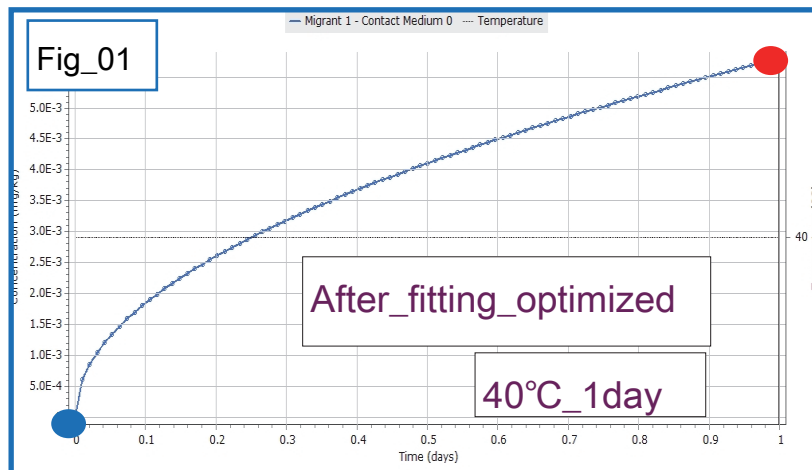


Title : 40℃と70℃溶出量実測データ各1点から活性化エネルギーを求める



FCM : アクリルニトリル_スチレン_コポリマー
NAS(AS_CAS No.0009003-54-7)

移行物質 : アクリルニトリル 15.0ppm

食品疑似溶媒 : 酢酸3%

溶出試験条件 40℃_24時間(1day)

このときの溶出量実測値 : **0.0058ppm**

↓ SML6_Fitting_Module により
40℃の拡散係数を算出する。

Fig_02

Article	Layer 1	Contact Medi...
ACRYLONIT...	ACRYLONIT...	Acetic acid 3%
Thickness (μm)	300	1.667E04
Migrant 1	ACRYLONIT...	14.7
		0.005798

Concentration	Diffusion Coefficient	Partition Coefficient

Fig_03

Article	Layer 1	Contact Medi...
ACRYLONIT...	ACRYLONIT...	Acetic acid 3%
Thickness (μm)	300	1.667E04
Migrant 1	ACRYLONIT...	A(3.172E-12)
		0.0001

Concentration	Diffusion Coefficient	Partition Coefficient

Fig_04

Article	Layer 1	Contact Medi...
ACRYLONIT...	ACRYLONIT...	Acetic acid 3%
Thickness (μm)	300	1.667E04
Migrant 1	ACRYLONIT...	P(0.1)

Concentration	Diffusion Coefficient	Partition Coefficient

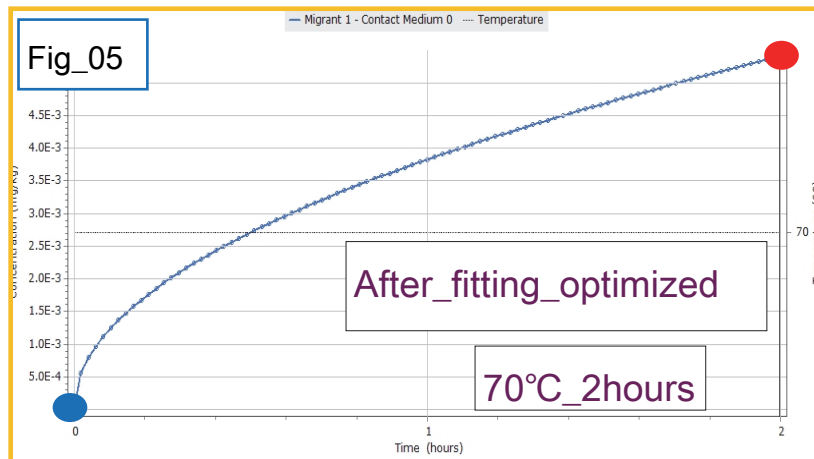
Fig_01ではFitting計算を1～2分間した後、1日後の溶出量が●実測溶出量（0.0058ppm）と一致する拡散係数が求まる。初期値は0.0000ppmとする。実測データ数は途中の経過時間で得られる実測データがあれば、より精度が向上するが、測定データは1点でも実測データの等温条件（40℃）の拡散係数が求まる。

Fig_02から計算上の溶出量は当然のことながら実測値0.0058ppmに近い0.005798ppmとなる。

またNASと食品疑似溶媒の境界面のNAS側のアクリルニトリルの濃度は14.7ppmとなる。

Fig_03では拡散係数が**3.12E-12cm²/s**、Fig_04から分配係数Kpf = 0.1が得られた。

Title : 40℃と70℃溶出量実測データ各1点から活性化エネルギーを求める



FCM : アクリルニトリル_スチレン_コポリマー
NAS(AS_CAS No.0009003-54-7)

移行物質 : アクリルニトリル 15.0ppm

食品疑似溶媒 : 酢酸3%

溶出試験条件 70℃_2時間

このときの溶出量実測値 : **0.0054ppm**

↓ SML6_Fitting_Module により
70℃の拡散係数を算出する。

Fig_06

Article	Layer 1	Contact Medi...
ACRYLONIT...	ACRYLONIT...	Acetic acid 3%
Thickness (μm)	300	1.667E04
Migrant 1	ACRYLONIT...	14.72
		0.0054
	Concentration	Diffusion Coefficient
		Partition Coefficient

Fig_07

Article	Layer 1	Contact Medi...
ACRYLONIT...	ACRYLONIT...	Acetic acid 3%
Thickness (μm)	300	1.667E04
Migrant 1	ACRYLONIT...	A(3.302E-11)
		0.0001
	Concentration	Diffusion Coefficient
		Partition Coefficient

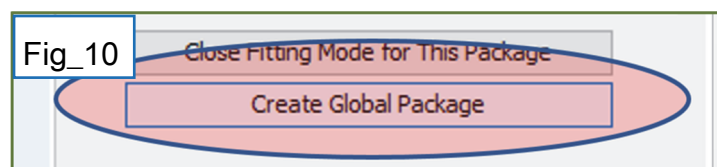
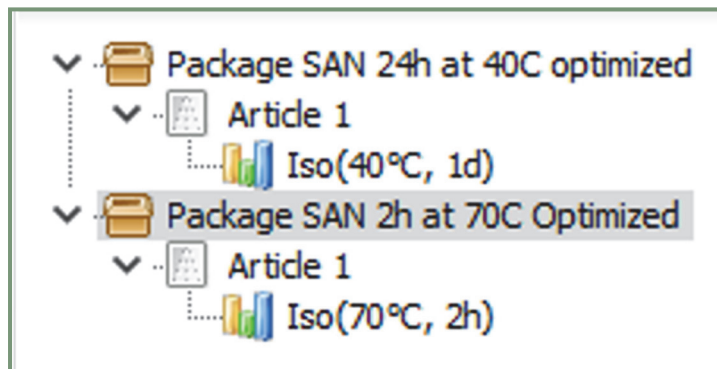
Fig_08

Article	Layer 1	Contact Medi...
ACRYLONIT...	ACRYLONIT...	Acetic acid 3%
Thickness (μm)	300	1.667E04
Migrant 1	ACRYLONIT...	P(0.1)
	Concentration	Diffusion Coefficient
		Partition Coefficient

Fig_06ではFitting計算を1～2分間した後、1日後の溶出量が●実測溶出量（0.0054ppm）と一致する拡散係数が求まる。初期値は0.0000ppmとする。実測データ数は途中の経過時間で得られる実測データがあれば、より精度が向上するが、測定データは1点でも実測データの等温条件（70℃）の拡散係数が求まる。Fig_06から計算上の溶出量は当然のことながら実測値0.0054ppmと一致する0.0054ppm となった。Fig_07では拡散係数が**3.302E-11cm²/s**、Fig_08から分配係数Kpf = 0.1が得られた。溶出温度が40℃から70℃へ上昇すると拡散係数は約1桁大きくなっていることがわかります。

Title : 40℃と70℃溶出量実測データ各1点から活性化エネルギーを求める

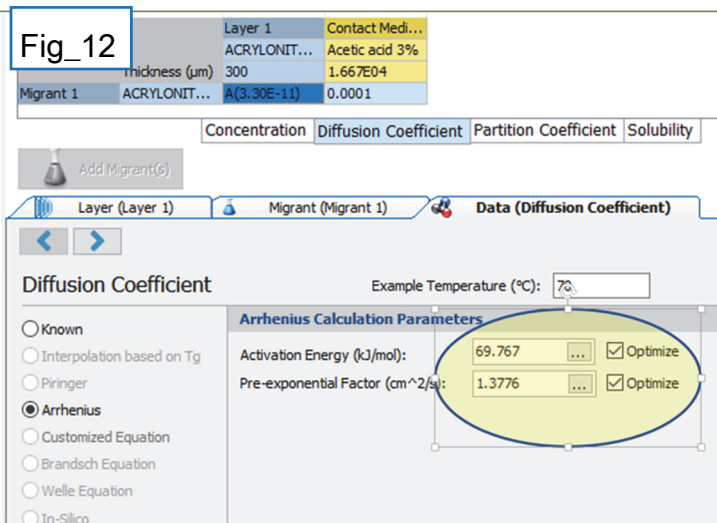
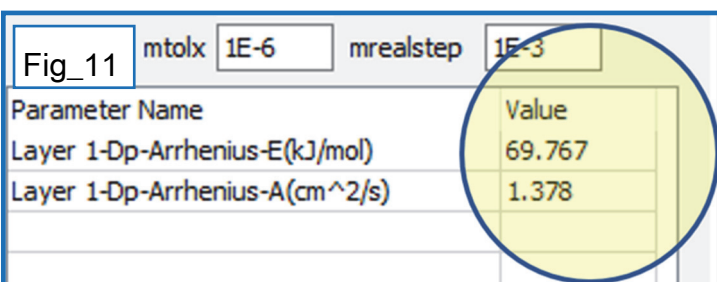
Fig_09 Fig_01～Fig_08の操作後、作成されたファイル



拡散係数のアレニウスの式：拡散係数の温度依存性

$$D = D_0 \exp \left(-\frac{Q}{RT} \right)$$

D : 拡散係数
D₀ : 定数 (振動数因子)
Q : 拡散の活性化エネルギー
R : 気体定数、 T : 温度



実測値で溶出曲線がFittingされた出力ファイルは Optimizedという名前で登録しておきます。

ここまでの操作機能は実測データから拡散係数を求めるだけなので、40℃の拡散係数は40℃における時間に対する溶出量、70℃における時間に対する溶出量予測ができるだけです。40℃～70℃間のある温度における溶出曲線の予測はできません。

40,70℃の実測データから活性化エネルギーを算出する機能がSML6_Fitting_Moduleにあります。

Fig_10のCreate_Global_PackageはFig_09の40℃_Optimizedと70℃_Optimizedから“Global Package”を生成することにより拡散係数の温度依存性から活性化エネルギーを求め、拡散係数をアレニウス式で表現することが可能です。

40℃の拡散係数は3.12E-12cm²/s、一方70℃の拡散係数は3.302E-11cm²/s となるように2点の実測データの拡散係数が1桁も違います。

Fig_11のDp_Arrhenius-A(cm²/s) は活性化エネルギー、1.378は前指数因子D₀に相当します。

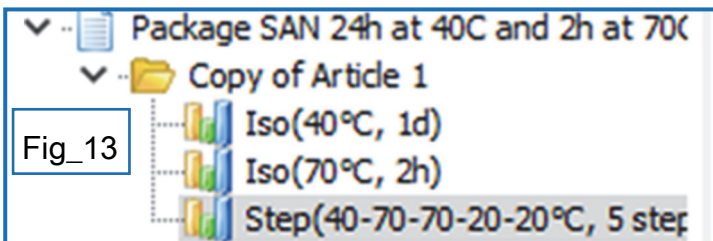
このようにFitting_Module機能を有効に使うには溶出温度は最低2個の温度水準の実測データを使うことが推奨されます。

Fig_12は実測データから求めた拡散係数のアレニウス式を使って、さまざまな温度と時間に対する移行物質の溶出量を予測するときの“拡散係数”はArrheniusを選択します。すると計算された活性化エネルギーと前指数因子が自動的にセットされます。

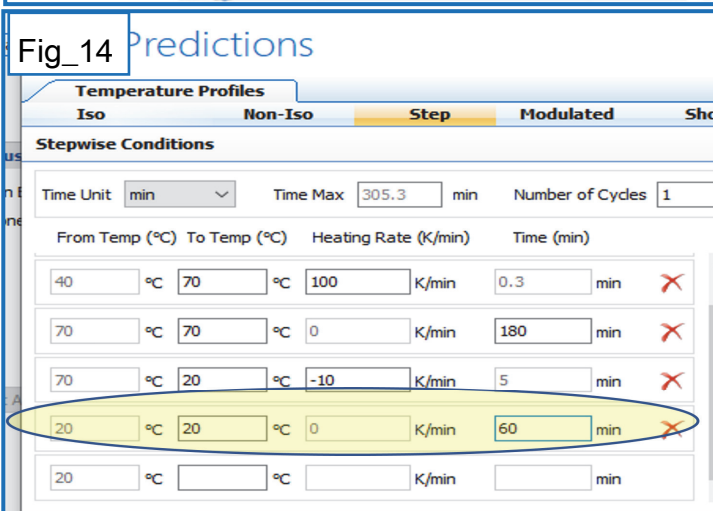
なおFig_09は2個のOptimized PackageからCreate Global packageを生成する事例を紹介していますが、実測データは温度水準が**2個以上**でもArrhenius式が計算されます。

操作手順としてはFig_01, Fig_05と同様に各温度における拡散係数を求めるだけです。

Title : 40℃と70℃溶出量実測データ各1点から活性化エネルギーを求める



Fig_13

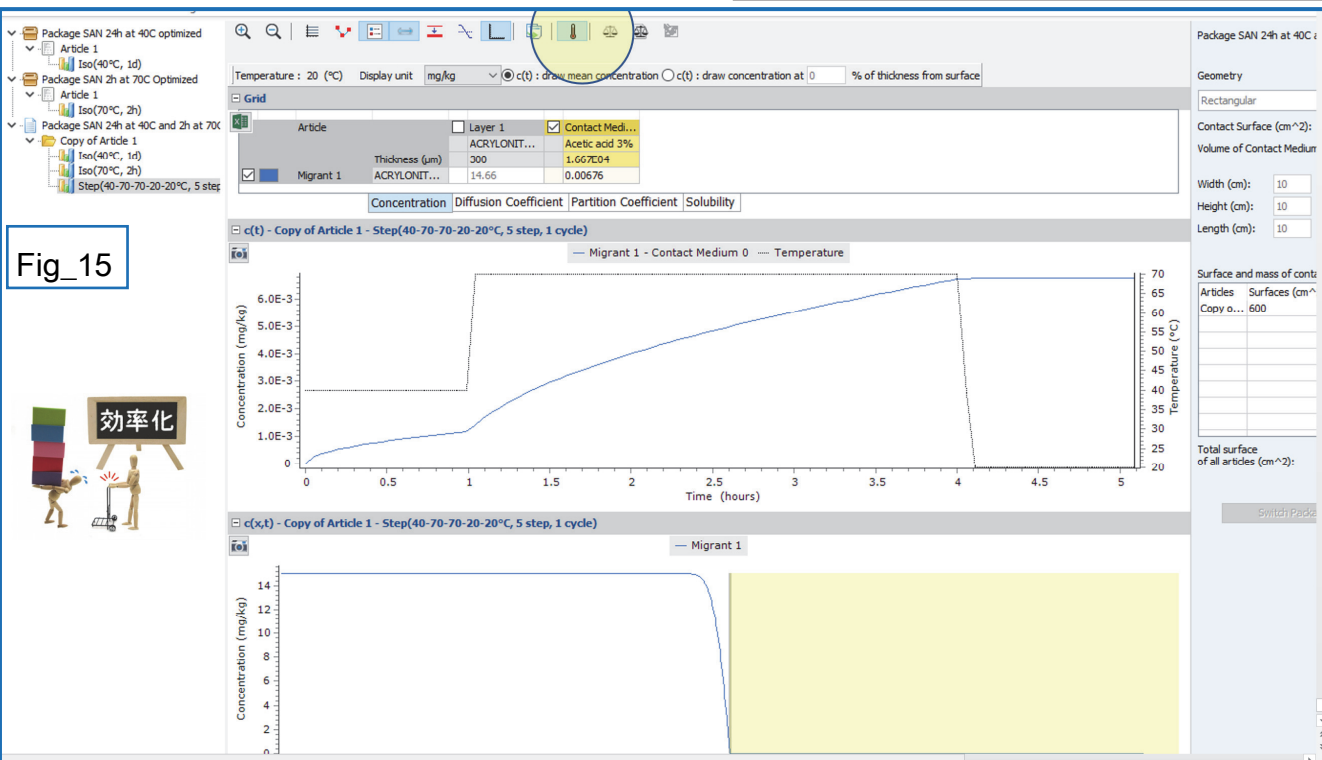


Fig_14

拡散式がArrhenius式で設定されたので40℃～70℃における溶出曲線が予測できます。実測値が1点だけだと実測値の溶出試験温度での予測しかできません。実測値が異なる等温条件の2点だと2点の温度間の予測が可能になります。

Fig_14では40℃_1時間溶出、その後70℃で3時間溶出させ20℃まで10K/minで冷却して1時間保持する温度プログラムを作成します。このプログラムでPredictionをクリックするとFig_15の画面が表示されます。

最終的な溶出量は0.00625mg/mLとなります。



Fig_15

2温度水準の実測データによるFitting Module操作手順書を必要な方は info@palmetrics.co.jp までご連絡ください。SML6の表示画面を中心に150ページもあるため、HPからのダウンロードはちょっと無理があるためです。