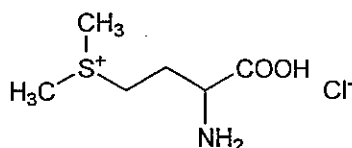


**(3-アミノ-3-カルボキシプロピル) ジメチルスルホニウム塩化物の
食品添加物の指定に関する部会報告書(案)**

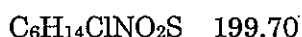
今般の添加物としての新規指定並びに使用基準及び成分規格の設定の検討については、国際汎用添加物として指定の検討を進めている当該添加物について、食品安全委員会において食品健康影響評価がなされたことを踏まえ、添加物部会において審議を行い、以下の報告をとりまとめるものである。

1. 品目名：(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物
(3-Amino-3-carboxypropyl)dimethylsulfonium chloride
〔CAS 番号：3493-12-7〕

2. 構造式、分子式及び分子量
構造式：



分子式及び分子量：



3. 用途
香料

4. 概要及び諸外国での使用状況

(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩は、アスパラガス、セロリ、コールラビ、うんしゅうみかん、スイートコーン、緑茶等の食品中に存在する成分であるとされている。欧米において、魚介製品といった加工食品に、香りの再現、風味の向上等の目的で添加されている。なお、本品目は、いわゆる「ビタミンU」とも呼ばれるものであり、また、「メチルメチオニンスルホニウムクロライド」として医薬品の成分としても用いられているものである。

5. 食品安全委員会における評価結果

食品安全基本法（平成 15 年法律第 48 号）第 24 条第 1 項第 1 号の規定に基づき、平成 23 年 2 月 10 日付け厚生労働省発食安 0210 第 1 号により食品安全委員会あて意見を求めた(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物に係る食品健康影響評価については、平成 23 年 2 月 22 日に開催された添加物専門調査会の議論を踏まえ、以下の評価結果が平成 23 年 5 月 12 日付け府食第 397 号で通知されている。

評価結果：(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物は、食品の着香の目的で使用する場合、安全性に懸念がないと考えられる。

6. 摂取量の推計

上記の食品安全委員会の評価結果によると次のとおりである。

添加物（香料）「(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物」の香料としての年間使用量の全量を人口の 10%が消費していると仮定する JECFA の PCTT（Per Capita intake Times Ten）法による 1995 年の米国及び欧州における一人一日あたりの推定摂取量は、それぞれ 75 μg 及び 250 μg である。正確には指定後の追跡調査による確認が必要と考えられるが、既に指定されている香料物質の我が国と欧米の推定摂取量が同程度との情報があることから、我が国での本品目の推定摂取量は、およそ 75 μg から 250 μg までの範囲になると推定される。

なお、食品中の(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩の含有量と国民健康・栄養調査に基づく平均的な摂取量とを勘案すると、食品中にもともと存在する本品目主成分の食事からの摂取量は、本品目の想定される推定摂取量と同等又はそれよりも多いと考えられる。

7. 新規指定について

(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物を食品衛生法第 10 条の規定に基づく添加物として指定することは差し支えない。ただし、同法第 11 条第 1 項の規定に基づき、次のとおり使用基準と成分規格を定めることが適当である。

（使用基準案）

香料として使用される場合に限定して食品健康影響評価が行われたことから、使用基準は「着香の目的以外に使用してはならない。」とすることが適当である。

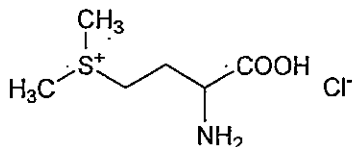
（成分規格案）

成分規格を別紙 1 のとおり設定することが適当である。(設定根拠は別紙 2、JECFA 規格等との対比表は別紙 3 のとおり。)

(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物

(3-Amino-3-carboxypropyl)dimethylsulfonium chloride

メチルメチオニンスルホニウムクロライド

 $C_6H_{14}ClNO_2S$

分子量 199.70

(3-Amino-3-carboxypropyl)dimethylsulfonium chloride [3493-12-7]

含 量 本品は、(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物 ($C_6H_{14}ClNO_2S$) 98.0 %以上を含む。

性 状 本品は白色の結晶又は粉末で、特有のにおいがある。

確認試験 本品をデシケーター中で減圧下、3 時間放置し、赤外吸収スペクトル測定法中のペースト法により測定し、本品のスペクトルを参照スペクトルと比較するとき、同一波数のところに同様の強度の吸収を認める。ただし、窓板は塩化ナトリウム製のものをを用いる。

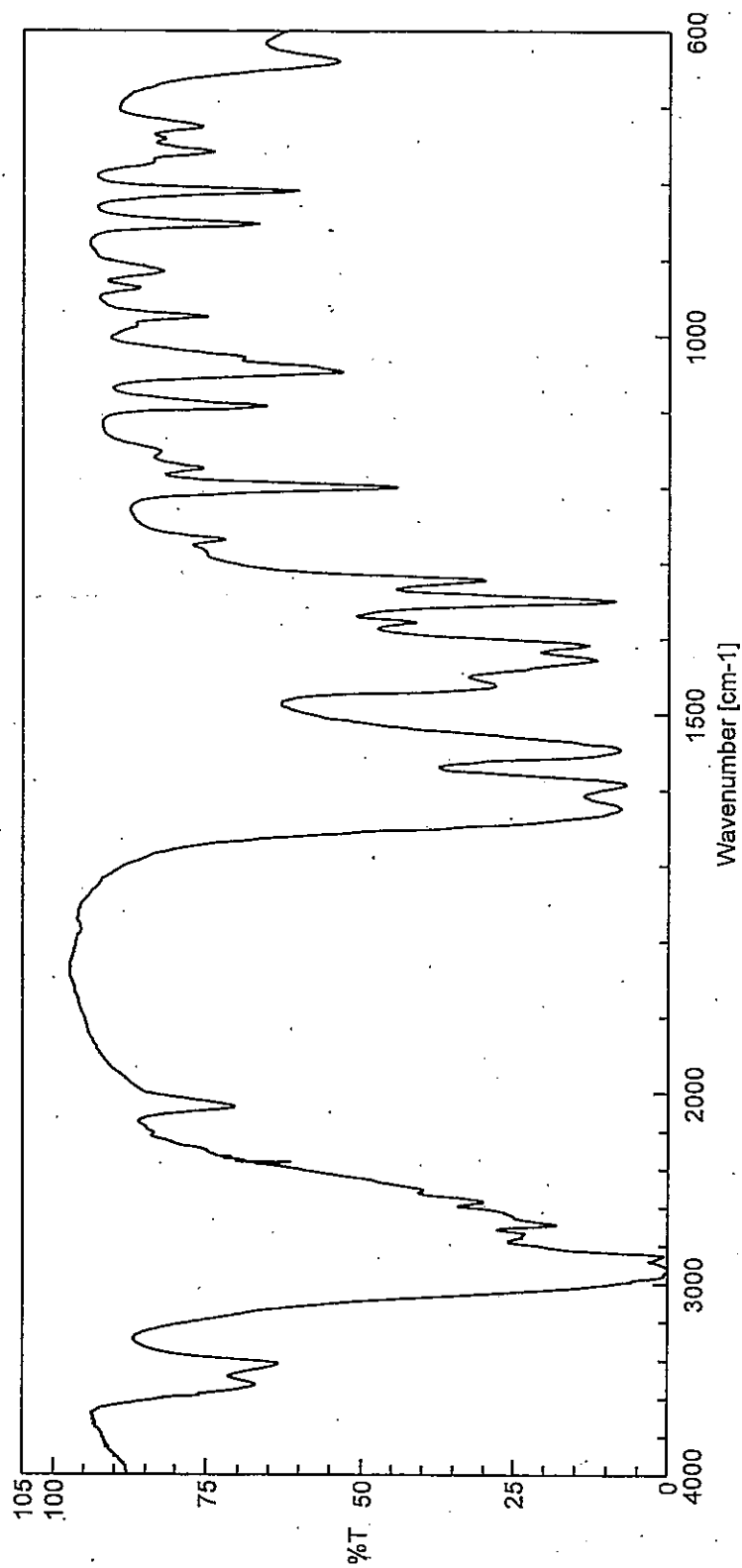
純度試験 融点 138～143℃ (分解)

定 量 法 本品を乾燥し、その約 0.3g を精密に量り、水 70ml 及び 0.1mol/L 塩酸 1ml を加えて溶かし、0.1mol/L 水酸化カリウム溶液で滴定する(電位差滴定法)。ただし、第 1 変曲点と第 2 変曲点の間の 0.1mol/L 水酸化カリウム溶液の消費量より求める。

0.1mol/L 水酸化カリウム溶液 1mL=19.970mg $C_6H_{14}ClNO_2S$

(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物

参照赤外吸収スペクトル



(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物に係る
成分規格等の設定根拠

名称

JECFA は DL-(3-Amino-3-carboxypropyl)dimethylsulfonium chloride としている。CAS 登録番号 3493-12-7 に登録されている化合物は、2 つの光学異性体（鏡像異性体）の等量混合物又は 2 つの光学異性体（鏡像異性体）のいずれであるかは特定されないものであることから、本規格は、「(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物」とした。

含量

JECFA は「98%以上」を規格値としている。我が国では日本薬局方外医薬品規格（局外規）に収載されており、「98.5～102.0%」を規格値としている。本規格案では、国際整合性を考慮して JECFA 規格と同水準の規格値とするが、局外規の規格値及び他の添加物の規格値との整合性を考慮して小数点下一桁までを有効数字とし「98.0～102.0%」とした。

性状

JECFA は「白色の結晶又は粉末；特有なキャベツの味とにおい」を規格とし、局外規では「本品は吸湿性の白色の結晶又は結晶性の粉末で、わずかに特異なおいがある。」としている。また、本品は特有の香気を持つが、香気は人により必ずしも同一に感ずるとは限らない。よって、本規格案では「白色の結晶又は粉末で、特有のにおいがある。」とした。

確認試験

JECFA では(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物の確認試験に核磁気共鳴分光法(NMR)を採用しているが、我が国では、NMR は汎用されていないこと、また、これまで指定された香料については赤外吸収スペクトル測定法(IR)のペースト法を確認試験法として採用していることから、本規格案では IR を採用することとした。測定法としては、本品は塩化物であることから、臭化カリウム錠剤法では、試料調製中に塩素と臭素の置換が生じ、異常ピークが観察される場合があるため、ペースト法を採用することとした。またペースト法では、窓板として臭化カリウム板を用いると、ペーストが臭化カリウム板に付着して伸びが悪く、一部臭化物への変化が認められ、試料作製が困難な上に、再現性が得られないため、塩化ナトリウム板を用いることとした。なお、本品については、各種 NMR 測定により完全帰属を行い、(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物と同定した試料を用いて参照スペクトルを作成した。

純度試験

融点 JECFA は「139℃」としている。1 製品（含量 99.8%）の融点を 6 機関で測定したところ、138～143℃で融解時に発泡分解した。融解時に発泡分解することから

JECFA 規格「139℃」ではなく、本規格案は流通実態及び融解時に発泡分解することを考慮して、「138～143℃（分解）」とした。

定量法

本品は気化せず、融解時に発泡分解することから GC 法により含量測定は行えない。よって局外規に準じて中和滴定により定量することとした。ただし、局外規では定量に 0.1mol/L 水酸化ナトリウム溶液が使用されているが、香料業界では酸価測定のアルカリ滴定溶液として 0.1mol/L 水酸化カリウム溶液を用いていることから、0.1mol/L 水酸化カリウム溶液を使用した定量法を検討した。その結果、0.1mol/L 水酸化ナトリウム溶液と 0.1mol/L 水酸化カリウム溶液で同様の定量結果 ($99.3 \pm 0.8\%$ 及び $99.2 \pm 1.5\%$) が得られたことから、定量法には 0.1mol/L 水酸化カリウム溶液を用いることとした。

JECFA では設定されているが、本規格では採用しなかった項目

溶解性

JECFA は、「溶解性：水に溶け、油脂に不溶」、「エタノールへの溶解性：溶ける」としている。しかしながら、本規格案では IR による確認試験、純度試験として融点を規定しており、「溶解性」の必要性は低いため、本規格では採用しないこととした。

なお、局外規では、「本品は水に極めて溶けやすく無水エタノール、アセトン、又はエーテルにほとんど溶けない。本品 1.0g を水 10mL に溶かすとき、液は無色澄明である。」としており、水及びエタノールへの溶解性が JECFA と異なることから、水及びエタノールへの溶解性を確認したところ、本品 1.0g は水 10mL で溶解したが、エタノールは 200mL で溶解した。以上のことより JECFA の溶解性は誤りと思われる。

香料「(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物」の規格対比表

		規格案	JECFA	日本薬局方外医薬品規格
品名		(3-アミノ-3-カルボキシプロピル)ジメチルスルホニウム塩化物	DL-(3-Amino-3-carboxypropyl)dimethylsulfonium chloride	メチルメチオニンスルホニウムクロライド
英名		(3-Amino-3-carboxypropyl)dimethylsulfonium chloride	d/-Methylmethionine sulfonium chloride Vitamin U	Methylmethioninesulfonium Chloride
別名		メチルメチオニンスルホニウムクロライド	S-Methylmethioninesulphonium chloride	-
CAS番号		3493-12-7	3493-12-7	3493-12-7
分子量		199.70	199.7	199.70
化学式		C ₆ H ₁₄ ClNO ₂ S	C ₆ H ₁₄ O ₂ NS	C ₆ H ₁₄ ClNO ₂ S
含量		98.0%以上	98%	98.5~102.0%
性状		白色の結晶又は粉末で、特有のにおいがある。	白色の結晶又は粉末;特有なキャベツの味とにおい	本品は吸湿性の白色の結晶又は結晶性の粉末で、わずかに特異なおいがある。
確認試験		IR法(ペースト)	NMR	(1) ニンヒドリン反応 (2) 塩化物の定性反応
pH		設定せず	-	4.0~5.0(水溶液(1→20))
旋光度		設定せず	-	旋光度を示さない(水溶液(1→50))
融点		138~143℃(分解)	139℃	-
純度試験	硫酸塩	設定せず	-	0.028%以下
	重金属	設定せず	-	20ppm以下
	ヒ素	設定せず	-	2ppm以下
	メチオニン	設定せず	-	本品0.10gを水5mLに溶かし、水酸化ナトリウム試液2mLを加えてよく振り混ぜ、35~40℃の水浴中で10分間放置する。次いで氷水中で2分間冷却し、この液に希塩酸2mLを加えて振り混ぜるとき、液は赤だいたい色を呈しない。
溶解性		設定せず	水に溶ける;油脂に不溶;アルコールに溶ける。	水に極めて溶けやすい;無水エタノール、アセトン、又はエーテルにほとんど溶けない。 本品1.0gを水10mLに溶かすとき、液は無色澄明である。
定量法		電位差滴定法(0.1mol/L水酸化カリウム溶液)。	-	電位差滴定法(0.1mol/L水酸化ナトリウム液)。
乾燥減量		設定せず	-	1.0%以下(1g, 減圧, シリカゲル, 3時間)
強熱残分		設定せず	-	0.10%以下(1g)
貯法		設定せず	-	気密容器

(参考)

これまでの経緯

平成23年2月10日	厚生労働大臣から食品安全委員会委員長あてに添加物の指定に係る食品健康影響評価について依頼
平成23年2月17日	第367回食品安全委員会（依頼事項説明）
平成23年2月22日	第93回食品安全委員会添加物専門調査会
平成23年3月31日 ～平成23年4月29日	第376回食品安全委員会（報告） 食品安全委員会における国民からの意見聴取
平成23年5月12日	第381回食品安全委員会（報告） 食品安全委員会より食品健康影響評価が通知
平成23年10月17日	薬事・食品衛生審議会へ諮問
平成23年11月2日	薬事・食品衛生審議会食品衛生分科会添加物部会

●薬事・食品衛生審議会食品衛生分科会添加物部会

[委員]

氏 名	所 属
鶴山 浩	国立医薬品食品衛生研究所食品添加物部長
井手 速雄	東邦大学薬学部教授
井部 明広	実践女子大学生生活科学部食生活科学科教授
小川 久美子	国立医薬品食品衛生研究所安全性生物試験研究センター病理部長
鎌田 洋一	国立医薬品食品衛生研究所衛生微生物部第三室長
北田 善三	畿央大学健康科学部教授
佐藤 恭子	国立医薬品食品衛生研究所食品添加物部第一室長
中島 春紫	明治大学農学部農芸化学科教授
堀江 正一	大妻女子大学家政学部食物学科食安全学教室教授
山内 明子	日本生活協同組合連合会執行役員組織推進本部本部長
山崎 壮	国立医薬品食品衛生研究所食品添加物部第二室長
由田 克士	大阪市立大学大学院生活科学研究科教授
吉成 浩一	東北大学大学院薬学研究科医療薬学講座薬物動態学分野准教授
若林 敬二※	静岡県立大学環境科学研究所 大学院生活健康科学研究科 環境物質科学専攻 化学環境研究室教授

※部会長