





使用量順	規格先	H12-SEQ	表示名	判断樹番号	含量(GC%)	含量(SC以外)	融点区分	融点又は凝固点(°C)	屈折率(20°C)	比重(20°C)	酸価	旋光度又は比旋光度(°)	重金属(μg/g)	確認試験 <sup>※2</sup>	
														IR	MS
545	JFFMA	2016	octanal propyleneglycol acetal	1	97				1.427-1.434	0.886-0.893	1	-		4	-
	流通		octanal propyleneglycol acetal		97.0				1.427-1.434	0.886-0.893	<1.0				
	流通		octanal propyleneglycol acetal		97.0				1.427-1.434	0.886-0.893	1.0				
	流通		octanal propyleneglycol acetal		97.0				1.427-1.434	0.886-0.893	1.0				
	流通		octanal propyleneglycol acetal		95				1.427-1.437	0.886-0.893	<1.0				
	流通		octanal propyleneglycol acetal		95				1.426-1.430 (25°C)	0.885-0.889 (25°C)					
	流通		octanal propyleneglycol acetal		>97.0				1.427-1.434	0.886-0.893	<1.0				
	流通		octanal propyleneglycol acetal		>97				1.427-1.434	0.886-0.893	<1.0				
	流通		octanal propyleneglycol acetal		>97				1.427-1.434	0.886-0.893	<1.0				

使用量順	規格先	H12-SEQ	表示名	判断樹番号	含量(GC%)	含量(GC以外)	融点区分	融点又は凝固点(°C)	屈折率(20°C)	比重(20°C)	酸価	旋光度又は比旋光度(°)(μg/g)	IR	確認試験 <sup>*2</sup>	NMR
548	JFEMA	719	epsilon-decalactone	1	98				1.458-1.465	0.976-0.982	3		1	4	—
	JECFA		epsilon-Decalactone		99				1.458-1.463	0.976					
	流通		epsilon-decalactone		98.0				1.458-1.465	0.976-0.982	3.0				
	流通		epsilon-decalactone		>98				1.458-1.465	0.976-0.982	<3.0				
	流通		epsilon-decalactone		>98				1.458-1.465	0.976-0.982	<3.0				
	流通		epsilon-decalactone												
	流通		epsilon-decalactone						1.459-1.463	0.9770-0.9810					

使用量順	規格先	H12-SEQ	表示名	判断標 番号	含量 (GC%)	含量 (GC以外)	融点 区分	融点又は 凝固点(°C)	屈折率 (20°C)	比重 (20°C)	酸価	旋光度又は 比旋光度(°)	重金属*1 (µg/g)	IR	MS	確認試験*2	NMR
551	JEFMA JECFA	219	benzyl cinnamate Benzyl cinnamate	11,19	98 98		SP SP	32-36 25			1 10		10	1,2,3,6	3,4		3,6
	FCC		Benzyl Cinnamate		98	GC(M-1b)	SP	33-35			1.0						
	流通		benzyl cinnamate		98.0	98.0		32-35			1.0						
	流通		benzyl cinnamate		98.0	98.0		32-35			1.0						
	流通		benzyl cinnamate		98.0	98.0		32-35			1.0						
	流通		benzyl cinnamate		98	98					<1.0						
	流通		benzyl cinnamate		98	98					<1						
	流通		benzyl cinnamate		98	98					1						
	流通		benzyl cinnamate		98	98					1						
	流通		benzyl cinnamate		98	98											
	流通		benzyl cinnamate		98	98											
	流通		benzyl cinnamate		98	98											
	流通		benzyl cinnamate		>98												
	流通		benzyl cinnamate														
	流通		benzyl cinnamate														
	流通		benzyl cinnamate														

## \*1 重金属規格設定基準

固体化合物において、最終精製法が蒸留法など重金属混入の懸念がない場合を除き、重金属の項目を規格項目として採用することとした。  
重金属規格設定を必要とする化合物については公定書の設定値である10µg/gを原則とする。

## \*2 参照スペクトルデータベース番号

- 1) FAO/WHO合同食品添加物専門家委員会 (Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additive; JECFA)
- 2) 米国食品化学物質規格集 (Food Chemicals Codex 5th Edition; FCC)
- 3) 有機化合物のスペクトルデータベース SDBS (独立行政法人産業技術総合研究所)
- 4) Wiley's Registry of Mass Spectral Database
- 5) NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library
- 6) Sigma-Aldrich カタログ

資料－5

日本香料工業会 自主規格 一覧

表示名	判断番号	含量 (GC%)	含量 (GC以外)	融点 区分	融点又は 凝固点(°C)	屈折率 (20°C)	比重 (20°C)	酸価	旋光度又は 比旋光度(°)	重金属 <sup>*)</sup> (µg/g)	確認試験 <sup>2)</sup>			使用量順	H12- SEQ
											IR	MS	NMR		
acetaldehyde dihexyl acetal	1	95				1.418-1.428	0.834-0.844	1			6	-	6	438	19
acetaldehyde ethyl cis-3-hexenyl acetal	3	98				1.419-1.430	0.848-0.856	2			1,3	4	3	376	25
acetanilide	10,18	97		MP	36-42					10	1,2,3,5,6	3,5	3,6	249	38
2-acetylfuran	10,18	95		SP	27-34					10	3,5	3,4,5	3	211	77
acetylpyrazine	10,18	99		MP	75-80					10	1,5,6	4,5	6	123	78
2-acetylpyrrole	10,18	97		MP	87-93					10	3,6	3,4,5	3,6	337	82
allyl cinnamate	3	97				1.564-1.570	1.053-1.059	1			1,3,6	3	3,6	286	99
amyl hexanoate	1	98				1.418-1.424	0.862-0.868	1			1,5	4,5	-	486	152
amyl isobutyrate	1	98				1.405-1.411	0.859-0.865	1			-	4,5	-	528	153
amyl isovalerate	1	98				1.411-1.417	0.857-0.863	1			1,3	3,5	3,6	261	156
amyl valerate	1	98				1.413-1.419	0.863-0.869	1			1,2,3,6	3	3	413	166
trans-anethole	4	98				1.557-1.563	0.981-0.991	1			1,2,3,6	3,4,5	3,6	13	175
anisaldehyde propyleneglycol acetal	1	95				1.516-1.526	1.113-1.123	1			-	4,5	-	529	184
anisyl acetate	1	97				1.511-1.517	1.107-1.113	1			1,3	3,4,5	3	324	187
anisyl alcohol	10,18	97		SP	23-27					10	1,2,3,6	3,4,5	3,6	132	189
benzyl cinnamate	11,19	98		SP	32-36					10	1,2,3,6	3,4	3,6	551	219
benzyl isobutyrate	1	97				1.488-1.492	1.004-1.010	1			1,2,6	-	-	407	227
benzyl isoeugenyl ether	12,20	95		MP	55-63					10	3	3,4	1	433	1384
benzyl isovalerate	1	98				1.482-1.490	0.987-0.993	1			-	4,5	-	414	229
benzyl phenylacetate	1	98				1.553-1.559	1.098-1.104	1			1,2,3,5	3,5	3	102	239
bornyl acetate	3	95				1.460-1.470	0.982-0.992	1			1,2	5	3	276	252
butanal diethyl acetal	1	98				1.394-1.400	0.827-0.833	1			-	4,5	-	542	259
3-butenyl isothiocyanate	4	97				1.520-1.526	0.990-0.996	1			-	4,5	-	153	264
butyl 10-undecenoate	3	98				1.439-1.445	0.871-0.877	1			1,5	5	-	505	315
butyl formate	1	95				1.385-1.395	0.889-0.899	1			1,3,5,6	3,4,5	3,6	357	286
butyl isobutyrate	1	97				1.400-1.406	0.861-0.867	1			1,2,3,5	3,4,5	3	469	289
butyl octanoate	1	98				1.422-1.428	0.862-0.868	1			3,5	4,5	3	519	302
butyl valerate	1	98				1.408-1.414	0.866-0.872	1			1,5,6	3,5	6	434	316
d-camphor	14,22	96		MP	174-182				+41 to +45	10	2,3,6	3,4,5	3,6	380	337
l-carveol	8	95				1.491-1.501	0.949-0.959		-135 to -118		-	4	-	509	342
caryll acetate	3	95				1.470-1.480	0.969-0.980	1			1,3,6	3,4	3,6	412	350
cinnamyl isobutyrate	3	96				1.519-1.529	1.005-1.015	3			1,2	4	-	300	366
cinnamyl isovalerate	3	95				1.514-1.524	0.989-0.999	1			1,3,5,6	3,5	3,6	459	387
cuminaldehyde	1	95				1.527-1.534	0.974-0.984	5			1,2,3	3,4,5	3,6	297	431
cyclotene	12,20	95		MP	104-108					20	3	3,4,5	3	31	475
beta-damascenone	4	98				1.508-1.514	0.944-0.952				1	4	-	346	482
damascenone	4	98				1.508-1.514	0.944-0.952				1	4	-	307	482
beta-damascone	4	90				1.493-1.503	0.933-0.943				1,3	3	3	423	484
2,4-decadienal	3	90				1.513-1.523	0.866-0.876	10			1,2	4	-	513	486
epsilon-decalactone	1	98				1.458-1.465	0.976-0.982	3			1	4	-	548	719
decanal diethyl acetal	1	95				1.439-1.449	0.834-0.844	1			-	4	-	484	492
decanal dimethyl acetal	1	95				1.420-1.430	0.845-0.855	1			1	4	-	356	493
decanoic acid	10,18		98	SP	29-35					10	1,3,6	3,4,5	3,6	32	495
2-decanone	2	95				1.421-1.431	0.821-0.831	1			-	4,5	-	437	1694
2-decen-5-olide	3	93				1.465-1.480	0.981-0.991	10			-	4,5	-	215	1495
9-decenoic acid	4	94				1.442-1.452	0.912-0.922				3	3,4	3	374	511
decyl acetate	1	95				1.423-1.433	0.861-0.871	1			1	4	-	480	519
diethyl tartarate	1	97				1.443-1.449	1.203-1.210	3			3,5,6	3,5	3,6	252	557
difurfuryl disulfide	2	95				1.582-1.600	1.230-1.250				3,6	3,4	3,6	128	559
dihydrocarvyl acetate	3	95				1.456-1.466	0.944-0.954	1			1,3,6	3,4,5	6	464	570

表示名	判断番号	含量(GC%)	含量(GC2H)	融点区分	融点又は凝固点(°C)	屈折率(20°C)	比重(20°C)	酸価	旋光度又は比旋光度(°)	重金属(μg/g)	確認試験 <sup>2)</sup>			使用量順	H12-SEQ
											IR	MS	NMR		
diisopropyl adipate	1	98				1.423-1.427	0.963-0.968	1			3	3,4,5	3	298	5000
3,4-dimethoxybenzaldehyde	9,17	95		MP	40-48			5		10	1,3,6	3,4,5	3,6	325	2491
2,6-dimethoxyphenol	10,18	95		MP	52-56					10	1,3,6	3,4	3,6	430	607
dimethyl succinate	1	98				1.418-1.422	1.119-1.125	1			1,3,5,6	3,5	3,6	262	624
2,5-dimethyl-4-hydroxy-3(2H)-furanone	12,20	98		MP	73-83					20	2,6	4,5	1,6	34	959
diphenyl ether	10,18	98		MP	26-30					10	2,3,6	4,5	1,6	492	680
dipropyl adipate	1	98				1.429-1.433	0.979-0.983	1			3,5	3,4,5	-	364	681
dodecanol	10,18	97		SP	23-27					10	1,2,3,5,6	3,5	3,6	270	700
dodecyl acetate	1	97				1.430-1.436	0.862-0.868	1			1,3,5,6	3,5	3,6	292	1458
dodecyl butyrate	1	98				1.433-1.438	0.857-0.862	1			5	5	-	525	708
estragole	4	97				1.518-1.524	0.963-0.971				2,3,5,6	3,4,5	3,6	321	721
2-ethoxy-5-(1-propenyl)phenol	12,20	97		MP	84-88					10	1,2,6	4	6	271	2497
ethyl 3-(methylthio)propionate	1	98				1.457-1.463	1.035-1.041	1			-	4	-	344	773
ethyl beta-methyl-beta-phenylglycidate	1	95				1.502-1.513	1.087-1.098	2			1,2,5,6	-	-	52	853
ethyl beta-naphthyl ether	10,18	98		MP	33-38					10	2,3,5	3,4,5	1,3	382	1915
ethyl beta-phenylglycidate	1	97				1.515-1.521	1.122-1.129	1			1,2,5,6	5	6	58	820
ethyl maltol	10,18	98		MP	89-93					10	3,6	3	1,3,6	2	850
ethyl palmitate	9,17	97		MP	23-28					10	1,3,5,6	3,5	3	74	862
ethyl stearate	9,17	97		MP	30-39					10	3,6	3,4,5	3	232	877
ethyl trans-2-decenoate	3	95				1.440-1.450	0.880-0.890	1			-	4,5	-	222	881
ethyl trans-2-hexenoate	3	98				1.430-1.438	0.898-0.905	1			1,5	4,5	-	351	882
5-ethyl-4-hydroxy-2-methyl-3(2H)-furanone	4	95				1.507-1.517	1.134-1.146				-	-	1	99	899
2-ethylhexanoic acid	2	97				1.422-1.428	0.904-0.912				3,6	3,4,5	3,6	418	919
ethylvanillin propylene glycol acetal	1	90				1.526-1.536	1.163-1.173		特例除外		-	-	-	213	938
eugenyl acetate	11,19	98				1.514-1.522	1.080-1.086	1			1,2,3	3,4,5	3	350	940
famesol	4	96				1.487-1.492	0.883-0.893				1,2,3,5,6	4,5	3,6	507	948
alpha-fenchyl alcohol	10,18	95		MP	35-45					10	1,2,3	3,4,5	3	530	954
fenchyl alcohol	10,18	95		MP	35-45					10	1,2,3	3,4,5	3	393	954
2-furannmethanethiol	2	95				1.526-1.536	1.120-1.135				3,6	3,4,5	1,3,6	199	976
furfuryl acetate	1	97				1.459-1.465	1.117-1.123	1			1,3,5,6	3,5	3,6	268	967
guaiaicol	10,18	95		MP	26-32	1.539-1.549	1.127-1.137				1,3,6	3,4,5	3,6	329	1017
heptanal dimethyl acetal	1	95				1.405-1.415	0.845-0.855	1			1	4	-	417	1034
heptanol	2	97				1.421-1.427	0.820-0.826	1			1,2,5,6	5	6	409	1041
hexanal diethyl acetal	1	95				1.404-1.414	0.829-0.839	1			-	4,5	-	59	1090
2-hexanone	2	96				1.396-1.406	0.808-0.818	1			3,5,6	3,4,5	3	375	297
trans-2-hexenal	3	95				1.440-1.451	0.840-0.854	10			3,6	3,4,5	1,6	12	1108
trans-2-hexenoic acid	12,20	95	98	MP	32-38					10	3,6	3,5	1,3,6	67	1121
cis-3-hexenol	4	95				1.436-1.446	0.845-0.855				3,6	3,4,5	3,6	8	1125
trans-2-hexenol	4	95				1.433-1.443	0.839-0.849				2,3,6	3,4,5	3,6	43	1127
trans-3-hexenol	4	98				1.437-1.442	0.830-0.860				3,6	3,4,5	3,6	345	1128
cis-3-hexenyl 2-methylbutyrate	3	95				1.429-1.439	0.876-0.886	1			3,5,6	3,4,5	3,5,6	410	1133
cis-3-hexenyl acetate	4	95				1.421-1.431	0.897-0.907	2			-	4,5	-	69	1141
trans-2-hexenyl acetate	3	95				1.422-1.432	0.893-0.903	1			1,2,3,6	3,5	3,6	51	1142
cis-3-hexenyl anthranilate	3	96				1.546-1.556	1.052-1.062	2			1	4	1	498	1148
cis-3-hexenyl benzoate	3	95				1.503-1.514	0.998-1.008	2			1,3,6	3,4	3	508	1149
cis-3-hexenyl butyrate	3	95				1.425-1.435	0.883-0.893	2			1,2,3,6	3,4	3,6	203	1151
trans-2-hexenyl butyrate	3	95				1.428-1.435	0.881-0.888	1			1,2	-	-	451	1152
cis-3-hexenyl formate	3	94				1.422-1.432	0.910-0.920	2			1	-	-	456	1159
cis-3-hexenyl hexanoate	3	95				1.432-1.442	0.875-0.885	2			1,3	3,4	3	164	1162
trans-2-hexenyl hexanoate	3	93				1.432-1.442	0.873-0.883	1			3	4,5	3	496	1164



表示名	判断番号	含量 (GC%)	含量 (GC以外)	融点 区分	融点又は 凝固点(°C)	屈折率 (20°C)	比重 (20°C)	酸価	旋光度又は 比旋光度(°)	重金属 (µg/g)	確認試験 <sup>2)</sup>			H12- SEQ	
											IR	MS	NMR		
cis-3-hexenyl isobutyrate	3	98				1.424-1.432	0.877-0.887	1			1.3	1.4	3	522	1167
cis-3-hexenyl isovalerate	3	95				1.427-1.437	0.873-0.883	2			3	3.4	3	367	1170
cis-3-hexenyl lactate	3	95				1.441-1.451	0.981-0.991	2			1.3,6	3.4	3	227	1172
cis-3-hexenyl propionate	3	95				1.424-1.434	0.891-0.901	2			1.3	3.4	1.3	363	1181
hexyl isovalerate	1	95				1.413-1.423	0.854-0.864	1			1.3,6	4	3	510	1208
hexyl propionate	1	97				1.411-1.417	0.868-0.874	1			1.3,6	3.5	3.6	275	1216
alpha-hexylcinnamaldehyde	3	95		MP	25-29	1.545-1.555	0.953-0.964	10		10	1.3	3	3	416	1223
3-hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanone	12,20	97				1.435-1.445	0.903-0.913	1			1	4	-	184	1250
hydroxycitronellal diethyl acetal	3	95				1.499-1.505	1.114-1.120	1			3.6	3.4,5	3.6	280	1268
2-hydroxyethanethiol	2	98									2.3,5,6	3.4,5	1.3,6	144	1541
indole	10,18	97	MP	51-54						10	1.2,3	3.4,5	3	299	1278
isoamyl cinnamate	3	96				1.531-1.541	0.992-1.002	1			1.5	5	-	411	1309
isoamyl octanoate	1	98				1.423-1.429	0.857-0.863	1			1.2,3,5	3.4,5	3.6	383	1315
isoamyl salicylate	1	98				1.504-1.509	1.051-1.057	1			1.2,3,5	3.4,5	3	334	1320
isoamyl valerate	1	98				1.413-1.419	0.860-0.866	1			-	4.5	-	334	1320
isobutanol diethyl acetal	1	97				1.391-1.397	0.822-0.828	1			3	3.5	3	278	1327
isobutyl 2-methylbutyrate	1	98				1.404-1.450	0.856-0.862	1			-	5	-	255	1329
isobutyl benzoate	1	98				1.490-1.496	0.997-1.003	1			1.3,5	3.4,5	3	360	1338
isobutyl butyrate	1	98				1.400-1.406	0.861-0.867	1			1.2,3,5	3.5	3.6	250	1340
isobutyl hexanoate	1	98				1.412-1.418	0.857-0.863	1			1.2,3,5	3.4,5	3	317	1347
isobutyl isovalerate	1	98				1.403-1.409	0.852-0.858	1			1.3,5	3.5	3	288	1350
isobutyl lactate	1	98				1.415-1.421	0.974-0.980	1			3	-	3	521	1351
isophorone	4	97				1.475-1.481	0.920-0.926	1			3.6	4.5	1.6	489	1397
isopropyl 2-methylbutyrate	1	98				1.395-1.401	0.851-0.857	1			1.6	-	-	267	1400
isopropyl butyrate	1	98				1.391-1.397	0.858-0.864	1			1.3,5	3.5	3.6	291	1404
isopropyl cinnamate	3	98				1.542-1.548	1.017-1.023	1			1.3,5,6	3.5	3.6	442	1405
isopropyl hexanoate	1	98				1.405-1.409	0.854-0.860	1			3	1.3,4	3	471	1410
isopropyl isobutyrate	1	95				1.384-1.394	0.844-0.854	1			1.3	4.5	3	515	1411
isopropyl propionate	1	98				1.384-1.390	0.863-0.869	1			2.3	3.4,5	3	361	1425
isovaleraldehyde diethyl acetal	1	95				1.395-1.403	0.825-0.832	1			-	4.5	-	279	1446
cis-jasmane	4	98				1.496-1.502	0.940-0.947	1			3.6	3.4,5	1.3,6	161	1453
lauric acid	10,18	98	98	SP	42-47					20	1.3,5,6	3.5	3.6	55	1457
levulinic acid	2		97			1.439-1.445	1.136-1.147				1.2,3,6	3.4,5	3.6	126	1462
linallyl butyrate	3	95				1.447-1.457	0.892-0.902	1			1	4	6	487	1478
d-8-p-menthene-1,2-epoxide	8	97				1.464-1.474	0.926-0.936		+65 to +80 -86 to -80		-	4.5	-	439	1468
3-(l-menthoxy)-1,2-propanediol	2	98				1.471-1.477	0.992-1.004				-	-	1	68	1515
2-mercaptopyrionic acid	2	95				1.477-1.487	1.194-1.204				2.3,5,6	3.4,5	3.6	408	1546
2-methoxy-3(5)-methylpyrazine	2	98				1.504-1.510	1.079-1.086				2	-	-	389	1557
1-methoxy-4-propylbenzene	2	98				1.503-1.506	0.941-0.947				1.2,5	5	-	253	2215
methyl 2-furoate	1	98				1.485-1.491	1.179-1.185	1			1.2,3,5,6	3.4,5	3.6	313	1586
methyl 3-hydroxyhexanoate	1	95				1.426-1.436	1.000-1.010	1			1	-	6	258	1605
methyl 3-nonenoate	3	95				1.432-1.442	0.890-0.900	1			1.6	4	6	520	1608
methyl beta-naphthyl ether	10,18	98		MP	70-75					10	-	5	-	473	1570/ 1916
methyl butanethioate	1	97				1.457-1.467	0.960-0.975	1			3.6	3.4,5	6	206	1634
methyl decanoate	1	98				1.423-1.429	0.872-0.878	1			3.6	3.4,5	3.6	477	1642
methyl ethyl ketone	1	98				1.376-1.382	0.803-0.810				2.3,6	3.4,5	3.6	117	1648
methyl jasmonate	3	95				1.470-1.477	1.022-1.033	2			6	-	1.6	281	1669
methyl N-acetylanthranilate	9,17	95		MP	96-103					10	-	-	1	405	1682
alpha-methyl naphthyl ketone	2	95				1.623-1.633	1.114-1.124				3.5	3.4,5	3.6	460	1684

表示名	判断樹 番号	含量 (GC%)	含量 (GC以外)	融点 区分	融点又は 凝固点(°C)	屈折率 (20°C)	比重 (20°C)	酸価	旋光度又は 比旋光度(°)	重金属 <sup>1)</sup> (μg/g)	確認試験 <sup>2)</sup>			使用量順	H12- SEQ
											IR	MS	NMR		
methyl palmitate	10,18	96		SP	26-29			1		10	3,5,6	3,5	3	402	1698
methyl trans-2-hexenoate	3	98				1.430-1.439	0.914-0.921	1				4,5		277	1587
methyl valerate	1	98				1.395-1.401	0.888-0.894	1			1,2,3,6	3,4,5	3,6	478	1726
2-methyl-1-phenyl-2-propanol	2	98				1.512-1.518	0.974-0.980				2,3,5	3,5	3	282	612
2-methyl-1-phenyl-2-propyl acetate	9,17	98		SP	28-36			1		10		4,5		151	660
3-methyl-2-butenyl acetate	3	98				1.428-1.434	0.916-0.922	1			3,6	3	6	398	2193
2-methyl-2-pentenoic acid	12,20	95		MP	24-28					10	1,2,3	3,4	3	202	1749
5-methyl-2-phenyl-2-hexenal	3	92				1.526-1.536	0.970-0.978	10			2,6	4	1,6	319	1750
4-methyl-5-thiazolethanol decanoate	1	98				1.486-1.492	1.012-1.018	1				4,5		204	2308
4-methyl-5-thiazolethanol isobutyrate	1	98				1.494-1.500	1.102-1.108	1			2		1	197	2312
2-methylpentanoic acid	2	95				1.411-1.417	0.921-0.931				6	4,5	6	425	1898
4-methylpentanoic acid	2	95				1.410-1.420	0.920-0.930				1,2,5,6	4,5	6	427	1899
2-methylundecanal	1	94				1.428-1.438	0.823-0.833	10			2,5,6	4,5	6	541	1895
myristic acid	12,20	98	98	SP	51-60					10	1,3,5,6	3,5	3,6	63	1907
myrtenol	4	93				1.490-1.500	0.976-0.986				1,3	3,4,5	1,3	465	1909
nonanal	1	95				1.418-1.428	0.819-0.831	10			1,2,3,6	3,4,5	3,6	131	1954
nonanal diethyl acetal	1	98				1.418-1.424	0.835-0.841	1			3,5	4,5	3	482	1955
nonanoic acid	2	97				1.428-1.435	0.903-0.910				1,3,5,6	3,4,5	3,6	304	1960
6-nonenol	4	94				1.444-1.454	0.844-0.854				1,2,3,5,6	4,5	3	488	1975
cis-6-nonenol	4	94				1.444-1.454	0.844-0.854				1,2,3,5,6	4,5	3	347	1975
nonyl acetate	1	97				1.421-1.427	0.866-0.872	1			1,2,3,5	4,5	3	540	1983
octahydro-2H-1-benzopyran-2-one	2	98				1.487-1.495	1.089-1.099						1	93	2009
octanal diethyl acetal	1	98				1.414-1.420	0.834-0.840	1				4		302	2013
octanal dimethyl acetal	1	95				1.412-1.422	0.845-0.855	3			1,3	3,4	3	366	2014
octanal propyleneglycol acetal	1	97				1.427-1.434	0.886-0.893	1				4		545	2016
2-octanone	2	95	98	SP	58-65	1.410-1.420	0.815-0.825				1,3,5,6	3,4,5	3,6	352	1659
palmitic acid	10,18									10	1,3,5,6	3,5	3,6	76	2073
2-pentadecanone	10,18	97		MP	32-42					10	1,3	3,4,5	3	241	2078
2,3-pentanedione	2	93				1.398-1.408	0.957-0.967				1,2,3,6	3,4,5	3,6	110	58
3-pentanone	2	98				1.389-1.395	0.814-0.820				3	3,4,5	3,6	426	2082
4-pentenoic acid	4	97				1.424-1.432	0.974-0.986				1,3	3,4,5	3,6	188	2085
phenethyl 2-methylbutyrate	1	95				1.481-1.489	0.976-0.986	2			6	4	1,6	503	2101
phenethyl butyrate	1	97				1.487-1.493	0.994-1.000	1			2,3,5,6	3,5	1,3,6	269	2106
phenethyl isovalerate	1	97				1.482-1.487	0.975-0.981	1			1,2	4	6	535	2115
phenethyl phenylacetate	9,17	98		SP	26-31			1		10	1,2,3	3,4,5	3	238	2120
4-phenyl-3-buten-2-one	12,20	96		MP	36-42					10	1,6	4	6	511	244
phenylacetic acid	10,18		98	MP	74-78					10	1,2	4,5	3,6	150	2152
3-phenylpropanol	2	98				1.523-1.529	1.000-1.006				1,2,3,5,6	3,4,5	3,6	369	579
3-phenylpropyl acetate	1	98				1.493-1.499	1.014-1.020	1			3	3	1,3	450	2160
3-phenylpropyl isobutyrate	1	98				1.483-1.489	0.978-0.983	1					1	453	2168
piperitone	4	95				1.480-1.490	0.925-0.935				1		1	113	2183
piperonal propyleneglycol acetal	1	95				1.528-1.538	1.231-1.241	1			1	4,5		256	1022
piperonyl acetate	1	97				1.523-1.529	1.237-1.243	1				5		256	1022
propanal diethyl acetal	1	95				1.385-1.395	0.824-0.834	1			1	4		315	2186
propyl hexanoate	1	95				1.408-1.418	0.864-0.874	1			3,6	3,4,5	6	342	2200
propyl isobutyrate	1	98				1.393-1.399	0.863-0.869	1			1,5	4,5		309	2227
propyleneglycol diacetate	1	96				1.412-1.416	1.055-1.060	1			3	3,4,5	3	385	2228
pyruvic acid	2	96				1.424-1.434	1.260-1.290	1			5	4,5		354	2245
raspberry ketone	12,20	98		MP	80-85					10	1,3,5,6	3,4,5	3	263	2267
stearic acid	10,18		98	MP	65-73					10	1,2,5,6	5	6	54	2268
										10	1,3	3,4,5	3	134	2296

表示名	判断樹 番号	含量 (GC%)	含量 (GC以外)	融点 区分	融点又は 凝固点(°C)	屈折率 (20°C)	比重 (20°C)	酸価	旋光度又は 比旋光度(°)	重金属 <sup>*1</sup> ( $\mu\text{g/g}$ )	確認試験 <sup>*2</sup>			使用量 <sup>順</sup>	H12- SEQ
											IR	MS	NMR		
styralyl butyrate	1	98				1.484-1.490	0.989-0.995	1				6	406	2299	
styralyl isobutyrate	1	98				1.480-1.486	0.981-0.987	1					301	2302	
styralyl propionate	1	98				1.487-1.494	1.007-1.013	6				6	359	2304	
alpha-terpineol	4	96				1.478-1.488	0.930-0.941	1,3,5				3,6	259	2321	
thymol	10,18	98		MP	48-52			2,3,5		10		3	219	2390	
tiglic acid	11,19	98		MP	61-65			3,6		10		3,6	289	2392	
2-tridecanone	10,18	97		MP	25-31			1,3,5,6		10		3,6	138	1724	
triethyl citrate	1	98				1.439-1.445	1.138-1.145	1,3,6				3,4,5	9	2415	
triethyleneglycol diacetate	1	98				1.435-1.441	1.115-1.121	3				3,4,5	3	458	
valeraldehyde diethyl acetal	1	98				1.401-1.407	0.829-0.835	1				4,5	290	2479	
valeraldehyde propyleneglycol acetal	1	98				1.415-1.420	0.900-0.906	1				4	537	2482	
gamma-valerolactone	1	95				1.429-1.439	1.051-1.061	3				1,2,3,6	327	2486	
vanillin acetate	9,17	98		MP	75-80			1,5,6		10		5	60	59	
vanillin propyleneglycol acetal	1	94				1.536-1.546	1.205-1.215	1				4	146	2492	

## \* 1 重金属規格設定基準

固体化合物において、最終精製法が蒸留法など重金属混入の懸念がない場合を除き、重金属の項目を規格項目として採用することとした。  
重金属規格設定を必要とする化合物については公定書の設定値である $10\mu\text{g/g}$ を原則とする。

## \* 2 参照スペクトルデータベース番号

- 1) FAO/WHO 合同食品添加物専門家委員会 (Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additive; JECFA)
- 2) 米國食品化学物質規格集 (Food Chemicals Codex 5th Edition; FCC)
- 3) 有機化合物のスペクトルデータベース SDBS (独立行政法人産業技術総合研究所)
- 4) Wiley's Registry of Mass spectral Database
- 5) NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library
- 6) Sigma-Aldrich カタログ

資料一 6

平成 17 年度作成  
日本香料工業会  
食品香料化合物参考規格集

昨年度自主規格を設定した 129 品目については、構造式、分子量、CAS 登録番号など化合物の特定に関する情報および、JECFA, FCC の規格設定状況および FEMA 番号、JECFA 番号などの規制情報を加え、参考規格集として日本香料工業会のホームページで開示した。以下にそのコピーを記載する。

#### 日本香料工業会 食品香料化合物参考規格集の公開に際して

本規格は、一般消費者、香料研究開発者、香料化合物取引業者等に広くご利用頂く目的で公開するものです。

本規格は、日本香料工業会が会員へアンケート調査した「現在日本で流通し使用している化合物の規格値」を基に最大公約数としてまとめたもので、公定書規格のような規制を目的とした規格ではありません。従いまして市場には公開化合物と同一名称のものであっても参考規格と異なった規格値で流通しているものもあることとお断りしておきます。

なお、公開化合物は今回を初めとして順次追加する予定であります。

#### 確認試験の参照文献番号

- 1) FAO/WHO 合同食品添加物専門家委員会 (Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additive; JECFA)  
[http://apps3.fao.org/jecfa/flav\\_agents/flavag-q.jsp?SNAME=P](http://apps3.fao.org/jecfa/flav_agents/flavag-q.jsp?SNAME=P)
- 2) 米国食品化学物質規格集 (Food Chemicals Codex 5th Edition; FCC)
- 3) 有機化合物のスペクトルデータベース SDBS (独立行政法人産業技術総合研究所)  
[http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/cgi-bin/cre\\_index.cgi](http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/cgi-bin/cre_index.cgi)
- 4) Wiley's Registry of Mass Spectral Database
- 5) NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library <http://webbook.nist.gov/>
- 6) Sigma-Aldrich <http://www.sigma-aldrich.co.jp/>

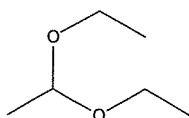
# Acetaldehyde diethyl acetal

アセトアルデヒド ジエチル アセタール

化学式 C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>O<sub>2</sub>

分子量 118.18

CAS No. 105-57-7



SEQ No. 17 エーテル類

FEMA No. 2002

JECFA No. 941

規格項目	JFFMA自主規格	参考1:JECFA規格	参考2:FCC規格
登録名称	Acetaldehyde diethyl acetal	Acetal	Acetaldehyde Diethyl Acetal
含量	95.0 % 以上(GC法)	min. 95 %	min. 97.0 % GC(M-1b)
比重	0.823-0.833 (d <sub>20</sub> /20)	0.822-0.831 (d <sub>25</sub> /25)	0.821-0.827 (d <sub>25</sub> /25)
屈折率	1.377-1.387 (n <sub>20D</sub> )	1.378-1.386 (n <sub>20D</sub> )	1.379-1.384 (n <sub>20D</sub> )
酸価	1.0 以下	max. 1.0	
溶状		Solubility in ethanol : miscible	1 ml in 1ml 95% ethanol
確認試験	IR :1,2,3,6 MS :3,4,5 NMR :3,6	ID Test : IR	ID Test: IR

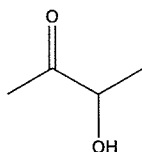
# Acetoin

## アセトイン

化学式 C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>

分子量 88.11

CAS No. 513-86-0



SEQ No. 40 ケトン類

FEMA No. 2008

JECFA No. 405

規格項目	JFFMA自主規格	参考1:JECFA規格	参考2:FCC規格
登録名称	Acetoin	Acetoin	Acetoin(monomer)
含量	95.0 % 以上(GC法)	min. 96.0 %	min. 96.0 % GC(M-1b)
比重	0.997-1.014 (d20/20)	1.005-1.019 (d25/25)	0.995-1.019 (d25/25)
屈折率	1.414-1.424 (n20D)	1.417-1.420 (n20D)	1.417-1.422 (n20D)
確認試験	IR : 1,2,3 MS : 3,4,5 NMR : 3	ID Test : IR	ID Test: IR

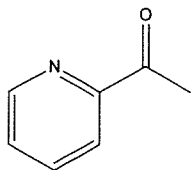
## 2-Acetylpyridine

### 2-アセチルピリジン

化学式 C<sub>7</sub>H<sub>7</sub>NO

分子量 121.14

CAS No. 1122-62-9



SEQ No. 79 ケトン類

FEMA No. 3251

JECFA No. 1309

規格項目	JFFMA自主規格	参考1:JECFA規格	参考2:FCC規格
登録名称	2-Acetylpyridine	2-Acetylpyridine	
含量	95.0 % 以上(GC法)	min. 97 %	
比重	1.078-1.088 (d <sub>20</sub> /20)	1.077-1.084 (d <sub>25</sub> /25)	
屈折率	1.515-1.525 (n <sub>20D</sub> )	1.518-1.524 (n <sub>20D</sub> )	
酸価		max. 1	
溶状		Solubility in ethanol : Soluble	
確認試験	IR :3 MS :3,4,5 NMR :1,3,6	ID Test : NMR	



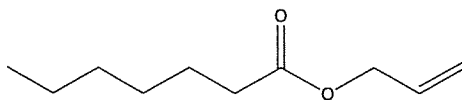
# Allyl heptanoate

## アリル ヘプタノエート

化学式 C<sub>10</sub>H<sub>18</sub>O<sub>2</sub>

分子量 170.25

CAS No. 142-19-8



SEQ No. 106 エステル類

FEMA No. 2031

JECFA No. 4

規格項目	JFFMA自主規格	参考1:JECFA規格	参考2:FCC規格
登録名称	Allyl heptanoate	Allyl heptanoate	Allyl Heptanoate
含量	97.0 % 以上(GC法)	min. 97.0 %	min. 97.0 % GC(M-1b)
比重	0.882-0.888 (d20/20)	0.880-0.885 (d25/25)	0.880-0.885 (d25/25)
屈折率	1.426-1.432 (n20D)	1.426-1.430 (n20D)	1.426-1.430 (n20D)
酸価	1.0 以下	max. 1.0	max. 1.0
溶状		Solubility in ethanol : 1ml in 1ml 95% ethanol	1 mL in 1 mL 95% alc
備考		Allyl alcohol 0.1% max	Allyl Alcohol 0.1% /GC(M-1b)
確認試験	IR : 1,2,5 MS : 4,5 NMR :-	ID Test : IR	ID Test: IR

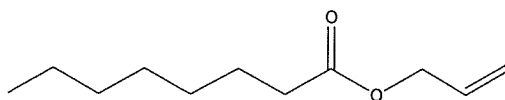
# Allyl octanoate

アリル オクタノエート

化学式 C<sub>11</sub>H<sub>20</sub>O<sub>2</sub>

分子量 184.28

CAS No. 4230-97-1



SEQ No. 119 エステル類

FEMA No. 2037

JECFA No. 5

規格項目	JFFMA自主規格	参考1:JECFA規格	参考2:FCC規格
登録名称	Allyl octanoate	Allyl octanoate	
含量	98.0 % 以上(GC法)	min. 97.0 %	
比重	0.880-0.886 (d20/20)	0.872-0.880 (d25/25)	
屈折率	1.429-1.435 (n20D)	1.432-1.434 (n20D)	
酸価	1.0 以下		

確認試験	IR :1 MS :- NMR :-	ID Test : IR
------	--------------------------	--------------

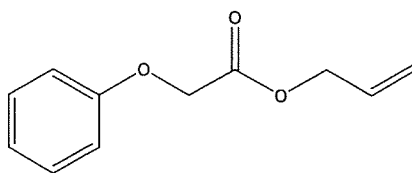
# Allyl phenoxyacetate

アリル フェノキシアセート

化学式 C<sub>11</sub>H<sub>12</sub>O<sub>3</sub>

分子量 192.21

CAS No. 7493-74-5



SEQ No. 120 エステル類

FEMA No. 2038

JECFA No. 18

規格項目	JFFMA自主規格	参考1:JECFA規格	参考2:FCC規格
登録名称	Allyl phenoxyacetate	Allyl phenoxyacetate	Allyl Phenoxy Acetate
含量	98.0 % 以上(GC法)	min. 97.5 %	min. 97.0 % GC(M-1b)
比重	1.105-1.111 (d <sub>20</sub> /20)	1.00-1.11 (d <sub>25</sub> /25)	1.100-1.105 (d <sub>25</sub> /25)
屈折率	1.513-1.519 (n <sub>20D</sub> )	1.512-1.519 (n <sub>20D</sub> )	1.513-1.518 (n <sub>20D</sub> )
酸価	1.0 以下	max. 1.0	max. 1.0
溶状			1 mL in 1 mL 95% ethanol
確認試験	IR :1,6 MS :4,5 NMR :-	ID Test : IR	ID Test: IR

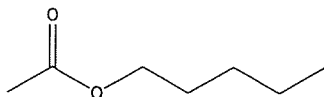
# Amyl acetate

## アミル アセテート

化学式 C<sub>7</sub>H<sub>14</sub>O<sub>2</sub>

分子量 130.19

CAS No. 628-63-7



SEQ No. 141 エステル類

FEMA No.

JECFA No.

規格項目	JFFMA自主規格	参考1:JECFA規格	参考2:FCC規格
登録名称	Amyl acetate		
含量	98.0 % 以上(GC法)		
比重	0.875-0.881 (d <sub>20</sub> /20)		
屈折率	1.400-1.406 (n <sub>20D</sub> )		
酸価	1.0 以下		

確認試験	IR :- MS :4,5 NMR :-
------	----------------------------