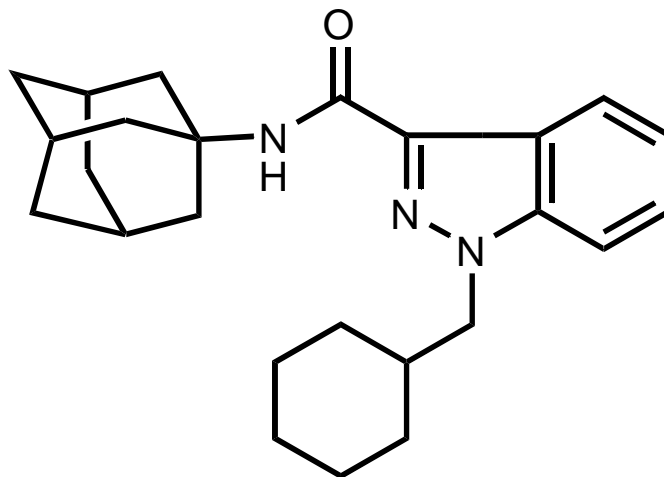


資料1 指定薬物の化学構造等

令和3年10月21日公布の省令(令和3年厚生労働省令第174号)により新たに指定された4物質の化学構造等は次のとおりである。

物質1

構造式:



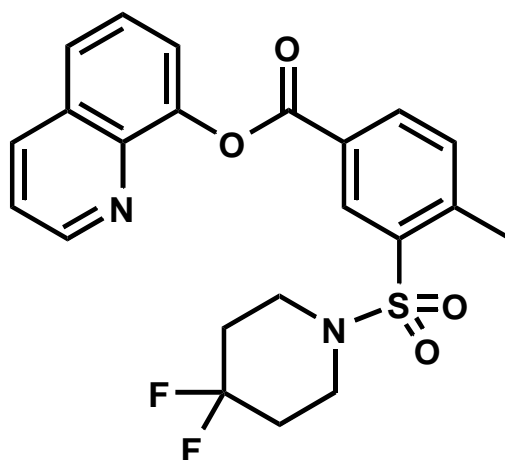
化学名: *N*-(1-Adamantyl)-1-(cyclohexylmethyl)-1*H*-indazole-3-carboxamide

化学名字訳: *N*-(1-アダマンチル)-1-(シクロヘキシルメチル)-1*H*-インダゾール-3-カルボキサミド

通称等: Adamantyl-CHMINACA, A-CHMINACA

物質2

構造式:



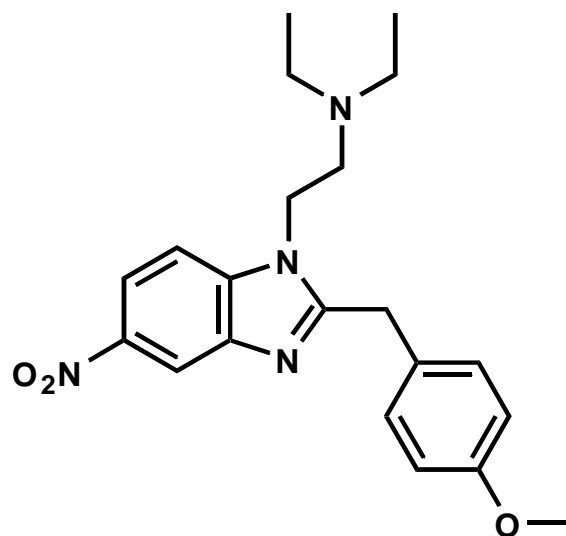
化学名: Quinolin-8-yl 3-[(4,4-difluoropiperidin-1-yl)sulfonyl]-4-methylbenzoate

化学名訳: キノリン-8-イル=3-[(4,4-ジフルオロピペリジン-1-イル)スルホニル]-4-メチルベンゾアート

通称等: 2F-QMPSB

物質3

構造式:



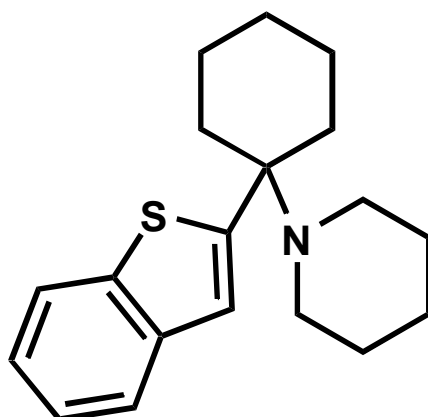
化学名: 1-(Diethylamino)ethyl-2-(4-methoxybenzyl)-5-nitrobenzimidazole

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

通称等: Metonitazene

物質4

構造式:



化学名: 1-[1-(Benzo[*b*]thiophen-2-yl)cyclohexyl]piperidine

化学名字訳: 1-[1-(ベンゾ[*b*]チオフェン-2-イル)シクロヘキシル]ピペリジン

通称等: Benocyclidine, BTCP

参考資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 3 年 10 月 21 日公布の 4 物質追加省令により、新たに指定薬物として指定された 4 物質(メタノール溶液、アセトニトリル溶液、クロロホルム溶液)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 4 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
Benocyclidine	45.33	1.61	55.8	6.94
Metonitazene	53.24	1.90	44.9	5.58
[参考値]				
2F-QMPSB*	53.56	1.91	61.1	7.60
A-CHMINACA	54.36	1.94	—	—
5-MeO-DMT	28.08	1.00	8.0	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)

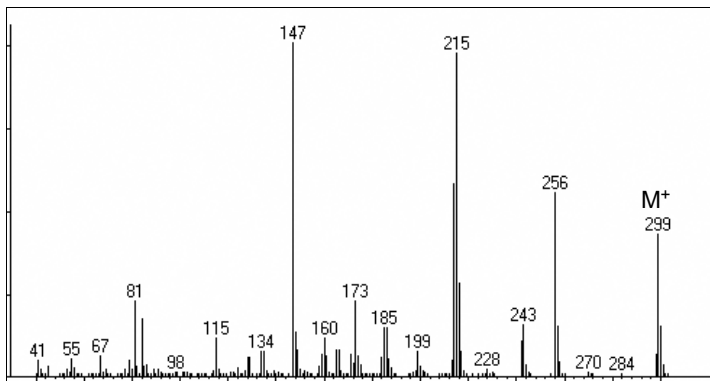
Compounds	GC-MS 条件 2		LC-PDA-MS 条件 2	
	Retention time (min)	Relative retention time 5-MeO-DMT = 1	Retention time (min)	Relative retention time 吉草酸ベタメタゾン = 1
2F-QMPSB*	22.38	4.57	8.9	0.99
A-CHMINACA	23.29	4.76	27.9	3.13
5-MeO-DMT	4.89	1.00	—	—
吉草酸ベタメタゾン	—	—	8.9	1.00

*メタノール溶液、アセトニトリル溶液で GC-MS 測定を行なうと主に分解物が検出される。クロロホルム溶液では主に 2F-QMPSB が検出される。

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) Benocyclidine

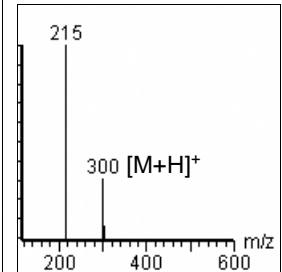
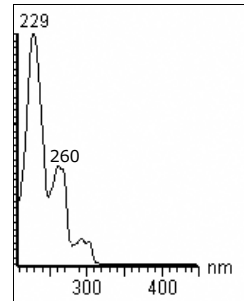
GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

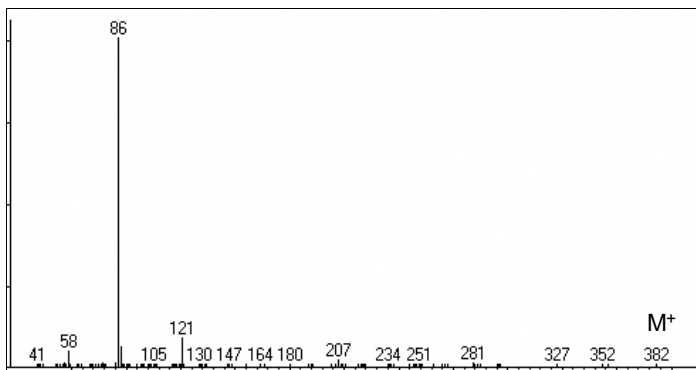
UV スペクトル (nm)

マススペクトル (m/z)



2) Metonitazene

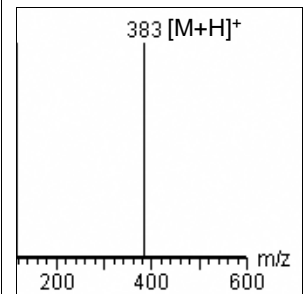
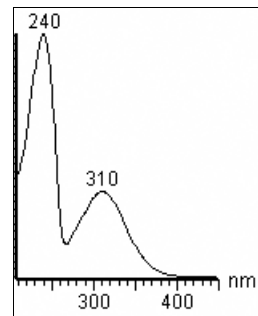
GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

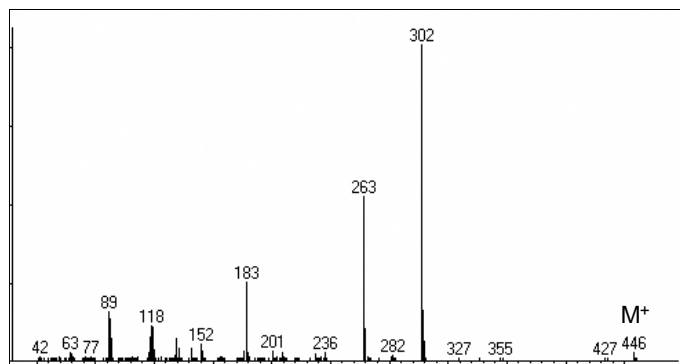
UV スペクトル (nm)

マススペクトル (m/z)



3) 2F-QMPSB

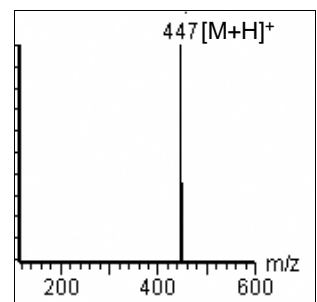
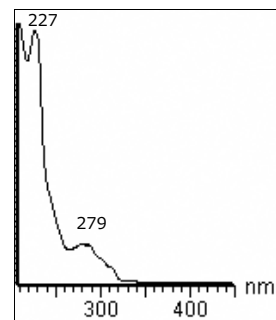
GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

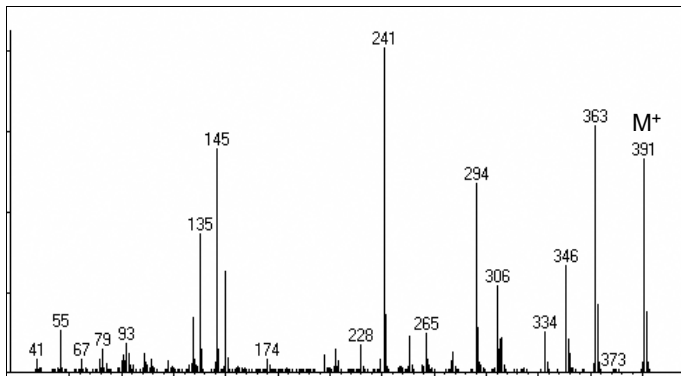
UV スペクトル (nm)

マススペクトル (m/z)



メタノール溶液、アセトニトリル溶液で GC-MS 測定を行なうと主に分解物が検出される。クロロホルム溶液では主に 2F-QMPSB が検出される。

4) A-CHMINACA
GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

