

Title : 移行物質と疑似溶媒の極性_Polarityから分配係数を推定するアプローチ



Photo_1



Photo_2



Photo_3

SML6のVersion6.6には新しい機能、Pow値アプローチによる分配係数(Kpf)の予測を優先しています。しかしPow値アプローチは親水性疑似溶媒に対して有効ですが、親油性の疑似溶媒では 移行物質の**Log Pow**との間にある**LogKpf**の直線関係が低下します。PowアプローチにはWorstケースとRealisticケースの2選択が可能です。親油性の溶媒のオリーブオイルではRealisticにのみパラメータが設定され、Worstには対応できません。SML6はこのパラメータが未設定です。オリーブオイルの代わりに使用されるn-Heptaneやiso-Octaneではこのパラメータがないため、Powアプローチが対応できません。このため未設定の疑似溶媒はパラメータが**Missing**と表示されるようになりました。この場合Powアプローチは使えず、他のアプローチを選択する必要があります。

SML6 Version6.6 からPolarity(極性)によるKpf 推定アプローチを選択することが可能になりました。 移行物質・Migrant ,疑似溶媒・Simulant, および食品疑似溶媒に接触するポリマーの3種類のLogPow値を設定すれば、分配係数を推定することが可能です。この詳しい説明は別途、テクニカル・ノートを発行する予定です。

Polarity (極性スケール)によるKpf値の予測とは？

極性の違いから起きる現象は日常の場面においてもよく経験する事例があります。

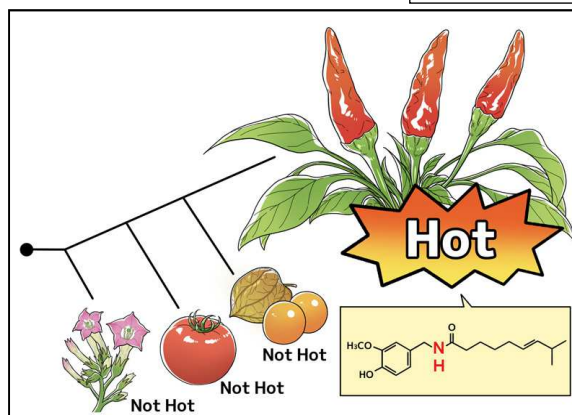
パプリカはピーマンと同様にナス科のトウガラシ属の植物で辛みのない唐辛子です。

Photo_1はパプリカの瓶詰と瓶詰のフタです。フタのシール層にパプリカの色素である リコピンが付着・移行しています。これに似た自然色素であるニンジンのβ-カロチンもリコピンと同じく脂溶性です。蓋のシール剤の極性が色素の極性と似ているため、この色素の移行が生じます。

Photo_2は緑色野菜のホウレンソウが紙・PEカートンに収納されています。ホウレンソウの緑色色素のクロロフィルは疎水性であり、その極性はPE/紙の極性とは反極性であり、PE/紙の表面にはクロロフィル色素が移行しません。Photo_2の Kartonボックスは緑色にはなっていません。このように極性が似たもの同士が引き合い、反極性同士は反発する現象といえます。

Photo_3 は唐辛子とゴマ油を一緒にポリマーフィルム袋に詰めた“ラー油”です。

唐辛子に含まれる辛味は**カプサイシン**ですが、トウガラシ色素の主成分は、カロテノイドの一種である**カプサンチン**に脂肪酸がエステル結合した構造を持っています。ポリマー・フィルムに含まれる移行物質が、食品のゴマ油への移行量をシミュレーションするのが普通ですが、今回は逆に唐辛子の色素の主成分**カプサンチン**が、食品包装材のポリマー・フィルム(LDPE)にどれくらい移行するか？をシミュレーションしてみます。 なおゴマ油のLogPow値は入手不可能なので、代わりにオリーブ・オイル (LogPow値: 23.29)を使用します。



左のイラストは

“トウガラシだけが辛味成分**カプサイシン**を作るメカニズムの一端を解明”という京大のリーサー・ニュースの“最新の研究成果を見る”に掲載されているものです。その概要は**カプサイシン**は、トウガラシに特有の辛味成分です。トウガラシはナス科植物ですが、トマトやジャガイモ など他のナス科植物はカプサイシンを合成しません。なぜトウガラシだけ辛味成分を作れるのか？というカプサイシン生合成の種特異性のメカニズムはよくわかっていません。

この研究に関する詳しい情報は京都大学の最新の研究成果を知る

2023_12_22の記事より【KURENAIアクセスURL】

<http://hdl.handle.net/2433/287099> のイラストです。

オリーブ油のLowPow値は天然物質であることからLowPow値は Not Availableと表記されています。しかしこのURLではOlive OilのLogPow値が**23.29**と記載されていました。。

[OLIVE-OIL_20240312_EN.pdf](#)

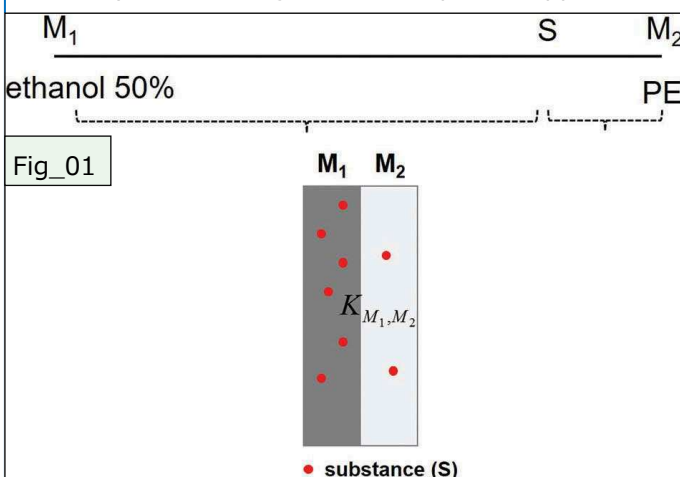
Palmetrics

〒357-0038 埼玉飯能市仲町127-20 リバーサイド飯能 202
株式会社パルメトリクス はんのう研究室
電話 042-978-8655 FAX 042-978-8664

Title : 移行物質と疑似溶媒の極性_Polarityから分配係数を推定するアプローチ

Fig_01: 極性スケール アプローチにより分配係数を算出する計算式

SML6の極性スケールによる分配係数Kの算出式は “Probabilistic migration modelling focused on functional barrier efficiency and low migration concepts in support of risk assessment ” Rainer Brandsch 2017文献“16ページ



にFig_02の計算式が掲載されています。

M1層; 食品接触層のポリマー 事例: LDPE層
M2層; 食品疑似溶媒層 事例: Olive Oil
赤丸; 移行物質 事例: 唐辛子カプサン

下段の分配係数の算定式は
赤色破線枠: 移行物質SubstanceのLogPow値
青色破線枠: 食品接触ポリマー層のLogPow値
緑色破線枠: 疑似溶媒層のLogPow値

上記3種類のLogPowは下記の通りです。

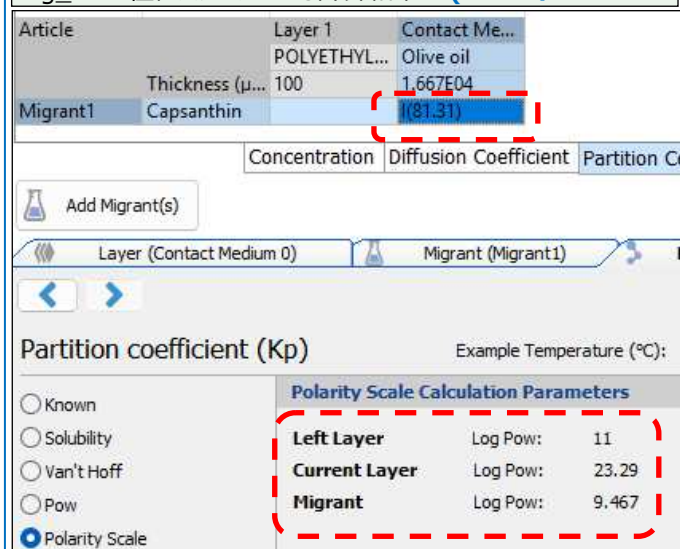
赤色破線: Migrant移行物質の**カプサンチン**LogPowが**9.467**
青色破線: 食品接触層ポリマー層(LDPE)のLogPow が**11.0**
緑色破線: ゴマ油の代替のオリーブ・オイルのLogPow値は**23.29**

左の計算式に上記のLogPowを設定して電卓で手計算すると
 $K_{M1,M2} = 81.31$ となります。

SML6 Ver.6.6以降ではFig_02の計算式が設定されており、
Fig_03の赤破線枠に表示されるように $K_{M1,M2} = 81.32$
となり、手計算と同じ結果が得られます。

Fig_02

$$K_{M1,M2} = \frac{(\log P_{O/W}^S - \log P_{O/W}^{M2})^2}{(\log P_{O/W}^{M1} - \log P_{O/W}^S)^2}$$

Fig_03: 極性スケールによる計算結果 $I(81.31)$ 

説明の繰返しになりますが極性スケールにより分配係数を求める事例として、前ページのポリマーフィルム袋(Photo_3)を採用するとします。ポリマーフィルム袋は**LDPE(低密度ポリエチレン)**とし、中身は唐辛子とオリーブ・オイルが詰めてあるとします。

唐辛子の辛み成分はカプサイシンですが、色移りをテーマとするので**唐辛子色素カプサンチン**が移行物質であるとします。食品包装パッケージ・サイズを 200mm×125mmの封筒状で、全表面積500cm²、容量200mLとします。オリーブオイルの比重0.91 からオリーブ・オイルの重量は136gとなり、容器表面積当たりの食品溶媒層のオリーブオイルの厚みは4.0mmとなります。

極性スケールの分配係数はRealisticモードのみであるため、移行量のシミュレーションはRealisticモードとしています。

食品接触層のポリマー層のLogPowについて

食品接触ポリマー層のLDPEはポリマーであり、LogPow値はデータベースには存在していません。そこで、代わりにLDPEのオリゴマー(低分子)の**LogPow値11.0**を採用します。**LogPow値11.0**はLDPEが疎水性(親油・脂溶性)であることを意味します。

該当するポリマー層の分子量1,000 (Da) 以下のオリゴマーのLogPow値をmolinspirationを使って探索することが必要です。極性スケールによる分配係数を予測する場合、課題は食品接触層ポリマーのオリゴマーを特定し、このオリゴマーのLogPow値をMolinspirationなどのデータベースを駆使して検索することであると思います。

高分子のポリマーのLogPow値については高分子合成や構造の専門的な知識が要求され、単にSML6ソフトウェアの操作方法を理解するだけでは対処できない課題です。なお極性スケールによる分配係数について別途、本ノートの追加編集を計画しています。