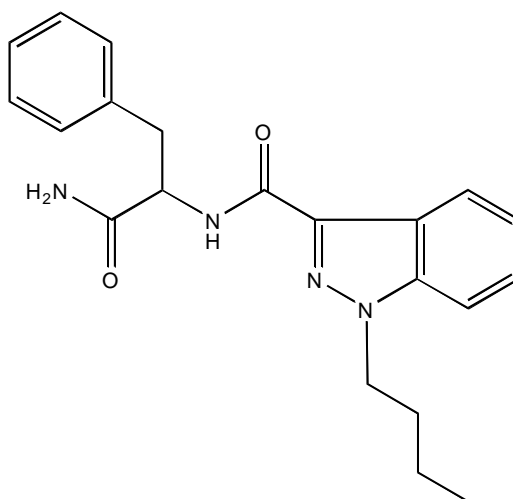


資料1 指定薬物の化学構造等

令和4年12月16日公布の省令(令和4年厚生労働省令第168号)により新たに指定された5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-Amino-1-oxo-3-phenylpropan-2-yl)-1-butyl-1*H*-indazole-3-carboxamide

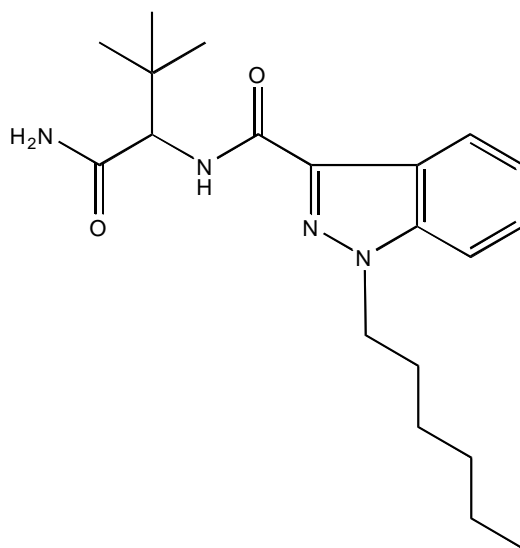
化学名字訳：

N-(1-アミノ-1-オキソ-3-フェニルプロパン-2-イル)-1-ブチル-1*H*-インダゾール-3-カルボキサミド

通称等：APP-BINACA、APP-BUTINACA

物質2

構造式：



化学名：

N-(1-Amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl)-1-hexyl-1*H*-indazole-3-carboxamide

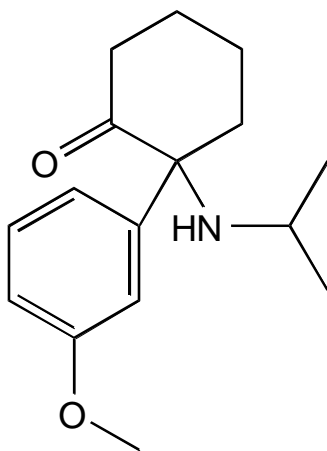
化学名字訳：

N-(1-アミノ-3,3-ジメチル-1-オキソブタン-2-イル) - 1-ヘキシル-
1*H*-インダゾール-3-カルボキサミド

通称等：ADB-HEXINACA、ADB-HINACA

物質3

構造式：



化学名：

2-(Isopropylamino)-2-(3-methoxyphenyl)cyclohexanone

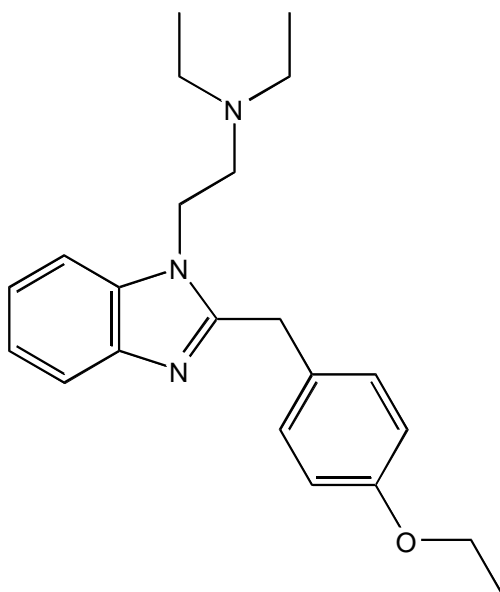
化学名字訳：

2 - (イソプロピルアミノ) - 2 - (3 - メトキシフェニル) シクロヘキサノン

通称等：Methoxisopropamine、MXiPr

物質4

構造式：



化学名：

1-(2-Diethylamino)ethyl-2-(4-ethoxybenzyl)benzimidazole

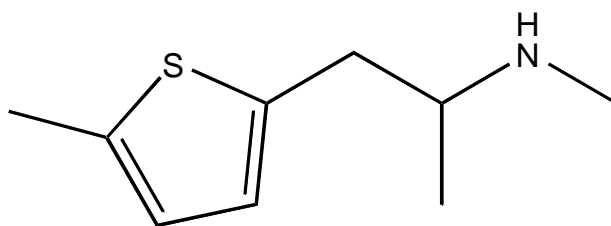
化学名字訳：

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

通称等：Etazene、Etodesnitazene

物質5

構造式：



化学名：

N-Methyl-1-(5-methylthiophen-2-yl)propan-2-amine

化学名字訳：

N-メチル-1-(5-メチルチオフェン-2-イル)プロパン-2-アミン

通称等：Mephedrene、5-MMPA

資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 4 年 12 月 16 日公布の 5 物質追加省令により、新たに指定薬物として指定された 5 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 (10 min 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 5 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
MXiPr	25.71	0.92	23.0	2.91
5-MMPA	11.37	0.40	9.8	1.24
Etazene	49.40	1.76	19.5	2.47
[参考値]				
ADB-HEXINACA	49.76	1.77	61.32	7.76
APP-BINACA	52.14	1.86	59.19	7.49
5-MeO-DMT	28.08	1.00	7.9	1.00

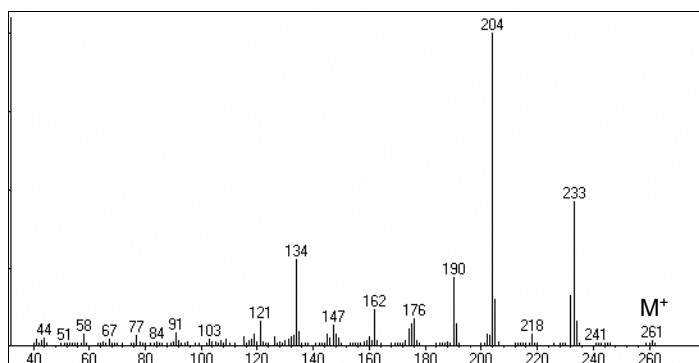
測定条件2 (合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

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
ADB-HEXINACA	16.52	3.38	13.1	1.47
APP-BINACA	20.54	4.20	7.3	0.81
5-MeO-DMT	4.89	1.00	—	
吉草酸ベタメタゾン	—		9.0	1.00

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

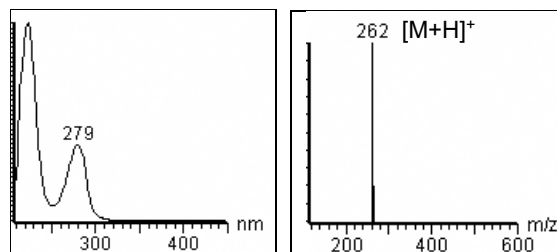
1) MXiPr

GC-MS



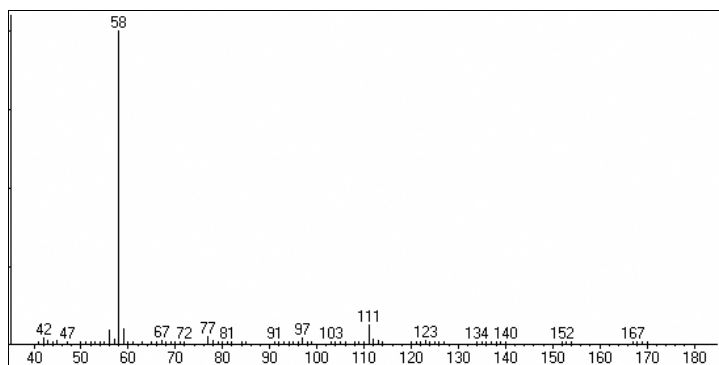
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



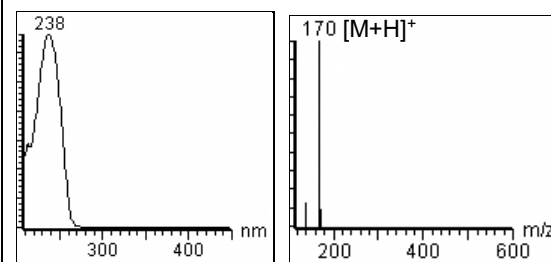
2) 5-MMPA

GC-MS



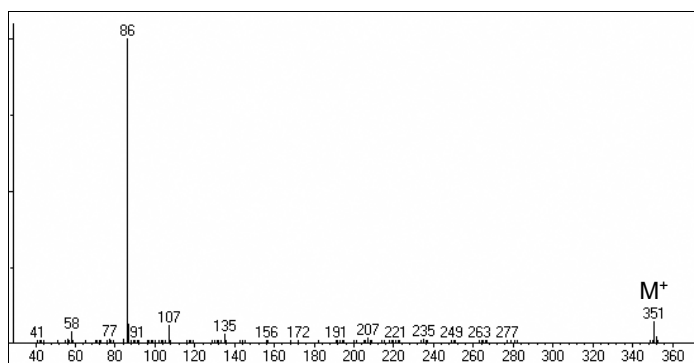
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



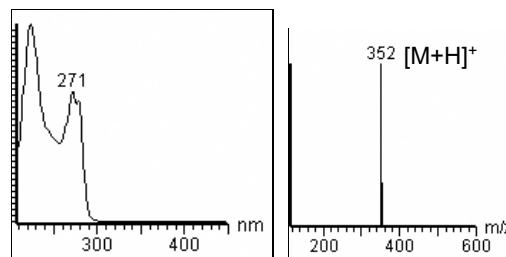
3) Etazene

GC-MS



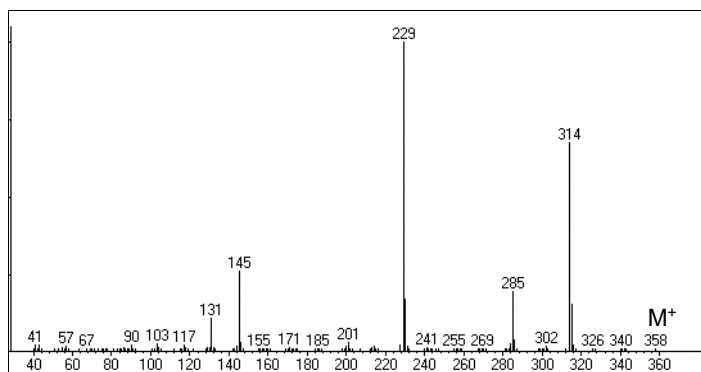
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



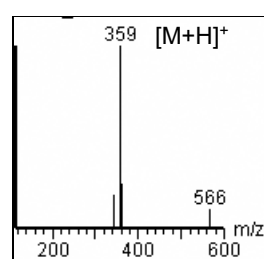
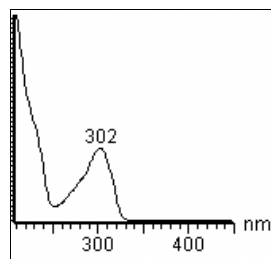
4) ADB-HEXINACA

GC-MS



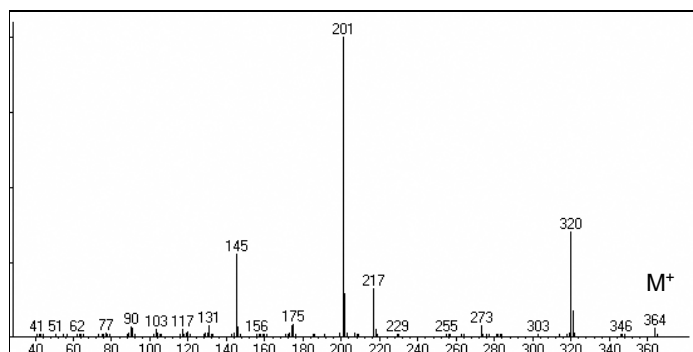
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



5) APP-BINACA

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

