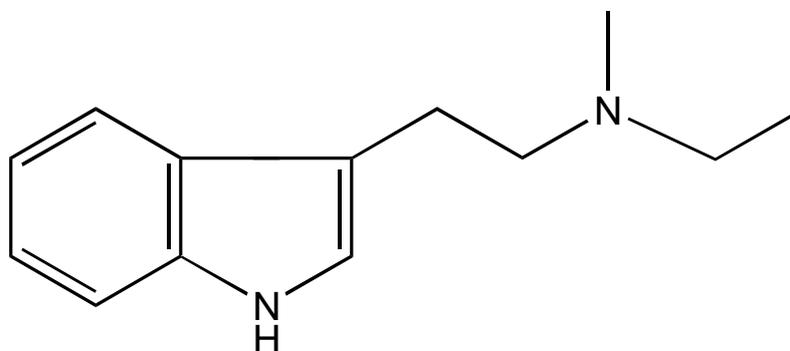


資料1 指定薬物の化学構造等

令和5年3月10日公布の省令(令和5年厚生労働省令第21号)により新たに指定された7物質の化学構造等は次のとおりである。

物質1

構造式：



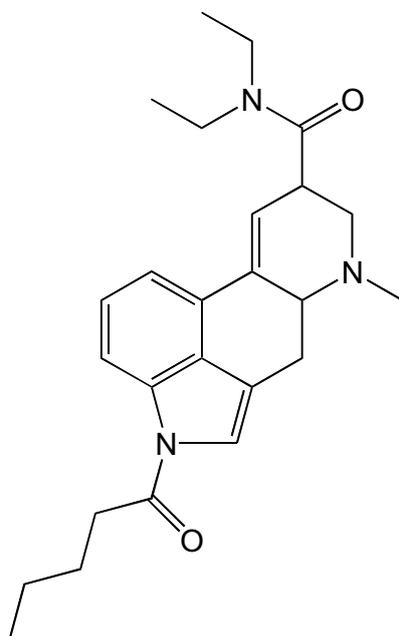
化学名：N-Ethyl-N-methyltryptamine

化学名字訳：N-エチル-N-メチルトリプタミン

通称等：MET、Methyl ethyl tryptamine

物質2

構造式：



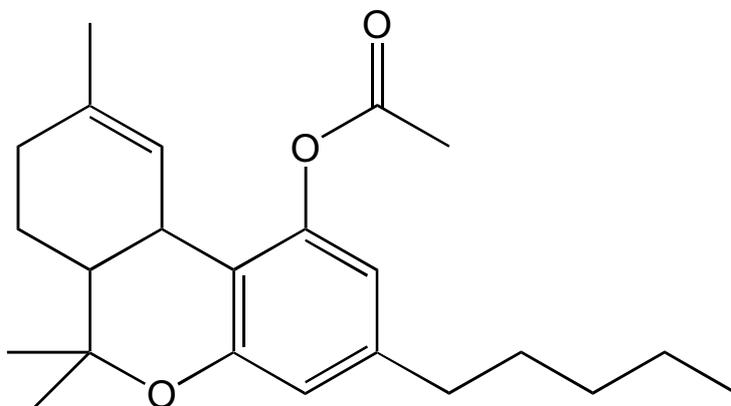
化学名：N,N-Diethyl-7-methyl-4-pentanoyl-4,6,6a,7,8,9-hexahydroindolo[4,3-fg]quinoline-9-carboxamide

化学名字訳：N, N-ジエチル-7-メチル-4-ペンタノイル-4, 6, 6a, 7, 8, 9-ヘキサヒドロインドロ[4, 3-fg]キノリン-9-カルボキサミド

通称等：1V-LSD

物質3

構造式：



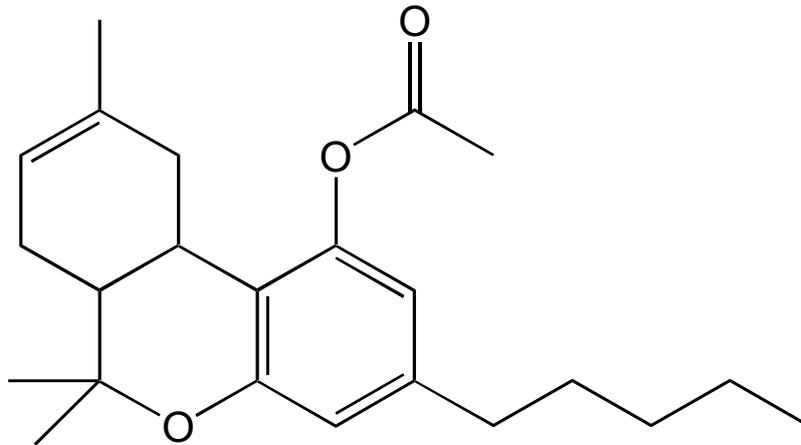
化学名：6a,7,8,10a-Tetrahydro-6,6,9-trimethyl-3-pentyl-6*H*-dibenzo[*b,d*]pyran-1-yl acetate

化学名字訳：6a, 7, 8, 10a-テトラヒドロ-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-イル=アセテート

通称等： Δ^9 -THC-O、THC-O-acetate、THC acetate、O-acetyl- Δ^9 -THC、THC-O

物質4

構造式：



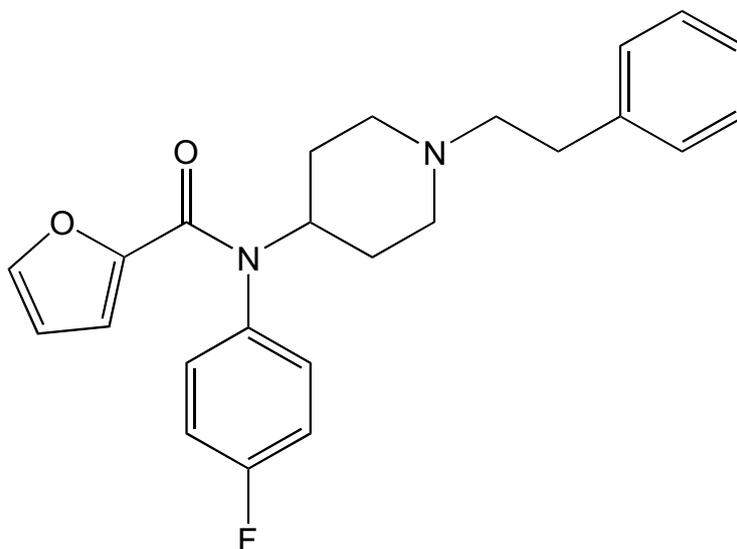
化学名：6a,7,10,10a-Tetrahydro-6,6,9-trimethyl-3-pentyl-6*H*-dibenzo[*b,d*]pyran-1-yl acetate

化学名字訳：6 a, 7, 10, 10 a-テトラヒドロ-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-イル=アセテート

通称等： Δ^8 -THC-O、THC-O-acetate、THC acetate、O-acetyl- Δ^8 -THC、THC-O

物質5

構造式：



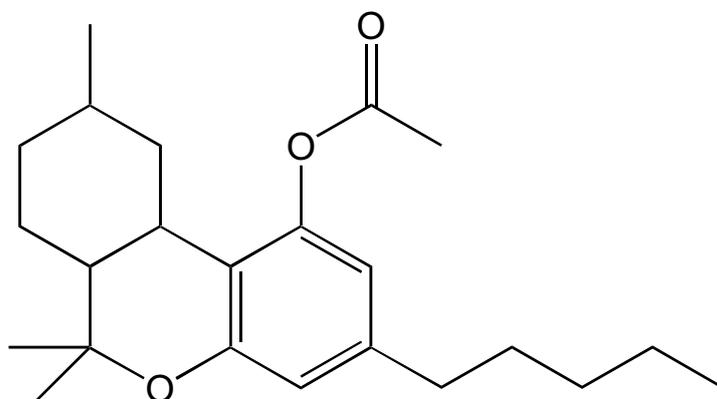
化学名： *N*-(4-Fluorophenyl)-*N*-(1-phenethylpiperidin-4-yl)furan-2-carboxamide

化学名字訳： *N*-(4-フルオロフェニル)-*N*-(1-フェネチルピペリジン-4-イル)フラン-2-カルボキサミド

通称等： 4F-Furanylfentanyl、 para-Fluorofuranylfentanyl

物質6

構造式：



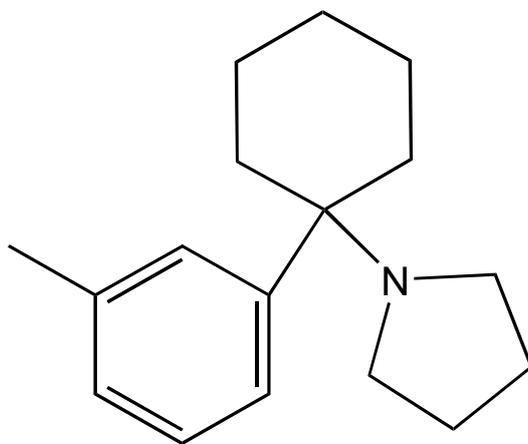
化学名：6a,7,8,9,10,10a-Hexahydro-6,6,9-trimethyl-3-pentyl-6*H*-dibenzo[*b,d*]pyran-1-yl acetate

化学名字訳：6 a, 7, 8, 9, 10, 10 a -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 -イル=アセテート

通称等：HHC-O、HHC-O-acetate、HHC acetate

物質7

構造式：



化学名：1-[1-(3-Methylphenyl)cyclohexyl]pyrrolidine

化学名字訳：1 - [1 - (3 - メチルフェニル) シクロヘキシル] ピロリジン

通称等：3-Me-PCPy、3-Methyl rolicyclidine

参考資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 5 年 3 月 10 日公布の 7 物質追加省令により、新たに指定薬物として指定された 7 物質(メタノール溶液もしくはアセトニトリル溶液)の GC-MS, LC-PDA-MS 及び HPLC-FL 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)

条件 3(LSD 類を対象とした測定条件)*

カラム:DB-1HT(15 m × 0.25 mm i.d., 膜厚 0.10 µm, Agilent 社製)

キャリアーガス:He, 1.0 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:120°C (1 min hold)－15°C/min－310°C (5 min hold)

*平成 28 年 4 月 8 日に公布された指定薬物の分析結果通知より測定条件を一部変更

LC-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

HPLC-FL

条件(LSD 類を対象とした測定条件)*

カラム: ACQUITY UPLC HSS T3 (2.1 × 100 mm, 1.8 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

A: B 85:15 (0 min) – 60:40 (20 min) – 15:85 (22 min, 4 min hold)

流速: 0.3 mL/min、カラム温度: 40°C、注入量: 1 μL

検出: 蛍光検出器(励起波長 300 nm、測定波長 420 nm)

*平成 28 年 4 月 8 日に公布された指定薬物の分析結果通知より測定条件を一部変更

②測定結果

各測定条件における新規指定薬物 7 物質の保持時間及び 5-MeO-DMT, 吉草酸ベタメタゾン, 又は 1P-LSD 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
4F-Furanylfentanyl	51.04	1.82	54.3	6.82
MET	24.65	0.88	10.0	1.26
3-Me-PCPy	25.50	0.91	50.7	6.37
1V-LSD*	—		56.5	7.09
[参考値]				
Δ^9 -THC-O*	45.41	1.62	—	—
Δ^8 -THC-O*	45.06	1.60	—	—
HHC-O				
[11 β -HHC-O*	44.39	1.58	—	—
11 α -HHC-O*	45.25	1.61	—	—
5-MeO-DMT	28.08	1.00	8.0	1.00

*測定はアセトニトリル溶液で行った

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
Δ^9 -THC-O*	10.91	2.23	27.8	3.11
Δ^8 -THC-O*	10.67	2.18	27.5	3.09
HHC-O				
[11 β -HHC-O*	10.11	2.07	28.7	3.22
11 α -HHC-O*	10.81	2.21	28.2	3.16
5-MeO-DMT	4.89	1.00	—	
吉草酸ベタメタゾン	—		8.9	1.00

*測定はアセトニトリル溶液で行った。

測定条件 3 (LSD を対象とした測定条件) *

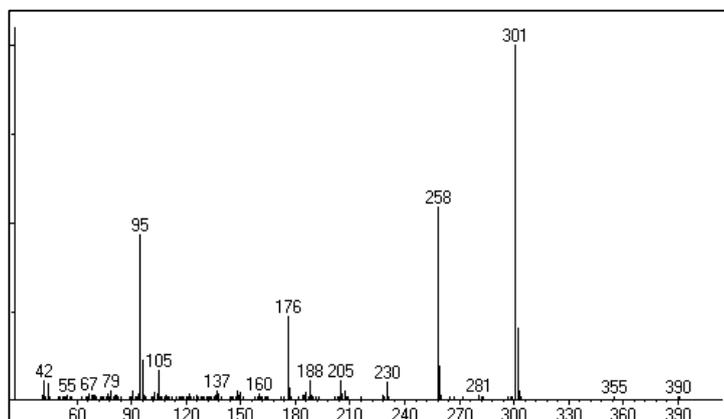
Compounds	GC-MS 条件 3		HPLC-FL	
	Retention time (min)	Relative retention time 1P-LSD= 1	Retention time (min)	Relative retention time 1P-LSD= 1
1V-LSD	13.02	1.05	18.1	1.56
1P-LSD	12.34	1.00	11.6	1.00
[参考値]				
LSD	11.00		6.6	

*1V-LSD, 1P-LSD 及び LSD の測定はアセトニトリル溶液で行なった。

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

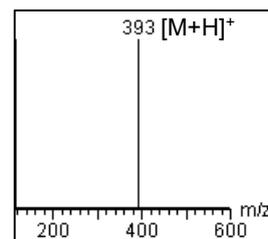
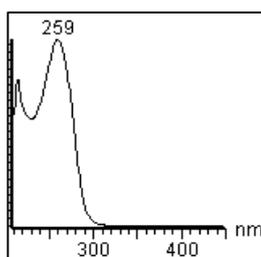
1) 4F-Furanylfentanyl

GC-MS



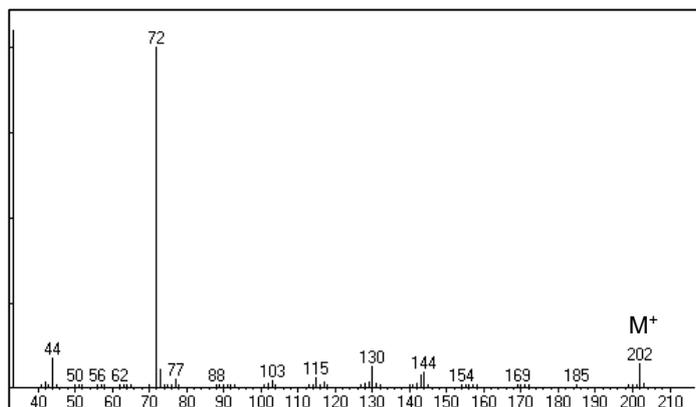
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



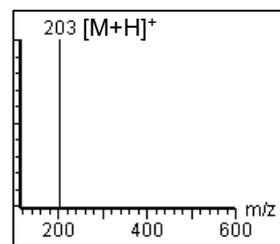
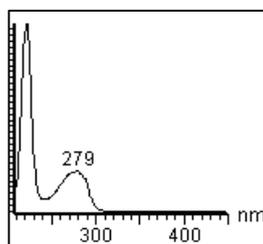
2) MET

GC-MS



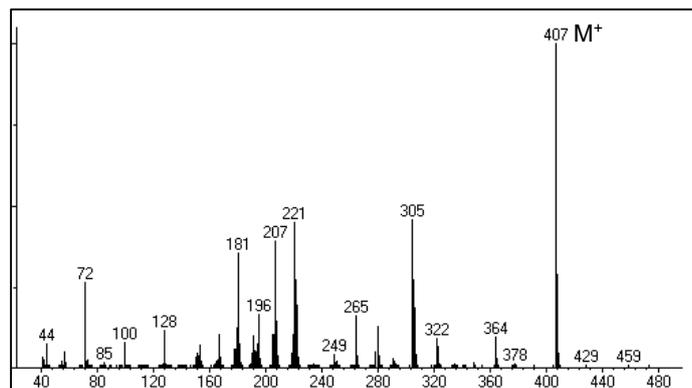
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



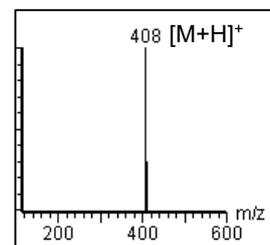
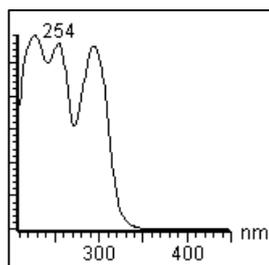
3) 1V-LSD

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

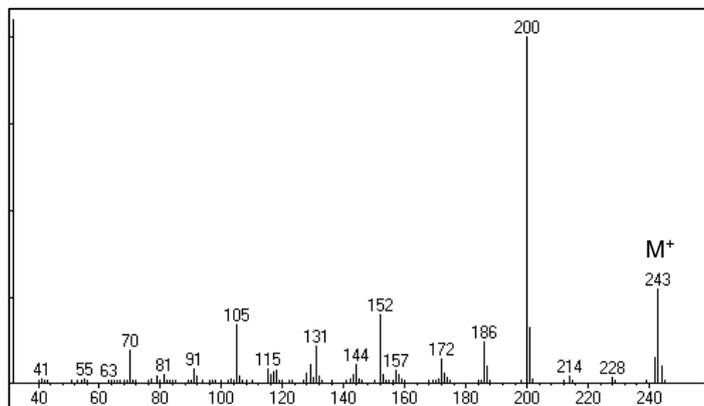
UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



測定はアセトニトリル溶液で行った。

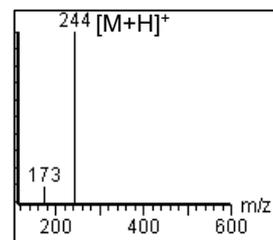
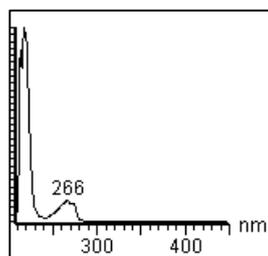
4) 3-Me-PCPy

GC-MS



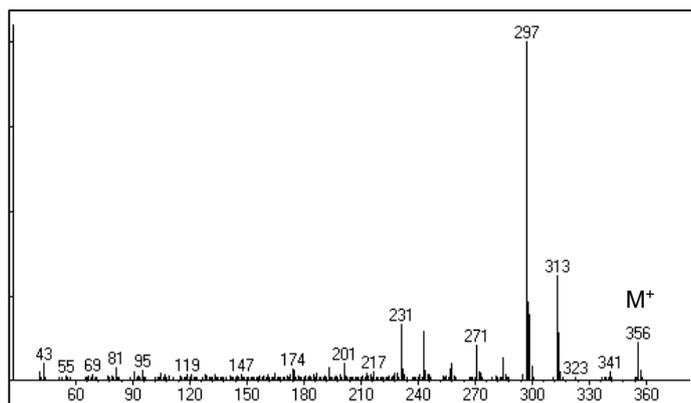
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



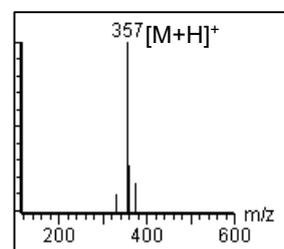
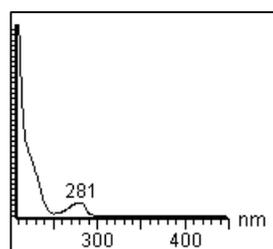
5) Δ⁹-THC-O

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

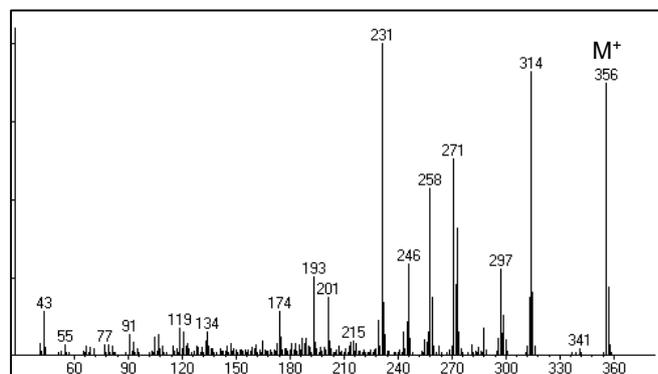
UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



測定はアセトニトリル溶液で行った。

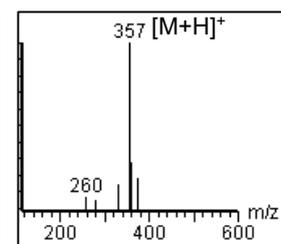
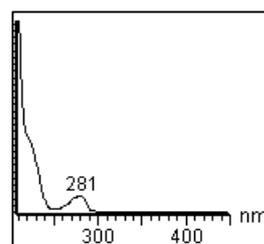
6) Δ⁸-THC-O

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

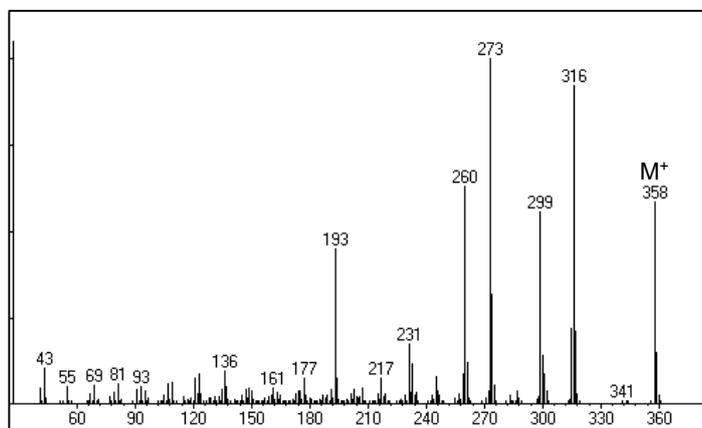


測定はアセトニトリル溶液で行った。

7) HHC-O

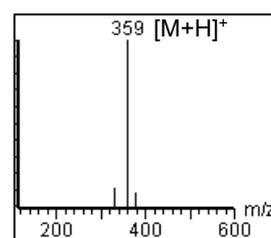
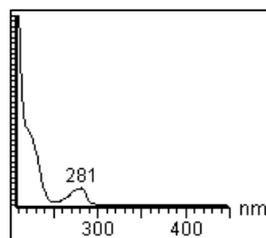
11 β -HHC-O (10.11 min)

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

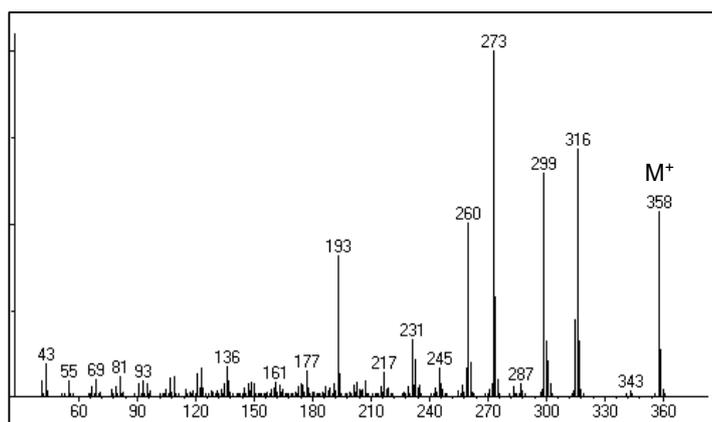
UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



測定はアセトニトリル溶液で行った.

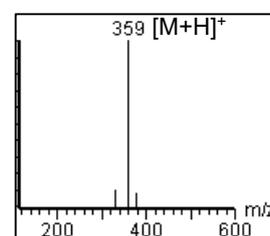
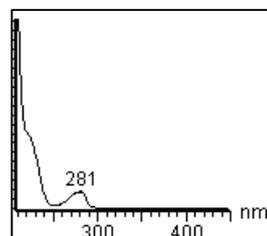
11 α -HHC-O (10.81 min)

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



測定はアセトニトリル溶液で行った.