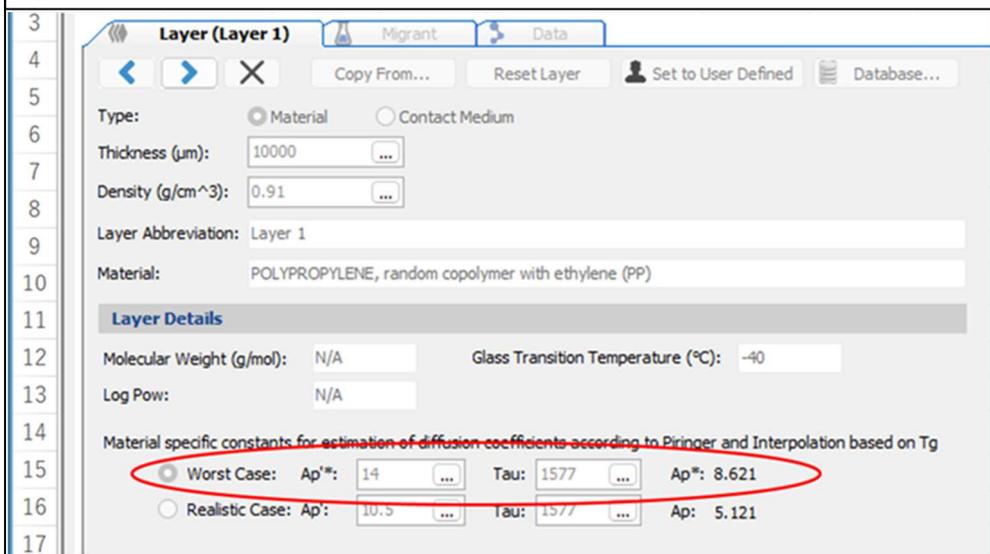


Title : ポリプロピレン(PP)のデータベース(拡散係数)の変更について Version 6.71以降

SML6ユーザより、「SML6_Version6.62とVersion6.8では PP(ポリプロピレン)のPiringer式のパラメータに違いがあるが、Version6.62とVersion6.8ではどちらのパラメータは正しいのか? 」という質問がありました。

CAS9010-79-1 Polypropylene, random copolymer with ethylene (PP) Fig_04を参照してください。

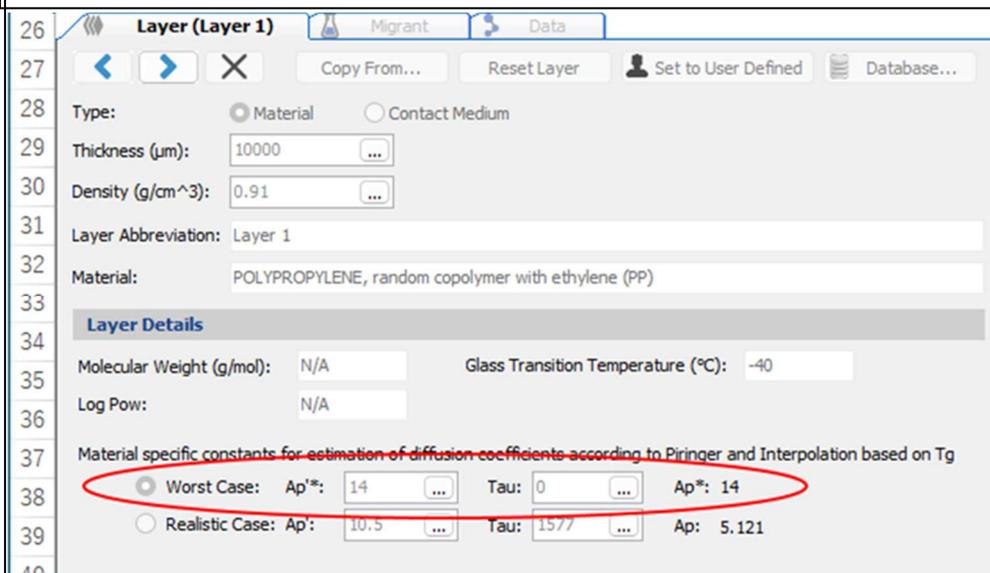
Fig_01: Version6.62の場合



Version6.62のデータベースではWorstケースの場合 Ap7' * : 14, Tau : 1577 その結果Ap_Valueは **Ap* : 8.621** になります。

Version6.71以降から ChemprofilerデータベースではWorstケースの場合 Ap7' * : 14, Tau : 0 その結果Ap_Valueは **Ap* : 14** になります。

Fig_02: Version6.71以降 Version 6.8を含む。



ただし、拡散係数をより高精度に近似するRealisticケース(より現実的な移行量を得る)では従来のVersionと同じであり、Ap_Valueの変更はありません。

AKTS-SML 6.7

Improvements

- 495 - The density of PET (CAS 0025038-59-9) has been updated from 1.4 to 1.375
- 496 - The worst-case Tau for POLYPROPYLENE (CAS 0009010-79-1) has been updated from 1577 to 0

SML6のリリース・ノートにはアップグレードされたとき、改良された内容や、バグを解消したことなどが記載されています。

AKTS社によればPPのPiringer式の拡散定数(Worst Case)のパラメータが変更された理由は Realisticケースと同様に 1) Piringerモデルに関しては、すべてのアタクチックPP (ゴム、エチレンコポリマー)の拡散係数は同一と見なすべきであると考えています。そのためVersion 6.7からFig_03に示すようにPP(CAS-0009010-79-1)についてWorst-caseのtau値が従来の1577から0に変更されています。このためWorst-caseにおける移行値は従来のVersionよりも**低い値**になります。ただし、拡散係数をより高精度に近似する場合、Realisticケース(より現実的な移行量を得る)では、シミュレーションの結果にいくつかの違いが生じる可能性があります。

Title : ポリプロピレン(PP)のデータベース(拡散係数)の変更について Version 6.71以降

2) Version 6.71と6.8のPPのWorstケースのtau値は正しく、“2015 JRC ガイドライン”(特定の移行の推定のための移行モデリングの適用に関する実践ガイドライン)に記載されている τ (tau)とも一致しています。PPのWorstケースのtau値の変更については、AKTSはすでに米国のFDAとも協議しています。PPの拡散係数をPiringer式で求めるためには今後何、を追加すべきか完全にはわかりませんが、今回の A_p 値とTau値はVersion 6.71からすでに実施されています。

Fig_03 : Table_01:PO樹脂の代表的ポリマーのパラメータ

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

CAS 9010-79-1

SMLのChemiprofilerデータベースでCAS.No 9010-79-1で検索するとFig_04のように4種類のPPが表示されます。SML Version6.71以降、PPのPiringer式のパラメータはWorst caseはTau値がすべて0になっています。SML6のChemiprofilerのpolymerのデータベースは過去にPETのパラメータに関しての変更がありました。

Fig_04: Chemiprofilerデータベース Version6.71以降

Reference Number: Name:

CAS Number: Molecular Weight:

FCM number: Type:

MasterDB (4) UserDB (0)

Name	CAS Number	Reference Number	A_p '* Worst C...	Tau Worst Case	A_p ' Realistic
POLY(ETHYLENE-CO-PROPYLENE) elastomer (PP)	0009010-79-1	80760	11.5	0	10
POLYPROPYLENE, random copolymer with ethylen...	0009010-79-1	80760	14	0	10.5
POLYPROPYLENE, heterophasic copolymer with et...	0009010-79-1	80760	15	0	11.5
POLYPROPYLENE, random, heterophasic copolyme...	0009010-79-1	80760	16	0	12

今回はPPのパラメータがVersion6.71以降は旧Version6.62のパラメータが変更になっています。SML6がVersion 6.71になった時点でPPのPiringer式で拡散係数を決定するパラメータに変更があり、PPに関してはVersion6.62以前とVersion6.71以降では算出されるSML値が異なります。今後SMLのバージョンアップ時に、SML6のChemiprofilerのポリマー・データベースに変更があるときは、SML6のユーザの方々へ情報提供を実施する所存です。なおVersion変更時にはSML6のRelease Noteに変更点が記載されています。

SML6になってから今までポリマーや移行物質のデータベースのChemiprofilerの内容が変更されることはありませんでした。Version6.7、Version6.8、および今後の実施される更新時にデータベースの内容の一部の変更が計画されています。