項目	内容
名称	ブタノール
一般的名称	Butanol、Butyl alcohol
英名	Butanol
CAS番号	71-36-3
指定日	平成18年9月12日　　官報
消費者庁 *	―
厚生労働省 *	薬事・食品衛生審議会食品衛生分科会　平成18年2月9日 薬事・食品衛生審議会食品衛生分科会添加物部会　平成17年11月24日
食品安全委員会	第112回　食品安全委員会　平成17年9月22日　評価書 第 23回　添加物専門調査会　平成17年7月22日 第 22回　添加物専門調査会　平成17年6月14日
JECFA等の国際的評価機関の結果	FEXPANにより評価され1965年のGRAS 3に公表された[1)]。 1997年　第49回JECFA会議にて飽和脂肪族非環式鎖状一級アルコール類、アルデヒド類、酸類のグループとして評価された。本物質はクラスⅠに分類され、推定摂取量はクラスⅠの閾値を越えていたが、完全に生体内成分に代謝され、かつそのレベルは生理的範囲を超えないと予測されたためステップA4で安全性に懸念なしと判断された[2)]。
JECFA番号	85
FEMA GRAS番号	2178
外国の認可状況・使用状況	欧米をはじめ各国で広く使用されている。
FEMA GRAS番号	2178
CoE番号	52
FDA	21CFR 172.515
EUレジスター	FL No. 02.004
天然での存在	ペパーミント、リンゴ、ベリー類、トロピカルフルーツ、コニャックやラム等の酒類、クックドアスパラガスや加熱バター等の加熱加工食品、乳製品等々天然界に幅広く存在し、200種類以上の食品の香気成分としての存在が確認されている[3)]。
米国での食品への使用例	アルコール飲料　11.09ppm、焼き菓子　30.82ppm、アイスクリーム　13.89ppm、ゼリー＆プリン　22.15ppm、ハードキャンディ　28.12ppm、清涼飲料　6.97ppm、ソフトキャンディ　24.95ppm
参考資料	1) Food Technology(1965) Vol.19.No.2, pp151-197. 2) Evaluation of certain food additives and contaminants (Forty-ninth report of the Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additives). WHO Technical Report Series. http://www.inchem.org/documents/jecfa/jecmono/v040je10.htm 3) TNO(1996) Volatile Compounds in Food. Edited by L. M. Nijssen et al. 7th Ed. Index of Compounds. TNO Nutrition and Food Research Institute. Zeist.

*食品表示等に関する通知は、平成21年9月1日より消費者庁へ移管されました
http://www.mhlw.go.jp/topics/bukyoku/iyaku/syoku-anzen/other/ikan.html

○　厚生労働省令 第百五十八号

　食品衛生法（昭和二十二年法律第二百三十三号）第十条の規定に基づき、食品衛生法施行規則の一部を改正する省令を次のように定める。

　平成十八年九月十二日　　厚生労働大臣　川崎　二郎

食品衛生法施行規則の一部を改正する省令

　食品衛生法施行規則（昭和二十三年厚生省令第二十三号）の一部を次のように改正する。

　別表第一中第三百六十号を第三百六十一号とし、第二百七十八号から第三百五十九号までを一号ずつ繰り下げ、第二百七十七号の次に次の一号を加える。

二百七十八　ブタノール

　附　則

　この省令は、公布の日から施行する。

○ 厚生労働省告示 第四百九十二号

食品衛生法（昭和二十二年法律第二百三十三号）第十一条第一項の規定に基づき、食品、添加物等の規格基準（昭和三十四年厚生省告示第三百七十号）の一部を次のように改正する。

平成十八年九月十二日　　厚生労働大臣　川崎　二郎

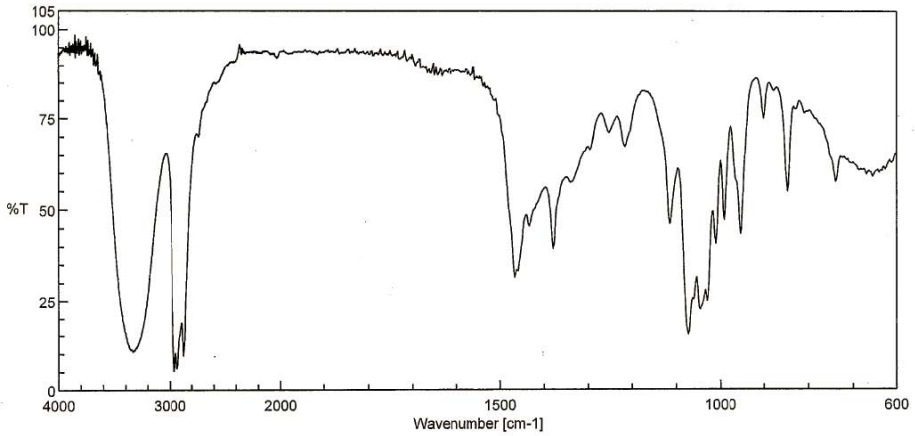
第２　添加物の部C　試薬・試液等の項１　試薬・試液のジフェニルアミン試液の目の次に次の一目を加える。

ジブチルエーテル　$[CH_3(CH_2)_3]_2O$　本品は，無色澄明の液体である。

屈折率 n_D^{20}＝1.398～1.400
比重　0.764～0.770
沸点　141～143℃

第２　添加物の部C　試薬・試液等の項 11　参照赤外吸収スペクトルの微結晶セルロースの目の次に次の一目を加える。

ブタノール



第２　添加物の部D　成分規格・保存基準各条の項フェロシアン化ナトリウムの目の次に次の一目を加える。

ブタノール

Butanol

$C_4H_{10}O$　　分子量　74.12
Butan－１－ol　[71-36-3]
含　量　本品は，ブタノール（$C_4H_{10}O$）99.5%以上を含む。
性　状　本品は，無色透明な液体で，特有のにおいがある。

確認試験　本品を赤外吸収スペクトル測定法中の液膜法により測定し，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。

純度試験　(1)　屈折率n_D^{20}＝1.393～1.404

(2)　比重　0.807～0.809（25℃）

(3)　酸価　2.0 以下（香料試験法）

(4)　ジブチルエーテル 0.15%以下

定量法を準用してガスクロマトグラフィーを行うとき，ジブチルエーテルのピーク面積は，全ピークの合計面積の 0.15%以下である。ただし，ジブチルエーテル・ブタノール溶液（15→10,000）1 μl につき，試験するとき，ブタノールとジブチルエーテルのピークが完全に分離する操作条件を用いる。

定　量　法　香料試験法中の香料のガスクロマトグラフィーの面積百分率法の操作条件(2)により定量する。

第２　添加物の部F　使用基準の項フェロシアン化ナトリウムの目の次に次の一目を加える。

ブタノール

ブタノールは，着香の目的以外に使用してはならない。

食安発 0912004 号
平成 18 年 9 月 12 日

各 都道府県知事
保健所設置市長
特別区長 殿

厚生労働省医薬食品局食品安全部長

食品衛生法施行規則の一部を改正する省令及び食品、
添加物等の規格基準の一部を改正する件について

食品衛生法施行規則の一部を改正する省令(平成 18 年厚生労働省令第 158 号)及び食品、添加物等の規格基準の一部を改正する件(平成 18 年厚生労働省告示第 492 号)が本日公布、施行・適用され、これにより食品衛生法施行規則(昭和 23 年厚生省令第 23 号。以下「省令」という。)及び食品、添加物等の規格基準(昭和 34 年厚生省告示第 370 号。以下「告示」という。)の一部が改正されたので、下記の事項に留意の上、その運用に遺憾のなきよう取り計らわれたい。

記

第１　改正の概要

１　省令関係

食品衛生法（昭和 22 年法律第 233 号。以下「法」という。）第 10 条の規定に基づき、ブタノールを省令別表第１に追加すること。

２　告示関係

法第 11 条第 1 項の規定に基づき、ブタノールの成分規格及び使用基準を設定すること。

第２　施行・適用期日

１　省令関係

公布日から施行すること。

２　告示関係

公布日から適用すること。

第３　運用上の注意

１　使用基準関係

ブタノールについては、「着香の目的以外に使用してはならない。」との使用基準を設定することから、有機溶剤として使用する等の着香の目的以外の使用は認められないこと。

２　添加物の表示関係

ブタノール並びにそれを含む食品及び添加物製剤については、法第 19 条第 1 項の規定に基づき添加物の表示を行うよう、関係業者に対して指導されたいこと。

なお、今回の省令及び告示の改正に伴い、平成 8 年 5 月 23 日付け衛化第 56 号厚生省生活衛生局長通知「食品衛生法に基づく添加物の表示等について」（以下「通知」）の別紙４「各一括名の定義及びその添加物の範囲」の７香料の（３）に「ブタノール」を加える。

また、通知の１　制度の概要（２）添加物及びその製剤に係る表示についてのイの目中の「品質保持期限」を「賞味期限」に改める。

（参考）

改正後の別紙４「各一括名の定義及びその添加物の範囲」の７香料の（３）は、次のとおり。

（３）添加物の範囲　以下の添加物を香料としての目的で使用する場合。

アセトアルデヒド	アセト酢酸エチル
アセトフェノン	アニスアルデヒド
アミルアルコール	α―アミルシンナムアルデヒド
アントラニル酸メチル	イオノン
イソアミルアルコール	イソオイゲノール
イソ吉草酸イソアミル	イソ吉草酸エチル
イソチオシアネート類	イソチオシアン酸アリル
イソブタノール	イソプロパノール
インドール及びその誘導体	γ―ウンデカラクトン
エステル類	
2-エチル-3, 5-ジメチルピラジン及び 2-エチル-3, 6-ジメチルピラジンの混合物	
エチルバニリン	２－エチル－３－メチルピラジン
エーテル類	オイゲノール
オクタナール	オクタン酸エチル
ギ酸イソアミル	ギ酸ゲラニル
ギ酸シトロネリル	ケイ皮酸
ケイ皮酸エチル	ケイ皮酸メチル
ケトン類	ゲラニオール
酢酸イソアミル	酢酸エチル
酢酸ゲラニル	酢酸シクロヘキシル
酢酸シトロネリル	酢酸シンナミル

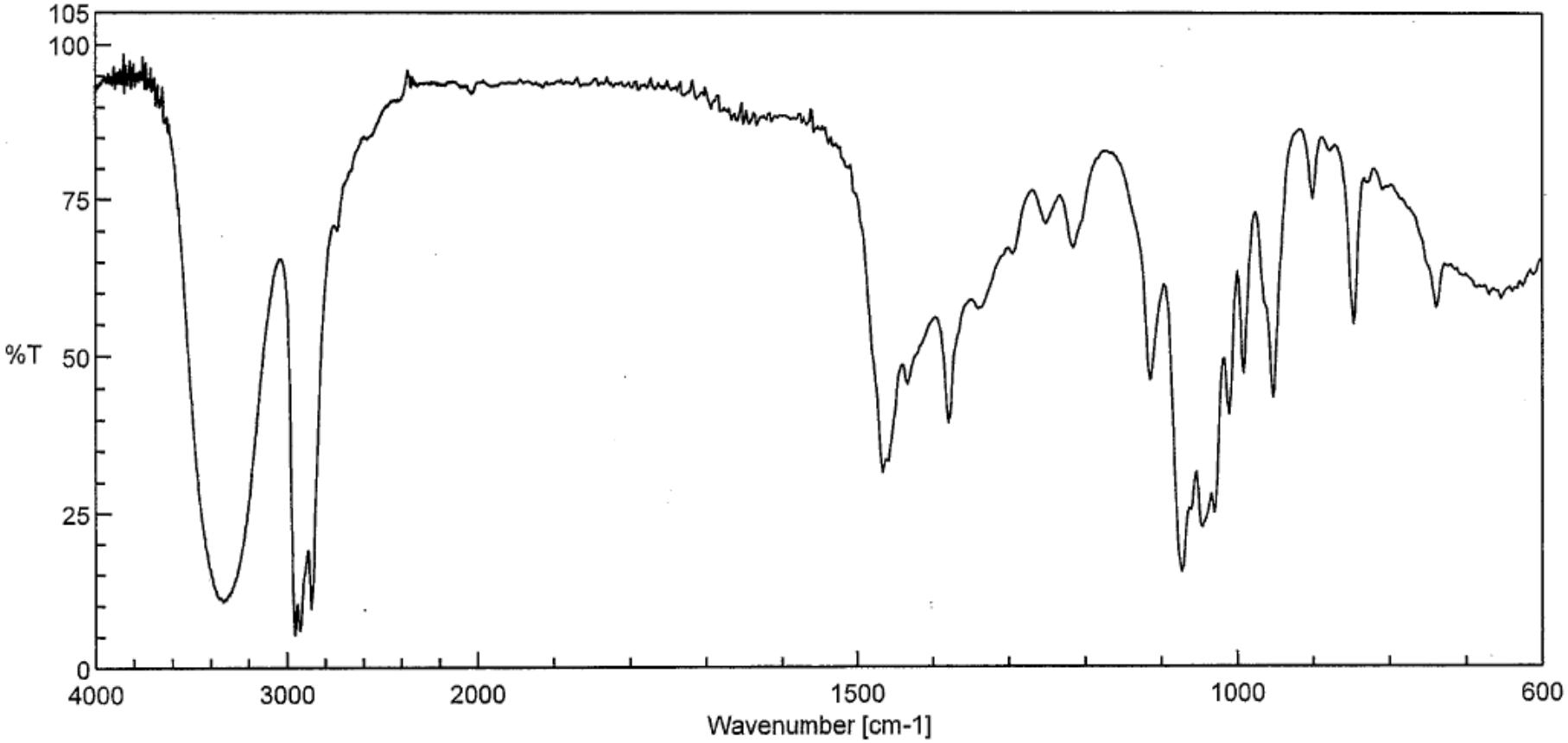
酢酸テルピニル
酢酸ブチル
酢酸 l―メンチル
サリチル酸メチル
シトラール
シトロネロール
脂肪酸類
脂肪族高級アルデヒド類
シンナミルアルコール
チオエーテル類
デカナール
デカン酸エチル
テルピネオール
2, 3, 5－トリメチルピラジン
バニリン
ヒドロキシシトロネラール
ピペロナール
フェニル酢酸イソブチル
フェノールエーテル類
ブタノール
プロパノール
プロピオン酸イソアミルプ
プロピオン酸ベンジル
ヘキサン酸アリル
ヘプタン酸エチル
ベンジルアルコール
芳香族アルコール類
ｄ―ボルネオール
N―メチルアントラニル酸メチル
メチルβ―ナフチルケトン
l―メントール
酪酸イソアミル
酪酸シクロヘキシル
ラクトン類
別添２に掲げる添加物

酢酸フェネチル
酢酸ベンジル
酢酸リナリル
シクロヘキシルプロピオン酸アリル
シトロネラール
１，８―シオネール
脂肪族高級アルコール類
脂肪族高級炭化水素類
シンナムアルデヒド
チオール類
デカノール
2, 3, 5, 6-テトラメチルピラジン
テルペン系炭化水素類
γ―ノナラクトン
パラメチルアセトフェノン
ヒドロキシシトロネラールジメチルアセタール
フェニル酢酸イソアミル
フェニル酢酸エチル
フェノール類
フルフラール及びその誘導体
プロピオン酸
プロピオン酸エチル
ヘキサン酸
ヘキサン酸エチル
l―ペリルアルデヒド
ベンズアルデヒド
芳香族アルデヒド類
マルトール
５－メチルキノキサリン
dl―メントール
酪酸
酪酸エチル
酪酸ブチル
リナロオール

第４　その他

別紙のとおり、ブタノールの参照赤外吸収スペクトルを示す。

(別紙)


105
100
75
%T 50
25
0
4000
3000
2000
1500
1000
600
Wavenumber [cm-1]

府食第９３６号
平成１７年９月２２日

厚生労働大臣
尾辻　秀久　殿

食品安全委員会
委員長　　寺田　雅昭

食品健康影響評価の結果の通知について

平成１７年３月７日付け厚生労働省発食安第０３０７００２号をもって貴省から当委員会に対して意見を求められたブタノールに係る食品健康影響評価の結果は下記のとおりですので、食品安全基本法（平成１５年法律第４８号）第２３条第２項の規定に基づき通知します。

なお、食品健康影響評価の詳細をまとめたものは別添のとおりです。

記

ブタノールは、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。

添加物評価書

ブタノール

２００５年９月

食品安全委員会

目次

	頁
○　審議の経緯	1
○　食品安全委員会委員名簿	1
○　食品安全委員会添加物専門調査会専門委員名簿	1
○　ブタノールを添加物として定めることに係る食品健康影響評価に関する審議結果	2
１．はじめに	2
２．背景等	2
３．名称等	2
４．安全性	2
(1)　遺伝毒性	2
(2)　反復投与毒性	3
(3)　発がん性	3
(4)　発生毒性	3
(5)　その他	3
５．摂取量の推定	3
６．安全マージンの算出	4
７．構造クラスに基づく評価	4
８．JECFA における評価	4
９．「国際的に汎用されている香料の我が国における安全性評価法」に基づく評価	4
１０．評価結果	4
・　引用文献	4
・　香料構造クラス分類	6

〈審議の経緯〉

平成17年3月7日	厚生労働大臣から添加物の指定に係る食品健康影響評価について要請、関係書類の接受
平成17年3月10日	第85回食品安全委員会（要望事項説明）
平成17年6月14日	第22回添加物専門調査会
平成17年7月22日	第23回添加物専門調査会
平成17年8月18日	第107回食品安全委員会（報告）
平成17年8月18日から9月14日	国民からの意見聴取
平成17年9月22日	第112回食品安全委員会（報告） （同日付け厚生労働大臣に通知）

〈食品安全委員会委員〉

委員長	寺田雅昭
委員長代理	寺尾允男
	小泉直子
	坂本元子
	中村靖彦
	本間清一
	見上　彪

〈食品安全委員会添加物専門調査会専門委員〉

座　長	福島昭治
座長代理	山添　康
	井上和秀
	今井田克己
	江馬　眞
	大野泰雄
	西川秋佳
	林　　真
	三森国敏
	吉池信男

ブタノールを添加物として定めることに係る食品健康影響評価に関する審議結果

1．はじめに

ブタノールはフルーツ様の香気を有し、果実等の食品に天然に含まれている成分である[1)]。欧米では、焼き菓子、アイスクリーム、ゼリー・プリン、清涼飲料等、様々な加工食品において香りを再現するため添加されている[2)]。

2．背景等

厚生労働省は、平成14年7月の薬事・食品衛生審議会食品衛生分科会での了承事項に従い、①JECFAで国際的に安全性評価が終了し、一定の範囲内で安全性が確認されており、かつ、②米国及びEU諸国等で使用が広く認められていて国際的に必要性が高いと考えられる食品添加物については、企業等からの指定要請を待つことなく、国が主体的に指定に向けた検討を開始する方針を示している。今般香料の成分として、ブタノールについて評価資料がまとまったことから、食品安全基本法に基づき、食品健康影響評価が食品安全委員会に依頼されたものである（平成17年3月7日、関係書類を接受）。

なお、香料については厚生労働省が示していた「食品添加物の指定及び使用基準改正に関する指針」には基づかず、「国際的に汎用されている香料の安全性評価の方法について」に基づき資料の整理が行われている。

3．名称等

名称：ブタノール

英名：Butanol, Butyl alcohol

構造式：

化学式：$C_4H_{10}O$

分子量：74.12

CAS番号：71-36-3

4．安全性

(1) 遺伝毒性

細菌を用いた復帰突然変異試験（TA98, TA100, TA1535, TA1537, WP2*uvrA*、最高用量5,000 μg/plate[3)]及びTA102、最高用量5,000 μg/plate[4)]）において、S9mixの有無にかかわらず陰性であった。また、TA98、TA100、TA1535及びTA1537を用いた復帰突然変異試験で陰性との報告がある[5)]。

チャイニーズ・ハムスター培養細胞（CHL/IU細胞）を用いた染色体異常試験（最高濃度0.70 mg/mL、＋/－S9mixの6時間及び－S9mixの24時間処理）の結果は陰性であった[6)]。また、チャイニーズ・ハムスター培養細胞を用いた姉妹染色分体交換試験（CHO、0.1%7日間、－S9mix）[7)]及び小核試験（V79、最高濃度50 μg/mL、＋/－S9mix）[8)]の結果はいずれも陰性であった。

9週齢ICR雄マウスを用いた強制経口投与による*in vivo*小核試験（最高用量2,000 mg/kg体

重/日×2、溶媒：オリーブ油）において、小核の誘発は認められなかった[9]。
以上から、ブタノールに遺伝毒性はないものと考える。

(2) 反復投与毒性

雄ラット（各群 10 匹）への混餌投与による 28 日間反復投与試験（0、88.9、304.9、940 mg/kg 体重/日）において、体重増加及び摂餌量等に異常は認められなかった。全ての投与群で副腎比重量が対照群に比べて有意に増加したが、剖検において投与による影響は認められなかった[10]。JECFA は、本試験における無影響量（NOEL）を 940 mg/kg 体重/日としている[11]。

SD ラット（各群 30 匹）への水溶液の強制経口投与による 13 週間反復投与試験（0、30、125、500 mg/kg 体重/日）において、500 mg/kg 体重/日投与群の雌雄で運動失調及び運動機能の低下の発症率が試験開始 7 週目以降に上昇し、それらの症状は、投与開始後 2～3 分で現れ、1 時間弱持続した。また、雌では中間検査（6 週目）において赤血球数、血球容積及びヘモグロビン値の軽度ではあるが有意な減少が認められた[12]。その他、一般状態、体重、摂餌量、眼科的検査、血清生化学検査、臓器重量及び病理組織学的検査等に対照群との差は認められなかった。本試験において雌の高用量群で観察された運動失調等については、投与の２～３分後に発現し、１時間以内に消失したが、症状が出現した 7 週目以降も継続して認められていることから、投与に関連する毒性と考え、無毒性量（NOAEL）を 125 mg/kg 体重/日とする。

(3) 発がん性

International Agency for Research on Cancer (IARC)、European Chemicals Bureau (ECB)、U. S. Environmental Protection Agency (EPA)、National Toxicology Program (NTP) では、発がん性の評価はされていない。

(4) 発生毒性

ラットへの妊娠 0 日から 20 日までの飲水投与による発生毒性試験（316、1,454、5,654 mg/kg 体重/日）において、母動物の妊娠維持に及ぼす影響及び胎児の生存に及ぼす影響はいずれの投与群でもみられなかった。5,654 mg/kg 体重/日投与群では、母動物への影響として摂餌量及び摂水量の減少、体重増加抑制が認められ、また、胎児への影響として胎児体重の低値、骨格変異の出現頻度の上昇等がみられた。以上から、母動物及び胚・胎児に対する NOAEL はいずれも 1,454 mg/kg 体重/日と結論されている[13]。

なお、別の発生毒性に関する報告では、胎児に脳室拡張、水頭症、腎盂拡張等がみられている[14]が、2004 年の上記試験ではこれらの異常は認められなかった。

(5) その他

内分泌かく乱性を疑わせる報告は見当たらない。

５．摂取量の推定

本物質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 法による 1995 年の使用量調査に基づく米国及び欧州における一人一日当りの推定摂取量は 800 及び 1,640 μg[15]。正確には認可後の追跡調査による確認が必要と考えられるが、既に許可されている

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[16]ことから、我が国での本物質の推定摂取量は、おおよそ 800 から 1,640 μg の範囲にあると想定される。なお食品中にもともと存在する成分としての本物質の摂取量は、意図的に添加された本物質の 83 倍であるとの報告がある[17]。

６．安全マージンの算出

13 週間反復投与試験の NOAEL 125 mg/kg 体重/日と、想定される推定摂取量（800～1,640 μg/ヒト/日）を日本人平均体重（50 kg）で割ることで算出される体重あたりの推定摂取量（16.0～32.8 μg /kg 体重/日）とを比較し、安全マージン 3,811～7,813 が得られる。

７．構造クラスに基づく評価

本物質は生体成分と同一物質に代謝され、これらは最終的に二酸化炭素と水に代謝され、尿中及び呼気中に排出される[11]ことから、構造クラスＩに分類される。

８．JECFA における評価

JECFA では、1997 年に飽和脂肪族非環式鎖状一級アルコール類、アルデヒド類、酸類のグループとして評価され、クラスＩに分類されている。想定される推定摂取量（1,900～8,100 μg/ヒト/日*）は、クラスＩの摂取許容値（1,800 μg/ヒト/日）を上回るが、本物質は完全に生体成分に代謝され、かつそのレベルは生理的範囲を超えないと予測されることから、香料としての安全性の問題はないとされている[11]。

＊ JECFA における評価に用いられた推定摂取量。なお、8,100 μg/ヒト/日は、1987 年の米国における一人一日当りの推定摂取量であり、溶剤としての使用量を含めたブタノールの全消費量をもとに算出された値である。

９．「国際的に汎用されている香料の我が国における安全性評価法」に基づく評価

本物質は、生体内において遺伝毒性はないと考えられる。また、クラスＩに分類され、安全マージン（3,811～7,813）は 90 日間反復投与試験の適切な安全マージンとされる 1,000 を上回り、かつ想定される推定摂取量（800～1,640 μg/ヒト/日）はクラスＩの摂取許容値（1,800 μg/ヒト/日）を超えていない。

１０．評価結果

ブタノールを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と評価した。

【引用文献】

1) TNO (1996) Volatile compounds in food. Ed. By L.M.Nijssen et.al. 7th.ed. Index of compounds. TNO Nutrition and Food Research Institute. Zeist.

2) Burdock, G. A. Fenaroli's Handbook of Flavor Ingredients. Vol Ⅱ, 3rd Edition (1995): 77.

3) ブタノールの細菌を用いる復帰突然変異試験 (2004) （財）食品薬品安全センター秦野研究

所（厚生労働省委託試験）
4) Müller W, Engelhart G, Herbold B, Jackh R, Jung R. Evaluation of mutagenicity testing with *Salmonella typhimurium* TA102 in three different laboratories. *Environ. Health Perspect.* (1993) 101 (suppl. 3): 33-36.
5) McCann J, Choi E, Yamasaki E, Ames BN. Detection of carcinogens as mutagens in the Salmonella/microsome test: assay of 300 chemicals. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* (1975) 72: 5135-5139.
6) ブタノールのチャイニーズ・ハムスター培養細胞を用いる染色体異常試験 (2004) （財）食品薬品安全センター秦野研究所（厚生労働省委託試験）
7) Obe G, Ristow H. Acetaldehyde, but not ethanol, induced sister chromatid exchanges in Chinese hamster cells *in vitro*. *Mutat. Res.* (1977) 56: 211-213.
8) Lasne C, Gu ZW, Venegas W, Chouroulinkov I. The in vitro micronucleus assay for detection of cytogenetic effects induced by mutagen-carcinogens: comparison with the in vitro sister-chromatid exchange assay. *Mutat. Res.* (1984) 130: 273-282.
9) ブタノールのマウスを用いる小核試験 (2004) （財）食品薬品安全センター秦野研究所（厚生労働省委託試験）
10) Bio-Fax Industrial Bio-test Lab. Inc. (1969) 1810 Frontage Road Northbrook. III. 60062 Data Sheet No.2-5/69: *n*-Butyl alcohol.（非公表）
11) 第 49 回 JECFA　WHO Food Additives Series 40.
12) The Office of Solid Waste. Rat oral subchronic study of normal butanol. US EPA's Integrated Risk Information System (1987).
13) Ema M, Hara H, Matsumoto M, Hirose A, Kamata E. Evaluation of developmental toxicity of 1-butanol given to rats in drinking water throughout pregnancy. *Food Chem Toxicol.* (2005) 43: 325-331.
14) Sitarek K, Berlinska B, Baranski B. Assessment of the effect of *n*-butanol given to female rats in drinking water on fertility and prenatal development of their offspring. *Int. J. Occup. Med. Environ. Health.* (1994) 7: 365-370.
15) RIFM-FEMA Database, Material information on Butyl alcohol.（2005 年入手）（非公表）
16) 平成 14 年度厚生労働科学研究報告書「日本における食品香料化合物の使用量実態調査」、日本香料工業会
17) Stofberg J, Grundschober, F. Consumption ratio and food predominance of flavoring materials. *Perfumer & Flavorist*. (1987) 12: 27-56.

香料構造クラス分類（ブタノール）

YES : ⟶ , NO : ⇢

START

1. 生体成分、或いはその光学異性体であるか → I

2. 以下の官能基を持つか
脂肪族第２級アミンとその塩, cyano, N-nitroso, diazo, triazeno, 第４級窒素（例外あり） → III

3. 構造に C,H,O,N, ２価の S **以外**の要素があるか

4. 前項の質問でリストされなかったのは以下の何れかであるか
a. carboxylic acid の Na,K,Mg,NH_4 塩
b. amine の硫酸塩又は塩酸塩
c. Na-,K-,Ca-sulphonate,sulphamate or sulphate → III

5. 単純に分岐した、非環状脂肪族炭化水素か炭水化物か → I

6. ベンゼン環の以下の置換構造物質か
a. 炭化水素またはその 1'-hydroxy or hydroxy ester 体 **かつ**
b. 一つ又は複数の alkoxy 基があり、このうち一つは a の炭化水素のパラ位 → III

7. heterocyclic 構造である

8. lactone か cyclic diester であるか

9. 他の環に融合しているか、5 又は 6 員環のα,β-不飽和 lactone か
lactone の場合はヒドロキシ酸として扱う。
cyclic diester の場合はそれぞれの構成要素として扱う。 → III
複素環 → 10.　開環 → Q20　炭素環 → Q23

10. 3 員の heterocyclic 化合物か → III

11. いかなる環における hetero 原子を無視して、複素環は以下の置換基**以外**の置換基をもつか
単純な炭化水素（架橋及び単環 aryl or alkyl を含む）、alkyl alcohol 、aldehyde 、acetal 、ketone、ketal、acid、ester(ラクトン以外のエステル)、mercaptan、sulphide、methyl ethers、水酸基、これらの置換基**以外**の置換基をもたない単一の環(hetero 又は aryl) → III

12. hetero 芳香族化合物か

13. 置換基を有するか → III

14. 二つ以上の芳香族の環を有するか

15. 一つずつの環に容易に加水分解されるか → III

16. 普通の terpene-hydrocarbon、-alcohol、-aldehyde 、または -carboxylic acid (not a ketone)であるか → I

17. 普通の terpene、-alcohol、-aldehyde 又は-carboxylic acid に容易に加水分解されるか

18. 以下の何れかであるか
a. diketone が近接；末端の vinyl 基に ketone,ketal が接続
b. 末端の vinyl 基に２級アルコールかそのエステルが接続
c. allyl alcohol 又は acetral、ketal 又は ester 誘導体
d. allyl mercaptan, allyl sulphide, allyl thioester, allyl amine
e. acrolein, methacrolein 又はその acetal
f. acrylic or methacrylic acid
g. acetylenic compound
h. acyclic 脂肪族 ketone, ketal, ketoalcohol のみを官能基とし、4 つ以上の炭素を keto 基のいずれかの側に持つ
i. 官能基が sterically hindered → II　I

19. open chain か

20. 次のいずれかの官能基を含む直鎖又は単純に分岐した、脂肪族化合物か
a. alcohol, aldehyde, carboxylic acid or ester が 4 つ以下
b. 以下の官能基が一つ以上で一つずつ acetal, ketone or ketal, mercaptan, sulphide, thioester, polyethylene(n<4), １級又は３級 amine

21. methoxy を除く３種類以上の異なる官能基を含むか → III

22. 食品の一般的な成分又はその成分と構造的に良く類似しているか → III　II

23. 芳香族化合物か

24. cyclopropane, cyclobutane とその誘導体を除く monocarbocyclic 化合物で置換されていないか或いは以下の置換基を 1 つ含む環または脂肪族側鎖を持つか。(alcohol, aldehyde, 側鎖の ketone, acid, ester, 又は Na, K, Ca, sulphonate, sulphamate, acyclic acetal or ketal)

25. 以下のいずれかか
a. 24 で述べた置換基のみの cyclopropane 又は cyclobutane
b. mono- or bicyclic sulphide or mercaptan → Q11

26. 以下のいずれかか
a. 24 にリストした以外の官能基を含まない
b. 環状 ketone の有無に関わらず monocycloalkanone か bicyclic 化合物 → Q11

27. 環は置換基を持つか → III

28. 二つ以上の芳香族環を持つか

29. 加水分解を受けて単環式残基となるか
その他 → ※単純 ester が加水分解されるとき、芳香族以外は Q19
芳香族残基 → III

30. 環の hydroxy, methoxy 基を無視して、その環は以下に示す炭素数 1-5 の脂肪族グループ**以外**の置換基を持つか。
すなわち炭化水素あるいは alcohol, ketone, aldehyde, carboxyl, 単純 ester※（加水分解を受けて炭素数 5 以下の環置換体となる）を含む 脂肪族置換基。 → Q18
※単純 ester が加水分解されるとき、芳香族は Q18

31. Q30 の、acyclic acetal, -ketal or -ester の何れかか → Q18

32. Q30 の官能基のみ、又は Q31 の誘導体と以下の何れか又は全てを持つか
a. 融合した非芳香族 carboxylic ring
b. 炭素数 5 を超える置換鎖
c. 芳香族環または脂肪族側鎖に polyoxyethylene 鎖 → II　Q22