

**Title: SML6 の計算設定条件カテゴリは難易度で分けると3段階あります。**

SML6を使ってFCM（食品接触材料）から食品疑似溶媒の溶出量(移行量)を算出する場合、計算に必要なファクターとして **A：拡散定数**と**B:分配係数**の2項目があります。

A項目にはA\_1, A\_2, A\_3, B項目にはB\_1, B\_2, B\_3のレベルがあることとなります。

A) FCM（ポリマー）に含まれる添加剤など化学物質のポリマー内での拡散定数は

**A\_1：ポリマー特定係数 Ap\_Value (Piringer定数) から拡散係数を算出。**

**A\_2：ポリマー特定係数が存在しない場合 ⇒ ガラス転移点温度TgからAp\_Valueを推定。**

**A\_3：ポリマー特定係数、ガラス転移点温度が不明な場合 実測データから拡散係数と分配係数を解析する方法**

B) ポリマーと食品疑似溶媒の境界面における分配係数Kpは通常は1~1000の範囲になります。

**B\_1：オクタノール・水の分配係数LogPow値から化学物質と疑似溶媒間のKp値を算出。(Powアプローチ)**

**B\_2：極性スケールにより、分配係数Kpf値を予測する方法**

**B\_3：Kp値(1~1,000)をなんらかの知見から推定して設定する場合。**

**A\_1とB\_1の組合せで計算条件が設定可能な場合 簡単に移行量計算の条件設定が可能**



A\_1：多くの実験データから算出されたAp値から妥当性のある拡散係数

B\_1：化学物質データベースに収録されているPowと疑似溶媒データベースに登録された計算式から妥当性のある分配係数

**A\_2とB\_1の組合せで計算条件を設定する場合も 比較的簡単に条件設定が可能です。**



A\_2：ポリマー特定係数 (Ap\_Value) が得られない場合。ガラス転移点温度Tgが定義可能であれば Ap\_Valueを推定して、拡散係数を予測することが可能です。

SML6ユーザにとってはガラス転移点温度が定義できるならA\_2とB\_1の組合せも条件設定が簡単です。

**B\_2の組合せで計算条件を設定する場合、Kp値の設定にはLogPow値の情報収集が不可欠です。**



**B\_1 食品疑似溶媒がPowアプローチの対象になっていない場合は、Powアプローチは選択不可能 下記のB\_2,とB\_3が選択肢となる。**

**B\_2：極性スケール・アプローチの選択が可能**

**B\_3：移行モデルのガイドラインにより、K=1またはK=1,000を選択する。**

SML6\_Version6.8になった2025年現在の状況に合わせて再編集しました。PIringerのAp\_Valueが設定されている次ページのポリマーの一覧表は、SML6を使用するときには不可欠な情報です。

Palmetrics 株式会社パルメトリクス  
〒350-1328 埼玉県飯能市仲町27-20 リバーサイド飯能202  
電話 042-978-8655 FAX 042-978-8664  
連絡先：info@palmetrics.co.jp

## Technical Note テクニカルノート

SML6\_06R/3

2025-05-03

Title: SML6 の計算設定条件カテゴリーは難易度で分けると3段階あります。

## A\_1 カテゴリーの“簡単に移行量計算の条件設定が可能なAP\_Value ”のあるポリマー”

略称	カタカナ Japanese	English name	CAS No
PE	ポリエチレン	POLYETHYLENE	
LDPE	低密度ポリエチレン	POLYETHYLENE,low density	0009002-88-4
	ポリエチレンワックス	POLYETHYLENE WAX	0009002-88-4
HDPE	高密度ポリエチレン	POLYETHYLENE,high density	0009002-88-4
LLDPE	直鎖状低密度ポリエチレン	POLYETHYLENE,linear low density	0009002-88-4
UHPE	超高分子量ポリエチレン	Ultra High Molecular Weight Polyethylene	
PP	ポリプロピレン	POLYPROPYLENE	
		POLYPROPYLENEGLYCOL AZELATE	0029408-67-1
		POLYPROPYLENEGLYCOL POLYOXYETHYLATED	0009003-11-6
		POLYPROPYLENE WAX	0009003-07-0
		POLYPROPYLENE,isotactic	0009003-07-0
		POLYPROPYLENE,rubbery	0009003-07-0
		POLYPROPYLENE,random	0009003-07-0
	1-ブテン・プロピレン共重合物	1-BUTIEN-ETHYLENE-PROPYLENE,COPOLYMER	0025895-47-0
PS	ポリスチレン	POLYSTYRENE	009003-53-6
		POLYSTYRENE,high impact	009003-53-6
AS	AS樹脂	ACRYLONITRILE-STYRENE,COPOLYMER	009003-54-7
ABS	ABS樹脂	ACRYLONITRILE-BUTADIENE-STYRENE COPOLYMER	009003-56-9
PA	ナイロン	Nylon	
		POYAMIDES(MW>6000	
		MODIFIED POLYAMIDE RESIN	0977139-89-1
		POYAMIDE 11	0025035-04-5
		POLYAMIDE 12	0024937-16-4
		POLYAMIDE 6	0025038-54-4
		POLYAMIDE 66	0032131-17-2
		POLYAMIDE 6,12	0026098-55-5
		POLYAMIDE 6,10	0009011-52-3
PB-1	ポリブテン	POLYBUTENE	0009003-29-6
PET	ポリエチレンテレフタレート	Polyethylene terephthalate	0025038-59-9
PVA	ポリビニルアルコール	POLYVINYL ALCOHOLS	0009002-89-5
POM	ポリアセタール	Polyoxymethylene copolymer produced from the reaction of trioxane and 1,3-dioxolane	0024969-26-4
PAN	ポリアクリロニトリル	POLYACRYLONITRILE	0025014-41-9
E/NB	エチレン・2_ノルボルネン樹脂	ETHYLENE AND 2-NORBORNENE COPOLYMERS	0026007-43-2

Technical Note テクニカルノート SML6\_06R/3 2025-05-03

Title: SML6 の計算設定条件は

A\_2カテゴリー：Ap\_Valueがないポリマーはガラス転移点温度からAp\_Valueを推定します。

下段の表はAp\_Valueのないポリマーです。

ただしガラス転移点温度の情報は欠落があり、完成した表ではありません。

ガラス転移点温度はSML6のポリマーデータベースに掲載されていない場合があります。

この場合は別途、移行計算の対象となるポリマーについて調査をお願いします。

ポリマー特定係数がない場合、解析があ対象となるポリマーについてガラス転移点温度などを検索してSML6はUserDB作成機能を使って、自前のデータベースを構築するようにします。

A\_3のような場合の最終手段は、溶出試験(移行試験)により直接、拡散係数と分配係数を実験データから求めるオプション機能 (Fitting Module機能) を使うことができます。

なお溶解度に関する情報はSML6のデータベースやその他のデータベースから入手することは困難です。したがって、分配係数を食品疑似溶媒と移行物質の溶解度から求めることは現実的ではありません。



A\_2カテゴリーのポリマー

略称	カタカナ Japanese	English name	CAS No
PMMA	メタクリル樹脂	Polymethyl Methacrylate (Tg105°C)	009003-56-9
PMP	ポリメチルペンテン	polymethylpentene	
BDR	1,3-ブタジエン樹脂	POLYBUTADIENE (Tg -102°C)	0009003-17-2
PC	ポリカーボネート	polycarbonate	0025037-45-0
PPE	ポリフェニレンエーテル	Polyphenyleneether (Tg -126°C)	0009016-00-6
FR	ふっ素樹脂	fluorocarbon polymers	
PBT	ポリブチレンテレフタレート	polybutylene terephthalate (Tg 17°C)	26062-94-2
MS	ポリメタクリルスチレン		
PASF	ポリアリルサルホン	polyarylsulfone	
PAR	ポリアリレート	Poly Arylate	
HBP	ヒドロキシ安息香酸ポリエステル	Hydroxybenzoic acid polyester	
PEI	ポリエーテルイミド	Polyetherimide (Tg215°C)	0061128-46-9
PCT	ポリシクロヘキシレンジ メチレンテレフタレート		
PEN	ポリエチレンナフタレート	Polyethylene naphthalate	
PPC	ポリエステルカーボネート	Polyestercarbonate	
E/TD	エチレン・テトラシクロドデセン・コポリマー		
PLA	ポリ乳酸	polylactic acid, polylactide	
PBS	ポリブチレンサクシネート		

SML6が発表された2020年に作成したノートですがSML6\_Version6.8になった2025年5月の状況に合わせて再編集しました。

Palmetrics 株式会社パルメトリクス  
〒350-1328 埼玉県飯能市仲町27-20 リバーサイド飯能202  
電話 042-978-8655 FAX 042-978-8664  
連絡先: [info@palmetrics.co.jp](mailto:info@palmetrics.co.jp)