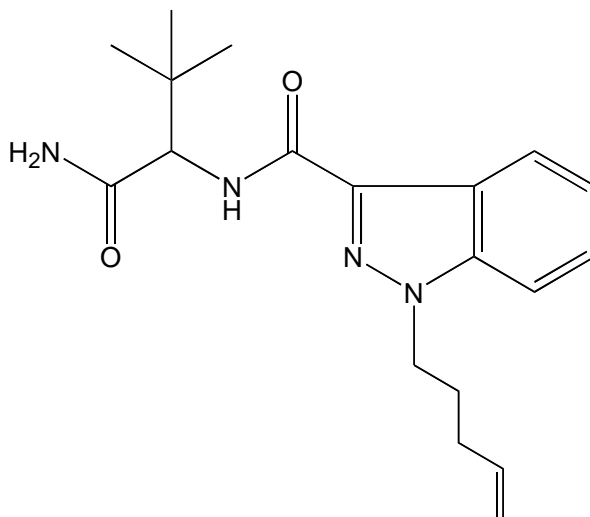


資料 1 指定薬物の化学構造等

令和 5 年 10 月 26 日公布の省令（令和 5 年厚生労働省令第 134 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：

N-(1-Amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl)-1-(pent-4-en-1-yl)-1*H*-indazole-3-carboxamide

化学名字訳：

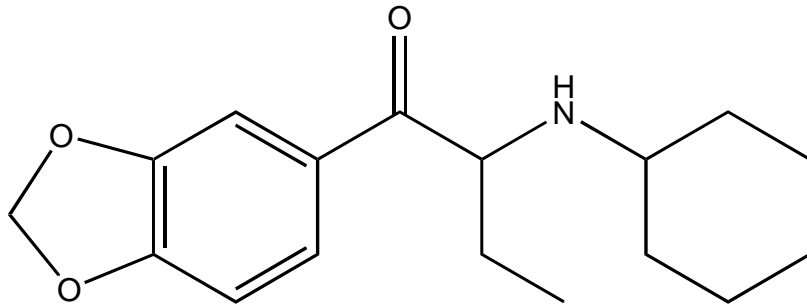
N-(1-アミノ-3,3-ジメチル-1-オキソブタン-2-イル)-1-(ペンタ-4-エン-1-イル)-1*H*-インダゾール-3-カルボキサミド

通 称 等：

ADB-4en-PINACA

物質 2

構造式：



化学名：

2-(Cyclohexylamino)-1-(3,4-methylenedioxyphenyl)butan-1-one

化学名字訳：

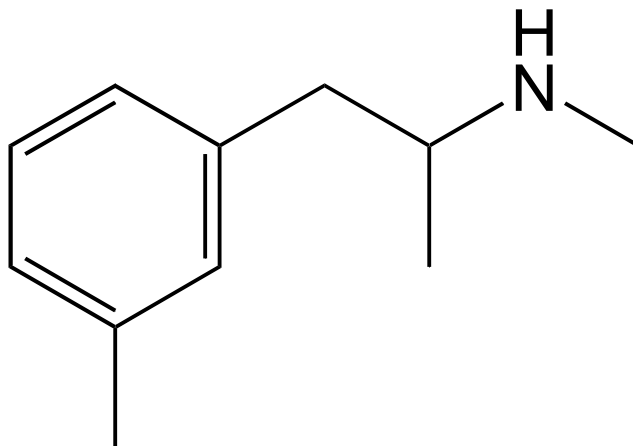
2 - (シクロヘキシルアミノ) - 1 - (3, 4 - メチレンジオキシフェニル)
ブタン - 1 - オン

通称等：

N-Cyclohexylbutylone、Cybutylone

物質 3

構造式：



化学名：

1-(3-Methylphenyl)-*N*-methylpropan-2-amine

化学名字訳：

1 - (3 - メチルフェニル) - *N* - メチルプロパン - 2 - アミン

通称等：

3-MMA、3-Methylmethamphetamine

資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 5 年 10 月 26 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(メタノールまたは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、スプリットレスまたはスプリット (10:1)、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
3-MMA	11.30	0.40	14.0	1.77
N-Cyclohexylbutylone	39.46	1.41	40.6	5.14
[参考値]				
ADB-4en-PINACA	48.87	1.74	58.3	7.38
5-MeO-DMT	28.08	1.00	7.9	1.00

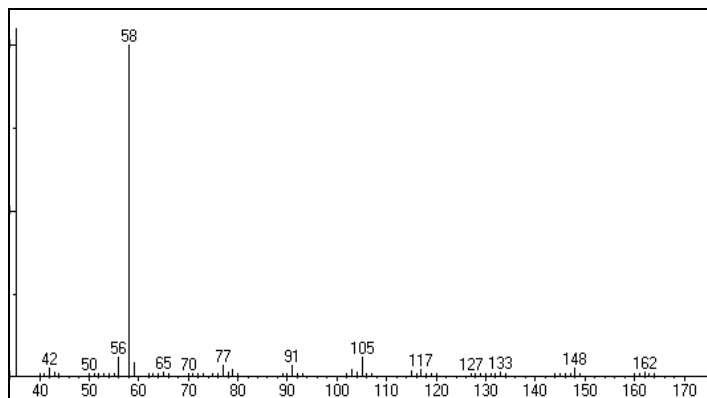
測定条件 2 (合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

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-4en-PINACA	14.83	3.09	8.0	0.91
5-MeO-DMT	4.88	1.00	—	
吉草酸ベタメタゾン	—		8.8	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

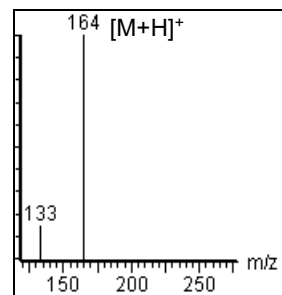
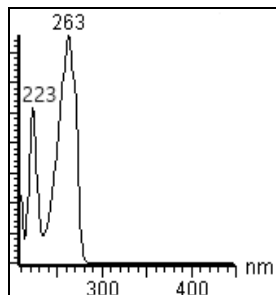
1) 3-MMA (3-Methylmethamphetamine)

GC-MS



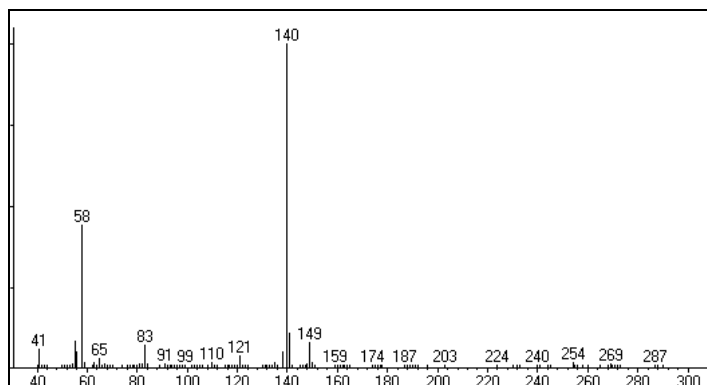
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



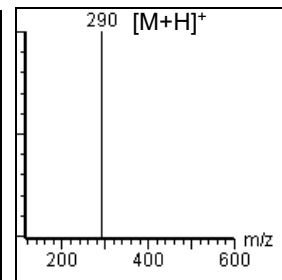
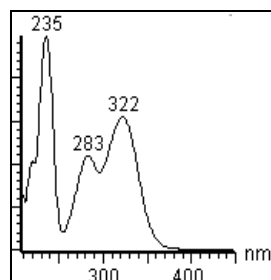
2) N-Cyclohexylbutylone

GC-MS



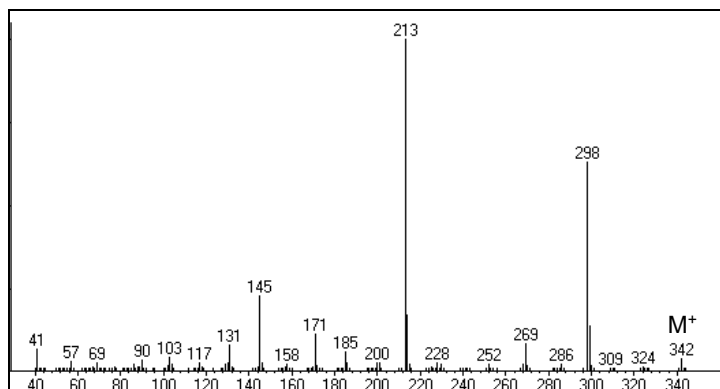
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



3) ADB-4en-PINACA

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

