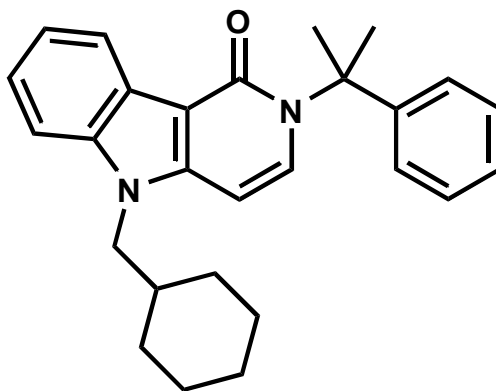


## 資料1 指定薬物の化学構造等

令和4年1月 19 日公布の省令(令和4年厚生労働省令第9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:

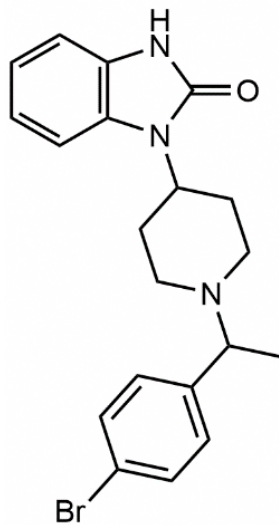
5-(Cyclohexylmethyl)-2-(2-phenylpropan-2-yl)-2,5-dihydro-1*H*-pyrido[4,3-*b*]indol-1-one

化学名字訳: 5-(シクロヘキシルメチル)-2-(2-フェニルプロパン-2-イル)-2,5-ジヒドロ-1*H*-ピリド[4,3-*b*]インドール-1-オン

通称等: CUMYL-CH-MEGACLONE, CUMYL-CHMEGACLONE

物質2

構造式:



化学名:

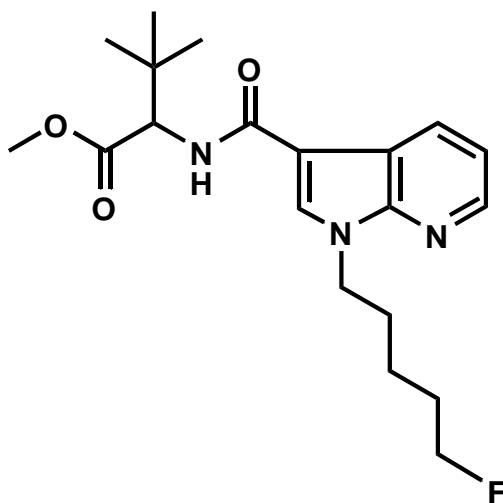
1-[1-[1-(4-Bromophenyl)ethyl]piperidin-4-yl]-1,3-dihydro-2*H*-benzo[*d*]imidazol-2-one

化学名字訳: 1-{1-[1-(4-ブロモフェニル)エチル]ピペリジン-4-イル}-1,3-ジヒドロ-2*H*-ベンゾ[*d*]イミダゾール-2-オン

通称等: Brorphine

物質3

構造式:



化学名:

Methyl 2-[1-(5-fluoropentyl)-1H-pyrrolo[2,3-*b*]pyridine-3-carboxamido]-3,3-dimethylbutanoate

化学名字訳:メチル=2-[1-(5-フルオロペンチル)-1*H*-ピロロ[2,3-*b*]ピリジン-3-カルボキサミド]-3,3-ジメチルブタノアート

通称等:5F-MDMB-P7AICA

## 参考資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 4 年 1 月 19 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、酢酸エチル溶液)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
Brorphine [参考値]	53.78	1.92	53.6	6.64
5F-MDMB-P7AICA	48.84	1.74	59.8	7.41
CUMYL-CH-MEGACLONE*	56.40	2.01	66.9	8.29
5-MeO-DMT	28.08	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)

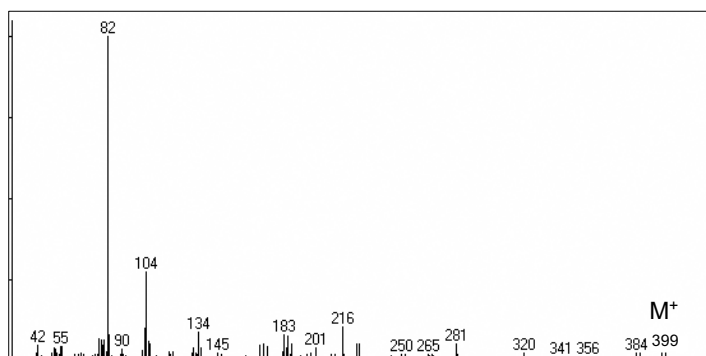
Compounds	GC-MS 条件 2		LC-PDA-MS 条件 2	
	Retention time (min)	Relative retention time 5-MeO-DMT = 1	Retention time (min)	Relative retention time 吉草酸ベタメタゾン = 1
5F-MDMB-P7AICA	15.03	3.07	6.9	0.77
CUMYL-CH-MEGACLONE*	25.68	5.25	19.1	2.12
5-MeO-DMT	4.89	1.00	—	—
吉草酸ベタメタゾン	—	—	9.0	1.00

\* 特にメタノール溶液、アセトニトリル溶液で GC-MS 測定を行なうと分解物と推測される化合物の大きなブロードピークが CUMYL-CH-MEGACLONE のピークに重なって検出される。

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

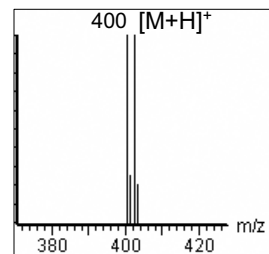
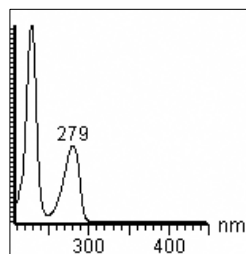
1) Brorphine

GC-MS



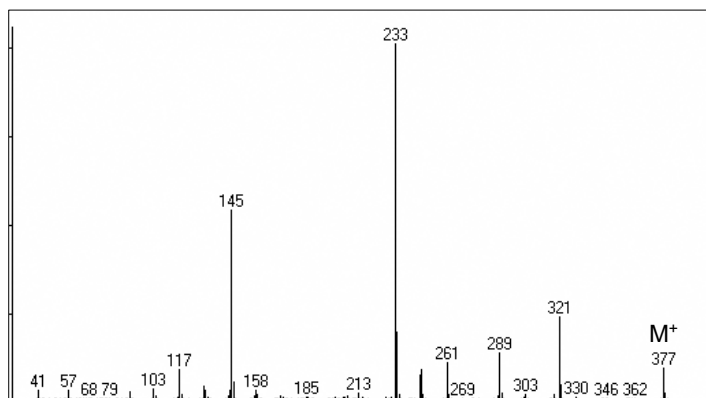
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm)      マススペクトル (m/z)



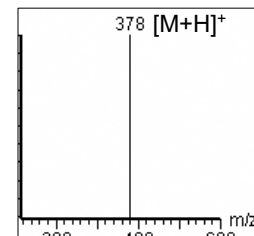
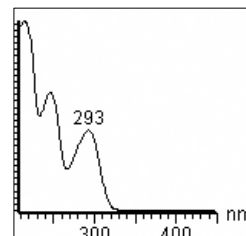
2) 5F-MDMB-P7AICA

GC-MS



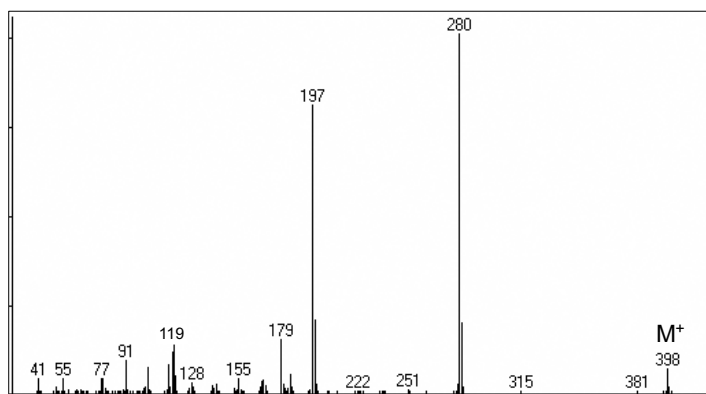
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm)      マススペクトル (m/z)



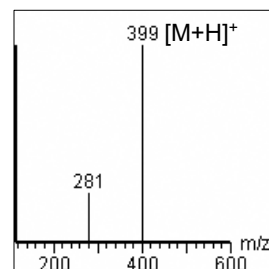
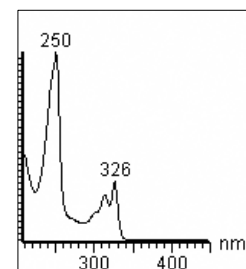
3) CUMYL-CH-MEGACLONE

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm)      マススペクトル (m/z)



特にメタノール溶液、アセトニトリル溶液で GC-MS 測定を行なうと分解物と推測される化合物の大きなブロードピークが CUMYL-CH-MEGACLONE のピークに重なって検出される。