項目	内容
名称	イソアミルアルコール
一般的名称	Isoamyl alcohol
英名	Isoamyl alcohol
CAS番号	123-51-3
指定日	平成17年8月19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17年3月28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2月24日
食品安全委員会	第86回　食品安全委員会　　平成17年3月17日　評価書 第16回　添加物専門調査会　　平成17年1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)]。 1996年　第46回JECFA会議にて評価され、本物質はクラスⅠに分類され、クラスⅠの閾値以下であったため安全性に懸念なしと判断された[2)]。
JECFA番号	52
外国の認可状況・使用状況	欧米をはじめ各国で認可され広く使用されている。
FEMA GRAS番号	2057
CoE番号	51
FDA	21CFR 172.515
EUレジスター	FL No. 02.003
天然での存在	リンゴ、バナナ、チェリー、オレンジ、ベリー類、メロン、ピーチ、グレープ等の果実、ポテト、コーン等の野菜、ミント、チーズやバター等の乳製品、ビーフ、牡蠣やホタテ貝等のシーフード、ウイスキー、ワイン等の酒類、コーヒー、ティー、等々天然界に幅広く存在し、230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	焼き菓子　26.65ppm、アイスクリーム　9.96ppm、ガム　594.10ppm、ソフトキャンディ　13.58ppm、ゼリー＆プリン　19.06ppm、清涼飲料　7.72ppm、ハードキャンディ　168.10ppm、アルコール飲料　82.31ppm
参考資料	1) Food Technology(1965) Vol.19.No.2, pp151-197. 2) Evaluation of certain food additives and contaminants (Forty-sixth report of the Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additives). WHO Technical Report Series. http://whqlibdoc.who.int/trs/WHO_TRS_868.pdf 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 第百三十一号

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。

平成十七年八月十九日　　厚生労働大臣　尾辻　秀久

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。

別表第一中第三百五十二号を第三百五十六号とし、第二百五十二号から第三百五十一号までを四号ずつ繰り下げ、第二百五十一号を第二百五十四号とし、同号の次に次の一号を加える。

二百五十五　ヒドロキシプロピルセルロース

別表第一中第二百五十号を第二百五十三号とし、第二百十八号から第二百四十九号までを三号ずつ繰り下げ、第二百十七号を第二百十九号とし、同号の次に次の一号を加える。

二百二十　２・３・５－トリメチルピラジン

別表第一中第二百十六号を第二百十八号とし、第三十号から第二百十五号までを二号ずつ繰り下げ、第二十九号を第三十号とし、同号の次に次の一号を加える。

三十一　イソアミルアルコール

別表第一中第二十八号を第二十九号とし、第十八号から第二十七号までを一号ずつ繰り下げ、第十七号の次に次の一号を加える。

十八　アミルアルコール

附　則

この省令は、公布の日から施行する。

厚生労働省告示 第三百七十七号

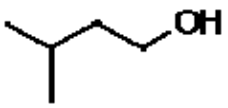
食品衛生法（昭和二十二年法律第二百三十三号）第十一条第一項の規定に基づき、食品、添加物等の規格基準（昭和三十四年厚生省告示第三百七十号）の一部を次のように改正し、公布の日から適用する。

平成十七年八月十九日　　厚生労働大臣　尾辻　秀久

第２添加物の部D成分規格・保存基準各条の項イオン交換樹脂の目の次に次の一目を加える。

イソアミルアルコール

Isoamyl alcohol



$C_5H_{12}O$　　分子量 88.15

３－Methyl－１－butanol〔123－51－３〕

含　量　本品は，イソアミルアルコール（$C_5H_{12}O$）98.0%以上を含む。

性　状　本品は，無～淡黄色の透明な液体で，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}＝1.404～1.410

(2) 比重　0.806～0.813（25℃）

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使用基準の項イオン交換樹脂の目の次に次の一目を加える。

イソアミルアルコール

イソアミルアルコールは，着香の目的以外に使用してはならない。

食安発第 0819001 号
平成 17 年 8 月 19 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 17 年厚生労働省令第 131 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 17 年厚生労働省告示第 377 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、アミルアルコール、イソアミルアルコール、2,3,5-トリメチルピラジン及びヒドロキシプロピルセルロースを省令別表第１に追加すること。

２　告示関係

（１）法第 11 条第 1 項の規定に基づき、アミルアルコール、イソアミルアルコール及び 2,3,5-トリメチルピラジン（以下「香料」という。）の成分規格及び使用基準を設定すること。

（２）法第 11 条第 1 項の規定に基づき、ヒドロキシプロピルセルロースの成分規格を設定すること。

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

香料については、「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

香料及びヒドロキシプロピルセルロース並びにそれら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、「食品衛生法に基づく添加物の表示等について」（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）（以下単に「通知」という。）の一部を次のように改正すること。

（１）通知の別紙１「簡略名一覧表」中

「

ビタミンＡ脂肪酸エステル	ビタミンＡエステル、レチノールエステル、ビタミンＡ、Ｖ．Ａ	の下に

」

「

ヒドロキシプロピルセルロース	ＨＰＣ	

」を加える。

（２）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「アミルアルコール」、「イソアミルアルコール」及び「2, 3, 5-トリメチルピラジン」を加える。

（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	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
酢酸フェネチル
酢酸ブチル
酢酸ベンジル
酢酸１―メンチル
酢酸リナリル
サリチル酸メチル
シクロヘキシルプロピオン酸アリル
シトラール
シトロネラール
シトロネロール
１，８―シオネール
脂肪酸類
脂肪族高級アルコール類
脂肪族高級アルデヒド類
脂肪族高級炭化水素類
シンナミルアルコール
シンナムアルデヒド
チオエーテル類
チオール類
デカナール
デカノール
デカン酸エチル
2,3,5,6-テトラメチルピラジン
テルピネオール
テルペン系炭化水素類
2,3,5－トリメチルピラジン
γ―ノナラクトン
バニリン
パラメチルアセトフェノン
ヒドロキシシトロネラール
ヒドロキシシトロネラールジメチルアセタール
ピペロナール
フェニル酢酸イソアミル
フェニル酢酸イソブチル
フェニル酢酸エチル
フェノールエーテル類
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
プロピオン酸イソアミル
プロピオン酸エチル
プロピオン酸ベンジル
ヘキサン酸
ヘキサン酸アリル
ヘキサン酸エチル
ヘプタン酸エチル
１―ペリルアルデヒド
ベンジルアルコール
ベンズアルデヒド
芳香族アルコール類
芳香族アルデヒド類
ｄ―ボルネオール
マルトール
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
dl―メントール
１―メントール
酪酸
酪酸イソアミル
酪酸エチル
酪酸シクロヘキシル
酪酸ブチル

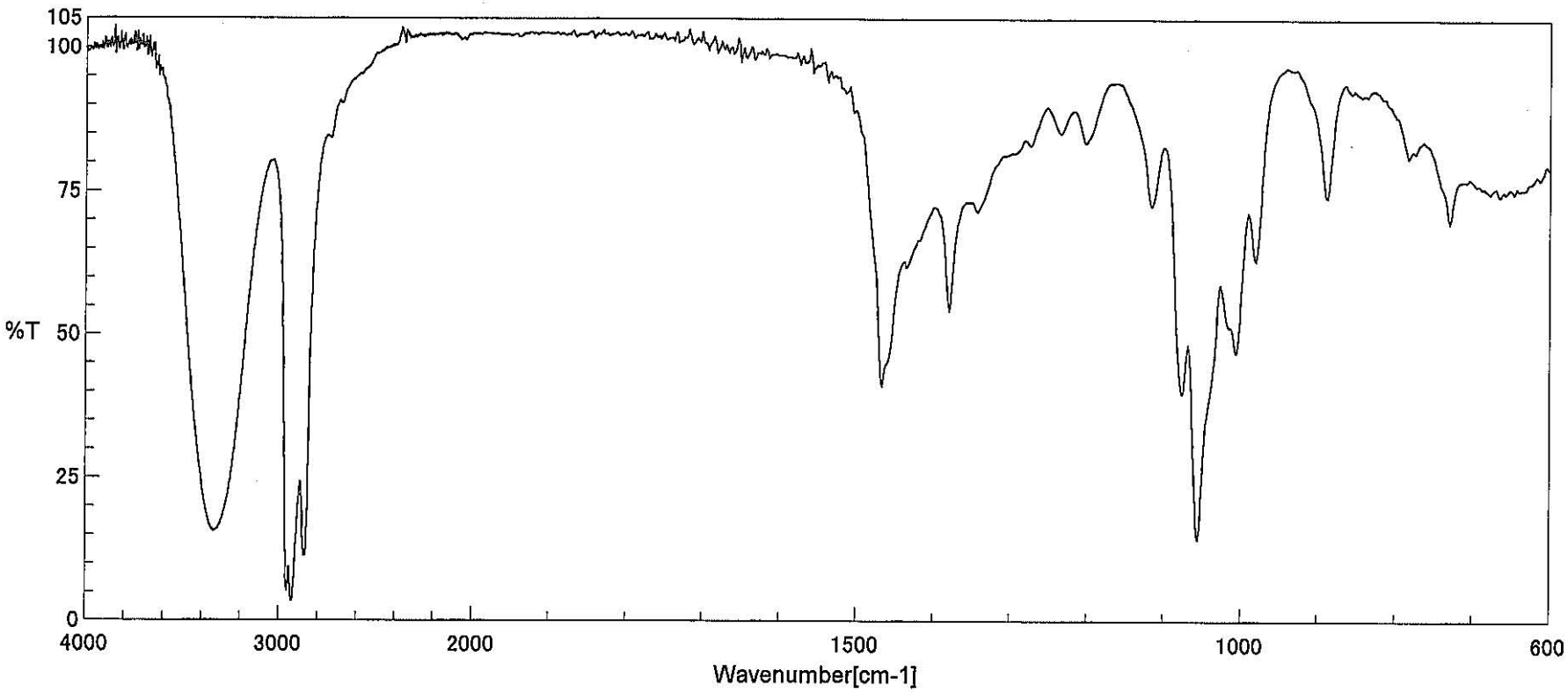
ラクトン類　　リナロオール

別添２に掲げる添加物

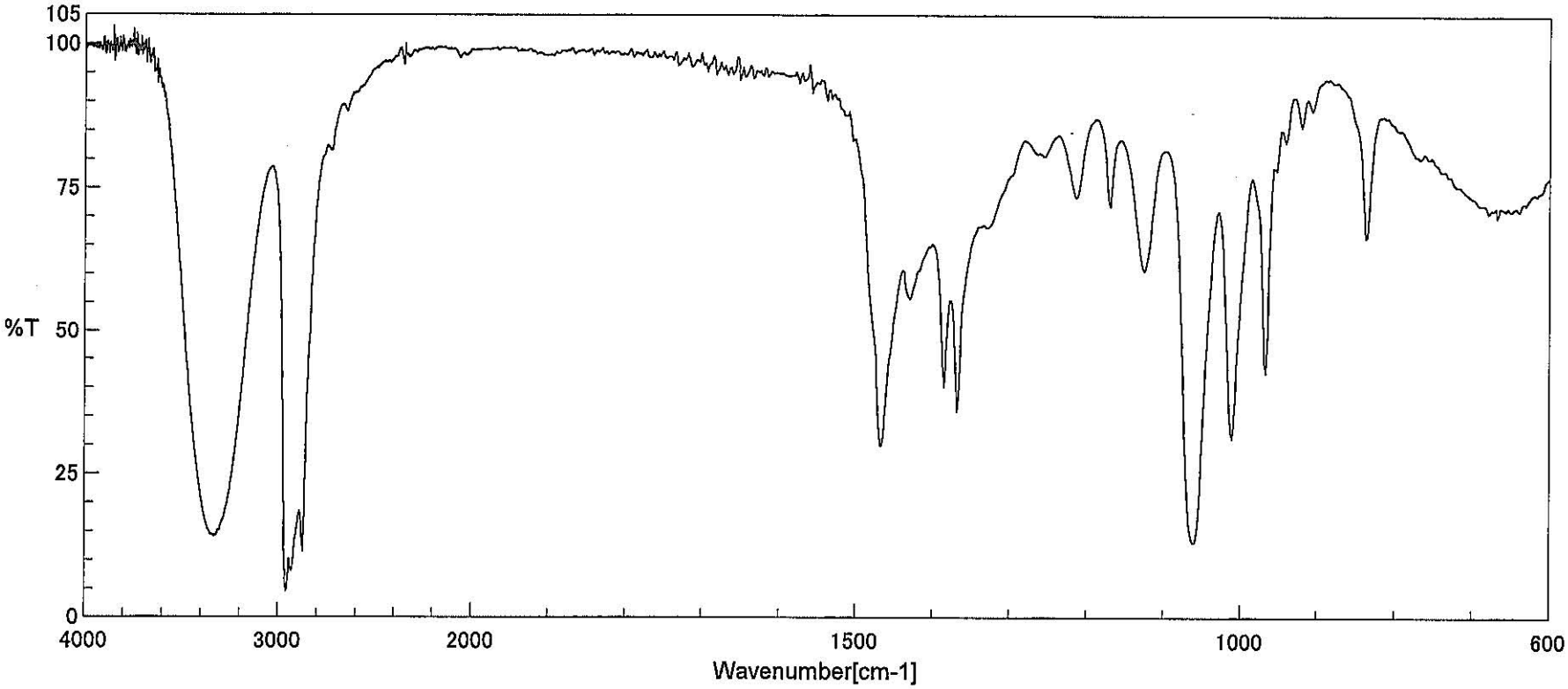
第４　その他

別紙のとおり、香料の参照赤外吸収スペクトルを示す。

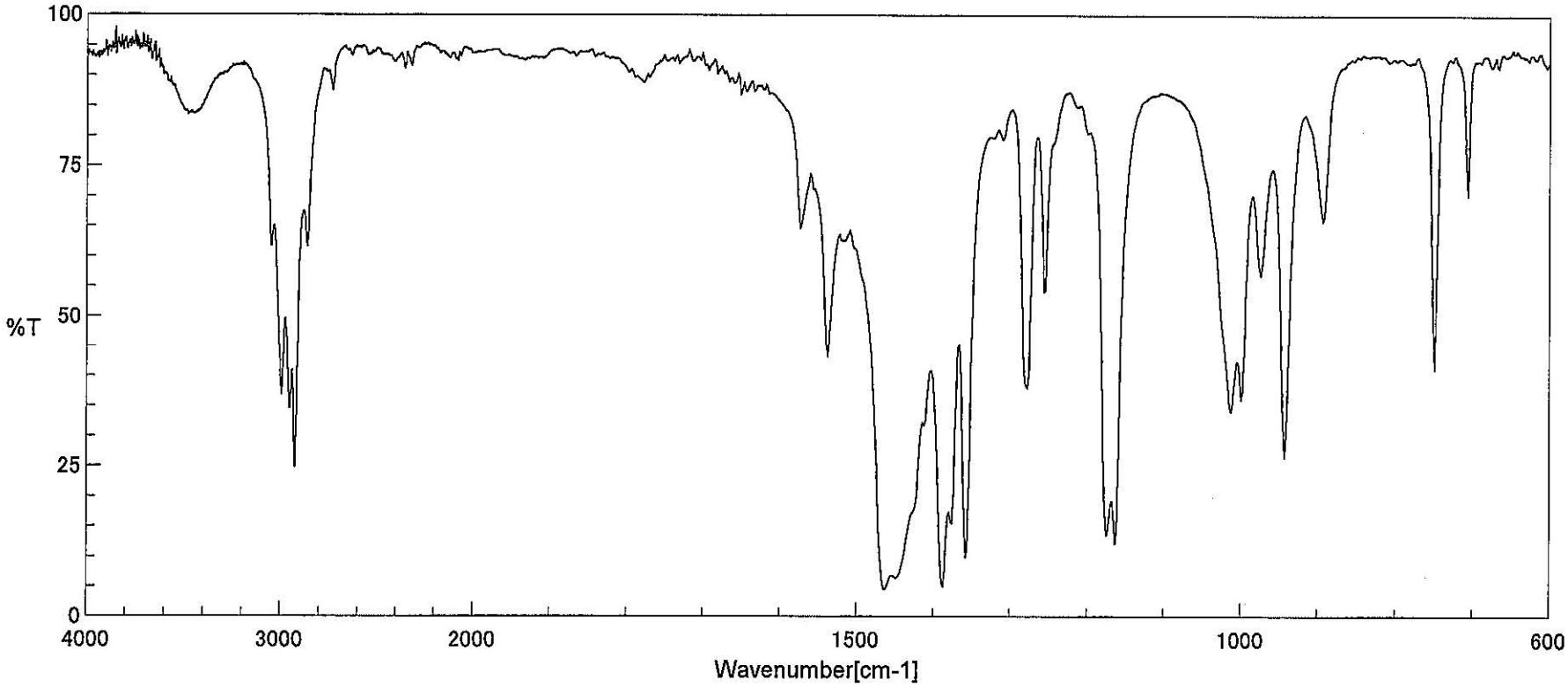
アミルアルコール


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

イソアミルアルコール


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

２，３，５－トリメチルピラジン



府食第２８９号
平成１７年３月１７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１６年１１月５日付け厚生労働省発食安第１１０５００１号をもって、貴省より当委員会に対し意見を求められたイソアミルアルコ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通知します。

なお、審議結果をまとめたものは、別添のとおりです。

記

イソアミルアルコールを食品の着香の目的で使用する場合、安全性に懸念はないと考えられる。

イソアミルアルコ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

イソアミルアルコールはラム酒又はウイスキー様の香気を有し、果実、野菜、乳製品、酒類等の食品に天然に含まれている成分である[1)]。欧米では、清涼飲料、キャンディー等、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．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、イソアミルアルコ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 16 年 11 月 5 日、関係書類を接受）。

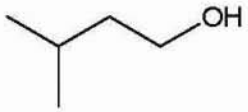
なお、香料については厚生労働省が示していた「食品添加物の指定及び使用基準改正に関する指針」には基づかず、「国際的に汎用されている香料の安全性評価の方法について」に基づき資料の整理が行われている。

３．名称等

名称：イソアミルアルコール

英名：Isoamyl alcohol, 3-Methylbutanol

構造式：



化学式：$C_5H_{12}O$

分子量：88.15

CAS 番号：123-51-3

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）において、S9mix の有無にかかわらず陰性であった[2)]。

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 0.90 mg/mL、±S9mix の 6 時間及び－S9mix の 24 時間連続処理）の結果は陰性であった[3)]。

ICR 雄マウスを用いた *in vivo* 小核試験（500、1,000、2,000 mg/kg 体重/日）において、小核の誘発は認められなかった[4)]。

標準的な組み合わせの遺伝毒性試験において全て陰性であることから、特段問題となる遺伝毒性はないものと考えられる。

(2) 反復投与

雌雄 Ash/CSE ラット（各群 15 匹）への強制経口投与による 17 週間反復投与試験（0、150、500、1,000 mg/kg 体重/日、溶媒：コーン油）において、高用量群の雄では有意な体重増加抑制が観察されたが、試験の全期間を通じては 10%未満の減少であった。血液検査、尿検査、臓器重量測定、病理組織学的検査において、投与における影響は認められなかった [5)]。著者らは、本試験における無毒性量（no-untoward-effect level）は 1,000 mg/kg 体重/日としているが、高用量群における体重増加抑制を考慮し、無毒性量（NOAEL）は 500 mg/kg 体重/日と考えられる。

雌雄 Wistar アルビノラット（各群 20 匹）への飲水投与による 53～56 週間反復投与試験（最大 2,000 mg/kg 体重/日）において、明らかな異常は認められなかった [6)]。

Wistar ラット（雌雄各 10 匹）への飲水投与による 90 日間反復投与試験（0、1,000、4,000、16,000 ppm）において、16,000 ppm 投与群の雄で赤血球数のわずかな増加並びに平均血球容積及び平均ヘモグロビン量のわずかな減少がみられた [7)]。4,000 ppm 投与群の雄で認められた赤血球数の変化は、その他の関連するパラメータの変動を伴うものではないことから、NOAEL は、雄で 4,000 ppm（295 mg/kg 体重/日）、雌で 16,000 ppm（1,431 mg/kg 体重/日）と考えられる。

(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。

なお、本物質に関しては、ラットへの経口投与試験（0.1 mL/kg (80 mg/kg 体重)、週 2 回）で悪性腫瘍の発生が報告されている場合もある [8), 9), 10)]が、発生部位が一定でなく散発的であり、定量・定性的にも不正確な試験であって、この物質の発がん性を評価するのに適した方法とは言えないとされている。

(4) 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 2,194 μg 及び 1,581 μg[11), 12)]。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 [13)]ことから、我が国での本物質の推定摂取量は、おおよそ 1,581 から 2,194 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 95 倍であるとの報告がある [14)]。

６．安全マージンの算出

90 日間反復投与試験の雄の NOAEL 295 mg/kg 体重/日と、想定される推定摂取量（1,581～2,194 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推定摂取量（0.0316～0.0439 mg/kg 体重/日）と比較し、安全マージン 6,720～9,335 が得られる。

７．構造クラスに基づく評価

本物質は速やかに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、1996 年にイソアミルアルコール及び関連エステル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（1,185～1,566 μg/ヒト/日*）は、クラスＩの摂取許容値（1,800 μg/ヒト/日）を下回ることから、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

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、生体内において特段問題となる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（6,720～9,335）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 を上回る。想定される推定摂取量（1,581～2,194 μg/ヒト/日）はクラスＩの摂取許容値（1,800 μg/ヒト/日）を上回る可能性がある。

１０．その他

本物質の代謝過程においては、アルコール脱水素酵素及びアルデヒド脱水素酵素（ALDH）が関与しており[11)]、特に ALDH については遺伝的多型性とアルコール代謝との関連が知られている[15)]。日本人では、ALDHⅡ型欠損のヒトが多いことが知られているが、別の酵素が補完的に働くことも報告されており、遺伝的な背景の違いを考慮しても、ヒトにおいて適応可能な代謝経路が存在すると考えられる。

１１．評価結果

イソアミルアルコールは、生体内において特段問題となる遺伝毒性はないと考えられる。本物質の想定される推定摂取量は、クラスＩの摂取許容値を超える可能性があるが、安全マージンは 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 を上回っていること、本物質は幅広い食品にもともと存在する成分であり、食事から日常的に摂取しているものと考えられ、その摂取量は意図的に添加される本物質の摂取量よりかなり多いと想定される情報もあること、並びにヒトにおいて明確な代謝経路が存在しており、体内で速やかに生体成分と同一物質に代謝されることなどから総合的に判断し、イソアミルアルコ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】

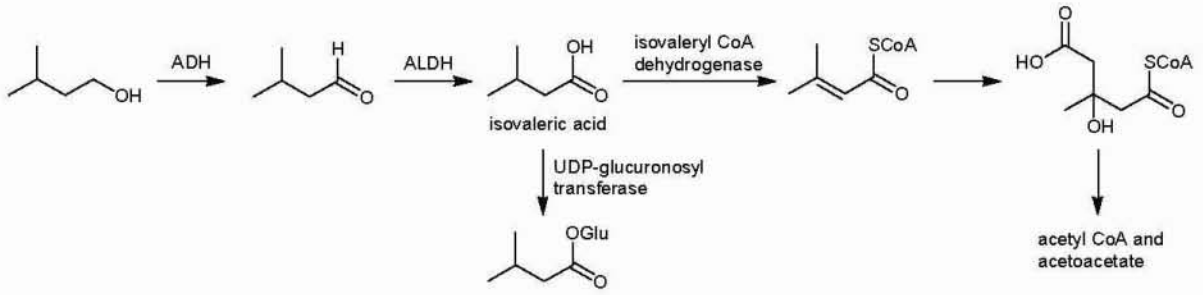
1) TNO (1996) Volatile compounds in food. Ed. By L.M.Nijssen et.al. 7th.ed. Index of compounds. TNO Nutrition and Food Research Institute. Zeist.

2) イソアミルアルコ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

一秦野研究所（厚生労働省委託試験）
3) イソアミルアルコ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）
4) イソアミルアルコ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）
5) Carpanini FMB, Gaunt IF, Kiss IS, Grasso P, Gangolli SD. Short-term toxicity of isoamyl alcohol in rats. *Fd Cosmet. Toxicol.* (1973) 11: 713-724.
6) Johannsen E, Purchase IFH. Kaffircorn malting and brewing studies. XXI: The effect of the fusel oils of Bantu beer on rat liver. *S. Afr. Med. J.* (1969) 43: 326-328.
7) Schilling K, Kayser M, Deckardt K, Kuttler K, Klimisch HJ. Subchronic toxicity studies of 3-methyl-1-butanol and 2-methyl-1-propanol in rats. *Hum. Exp. Toxicol.* (1997) 16: 722-726.
8) Gibel W, Lohs Kh, Wildner GP. Experimental study on carcinogenic activity of propanol-1, 2-methylpropanol-1, 3-methylbutanol-1. Arch. Geschwulstforsch. (1975) 45: 19-24.
9) Synder R. (ed.) Ethyl browning's toxicity and metabolism of industrial solvents. Second edition. Vol. 3 Alcohol and esters. New York, Elsevier, 125 (1992).
10) American conference of governmental industrial hygienists, Inc. Documentation of the threshold limit values and biological exposure indices. 6th ed. Vol. I, II, III. Cincinnati OH: ACGIH, 812 (1991).
11) 第 46 回 JECFA 資料、Drafted by FEMA, Unpublished.（非公表）
12) RIFM/FEMA database, Material information on isoamyl alcohol.（非公表）
13) 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
14) Stofberg J, Grundschober F. Consumption ratio and food predominance of flavoring materials. *Perf. Flav.* (1987) 12: 27-56.
15) Yoshida A, Huang I-Y, Ikawa M. Molecular abnormality of an inactive aldehyde dehydrrogenase variant commonly found in Orientals. *Proc. Natl. Acad. Aci. U. S. A.* (1984) 81: 258-261.

（参考）ほ乳類におけるイソアミルアルコールの代謝経路[11)]

イソアミルアルコールは速やかにイソ吉草酸（ヒトのロイシン代謝における中間代謝物）に酸化され、ロイシンの代謝経路及びトリカルボン酸回路（TCA サイクル）を経て、二酸化炭素に完全に代謝される。



ADH：アルコール脱水素酵素
ALDH：アルデヒド脱水素酵素
isovalenyl CoA dehydrogenase：吉草酸 CoA 脱水素酵素
UDP-glucuronosyl transferase：UDP グルクロノシルトランスフェラーゼ
Glu：グルクロン酸
acetyl CoA：アセチル CoA
acetoacetate：アセト酢酸

香料構造クラス分類（イソアミルアルコール）

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 / 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 → III
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 → 30

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