

食事中濃度の算出方法

1. 食事中濃度の推定

食事中濃度 (DC_{total}) は、実際のばく露量に近い値を推定するため、食品安全委員会の「食品用器具・容器包装に関する食品健康影響評価指針」(2019年5月作成、2024年4月改訂)における合成樹脂区分に従い、その合成樹脂区分ごとの食事中濃度 (DC_G) から算出する(式1及び式2)。ただし、減算係数 (RF) は、対象物質(添加剤)が使用されている用途別(プラスチック製品/接着剤/塗膜等の各種対象製品)の生産量の割合に基づいて設定した補正係数(表1)、食品区分係数 (DF) 及び消費係数 (CF) は、「食品用器具及び容器包装に関する食品健康影響評価指針」別表5の値(表2)を適用する。

$$\text{式1 } DC_{total} = (DC_{G1} + DC_{G2} + DC_{G3} + DC_{G4} + DC_{G5} + DC_{G6} + DC_{G7}) \times RF$$

DC_{total} : 食事中濃度

DC_{G1} : 合成樹脂区分1の合成樹脂に由来する食事中濃度

DC_{G2} : 合成樹脂区分2の合成樹脂に由来する食事中濃度

DC_{G3} : 合成樹脂区分3の合成樹脂に由来する食事中濃度

DC_{G4} : 合成樹脂区分4の合成樹脂に由来する食事中濃度

DC_{G5} : 合成樹脂区分5の合成樹脂に由来する食事中濃度

DC_{G6} : 合成樹脂区分6の合成樹脂に由来する食事中濃度

DC_{G7} : 合成樹脂区分7の合成樹脂に由来する食事中濃度

RF: 用途別の生産量の割合から算出された減算係数

(便宜上、 $RF = 1$ として、 DC_{total} を算出し、得られた DC_{total} が 0.05 mg/kg (Cramer 構造分類がクラス1のものは 0.9 mg/kg) を超えた場合のみ RF を適用する。)

$$\text{式2 } DC_G = (Q_{D1} \times DF_1 + Q_{D2} \times DF_2 + Q_{D3} \times DF_3 + Q_{D4} \times DF_4 + Q_{D5} \times DF_5) \times CF$$

Q_{D1} : 通常の商品への推定移行量

Q_{D2} : 酸性食品への推定移行量

Q_{D3} : 酒類への推定移行量

Q_{D4} : 乳・乳製品への推定移行量

Q_{D5} : 油脂及び脂肪性食品への推定移行量

DF_1 : 食事に占める通常の商品の割合

DF_2 : 食事に占める酸性食品の割合

DF_3 : 食事に占める酒類の割合

DF_4 : 食事に占める乳及び乳製品の割合

DF_5 : 食事に占める油脂又は脂肪性食品の割合

CF: 食事に占める各ポリマー製品の割合

表1 用途別の生産量の割合に基づいた補正係数

対象物質の用途等			補正 係数	対象物質の用途等		補正 係数
接着剤 (0.04)	ラミネート (0.008)	溶剤形	0.001	プラスチック製品 (0.93)	軟質包装用フィルム	0.353
		水性形	0.0017		軟質ラミネートフィルム	0.037
		ホットメルト形	0.0024		硬質フィルム	0.186
		反応形	0.002		シート	0.065
		感圧形	0.001		食器等	0.093
		その他	0.00008		中空成形容器	0.158
	容器包装 (0.032)	溶剤形	0.0003		発泡製品	0.037
		水性形	0.0102		その他	0.009
		ホットメルト形	0.0093	塗膜（金属缶）		0.01
		反応形	0.0003	塗膜（金属缶以外）		0.03
		感圧形	0.0118	その他		0.01
		天然樹脂形	0.0003	使用実績がある用途の補正係数を合計した値を減算係数（RF）とする。ただし、減算係数（RF）の最小値は 0.001 とする。		
		水溶性ポリマー形	0.0003			
	その他		0.0004			

表 2 各合成樹脂区分の消費係数と食品区分係数

合成樹脂 区分	消費 係数 CF	食品区分係数 DF				
		通常の食品 （右記以外 の食品） D ₁	酸性食品 D ₂	酒類 D ₃	乳・ 乳製品 D ₄	油脂及び脂 肪性食品 D ₅
区分 1	0.05	移行量が最大の区分の係数を 0.96、その他を 0.01				
区分 2	0.07	0.38	0.27	0.01	0.11	0.23
区分 3	0.05	0.92	0.01	0.01	0.01	0.05
区分 4	0.05	0.93	0.01	0.01	0.01	0.04
区分 5	0.25	0.88	0.04	0.01	0.02	0.05
区分 6	0.16	0.80	0.05	0.01	0.02	0.12
区分 7	0.22	0.86	0.09	0.01	0.01	0.03

食品安全委員会 食品用器具及び容器包装に関する食品健康影響評価指針より引用

2. 食品への移行量の算出

食品への移行量は、シミュレーションにより溶出量予測ソフトウェアを用いて算出する。
ソフトウェアは、欧州規則 10/2011 においてスクリーニングアプローチの 1 つとして定義

されている溶出量予測ソフトウェア SML6 を利用する。

4 種の温度及び時間（条件 A～D）と 5 種の食品区分（D₁～D₅）に相当する食品擬似溶媒を組み合わせた条件における移行量（Q_{D1A}～Q_{D5D}）を求め、式 3 により各食品区分の移行量（Q_{D1}～D₅）を算出する。ただし、製品係数（PF_A～PF_D）は、業界団体から聞き取った各区分の一般的な使用条件の実態調査結果から設定した値（表 3）を用いる。

$$\text{式 3 } Q_{D1} = Q_{D1A} \times PF_A + Q_{D1B} \times PF_B + Q_{D1C} \times PF_C + Q_{D1D} \times PF_D$$

$$Q_{D2} = Q_{D2A} \times PF_A + Q_{D2B} \times PF_B + Q_{D2C} \times PF_C + Q_{D2D} \times PF_D$$

$$Q_{D3} = Q_{D3A} \times PF_A + Q_{D3B} \times PF_B + Q_{D3C} \times PF_C + Q_{D3D} \times PF_D$$

$$Q_{D4} = Q_{D4A} \times PF_A + Q_{D4B} \times PF_B + Q_{D4C} \times PF_C + Q_{D4D} \times PF_D$$

$$Q_{D5} = Q_{D5A} \times PF_A + Q_{D5B} \times PF_B + Q_{D5C} \times PF_C + Q_{D5D} \times PF_D$$

Q_{D1A}～Q_{D5A}：条件 A における各食品区分の推定移行量

Q_{D1B}～Q_{D5B}：条件 B における各食品区分の推定移行量

Q_{D1C}～Q_{D5C}：条件 C における各食品区分の推定移行量

Q_{D1D}～Q_{D5D}：条件 D における各食品区分の推定移行量

PF_A：条件 A で使用する製品の割合

PF_B：条件 B で使用する製品の割合

PF_C：条件 C で使用する製品の割合

PF_D：条件 D で使用する製品の割合

条件 A：室温：1 年間超

条件 B：室温：1 ヶ月間～1 年間、冷蔵：3 ヶ月間超

条件 C：室温：2 日間～1 ヶ月間、冷蔵：1 週間～3 ヶ月間、冷凍：1 年間超

条件 D：室温：1 日間以下、冷蔵：1 週間以下、冷凍：1 年間未満

表 3 各合成樹脂区分の製品係数

合成樹脂区分	製品区分	PF _A (条件 A)	PF _B (条件 B)	PF _C (条件 C)	PF _D (条件 D)
区分 1	成形品	1.000	0	0	0
区分 2	成形品	0	0	0	1.000
区分 3	成形品	0	0.140	0.477	0.383
区分 4	成形品	0	0.012	0.003	0.225
	フィルム	0	0.039	0.009	0.712
区分 5	成形品	0	0.145	0.018	0.067
	フィルム	0	0.487	0.060	0.223
区分 6	成形品	0	0.034	0.099	0.157

	フィルム	0	0.082	0.243	0.385
区分 7	成形品	0.188	0.699	0.055	0.058

3. シミュレーション条件

(1) 試料の基材

合成樹脂の基材（重合体）については、溶出量予測ソフトウェアのデータベース内にAp値（ポリマー特定定数）が設定されているポリマーから選択する。ただし、区分1に該当するポリマーについては、ソフトウェアのデータベース内にAp値が設定されているポリマーが存在しなかったため、ガラス転移温度（Tg値）が設定されている5種のポリマー（ポリフェニレンエーテル、フッ素樹脂、ポリアリルサルホン、ヒドロキシ安息香酸ポリエステル、ポリエーテルイミド）のうち、予測値が最も多かったフッ素樹脂（FR）を区分1の代表ポリマーとする。区分2～4については、最も消費係数が高いポリスチレン（PS）、ポリアミド（PA）、ポリ塩化ビニル（PVC）をそれぞれのグループの代表ポリマーとして選択する。さらに、グループ4に該当するポリ塩化ビニル（PVC）及びポリ塩化ビニリデン（PVDC）は、可塑剤の添加により製品の柔軟性が大きく変わることから、可塑剤添加量は移行量に大きな影響を与える。そのため、可塑剤が多く添加されるフィルム製品の移行量を算出する際は、ソフトウェア開発者の指示に従って移行量が実態に合うよう補正したAp値（Ap値の補正方法：デフォルトのAp値+0.52×可塑剤添加量、可塑剤添加量＝30%、補正後のAp値＝11.6）を用いる。

溶出試験による実測値を求める場合は、その対象物質が使用される範囲内で、当該対象物質の移行しやすさと消費係数を考慮して、食事中濃度が高いと予想される重合体を選択する。

(2) 試料の厚さ

試料（成形品）の厚さは1 mm とする。ただし、区分 4（ポリ塩化ビニル）、区分 5（ポリエチレン）及び区分 6（ポリプロピレン）のフィルム製品については、汎用フィルム製品の厚さを参考として、区分 4 は 10 μ m、区分 5 及び 6 は 100 μ m とする。

(3) 対象物質

対象物質は、ソフトウェア内のデータベースから選択する。ただし、log P_{ow} 値が設定されていない物質については、Scifinder、ChemDraw 等による文献値、予測値、計算値等を調べて、その値を入力する。

データベース内に存在しなかった物質については、下記手順で代替物質を選択する。

1. 「〇〇酸ナトリウム」などの金属塩の場合は、「〇〇酸」を選択
2. 「C₈₋₂₂」などの炭素鎖に幅がある物質群の場合は、最も分子量が小さい物質を選

択

3. 天然物由来成分などの複数の物質の混合物である場合は、その中から代表的な物質を選択
4. 分子量及び $\log P_{ow}$ 値に近い類似の構造を有する物質を選択
5. 反応生成物の場合は、およその構造を予測し、その分子量及び $\log P_{ow}$ 値を推定

(4) 対象物質の含有量

対象物質の含有量は、合成樹脂区分別使用制限（重量％）の値を用いる。ただし、得られる食事中濃度は、当該対象物質の使用量が最大量（使用制限量）であることを前提としたものとなるため、以下のように使用制限量が一般的な使用量と乖離していると判断される場合は、一般的な使用量を用いて実態に近い食事中濃度を求める場合がある。

- 例) 一部の事業者の使用量のみが突出して多い
- 例) 特定の食品への使用量のみが突出して多い
- 例) 特定の製品への使用量のみが突出して多い
- 例) 特定の効果を期待した場合の使用量のみが突出して多い

(5) 食品との接触面積

移行量の推定は、食品 1 kg が容器包装の表面積 600cm² に接触すると仮定して算出する。

(6) 食品擬似溶媒

食品擬似溶媒は、食品区分に応じた水、4%酢酸、20%エタノール、50%エタノール及びオリーブ油の 5 種とする（表 4）。ただし、酸性食品への移行量は物質の酸解離定数（PKa）に依存するが、使用したソフトウェアでは物質の PKa に関連した予測プログラムが組み込まれておらず、酸性溶媒では過度な推定値となるよう設計されている。そのため、ソフトウェア開発者の意見を基に、イオン化しにくい物質（酸性の官能基を含まない物質）（イオン化：「N」）については、4%酢酸と挙動に近い 10%エタノールを食品擬似溶媒として移行量を推定する。一方、イオン化しやすい物質（イオン化：「A」）については 4%酢酸の結果を用いる。

表 4 食品の区分と溶出試験に用いる食品擬似溶媒

区分	食品	食品擬似溶媒
D ₁	通常の商品（下記以外の食品）	水
D ₂	酸性食品	4%酢酸または 10%エタノール
D ₃	酒類	20%エタノール

D4	乳・乳製品	50%エタノール
D ₅	油脂及び脂肪性食品	オリーブ油

(7) 温度及び時間

合成樹脂製品の耐久性（耐久温度と耐久時間）は、アレニウスの式で近似でき、欧州規則 10/2011 では長期間接触用途における加速試験の試験条件の設定に活用されている。また、溶出量予測ソフトウェアにおいても、アレニウスの式がポリマー内での物質の拡散プロセスの予測に用いられている。そこで、アレニウスプロットを用いて市販製品の使用条件（冷凍～室温、1 日～1 年間を超える。これに係る以下の条件 A～D の詳細は式 3 を参照）とほぼ同等となる代表条件を推定する。その結果、条件 A として「120℃ 30 分間」、条件 B として「105℃ 30 分間」、条件 C として「75℃ 30 分間」、条件 D として「45℃ 30 分間」の 4 条件を代表条件とし（表 5）、本代表条件を用いてシミュレーションを実施し、溶出量を推定し個々の移行量（ $Q_{D1A} \sim Q_{D5D}$ ）とする。ただし、シミュレーションによる予測値に疑義が実際の移行量と大きく乖離することが危惧される場合は、溶出試験による実測値を用いる場合がある。

表 5 器具・容器包装の使用条件例と溶出試験に用いる代表条件

条件	条件 A	条件 B	条件 C	条件 D
市販製品の使 用条件例	120℃ 30 分間	120℃ 5 分間	—	—
	105℃ 2 時間	105℃ 30 分間	105℃ 5 分間	—
	75℃ 12 時間	75℃ 1 時間	75℃ 30 分間	75℃ 5 分間
	45℃ 10 日間	45℃ 1 日間	45℃ 2 時間	45℃ 30 分間
	20℃ 1 年間	20℃ 3 ヶ月間	20℃ 10 日間	20℃ 12 時間
	—	10℃ 1 年間	10℃ 1 ヶ月間	10℃ 2 日間
	—	—	—15℃ 1 年間	—15℃ 3 ヶ月間
代表条件	120℃ 30 分間	105℃ 30 分間	75℃ 30 分間	45℃ 30 分間