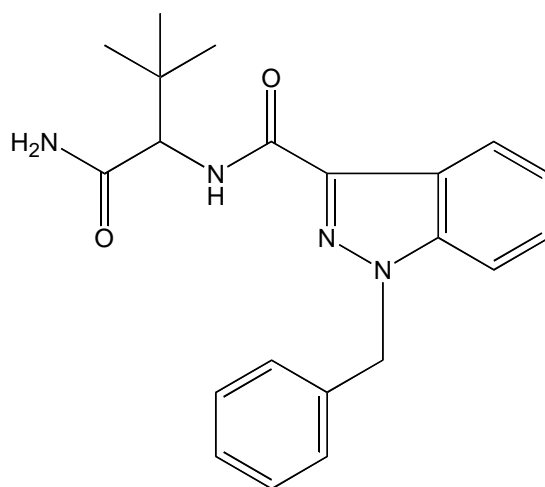


資料1 指定薬物の化学構造等

令和5年8月31日公布の省令(令和5年厚生労働省令第109号)により新たに指定された3物質及び2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-(1-Amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl)-1-benzyl-1*H*-indazole-3-carboxamide

化学名字訳:

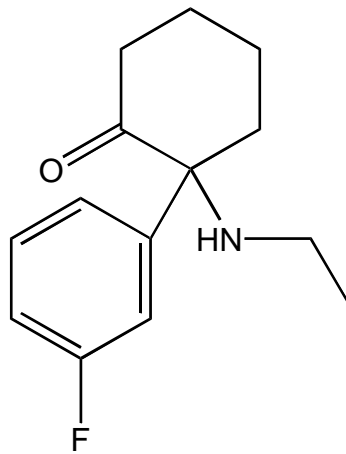
N-(1-アミノ-3,3-ジメチル-1-オキソブタン-2-イル)-1-ベンジル-1*H*-インダゾール-3-カルボキサミド

通称等:

ADB-BINACA

物質2

構造式:



化学名:

2-(Ethylamino)-2-(3-fluorophenyl)cyclohexanone

化学名字訳:

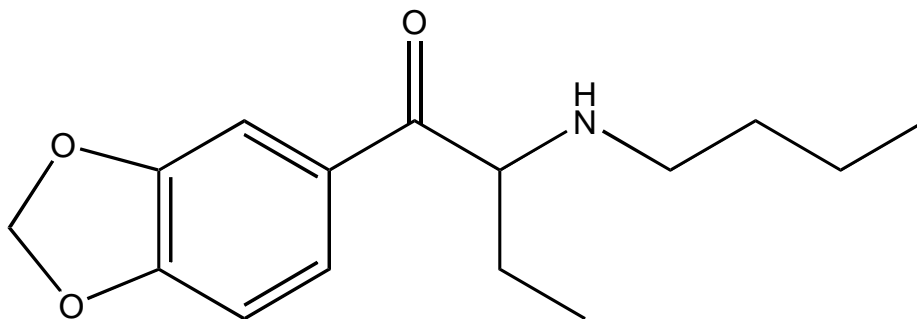
2 - (エチルアミノ) - 2 - (3 - フルオロフェニル) シクロヘキサノン

通称等:

FXE、Fluorexetamine

物質3

構造式:



化学名:

2-(Butylamino)-1-(3,4-methylenedioxyphenyl)butan-1-one

化学名字訳:

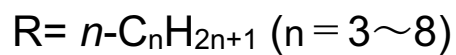
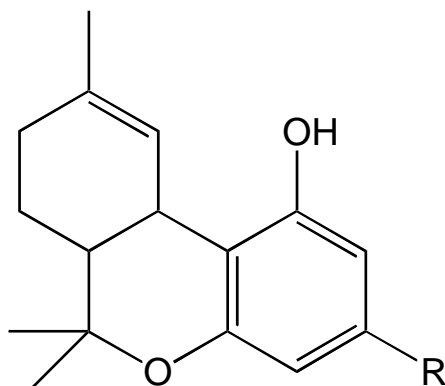
2-(ブチルアミノ)-1-(3,4-メチレンジオキシフェニル)ブタン-1-オン

通称等:

N-Butylbutylone

物質群1

構造式:

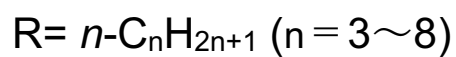
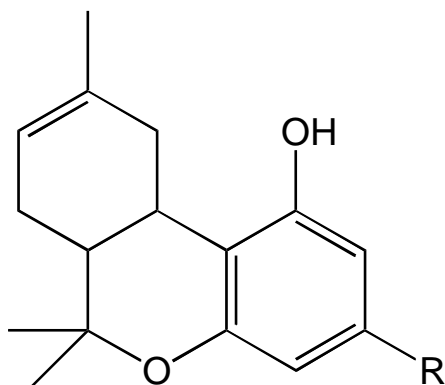


省令名:

6a, 7, 8, 10a-テトラヒドロ-6, 6, 9-トリメチル-6H-ジベンゾ[b, d]ピラン-1-オールの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、3位、6位及び9位以外にさらに置換基が結合していない物及びこれらの塩類。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

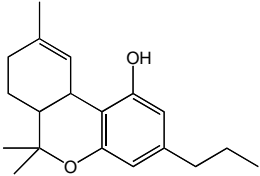
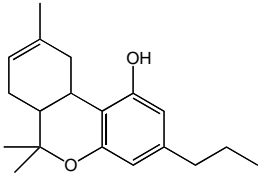
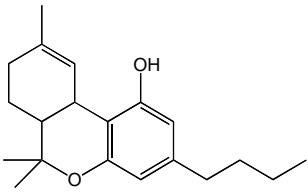
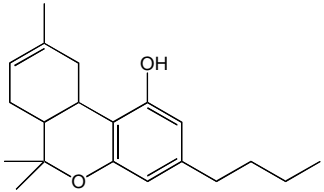
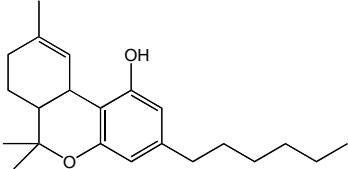
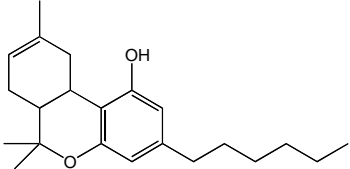
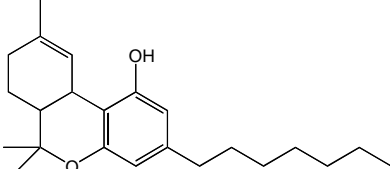
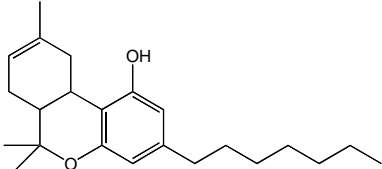
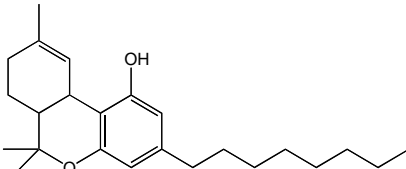
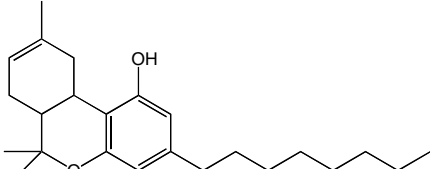
構造式:



省令名:

6a, 7, 10, 10a-テトラヒドロ-6, 6, 9-トリメチル-6H-ジベンゾ[b, d]ピラン-1-オールの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、3位、6位及び9位以外にさらに置換基が結合していない物及びこれらの塩類。ただし、麻薬及び向精神薬取締法に規定する麻薬を除く。

物質群として包括される物質一覧

結合する炭素数 通称名	物質群 1 (Δ^9-)	物質群 2 (Δ^8-)
炭素数 3 THCV		
炭素数 4 THCB		
炭素数 6 THCH		
炭素数 7 THCP		
炭素数 8 THCjd		

資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 5 年 8 月 31 日の省令公布により、新たに指定薬物として指定された 3 物質(メタノールまたは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 2 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化合物のうち、6 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。

注:今回指定された 2 物質群に包括されることとなった指定済み指定薬物 3 物質 Δ^9 -THCH、 Δ^8 -THCH、 Δ^9 -THCP についてはこれまでの測定結果を参照のこと(令和4年薬生監麻発 0315 第2号、令和5年薬生監麻発 0801 第1号)。また、 Δ^8 -THCP はデータ未掲載。

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 μ m, 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 μ m, 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 μ m, 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 μ L

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 μ m, 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 9 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-Butylbutylone	28.55	1.02	30.4	3.71
FXE (Fluorexetamine)	21.18	0.75	11.9	1.45
[参考値]				
ADB-BINACA	51.54	1.83	57.6	7.02
Δ^9 -THCV	41.38	1.47	64.8	7.90
Δ^8 -THCV	40.27	1.43	66.2	8.07
Δ^9 -THCB	44.36	1.58	67.2	8.20
Δ^8 -THCB	43.81	1.56	67.8	8.27
Δ^9 -THCjd	49.58	1.76	—*	—
Δ^8 -THCjd	49.37	1.76	—*	—
5-MeO-DMT	28.10	1.00	8.2	1.00

* LC-PDA-MS 条件 1 では溶出されない

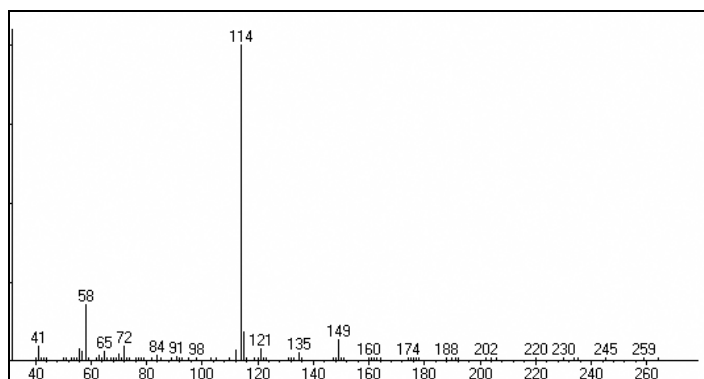
測定条件 2 (合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

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-BINACA	18.86	3.86	6.8	0.77
Δ^9 -THCV	8.47	1.74	17.4	1.97
Δ^8 -THCV	8.16	1.67	18.0	2.04
Δ^9 -THCB	9.93	2.03	20.1	2.27
Δ^8 -THCB	9.59	1.97	20.7	2.34
Δ^9 -THCjd	15.68	3.21	29.3	3.31
Δ^8 -THCjd	15.38	3.15	29.6	3.35
5-MeO-DMT	4.8	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

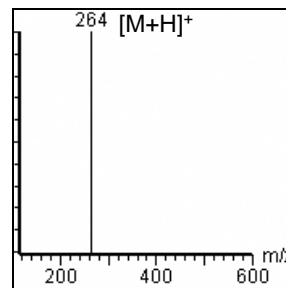
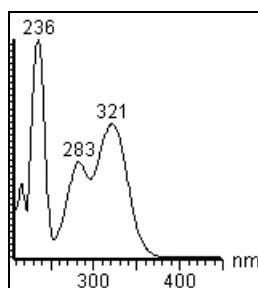
1) N-Butylbutylone

GC-MS



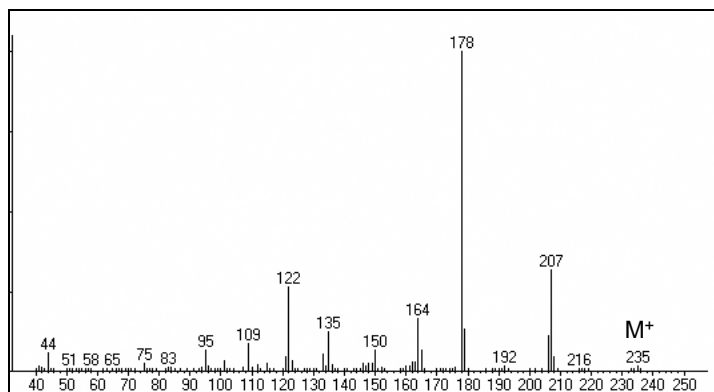
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



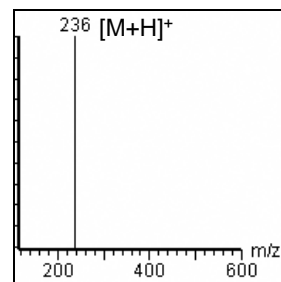
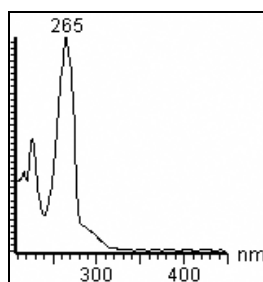
2) FXE (Fluorexetamine)

GC-MS



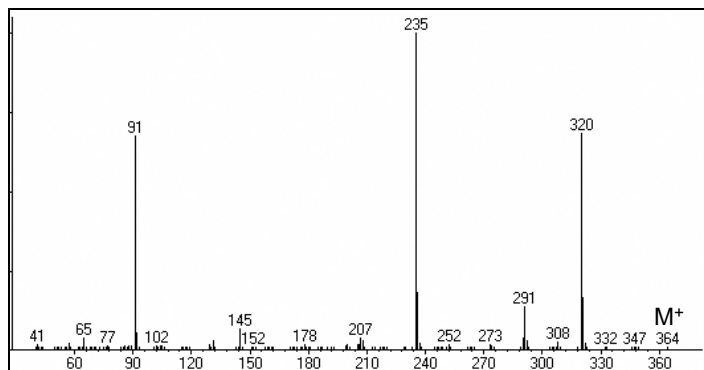
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



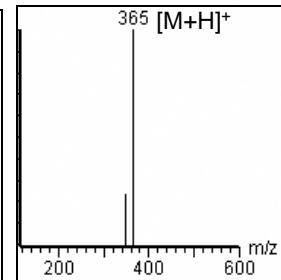
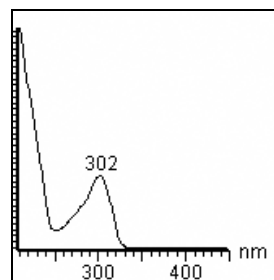
3) ADB-BINACA

GC-MS

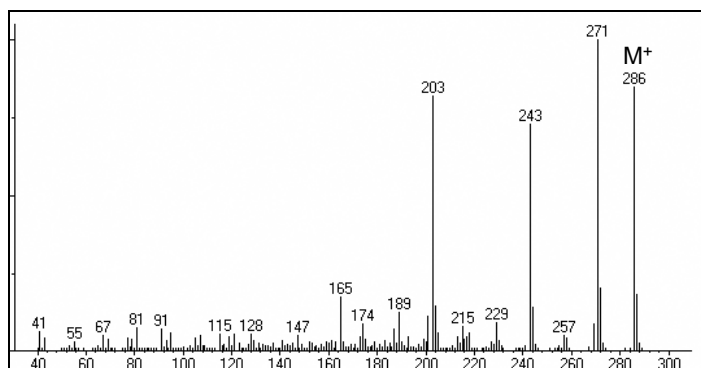


LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

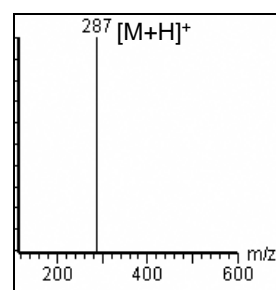
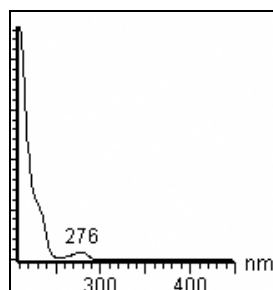


4) Δ^9 -THCV
GC-MS

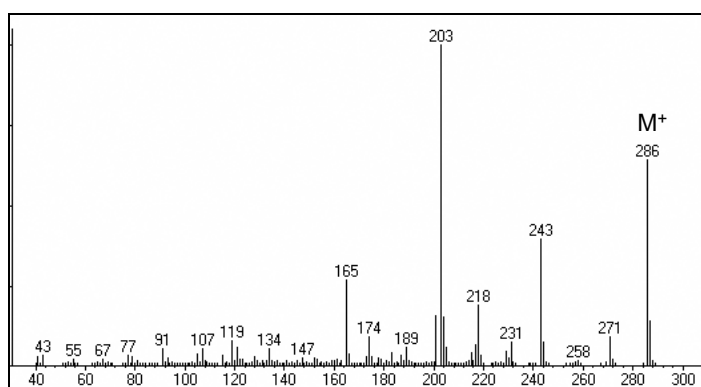


LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

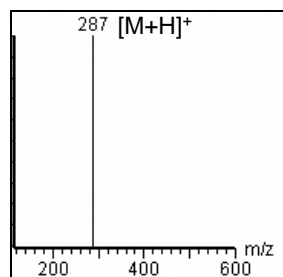
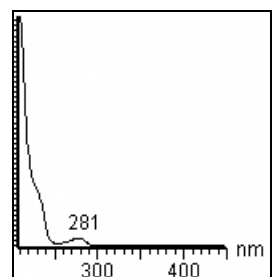


5) Δ^8 -THCV
GC-MS

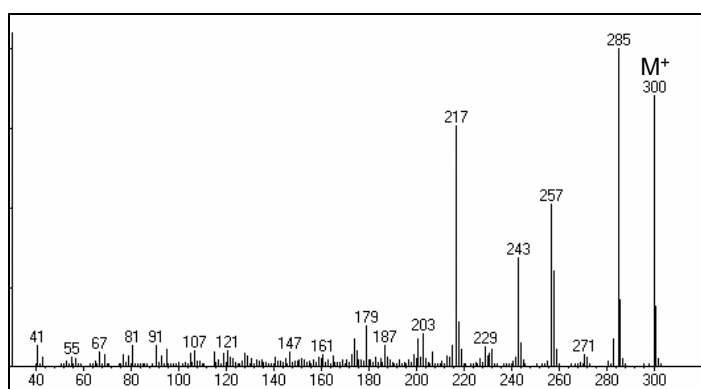


LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

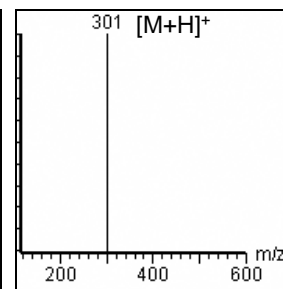
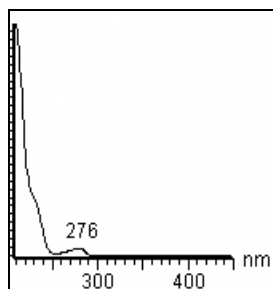


6) Δ^9 -THCB
GC-MS



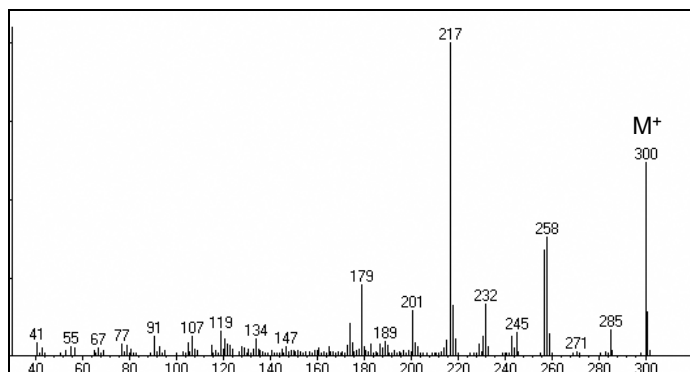
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

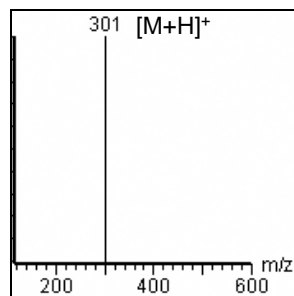
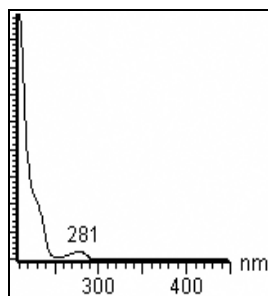


7) Δ^8 -THCB
GC-MS

LC-PDA-MS (positive mode)

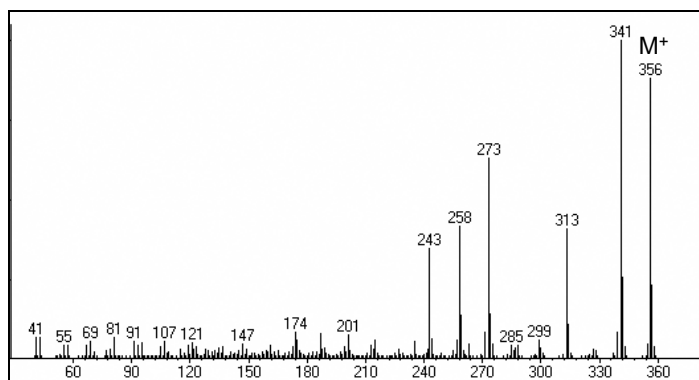


UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

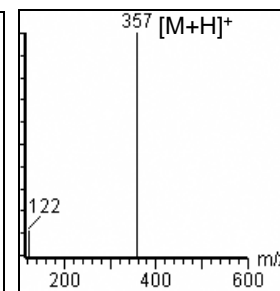
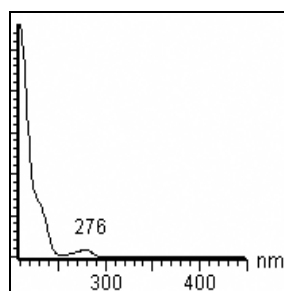


8) Δ^9 -THCjd
GC-MS

LC-PDA-MS (positive mode)

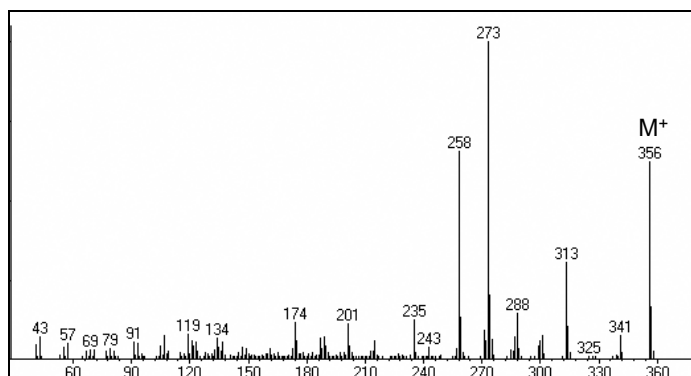


UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



9) Δ^8 -THCjd
GC-MS

LC-PDA-MS (positive mode)



UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

