

## 香料 2,4-ジメチル-4-フェニルテトラヒドロフランの 異性体存在比の決定

(2018年10月9日受付)

(2018年11月28日受理)

増本直子、西崎雄三、石附京子、中島 馨、杉本直樹、多田敦子、曹 永晩、小川久美子、佐藤恭子

国立医薬品食品衛生研究所

### Determination of isomer abundance ratio of 2,4-dimethyl-4-phenyltetrahydrofuran used as flavoring agent

(Received October 9, 2018)

(Accepted November 28, 2018)

Naoko Masumoto, Yuzo Nishizaki, Kyoko Ishizuki, Kaori Nakajima, Naoki Sugimoto,  
Atsuko Tada, Young-Man Cho, Kumiko Ogawa, Kyoko Sato

National Institute of Health Sciences

#### Abstract

2,4-dimethyl-4-phenyltetrahydrofuran is a flavoring agent that is permitted for use in food in Japan. To ensure the safety of this compound, its toxicity has been surveyed. For the safety assessment of chemicals, it is important to elucidate the abundance ratio of isomers, if they exist, because isomers can have different biological activities. For this compound, there are four potential isomers; however, no information on the abundance ratio of these isomers currently exists for the commercially available flavoring agent. In this study, the isomer abundance ratio in the commercial product was determined by quantitative <sup>1</sup>H-NMR and GC/MS equipped with a chiral column. All four isomers existed in almost equal amounts in the commercially available product.

**Keywords:** 香料、食品添加物、異性体存在比、定量 NMR、2,4-ジメチル-4-フェニルテトラヒドロフラン  
flavoring agent, food additives, isomer abundance ratio, quantitative NMR (qNMR), 2,4-dimethyl-4-phenyltetrahydrofuran

#### I 緒言

香料は、食品の製造または加工の工程で、香気を付与または増強する目的で使用される食品添加物である。香料には、食品衛生法第 10 条に基づいて厚生労働大臣の指定を受けた添加物（指定添加物）として使用が認められた合成香料と、指定制度の適用を受けない天然香料（食品衛生法第 4 条第 3 項：動植物から得られたものまたはその混合物）がある。指定添加物の香料にはさらに、「バニリン」のように化合物名で指定されている香料と、化合物の構造から「エステル類」など『類又は誘導体として指定されている 18 項目の香料（18 類香料）』の 2 種が存在する。18 類香料として食品への使用が認められている物質は、平成 25 年 7 月の時点で 3000 以上にのぼっている<sup>1)</sup>。

18 類香料については、その SEQ 番号、英名・和名、類及び類番号、CAS 番号が 18 類香料に関するリスト<sup>1)</sup>に記載されているが、成分規格は定められておらず、実際に流通している製品の純度や異性体存在比などの詳細は不明である。しかし、サリドマイドをはじめ光学異性体の違いにより毒性や生理活性が異なる例<sup>2)</sup>が多く知られているように、製品中の異性体存在比に関する情報は毒性を評価する上で欠かせない重要な付帯情報である。18 香料の安全性調査の一環として、4 つの異性体が存在する 2,4-ジメチル-4-フェニルテトラヒドロフラン (Figure 1) について一般毒性に関する知見<sup>\*1</sup>が報告されているが、その異性体存在比は流通製品にも記載がない。そのため、毒性試験に用いられた 2,4-ジメチル-4-フェニルテトラヒドロフラン製品についても、その異性体の存在比について調査する必要があると考えられた。

連絡先：〒 210-9501 神奈川県川崎市川崎区殿町 3-25-26 国立医薬品食品衛生研究所 増本直子

Corresponding author: Naoko Masumoto, National Institute of Health Sciences,  
3-25-26, Tonomachi, Kawasaki-ku, Kawasaki, Kanagawa 210-9501, Japan

\*1 水田保子、曹 永晩、赤木純一、小川久美子：2,4-ジメチル-4-フェニルテトラヒドロフランの F344 ラットにおける 90 日間反復投与毒性試験。日本食品化学学会第 24 回総会・学術大会 (B-38)。