

314種の香料の嗅覚特性データベースを構築 香料のにおい強度予測が可能に

花王株式会社(社長・澤田道隆)感覚科学研究所は、さまざまな分野の製品の香りを開発する際に頻繁に使用される香料 314 種の嗅覚特性(においの感じ方)に関するデータベースを構築しました。さらに、そのデータを用いて、空気中に気化した香料の濃度(空気中濃度)から、においの強さを予測する技術を開発しました。

今回の研究成果は、2019年7月、米国化学会(ACS: American Chemical Society)が発行する「Industrial & Engineering Chemistry Research」に掲載されました^{※1}。

※1 Wakayama, H.; Sakasai, M.; Yoshikawa, K.; Inoue, M. Method for Predicting Odor Intensity of Perfumery Raw Materials Using Dose-Response Curve Database, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2019**, 58 (32), 15036-15044.
<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.iecr.9b01225>

■背景

香料は種類によって、においを感じられる濃度が異なり、濃度とにおいの強さの関係は一様ではありません。例えば、ペントライドという香料は、濃度が低くてもにおいを感じることができますが、濃度を高めてもそのにおいはなかなか強くないという特徴があります。このような知見は、調香師の経験に依存しており、これまで製品に配合されるそれぞれの香料が、どの程度香りに影響しているかを客観的に把握する方法はありませんでした。

このような課題に対し、花王は、香料の特徴をより詳細に把握できれば、香り開発に有用であることに加え、香料をより効率的に使用できるようになると考えました。香料の製造・使用量は、今後もグローバルで増加することが見込まれており、環境やサステナビリティへの配慮もますます必要となっています。そこで今回、香料のにおい強度予測技術の開発に取り組みました。

■方法と結果

におい強度予測技術を開発するため、まず花王は、314種の香料の嗅覚特性を示すデータベースを構築しました。これらのデータは、調香師と訓練を積んだ研究員18名に、におい希釈・提示装置から噴出させたさまざまな濃度の香料サンプル^{※2}のにおい強度を評価してもらうことにより取得しました(図1)。

※2 香料の気体を含んだ空気



図1 におい強度の計測装置

この検討から、香料の空气中濃度とにおい強度の関係を把握できるようになり、香料の空气中濃度から、その原料のにおい強度を予測することが可能となりました(図2)。

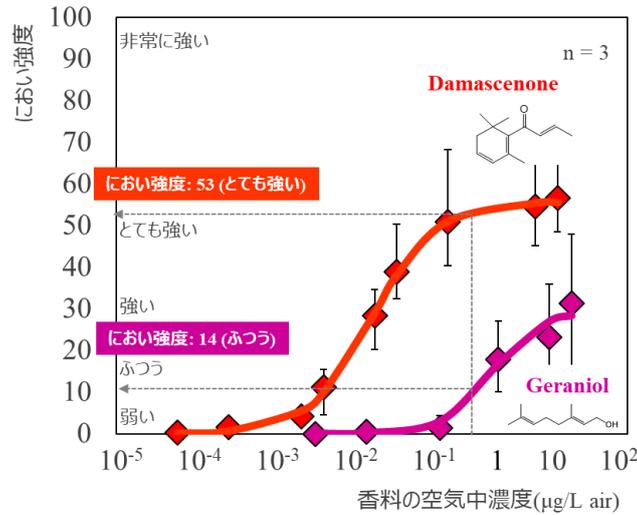


図2 香料の嗅覚特性データ

このデータベースをもとにした予測技術の精度を確認するため、香料のにおい強度の実測値^{※3}と予測値^{※4}の関係を統計的手法により検証しました。その結果、良好な予測精度が得られたことを確認しました(図3)。

※3 におい希釈・提示装置から噴出させたさまざまな濃度のサンプルを評価することで得られたにおい強度

※4 評価したサンプルの空气中濃度と取得した嗅覚特性データを使って予測されたにおい強度

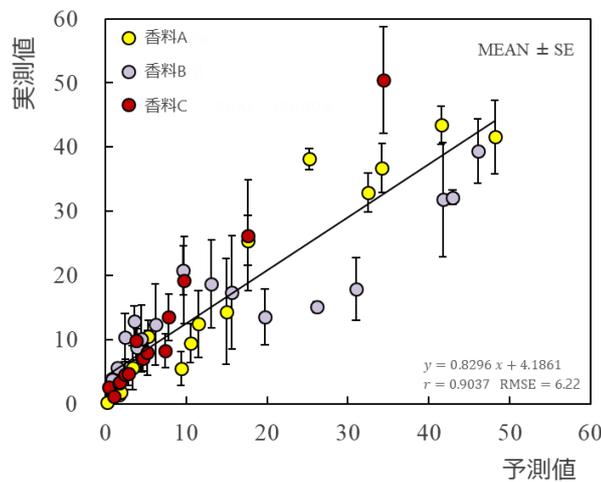


図3 におい強度の実測値と予測値の関係

■まとめ

今回、香料の嗅覚特性データベースを構築し、それを利用したにおい強度予測技術を開発しました。これにより、香料の空气中濃度だけでにおい強度を予測することが可能となりました。

今後は、この技術を香りの拡散・持続性などの高度な制御に応用することで、香りのパフォーマンスをさらに高め、より一層、お客さまに喜ばれる香りの開発をすすめていきます。また、香料使用の効率化により、香料の製造や輸送に関する温室効果ガス削減など環境課題解決にも貢献していきます。