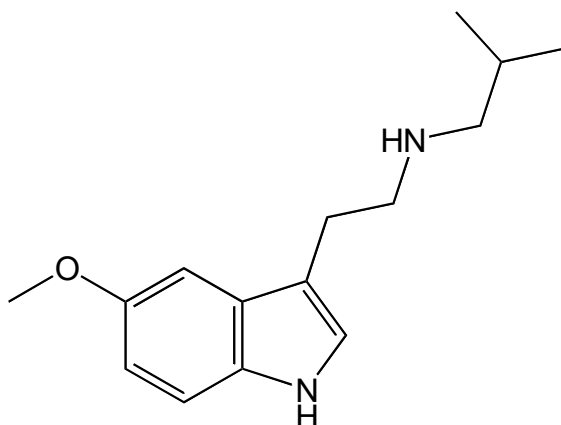


資料1 指定薬物の化学構造等

令和8年8月 18 日公布の省令(令和8年厚生労働省令第 131 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-Isobutyl-5-methoxytryptamine

化学名字訳：

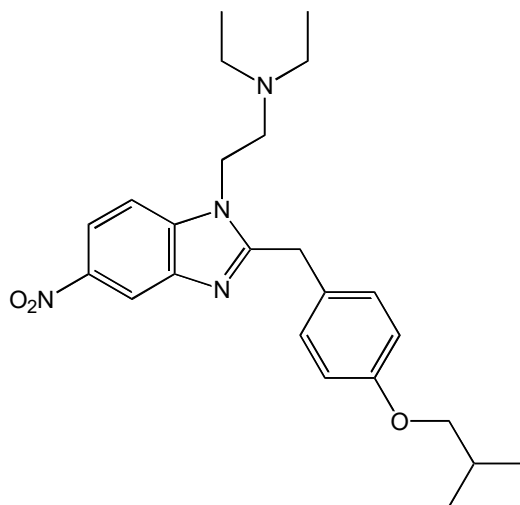
N-イソブチル-5-メトキシトリプタミン

通 称 等：

5-MeO-NiBT、5-MeO-iBT

物質 2

構 造 式：



化 学 名：

1-(2-Diethylamino)ethyl-2-(4-isobutoxybenzyl)-5-nitrobenzimidazole

化学名字訳：

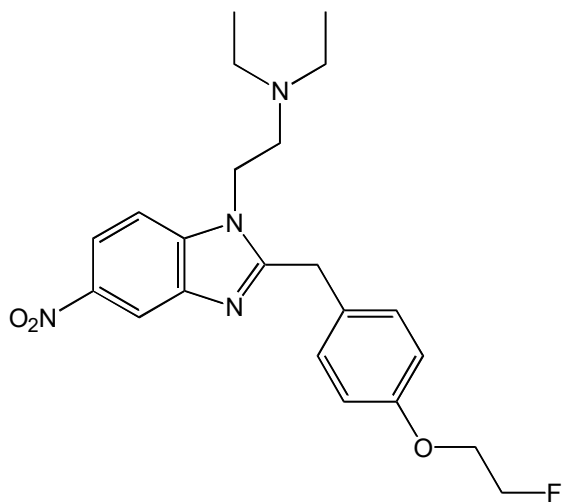
1 - (2 - ジエチルアミノ) エチル - 2 - (4 - イソブトキシベンジル) - 5 - ニトロベン
ズイミダゾール

通 称 等：

Isobutonitazene

物質 3

構 造 式：



化 学 名：

1-(2-Diethylamino)ethyl-2-[4-(2-fluoroethoxy)benzyl]-5-nitrobenzimidazole

化学名字訳：

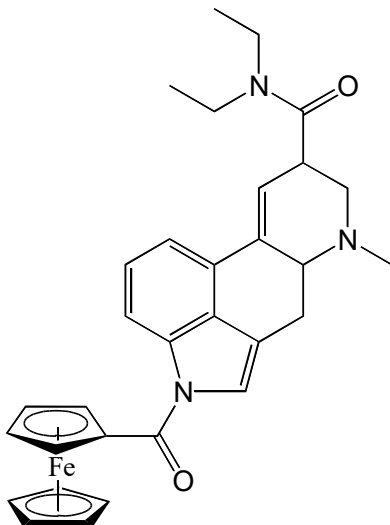
1 - (2 - ジエチルアミノ) エチル - 2 - [4 - (2 - フルオロエトキシ) ベンジル] - 5
- ニトロベンズイミダゾール

通 称 等：

Fluetonitazene

物質 4

構造式：



化学名：

N,N-Diethyl-4-(ferrocenecarbonyl)-7-methyl-4,6,6a,7,8,9-hexahydroindolo[4,3-*fg*]quinoline-9-carboxamide

化学名字訳：

N, N－ジエチル－4－（フェロセンカルボニル）－7－メチル－4, 6, 6a, 7, 8, 9－ヘキサヒドロインドロ [4, 3－f g] キノリン－9－カルボキサミド

通称等：

1Fe-LSD

資料 2 GC-MS、LC-PDA-MS 及び HPLC-FL の測定結果

令和 8 年 8 月 18 日の省令公布により、新たに指定薬物として指定された 4 物質(メタノール及びアセトニトリル溶液)の GC-MS、LC-PDA-MS 及び HPLC-FL 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℃、スプリットレス、トランスファーライン温度:280℃、イオン化法:EI 法

カラム温度:80℃ (1 min hold)－5℃/min－190℃ (15 min hold)－10℃/min－310℃ (10 min 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:280℃、スプリットレス、トランスファーライン温度:280℃、イオン化法:EI 法

カラム温度:120℃ (1 min hold)－15℃/min－325℃ (8 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(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℃、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)－55:45 (30 min)－15:85 (35 min, 5min 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 4 物質の保持時間及び、5-MeO-DMT 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	
	Retention time (min)	Relative retention time 5-MeO-DMT = 1	Retention time (min)	Relative retention time 5-MeO-DMT = 1
5-MeO-NiBT	36.05	1.28	24.0	2.93
Isobutონitazene	55.40	1.97	56.9	6.94
Fluetonitazene	54.50	1.94	50.4	6.15
1Fe-LSD*	—	—	57.3	6.99
5-MeO-DMT	28.16	1.00	8.2	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
1Fe-LSD*	17.60	1.42	21.1	1.82
1P-LSD	12.37	1.00	11.6	1.00
[参考値]				
LSD	11.04		6.6	

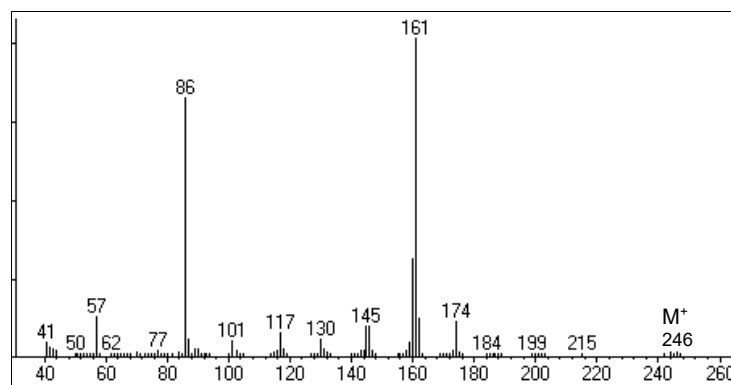
* 測定はアセトニトリル溶液で行った。

** GC-MS 分析において 1Fe-LSD の検出は困難である。また 1Fe-LSD の分析により分析機器の感度低下をもたらす恐れがあるため GC-MS 分析は推奨しない。

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

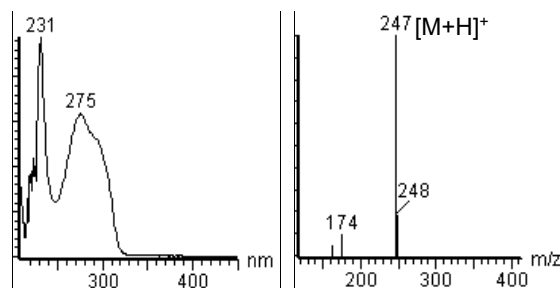
1) 5-MeO-NiBT

GC-MS



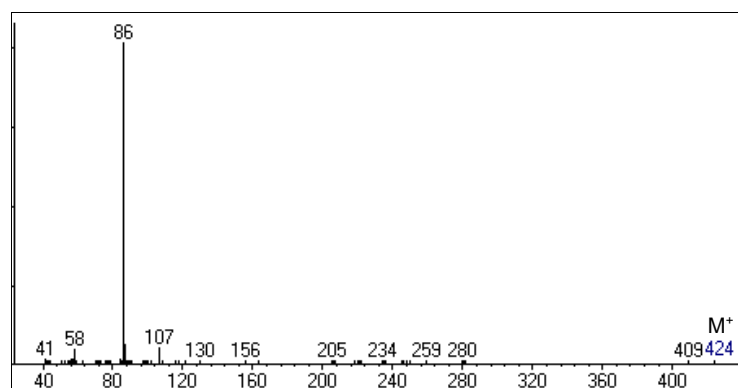
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



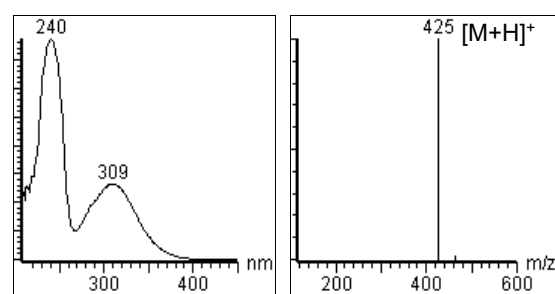
2) Isobutonitazene

GC-MS



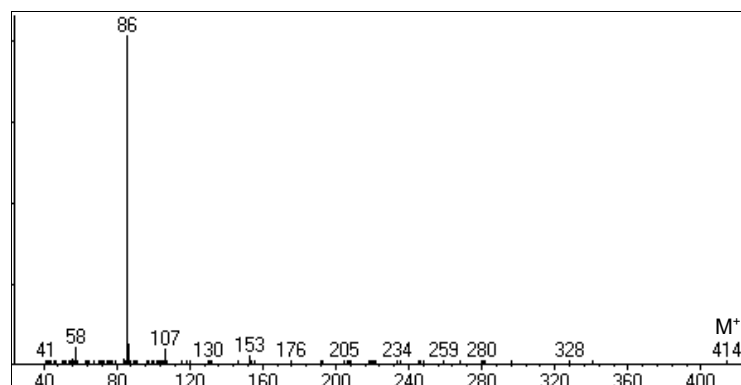
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



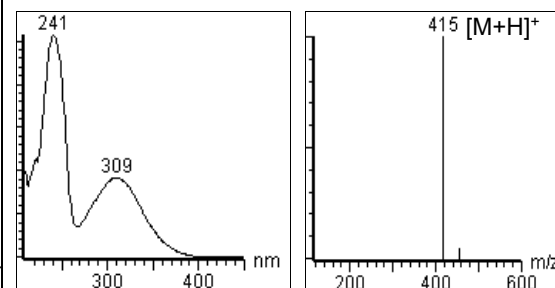
3) Fluetonitazene

GC-MS

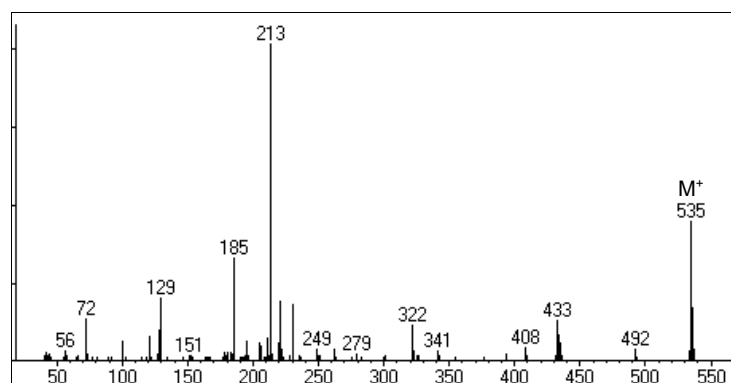


LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



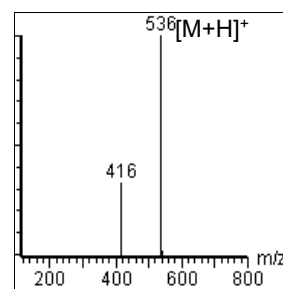
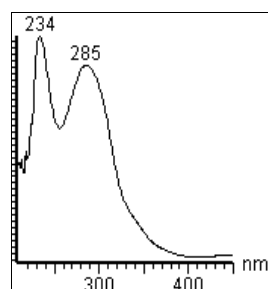
4) 1Fe-LSD
GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm)

マスペクトル (m/z)



【マスペクトル拡大】

