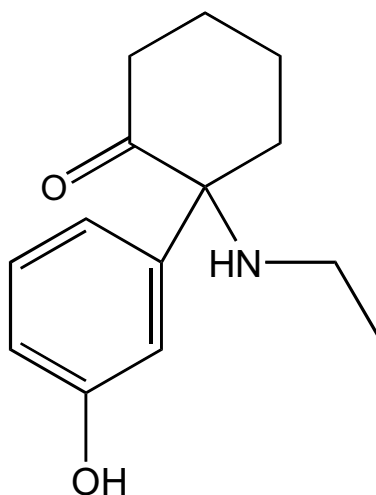


資料 1 指定薬物の化学構造等

令和 6 年 1 月 19 日公布の省令（令和 6 年厚生労働省令第 11 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：

2-(Ethylamino)-2-(3-hydroxyphenyl)cyclohexanone

化学名字訳：

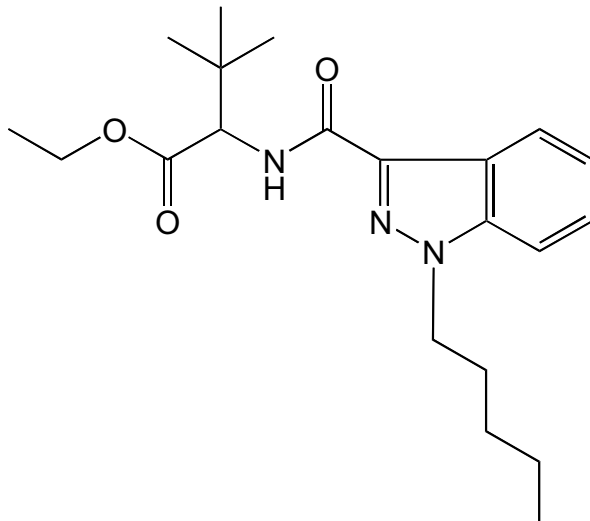
2 - (エチルアミノ) - 2 - (3 - ヒドロキシフェニル) シクロヘキサノン

通 称 等：

HXE、Hydroxetamine

物質 2

構造式：



化学名：

Ethyl 3,3-dimethyl-2-(1-pentyl-1*H*-indazole-3-carboxamido)butanoate

化学名字訳：

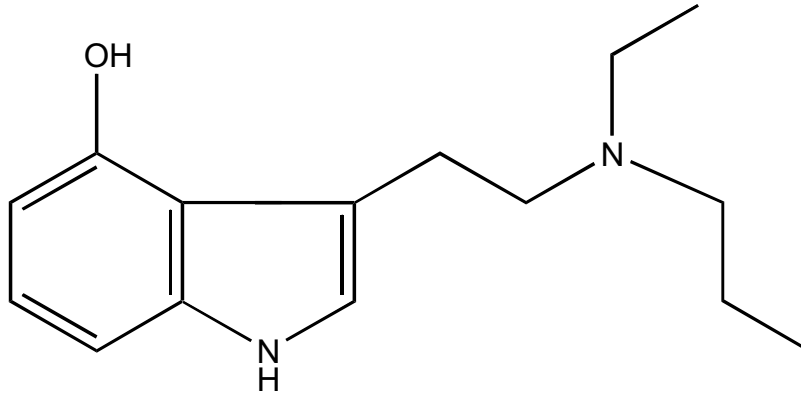
エチル = 3, 3 - ジメチル - 2 - (1 - ペンチル - 1 *H* - インダゾール - 3 - カルボキサミド) ブタノアート

通称等：

EDMB-PINACA

物質 3

構造式：



化学名：

N-Ethyl-4-hydroxy-*N*-propyltryptamine

化学名字訳：

N-エチル-4-ヒドロキシ-*N*-プロピルトリプタミン

通称等：

4-HO-EPT

資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 6 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。

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、スプリットレスまたはスプリット(10:1)、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
HXE	27.91	0.99	6.2	0.78
4-HO-EPT	35.82	1.27	10.9	1.38
[参考値]				
EDMB-PINACA	47.87	1.70	68.4	8.66
5-MeO-DMT	28.11	1.00	7.9	1.00

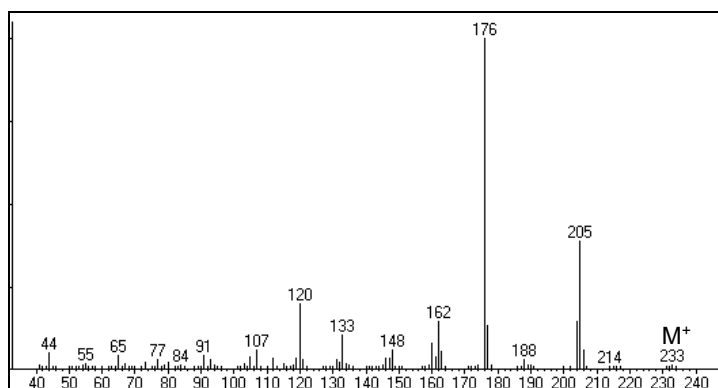
測定条件 2 (合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

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
EDMB-PINACA	13.26	2.75	19.6	2.23
5-MeO-DMT	4.83	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

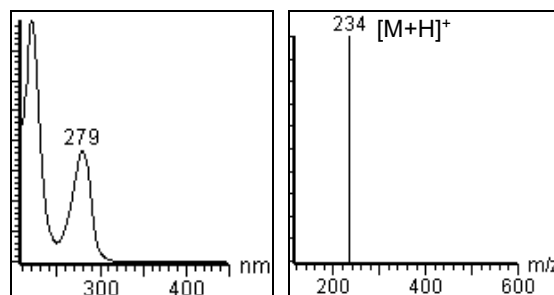
1) HXE (Hydroxetamine)

GC-MS



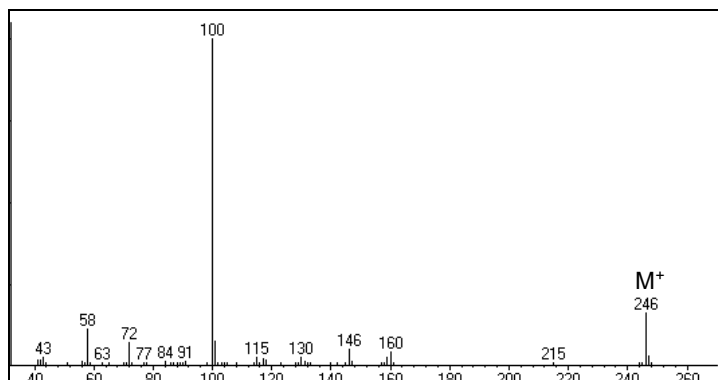
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



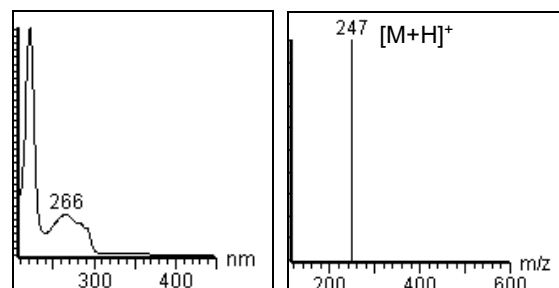
2) 4-HO-EPT (4-hydroxy EPT)

GC-MS



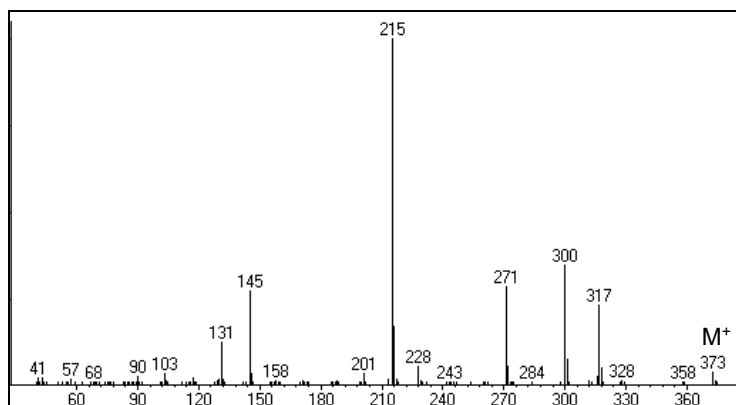
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



3) EDMB-PINACA

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

