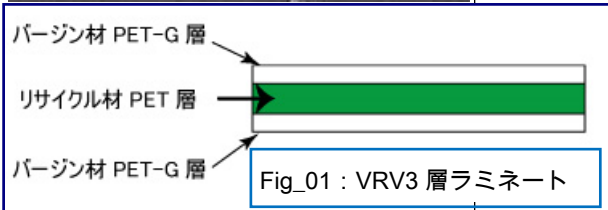


Title : 食品包装材に含まれる移行物質の最大許容濃度を推定する。



SML6の通常のシミュレーション解析は食品包装材中に含まれる移行物質の含有量(mg/kg)が既知の場合、ある溶出温度条件で食品疑似溶媒に溶出する特定移行量制限値 (SML値) をシミュレーションします。

回収されたPETボトルなどリサイクル材として生産された再生PET材には、通常のバージン材PETよりもさまざまな化学物質が混入することは避けて通れない課題です。このためにPETトレイとして再生PETを生産するにはリサイクル材のPETをバージン材のPETフィルムでサンドイッチする3層構造が採用されます。バージン材のPET層に機能性バリアーの役割を持たせるためです。
[機能性バリアーについてテクニカルノートSML6_No.8を参照してください。](#)



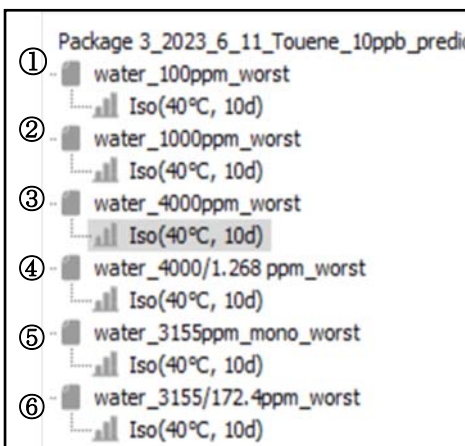
上下バージンPET層を各20μm,リサイクル材のPET層を180μmとします。溶出温度と時間を40℃_10days、移行物質はトルエンとし、疑似溶媒は“飲料水”とします。疑似溶媒へのトルエン最大溶出移行許容量を10ppbとします。SML6.6で予測する目的はリサクルPET材のトルエンの初期濃度は何ppm(mg/kg) になるか?です。



上限値の概念で食品疑似溶媒中の溶出量が10ppb以下という規制値からリサイクルPET材の各移行物質の初期濃度を予測することができます。この場合拡散係数と分配係数は必ずWorst Caseの値を選択します。

Fig_01のようなPETフィルムが食品包装容器として認可されるには、トルエンなど、他の移行物質についてPETフィルム中の該当する移行物質の初期濃度がSML6.6で予測される濃度以下であれば 溶出量が10pp以下になると証明できることとなります。またVRV構造でなく、PETリサイクル材だけのPETフィルムの機能性バリアーを使わない場合の移行物質初期濃度(制限量)についても比較してみます。

Fig_01:SML6 解析手順 ①～⑥



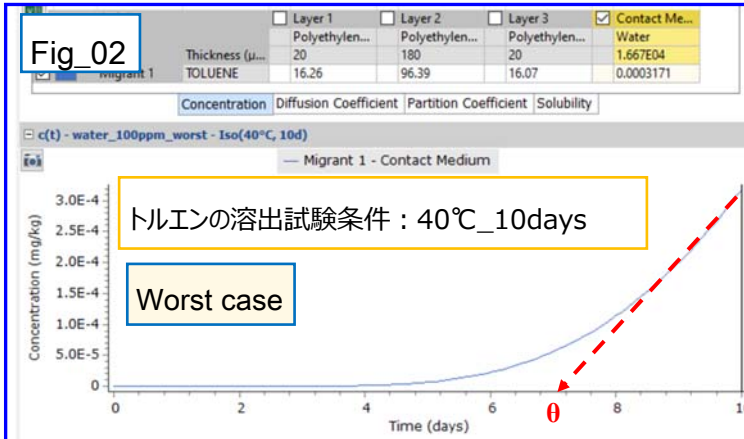
溶出量10ppbとなる“Migrantの初期濃度の計算”は系統的な[トライ・アンド・エラー](#)的な解析手順ですが、わずか2,3回のシミュレーションで計算ができます。

- ① ①は一番最初に初期濃度が100ppmの場合の40℃_10daysの溶出量を計算します。
- ② ①では溶出量が10ppbよりはるかに低い値なので初期濃度を1000ppmにして計算します。
- ③ ②の解析結果から1000ppmの4倍にすれば10ppbを越えることが暗算で計算できるので 初期濃度を4000ppmにして計算します。
- ④ ③の解析結果から溶出量は10ppbを越えて1.268倍になることがわかる。4000ppmを1.268で除算した値 3155ppmを初期濃度に設定して、40℃_10daysで溶出量が10ppb(0.010ppm) になることを確認する。
- ②の段階でも比例計算すれば10ppbとなる初期濃度は求まります。

⑤VRSの3層構造ラミネートは疑似溶媒(Simulant) に接するバージンPETフィルム20μmに強力なFunction_Barrier機能があり、初期濃度を大きな値にしています。そこでサンドイッチされるバージンPET層をなくした場合に、3層JRA構造と同じトルエンの初期濃度3,155ppmにした場合の疑似溶媒への溶出量を求めます。結果は1.724ppmと規制値の172倍になることがわかります。

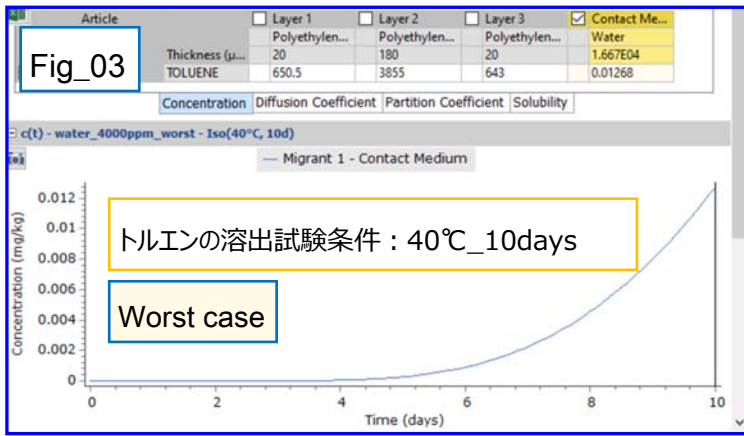
⑥リサイクル材のPETフィルム単層だけで食品包装材とした場合、3層構造の初期濃度3,155ppm/172.4= 18.3ppmにしたとき、疑似溶媒のトルエンの溶出量が10ppbになることを確認できます。わずか20μmのバージンPETフィルムがリサイクル材のPETフィルムからのトルエンの溶出量を1/172に低減する“[機能性バリアー](#)”になっていることがわかります。

Title : 食品包装材に含まれる移行物質の最大許容濃度を推定する。

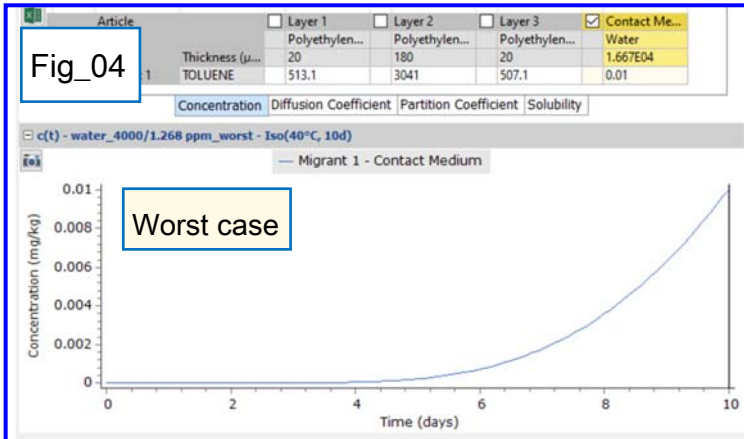


Fig_02は操作手順①の40℃_10days時のトルエンの溶出量が0.0003171mg/kg(0.31ppb)であることを示しています。バージンPETフィルム層が介在することにより疑似溶媒の溶解曲線は下に凹な曲線になります。7days後のθ点を遅延時間と呼称し、溶出がどれだけ遅延しているか？を示しています。遅延時間についてはテクニカルノートSML6_No.12を参照してください。

許容量10ppbに対して0.31ppbは3.1/100であり、100mg/kgの32倍にすれば10ppbになるはずで、移行モデル計算は移行物質の含有量が1%以下なら、溶出量と移行物質のSML値は初期濃度に比例すると仮定しており、比例計算により最大初期濃度を算出することが可能です。

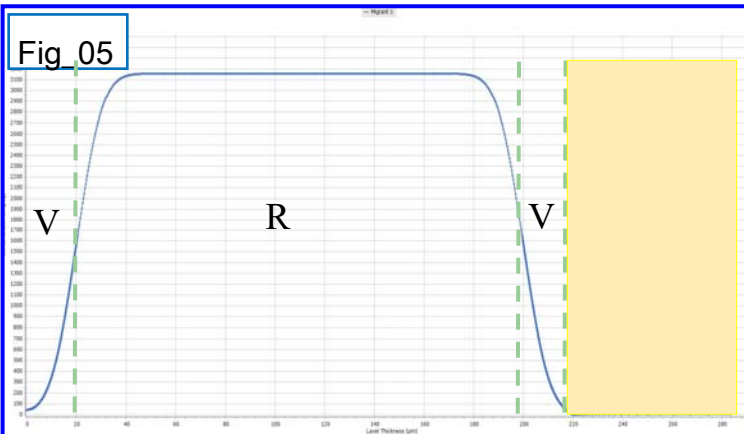


Fig_03は操作手順③の40℃_10daysの溶出量を表示しています。100mg/kgの32倍以上なので初期濃度を4000mg/kgにしています。溶出量は0.0003171×40=0.01268mg/kgとなり、正比例していることが確認できます。4000ppmでは規制値を超え12.68ppbとなり、10ppbの1.268倍になっています。これを逆算すれば初期濃度は4000/1.268 = 3,155ppmとなります。



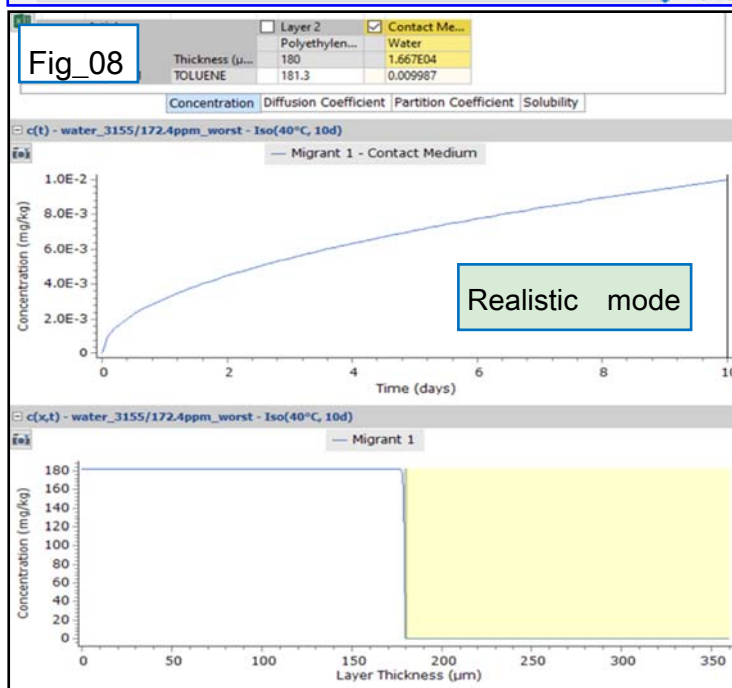
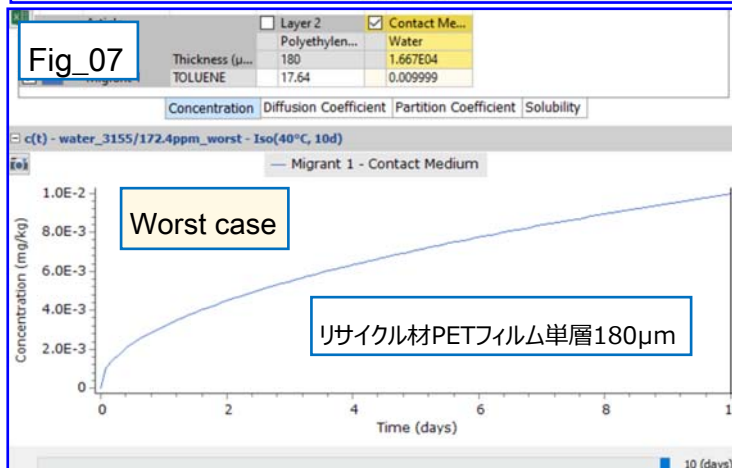
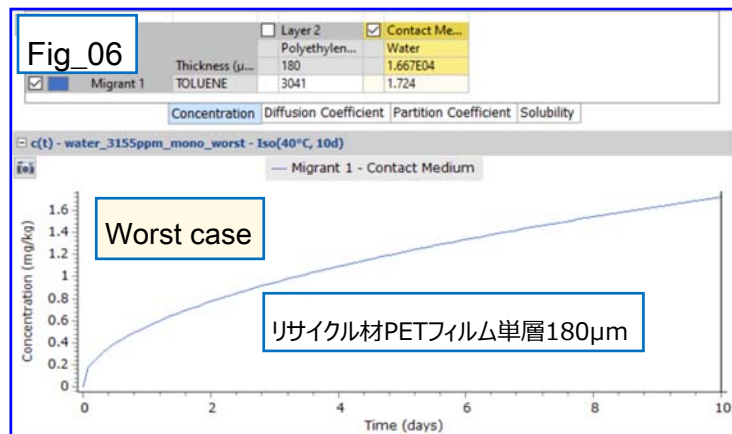
Fig_04 にこの解析結果を表示します。

電卓を用意して比例計算すれば、規制許容値に対する初期濃度の解析計算はFig_02~Fig_04の3ステップで解析できます。このように規制値をクリアする初期濃度の計算は、電卓で簡単な比例計算をするだけでOKです。



Fig_05 はPETフィルムVRV3層構造の断面における40℃_10days時のMigrantトルエンの濃度分布VRVを表示しています。トルエンのリサイクル材・PETフィルム層の初期濃度3,155ppmが10days後に3,140ppmになり、リサイクル材PETフィルムとバージンPETフィルム層の界面でトルエン濃度が1500ppm、バージンPETファイルの平均濃度が507ppmとなり、移行速度を抑制していることがわかります。次にこのバージンPETファイル層がない場合はどうなっているかを次ページで解析します。

Title : 食品包装材に含まれる移行物質の最大許容濃度を推定する。



Fig_06はリサイクル材・PETフィルム_180μm単層を食品包装容器として使用した場合です。

Fig_04と同様、リサイクル材・PETフィルム中のトルエンの初期濃度を3,155mg/kgとし、40°C_10daysの溶出曲線を予測すると、溶出濃度は1.724mg/kgで規制許容値の172倍になります。溶出量だけでなく、Fig_06はFig_02,03,04の溶出曲線とは全く傾向が異なり、疑似溶媒中の溶解曲線は上に凸な曲線になります。

Fig_02～Fig_04のように下に凹な曲線となるバージンPETフィルムは隣接するリサイクル材PETフィルム層からの移行物質の拡散現象に対して、機能性バリア特性があることを示しています。

Fig_07はリサイクル材PETフィルム_180μmだけの単層フィルムによりトルエンの溶出量を規制値10ppb以内にするトルエンの初期濃度を求めたものです。これによれば40°C_10daysの条件では17.64mg/kgとなります。以上の解析モードは拡散係数と分配係数を上限値の概念(Worst_case)で予測したものです。



Fig_08はWorst Caseによる予測ではなく、より現実的な拡散係数と分配係数による予測、言い換えるとSML6の“Realistic mode”を使って、リサイクル材・PETフィルム単層(180μm)中のトルエンの初期濃度を予測しました。この場合、40°C_10daysで溶出濃度が10ppb以下となるトルエン初期濃度は**181.3mg/kg**となります。Fig_07の**17.64mg/kg**の結果と比較すると約10倍の初期濃度でも規制値をクリアすることが可能となります。

PET専用の移行モデル Welle式でも同様に現実的な移行濃度が予測できます。

Worstケースの予測値は実測値より高い値になる代わりにコンプライアンスとして認証されるのが最大の利点です。一方のRealisticモードやWelle式の予測結果は実測値に近い代わりに実測データと比較をすることにより、移行モデルの予測値に妥当性、信頼性を与えることが必要になるでしょう。

Welle式によるシミュレーションはテクニカル・ノート No.SML6_14を参照してください。

疑似溶媒中の移行物質の濃度が10ppb以下となる包装材中の移行質の最大初期濃度を求める方法として、オプション機能の Fitting_Moduleを使用する方法がありますが、本ノートの電卓で比例計算をする方がはるかに**操作が楽**です。