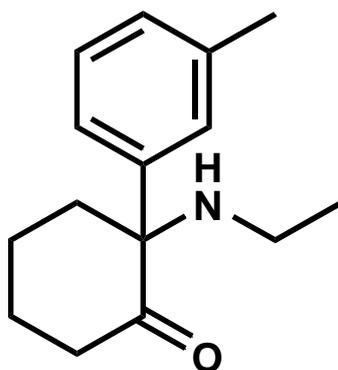


資料1 指定薬物の化学構造等

令和4年6月28日公布の省令(令和4年厚生労働省令第98号)により新たに指定された3物質の化学構造等は次のとおりである。

物質1

構造式:



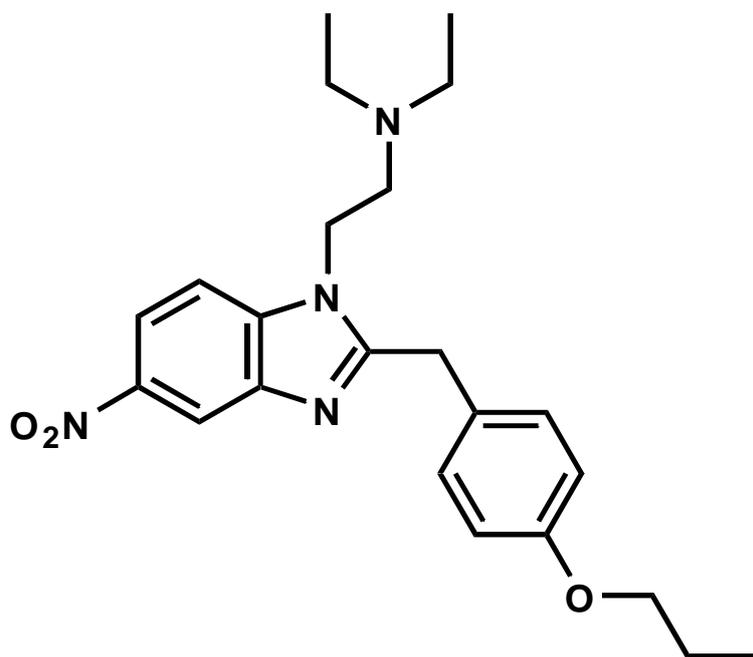
化学名:2-(Ethylamino)-2-(3-methylphenyl)cyclohexanone

化学名字訳:2-(エチルアミノ)-2-(3-メチルフェニル)シクロヘキサノン

通称等:DMXE、Deoxymethoxetamine、3'-methyl-2-oxo-PCE、3D-MXE

物質2

構造式:



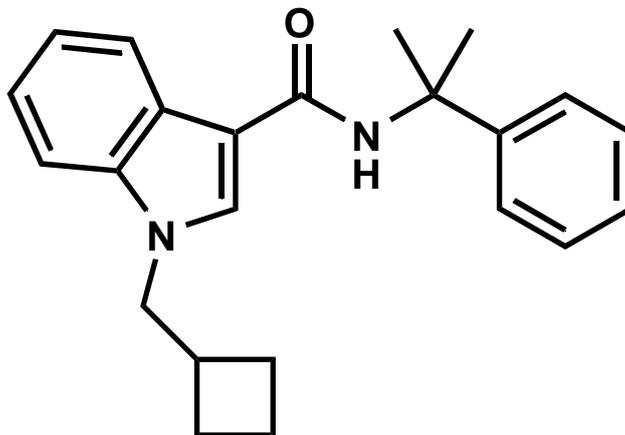
化学名:1-(2-Diethylamino)ethyl-5-nitro-2-(4-propoxybenzyl)benzimidazole

化学名字訳:1-(2-ジエチルアミノ)エチル-5-ニトロ-2-(4-プロポキシベンジル)ベンズイミダゾール

通称等:Protonitazene

物質3

構造式:



化学名:1-(Cyclobutylmethyl)-*N*-(2-phenylpropan-2-yl)-1*H*-indole-3-carboxamide

化学名字訳:1-(シクロブチルメチル)-*N*-(2-フェニルプロパン-2-イル)-1*H*-インドール-3-カルボキサミド

通称等:CUMYL-CBMICA

参考資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 4 年 6 月 28 日公布の 3 物質追加省令により、新たに指定薬物として指定された 3 物質(メタノール溶液、アセトニトリル溶液)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、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 3 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
DMXE	22.76	0.81	20.4	2.57
Protonitazene [参考値]	54.93	1.96	55.8	7.02
CUMYL-CBMICA	51.48	1.83	62.5	7.86
5-MeO-DMT	28.08	1.00	8.0	1.00

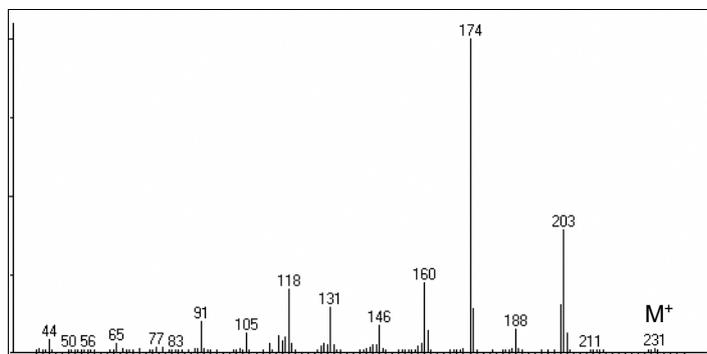
測定条件2 (合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

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
CUMYL-CBMICA [参考値]	19.41	3.97	13.1	1.47
Protonitazene	24.25	4.96	—	—
5-MeO-DMT	4.89	1.00	—	—
吉草酸ベタメタゾン	—	—	8.9	1.00

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

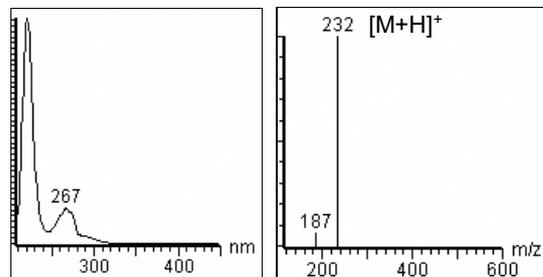
1) DMXE

GC-MS



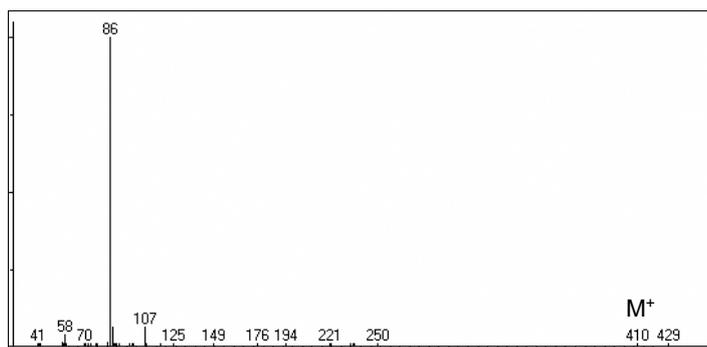
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



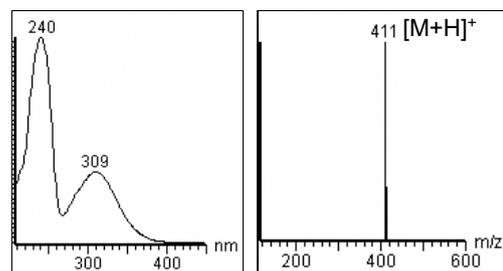
2) Protonitazene

GC-MS



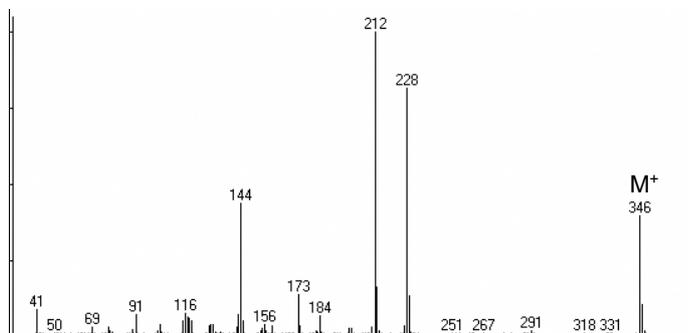
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



3) CUMYL-CBMICA

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

