

FEMA	EU FLAVIS-No.	EU Group	EU Synonym	FEMA Synonym	別添 SEQ	18類	備考
3245	08.042	1	Undecanoic acid n-Undecoic acid n-Undecylic acid Hendecanoic acid Undecanoic acid	Undecanoic acid Hendecanoic acid n-Undecoic acid n-Undecylic acid	2458	6	
3246	02.086	5	Undecan-2-ol sec-Undecylic alcohol Methyl nonyl carbinol 2-Undecanol	2-Undecanol Methyl nonyl carbinol sec-Undecylic alcohol	2459	7	
3097	02.057	1	Undecan-1-ol Alcohol C-11Undecylic Decyl carbinol 1-Hendecanol 1-Undecanol	Undecyl alcohol 1-Hendecanol 1-Undecanol Alcohol C-11 undecylic Decyl carbinol	2460	7	
3093	07.016	5	Undecan-2-one Methyl nonyl ketone 2-hendecanone Undecanone-2 Methyl nonyl ketone 2-Hendecanone 2-Oxoundecane Nonyl methyl ketone 2-Undecanone	2-Undecanone 2-Hendecanone 2-Oxoundecane Methyl nonyl ketone MNK Nonyl methyl ketone Undecanone	1689	5	
	07.249	5	Undecan-6-one			5	
					2461	9	
3795	01.061	31	Undeca-1,3,5-triene	1,3,5-Undecatriene Galbanolene Galbanolene super	2463	9	
					2462	7	
3095	05.035	4	Undec-10-enal Undecylenic aldehyde (mixed isomers) Undecenal Intreleven aldehyde Aldehyde C-11 10-Undecenal	10-Undecenal 10-Hendecenal Aldehyde C-11 undecylenic Aldehyde C-111 LEN Intreleven Aldehyde Undecylenic aldehyde	2464	8	
3423	05.109	3	2-Undecenal 2-Undecen-1-al	2-Undecenal 2-Undecen-1-al	2466	8	
	05.184	3	Undec-2(trans)-enal		2466	8	
						8	
					2467	3	
					2468	3	

第1品目名	第2品目名	和名	JFFMA CAS	FEMA CAS
10-undecenoic acid	10-undecenoic acid	10-ウンデセノイックアシド	112-38-9	112-38-9
5-undecenoic acid	cis-5-undecenoic acid	cis-5-ウンデセノイックアシド		
5-undecenoic acid	trans-5-undecenoic acid	trans-5-ウンデセノイックアシド		
undecenoic acid	undecenoic acid	ウンデセノイックアシド	1333-28-4	
10-undecenol	10-undecenol	10-ウンデセノール	112-43-6	
2-undecenol	2-undecenol	2-ウンデセノール	37617-03-1	
2-undecenol	trans-2-undecenol	trans-2-ウンデセノール		37617-03-1
8-undecen-5-olide	8-undecen-5-olide	8-ウンデセン-5-オリド		68959-28-4
10-undecen-2-one	10-undecen-2-one	10-ウンデセン-2-オン	36219-73-5	
10-undecenyl acetate	10-undecenyl acetate	10-ウンデセニル アセテート	112-19-6	112-19-6
10-undecenyl butyrate	10-undecenyl butyrate	10-ウンデセニル ブチレート		
undecenyl butyrate	undecenyl butyrate	ウンデセニル ブチレート		
undecyl acetate	undecyl acetate	ウンデシル アセテート	1731-81-3	
undecyl butyrate	undecyl butyrate	ウンデシル ブチレート	5461-02-9	
valencene	valencene	バレンセン	4630-07-3	4630-07-3
valeraldehyde dibutyl acetal	valeraldehyde dibutyl acetal	バレラルデヒド ジブチル アセタール		

FEMA	EU FLAVIS- No.	EU Group	EU Synonym	FEMA Synonym	別添 SEQ	18類	備考
3247	08.039	4	Undec-10-enoic acid Undecylenic acid 10-Hendecenoic acid 10-Undecenoic acid	10-Undecenoic acid 10-Hendecenoic acid 10-Undecylenic acid	2470	6	
						6	
						6	
					2470	6	
	02.125	4	Undec-10-en-1-ol Undecen-1-ol Alcohol C-11 Undecylenic alcohol 10-Undecenol-1		2471	7	
	02.210	3	Undec-2-en-1-ol		2472	7	
4068				2-Undecen-1-ol 1-Hydroxy-2-undecene trans-2-Undecenol	2472	7	
3758				5-Hydroxy-8-undecenoic acid lactone cis-6-(3-Hexenyl)tetrahydro(2H)pyran-2-one Jasmolactone extra C	1257	18	68959-28-4 : cis-体
						5	
3096	09.214	4	Undec-10-enyl acetate Acetate C-11 10-Hendecyl acetate Undecylenic acetate Undecenyl acetate 10-Undec-1-ol, acetate	10-Undecen-1-yl acetate 10-Undecenyl acetate 10-Hendecenyl acetate 10-Undecylenic acetate Acetate C-11	2473	4	
					2474	4	
					2474	4	
	09.820	1	Undecyl acetate 1-Undecyl acetate		2475	4	
					2476	4	
3443	01.017	31	Valencene 1,2,3,5,6,7,8a-Octahydro-1,8a-dimethyl-7-isopropenyl naphthalene 1,2-Dimethyl-9-isopropylene-bicyclo[4.4.0]dec-5-ene	Valencene 1,2,3,5,6,7,8,8a-Octahydro-1,8a-dimethyl-7-(1-methylethenyl)naphthalene	2477	12	
					2478	3	

第1品目名	第2品目名	和名	JFFMA CAS	FEMA CAS
valeraldehyde diethyl acetal	valeraldehyde diethyl acetal	バレラルデヒド ジエチル アセタール	3658-79-5	
valeraldehyde dihexyl acetal	valeraldehyde dihexyl acetal	バレラルデヒド ジヘキシル アセタール		
valeraldehyde propyleneglycol acetal	valeraldehyde propyleneglycol acetal	バレラルデヒド プロピレングリコール アセタール		
valeric acid	valeric acid	バレリクアシド	109-52-4	109-52-4
delta-valerolactone	delta-valerolactone	δ-バレロラクトン	542-28-9	
gamma-valerolactone	gamma-valerolactone	γ-バレロラクトン	108-29-2	108-29-2
vanillin	vanillin	バニリン	121-33-5	121-33-5
verbenol	verbenol	ベルベノール		473-67-6
verbenone	verbenone	ベルベノン		
verbenyl acetate	verbenyl acetate	ベルベニル アセテート	33522-69-9	

FEMA	EU FLAVIS-No.	EU Group	EU Synonym	FEMA Synonym	別添 SEQ	18類	備考
	06.067	1	1,1-Diethoxypentane Valeraldehyde diethyl acetal Pentanal diethyl acetal		2479	3	
					2480	3	
					2482	3	
3101	08.007	1	Valeric acid Pentanoic acid Propylacetic acid Valerianic acid 1-Butanecarboxylic acid Pentanoic acid	Valeric acid Pentanoic acid Propylacetic acid Valerianic acid	2483	6	
	10.055	9	Pentano-1,5-lactone delta-Valerolactone 2H-Pyran-2-one, tetrahydro-		2485	18	
3103	10.013	9	Pentano-1,4-lactone gamma-Valerolactone 4-Hydroxypentanoic acid lactone gamma-Methyl-gamma-butyrolactone gamma-Pentalactone Pentanoic acid, 4-hydroxy,- lactone	gamma-Valerolactone 4-Methyl-4-hydroxybutanoic acid lactone 4-Valerolactone gamma-Methyl-gamma-butyrolactone gamma-Valeryllactone Pentanolide-1,4	2486	18	
3107	05.018	23	Vanillin Methyl protocatechuic aldehyde Protocatechualdehyde-3-methylether Vanillic aldehyde Methylprotocatechuic aldehyde 4-Hydroxy-3-methoxybenzaldehyde	Vanillin 3-Methoxy-4-hydroxybenzaldehyde 4-Hydroxy-3-methoxybenzaldehyde Methylprotocatechuic aldehyde Vanillaldehyde Vanillic aldehyde		17	
3594				Verbenol 2-Pinen-4-ol 4-Hydroxy-2,6,6-trimethylbicyclo[1.1.3]hept-2-ene	2499	7	19890-02-9: (S)-(-)-trans-Verbenol 18881-04-4: S(-)-cis-Verbenol 13040-03-4: (R)-(+)-cis-Verbenol 22339-08-8: R-(+)-trans-Verbenol 473-67-6: (+)-Verbenol 1820-09-3: (+/-)-trans-Verbenol
					2500	5	18309-32-5: (R)-(+)-Verbenone 1196-01-6: (S)-(-)-Verbenone 80-57-9: (+/-)-Verbenone
					2501	4	

第1品目名	第2品目名	和名	JFFMA CAS	FEMA CAS
vetiveryl acetate	vetiveryl acetate	ベチベリル アセテート	62563-80-8	
vitispirane	vitispirane	ビテイスピラン	65416-59-3	
zingerone	zingerone	ジンゲロン	122-48-5	122-48-5

FEMA	EU FLAVIS-No.	EU Group	EU Synonym	FEMA Synonym	別添 SEQ	18類	備考
					2503	4	
	16.054	16	6-Methylene-2,10,10-trimethyl-1-oxaspiro[4.5]dec-7-ene Vitispirane		2508	12	66965-95-5: cis- 99944-79-3: trans-
3124	07.005	21	Vanillyl acetone Zingerone 3-Methoxy-4-hydroxybenzylacetone 2-Ethyl methyl ketone 3-Methoxy-4-methoxybenzylacetone Vanillylacetone 4-(4-Hydroxy-3-methoxyphenyl)butan-2-one	Zingerone 2-(4-Hydroxy-3-methoxyphenyl)ethyl methyl ketone 3-Methoxy-4-hydroxybenzylacetone 4-(3-Methoxy-4-hydroxyphenyl)-2-butanone 4-Hydroxy-3-methoxybenzylacetone Vanillylacetone	2512	5	

平成16年度 厚生労働科学研究補助金（食品の安全性高度化推進事業）
「国際的動向を踏まえた食品添加物の規格に関する調査研究」

食品香料化合物の自主規格の作成に関わる
調査研究

機 関 名	日本香料工業会
研究者氏名	長谷川 徳二郎

平成 16 年度

食品香料化合物の自主規格の作成に関わる調査研究

平成 17 年 3 月

機 関 名 日本香料工業会

研究者名 長谷川 徳二郎

目 次

要旨	1
はじめに	3
A 研究目的	4
B 研究方法	4
C 研究内容	6
D 結果と考察	6
(1) 規格設定の考え方	6
(2) 香料化合物の規格項目の比較	7
(3) 香料化合物の規格項目の設定	8
(4) 香料関連化合物規格項目の試験法	11
(5) 参考規格の記載様式	13
E 結論	13
おわりに	14
F 健康危機管理情報	15
参考文献リスト	16
添付資料	29

平成 16 年度厚生労働科学研究

「食品香料化合物の自主規格の作成に関わる調査研究」

研究報告書

研究要旨

日本香料工業会が行ってきた過去の厚生労働科学委託研究の中で、香料化合物の公的規格としては、①化学的構造が判る分子式、②確認試験、③含量の3項目で十分であるという提案をしてきた。しかしながらその一方で、商業上必要でありかつ顧客や一般消費者への情報開示を目的とする参考規格については、日本工業会自体が積極的に取り組むべきともしてきた。

我が国で使用されている食品香料化合物は、平成 14 年調査（平成 15 年度厚生労働科学研究「日本における食品香料化合物の使用量実態調査研究」）により 2,854 化合物であることが判った。このうち年間使用量が 1kg 以下で使用されているものが 1,753（全体の 61.4%）であることも判った。このように極少量で使用される化合物が多数あることが特徴である香料化合物の規格はどのようにあるべきなのかを検討することを目的に本研究を行った。

おそらく長い歴史を通じて香料による健康被害が発生していないことによるものと思われるが、平成 13 年度の厚生労働科学研究「諸外国における香料規格の考え方に関する調査」で報告したように香料化合物に対する規格は諸外国を通して殆ど無い。一方そのような中で香料化合物が医薬品としての機能で使われているものがあり、諸外国での局方にその規格が収載されている。そこで本研究では、局方（JP、USP、BP、EP）と食品添加物の規格（JECFA、FCC、食品添加物公定書）を調査比較することにより、香料化合物の規格作成に必要な項目、試験方法及び記載様式について検討した。

調査の結果、規格項目については、①外観・性状、②純度試験（比重、屈折、重金属類、旋光度など）、③含量、④確認試験を基本的な項目とし、更に香料化合物個別に必要となる項目（水分、乾燥減量など）を加えるのが妥当との結論に至った。各規格項目の試験方法については、食品香料も食品添加物であることから基本的に第 7 版食品添加物公定書の一般試験法の採用が望ましい。しかし、香料化合物は揮発性化合物であるところから、含量についてはガスクロマトグラフィー（GC）法が望ましいと結論した。ただし、熱分解、熱重合等熱に不安定な化合物については別途化学法や液体クロマトグラフィー（LC）法での測定が必要になる。また、確認試験については官能試験、赤外線吸収スペクトル（IR）、紫外線吸収スペクトル（UV）、核磁気共鳴スペクトル（NMR）、GC、ガスクロマトグラフィーマ

ススペクトルメトリー (GC-MS)、LC、液体クロマトグラフィー—マススペクトルメトリー (LC-MS) 等のうちいずれか又はそれらの組み合わせで行うことが望ましいと結論した。

規格の記載様式については、一覧表形式と一品一葉形式があるが、それぞれ一長一短がありどちらか一方に決めることは難しかった。香料化合物の分子式と構造式の両方を記載する FCC が採用している一覧表様式を先行し、併せて順次他の情報 (各種スペクトルデータ、年間使用量、摂取量、安全性評価結果など) を入れた一品一葉様式にするのが望ましいと結論した。

はじめに

これまでに日本香料工業会では食品香料の国際的整合性及び国内実態を明らかにすることを目的として、食品香料化合物の規格について比較及び実態調査研究を行ってきた。

平成5年度の厚生科学研究「香料の本質の解釈、規格値及び試験法に関する国内外の比較調査研究」¹⁾では、食品添加物公定書収載の78品目の香料化合物の規格について、JECFA、FCC及び日本薬局方収載の規格との比較研究を行った。その結果、規格項目や規格内容についてはFCCとおおむね整合性が取れていることを報告した。また、試験方法としてFCCでは機器分析の活用が進んでおり、日本においても香料業界では既に機器分析が品質管理に取込まれていることから、GCなどの機器分析手法の導入の必要性を提言した。

平成10年度の厚生科学研究「JECFA規格と日本で流通している香料化合物の規格との比較研究」²⁾では、JECFA Compendium Addendum 5までに収載されている日本の食品衛生法で18類を含めた指定添加物「香料」に属する211品目の使用実態を調査し、その中でも汎用性の高い28品目の実測値とJECFA規格との比較を行った。その結果、実測値はアルデヒド類やジケトン類の様に経時変化を受けやすいもの等を除けば、大部分の香料化合物はJECFA規格内にあることが判り報告した。

平成13年度厚生科学研究「諸外国における香料規格の考え方に関する調査研究」³⁾で米国(FDA、FEMA、FCC)、欧州(EU)及び国際機関(JECFA)の規格への考え方に関して比較調査を行った。その結果、欧州及び米国では規格は規制目的ではなく、自主管理の目的で設定されたものであり、その安全性はGMP基準の遵守により十分確保できるという考え方であることが判った。

平成14年度及び平成15年度の2年に亘る厚生労働科学委託研究^{4) 5)}では、食品添加物公定書に収載の78品目以外は各香料会社の社内で規定している自主規格に委ねられている現状の下、国内の実態調査結果を報告した。その結果、使用量の多い化合物には規格が設定されていたが、使用量の少ない化合物の多くには、規格が定められていなかった。規格が設定されている香料化合物であっても規格項目については確認試験、含量、純度試験(屈折率・比重・酸価・沸点・溶状)など、現状の食品添加物公定書収載の香料化合物に設定されている試験項目を全て満たしているものはほとんどないことが判明した。

以上これまでの規格に関する研究結果及びその実態を踏まえ、本年度以降行う「国際的動向を踏まえた食品添加物の規格向上」調査研究の一環として実施する本調査研究では、FCCの目的(安全で適切な製造方法という基準に基づき、識別・強度・純度・食品グレードで化学物質の品質を定義する⁶⁾)を参考に、商業取引や香料化合物(化学物質)の実体を広く社会へ情報公開することとを目的に実施するもので、国内のみならず諸外国に対しても大変意義のあるものとする。

本年度は、医薬品としてではあるが香料化合物の規格が収載されている我が国や欧米の

局方及び食品添加物として香料化合物の規格がある FCC、JECFA、食品添加物公定書について規格設定の実態を調査し、将来の我が国における香料化合物に対する規格の望ましい項目、試験方法及び公開のための規格の記載様式等について調査研究することとした。

A 研究目的

現在日本を含めた諸外国では約 3,000 の香料化合物が使用されている。それらの香料化合物に対する規格の目的は 3 通りある。すなわちその一つは、「生物学的試験を受けた物質の同定」を目的とした規格で、FAO/WHO 合同食品添加物専門家会議（JECFA）は 1600 品の香料化合物規格を定めている（2004 年現在）。二つ目は、「商業取引上の参考規格」を目的とするもので、米国 FCC（Food Chemicals Codex）に 441 品が収載されている。三つ目は、「規制」を目的とするもので、我が国において 78 品（平成 17 年 3 月現在）の規格が食品添加物公定書に収載されている。これらの結果、規制あるいは商取引上を目的とした規格を有する香料化合物は、流通している品目数に比較し非常に少ないことが判った。

このような現状の下で、日本香料工業会では使用者及び一般消費者への情報開示と商業取引上の参考にすることを目的として、FCC の目的（安全で適切な製造方法という基準に基づき、識別・強度・純度・食品グレードで化学物質の品質を定義する⁶⁾）を考慮し参考規格を作成することとした。

参考規格を作成するにあたり、平成 14 年に調査した「日本における食品香料化合物の使用量実態調査」の結果より、日本で使用されている香料化合物は約 2,900 とその品目数が多いこと、また年間 1kg 以下で使用されている化合物数が全体の 60%を超え、更に年間 10g 以下で使用されている化合物数が全体の 18%もある実態を踏まえ、本年度は香料化合物に対し、まず①どのような規格項目を設定するのが望ましいのか、②規格項目を試験するに望ましい試験法は何か、③更にそれらを開示するに最もふさわしい様式はどのようなものかについて調査研究することとした。

B 研究方法

研究の方法は、医薬品としてではあるが香料化合物の規格が収載されている我が国や欧米の局方（JP, BP, EP, USP）及び食品添加物として香料化合物の規格がある FCC、JECFA、食品添加物公定書について規格設定の実態を調査、比較、整理する方法により行い、香料化合物に望ましい規格項目、試験方法及び規格の記載様式を設定することとした。

調査対象資料

- (1) 英国薬局方 (British Pharmacopoeia 2004; BP)
- (2) 米国薬局方 (United States Pharmacopeia 27; USP)
- (3) 欧州薬局方 (European Pharmacopoeia 5.0; EP)
- (4) 第14改正日本薬局方 (The Japanese Pharmacopoeia XIV; JP XIV)
- (5) 第7版食品添加物公定書 (Japan's Specifications and Standards for Food Additives)
- (6) 米国食品化学物質規格集 (Food Chemicals Codex 5th Edition; FCC)
- (7) FAO/WHO 合同食品添加物専門家委員会 (Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additives; JECFA)

【本報告書で引用した略語及び用語】

- 食品香料化合物 : 天然基原物質からの単離または化学的合成により製造され、食品香料に使用される香気及びフレーバーの特性を有する化学物質をいう。
- 18類 : 食品衛生法施行規則別表第4に収載のもの
例) 脂肪族高級アルデヒド類 など
- EU : European Union
欧州連合
- FCC : Food Chemicals Codex
米国食品化学物質規格集。米国において FCC は法的な強制力のある規格集ではなく、参考規格として利用されており、また使用できる香料物質がすべて掲載されているものではない。
- FEMA : Flavor and Extract Manufacturers' Association of the United States
米国食品香料工業会
- GRAS : Generally Recognized as Safe
米国で1958年の改正食品医薬品化粧品法に基づき、一般に安全とみなされること、またはその物質
- JECFA : Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additives
FAO/WHO 合同食品添加物専門家委員会
- FDA : Food and Drug Administration
米国食品医薬品局
- RIFM : Research Institute for Fragrance Materials
化粧品香料原料安全性研究所

C 研究内容

我が国における香料化合物の規格は、一般消費者の健康被害防止を目的とした、いわゆる取り締まり規制のために使われているのに対し、欧米での規格のあり方は、GMP 基準での製造を前提に、スムーズな商取引ができることを主目的としたものであると現在のところ一般に解釈されている。平成 13 年度の厚生労働科学研究「諸外国における香料規格の考え方に関する調査」で報告したように香料化合物に対する規格は諸外国を通してほとんどない。一方そのような中で香料化合物が医薬品としての機能で使われているものがあり、諸外国での局方にその規格が収載されている。そこで本研究では、局方 (JP、USP、BP、EP) と食品添加物の規格 (JECFA、FCC、食品添加物公定書) を調査比較することにより、香料化合物の規格作成に必要な項目、試験方法及び記載様式について検討することとし、具体的には以下の視点で調査研究することにした。

調査視点

- 規格設定の考え方
- 香料化合物の規格項目の比較
- 香料化合物の規格項目の設定
- 香料関連化合物規格項目の試験法
- 参考規格の記載様式

D 結果と考察

国内はもとより国際的にも十分対応できる「香料化合物の規格」を作成するのに必要となる規格項目及び試験方法を検討するため、一部の香料化合物についてのみではあるが、その規格が収載されている諸外国の局方 (BP, EP, USP)、JP、JECFA、FCC、食品添加物公定書について調査した。

(1) 規格設定の考え方

BP、EP、USP^{7, 8, 9)}では、規格作成の目的を「医療従事者、患者に対する健康の促進のために、公的標準を設定すること」としており、また EP⁸⁾においては医薬品そのものの自由な流通の促進も目的の一部としている。

JPには規格の考え方についての直接の記載はないが、第十五改正日本薬局方原案作成要領の「第 15 改正日本薬局方原案の作成に関する細則」¹⁰⁾には、規格の目的として「医

薬品の適正な性状及び品質の確保を図ることが目的」と記載されている。しかし、BP、EP、USP で記載されているような規格の目的、即ち「医療従事者、患者にたいする健康の促進のために、公的標準を設定すること」に該当する記述はみられなかった。また「第15改正日本薬局方原案の作成に関する細則」の中で試験項目については、「有効性、安全性に関して同等とみなすことができる」と記載され、更に「一定の品質を総合的に担保する上で必要なものを設定する」と記載されている。

一方食添の「第7版食品添加物公定書原案作成要領」¹¹⁾では、規格の目的について、「規格・基準の定まった添加物に対する規制を明らかにすることで、食品の安全性を確保することをその目的とするものである」と記載され、規制のためであることが明記されている。またその試験項目については「有効性、安全性に関して同等とみなすことができる一定の品質を総合的に担保する上で必要なものとする」と記載されている。

FCC⁶⁾の序文には規格の目的について、「品質の統一化」と「化学物質の安全性の保証」を目的としている。

JECFA¹²⁾では規格の目的を、「消費者の保護、当局への助言、食品産業のための基準、及び安全な使用の確立として生物学的試験に用いられる物質と商業的使用の物質との同等性の確認にある」としている。また、食品添加物として国際的に使用されることに鑑み、世界各地で適切な製造が実施されるよう規格が設定されるとしている。

更に規格の必要要件としては、a)食品中の不純物を制限する、b)毒性試験に使われた物質との同等性を確認する、c)試験された添加物が、実際に使用されている添加物であることを確かめることにあると述べられている。この原則に基づき JECFA では規格が設定されている。

以上の調査結果によれば、規格を設定する考え方は、国・地域によりあるいは局方と食品添加物の違いにより多少の表現の差はあるものの、おおむね「化学物質の安全性の保証」と「品質の統一化」にあり、規格項目については「一定の品質を総合的に担保する上で必要なもの」と定義され、「必要なものを設定する」となっていることが判った。

(2) 香料化合物の規格項目の比較

局方 (BP、EP、JP、USP) といわゆる食添 (JECFA、FCC、食品添加物公定書) 両方に収載されている香料化合物 (d-及び dl-Camphor、l-及び dl-Menthol、Methyl salicylate、Benzyl alcohol) について、規格項目を比較 (表-1) した。総規格項目数は、局方が 33、食添が 23 と局方の方が多く設定されていた。局方だけに設定されていた規格としては、蒸留試験、ボルネオール量、その他不純物全般、蒸発残留物、クロマトグラフィー不純物、強熱残留物、有機揮発性不純物、ニトロメタン又はニトロエタン量、易酸化物、原体関連物質の各項目が挙げられた。一方、食品添加物公定書だけに設定されていた規格としては、ヒ素及び溶解性があつた。

これらの調査結果から、局方では不純物に関する項目が多い傾向にあることが判った。

その理由としては、食品と医薬品の用途の違いが考えられる。すなわち、食添である香料化合物は原体そのままを直接摂取することではなく、他の香料化合物やそれ以外の食品添加物と混合され「食品香料製剤」となったものが、更に約 1000 倍以上に希釈されて加工食品を通して口に入るものである。そのため一香料化合物としての経口量は極く微量（数 ppm 以下）となる。一方、医薬品は香料化合物に比べ原体自体がかなりの高濃度で摂取されることや生理活性な物質であることから、詳細な不純物の確認が要求されているものと考えられる。

本調査の結果から、局方及び食添両方に収載されている香料化合物に共通する規格項目は、以下の内容であることが判った。即ち、含量、酸（酸価）、性状、沸点、ベンズアルデヒド量、融点又は凝固点、ハロゲン化物確認、重金属、屈折率、比重、旋光度、溶状、水分、確認試験、過酸化物質価、チモール確認、不揮発性残留物、塩素化合物確認であった。このうちベンズアルデヒド量、チモール確認、ハロゲン化物及び塩素化合物確認は、限定された香料化合物固有の規格項目であり必ずしも全般に亘って必要となるものではない。したがって、一般的規格項目としては、含量、酸（酸価）、性状、融点又は凝固点、重金属、屈折率、比重、旋光度、溶状、水分、確認試験、不揮発性残留物に絞られる。

これらに我が国の食品添加物公定書にある項目のヒ素及び溶解性を加えたものが香料化合物の規格として参考にすべき項目と考えられる。実際には、一定の品質を担保するために必要な項目を選択し個別の香料化合物に規格設定する。

（3）香料化合物の規格項目の設定

1) 規格項目設定手順

前項において食添としての香料化合物には、含量、酸（酸価）、性状、融点又は凝固点、重金属、屈折率、比重、旋光度、溶状、水分、確認試験、不揮発性残留物、ヒ素及び溶解性の規格項目のうちから、一定の品質を担保する上で必要な項目を個別の香料化合物に設定することが望ましいとした。

個別の香料化合物に必要な規格項目を設定するには、JECFA の要求する規格 3 項目、「化学式と分子量、確認試験及び含量」（平成 13 年度の厚生科学研究報告書³¹）がその基本となるが、更に香料化合物の持つ特性にも配慮する必要がある。即ち、香料化合物は感覚にうったえる「匂い」が機能の本質であり、現在約 3000 という多数で流通しており、またその使用量は極めて少なく、規格項目によっては測定も不可能な流通量（数 g）の物質もある。反面それらの香料化合物はその物理的及び化学的性質の類似性により幾つかのグループに分類できる特徴がある。香料化合物の一般的性質と今回調査した 6 香料化合物の規格項目より分類してみると、物性、製法、旋光度、化学的性質の 4 つの基本的要件により分類できることが判った。香料化合物の規格項目の設定にあたっては、基本要件（物性、製法、旋光度、化学的性質等）から導き選択される規格項目に個々の香料化合物が持つ特性を加味して規格項目を定めることが最も合理的な方法と考えた。

そこで規格項目選択のための具体的手段として物性、製法、旋光度、化学的性質の基本要件を使って簡便に規格項目を選択できるような判断樹の作成を検討することとし、最終的に図-1のような判断樹を完成した。

即ち、この判断樹では名称、分子式、分子量及び構造式又は示性式、含量、確認試験等は各香料化合物に共通する必要かつ不可欠な項目とした。その上で物性からは、液体か固体かにより比重・屈折率又は融点・凝固点のどちらかが必要項目として選択される。

製法からは、精製方法により蒸留・昇華の場合は、GCあるいは溶状、結晶化の場合はその他にヒ素・重金属・強熱残留物・乾燥減量等の項目が必要と選択される。なお、旋光性は物性ではあるが、単独で要件として設定した。その理由は、従来は対象とすべき物質が極少数であったが、今後の開発の動向を考慮すると重要な規格項目であると判断し基本要件の項目とした。

化学的性質としては、他の3要件で包含できない官能基を有する化合物のみを対象として項目が選択される。即ち、不飽和化合物には過酸化物価、エステル類・ラクトン類・アルデヒド類・アセタール類には酸価が選択される。このようにして判断樹から導かれる1から24のパターンに当てはめることにより個々の香料化合物に必要な規格項目が選択できる(表-2)。判断樹を基に食品添加物公定書収載の78品目をトレースした結果を(表-3)に示す。例えば、結晶化により精製された旋光性を有する1-メントールを例にとると、名称、分子式、分子量及び構造式又は示性式、含量、確認試験、融点又は凝固点、GC、強熱残留物、乾燥減量、及び比旋光度が判断樹のパターンより選択されることが判断樹及び規格項目一覧表(図-2、表-4、1-メントール)から判る。

また、重金属等の混入が予想される製法や酸化され易い化合物などには、溶状・重金属・ヒ素・過酸化物価等の規格項目が必要に応じて選択される。更に、製法により安全性が懸念される場合は、原料あるいは反応副生成物等特別な項目も別途選択し設定することとなる。

以下に1-メントール以外の代表的香料化合物について、判断樹から導かれた規格項目を具体的に資料-1に示す。これから判るように、判断樹を利用し選択された規格項目と食品添加物公定書の規格項目とは良く一致した。

2) 規格項目の説明

① 基本項目

・名称

分子式及び分子量

構造式又は示性式

・含量

名称に該当する成分の量を表す。

・確認試験

香料化合物の名称と容器に入った物が同一であることを確認する試験項目*

*注 USP、FCC、BP、EP、JECFA の各規格書に解説されている確認試験の目的は、「ラベルを貼った容器から採取した物質がその内容物と同一であることを確かめるための一助になるものであり、その物質を確証するまでのものではない^{1 3)}」とされている。

食品添加物公定書及び JP でも同様と推察される（食品添加物の解説書では^{1 4)}FCC、JECFA と同一と説明され、JP の解説書では^{1 5)} Identification の訳と解説され、同定試験あるいは定性試験などとも訳されている）が、具体的説明は見当たらない。

②物性項目

・比重、屈折率

香料化合物は液体化合物が多い。物質に固有の数値があり、規格範囲を超える数値の変動は不純物の存在を示唆するもので、簡易的、迅速に確認できる重要項目である。

・融点・凝固点

固体・結晶の香料化合物は少ないが、該当する香料化合物については、比重・屈折率に変わって重要な項目である。

・比旋光度

旋光性を有する香料化合物の香気特性は一般に光学純度に左右され、また天然に存在する光学活性な有効成分の開発頻度が高くなるので重要な項目である。

③製法項目

・GC

各種揮発性不純物を確認するために利用する重要項目である。

・溶状

GC、屈折率あるいは比重などと同様に不純物有無の確認の簡便な方法であり、香料化合物によっては必要である。

・重金属・ヒ素*

製法に由来する不純物の管理項目である。健康危害に直接通ずる項目であり蒸留・昇華精製工程を経していない香料化合物には基本的に重要な項目である。

*注 今後、重金属は、個別金属(鉛、カドミウム、水銀等)に対する規格設定へ変更される可能性もあり、将来的に規格項目の見直しが必要となることが考えられる。歴史的な背景から我国のみに設定されているヒ素も、国際整合を加味すれば今後見直すこともありうる。