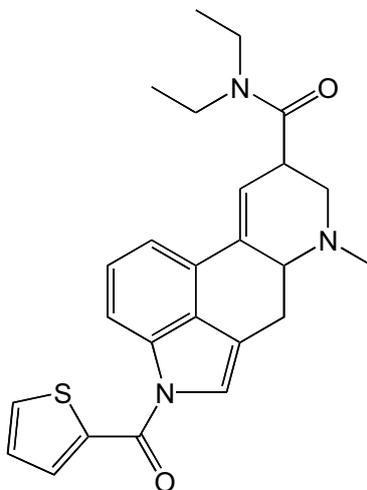


資料1 指定薬物の化学構造等

令和6年5月1日公布の省令(令和6年厚生労働省令第 81 号)により新たに指定された1物質及び3物質群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,N-Diethyl-7-methyl-4-(thiophene-2-carbonyl)-4,6,6a,7,8,9-hexahydroindolo[4,3-*fg*]quinoline-9-carboxamide

化学名字訳：

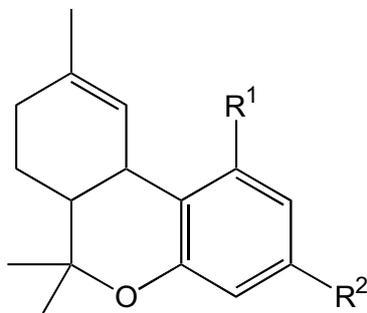
N,N-ジエチル-7-メチル-4-(チオフェン-2-カルボニル)-4,6,6a,7,8,9-ヘキサヒドロインドロ[4,3-*fg*]キノリン-9-カルボキサミド

通称等：

1T-LSD、「1D-LSD」と称する製品の成分

物質群 1

構造式：



$R^1 = -OH$ 又は $-OC(=O)CH_3$

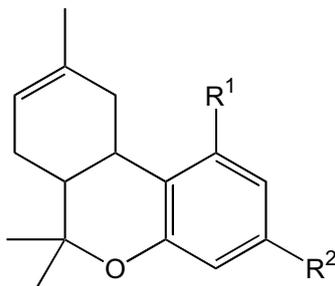
$R^2 = n-C_nH_{2n+1}$ ($n = 3 \sim 8$)

省令名：

6 a, 7, 8, 10 a - テトラヒドロ - 6, 6, 9 - トリメチル - 6 H - ジベンゾ [b, d] ピランの 1 位に水酸基又はアセトキシ基が一つ結合し、かつ、3 位に直鎖状アルキル基（炭素数が 3 から 8 までのものに限る。）が結合する物であって、1 位及び 3 位以外の位置に置換基が結合していないもの並びにこれらの塩類。ただし、麻薬及び向精神薬取締法に規定する麻薬を除く。

物質群 2

構造式：



$R^1 = -OH$ 又は $-OC(=O)CH_3$

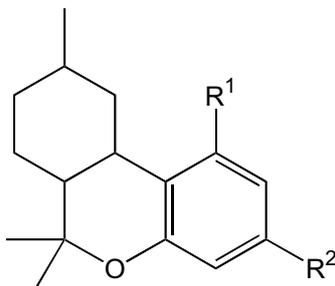
$R^2 = n-C_nH_{2n+1}$ ($n = 3 \sim 8$)

省令名：

6 a, 7, 10, 10 a-テトラヒドロ-6, 6, 9-トリメチル-6 H-ジベンゾ [b, d] ピランの 1 位に水酸基又はアセトキシ基が一つ結合し、かつ、3 位に直鎖状アルキル基（炭素数が 3 から 8 までのものに限る。）が結合する物であって、1 位及び 3 位以外の位置に置換基が結合していないもの並びにこれらの塩類。ただし、麻薬及び向精神薬取締法に規定する麻薬を除く。

物質群 3

構造式：



$R^1 = -OH$ 又は $-OC(=O)CH_3$

$R^2 = n-C_nH_{2n+1}$ ($n = 3 \sim 8$)

省令名：

6 a, 7, 8, 9, 10, 10 a-ヘキサヒドロ-6, 6, 9-トリメチル-6 H-ジベンゾ [b, d] ピランの1位に水酸基又はアセトキシ基が一つ結合し、かつ、3位に直鎖状アルキル基（炭素数が3から8までのものに限る。）が結合する物であって、1位及び3位以外の位置に置換基が結合していないもの並びにこれらの塩類

資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 6 年 5 月 1 日の省令公布により、新たに指定薬物として指定された 1 物質(メタノール及び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。

また、同日公布の 3 物質群を包括的に指定する省令により、新たに指定薬物として指定された 15 物質のうち、7 物質(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、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

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℃、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8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
1P-LSD	—	—	54.3	6.87
[参考値]				
Δ^8 -THCV-O*	40.24	1.43	72.3	9.15
Δ^9 -THCH-O*	45.87	1.63	—	—
Δ^8 -THCH-O*	45.71	1.62	—	—
Δ^9 -THCP-O*	46.96	1.67	—	—
Δ^8 -THCjd-O*	47.79	1.69	—	—
HHCH-O				
[9(R)-HHCH-O*	45.19	1.60	—	—
[9(S)-HHCH-O*	45.83	1.63	—	—
HHCP-O				
[9(R)-HHCP-O*	46.40	1.65	—	—
[9(S)-HHCP-O*	46.92	1.66	—	—
5-MeO-DMT	28.20	1.00	7.9	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^8 -THCV-O*	7.48	1.55	22.3	2.52
Δ^9 -THCH-O*	11.38	2.36	29.4	3.33
Δ^8 -THCH-O*	11.16	2.31	29.2	3.30
Δ^9 -THCP-O*	12.66	2.62	31.4	3.55
Δ^8 -THCjd-O*	13.80	2.86	33.1	3.74
HHCH-O				
[9(R)-HHCH-O*	10.65	2.20	30.3	3.43
[9(S)-HHCH-O*	11.31	2.34	29.7	3.36
HHCP-O				
[9(R)-HHCP-O*	11.95	2.47	32.2	3.64
[9(S)-HHCP-O*	12.62	2.61	31.7	3.59

5-MeO-DMT	4.83	1.00	—	
吉草酸ヘタメタゾン	—		8.8	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)

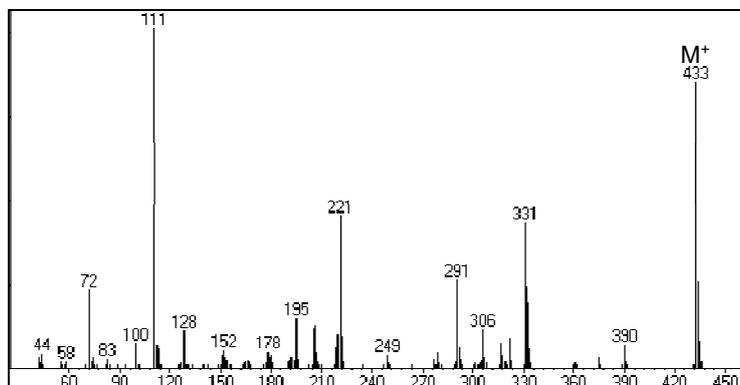
Compounds	GC-MS 条件 3* ¹	
	Retention time (min)	Relative retention time 1P-LSD= 1
1T-LSD	14.54	1.18
1P-LSD	12.32	1.00
[参考値]		
LSD	11.00	0.89

*¹測定はアセトニトリル溶液で行った

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) 1T-LSD

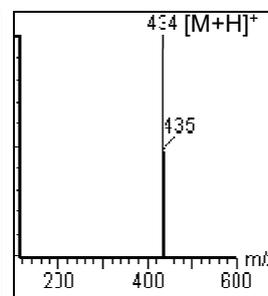
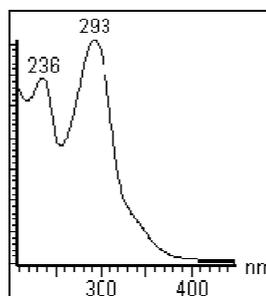
GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

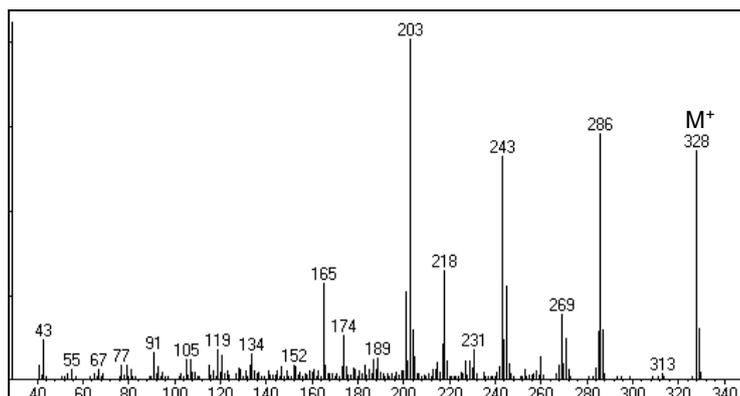
UV スペクトル (nm)

マスペクトル (m/z)



2) Δ⁸-THCV-O

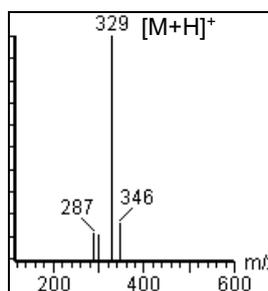
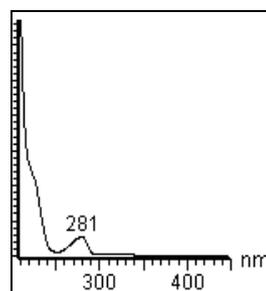
GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

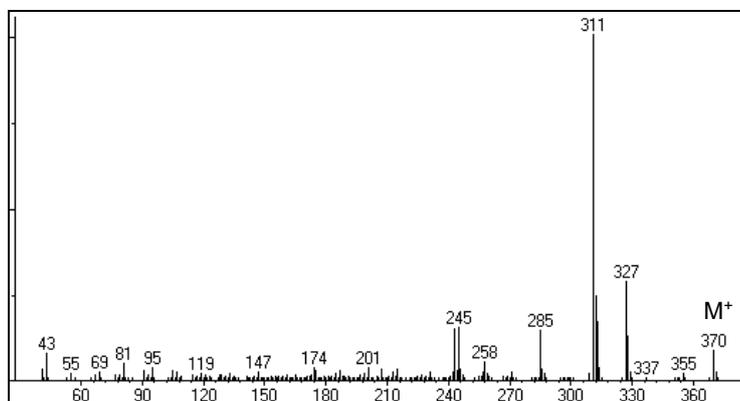
UV スペクトル (nm)

マスペクトル (m/z)



3) Δ⁹-THCH-O

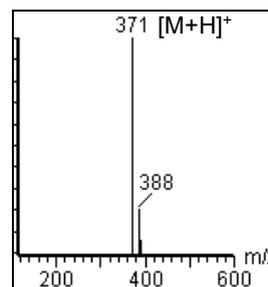
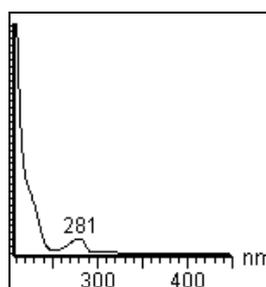
GC-MS



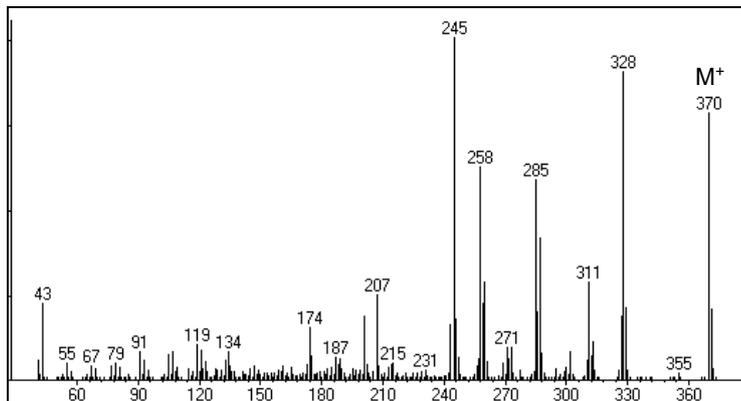
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm)

マスペクトル (m/z)

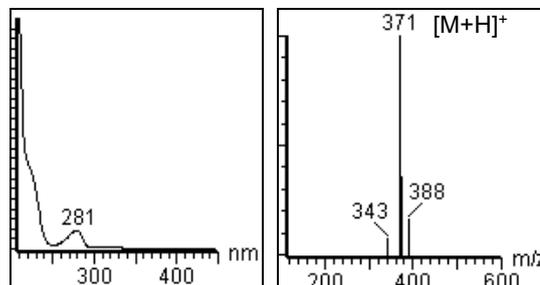


4) Δ^8 -THCH-O
GC-MS

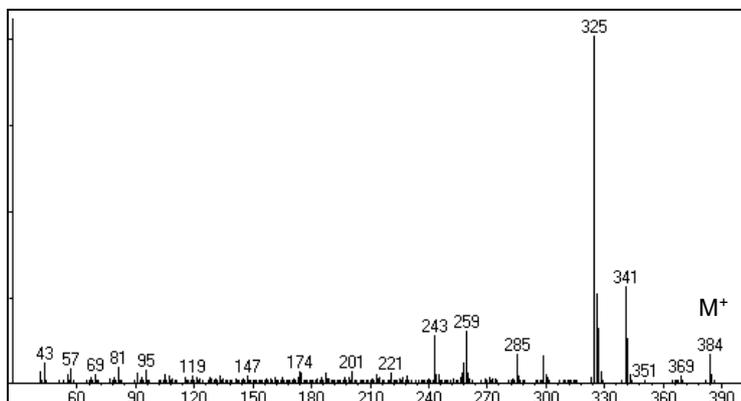


LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

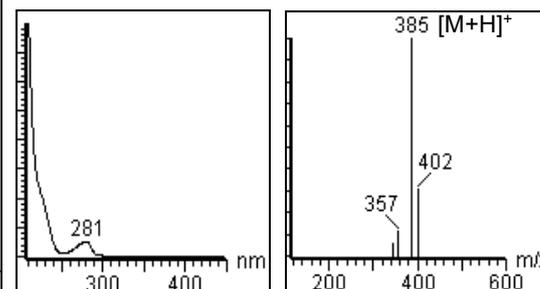


5) Δ^9 -THCP-O
GC-MS

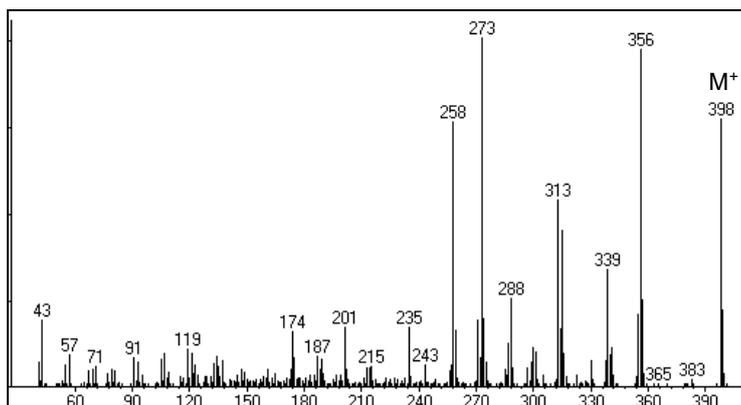


LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

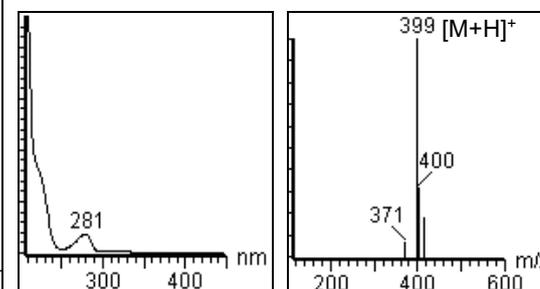


6) Δ^8 -THCjd-O
GC-MS



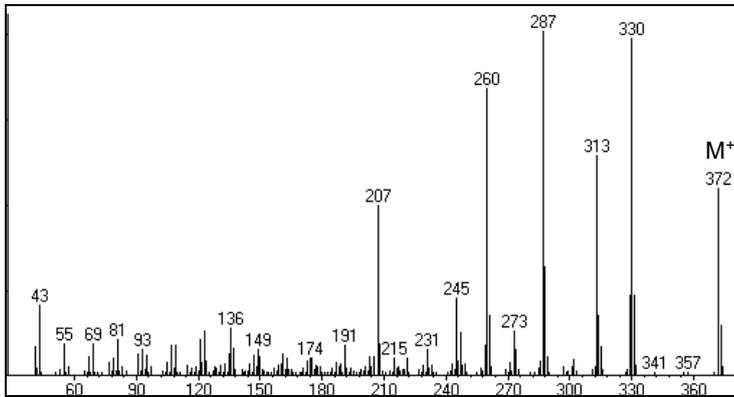
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

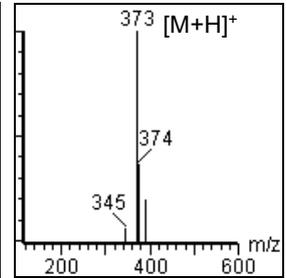
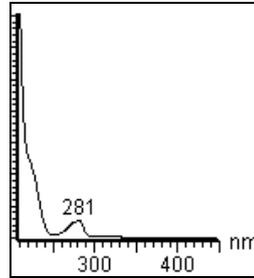


7) 9(R)-HHCH-O
GC-MS

LC-PDA-MS (positive mode)

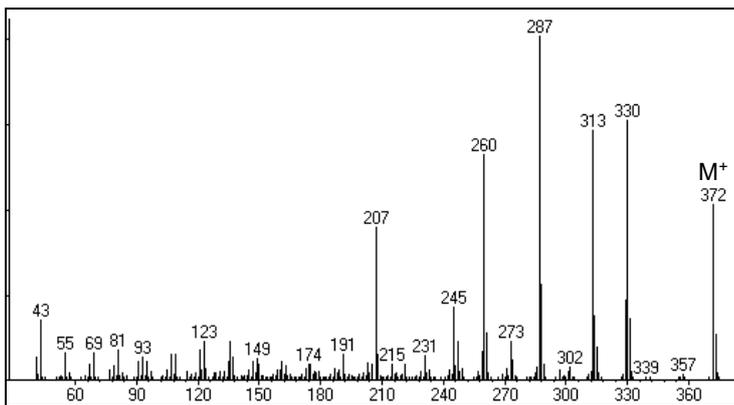


UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

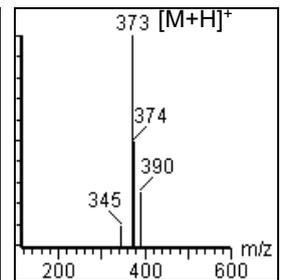
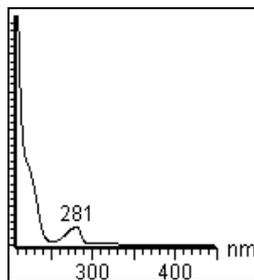


8) 9(S)-HHCH-O
GC-MS

LC-PDA-MS (positive mode)

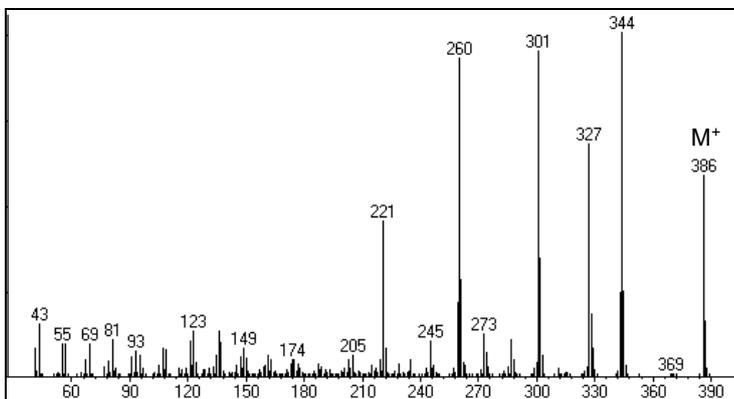


UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

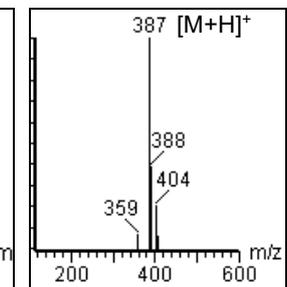
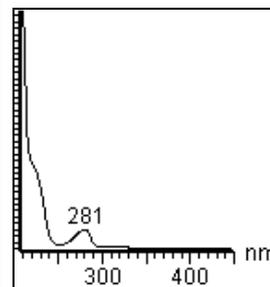


9) 9(R)-HHCP-O
GC-MS

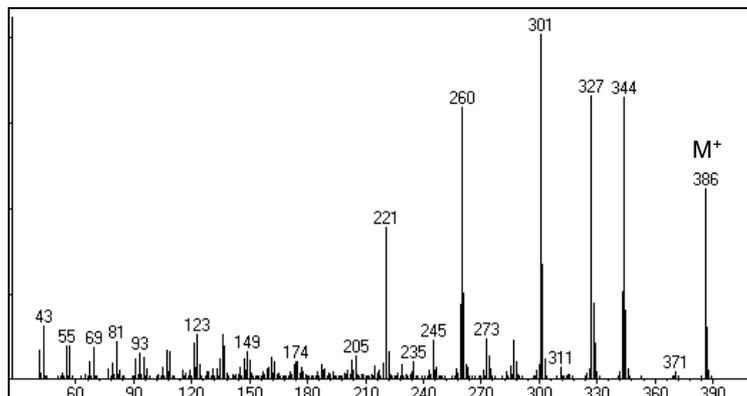
LC-PDA-MS (positive mode)



UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



10) 9(S)-HHCP-O
GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

