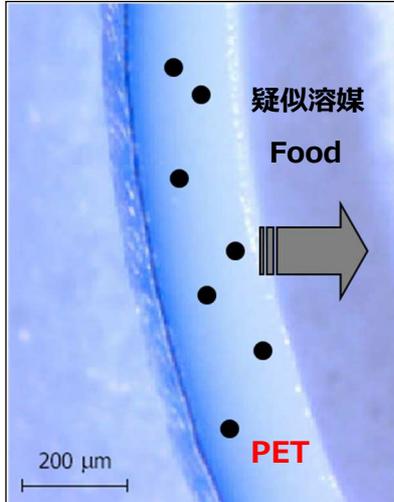


Title: 分配係数K = 1とK = 1000では溶出量はどれくらい違いがあるか？



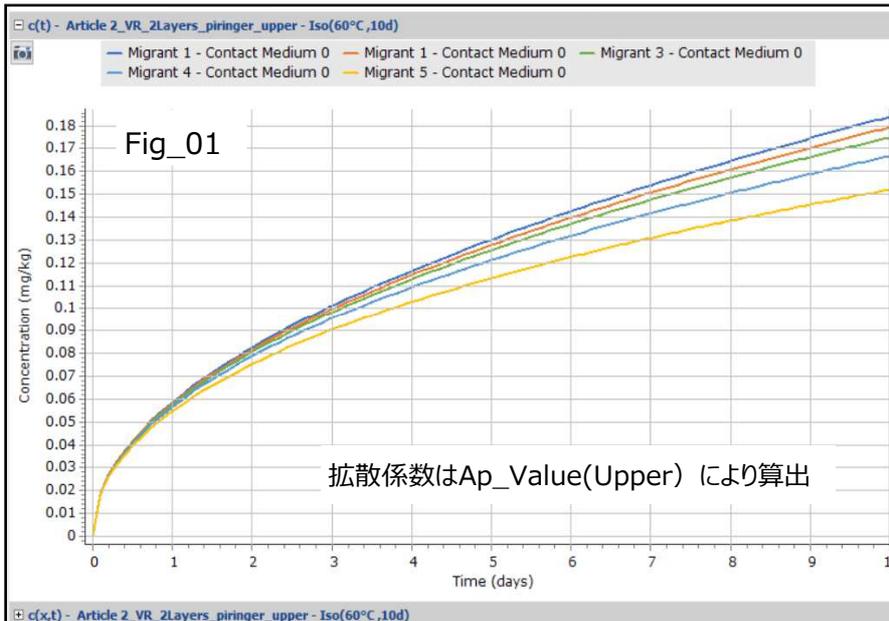
分配係数について

移行物質（左図●）が拡散して疑似溶媒との界面に接したとき、疑似溶媒中に移行物質がどれだけ移行するかはポリマーと疑似溶媒の間の分配係数で決定される。化学物質がFCMのプラスチックから食品や疑似溶媒へ溶出する際に用いる分配係数 K_{pf} (ポリマー-p/食品 f) は、化学物質が“プラスチックと相性が良いか、それとも食品疑似溶媒と相性が良いか”という性質を示す数値であり、 $K_{p,f} = 1000$ であれば、化学物質がプラスチックと相性がよく、疑似溶媒には溶出し難い。 $K_{p,f} = 1$ であれば非常に食品、疑似溶媒へ溶出し易いことを示している

ここで使われる $K = 1$, $K = 1000$ という指標は定量的に定義されているが、予測される疑似溶媒の溶出量で比較すると、それほど大きな差にならないことがある。分配係数の $K = 1$ と $K = 1000$ では感覚的に非常に大きな差があるものと捉えられやすいが、以下に示すように溶出量の差が少ないことがある。

Table_01 : 分配係数を1~2,000の5段階で移行量を比較する。

Article	Layer 1	Layer 1	Contact Medi...
	Polyethylene...	Polyethylene...	Ethanol 10%
	6	120	1.667E04
Migrant 1	178.7	973.2	0.1838
Migrant 1	178.7	973.6	0.1792
Migrant 3	178.7	974.1	0.1748
Migrant 4	178.7	974.9	0.1666
Migrant 5	178.7	976.3	0.1519



Fig_01は分配係数 K_{pf} を1~2000まで変化させると溶出量がどの程度変わるのかを点検した。

ポリマーはPET_厚み120 μ mの中に分子量500g/molの移行物質が1000ppm含まれるとする。

エタノール10%の疑似溶媒に移行物質が温度60 $^{\circ}$ C_10daysに移行するか溶出量の予測曲線である。

- $K_{pf} = 1$ 0.1838ppm
 - $K_{pf} = 250$ 0.1792
 - $K_{pf} = 500$ 0.1748
 - $K_{pf} = 1000$ 0.1666
 - $K_{pf} = 2000$ 0.1519
- $K_{pf} = 1$ と $K_{pf} = 1000$ で9.4%異なるに過ぎない。



Title: 分配係数K = 1とK = 1000では溶出量はどれくらい違いがあるか？



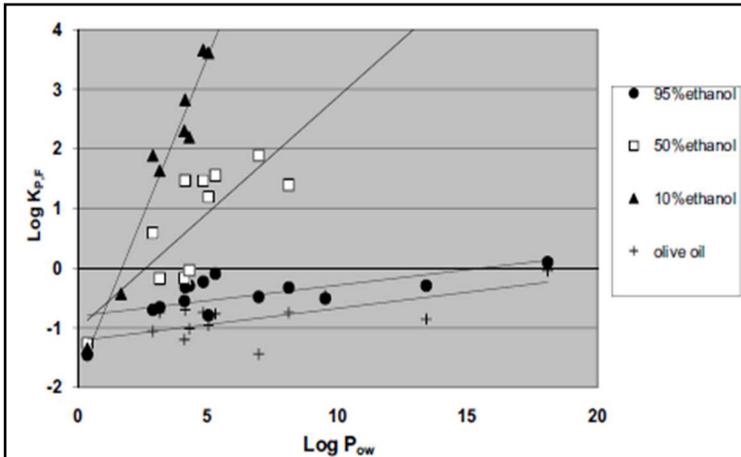
分配係数とは

水と油のように混じり合わない2種類の液体を同じ容器に入れ、カフェインのようなどちらの液体にも溶ける第3の物質を加えてよく振ると、両方の液体中のカフェイン濃度の比は最初に加えた量にかかわらず一定となる。このときの濃度比を、対象となる物質の分配係数という。実際には、水と油のような液体同士の場合以外に、固体と液体の場合でも分配係数は求められる。

用いる2相が水と油の場合、分配係数は対象物質の水へのなじみにくさ(疎水性)を示す数値となる。疎水性は、薬や毒などの化学物質が生物の体内や自然環境中でどのように振る舞うかを考えるときに重要な要素となるため、多くの物質について分配係数が調べられている。とくに、オクタノール/水分配係数 $\log P_{ow}$ は、化学物質を規制する法律等でも参考とされる数値になっており、国際的な測定方法が定められている。現在では計算機化学の発展により、実際に測定しなくてもコンピュータで計算して分配係数が予測できるようになりつつある。

出典：フリー百科事典『ウィキペディア (Wikipedia)』

Fig_02 : オクタノール/水のLogPowを基礎とする分配係数の推定



Fig_02: SML6は分配係数をポリマー/疑似溶媒の分配係数 $K_{p,F}$ とオクタノール/水のLogPowとの間の相関から算出するPowアプローチを採用しています。

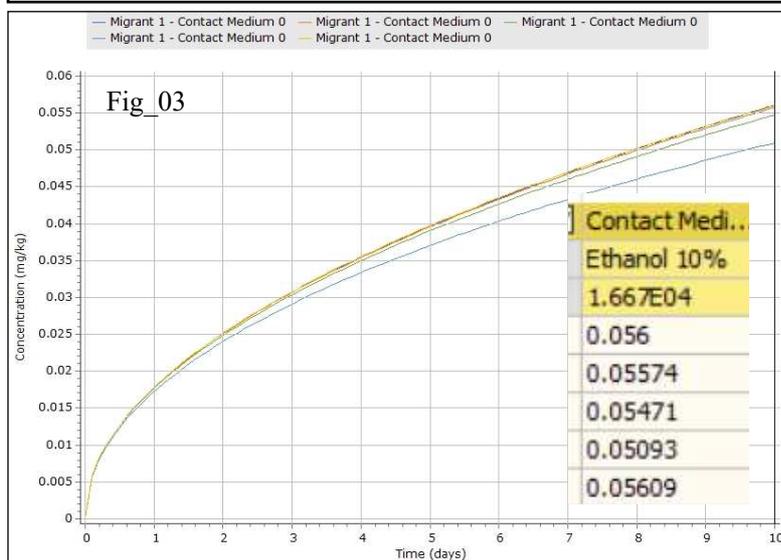
代表的な疑似溶媒について移行物質のlog_Pow値から分配係数が算出されます。

Simulantデータベースから疑似溶媒を選択したとき、Powが選択可能とSML6の操作画面に表示されれば移行物質のLog_PowからKpf値が得られます。

各疑似溶媒に対して下記のように分配係数を算出するための1次式が設定されています。

Ethanol 10%	$y = 1.07 \cdot x - 1.82$
Ethanol 50%	$y = 0.389 \cdot x - 1.02$
Ethanol 95%	$y = 0.052 \cdot x - 0.807$
Olive oil	$y = 0.054 \cdot x - 1.22$

Fig_03 : 厚み120 μ mPET層に含まれる移行物質をアセトアルデヒド 20ppmとし、移行物質の分配係数はLog_Pow値からKpfを算出した。疑似溶媒はエタノール10%である。アセトアルデヒドは水溶性物質にはよく溶けるのでLogPow値から得られた分配係数はKpf=1となっており、常識的に妥当な値です。ここで敢えてKpf値を変えて比較するためにKpf=1, 4, 16, 64 で溶出量を確認した。温度_時間条件は60 $^{\circ}$ C_10daysとしています。



Fig_03のTableは溶出温度60 $^{\circ}$ C_10days後のアセトアルデヒドの濃度(mg/kg)です。

上からKpf=1,4, 16, 64 最下段がLog_Powから算出したKpf値(ほぼ1近傍)です。

Kpf値を1~16にしてもPowから算出した値とそれほど移行値が変わらず、64の場合で10%の差しかないことがわかります

