

单一材质聚乙烯复合薄膜中挥发性物质的迁移和安全评估研究

doi:10.20269/j.cnki.1674-7100.2026.2002

叶华雄^{1,2} 蔡微³
林勤保¹ 杨青华⁴
陈可晴³ 李可金⁵

1. 暨南大学

包装工程学院

广东 珠海 519070

2. 广州职业技术大学

艺术设计学院

广东 广州 511483

3. 广州酒家集团利口福食品

有限公司

广东 广州 511442

4. 知里科技(广东)有限公司

广东 广州 510730

5. 珠海市德燊环保包装有限公司

广东 珠海 519045

摘要: 以食品包装用的单一材质聚乙烯(PE)复合薄膜为对象,采用直接浸入-固相微萃取-气相色谱-质谱联用(DI-SPME-GC-MS)技术,对PE薄膜中迁移至95%乙醇食品模拟物中的挥发性物质进行非靶向筛查和定量分析,并结合食品安全标准中的特定迁移限量及毒理学关注阈值(TTC)进行安全评估。结果表明,GC-MS初步筛查出22种挥发性迁移物,主要为烷烃类和含苯环化合物,迁移浓度较低且多数属于Cramer I类低毒性物质。安全评估结果表明,所有检出迁移物的TTC均显著低于安全阈值,不会对人体健康造成潜在风险。PE复合薄膜在正常使用条件下释放的挥发性迁移物符合食品安全标准,对人体健康无显著威胁。

关键词: 聚乙烯复合薄膜;挥发性迁移物;安全评估;气相色谱-质谱法;毒理学关注阈值

中图分类号: TS207.7

文献标志码: A

文章编号: 1674-7100(2026)02-0009-07

引文格式: 叶华雄,蔡微,林勤保,等.单一材质聚乙烯复合薄膜中挥发性物质的迁移和安全评估研究[J].包装学报,2026,18(2):9-15.

1 研究背景

在竞争激烈的食品市场中,包装方案的创新已成为企业提升产品竞争力和满足消费者需求的关键因素。然而,当前市场上食品包装的同质化现象严重,大多数包装在材料选择和结构设计上缺乏差异化,难以满足消费者对个性化、环保和食品安全的多重需求。这种同质化不仅限制了企业的市场拓展,也对整个行业的可持续发展构成了挑战。在此背景下,开发新型包装材料和技术显得尤为重要^[1]。单一材质聚乙烯(polyethylene, PE)膜作为一种新开发的新型包装材料,由双层PE薄膜通过复合等工艺加工而

成,因其独特的性能优势,受到了持续关注。这种材料不仅具有良好的力学性能、阻隔性能和加工性能,还便于回收再利用,显著减少了包装废弃物对环境的负担,符合绿色包装和可持续发展的趋势。此外,单一材质结构避免了复合材料分离的难题,进一步提升了回收效率,降低了资源消耗^[2]。

近年来,国内外学者对食品接触材料的安全性进行了大量研究^[3],尤其是在迁移物的检测和风险评估方面取得了显著进展。国外研究主要集中在高灵敏度分析技术的应用和新型迁移物的发现上,如气相色谱-质谱联用(gas chromatography-mass spectrometry, GC-MS)、高效液相色谱-质谱联

收稿日期:2025-10-24

作者简介:叶华雄,男,实验师,主要研究方向为食品包装, E-mail: 592477691@qq.com

通信作者:林勤保,男,研究员,博士,主要从事食品接触材料安全评估研究, E-mail: 7899966@qq.com

用等高灵敏度分析技术^[4]。J. R. Smith等^[5]采用GC-MS结合非靶向筛查策略,系统鉴定了PE薄膜中的挥发性有机化合物。此外,毒理学关注阈值(threshold of toxicological concern, TTC)和定量构效关系(quantitative structure-activity relationship, QSAR)等方法也被用于评估迁移物的潜在健康风险^[6-7]。在国内,相关研究也在不断深入,研究重点逐渐从传统的迁移物检测转向非靶向筛查和安全评估^[8]。任纪州等^[9]研究了活性塑料瓶盖中抗氧化剂丁基羟基茴香醚(BHA)和丁基羟基甲苯(BHT)的迁移行为,发现迁移量受抗氧化剂浓度、模拟液极性、温度等因素显著影响,指出数学模拟迁移值普遍高于试验值,提示在实际安全评估中应谨慎使用模拟数据。董世蒙等^[10]对273批食品接触材料进行橄榄油总迁移量测试,发现热塑性弹性体(TPE)、聚丙烯(PP)等材质存在较高迁移风险,强调在迁移试验前应进行适宜性判定和水分敏感性调节,以确保测试结果的准确性和有效性。金莉莉等^[11]采用顶空气相色谱-串联质谱、气相色谱-四极杆飞行时间质谱和液相色谱-四级杆飞行时间质谱方法对20批纸/铝/塑复合包装进行非靶向筛查,发现其在体积分数为95%的乙醇模拟物(以下简称95%乙醇)中共检出35种迁移物,其中33种物质经过评估后被认为风险较低,但两类聚烯烃低聚物因结构不确定且缺乏毒理学数据需持续关注。该研究建立了复合包装材料迁移物的系统筛查方法,为其安全性评价提供了重要技术参考。高分辨液相色谱-质谱联用技术的发展,为食品接触材料中迁移物的非靶向筛查提供了强有力的技术支持^[12]。直接浸入-固相微萃取-气相色谱-质谱联用(direct immersion-solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry, DI-SPME-GC-MS)技术结合了固相微萃取(SPME)的高效样品预处理能力和气相色谱-质谱联用(GC-MS)的高灵敏度检测能力,具有无需溶剂、操作简便、快速、灵敏度高和重复性好等优点,特别适合于复杂基质中挥发性和半挥发性有机化合物的检测^[13]。例如, Su Q. Z.等^[13]利用DI-SPME-GC-MS技术对消费后高密度聚乙烯牛奶瓶中的挥发性迁移物进行了筛查和定量分析,成功鉴定了多种低浓度的挥发性有机化合物,并评估了其潜在的健康风险。此外,该技术在其他食品接触材料如塑料包装、橡胶制品和涂层等,也显示出良好的适用性和可靠性^[14-15]。尽管如此,目前对

于单一材质PE复合薄膜中挥发性迁移物的研究仍存在不足,尤其是在实际食品包装应用中的安全评估方面,对实际使用条件下的迁移研究相对较少。

鉴于此,本研究采用DI-SPME-GC-MS技术对单一材质PE复合薄膜中的挥发性迁移物进行非靶向筛查和定量分析,旨在为单一材质PE复合薄膜的研发和应用提供科学依据,同时推动食品包装行业绿色包装材料的可持续发展。

2 试验部分

2.1 样品与试剂

1)样品:带有油墨印刷的单一材质PE复合膜(如图1所示),由某包装公司提供。此款薄膜预计应用于煎饺产品的内包装,需在-18℃的环境下进行冷冻储存。

2)试剂:超纯水,实验室自制;乙醇,HPLC级,上海麦克林科技有限公司;正构烷烃(C7~C40)混合标准溶液,1000 μg/mL,色谱纯,上海安谱瑾世标准技术服务有限公司。



图1 PE复合膜样品

Fig. 1 PE composite film samples

2.2 主要仪器和设备

铝制不锈钢金属迁移池,符合GB 5009.156—2016《食品安全国家标准 食品接触材料及制品迁移试验预处理方法通则》,接触面积为0.442 dm²;UPTC系列超纯水系统,上海力辰邦西仪器科技有限公司;电子天平,BSA2245-CW型,精确等级I,赛多利斯科学仪器有限公司;电热鼓风干燥箱,101-1DB型,天津泰斯特仪器有限公司;水浴加热锅,WB-S型,湖南比克曼生物科技有限公司;SPME萃取头,DVB/CWR/PDMS型,80 μm,光纤长度为1 cm,美国默克Supelco公司;CTC自动进样器(COMBI PAL型)、气相色谱-质谱联用系统

(7890A-5975C型)、石英毛细管色谱柱 DB-5MS (30 m × 0.25 mm × 0.25 μm), 美国安捷伦科技有限公司。

2.3 试验方法

2.3.1 样品处理

样品制备时, 根据迁移池规格, 将 PE 复合薄膜样品裁剪成表面积大于 0.446 dm² 的试样。使用洁净酒精布轻轻擦拭试样与食品接触面后, 将试样置于通风处, 迅速风干, 再装入洁净 PE 袋中保存。

2.3.2 挥发性物质特定迁移试验

依据 GB 31604.1—2023《食品安全国家标准 食品接触材料及制品 迁移试验通则》, 选择 95% 乙醇作为化学溶剂替代含油脂食品模拟物, 进行挥发性特定迁移试验。由于无法获取实际的试样与煎饺食品接触的面积体积比 (S/V), 按照 GB 31604.8—2021《食品安全国家标准 食品接触材料及制品 总迁移量的测定》, 将 S/V 假设为 6 dm²/1 kg (或 6 dm²/1 L)。取洁净的薄膜试样放置于铝制不锈钢金属迁移池 (如图 2 所示) 中, 加入 74.3 mL 食品模拟物, 并在 20 °C 下进行 10 d 的特定迁移试验。迁移后的食品模拟物测试液装入玻璃瓶中, 在 4 °C 环境下保存, 用于后续潜在污染物的非靶向筛查和定量分析。不加样品, 按上述步骤对空白样品进行迁移测试。所有迁移测试均采用 3 个平行试验。



图 2 铝制迁移池

Fig. 2 Aluminum migration cell

2.3.3 挥发性迁移物的 GC-MS 筛查

对于特定迁移试验后得到的 95% 乙醇测试液, 将模拟物过滤后用超纯水稀释至 20% 乙醇, 经 0.45 μm 有机系微孔滤膜过滤后备用 (避免损伤 SPME 萃取头)。准确移取 18 mL 稀释后食品模拟物待测液于 20 mL 顶空瓶, 以 250 r/min 的搅拌速度, 在萃取温度 70 °C 下预孵化 5 min, 随后插入并浸没固定长度的 SPME 萃取头于待测食品模拟物中, 在萃取温度 70 °C 下萃取 55 min 后, 收回 SPME 萃取头并插入 GC 进样口 (温度为 250 °C) 中热解吸 8 min, 并进

行 GC-MS 分析。上述操作由 CTC 进样器自动完成, 并采用 3 个平行试验。

GC-MS 仪器参数设置如下:

1) GC 条件: 色谱柱 Agilent DB-5MS (30 m × 0.25 mm × 0.25 μm); 溶剂延迟为 4.50 min; 进样口温度为 250 °C; SPME 萃取头解吸时间为 8 min; 采用不分流模式; 用氦气作为载气, 流速为 1.0 mL/min。在初始温度 40 °C 下保持 8 min, 以 15 °C/min 升温至 170 °C, 以 10 °C/min 升温至 250 °C, 并以 15 °C/min 升温至 280 °C 后保持 5 min。

2) MS 条件: 采用电子轰击 (EI) 离子源, 电离能量为 70 eV; 离子源、四级杆温度分别为 230, 150 °C; 全扫描模式, 扫描质量范围为 45~450 m/z。

2.3.4 挥发性迁移物的非靶向筛查与定量

用 MS-DIAL (mass spectrometry data independent analysis) 代谢组学数据分析软件对迁移物进行非靶向筛查, 通过保留指数、NIST 质谱库匹配提高物质定性的准确性^[13-14]。软件参数设置如下: 离子化类型选择 “Hard ionization (GC/MS)”, 数据类型为 “Centroid data”, 导入 .CDF 格式数据文件、.txt 正构烷烃 (C9~C27) 保留时间文件和 .msp 质谱数据文件, 并设置样品相关类型; MS 质量数分析范围为 40~600 Da, 容差值为 0.5 Da, 最小分析峰高为 500, 保留指数相似度容差为 20%, 保留时间容差为 0.1 min, EI 碎片离子峰的相似度不低于 70%。为减少假阳性结果, 分别将 MS 相似性、片段相似性和点积相似性阈值设置为 80%、70% 和 70%。

采用一系列正构烷烃物质对保留时间近似的迁移物浓度进行半定量分析。分别准确称取适量的物质标准品溶解于正己烷, 制备得到正构烷烃标准中间溶液后, 分别移取适量标准中间溶液到洁净 20 mL 顶空瓶中, 准确加入 20% 乙醇, 制备得到一系列质量浓度为 0.5, 1.0, 2.0, 5.0, 10.0, 50.0 μg/mL 的正构烷烃标准工作溶液。在相同时间段内按照相同仪器方法对标准工作溶液和样品待测液进行分析, 并根据绘制的标准工作曲线和分析程序计算出迁移物的定量浓度。

2.3.5 安全评估

基于迁移物的迁移浓度进行安全风险^[16-17]。具体评估方法如下:

1) 将迁移物的迁移浓度与 GB 9685—2016《食品安全国家标准 食品接触材料及制品用添加剂使用标准》中的特定迁移限量 (specific migration limit,

SML) 进行比较和合规性评估。

2) 当无法获取 SML 时, 采用定量构效关系和毒理学关注阈值进行风险评估。通过 Cramer 决策树和迁移物独特结构将化合物分类为 3 个毒性等级 (Cramer I、II、III), 并分别对应了不同的毒性安全阈值 (30.0, 9.0, 1.5 $\mu\text{g}/\text{kg bw}/\text{d}$)。

欧盟食品安全局 (European Food Safety Authority, EFSA) 基于标准成人体质量 60 kg, 在最坏膳食情况下, 依据迁移物的迁移浓度和食品消费情况计算迁移物的估计每日摄入量 (estimated daily intake, EDI)^[16]。

$$E_{\text{DI}} = M \times Q/BW, \quad (1)$$

式中: Q 为每日摄入包装食品的质量, kg/d , 此处取值为 1 kg/d ; M 为食品模拟物中物质的迁移浓度, mg/kg ; BW 为标准成人体质量。

对于未检出或未定量的迁移物, 分别将检测限 (LOD)、定量限 (LOQ) 用于计算 EDI 和安全评估。危害商 (hazard quotient, HQ) 作为评判迁移化合物是否存在健康风险的依据, 如式 (2) 所示。当 $HQ > 1$ 时, 表示该化合物会造成潜在的人类健康风险^[17]。

$$HQ = E_{\text{DI}}/H_{\text{BGV}}, \quad (2)$$

式中, H_{BGV} 为物质的健康指导值, $\text{mg}/\text{kg bw}/\text{d}$ 。

2.3.6 数据处理

整理数据用 Microsoft Excel。质谱数据分析用 MS-DIAL version 5.50 软件^[13, 18]。从 PubChem 数据库中检索获取初步定性物质的具体信息 (CAS 号等)。迁移物的毒性描述 (包括 Cramer 等级) 是通过相关 QSAR 工具预测完成的^[15]。SML 从欧盟法规 EU No. 10/2011 和国家标准 GB 9685—2016 清单中获取。

3 结果与讨论

3.1 挥发性迁移物的定性与溯源

采用 DI-SPME-GC-MS 技术对 PE 复合薄膜迁移到 95% 乙醇中的挥发性迁移物进行色谱数据采集, 典型的总离子流图如图 3 所示。通过 MS-DIAL 等代谢组学分析软件对迁移物进行非靶向筛查, 结合保留指数、NIST 质谱库匹配等方法提高物质定性的准确性, 结果如表 1 所示。

如表 1 所示, 共检测出 22 种挥发性迁移物。其中, 基于较为可靠的质谱碎片匹配以及保留指数 RI 相似性 (RI 相似度阈值设定为 20), 14 种化合物被划分为置信度 level 2 级; 其余 8 种化合物无法被初步定性, 但给出了质谱碎片结构相似的物质作为参考。

表 1 PE 复合薄膜中挥发性迁移物的定性和溯源

Table 1 Identification and source attribution of volatile migrants in PE composite films

序号	保留时间 /min	保留指数	迁移物	CAS 号	置信度	总评分	可能来源
1	3.13	719	2, 2-二甲基己烷	590-73-8	level 3	81.20	香精
2	13.06	895	顺-环辛烯	931-87-3	level 2	76.10	中间体 / 单体
3	14.84	1037	1-甲基-3-丙基苯	1074-43-7	level 3	71.10	
4	14.89	887	2, 3-二甲基双环 [2.2.1] 庚-2-烯	529-16-8	level 2	82.00	香精
5	14.93	1064	反式-十氢萘	91-17-8	level 2	78.80	树脂溶剂
6	15.24	1090	1-乙基-2, 3-二甲基苯	933-98-2	level 2	70.10	
7	15.29	1025	对-伞花炔	99-87-6	level 3	74.00	香精香料 / 稀释剂
8	15.41	1076	2-乙基-1, 4-二甲基苯	1758-88-9	level 2	90.40	
9	15.70		正十一烷	1120-21-4	level 2	86.40	溶剂 / 中间体
10	15.97	1344	6-甲基十三烷	13287-21-3	level 2	78.60	
11	16.17	1117	5-丙基壬烷	998-35-6	level 2	84.70	
12	16.82	1259	4-甲基十二烷	6117-97-1	level 3	75.90	
13	16.92	1170	3-甲基十一烷	1002-43-3	level 2	86.70	
14	17.35	1105	1, 3-二甲基-5-异丙基苯	4706-90-5	level 2	78.00	
15	17.40		正十二烷	112-40-3	level 2	87.70	中间体 / 香精
16	17.59	1409.52	2, 5-二甲基十三烷	56292-66-1	level 3	76.60	
17	18.07	1237	己基环己烷	4292-75-5	level 2	80.50	
18	18.08	1474	月桂醇	112-53-8	level 3	70.70	溶剂 / 有机合成
19	18.37	1264	2-甲基十二烷	1560-97-0	level 2	86.30	
20	18.53		正十七烷	629-78-7	level 3	84.40	有机合成
21	18.67	1587	2-甲基-1-十五碳烯	29833-69-0	level 3	76.90	
22	18.79	1263.14	(2-乙基-1-甲基-1-丁烯基) 环己烷	74810-42-7	level 2	75.00	香精

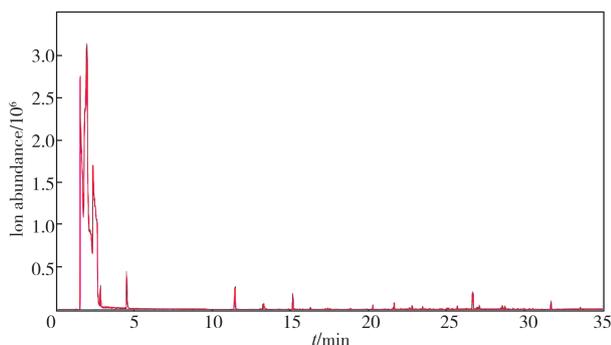


图3 从PE复合薄膜迁移到95%乙醇中的挥发性迁移物的总离子流图

Fig. 3 Total ion chromatogram of volatile substances migrated from PE composite film into 95% ethanol

根据 ClassyFire 分类, 所有挥发性和半挥发性迁移物可分为 4 类, 包括 4 种苯环化合物、13 种烷烃化合物、2 种烯烃化合物和 1 种醇类化合物。从 PubChem 数据库可知, 部分检出的迁移物是常见的天然或人工合成的风味剂, 比如 2, 2-二甲基己烷 (No. 1)、檀烯 (No. 4)、4-异丙基甲苯 (No. 7) 等。4-异丙基甲苯和正十二烷 (No. 15) 常用于工业生产, 比如化合物中间体等。顺-环辛烯 (No. 2)、十氢萘 (No. 5)、正十一烷 (No. 9)、月桂醇 (No.

18) 和正十七烷 (No. 20) 也都经常被用作化合物中间体、溶剂或聚合单体等。此外, 12 种挥发性和半挥发性迁移物暂时无法获取到明确的用途或来源, 其可能来源于生产过程中的降解或污染残留。

3.2 迁移物的半定量浓度

采用正构烷烃标准, 通过外标法对 PE 复合薄膜迁移至 95% 乙醇中的 22 种挥发性迁移物进行半定量分析, 结果如表 2 所示。所有检出化合物的迁移浓度均低于 31 $\mu\text{g}/\text{kg}$, 且多数未超过 10 $\mu\text{g}/\text{kg}$, 这表明 PE 复合薄膜在食品接触条件下的挥发性物质释放量极低。

3.3 迁移物的安全评估

基于不同毒性终点模型的 QSAR 通过检测物质独特结构中 与毒性相关的结构片段, 实现对物质危害的预测。根据 QSAR 预测和结构特征分析, 22 种检出的挥发性和半挥发性迁移物均具有 Cramer I 等级。基于欧盟 EFSA 的毒理学关注阈值体系, Cramer I 类物质的每日允许摄入量为 30 $\mu\text{g}/\text{kg}$ 。采用最保守的暴露场景 (每日摄入 1 kg 包装食品, 体重 60 kg) 进行评估。表 2 中结果显示, 22 种迁移物中顺-环辛烯的 EDI 最高 (0.517 $\mu\text{g}/\text{kg}$ bw/d), 仅占 TTC 的

表 2 PE 复合薄膜中挥发性迁移物的半量浓度

Table 2 Semi-quantitative concentrations of volatile migrants in PE composite films

序号	迁移物	Cramer 类型	迁移浓度 / ($\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$)	EDI / ($\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{bw}\cdot\text{d}^{-1}$)	HQ	化合物类别
1	2, 2-二甲基己烷	Cramer I	20.18 \pm 10.13	0.3360	0.0112	烷烃类
2	顺-环辛烯	Cramer I	31.01 \pm 11.59	0.5170	0.0172	烯烃类
3	1-甲基-3-丙基苯	Cramer I	4.17 \pm 0.31	0.0695	0.0023	苯环类
4	2, 3-二甲基双环 [2.2.1] 庚-2-烯	Cramer I	9.01 \pm 1.47	0.1500	0.0050	烯烃类
5	反式-十氢萘	Cramer I	3.89 \pm 0.27	0.0648	0.0022	烷烃类 (环状)
6	1-乙基-2, 3-二甲基苯	Cramer I	5.16 \pm 0.37	0.0860	0.0029	苯环类
7	对-伞花烃	Cramer I	4.71 \pm 0.56	0.0785	0.0026	苯环类
8	2-乙基-1, 4-二甲基苯	Cramer I	5.33 \pm 0.84	0.0888	0.0030	苯环类
9	正十一烷	Cramer I	7.16 \pm 1.81	0.1190	0.0040	烷烃类
10	6-甲基十三烷	Cramer I	<2.38	<0.0397	0.0013	烷烃类
11	5-丙基壬烷	Cramer I	3.32 \pm 0.08	0.0553	0.0018	烷烃类
12	4-甲基十二烷	Cramer I	<2.38	<0.0397	0.0013	烷烃类
13	3-甲基十一烷	Cramer I	3.75 \pm 0.32	0.0625	0.0021	烷烃类
14	1, 3-二甲基-5-异丙基苯	Cramer I	4.40 \pm 0.30	0.0733	0.0024	苯环类
15	正十二烷	Cramer I	9.70 \pm 3.90	0.1620	0.0054	烷烃类
16	2, 5-二甲基十三烷	Cramer I	<2.38	<0.0397	0.0013	烷烃类
17	己基环己烷	Cramer I	3.40 \pm 0.11	0.0567	0.0019	烷烃类 (环状)
18	月桂醇	Cramer I	3.31 \pm 0.08	0.0552	0.0018	醇类
19	2-甲基十二烷	Cramer I	<2.38	<0.0397	0.0013	烷烃类
20	正十七烷	Cramer I	<2.38	<0.0397	0.0013	烷烃类
21	2-甲基-1-十五碳烯	Cramer I	<2.38	<0.0397	0.0013	烯烃类
22	(2-乙基-1-甲基-1-丁烯基) 环己烷	Cramer I	<2.38	<0.0397	0.0013	烷烃类 (环状)

注: “<2.38 $\mu\text{g}/\text{kg}$ ” 表示迁移物浓度低于 LOD。

1.72%。进一步分析表明, 这些 Cramer I 类迁移物在 95% 乙醇中的迁移浓度较低, 单一迁移物的 HQ 介于 0.0013~0.0172 之间, 累积 HQ 为 0.0749, 远低于风险阈值 (HQ 为 1)。综合以上结果可知, 单一材质 PE 复合薄膜释放的挥发性迁移物均属低毒物质, 在预期使用条件下对人体健康无显著威胁。

4 结论

本研究采用 DI-SPME-GC-MS 技术, 对用于煎饺产品内包装的单一材质 PE 复合薄膜中的挥发性迁移物进行了全面的非靶向筛查和安全评估。研究结果表明, 通过 GC-MS 筛查, 共检测出 22 种挥发性迁移物, 主要为烷烃类和苯环结构化合物。这些物质的迁移浓度较低, 且大多属于 Cramer I 类低毒性物质。安全评估结果显示, 所有检出的挥发性迁移物的毒性关注阈值均远低于安全阈值, 不会对人体健康造成潜在的安全风险。因此, 单一材质 PE 复合薄膜在正常使用条件下释放的挥发性迁移物符合食品安全标准, 对人体健康无显著威胁。本研究为食品包装材料的安全性评估提供了科学依据, 并为绿色包装材料的研发和应用提供了参考。未来, 本课题组将聚焦于挥发性迁移物的准确定量分析, 并且对市售的多种食品包装膜进行筛查分析, 以此为食品包装材料的安全性提供重要参考。

参考文献:

- [1] GEUEKE B, GROH K, MUNCKE J. Food Packaging in the Circular Economy: Overview of Chemical Safety Aspects for Commonly Used Materials[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2018, 193: 491–505.
- [2] ERIKSEN M K, CHRISTIANSEN J D, DAUGAARD A E, et al. Closing the Loop for PET, PE and PP Waste from Households: Influence of Material Properties and Product Design for Plastic Recycling[J]. *Waste Management*, 2019, 96: 75–85.
- [3] MUNCKE J, ANDERSSON A M, BACKHAUS T, et al. Impacts of Food Contact Chemicals on Human Health: A Consensus Statement[J]. *Environmental Health*, 2020, 19(1): 25.
- [4] PUGLISI E, FIORINI D, ZUCCHETTI M, et al. Recent Advances in Analytical Techniques for the Detection of Migrants from Food Contact Materials[J]. *Trends in Analytical Chemistry*, 2021, 142: 116–128.
- [5] SMITH J R, JOHNSON A B, CHEN L, et al. Non-Targeted Screening of Volatile Organic Compounds in Polyethylene Films Using GC-MS[J]. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2023, 71(15): 5890–5901.
- [6] SERRA H, BOCCACCI MARIANI M, VITRAC O, et al. Application of Threshold of Toxicological Concern (TTC) Approach to Migrants from Food Contact Materials[J]. *Food Additives & Contaminants: Part A*, 2022, 39(5): 912–925.
- [7] SERRA H, BOCCACCI MARIANI M, VITRAC O, et al. Application of TTC and QSAR Approaches for Safety Assessment of Food Contact Materials[J]. *Food and Chemical Toxicology*, 2024, 183: 113456.
- [8] WANG L, ZHANG Y, LIU X M, et al. Recent Advances in Migration Testing Methods for Food Contact Materials in China[J]. *Food Control*, 2023, 145: 109432.
- [9] 任纪州, 张珍红, 林勤保, 等. 活性塑料瓶盖中抗氧化剂的特定迁移与模拟迁移对比研究[J]. *包装学报*, 2022, 14(1): 60–69.
- [10] 董世蒙, 葛文秀, 时惠莲, 等. 食品接触材料中橄榄油总迁移量的风险分析[J]. *包装学报*, 2023, 15(2): 1–7.
- [11] 金莉莉, 邹凯, 黄颖琦, 等. 食品接触用多层复合包装中迁移物质的非靶向筛查和风险评价[J]. *包装工程*, 2024, 45(7): 119–129.
- [12] 王国秀, 张琦, 陆佳, 等. 高分辨质谱-色谱联用技术在食品接触材料迁移物筛查中的应用研究进展[J]. *食品科学*, 2025, 46(7): 346–356.
- [13] SU Q Z, VERA P, SALAFRANCA J, et al. Decontamination Efficiencies of Post-Consumer High-Density Polyethylene Milk Bottles and Prioritization of High Concern Volatile Migrants[J]. *Resources, Conservation and Recycling*, 2021, 171: 105640.
- [14] TSUGAWA H, CAJKA T, KIND T, et al. MS-DIAL: Data-Independent MS/MS Deconvolution for Comprehensive Metabolome Analysis[J]. *Nature Methods*, 2015, 12(6): 523–526.
- [15] YANG Q H, LIN Q B, LIAO J, et al. Non-Targeted Screening for Contaminants Derived from Food Contact Water-Borne Coatings and Risk Assessment Based on (Q) SAR Matrix[J]. *Food Packaging and Shelf Life*, 2023, 35: 101036.
- [16] PlasticsEurope. Risk Assessment of Non-Listed Substances (NLS) and Non-Intentionally Added Substances (NIAS) Under Article 19 of Commission Regulation (EU) No 10/2011 of 14 January 2011 on Plastic Materials and Articles Intended to Come into

Contact with Food[EB/OL]. (2014-12-01)[2025-04-25].
<https://plasticseurope.org/sustainability/plastics-health/safety-of-plastics/food-contact/>.

- [17] U.S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA). Supplementary Guidance for Conducting Health Risk Assessment of Chemical Mixtures[EB/OL]. (2000-08-01)[2025-04-25]. <https://cfpub.epa.gov/ncea/raf/pdfs/>

[chem_mix/chem_mix_08_2001.pdf](#).

- [18] DJOUMBOU FEUNANG Y, EISNER R, KNOX C, et al. ClassyFire: Automated Chemical Classification with a Comprehensive, Computable Taxonomy[J]. *Journal of Cheminformatics*, 2016, 8(1): 61.

(责任编辑: 邓 彬)

Migration Study and Safety Assessment of Volatile Substances in Single-Material Polyethylene Composite Films

YE Huaxiong^{1,2}, CAI Wei³, LIN Qinbao¹, YANG Qinghua⁴, CHEN Keqin³, LI Kejin⁵

- (1. College of Packaging Engineering, Jinan University, Zhuhai Guangdong 519070, China;
2. College of Art and Design, Guangzhou Polytechnic University, Guangzhou 511483, China;
3. Guangzhou Restaurant Group Likofu Food Co., Ltd., Guangzhou 511442, China;
4. Zhili Technology (Guangdong) Co., Ltd., Guangzhou 510730, China;
5. Zhuhai Densy Environmental Protection Packaging Co., Ltd., Zhuhai Guangdong 519045, China)

Abstract: Taking the single-material polyethylene (PE) composite film used for food packaging as the object, the volatile compounds migrating from PE films into 95% ethanol food simulants were analyzed using direct immersion-solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry (DI-SPME-GC-MS) technology for non-targeted screening and quantitative analysis. Safety assessment was performed based on specific migration limits and threshold of toxicological concern (TTC) according to food safety standards. The results showed that GC-MS analysis identified 22 volatile migrants, predominantly alkanes and benzene-containing compounds, with low migration concentrations. Most compounds were classified as Cramer Class I low-toxicity substances. The safety evaluation demonstrated that all detected migrants exhibited TTC values significantly below safety thresholds, indicating no potential health risks. The results confirm that volatile substances released from PE composite films under normal usage conditions comply with food safety standards and pose negligible health concerns.

Keywords: polyethylene composite film; volatile migrant; safety assessment; gas chromatography-mass spectrometry; threshold of toxicological concern