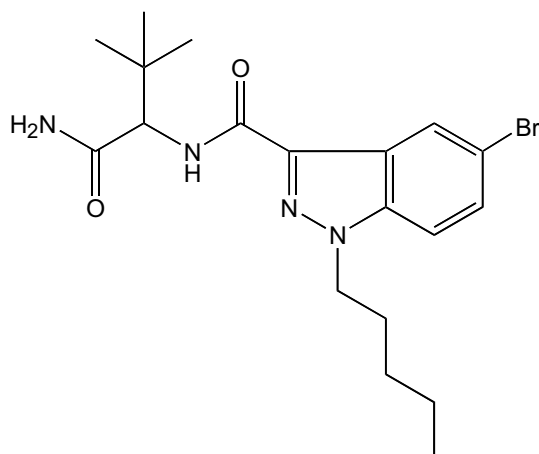


資料1 指定薬物の化学構造等

令和6年 11 月6日公布の省令(令和6年厚生労働省令第 151 号)により新たに指定された4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-pentyl-1*H*-indazole-3-carboxamide

化学名字訳：

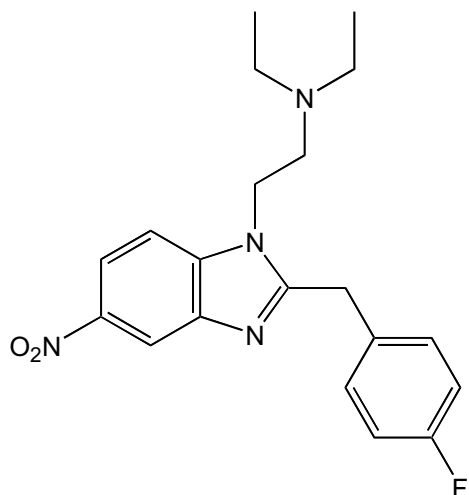
N-(1-アミノ-3,3-ジメチル-1-オキソブタン-2-イル)-5-ブロモ-1-ペンチル-1*H*-インダゾール-3-カルボキサミド

通 称 等：

ADB-5'Br-PINACA

物質 2

構 造 式：



化 学 名：

1-(2-Diethylamino)ethyl-2-(4-fluorobenzyl)-5-nitrobenzimidazole

化学名字訳：

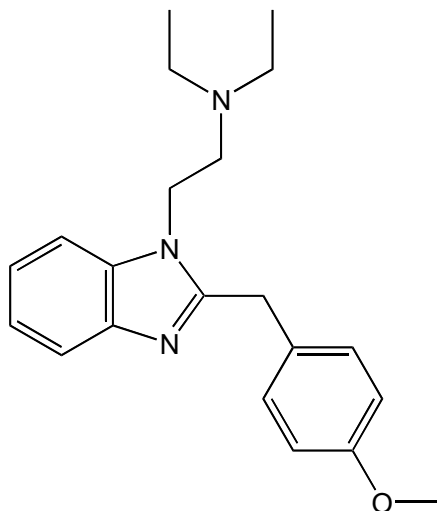
1 - (2 - ジエチルアミノ) エチル - 2 - (4 - フルオロベンジル) - 5 - ニトロベン
ズイミダゾール

通 称 等：

Flunitazene、Fluonitazene

物質 3

構 造 式：



化 学 名：

1-(2-Diethylamino)ethyl-2-(4-methoxybenzyl)benzimidazole

化学名字訳：

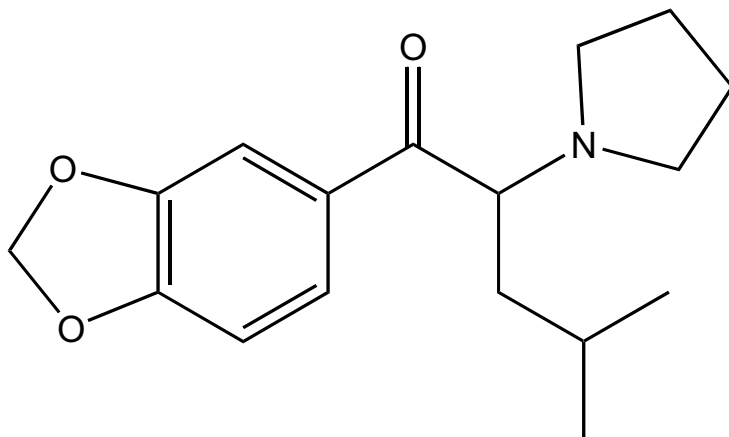
1 - (2 - ジエチルアミノ) エチル - 2 - (4 - メトキシベンジル) ベンズイミダゾール

通 称 等：

Metodesnitazene、Metazene

物質 4

構 造 式：



化 学 名：

4-Methyl-1-(3,4-methylenedioxyphenyl)-2-(pyrrolidin-1-yl)pentan-1-one

化学名字訳：

4－メチル－1－（3，4－メチレンジオキシフェニル）－2－（ピロリジン－1－イル）ペンタン－1－オン

通 称 等：

MD-PiHP、MD-PHiP

参考資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 6 年 11 月 6 日の省令公布により、新たに指定薬物として指定された 4 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 4 物質の保持時間及び、5-MeO-DMT 又は吉草酸ヘ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
Flunitazene	50.40	1.78	45.9	5.74
Metodesnitazene	47.87	1.69	8.3	1.04
MD-PiHP	35.73	1.26	36.5	4.56
[参考値]				
ADB-5'Br-PINACA	50.68	1.79	61.9	7.74
5-MeO-DMT	28.25	1.00	8.0	1.00

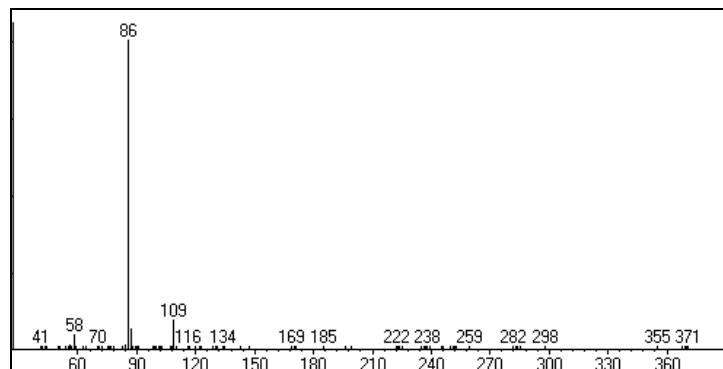
測定条件 2 (合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

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 吉草酸ヘタメタゾン = 1
ADB-5'Br-PINACA	18.49	3.76	14.5	1.63
5-MeO-DMT	4.89	1.00	—	
吉草酸ヘタメタゾン	—		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

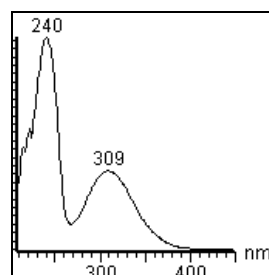
1) Flunitazene

GC-MS

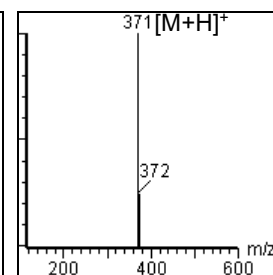


LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm)

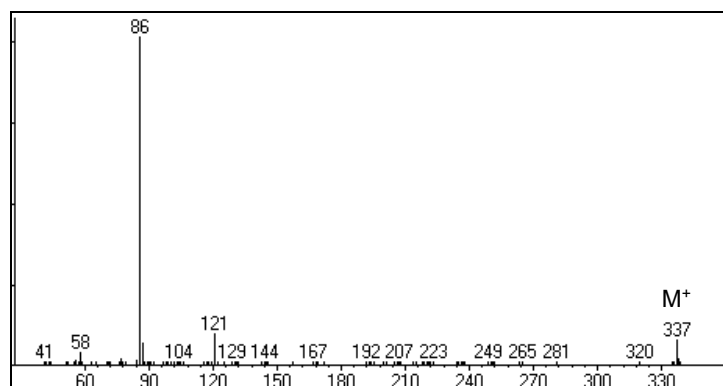


マスマスペクトル (m/z)



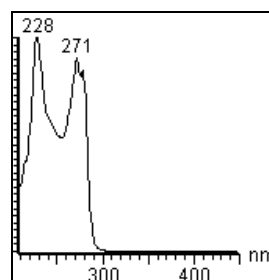
2) Metodesnitazene

GC-MS

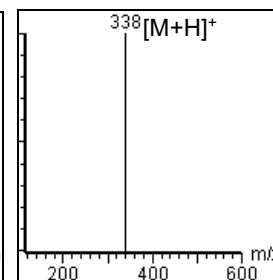


LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm)

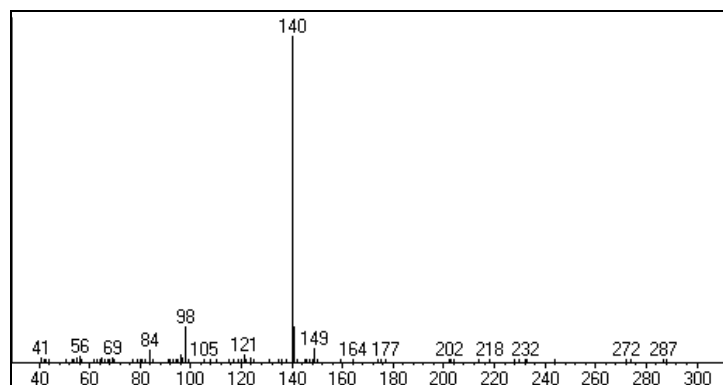


マスマスペクトル (m/z)



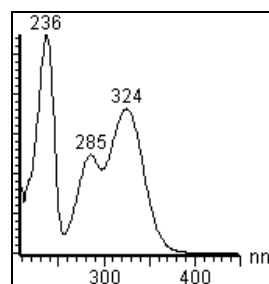
3) MD-PiHP

GC-MS

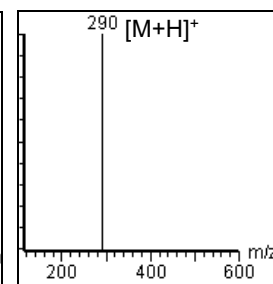


LC-PDA-MS (positive mode)

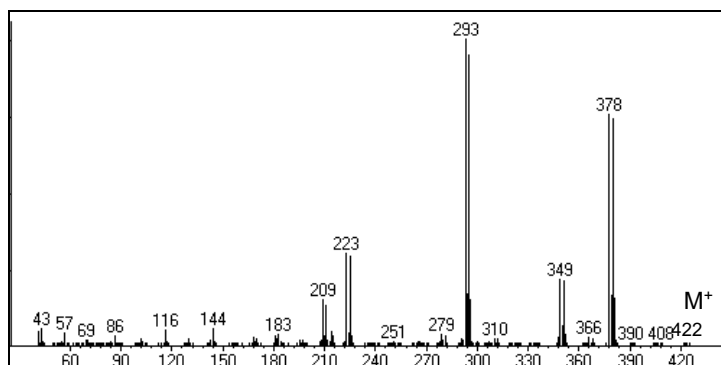
UV スペクトル (nm)



マスマスペクトル (m/z)



4) ADB-5'Br-PINACA
GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm)

マスマスペクトル (m/z)

