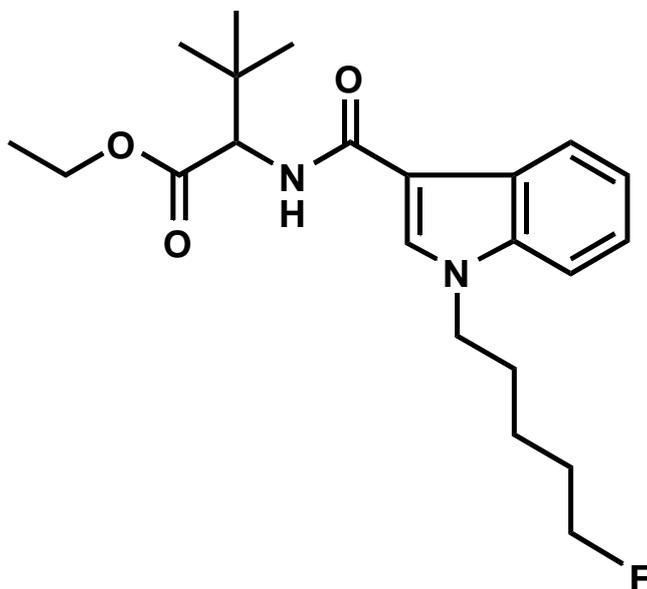


資料1 指定薬物の化学構造等

令和4年3月7日公布の省令(令和4年厚生労働省令第34号)により新たに指定された6物質の化学構造等は次のとおりである。

物質1

構造式:



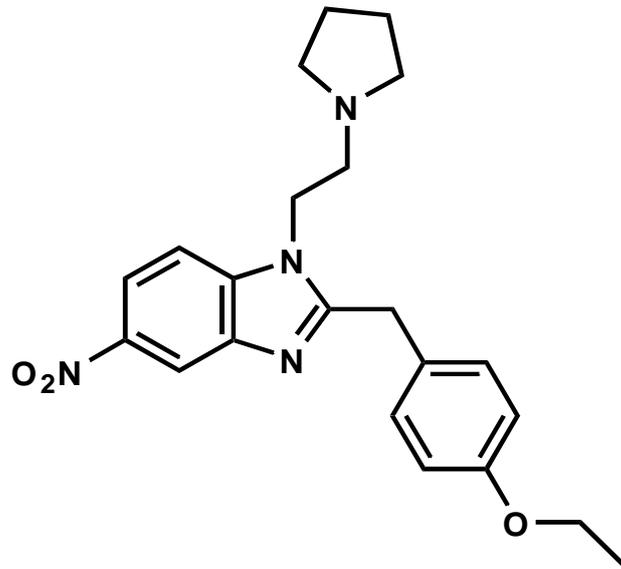
化学名: Ethyl 2-[1-(5-fluoropentyl)-1*H*-indole-3-carboxamido]-3,3-dimethylbutanoate

化学名字訳: エチル=2-[1-(5-フルオロペンチル)-1*H*-インドール-3-カルボキサミド]-3,3-ジメチルブタノアート

通称等: 5F-EDMB-PICA

物質2

構造式:



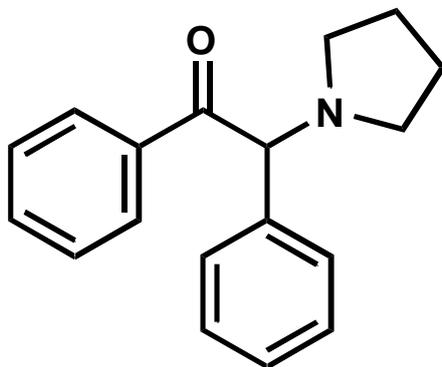
化学名:2-(4-Ethoxybenzyl)-5-nitro-1-[2-(pyrrolidin-1-yl)ethyl]benzimidazole

化学名字訳:2-(4-エトキシベンジル)-5-ニトロ-1-[2-(ピロリジン-1-イル)エチル]ベンズイミダゾール

通称等:Etonitazepyne, N-Pyrrolidino Etonitazene

物質3

構造式:



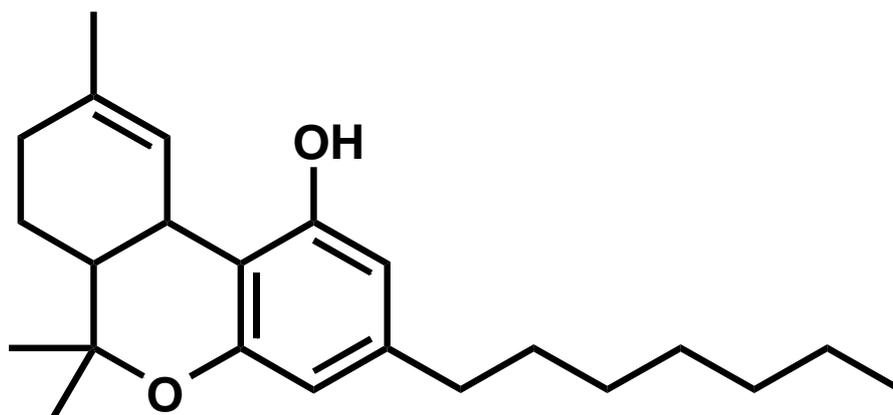
化学名: 1,2-Diphenyl-2-(pyrrolidin-1-yl)ethan-1-one

化学名字訳: 1, 2-ジフェニル-2-(ピロリジン-1-イル)エタン-1-オン

通称等: α -D2PV, A-D2PV

物質4

構造式:



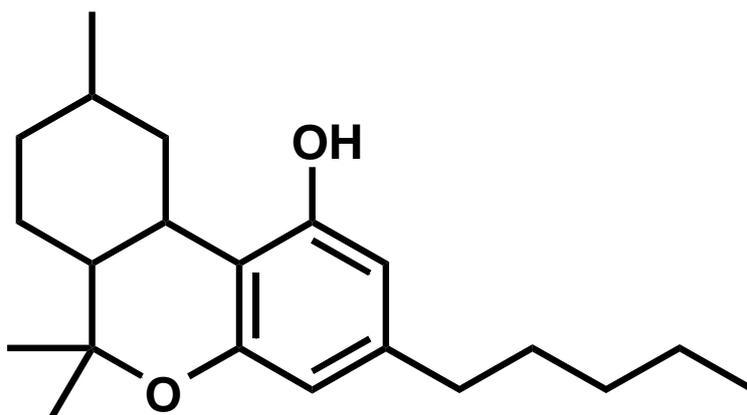
化学名:6a,7,8,10a-Tetrahydro-6,6,9-trimethyl-3-heptyl-6*H*-dibenzo[*b,d*]pyran-1-ol

化学名字訳:6a, 7, 8, 10a-テトラヒドロ-6, 6, 9-トリメチル-3-ヘプチル-6*H*-ジベンゾ[*b, d*]ピラン-1-オール

通称等 :テトラヒドロカンナビフォロール, Δ9-THCP, THC-Heptyl

物質5

構造式:



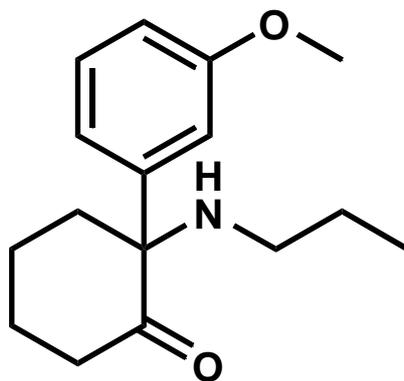
化学名:6a,7,8,9,10,10a-Hexahydro-6,6,9-trimethyl-3-pentyl-6*H*-dibenzo[*b,d*]pyran-1-ol

化学名字訳:6a, 7, 8, 9, 10, 10a-ヘキサヒドロ-6, 6, 9-トリメチル-3-ペンチル-6*H*-ジベンゾ[*b, d*]ピラン-1-オール

通称等:Hexahydrocannabinol, ヘキサヒドロカンナビノール, HHC

物質6

構造式:



化学名: 2-(3-Methoxyphenyl)-2-(propylamino)cyclohexanone

化学名字訳: 2-(3-メトキシフェニル)-2-(プロピルアミノ)シクロヘキサノン

通称等: Methoxpropamine, MXPr, 3-MeO-2'-oxo-PCPr

参考資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 4 年 3 月 7 日公布の 6 物質追加省令により、新たに指定薬物として指定された 6 物質(メタノール溶液、アセトニトリル溶液、エタノール溶液)の GC-MS 及び LC-PDA-MS による測定結果を以下に示す。

①測定条件

GC-MS

条件 1(監視指導・麻薬対策課長通知薬食監麻発第 0521002 号と同法)

カラム:HP-1MS(30 m × 0.25 mm i.d., 膜厚 0.25 µm, Agilent 社製)

キャリアーガス:He, 0.7 mL/min

注入口温度:200°C、スプリットレス、トランスファーライン温度:280°C、イオン化法:EI 法

カラム温度:80°C (1 min hold)－5°C/min－190°C (15 min hold)－10°C/min－310°C (10min hold)

条件 2(合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

カラム:HP-1MS(30 m × 0.25 mm i.d., 膜厚 0.25 µm, Agilent 社製)

キャリアーガス:He, 1.1 mL/min

注入口温度:250°C、スプリットレスまたはスプリット 10:1、トランスファーライン温度:280°C、イオン化法:EI 法

カラム温度:200°C (1 min hold)－5°C/min－310°C (7 min hold)

HPLC-PDA-MS

条件 1(監視指導・麻薬対策課長通知薬食監麻発第 0521002 号と同法)

カラム:Atlantis T3(2.1 × 150 mm, 5 µm, Waters 社製)

移動相 A:10 mM ギ酸アンモニウム緩衝液(pH 3.0)、移動相 B:アセトニトリル

A:B 90:10(0 min)－80:20(50 min)－30:70(60 min, 15 min hold)

流速:0.3 mL/min、カラム温度:40°C、注入量:1 µL

検出:ダイオードアレイ検出器(210 - 450 nm)及び質量検出器

質量分析条件

イオン化法:ESI 法、ポジティブモード、コーン電圧:30V、キャピラリー電圧:2500V

条件 2(合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

カラム:XBridge C18(2.1 × 150 mm, 3.5 µm, Waters 社製)

移動相 A:0.1% ギ酸、移動相 B:0.1% ギ酸 アセトニトリル/メタノール(60:40)

A:B 50:50(0 min)－10:90(30 min, 5 min hold)

流速:0.3 mL/min、カラム温度:40°C、注入量:1 µL

検出:ダイオードアレイ検出器(210 - 450 nm)及び質量検出器

質量分析条件

イオン化法:ESI 法、ポジティブモード、コーン電圧:30V、キャピラリー電圧:2500V

②測定結果

各測定条件における新規指定薬物 6 物質の保持時間及び 5-MeO-DMT 又は吉草酸ベタメタゾンの保持時間を 1 とした場合の相対保持時間を下記に示す。

測定条件1 (監視指導・麻薬対策課長通知薬食監麻発第 0521002 号と同法)

Compounds	GC-MS 条件 1		LC-PDA-MS 条件 1	
	Retention time (min)	Relative retention time 5-MeO-DMT = 1	Retention time (min)	Relative retention time 5-MeO-DMT = 1
Methoxpropamine	27.48	0.98	24.1	2.98
Etonitazepyne	55.65	1.98	53.7	6.67
α -D2PV	32.27	1.15	29.1	3.61
HHC*	[44.91	1.60	—	—
	45.13	1.61	—	—
Δ 9-THCP [参考値]	48.36	1.72	—	—
5F-EDMB-PICA**	48.84	1.74	62.0	7.70
5-MeO-DMT	28.08	1.00	8.1	1.00

*今回分析に使用した HHC の分析用標品 (CBD より合成) では、クロマト上で立体異性体のピークが 2 つ観測される。

** メタノール溶液で GC-MS を測定すると一部 5F-MDMB-PICA となって検出される。エタノール溶液では 5F-EDMB-PICA として検出される。

測定条件2 (合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

Compounds	GC-MS 条件 2		LC-PDA-MS 条件 2	
	Retention time (min)	Relative retention time 5-MeO-DMT = 1	Retention time (min)	Relative retention time 吉草酸ベタメタゾン = 1
HHC*	[10.43	2.13	24.7	2.74
	10.61	2.17	24.4	2.70
Δ 9-THCP	14.47	2.96	27.6	3.06
5F-EDMB-PICA** [参考値]	17.51	3.58	12.5	1.39
Etonitazepyne	24.89	5.90	—	—
5-MeO-DMT	4.89	1.00	—	—
吉草酸ベタメタゾン	—	—	9.0	1.00

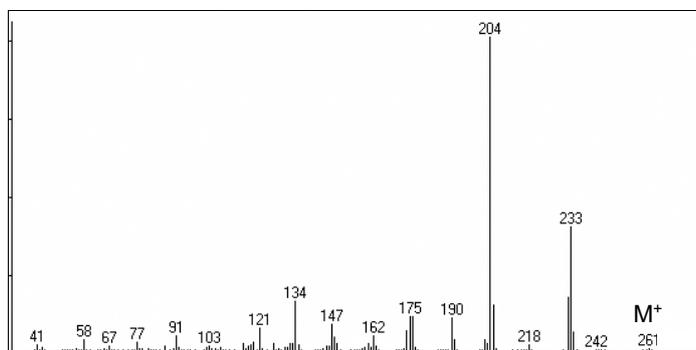
*今回分析に使用した HHC の分析用標品 (CBD より合成) では、クロマト上で立体異性体のピークが 2 つ観測される。

** メタノール溶液で GC-MS を測定すると一部 5F-MDMB-PICA となって検出される。エタノール溶液では 5F-EDMB-PICA として検出される。

③各物質の GC-MS 及び LC-PDA-MS 測定におけるスペクトルデータ

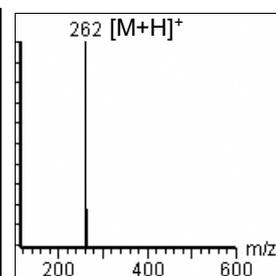
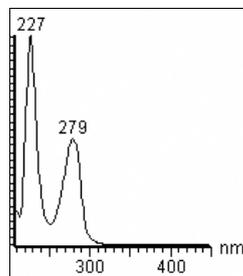
1) Methoxpropamine

GC-MS



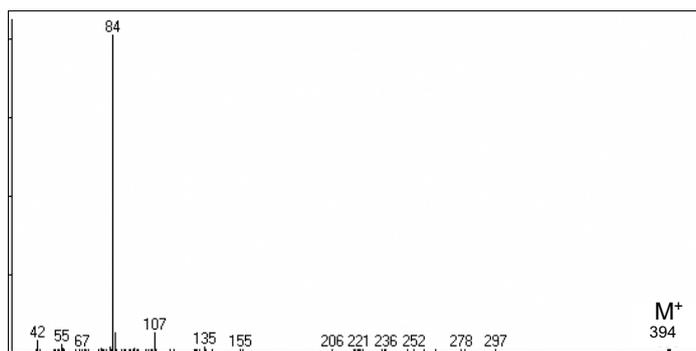
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



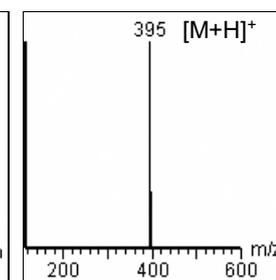
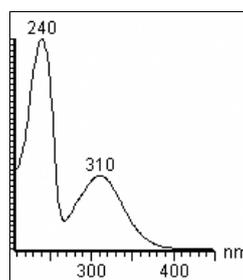
2) Etonitazepine

GC-MS



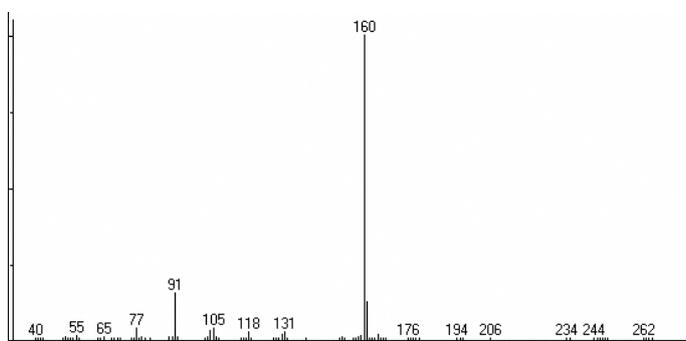
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



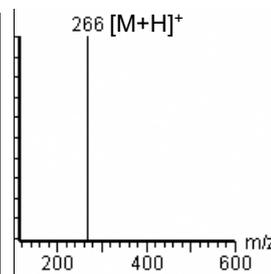
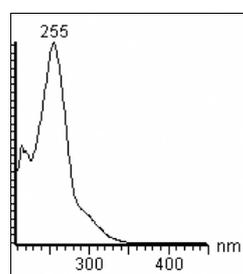
3) α-D2PV

GC-MS



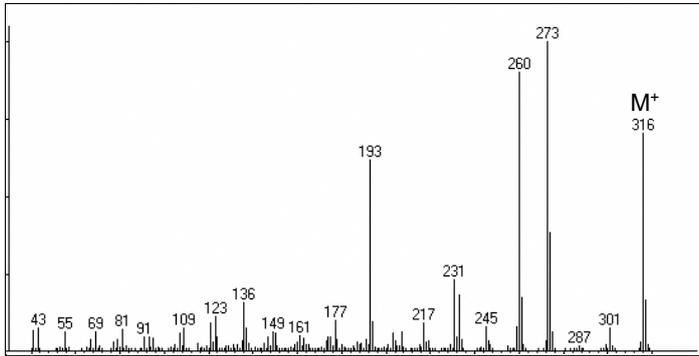
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



4) HHC

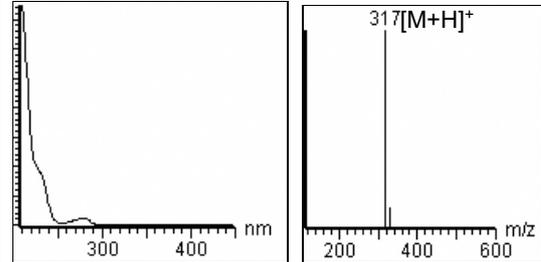
GC-MS
44.91 min



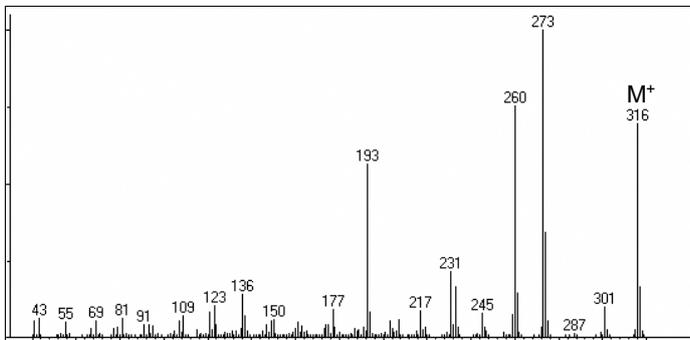
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

24.7 min



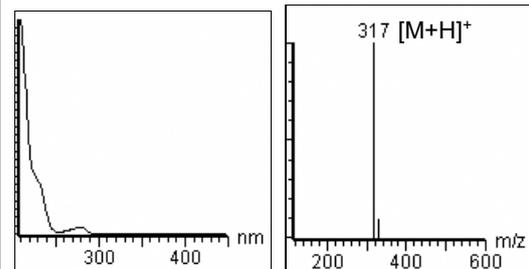
GC-MS
45.13 min



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

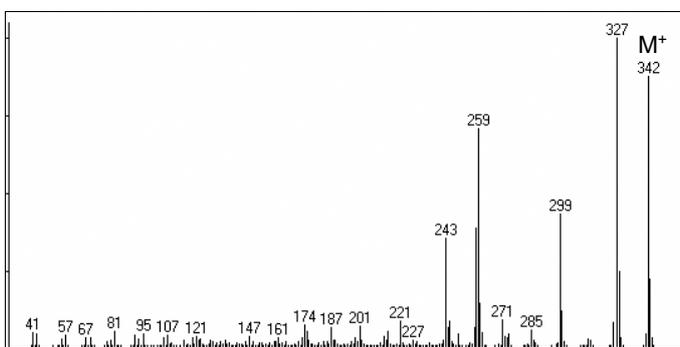
24.4 min



今回分析に使用した HHC の分析用標品 (CBD より合成) では、クロマト上で立体異性体のピークが 2 つ観測される。

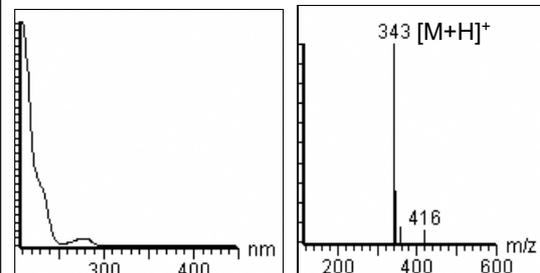
5) Δ9-THCP

GC-MS



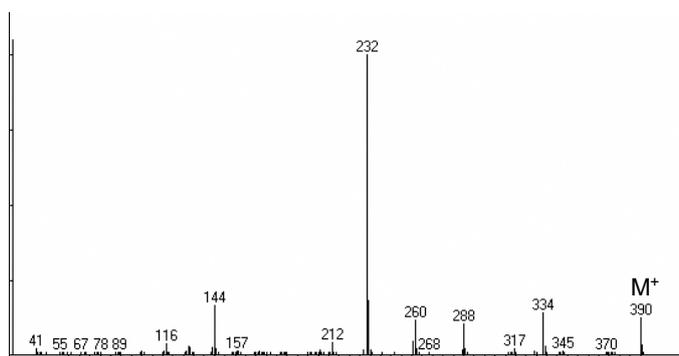
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



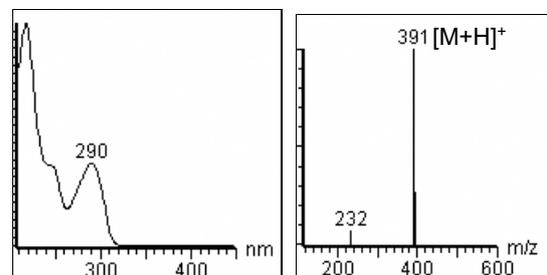
6) 5F-EDMB-PICA

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



メタノール溶液で GC-MS を測定すると一部 5F-MDMB-PICA となって検出される. エタノール溶液では 5F-EDMB-PICA として検出される.