

GC-MS/MS を用いた危険ドラッグに含まれる化合物の構造推定

吹譯友秀, 高橋和長¹⁾, 内本勝也, 榎本啓吾, 吉野宏毅, 西村真紀

Structure Estimations of Compounds Contained in Dangerous Drugs with a GC-MS/MS

Tomohide FUKIWAKE, Kazunaga TAKAHASHI, Katsuya UCHIMOTO, Keigo ENOMOTO,
Hiroki YOSHINO and Maki NISHIMURA

要旨

危険ドラッグとして流通する製品の中には新たな化合物が含まれていることがあり、その化合物の多くは麻薬や指定薬物に指定された化合物の構造の一部を変えることで規制を逃れたものである。そこで、新たな化合物が流通した場合にその構造が推定できるように、GC-MS/MS のスキャンモードを用いて、カルボキサミド型カンナビノイド系化合物、カルボキシレート型カンナビノイド系化合物、指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物、フェンタニル系化合物、トリプタミン系化合物、フェネチルアミン系化合物及びフェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体のマススペクトルを取得し、そのフラグメントイオンの特徴を調べた。また、プロダクトイオンスキャンモードを用いてプロダクトイオンスペクトルを取得し、プロダクトイオンの特徴を調べた。その結果、各化合物群において、その構造に由来した特徴的なフラグメントイオン及びプロダクトイオンを得ることができ、これらフラグメントイオン及びプロダクトイオンの情報をまとめることで、今後、これらの化合物に類似する新たな化合物が危険ドラッグから検出された際に、それらの情報から構造を推定することが可能となった。

キーワード：危険ドラッグ、GC-MS/MS、構造推定、カンナビノイド、カチノン、
フェンタニル、トリプタミン、フェネチルアミン

Keywords : dangerous drug, GC-MS/MS, structure estimation, cannabinoid, cathinone,
fentanyl, tryptamine, phenethylamine

(令和3年6月14日受付 令和3年9月9日受理)

はじめに

危険ドラッグは興奮、抑制及び幻覚作用等を得ることを目的として使用されているもので、それを摂取した者自身の死亡例や交通事故等が多発したことで、危険性が広く知れ渡ることとなった。現在は、関係機関による危険ドラッグの危険性の周知や取締りが積極的に行われ、努力の成果として、国内で危険ドラッグを販売する実店舗がなくなるなど、国内からなくなったかに見える。しかし、いまだに、インターネットで購入した製品から「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(薬機法)」で規制される指定薬物が検出される^{1)、2)}など、危険ドラッグの流通が確認されており、引き続き、買い上げ検査等を行っていく必要がある。

危険ドラッグに含まれる精神毒性(中枢神経系の興奮、抑制及び幻覚作用)を有する蓋然性が高い化合物は、薬機法で指定薬物に指定されるほか、各都道府県の条例で知事指定薬物に指定されることで規制されている。危険ドラッグとして流通する製品の中に含まれる新たな化合物は、麻薬や指定薬物に指

定された化合物の構造の一部を変えることで規制を逃れようとした化合物も多く存在する^{3)、4)}。

麻薬や指定薬物の多くは、その構造の類似性から、カンナビノイド系化合物、カチノン系化合物、トリプタミン系化合物といった系統に分類することができる。既報^{5)、6)}では、超高速液体クロマトグラフ-四重極-キングドントラップ質量分析計を用いて、これら化合物のプロダクトイオンの特徴をまとめたが、今回は GC-MS/MS を用い、カルボキサミド型カンナビノイド系化合物、カルボキシレート型カンナビノイド系化合物、指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物、フェンタニル系化合物、トリプタミン系化合物、フェネチルアミン系化合物及びフェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体について、そのマススペクトル及びプロダクトイオンスペクトル中に見られるイオンの特徴をまとめたので報告する。

実験方法

1. 試薬及び標準品

1) 現：市川保健所

1) 試薬

メタノールは和光純薬工業製の特級品を用いた。

2) 標準品

2C-P 塩酸塩及び Furanylfentanyl 塩酸塩は SIGMA-ALDRICH 製を用いた。AMT 及び 2C-H は和光純薬工業製を用いた。5-MeO-DMT は MP Biomedicals 製を用いた。その他の標準品は Cayman Chemical 製を用いた。

2. 標準溶液の調製

標準品として、カルボキサミド型カンナビノイド系化合物、カルボキシレート型カンナビノイド系化合物、指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物、フェンタニル系化合物、トリプタミン系化合物、フェネチルアミン系化合物及びフェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体のうち、麻薬及び指定薬物に指定されている化合物、それらと構造が類似している化合物を選択した。

各標準品をメタノールに溶解させ 100 µg/mL (as free base) の標準溶液となるように用時調製し、GC-MS/MS に供した。

3. 分析条件

GC 部は Agilent 製 7890B、MS 部は同 7000D トリプル四重極質量分析計から構成される GC-MS/MS を用いた。

1) カルボキサミド型カンナビノイド系化合物、カルボキシレート型カンナビノイド系化合物及びフェンタニル系化合物

(1)GC 条件

カラム：HP-1MS (0.25 mm i.d.× 30 m、0.25 µm、Agilent 製)、カラム温度：200 °C (1 分間保持) →5°C/分昇温→310°C (7 分間保持)、キャリアーガス：超高純度ヘリウム (99.99995%)、流量：1.1 mL/分、注入量：1 µL、注入方法：スプリットレス、注入口温度：250°C

(2)MS 条件及び MS/MS 条件

イオン化法：電子衝撃イオン化 (EI) 法、イオン源温度：280°C、トランスファライン温度：290°C

(3)スキャンモード条件 (MS)

測定質量範囲： m/z 40-600

(4)プロダクトイオンスキャンモード条件 (MS/MS)

測定質量範囲： m/z 40-400、コリジョンガス：超高純度窒素 (99.99995%)、コリジョンエネルギー (CID)：10、20、30、40 eV

2) 指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物、トリプタミン系化合物、フェネチルアミン系化合物及びフェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体

(1)GC 条件

カラム：HP-1MS (0.25 mm i.d.× 30 m、0.25 µm、Agilent 製)、カラム温度：80 °C (1 分) →5°C/分昇温→190°C (15 分) →10°C/分昇温→310°C (10 分)、キャリアーガス：超高純度ヘリウム (99.99995%)、流量：0.7 mL/分、注入量：1 µL、注入方法：スプリットレス、注入口温度：200°C

(2)MS 条件及び MS/MS 条件

イオン化法：EI 法、イオン源温度：280°C、トランスファー温度：290°C

(3)スキャンモード条件 (MS)

測定質量範囲： m/z 40-600

(4)プロダクトイオンスキャンモード条件 (MS/MS)

測定質量範囲： m/z 40-400、コリジョンガス：超高純度窒素 (99.99995%)、コリジョンエネルギー (CID)：10、20、30、40 eV

4. データ解析

標準溶液から得られたマススペクトル中に見られるフラグメントイオン及びプロダクトイオンスペクトル中に見られるプロダクトイオンの構造は Mass Frontier 7.0 ソフトウェア (ThermoFisher Scientific 製) を用いて推定した。

結果及び考察

1. カルボキサミド型カンナビノイド系化合物

1) スキャンモード

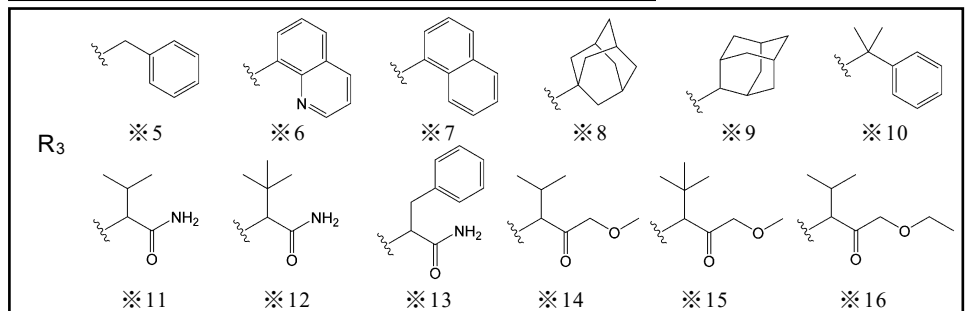
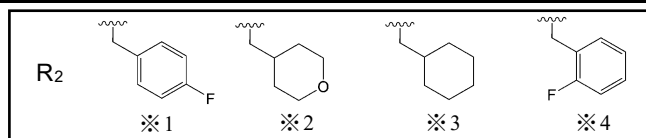
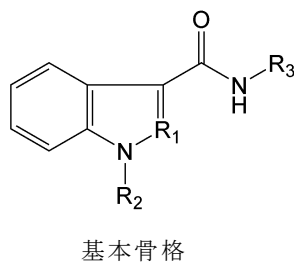
APINACA や AB-PINACA 等のカルボキサミド型カンナビノイド系化合物の基本骨格を有する 60 化合物 (表-1) の標準品をスキャンモードで分析し、マススペクトルを取得した。マススペクトル中に見られる特徴的なフラグメントイオンについて、その構造式を Mass Frontier 7.0 で推定した結果を図-1 に示した。

一例として、カルボキサミド型カンナビノイド系化合物のうちの一部、APINACA、AB-PINACA、ADB-CHMINACA 及び FU-PX-2 のマススペクトルを図-2 に示した。

図-1 の(a)のフラグメントイオンは分析を行った全てのカルボキサミド型カンナビノイド系化合物で見られた。図-1 の(b)のフラグメントイオンは FDU-NNE1 以外の化合物で見られ、図-1 の(c)のフラグメントイオンは FDU-NNE1 及び MDMB-FUBICA 以外の化合物で見られた。図-1 の(d)のフラグメントイオンは表-1 の R₃ に Adamantyl が結合している化合物で見られた。図-1 の(e)のフラグメントイオンは表-1 の R₃ に 1-amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl が結合している化合物、(f)のフラグメントイオンは表-1 の R₃ に 1-amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl が結合している化合物、(g)のフラグメントイオンは表-1 の R₃ に 1-amino-1-oxo-3-phenylpropan-2-yl が結合している化

表-1 分析したカルボキサミド型カンナビノイド系化合物

化合物	R ₁	R ₂	R ₃	分類	化合物	R ₁	R ₂	R ₃	分類
SDB-006	C	-(CH ₂) ₄ CH ₃	Benzyl ※5	指定薬物	AB-CHMINACA	N	Cyclohexylmethyl ※3	1-amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl ※11	麻薬
5F-SDB-006	C	-(CH ₂) ₃ F	Benzyl ※5	指定薬物	AB-FUBINACA	N	4-Fluorobenzyl ※1	1-amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl ※11	麻薬
THJ	N	-(CH ₂) ₄ CH ₃	Quinoly 1 ※6	指定薬物	AB-FUBINACA 2-fluorobenzyl isomer	N	2-Fluorobenzyl ※4	1-amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl ※11	麻薬
5F-THJ	N	-(CH ₂) ₃ F	Quinoly 1 ※6	-	ADBICA	C	-(CH ₂) ₄ CH ₃	1-amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl ※12	指定薬物
JWH-018 8-Quinoly 1 carboxamide	C	-(CH ₂) ₄ CH ₃	Quinoly 1 ※6	-	5-Fluoro-ADBICA	C	-(CH ₂) ₄ CH ₂ F	1-amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl ※12	指定薬物
AM2201 8-Quinoly 1 carboxamide	C	-(CH ₂) ₃ F	Quinoly 1 ※6	-	ADB-CHMICA	C	Cyclohexylmethyl ※3	1-amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl ※12	指定薬物
NNE1	C	-(CH ₂) ₄ CH ₃	Naphthyl ※7	指定薬物	ADB-PINACA	N	-(CH ₂) ₄ CH ₃	1-amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl ※12	指定薬物
5F-NNE1	C	-(CH ₂) ₃ F	Naphthyl ※7	指定薬物	5F-ADB-PINACA	N	-(CH ₂) ₃ F	1-amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl ※12	指定薬物
MN-18	N	-(CH ₂) ₄ CH ₃	Naphthyl ※7	指定薬物	ADB-CHMINACA	N	Cyclohexylmethyl ※3	1-amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl ※12	麻薬
5-Fluoro-MN-18	N	-(CH ₂) ₃ F	Naphthyl ※7	指定薬物	ADB-FUBINACA	N	4-Fluorobenzyl ※1	1-amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl ※12	麻薬
FDU-NNE1	C	4-Fluorobenzyl ※1	Naphthyl ※7	指定薬物	APP-PICA	C	-(CH ₂) ₄ CH ₃	1-amino-1-oxo-3-phenylpropan-2-yl ※13	-
APICA	C	-(CH ₂) ₄ CH ₃	Adamantyl ※8	指定薬物	PX-1	C	-(CH ₂) ₃ F	1-amino-1-oxo-3-phenylpropan-2-yl ※13	指定薬物
STS-135	C	-(CH ₂) ₃ F	Adamantyl ※8	指定薬物	PX-2	N	-(CH ₂) ₃ F	1-amino-1-oxo-3-phenylpropan-2-yl ※13	指定薬物
APINACA	N	-(CH ₂) ₄ CH ₃	Adamantyl ※8	指定薬物	PX-3	N	Cyclohexylmethyl ※3	1-amino-1-oxo-3-phenylpropan-2-yl ※13	指定薬物
APINACA N-(5-fluoropentyl) isomer	N	-(CH ₂) ₅ F	Adamantyl ※8	麻薬	FU-PX-2	N	4-Fluorobenzyl ※1	1-amino-1-oxo-3-phenylpropan-2-yl ※13	指定薬物
5Cl-APINACA	N	-(CH ₂) ₅ Cl	Adamantyl ※8	指定薬物	MMB2201	C	-(CH ₂) ₃ F	methyl-3-methyl-butanoate-2-yl ※14	指定薬物
FUB-APINACA	N	4-Fluorobenzyl ※1	Adamantyl ※8	指定薬物	MMB-018	C	-(CH ₂) ₄ CH ₃	methyl-3-methyl-butanoate-2-yl ※14	-
ATHPINACA	N	((Tetrahydro-2H-pyran-4-yl)methyl) ※2	Adamantyl ※8	指定薬物	MMB-CHMICA	C	Cyclohexylmethyl ※3	methyl-3-methyl-butanoate-2-yl ※14	指定薬物
ATHPINACA 2-adamantyl isomer	N	((Tetrahydro-2H-pyran-4-yl)methyl) ※2	Adamantan-2-yl ※9	指定薬物	AMB	N	-(CH ₂) ₄ CH ₃	methyl-3-methyl-butanoate-2-yl ※14	指定薬物
CUMYL-PICA	C	-(CH ₂) ₄ CH ₃	1-methyl-1-phenylethyl ※10	指定薬物	5-Fluoro-AMB	N	-(CH ₂) ₃ F	methyl-3-methyl-butanoate-2-yl ※14	麻薬
CUMYL-5F-PICA	C	-(CH ₂) ₃ F	1-methyl-1-phenylethyl ※10	指定薬物	MA-CHMINACA	N	Cyclohexylmethyl ※3	methyl-3-methyl-butanoate-2-yl ※14	指定薬物
CUMYL-PINACA	N	-(CH ₂) ₄ CH ₃	1-methyl-1-phenylethyl ※10	指定薬物	FUB-AMB	N	4-Fluorobenzyl ※1	methyl-3-methyl-butanoate-2-yl ※14	麻薬
CUMYL-5F-PINACA	N	-(CH ₂) ₃ F	1-methyl-1-phenylethyl ※10	指定薬物	5F-MDMB-PICA	C	-(CH ₂) ₃ F	methyl-3,3-dimethyl-butanoate-2-yl ※15	麻薬
CUMYL-4CN-BINACA	N	-(CH ₂) ₄ CN	1-methyl-1-phenylethyl ※10	麻薬	MDMB-CHMICA	C	Cyclohexylmethyl ※3	methyl-3,3-dimethyl-butanoate-2-yl ※15	麻薬
CUMYL-THPINACA	N	((Tetrahydro-2H-pyran-4-yl)methyl) ※2	1-methyl-1-phenylethyl ※10	指定薬物	MDMB-FUBICA	C	4-Fluorobenzyl ※1	methyl-3,3-dimethyl-butanoate-2-yl ※15	指定薬物
AB-CHMICA	C	Cyclohexylmethyl ※3	1-amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl ※11	-	5-Fluoro-ADB	N	-(CH ₂) ₃ F	methyl-3,3-dimethyl-butanoate-2-yl ※15	麻薬
5-Fluoro-ABICA	C	-(CH ₂) ₃ F	1-amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl ※11	指定薬物	MDMB-CHMINACA	N	Cyclohexylmethyl ※3	methyl-3,3-dimethyl-butanoate-2-yl ※15	指定薬物
AB-PINACA	N	-(CH ₂) ₄ CH ₃	1-amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl ※11	麻薬	MDMB-FUBINACA	N	4-Fluorobenzyl ※1	methyl-3,3-dimethyl-butanoate-2-yl ※15	指定薬物
5-Fluoro-AB-PINACA	N	-(CH ₂) ₃ F	1-amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl ※11	指定薬物	5F-AEB	N	-(CH ₂) ₃ F	ethyl-3-methyl-butanoate-2-yl ※16	指定薬物
5Cl-AB-PINACA	N	-(CH ₂) ₃ Cl	1-amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl ※11	指定薬物	FUB-AEB	N	4-Fluorobenzyl ※1	ethyl-3-methyl-butanoate-2-yl ※16	指定薬物



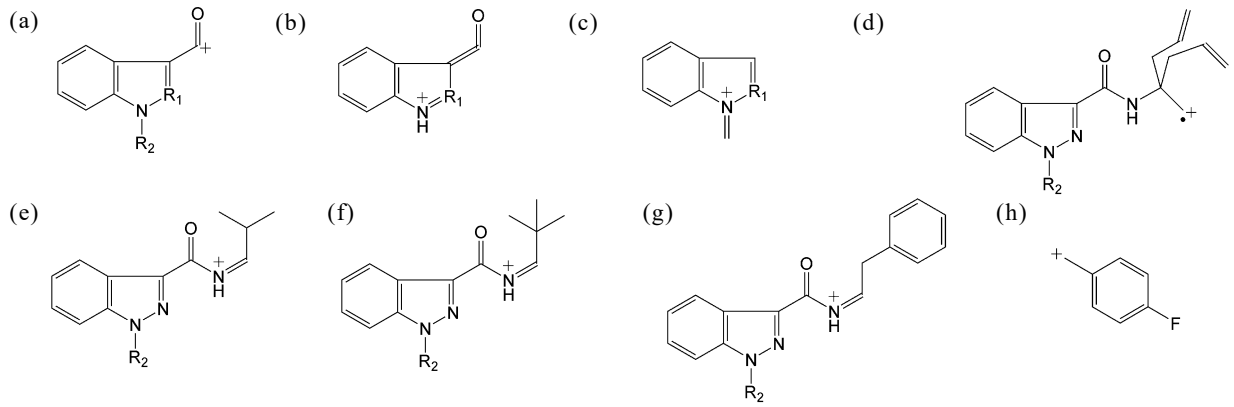


図-1 カルボキサミド型カンナビノイド系化合物のフラグメントイオン

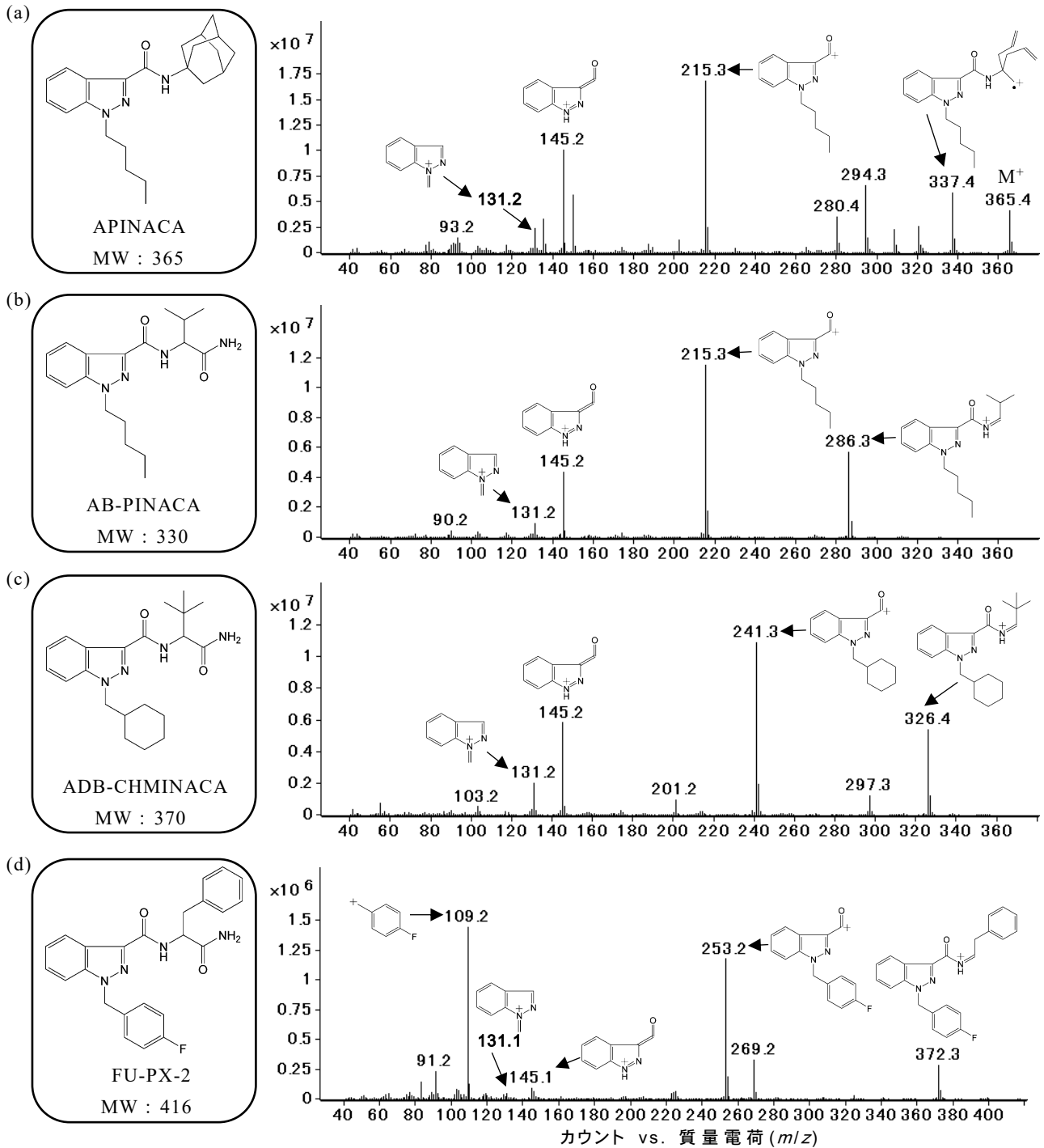


図-2 カルボキサミド型カンナビノイド系化合物のマスペクトル

(a) APINACA、(b) AB-PINACA、(c) ADB-CHMINACA、(d) FU-PX-2

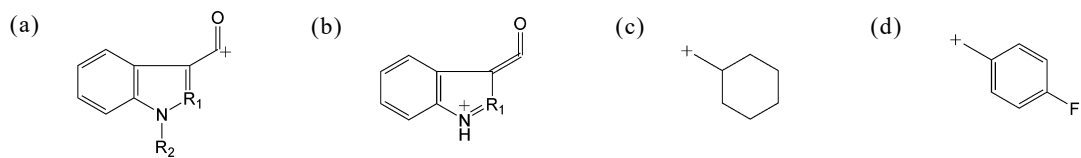


図-3 カルボキサミド型カンナビノイド系化合物のプロダクトイオン

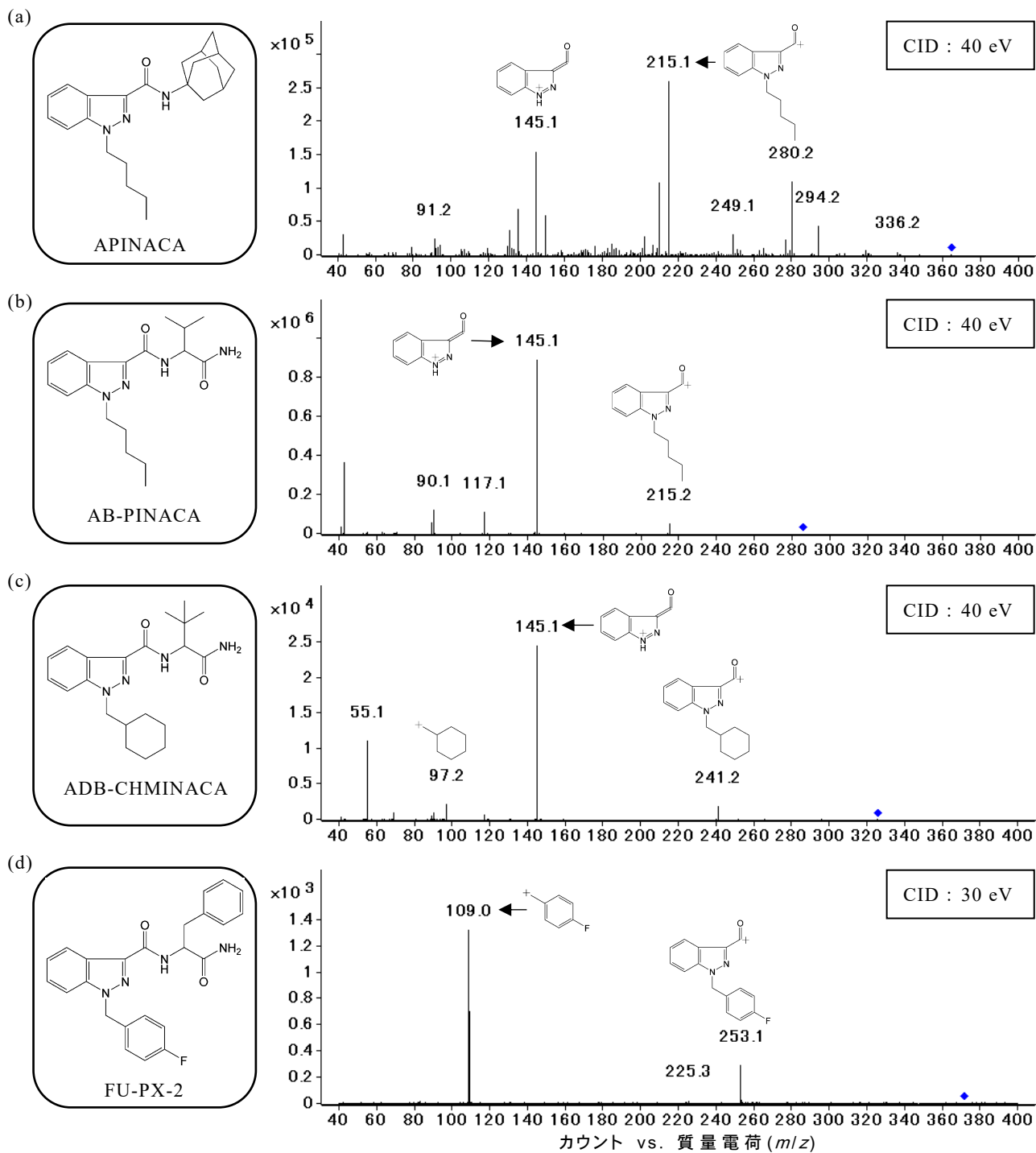


図-4 カルボキサミド型カンナビノイド系化合物のプロダクトイオンスペクトル

(a) APINACA、(b) AB-PINACA、(c) ADB-CHMINACA、(d) FU-PX-2、

◆ : プリカーサーイオン

化合物で見られた。図-1の(h)のフラグメントイオンは表-1のR₂に4-Fluorobenzylが結合している化合物で見られた。

2) プロダクトイオンスキャン

スキャンモードで分析した結果から、分子イオンピークが確認できる化合物は分子イオンをプリカーサーイオンとして標準品をプロダクトイオンスキャンモードで分析し、プロダクトイオンスペクトルを取得した。また、表-1のR₁がNであり、かつR₃に1-amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl、1-amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl及び1-amino-1-oxo-3-phenylpropan-2-ylが結合している化合物については、分子イオンピークがほとんど検出されないため、図-1の(e)、(f)及び(g)に対応するフラグメントイオンをプリカーサーイオンとしてプロダクトイオンスキャンモードで分析し、プロダクトイオンスペクトルを取得した。

プロダクトイオンスペクトル中に見られる特徴的なプロダクトイオンについて、その構造式をMass Frontier 7.0で推定した結果を図-3に示した。

一例として、カルボキサミド型カンナビノイド系化合物のうち、APINACA、AB-PINACA、ADB-CHMINACA及びFU-PX-2のプロダクトイオンスペクトルを図-4に示した。

図-3の(a)のプロダクトイオンは分析を行った全てのカルボキサミド型カンナビノイド系化合物で見られた。図-3の(b)のプロダクトイオンは表-1のR₂に4-Fluorobenzylが結合している化合物では見られなかったが、それ以外の化合物では見られた。図-1の(c)のプロダクトイオンはR₂にCyclohexylmethyl

が結合している化合物で見られた。図-1の(d)のプロダクトイオンは表-1のR₂に4-Fluorobenzylが結合している化合物で見られた。

なお、各プロダクトイオンはCIDが30 eV~40 eVで確認することができた。

2. カルボキシレート型カンナビノイド系化合物

1) スキャンモード

NPB-22やFDU-PB-22等のカルボキシレート型カンナビノイド系化合物の基本骨格を有する12化合物(表-2)の標準品をスキャンモードで分析し、マススペクトルを取得した。マススペクトル中に見られる特徴的なフラグメントイオンについて、その構造式をMass Frontier 7.0で推定した結果を図-5に示した。

一例として、カルボキシレート型カンナビノイド系化合物のうち、NPB-22及びFDU-PB-22のマススペクトルを図-6に示した。

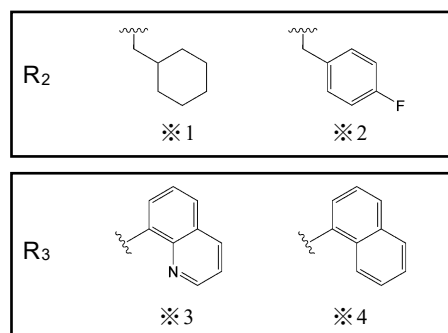
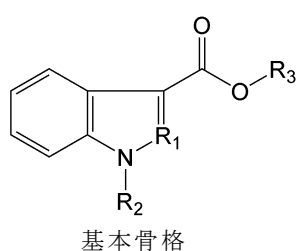
図-5の(a)及び(b)のフラグメントイオンは分析を行った全てのカルボキシレート型カンナビノイド系化合物で見られた。図-5の(c)のフラグメントイオンは表-2のR₂に4-Fluorobenzylが結合している化合物で見られた。

2) プロダクトイオンスキャンモード

スキャンモードで分析した結果から、分子イオンピークが確認できる化合物は分子イオンをプリカーサーイオンとして標準品をプロダクトイオンスキャンモードで分析し、プロダクトイオンスペクトルを取得した。また、表-2のR₁がCであり、かつR₃にNaphthylが結合した化合物については、分子イオン

表-2 分析したカルボキシレート型カンナビノイド系化合物

化合物	R ₁	R ₂	R ₃	分類	化合物	R ₁	R ₂	R ₃	分類
QUPIC、PB-22	C	-(CH ₂) ₄ CH ₃	Quinoly1 ※3	指定薬物	FUB-NPB-22	N	4-Fluorobenzyl ※2	Quinoly1 ※3	指定薬物
5F-QUPIC	C	-(CH ₂) ₄ CH ₂ F	Quinoly1 ※3	麻薬	CBL-018	C	-(CH ₂) ₄ CH ₃	Naphthyl ※4	-
QUCHIC、BB-22	C	Cyclohexylmethyl ※1	Quinoly1 ※3	指定薬物	NM2201	C	-(CH ₂) ₄ CH ₂ F	Naphthyl ※4	指定薬物
FUB-PB-22	C	4-Fluorobenzyl ※2	Quinoly1 ※3	指定薬物	FDU-PB-22	C	4-Fluorobenzyl ※2	Naphthyl ※4	指定薬物
NPB-22	N	-(CH ₂) ₄ CH ₃	Quinoly1 ※3	指定薬物	SDB-005	N	-(CH ₂) ₄ CH ₃	Naphthyl ※4	指定薬物
5-Fluoro-NPB-22	N	-(CH ₂) ₄ CH ₂ F	Quinoly1 ※3	指定薬物	5-Fluoro-SDB-005	N	-(CH ₂) ₄ CH ₂ F	Naphthyl ※4	指定薬物



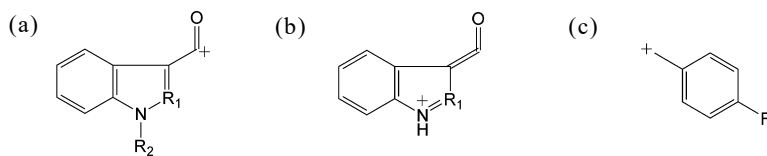


図-5 カルボキシレート型カンナビノイド系化合物のフラグメントイオン及びプロダクトイオン

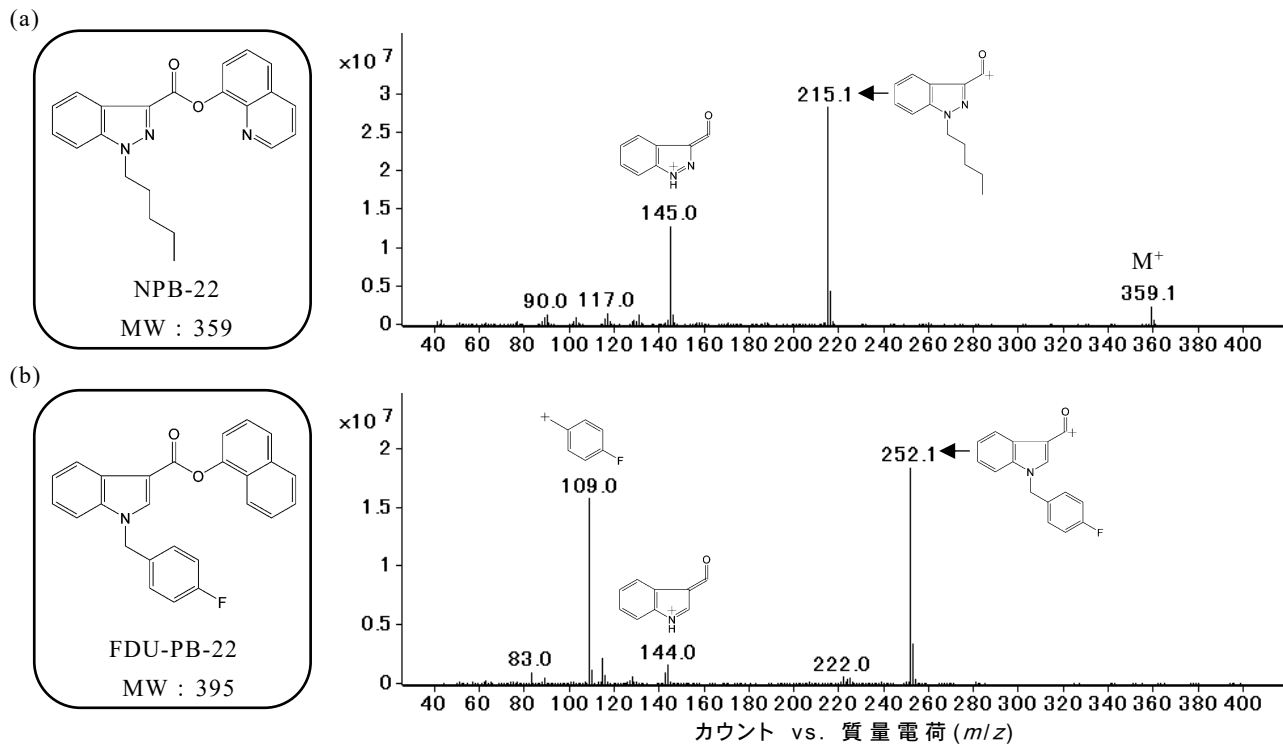


図-6 カルボキシレート型カンナビノイド系化合物のマススペクトル
(a) NPB-22、(b) FDU-PB-22

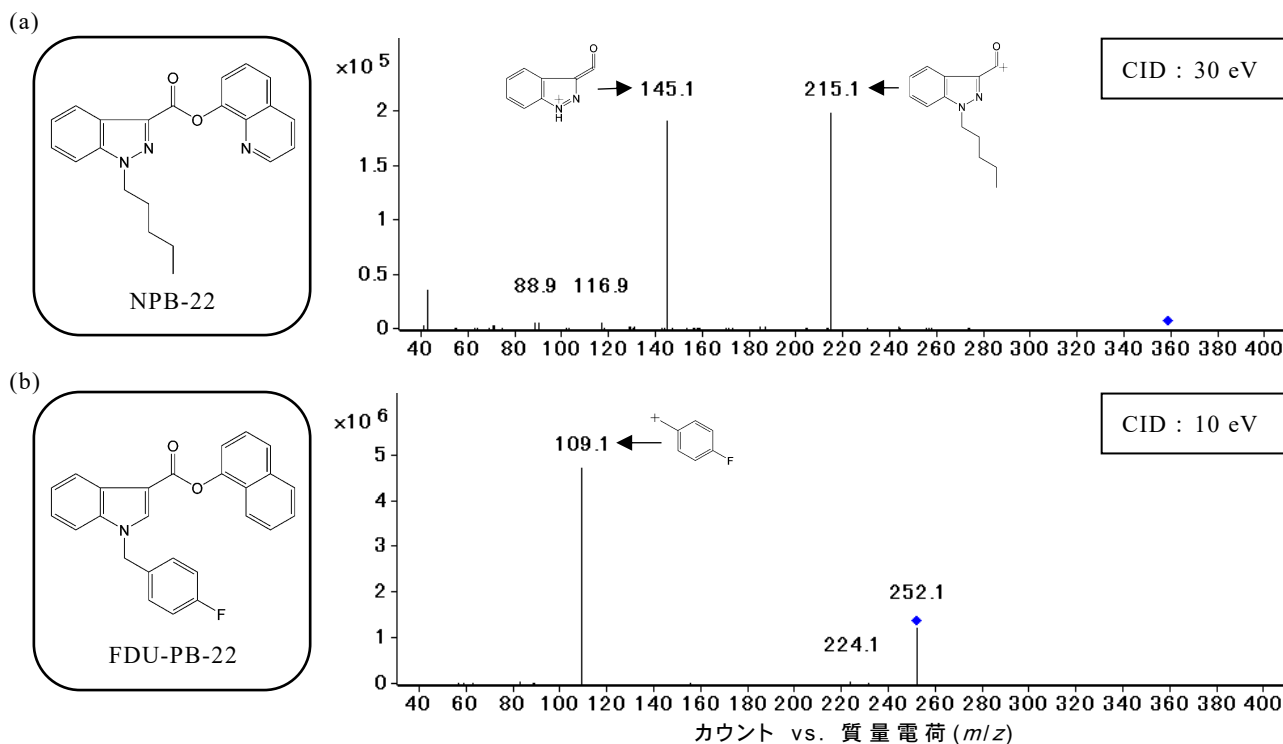


図-7 カルボキシレート型カンナビノイド系化合物のプロダクトイオンスペクトル
(a) NPB-22、(b) FDU-PB-22、◆ : プリカーサーイオン

ピークがほとんど検出されないため、図-5の(a)に対応するフラグメントイオンをプリカーサーイオンとしてプロダクトイオンスキャンモードで分析し、プロダクトイオンスペクトルを取得した。

プロダクトイオンスペクトル中に見られる特徴的なプロダクトイオンについて、その構造式を Mass Frontier 7.0 で推定した結果を図-5に示した。

一例として、カルボキシレート型カンナビノイド系化合物のうち、NPB-22及びFDU-PB-22のプロダクトイオンスペクトルを図-7に示した。

表-2のR₁がCであり、かつR₃にNaphthylが結合した化合物（これらの化合物では(a)がプリカーサーイオンとなる）以外の化合物では図-5の(a)のプロダクトイオンが見られた。図-5の(b)のプロダクトイオンは表-2のR₂に4-Fluorobenzylが結合している化合物では見られなかったが、それ以外の化合物では見られた。図-5の(c)のプロダクトイオンはR₂に4-Fluorobenzylが結合している化合物で見られた。

なお、各プロダクトイオンはCIDが10 eV~30 eVで確認することができた。

3. 指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物

1) スキャンモード

Eutylone や 4-Methyl-N-methylbupedrone 等の指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する46化合物(表-3)の標準品をスキャンモードで分析し、マススペクトルを取得した。マススペクトル中に見られる特徴的なフラグメントイオンについて、その構造式を Mass Frontier 7.0 で推定した結果を図-8に示した。

一例として、指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物のうち、Eutylone、4-Methyl-N-methylbupedrone 及び 4-Fluoro- α -PHP のマススペクトルを図-9に示した。

図-8の(a)、(b)、(c)及び(d)のフラグメントイオンは分析を行った全ての指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物で見られた。図-8の(e)のフラグメントイオンは表-3のR₂に1-ピロリジニル基が結合している化合物で見られた。

2) プロダクトイオンスキャンモード

指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物においては、スキャンモードにて確認されたフラグメントイオンから構造推定が可能であるが、R₂にエチルアミノ基かジメチルアミノ基が結合している化合物の場合、スキャンモードではどちらが結合しているか区別することが困難である。スキャンモードで得られた、図-8の(b)のフラグメントイオンをプリカーサーイオンと

しプロダクトイオンスキャンモードで分析すると、エチルアミノ基とジメチルアミノ基を区別可能と考えられることから、プロダクトイオンスペクトルを取得した。それらのプロダクトイオンスペクトル中に見られる特徴的なプロダクトイオンについて、その構造式を Mass Frontier 7.0 で推定した結果を図-10に示した。

一例として、指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物のうち、R₂がエチルアミノ基である Eutylone 及び R₂がジメチルアミノ基である 4-Methyl-N-methylbupedrone のプロダクトイオンスペクトルを図-11に示した。

R₂にエチルアミノ基が結合している化合物は、図-10の(a)のプロダクトイオンが見られ、R₂にジメチルアミノ基が結合している化合物は、図-10の(b)及び(c)のプロダクトイオンが見られた。プロダクトイオンスキャンモードにて、これらのプロダクトイオンを確認できれば、R₂がエチルアミノ基であるかジメチルアミノ基であるか確認することが可能である。

なお、各プロダクトイオンはCIDが10 eV~20 eVで確認することができた。

4. フェンタニル系化合物

1) スキャンモード

pala-Fluorobutyrylfentanyl や Ocfentanil 等のフェンタニル系化合物の基本骨格を有する17化合物(表-4)の標準品をスキャンモードで分析し、マススペクトルを取得した。マススペクトル中に見られる特徴的なフラグメントイオンについて、その構造式を Mass Frontier 7.0 で推定した結果を図-12に示した。

一例として、フェンタニル系化合物のうち、pala-Fluorobutyrylfentanyl、Ocfentanil 及び Furanylfentanyl のマススペクトルを図-13に示した。



































図-12の(a)、(b)及び(c)のフラグメントイオンは分析を行った全てのフェンタニル系化合物で見られた。図-12の(d)のフラグメントイオンはR₁にフリル基が結合している化合物以外の化合物で見られた。図-12の(e)のフラグメントイオンはR₁にメトキシメチル基が結合している化合物以外の化合物で見られた。

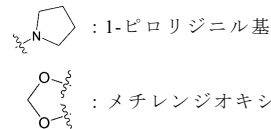
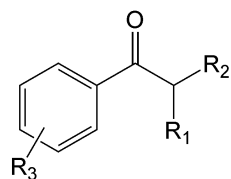
2) プロダクトイオンスキャンモード

フェンタニル系化合物はスキャンモードで分析した結果、分子イオンピークがほとんど検出されないため、図-12の(a)に対応するフラグメントイオンをプリカーサーイオンとしてプロダクトイオンスキャンモードで分析し、プロダクトイオンスペクトルを取得した。

プロダクトイオンスペクトル中に見られる特徴的なプロダクトイオンについて、その構造式を Mass

表-3 分析した指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物

化合物	R ₁	R ₂	R ₃	分類	化合物	R ₁	R ₂	R ₃	分類
2-Methylmethcathinone	-CH ₃	-NHCH ₃	-CH ₃ (2位)	指定薬物	α-PBP	-CH ₂ CH ₃		-H	指定薬物
2,3-Methylenedioxy-methcathinone	-CH ₃	-NHCH ₃	 (2,3位)	指定薬物	4-Fluoro-α-PBP	-CH ₂ CH ₃		-F (4位)	指定薬物
2-Methylethcathinone	-CH ₃	-NH(C ₂ H ₅)	-CH ₃ (2位)	指定薬物	4-Methylpentedrone	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-NHCH ₃	-CH ₃ (4位)	指定薬物
3-Fluoroethcathinone	-CH ₃	-NH(C ₂ H ₅)	-F (3位)	指定薬物	Pentytone	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-NHCH ₃	 (3,4位)	指定薬物
4-Ethylethcathinone	-CH ₃	-NH(C ₂ H ₅)	-CH ₂ CH ₃ (4位)	指定薬物	4-Methyl-α-ethylaminopentiophenone	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-NH(C ₂ H ₅)	-CH ₃ (4位)	指定薬物
2,3-Ethylone isomer	-CH ₃	-NH(C ₂ H ₅)	 (2,3位)	指定薬物	N,N-Dimethylpentytone	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-N(CH ₃) ₂	 (3,4位)	指定薬物
N,N-Dimethylcathinone	-CH ₃	-N(CH ₃) ₂	-H	指定薬物	4-Fluoro-α-PVP	-(CH ₂) ₂ CH ₃		-F (4位)	指定薬物
4-Methoxy-N,N-dimethylcathinone	-CH ₃	-N(CH ₃) ₂	-OCH ₃ (4位)	指定薬物	α-Methylamino-hexanophenone	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-NHCH ₃	-H	指定薬物
bk-MDDMA	-CH ₃	-N(CH ₃) ₂	 (3,4位)	指定薬物	4-Methyl-N-methylhexanophenone	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-NHCH ₃	-CH ₃ (4位)	指定薬物
N-Ethyl-N-methylcathinone	-CH ₃	-N(CH ₃)(C ₂ H ₅)	-H	指定薬物	α-PHP	-(CH ₂) ₂ CH ₃		-H	麻薬 ⁷⁾
4-Methyldiethcathinone	-CH ₃	-N(C ₂ H ₅) ₂	-CH ₃ (4位)	指定薬物	MPHP	-(CH ₂) ₂ CH ₃		-CH ₃ (4位)	指定薬物
α-Pyrrolidinopropiophenone	-CH ₃		-H	指定薬物	4-Fluoro-α-PHP	-(CH ₂) ₂ CH ₃		-F (4位)	指定薬物
2-Methyl-α-pyrrolidinopropiophenone	-CH ₃		-CH ₃ (2位)	指定薬物	MDPH	-(CH ₂) ₂ CH ₃		 (3,4位)	指定薬物
3-Fluoro-α-pyrrolidinopropiophenone	-CH ₃		-F (3位)	指定薬物	α-PHPP	-(CH ₂) ₄ CH ₃		-H	指定薬物
MOPPP	-CH ₃		-OCH ₃ (4位)	指定薬物	4-Methyl PV8	-(CH ₂) ₄ CH ₃		-CH ₃ (4位)	指定薬物
MDPPP	-CH ₃		 (3,4位)	指定薬物	4-Methoxy-α-PHPP	-(CH ₂) ₄ CH ₃		-OCH ₃ (4位)	指定薬物
Buphedrone	-CH ₂ CH ₃	-NHCH ₃	-H	指定薬物	4-Fluoro-α-PHPP	-(CH ₂) ₄ CH ₃		-F (4位)	指定薬物
4-Methylbuphedrone	-CH ₂ CH ₃	-NHCH ₃	-CH ₃ (4位)	指定薬物	3,4-Methylenedioxy-PV8	-(CH ₂) ₄ CH ₃		 (3,4位)	指定薬物
bk-MBDB	-CH ₂ CH ₃	-NHCH ₃	 (3,4位)	指定薬物	α-POP	-(CH ₂) ₅ CH ₃		-H	指定薬物
NEB	-CH ₂ CH ₃	-NH(C ₂ H ₅)	-H	指定薬物	4-Methoxy-α-POP	-(CH ₂) ₅ CH ₃		-OCH ₃ (4位)	指定薬物
Eutylone	-CH ₂ CH ₃	-NH(C ₂ H ₅)	 (3,4位)	指定薬物	4-Fluoro-α-POP	-(CH ₂) ₅ CH ₃		-F (4位)	指定薬物
4-Methyl-N-methylbuphedrone	-CH ₂ CH ₃	-N(CH ₃) ₂	-CH ₃ (4位)	指定薬物	3,4-Methylenedioxy-PV9	-(CH ₂) ₅ CH ₃		 (3,4位)	指定薬物
bk-DMBDB	-CH ₂ CH ₃	-N(CH ₃) ₂	 (3,4位)	指定薬物	α-PNP	-(CH ₂) ₆ CH ₃		-H	指定薬物



指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格

R₁ : 水素以外が結合していないか、または次の置換基のいずれかが結合する。

- 1 メチル基、2 エチル基、3 直鎖状プロピル基、4 直鎖状ブチル基、5 直鎖状ペンチル基、6 直鎖状ヘキシル基、7 直鎖状ヘプチル基

R₂ : アミノ基以外の置換基が結合していないか、または当該アミノ基の代わりに次の置換基のいずれかが結合する。

- 1 メチルアミノ基、2 エチルアミノ基、3 ジメチルアミノ基、4 メチルエチルアミノ基、5 ジエチルアミノ基、6 1-ピロリジニル基

R₃ : ベンゼン環の2位から6位に水素以外が結合していないか、または当該ベンゼン環の2位、3位もしくは4位に次の置換基のいずれかが結合する。

- 1 メチル基、2 エチル基、3 メトキシ基、4 メチレンジオキシ基、5 フルオロ基、6 クロロ基、7 プロモ基、8 ヨード基

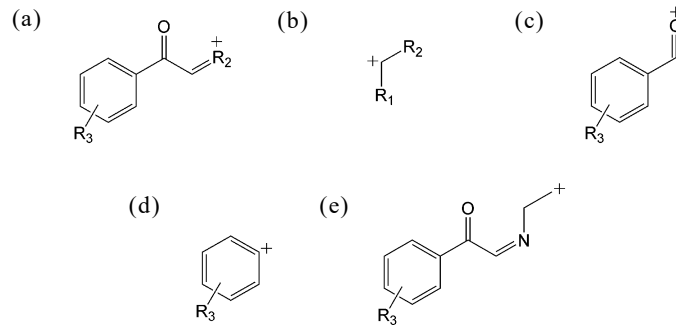


図-8 指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物のフラグメントイオン

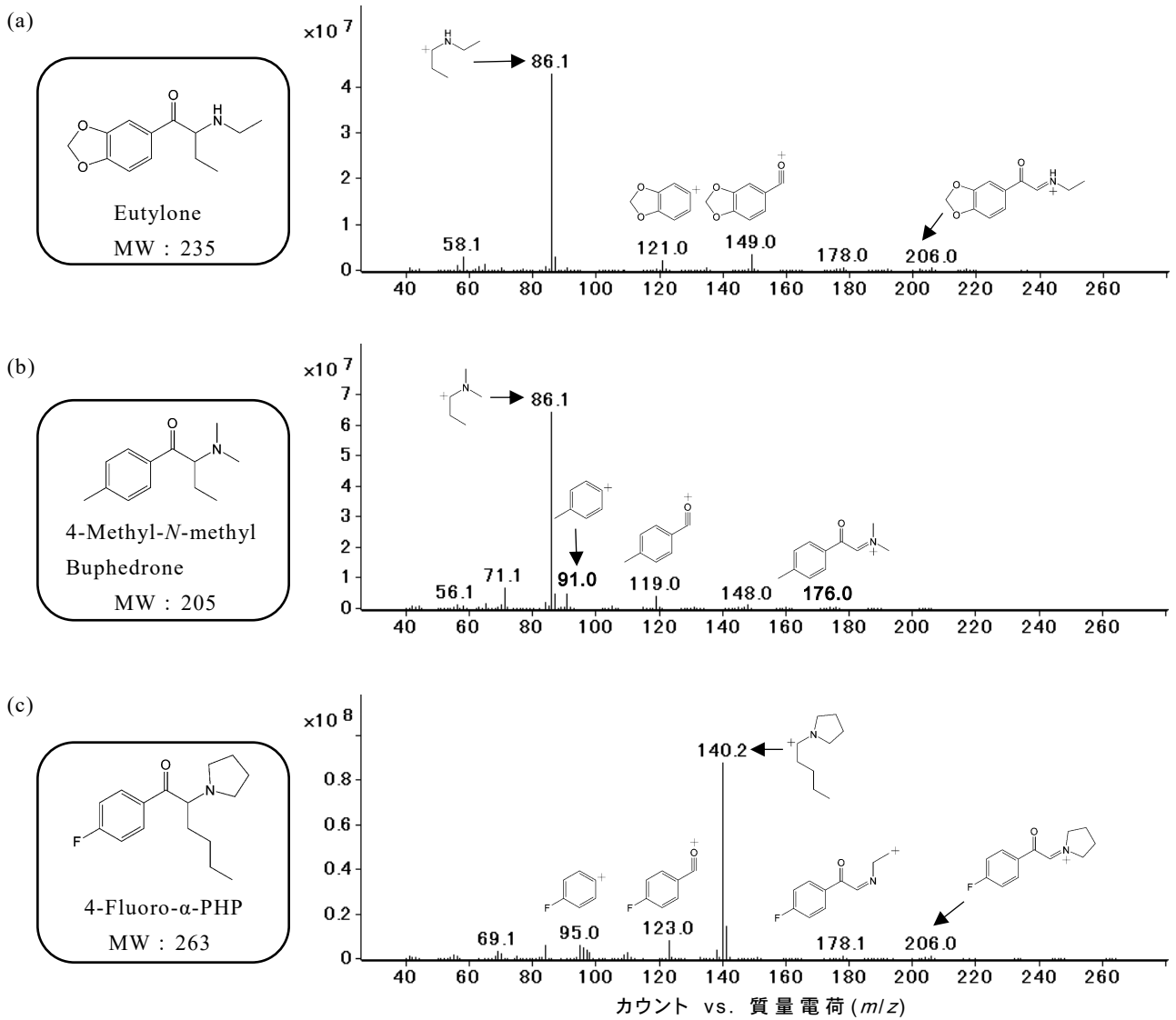


図-9 指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物のマススペクトル

(a) Eutylone、(b) 4-Methyl-N-methylbuphedrone、(c) 4-Fluoro- α -PHP

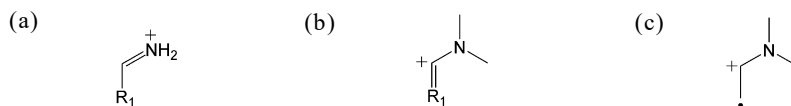


図-10 指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物のうち、R₂がエチルアミノ基またはジメチルアミノ基である化合物のプロダクトイオン

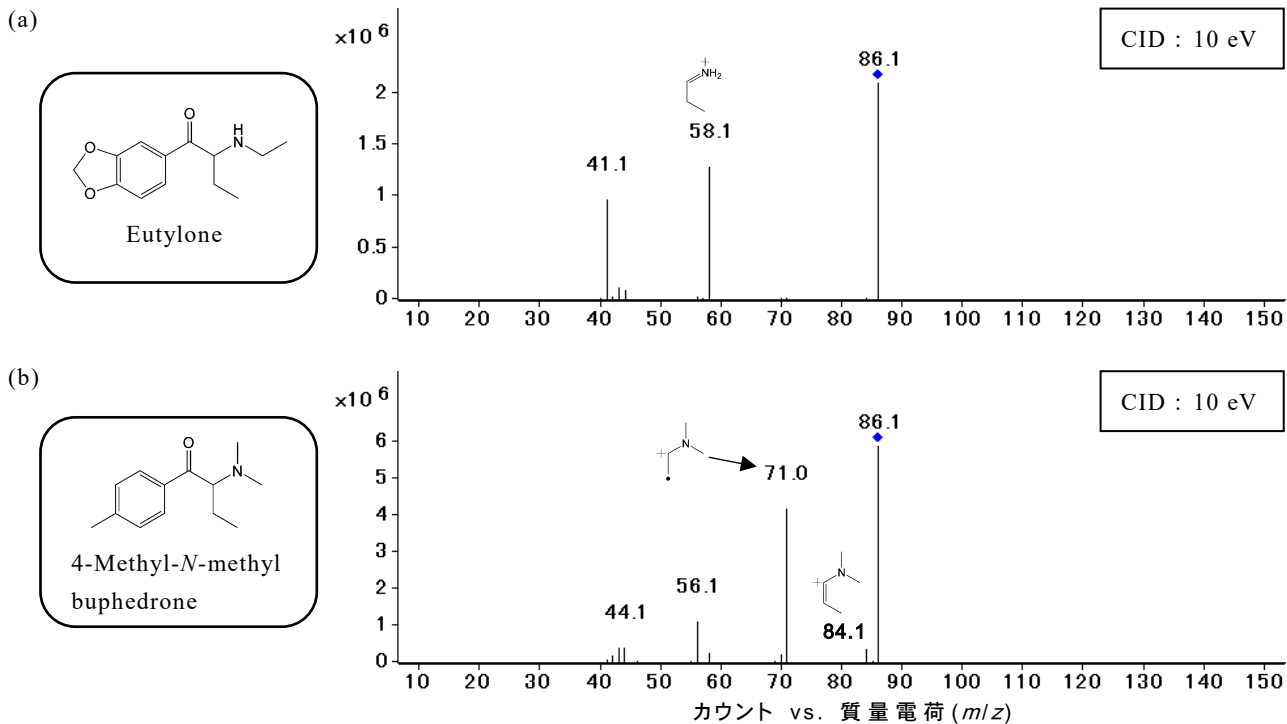
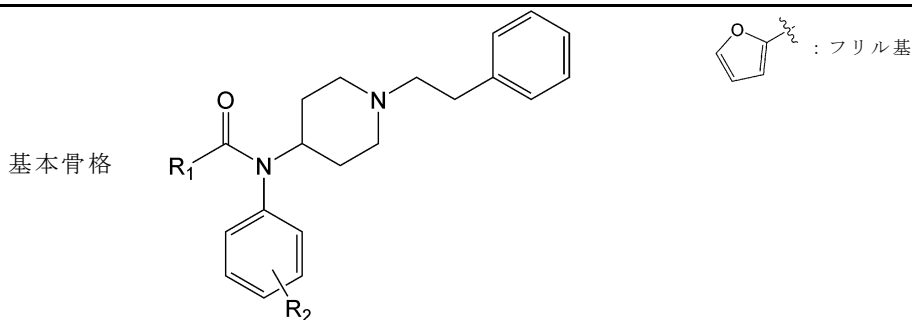


図-11 指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物のうち、R₂がエチルアミノ基またはジメチルアミノ基である化合物のプロダクトイオンスペクトル

(a) Eutylone、(b) 4-Methyl-N-methylbuphedrone、◆：プリカーサーイオン

表-4 分析したフェンタニル系化合物

化合物	R ₁	R ₂	分類	化合物	R ₁	R ₂	分類
Acetylfentanyl	-CH ₃	-H	麻薬	Valerylentanyl	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-H	麻薬
<i>para</i> -Methoxyfentanyl	-CH ₂ CH ₃	-OCH ₃ (4位)	-	Acrylfentanyl	-CH=CH ₂	-H	麻薬
<i>meta</i> -Fluorofentanyl	-CH ₂ CH ₃	-F (3位)	-	<i>ortho</i> -Fluoroacrylfentanyl	-CH=CH ₂	-F (2位)	-
Butyrylfentanyl	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-H	麻薬	Ocfentanyl	-CH ₂ -O-CH ₃	-F (2位)	麻薬
<i>ortho</i> -Methoxybutyrylfentanyl	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-OCH ₃ (2位)	-	<i>meta</i> -Fluoromethoxyacetylfentanyl	-CH ₂ -O-CH ₃	-F (3位)	-
<i>para</i> -Methoxybutyrylfentanyl	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-OCH ₃ (4位)	指定薬物	<i>para</i> -Fluoromethoxyacetylfentanyl	-CH ₂ -O-CH ₃	-F (4位)	-
<i>ortho</i> -Fluorobutyrylfentanyl	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-F (2位)	-	Furanylfentanyl		-H	麻薬
<i>meta</i> -Fluorobutyrylfentanyl	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-F (3位)	-	<i>para</i> -Fluorofuranylfentanyl		-F (4位)	-
<i>para</i> -Fluorobutyrylfentanyl	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-F (4位)	麻薬				



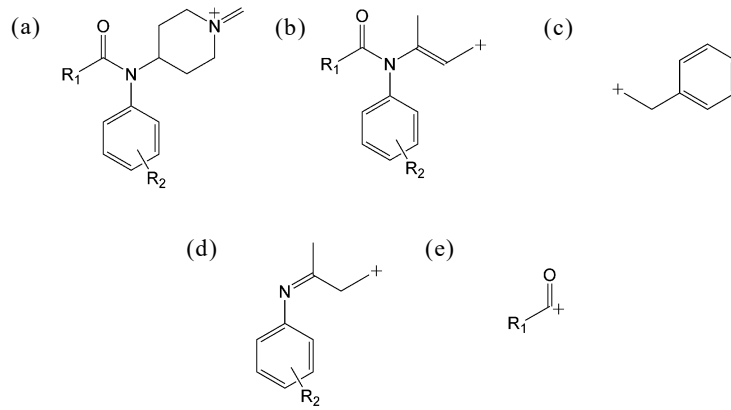


図-12 フェンタニル系化合物のフラグメントイオン

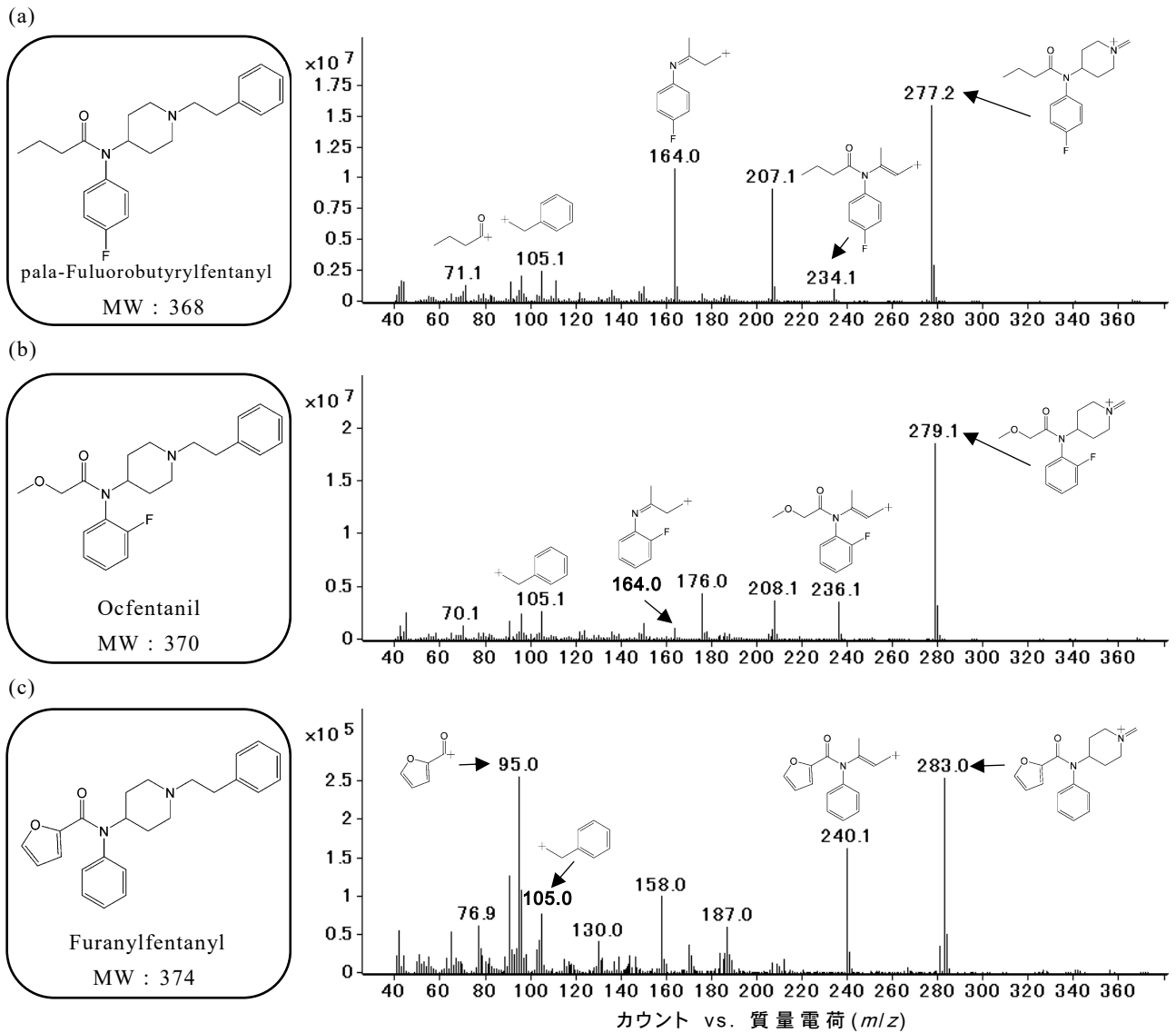


図-13 フェンタニル系化合物のマスペクトル
(a) pala-Fuluorobutyrylfentanyl、(b) Ocfentanil、(c) Furanylfentanyl

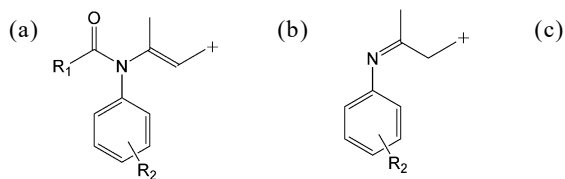


図-14 フェンタニル系化合物のプロダクトイオン

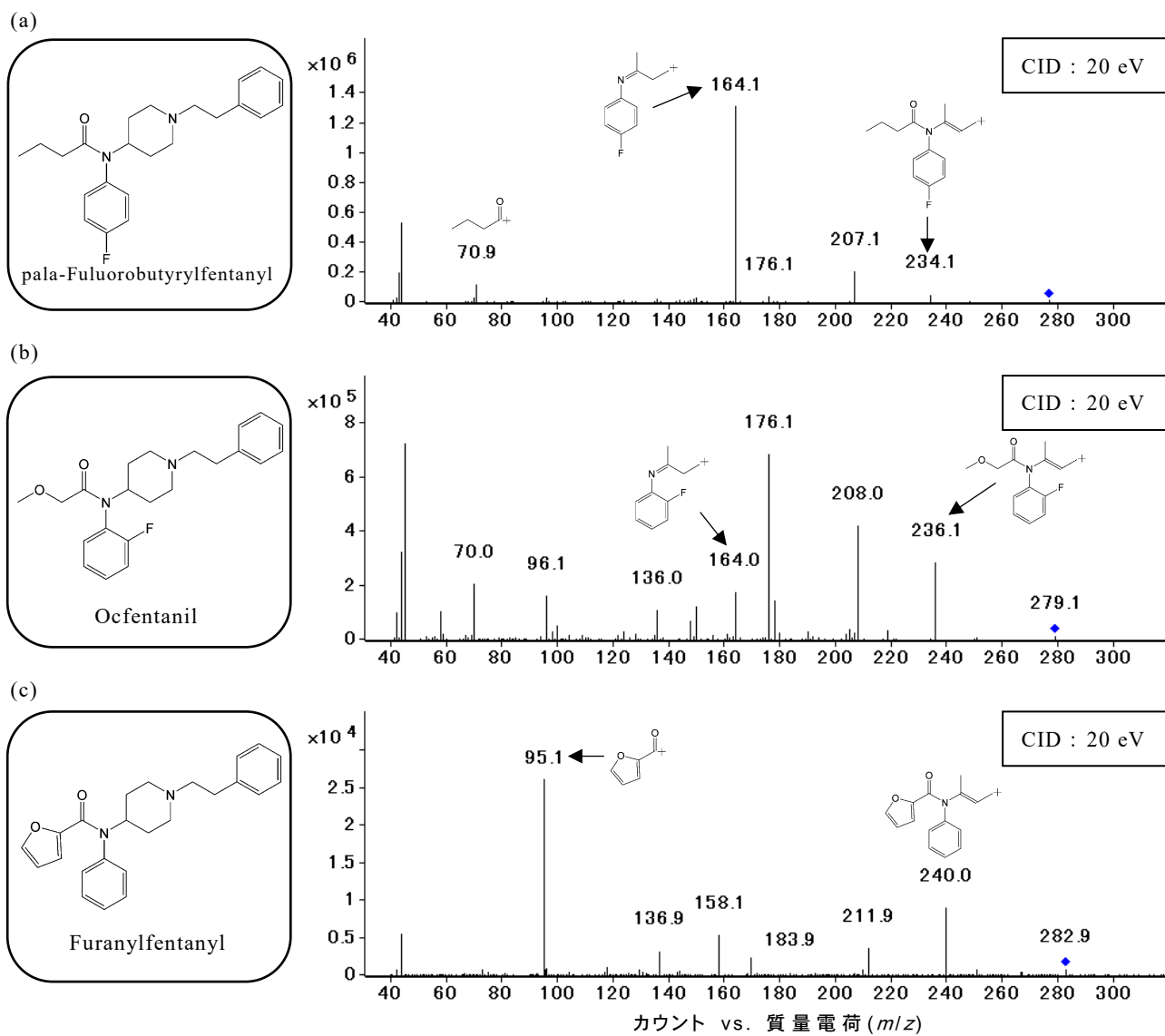
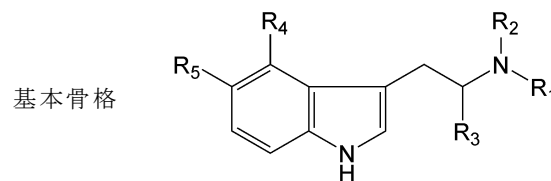


図-15 フェンタニル系化合物のプロダクトイオンスペクトル
 (a) pala-Fuluorobutyrylfentanyl、(b) Ocfentanil、(c) Furanylfentanyl、
 ◆ : プリカーサーイオン

表-5 分析したトリプタミン系化合物

化合物	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	分類	化合物	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	分類
AMT	-H	-H	-CH ₃	-H	-H	麻薬	DPT	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-H	-H	-H	指定薬物
5-MeO-AMT	-H	-H	-CH ₃	-H	-OCH ₃	指定薬物	4-AcO-DPT	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-H	-OCOCH ₃	-H	-
4-AcO-DMT	-CH ₃	-CH ₃	-H	-OCOCH ₃	-H	指定薬物	MIPT	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₃	-H	-H	-H	指定薬物
5-MeO-DMT	-CH ₃	-CH ₃	-H	-H	-OCH ₃	指定薬物	4-OH-MIPT	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₃	-H	-OH	-H	指定薬物
4-OH-MET	-CH ₂ CH ₃	-CH ₃	-H	-OH	-H	指定薬物	5-MeO-MIPT	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₃	-H	-H	-OCH ₃	指定薬物
4-AcO-MET	-CH ₂ CH ₃	-CH ₃	-H	-OCOCH ₃	-H	指定薬物	5-MeO-EIPT	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ CH ₃	-H	-H	-OCH ₃	指定薬物
4-OH-DET	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	-H	-OH	-H	指定薬物	DIPT	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	-H	-H	-H	指定薬物
4-AcO-DET	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	-H	-OCOCH ₃	-H	指定薬物	4-OH-DIPT	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	-H	-OH	-H	指定薬物
5-MeO-DET	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	-H	-H	-OCH ₃	指定薬物	4-AcO-DIPT	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	-H	-OCOCH ₃	-H	指定薬物



Frontier 7.0 で推定した結果を図-14 に示した。

一例として、フェンタニル系化合物のうち、pala-Fluorobutyrylfentanyl、Ocfentanyl 及び Furanylfentanyl のプロダクトイオンスペクトルを図-15 に示した。

図-14 の(a)のプロダクトイオンは分析を行った全てのフェンタニル系化合物で見られた。図-14 の(b)のプロダクトイオンは R₁ にフリル基が結合している化合物以外の化合物で見られた。図-14 の(c)のプロダクトイオンは R₁ にメトキシメチル基が結合している化合物以外の化合物で見られた。

なお、各プロダクトイオンは CID が 10 eV~20 eV で確認することができた。

5. トリプタミン系化合物

1) スキャンモード

5-MeO-AMT や 4-OH-MIPT 等のトリプタミン系化合物の基本骨格を有する 18 化合物 (表-5) の標準品をスキャンモードで分析し、マススペクトルを取得した。マススペクトル中に見られる特徴的なフラグメントイオンについて、その構造式を Mass Frontier 7.0 で推定した結果を図-16 に示した。

一例として、トリプタミン系化合物のうち、5-MeO-AMT、5-MeO-DMT 及び 4-OH-MIPT のマススペクトルを図-17 に示した。

図-16 の(a)のフラグメントイオンは分析を行った全てのトリプタミン系化合物で見られた。図-16 の(b)、(c)及び(d)のフラグメントイオンは表-5 の R₃ にメチル基が結合している AMT 及び 5-MeO-AMT で見られた。図-16 の(e)及び(f)のフラグメントイオンは

AMT 及び 5-MeO-AMT 以外の全ての化合物で見られた。

2) プロダクトイオンスキャンモード

スキャンモードで分析した結果、全てのトリプタミン系化合物において、分子イオンピークが確認できたことから、それをプリカーサーイオンとしプロダクトイオンスキャンモードで分析し、プロダクトイオンスペクトルを取得した。プロダクトイオンスペクトル中に見られる特徴的なプロダクトイオンについて、その構造式を Mass Frontier 7.0 で推定した結果を図-18 に示した。

一例として、トリプタミン系化合物のうち、5-MeO-AMT、5-MeO-DMT 及び 4-OH-MIPT のプロダクトイオンスペクトルを図-19 に示した。

図-18 の(a)、(b)及び(c)のプロダクトイオンは、表-5 の R₃ にメチル基が結合している AMT 及び 5-MeO-AMT で見られた。図-18 の(d)のプロダクトイオンは AMT 及び 5-MeO-AMT 以外の化合物で見られた。

なお、AMT 及び 5-MeO-AMT で見られた図-18 の(a)、(b)及び(c)のプロダクトイオンは CID が 10 eV~30 eV で確認することができた。また、AMT 及び 5-MeO-AMT 以外で見られた図-18 の(d)のプロダクトイオンは CID が 10eV~40eV で確認することができた。

6. フェネチルアミン系化合物

1) スキャンモード

2C-C や Escaline 等のフェネチルアミン系化合物

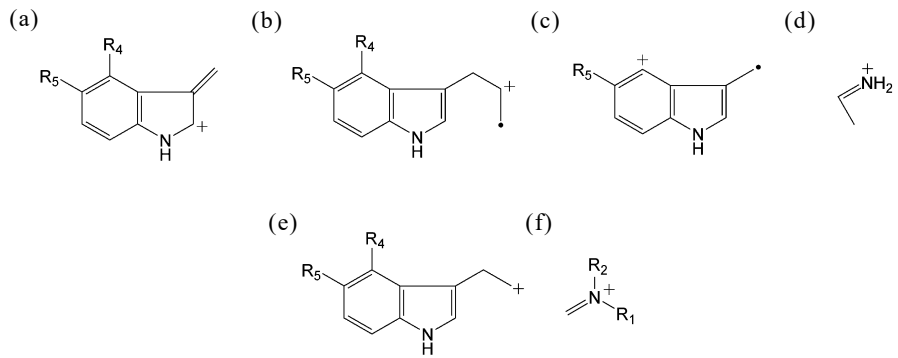


図-16 トリプタミン系化合物のフラグメントイオン

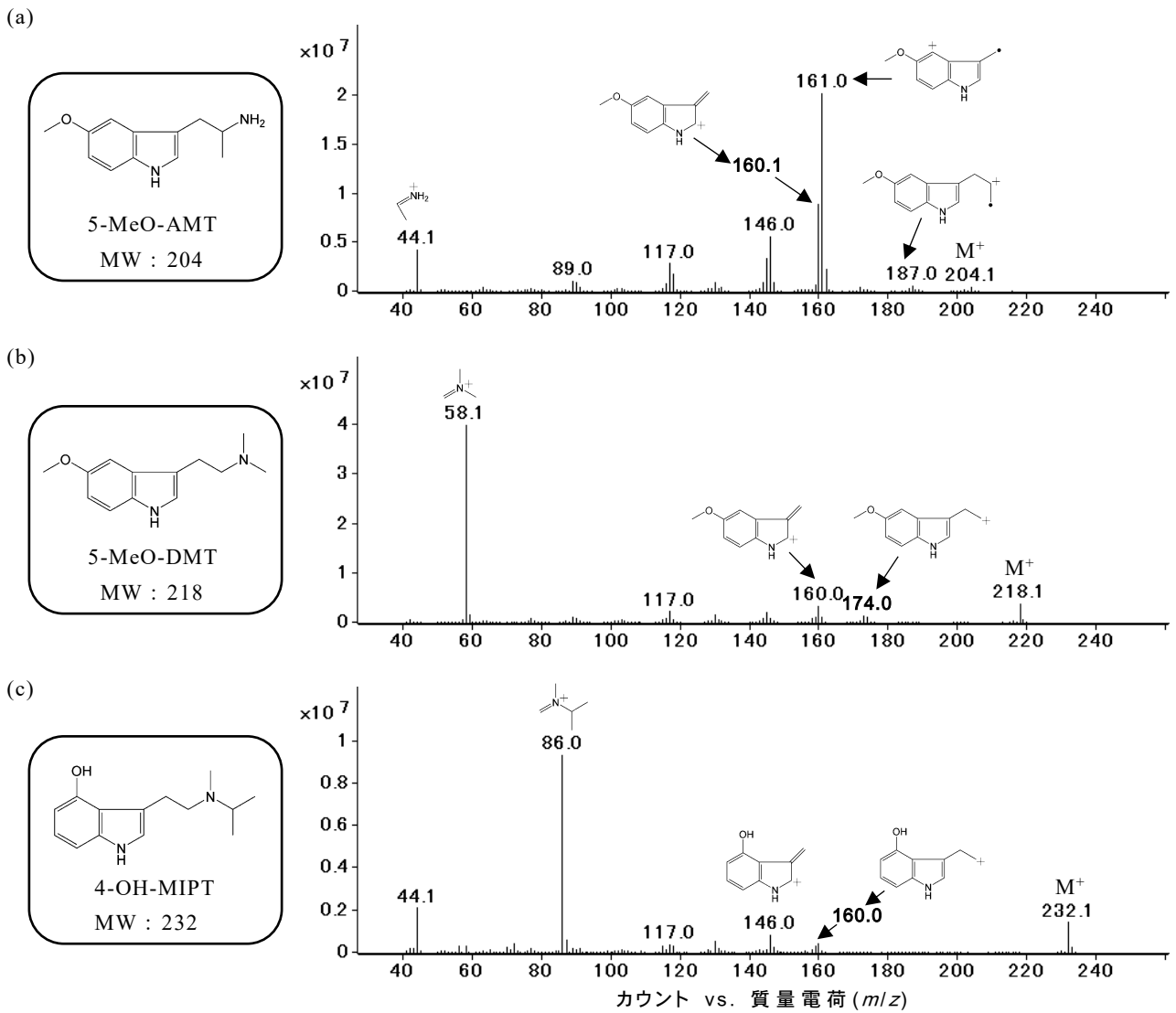


図-17 トリプタミン系化合物のマススペクトル
(a) 5-MeO-AMT、(b) 5-MeO-DMT、(c) 4-OH-MIPT

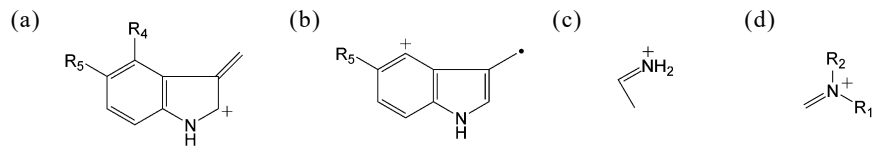


図-18 トリプタミン系化合物のプロダクトイオン

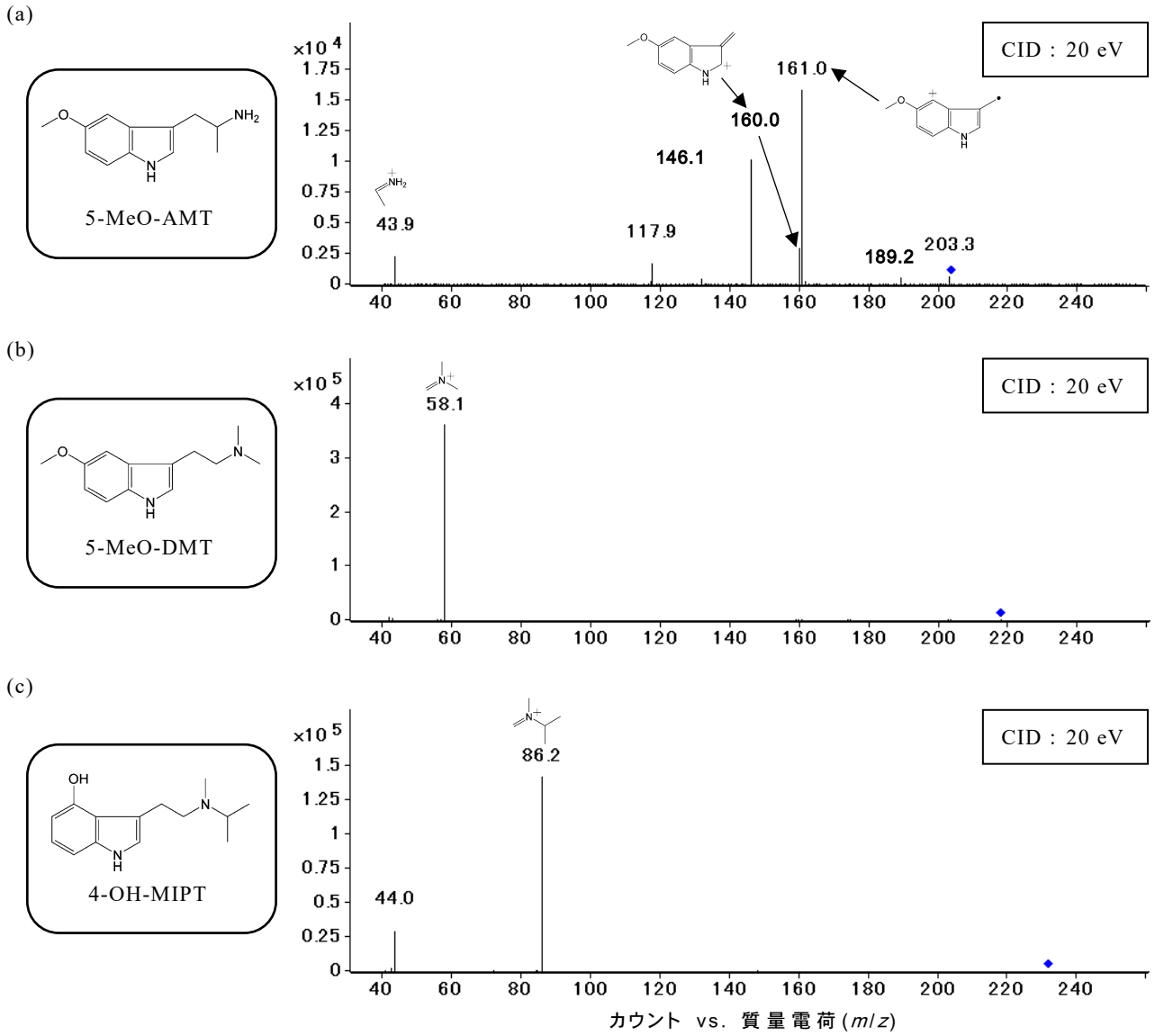


図-19 トリプタミン系化合物のプロダクトイオンスペクトル

(a) 5-MeO-AMT、(b) 5-MeO-DMT、(c) 4-OH-MIPT、

◆: プリカーサーイオン

表-6 分析したフェネチルアミン系化合物

化合物	R ₁	R ₂	R ₃	分類	化合物	R ₁	R ₂	R ₃	分類
2C-H	-H	-H	-OCH ₃	指定薬物	2C-T	-SCH ₃	-H	-OCH ₃	-
2C-E	-CH ₂ CH ₃	-H	-OCH ₃	指定薬物	Escaline	-OCH ₂ CH ₃	-OCH ₃	-H	指定薬物
2C-P	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-H	-OCH ₃	指定薬物	Proscaline	-O(CH ₂) ₂ CH ₃	-OCH ₃	-H	-
2C-C	-Cl	-H	-OCH ₃	指定薬物					

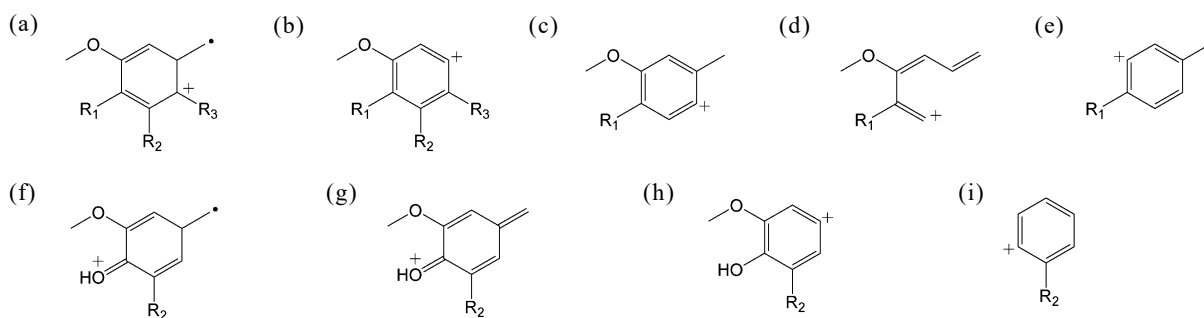
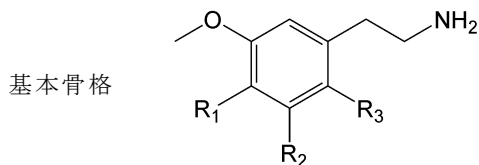
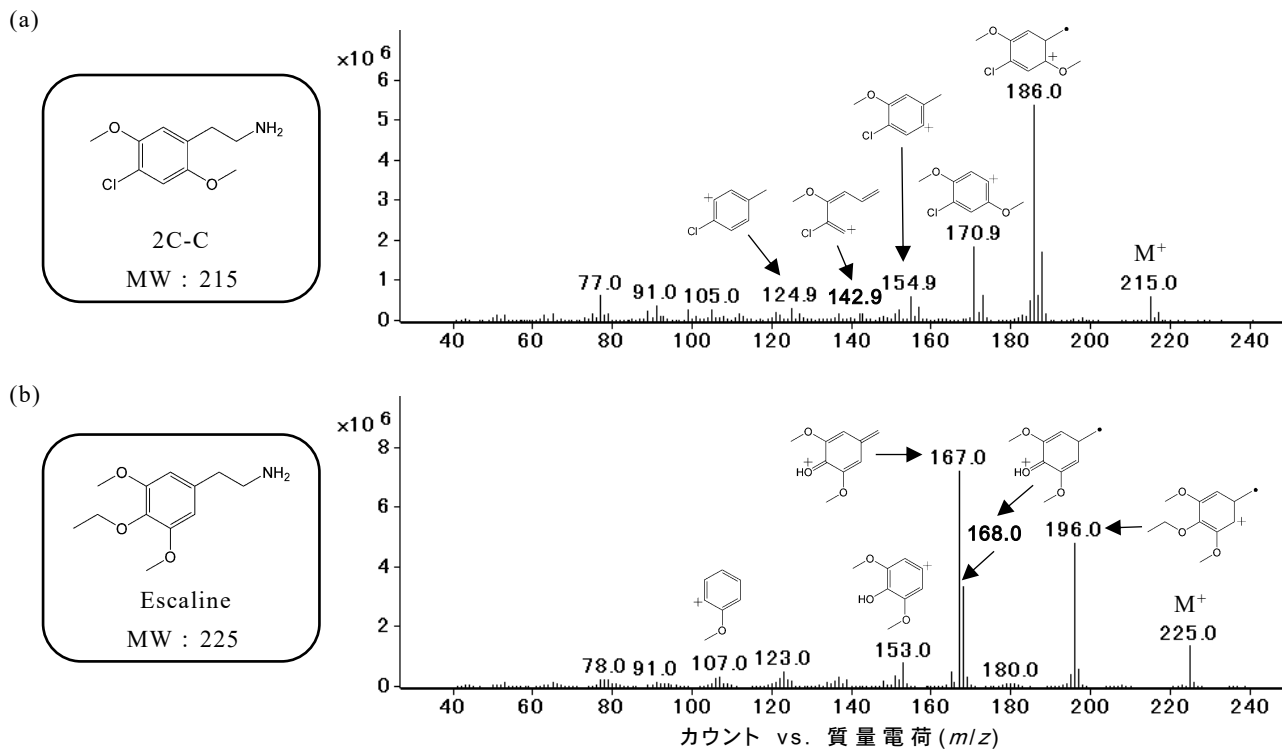


図-20 フェネチルアミン系化合物のフラグメントイオン



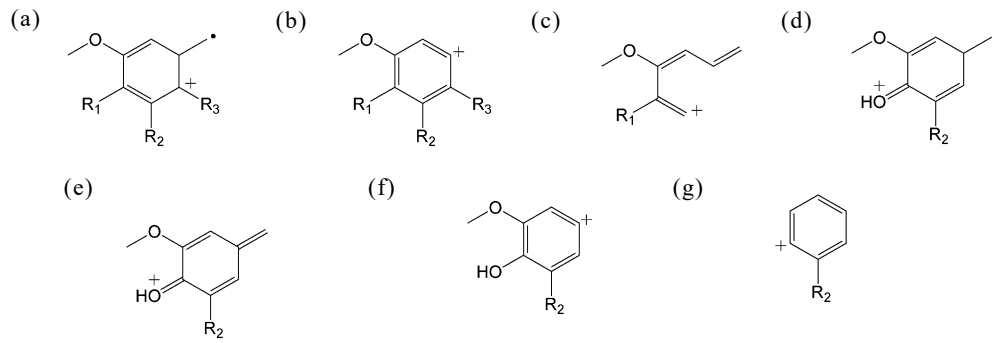


図-22 フェネチルアミン系化合物のプロダクトイオン

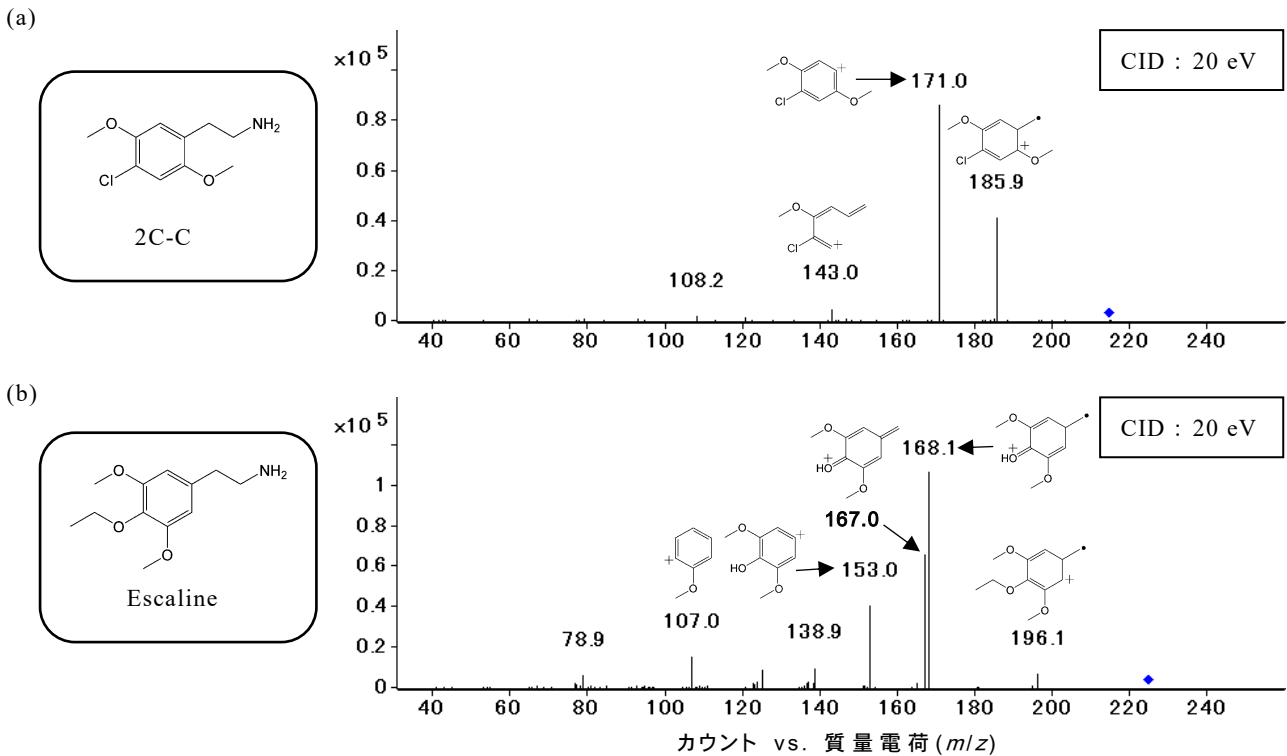


図-23 フェネチルアミン系化合物のプロダクトイオンスペクトル
 (a) 2C-C、(b) Escaline、◆：プリカーサーイオン

の基本骨格を有する 7 化合物（表-6）の標準品をスキャンモードで分析し、マススペクトルを取得した。マススペクトル中に見られる特徴的なフラグメントイオンについて、その構造式を Mass Frontier 7.0 で推定した結果を図-20 に示した。

一例として、フェネチルアミン系化合物のうち、2C-C 及び Escaline のマススペクトルを図-21 に示した。

図-20 の(a)のフラグメントイオンは分析を行った全てのフェネチルアミン系化合物で見られた。図-20 の (b)、(c)、(d)、(e)のフラグメントイオンは表-6 の R₃ にメトキシ基が結合していない Escaline 及び Proscaline 以外の全ての化合物で見られ、Escaline 及び Proscaline については、(f)、(g)、(h)及び(i)のフラグメントイオンが見られた。

2) プロダクトイオンスキャンモード

スキャンモードで分析した結果、全てのフェネチルアミン系化合物において、分子イオンピークが確認できたことから、分子イオンをプリカーサーイオンとしてプロダクトイオンスキャンモードで分析し、プロダクトイオンスペクトルを取得した。プロダクトイオンスペクトル中に見られる特徴的なプロダクトイオンについて、その構造式を Mass Frontier 7.0 で推定した結果を図-22 に示した。

一例として、フェネチルアミン系化合物のうち、2C-C 及び Escaline のプロダクトイオンスペクトルを図-23 に示した。

図-22 の(a)のプロダクトイオンは全てのフェネチルアミン系化合物で見られた。図-22 の(b)及び(c)のプロダクトイオンは表-6 の R₃ にメトキシ基が結合していない Escaline 及び Proscaline 以外の全ての化

化合物で見られ、Escaline 及び Proscaline については (d)、(e)、(f)及び(g)のプロダクトイオンが見られた。

なお、Escaline 及び Proscaline 以外の全ての化合物で見られた図-22の(a)、(b)及び(c)のプロダクトイオンは CID が 20 eV~30 eV で確認することができた。また、Escaline 及び Proscaline でみられた(a)、(d)、(e)、(f)及び(g)のプロダクトイオンは CID が 10eV ~20 eV で確認することができた。

7. フェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体
1) スキャンモード

25D-NBOMe や 25B-NBF 等のフェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体の基本骨格を有する 10 化合物(表-7)の標準品をスキャンモードで分析し、マススペクトルを取得した。マススペクトル中に見られる特徴的なフラグメントイオンについて、その構造式を Mass Frontier 7.0 で推定した結果を図-24に示した。

一例として、フェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体のうち、25D-NBOMe 及び 25B-NBF のマススペクトルを図-25に示した。

図-24の(a)、(b)、(c)及び(d)のフラグメントイオン

は分析を行った全てのフェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体で見られた。図-24の(e)のフラグメントイオンは表-7の R₄ にフルオロ基が結合していない化合物で見られた。

2) プロダクトイオンスキャンモード

全てのフェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体において、分子イオンピークがほぼ確認されなかったことから、分子イオンに比較的構造に近い図-24の(a)をプリカーサーイオンとしプロダクトイオンスキャンモードで分析し、プロダクトイオンスペクトルを取得した。プロダクトイオンスペクトル中に見られる特徴的なフラグメントイオンについて、その構造式を Mass Frontier 7.0 で推定した結果を図-26に示した。

一例として、フェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体のうち、25D-NBOMe 及び 25B-NBF のプロダクトイオンスペクトルを図-27に示した。

図-26の(a)、(b)及び(c)のプロダクトイオンは全てのフェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体で見られた。図-26の(d)のプロダクトイオンは表-7の R₄ にフルオロ基が結合していない化合物で見られた。

表-7 分析したフェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体

化合物	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	分類	化合物	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	分類
25H-NBOMe	-H	-H	-OCH ₃	-OCH ₃	指定薬物	25C-NBF	-Cl	-H	-OCH ₃	-F	指定薬物
25D-NBOMe	-CH ₃	-H	-OCH ₃	-OCH ₃	指定薬物	25B-NBOMe	-Br	-H	-OCH ₃	-OCH ₃	麻薬
25G-NBOMe	-CH ₃	-CH ₃	-OCH ₃	-OCH ₃	-	25B-NBF	-Br	-H	-OCH ₃	-F	指定薬物
25E-NBOMe	-CH ₂ CH ₃	-H	-OCH ₃	-OCH ₃	指定薬物	25I-NBOMe	-I	-H	-OCH ₃	-OCH ₃	麻薬
2C-C-NBOMe	-Cl	-H	-OCH ₃	-OCH ₃	麻薬	25I-NBF	-I	-H	-OCH ₃	-F	指定薬物

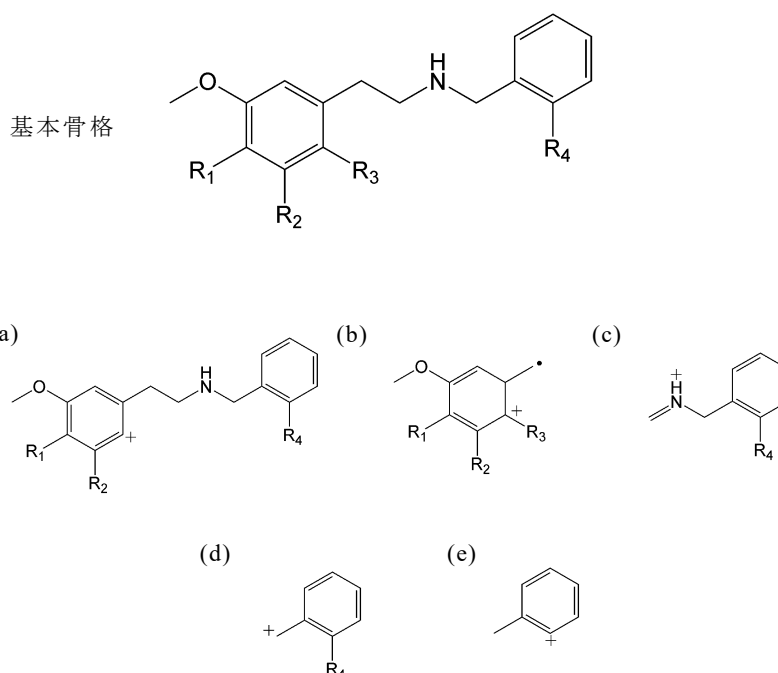


図-24 フェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体のフラグメントイオン

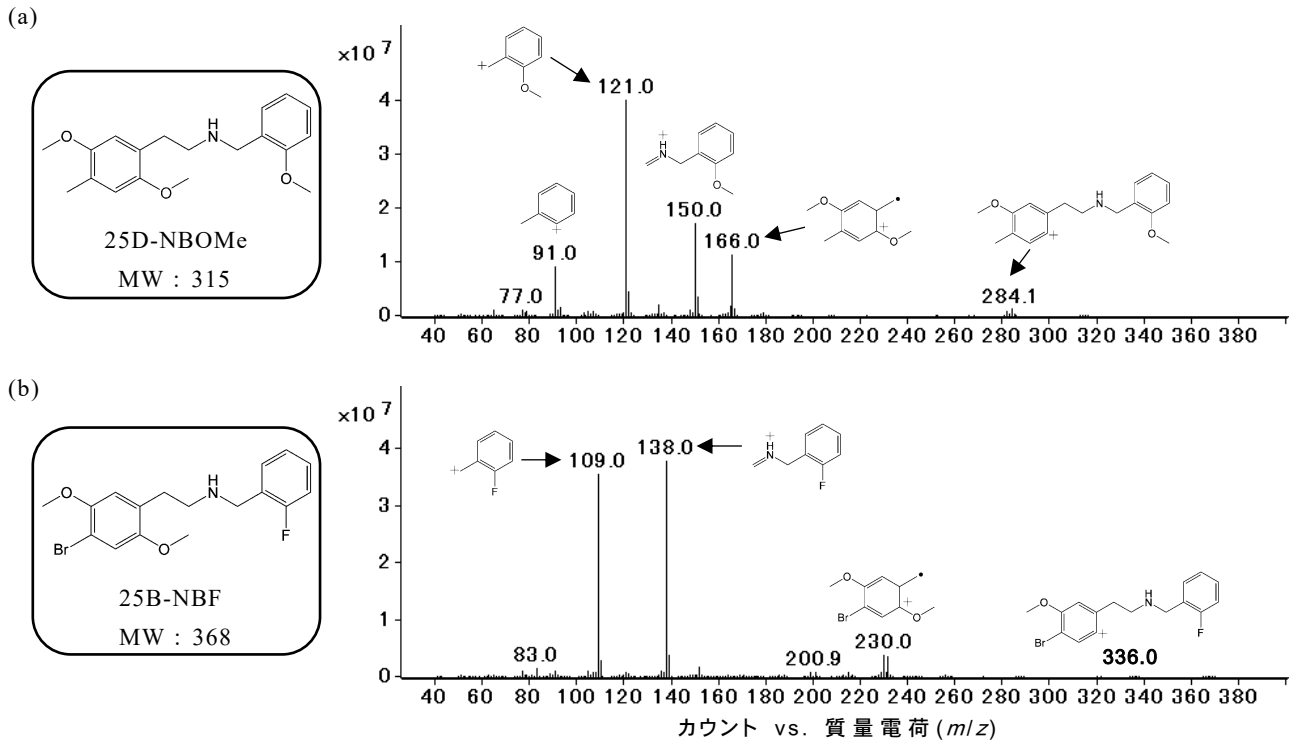


図-25 フェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体のマスペクトル
(a) 25D-NBOMe、(b) 25B-NBF

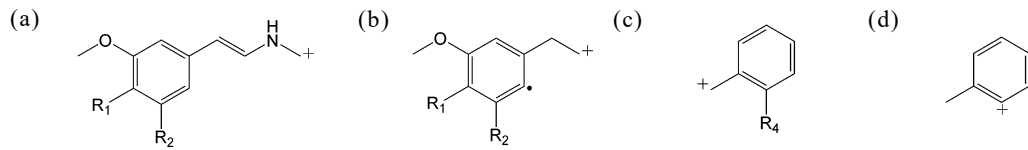


図-26 フェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体のプロダクトイオン

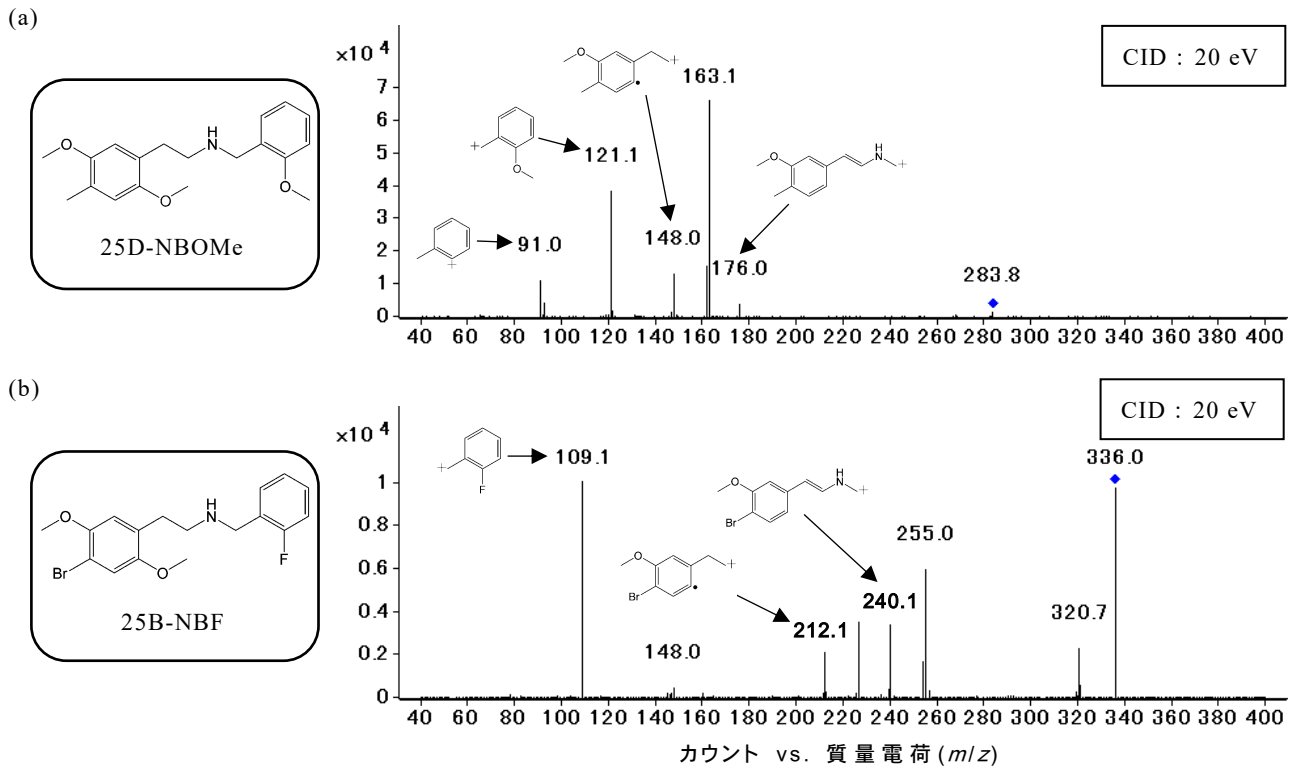


図-27 フェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体のプロダクトイオンスペクトル
(a) 25D-NBOMe、(b) 25B-NBF、◆ : プリカーサーイオン

なお、各プロダクトイオンは CID が 10 eV～20 eV で確認することができた。

今回、全ての化合物について、標準溶液の濃度は 100 µg/mL で分析している。しかしながら、プロダクトイオンスキャンモードのプリカーサーイオンとなるフェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体のフラグメントイオン(a)のように強度が小さいフラグメントイオンピークしか検出されないことがある。そのような場合、溶液中の濃度が 100 µg/mL より低いとフラグメントイオン(a)が検出されない可能性があるので注意が必要である。また、立体異性体が存在する化合物の場合には、その立体配置は本法では確認できないので、円二色分散計等の別の方法を使用して確認⁸⁾する必要がある。

まとめ

今回、GC-MS/MS を用いて、カルボキサミド型カンナビノイド系化合物、カルボキシレート型カンナビノイド系化合物、指定薬物として包括規制されているカチノン系化合物の基本骨格を有する化合物、フェンタニル系化合物、トリプタミン系化合物、フェネチルアミン系化合物及びフェネチルアミン系化合物の *N*-ベンジル誘導体のマススペクトル及びプロダクトイオンスペクトルを取得した結果、各化合物群において、その構造に由来した特徴的なイオンを得ることができた。これらイオンの情報をまとめることで、今後、これらに類似する新たな化合物が危険ドラッグから検出された際に、そのイオンの情報から構造を迅速かつ容易に推定することが可能となった。

引用文献

- 1) 指定薬物を含有する危険ドラッグの発見について (<https://www.metro.tokyo.lg.jp/tosei/hodohappyo/press/2020/10/19/08.html>)
- 2) 指定薬物を含有する危険ドラッグの発見について (<https://www.mhlw.go.jp/content/11126000/000498190.pdf>)
- 3) 花尻(木倉)瑠理：危険ドラッグの規制と流通実態について，薬剤学，75，121-127(2015)
- 4) 花尻(木倉)瑠理：危険ドラッグの法規制と流通実態変化，日薬理誌，150，129-134(2017)
- 5) 高橋和長，山崎翠，印南佳織，松尾千鶴子，吉田智也：ハイブリッド四重極-オービトラップ質量分析計を用いた危険ドラッグ一斉分析法の構築，千葉県衛研年報，64，64-81(2015)
- 6) 高橋和長，山崎翠，印南佳織，吹譚友秀，吉田智也：四重極-オービトラップ質量分析計を用いた危険ドラッグに含まれる薬物の構造推定法，千葉県衛研年報，66，51-60(2017)

7) 麻薬、麻薬原料植物、向精神薬及び麻薬向精神薬原料を指定する政令の一部を改正する政令の交付について，薬発第 0708 第 5 号，令和 2 年 7 月 8 日

8) 吹譚友秀，山崎翠，高橋和長，土井崇広，川口正美，榎本啓吾，吉野宏毅，内本勝也，西村真紀：健康食品に含まれていたタダラフィルおよびタダラフィル構造類似物質の立体配置，食品衛生学雑誌，62(2)，65-72(2021)