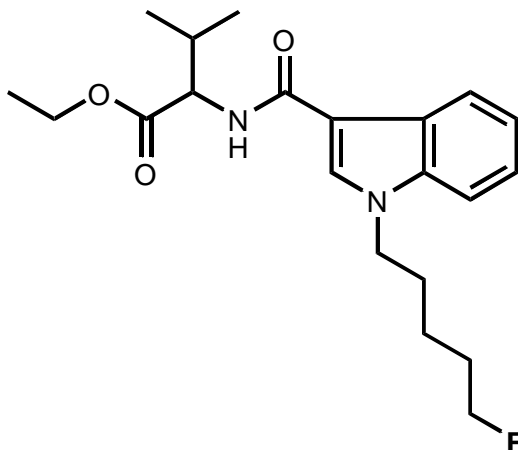


資料1 指定薬物の化学構造等

令和3年8月25日公布の省令(令和3年厚生労働省令第142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:



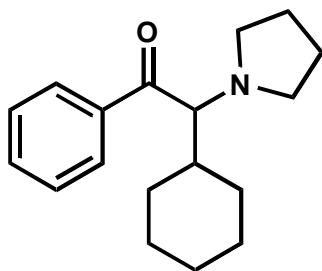
化学名: Ethyl 2-[1-(5-fluoropentyl)-1*H*-indole-3-carboxamido]-3-methylbutanoate

化学名字訳: エチル=2-[1-(5-フルオロペンチル)-1*H*-インドール-3-カルボキサミド]-3-メチルブタノアート

通称等: 5F-EMB-PICA, EMB-2201

物質2

構造式:



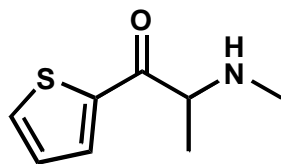
化学名: 2-Cyclohexyl-1-phenyl-2-(pyrrolidin-1-yl)ethan-1-one

化学名字訳: 2-シクロヘキシル-1-フェニル-2-(ピロリジン-1-イル)エタン-1-オン

通称等: α -PCYP

物質3

構造式:



化学名:2-(Methylamino)-1-(thiophen-2-yl)propan-1-one

化学名字訳:2-(メチルアミノ)-1-(チオフェン-2-イル)プロパン-1-オン

通称等:2-Thiothionone, β k-MPA

参考資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 3 年 8 月 25 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)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
2-Thiothionone*	12.99	0.46	2.6	0.32
α-PCYP	32.74	1.17	49.1	6.03
[参考値]				
5F-EMB-PICA**	49.99	1.78	61.1	7.50
5-MeO-DMT	28.08	1.00	8.2	1.00

*メタノール溶液で LC-MS の測定を行なうとピークが割れることがあるので、注入サンプルは移動相で希釈する。

測定条件2 (合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

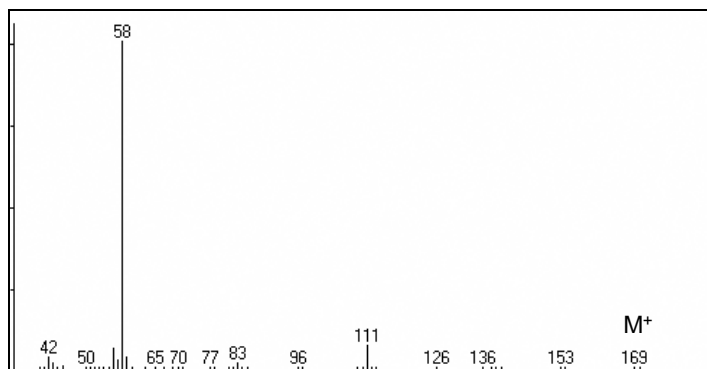
Compounds	GC-MS 条件 2		LC-PDA-MS 条件 2	
	Retention time (min)	Relative retention time 5-MeO-DMT = 1	Retention time (min)	Relative retention time 吉草酸ベタメタゾン = 1
5F-EMB-PICA**	16.89	3.46	10.0	1.11
5-MeO-DMT	4.88	1.00	—	
吉草酸ベタメタゾン	—		9.0	1.00

**メタノール溶液中で GC-MS の測定を行なうと一部 MMB2201 として検出される。アセトニトリル溶液中ではほとんど 5F-EMB-PICA として検出される。

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

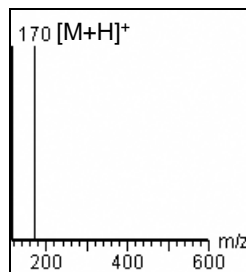
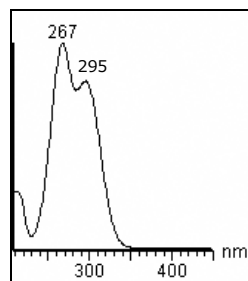
1) 2-Thiothionone

GC-MS



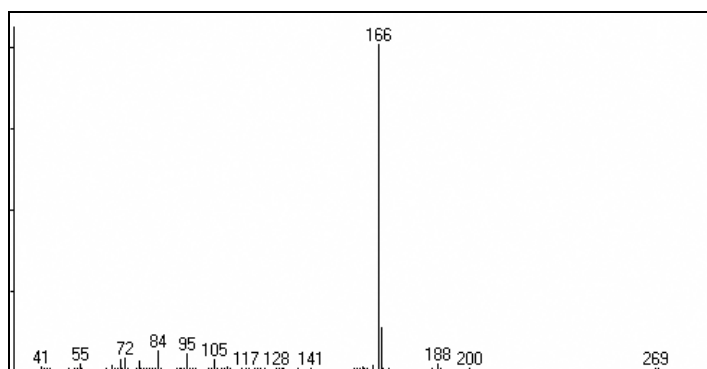
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



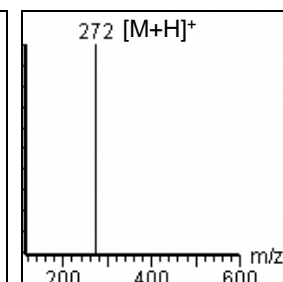
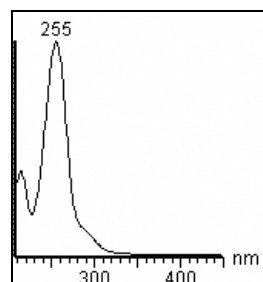
2) α-PCYP

GC-MS



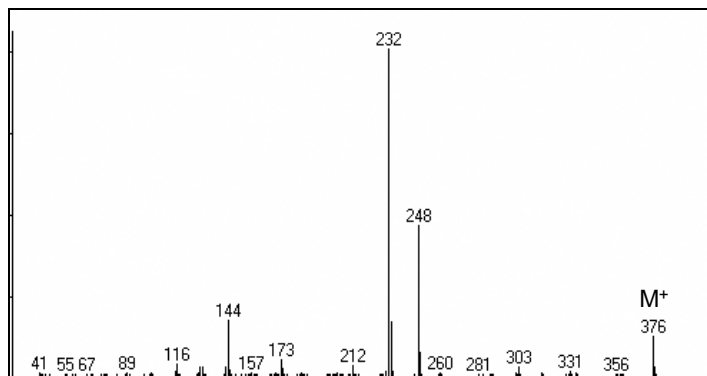
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



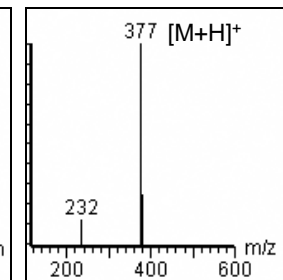
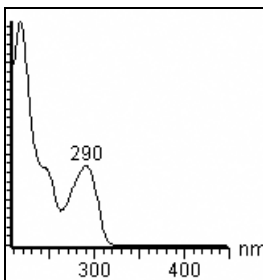
3) 5F-EMB-PICA

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



メタノール溶液中で GC-MS の測定を行なうと一部 MMB2201 として検出される。アセトニトリル溶液中ではほとんど 5F-EMB-PICA として検出される。