



SML 5 -ソフトウェアの概要



SMLの訳語は特定移行成分限界値が主流？

特定移行成分限界値 (specific migration limits) www.epoxy.gs/anzensei.html 2012 HP掲載

特定移行成分限界値 (specific migration limits) www.fsc.go.jp/fsciis/foodSafetyMaterial/.2005/07

特定移行成分限界値 (specific migration limits) www.fsc.go.jp/fsciis/foodSafetyMaterial/.2012/01/

特定移行成分限界値 SML www.mizuho-ir.co.jp/publication/ みずほ情報総研 ケミマガ 2011/06月号

特定移行成分限界値 Specific Migration Limits www.palmetrics.co.jp/userdata/AKTS_SML.pdf

特定移行限度 Specific Migration Limit www.mhlw.go.jp/stf/shingi/...att/2r98520000022ncg.pdf

特定移行限度 (SML: Specific Migration Limit). www.jetro.go.jp/jfile/report/07000081/EU.pdf

特定溶出限度値 (SML) www.fsc.go 食品安全総合情報システム 2011

特定移行量制限 (SML) **食品安全情報blog**

移行量限度 (SML) 財団法人 日本食品分析センター

特定移行量限度 (SML) 財団法人 日本食品分析センター

移行制限量 (the specific migration limit: SML) www.fsc.go.jp/fsciis/attachedFile/download?retrievalId

溶出基準値 SML 国立医薬品食品衛生研究所

特殊移行量制限 SML www.johokiko.co.jp/column/column_masakazu_isurugi.php -

パルメトリクスはweb上でヒット数の多い名前に追従しました。

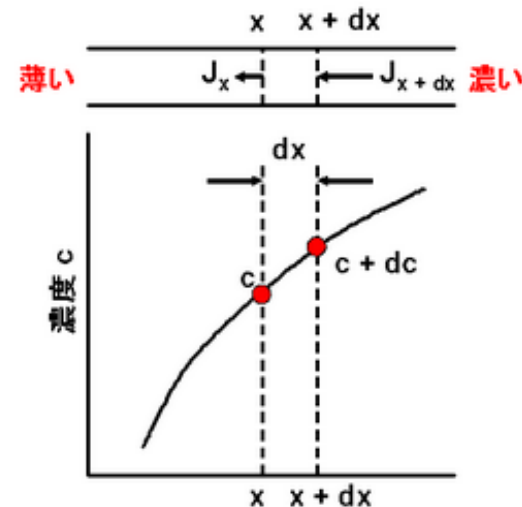
AKTS-SMLとは

最新の数値アルゴリズムを採用したAKTS/SMLソフトウェアは、プラスチック多層膜あるいは複合物質の多層膜に含まれる物質が、包装食品、あるいは医薬品や化粧品、飲料水、あるいは環境など他の接触媒体に移行する 残存モノマー、添加剤、汚染物質、反応生成物、あるいは非意図的な加えられる物質移行量を予測することです。

ここに紹介する予測法は食品に接触するプラスチック物質がEU規制とスイス法規制による包装材の特定移行成分限界値に準拠することを保証します。この技術は複合物質;たとえば異なる幾何学的形状をしていても、あるいはいかなる多層膜構造に対しても特定移行成分を評価することができます。

移行プロセスは隣接した膜と閉じた系における接触媒体間の**分配**を考慮しつつ、**Fickの拡散第2法則**を基礎としています。

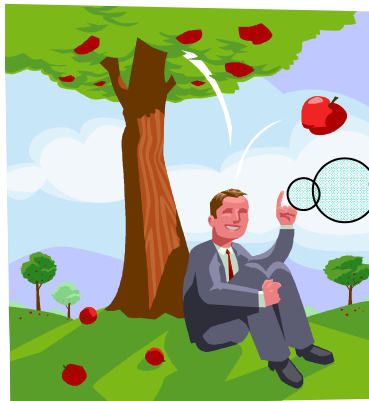
フィックの第2法則導出模式図
位置:dxと濃度:dcの時間変化



AKTS-SML

拡散プロセスの温度依存性は、アレニウス式によって考慮することができます。ポリマー物質の拡散係数は、一般的にポリマー特定定数 (A_p -value) [2]を基礎とするPiringerモデルのような**実証的**な推定手順が承認されています。ただし A_p -valueが採用できるポリマーの数は限られています。

Brandsch[6]による A_p -valueの拡張モデルは**非実証的**にポリマーのガラス転移点温度を基礎として、拡散係数を推定します。ガラス転移点温度によって特性化される拡散係数は、いかなるポリマーあるいは複合ポリマーに対してもモデル化することができます。



Dr.Brandsch

実証的なPiringer法の A_p -valueを、実測することなく推定できる良い方法はないか？

T_g 点温度から拡散係数を推定！

SML4→SML5 Brandsch equationが選択可能

Article 1 (Package 1)

Article

Surface (cm²) 600

Article	Layer 1	Contact Medi...	
	POLYETHYLE...	Vegetable oil...	
Thickness (μm)	100	1.667E04	
Substance 1	OCTADECYL ...	P(2.263E-10)	0.0001
Substance 2	PHOSPHORO...	P(9.212E-11)	0.0001

Concentration Diffusion coefficient Partition coefficient

Add substance(s) Run prediction...

Layer (Layer 1) Substance (Substance 2) Data (diffusion coefficient)

拡散係数方式の選択入力画面

Diffusion coefficient

- Known
- Interpolation based on Tg
- Piringer
- Arrhenius
- Customized equation
- Brandsch equation

Example for 20°C (cm²/s): P(9.045E-11)

Brandsch equationが選択可能

AKTS-SML

- ・接触膜と接触媒体(例えばポリマーと食品類似品または水)間の分配係数を推定するには移行物質に対するoctanol/水の分配係数で表現される移行物質の極性が基礎となっています。[5]
- ・時間に依存する移行曲線と多層膜構造のすべての膜の中の濃度プロファイルは、ポリマー物質から接触媒体および接触媒体からポリマー物質への移行量のそれぞれを計算することができます。
- ・多層膜から物質が放出されるシミュレーションは温度レンジを拡張した温度条件で可能です。実験的検証が非常に困難な条件、例えば観測時間中に生じる温度がふらつくような条件でもシミュレーションが可能です。複雑な周囲温度のプロファイル、例えば階段状、モジュレート、温度衝撃あるいは実際の大気温度変化を反映するような温度条件(季節日間変動を含む年間温度変動)で移行量を検討できます。

SML4→SML5 分配係数 K_p 溶解度, Pow入力が追加

Article 1 (Package 1)

Article

Surface (cm²) 600

Article	Layer 1	Contact Medi...
	POLYETHYLE...	Vegetable oil...
	Thickness (μm)	100
		1.667E04
Substance 1	OCTADECYL ...	1
Substance 2	PHOSPHORO...	1

Add layer(s)

Concentration / Diffusion coefficient / Partition coefficient

Add substance(s)

Run prediction...

Layer (Contact Medium) / Substance (Substance 2) / Data (partition coefficient)

Partition coefficient (Kp)

Known Solubility Pow

1

分配係数 K_p の選択入力画面

Solubility, Powが選択可能

SML 4.54の入力画面 Piringer:Ap値 と K_p は分配係数項のみ

Layer properties

Thickness [um]	100	100	50	150	50	50	
Density [g/cm ³]	1	1	1	1	1	1	
Migrant							
<input checked="" type="radio"/> Initial conc. [mg/kg]	0	0	1000	500	0	0	
<input type="radio"/> Imported Initial conc.	Import initial profile						
Partition coefficient	1	1	1	1	1	1	
Solubility of migrant in food [mg/l]							2
Piringer	A_p	A_p	A_p	A_p	A_p	A_p	
Arrhenius	E_a	E_a	E_a	E_a	E_a	E_a	
Known	K_m	K_m	K_m	K_m	K_m	K_m	
Customized equation	C_e	C_e	C_e	C_e	C_e	C_e	
Dm [cm ² /s]	5E-10	1.68E-13	6.18E-14	8.92E-09	8.92E-09	3.45E-12	0.0001
<input checked="" type="checkbox"/> Simulant							
Known	K_s	K_s	K_s	K_s	K_s	K_s	
Ds [cm ² /s]	2E-11	2E-11	2E-11	2E-11	2E-11	2E-11	0.0001
<input checked="" type="radio"/> Initial Concentration of simulant [mg/kg]	0	0	0	0	0	0	500
<input type="radio"/> Imported Initial conc.	Import initial profile						
Partition coefficient	1	1	1	1	1	1	
	1	2	3	4	5	6	
Surrounding ↑							↑ Food

Viewer version : All edits and buttons locked

SML5はSML4.54に比較して応用範囲が拡大

SML5の特長

- ・複合包装品(フタとトレイなど)から全体の包装構造を組み上げての移行モデルが可能です。
- ・膜の数に制限なく移行モデルが可能です。
- ・移行物質の数に制限なく、一括した移行モデルが可能です。
(バッチ プロセス)
- ・13,000の化学物質データベース
(添加剤、モノマー、光開始剤、色素、溶媒、ポリマー、他)
- ・ポリマー膜と食品類似物間の分配係数の推定は移行物質の P_{ow} :
octanol/水の分配係数で表現される移行物質の極性を基礎[4]

SML5の特長

- ・ Brandsch[6]によるAp-Valueの拡張モデルはポリマーのガラス転移点温度を基礎とする拡散係数の推定により、いかなるポリマーや複合ポリマーに対してもモデル化することができます。
- ・ ポリマーのガラス転移点温度を基礎とするポリマー拡散定数および隣接したポリマー膜に対する物質の溶解度を基礎とするポリマー間の分配係数推定はBrandsh独自の推定手順です。
- ・ 法規制の適合性点検：
特定移行成分限界値(SML)物質のコンプライアンス 評価はPlastics Regulation (EU) No 10/2011 の中でリストされ、コンプライアンス証明書
を出力することができます。
- ・ 確率的な移行モデルと感度分析はすべての入力に対しモンテ・カルロ、ソボルとFAST技術を採用し、ガウス分布を基礎としています。

Reference

- [1] <http://www.akts.com/sml.html>
- [2] C. Simoneau, ed., "Application of generally recognise diffusion models for the estimation of specific migration in support of EU Directive 2002/72/EC", JRC Scientific and Technical Reports, 2010
- [3] EU, 2011, European Commission Regulation (EU) No 10/2011 relating to plastic materials and articles intended to come into contact with foodstuffs. Official Journal of the European Union 15.1.2011; L 12/1
- [4] Verordnung des EDI über Bedarfsgegenstände vom 23. November 2005 (Stand am 1. Mai 2011); <http://www.bag.admin.ch>
- [5] [Asako Ozaki](#), Anita Gruner, Angela Störmer, Rainer Brandsch and Roland Franz; "Correlation between Partition Coefficients Polymer/Food Simulant, KP,F, and Octanol/Water, Log POW – a New Approach in support of Migration Modeling and Compliance Testing"
- [6] Rainer Brandsch, to be published

SML4 : Piringer → SML5 : Piringer + Brandsch

SML4はデータベースにAP-valueがないポリマーは、実質的に解析不能という弱点がありました。

SML5はBrandschモデルを採用することにより解析応用範囲を広げました。



DR. RAINER BRANDSCH

Director, MDC Tec Ltd

Dr. Rainer Brandsch studied Chemistry at the Technical University Karlsruhe, Germany with main focus on technical and polymer chemistry.

After his graduation in chemistry science in 1996 he started its dissertation at the University of Freiburg, Germany which he succeeded in 1999.

After two years engagement in the chemical industry he joined FABES for six years as research scientist leading major projects focusing on interaction between packaging and filled good. He joined part time the non profit Industry Association for Food Technology and Packaging (IVLV e.V.) in 2005 as secretary and became chairman of the executive committee in 2008. Further more he is owner and managing director of the Macrodynamic Chemical Technologies Limited (MDC Tec Ltd).

Compliance

ポリマー物質と食品包装材の現実的な健康リスクの評価は必要です。ポリマー物質を使用することの恩恵に対するリスク比はそれらを使わない場合と比較すると通常は無視できるものです。これが議論の余地がないほど明白であったとしても消費者の安全を確実にするために留意されなければなりません。

このようにあらゆる安全規制は下記の が考慮されるべきです。

ポリマー物質と食品包装材から接触媒体への物質移送は望まれないものです。

最新技術の生産物から避けることができない質量移送は禁止されるべきではありません。もしその物質が健康危険の要素とならず、最適化された生産システムにおいて質量移送が技術的に避けられない場合であれば、(許容されるものです。)現代の製造物に対する重要な最適基準はそれらの技術的特性、すなわち消費者安全性、環境適合性および低生産コストです。これらの点に合致すれば消費者の恩恵となり、科学技術の進展を促すこととなります。

製造物に対する重要な最適基準となる技術的特性



消費者安全性



環境適合性



低生産コスト



Compliance

- 物質の強烈な毒性以外に慢性突然変異誘発性、発がん性活性が最も重要です。
- 動物に対する最大無毒性量 (NOSEL) の実験結果をヒトに適用することと、それに由来する1日許容摂取量の水準の妥当性はよくわからないかもしれません。
- EDI: 推定1日摂取量水準は地方特性と時間的検討から由来する不確実性が加わります。
- それに関連して起こり得る障害は季節や地形および社会経済的あるいは民族の背景により変化します。
- ポリマー物質と食品包装材から接触媒体への物質移送量は、そのような訳で消費者への暴露は大きなレンジを越えて変化するものです。
- 拡散理論は移送物質量を数学的に推定するために使われます。
- しかしながら移行に対して多くの他の因子が影響することを予想することはできません。

Compliance

- フェデラル規制のFDAコードやEU規制と指針、ドイツのDfR勧告などのような世界規模の規制に準拠することはポリマー物質と食品包装材料に対してpositiveリストと関連する限界値は強制的な義務を伴うものです。
- 消費者にさらされる物質の許容レベルは上記の内容と関連しています。これらが不確実である結果、規制の基礎として使用されるよりはすべての物質は消費者の健康リスクによるカテゴリーに分けられます。リスクがないことを提起する物質からなるスペクトラムの片側(不活性あるいは自然に起き、毒性活性がないこれらの物質)および他の片側は使用から除外されるべきです。なぜならそれらは毒性のある危険なものとして認識されているからです。この2つの極端な状態は残存している物質であり、多かれ少なかれ毒性あるいは特定限界値から導かれる評価から移行量の研究が要求されます。
- 認識された拡散モデルを適用することによって食品に接触する物質のコンプライアンスの実証することはEU規制で2001年に導入されています。

Migration modelling 移行モデルとは？

高分子材料(プラスチック, 塗料, ゴム, 他)は多かれ少なかれ熱力学現象により、モノマーや添加物など低分子物質である溶質が移動します。

この現象は”物質移動”と呼ばれ、排出される側と接触する物質に依存します。これらが液体、気体の接触媒体に移行することにより高分子材料中の化学物質量が低下し、濃度プロファイルが変化することが知られています。移行物質量は物質と媒体の界面で消耗されます。

拡散プロセスが律速段階Rate determining stepであるため、媒質と接触している高分子材料からの物質放出は、おおむね拡散法則に従います。蒸発プロセスにおける気体と接触する媒質は、特定の状況下で律速段階になります。

逆に接触する媒体側から高分子材料にも物質移行が発生することは明らかです。

Migration modelling

高分子材料からの物質放出評価は、歴史的に伝統的な試験条件下で**実測定試験**により行われてきました。


物質移行プロセスと移行量に対して先進的な理解がされたことにより、科学に根差したコンピュータ計算ツールによる移行プロセス・シミュレーションが可能となりました。



シミュレーション & 拡散モデル

複雑な移行プロセスは律速過程であり、例えば拡散過程に変換することができます。相応する移行モデルは拡散モデルに基づいています。移行プロセスは実際の使用条件または従来のテスト条件によってシミュレーションされます。移行モデルは従来のテスト条件の実験結果と計算シミュレーションで1対1の比較が可能です。数学的観点から、媒体と接触する高分子材料システムは以下の数式で示されます。

Mass transfer ~ diffusion



**Fick's 2nd law of diffusion
(one dimensional):**

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

c - concentration
t - time
x - distance
D - diffusion coefficient

P - polymeric material
M - contacting medium




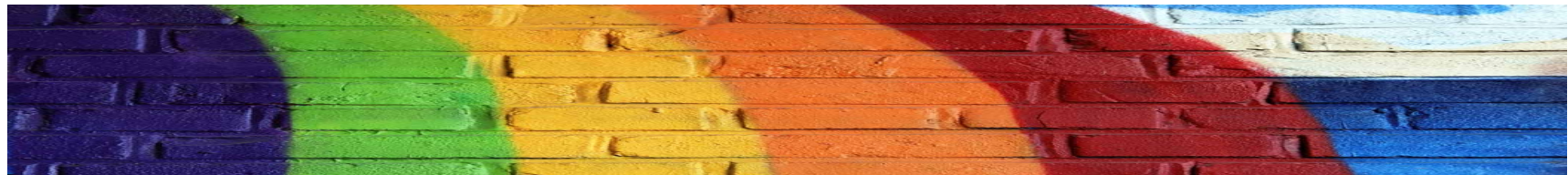
図 1 : 物質移送 ~ 拡散法則

シミュレーション & 拡散モデル

数学的問題の単純化するため、高分子材料と接触する各々の媒体は互いに平行であると仮定します。

拡散方程式は、認知された数値計算アルゴリズムで解くことができる偏微分方程式です。

拡散方程式の数値解法による移行解析は、例えば系内媒体に接触する高分子材料の移行物質の時間と移行物質の濃度分布を計算することができます。



シミュレーション & 拡散モデル

N層の多層膜材料が液体媒体と接触している場合のシステムを記述するためにはすべての物質伝達定数、すなわちそれぞれの膜物質の拡散係数; N個を定義する必要があります。

接触する媒体が液体またはガスの場合、媒体内の拡散プロセスは無視できます。それは高分子材料のような固体に比較して拡散速度がはるかに低いからです。

接触媒体が一部の食品や他の高分子材料のような固体の場合は、それに応じて媒体中の拡散を考慮しなければなりません。

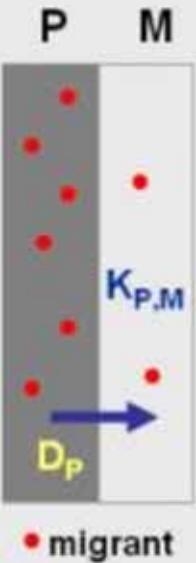


注: SML 5 は単層モデル、N層モデルのいずれも包括しています。
N層モデルでは各レイヤー材料ごとに拡散係数を定義する必要があります。

拡散モデル

Diffusion models

図 2: 拡散モデル



» monolayer materials
(monolayer)

D/K

» multilayer materials
(multilayer)

$(D/K)_n$

D, K - mass transfer constants

MDC Tec

単層膜材料が、液体媒体と接触している場合は、システムは2つの物質移動定数；
1) 高分子材料中の物質の拡散定数 D_p および
2) 高分子材料と接触媒体間の分配係数 $K_{P,M}$ で説明されます

拡散モデル

Diffusion models

polymeric materials in contact with ...

general diffusion model:

D/K/.../D

D/K	- polymer/liquid
D/K/D	- polymer/solid
D/K/D/K	- polymer/coating/liquid
...	
$(D/K)_n/D$	- general



図 3 シンボルの拡散モデル (n - レイヤーの数)

単層膜とマルチ層膜物質を区別する必要があります。もし単層膜が液体媒体に接触していれば、この系は2つの物質移送係数；ポリマー物質中の物質の拡散係数とポリマー物質と接触媒体間の分配係数で記述することができます。

もし n 層の多層膜が液体媒体に接触しているなら、系を記述するすべての物質移送係数が検討されます。；例えばそれぞれの層の中の物質の n 拡散係数
接触媒体が液体あるいは気体であれば、媒体の中の拡散は無視できます。なぜならポリマー物質のような固体と比較すると拡散速度ははるかに低いからです。

もし接触媒体がいくつかの食品あるいは他のポリマー物質のような固体であるなら、それに伴う媒体の中の拡散速度が考慮されるべきです。



拡散方程式を解くには移行速度および濃度プロファイルのシミュレーションのための下記に示す変数が必要です。

ジオメトリ変数 (厚さ、接触領域、体積) だけでなく、時間と温度など実際に使用される環境条件または従来のテスト条件に従う変数

接触する媒体を含む各レイヤーの移行の初期濃度また残留濃度

質量移動定数 (拡散および分配定数)

これらは文献値がありませんが、科学的な証拠に基づいて妥当性確認の推定手順が次第に一般に認知され、推定することが可能です。

モデルは実際の移行システム動作を正確に記述する場合有効です。

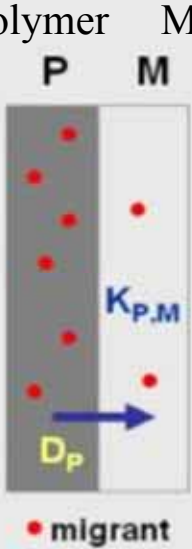
時間に依存する実験的移行データとシミュレーション・データを比較することは、拡散モデルを検証するのに適しています。この手順は、多くの科学文献が出版されているように、いくつかのEUプロジェクトの枠組みの中で選ばれています。

ここでは、高分子材料と媒体が接触する移行プロセスのシステムが拡散方程式で記述され、解が得られることが示されています。

質量移行係数の推定

この拡散係数とは、いかに化学物質が高分子材料から接触媒体へ拡散により放出されるかを示す時間の関連する質量移行係数です。

Diffusion coefficient



Polymer P Medium M

$$D = D_0 \cdot e^{\frac{-E_A}{RT}}$$

D - diffusion coefficient [cm²/s]

D_0 - pre-exponential factor
 E_A - activation energy [J]
R - gas constant [8,314 J/mol K]
T - temperature [K]

• migrant


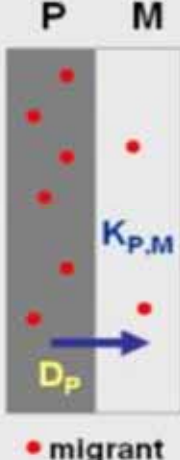


図 4 拡散係数 (アレニウス)

Partition coefficient


$$K_{P,M} = \frac{c_{P,\infty}}{c_{M,\infty}}$$

K - partition coefficient

c - concentration
P - polymeric material
M - contacting medium
 ∞ - at equilibrium




図 5 分配係数

分配係数は高分子材料と接触する媒体の平衡濃度を考慮した熱力学的物質伝達定数です。

分配係数は、高分子材料から接触媒体に移送可能な物質最大量を定義します。

拡散係数と分配係数の推定には下記の科学的アプローチがあります。

Estimation of mass transfer constants

D_p - diffusion coefficient
 D_0 - pre-exponential factor (Arrhenius)
 E_A - activation energy (Arrhenius)
 T - temperature [K]
 A_p' - polymer specific constant (Piringer)
 τ - polymer specific temperature constant (Piringer)
 M - molecular weight [g/mol]
 M_r - relative molecular weight
 T_g - glass temperature of polymer
 $K_{P,M}$ - partition coefficient
 V_p - volume of polymer
 V_w - volume of medium
 p - vapour pressure of migrant
 S_w - water solubility of migrant
 P_{ow} - octanol/water- partition coefficient of migrant

» Diffusion coefficients (D_p)

Arrhenius $D_p = f(D_0, E_A, T)$

Piringer $D_p = f(A_p', \tau, M_r, T)$

Brandsch $D_p = f(T_g, M, T)$ - **new**

» Partition coefficients ($K_{P,M}$)

worst case $K = 1, (V_p \ll V_M)$

Piringer $K = f(p, M_a, W_a, G_F)$

Brandsch $K = f(S_w)$
 $K = f(P_{ow})$ - **new**



図 6 質量移送定数の推定手順例

アレニウス法とPiringer法

アレニウス法とPiringer法によれば拡散係数を推定するには、実験テストによる測定データから

D_0 : 前指数因子やEA;活性化エネルギー、 A_p ; ポリマー特定定数 およびポリマー特定温度定数、 τ (時定数)など物質の特定パラメータを求めます。
(τ は基準の活性化エネルギー; $EA=EA_{ref}+t \cdot R$ R はガス定数)

拡散速度は移行物質サイズ、即ち分子量 (Molecular Weight) が影響していると考えられます。

PiringerのAP-Value 概念はEU委員会活動の中で改良され、プラスチックから食品擬似物の移行モデル(液体と接触する高分子材料)の検証がされています。

Brandsch法

Brandschによれば拡散係数の推定はポリマー物質のガラス転移点温度のようなよく知られた熱力学的パラメータを基礎とする非経験技術といえるものです。Brandschによる拡散係数 D の推定法は高分子材料のガラス転移点温度のように良く知られた熱力学的パラメータに基づいて拡散係数を根本から計算する手法です。

新しく提案されたBrandsch法は、Piringer法が実験データに対して検証するのと同じように、現存する A_p -Valueに対しても検証可能な新しい手順です。

分配係数 K 推定についてはそれほどではありませんが改良されています。科学的なアプローチとして Piringer によって開発されたグループ寄与法、およびBrandsch の”Foodmigrosure ”などEU プロジェクトの枠組みで開発された実験で立証するアプローチがあります。

Brandschの実証的なアプローチはオクタノール/水の分配係数とポリマー物質と実際の食品、または食品擬似物の間の分配係数との関係を組み込むものです。水への溶解度の知識はポリマー物質と水溶媒の間のワーストケースの分配係数の推定を可能にします。

AP-value-Conceptとは

Piringerによる拡散係数の推定手順は、いわゆるAP-value概念です。Piringer法は実験的に決定されるポリマーの特定定数AP-valueとポリマーの特定温度定数、それぞれのポリマータイプの時定数を必要とします。それぞれのポリマー物質に対する時間依存の移行実験を異なるいくつかの温度で測定することが最小限必要です。

この実験データから拡散係数が決定されます。

これらはPiringerによって開発された関係式によりAP-valueに変換されます。

すべての使用可能なAp-valueからある高分子材料に対するAP-valueの上限値はこれらデータセットの95%値として計算します。

与えられるデータセットが十分に大きければ、高分子材料に対するAP-valueは、検証(Validation)されていると見なされます。

AP-Valueは実験データから得られた拡散係数です。

AP-value-Conceptとは

時間に依存する実験移行データ、拡散係数およびそこから派生したAP-valueを収集し、EU委員会の共同研究センターに設置されたモデリング専門調査会でこれらのデータが評価されました。

多くの食品と接触する高分子材料の上限“AP-value”と平均tau-valueが、EU委員会のPlastics Regulation (EU) No 10/2011 がサポートするJRCガイドラインにリストされています。

上限値”AP-value”を使うことにより推定評価結果は移行値が過大評価値となり消費者の安全をサポートすることになります。



Overestimation and consumer protection

過大評価と消費者のリスク保護

消費者の安全をサポートするには、体系的に実際の高分子材料の移行挙動を過大評価するように物質移動定数の評価手順を開発することです。体系的に過大評価することにより、実際のシステムの移行挙動を過少評価するリスクを最小化します。ある単一の移行サイクルをシミュレーションすることにより、食品接触材料を過大評価することは容易です。拡散係数の評価手続において“ A_p 値”上限値と低い分配係数を使うことにより、実際の物質移行値と比べてより高い物質移行値が得られることとなります。



物質移行値を過小評価して消費者を危険に晒すよりも過大評価することで、より消費者の安全を守ることになるのです。

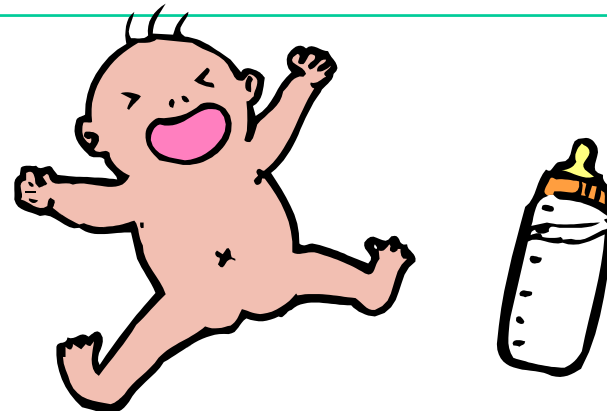
Repeated use 繰り返し使用

繰り返し使用される高分子材料または接触媒体の動的フロー挙動については、特別に考慮することが必要です。物質移行シミュレーションと同様に実験的に行われる従来テストは”繰り返し使用”されることを考慮するか、あるいはいくつかの物質移行サイクルの実行によって得られた動力学的なフローによって計算します。

最初の移行における移行成分を過大評価すると、後でおきる移行サイクルにおいて過小評価を引き起こす可能性があります。

こうしたことは、拡散と分配に基づいて過大評価の可能性が非常に高く、最初の移行サイクルにおいて高分子物質からの移行物質が50%以上となる場合に起こります。

これらの特殊なケースでは、シミュレーションの中で簡単に識別が可能であり、最初の移行サイクルのみを1つのある特定移行成分限界値(SML値)と比較することにより可能になります。



Use of simulation (introduction)

高分子材料と媒体の相互作用に基づいて、その結果として高分子材料に含まれる物質が消費者に被爆されることになるため、国内および国際的レベルで法律的な要件が設定されます。

食品と接触する材料や“おもちゃ”に適応される詳細な法的要件の場合、特定移行成分限界値については適応法令によって設定されます。

歴史的には実験的アプローチによる方法、例えば伝統的なテスト条件による移行実験テストが、コンプライアンス アセスメントに使用されてきました。



EU legislation

移行モデリングは、高分子材料と媒体の相互作用のタイプと移行限度値を推定する貴重なツールです。関連する物理・化学的パラメータに基づいて質量移行を推定し、例えば質量移行定数について、生産チェーンのすべての段階で消費者への暴露を推定することが可能になります。

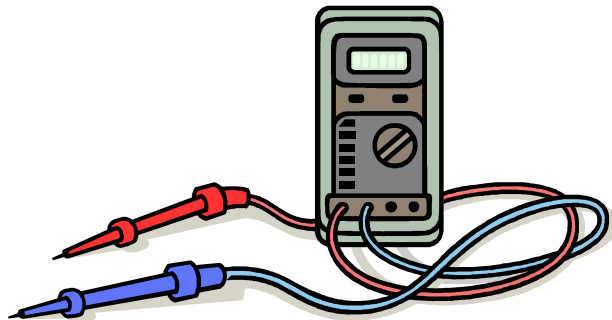
2001年に食品と接触するプラスチック材料と包装材についてコンプライアンスアセスメントに適応することができる法律として初めて導入され、（昨年2011/5の）移行モデリングはさらにさらに受け入れられるようになりました。



EU legislation

移行モデルはEU法規の中で、食品と接触するプラスチック素材と食品包装材 (Articles) を対象として導入され、 6. Amendment of Directive 90/128/EEC, **2011年4月の時点では** Directive 2002/72/ECに統合されていました。

この統合されたプラスチック指令 2002年/72/ECは 今まで4回修正されましたが、**ついに2011年5月にRegulation(EU) No 10/2011の発効によって、** Directive 2002/72/ECは撤廃・破棄されました。



この改正により移行モデル (Piringer、Brandschモデル) は スクリーニング・アプローチの1つとして定義され、食品に接触するプラスチックに対する整合性評価をサポートするものとして使用することができます。

AKTS/SML5はスクリーニング・ツールとして今後が期待されます。

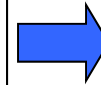
EU legislation (FCM 2002/72/EC, Article 8)

4. The verification of compliance with the specific migration limits provided for in paragraph 1 may be ensured by the determination of the quantity of a substance in the finished material or article provided that a relationship between that quantity and the value of the specific migration of the substance has been established either by an adequate experimentation or by the application of **generally recognised diffusion models based on scientific evidence**. To demonstrate the non-compliance of a material or article, confirmation of the estimated migration value by experimental testing is obligatory.

FOOD CONTACT MATERIALS

PRACTICAL GUIDE

"A PRACTICAL GUIDE FOR USERS OF EUROPEAN DIRECTIVES"



Regulation(EU) No 10/2011

科学的な証拠に基づいて拡散モデルがさらに容認されるようになりました。

Article 8 指令2002年/72/の移行モデリングによれば食品に接触する物質と法律規制に適応する食品包装材についてコンプライアンスのデモが可能です。

デモすること自体はnon-complianceであり、正式な規制では推定された移行量は実験テストで確認することが不可欠です。



新しい規制 (EU) No. 10/2011 では移行モデルはいわゆるスクリーニング・アプローチの1つとして定義され、移行モデルは食品に接触するプラスチックに対する整合性評価をサポートするものとして使用することができます。

参考資料: 食品安全委員会の食品安全総合情報システム 2011/1から抜粋

EUは1月15日、食品と接触することを意図するプラスチック素材及び製品に関する委員会規則 (EU) No 10/2011を官報にて公表した。概要は以下のとおり。抜粋

1. 規則(EC)No1935/2004は、食品接触材に関する加盟国間の規制の差異を除くための基本原則を定めている。本規則には接触材及び製品のグループによる具体的な施策を示し、認可物質リストについて具体的な方法が示されている場合についてEUレベルでの認可手続きの詳細を記述している。

本規則は規則(EC)No1935/2004の意義の範囲内でのプラスチック材及び製品の安全な使用のために具体的な規則を定めるもので、食品と接触することを意図したプラスチック材に関する委員会指令2002/72/ECを破棄するものである。(発効は2011/05/01)

2. 食品と接触することを意図したプラスチック材に関する委員会指令2002/72/ECの適用範囲を、従来のプラスチック材料のみから製造した製品から、複合材料多層フィルム (multi-material multi-layer plastic layer)に拡大する。

5. 潜在的な健康リスクは、食品接触プラスチック材から食品へ溶出した未反応あるいは不完全に反応したモノマー、他の出発原料、または低分子添加物から生じる可能性がある。よってモノマー、他の出発原料、添加物についてプラスチック材及び製品製造に使用する前にリスク評価し、認可を受けなければならない。

15. 具体的溶出基準:

(1)AnnexIに定められた特定溶出限度値 (SML) (mg物質/kg食品)を超えて食品に移行してはならない。

(2)SMLがない場合には一般溶出基準である60mg/kgが適用される。