6	0.125
53200	2-Ethoxy-2'-ethyloxanilide	312	30	0.5
59120	1,6-Hexamethylene-bis(3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionamide	637	45	0.5
60320	2-(2-Hydroxy-3,5-bis(1,1-dimethylbenz-yl)phenyl)benzo-triazole	448	1.5	0.5
60480	2,2'-Methylenebis(4-methyl-6-tert-butyl-phenol)	358	30	0.5
68320	Octadecyl 3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxy-phenyl)propionate	531	6	0.5
71680	Pentaerythritol tetrakis[3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)-propionate]	1178	60	0.5
74240	Phosphorous acid, tris(2,4-di-tert-butylphenyl)ester	647	60	0.5
81200	Poly[6-[(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-amino]-1,3,5-triazine-2,4-diy]-[(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]-hexamethylene-[(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]	2000-3100	3	0.5
81220	Poly-[[6-[N-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)-n-butylamino]-1,3,5-triazine-2,4-diy]][(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]-1,6-hexanediyl][(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]-alpha-[N,N,N',N'-tetrabutyl-N''-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)-N''-[6-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidylamino)-hexyl]-[1,3,5-triazine-2,4,6-triamine]-omega-N,N,N',N'-tetrabutyl-1,3,5-triazine-2,4-diamine]	2600-3400	5	0.5
83595	Reaction product of di-tert-butyl phosphonite with biphenyl, obtained by condensation of 2,4 di-tert-butylphenol with Friedel-Crafts reaction product of phosphorus trichloride and biphenyl	991	18	0.25
92880	Thiodiethanol-bis(3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate)	643	2.4	0.5
93120	Thiodipropionic acid, didodecyl ester	515	5	0.25
94400	Triethyleneglycol-bis[3-(3-tert-butyl-4-hydroxy-5-methylphenyl) propionate]	587	3	0.5
95200	1,3,5-Trimethyl-2,4,6-tris(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxybenzyl)benzene	775	60	0.5

PM/REF, PM/REF-numbers; M_r, molecular mass; C_{P,0}, highest concentrations in polymer

これらのリストはSML6で溶出量を求める場合、解析事例として練習に使用できます。



欧州JRC「特定移行の推定のための移行のモデル化の適用に関する実用ガイドライン 参照