Application note
AKTS-SML6 Software 操作トレーニング
MR-PETの移行モデル”Cmod”による汚染度算定

2024_04_06_kmj03

Palmetrics

Application note

– Calculation of modelled Cmod contamination in recycled PET
再生PETの移行モデル”Cmod”による汚染度算定

Summary

In the European Union, the safety evaluation of a PET recycling process is performed by comparing the *residual concentration* of each contaminant in recycled PET (Cres) to a *modelled concentration* (Cmod) in PET [1].
This Cmod is calculated using generally recognized conservative migration models and it corresponds to a migration which cannot give rise to an unsafe dietary exposure

欧州連合では、PETリサイクルプロセスの安全性評価は、リサイクルPET(Cres)中の各汚染物質の残留濃度はPETの移行モデルによる推定濃度(Cmod)と比較することによって行われます[1]。

このCmodは、一般的に認識されている保守的な移行モデルを使用して計算され、危険な飲食による曝露を引き起こさない移行量に対応しています。

This application note describes how to apply the AKTS-SML software to calculate Cmod for a contaminant used in a challenge test performed for the determination of the cleaning efficiency.

このアプリケーションノートでは、*AKTS-SML*ソフトウェアを適用して、洗浄効率を決定するために実行されるチャレンジテストであり、使用される汚染物質の*Cmod*を計算する方法について説明します。

[1] EFSA Panel on food contact materials, enzymes, flavourings and processing aids (CEF); **Scientific Opinion on the criteria to be used for safety evaluation of a mechanical recycling process to produce recycled PET intended to be used for manufacture of materials and articles in contact with food**. EFSA Journal 2011;9(7):2184. [25 pp.] doi:10.2903/j.efsa.2011.2184.
1] 食品接触材料、酵素、香料、加工助剤(CEF)に関するEFSAパネル。食品と接触する材料や物品の製造に使用されることを目的としたリサイクルPETを製造するためのメカニカル・リサイクルプロセスの安全性評価に使用される基準に関する科学的意見。EFSAジャーナル2011;9(7):2184. [25ページ] DOI: 10.2903/j.efsa.2011.2184.

AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

Evaluation principles

Migration criterion

In the safety evaluation, EFSA considers that a contaminant present in recycled PET should not give rise to a migration in food which could result in a dietary exposure higher than 0.025 µg/ kg bw/day.

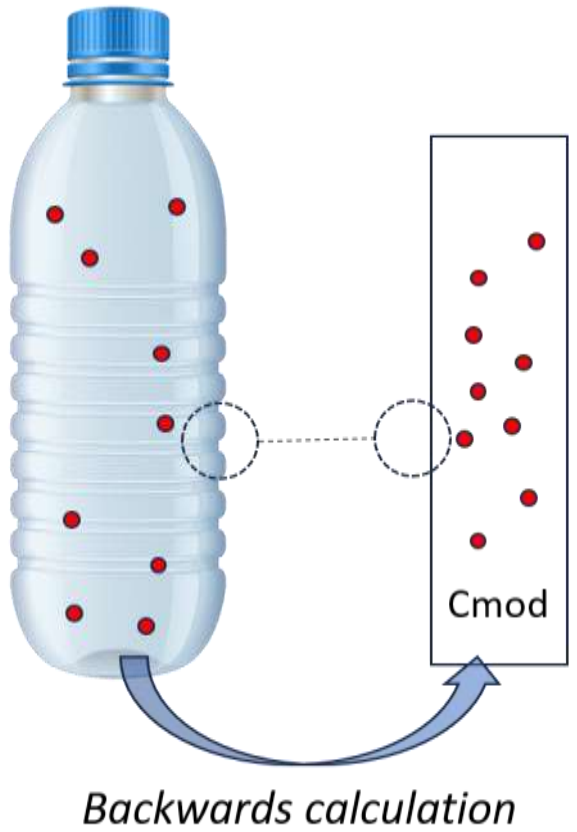
安全性評価において、EFSAは、リサイクルPETに存在する汚染物質が、0.025µg/kg体重/日を超える食事曝露をもたらす可能性のある食品の移行を引き起こすべきではないと考えています。

Three exposure scenarios are considered. For the infants, the population group the most at risk, the exposure limit is respected if the concentration in water is lower or equal at 0.1 µg/ kg (modelling over-estimation factor of 5 included).

3 つの曝露シナリオが考慮されます。最もリスクの高い集団である乳児の場合、水中の濃度が0.1 µg/kg以下であれば曝露限界が尊重されます。(5の移行モデル_過大評価係数を含みます)

Cmod is the concentration in recycled PET that leads to a migration equal to 0.1 µg/kg food, using migration modelling.

Cmod は、移行モデルを使用して、食品中0.1 µg/kg に等しい移行をもたらすリサイクル PET 中の濃度です。



AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

Evaluation principles

Modelling parameters

For the Cmod calculation (infant scenario), EFSA requires the following parameters to be applied in the modelling:

Cmod計算(乳幼児シナリオ)の場合、EFSAでは、モデリングとして次のパラメータを適用する必要があります。

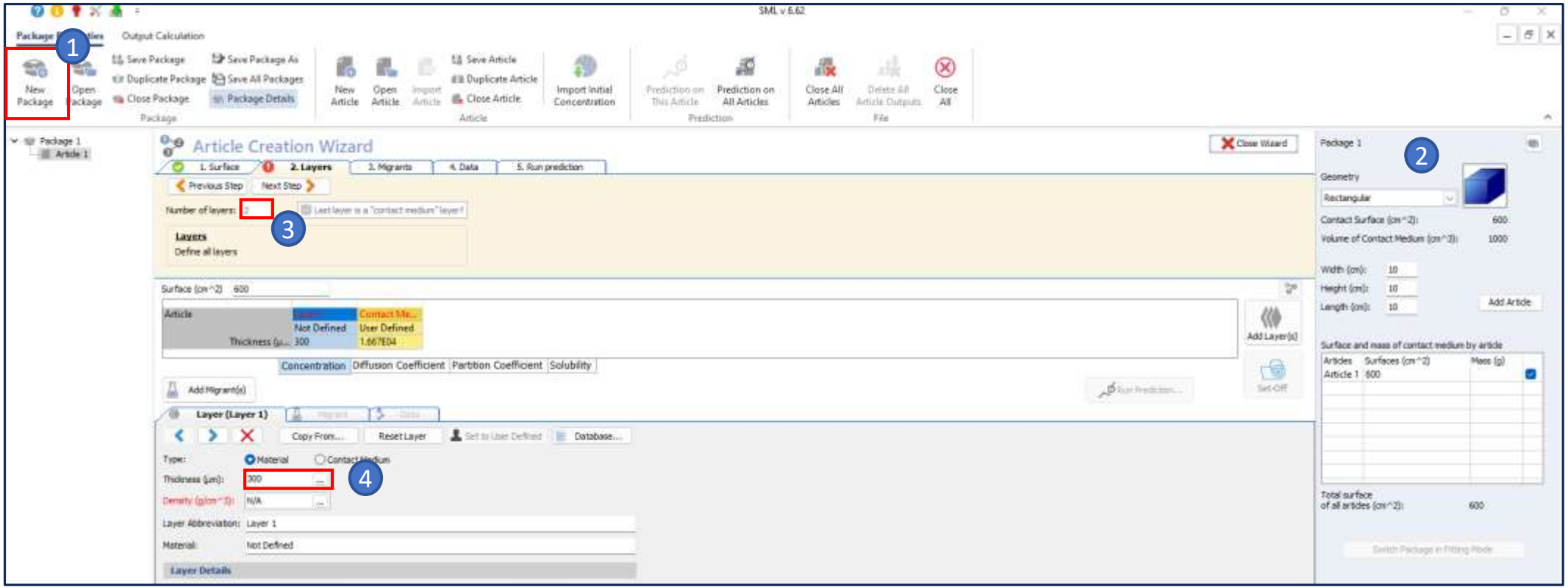
Contact time:	12 months
Contact temperature:	25°C
Thickness of PET package:	300 µm
Density of PET material:	1.375 g/cm^3
Packaging geometry:	EU-cube (V=1l, S=6dm^2)
Diffusion coefficient, D:	estimated with Piringer model (Ap′ = 3.1, Tau = 1577, worst case for T ≤ 70°C)
Partition coefficient, $K_{p/F}$	1.0 (good solubility)

AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

Solving problem step by step

1) Create the traditional “EU cube” package (volume of 1 l, surface of 600 cm^2), one layer PET of 300 µm

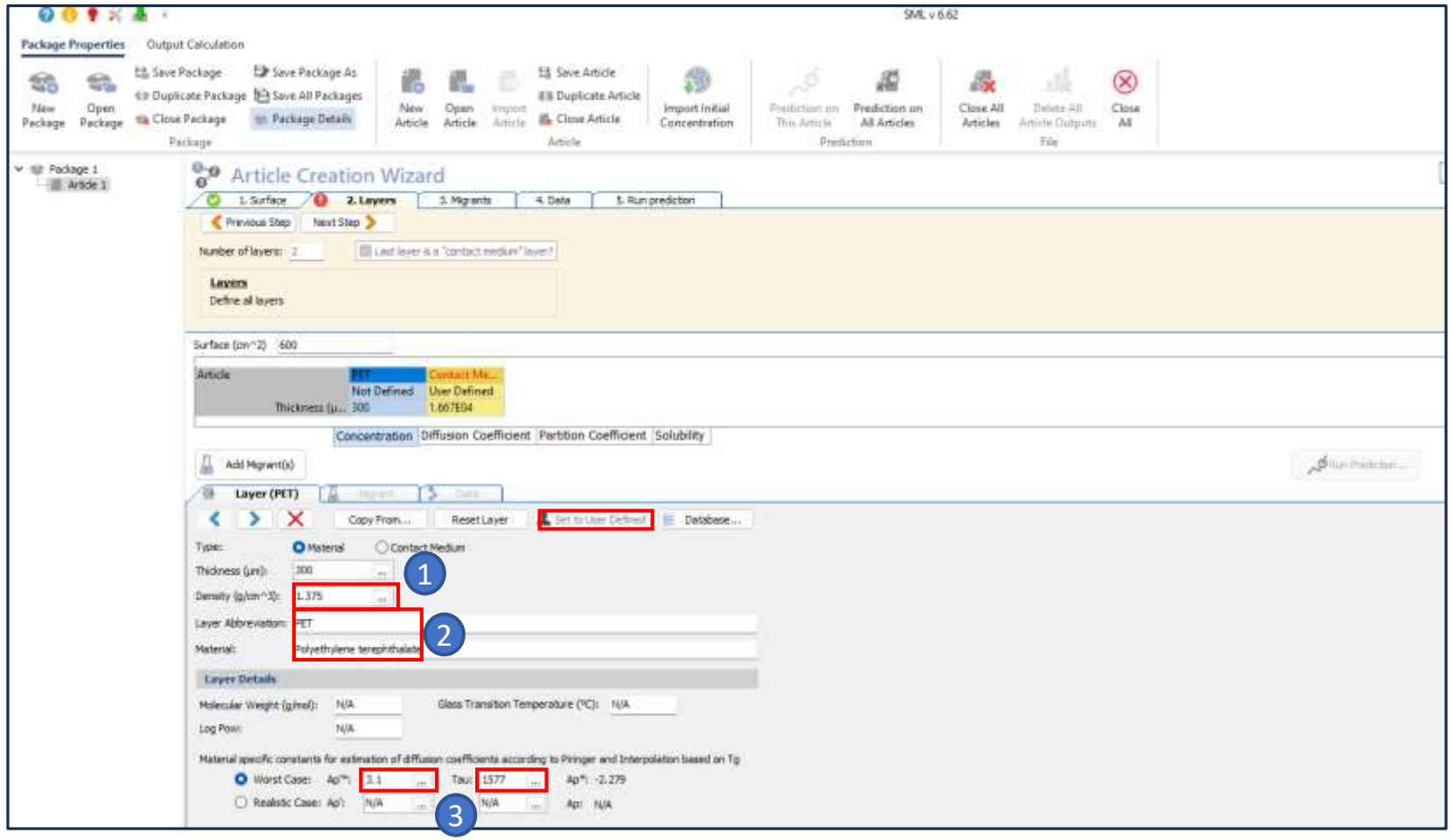
従来の「EUキューブ」パッケージ(容量1リットル、表面600cm2)、300µmの1層のPETを作成します。



AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

2) Define the characteristics of the PET layer in the tab “set to User Defined” (alternatively, material type can be selected and assigned using the database)

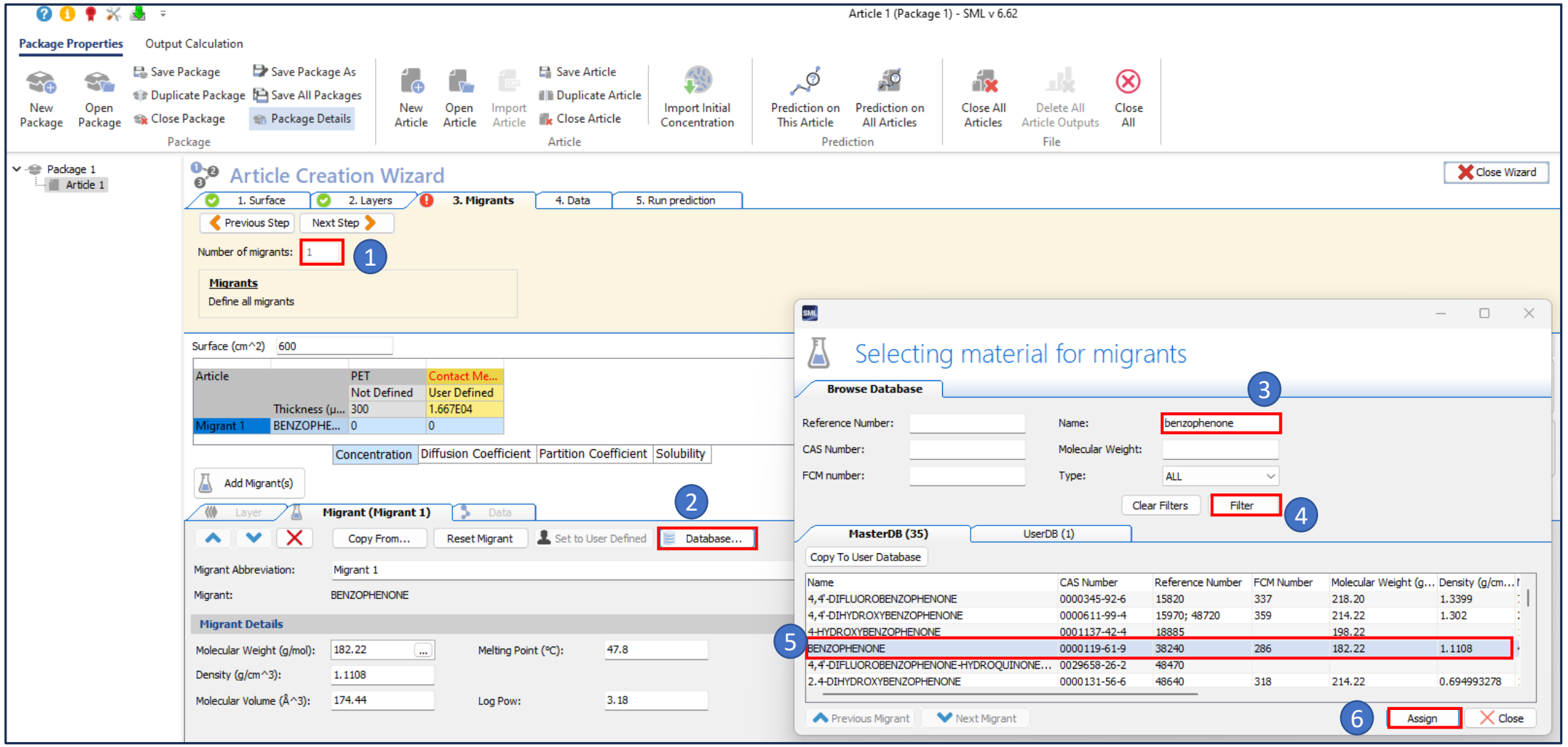
“set to User Defined” タブでPETレイヤーの特性を定義します （データベースを使用して材料タイプを選択して割り当てることもできます）



AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

3) Select one migrant using the database (note: benzophenone is a common surrogate in challenge test of PET recycling process)

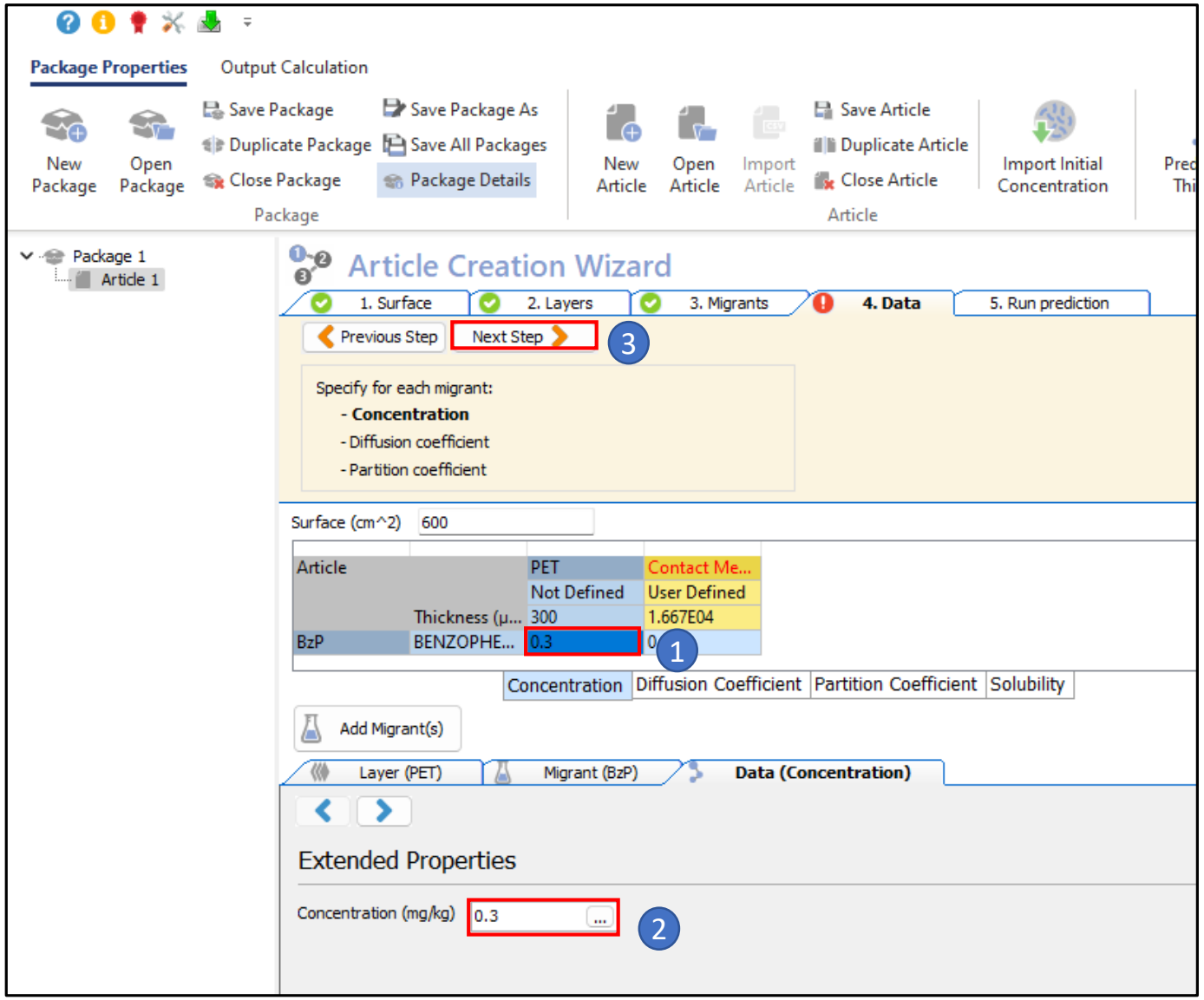
データベースを使用して移行物質を選択します(注:ベンゾフェノンは、PETリサイクルプロセスのチャレンジテストで一般的な代理物質です)



AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

4) Assign an initial concentration of benzophenone in the PET material

PET材料中のベンゾフェノンの初期濃度 **0.3mg/kg** を割り当てます。



Note: the initial concentration of the contaminant is not important as it will be fitted backwards.

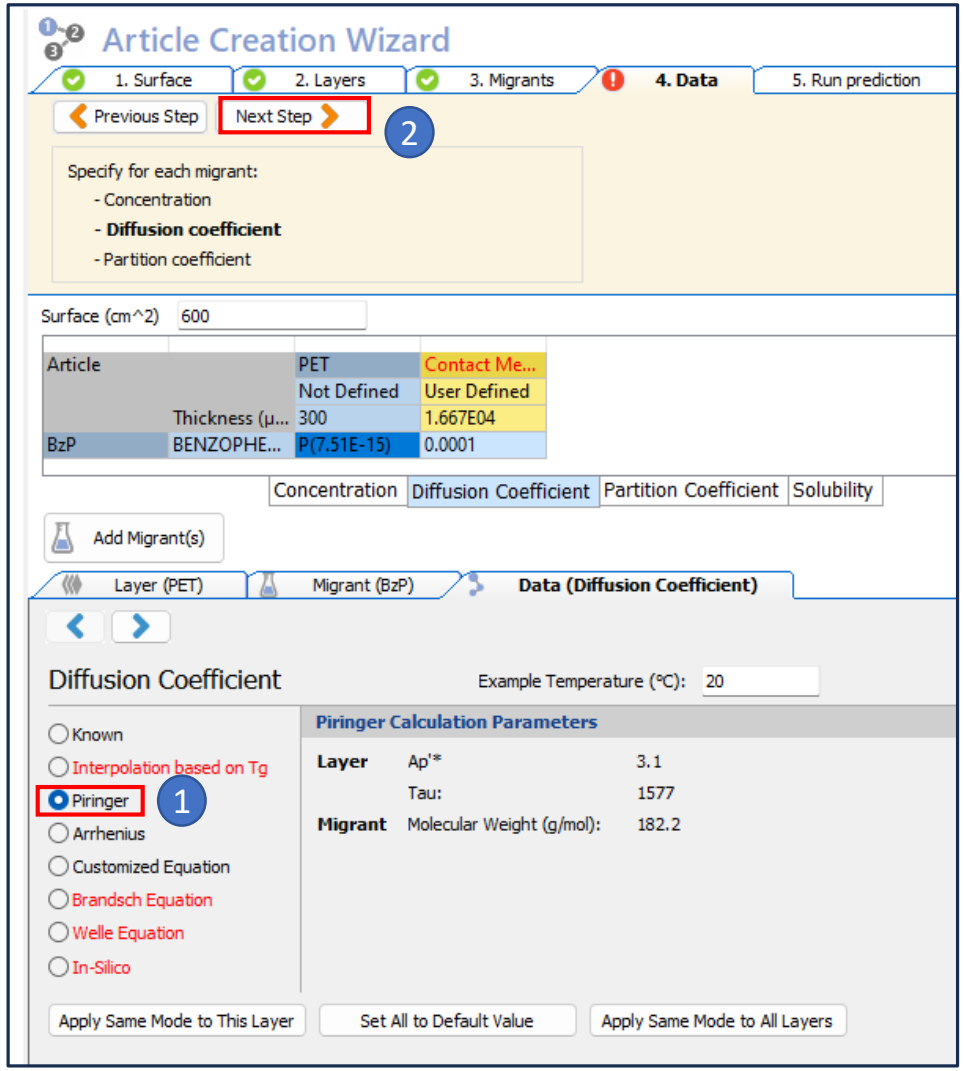
注:汚染物質の最終目標の初期濃度は後半で計算されます。

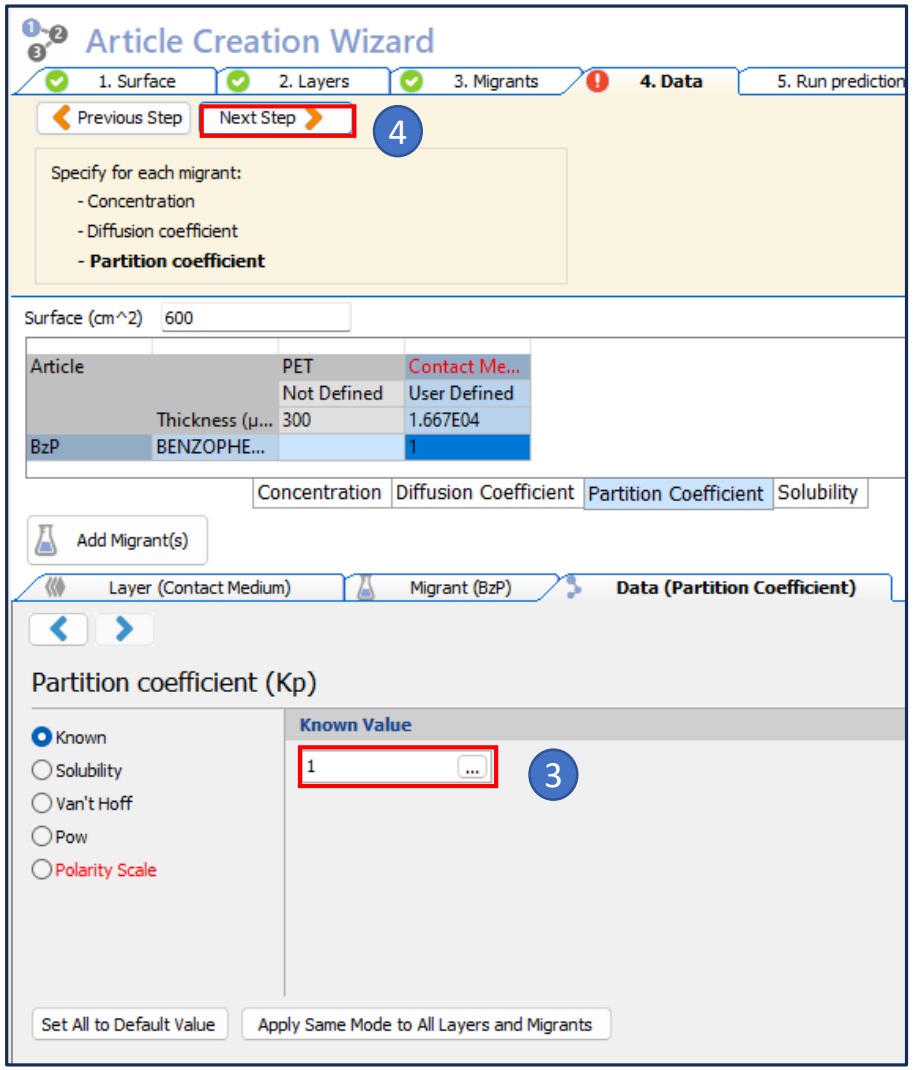
ここでは実際に含有されるmigrantの初期濃度を入力しています。

AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

4) Select the Piringer model for the estimation of the diffusion coefficient, then define the partition coefficient $K_{p/f}$ equal to 1.0

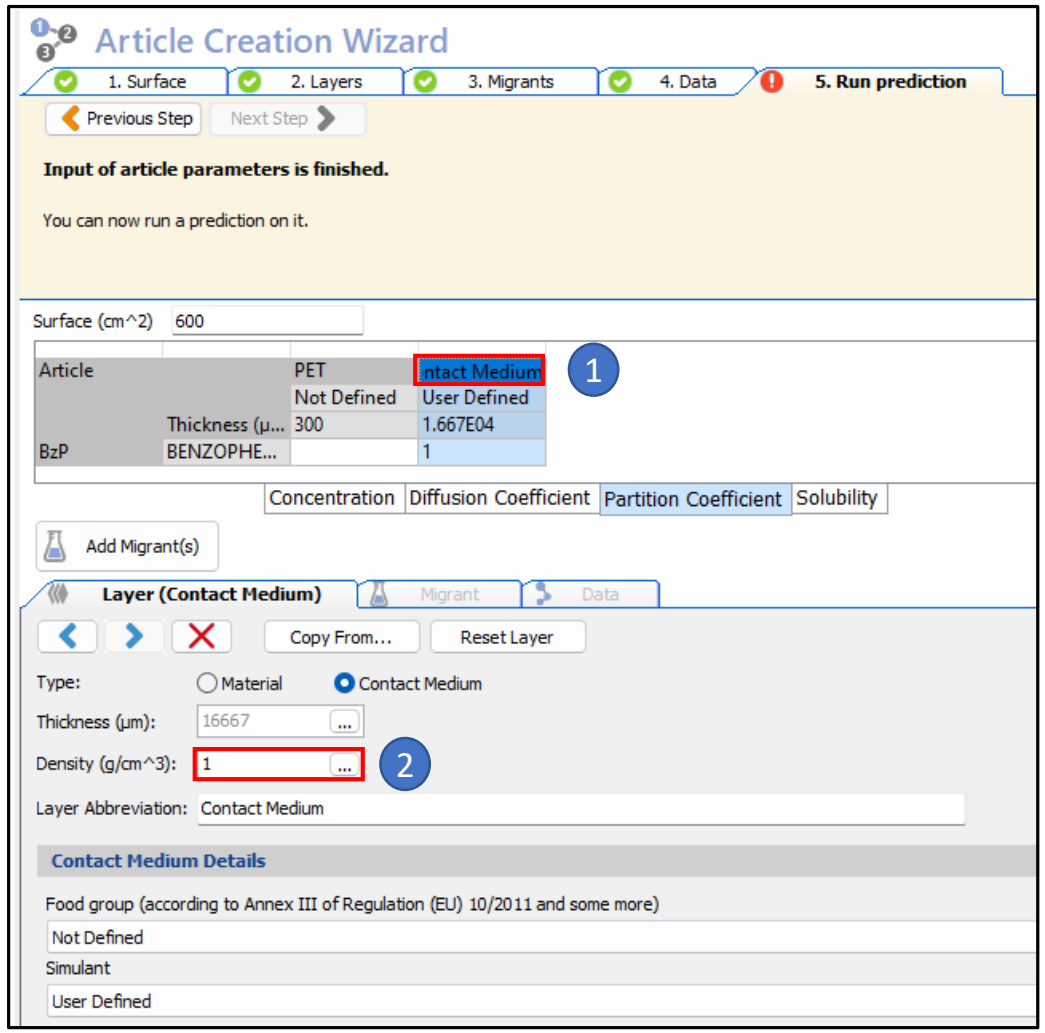
拡散係数の推定に“ピリンジャーモデル”を選択し、分配係数Kp/fとして1.0に定義します。





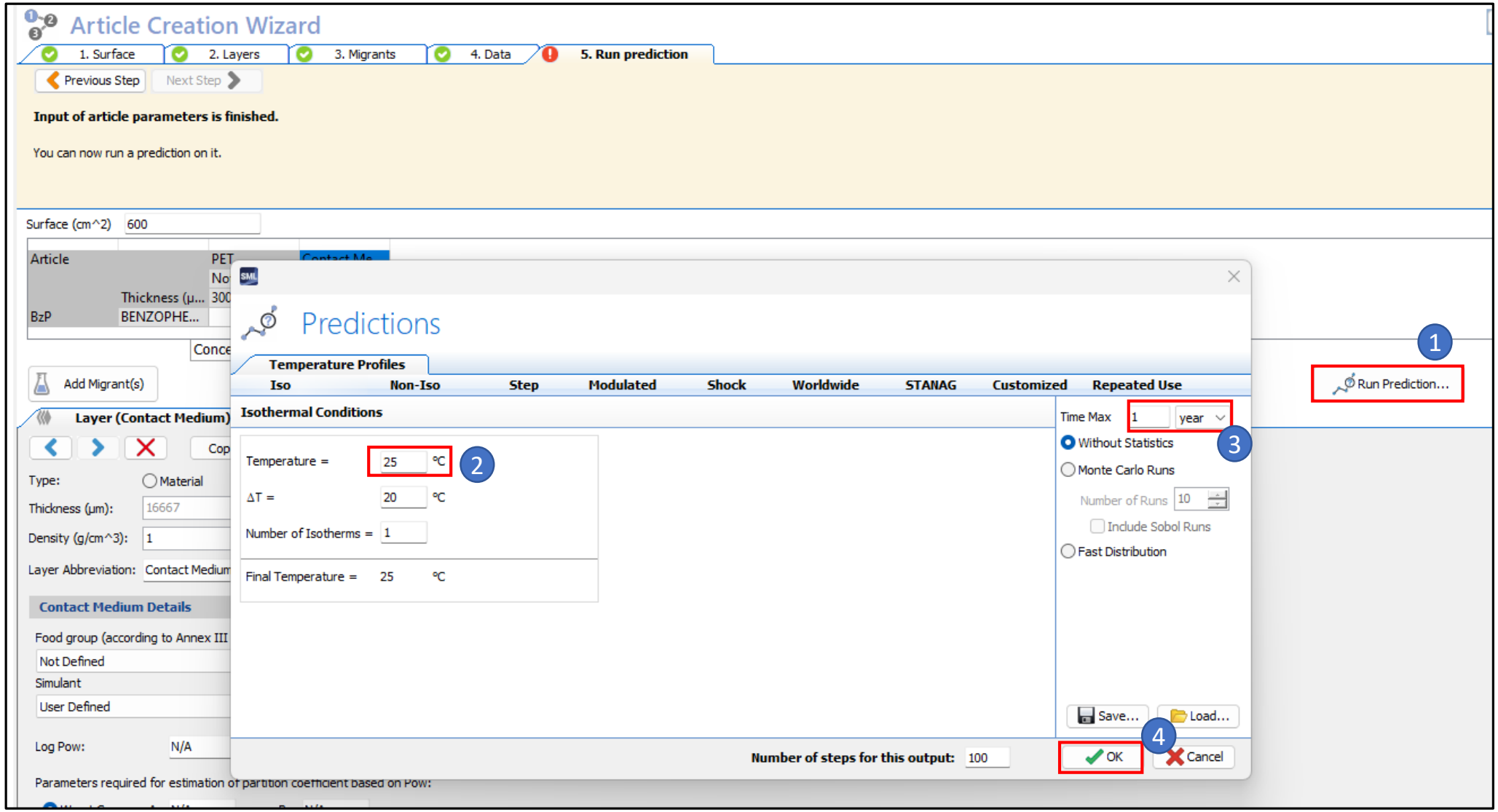
AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

6) Enter the density of the contact medium (water)
食品接触溶媒として(水)の密度を入力します。



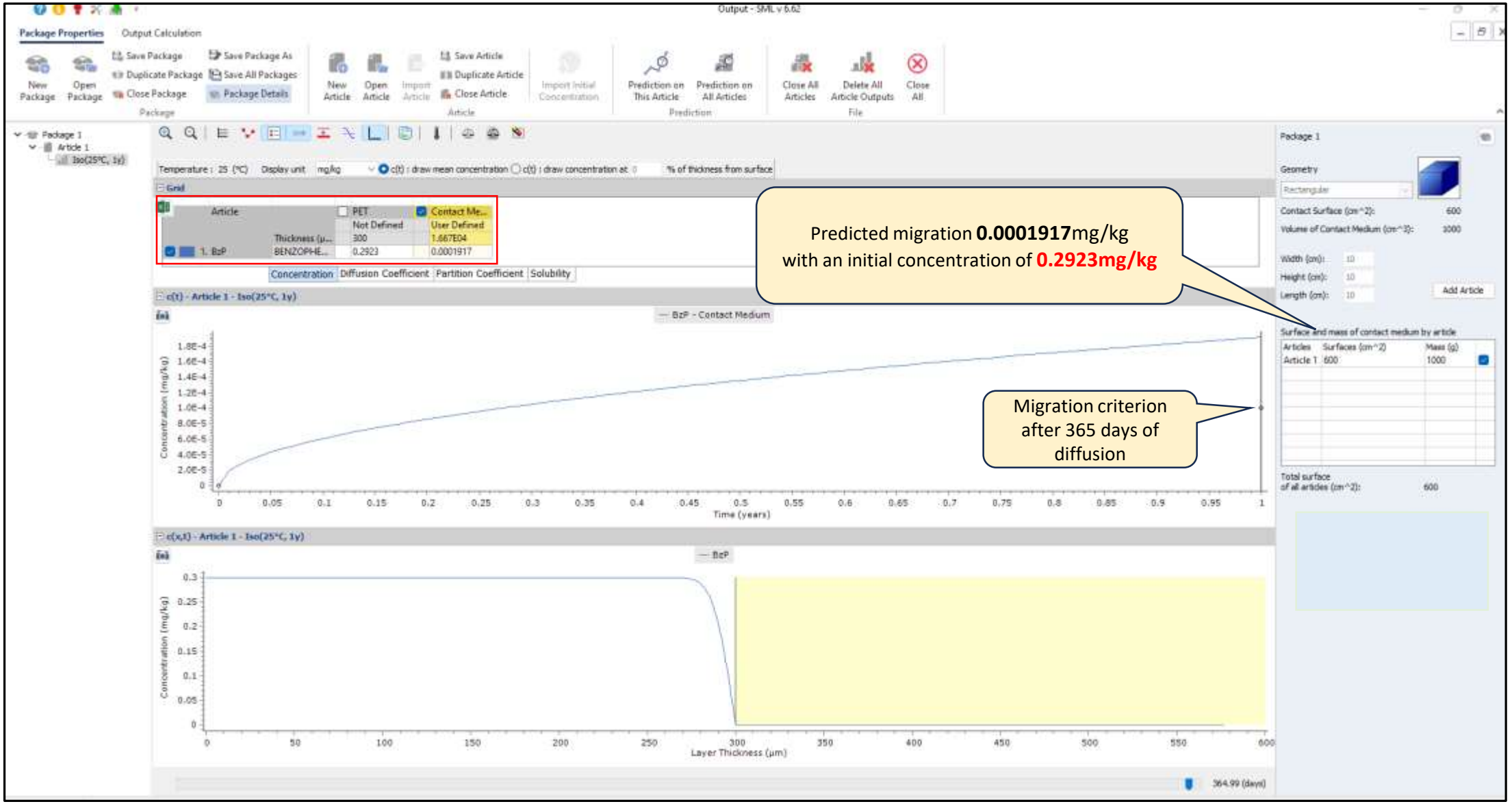
AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

7) Run a prediction of the diffusion for the benzophenone
ベンゾフェノンの拡散の予測を実行します。 25℃等温条件　1年間



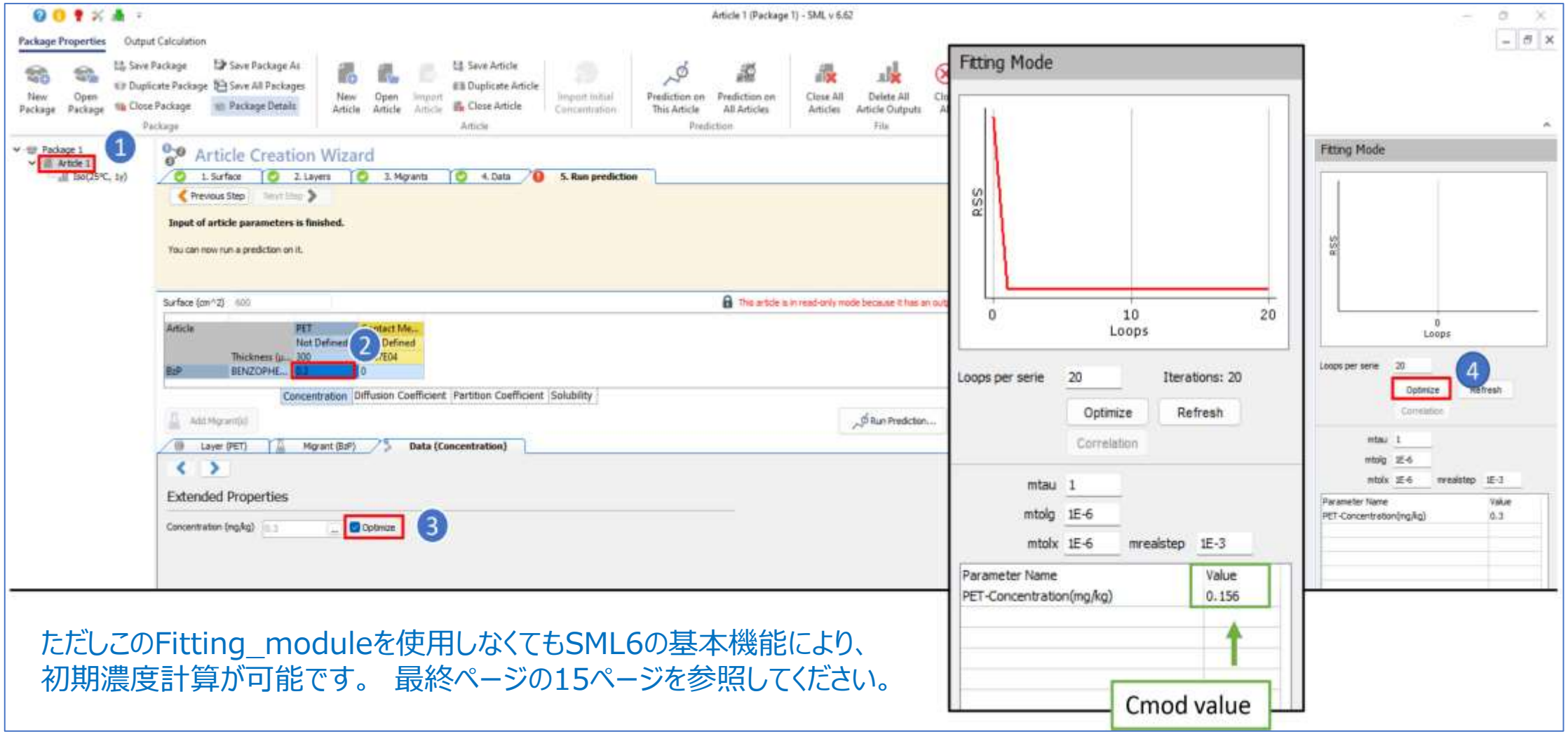
AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

9) 赤線枠から25℃365日後の疑似溶媒中の移行量（溶出濃度）が0.2923mg/kgであることを示しています。



AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

Cmod valueが　0.156と予測されました。
このようにSML6のOption機能Fitting_moduleを使用して最大許容濃度を越えない初期濃度の計算が可能です。



ただしこのFitting_moduleを使用しなくてもSML6の基本機能により、
初期濃度計算が可能です。 最終ページの15ページを参照してください。

AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

Final remarks

This calculation can be adapted to fit different scenarios (i.e. EFSA scenarios for toddler or adult) or to calculate Cmod of other surrogates used in challenge test of PET recycling process: use the prepared package “Cmod_calculation” and enter the parameters of the desired migrant.

この計算は、さまざまなシナリオ(幼児または成人向けのEFSAシナリオなど)に適合させるか、PETリサイクルプロセスのチャレンジテストで使用される他のサロゲートのCmodを計算するように調整できます:

準備されたパッケージ「Cmod_calculation」を使用して、目的とする移行物質のパラメータを入力します。
移行物質の入力は10種類をセットすることができます。（最大18種類まで確認済み）

other than bottles.
また、物品の接触時間や温度を変更して、ボトル以外の包装容器について拡散係数を評価することができます

Fitting_moduleの機能は実測値から拡散係数を求めることができることが基本機能です。

Data files for SML 6.7

AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com

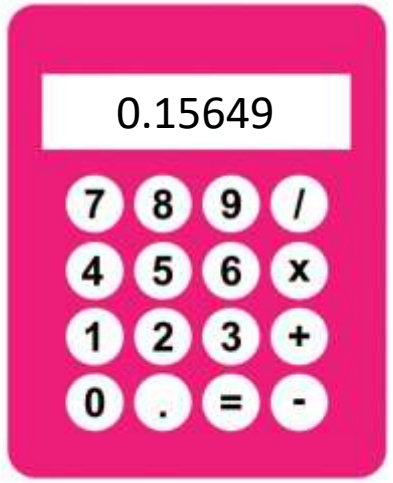
初期濃度**0.3mg/kg**,25℃365日後の疑似溶媒中の移行量_溶出濃度が**0.0001917mg/kg**であることを示しています。

25℃365日後の疑似溶媒中の移行量（溶出濃度）が**0.0001mg/kg**となるときの初期濃度　X　は?

0.3mg/kg : 0.0001917mg/kg　=　X mg/kg : 0.0001 mg/kg

移行モデルのガイドラインによれば、FCM中の初期濃度が1%以内であれば、初期濃度と食品疑似溶媒への移行量は比例関係が成立するとされています。

比例関係があることから簡単な移行量が1点求まればこの値からポリマーに含まれる移行物質の初期濃度が算出できます。



X　＝　（0.3 × 0.0001) / 0.0001917

　＝　　0.156mg/kg

筆算または電卓で計算できます！

AKTS SA , Technopôle 1, 3960 Sierre, Switzerland | info@akts.com