

[ここに入力]

欧州 JRC「特定移行の推定のための移行のモデル化の適用に関する実用ガイドライン」

塩ビ食品衛生協議会 石動正和

2018.07.06

原文：<http://publications.jrc.ec.europa.eu/repository/handle/JRC98028>

概要：

このドキュメントの目的は、適合性の目的のため関連の入力パラメーターに関するガイダンスを提供することにより、プラスチック食品接触材料からの保守的な、上限の特定移行を示す拡散のモデルについて、ユーザーを助けることにある。このドキュメントは、以前の版「EU 指令 2002/72/EC の支援の中で一般に認められた拡散モデルによる特定移行量の推定」を代替し、現在の法的根拠（規則(EU)No 10/2011）を改訂し、プラスチック多層からの特定移行の推定に移行モデルの使用を可能にする。

このドキュメントは、DG SANTE を代表する欧州委員会 JRC により実施された移行のモデル化に関するタスクフォースによりコンスタントな定期的評価に基づき、現在のモデルの入力パラメーターの有効性を示している。タスクフォースのメンバーは、E.J. Hoekstra, R. Brandsch, C. Dequatre, P. Mercea, M.R. Milana, A. Störmer, X. Trier, O. Vitrac A. Schäfer 及び C. Simoneau であり、彼らはこの実用的ガイダンスドキュメントの著者である。

1 序論

欧州の法制度は、既存の SML と OML によりプラスチック食品接触材料からの物質移行について適合性の検証を求める。そのため規則（EU）No 10/2011 に特定された試験条件下、食品／食品疑似溶媒を使用し実施する移行試験が存在する。

過去 20 年に亘る数多くの科学的調査により、食品接触材料から食品及び食品疑似溶媒への移行は予測可能な物理プロセスであることが立証されてきた。食品との特定の相互作用がないとき、移行はプラスチック材料から食品への物質の質量移動であり、殆どの場合 Fick の拡散式に従う（Crank, 1979 年；Vieth, 1991 年）。

これにより実験方法に加え、理論的移行推定に基づく代替ツールが、移行物質の適合性検証に適用できる。EU はこのオプションを一般に認められた拡散モデルを新たな適合に使用するため導入し、指令 2001/62/EC により検証ツールに格付けしたが、この指令は 90/128/EEC を改訂したものである。指令 90/128/EEC は、指令 2002/72/EC により代替され、これは規則（EU）No 10/2011 に置き換わった。この規則の付属書 V 2.2.3 章は、移行のモデル化が、この方法が検証方法よりも厳しいと認められる限り（注 1）、特定移行のスクリーニングツールとして適用できると述べている：

「特殊移行のスクリーニングのため、実際の移行より過大評価するように設計された科学的エビデンスに基づく一般に知られた拡散モデルを適用し、材料又は製品中の化学物質の残留量に基づき、想定される移行を計算することができる。」

（注 1）注：規則（EU）No 10/2011 の今後の改訂では、“それより厳しく”を“少なくともそれと同様に厳しく”に変更される可能性がある。

[ここに入力]

第 18 条 3 は、移行モデルを使用した適合性検証を規制している：

「食品にまだ接触していない材料及び製品について、特殊移行量制限の適合性の食品スクリーニングは、付属書 V 第 2 章 第 2.2 部に示された規則に従い、スクリーニングアプローチを適用して実施することができる。もし材料又は製品がスクリーニングアプローチで移行量制限に適合しないときは、その不適合を確認するため、．．． 確認試験を行わねばならない。」

一般に認められたモデルは科学的エビデンスに基づかねばならない。この要件の実現は、EU PJ SMT-CT98-7513 第 5 次混合液に充分接触する単層膜への枠組みプログラムの下での「指令 90/128/EEC の裏付けにおける移行モデル評価」とともに達成された（Hinrichs と Piringer、2002 年）。

この PJ の主な目的はつぎであった。

■ SML と最終製品における物質の最大許容初期濃度（MIC）との間の関連性が、ある種の境界の制限とともに設定できることを立証すること、及び、

■ 適合性の目的のため潜在する移行モデルの有効性を立証する書類を策定すること。その結果、移行モデルで用されるパラメーターは、移行の“上限の”推定値が得られる方法で選択された。

この PJ の最終報告書は、ピアレビューされた科学ジャーナルで公表された（Begley ら、2005 年）。この研究 PJ は、特にポリオレフィンの単層プラスチックに焦点化し、適用される数式とそれらが適正に適用される質量移行の係数と条件を設定した。

設定された拡散モデルは、境界とシンプル化した仮定が満たされる限り、上限移行値の推定が可能である。このモデルは継続的改訂や改良プロセスを課され、適切なスキルやトレーニングを経たユーザーだけで実施されねばならない。

現在の技術の状況に従い、移行指標の範囲と適用性は、規則（EU）No 10/2011 による食品疑似溶媒と接触するとき、全ての設定条件が満たされる限り、付属書 10 にリストされたプラスチックからの移行物の質量移動を要約する。

他のポリマーやこの書類の 3.2 節にリストされていない状況について、拡散のモデル化は、その特定ケースでのモデルの使用について、特定移行量が実験より過大に評価されることを立証すべく、3.2.6 節に記述された手続きがフォローされ正確に書類化される限り、使用できる。

このドキュメントは、予件数のポリマーや移行物への拡散と分配係数の推定手続きに関する用途分野における継続的改訂と検証を示す。

2 移行のモデル化の概念

移行は、包装材料から食品への化学物質のネットの質量移動を記述する一般的用語である（Crompton、2007 年）。規則（EU）No 10/2011 にカバーされるプラスチック食品接触材料（FCM）の場合、つぎのようないくつかのマクロな質量移行機構を含む：

[ここに入力]

i)異なるプラスチック材料をはじめ食品による、最初のソースとは区別される液体や気層の中及びそれらを通した質量の拡散、及び、

ii) 各断面の媒体間の界面での排出／吸収。

それが液体の層に係るとき、移行は又新たな移行や移流による混合効果をカバーする。FCM 規制の枠組みにおいて、移行のモデル化は抽象的プロセスであり、多様なシンプル化を伴う計算と、接触する食品へ移行する可能性のある物質の最大量の仮定とともに目指される。このドキュメントの目的に使用される移行モデルが、現実の機構の全ての詳細（例えば、食品での或いは包装材料アセンブリの特定要素での正確な濃度）の再現を目指してはいないが、決定に導くための、食品や食品疑似溶媒中の濃度に充分現実的或いは上限の値の再現を目指すため使用されることに留意することは重要である（Brandsch ら、2002 年；Vergnaud と Rosca、2006 年；Vitrac と Hayert、2007 年 a；Gillet ら、2009 年 b）。

与件の物質についてプラスチック食品接触材料からの接触媒体への特定移行を示すため、質量移動の物理的記述への科学的モデル（付属書 9 参照）、プラスチックにおける拡散係数の値や一般的に認められた推定手続き（第 3 節参照）及びプラスチックー食品及びプラスチックープラスチック（多層構造）の界面での分配条件への仮定（第 4 節参照）が必要になる。

移行のモデル化自体いくつかの観点をカバーしている：シンプル化の設定及び幾何を伴ったコード化及びマスバランスでの接触条件、初期及び境界条件；計算の実施；不確実なパラメーターの明確化、改良やヒントとなる条件。

各構造的包装材料の層における定まった一定の拡散係数をもつ移行問題への構成的等式の例は、多くの教科書（Crank、1975 年；Piringer と Baner、2000 年、2008 年；Vergnaud、1991 年；Vitrac と Hayert、2007 年）や Helmroth ら（2002 年）や Pocas ら（2008 年）によりレビューされ、時には異なる合意を伴ったピアレビューに見出すことができる。単層材料について、固体や液体の食品をシミュレート可能な一般的境界条件を伴った最も一般的フォーミュレーションや解析解が、Virac と Hayert（2006 年）により示されている。彼らは Sagiv（2001 年、2002 年）により提案された初期の解を拡張している。多層材料については、一般的解析解は存在せず、数学的モデル化を使用せざるをえない。提案された数学的スキーム（Roduit ら、2005 年；Tosa ら、2008 年；Torres ら、2012 年）の中で、準解析的解と効率的フリーボリュームのフォーミュレーションを組み合わせた非常に効率的なスキームを含む一般的フォーミュレーションが、Nguyen ら（2013 年）により報告されている。

移行モデルにより計算される特定移行の過大評価の境界は、ポリマーと移行物の組み合わせや接触条件により多様である；それは一般に、より低い拡散の場合、より高くなる（例えば、高分子量の移行物、ポリオレフィン以外）。しかし常に全ての場合過大評価になるわけではない。その結果モデルは、移行物の分子量、「上限」拡散係数の導出のため実験上試験され使用される温度や接触条件の範囲で使用されねばならない。モデルのユーザーへのガイダンスを提供する有用な説明は、つぎのパラグラフの中で報告される。

[ここに入力]

3 拡散係数とポリマー特有のパラメーターの推定

上述の通り、プラスチックにおける移行のモデル化のため必要な一つの主なパラメーターとして、プラスチックに含まれる移行物の拡散係数がある一方、その他にプラスチックと食品（疑似溶媒）間での移行物の分配係数がある。両パラメーターは、真の食品包装用途での移行レベルを決定するとき決定的役割を演じる（Reynier ら、1999 年；RoduitとDudler、2005 年；PiringerとBaner、2008 年）。何らかの特定ケースで拡散係数の正確な値について知見が欠落すると、規制上の立場からはまず、移行の観点とともに現実的「最悪ケース」のシナリオを推定するような方式で、これらの値を設定することが重要になる。この要件に合わせるため、この節では拡散係数を過大評価する単純なアプローチを詳述する。

3.1 拡散係数の推定

文献では、ポリマーにおける拡散係数の理論的推定へ一連のモデルを報告している（Mercea、2008 年）が、これらのモデルは、少なくとも今日では現実的適用に対し余りに複雑である。それ故よりシンプルなアプローチが 1990 年代開発された。拡散係数（ D_p ）推定の最初の近似において、それらは、経験上の相関性と実験データに基づき、温度に依存するポリマー固有の定数（ A_p ）の導入と絶対温度（ T ）により、移行物に関連する相対分子量（ M_r ）と関連させられた。式 1) 参照。同様のアプローチは以前も使用されていた（Piringer、1994 年；Hamdani ら、1997 年；Limm と Hollifield、1996 年）。 D_p 推定のためシンプルな式を得る目的を追求するため、ポリオレフィンとある種の他のプラスチック材料へ改良された等式が開発された（Brandsch ら、2002 年）。この等式により、ポリマーにおける移行物のポリマー固有の上限拡散係数 D_p^* が推定でき、現実的な拡散係数 D_p に代わって使用できるようになった。 $D_p \leq D_p^*$ であることを強調しなければならない。それ故こうした D_p^* を使用すると、移行の推定は過大推定した移行値になる。現象的な導出や、実験上の拡散と移行データの統計学的評価（Mercea と Piringer、1998 年）からは、 D_p^* はつぎのアレニウスタイプの様式により推定できる（Brandsch ら、2002 年）。

$$1) \quad D_p^* = \exp \left(A_p^* - 0.1351 M_r^{2/3} + 0.003 M_r - \frac{10454R}{RT} \right) \quad (\text{m}^2/\text{s})$$

and

$$2) \quad A_p^* = A_p^* - \frac{\tau}{T}$$

ここで M_r は移行物（Da）の相対分子量、 τ はポリマー固有の「活性化温度」の上昇（K）、 R は気体定数（8.3145 J/mol/K）であり、10454R は参照活性化エネルギー（J/mol）である。
 A_p^* は上限値を、 A_p はそのパラメーターが温度依存性であることを示す。

等式 1 より、主な変数があり、それがポリマー内での拡散を決定することが分かる。それら 2 つはポリマーに関連し、移行物の相対分子量と絶対温度である。

パラメーター A_p はポリマーにリンクし、移行物との関係の中でポリマーマトリックスの基本的拡散挙動を記述する。軟質／可撓性ポリマー例えば LDPE では、 A_p 値は高い拡散挙動（ D_p ）を強く反映し、この結果ポリマー内部を速く移行する一方、ポリエステルなど固い鎖のポリマーは、拡散挙動が小さくより低い A_p 値をもつ。 A_p は温度により変わり、

[ここに入力]

A_p' は温度から独立した項である。

A_p^* （及び $A_p'^*$ ）は上限値であり、それらは実験上確定した拡散係数から等式 1 を経て得られる個々の値により、最初の段階で統計学的に導出される。

その後適合性評価のための第 2 段階で、等式 1 は $D_p \leq D_p^*$ を満足する条件で、上限拡散係数 D_p^* を得る。これら D_p^* を使用するので、移行は過大評価されることになり、この結果過大評価された移行速度が、ある温度範囲内で拡散則に基づく移行モデルにより計算される。

パラメーター τ は、等式 1 にある「参照活性化エネルギー」 $10454 \cdot R$ とともに、双方が拡散活性化エネルギー $E_A = (10454 + \tau) R$ に寄与する。シンプル化のため、このモデルでは、活性化エネルギーは適用可能な分子量範囲で全ての分子に同じであると仮定される。

多くのポリマーマトリックスにおける多くの一連の移行物について、文献から E_A データを解析すると、多くのポリマーについて $\tau=0$ になると結論された。この結果、LDPE への最初の近似として $\tau=0$ と置くと、 $E_A=86.92\text{kJ/mol}$ となるが、これが文献データにある中央値 $E_A=87\text{kJ/mol}$ とよく合っている。

食品包装材料に関する他の重要なプラスチックの Gr、例えば HDPE や PET は、一般により高い活性化エネルギーが観察される。これらの材料への良い E_A 中央値は、 1577K の τ に対し 100kJ/mol となる。

与件のポリマーや温度範囲において、各移行物は異なる拡散活性化エネルギーをもつことが知られている（Mercea、2000 年）。ありうる理由として、中央値に係るポリマーは、移行のモデル化に使用される。中央値からの移行物固有の活性化エネルギーの導出は、統計的評価によりフォローされポリマー固有の定常における拡散データの変更において考慮される。

単層プラスチックに記述されるこの同様のアプローチや推定手続き（上記参照）は、多層プラスチックの各層にも適用される。

3.2 ポリマー固有のパラメーター評価

欧州 PJ SMT-CT98-7513「指令 90/128/EEC に裏付けられる移行モデル評価」に参加した専門家は、大多数の一貫した結果によりポリオレフィンに全面的に検証された指標ツールを検討することに合意した。この PJ の間、専門家はポリオレフィンに比較しポリオレフィン以外（PS、HIPS、PET、PEN、PA のような）には十分なデータが利用できないが、充分規定された移行実験が国際的に認知された研究所で選択され実施されている事実により、ベースは充分確実と見られることに合意した。市場状況をカバーするポリオレフィン以外のサンプルについて、これらの等式は実験上の移行値より過大評価していることが示された。PC や可塑化された PVC について、SMT PJ の期間、専門家は、移行のモデル化に信頼できるパラメーターのセットを創るにはデータが不足していると考えた。

この現在の最新情報は JRC が協同し指定されたタスクフォースの結果であり、特に PET の場合、PJ SMT（即ち 2000～2004 年の期間）以降に得られた実験上の移行データを検討された。より新たなデータはまだ評価されていないが、今後の改訂の一部となるであろう。

[ここに入力]

適宜、以前の主要パラメーターの値はリファインされた。加えて新たなポリマーの移行挙動はそれらポリマー固有の定数 ($A_p'^*$ 値) の中で実験データやこの最新情報に導入されたそれらの関連パラメーターに基づき評価された。

この結果として、ポリマー固有の移行のモデル化への最新の要件はつぎのパラグラフに記述される。

3.2.1 ポリオレフィン

食品包装材料に使用される最も重要なポリオレフィン (PO) は、LDPE 及び LLDPE、HDPE 及び多様なタイプの PP (PP-ランダム、PP-ホモ及び PP-ブロックコポリマー) である (注 2)。これら材料は食品包装材料の完全性が維持される特定の温度範囲をもつ。これら包装材料の製品の知見によれば、PO 使用の温度範囲は一般に 100℃未満に限定され、これは又移行のモデル化の用途として検証されている (表 1)。これらの温度条件下そしておよそ 1%以下の移行物の初期濃度 $C_{p,0}$ により、PO での移行プロセスは一般的な拡散の物理法則に従う。

(注 2) オレフィン以外のモノマー、例えばアクリル系、ビニル系などを有するコポリマーはまだ評価されていない。

Table 1 Parameter ranges for the applicability of the migration model for selected PO.

Polymer	T (°C)	M_r (g mol ⁻¹)	$A_p'^*$	τ (K)
LDPE	≤ 80	30 - 2000	11.5	0
LLDPE	≤ 100	30 - 2000	11.5	0
HDPE	≤ 90	30 - 2000	14.5	1577
PP (homo + random)	≤ 120	30 - 2000	13.1	1577
PP (blockcopolymer)	≤ 100	30 - 2000	11.5	0

PO について、等式 (1) による $A_p'^*$ の現実的上限值及び関連の τ は、ここ 40 年間に亘り文献に報告されている拡散係数を伴う DB を用い、まず経験的に決定された (Mercea, 2000 年)。加えて最近の移行測定による結果が、これら $A_p'^*$ 及び τ 値を確定し検証するため使用された。更にモデル評価の方法論に対する詳細が先頃 Begley らにより公表された (2005 年)。この $A_p'^*$ 値は計算上の値 A_p' 値の 95 パーセンタイルに基づいている (注 3)。

(注 3) 現在の $A_p'^*$ 値は Begley ら、2005 年に拠っている。

[ここに入力]

3.2.2 ポリスチレン

食品包装用途に使用されるポリスチレン（PS）は大方 3 つの一般的カテゴリーに分けられる：GPPS、HIPS 及び SBS。これらポリマーの実験上の移行データ評価を用い、移行のモデル化に適用できる温度範囲は、前もって与えられた一般要件により求められる通り、表 2 にリストされる。これらのケースと初期移行物の濃度では、 $C_{p,0}$ はおよそ 1%より高くなく、PS での移行プロセスは、一般に受容される拡散の物理的法則に従う。

Table 2 Ranges of parameters for the applicability of the migration model for PS, HIPS and SBS.

Polymer	T (°C)	M_r (g mol ⁻¹)	$A_{p'}^*$	τ (K)
PS	≤ 70	104 - 647	-1	0
HIPS	≤ 70	104 - 430	1.0	0
SBS	≤ 70	84 - 689	10.5	0
PS/SBS blend [#]	≤ 70	84 - 689	$A_{p'}^*(\text{blend}) = -1 + 0.115 \cdot \% \text{SBS}$	0

[#] blending PS with SBS results in a linear relationship of $A_{p'}^*$ value as a function of the percentage of SBS (% SBS) added to PS. The upper bound $A_{p'}^*$ value for a blend of PS with SBS can be described by the given relationship

PS, HIPS 及び SBS について、 $A_{p'}^*$ の現実的値及び τ は、拡散係数の DB から実験的に決定され、ここ数年報告され充分設定された移行実験で検証されている（Hinrichsと Piringer、2002 年；Begleyら、2005 年）。等式 1 と 2 にあるこれら $A_{p'}^*$ 値及び τ （表 2 参照）の適用により、「上限」拡散係数 D_p^* が得られる。これら D_p^* は、利用可能な実験上の移行データを過大評価に導く。

3.2.3 ポリエステル

食品包装用途に主に使用されるポリエステルは PET 及び PEN である。これらポリマーの実験上の移行データ評価を用い、移行のモデル化に適用できる温度範囲は、前もって与えられた一般要件に求められる通り、表 3 にリストされる。これらの場合、これらポリエステルの移行プロセスは一般に受容される拡散の物理的法則に従う。

PET 及び PEN について、等式 2 における $A_{p'}^*$ 及び τ の現実的値は、ここ数年報告され充分設定された移行実験による移行データから実験的に決定されている（Hinrichsと Piringer、2002 年；Begleyら、2005 年）。等式 1 及び 2 にあるこれら $A_{p'}^*$ 値及び τ を使用することで、「上限」拡散係数（ D_p^* ）が得られる。この値は、実験上の移行データの過大評価に導く。このことは極く最近 PET ボトルからソフトドリンクへの移行に関する組織的研究で確認された（Franzと Welle、2008 年）。この研究で得られた結果は、 $T_g 70^\circ\text{C}$ 以下の温度をもつ PET において $A_{p'}^*$ 指定を裏付けている。新たなデータ評価により温度を 2 つに分けることになった（Feigenbaumら、2005 年；Pennarun ら、2005 年）。

温度の分割点は、市場にある PET の最低 T_g 値を反映し安全マージンがあるよう選択された（PET の典型的 T_g 範囲は $70 \sim 80^\circ\text{C}$ ）。低分子量の場合、一般に 50g/mol 未満を参照し、 $A_{p'}^*$ 値は両方の場合とも 6.4 としなければならない。これらの場合そして移行物の初期濃度 $C_{p,0}$ がおよそ 1%を超えないとき、移行プロセスは一般に受容される拡散の物理的法則に従う。

[ここに入力]

Table 3 Ranges of parameters for the applicability of the migration model for PET and PEN

Polymer	T (°C)	M _r (g mol ⁻¹)	A _p '*	τ (K)
PET	70<T≤175	>32	6.4	1577
PET	≤70	<50	6.4	1577
PET	≤70	≥50	3.1	1577
PEN	≤175	>32	5.0	1577

3.2.4 ポリアミド

ポリアミド（PA）については、拡散係数及び移行データの両方とも参照できるデータが少ない。更に食品又は食品疑似溶媒の水含有量が移行のメカニズムに強く影響を与える。

現在のデータはオリーブ油やイソオクタンに接触する PA だけに係っている。しかし膨潤状態にある PA ではない。タスクフォースは、現在のデータは全ての関連食品を示していないと考えている。このモデルはそのため PA について充分検証されていないと考えられる。疑似溶媒 D2 及びイソオクタンに係るつぎの表は単に情報提供のために示されている。

Table 4 Ranges of parameters for the applicability of the migration model for polyamides[#]

Polymer	T (°C)	M _r (g mol ⁻¹)	A _p '*	τ (K)
PA6	≤100	113 [@]	0	0
PA6,6	≤100	32-587	2.0	0
PA12	≤100	197 ^{\$}	2.6	0

[#] use of parameters limited to simulant D2 and isooctane. PA was previously equilibrated with air at room temperature, within an approximate range of 40-65% relative humidity. [@] caprolactam. ^{\$} laurolactam

PA6,PA6,6 及び PA12 について、式 2 における A_p'*及びτの現実的値は、ここ数年報告され充分設定された移行実験による移行データから実験的に決定されている（Hinrichsと Piringer、2002 年；Begley ら、2005 年；Stoffers ら、2003 年、2005 年）。等式 1 及び 2 にあるこれら A_p'*値及びτを使用することで、「上限」拡散係数 D_p*が得られる。この値は、実験上の移行データを過大評価に導く。移行物の初期濃度 C_{p,0} は 1%を超えてはならない。

[ここに入力]

3.2.5 PVC

3.2.5.1 硬質 PVC

硬質 PVC については、20～70℃の温度範囲で、移行データ及び拡散係数が参照可能である（FABES 未公表データ）。これらポリマーの実験上の移行データ評価を用いると、移行のモデル化に適用できる温度範囲は、以前与えられた一般要件に求められる通り、表 5 にリストされる。これらの場合、そして移行物の初期濃度 $C_{p,0}$ が 1% を超えない条件において、PVC における移行プロセスは一般に受容される拡散の物理的法則式に従う。

Table 5 Ranges of parameters for the applicability of the migration model for rigid PVC

Polymer	T (°C)	M_r (g mol ⁻¹)	$A_{p'}^*$	τ (K)
PVC (rigid)	≤70	>225	-1.0	0

3.2.5.2 可塑化 PVC

可塑化 PVC については、拡散係数及び移行データ双方とも参照できるデータが少ない。現在のデータは個々の可塑剤の移行だけに係っている。それ故タスクフォースは、現在のデータは添加剤の混合物の存在に係っていないので、モデルは可塑化 PVC 全体で検証されたとは考えていない。つぎの表と式は単に情報提供のために示されている。

可塑剤は高濃度で使用されるため、拡散係数は PVC の可塑剤或いは可塑剤混合物の濃度全体とともにばらつくと予想される。可塑剤の濃度全体の初期値に基づく拡散係数は過大評価される。移行は一般的拡散の法則に従い、提案される拡散係数は定数で常に現実の拡散係数を過大評価していると仮定される。

PVC に添加された可塑剤の%は関数としての $A_{p'}^*$ とリニアな関係にある（表 6）。この等式にあるパラメーターは又、可塑剤の分子量でばらつくことに留意しなければならない。30%(w/w)の量と M_r 370～419g/mol をもつ 4 つの可塑剤について、可塑化 PVC の計算上の $A_{p'}^*14.6$ は合理的と考えられる。この式は、試験した範囲以上の分子量をもつ可塑剤、そして移行物の初期濃度 $C_{p,0}$ が最大 30%のときだけに使用されねばならない。

Table 6 Ranges of parameters for the applicability of the migration model for plasticised PVC. plast, plasticiser

Polymer	T (°C)	M_r (g mol ⁻¹)	$A_{p'}^*$	τ (K)
PVC (plasticised)	≤70	370-419	$A_{p'}^*(PVC) = -1 + 0.52 \cdot \%plast$	0

3.2.6 他のポリマー、移行物及び他のパラメーターの範囲

この節にリストされていない他のポリマーやパラメーターについては、移行のモデル化が、プラスチックから食品又は食品疑似溶媒への質量移動（移行プロセス）が拡散の法則に従い、パラメーター（ $A_{p'}^*$ や τ ）が認知され検証された手続きに従い決定される限り、適合目的に使用できる。こうした手続きは今後のガイダンスドキュメントで記述される。これらガイドラインは、 D_p 値が如何に生じ、それらが如何に $A_{p'}^*$ 値に変換できるか、食品接触条件や分子量の範囲の文脈で適用範囲に基づき証明しなければならない。更に書類化により、特定ケースでのモデルの使用が、必然的に全用途ケースの 95 パーセンタイルにおいて過大評価に導く決定的証拠を齎さねばならない。

[ここに入力]

4 分配係数の推定

4.1 単層

特定データがない中、最悪ケースのシナリオをモデル化するには、ポリマーPと食品Fの間の移行物の分配係数は $K_{P,F}=1$ ととらえねばならない。このことはその物質がFの中で充分溶解していることを意味する。このオプションは、最も高い移行値、即ち食品接触材料から食品への移行物が平衡状態で完全に移行することにつながる。この平衡分配が現実の適用で到達するかどうかの問題は、ポリマータイプにより、そしてより一層現実の接触条件下でのポリマーの拡散挙動に依存する。他の多くの場合、移行物がFで部分的にだけ溶解しているときは、 $K_{P,F}=1000$ と設定されねばならない。例えばポリマー材料が水性食品／疑似溶媒に接触しているときの親油性物質に対してである。

4.2 多層

特定データがない中では最悪ケースのシナリオがモデル化に必要な。移行物(P_i)を含むポリマー層と食品(F)間における全てのポリマー層の分配係数は、 $K_{P_i, P_{i-1}}=1$ ($i=i \rightarrow 1$)ととらえねばならない(注4)。移行物を含むポリマー層とその外側にあるポリマー層(P_n)間における全てのポリマー層(図1参照)或いはファンクショナルバリアーの分配係数は、 $K_{P_{i+1}, P_i}=0.001$ ($i=i \rightarrow n-1$)ととらえねばならない。

(注4) 注記： $K_{P,F}=C_P/C_F$ 及び $K_{F,P}=C_F/C_P$ 。ここでCは、関連の層や食品における移行物の平衡状態での濃度である。

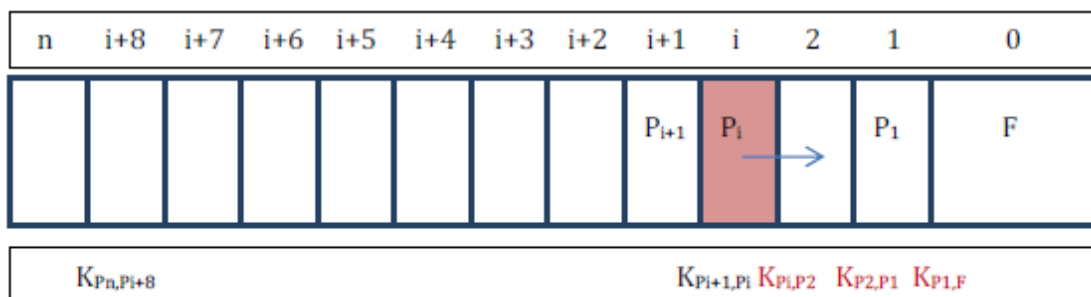


Figure 1 Forced specific migration of migrant in one layer (i) to food. K in black is 0.001 and K in red is 1

[ここに入力]

もし移行物が更なる層に存在するなら、いくつかの最悪ケースシナリオが存在する可能性があり、最悪ケースがある番号の確認にモデル化する必要がある。移行物 (P_i) を含む最内のポリマー層と食品 (F) 間における全てのポリマー層の分配係数は、 $K_{P_i, P_{i-1}}=1$ ($i=i \rightarrow 1$) ととらえねばならず、移行物 (P_j) を含む最外のポリマー層と最も外側のポリマー層 (P_n) の間にある全てのポリマー層は或いはファンクショナルバリアーは、 $K_{P_{j+1}, P_j}=0.001$ ($j=j \rightarrow n-1$) ととらえねばならない。各シナリオについて、移行物 (P_x) を含むある特定のポリマー層とその外側の層間の分配係数は、 $K_{P_{x+1}, P_x}=0.001$ ($x=x \rightarrow j-1$) と設定される一方、残りの分配係数は、 $K_{P_x, P_{x-1}}=0.001$ ($x=i+1 \rightarrow x$) と設定される。



Figure 2 Example of scenario's of forced specific migration of one migrant that is present in three layers (i, j, x), to food. In this example three scenario's are necessary to be calculated. K in black is 0.001 and K in red is 1

[ここに入力]

5 他の拡散モデルの入力パラメーター

5.1 初期濃度

附属書 10 にリストされた全物質の初期濃度($C_{p,0}$)は 1%を超えてはならない。1%超のレベルは、予件のポリマーで可塑化作用が生じる可能性があり、拡散モデルは使用できない。もし可塑化効果が観察されたら、移行モデルの使用は、可塑化効果を考慮した A_p 値と見極める実験とともに初めて可能になる。

例外として、可塑化 PVC における可塑剤濃度は、相対分子量が 255g/mol 以上の条件で、30%まで可能である (3.2.5.2 節参照)

ある物質がポリマーからブリードしているとき、その物質はポリマーに均一の分散していないので、モデル化は適用できない。ブリードの問題は調査されるポリマー／移行物の組み合わせに関しケースバイケースで検討されねばならない。ポリオレフィンに典型的に導入される静電防止剤や防曇剤は、ポリマー材料の表面に出てブリードしやすい。同様の物質はポリエステルやポリアミドのような極性の強いポリマー材料からはブリードしない。移行モデルのユーザーは、ブリード現象が移行レベルに影響しやすい特定ケースへ移行モデル適用を避けるため、ブリードの可能性を慎重に考慮するようアドバイスされる。

5.2 食品と食品疑似溶媒

食品と食品疑似溶媒は拡散モデルでそのようには選択されない。それらは、密度や食品における拡散係数により代表される。規則 (EU) No 10/2011 は慣用的に、食品の密度を 1kg/m^3 と設定している。密度のより高い食品では、慣用的値を使用するとき、特定移行は過小評価される。それ故、未知の食品に接触するポリマー、又慣用的な密度より低いもの或いは液状食品疑似溶媒には、食品の密度 1kg/m^3 の使用が推奨される。もし食品密度が既知か慣用的密度より高いなら、最悪ケースの食品に真の密度の使用が推奨される。

「充分混合された」条件を満たすため、食品又は液状食品疑似溶媒における拡散係数はデフォルトとして $10^{-6}\text{m}^2/\text{s}$ が設定される。

移行モデルは、ポリマーに膨潤が生じたとき使用できない。膨潤の例はイソオクタンと接触するポリオレフィン或いは高い膨潤力をもつ試験溶媒とポリマーの他の組み合わせである。なぜなら初期及び境界条件により、ポリマーでの拡散は不均一であり、時間によりばらつくからである。

5.3 接触温度－時間条件

接触時間と温度は、規則(EU)No 10/2011 附属書 V 第 2 章の関連セクションに従い、それらが最悪予見される条件を代表するものとして選択されねばならない。最高の特定期移行が SML と比較されねばならない。

5.4 食品の接触面積、体積及び効果的厚み

食品の接触面積と体積は、それらが規則(EU)No 10/2011 第 17 条 2 に特定された成形品に対し最悪ケースで予見される比表面積 $6\text{dm}^2/\text{kg}$ を代表するものとして選択されねばならない。キャップ、ガasket、ストッパーや他のシーリング材には、第 17 条 3 の追加ルールが適用できる (規則(EU)No 10/2011 の枠組みにおけるプラスチック接触材料の適合試験への技術ガイダンス 2016 年参照)。

[ここに入力]

食品の効果的厚みは食品の容積と接触面積の比である。比表面積 $6\text{dm}^2/\text{kg}$ について、このことは モデルでは食品厚み $16666.7\mu\text{m}$ に相当する。

5.5 留保される入力パラメーター

留保される入力パラメーター、例えばポリマーやポリマー層の厚みと密度には、真の値が使用されねばならない。

5.6 プラスチック多層材料

プラスチック多層材料の製造や貯蔵の間に、材料の層間で拡散や分配が既に生じている。

プラスチック多層材料が、シートや成形品それぞれを積層して貯蔵されるなら、異なるシート間で拡散が生じる。積層には異なる 3 つの可能性がある：

- 1) 全ての食品接触層が、つぎのシートの食品非接触層と接触する（セットオフ）
- 2) 食品接触層が、つぎのシートの食品接触層と接触する、及び
- 3) 食品接触層がランダムに、つぎのシートの食品接触層或いは食品非接触層と接触する。

もしプラスチック多層材料がロール状で作られ置かれるなら、食品接触層は食品非接触層と接触する（セットオフ）。

プラスチック多層材料の移行モデル化に、このプロセスや食品接触前の結果となる現象が考慮される必要がある。その他移行モデルは、真の特定移行の過小評価となる恐れがある。

6 手続き、現実的適用、例示

モデル化は、つぎの推定を可能にする：

(i) ポリマーに含有される既知分子量の移行物の既存の初期濃度の知見に基づき、その特定時間及び温度に依存する与件としての食品疑似溶媒又は食品への移行が等式 3（付属書 9.1）或いは数式解から計算できること。

(ii) 逆に、与件としての移行量制限や SML 値に基づき、食品接触に使用可能なポリマーに含まれる既知の分子量をもつ移行物の最大初期濃度（MIC）が等式 7（付属書 9.1）から推定できること。

一般的規則として：上に強調した移行推定スキームが特定移行量制限（SML）を超える結果に導く場合、実験上の適合試験が強制される。

もしポリマー固有の $A_p'^*$ 値が 3.2 節にある表で知られておらず又は適用できないとき、移行モデルは使用できず、3.2.6 節にある手続きが実施され、移行モデルの適用性を拡大しなければならない。

[ここに入力]

6.1 物質の SML との適合性試験

このドキュメントの主要な目的の一つは、適合性試験へのガイダンスを提供することにある。その結果、適用の主要分野の一つは規則(EU)No 10/2011 及びその改正にリストされた物質の SML についての適合性管理に係る。

現段階の知見では、移行モデルは 3.2 章に記述されたポリマーに適し、そして条件の下にあることを強調しなければならない。加えて付属書 10 は規則(EU)No 10/2011 にある全物質をリストし、下記基準に基づきモデル化するとき理論的可能性を示している。しかしながらモデルの適用に先立ち、そのモデルの仮定（第 2 章）が、検討される物質に満たされているか常に確認しなければならない。

移行のモデル化への可能性にはつぎの基準が適用される：

充分規定された分子量をもち、ポリマーマトリックスに溶解している全ての有機系の非ガス状の物質は移行のモデル化に可能である。

充分規定された分子量分布をもつ全てのポリマー添加剤、即ち GPC、MS 或いは何らかの他の分析技術で分子量分布追跡にアクセス可能なものが、移行のモデル化に可能である。移行のモデル化は、調べられているポリマー添加剤の現実の分子量分布が、適した分析技術の適用で参照可能な限り適用できる。過大推定されたモデル化の移行結果は、質量分布の最低分子量が拡散係数推定に使用されるとき得られる。

ある種のポリマー材料からブリードし出てくるとして知られる全ての有機物質、例えば PO に添加される静電防止剤や防曇剤は、留保の下リストに収載された。移行のモデル化はブリードが生じない場合（ポリマー／移行物の組み合わせ）だけに適用される。

注記：プラスチックからの与件の成分のブリードは、その成分とポリマーマトリックスにおける極性の差が高く、そのポリマーでその成分の溶解性が低いときに生じる。更にブリードはしばしば、物質が界面活性構造（極性のヘッド、非極性のテイル）をもつとき生じる。ブリードにより、成分はポリマー／大気の界面に短時間で移行し、短い接触時間で高い移行値となる。移行モデル化の見解のポイントから、移行物が P の中で均一分散しているとする仮定はもはや満たされず、従ってブリードが生じたとき、移行のモデル化は適用できない。

分子量が規定されていない全ての有機系混合物、典型的には油脂や油、ロジン、ワックス、スターチ、タンパク質、セルロース、綿など天然素材から得られるものは、移行のモデル化ができない。しかし混合物の構成成分で 2,000g/mol 未満の充分規定された分子量をもつ特定の物質は、移行のモデル化で扱うことが可能である。

全ての無機化合物、金属、金属酸化物、金属塩などは、付属書 10 に個別に指定されていないとき、移行のモデル化はできない。

付属書 10 のリストは、推定を行うユーザーへの参考資料である。このリストから選ばれれば、移行のモデル化は、その物質が 3.2 章で特定されたポリマーの一つに含まれ、又分配係数 K_{pF} の正確な値が適用される限り、その物質に適用できる。

[ここに入力]

6.2 適合性管理の最適化

モデルに必要な入力情報が参照可能なとき、移行モデルは適合性管理戦略の最適化に使用できる。

PO 及び PO 以外に常時使用されるある種の添加剤について、FCM や PM/REF 番号、化学品名、Mr 値、SML 値及び最大濃度 $C_{p,0}$ の表が、付属書 11 に見出すことができる。

食品接触材料の製造、加工、輸入及び小売りに係る各企業にとって、既存の EU 規制への適合を立証する責務がある。国の当局は、法制度がフォローされることを強制する責任がある。彼らの責務を満たすため、企業（又は契約された管理ラボ）及び規制当局双方は、食品接触材料の適合性試験、例えば実験による化学品の移行試験及び／又は移行モデルによる試験に従事する。

しかしモデル化により得られる結果は、モデルに入力されるデータが良好であるときだけ、そしてモデルの仮定が満たされるときだけ有効である。移行モデルをうまく使用するため、充分記述された食品接触材料であることが必須である。これは典型的に製造とサプライチェーンを通し、原材料製造者から食品工業まで、又最終食品接触材料製品の「販売者」までを経た良好なトレーサビリティと情報の流れを求める。又移行モデルは既知の初期濃度をもつ既知物質の移行だけを決定できることを強調しなければならない。

食品接触材料の適合性を試験する時、問われるべき最初の質問は、どのタイプのポリマーが扱われるのかである。もし疑問があれば FTIR がある種の助けになる可能性がある。ポリマーがこのガイドの表にリストされていれば、移行のモデル化は適用できる。なければポリマーの特定定数 (A_p^* 及び τ) が 3.2.6 節に記述した通り決定されねばならず、そのとき移行モデルが適用できる。他に実験上での移行－化学物質試験を実施する必要がある。

ポリマーの特定の一環として、次の 5 項目を知ることが決定的である。

1. 移行可能などのような物質が試験対象物に存在しているか？
(例えば添加物、モノマー残留量)
2. それらの初期濃度、例えば、配合又は実験上のテストから見出される添加剤の量は？
(Feigenbaum によるガイダンス、2002 年参照)
3. 食品接触材料の機能及びユーザーに与えられたあらゆる助言に基づき、現実の生活における「最悪ケース」で予見される用途は何か？ (食品のタイプ、最高温度及び最大包装期間)
4. 最終製品の意図される計上、特にどの表面エリアがどの食品の部分に接触しているか？
(即ち比表面積)

5. これらの物質の何が現実ポリマーに使用でき、モデル化可能物質の制限を満たすことが可能か？ 例えば、ブリードする物質はポリマーに均一には分散しない、そのためモデル化できない。

[ここに入力]

現実全ての必要情報を得るのは挑戦的であり（Petersen ほか、2005 年）、その 1,3 及び 4 は実験上のテストを実施するあらゆる管理ラボへの元々の要件だが、2 と 5 は移行モデル特有のものである。典型的には 2 つの状況が存在する（図 3）：

- 全ての必要情報が参照できる：例として原材料製造業者がその最終的に意図される用途について、代表的ポリマーサンプルの適合性を試験しているとき。これは例えばコーヒーカップに知られている。

- 必要な情報がないとき：例として製品の上市段階のある場面で、中間製造業者が、規制当局の目的の裏付け資料を再現するため、彼らの出発材料の生産者の窓口を書類化していない。この状況は、規則 (EC) No 2023/2006 第 5 条、及び枠組み規則 (EC) No 1935/2004 第 17 条違反である。

受理される情報の質は常に、実験結果の場合のように、批判的に判断されねばならない。データが信頼できると見られる時、移行モデルの適用はそのまま行われ、時間は大きく節約される。特に移行モデルが SML 未満の移行を示すとき、何ら新たな対策を取る必要はない。移行モデルが SML を超えて示されるとき、実験上の移行試験が実施されねばならない。移行モデルにより製造業者に提供される有用な追加オプションは、最大許容初期濃度（MIC）を計算するため移行モデルを使用することである。この情報は移行を SML 未満に保つため、食品接触材料のフォーミュレーションに、又製品の使用制限（例えば、食品タイプ、より低い接触温度、時間及び比表面積）に適用できる。

施行の最初の段階で、規制当局は製造チェーンからの情報を収集する努力をしなければならない。その情報が参照可能なら、移行のモデル化は上述の通りフォロー可能である。移行物質が既知であるが、それらの C_{p0} が未知の時、その時は 3 つの可能性がある。

生産業者は、多様なポリマー（表 4.2.1(PO)及び表 4.2.2(PO 以外)にリスト）に使用可能な添加物の通常の最大濃度（ C_{p0} ）を企業から得る必要がある。これら物質は、与件のポリマーへの通常の組成に基づき、付属書 10 の表から抽出できる。

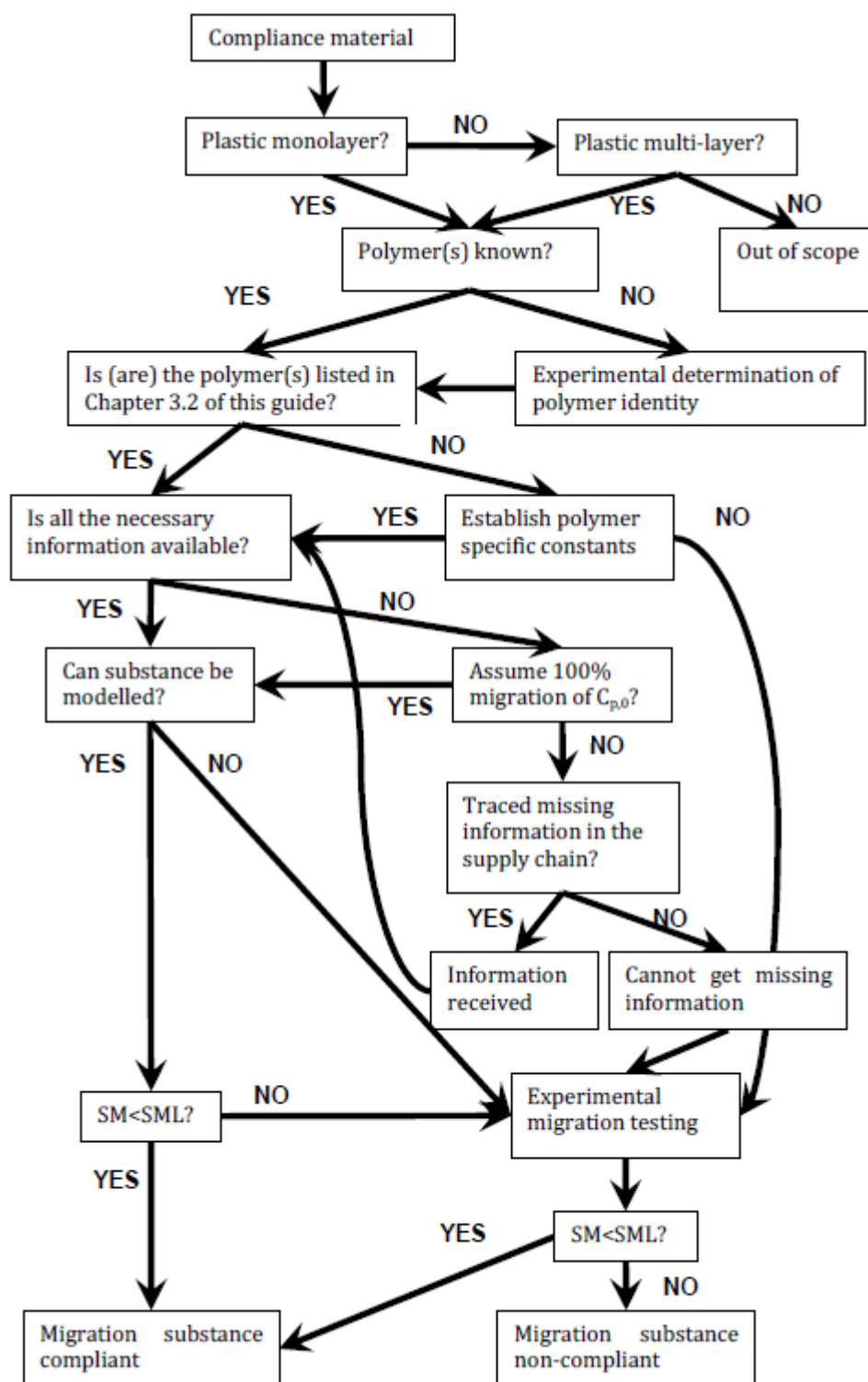
これらの表はプラスチック材料の最も重要な生産業者への協議及びプラスチック材料用添加剤を参照した二次的文献により作成された（Zweifel, 2001 年）。特定番号に加え、食品接触プラスチック材料に使用されると報告された上限初期濃度が示されている。

しかしながら Milana と Piringer（2002 年）で全面的に特定されたように、「この表は、他の情報が試験すべきサンプルの構成にないとき、特定の添加剤を選択する最初のガイドを提供する事例としてだけ検討されねばならない」。

一方強制機関は、尋ねるべき全ての情報を得る法的権限をもっているので、私企業はその組成に関する守秘問題のため、現実困難に直面する可能性がある。

図 3 に見る通り、材料の適合性決定へのエンドポイントは実験上の試行試験である。この意味は、実際実験上の移行試験が（規制当局に認証される）その食品接触材料が適法か否か決定するため利用可能でなければならないことを意味する。

結論として移行のモデル化は、特に食品接触材料に関し必要な全情報を予め評価しているひとに時間とコストの節約になりうる。



17 / 24

[ここに入力]

7 参考文献（略）

8 付属書－シンボルと要略記号のリスト（略）

9 付属書－移行の等式

9.1 拡散式への解析解

限定した体積（ V_F ）の十分な混合された液体に接触するプラスチック単層からの移行物の特定移行の解析解は、Cranck（1975 年）の等式 4.37 で示されている；

$$3) \quad \frac{m_{F,t}}{A} = c_{P,0} \rho_P d_P \left(\frac{\alpha}{1+\alpha} \right) \left[1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\alpha(1+\alpha)}{1+\alpha+\alpha^2 q_n^2} \exp \left(-q_n^2 \frac{D_P}{d_P^2} t \right) \right]$$

where:

$$4) \quad \alpha = \frac{1}{K_{P,F}} \frac{V_F}{V_P} = \frac{c_{F,\infty}}{c_{P,\infty}} \frac{\rho_F}{\rho_P} \frac{V_F}{V_P} = \frac{m_{F,\infty}}{m_{P,\infty}}$$

$$5) \quad \tan q_n = -\alpha q_n$$

$$6) \quad m_{F,\infty} + m_{P,\infty} = m_{P,0}$$

ここで $m_{F,t}$ は時間 t 後の P から F への移行物質の質量、 $C_{P,0}$ は P における移行物の初期濃度、 V_P は P の体積、 A は P と F 間の接触面積、 P と F は P とそれに関する F の密度、そして q_n は等式 5 のゼロ以外の正の平方根である。

注 1：異なるパラメーターには正確な次元を使用することが重要である。

注 2：与件の時間 t に対し、等式 3 における系 $m_{F,t}/A$ に良い推定を得るには、最後の 2 t つの計算間の相対差異が 1%未満になるまで行わねばならない。

製品の初期の有働の適合性確認のために、等式 3 が SML に基づきプラスチックでの移行物質の最大初期濃度（MIC）を計算するため再調整できる。

$$7) \quad MIC = SML \frac{V_F \rho_F}{A} \left\{ \rho_P d_P \left(\frac{\alpha}{1+\alpha} \right) \left[1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\alpha(1+\alpha)}{1+\alpha+\alpha^2 q_n^2} \exp \left(-q_n^2 \frac{D_P}{d_P^2} t \right) \right] \right\}^{-1}$$

[ここに入力]

9.2 数値アプローチ

一方拡散式の解析解（9.1 節参照）、数値解は、殆どの場合使用しなければならない。一般的に数値解が多層プラスチック（Roduit と Dudler、2005 年、Tosa ら、2008 年、Reynier ら、2002 年）、そしてより複雑な条件への単層、例えば濃度依存性がある拡散係数や非線形境界条件（Piringer と Baner、2008 年）に使用される。

画分の拡散係数を数学的に如何に解くかは、標準の教科書に記述され、このガイダンスの範囲を超えている。数学的アルゴリズムは信頼される必要があり、検証が求められる。信頼できる数学的アルゴリズムは、そのシステムでの物質の質量を保存する必要がある。即ち適用される数学の方法論により移行物の質量を設定したり消費したりしない。数学的アルゴリズムの検証は 2 つの方法で達成できる。

(1) 事例の結果そのものと直接比較する、及び／又は

(2) 単層構造或いは単層にシンプル化できる多層構造への拡散式の解析解と比較する。

10 付属書 – 改訂規則（EU）No 10/2011 の PL からの物質リスト、それらの移行のモデル化の可能性を含め。

この付属書は、規則（EU）No 10/2011 付属書 I 表 1 の各改訂をフォローし改訂される必要があるとき、別ドキュメントして公表される。

11 付属書 – ポリマー使用されるいくつかの添加剤の PM/REF-番号、化学物質名、分子量、SML 値及び最大濃度

[ここに入力]

1.1 ポリオレフィン

PM/ REF	Chemical name	M _r	SML (mg/kg)	C _{P,0} (%)
38560	2,5-bis(5-tert-butyl-2-benzoxazolyl)thiophene	431	0.6	
38800	N,N'-bis(3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionyl)-hydrazide	553	15	HDPE 0.2
38820	Bis(2,4-di-tert-butylphenyl)pentaerythritol diphosphite	605	0.6	PP 0.1; LDPE 0.06
38840	Bis(2,4-dicumylphenyl)pentaerythritol diphosphite	853	5	LDPE 0.06
39890	Bis(methylbenzylidene) sorbitol	386	60	
46480	Dibenzylidene sorbitol	358	60	
46640	2,6-Di-tert-butyl-p-cresol (BHT)	220	3	PP 0.2
48640	2,4-Dihydroxybenzophenone	214	6	
48720	4,4'-Dihydroxybenzophenone	214	6	
48880	2,2'-Dihydroxy-4-methoxy benzophenone	244	6	
53670	Ethylenglycol-bis(3,3-bis(3-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)butyrate)	795	6	PP 0.2; HDPE 0.1
54300	2,2'-Ethylidene-bis(4,6-di-tert-butyl-phenyl)-fluorophosphonite	487	6	PP 0.1; LDPE 0.06
60320	2-(2-Hydroxy-3,5-bis(1,1-dimethylbenzyl)phenyl)benzo-triazole	448	1.5	
60400	2-(2'-Hydroxy-3'-tert-butyl-5'-methyl-phenyl)-5-chlorobenzotriazole	316	30	PP 0.4; HDPE 0.3
60480	2-(2'-Hydroxy-3,5'-di-tert-butylphenyl)-5-chlorobenzotriazole	358	30	PP 0.5
61600	2-Hydroxy-4-n-octylbenzophenone	326	6	PP 0.5; HDPE 0.3; LDPE 0.5
68320	Octadecyl 3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate	531	6	PP 0.2; HDPE 0.1; LDPE 0.3
71680	Pentaerythritol tetrakis[3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)-propionate]	1178	60	PP 0.2; HDPE 0.25; LDPE 0.03
74010	Phosphorous acid, bis(2,4-di-tert-butyl-6-methylphenyl)ethyl ester	514	5	PP 0.1; HDPE 0.05; LDPE 0.06
74240	Phosphorous acid, tris(2,4-di-tert-butylphenyl)ester	647	60	PP 0.1; HDPE 0.5; LDPE 0.12
80480	Poly[6-morpholino-1,3,5-triazine-2,4-diyl]-[(2,2,6,6-tertamethyl-4-piperidyl)imino]-hexamethylene-[(2,2,6,6-tertamethyl-4-piperidyl)imino]	2600 -	1.8	PP 0.5
81200	Poly[6-[(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-amino]-1,3,5-triazine-2,4-diyl]-[(2,2,6,6-tertamethyl-4-piperidyl)imino]-hexamethylene-[(2,2,6,6-tertamethyl-4-piperidyl)imino]	2000-3100	3	PP 0.5; HDPE 0.2; LDPE 0.5
81220	Poly-[[6-[N-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)-n-butylamino]-1,3,5-triazine-2,4-diyl][(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]-1,6-hexanediyl[(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]]-alpha-[N,N,N',N'-	2600-3400	5	PP 0.2; HDPE 0.1; LDPE 0.1

[ここに入力]

	tetrabutyl-N"-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidiny)-N"-[6-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidinylamino)-hexyl]-[1,3,5-triazine-2,4,6-triamine]-omega-N,N,N',N'-tetrabutyl-1,3,5-triazine-2,4-diamine]			
83595	Reaction product of di-tert-butyl phosphonite with biphenyl, obtained by condensation of 2,4 di-tert-butylphenol with Friedel-Crafts reaction product of phosphorus trichloride and biphenyl	991	18	PP 0.1; HDPE 0.05 ; LDPE 0.06
92880	Thiodiethanol-bis(3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate)	643	2.4	
93120	Thiodipropionic acid, didodecyl ester	515	5	PP 0.1 – 0.5
93280	Thiodipropionic acid, dioctadecyl ester	683	5	PP 0.5
93520	Alpha-Tocopherol	431	60	
94960	1,1,1-Trimethylol-propane	134	6	
95200	1,3,5-Trimethyl-2,4,6-tris(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxybenzyl)benzene	775	60	PP 0.2; HDPE 0.1
95270	2,4,6-Tris(tert-butyl)phenyl 2-butyl-2-ethyl-1,3-propanediol phosphite	450	2	HDPE 0.05;LDPE 0.06
95360	1,3,5-Tris(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxybenzyl)-1,3,5-triazine-2,4,6-(1H,3H,5H)-trione	784	5	PP 0.1; HDPE 0.1
95600	1,1,3-Tris(2-methyl-4-hydroxy-5-tert-butylphenyl)butane	545	5	PE 0.1

PM/REF, PM/REF-numbers; M_r, molecular mass; C_{P,0}, highest concentrations in polymer

[ここに入力]

1.2 ポリオレフィン以外

PM/ REF	Chemical name	M _r	SML (mg/kg)	C _{P,0} (%)
PS				
40020	2,4-Bis(octylthiomethyl)-6-methyl-phenol	425	6	0.2
61440	2-(2-Hydroxy-5'-methylphenyl)benzotri-azole	225	30	0.25
61600	2-Hydroxy-4-n-octylbenzophenone	326	6	0.2
68320	Octadecyl 3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxy-phenyl)propionate	531	6	0.15
74240	Phosphorous acid, tris(2,4-di-tert-butylphenyl)ester	646	60	0.2
83595	Reaction product of di-tert-butyl phosphonite with biphenyl, obtained by condensation of 2,4 di-tert-butylphenol with Friedel-Crafts reaction product of phosphorus trichloride and biphenyl	595	18	0.2
94400	Triethyleneglycol-bis[3-(3-tert-butyl-4-hydroxy-5-methylphenyl) propionate]	587	18	0.2
95600	1,1,3-Tris(2-methyl-4-hydroxy-5-tert-butylphenyl) butane	545	5	0.2
HIPS				
31520	Acrylic acid, 2-tert-butyl-6-(3-tert-butyl-2-hydroxy-5-methylbenzyl)-4-methyl-phenyl ester	395	6	0.5
38560	2,5-bis(5-tert-butyl-2-benzoxazolyl)thiophene	431	0.6	0.05
40000	2,4-Bis(octylmercapto)-6-(4-hydroxy-3,5-di-tert-butylanilino)-1,3,5-triazine	589	30	0.1
40020	2,4-Bis(octylthiomethyl)-6-methyl-phenol	425	6	0.2
61440	2-(2-Hydroxy-5'-methylphenyl)benzotri-azole	225	30	0.4
68320	Octadecyl 3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxy-phenyl)propionate	531	6	0.5
94400	Triethyleneglycol-bis[3-(3-tert-butyl-4-hydroxy-5-methylphenyl) propionate]	587	3	0.04
PEN				
51700	2-(4,6Diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-5-(hexyloxy)phenol	425	0.05	0.5
60320	2-(2-Hydroxy-3,5-bis(1,1-dimethylbenz-yl)phenyl)benzo-triazole	448	1.5	0.5
71680	Pentaerythritol tetrakis[3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)-propionate]	1178	60	0.1
74240	Phosphorous acid, tris(2,4-di-tert-butylphenyl)ester	647	60	0.1
94400	Triethyleneglycol-bis[3-(3-tert-butyl-4-hydroxy-5-methylphenyl) propionate]	587	3	0.1
PET				
51700	2-(4,6Diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-5-(hexyloxy)phenol	425	0.05	0.2
60320	2-(2-Hydroxy-3,5-bis(1,1-dimethylbenz-yl)phenyl)benzo-triazole	448	1.5	0.2
60480	2,2'-Methylenebis(4-methyl-6-tert-butyl-phenol)	358	30	0.2
71680	Pentaerythritol tetrakis[3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)-propionate]	1178	60	0.08
PA				
38820	Bis(2,4-di-tert-butylphenyl)penta-erythritol diphosphite	605	0.6	0.125
53200	2-Ethoxy-2'-ethyloxanilide	312	30	0.5
59120	1,6-Hexamethylene-bis[3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionamide]	637	45	0.5
60320	2-(2-Hydroxy-3,5-bis(1,1-dimethylbenz-yl)phenyl)benzo-triazole	448	1.5	0.5
60480	2,2'-Methylenebis(4-methyl-6-tert-butyl-phenol)	358	30	0.5
68320	Octadecyl 3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxy-phenyl)propionate	531	6	0.5
71680	Pentaerythritol tetrakis[3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)-propionate]	1178	60	0.5

[ここに入力]

74240	Phosphorous acid, tris(2,4-di-tert-butylphenyl)ester	647	60	0.5
81200	Poly[6-[(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-amino]-1,3,5-triazine-2,4-diyl]-[(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]-hexamethylene-[(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]	2000-3100	3	0.5
81220	Poly-[[6-[N-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)-n-butylamino]-1,3,5-triazine-2,4-diyl][(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]-1,6-hexanediyl][(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]-alpha-[N,N,N',N'-tetrabutyl-N''-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)-N''-[6-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidylamino)-hexyl]-[1,3,5-triazine-2,4,6-triamine]-omega-N,N,N',N'-tetrabutyl-1,3,5-triazine-2,4-diamine]	2600-3400	5	0.5
83595	Reaction product of di-tert-butyl phosphonite with biphenyl, obtained by condensation of 2,4 di-tert-butylphenol with Friedel-Crafts reaction product of phosphorus trichloride and biphenyl	991	18	0.25
92880	Thiodiethanol-bis(3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate)	643	2.4	0.5
93120	Thiodipropionic acid, didodecyl ester	515	5	0.25
94400	Triethyleneglycol-bis[3-(3-tert-butyl-4-hydroxy-5-methylphenyl) propionate]	587	3	0.5
95200	1,3,5-Trimethyl-2,4,6-tris(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxybenzyl)benzene	775	60	0.5

PM/REF, PM/REF-numbers; M_r , molecular mass; $C_{P,0}$, highest concentrations in polymer

]

[ここに入力]

AKTS の SML ソフトウェアによる解析をするとき欠かせないのがこのガイドブックです。

このガイドブックを翻訳された現 JCII の石動正和さまからこのガイドブックについて SML6 ソフトウェアユーザが利用することの承諾を得ています。

なおネットからダウンロードし易いように、オリジナルの Word ファイルを PDF ファイルに変換しています。

また JRC が発行した JRC_EU 規則 No.20/2011_移行モデル_実用ガイドライン（英文版）についても PDF ファイルをダウンロードできるようにしていますので、併せてご利用ください。



AKTS 社日本総代理店

株式会社パルメトリクス