

Title : SML6_Version 6.6 は一部の疑似溶媒(Contact Medium)Kpf 計算の改良

SML6は分配係数の推定するため移行物質(Migrant)のPowを使っています。分配係数のKpfは各移行物質で求められているオクタノール・水の分配係数Powとそれぞれの疑似溶媒によって求められたパラメータA,Bの値を使い、下図の赤破線枠の計算式で 求めることができます。食品疑似溶媒(Simulant) の酢酸3%の場合、A値は0, B 値は-1です。しかしA=0の場合、Log Pow = 3.7であってもPow値は無視されてKpf = $10^{-1} = 0.1$ となります。Powで計算する方法を選んでも実際にはPow値で計算されていないこととなります。



Fig_01

Layer 1	Layer 2	Contact Medi...
Ink	POLYETHYLE...	Acetic acid 3%
Thickness (μm)	5	40
230130-NA	230130-NA	14.42
		P(0.1)

Concentration Diffusion Coefficient Partition Coefficient Sol

Add Migrant(s) Run Prediction...

Layer (Contact Medium) Migrant (230130-NA)

Partition coefficient (Kp) Example Temperature (°C): 0

Pow Calculation Parameters

Kpf(-) = $10^{(B + A * \log(\text{Pow}(-)))}$

Food A: 0

Food B: -1

Migrant Log Pow: 3.7

Note: The estimation of Kpf based on Pow is limited to temperature below

Pow値から分配係数を求める機能は非常に便利なのですが、すべての疑似溶媒に適用しようとしても、一部の疑似溶媒では必ずしも高精度の分配係数が得られません。こうした疑似溶媒として n_Heptane や iso_OctaneはパラメータがA=0 B=-1になっています。このような場合、ガイドラインで推奨されている上限値の概念を使って移行物質が疑似溶媒に溶け易いならばK=1、溶け難いならばK=1000として計算するのとあまり変わりません。

そこでVersion6.60はPowによる計算方法を選択した場合、データベースからA=0, B=-1が得られた場合、A,Bの値は正しく設定されていないものとして、Fig_02に示すようにA,B値がMissingと表示するようにしました。今回の変更は正しくないA, Bパラメータから分配係数がKpf=0.1となるような場合の注意喚起のための処置です。

多くの実測データからA,Bの正しい値が得られるならば、疑似溶媒のデータベースのパラメータA, B値を変更可能です。しかし、現状ではそこまで実測データが蓄積されていません。

Fig_02

Layer 1	Layer 2	Contact Me...
Ink	POLYETHYL...	Acetic acid ...
Thickness (μm)	5	40
230130-NA	230130-NA	14.42
		P(N/A)

Concentration Diffusion Coefficient Partition Coefficient Solubility

Add Migrant(s)

Layer (Contact Medium) Migrant (230130-NA) Data (Partition Coefficient)

Partition coefficient (Kp) Example Temperature (°C): 0

Pow Calculation Parameters

Kpf(-) = $10^{(B + A * \log(\text{Pow}(-)))}$

Food A: Missing

Food B: Missing

Migrant Log Pow: 3.7

Version6.52以前のSML6で解析したsmlファイルをVersion6.6で読み込むとFig_02のようにA,BパラメータがMissingと表示され、そのままでは分配係数の予測が不可能です。過去のVersionでは分配係数の予測されていたとしても、Version6.62以降では解析できないようになっています。

この場合、Powによる計算方法ではなくそれ以外の計算方法である極性スケールによる分配係数の推定、あるいはガイドラインに沿ってK=1あるいはK=1,000を選択して分配係数を決定するようにしてください。

Version6.6で改善された結果、食品疑似溶媒によってはMissingという表示されることがあります。これは決してバグではなく、Pow法では分配係数が正しく計算されない可能性を注意喚起していることを理解していただくためのノートです。