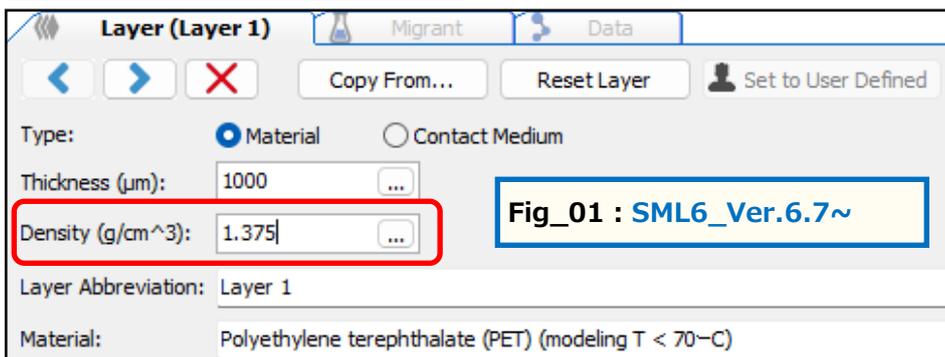


Title : SML6-6.7以降 PETポリマーの密度が1.4 ⇒1.375に変更されました。

SML6はVersion 6.8になりました。PETポリマーで移行値を算出されているSML6ユーザから、旧VersionのSML6に比較すると移行値が以前より2%弱、低い値になると指摘されました。その原因をAKTS社に問い合わせた結果、PETポリマーのみデータベースの密度(比重)が、Version6.7から従来の1.4から1.375g/cm³へ変更されたためであることが判明しました。



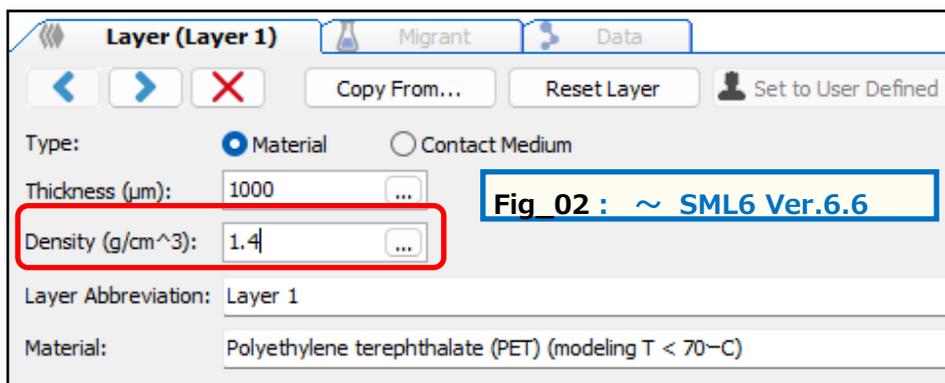
SML6ソフトウェアを使ってPETポリマーのSML値をシミュレーションする場合、PETに含まれる**移行物質の初期総重量**はどのように計算されているでしょうか？
初期重量は ① 移行物質の初期濃度(mg/kg) ② PET層 厚み(μm) ③ 包装容器の体積(cm³) ④ **PETポリマーの密度(比重)g/cm³** の4点の情報でSML6は計算しています。
ここで ①1% ②1000μm ③600cm³ ④**1.4** とします。
移行物質の総重量は ①×②×③×④ = 0.01×0.1×600×1.4 = 0.840g となります。SML6はVersion6.7からPETの密度が1.375に変更されました。そのため 同一条件であれば移行物質の初期総重量は0.825gとなります。旧Versionの移行値よりも新Versionでは**1.786%移行値が低くなります**。



Fig_01は新Versionの6.8でPETポリマーの密度1.375を自動設定している画面です。

Fig_02はVersion6.6までの旧VersionでPETポリマーの1.4の密度をセットしている画面です。

なお拡散係数はFig_01,02ともPiringerアプローチのWorstケースで算出しています。



PETポリマー密度の1.375g/cm³への変更はSML6のデータベース Chemprofiler内で変更されています。

旧VersionのVersion6.6以前のSML6で解析された解析ファイル(拡張子sml)を、新Version6.7以降のSML6で読み取ると移行値は密度1.375を使った正しい予測値に自動的に修正されます。

SML6のVersion6.7のRelease Noteには下記のように記載されています。

AKTS-SML 6.7
Improvements

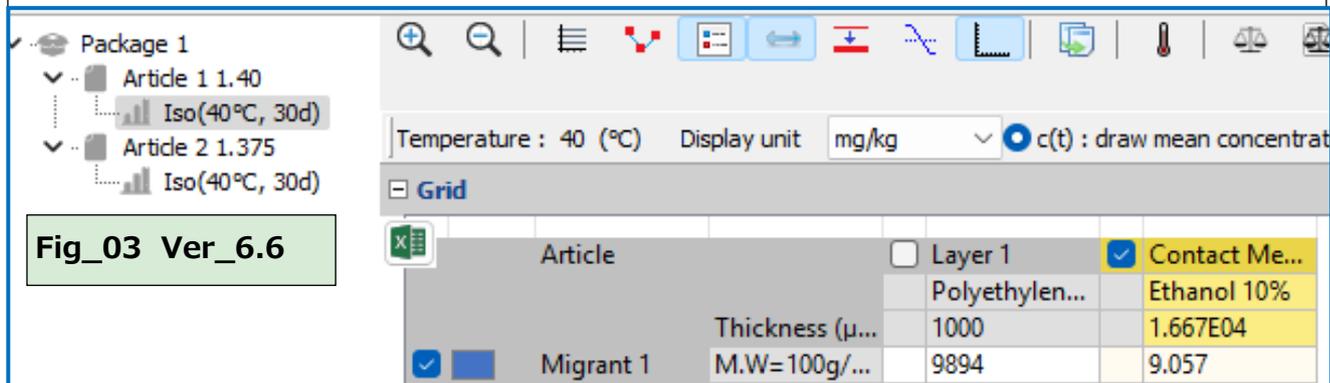
495 - **The density of PET (CAS 0025038-59-9) has been updated from 1.4 to 1.375**

496 - **The worst-case Tau (CAS 00for POLYPROPYLENE 09010-79-1) has been updated from 1577 to 0**

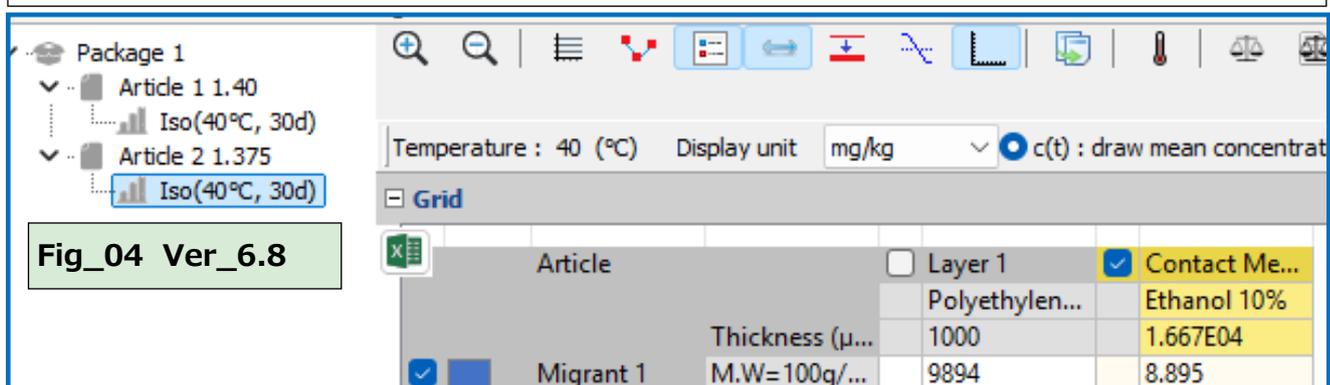
Version6.6までのSML6をお使いのSML6ユーザは、SML6のデータベースを一時的に修正する機能である **Set to User Defined機能で1.375に修正**してお使い下さい。次ページにはPETポリマーの密度の違いによる解析結果の差(1.8%の差)を表示しています。

Title : SML6-6.7以降 PETポリマーの密度が1.4 ⇒1.375に変更されました。

Fig_03 : PETポリマーの密度が1.40g/cm3の場合 40℃30日間の移行量 9.057mg/kg (エタノール10%)



Fig_04 : PETポリマーの密度が1.375g/cm3の場合 40℃30日間の移行量 8.895mg/kg (エタノール10%)



Fig_03の移行試験のシミュレーションはSML6_Version6.6以前の旧Versionを使用した場合です。PETポリマーに分子量100、LogPow値が0.0の移行物質が1.00%（10,000mg/kg）の初期含有量の場合です。移行条件は40℃30日間です。疑似溶媒のエタノール10%の移行物質の濃度は9.057mg/kgです。

Fig_04の移行試験のシミュレーションはSML6_Version6.8の新Versionを使用した場合です。PETポリマーに分子量100、LogPow値が0.0の移行物質が1.00%（10,000mg/kg）の初期含有量の場合です。移行条件は40℃30日間です。疑似溶媒のエタノール10%の移行物質の濃度は8.895mg/kgです。

結論 : Fig_03とFig_04の移行濃度の違いは 9.057 と 8.895 の差は 移行量が旧バージョンの98.2% (1.786%減) になることです。

前ページでも予測しているようにFCMの基材のポリマーの密度が1.786%減少するために、PETポリマー中の移行物質の含有量が1.786%低下するためです。

SML6の旧バージョンと新バージョンを使って、いずれも移行物質の濃度を1.00%に設定すれば移行量も同じになると思われ勝ちですが、ポリマーの密度が移行物質の含有量に関与していることを忘れてはなりません。

注:ポリマーの密度が1.4から1.375の低い値になれば、移行物質の含有量も同じ比率で低下すると直感的に理解できる人はこのノートはあまりにも長い説明であり、わざわざ読む必要はないと言えます。

SML6のPiringerアプローチのワーストケースで移行量を算出しているから使用目的からすれば、移行量が1.8%違っていると、問題になることはありません。本ノートではポリマーの密度の違いによって、同一値のmg/kg,同一の%値で移行量の比較をしても、同一の移行値にならないことを示すことにあります。