

## リサイクル PET ボトルの安全性評価への活用を見据えた 包材からの溶出予測ソフトウェアの妥当性検証

島 壮一郎

サントリーホールディングス株式会社

### 1. 要約

リサイクル PET ボトルの安全性評価への活用を目指し、ソフトウェアによる代理汚染物質の溶出予測の妥当性を評価した。

### 2. 目的

使用済み PET ボトルを再生した飲料用 PET ボトルを使用する場合は、再生処理工程での汚染物質の除去性を確認するため、実再生処理工程で代理汚染試験を実施し、得られたリサイクル PET レジンを用いて PET ボトルを成型した後、疑似液の溶出試験で代理汚染物質の中味液への移行が少ないことの証明が原則である。この実再生処理工程での代理汚染試験には、再生処理工程の汚染リスクや過大な作業負荷を伴うとともに、溶出試験を含め、判定までに時間も要する。

一方で、「食品用器具及び容器包装の製造に用いる合成樹脂の原材料としてのリサイクル材料の使用に関する指針（2024年 厚生労働省）」では、既存の代理汚染試験結果や *in silico* による予測値を活用し、リサイクル PET ボトルからの代理汚染物質の移行量を推定する評価手法が記載されている。

そこで、リサイクル PET ボトルの安全性評価への溶出量予測ソフトウェアの活用を目的として、代理汚染試験に使用される物質を中心に、ソフトウェアの溶出予測値の妥当性を評価した。

### 3. 方法

非晶性のバージンレジンに 40°C 2週間、代理汚染物質混合溶液に浸漬させ、表面を蒸留水で洗浄後、2日間風乾することで代理汚染レジンを得た。

この代理汚染レジンに、バージンレジンへ 1%の割合で混合したレジンを用いて、代理汚染 PET ボトルを成型した。成型した代理汚染 PET ボトルに疑似液（水、10%、20%、40%エタノール）を満量充填し、35°Cで1ヶ月、3ヶ月保管し、疑似液中の代理汚染物質の溶出量（＝溶出実測値）を GC-MS で分析した。

また、成型した代理汚染 PET ボトル材質中の代理汚染物質濃度を GC-MS で分析した。溶出予測ソフトウェア「SML6」（AKTS 社）を用いて、PET ボトル材質中の代理汚染物質濃度から中味液への溶出予測を行い、得られた溶出予測値と溶出実測値と比較した。

### 4. 結果

汚染物質は、Log  $p_{ow}$  -0.4~4.5、沸点 101~305°C の広範な物性を有する物質 6 種を選定した。これらの物質の実測値は溶出量予測ソフトウェアによる予測値に対して 2%~83%の結果であった。

以上から、「SML6」は実測値よりも安全側で予測可能なソフトウェアであると評価した。

リサイクル PET 材質中の汚染物質濃度から中味液への溶出濃度を予測し、代理汚染物質の許容濃度と比較することで、リサイクル PET ボトルの安全性評価へ活用できると考えられた。

