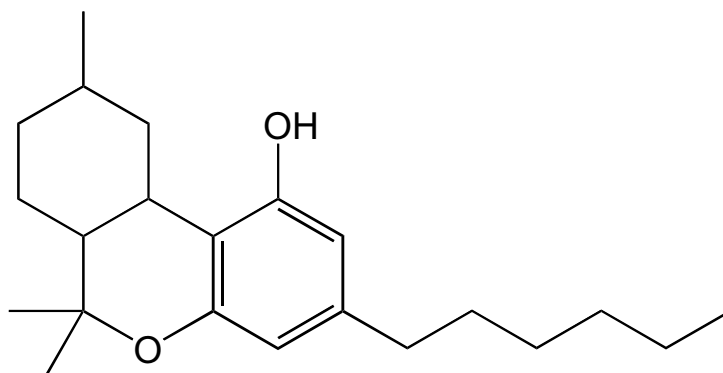


資料1 指定薬物の化学構造等

令和5年11月22日公布の省令（令和5年厚生労働省令第143号）により新たに指定された1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：

3-Hexyl-6a,7,8,9,10,10a-hexahydro-6,6,9-trimethyl-6*H*-dibenzo[*b,d*]pyran-1-ol

化学名字訳：

3-ヘキシル-6a, 7, 8, 9, 10, 10a-ヘキサヒドロ-6, 6, 9-トリメチル-6*H*-ジベンゾ[*b, d*]ピラン-1-オール

通称等：

HHCH、HHC-H、Hexahydrocannabihexol

資料 2 GC-MS 及び LC-PDA-MS の測定結果

令和 5 年 11 月 22 日公布の 1 物質追加省令により、新たに指定薬物として指定された 1 物質(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)

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、コロン電圧: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、コロン電圧: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
[参考値]				
HHCH				
9(R)-HHCH	46.64	1.66	— *	—
9(S)-HHCH	46.79	1.67	— *	—
5-MeO-DMT	28.07	1.00	7.8	1.00

* LC-PDA-MS 条件 1 では溶出されない

測定条件 2 (合成カンナビノイドを対象とした測定条件)

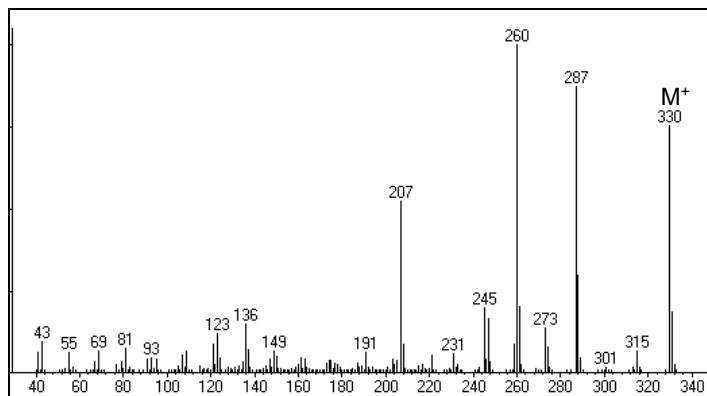
Compounds	GC-MS 条件 2		LC-PDA-MS 条件 2	
	Retention time (min)	Relative retention time 5-MeO-DMT = 1	Retention time (min)	Relative retention time 吉草酸ベタメタゾン = 1
HHCH				
9(R)-HHCH	11.88	2.48	26.4	3.00
9(S)-HHCH	12.07	2.51	26.2	2.98
5-MeO-DMT	4.80	1.00	—	—
吉草酸ベタメタゾン	—	—	8.8	1.00

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) HHCH

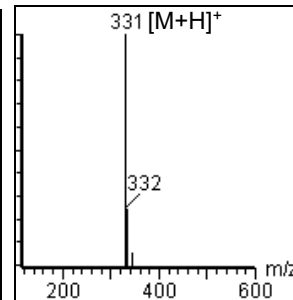
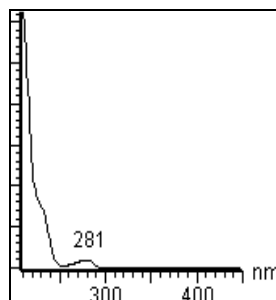
9(R)-HHCH

GC-MS



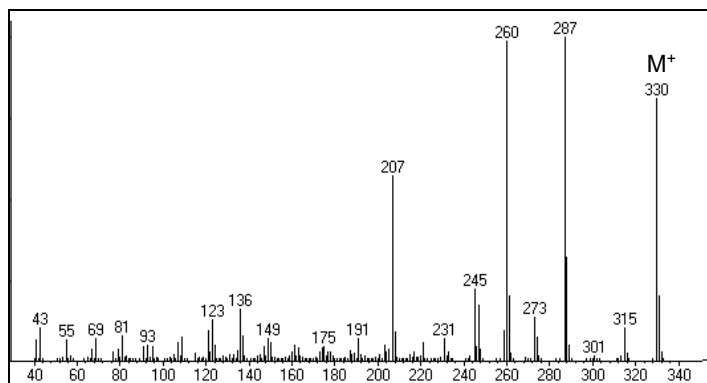
LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)



9(S)-HHCH

GC-MS



LC-PDA-MS (positive mode)

UV スペクトル (nm) マススペクトル (m/z)

