

Title : PETボトルキャップに含まれている顔料の溶出量推定



ボトル・キャップが飲料水と接触しています。

この10数年、ペットボトルのキャップは白無地というのが大半でした。その理由は2011年の東日本大震災によって、容器製造メーカーが大打撃を受けたため、容器製造時のコスト軽減と流通の安定確保が課題になりました。この結果、飲料メーカー各社の協議によって各社・商品別キャップの製造を取り止め、代わりに各社・各商品共通で白無地キャップを使用するという方針を打ち出されていたからです。

またペットボトルのキャップを無色にする利点として「リサイクル性の向上」と「製造コスト・在庫管理の簡素化」という側面も存在していたと思います。

ペットボトルのキャップの色が白無地というのは食品安全の立場から検討された訳ではなさそうです。

それから10余年経過して、ペットボトルキャップの色は次第にカラフルになってきました。コンビニエンス・ストアの棚でペットボトルを眺めると、カラフルなキャップたちがさりげなく存在感を放っているのに気づきます。

赤、青、緑、白、黒…キャップの色が青色ならば水、緑色はお茶、赤色は炭酸飲料といった具合に、色によって中身が直感的に識別され、消費者が選び易くなっています。キャップは本来の“ふた”という機能に加えて“視覚的なナビゲーション”としても機能しています。



ボトル・キャップはボトルの一番上に位置するもので、ボトルの内容物に接触している訳ではありません。ペット・ボトルの段ボール箱を開口したときキャップになるような標準パッケージであっても、段ボール箱は運搬中や保管時に、横倒しの状態になることがあります。ペットボトル内の飲料がキャップ側と長時間接触している状態になることは避けられません。

ボトルのキャップが飲み物と触れた状態になれば、キャップに含有されている物質(色をつける顔料やポリマー用添加剤)が飲料に**移行する**ことになります。このテクニカルノートでは、青色のペットボトル・キャップに使用されている青色顔料(C.I. Pigment Blue 15:3)が、飲料水にどの程度**“溶出する”**のかをSML6ソフトウェアを用いて**溶出試験 (移行試験)** シミュレーションします。

移行試験のシミュレーションの結果がどうなるか? についてはどうぞご安心ください。



蓋(キャップ)からの移行はキャップと飲料水の接触面積が6.16cm²と比較して、ボトルが円筒形の場合のボトルの表面積約600cm²となりわずか1/100しかありません。そのためにボトルに青色顔料が含有される場合に比較して、顔料の含有量の1/100倍になるので、移行量も1/100倍になります。**キャップからの移行量はボトルへの移行量に比較して約1/100の移行量になります。**



標準パッケージ
ボトル500mL
24本入り
段ボール箱
キャップ上向き

保管・輸送中に必ずしもボトル・キャップが上向きになっているとは限りません。

標準パッケージ
ボトル・2L
6本入り
段ボール箱
キャップ上向き



日本では従来から**溶出試験**という用語が使われています。SMLのMはMigration(移行)を意味するもので、欧米では**“移行試験”**となりますが、意味としては全く同じです。

Title : PETボトルキャップに含まれている顔料の溶出量推定

SML6ソフトウェアでシミュレーションを行う際には、ペットボトル・キャップと飲料(疑似溶媒)、およびキャップに含まれる物質の情報が必要です。まず、キャップの材質と含有顔料の種類・性質を設定します。次に、水やアルコールなどの疑似溶媒を選定します。さらに、キャップと疑似溶媒の接触面積、容器の容量・形状を把握し、最後に接触時間と温度条件を設定します。本ページでは、**Surface/Volume Ratio機能**を使用して疑似溶媒の厚みを設定できることを解説します。

項目	立体形状やポリマー層、疑似溶媒、移行物質の設定条件
試験目的	青色顔料 (C.I. Pigment Blue 15:3) がペットボトルキャップから飲料水に移行する量の予測
接触物質	HDPE製キャップ、PP製キャップ
キャップ寸法	厚み : 1.49 mm / 直径 : 2.8 cm
接触面積	約 6.16 cm²
疑似溶媒の種類	水
疑似溶媒の体積	500ml
移行物質 (顔料)	名称 : C.I. Pigment Blue 15:3 (CAS No. : 147-14-8) 分子量 : 576.07 g/mol Log Pow : 6.60 (参考値) 性質 : 高い疎水性により水への移動は極めて抑制されます。
温度・時間条件	40℃ × 180日

SML6ソフトウェアは、ポリマー層と溶媒層の厚みを定義する必要があります。容器に充填された形状は3次元(3D)ですが、SML6ではこれを2次元(厚み)で表現して移行プロセスを解析します。

今回、キャップの厚みは1.49mmであり、キャップの厚みは1,490μmとなります。

Fig.1は“Geometry”という包装容器の**立体形状**を設定する機能です。

Surface volume Ratio(表面積/体積比)を選択します。疑似溶媒(飲料水)

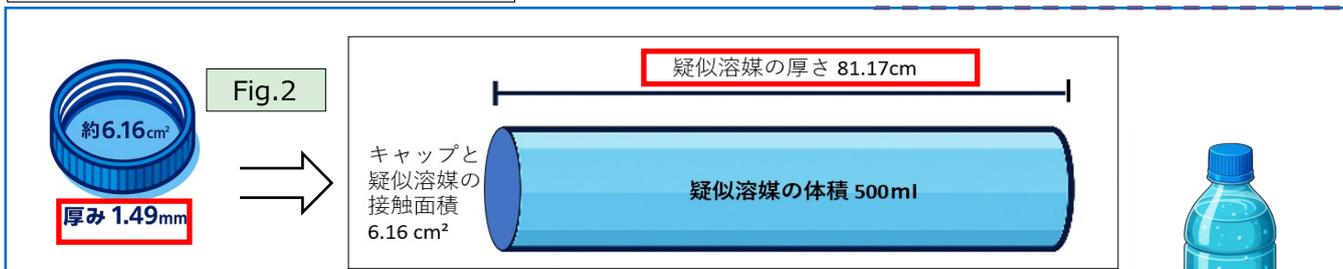
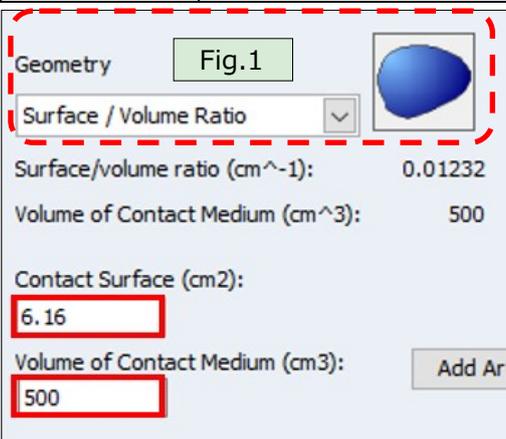
の厚みを設定するには
接触面積 **6.16 cm²** と
溶媒の体積 **500 cm³**を
入力することにより、

$500 \text{ cm}^3 / 6.16 \text{ cm}^2 \approx 81.17 \text{ cm}$
と算出され、疑似溶媒の厚みはμm単位
で8.117E05μmとなります。

(Fig.2, Fig.3)

赤破線枠のSurface Volume Ratio
(Fig.1)は、どのような複雑な容器形状であつても、ポリマー層の**表面積**と疑似溶媒層の**体積**さえ定義できれば、2次元表示で“各層の厚み”を定義できます。

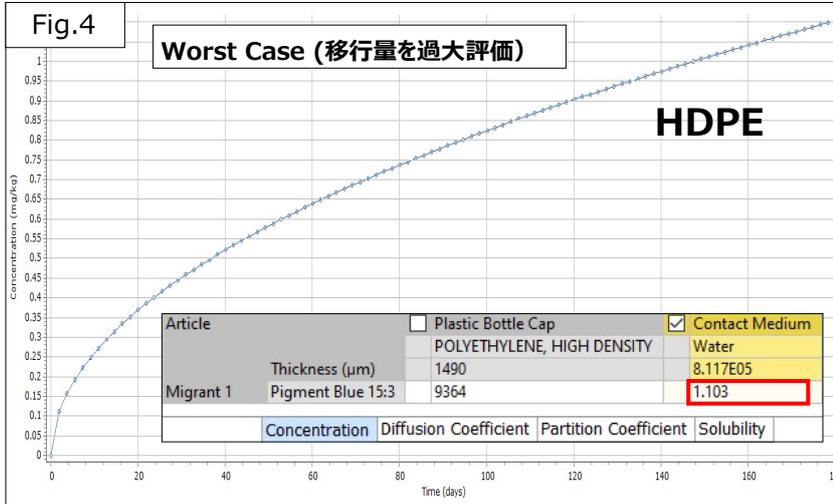
通常は移行試験容器として1辺が10cmの6面体を使いますが、実際の実測条件に合せた容器形状でシミュレーションするには非常に貴重な機能です。



Surface (cm²) 6.16 Fig.3 : ポリマー層と疑似溶媒層の厚みをμm単位で入力する画面

Article	Plastic Bottle Cap	Contact Medium
	POLYETHYLENE, HIGH DENSITY	Water
Thickness (μm)	1490	8.117E05
Migrant 1	Pigment Blue 15:3	0

Title : PETボトルキャップに含まれている顔料の溶出量推定

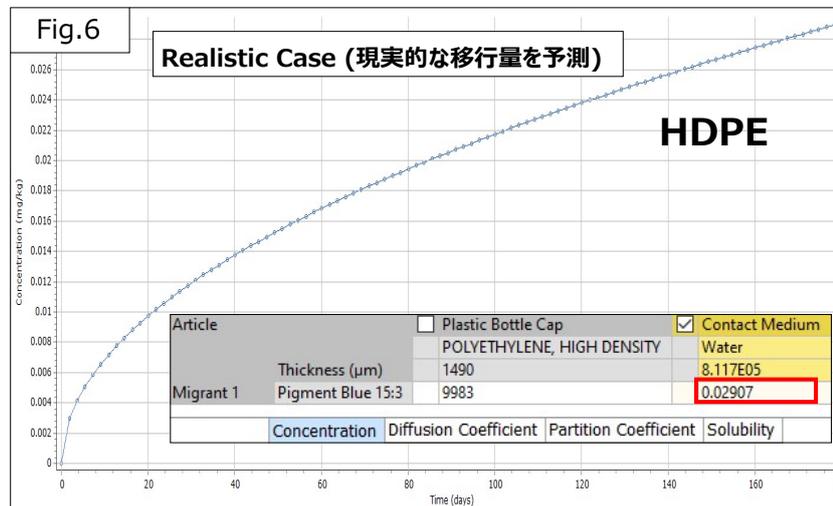


HDPE製PETボトル・キャップに含有される青色顔料の C.I. Pigment Blue 15:3 (以下、PB15:3 と呼称) について、初期含有量を10,000mg/kg と仮定してシミュレーションを実施しました。その結果、疑似溶媒への移行量は、Worst Caseの場合**1.103 mg/kg**、Realistic Caseの場合**0.02907mg/kg**となりました。(Fig4, Fig.5)

Worst Caseでは、リスクを過大に見積もるために、拡散係数と分配係数を高めに設定されます。その結果、シミュレーションで得られる疑似溶媒への移行量は、実際よりも多く算出されます。



拡散係数とは、物質がポリマー内部を分子拡散によって移動する速度を定量的に示す指標です。値が大きいほど、単位時間あたりの移動距離が長くなり、結果としてポリマー層と疑似溶媒層の境界により速く到達します。**分配係数とは**、物質がポリマーと疑似溶媒のどちらに留まりやすいかを表す指標で、値が小さいほど食品側への移行量が増えます。



一方でRealistic Caseは、現実的な予測値を求めるもので、拡散係数と分配係数の各パラメータを現実的な値に設定します。とくに分配係数は、PB15:3の高い疎水性(Log Pow値 6.60)を踏まえ、ポリマー内に留まりやすい性質を反映して分配係数が**174,600**と非常に高く設定値となります。これは顔料が疑似溶媒よりもポリマー内に留まりやすい性質を反映しており、移行量がごく微量になると見込まれます。

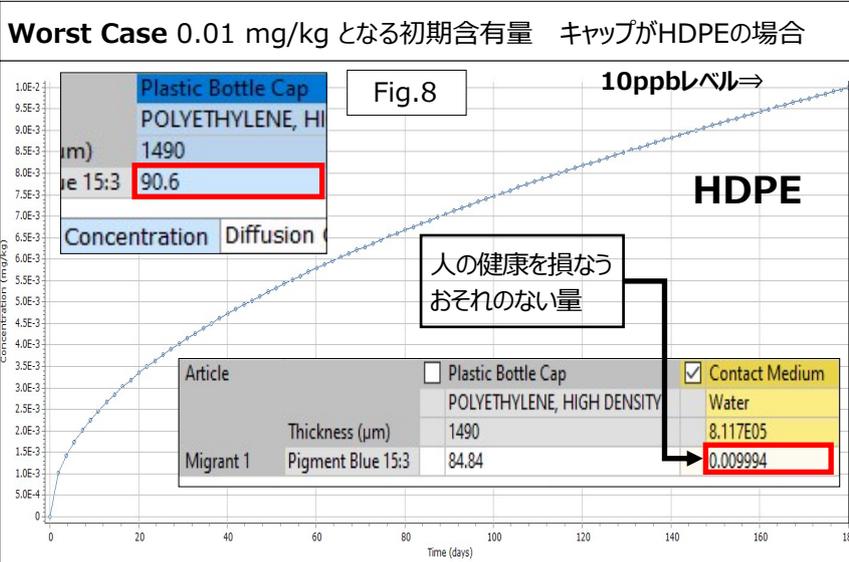
以上の青色顔料の含有量がHDPEに1%という極めて高い濃度とした場合の移行量が算出されました。



国のガイドラインで定められた「人の健康を損なうおそれのない量」である移行量として**0.01mg/kg (10ppb)** とするにはHDPEの青色顔料の含有量をどれだけの濃度にすれば良いか? について次ページで紹介します。

Log Powは有機化合物の親水性・疎水性を定量的に示す指標であり、SML6ソフトウェアで分配係数を算定する際に標準的に使用されるパラメータです。

Title : PETボトルキャップに含まれている顔料の溶出量推定



移行モデルのガイドラインによれば、物質の初期含有量が**最大1%まで**ならば、含有量が増えれば移行量も正比例するとされています。

初期濃度10,000mg/kgで移行濃度が1.103mg/kgとなる場合、逆に初期濃度0.010mg/kgとするには初期濃度はどれだけの濃度になるか？ これは簡単な下記の比例計算で答えが得られます。

10,000 : 1.103 = A : 0.010
A = (10,000 × 0.010) / 1.103
= 90.6 mg/kg



Worst Caseでは初期含有量が**90.6 mg/kg**となります。

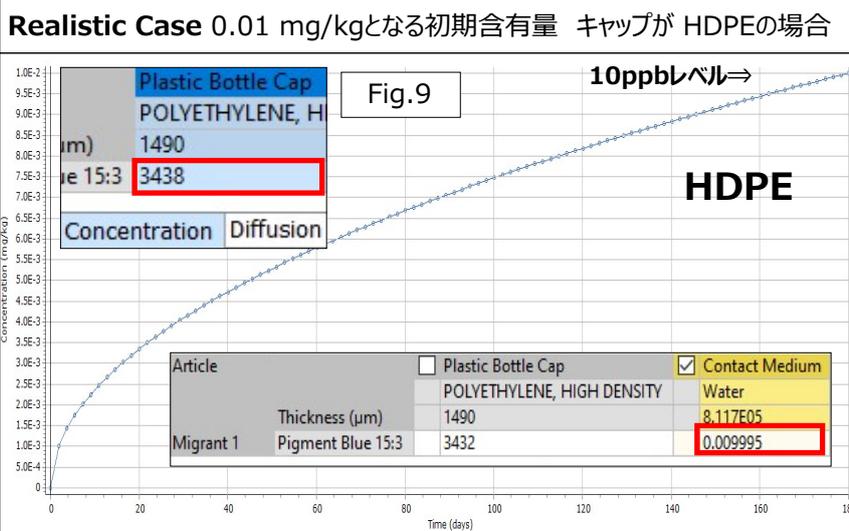


Fig.8とFig.9ではSML6によるシミュレーションで10ppbとなることを確認していますが、本来は最確認するまでもないことです。

Realistic Caseでは初期含有量**3,438 mg/kg**でも同様に比例計算で移行量が0.01 mg/kgとなる結果が得られます。RealisticとWorstでは移行物質の初期含有量は**38:1**の違いがあります。

PPキャップの移行試験結果

HDPEキャップと同様の条件下で**PPキャップ**を対象にシミュレーションを実施したところ、拡散係数および分配係数の差は小さく、Worst Caseでは、0.01mg/kgの移行量を示す初期含有量は**108mg/kg**であり、Realistic Caseでは、初期含有量は**3,690mg/kg**となりました。

Table_01 : 移行試験条件 40℃/180日間後の移行濃度

キャップの材質	解析モード	初期濃度が10,000mg/kgの場合	移行値が10ppmとなる初期濃度
HDPE	Worst case	1.103 mg/kg	90.6 mg/kg
HDPE	Realistic case	0.029 mg/kg	3,438 mg/kg
PP	Worst case	0.922 mg/kg	108 mg/kg
PP	Realistic case	0.027 mg/kg	3,690 mg/kg

Table_01はHDPEとPPのキャップの移行試験シミュレーションの比較テーブルです。Worstケースに合致するように、顔料の含有量を90~110mg/kgの配合比率とした時キャップの色が青色になるのでしょうか？それとも無色に近い状態となるのでしょうか？



HDPEの場合、Worst-caseとRealistic-caseの濃度差は38 : 1ですが、PPの場合は34:1となります。このようにWorstとRealisticを比較すると10ppbとなる初期濃度、あるいは移行量が1桁ほど異なる結果になります。

Title : PETボトルキャップに含まれている顔料の溶出量推定

2025年6月1日より、改正食品衛生法に基づく*ポジティブリスト制度*（PL制度）が完全施行され、食品に接触する器具・容器包装に使用される物質に対して、法的な適合性が求められるようになりました。これは、有害性が懸念される物質の事前排除を目的とし、規制の対象となる物質がPLリストに明記されている場合のみ使用可能となる仕組みです。

一方で、顔料（色材）は、PLリストおよびEUのユニオンリストのいずれにも現時点では記載されていないため「制度の対象外」と位置づけられます。ただしこれは、法規制の範囲外で自由に使用可能という意味ではなく、日本では別途、食品衛生法に基づく告示370号により包括的な管理の対象とされています。

告示370号では、着色料の使用は原則禁止とされつつも、例外として「食品に溶出・混和するおそれのないように加工されている場合に限り、使用が認められる」という但し書きが明記されています。

このため、顔料を使用する際には、加工技術を駆使し、必要に応じて溶出試験によって食品への影響がないことを検証することが必須となります。

本テクニカルノートでは、PLリストに記載されていない有機顔料に着目し、厚生労働省が示す改正食品衛生法第18条第3項ただし書の規定より「食品中濃度が0.01 mg/kg（10 ppb）以下であれば健康上の問題がない」という考え方にに基づき、SML6(特定移行限界)シミュレーションソフトを用いて、HDPE、PP製ペットボトルキャップにおける有機顔料の初期含有量を予測して、その結果、顔料が食品へ移行する量が規定値以下となる条件をシミュレーションしました。

SML6ソフトウェアは、ポリマー中の化学物質の移行量を拡散と分配係数モデルで予測するツールであり、**Worstケース**で得られた解析結果は“**ドキュメント宣言**”として使用できます。また**Realisticケース**(実測値に近い現実的な予測値)は実測に先立ち、おおよその移行量を迅速に予測することができるので、実測の効率や測定精度の向上に役立ちます。

PL（ポジティブリスト）制度では、食品用機器・容器包装に使用する原材料・添加物をあらかじめ国が定めたリスト(Positive List)に載っているものに限り使用を認めています。この制度のもとでは、メーカーや輸入業者には「適合性の証明」と「情報の伝達」が義務づけられており、その一環として「**ドキュメント宣言**」という手続きがあります。

ドキュメント宣言とは何か

- 製造者（あるいは輸入者）が、自社製品に用いた原材料や添加物がPLリスト品であることを「文書（ドキュメント）で宣言」し、かつその根拠となる試験成績書や適合証明書を添付・保管・必要に応じて提出できる状態にしておくことを指します。
- 単に「製品パッケージに適合マークを付ける」だけでなく、いつ・誰が・どのロットで製造した製品について、どの試験でどのような基準をクリアしたのかを明確に記録し、第三者（保健所や消費者庁）の求めに応じて提出できる体制を整える必要があります。

PL制度上の位置づけと目的

1. **情報伝達の義務** 食品衛生法改正（2020年6月施行）によって、PL適合製品を製造・販売する事業者は「製造管理・品質管理のための文書」を作成し、それを関係行政機関へ報告する「情報伝達（ドキュメント宣言）」が義務化されました。
2. **自己検証と第三者検証** 「ドキュメント宣言」は製造者自身による適合性の自己検証（自己宣言）であると同時に、必要に応じて第三者機関（公的検査機関や認証団体）が発行する適合証明書を示すことで、客観的な裏づけを持たせる役割も担います。
3. **製品ロット追跡性の担保** どのロットの製品にどの素材をどれだけ使ったかを文書化しておくことで、不適合品が発生した際の速やかな回収や原因究明が可能になります。



今回の事例は蓋と疑似溶媒の接触面積が6.16cm²しかありません。ボトルの青色顔料が含有するケースと比較すればキャップと疑似接触の接触面積が1/100倍となり、移行量もボトルの移行量に比較して1/100倍になります。食品包装材としての蓋やキャップはPL制度の中でドキュメント宣言するには比較的容易なことのように思えます。