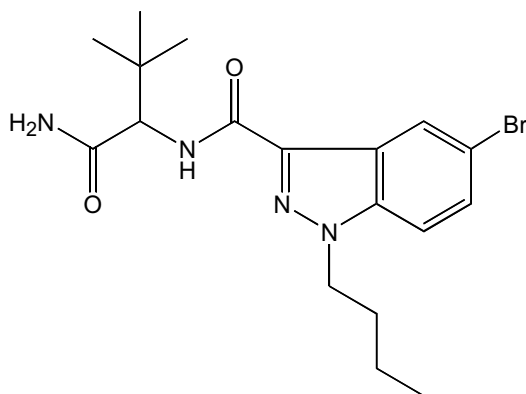


資料1 指定薬物の化学構造等

令和6年8月7日公布の省令(令和6年厚生労働省令第 110 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：

N-(1-Amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl)-5-bromo-1-butyl-1*H*-indazole-3-carboxamide

化学名字訳：

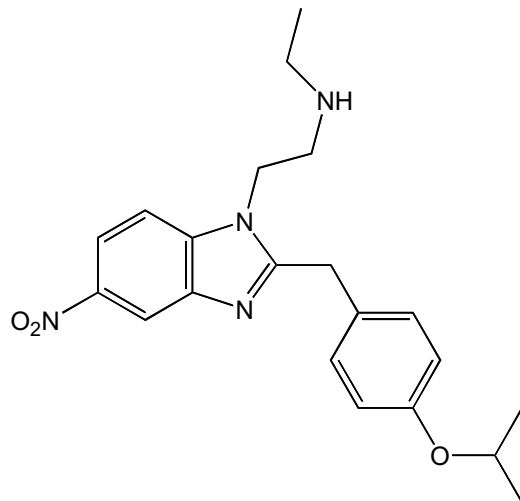
N-(1-アミノ-3,3-ジメチル-1-オキソブタン-2-イル)-5-ブromo-1-ブチル-1*H*-インダゾール-3-カルボキサミド

通 称 等：

ADB-5'Br-BUTINACA

物質 2

構 造 式：



化 学 名：

1-(Ethylamino)ethyl-2-(4-isopropoxybenzyl)-5-nitrobenzimidazole

化学名字訳：

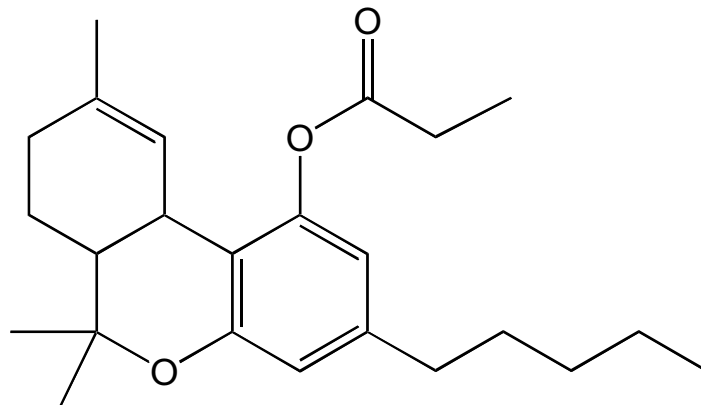
1 - (エチルアミノ) エチル - 2 - (4 - イソプロポキシベンジル) - 5 - ニトロ
ベンズイミダゾール

通 称 等：

N-Desethyl isotonitazene

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
propionate

化学名字訳：

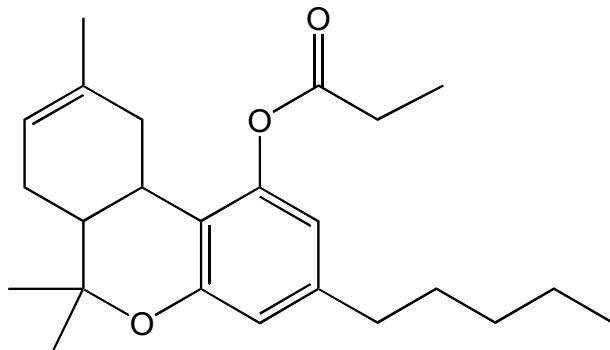
6 a, 7, 8, 1 0 a - テトラヒドロ - 6, 6, 9 - トリメチル - 3 - ペンチル -
6 *H* - ジベンゾ [*b*, *d*] ピラン - 1 - イル = プロピオネート

通 称 等：

Δ^9 -THCOP、 Δ^9 -THC propionate

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
propionate

化学名字訳：

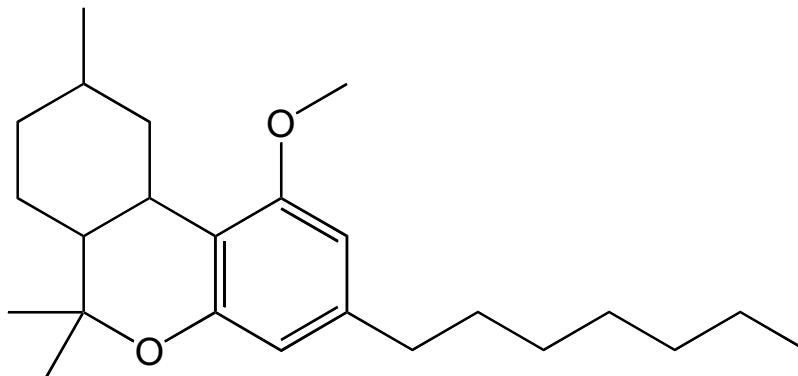
6 a, 7, 1 0, 1 0 a - テトラヒドロ - 6, 6, 9 - トリメチル - 3 - ペンチ
ル - 6 *H* - ジベンゾ [*b*, *d*] ピラン - 1 - イル = プロピオネート

通 称 等：

Δ^8 -THCOP、 Δ^8 -THC propionate

物質 5

構 造 式：



化 学 名：

3-Heptyl-6a,7,8,9,10,10a-hexahydro-1-methoxy-6,6,9-trimethyl-6*H*-
dibenzo[*b,d*]pyran

化学名字訳：

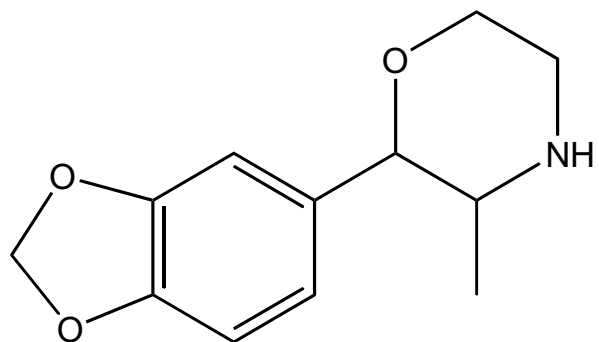
3-ヘプチル-6a, 7, 8, 9, 10, 10a-ヘキサヒドロ-1-メトキシ-
6, 6, 9-トリメチル-6*H*-ジベンゾ [*b*, *d*] ピラン

通 称 等：

HHCPM、O-methyl-HHCP、Hexahydrocannabiphorol methyl ether

物質 6

構 造 式：



化 学 名：

3-Methyl-2-(3,4-methylenedioxyphenyl)morpholine

化学名字訳：

3-メチル-2-(3,4-メチレンジオキシフェニル)モルフォリン

通 称 等：

3,4-MDPM、3-MDPM、3,4-Methylenedioxyphenmetrazine

資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 6 年 8 月 7 日の省令公布により、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。

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℃、スプリットレス、トランスファーライン温度:280℃、イオン化法:EI 法

カラム温度:80℃ (1 min hold)－5℃/min－190℃ (15 min hold)－10℃/min－310℃ (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℃、スプリット、トランスファーライン温度:280℃、イオン化法:EI 法

カラム温度:200℃ (1 min hold)－5℃/min－310℃ (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℃、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, 10 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

*平成 21 年 10 月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 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
N-Desethyl isotonitazene	52.93	1.87	54.3	6.70
3,4-MDPM	22.91	0.81	6.2	0.77
[参考値]				
ADB-5'Br-BUTINACA	50.11	1.77	60.7	7.49
Δ^9 -THCOP	45.68	1.62	—	—
Δ^8 -THCOP	45.48	1.61	—	—
HHCPM				
9(R)-HHCPM	45.45	1.61	—	—
9(S)-HHCPM	45.70	1.62	—	—
5-MeO-DMT	28.24	1.00	8.1	1.00

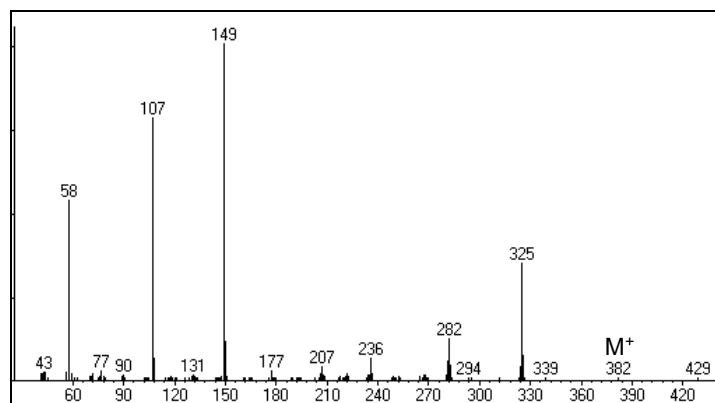
測定条件 2 (合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

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
ADB-5'Br-BUTINACA	17.36	3.56	11.5	1.31
Δ^9 -THCOP	11.06	2.27	29.5	3.35
Δ^8 -THCOP	10.83	2.22	29.2	3.32
HHCPM				
9(R)-HHCPM	10.83	2.22	37.2	4.23
9(S)-HHCPM	11.1	2.28	36.8	4.18
5-MeO-DMT	4.87	1.00	—	—
吉草酸ベタメタゾン	—	—	8.8	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

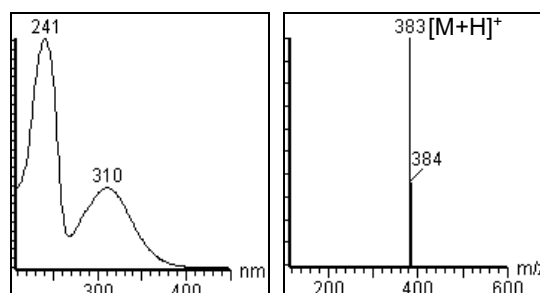
1) *N*-Desethyl isotonitazene

GC-MS



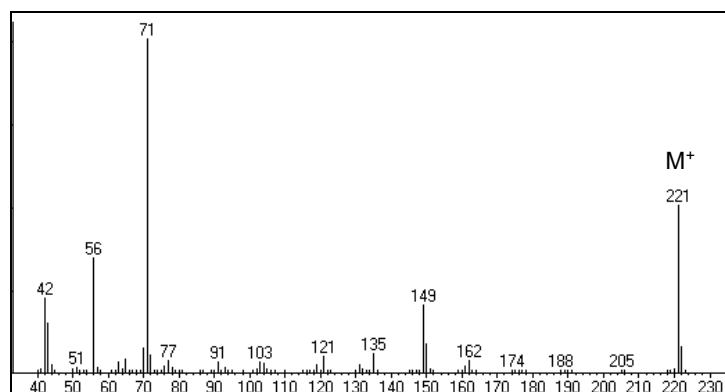
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



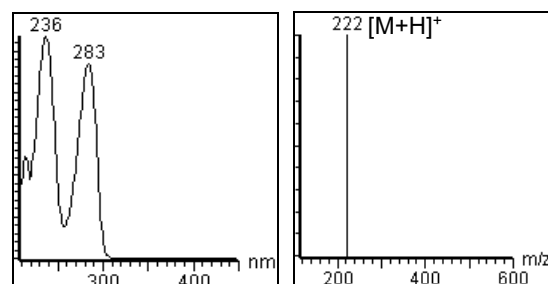
2) 3,4-MDPM (3,4-Methylenedioxyphenmetrazine)

GC-MS



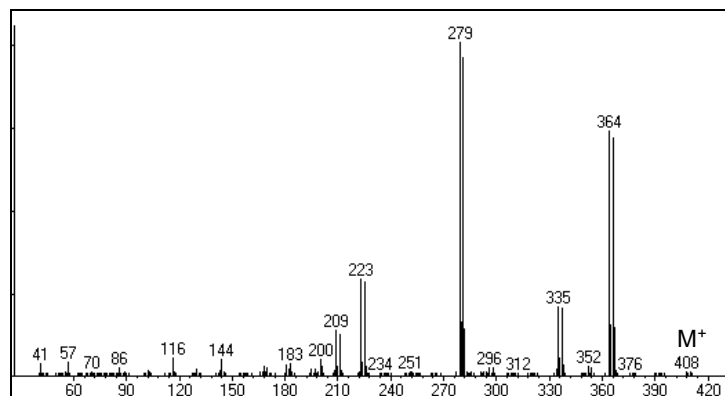
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



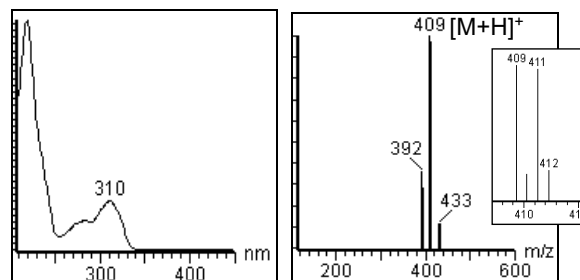
3) ADB-5'Br-BUTINACA

GC-MS



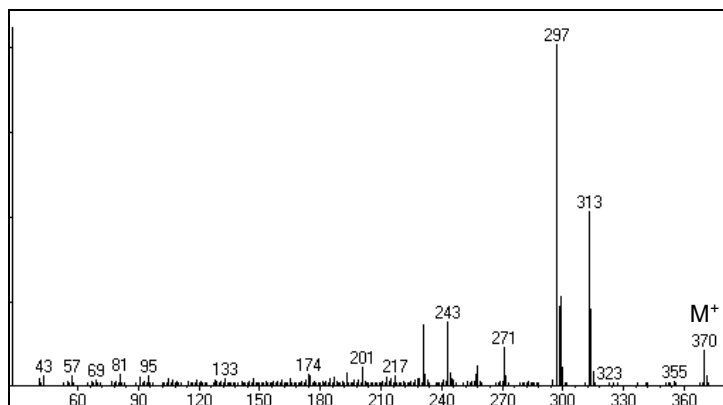
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



4) Δ^9 -THCOP

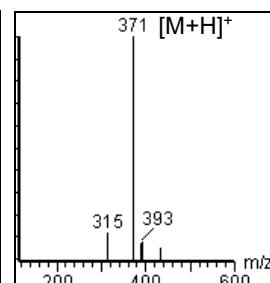
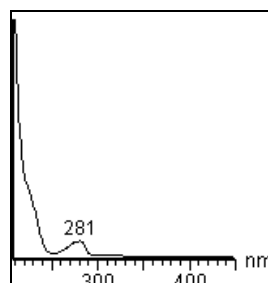
GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

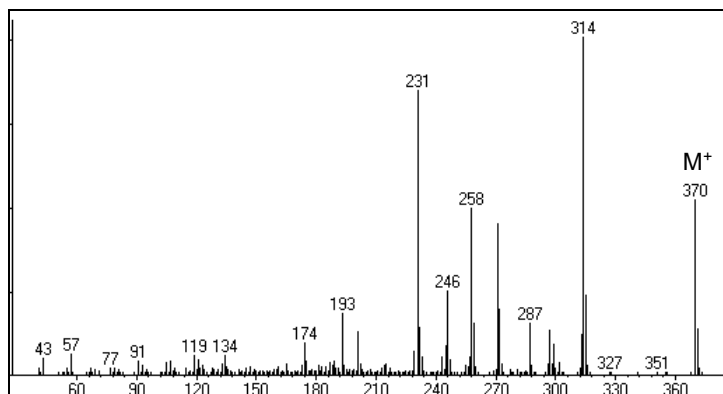
UV スペクトル (nm)

マスマスペクトル (m/z)



5) Δ^8 -THCOP

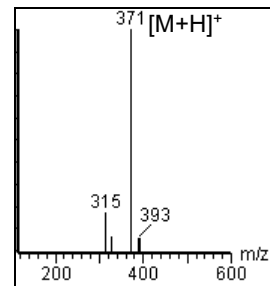
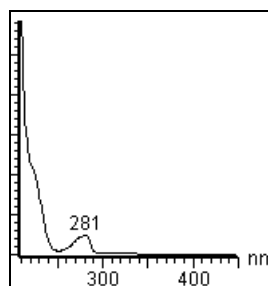
GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

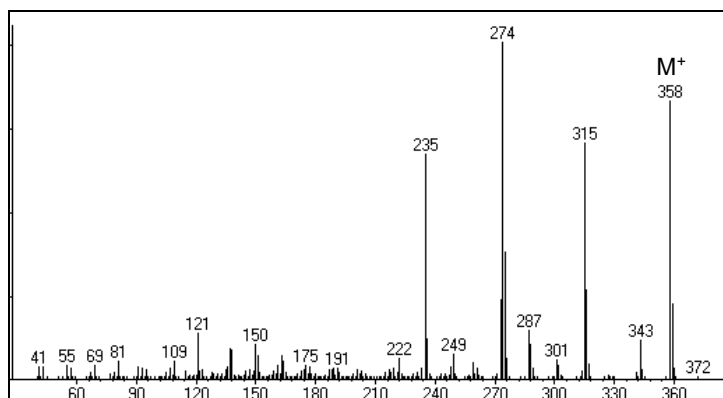
UV スペクトル (nm)

マスマスペクトル (m/z)



6) 9(R)-HHCPM

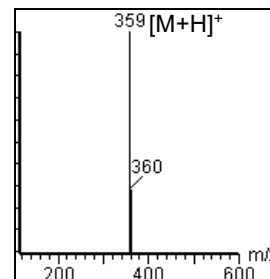
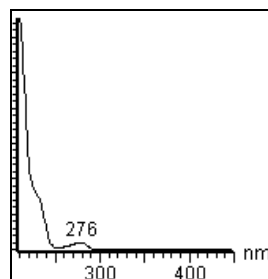
GC-MS



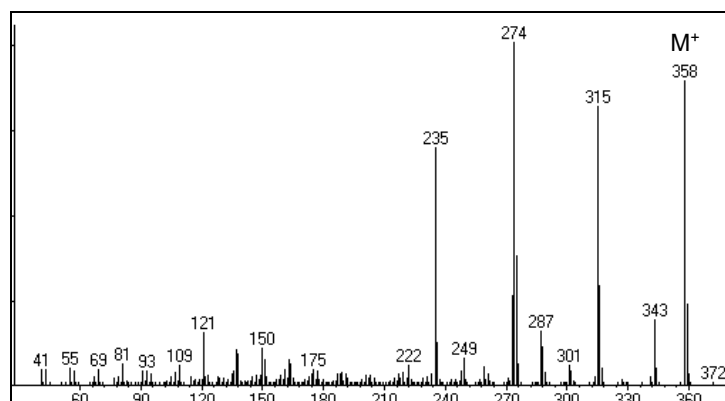
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm)

マスマスペクトル (m/z)



7) 9(S)-HHCPM
GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm)

マスペクトル (m/z)

