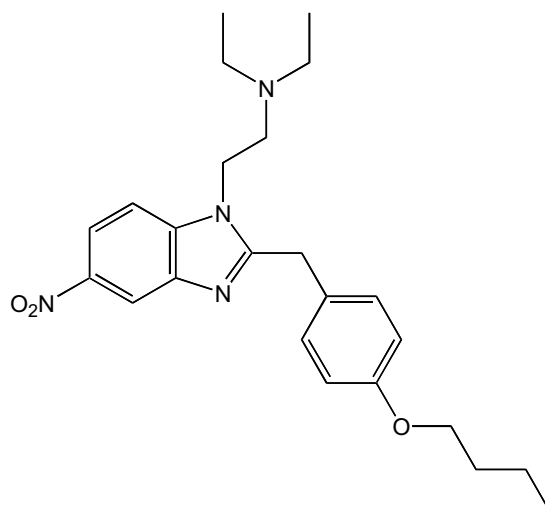


資料 1 指定薬物の化学構造等

令和 6 年 3 月 6 日公布の省令（令和 6 年厚生労働省令第 36 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-(4-Butoxybenzyl)-1-(2-diethylamino)ethyl-5-nitrobenzimidazole

化学名字訳：

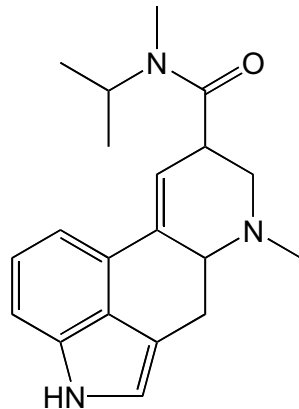
2 - (4 - ブトキシベンジル) - 1 - (2 - ジエチルアミノ) エチル - 5 -
ニトロベンズイミダゾール

通 称 等：

Butonitazene

物質 2

構造式：



化学名：

N-Methyl-*N*-(propan-2-yl)-7-methyl-4,6,6a,7,8,9-hexahydroindolo[4,3-*fg*]quinoline-9-carboxamide

化学名字訳：

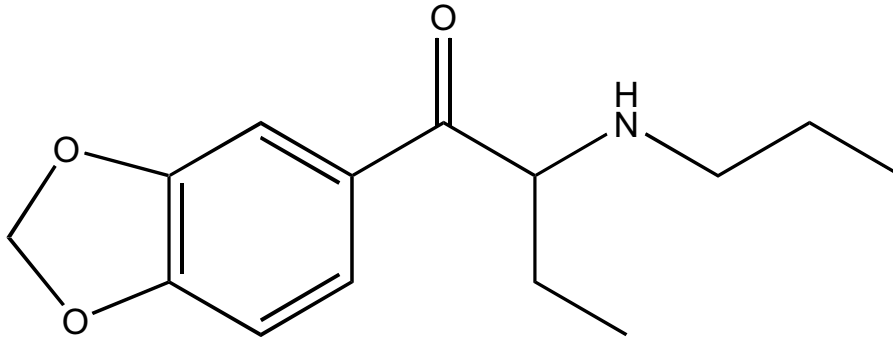
N-メチル-*N*-(プロパン-2-イル)-7-メチル-4,6,6a,7,8,9-ヘキサヒドロインドロ[4,3-*fg*]キノリン-9-カルボキサミド

通称等：

MiPLA、MIPLA、*N*-Methyl-*N*-isopropyl lysergamide

物質 3

構造式：



化学名：

1-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-2-(propylamino)butan-1-one

化学名字訳：

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

通称等：

N-Propylbutylone、Putylone、bk-PBDB

資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 6 年 3 月 6 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、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(LSD 類を対象とした測定条件)*

カラム:DB-1HT(15 m × 0.25 mm i.d., 膜厚 0.10 µm, Agilent 社製)

キャリアーガス:He, 1.0 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:120°C (1 min hold)－15°C/min－310°C (5 min hold)

*平成 28 年 4 月 8 日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

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

HPLC-FL

条件(LSD 類を対象とした測定条件)

カラム:ACQUITY UPLC HSS T3(2.1 × 100 mm, 1.8 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

A:B 85:15 (0 min)－65:35 (20 min)－15:85 (22 min, 4 min hold)

流速:0.3 mL/min、カラム温度:40°C、注入量:1 µL

検出:蛍光検出器(励起波長 300 nm、測定波長 420 nm)

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
N-Propylbutylone	25.63	0.91	17.2	2.15
Butonitazene	56.16	1.99	56.5	7.06
MiPLA*	51.21	1.82	34.6	4.33
5-MeO-DMT	28.17	1.00	7.9	1.00

*測定はアセトニトリル溶液で行った

測定条件 2 (LSD を対象とした測定条件)*

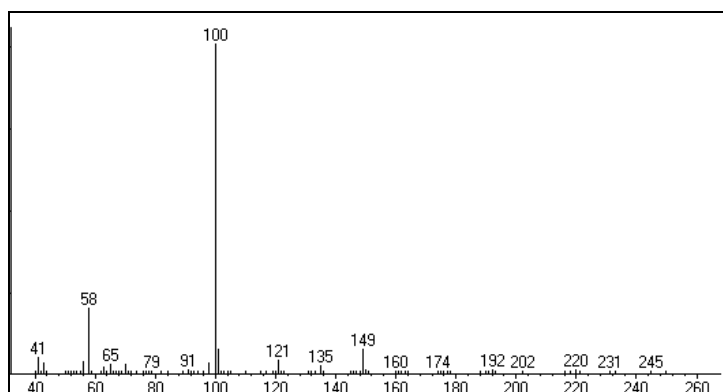
Compounds	GC-MS 条件 2		HPLC-FL	
	Retention time (min)	Relative retention time 1P-LSD= 1	Retention time (min)	Relative retention time 1P-LSD= 1
MiPLA	11.07	0.90	6.9	0.59
1P-LSD	12.32	1.00	11.6	1.00
[参考値]				
LSD	11.00		6.6	

*測定はアセトニトリル溶液で行った

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

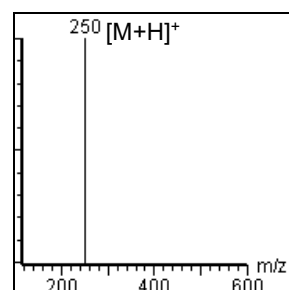
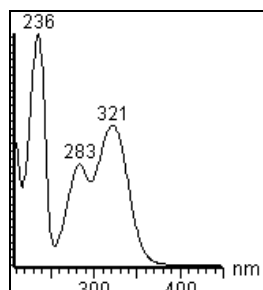
1) N-Propylbutylone

GC-MS



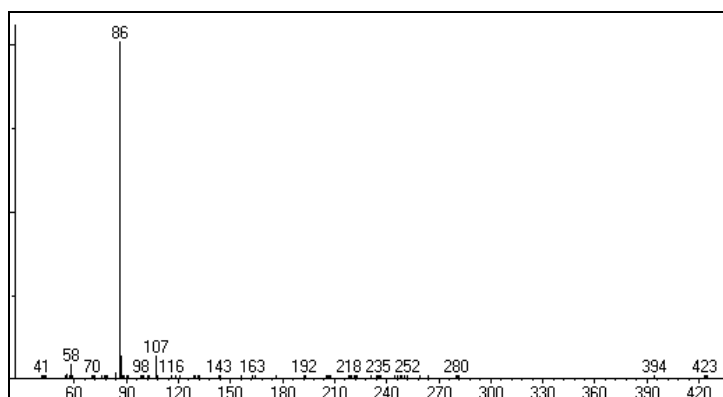
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



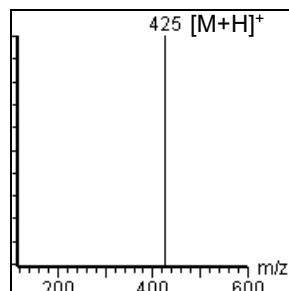
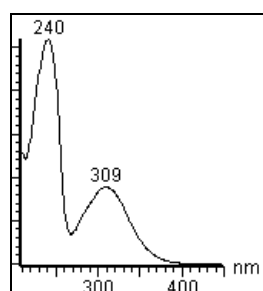
2) Butonitazene

GC-MS*



LC-PDA-MS (positive mode)

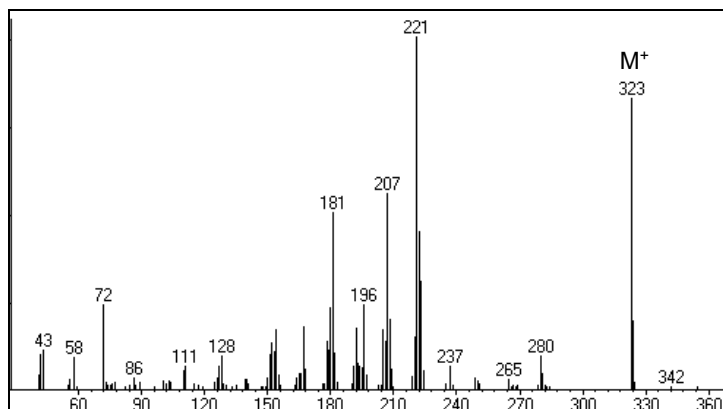
UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



* GC-MS の注入口温度を 250°Cに変更し測定を行った.

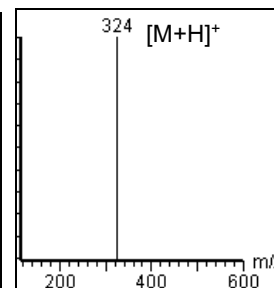
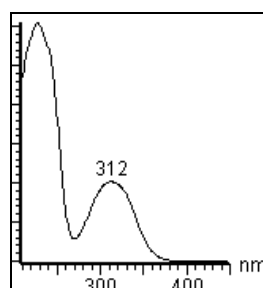
3) MiPLA

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



MiPLA の GC-MS 及び LC-MS 測定はアセトニトリル溶液で行った.