



薬生監麻発 0902 第 1 号
令和 3 年 9 月 2 日

各都道府県衛生主管部（局）長 殿

厚生労働省医薬・生活衛生局
監視指導・麻薬対策課長
(公 印 省 略)

指定薬物の測定結果等について

今般、「医薬品、医療機器等の品質、有効性及び安全性の確保等に関する法律第二条第十五項に規定する指定薬物及び同法第七十六条の四に規定する医療等の用途を定める省令の一部を改正する省令」（令和3年厚生労働省令第142号、令和3年8月25日公布）により新たに指定薬物として指定された3物質について、指定薬物の分析法（「指定薬物の分析法について」平成19年5月21日付け薬食監麻発第0521002号監視指導・麻薬対策課長通知）に基づき測定した結果等につき、別添資料のとおり取りまとめましたので、今後の指定薬物に係る監視指導等の参考として御活用ください。

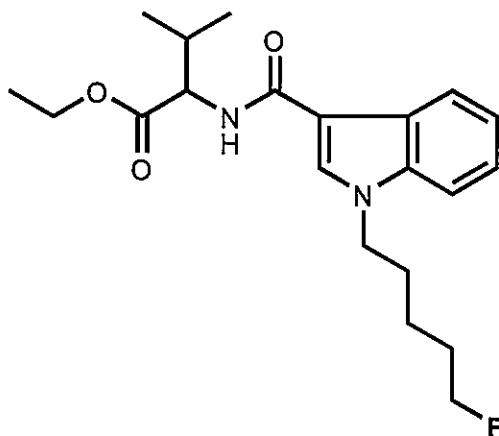


資料1 指定薬物の化学構造等

令和3年8月25日公布の省令(令和3年厚生労働省令第142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:



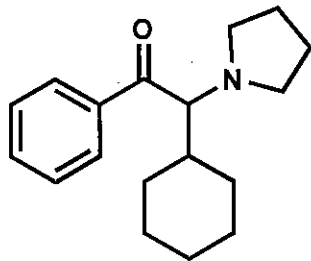
化学名: Ethyl 2-[1-(5-fluoropentyl)-1*H*-indole-3-carboxamido]-3-methylbutanoate

化学名字訳: エチル=2-[1-(5-フルオロペンチル)-1*H*-インドール-3-カルボキサミド]-3-メチルブタノアート

通称等: 5F-EMB-PICA, EMB-2201

物質2

構造式:



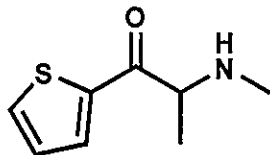
化学名: 2-Cyclohexyl-1-phenyl-2-(pyrrolidin-1-yl)ethan-1-one

化学名字訳: 2-シクロヘキシル-1-フェニル-2-(ピロリジン-1-イル)エタン-1-オン

通称等: α -PCYP

物質3

構造式:



化学名: 2-(Methylamino)-1-(thiophen-2-yl)propan-1-one

化学名字訳: 2-(メチルアミノ)-1-(チオフエン-2-イル)プロパン-1-オン

通称等: 2-Thiothinone, β k-MPA

参考資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 3 年 8 月 25 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 (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 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
2-Thiothionone*	12.99	0.46	2.6	0.32
α-PCYP [参考値]	32.74	1.17	49.1	6.03
5F-EMB-PICA**	49.99	1.78	61.1	7.50
5-MeO-DMT	28.08	1.00	8.2	1.00

*メタノール溶液で LC-MS の測定を行なうとピークが割れることがあるので、注入サンプルは移動相で希釈する。

測定条件2 (合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

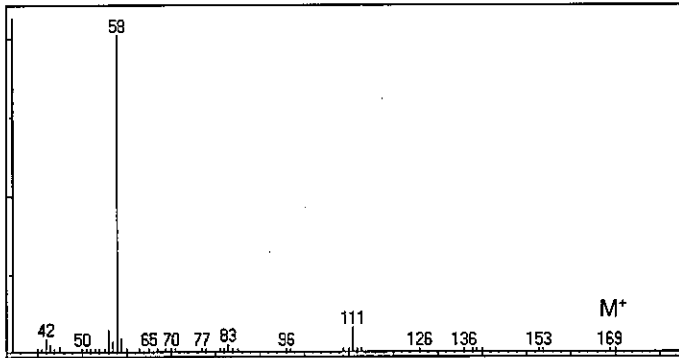
Compounds	GC-MS 条件 2		LC-PDA-MS 条件 2	
	Retention time (min)	Relative retention time 5-MeO-DMT = 1	Retention time (min)	Relative retention time 吉草酸ベタメタゾン = 1
5F-EMB-PICA**	16.89	3.46	10.0	1.11
5-MeO-DMT	4.88	1.00	—	—
吉草酸ベタメタゾン	—	—	9.0	1.00

**メタノール溶液中で GC-MS の測定を行なうと一部 MMB2201 として検出される。アセトニトリル溶液中ではほとんど 5F-EMB-PICA として検出される。

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

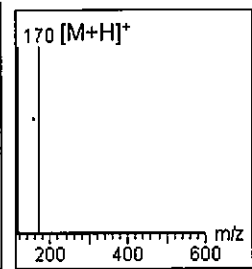
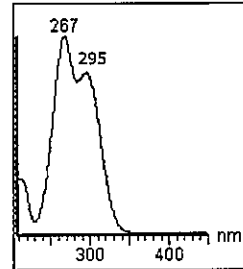
1) 2-Thiothionone

GC-MS



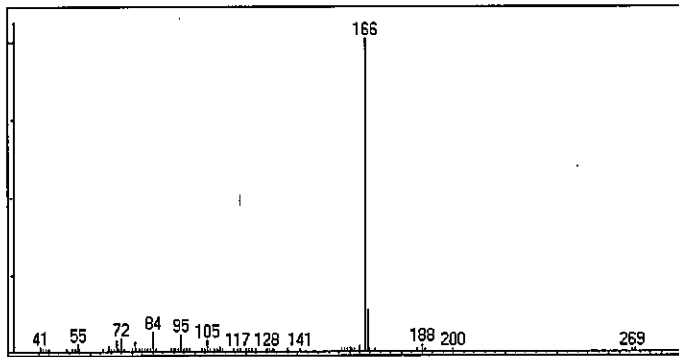
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



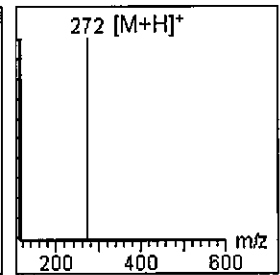
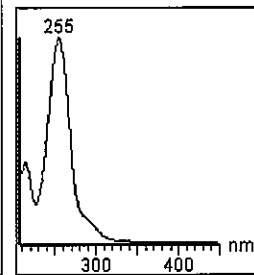
2) α-PCYP

GC-MS



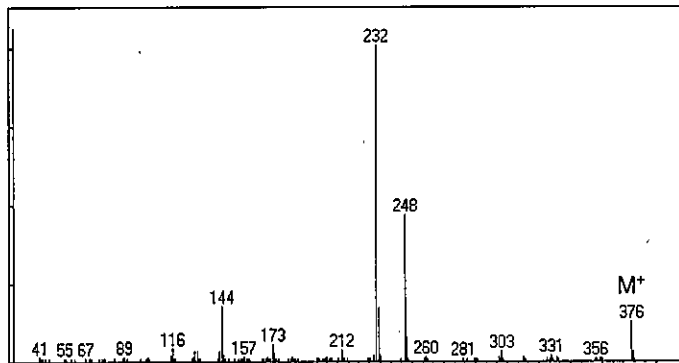
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



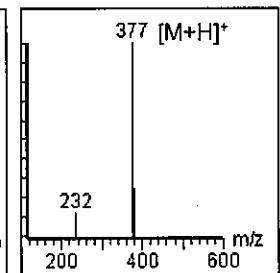
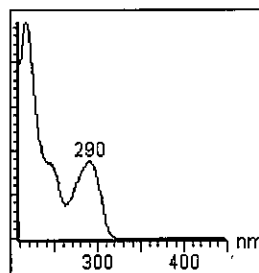
3) 5F-EMB-PICA

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



メタノール溶液中で GC-MS の測定を行なうと一部 MMB2201 として検出される。アセトニトリル溶液中ではほとんど 5F-EMB-PICA として検出される。