

第2品目名(オリジナルの正式英名)	判断樹対照番号	含量%(GC)	比重(20°C)	屈折率(20°C)	酸価	確認試験			使用量順	H12-SEQ
						IR	MS	NMR		
acetaldehyde diethyl acetal	1	95.0以上	0.823-0.833	1.377-1.387	1.0以下	2,3,6	3,4,5	3,6	35	17
acetoin	2	95.0以上	0.997-1.014	1.414-1.424	1.0以下	1,2,3	3,4,5	3	30	40
2-acetylpyridine	2	95.0以上	1.078-1.088	1.515-1.525		3	3,4,5	1,3,6	172	79
allyl heptanoate	3	97.0以上	0.882-0.888	1.426-1.432	1.0以下	1,2,5	4,5	-	112	106
allyl octanoate	3	98.0以上	0.880-0.886	1.429-1.435	1.0以下	1	-	-	207	119
allyl phenoxyacetate	3	98.0以上	1.105-1.111	1.513-1.519	1.0以下	1,6	4,5	-	165	120
amyl acetate	1	98.0以上	0.875-0.881	1.400-1.406	1.0以下	-	4,5	-	116	141
amyl butyrate	1	98.0以上	0.866-0.872	1.409-1.415	1.0以下	1,	4,5	-	229	146
benzaldehyde propylene glycol acetal	1	95.0以上	1.065-1.075	1.506-1.516	1.0以下	3	3,4	3	137	206
benzyl benzoate	1	98.0以上	1.118-1.124	1.566-1.572	1.0以下	1,2,3,5,6	3,5	3,6	97	216
benzyl butyrate	1	98.0以上	1.009-1.015	1.490-1.496	1.0以下	1,2,3,5,6	3,4,5	3,6	121	218
benzyl formate	1	95.0以上	1.086-1.096	1.506-1.516	5.0以下	1,2,3	3,4,5	3	154	224
benzyl lactate	1	96.0以上	1.121-1.131	1.508-1.518	2.0以下	-	4	-	71	230
benzyl octanoate	1	95.0以上	0.959-0.969	1.481-1.491	1.0以下	-	4,5	-	210	238
2-butoxyethanol	2	99.0以上	0.899-0.905	1.416-1.422	1.0以下	3,6	3,4,5	6	245	319
2-butoxyethyl acetate	1	98.0以上	0.938-0.944	1.411-1.417	1.0以下	-	4,5	-	194	320
butyl butyryl lactate	1	95.0以上	0.971-0.981	1.417-1.427	2.0以下	1,2,5,6	5	-	57	280
butyl hexanoate	1	98.0以上	0.865-0.871	1.413-1.419	1.0以下	1	4,5	-	208	288
butyl isovalerate	1	98.0以上	0.858-0.864	1.406-1.412	1.0以下	1,2,3,6	3,4,5	3	170	292
butyl lactate	1	95.0以上	0.979-0.989	1.417-1.427	1.0以下	1	4,5	-	195	293
butyl 2-methylbutyrate	1	98.0以上	0.862-0.868	1.407-1.413	1.0以下	1,2	4,5	-	243	269
butyl propionate	1	98.0以上	0.875-0.881	1.398-1.404	1.0以下	1,3,5	3,5	3,6	70	308
gamma-butyrolactone	1	95.0以上	1.125-1.135	1.432-1.442	3.0以下	1,3,5,6	3,5	3,6	82	331
carveol	4	95.0以上	0.949-0.959	1.491-1.501		1,2	4,5	-	234	343
p-cymene	2	95.0以上	0.852-0.862	1.482-1.492		1,2	4,5	-	224	480
delta-decalactone	1	95.0以上	0.967-0.977	1.453-1.463	5.0以下	1,2,3	3,4,5	3,6	7	489
gamma-decalactone	1	95.0以上	0.950-0.960	1.443-1.453	3.0以下	1,2,3,6	3,4,5	3,6	38	490
diacetyl	2	95.0以上	0.980-0.990	1.390-1.400		1,2,3,6	3,4,5	3,6	49	533
diethyl adipate	1	98.0以上	1.005-1.011	1.425-1.431	1.0以下	3,6	3,4,5	3,6	174	545
diethyl malate	1	98.0以上	1.126-1.132	1.433-1.439	3.0以下	-	4	-	122	550
diethyl malonate	1	98.0以上	1.054-1.060	1.411-1.417	1.0以下	1,2,3,6	3,4,5	3,6	24	552
diethyl sebacate	1	98.0以上	0.962-0.968	1.434-1.440	1.0以下	1,2,3,5,6	3,5	3	103	554
diethyl succinate	1	98.0以上	1.040-1.046	1.417-1.423	1.0以下	1,2,3,6	3,4,5	3,6	130	555
2,5-dimethyl-3(2H)-furanon-4-yl acetate	1	95.0以上	1.162-1.172	1.472-1.482	特例除外	-	-	1	230	960
dimethyl sulfide	2	98.0以上	0.844-0.854	1.430-1.440		1,2,3,6	3,4,5	3,6	5	625
delta-dodecalactone	1	97.0以上	0.948-0.954	1.457-1.463	8.0以下	1,2,3	3	3,6	4	692
gamma-dodecalactone	1	96.0以上	0.932-0.942	1.447-1.457	3.0以下	1	5	6	77	693
ethyl anthranilate	1	96.0以上	1.116-1.126	1.560-1.570	1.0以下	1,2	4,5	-	235	816
ethyl benzoate	1	98.0以上	1.045-1.051	1.502-1.508	1.0以下	1,2,3,6	3,4,5	3,6	129	817
2-ethylbutyric acid	2	98.0以上	0.922-0.928	1.410-1.420		1,2,3,5,6	3,5	3,6	104	908
ethyl crotonate	3	98.0以上	0.917-0.923	1.422-1.428	2.0以下	2,3	3,4,5	3,6	187	826

第2品目名(オリジナルの正式英名)	判断樹対照番号	含量%(GC)	比重(20°C)	屈折率(20°C)	酸価	確認試験			使用量順	H12-SEQ
						IR	MS	NMR		
ethyl formate	1	95.0以上	0.917-0.927	1.355-1.365	特例除外	1,2,3,6	3,4,5	3,6	29	830
ethyl 3-hydroxybutyrate	1	98.0以上	1.011-1.017	1.418-1.424	1.0以下	3	1,3,4,5	3,6	189	781
ethyl 3-hydroxyhexanoate	1	95.0以上	0.971-0.981	1.423-1.433	1.0以下	-	4,5	-	240	782
ethyl isobutyrate	1	98.0以上	0.867-0.873	1.385-1.391	1.0以下	1,2,3,6	3,4,5	3,6	23	839
ethyl lactate	1	97.0以上	1.032-1.038	1.410-1.416	1.0以下	1,2,3	3,4,5	3	21	843
ethyl laurate	1	98.0以上	0.861-0.867	1.430-1.436	1.0以下	1,2,3,5	3,5	3	98	844
ethyl levulinate	1	98.0以上	1.012-1.018	1.419-1.425	1.0以下	1,2,3,6	3,4,5	3,6	25	845
ethyl levulinatone propyleneglycol acetal	1	98.0以上	1.027-1.035	1.427-1.434	1.0以下	-	4,5	-	236	847
ethyl 2-methylbutyrate	1	95.0以上	0.864-0.874	1.392-1.402	2.0以下	1	4,5	6	16	766
ethyl 2-methylpentanoate	1	98.0以上	0.863-0.869	1.401-1.407	1.0以下	1,3	3	3	86	767
ethyl myristate	1	98.0以上	0.860-0.866	1.434-1.440	1.0以下	1,2,3,5,6	3,5	3,6	62	855
ethyl nonanoate	1	95.0以上	0.863-0.873	1.418-1.428	1.0以下	1,2,3,6	3,4,5	3,6	168	858
ethyl salicylate	1	98.0以上	1.129-1.135	1.519-1.525	1.0以下	1,2,3,6	3,4,5	3,6	41	875
ethyl valerate	1	98.0以上	0.873-0.879	1.397-1.403	1.0以下	3	3,4,5	3,6	124	889
eugenyl methyl ether	4	98.0以上	1.030-1.040	1.529-1.535	1.0以下	3	3,4,5	3,6	48	1831
furfural	1	95.0以上	1.155-1.165	1.520-1.530	3.0以下	2,3,5	3,5	3,6	61	961
furfuryl alcohol	2	97.0以上	1.129-1.139	1.480-1.490		2,3,6	3,4,5	3,6	44	968
gamma-heptalactone	1	96.0以上	0.995-1.005	1.437-1.447	3.0以下	1	4,5	-	135	1029
heptanoic acid	2	98.0以上	0.917-0.923	1.420-1.426		1,3,5,6	3,5	3,6	88	1037
2-heptanone	2	95.0以上	0.812-0.822	1.404-1.414		1,2,3	3,4,5	3,6	166	1627
heptyl acetate	1	98.0以上	0.868-0.874	1.411-1.417	1.0以下	1	4,5	-	237	1056
gamma-hexalactone	1	98.0以上	1.024-1.030	1.435-1.441	3.0以下	1	4,5	7	127	1086
hexanal	1	95.0以上	0.808-0.823	1.400-1.410	10.0以下	1,3,6	3,4,5	3	22	1087
hexanal propyleneglycol acetal	1	95.0以上	0.893-0.903	1.418-1.428	1.0以下	1	-	-	73	1097
hexanol	2	95.0以上	0.818-0.828	1.414-1.424		3,6	3,4,5	3,6	17	1102
hexyl acetate	1	98.0以上	0.871-0.877	1.407-1.413	1.0以下	1,2,3,6	3,4,5	3,6	6	1195
hexyl butyrate	1	98.0以上	0.864-0.870	1.414-1.420	1.0以下	1,2,3,6	3,4,5	3,6	155	1197
hexyl formate	1	95.0以上	0.878-0.888	1.402-1.412	1.0以下	-	4,5	-	201	1202
hexyl hexanoate	1	98.0以上	0.861-0.867	1.421-1.427	1.0以下	1,3,6	3,4,5	3,6	173	1204
hexyl 2-methylbutyrate	1	98.0以上	0.858-0.864	1.416-1.422	1.0以下	1	4,5	-	169	1192
hexyl octanoate	1	98.0以上	0.859-0.865	1.428-1.434	1.0以下	1,6	4,5	-	192	1213
hydroxycitronellol	2	97.0以上	0.929-0.935	1.456-1.462		1	4,5	-	180	1272
isoamyl hexanoate	1	98.0以上	0.859-0.865	1.417-1.423	1.0以下	1,2,3	3,4,5	3	167	1299
isoamyl isobutyrate	1	98.0以上	0.856-0.862	1.404-1.410	1.0以下	1,2,3,6	3,5	3	89	1300
isoamyl 2-methylbutyrate	1	97.0以上	0.857-0.863	1.411-1.417	1.0以下	1	4,5	-	239	1287
isobutyl acetate	1	97.0以上	0.870-0.876	1.388-1.394	1.0以下	1,2,3	3,4,5	3,6	20	1334
isobutyl isobutyrate	1	98.0以上	0.853-0.859	1.397-1.403	1.0以下	1,3	3,4,5	3,6	158	1348
isobutyl propionate	1	98.0以上	0.865-0.871	1.396-1.402	1.0以下	1,3	3,4,5	3,6	147	1362
2-isobutylthiazole	2	95.0以上	0.995-1.005	1.490-1.500		5	4,5	1	109	1375
isobutyric acid	2	98.0以上	0.947-0.953	1.391-1.397		1,2,3,6	3,4,5	3,6	37	1377
isopropyl acetate	1	98.0以上	0.870-0.876	1.374-1.380	1.0以下	1,2,3,6	3,4,5	3,6	133	1401

第2品目名(オラジナルの正式英名)	判断樹対照番号	含量% (GC)	比重 (20°C)	屈折率 (20°C)	酸価	確認試験			使用量順	H12-SEQ
						IR	MS	NMR		
isopropyl myristate	1	96.0以上	0.850-0.860	1.429-1.439	1.0以下	-	4.5	-	107	1420
isovaleric acid	2	98.0以上	0.925-0.931	1.400-1.406	1.0以下	1.2,3,5,6	3.5	3.6	90	1451
linalyl anthranilate	3	98.0以上	1.043-1.058	1.545-1.552	2.0以下	-	4.5	1	223	1476
maltol isobutyrate	1	97.0以上	1.150-1.156	1.493-1.499	5.0以下	2	4	-	50	1493
menthofuran	2	95.0以上	0.964-0.974	1.479-1.489	1.0以下	1.5	4	3	136	1510
methyl acetate	1	98.0以上	0.925-0.940	1.359-1.365	1.0以下	1.2,3,5,6	3.5	3.6	64	1624
methyl benzoate	1	98.0以上	1.087-1.093	1.513-1.519	1.0以下	1.2,3	3.4,5	3.6	157	1631
2-methylbutyl acetate	1	97.0以上	0.873-0.879	1.398-1.404	1.0以下	1.3	3.4,5	3	15	1808
methyl butyrate	1	98.0以上	0.896-0.902	1.384-1.390	1.0以下	1.2,3,6	3.4,5	3.6	36	1636
methyl dihydrojasmonate	1	96.0以上	0.998-1.008	1.454-1.464	2.0以下	1.3,5	3.4,5	3	139	1644
5-methylfurfural	1	97.0以上	1.105-1.111	1.524-1.534	5.0以下	3.5,6	3.5	3.6	94	1834
6-methyl-5-hepten-2-one	4	95.0以上	0.847-0.857	1.435-1.445	1.0以下	2.3,5,6	3.5	1.3,6	81	1841
methyl hexanoate	1	98.0以上	0.883-0.889	1.403-1.409	1.0以下	2.3,5,6	3.5	3.6	66	1658
methyl isobutyrate	1	98.0以上	0.888-0.894	1.381-1.387	1.0以下	1.2	4.5	-	198	1664
methyl isovalerate	1	98.0以上	0.878-0.884	1.390-1.396	1.0以下	1.2	4.5	-	200	1668
methyl 2-methylbutyrate	1	98.0以上	0.883-0.889	1.392-1.398	1.0以下	1.6	5	6	56	1591
methyl 3-(methylthio)propionate	1	98.0以上	1.073-1.079	1.463-1.469	1.0以下	1.3	3.4,5	3.6	156	1598
methyl phenylacetate	1	98.0以上	1.066-1.072	1.504-1.510	1.0以下	2.3,6	3.4,5	3.6	145	1702
2-methyl-1-phenyl-2-propyl butyrate	1	98.0以上	0.972-0.978	1.483-1.489	1.0以下	2	-	-	100	613
methyl propionate	1	98.0以上	0.913-0.919	1.375-1.381	1.0以下	1.3	3.4,5	3.6	179	1706
methyl 4-tert-butylphenylacetate	1	95.0以上	0.994-1.004	1.495-1.505	1.0以下	6	-	1.6	101	1712
4-methyl-5-thiazoleethanol	2	97.0以上	1.195-1.216	1.540-1.551	1.0以下	2.3,6	3.4,5	1.3,6	26	2305
4-methyl-5-thiazoleethanol acetate	1	98.0以上	1.166-1.172	1.506-1.512	1.0以下	-	4.5	1.6	33	2306
delta-nonalactone	1	97.0以上	0.985-0.991	1.454-1.460	5.0以下	1.2,3	3.4,5	-	176	1952
2-nonanone	2	97.0以上	0.821-0.827	1.418-1.424	1.0以下	1.2,3	3.4,5	3	159	1657
delta-octalactone	1	97.0以上	0.998-1.008	1.451-1.459	5.0以下	1.2	4.5	-	242	2010
gamma-octalactone	1	95.0以上	0.978-0.988	1.439-1.449	3.0以下	1.3,6	3.4	3.6	108	2011
octanoic acid	2	98.0以上	0.908-0.914	1.425-1.431	1.0以下	1.3,6	3.4,5	3.6	45	2019
3-octanol	2	95.0以上	0.821-0.831	1.422-1.432	1.0以下	1	4.5	-	209	2021
octanol	2	98.0以上	0.823-0.829	1.426-1.432	1.0以下	1.2,3,5,6	3.5	3.6	91	2022
1-octen-3-ol	4	97.0以上	0.834-0.842	1.434-1.440	1.0以下	2	4.5	1	217	2024
octyl acetate	1	98.0以上	0.867-0.873	1.417-1.423	1.0以下	1.2,3	3.4,5	6	163	2046
octyl isobutyrate	1	98.0以上	0.855-0.861	1.419-1.425	1.0以下	1	4.5	6	171	2056
2-pentanone	2	95.0以上	0.802-0.812	1.386-1.396	1.0以下	1.2,3	3.4,5	3.6	177	1709
phenethyl alcohol	2	98.0以上	1.019-1.025	1.529-1.535	1.0以下	1.2,3,6	3.4,5	3.6	46	2103
phenethyl isobutyrate	1	98.0以上	0.988-0.994	1.484-1.490	1.0以下	1.2	4.5	-	221	2113
2-phenoxyethanol	2	98.0以上	1.107-1.113	1.533-1.539	1.0以下	3.6	3.4,5	3.6	115	2129
propyl acetate	1	95.0以上	0.884-0.894	1.380-1.390	1.0以下	1.2,3	3.4,5	3.6	14	2213
propyl butyrate	1	98.0以上	0.872-0.878	1.397-1.403	1.0以下	1.3,5	3.5	3.6	105	2217
propyl 2-methylbutyrate	1	98.0以上	0.864-0.870	1.401-1.407	1.0以下	-	4	-	95	2212
propyl propionate	1	98.0以上	0.880-0.886	1.390-1.396	1.0以下	1.3,5,6	3.4,5	3.6	140	2239

第2品目名(オリジナルの正式英名)	判断樹対照 番号	含量% (GC)	比重 (20°C)	屈折率 (20°C)	酸価	確認試験			使用量順	H12-SEQ
						IR	MS	NMR		
styrallyl alcohol	2	97.0以上	1.011-1.017	1.524-1.530		1,2,3	3,4,5	3,6	181	2297
styrallyl acetate	1	97.0以上	1.025-1.031	1.492-1.498	2.0以下	-	4,5	6	39	2298
delta-tetradecalactone	1	98.0以上	0.931-0.941	1.459-1.465	5.0以下	1,3	3	-	84	2343
delta-undecalactone	1	96.0以上	0.956-0.966	1.454-1.464	5.0以下	1,3	3,4,5	3,6	42	2451
2-undecanone	2	95.0以上	0.822-0.832	1.426-1.436		1,2,3	3,4,5	6	162	1689
valeric acid	2	98.0以上	0.937-0.943	1.405-1.411		3,6	3,4,5	3,6	119	2483

平成17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」

我が国を含めて国際的に使用されている
食品香料化合物のリスト化及びリスト化合物の
データベース高度化に関わる調査研究

機 関 名

日本香料工業会

研究者氏名

長谷川 徳二郎

目 次

要 旨	1
はじめに	2
A. 研究目的	5
B. 研究方法	5
C. 調査	6
D. 結果および考察	7
E. 結論	9
おわりに	9
F. 健康危機管理情報	11
資料	12

平成17年度厚生労働科学研究

我が国を含めて国際的に使用されている食品香料化合物の リスト化及びリスト化合物のデータベース高度化に関わる 調査研究

要旨

JECFA が採用している食品香料化合物の安全性評価には摂取量情報が必須であるが、これらの情報は当然ながらできるだけ最新のものを使用する事が望ましい。従ってその算出に必要な使用量の調査もできるだけ頻繁に行われかつ迅速に集計がなされる必要がある。食品香料化合物データベースの充実はその実現に欠かせない条件の一つである。一方、我が国も含め国際的に食品香料を製造、販売、使用していくには、食品香料化合物に関わる国際的な各種情報を包括した個別食品香料化合物リストを構築しておく必要がある。そのような背景から日本香料工業会では、平成16年度厚生労働科学研究で構築した「我が国で使用されている食品香料化合物データベース」を基盤にし、これに JECFA リスト、FDA リスト、FEMA リスト、EU Register からの重要な情報を加味することによりデータベースを高度化することを目指した。

日本では平成14年度に初の本格的な使用量調査を実施し、その調査結果を平成14年度、15年度の厚生労働科学研究で報告してきた。一方、米国と EU は1995年以来使用量調査を実施していないが、2006年には日米欧同時に食品香料化合物の使用量調査を行う予定になっている。日米欧三極で世界の食品香料販売実績の80%以上を占めることから、食品香料業界の世界的組織である IOFI はそれらの地域で同時に使用量調査を行う意義を重要視している。

しかしながら、使用量調査の結果に基づいて推定摂取量を算出するには膨大な労力と時間を要する。日本香料工業会による平成14年度、15年度摂取量調査では食品香料委員会の委員20数名が参加し、10数台のコンピューターを駆使したにもかかわらず、調査結果のデータ処理に2年を費やした。その原因として、回答された品目名の不統一性(化学名、慣用名、商品名等)、構造式が確定できない品目名、混合物でありながら単品のごとく扱われている品目名、異性体品目名の取り扱い等の問題を個別に論議する必要性などが挙げられる。

また欧米における過去の使用量調査においても、米国の1995年に実施した使用量調査では膨大なデータ処理に5年の年月を費やした。EUでもデータ処理に時間が必要とされることを予測し、使用量調査を数年に分けて実施している。

本年度の研究は、我が国で使用されている食品香料化合物に限定せず、JECFA リスト、

FDA リスト、FEMA リスト、EU Register など欧米において使用されている食品香料化合物の情報も調査・統合し、その結果に基づいて国際的に使用されている食品香料化合物及び科学的な安全性評価に関わる情報を包含したデータベースを構築することを目的とした。本データベースは、食品香料化合物の包括的データベースとしての利用だけでなく、今後の食品香料化合物の摂取量調査における煩雑なデータ処理作業を円滑化するための情報源として極めて有効なものとなる。

はじめに

JECFA での食品香料化合物の安全性評価は、主として代謝、毒性、摂取量の 3 つの情報に基づいて行われている。安全性評価は最新調査時の摂取量データに基づき評価されるため使用量調査を定期的実施する事が望ましい。また評価後の確認のためには定期的に更新される事も重要である。食品香料の場合この情報を実際の食事調査から測定することは不可能であるため、現在は食品香料化合物の使用量から一人あたりの摂取量を推定する方法が一般的に用いられている。従ってそのもととなる食品香料化合物の使用量調査も出来るだけ頻繁に行われ、かつ迅速に集計がなされる必要がある。

日本香料工業会は平成 14 年に使用量調査を実施し、同年および平成 15 年に表計算ソフトウェアなどを使用してデータ処理を効率的に行い、日本において使用されている食品香料化合物の使用量をまとめ摂取量の推定を行った。昨年度はこの結果を基盤にして、国内で使用されている食品香料化合物について関連する国際情報、すなわち FEMA GRAS 番号 (米国)、FLAVIS 番号 (欧州)、EU 構造分類番号等を収載したデータベースを構築した。

本年度はこのデータベースに日本で使用実績がなく欧米で使用されている食品香料化合物を追加し、欧米リストのシノニムなど詳細情報も包含し柔軟に利用できるデータベースの構築を目指した。このデータベースは今後の使用量調査の円滑化という面で利用価値があるばかりでなく、将来の食品香料規制のあり方を考えるとき、食品香料化合物の国際的整合性を考慮する必要があることから各食品香料化合物の科学的な安全性評価に基づく国際情報との関連を把握できるようにしたものである。

【本報告書で引用した略語及び用語の定義】

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。
使用量調査	: 日本における食品着香用の香料化合物の使用量調査。
フレーバー	: 欧米などで使用される英語の flavor(flavour)。通常、食品の「香味」または「風味」に相当し、「香りと味」の感覚を指す用語であるが、その機能を有する物質又は製造物(一般に食品香料)をさす場合もある。
CAS	: Chemical Abstracts Service
CoE	: Council of Europe 欧州評議会
EINECS	: European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances
EU	: European Union 欧州連合
EU Group	: EU 規制 (EC1565/2000)において決定された、代謝と化学構造に基づく物質の分類
EU Register	: EU 規則 2232/96 により、欧州連合加盟国より届出された食品香料化合物(chemically defined flavouring substances)の登録又はそのリスト。EU のポジティブリストの候補
FEMA	: Flavor and Extract Manufacturers' Association of the United States 米国食品香料工業会
FLAVIS 番号	: EU のポジティブリストにおける物質特有の分類番号 (FLAVIS は Flavour Information System というデータベースの略称)
GRAS	: Generally Recognized as Safe 米国において 1958 年の改正食品医薬品化粧品法に基づく、“一般に安全とみなされる物質”。なかでも FEMA GRAS とは FEMA がフレーバーとしての使用において安全と見なされる物質として公開したものを指す。
IOFI	: International Organization of the Flavor Industry 国際食品香料工業協会
IUPAC	: International Union of Pure and Applied Chemistry 国際純粋及び応用化学連合
JECFA	: Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additives

- FAO/WHO 合同食品添加物専門家委員会
- JFFMA** : **Japan Flavor and Fragrance Materials Association**
日本香料工業会
- JFFMA CAS** : 日本香料工業会が **National Chemical Inventories™**で確認した
CAS 番号
- RIFM** : **Research Institute for Fragrance Materials, Inc.**
化粧品香料原料安全性研究所。FEMA と共同で、二つの機関が
掌握している香料及び関連の物質に関し総合的なデータベース
(RIFM-FEMA データベース)を構築し、会員向けに限定し有料
で公開している。
- 18 類** : 食品衛生法施行規則別表第 1 に類名で記載されており、食品衛
生法施行規則別表第 4 にまとめられている。
例) 脂肪族高級アルデヒド類など

A. 研究目的

食品香料化合物のポジティブリスト規制が進められつつある近年の国際的動向を見ると、ますます地域間の整合性が重要となる。この点を踏まえ、本年度は食品香料化合物に関して我が国ばかりでなく欧米で使用実績のある品目およびそれらの関連情報を含むデータベースの構築を目的とした。

また、データベースの内容に関しては、収載した各食品香料化合物に対し、日本香料工業会命名規則(資料1)に従った品目名の修正および統一化、CAS番号の修正および日本、米国、EU間での不一致の表記、シノニムの追加などを綿密に進め、データベースの精度および情報量向上を目指した。このことにより本データベースの信頼性をより高め、摂取量調査を初めとした今後の食品香料化合物に関わる調査・研究に幅広く利用できるように努めた。

B. 研究方法

平成16年度厚生労働科学研究で構築した食品香料化合物データベース(以後、「平成16年度データベース」と略す)を基盤にして、これに収載されていないが我が国および欧米で使用実績のある食品香料化合物を調査、抽出し、差分品目として新たにデータベースに加えた。

その調査方法として、我が国からの差分品目は平成12年度の使用実態調査のデータ(厚生労働省より食監発第0520002号通知の別添として公表)および平成15年度の使用量実態調査から得られたリスト(同じく食安基発0814001号通知の別添として公表)から抽出した。また欧米からの差分品目はFEMA GRASおよびEU Registerの各リストから抽出した。これらの抽出された差分品目をデータベースに加える際には、それらに付随する情報、すなわち各リストの登録番号、CAS番号、シノニムなども付け加えた。

このようにして構築した本年度の基本データベースの各品目に関して、品目名の修正および統一化、各品目に付随する関連情報の検証および修正を行うことにより、収載情報の精度および情報量を高め、本データベースの高度化を推し進めた。

C. 調査

本研究のデータベース構築作業は、下記に示した調査プロセスで進めた。

1. 平成 16 年度データベースに収録されている各品目名および CAS 番号の検証とその結果に基づいた修正および追加。

日本香料工業会命名規則（資料 1）に従い、収録品目名の見直しを行ない、同時に National Chemical Inventories™ (2005 Issue 2; Chemical Abstracts Service)により CAS 番号および化学構造式を検証した。その結果、1) 確認または修正した CAS 番号を JFFMA CAS とした。2) 英名品目名を修正した場合にはその和名も相当する名称に変更した。3) 異性体や混合物の統一名称と CAS 番号の整合性で矛盾が生じる場合には、品目の追加、CAS 番号の補足、または備考欄での簡易説明を行った。4) 類の範囲の判定基準及び優先順位（資料 2）に基づき類番号を再確認した。

2. 本調査において参照する FEMA GRAS リスト、EU Register、FDA リスト、および JECFA リストの入手および検証。

- FEMA GRAS リスト：RIFM-FEMA データベースをインターネットで参照し、同リストに掲載されている物質の化合物名、FEMA 番号、CAS 番号、およびシノニムを確認した。
- EU Register：EU Register は業界の実態調査に基づき Commission Decision N° 1999/217/EC で品名が公表され正式に採択されてから数度の改訂が行われている。FEMA が Commissions Decision 2004/357/EC までの更改データを基に作成したデータ(2004 年 7 月公表)を入手し、Commission Decision 2005/389/EC の改訂まで（現在最新）の情報を追加した。
- FDA リスト：Code of Federal Regulations (CFR) title 21 の section 172.515（人が摂取する食品に直接添加することが認められた合成フレーバー及び関連物質）及び 182.60（GRAS とみなされた合成フレーバー及び関連物質）の項などに掲載されている物質を抽出した。
- JECFA リスト：インターネット (<http://jecfa.ilsa.org/>、http://apps3.fao.org/jecfa/flav_agents/flavag-q.jsp)で安全性評価結果及び現在の規格を参照し JECFA が評価を終了している物質の化合物名と FEMA GRAS 番号より JECFA 番号、および CAS 番号を確認した。

3. 平成 16 年度データベースへの FEMA GRAS リスト、EU Register、および JECFA リストの各リスト差分品目およびその関連情報の追加。

平成 16 年度データベースと参照するデータベース (FEMA GRAS リスト、EU Register、および JECFA リスト) を品目名および CAS 番号により照合し、平成 16 年度データベースに収録されず参照したデータベースにのみ収録されている

品目、すなわち差分品目を抽出した。これらの差分品目の情報、すなわち品目名および FEMA GRAS 番号、JECFA 番号、FLAVIS 番号、EU 構造分類番号、英名シノニムなどの関連情報を平成 16 年度データベースに追加し、書式・掲載内容をそろえた。FDA リストに対しては、品目名により平成 16 年度データベースと照合し、該当品目に FDA 番号を付け加えた。

これらの差分品目に関しても日本としての類番号を振ったが、特に FEMA では食品香料物質に限らず香料製剤を製造するのに必要な物質についても GRAS 評価を行っていること、また海外のフレーバー物質は日本でいう香料物質と基本的に定義が異なっていることから、便宜上以下のように分類し類番号を付けた。

0：18 類に該当せず日本で新規に指定された食品香料化合物

19：香料化合物とは考えられるが、18 類には該当しない化合物（日本国内では食品香料としての使用は不可）

20：日本では食品香料物質に該当しない化合物

4. 平成 17 年度食品香料化合物データベースの構築。

3. で構築した本年度の基本データベースに収載されている品目名および CAS 番号などの関連情報を入念に検証、修正を繰り返し、目的とした国際的に使用されている食品香料化合物データベース（資料 3）を完成した。

D. 結果及び考察

本年度の研究で構築したデータベース（資料 3）の収載品目数は、4,329 品目となり、平成 16 年度データベース（2,926 品目）と比較すると、収載品目数は 1,403 品目増加した。本データベースに収載されている品目の関連情報として、平成 16 年度データベースと同様に、英名品目名、和名、JFFMA CAS、FEMA CAS、FEMA 番号、FLAVIS 番号、EU Group 番号、別添 SEQ 番号、18 類番号、FEMA シノニム、EU シノニム、備考と新たに EU CAS、JECFA CAS、FDA 番号、CoE 番号、EU EINECS を追加した。

本データベースに収載した品目名およびその関連項目については、新たに追加された品目に対する検証ばかりでなく、平成 16 年度データベースに収載されていた項目についても再検証した。しかしながら、これらの検証に当たっては、平成 16 年度の研究と同様に以下のような問題があり、検証とその後の修正、追加の作業に膨大な労力と時間を費やした。

① 同一品目であるにもかかわらず参照するデータベースにより CAS 番号が異なる。

本データベースの収載品目の中には、その CAS 番号である JFFMA CAS と FEMA CAS または EU CAS が異なるものがある。この原因として、FEMA GRAS リストの明らかな誤り、単一の香料化合物に対する複数の CAS の存在、異性体の

取り扱いの違いなどが挙げられる。

異性体の取り扱いの違いについては、参照するデータベースにより各異性体に対し個別な CAS 番号を割り当てる場合と統一した CAS 番号を割り当てる場合があった。このように CAS 番号は品目により整合性がない場合があるが、我が国においては FEMA GRAS も EU Register も海外との商取引上で現実に使用されていることから、敢えて FEMA CAS および EU CAS もそのまま併記した。こうすることにより同一物質に対する本データベースと参照するデータベース間の CAS 番号の不整合性にも対処した。

② 参照するデータベース間の異性体表記の不一致。

参照するデータベースにより異性体記号を示すものと示さないものが混在していた。

③ FEMA GRAS, EU Register, JECFA 間の品目名の不一致および誤り。

FEMA GRAS, EU Register, JECFA の各データベース間で同一の香料化合物に対して品目名が異なる場合があった。これは各データベースの構築における香料化合物の命名法の違い、または慣用名のように決められた命名規則を使用しなかったことが考えられる。また、それらの品目名には、品目名から化学構造式が描けない場合やスペルミスなど明らかな誤りも見られた。

④ 本データベースに収載された 4,329 品で CAS 番号を付けられなかった香料化合物が 800 品目あった。

これらの香料化合物は National Chemical Inventories™、FEMA GRAS および EU Register データベースに CAS 番号が収載されていなかった。それらの品目が他の CAS 番号を有するデータベースで検索できる可能性については、今後検討すべき課題である。それらの中には、もともと CAS 番号が付与されていなかった香料化合物も存在するかもしれない。

E. 結論

本年度の研究では、平成 16 年度データベース「我が国で使用されている食品香料化合物データベース」を基盤にし、これに欧米で使用実績のある品目およびそれらの関連情報を付加して、日本、米国、EU で使用実績のある食品香料化合物の全てを網羅したデータベースを構築した。また品目名、CAS 番号、シノニムなど本データベースに収載されている情報については、入念に検証、修正、追加を繰り返し精度の高いものとした。

このように高度化した本データベースは、国際的に使用されている食品香料化合物に関して豊富な情報量を有し、且つその情報の精度も高いことから、摂取量調査を初めとした今後の様々な食品香料化合物の調査・研究に対し高い信頼性を持って利用できる。

おわりに

平成 16 年度厚生労働科学研究と同様に本年度の研究においても、収載する食品香料化合物の品目名や CAS 番号などの関連情報の精度向上に努め、さらに本年度は国内使用品目の補完と海外で使用されている品目情報の追加を行い、国際的に利用できる形を目指した。

食品香料化合物の科学的安全性評価に関連して、摂取量推定の基となる使用量調査は継続的・定期的に行われていく事が期待されている。国際的な香料業界の団体である IOFI では、2006 年に日米欧で行われる調査が少なくとも調査対象時期を合わせた形で行われることを要望しているが、当然の事ながら将来的には調査手法まで統一することを視野に入れている。本年度の研究で得られた食品香料化合物データベースが、将来国際的な食品香料化合物の使用量調査のプラットフォームを形成し、迅速かつ正確な集計処理を可能とすることを期待する。

本研究は、日本香料工業会の会員のうち食品香料化合物を使用している企業の協力のもと、食品香料委員会 17 社及び日本香料工業会事務局の分担作業により行ったもので、分担作業協力者は下記の通りである。

飯 忠司	曾田香料株式会社
石田 正秀	曾田香料株式会社
稲井 隆之	長谷川香料株式会社
馬野 克己	高田香料株式会社
宇山 修二	日本フィルメニッヒ株式会社
大崎 和彦	三栄源エフ・エフ・アイ株式会社
岡村 弘之	長谷川香料株式会社
笠原 陽子	高砂香料工業株式会社
嘉屋 和史	株式会社昭和農芸
斉藤 憲二	小川香料株式会社
(立場 秀樹)	
佐藤 修司	クエスト・インターナショナル・ジャパン株式会社
渋谷 次郎	塩野香料株式会社
杉沢 義夫	アイ・エフ・エフ日本株式会社
鈴木 潤	曾田香料株式会社
関谷 史子	高砂香料工業株式会社
土屋 一行	ジボダン ジャパン株式会社
(石村 哲哉)	
所 一彦	高砂香料工業株式会社
(菅原 武夫)	
仁井 皓迪	長岡香料株式会社
野崎 忠	株式会社井上香料製造所
東仲 隆治	日本香料薬品株式会社
深谷 摂	高砂香料工業株式会社
福本 隆行	三栄源エフ・エフ・アイ株式会社
彌勒地 義治	理研香料工業株式会社
森本 克彦	稲畑香料株式会社
山本 隆志	小川香料株式会社
吉川 宏	塩野香料株式会社
渡部 一郎	長谷川香料株式会社
今野 忠彦	日本香料工業会
丸山 進平	日本香料工業会
河内 龍二郎	日本香料工業会

F. 健康危機管理情報

消費者或いは利用者に健康危害の懸念のない安全と安心を担保するため、本研究で得られた結果は大きく寄与するものとする。

資料

- 資料 1 : 食品香料化合物の日本香料工業会命名規則
- 資料 2 : 類の範囲の判定基準及び優先順位
- 資料 3 : 食品香料化合物データベース

参考資料

- 日本香料工業会：平成 12 年度厚生科学研究報告書「日本における食品香料化合物の使用実態調査」(平成 13 年 3 月)
- 日本香料工業会：平成 12 年度委託研究「食品香料規制に関する国際比較調査」(平成 13 年 3 月)
- 日本香料工業会：平成 14 年度厚生労働科学研究報告書「食品用香料及び天然添加物の化学的安全性確保に関する研究 (日本における食品香料化合物の使用量実態調査)」(平成 15 年 3 月)
- 日本香料工業会：平成 15 年度厚生労働科学研究報告書「食品用香料及び天然添加物の化学的安全性確保に関する研究 (日本における食品香料化合物の使用量実態調査)」(平成 16 年 3 月)
- 日本香料工業会：平成 16 年度厚生労働科学研究報告書「我が国において使用されている食品香料化合物データベースの高度化に関わる調査研究(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)」(平成 17 年 3 月)
- ©日本化学会化合物命名小委員会：化合物命名法 (補訂 7 版)
- 印藤元一：合成香料 (増補改訂版)、2005 年、化学工業日報社
- National Chemical Inventories™ (2005 Issue 2; Chemical Abstracts Service)
- RIFM-FEMA Database
- EU Register Commission Decision N° 1999/217/EC, Commission Decision N° 2002/113/EC, Commissions Decision 2004/357/EC 及び Commission Decision 2005/389/EC.
- Fenaroli's handbook of flavor ingredients, 5th ed. / George A. Burdock, 2005, CRC Press
- FDA Code of Federal Regulations Title 21
- JECFA (<http://jecfa.ilsi.org/> http://apps3.fao.org/jecfa/flav_agents/flavag-q.jsp)
- VCF (Volatile Compounds in Food(2000); TNO Nutrition and Food Research Institute)
- Wiley (The Wiley/NBS Registry of Mass Spectral Data; A Wiley-Interscience Publication JOHN WILEY & SONS)

資料 1

食品香料化合物の日本香料工業会命名規則

命名に当たり、IUPAC 有機化学命名法に準拠し原則的に下記 (1) の規則に基づいた。(1) のルールに則れない場合は (2) を適用した。(3) は IUPAC 命名法の基本的確認事項をまとめた。(4) および (5) には、和名への字訳の日本香料工業会規則を記載した。

(1) 命名法の一般的規則

基準	内容	備考または具体例
名称	化合物名には、全て小文字のアルファベットを用いる。 但し、元素記号 (N) 及びテルペン系化合物の名称の一部には大文字を用いる。 複数の基を有する場合には、アルファベット順に従い表記する。	methyl N-methylantranilate germacrene-D 2,4-dimethyl-5-acetylthiazole → 5-acetyl-2,4-dimethylthiazole
位置数字	複数の置換基を有する場合には、有機化学命名法に従い、優先順位を決める。	2-methyl-5-hepten-6-one → 6-methyl-5-hepten-2-one
	官能基が末端にくる直鎖状化合物の場合は、その官能基の位置番号 (1) を省略する。	octan-1-ol → octanol
	官能基位置を表す数字を化合物名の最後にしない。	terpineol-4 → 4-terpinenol
	「3- and/or 5- and/or 6-」は「3(5)(6)」。 「3,5- and/or 3,6-」は「3,5(3,6)」とする。	2-acetyl-3,5-or 6-dimethylpyrazine 2-acetyl-3,5(or 6)-dimethylpyrazine → 2-acetyl-3,5(3,6)-dimethylpyrazine
ギリシャ文字	ortho-, meta-, para-, ortho, meta, para は 2-, 3-, 4- の数字で表記する。	但し、para- はメンタン類のみ使用し、"p-" と表記する。
	ギリシャ文字は使用せず、alpha-, beta- 等を接頭に用いる。	β-ionone → beta-ionone α-ionone → alpha-ionone
略字	ギリシャ文字のアルファベット表記は、cinnam, glycidate, naphthyl 及びテルペン誘導体に限る。その表記は名称の最後にしない。	terpineol-alpha → alpha-terpineol
	アセタール類の略字は使用しない。	DMA → dimethyl acetal, PGA → propyleneglycol acetal
接頭字	水添された部分構造に略字 (4H, TH 等) は使用しない。	TH → tetrahydro
	テルペン系アルコールの O を S に置換したものは接頭語に thio- を用いる。	geranyl mercaptan → thiogeraniol
	p- は原則として使用しないが、メンタン類のみ使用可とする。 dehydro は使用しない	例 ; 1,8-p-menthadien-4-ol, p-menthan-2-one
iso, normal,	末端枝分かれの "iso" を "i-" のように省略しない。	i-amyl acetate → isoamyl acetate
	末端枝分かれの "iso" はハイフオンを付けず、化学名につなげる。	iso-amyl acetate → isoamyl acetate
	ノルマルを表す "n-" は省略する。	n-amyl acetate → amyl acetate

	末端枝分かれの"iso"は原則としてC-5以下の構造に限る。	
sec, tert	略号"t-","s-"の表記は使用しない。	t-butyl → tert-butyl
	sec, tert-は原則としてC-5以下の構造に限る。	
立体異性の 記号	立体異性体の表記は小文字とする。同時に光学異性体の(-), (+)表記は使用しない	L- → l-, D- → d-, DL- → dl-
	t- トランス- シス- (Z)- (E)-は使用しない	trans- cis-,
	2-trans は使用しない	trans-2-
	trans-2, cis-4-は使用しない	trans, cis-2,4-

(2) 日本香料工業会で使用した慣用名

慣用名	和名	備考
acetoacetate	アセトアセテート	
acetoin	アセトイン	3-hydroxy-2-butanone
acetoin acetals		
acetoin esters		
acetovanillone	アセトバニロン	4-hydroxy-3-methoxyacetophenone
aconitic	アコニチック	
acrolein	アクロレイン	
acrylate	アクリレート	アクリル酸エステルのみ適用
adipate	アジペート	アジピン酸エステルのみ適用
adipic	アジピック	
amyl, isoamyl	アミル, イソアミル	amyl ester, isoamyl ester 及び cinnam
anethole	アネオール	
angelate	アンゲレート	cis-2-methyl-2-butenolate
anis	アニス	4-methoxyphenyl 基のみが含まれる場合
anisate	アニセート	4-methoxybenzoate
anisole	アニソール	4-methoxyphenyl 基のみが含まれる場合
anisyl	アニシル	4-methoxyphenyl
catechol	カテコール	
cinnam	シナム	
cinnamate	シナメート	3-phenyl-2-propenoate のみに適用
cinnamic	シナミック	3-phenyl-2-propenoic のみに適用
cinnamyl	シナミル	3-phenyl-2-propenyl のみに適用
cresyl	クレジル	methylphenyl
crotonate	クロトネート	
cyclamen aldehyde	シクラメンアルデヒド	3-(4-isopropylphenyl)-2-methylpropanal
cyclotene	シクロテン	2-hydroxy-3-methyl-2-cyclopenten-1-one
diacetyl	ジアセチル	
estragole	エストラコール	4-allylanisole
ethyl maltol	エチルマルトール	2-ethyl-3-hydroxy-4H-pyran-4-one
eugenol	オイゲノール	
eugenyl	オイゲニル	
farnesylacetone	ファルネシルアセトン	6,10,14-trimethyl-5,9,13-pentadecatrien-2-one
fumarate	フマレート	