SML

PalMetrics

SPECIFIC MIGRATION LIMITS Software (SML)

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

**CONTENT**

AKTS 用テキスト

www.akts.com/sml/e-learning

TABLE OF CONTENTS

AKTS E-LEARNING

SPECIFIC MIGRATION LIMITS ソフトウェア (SML) を使用すると、さまざまな形状や多層構造を持つ複雑な材料の特定の移行評価が可能になります。移行プロセスのシミュレーションは、閉鎖系の隣接する層間または接触媒体間の分割を考慮したフィックの第 2 拡散法則に基づいています。このソフトウェアには、2 万を超える化学物質のデータベースが含まれており、拡散係数と分配係数の　包括的な推定手順を提供します。必要なパラメータが欠落している場合、ソフトウェアは推定方法を赤でマークし、欠落しているパラメータを示しま。SML　ユーザーは、これらのパラメータを手動で追加するか（わかっている場合）、別の方法を選択する必要があります。

SPECIFIC MIGRATION LIMITS ソフトウェア（SML）の解析作業は、次の 4 つのステップで進めることができます。
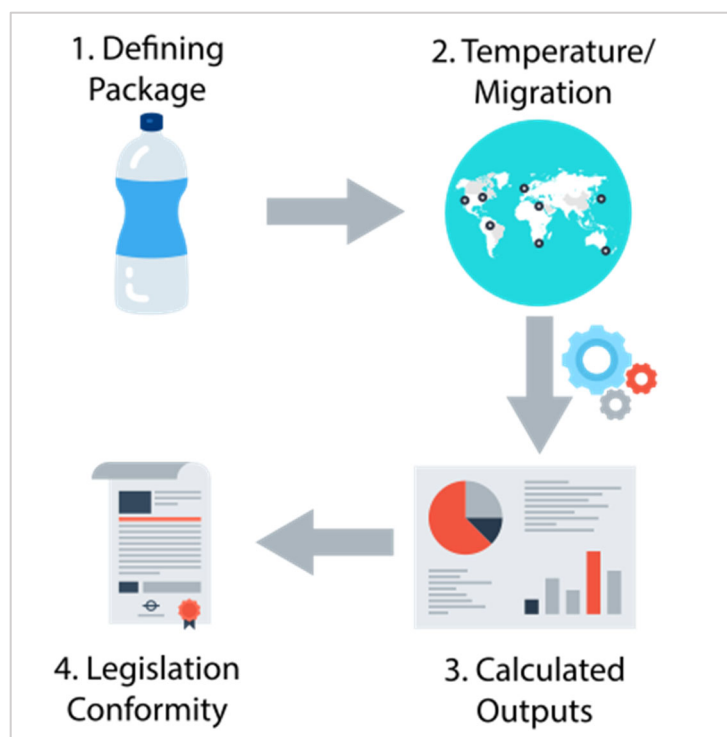
ワークフローには以下の 4 つの主要なステップがあります。

> 1-パッケージのさまざまな記事を作成してパッケージを定義し、それらのプロパティを紹介します。
> 2-さまざまな温度プロファイル（iso、non-iso、世界的な気候など）を使用して移行を予測します。
> 3-.計算された出力を分析します。
> 4-.結果が対応する法律に適合しているかどうかを確認します。

パッケージ構造

パッケージは、それぞれが異なるレイヤー・プロパティを持つ異なる品目のグループです。たとえば、ボトルは、ボトルキャップとボトル本体の 2 つの物品として扱うことができます。品目は、異なるサイズとプロパティの 1 つ以上のレイヤーで構成されます。 注：Article を品目と和訳します。

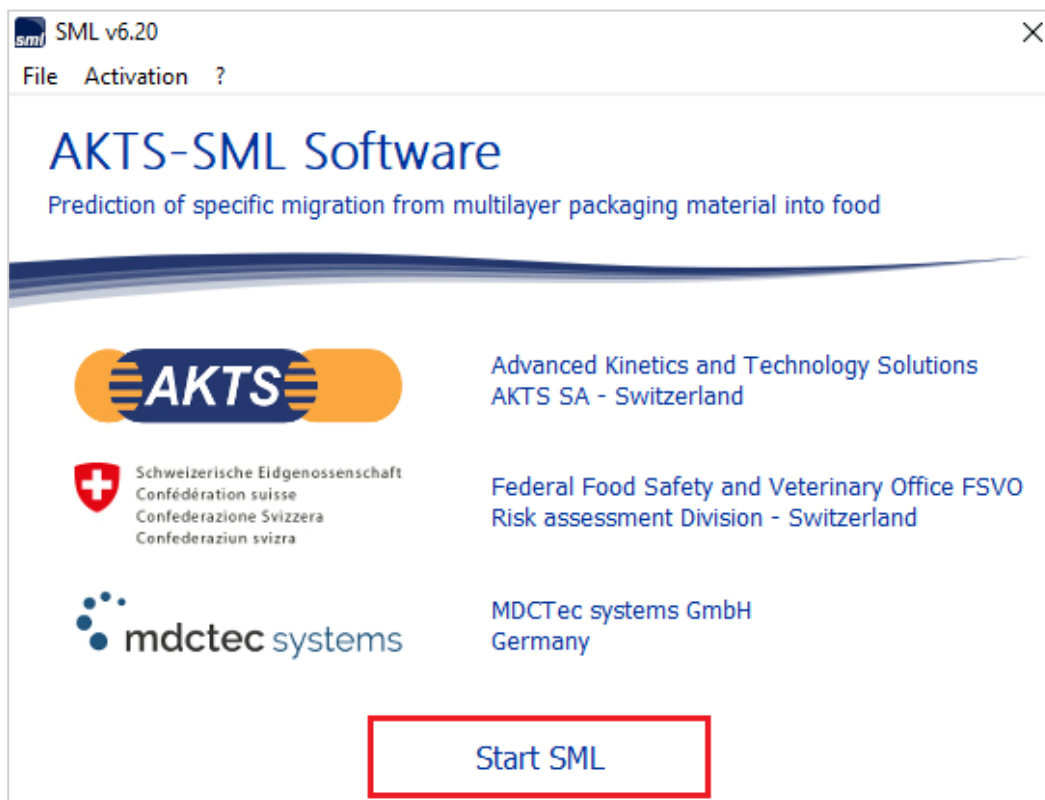**FIG. 1 -** 複数の品目（蓋と容器）で構成されるパッケージを想定します。

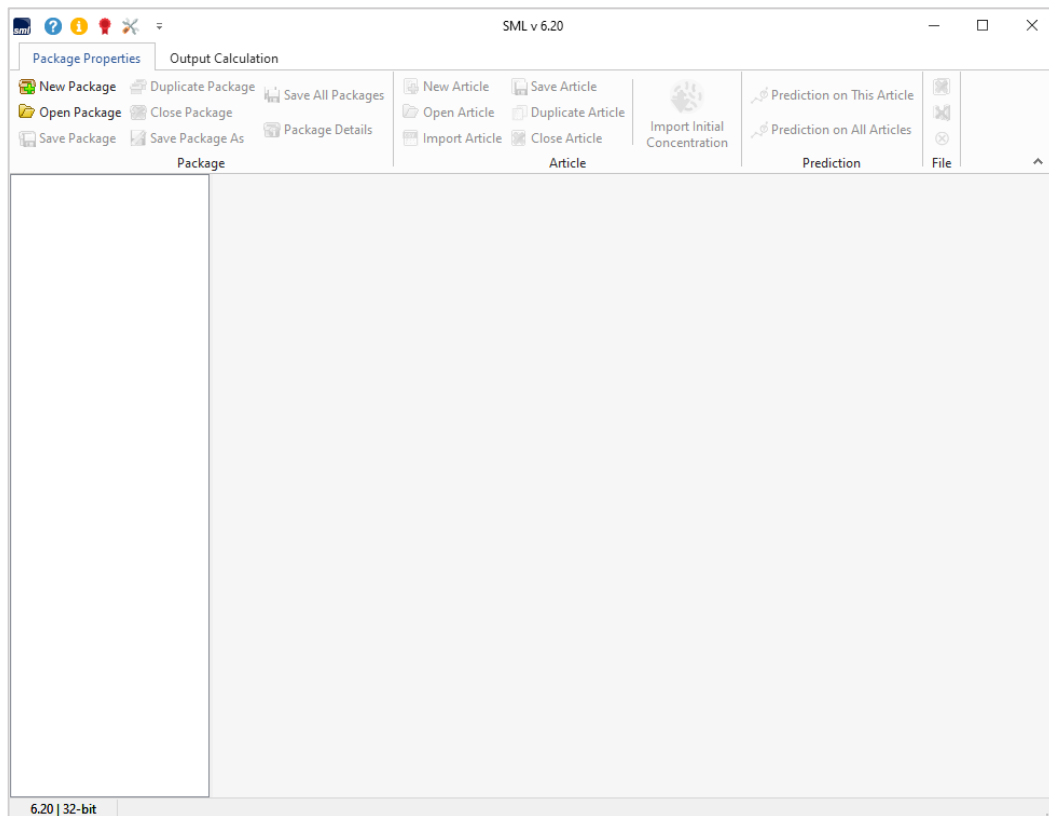**FIG. 2 -** Start_SML をクリックすると SML が起動します。SML スタートの"開けゴマ"です。
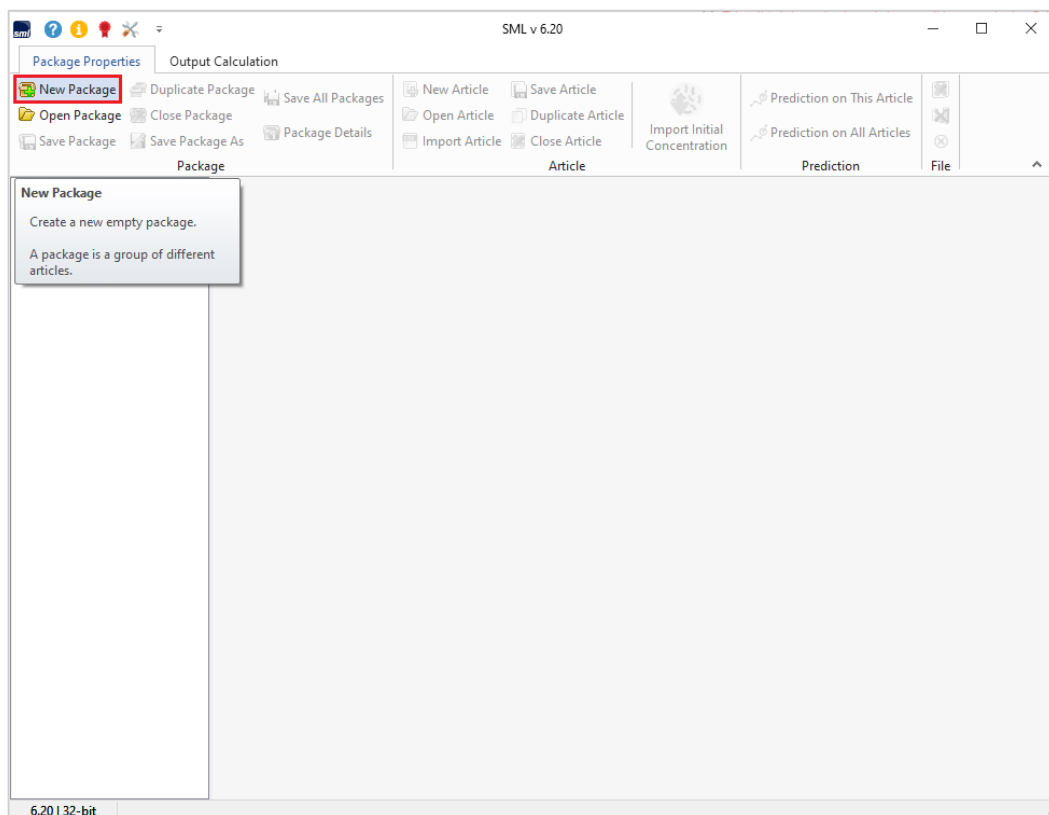
FIG. 3 - SML を起動したときの最初の画面
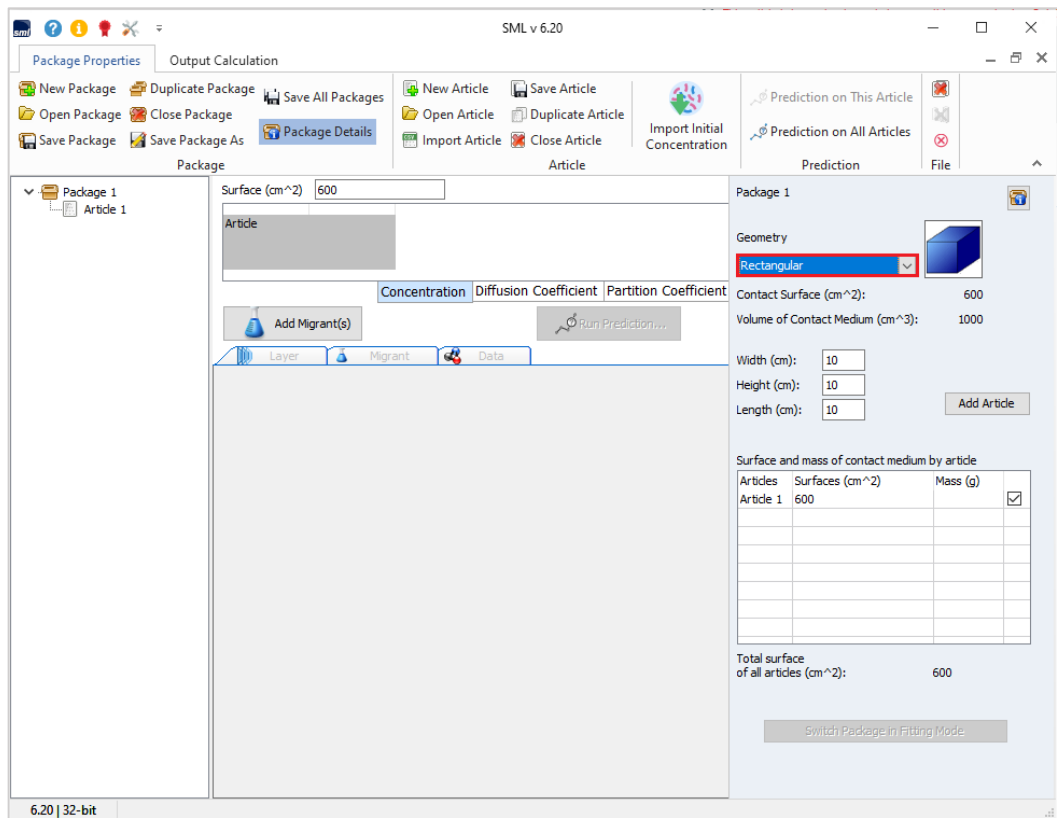

FIG. 4 - 赤枠の New_Package を選択します。
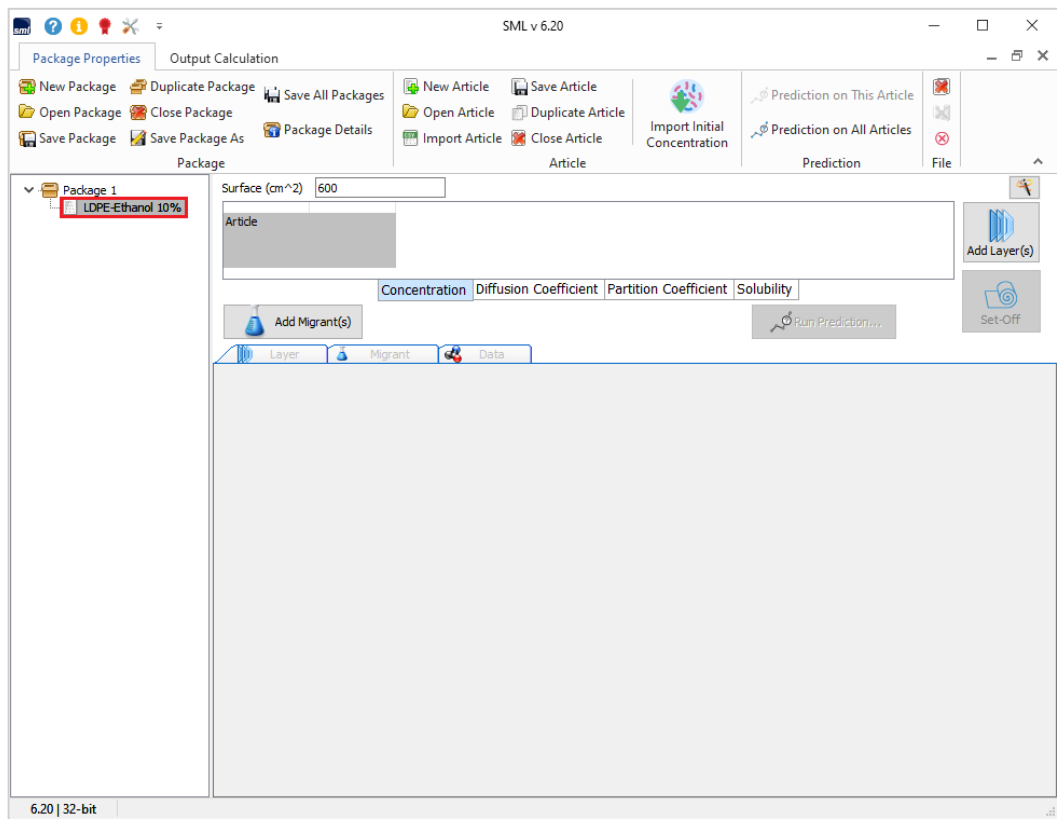
FIG. 5 - パッケージのジオメトリ（例：立方体）を選択します。
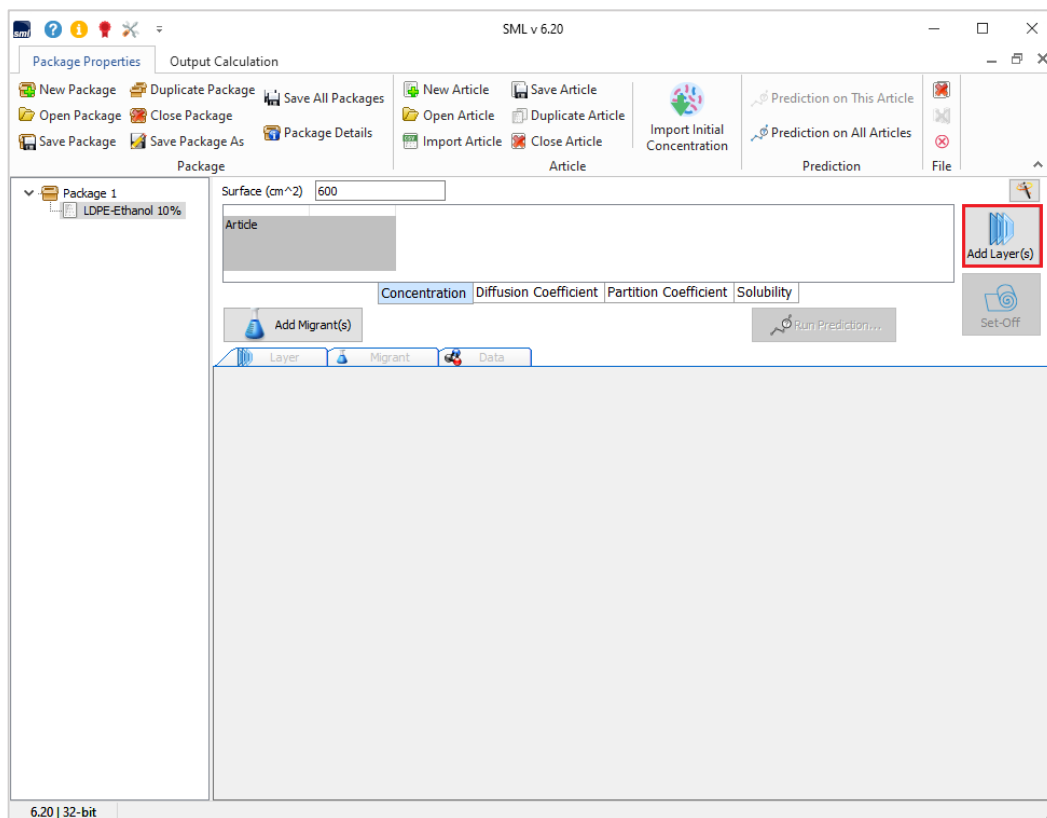

FIG. 6 – パッケージには、1つまたは複数の物品（ボトル本体とその蓋など）を含めることができます。
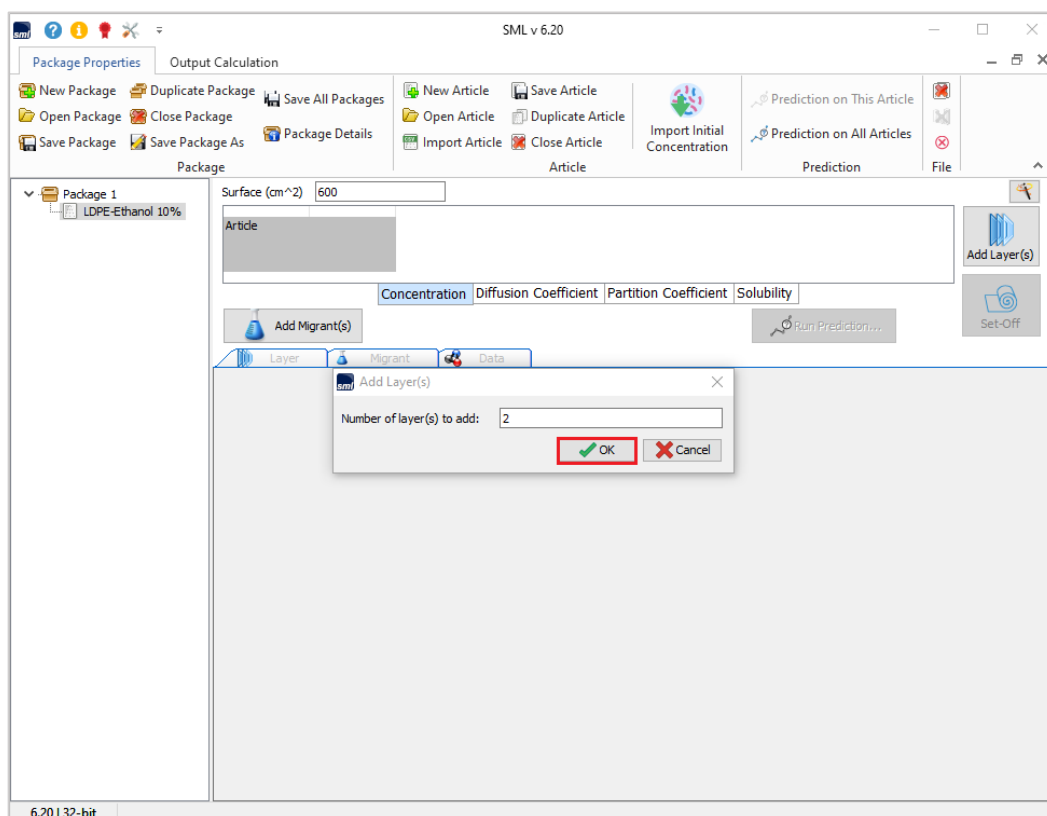
FIG. 7 - レイヤーを加えることにより品目の構成をします。
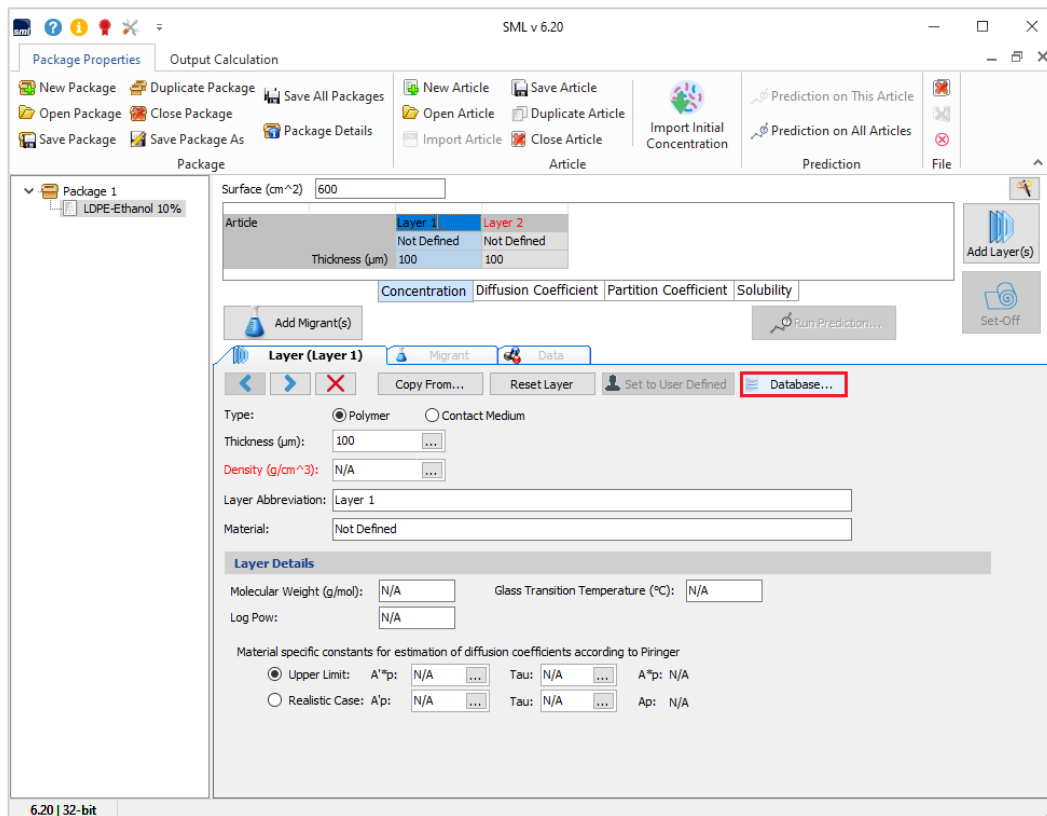

FIG. 8 - レイヤーの数を設定します。
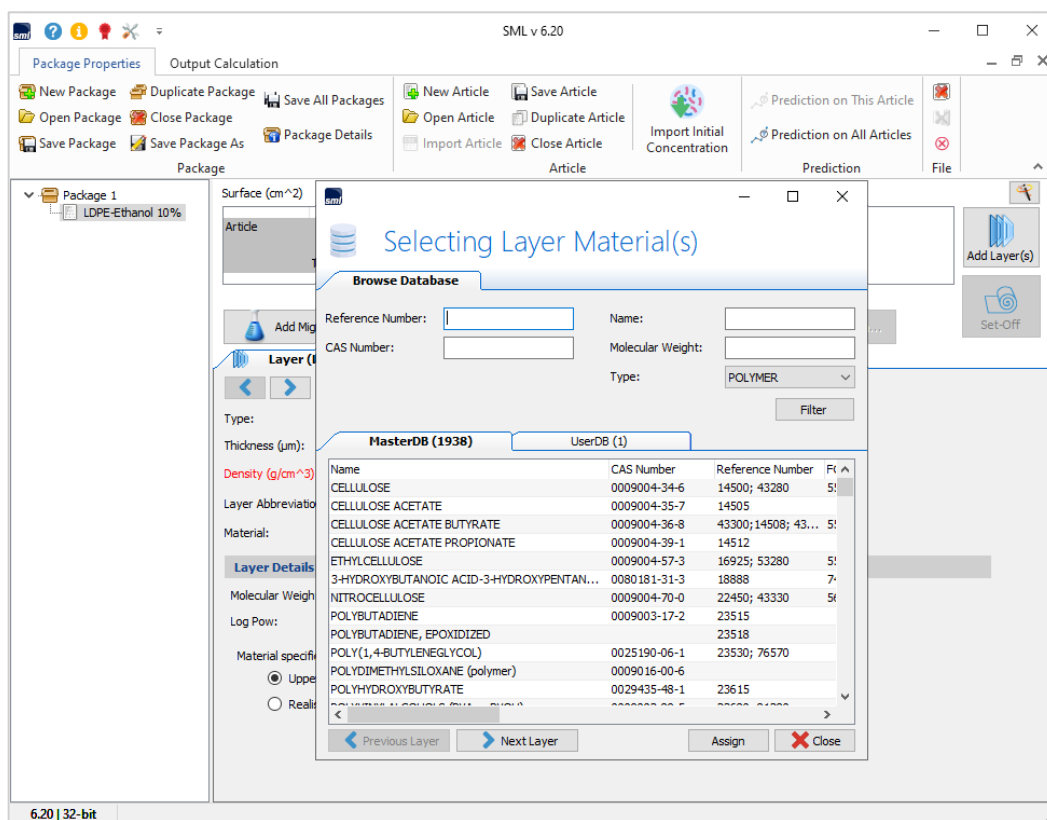
FIG. 9 - ポリマー層の特性はデータベースから選択できます。

FIG. 10 – ポリマー特性の検索には、いくつかのオプションを適用できます（CAS 番号、名前など）。
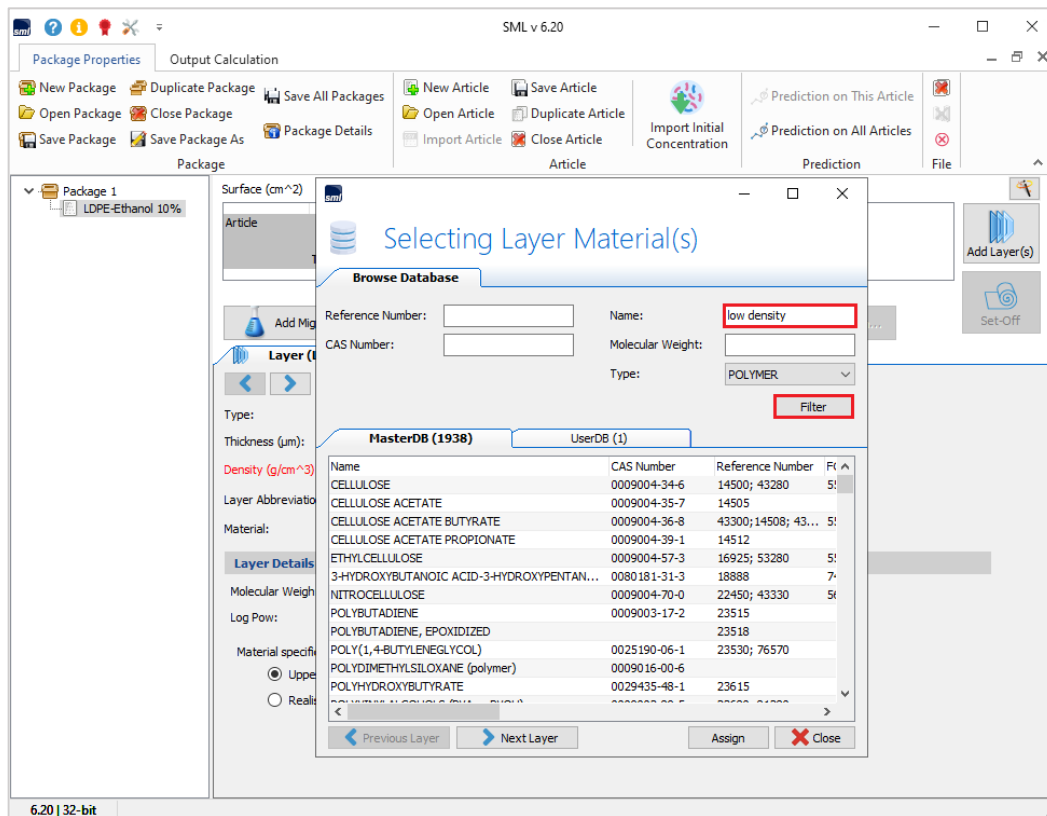
FIG. 11 - 名前または特定のプロパティによるポリマーの検索
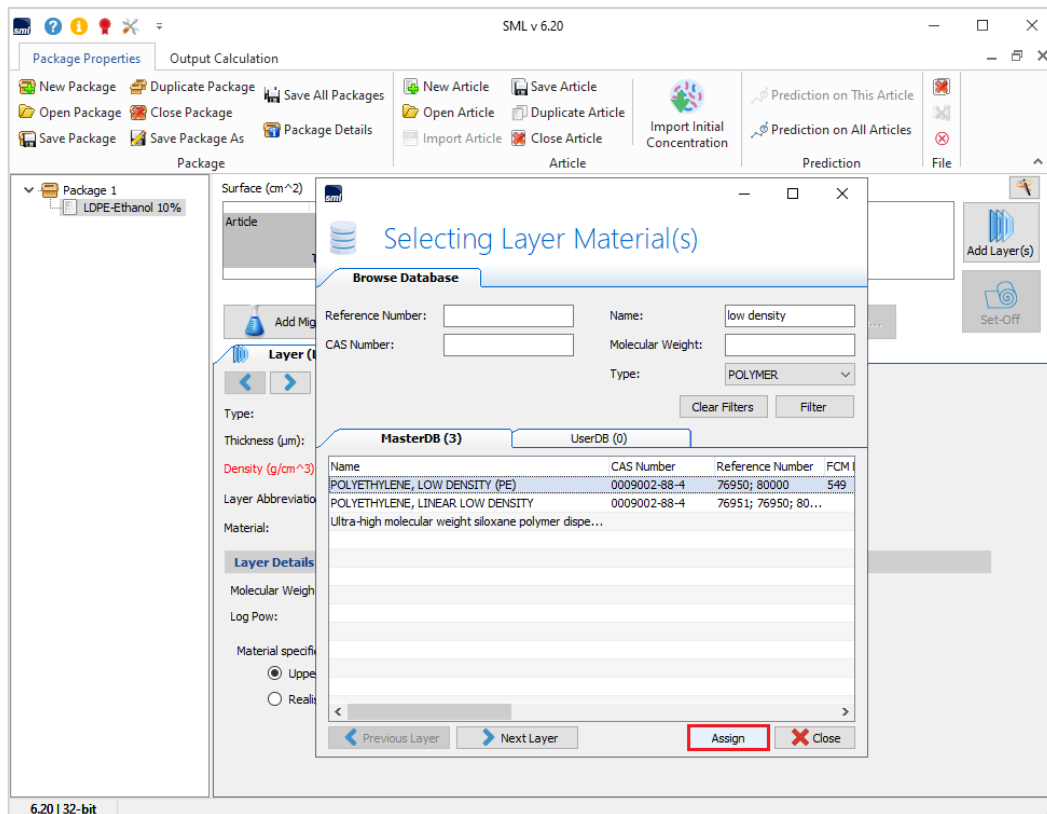（この例では、検索キーワードは「低密度」です）。
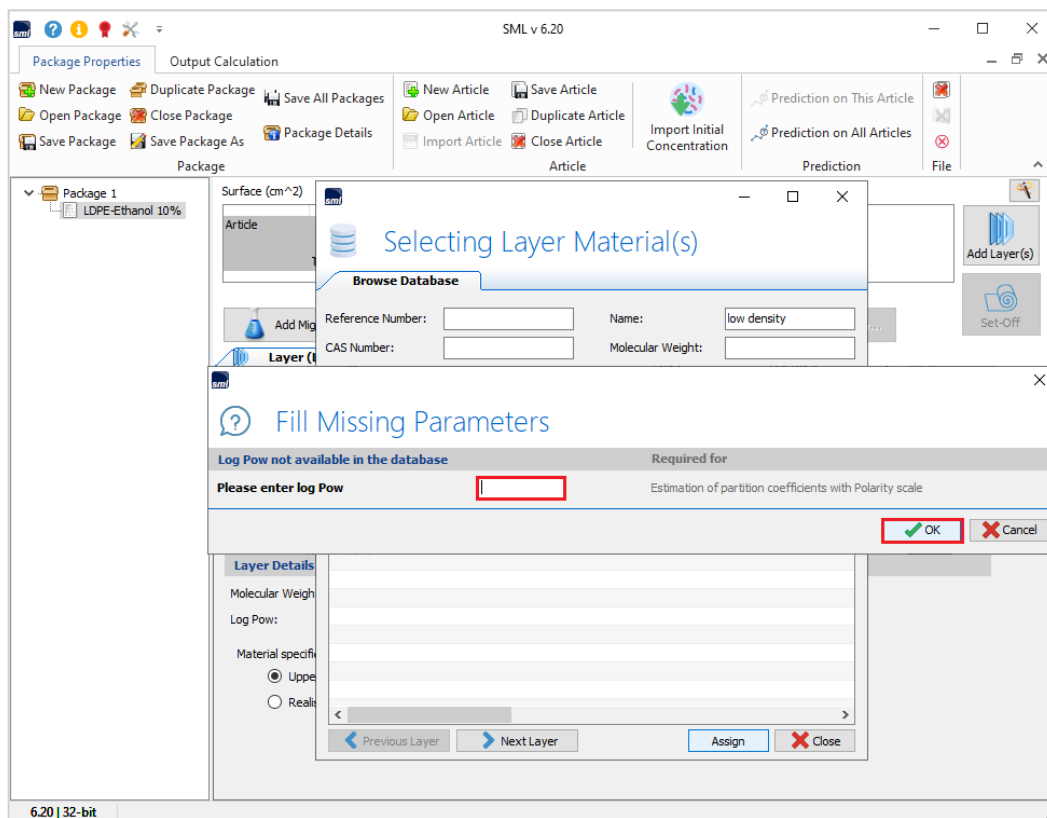

FIG. 12 - ポリマー探索選択の結果

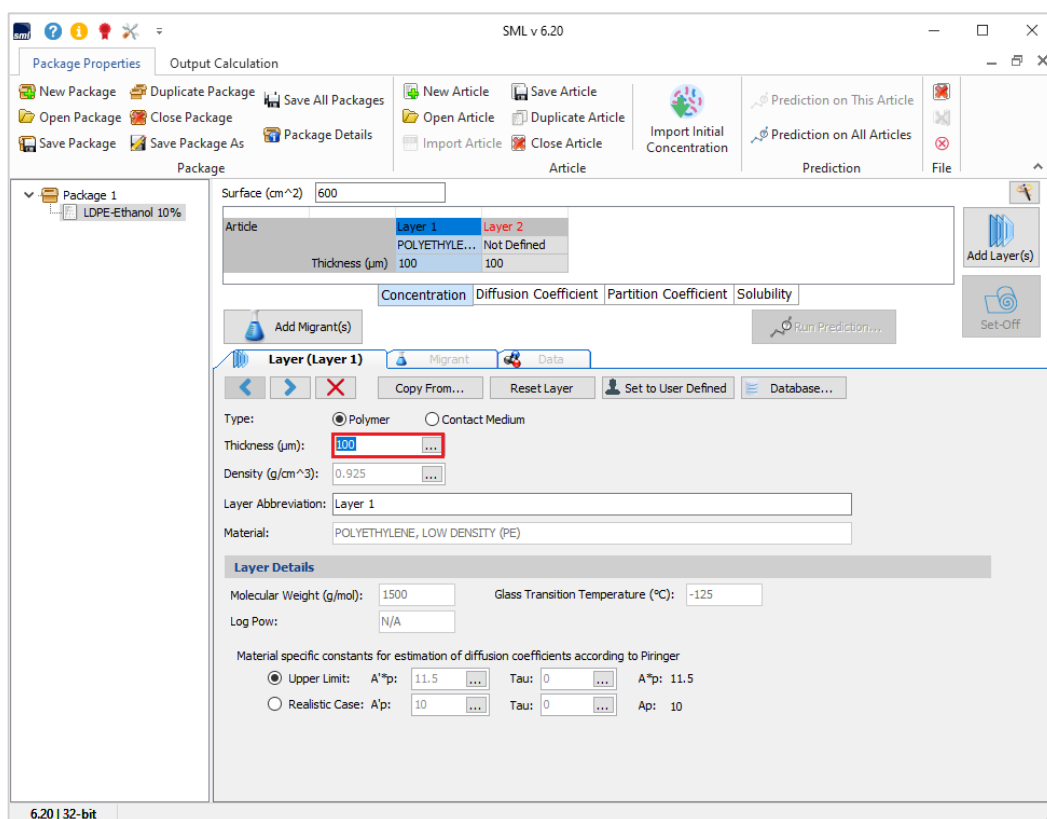**FIG. 13 -** 不足しているパラメーターを入力します（わかっている場合）。 この例では、LogPow がありません。

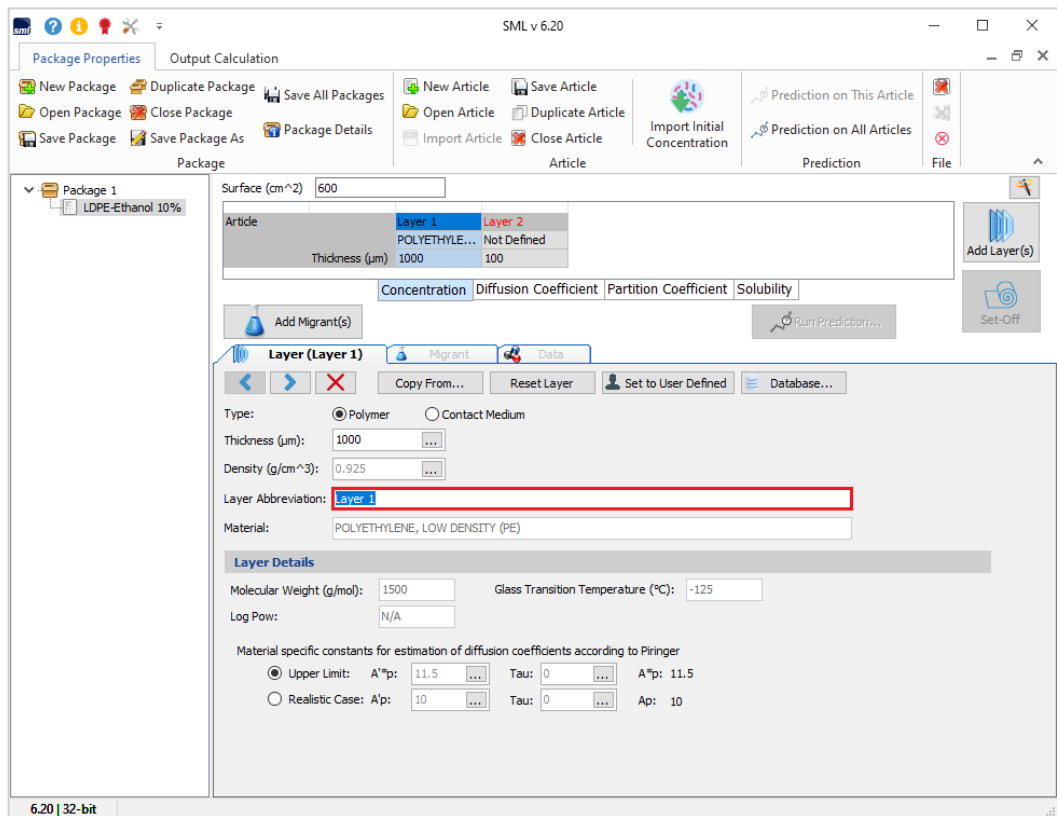**FIG. 14 -** ポリマー層の厚みの入力

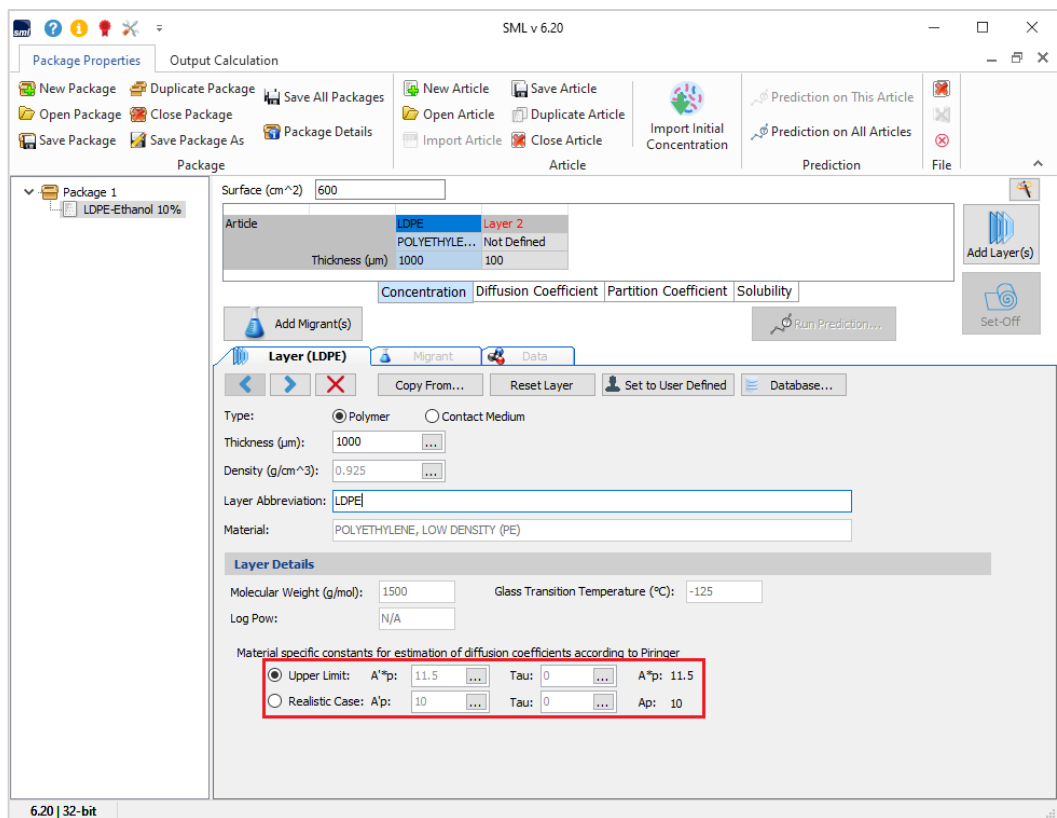**FIG. 15 –** レイヤーの名前は変更できます（要求された場合）。

FIG. 16 - 拡散の推定に必要な Piringer 法による物質特定係数の導入 。
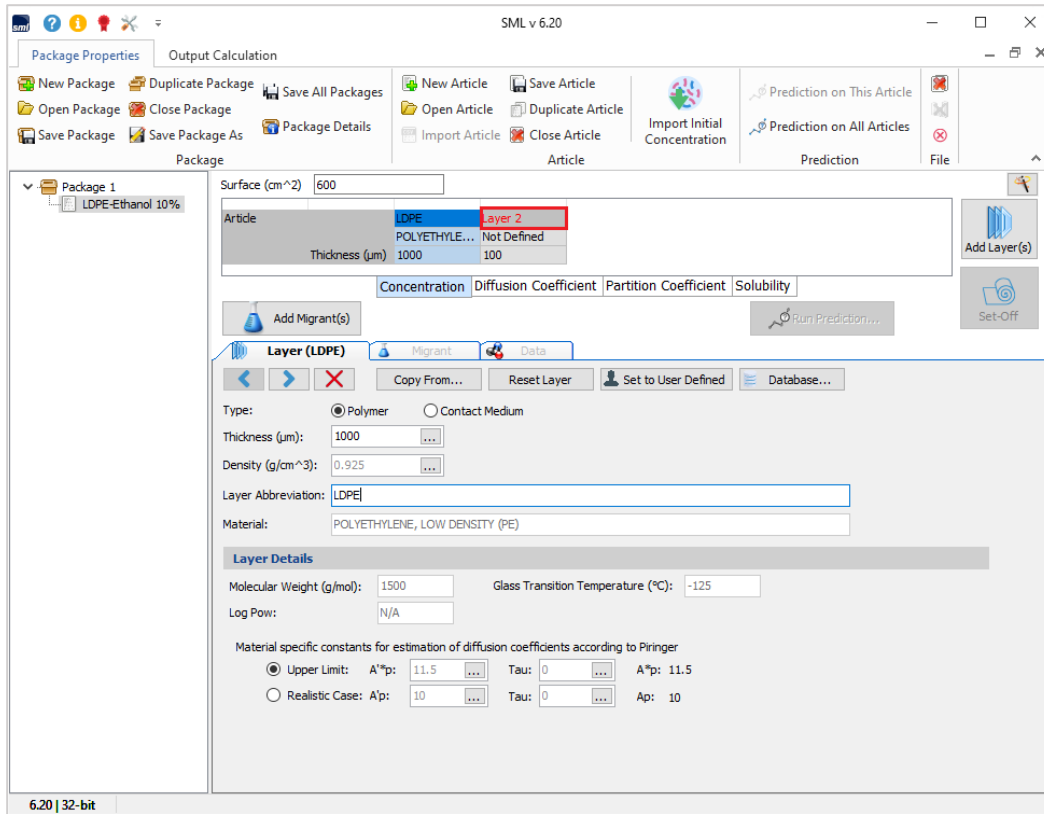Piringer 法の値には「上限値」または「現実的なケース」がある。

食品グループと食品疑似溶媒
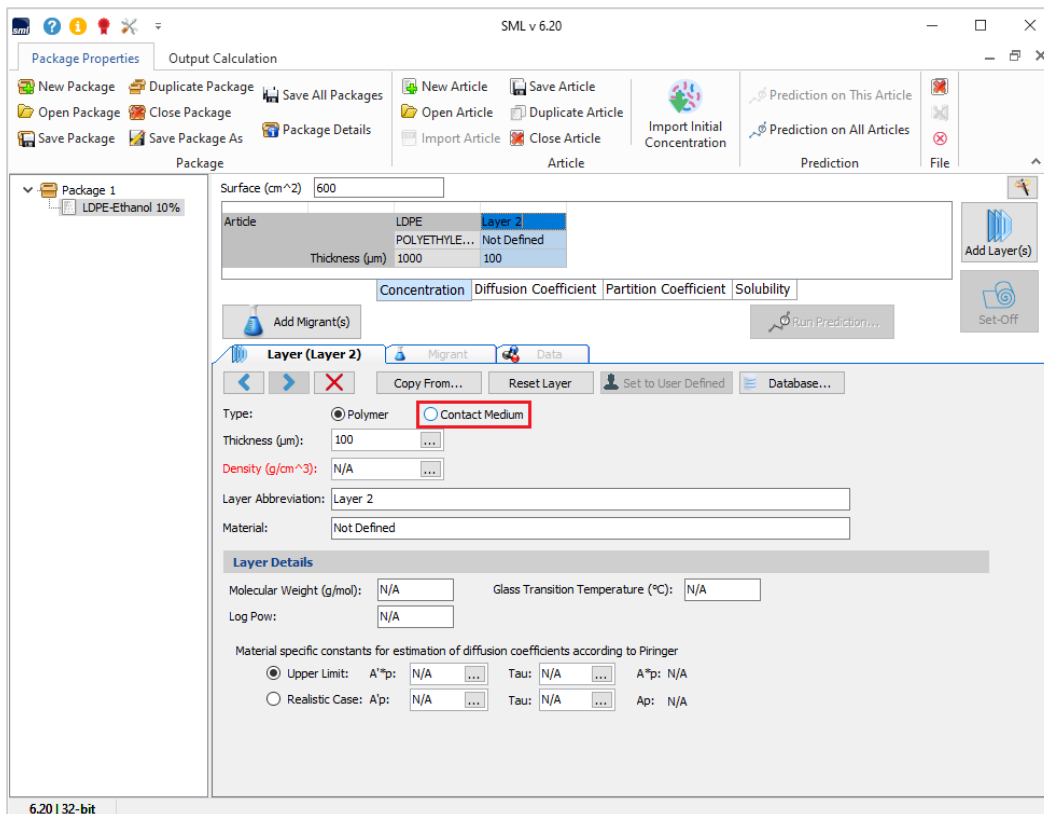

FIG. 1 - 次のレイヤー「レイヤー2」の選択

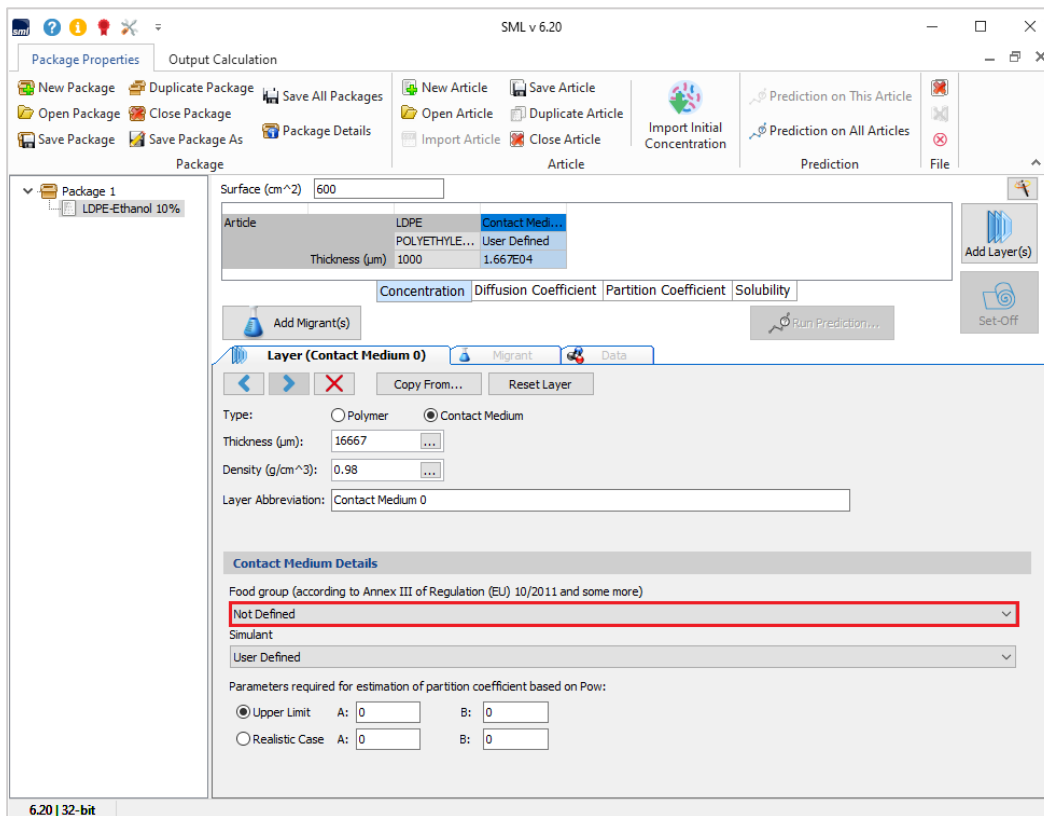**FIG. 2 –** レイヤー2 は食品疑似溶媒と設定されているので、「ポリマー」から「接触媒体」への変更が必要です

FIG. 3 - 食品グループで検索して接触媒体を定義する。
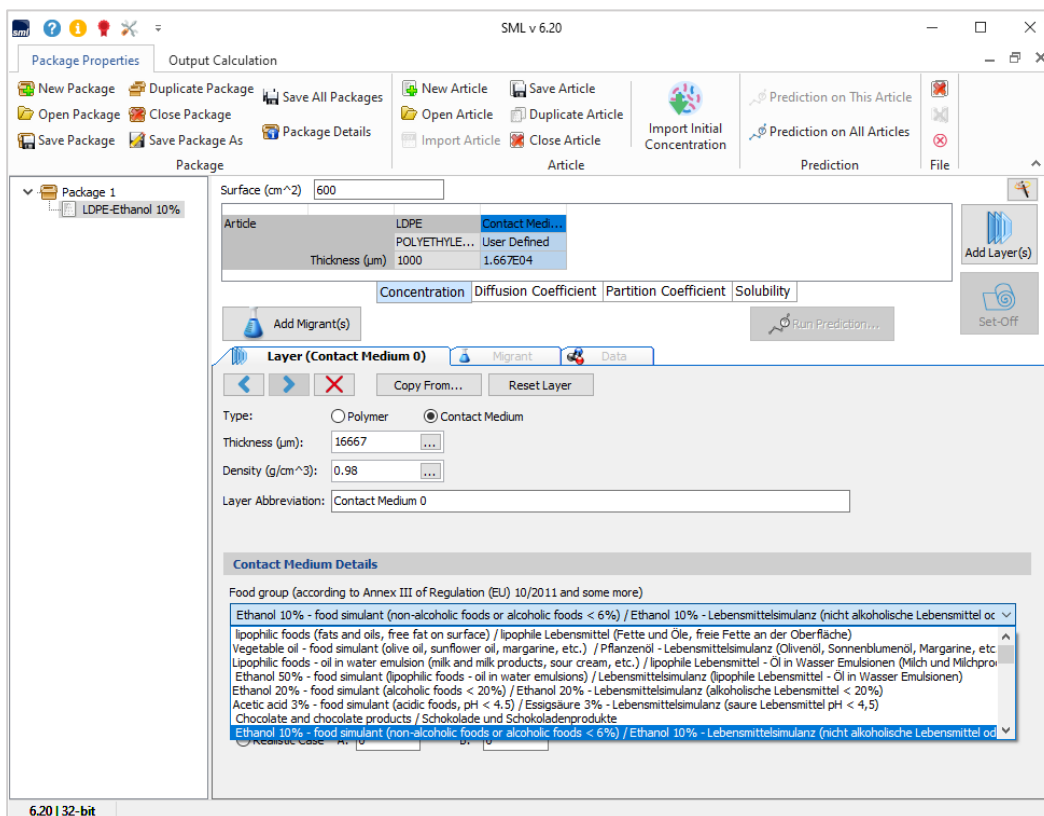（[未定義]をクリックして食品グループを選択します）。
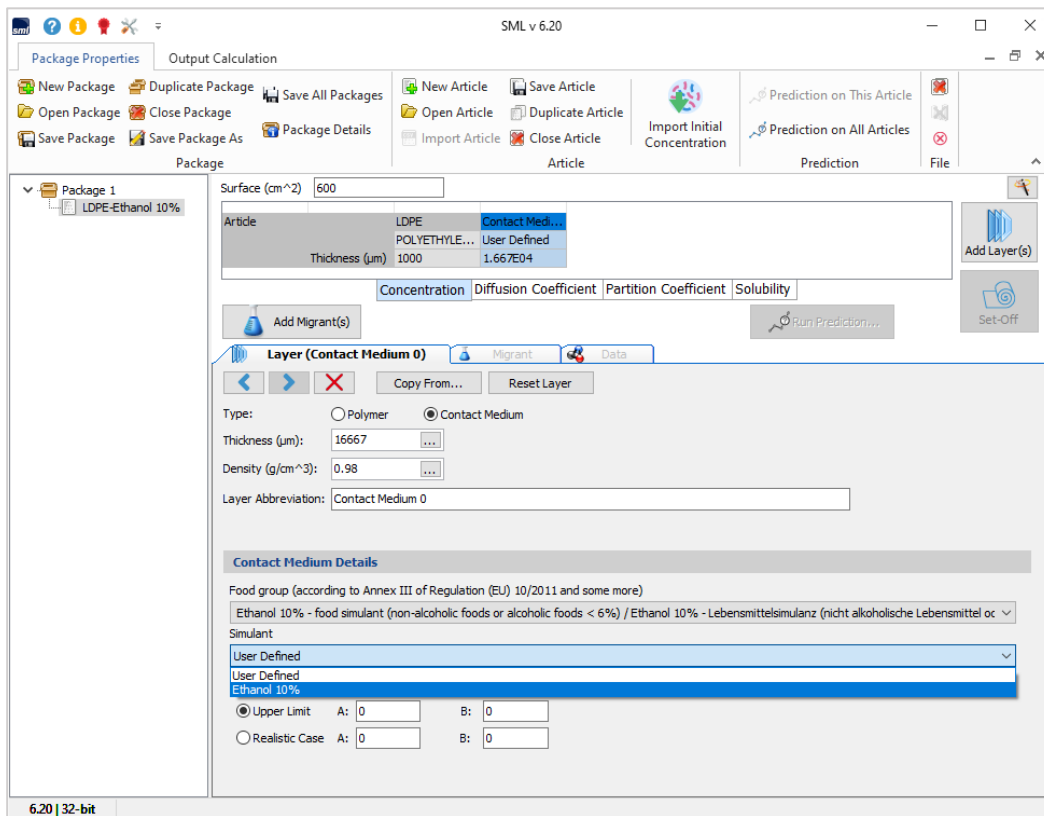

FIG. 4 - 要求された食品グループの選択（英語とドイツ語）。

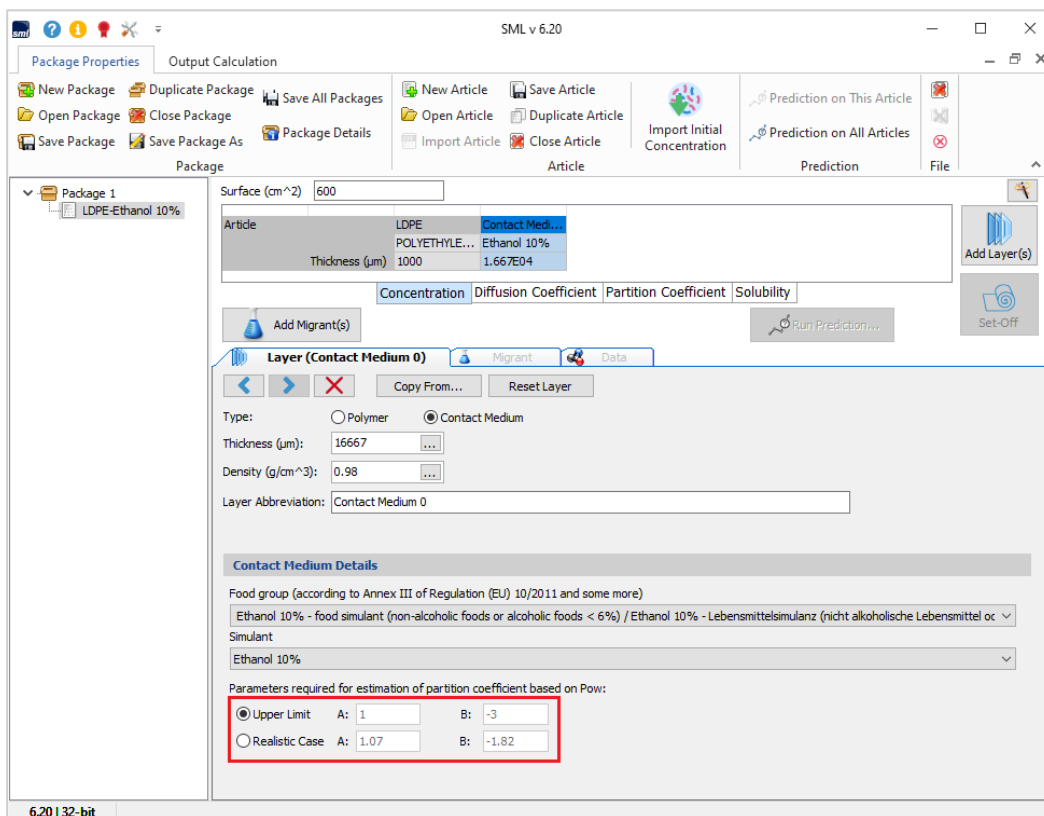**FIG. 5 -** 接触媒体としての「エタノール10%」の選択。

FIG. 6 - オクタノール/水の推定に必要なパラメータの導入
「上限値」または「現実的なケース」法による分配係数が選択できます。

移行

移行物質プロパティパネルでは、現在選択されている移行物質のプロパティを定義できます。 移行物質がユーザー定義として設定されている場合、そのプロパティを手動で入力することができます。 それ以外の場合、移行物質がデータベースからロードされると、そのプロパティは自動的に入力されます。

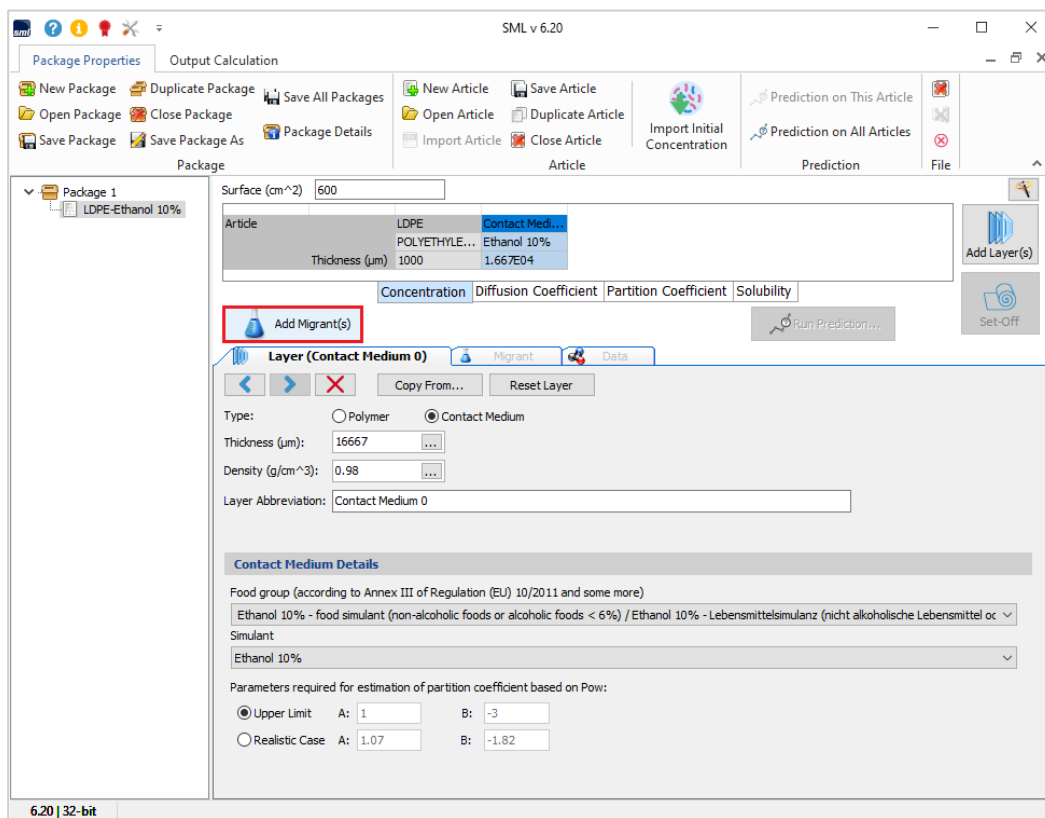データベースでは、既知の移行物質（20,000 を超える化学物質：添加剤、モノマー、光重合開始剤、顔料、溶剤など）を　閲覧できます。

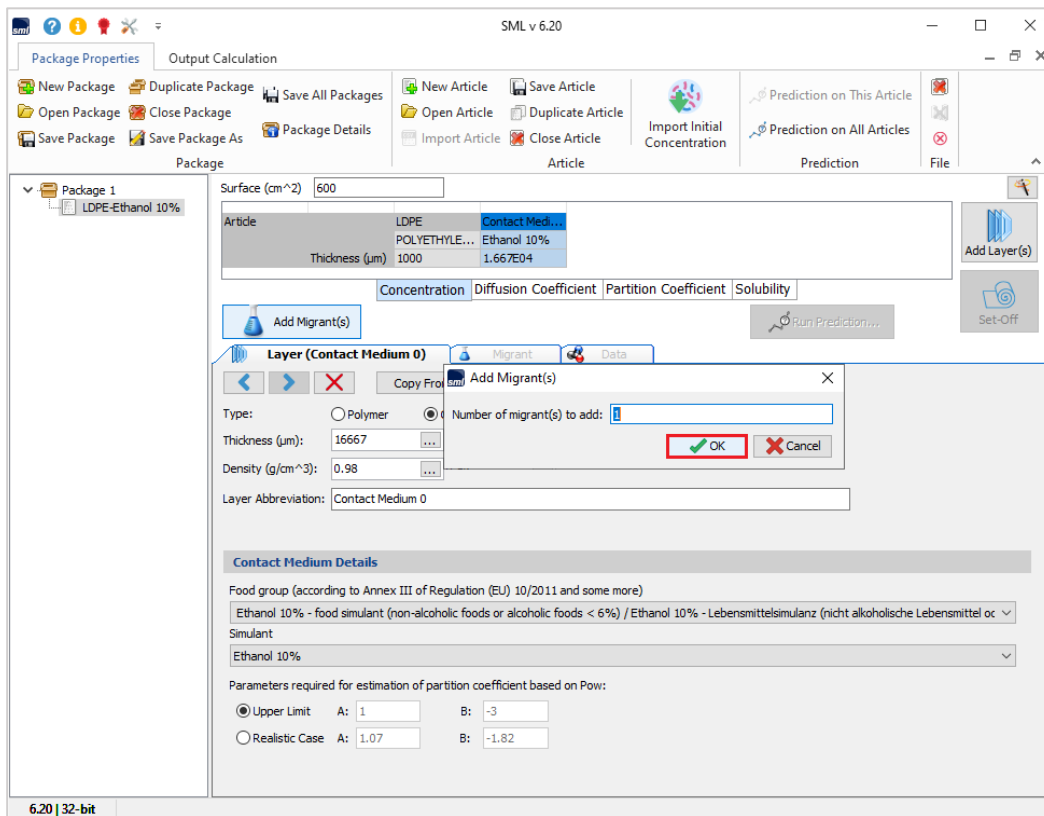**FIG. 1 -** 移行物質の数を定義する操作のために　Adding_Migrants をクリックします。
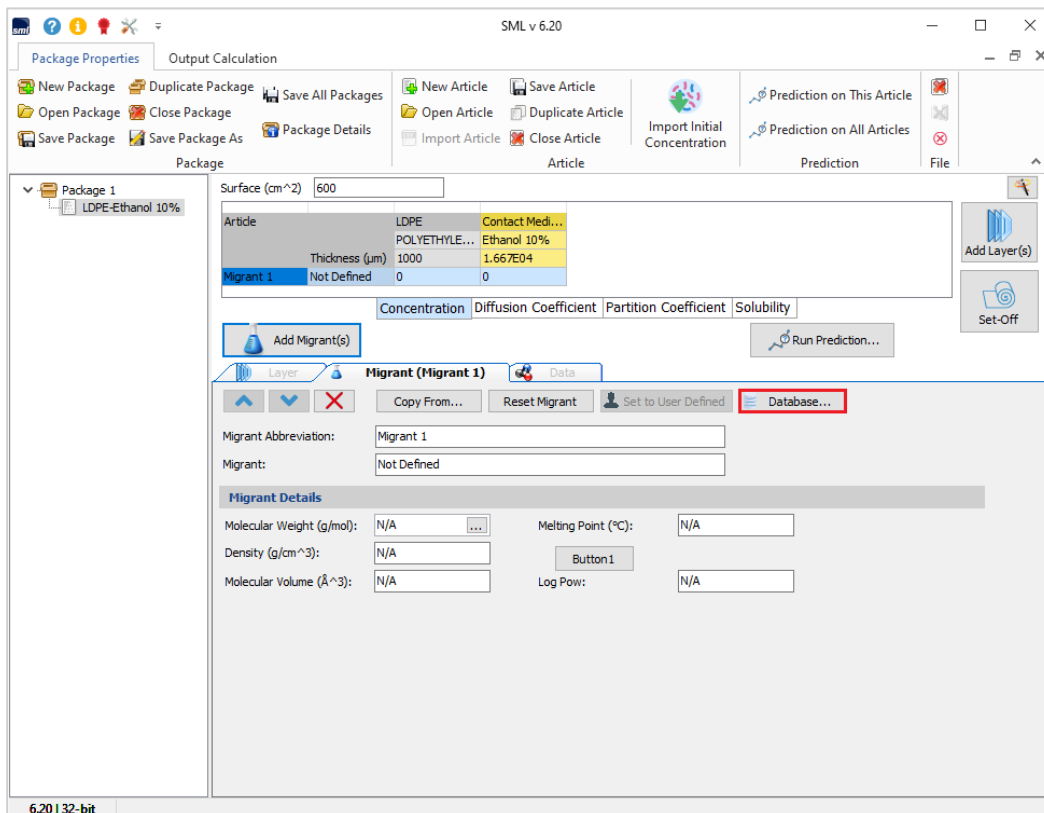
FIG. 2 - 移行物質の数を定義します。

FIG. 3 - データベースの中から移行物質の特性を見ることができます。
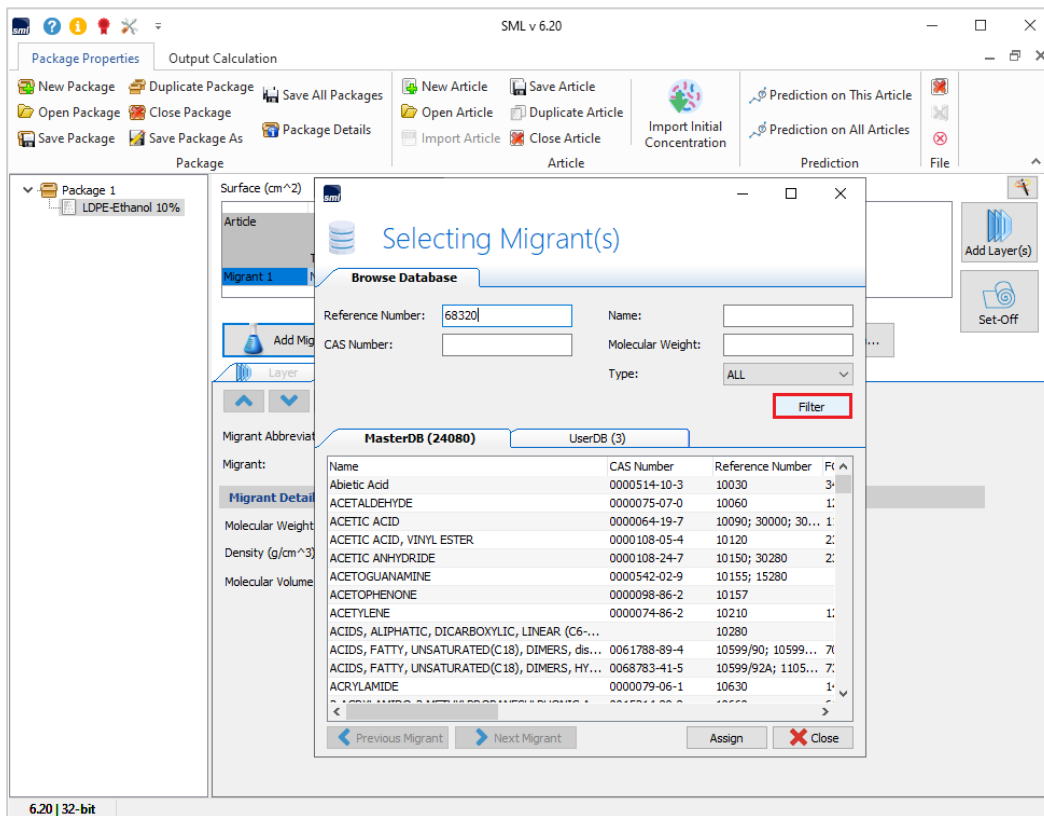
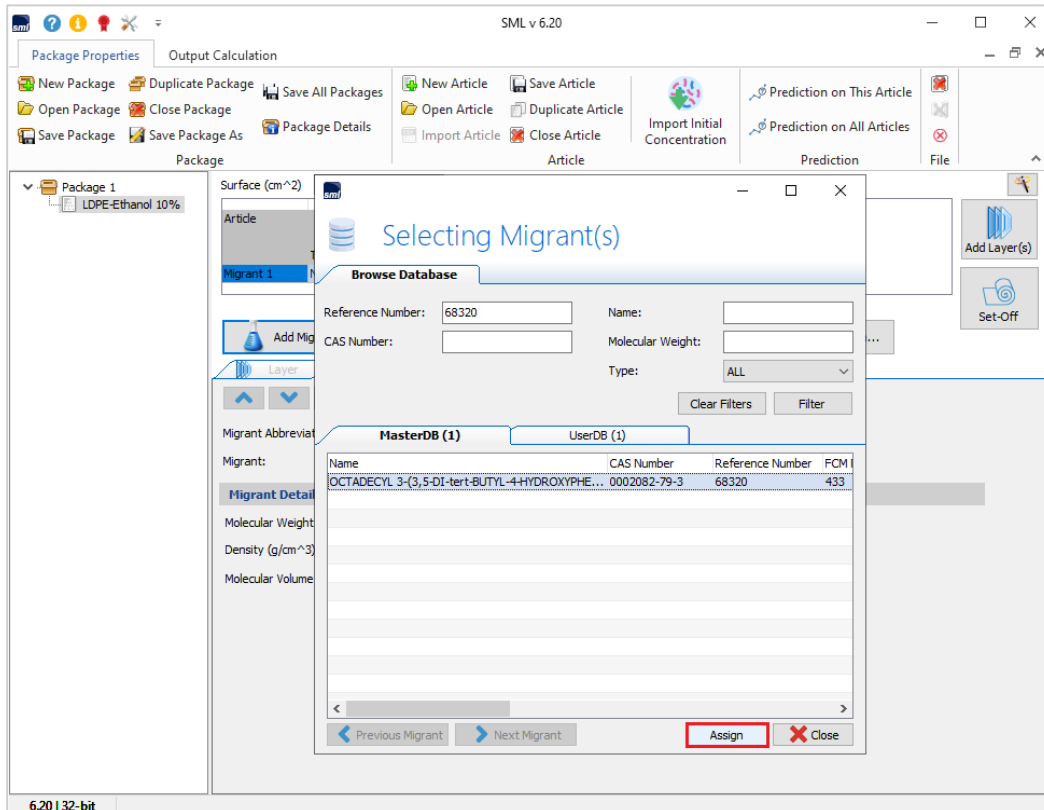**FIG. 4 -** この事例では Reference 番号を入力してデータベースの中から移行物質を探索します。その他 CAS No.を使うことをお勧めします。
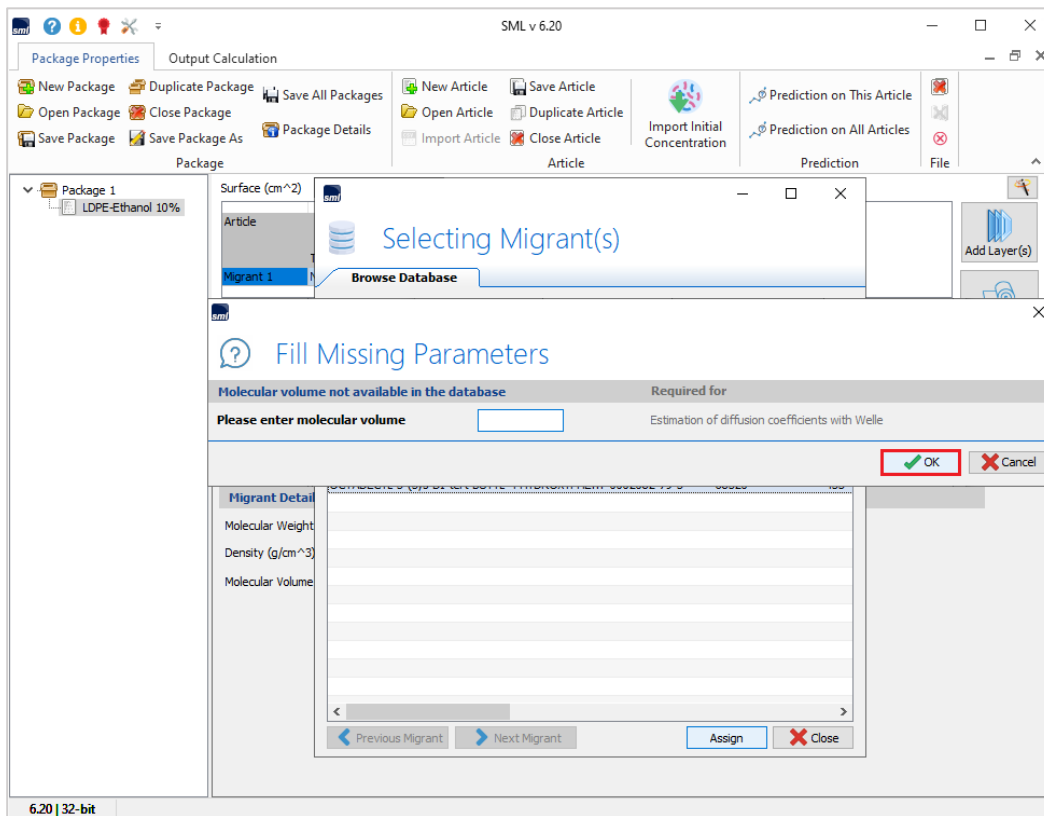

FIG. 5 - 要求される移行物質を選択したら Assign ボタンをクリックします。

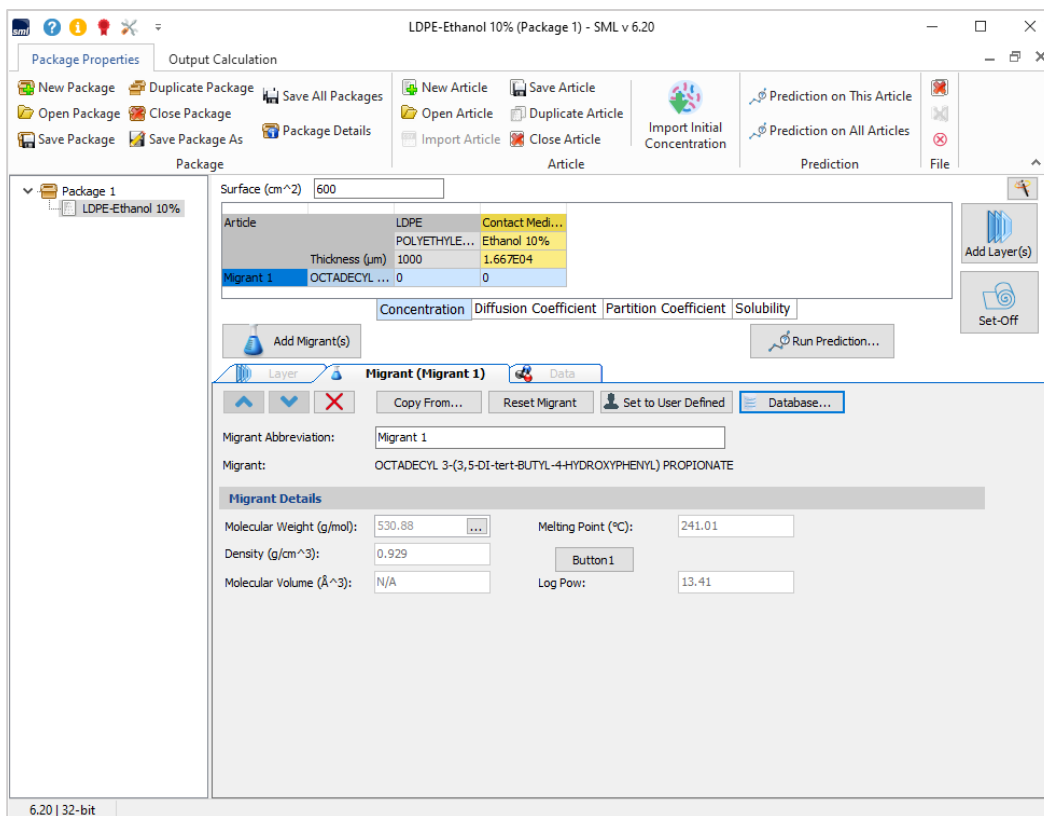**FIG. 6 -** 欠落しているパラメータ、ここではモル体積を加えます。（モル体積が分かっている場合）

FIG. 7 - 品目のレイヤーと移行物質(migrant)を定義します。

移行特性（濃度、拡散、分配係数）

移行プロセスを予測するには、移行者の主要なパラメータを導入する必要があります。
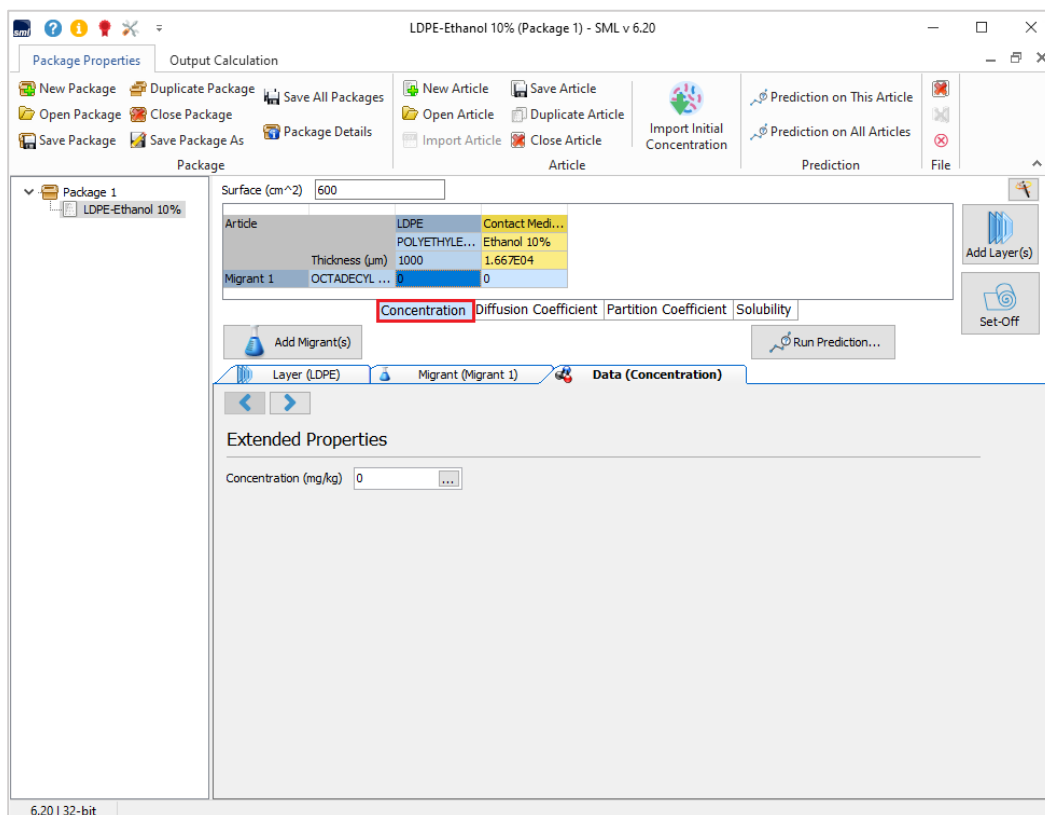
- ▶ 濃度
- ▶ 拡散係数
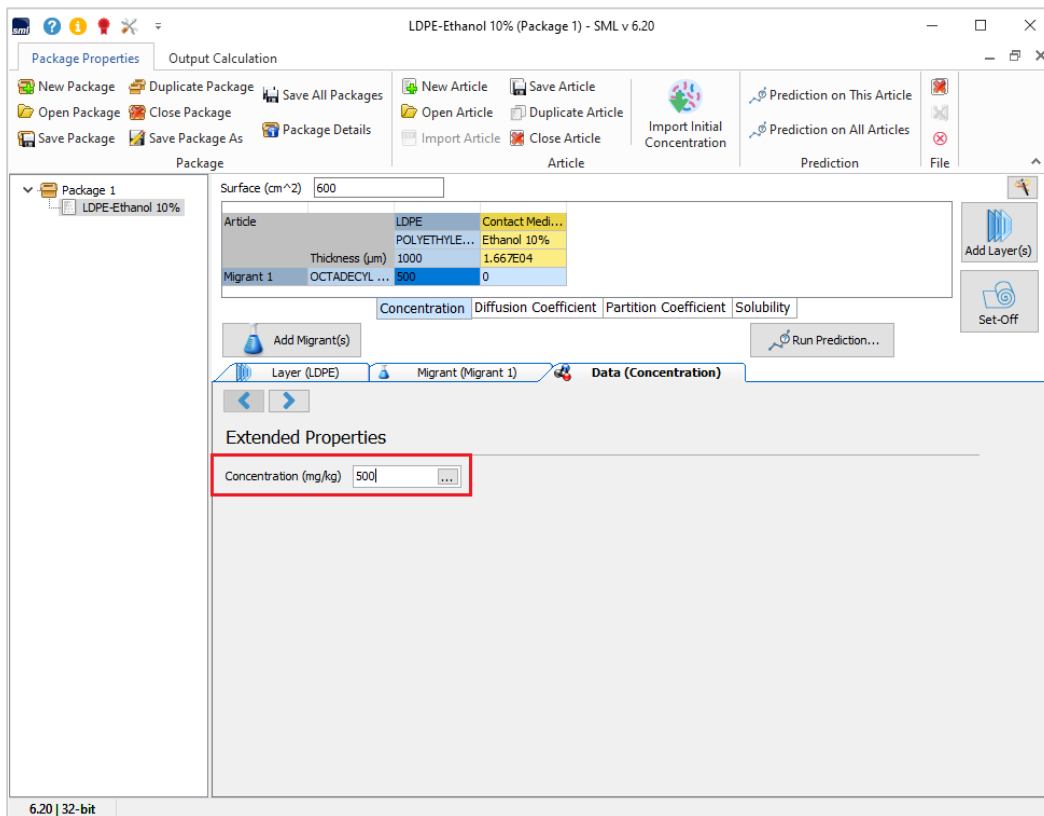- ▶ 分配係数

FIG. 1 - 移行物質の濃度を定義する。（移行物質の含有量が既知であることが必須条件です。）
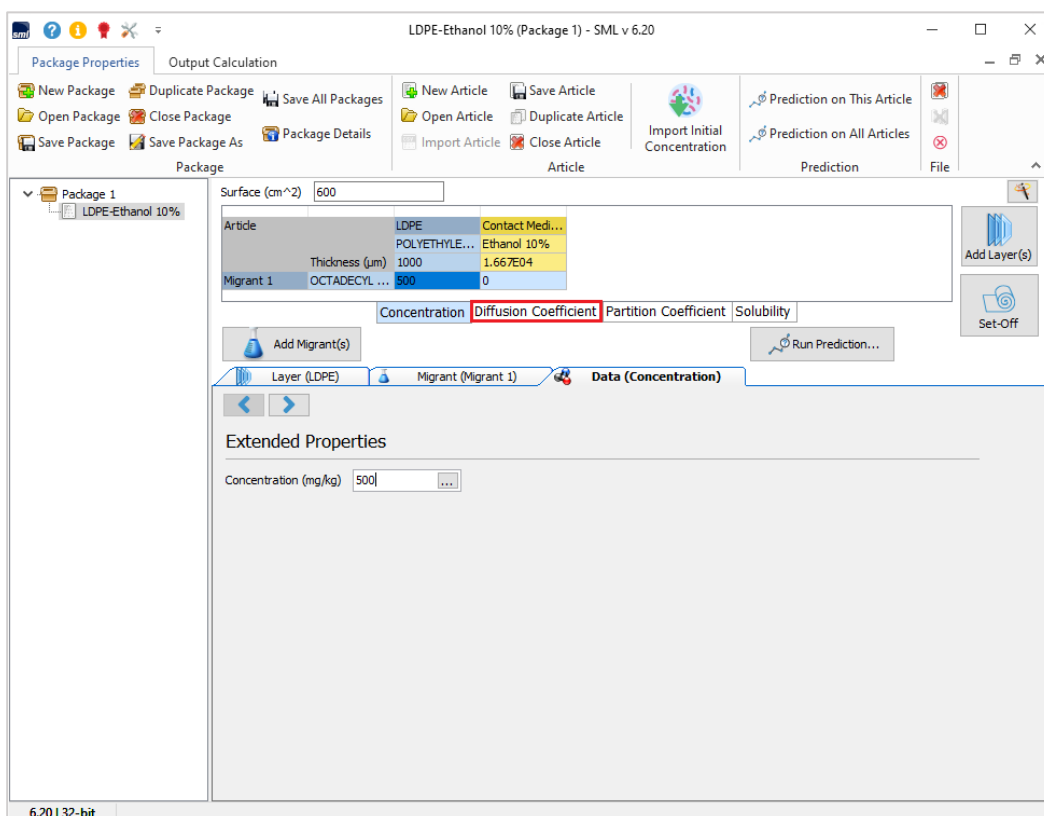
FIG. 2 - 移行濃度の単位を mg / kg（ppm）で設定します。
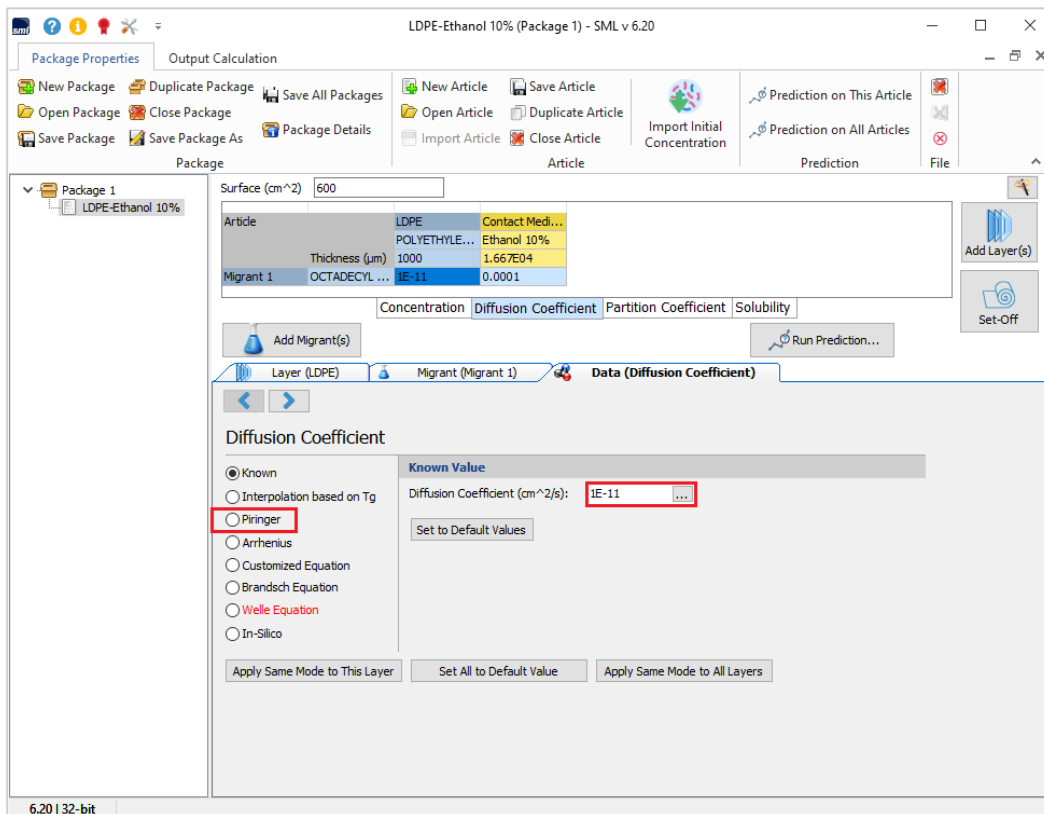

FIG. 3 - 拡散係数の選択します。

FIG. 4 - 拡散係数の導入（既知の場合、ここでは 1e-11 がデフォルト値です）または推定方法の選択（例：Piringer）。この例では、Welle equation で推定する必要なパラメータが不足しているために使用できないために、Welle 方程式は赤でマークされています。Version5.2 以降に追加された機能です。
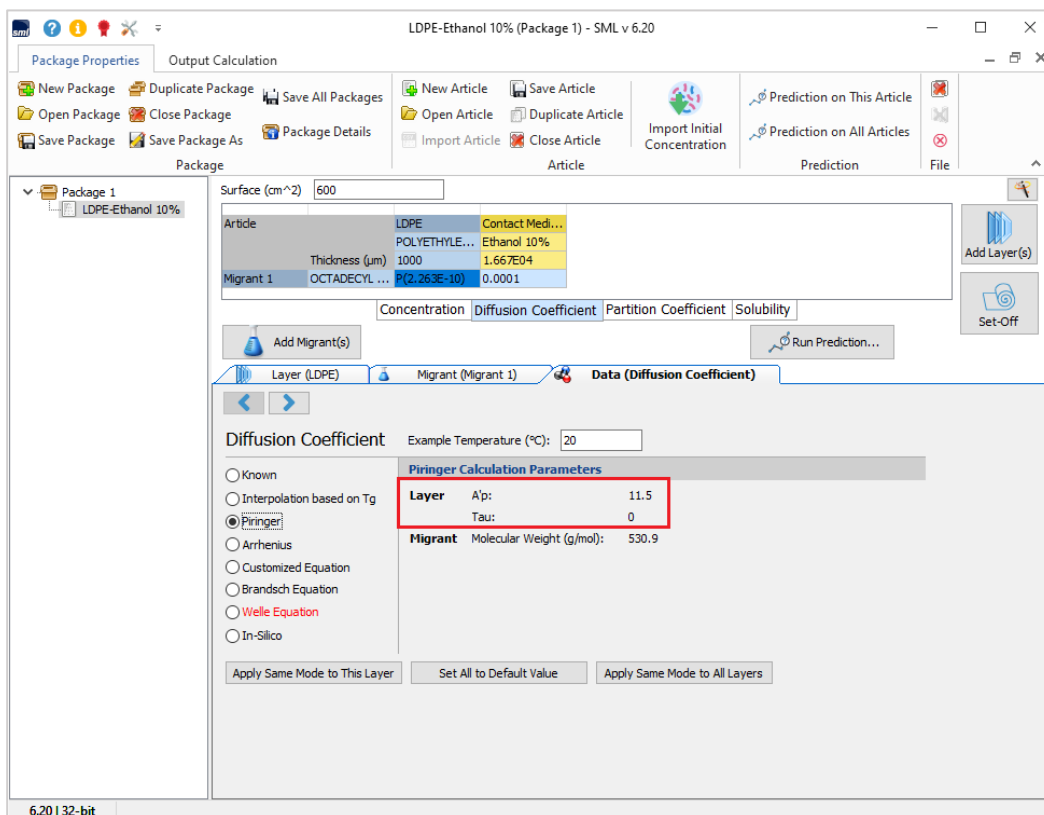

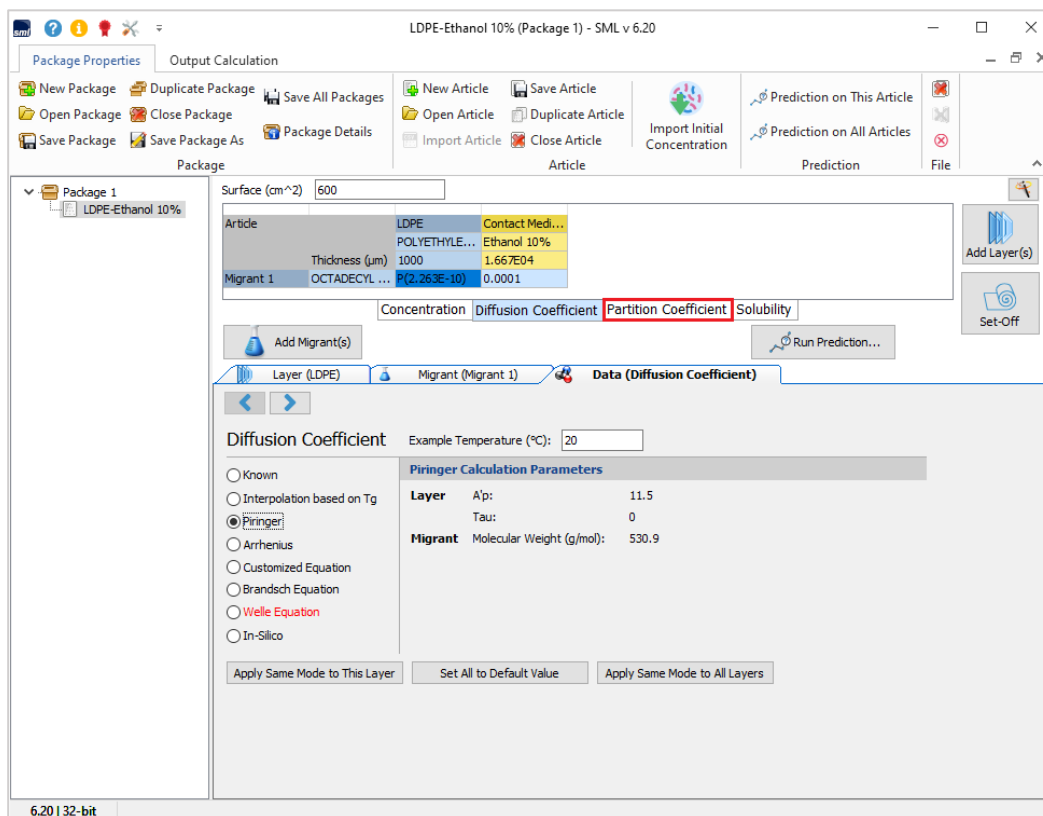**FIG. 5 –** Piringer 法に基づく拡散係数の評価に必要な計算パラメータ（Ap および Tau）の導入
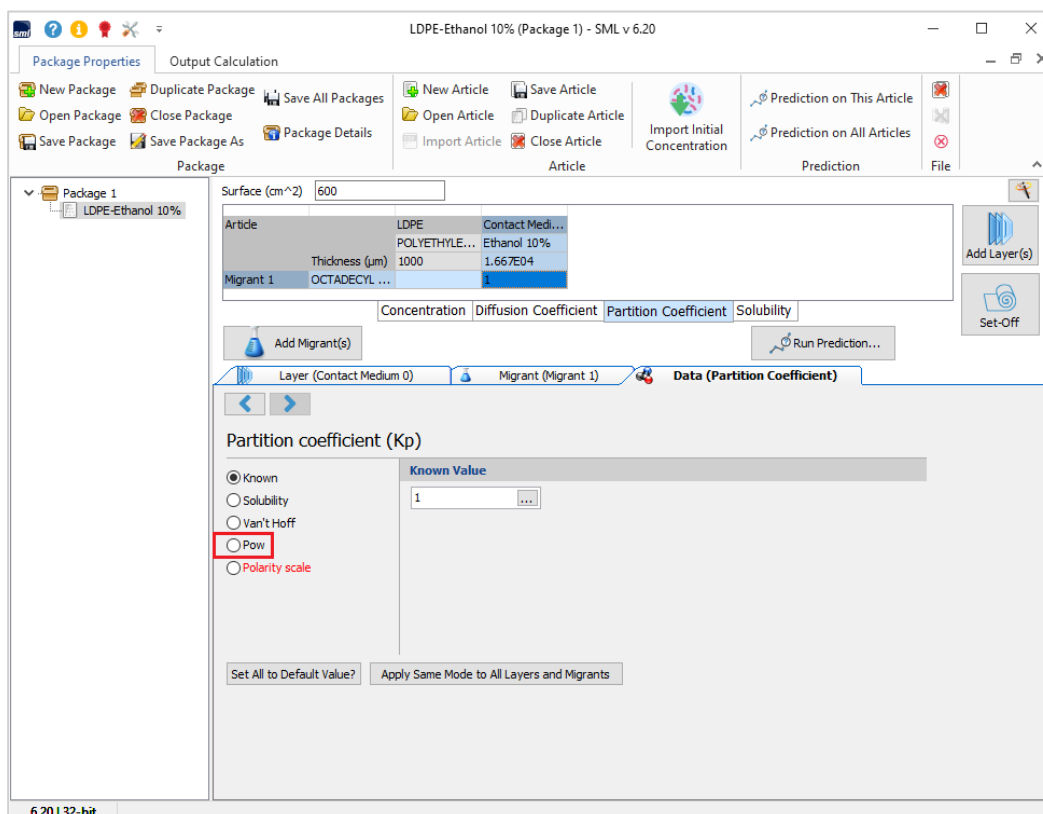
FIG. 6 - 分配係数の選択

FIG. 7 - -分配係数の入力（分配係数がわかっている場合）または推定方法の選択 （例：オクタノール/水分配係数）。
この例では、極性スケールは赤でマークされており、極性スケールのパラメータが欠落しているため使用できません。
一般に、JRC ガイドラインに従って任意に選択された 2 つの分配係数が上限計算に使用されます。
移行物質が食品接触材料/模擬物質に可溶である場合、kpF =1 とします。
移行物質が食品接触材料/模擬物質に溶解しない場合、kpF = 1000。
オクタノール・水の分配係数を利用する「POW」方式は、log POW（移行物質の極性から導出）と log kpF の間の関係
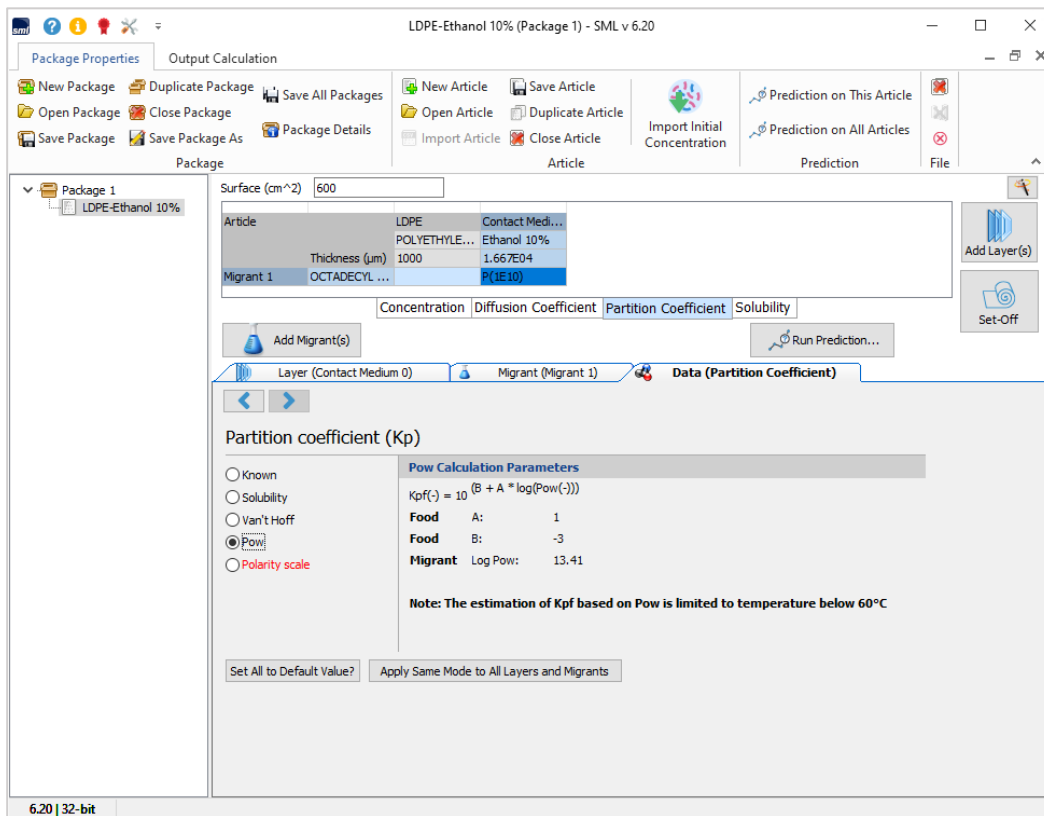を　使用し、より正確な分配係数を提供します。

FIG. 8 - オクタノール/水法に基づく分配係数。

移行量計算

品目のすべてのプロパティが導入されたら、「Run_Prediction　予測の実行」ボタンをクリックして予測計算を進めることができます。

移行の予測は、さまざまな温度プロファイルに対して実行できます。

- 等温
- 非等温
- 段階的
- 変調
- ショック
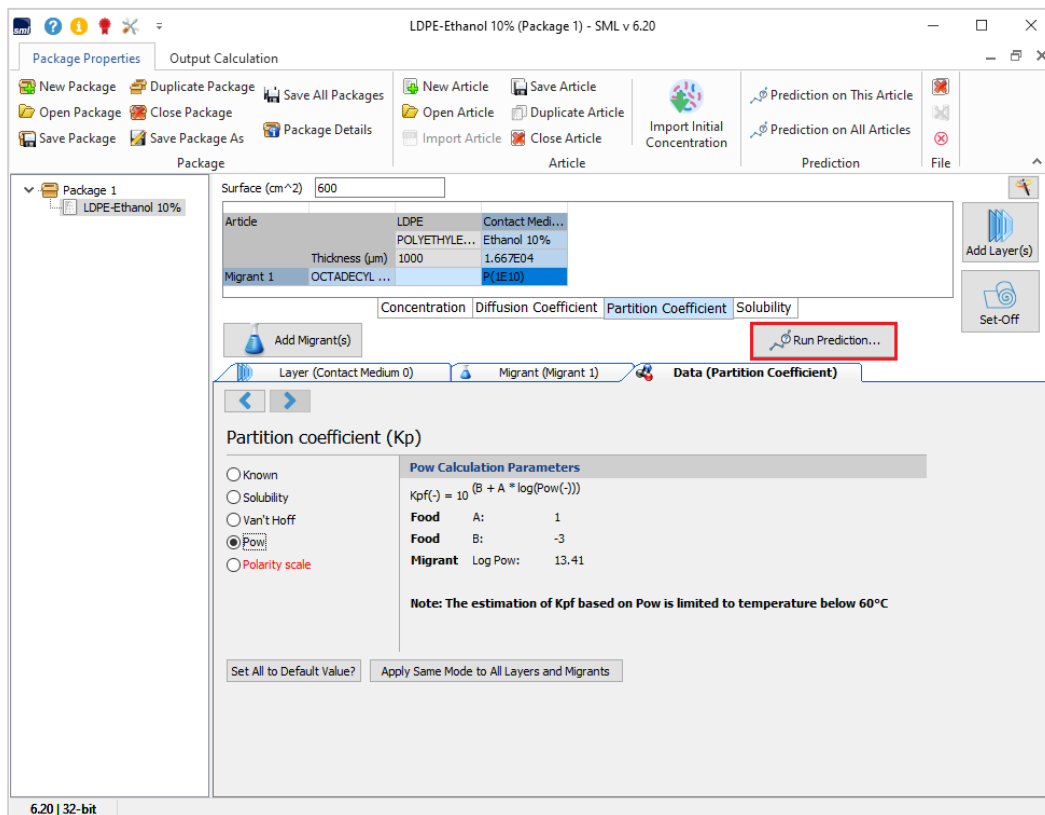- 世界気候　　世界都市の気候温度条件
- STANAG NATO の軍規格　SML では使用しません。
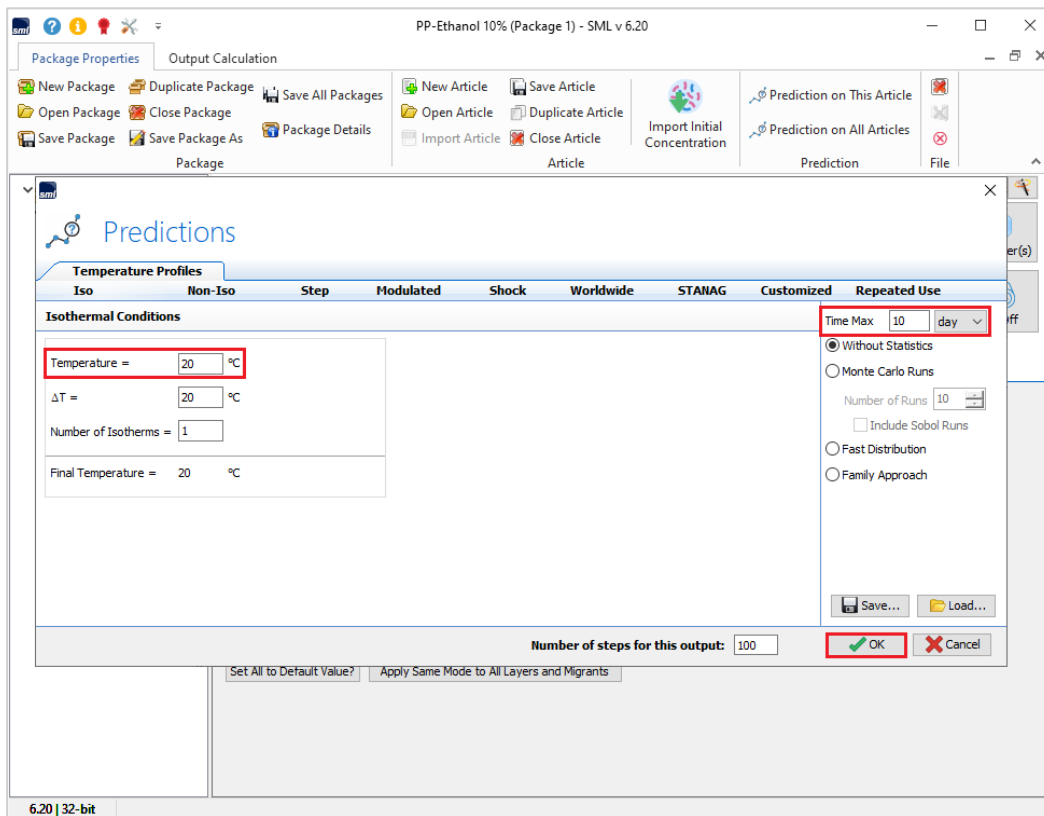- カスタマイズ

FIG. 1 - 移行物質の移行量（溶出量）の予測
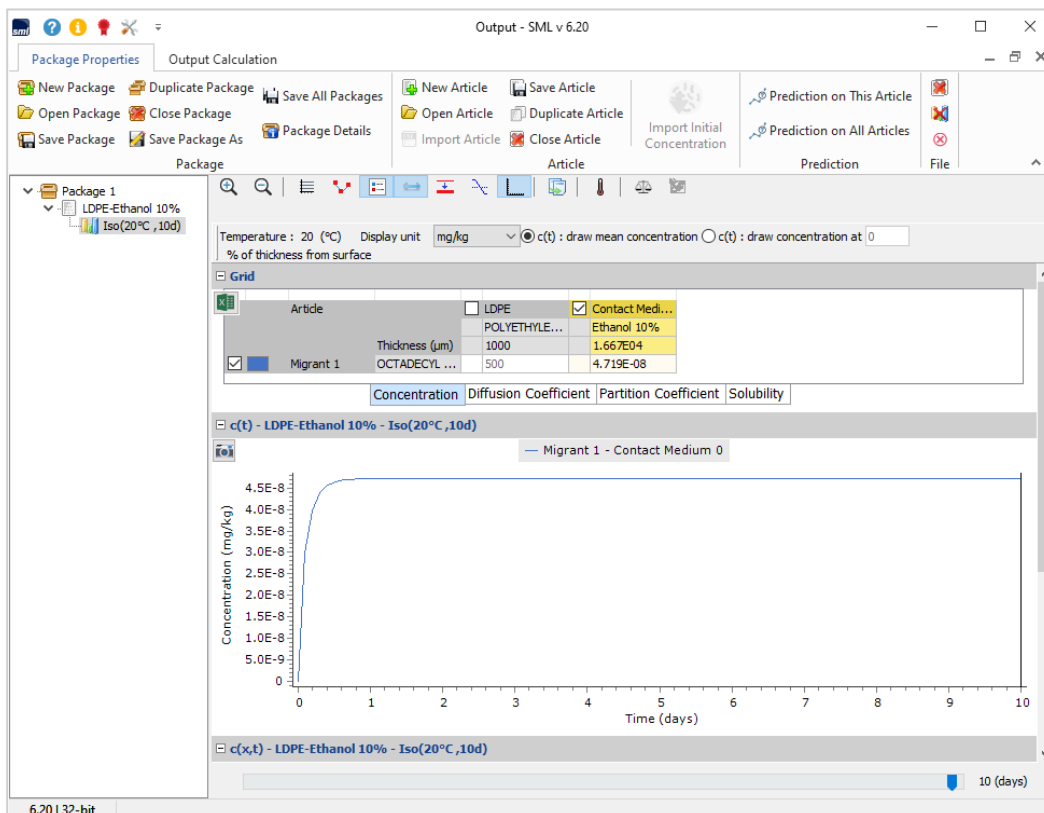
FIG. 2 - 等温条件下で発生する移行の予測（20°C で 10 日間）。

FIG. 3 - 接触媒体中の移行物質（オクタデシル 3-（3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニルプロピオネート）の濃度プロファイルは、時間の経過とともに、移行物質の食品疑似溶媒「エタノール 10%」への移行は見られません。
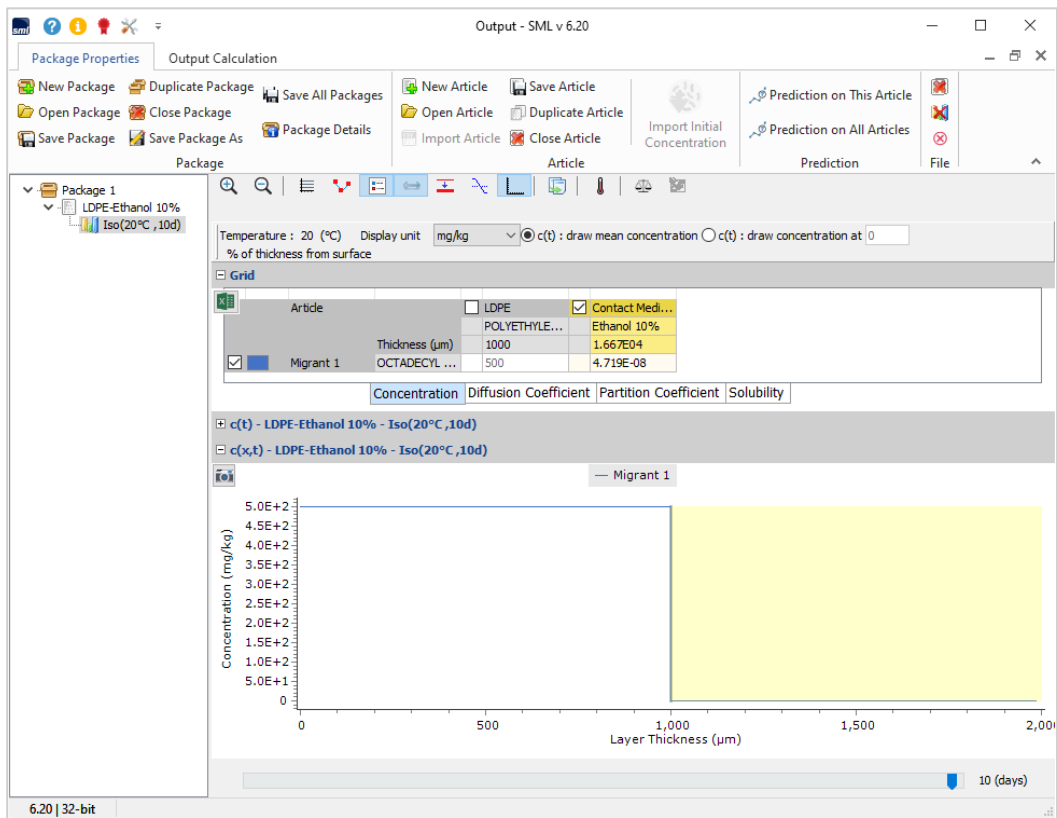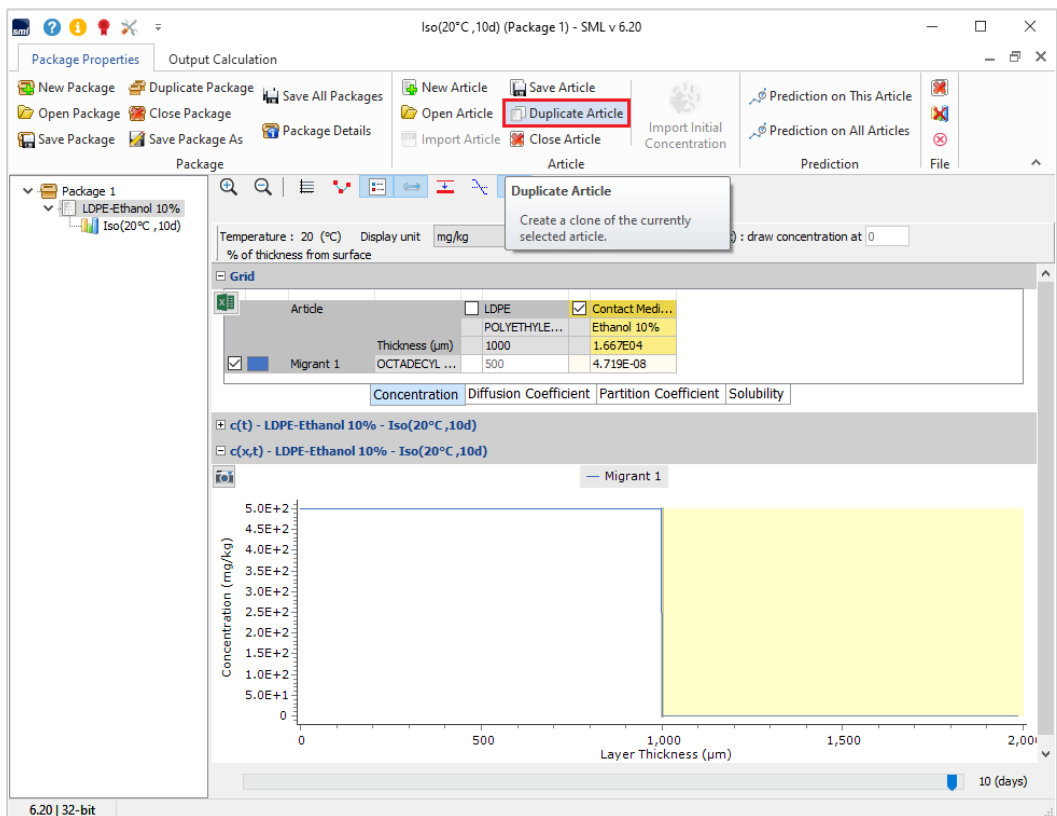
FIG. 4 - 層の厚さと時間にわたる移行物質の濃度プロファイル（食品疑似溶媒への移行なし）。

FIG. 5 - [品目の複製]オプションを適用して、新しいシミュレーションで品目のプロパティを変更します。
Duplicate Article は頻繁に使用する機能です。品目を複製した場合、後日に何を解析しようとしたか判るようにその都度その名称を丁寧に変更することが不可欠です。SML6 を効率的に使用する場合に非常に重要なことです。
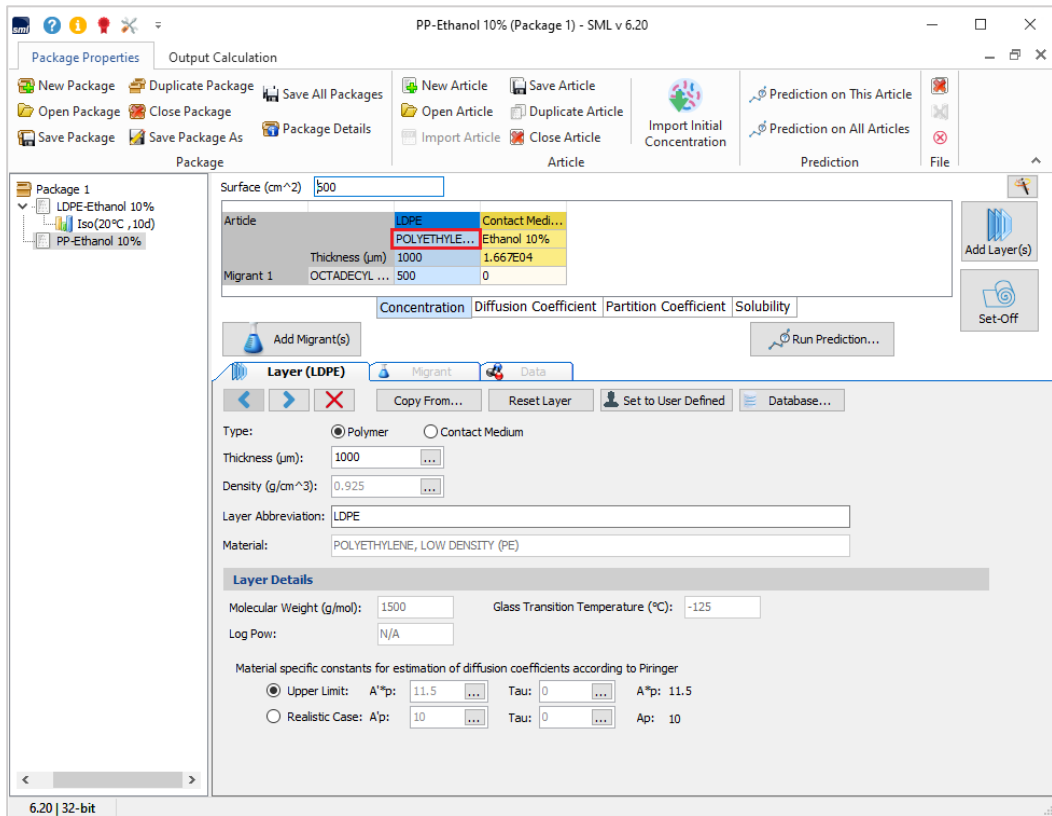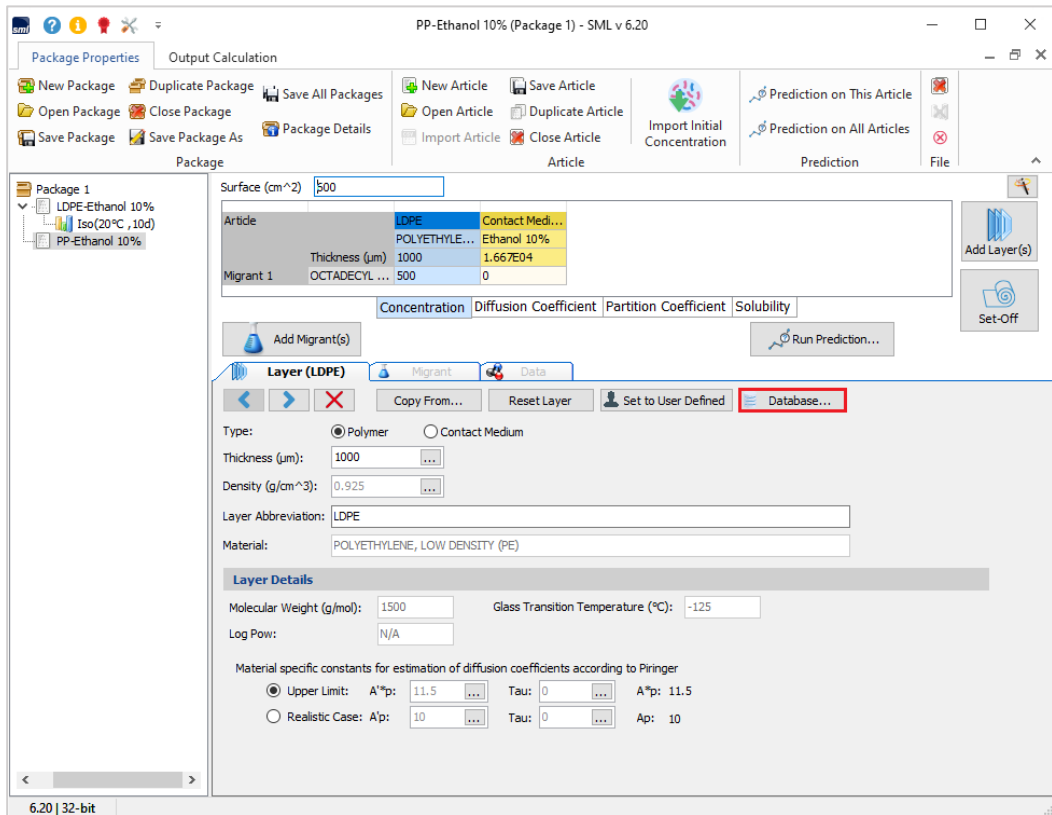
FIG. 6 - ポリマーレイヤーの選択

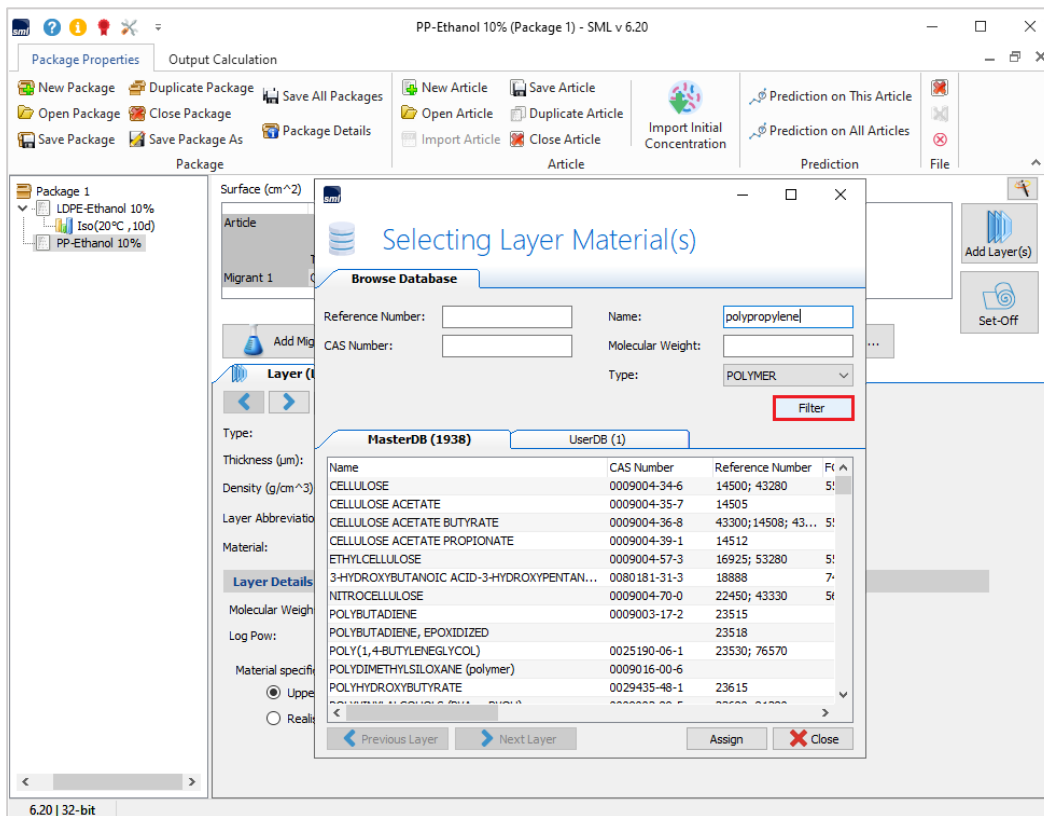**FIG. 7 -** ポリマーのデータベースから新しいポリマーの選択

FIG. 8 - ポリプロピレン(polypropylene)を入力　正しいスペルで入力すること。
解析に使用するポリマーの CAS.No 一覧表を事前に作成しておくことを推奨します。
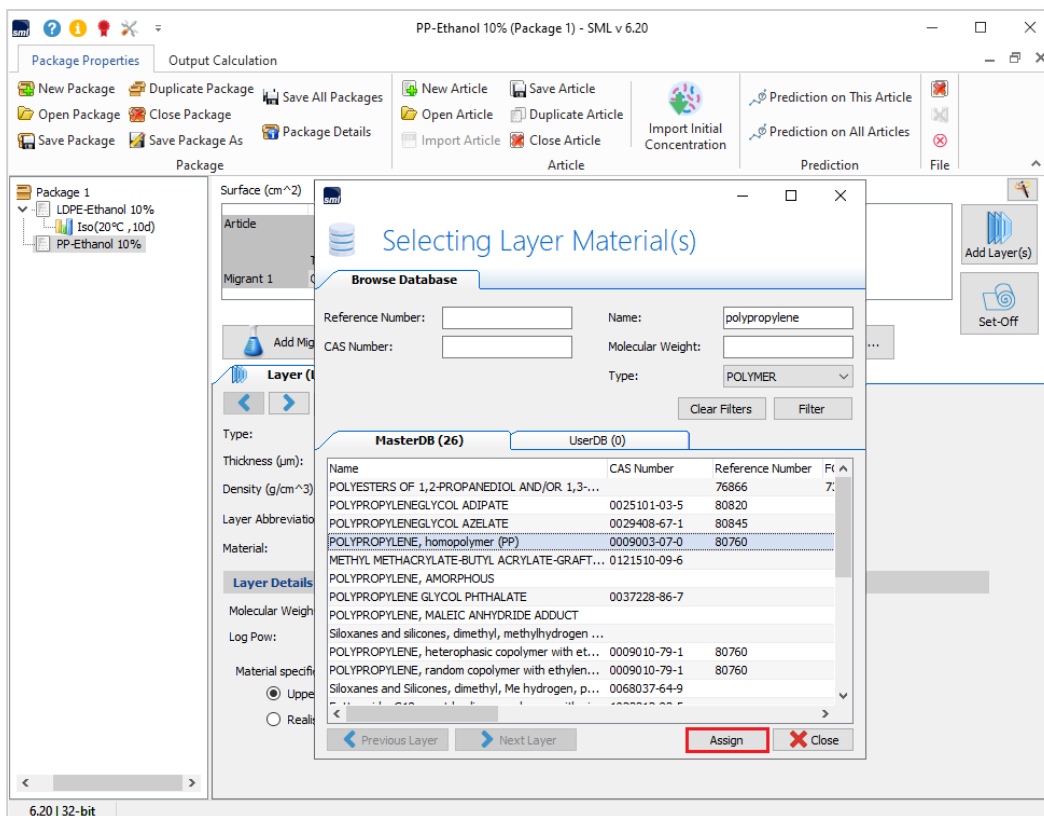

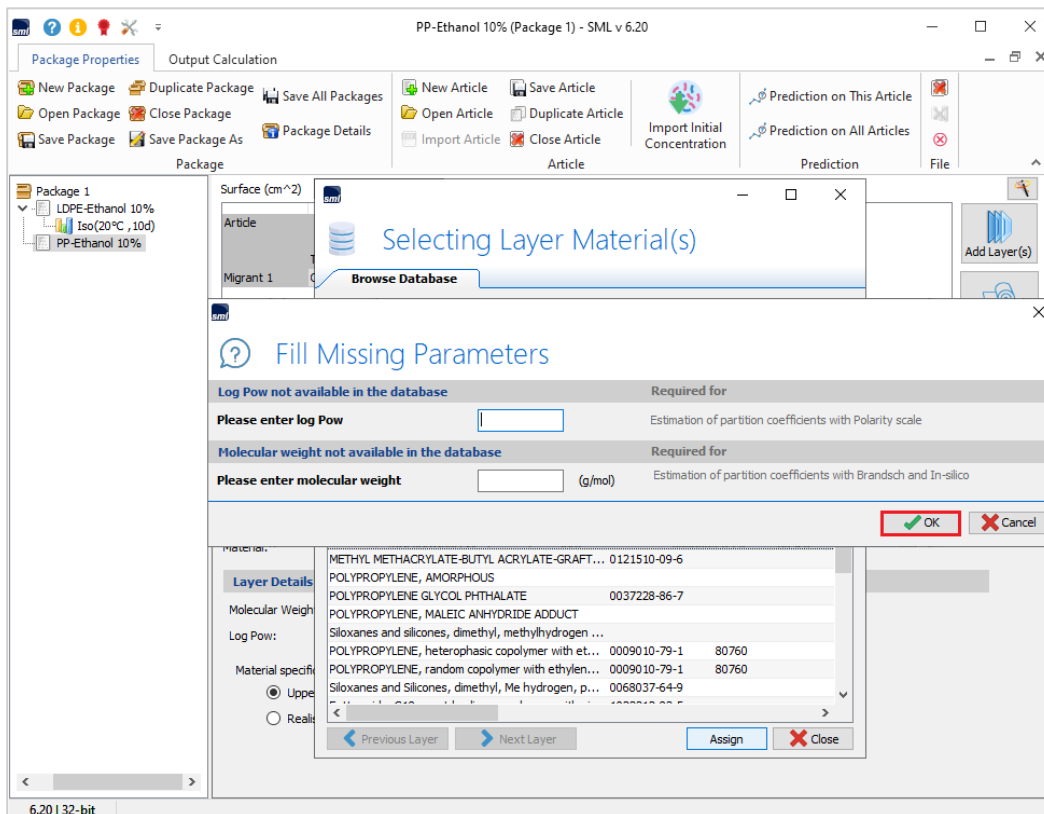**FIG. 9 -** Polypropylene を選択し、Assign をクリックします。

FIG. 10 - 入力されていないパラメータの入力が催促されます。
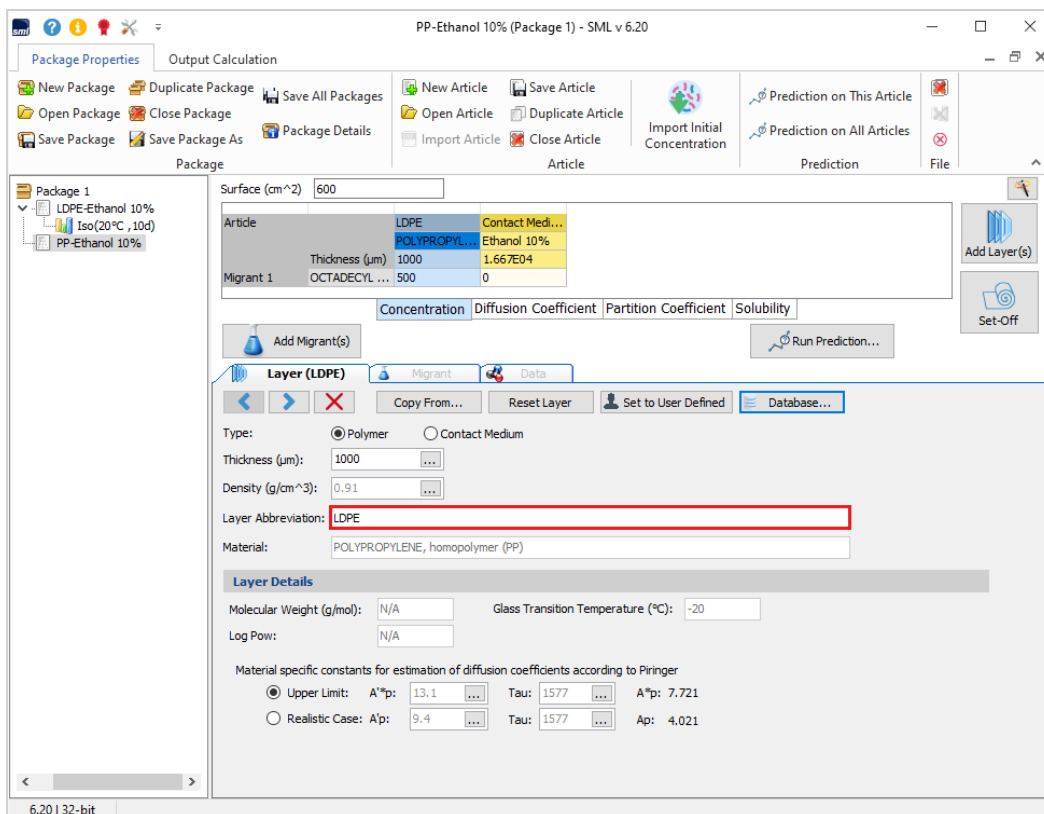入力されない場合、解析モードによっては解析が不可能な場合が出てきます。

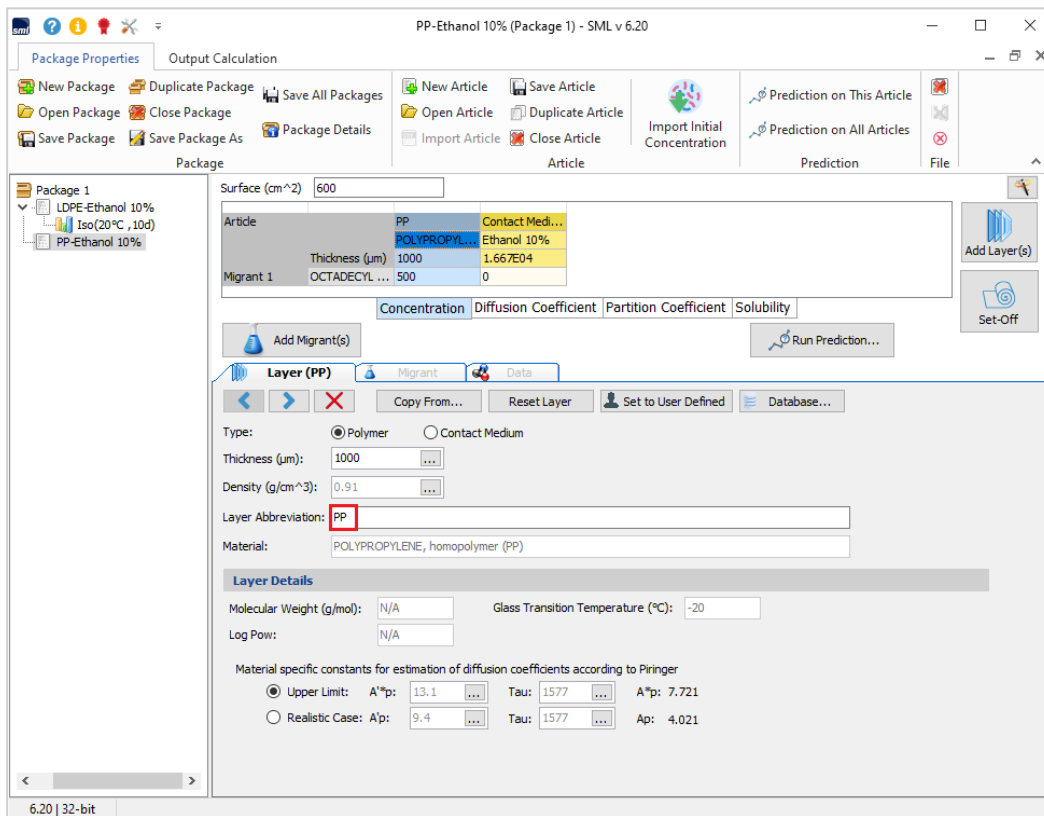**FIG. 11 -** ポリマーを変更する場合は、それに応じてレイヤーの略語を修正する必要があります。LDPE⇒PP へ
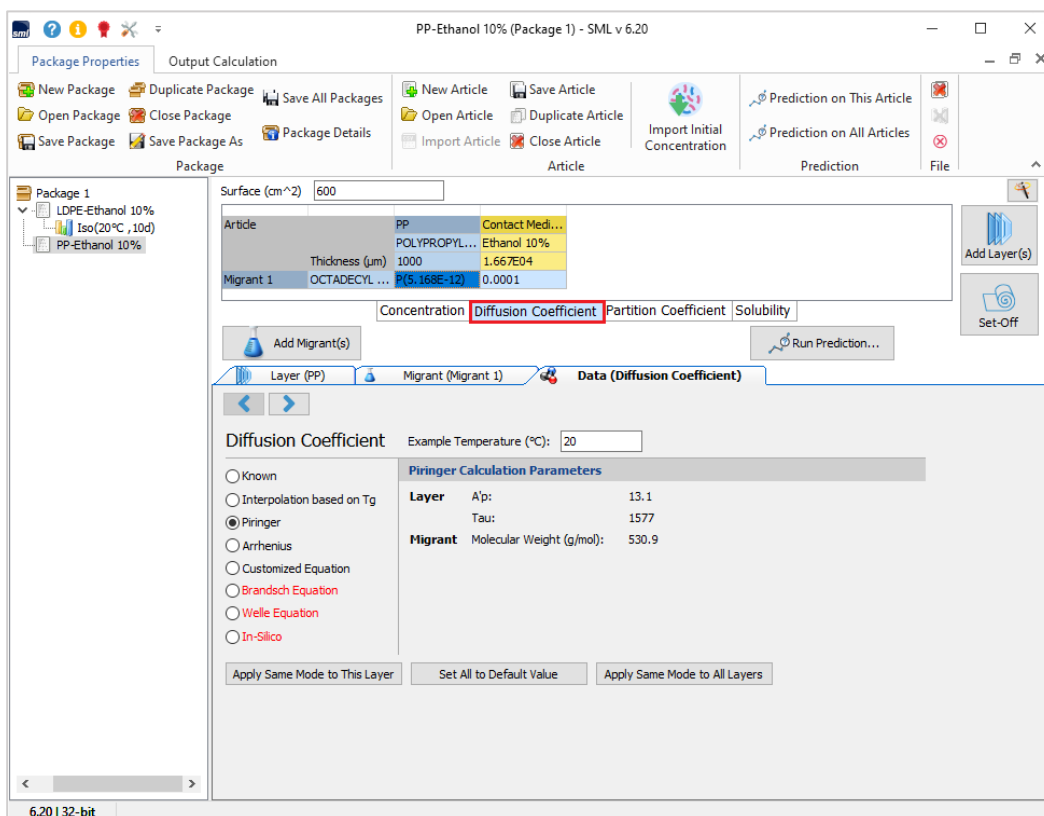
FIG. 12 - レイヤーの略語が PP に変更されました。

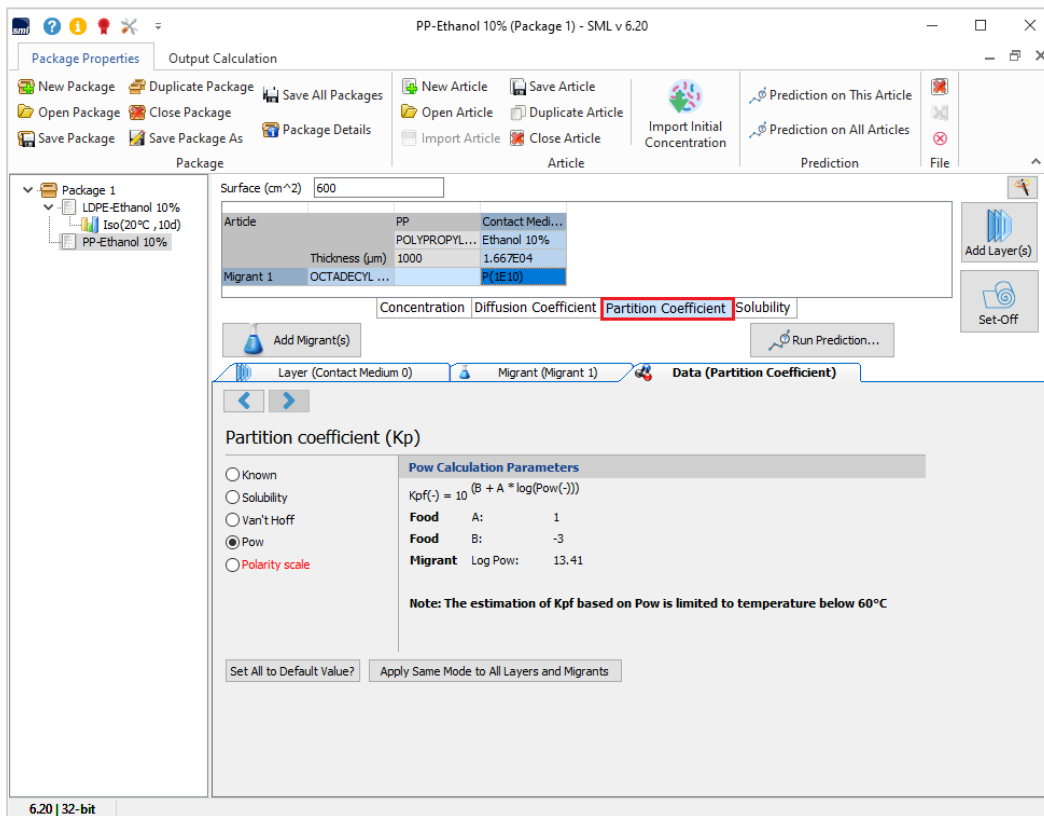**FIG. 13 -** 推定手順が利用できる場合、拡散係数は自動的に更新されます。
（赤で強調表示されている方法は、必要なパラメータが不足しているため選択できません）
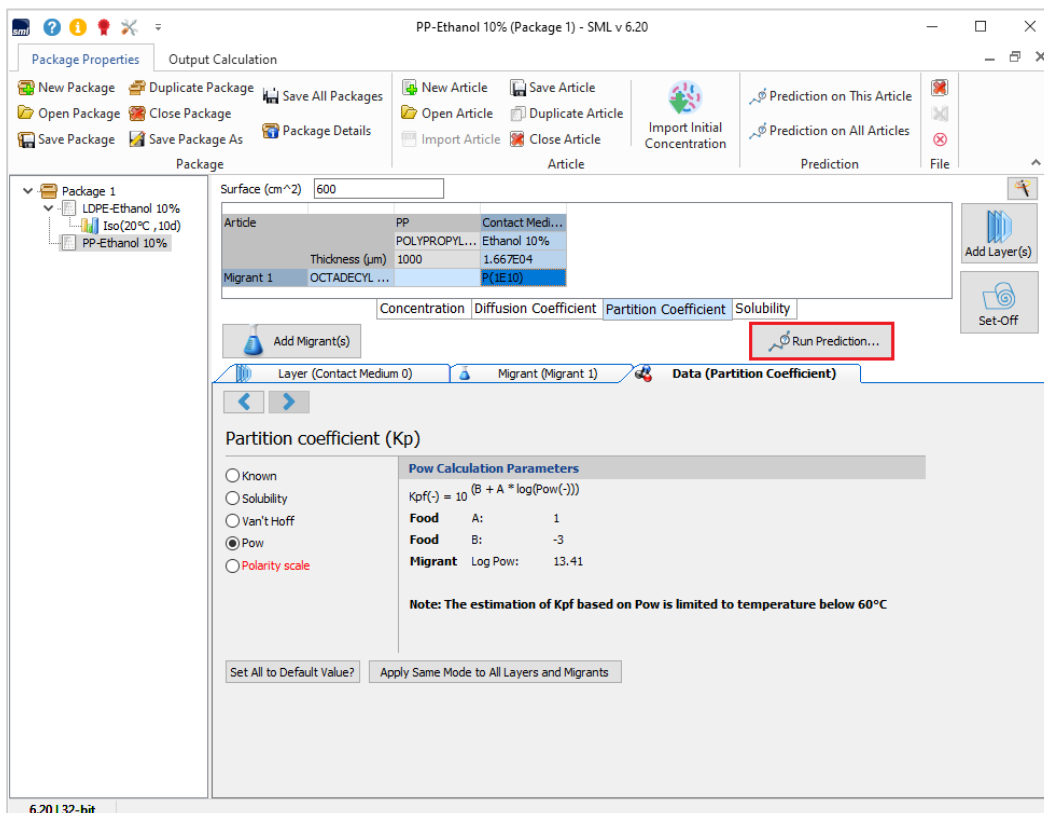
FIG. 14 - 推定手順が利用できる場合、分配係数も自動的に更新されます

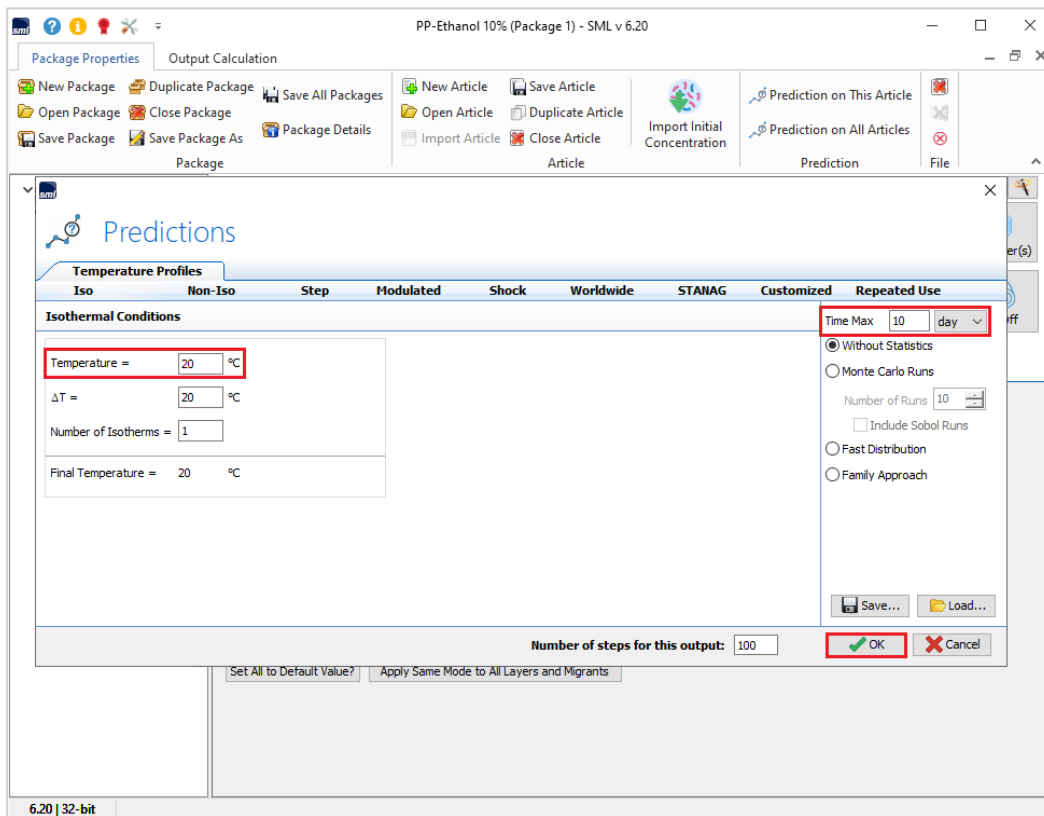
FIG. 15 - 移行の計算（[予測の実行]をクリックします）

FIG. 16 - 等温条件下（ここでは 20°C で 10 日間）の接触媒体への移行物質
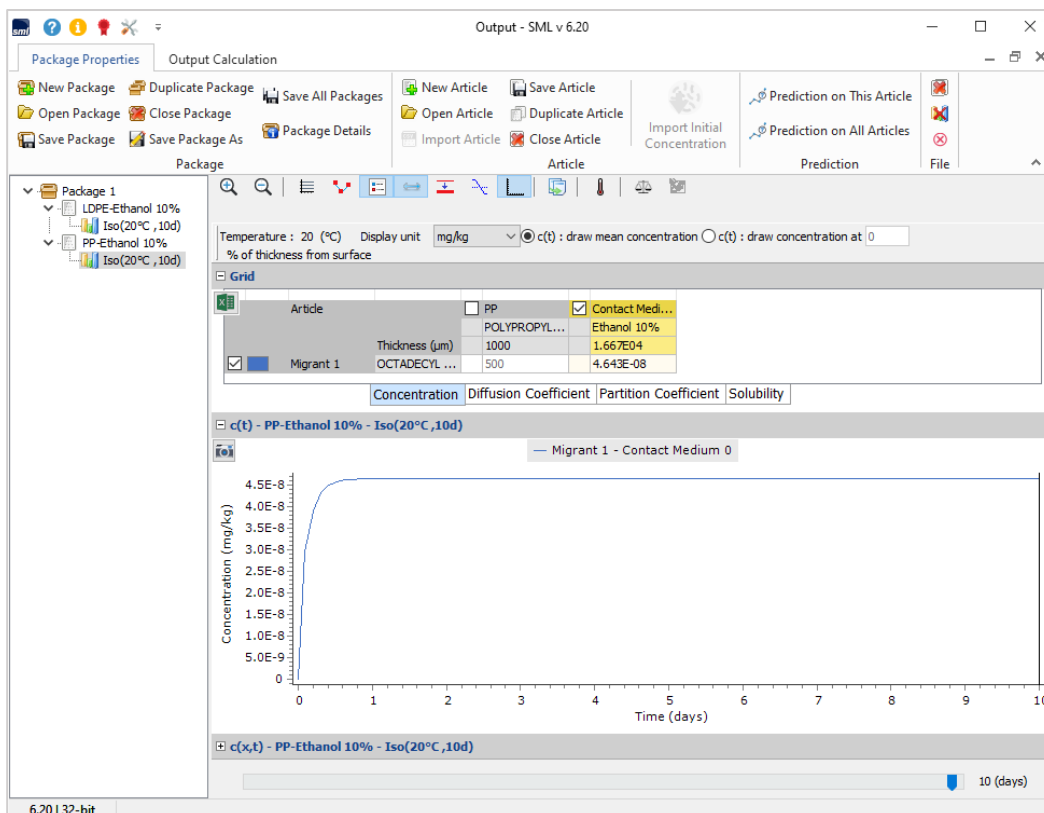（オクタデシル 3-（3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニルプロピオネート）) の移行量（溶出量）の予測。

FIG. 17 - 食品疑似溶媒「エタノール 10%」に対する経時的な移行（オクタデシル 3-（3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニルプロピオネート）) の濃度プロファイル。 食品疑似溶媒中の移行物質の濃度は 5E-8mg/kg 未満であることに注意してください。 移行が発生しないことを示します。
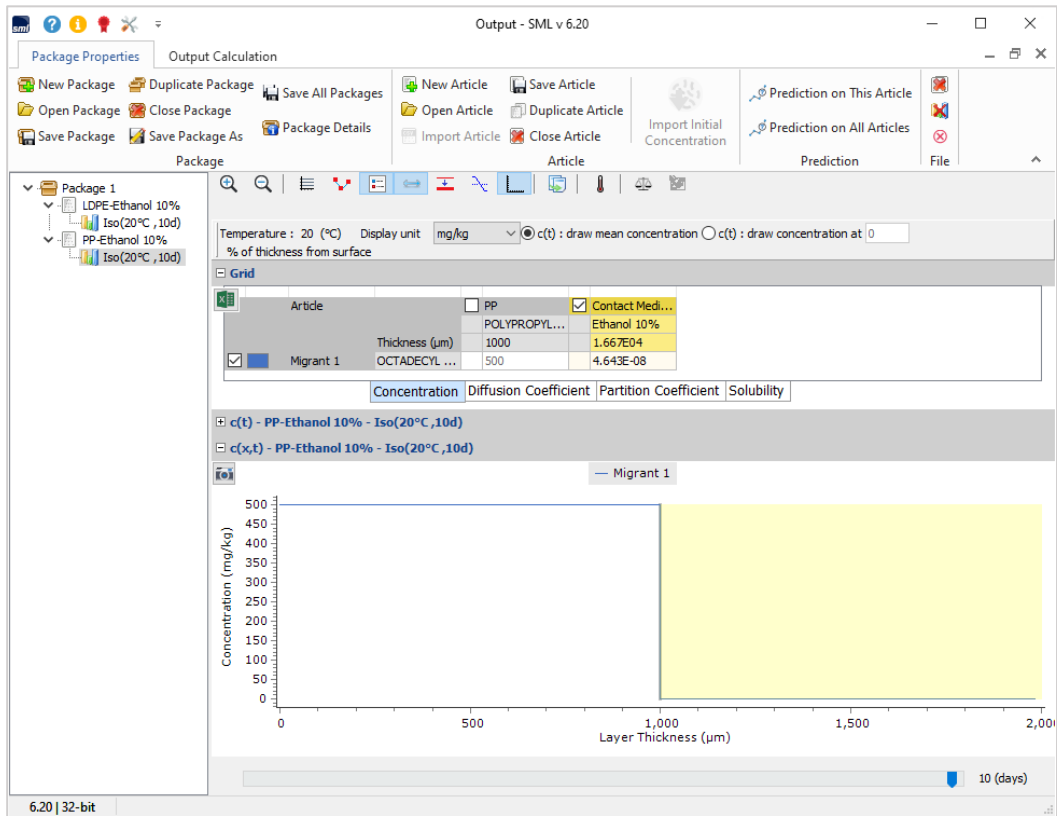
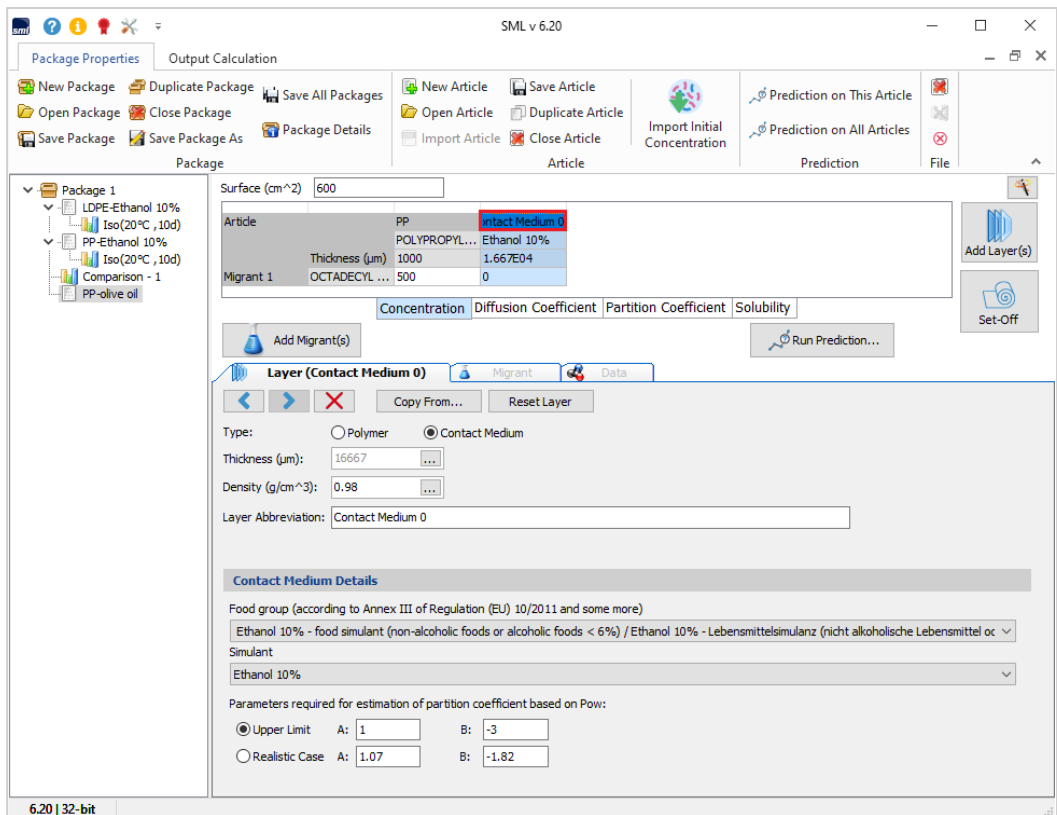**FIG. 18 -** 移行物質の濃度プロファイル（オクタデシル 3-（3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニルプロピオネート）層の厚さと時間にわたって、食品疑似溶媒への移行は観察されません。
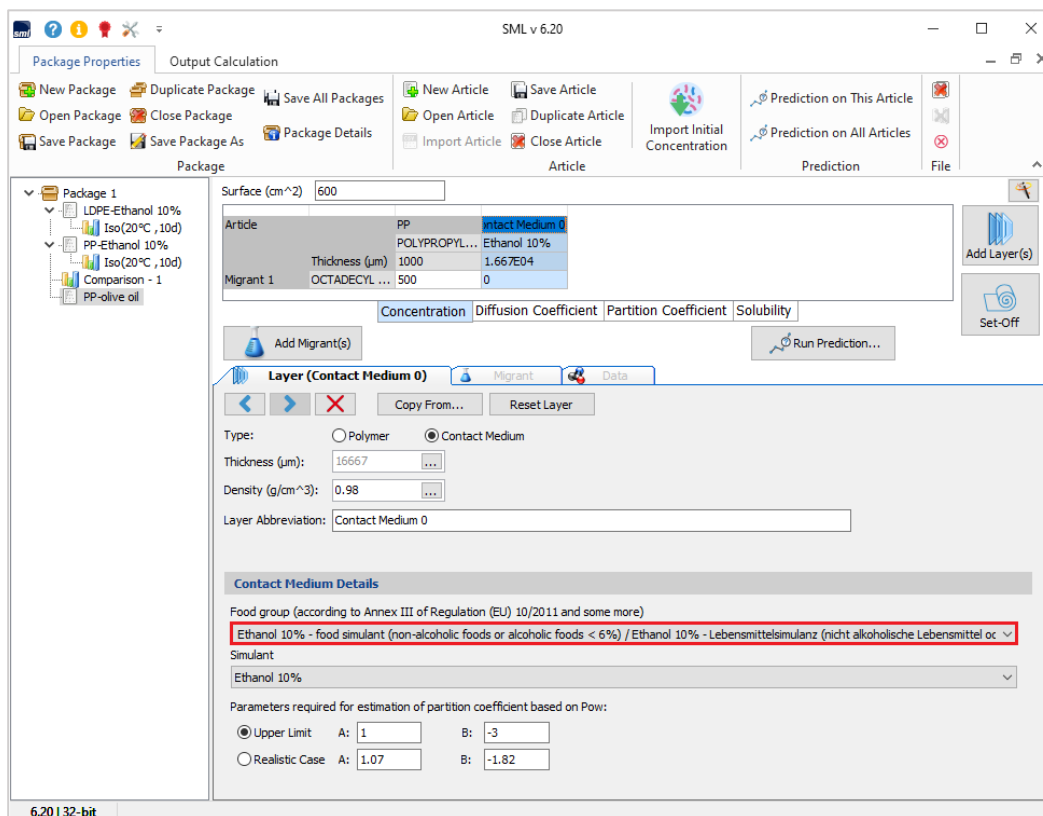

FIG. 19 - 接触媒体（食品疑似溶媒）の変更

FIG. 20 - 食品グループからの選択（現在の Contact Medium 接触媒体グループをクリックします）
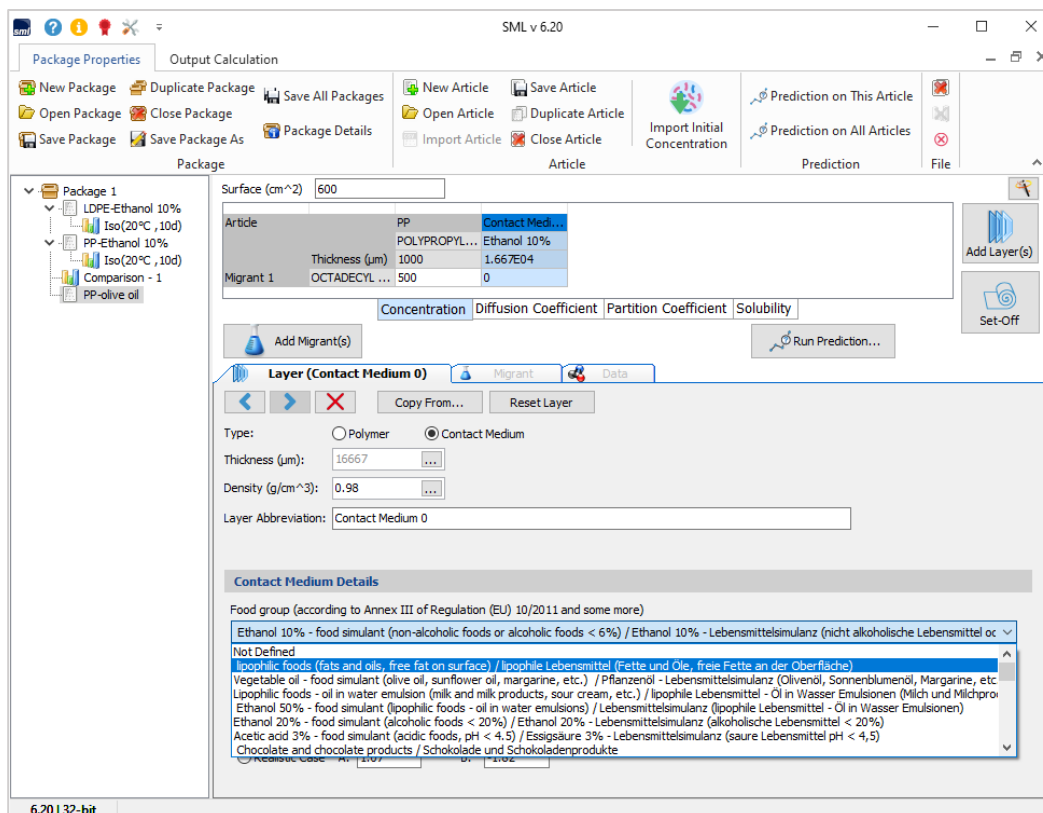注：Contact_Medium はデータベースが食品疑似溶媒　と食品グループの２種類に分けて登録されています。
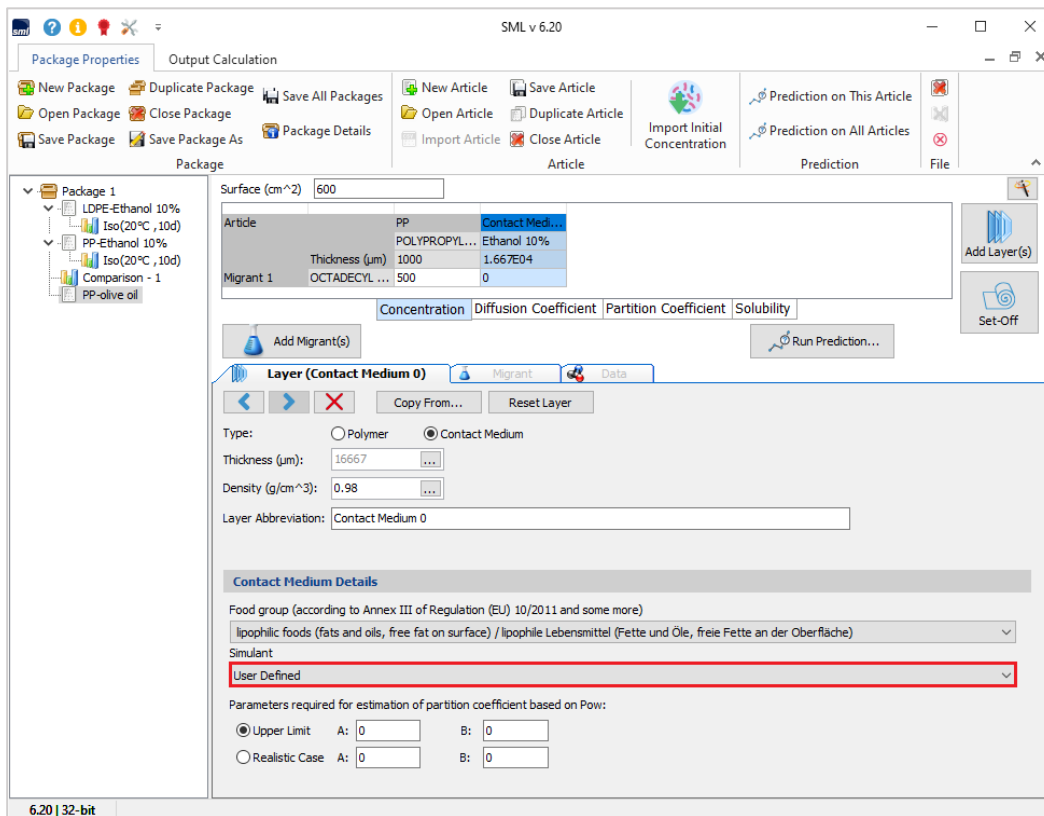

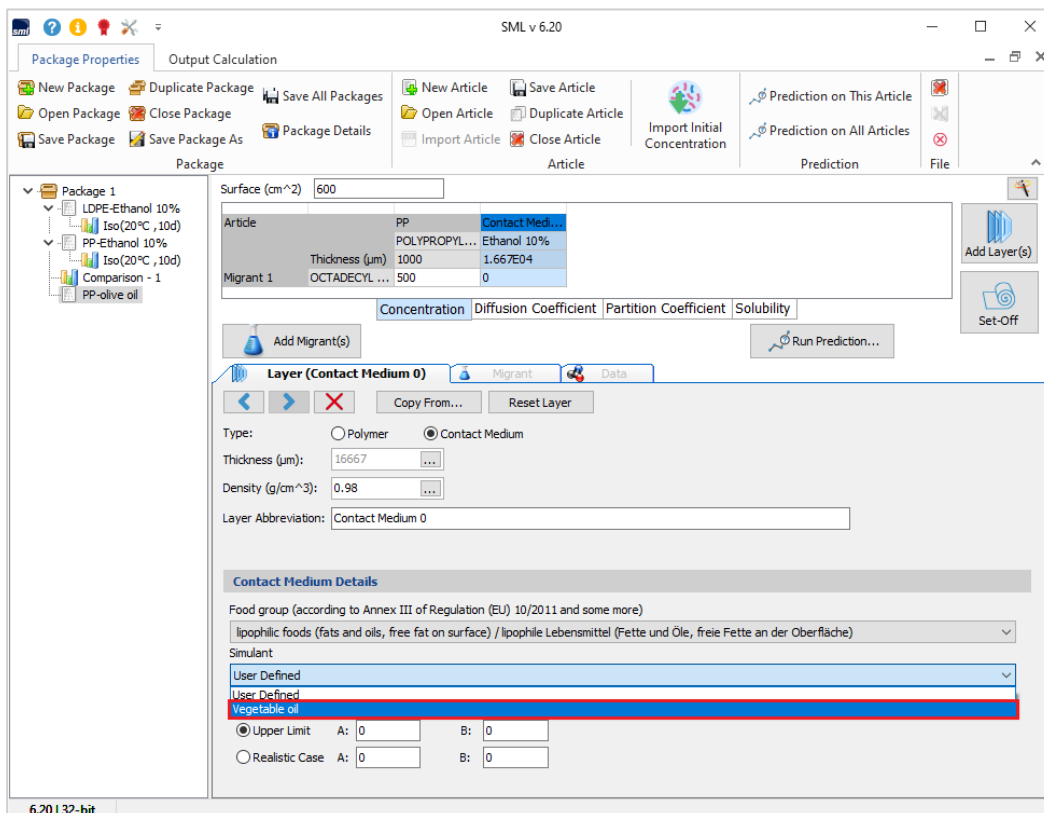**FIG. 21 -** 食品グループを「エタノール１０％」から「親油性食品」に変更します。

FIG. 22 - 食品疑似溶媒の選択

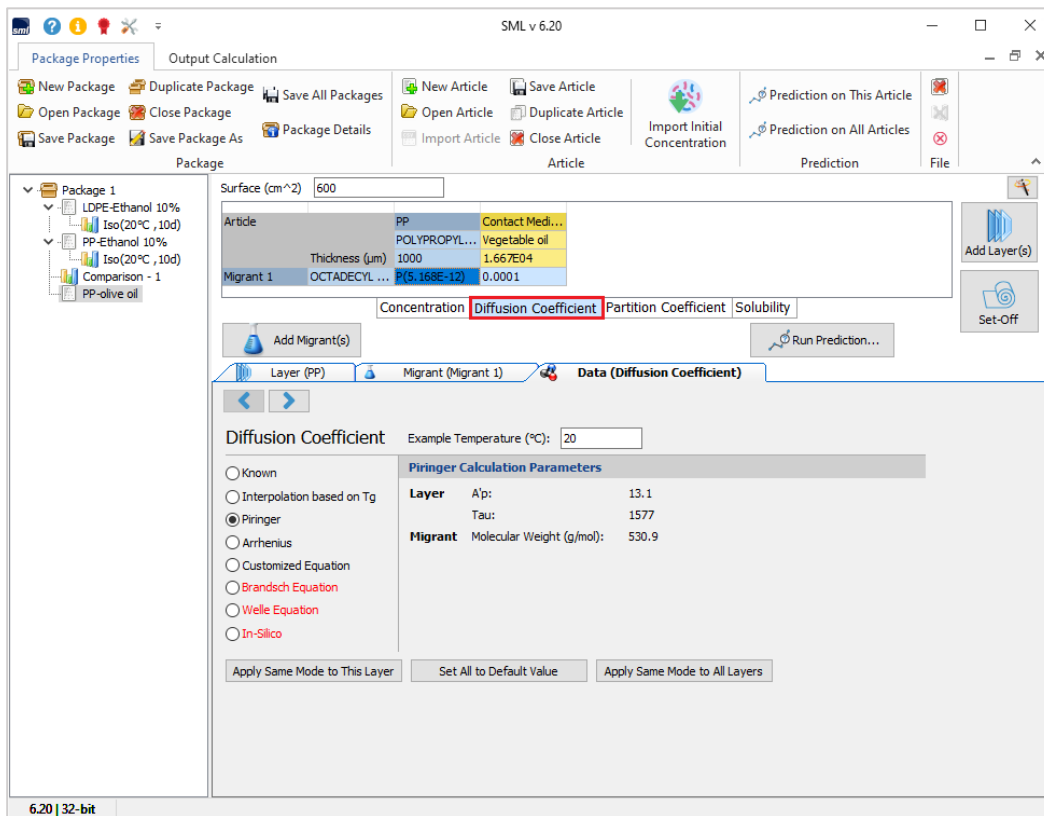**FIG. 23 -** 食品疑似溶媒として vegitable_oil を選択
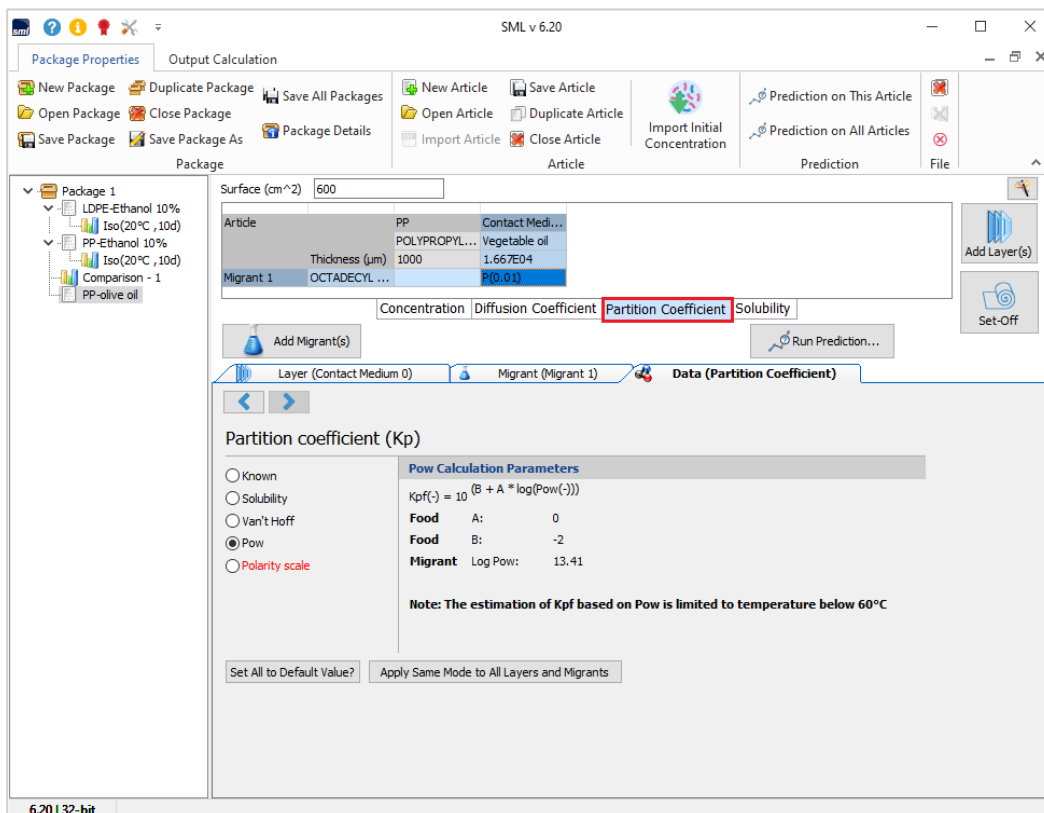
FIG. 24 – Piringer 法による拡散係数の評価。

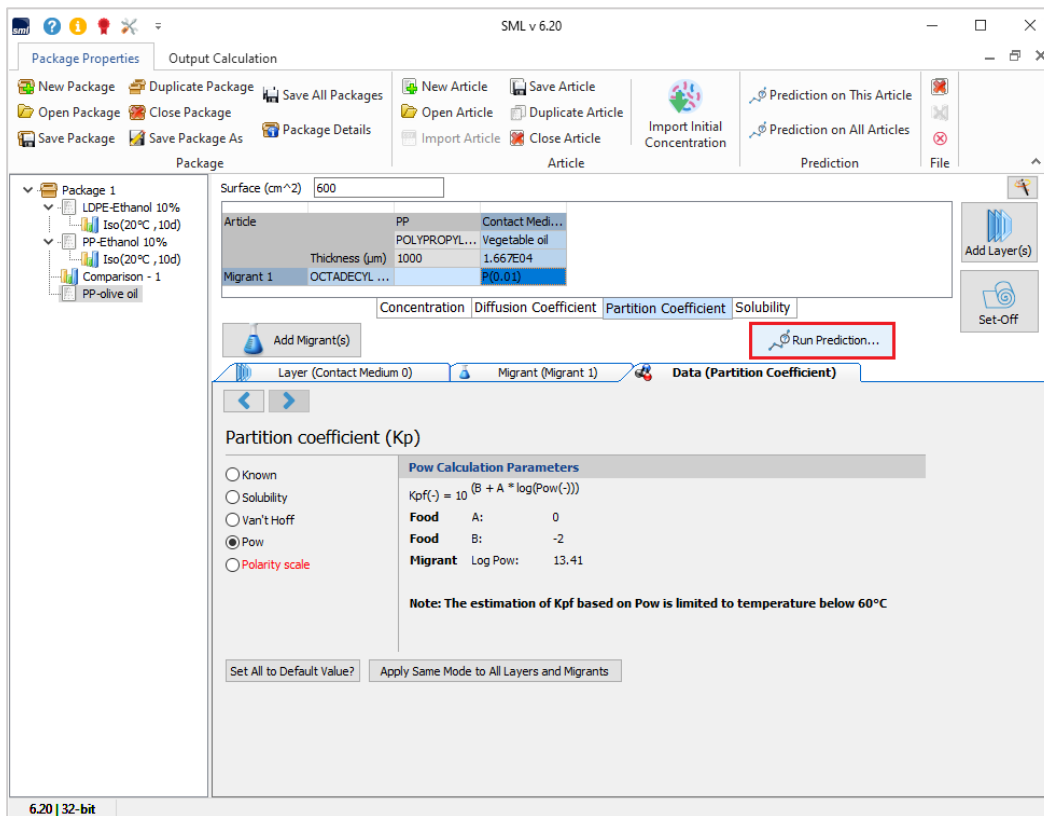**FIG. 25 –** オクタノール/水法による分配係数の評価
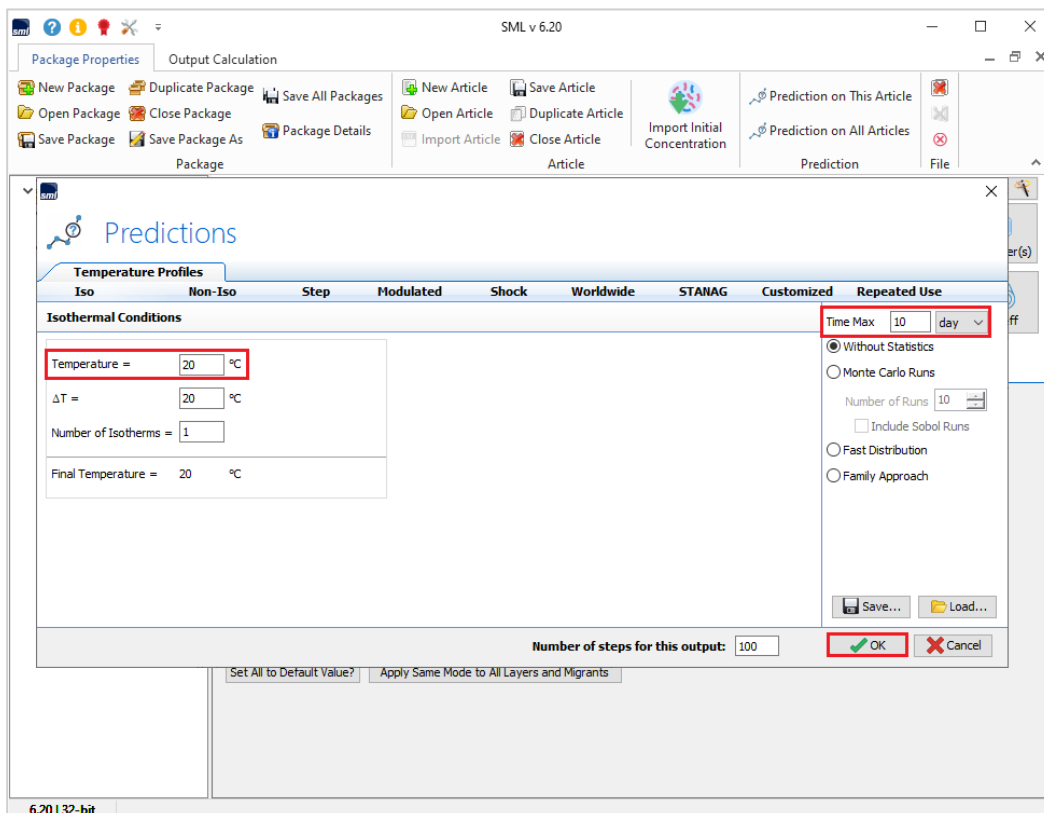
FIG. 26 - 移行の計算（[予測の実行]をクリックします）

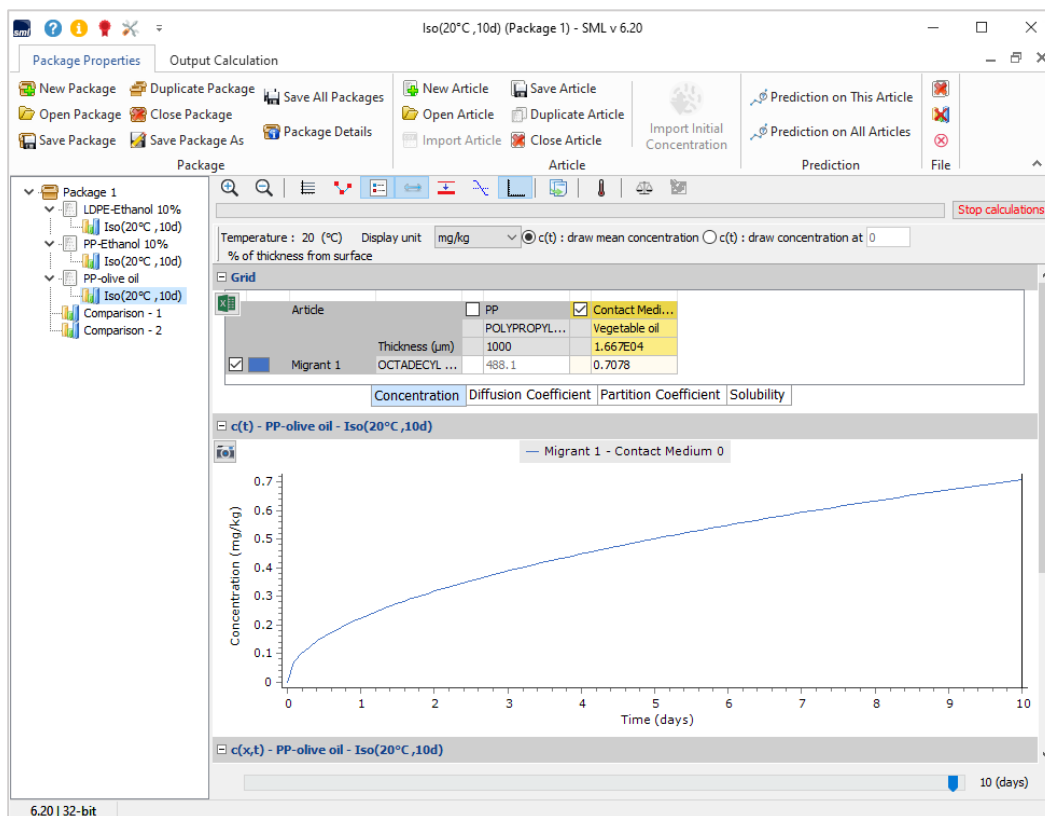**FIG. 27 -** 等温条件下での移動の予測（ここでは 20°C で 10 日間）。

FIG. 28 - 植物油中のプロピオン酸オクタデシル 3-（3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル）の経時的な移行プロファイル
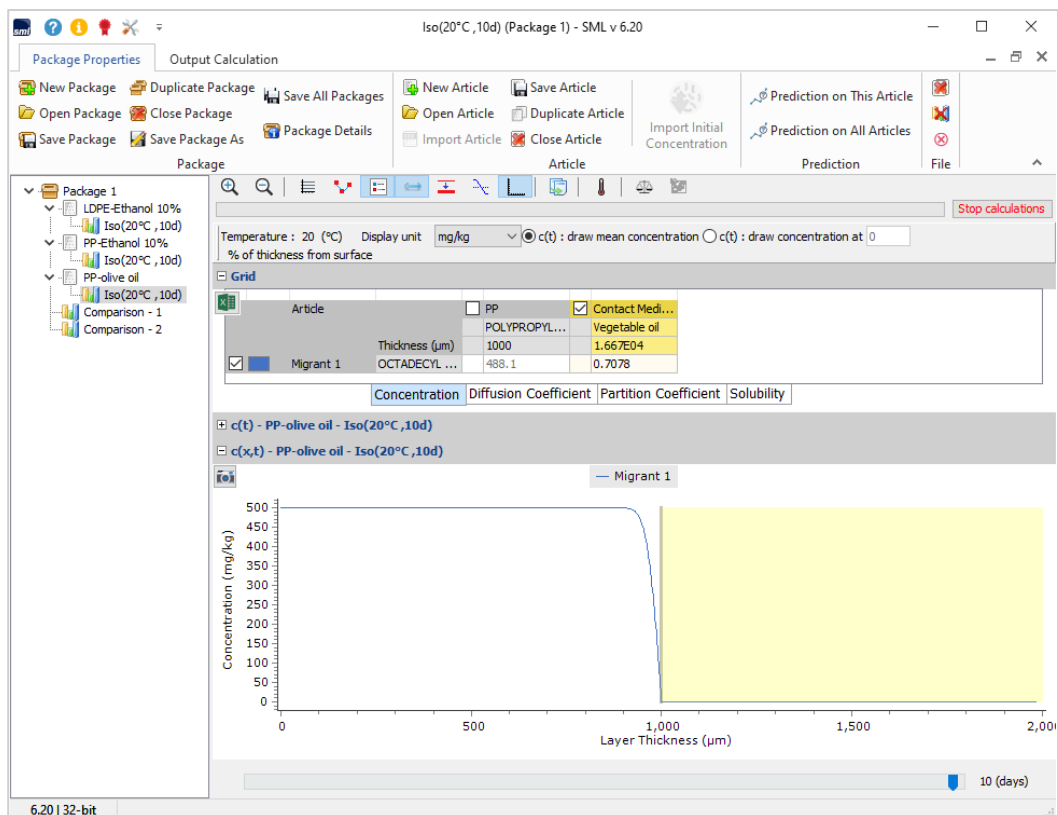

FIG. 29 - 「植物油」中の層の厚さと時間にわたるプロピオン酸オクタデシル 3-（3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル）の移行プロファイル。表示された予測は、「親油性食品」で移行が発生することを示しています。

結果/コンプライアンス証明書

出力ウィンドウには、シミュレートされた予測の結果が表示されます。
次の結果が表示される場合があります。

- ▶ 結果グリッド
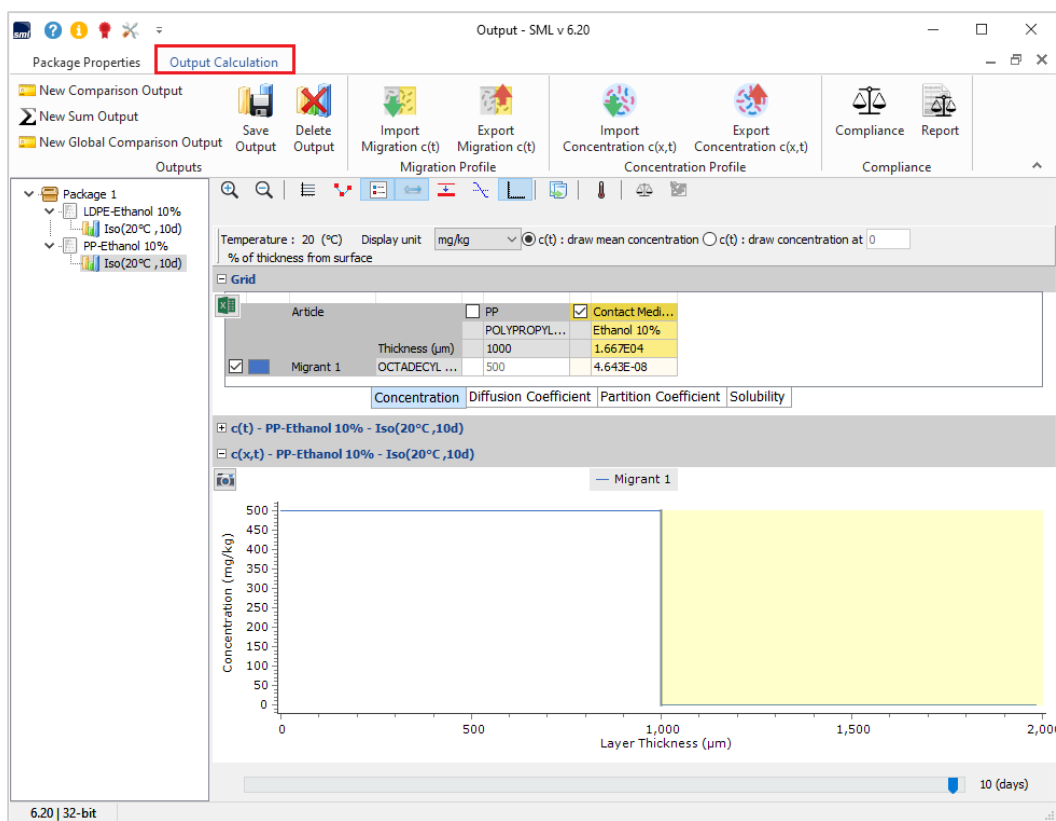- ▶ c（t）チャート
- ▶ c（x、t）チャート
- ▶ 比較出力
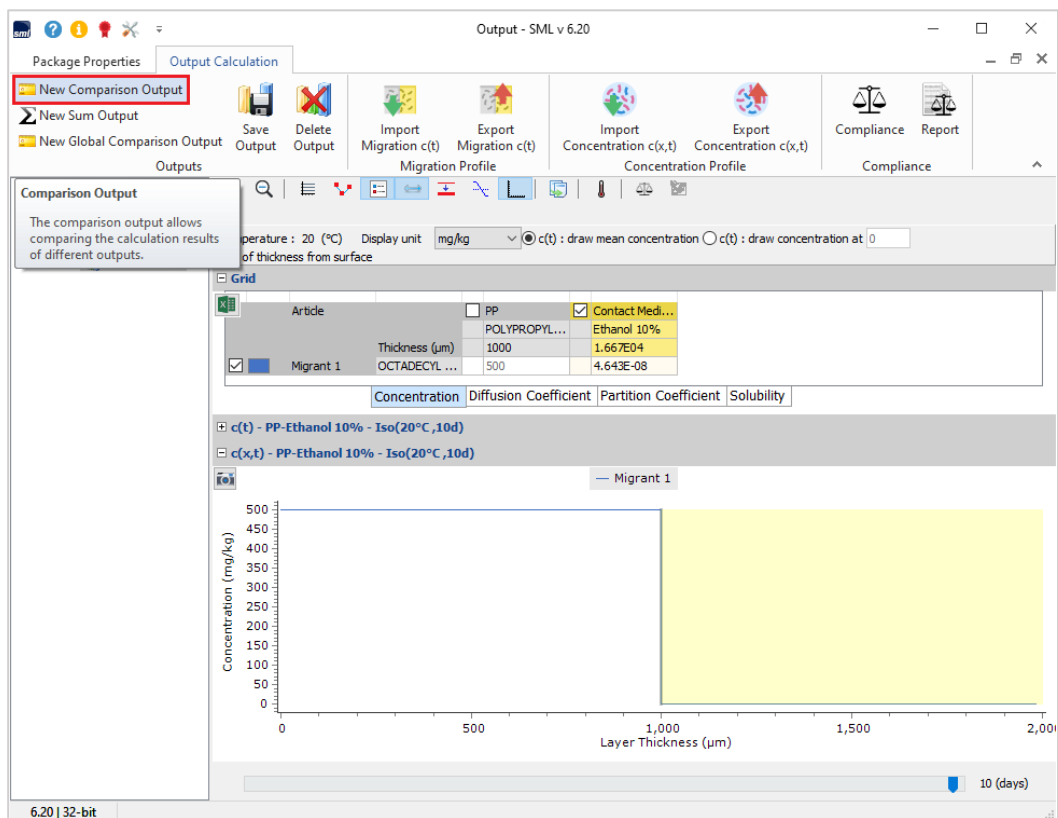- ▶ 合計出力
- ▶ コンプライアンス証明書

FIG. 1 - 「出力計算」を選択します。

FIG. 2 - 「比較出力」により、次の移行プロファイル間の比較が可能になります。
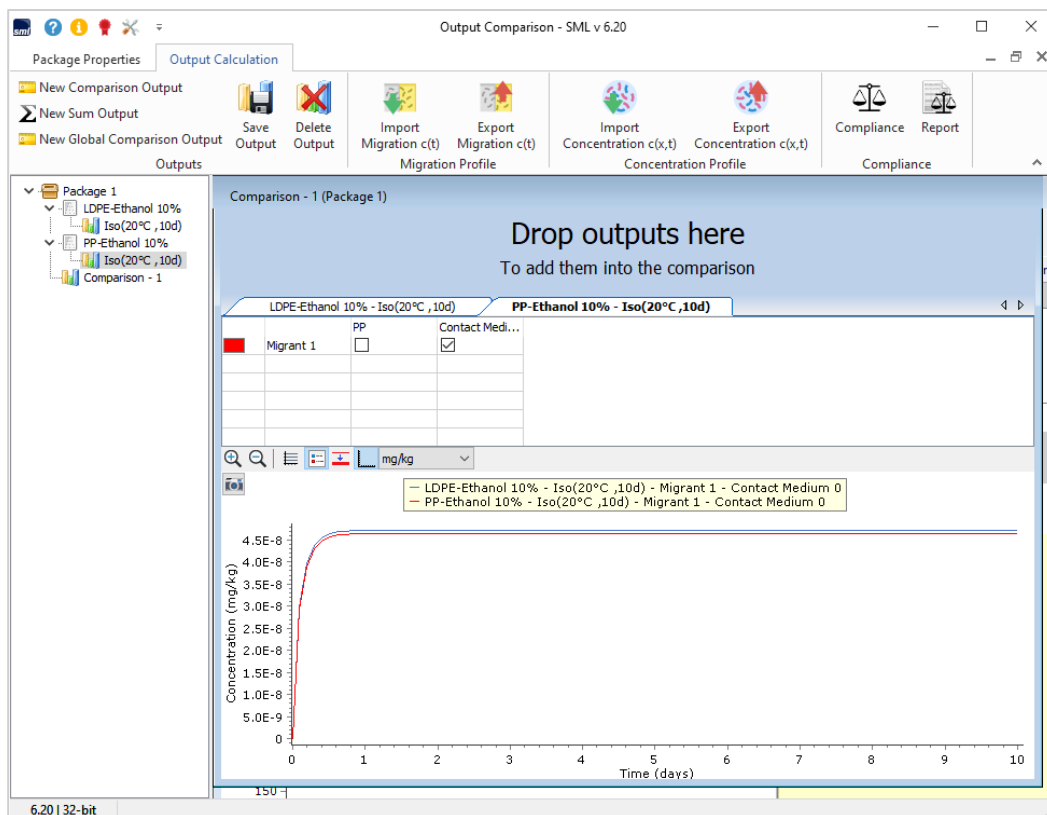「LDPE」と「PP」の層に含まれるプロピオン酸オクタデシル 3-（3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル）。

FIG. 3 - 移行計算結果は、両方のポリマー（「LDPE」と「PP」）
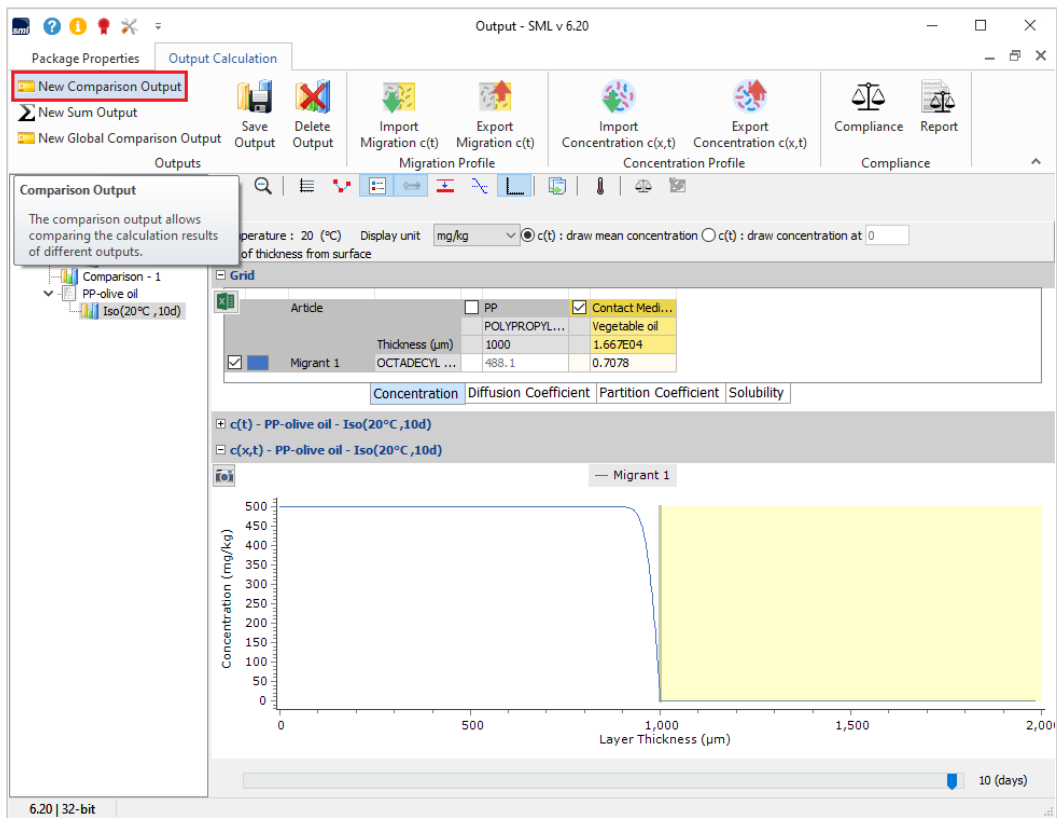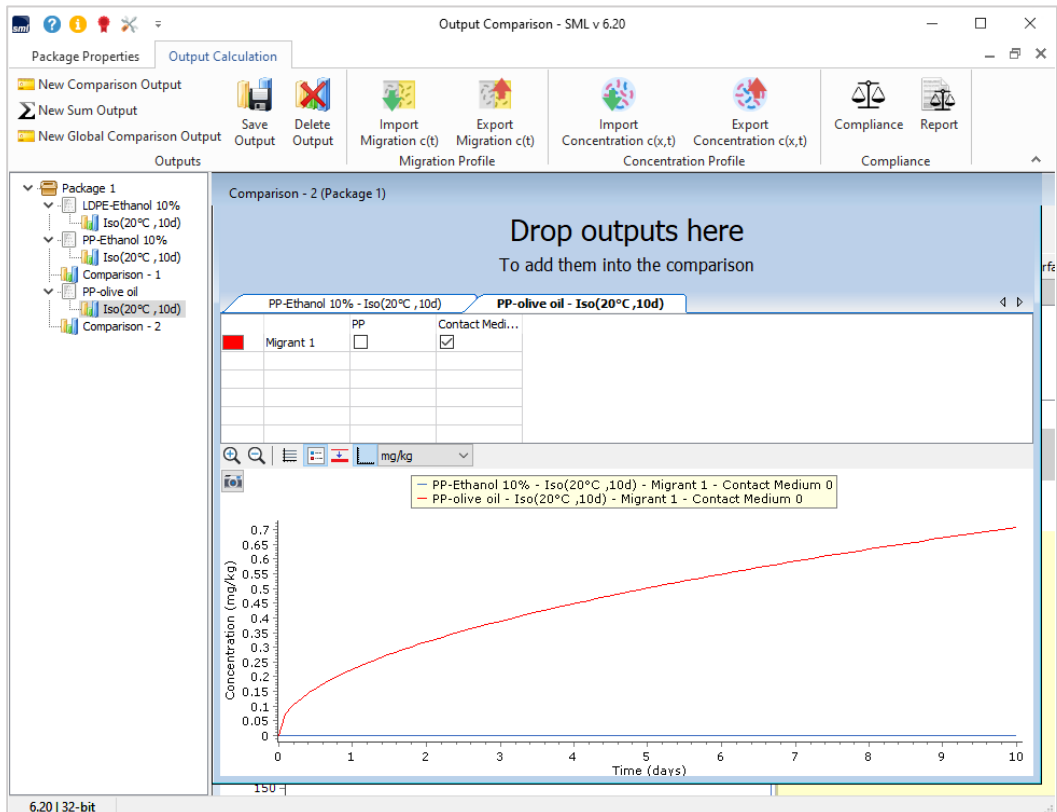から食品疑似溶媒「エタノール10%」への移行物質の移行を　示していません。

FIG. 4 - 比較出力の選択。

FIG. 5 - 「植物油」（赤）と「エタノール 10%」（青）の経時的な移行プロファイル。
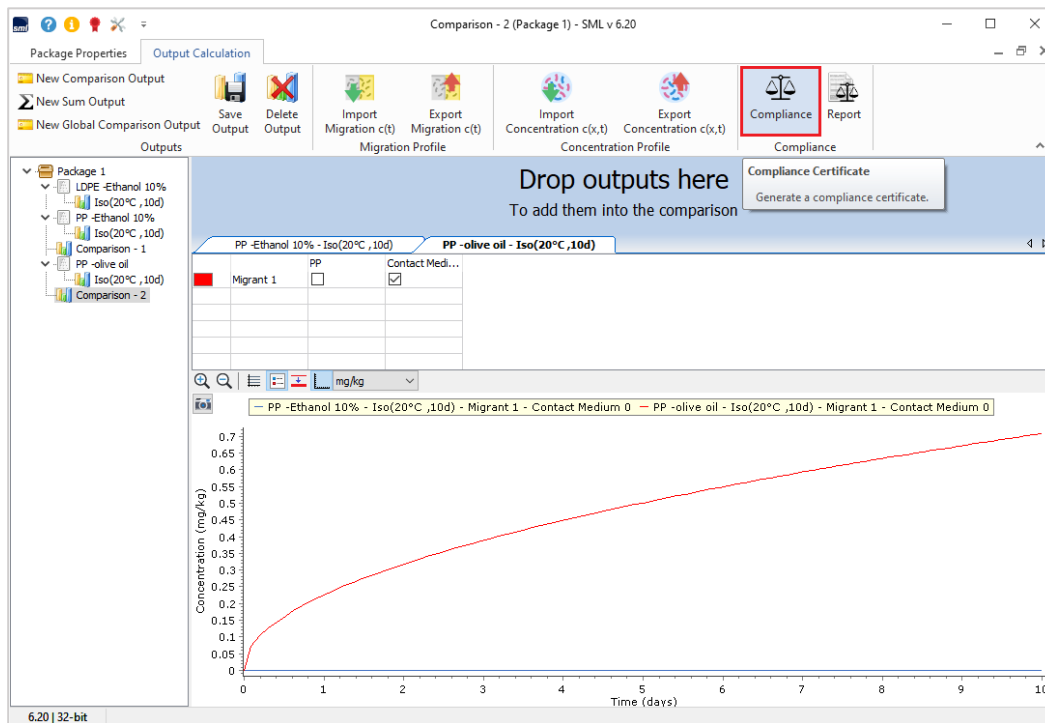エタノール溶液では移動は観察されません。

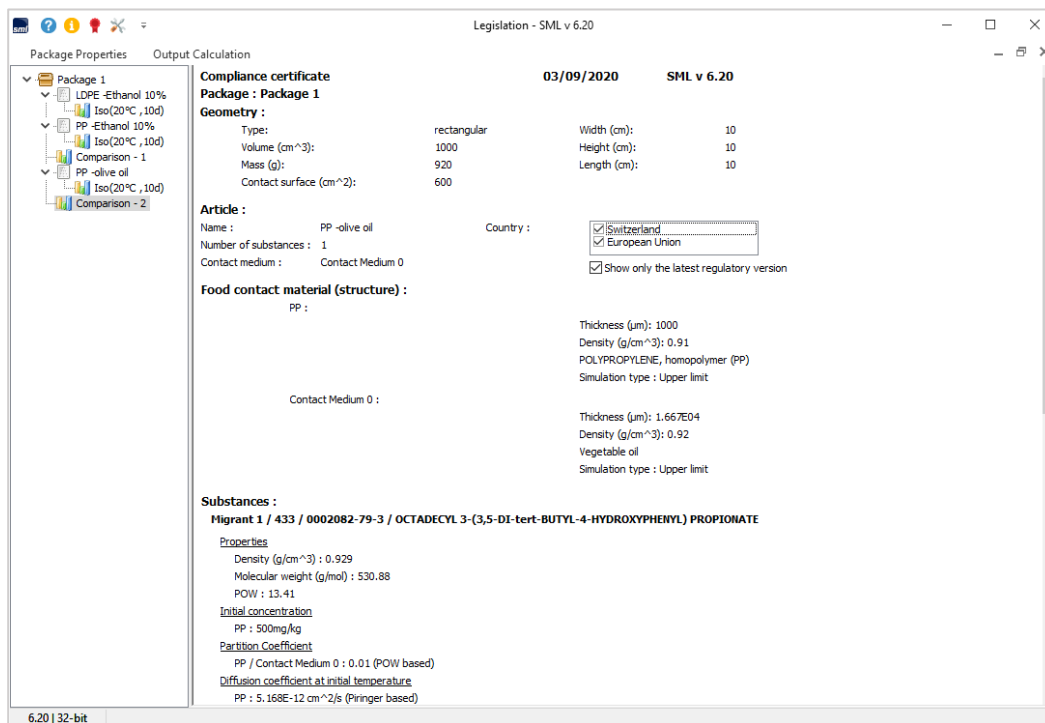**FIG. 6 -** [Compliance]をクリックして、法律の適合性に従ってコンプライアンス証明書を生成します。

FIG. 7 - システムのコンプライアンス証明書：
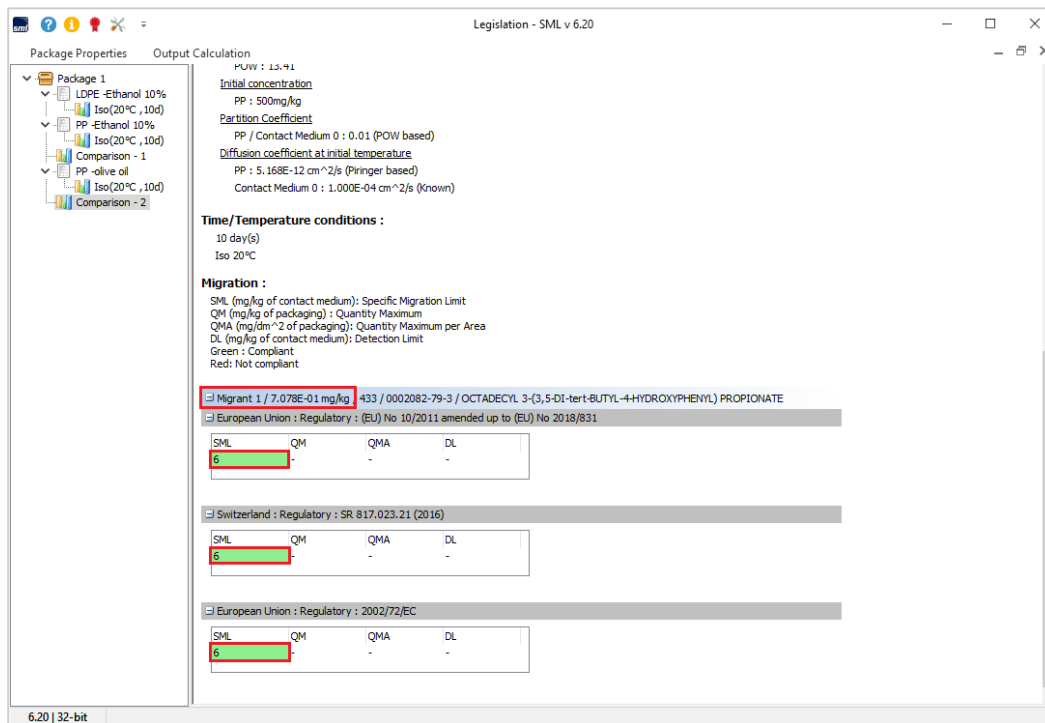ポリプロピレン-オリーブオイル-オクタデシル 3-（3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル）プロピオネート。

FIG. 8 - 適合証明書：移行計算（7.078e-01 mg / kg）と食品規制（SML：6 mg / kg）
の比較は赤でマークされています。
緑色は、特定の移行制限を超えていないことを示します。