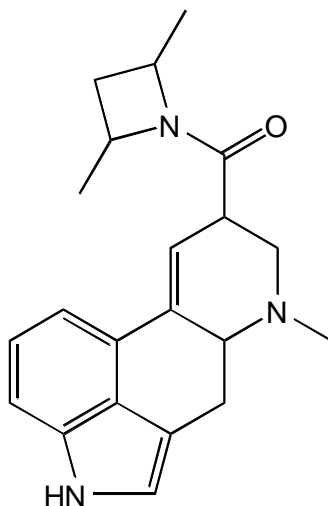


資料1 指定薬物の化学構造等

令和4年8月30日公布の省令(令和4年厚生労働省令第120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-Dimethylazetidin-1-yl)-(7-methyl-4,6,6a,7,8,9-hexahydroindolo[4,3-*fg*]quinolin-9-yl)methanone

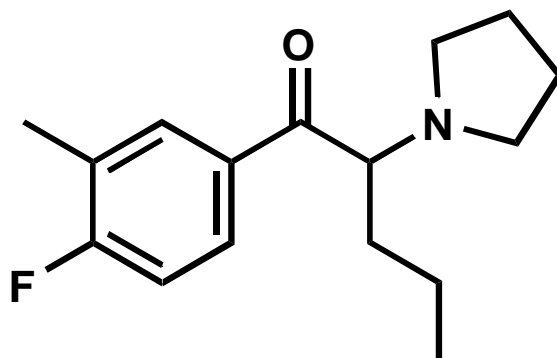
化学名字訳：

(2,4-ジメチルアゼチジン-1-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-イル)メタンオン

通称等：LSZ、LA-SS-Az

物質2

構造式：



化学名：

1-(4-Fluoro-3-methylphenyl)-2-(pyrrolidin-1-yl)pentan-1-one

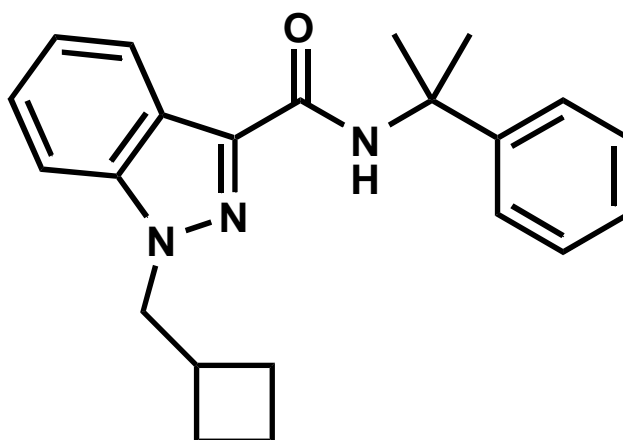
化学名字訳：

1 - (4 - フルオロ - 3 - メチルフェニル) - 2 - (ピロリジン - 1 - イル)
ペンタン - 1 - オン

通称等：4-fluoro-3-methyl- α -PVP、MFPVP

物質3

構造式：



化学名：

1-(Cyclobutylmethyl)-*N*-(2-phenylpropan-2-yl)-1*H*-indazole-3-carboxamide

化学名字訳：

1-(シクロブチルメチル)-*N*-(2-フェニルプロパン-2-イル)-1*H*-
インダゾール-3-カルボキサミド

通称等：CUMYL-CBMINACA

参考資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 4 年 8 月 30 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)

条件 3 (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

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℃、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)－70:30 (15 min)－15:85 (18 min, 4 min hold)

流速:0.3 mL/min、カラム温度:40℃、注入量:1 µL

検出:蛍光検出器(励起波長 300 nm、測定波長 420 nm)

*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

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, 吉草酸ベタメタゾン, 又は 1P-LSD 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
4-fluoro-3-methyl- α -PVP	24.40	0.87	42.0	5.28
LSZ [参考値]	—		32.8	4.13
CUMYL-CBMINACA	49.78	1.77	64.9	8.17
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
CUMYL-CBMINACA	16.59	3.39	16.6	1.87
5-MeO-DMT	4.89	1.00	—	
吉草酸ベタメタゾン	—		8.9	1.00

測定条件 3 (LSD を対象とした測定条件)*

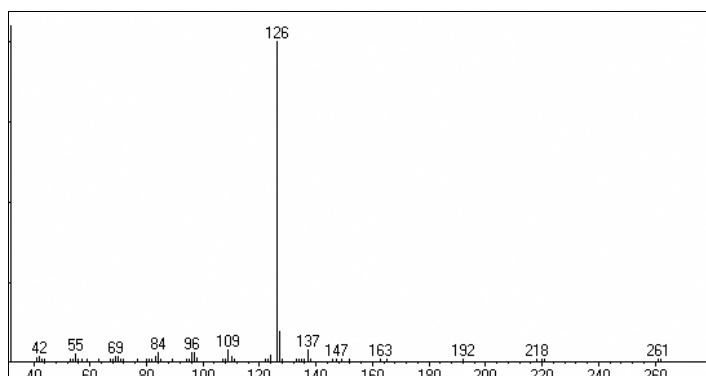
Compounds	GC-MS 条件 3		HPLC-FL	
	Retention time (min)	Relative retention time 1P-LSD = 1	Retention time (min)	Relative retention time 1P-LSD = 1
LSZ	11.47	0.93	6.7	0.58
1P-LSD [参考値]	12.34	1.00	11.6	1.00
LSD	11.00		6.6	

*LSZ, 1P-LSD 及び LSD の分析はアセトニトリル溶液で行なった。

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

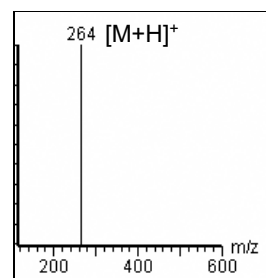
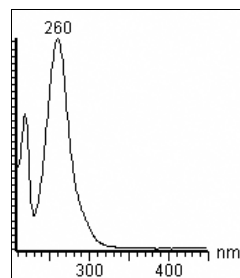
1) 4-fluoro-3-methyl- α -PVP

GC-MS



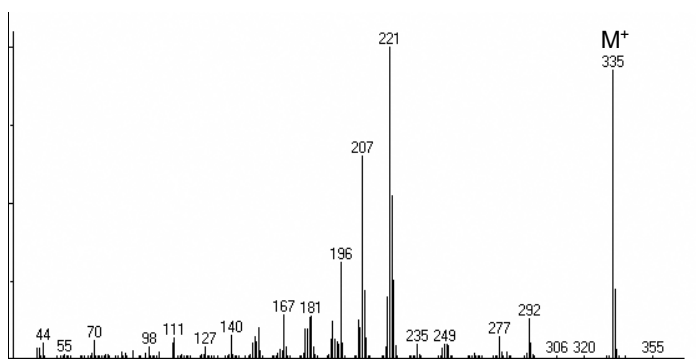
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



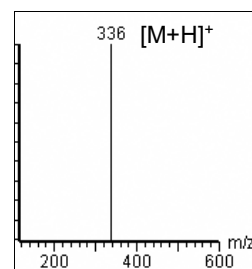
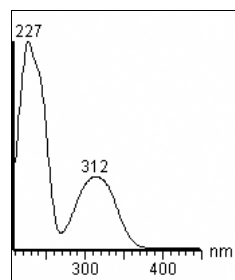
2) LSZ

GC-MS



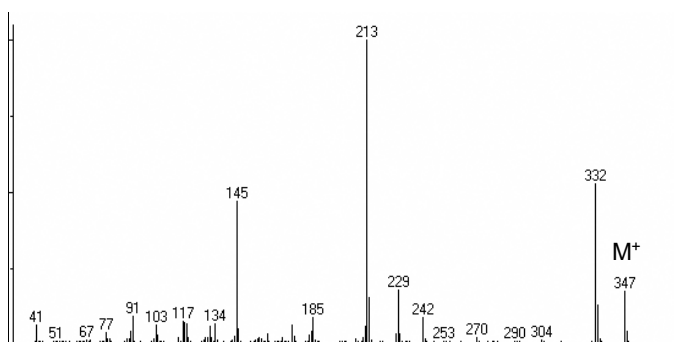
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



3) CUMYL-CBMINACA

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

