

# GC-MS、IR 及び LC-PDA-MS を用いた合成カンナビノイド系 危険ドラッグの鑑別方法の検討

加藤 実穂\*\*\*\*, 佐々木 良祐\*\*\*\*, 松本 健志\*\*\*\*\* , 宇田川 晃\*\*\*\*\* , 松崎 隆一\*

## Analysis of synthetic cannabinoids with GC-MS, IR and LC-PDA-MS

Miho KATO\*\*\*\*, Ryosuke SASAKI\*\*\*\*, Tsuyoshi MATSUMOTO\*\*\*\*\*,

Akira UDAGAWA\*\*\*\*\* and Ryuichi MATSUZAKI\*

\*Tokyo Customs Laboratory 2-7-11, Aomi, Koto-ku, Tokyo 135-8615 Japan

\*\* Present address: Tokyo Customs Narita Air Cargo Sub-Branch 32-1 Aza-tennmino, Komaino, Narita-shi, Chiba 282-8603 Japan

\*\*\* Present address: Tokyo Customs 2-7-11, Aomi, Koto-ku, Tokyo 135-8615 Japan

\*\*\*\* Present address: CentralCustoms Laboratory 6-3-5 Kashiwahona, Kashiwa, Chiba 277-0882 Japan

\*\*\*\*\* Present address: Tokyo Customs Shibaura Sub-Branch 2-7-68 Kaigan Minato-ku 105-0022 Tokyo Japan

In recent years, many kinds of synthetic cannabinoids have been found by Customs at Japan's border. Most of them detected in our laboratory were pure and in powdery form, not in the form of "herbal products". Synthetic cannabinoids newly detected in our laboratory have chemical structures like indole amide, indazole amide, indole ester, indazole ester and naphthyl ketone of indole, benzimidazole and carbazole. The purpose of this study was to develop an analytical procedure to identify the chemical structures of unknown synthetic cannabinoids by using the analytical data of known compounds. In this study, we analyzed 26 known synthetic cannabinoids with a gas chromatograph mass spectrometer (GC-MS), liquid chromatograph mass spectrometer coupled with photodiode array detector (LC-PDA-MS) and infrared spectrometer. As a result, it was found that the structures of unknown synthetic cannabinoids that have ester or amide bonds can be roughly identified by GC-MS and LC-PDA-MS.

## 1. 緒 言

危険ドラッグとは、規制薬物又は指定薬物に化学構造を似せて作られ、これらと同様の薬理作用を有する物品とされている<sup>1)</sup>。危険ドラッグの使用が原因とされる事件・事故、健康被害が報告されており、大きな社会問題となっている。

危険ドラッグは、その化学構造ごとにいくつかの系統に分けることができ、当分析室で検出された危険ドラッグの大部分は、合成カンナビノイド系危険ドラッグとカチノン系危険ドラッグである。そのうち、合成カンナビノイド系危険ドラッグは大麻に類似の作用をもつ薬物であり、当分析室においては、インドール環を有するエステル及びアミド化合物、インダゾール環を有するエステル及びアミド化合物が数多く検出されている。

未知の危険ドラッグ分析では、核磁気共鳴分析計(以下、「NMR」という。) ガスクロマトグラフ質量分析計(以下、「GC-MS」という。) 液体クロマトグラフ質量分析計(以下、「LC-MS」という。) 等を用いた構造推定が必要となる。NMR は詳細な構造推定のために非常に有用であるが、目的化合物の単離が必要であり、GC-MS や LC-MS と比較して感度が低いため、試料量が限られる場合にはその測定が困難である。

本研究では、NMR を用いない合成カンナビノイド系危険ドラッグの構造推定を目的として、構造既知の合成カンナビノイド系危険ドラッグ 26 種類について、GC-MS、赤外分光光度計(以下、「IR」という。) 及びフォトダイオードアレイ検出器付液体クロマトグラフ質量分析計(以下、「LC-PDA-MS」という。) による測定を行った。GC-MS で得られる電子イオン化マススペクトル(以下、

\* 東京税関業務部 〒135-8615 東京都江東区青海 2-7-11

\*\* 現在所属 東京税関成田航空貨物出張所 〒282-8603 千葉県成田市駒井野字天並野 2159

\*\*\* 現在所属 東京税関業務部 〒135-8615 東京都江東区青海 2-7-11

\*\*\*\* 現在所属 財務省税關中央分析所 〒277-0882 千葉県柏市柏の葉 6-3-5

\*\*\*\*\* 現在所属 東京税関芝浦出張所 〒105-0022 東京都港区海岸 2-7-68

「EI マススペクトル」という。)における、それぞれの化学構造に由来する特徴的なフラグメントイオンの有無を検討し、EI マススペクトルの解析を中心とした未知の合成カンナビノイド系危険ドラッグの構造推定法について検討を行った。

## 2. 実験

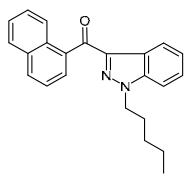
### 2.1 試料

合成カンナビノイド系危険ドラッグ合計 26 種類を使用した。使用した試料を Table 1 に、化学構造式を Fig.1 に示す。

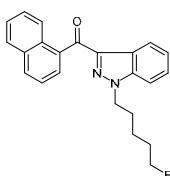
また、試料 5~26 について、インドール環又はインダゾール環に隣接したカルボニル基を境に、カルボニル基及びインドール環又はインダゾール環を含む側を R<sub>1</sub>、その反対側を R<sub>2</sub>としたときの、R<sub>1</sub> と R<sub>2</sub> の一覧を Table 2 に示す。

Table 1 Synthetic cannabinoids used in this study

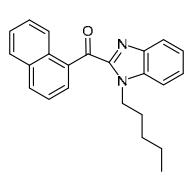
No.	Common name	Chemical name
1	THJ-018	Naphthalen-1-yl(1-pentyl-1H-indazol-3-yl)methanone
2	THJ-2201	[1-(5-Fluoropentyl)-1H-indazol-3-yl](naphthalen-1-yl)methanone
3	JWH-018 benzimidazole analog	[1-Pentyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl](naphthalen-1-yl)methanone
4	EG-018	Naphthalen-1-yl(9-pentyl-9H-carbazol-3-yl)methanone
5	NM2201	Naphthalen-1-yl 1-(5-fluoropentyl)-1H-indole-3-carboxylate
6	FDU-PB-22	Naphthalen-1-yl 1-(4-fluorobenzyl)-1H-indole-3-carboxylate
7	NNE1	N-(Naphthalen-1-yl)-1-pentyl-1H-indole-3-carboxamide
8	MN-18	N-(Naphthalen-1-yl)-1-pentyl-1H-indazole-3-carboxamide
9	5F-NNE1	N-(Naphthalen-1-yl)-1-(5-fluoropentyl)-1H-indole-3-carboxamide
10	5F-MN-18	1-(5-Fluoropentyl)-N-(naphthalen-1-yl)-1H-indazole-3-carboxamide
11	QUPIC	Quinolin-8-yl 1-pentyl(1H-indole)-3-carboxylate
12	5F-NPB-22	Quinolin-8-yl 1-(5-fluoropentyl)-1H-indazole-3-carboxylate
13	QUCHIC	Quinolin-8-yl 1-(cyclohexylmethyl)-1H-indole-3-carboxylate
14	FUB-PB-22	Quinolin-8-yl 1-(4-fluorobenzyl)-1H-indole-3-carboxylate
15	5F-ABICA	N-(1-Amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl)-1-(5-fluoropentyl)-1H-indole-3-carboxamide
16	5F-AB-PINACA	N-(1-Amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl)-1-(5-fluoropentyl)-1H-indazole-3-carboxamide
17	AB-CHMINACA	N-(1-Amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl)-1-(cyclohexylmethyl)-1H-indazole-3-carboxamide
18	5F-ADBICA	N-(1-Amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl)-1-(5-fluoropentyl)-1H-indole-3-carboxamide
19	5F-ADB-PINACA	N-(1-Amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl)-1-(5-fluoropentyl)-1H-indazole-3-carboxamide
20	ADB-CHMINACA	N-(1-Amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl)-1-(cyclohexylmethyl)-1H-indazole-3-carboxamide
21	PX-1	N-(1-Amino-1-oxo-3-phenylpropan-2-yl)-1-(5-fluoropentyl)-1H-indole-3-carboxamide
22	PX-2	N-(1-Amino-1-oxo-3-phenylpropan-2-yl)-1-(5-fluoropentyl)-1H-indazole-3-carboxamide
23	FUB-APINACA	N-(1-Adamantyl)-1-(4-fluorobenzyl)-1H-indazole-3-carboxamide
24	AMB	Methyl 3-methyl-2-(1-pentyl-1H-indazole-3-carboxamido)butanoate
25	5F-AMB	Methyl 2-[1-(5-fluoropentyl)-1H-indazole-3-carboxamido]-3-methylbutanoate
26	5F-ADB	Methyl 2-[1-(5-fluoropentyl)-1H-indazole-3-carboxamido]-3,3-dimethylbutanoate



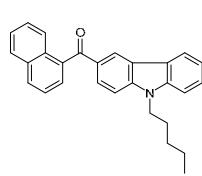
**THJ-018 (1)**  
 $C_{23}H_{22}N_2O: 342$



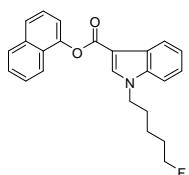
**THJ-2201 (2)**  
 $C_{23}H_{21}FN_2O: 360$



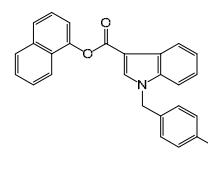
**JWH-018 benzimidazole analog (3)**  
 $C_{23}H_{22}N_2O: 342$



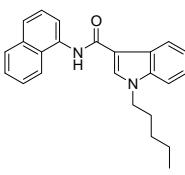
**EG-018 (4)**  
 $C_{28}H_{25}NO: 391$



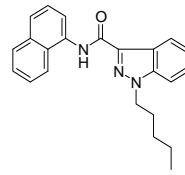
**NM2201 (5)**  
 $C_{24}H_{22}FN_2O_2: 375$



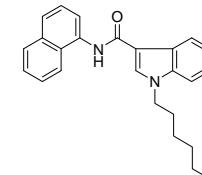
**FDU-PB-22 (6)**  
 $C_{26}H_{18}FN_2O_2: 395$



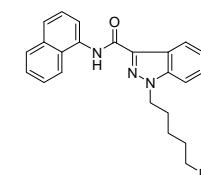
**NNE1 (7)**  
 $C_{24}H_{24}N_2O: 356$



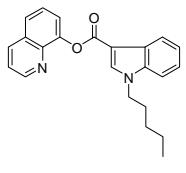
**MN-18 (8)**  
 $C_{23}H_{23}N_3O: 357$



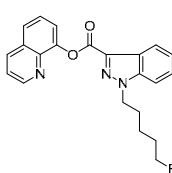
**5F-NNE1 (9)**  
 $C_{24}H_{23}FN_2O: 374$



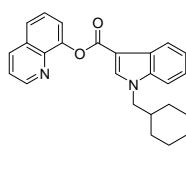
**5F-MN-18 (10)**  
 $C_{23}H_{22}FN_3O: 375$



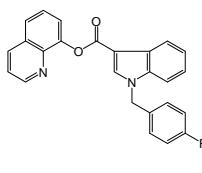
**QUPIC (11)**  
 $C_{23}H_{22}N_2O_2: 358$



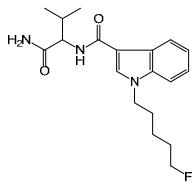
**5F-NPB-22 (12)**  
 $C_{22}H_{20}FN_3O_2: 377$



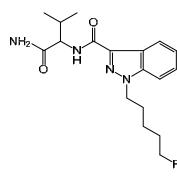
**QUCHIC (13)**  
 $C_{25}H_{24}N_2O_2: 384$



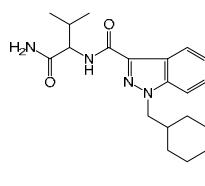
**FUB-PB-22 (14)**  
 $C_{25}H_{17}FN_2O_2: 396$



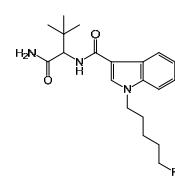
**5F-ABICA (15)**  
 $C_{19}H_{26}FN_3O_2: 347$



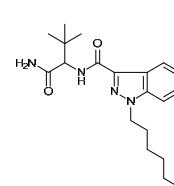
**5F-AB-PINACA (16)**  
 $C_{18}H_{25}FN_4O_2: 348$



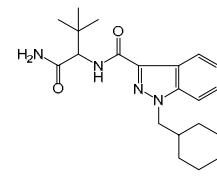
**AB-CHMINACA (17)**  
 $C_{20}H_{28}N_4O_2: 356$



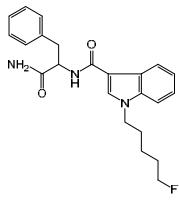
**5F-ADBICA (18)**  
 $C_{20}H_{28}FN_3O_2: 361$



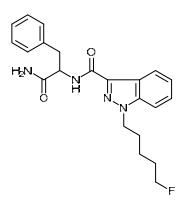
**5F-ADB-PINACA (19)**  
 $C_{19}H_{27}FN_4O_2: 362$



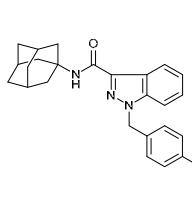
**ADB-CHMINACA (20)**  
 $C_{21}H_{30}N_4O_2: 370$



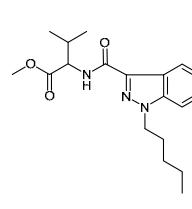
**PX-1 (21)**  
 $C_{23}H_{26}FN_3O_2: 395$



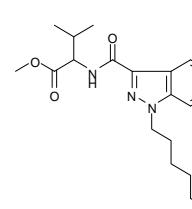
**PX-2 (22)**  
 $C_{22}H_{25}FN_4O_2: 396$



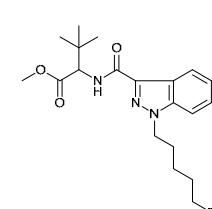
**FUB-APINACA (23)**  
 $C_{25}H_{26}FN_3O: 403$



**AMB (24)**  
 $C_{19}H_{27}N_3O_3: 345$



**5F-AMB (25)**  
 $C_{19}H_{26}FN_3O_3: 363$



**5F-ADB (26)**  
 $C_{20}H_{28}FN_3O_3: 377$

Fig.1 Chemical structures of synthetic cannabinoids

Table 2 Partial structures of compounds 5~26

	R <sub>1</sub> -1	R <sub>1</sub> -2	R <sub>1</sub> -3	R <sub>1</sub> -4	R <sub>1</sub> -5	R <sub>1</sub> -6	R <sub>1</sub> -7	R <sub>1</sub> -8	
R <sub>2</sub> - R <sub>1</sub>	compound	7,11	8,24	5,9,15, 18,21	10,12,16,19, 22,25,26	13	17,20	6,14	23
	R <sub>2</sub> -1	R <sub>2</sub> -2	R <sub>2</sub> -3	R <sub>2</sub> -4	R <sub>2</sub> -5	R <sub>2</sub> -6	R <sub>2</sub> -7	R <sub>2</sub> -8	R <sub>2</sub> -9
R <sub>2</sub>	compound	5,6	7,8,9,10	11,12,13, 14	15,16,17	18,19,20	21,22	23	24,25
									26

## 2.2 分析装置及び測定条件

### 2.2.1 IR

装置 : Nicolet6700

測定法 : KBr 錠剤法

測定波数範囲 : 4000~400 cm<sup>-1</sup>

分解能 : 4 cm<sup>-1</sup>

積算回数 : 32 回

試料について、上記の条件で IR スペクトルを測定した。

### 2.2.2 GC-MS

装置 : Agilent 7890(GC)/5977(MS)

カラム : HP-5MS UI 30 m × 0.25 mm I.D., 0.25 μm(Agilent)

カラム温度 : 80°C(1 min) (40°C/min) 320°C(10 min)

インターフェース温度 : 320°C

イオン化法 : 電子衝撃イオン化法 (EI 法)

イオン源温度 : 230°C

イオン化電圧 : 70 V

注入口温度 : 320°C

注入量 : 1 μL

注入法 : スプリット法 (スプリット比 50 : 1)

マスレンジ : 33 ~ 550 m/z

キャリアガス : ヘリウム

キャリアガス平均線速度 : 37.0 cm/s

試料を約 1 mg/mL の濃度でクロロホルムに溶解し、上記の条件

で EI マススペクトルを測定した。

### 2.2.3 LC-PDA-MS

装置 : Agilent 1260 infinity

カラム : XBridge C18(2.1 × 150 mm, 3.5 μm, Waters 社製)

カラム温度 : 40°C

移動相 : A 液 10 mM ギ酸アンモニウム水溶液

B 液 アセトニトリル

溶媒比 : A/B = 30/70

流速 : 0.3 mL/min

注入量 : 1 μL

検出器 : シングル四重極型質量検出器(Agilent6120)

キャピラリー電圧 : 3500 V

フラグメント電圧 : 70 V

イオン化法 : ESI 法、ポジティブモード

フォトダイオードアレイ検出器 (190 ~ 400 nm)

試料を約 0.1 mg/mL の濃度でアセトニトリルに溶解し、上記の条件で ESI マススペクトル及び UV スペクトルを測定した。

## 3. 結果及び考察

### 3.1 IR スペクトル

今回分析した合成カンナビノイド系危険ドラッグは、IR スペクトルによって R<sub>1</sub>と R<sub>2</sub>の間のカルボニル基の種類 (ケトン、エステル結合又はアミド結合) を識別できた。各試料の C=O 伸縮振動の波数を Table 3 に、THJ-2201(試料 2) 5F-NPB-22(試料 12) 5F-AB-PINACA (試料 16) 及び 5F-AMB (試料 25) の IR スペクトルを Fig.2 に示す。複素環とナフタレンのケトンである試料 1 ~ 4 については、芳香環と共にケトンの C=O 伸縮振動(1650 cm<sup>-1</sup>付近)<sup>2)</sup>による吸収が認められた (Fig.2 (a))。エステル結合をもつ試料 5、6、11 ~ 14 及び 24 ~ 26 については、エステル結合の C=O 伸縮振動 (1750~1700 cm<sup>-1</sup>)<sup>2)</sup> (Fig.2 (b), (d))。アミド結合をもつ試料 7 ~ 10 及び 15 ~ 26 については、アミド結合の C=O 伸縮振動 (1650 cm<sup>-1</sup>付近) 及び N-H 伸縮振動 (3400~3100 cm<sup>-1</sup>付近)<sup>2)</sup> (Fig.2 (c), (d)) による吸収が確認できた。

Table 3 Wavenumbers of carbonyl stretching vibration

No.	Common name	Wavenumber (cm <sup>-1</sup> )
1	THJ-018	1637
2	THJ-2201	1645
3	JWH-018 benzimidazole analog	1655
4	EG-018	1650
5	NM2201	1706
6	FDU-PB-22	1713
7	NNE1	1636
8	MN-18	1686
9	5F-NNE1	1635
10	5F-MN-18	1684
11	QUPIC	1717
12	5F-NPB-22	1731
13	UCHIC	1723
14	FUB-PB-22	1717
15	5F-ABICA	1648
16	5F-AB-PINACA	1662
17	AB-CHMINACA	1695
18	5F-ADBICA	1671
19	5F-ADB-PINACA	1699
20	ADB-CHMINACA	1695
21	PX-1	1650
22	PX-2	1702
23	FUB-APINACA	1665
24	AMB	1738
25	5F-AMB	1738
26	5F-ADB	1728
		1667

### 3.2 GC-MS

#### 3.2.1 複素環とナフタレンのケトンの EI マススペクトル

(試料 1~4)

試料 1~4 の EI マススペクトルを Fig.3 に示す。インダゾール環をもつ THJ-018 (試料 1) THJ-2201 (試料 2) 及びベンゾイミダゾール環をもつ JWH-018 benzimidazole analog (試料 3) では、分子イオンピーク (以下、「[M]<sup>+</sup>」という。) ナフタレン環に由来するピーク (*m/z* 127) 複素環に結合したアルキル鎖の 開裂によるピーク (*m/z* 271) が確認できた。 [M]<sup>+</sup>と分子イオンピークより質量電荷比が 1 小さいピーク (以下、「[M-H]<sup>+</sup>」という。) を比較すると、THJ-018 (試料 1) と THJ-2201 (試料 2) では [M]<sup>+</sup>

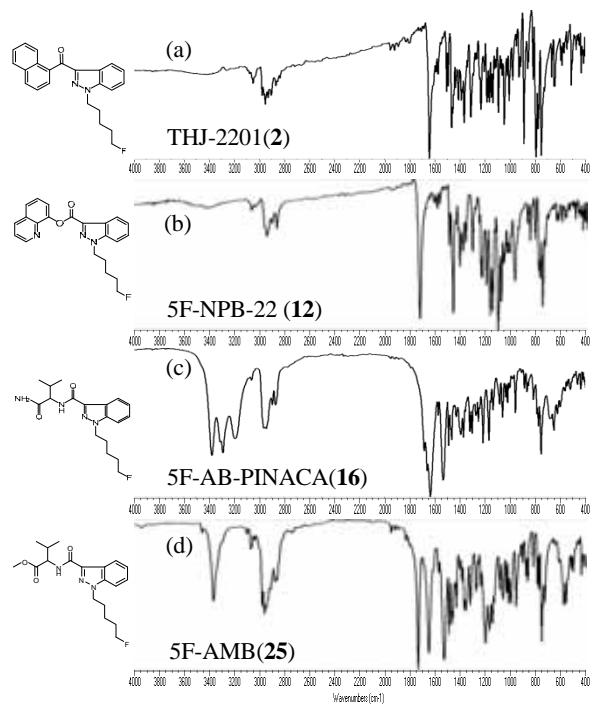


Fig.2 IR spectra of (a) THJ-2201(2), (b) 5F-NPB-22(12), (c) 5F-AB-PINACA(16) and (d) 5F-AMB(25)

が大きいのに対して、JWH-018 benzimidazole analog (試料 3) では [M-H]<sup>+</sup>が大きく検出された。

カルバゾール環をもつ EG-018 (試料 4) については異なるフラグメントパターンを示し、[M]<sup>+</sup> (*m/z* 391)、カルボニル基の 開裂によるフラグメントイオン (*m/z* 264)、複素環に結合したアルキル鎖の 開裂によるフラグメントイオン (*m/z* 334) が確認できた。

これらは、内木ら<sup>3)</sup>の研究で報告されたインドールとナフタレンのケトンとは異なるフラグメントパターンを示すことから、複素環の種類により異なるフラグメントパターンを示すことが分かった。

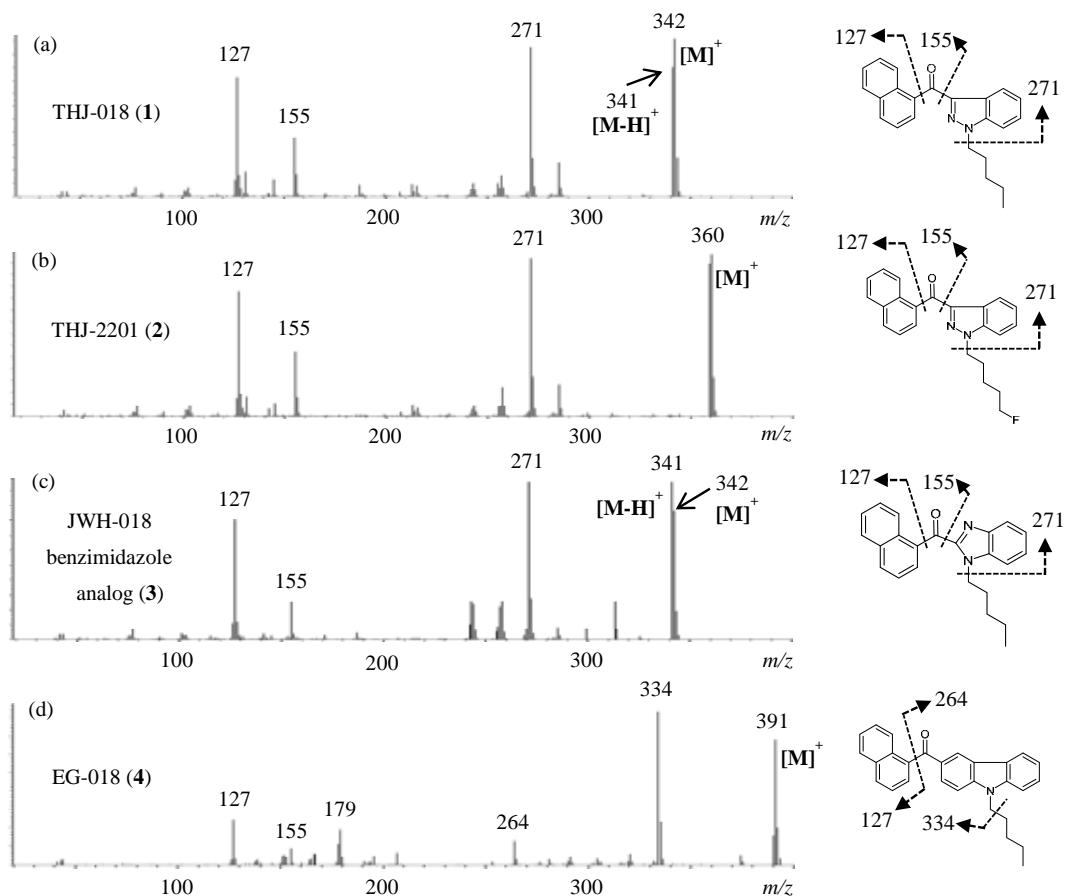


Fig.3 EI-MS spectra of (a) THJ-018(1), (b) THJ-2201(2), (c) JWH-018 benzimidazole analog (3) and (d) EG-018(4)

### 3.2.2 エステル結合・アミド結合をもつもののEIマススペクトル (試料5~26)

試料5~26のEIマススペクトルをFig.4に示す。

#### 3.2.2(1) R<sub>1</sub>に由来するピーク

Table 2で示したR<sub>1</sub>-1~6の構造をもつ試料5, 7~13, 15~22, 24~26について、R<sub>1</sub>に由来するフラグメントイオンがベースピークとして観測された。ベースピーク及び特徴的なフラグメントイオンピークをTable 4に示す。その他に、インドール環をもつ試料でm/z 144、インダゾール環をもつ試料でm/z 145のピークが認められた。

R<sub>1</sub>-7, R<sub>1</sub>-8の構造をもつ試料6, 14, 23については、フルオロベン

ジル基に由来するm/z 109のフラグメントイオンピーク及びカルボニル炭素とR<sub>1</sub>の結合の開裂による複素環側のフラグメントに由来するフラグメントイオンピークが観測された。R<sub>1</sub>-7をもつ試料6, 14については、試料14ではm/z 109のピークがベースピークであるのに対し、試料6では複素環側由来のm/z 252のピークがベースピークであることから、R<sub>2</sub>の構造によってピークの強度比が変化することがわかった。また、R<sub>1</sub>-8をもつ試料23についてもm/z 109のピークがベースピークとして観測された。その他に、試料6, 14についてはm/z 143、試料23についてはm/z 145のピークが認められた。

Table 4 Specific peaks of compounds 5~26

compound	7,11	8,24	5,9,15, 18,21	10,12,16,19, 22,25,26	13	17,20	6,14	23
<b>R<sub>1</sub></b>								
Base peak (m/z)	214	215	232	233	240	241	109 (14) 252 (6)	109
Fragment ion peaks (m/z)	144	145	144	145	144	145	252 (14) 109 (6) 143	253 145

3.2.2(2) R<sub>2</sub>に由来するピーク

R<sub>2</sub>に特徴的なフラグメントイオンをTable 5に示す。ここでは、分子イオンの質量数をMとする。

ナフタレン環を含むR<sub>2</sub>-1及びR<sub>2</sub>-2をもつ試料5~10については、m/z 115のピークが共通して観測された。また、キノリン環を含むR<sub>2</sub>-3をもつ試料11~14についてはm/z 116のピークが観測された。1-ナフトールのEIマススペクトルにおいてm/z 115のピークが観測される<sup>4)</sup>ことから、R<sub>2</sub>-1及びR<sub>2</sub>-2をもつ試料5~10のm/z 115のピークについては、ナフタレン環に由来するものと推測される。

末端にアミド結合をもつR<sub>2</sub>-4~6をもつ試料15~22については、末端アミドの位での開裂で生じたm/z M-44のピークが共通して観測された。また、R<sub>2</sub>-5をもつ試料18~20ではm/z M-73のピー

ク、R<sub>2</sub>-6をもつ試料21,22ではベンジル基に由来するm/z 91のピークも共通して観測された。

アダマンタン環を含むR<sub>2</sub>-7をもつ試料23では、カルボニル基の開裂に由来するm/z 150及びm/z 253(M-150に相当)のピークが観測された。

R<sub>2</sub>-8をもつ試料24,25及びR<sub>2</sub>-9をもつ試料26は共通して末端にメチルエステルをもつが、異なるフラグメントパターンを示した。R<sub>2</sub>-8をもつ試料24,25ではメチルエステルの位での開裂で生じたm/z M-59が観測されるのに対し、R<sub>2</sub>-9をもつ試料26ではm/z M-56及びm/z M-88のピークが観測された。m/z M-56については、Fig.5に示したMcLafferty転位によって生じたフラグメントイオンによるピークと考えられる。

Table 5 Fragment ions specific to R<sub>2</sub>-1~R<sub>2</sub>-9 of compounds 5~26

compound	5,6	7,8,9,10	11,12,13,14	15,16,17	18,19,20	21,22	23	24,25	26
<b>R<sub>2</sub></b>									
Fragment ion peaks (m/z)	115	115	116	M-44	M-44 M-73	M-44 91	M-150 150	M-59	M-56 M-88

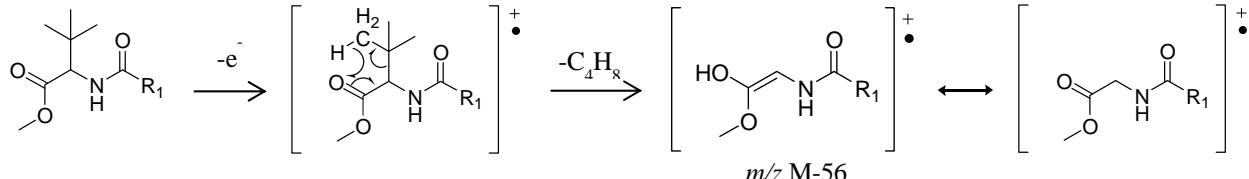


Fig.5 Proposed mechanism to generate the fragment ion m/z M-56

## 3.3 LC-PDA-MS

## 3.3.1 ESIマススペクトル

すべての試料において、プロトン化分子イオン([M+H]<sup>+</sup>)のピークが最も強く観測された。

## 3.3.2 UVスペクトル

複素環とナフタレンのケトンである試料1~4の極大吸収波長をTable 6に、エステル結合・アミド結合をもつ試料5~26の極大吸収波長をTable 7に示す。

試料1~4については、インダゾール環をもつTHJ-018(試料1)

及びTHJ-2201(試料2)、ベンゾイミダゾール環をもつJWH-018 benzimidazole analog(試料3)、カルバゾール環をもつEG-018(試料4)でそれぞれ異なる極大吸収波長を示した。

試料5~26については、R<sub>2</sub>の種類により異なる傾向を示し、インドール環をもつ化合物で291~299 nm、インダゾール環をもつ化合物で302~309 nmに極大吸収波長を示した。また、ナフタレン環を持つ試料で219~220 nm、キノリン環をもつ試料で203 nmに極大吸収波長を示した。

Table 6 max in UV spectra of compounds 1~4

No.	Common name	max (nm)	
1	THJ-018	219	320
2	THJ-2201	219	320
3	JWH-018 benzimidazole analog	219	290
4	EG-018	218	277 340

Table 7 max in UV spectra of compounds 5-26

<b>R<sub>2</sub></b>	Indole compounds				Indazole compounds			
	No.	Common name	max (nm)		No.	Common name	max (nm)	
<b>R<sub>2-1</sub></b>	<b>5</b>	NM2201	219		294			
	<b>6</b>	FDU-PB-22	219		293			
<b>R<sub>2-2</sub></b>	<b>7</b>	NNE1	220		299	<b>8</b>	MN-18	219
	<b>9</b>	5F-NNE1	220		299	<b>10</b>	5F-MN-18	220
<b>R<sub>2-3</sub></b>	<b>11</b>	QUPIC	203	216	228	294	<b>12</b>	5F-NPB-22
	<b>13</b>	QUCHIC	203	216		294		
	<b>14</b>	FUB-PB-22	203	213	227	293		
<b>R<sub>2-4</sub></b>	<b>15</b>	5F-ABICA	218		291	<b>16</b>	5F-AB-PINACA	209
						<b>17</b>	AB-CHMINACA	302
<b>R<sub>2-5</sub></b>	<b>18</b>	5F-ADBICA	218		291	<b>19</b>	5F-ADB-PINACA	209
						<b>20</b>	ADB-CHMINACA	303
<b>R<sub>2-6</sub></b>	<b>21</b>	PX-1	216		291	<b>22</b>	PX-2	208
<b>R<sub>2-7</sub></b>						<b>23</b>	FUB-APINACA	302
<b>R<sub>2-8</sub></b>						<b>24</b>	AMB	209
<b>R<sub>2-9</sub></b>						<b>25</b>	5F-AMB	302
						<b>26</b>	5F-ADB	209
								302

### 3.4 構造推定

IR、LC-PDA-MS及びGC-MSによる測定の結果から、構造未知の試料について構造推定を行う流れをFig.6に示す。

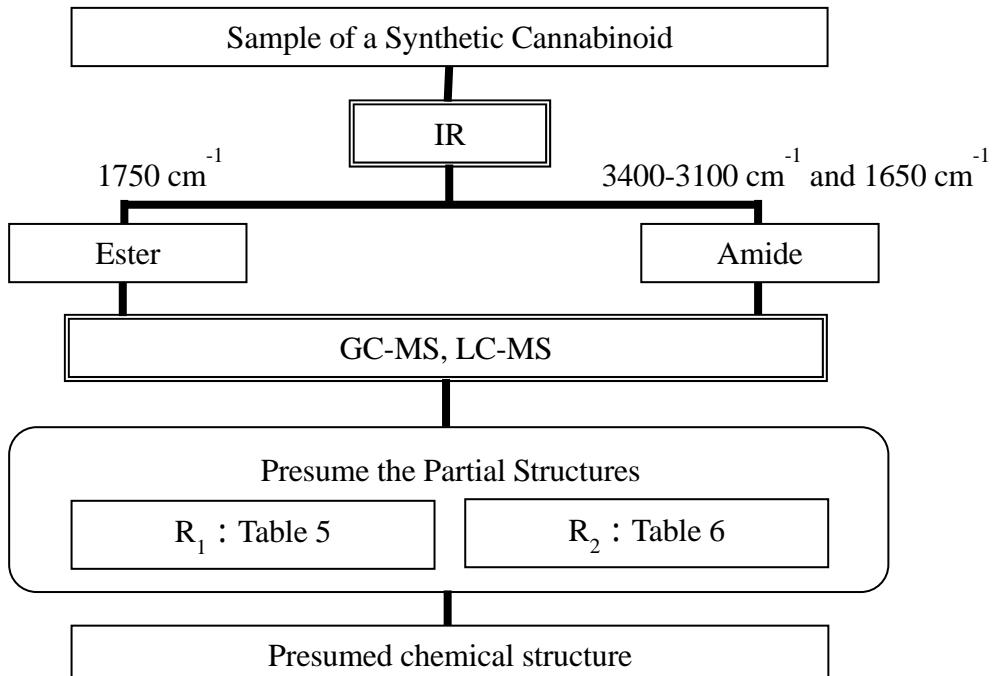


Fig.6 Analytical procedure to presume the chemical structure of a synthetic cannabinoid which has ester or amide bonds

### 3.4.1 IRスペクトルによるケトン、エステル及びアミドの識別

ケトン、エステル結合をもつもの及びアミド結合をもつものは、IRスペクトルによって識別が可能である。ケトンについては $1650\text{ cm}^{-1}$ 付近のC=O伸縮振動、エステルについては $1750\text{ cm}^{-1}$ 付近のC=O伸縮振動、アミドについては $1650\text{ cm}^{-1}$ 付近のC=O伸縮振動及び $3400\sim3100\text{ cm}^{-1}$ 付近のN-H伸縮振動が確認できることから、識別が可能であった。

### 3.4.2 ケトンのカルボニル基に隣接する複素環の推定

UVスペクトルにおいて、複素環の種類によって異なる極大吸収波長を示すことが予想される。また、EIマススペクトルにおいても、複素環の種類によって特徴的なフラグメントパターンを示すことが予想される。しかし、本研究で使用したケトンの構造を有する試料は4種類(試料1~4)と限られるため、構造推定を行うためにはさらなる検討が必要である。

### 3.4.3 エステル及びアミド結合をもつ物質の構造推定

Table 5に記載のベースピークにより、R<sub>1</sub>の構造をある程度推定できると考えられる。また、Table 6に示したフラグメントピークや、分子量からR<sub>1</sub>の質量を差し引いた値から、R<sub>2</sub>についてもある程度の推定が可能と考えられる。しかし、本研究で使用した試料と異なるR<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>をもつ試料の構造推定や、構造異性体の識別を行うためにはNMRによる測定が必要である。

## 4. 要約

本研究では、インドール環、インダゾール環、ベンゾイミダゾール環又はカルバゾール環にカルボニル基が結合した構造を持つ合成カンナビノイド系危険ドラッグ26種類について、GC-MS、IR及びLC-PDA-MSによる測定を行った。

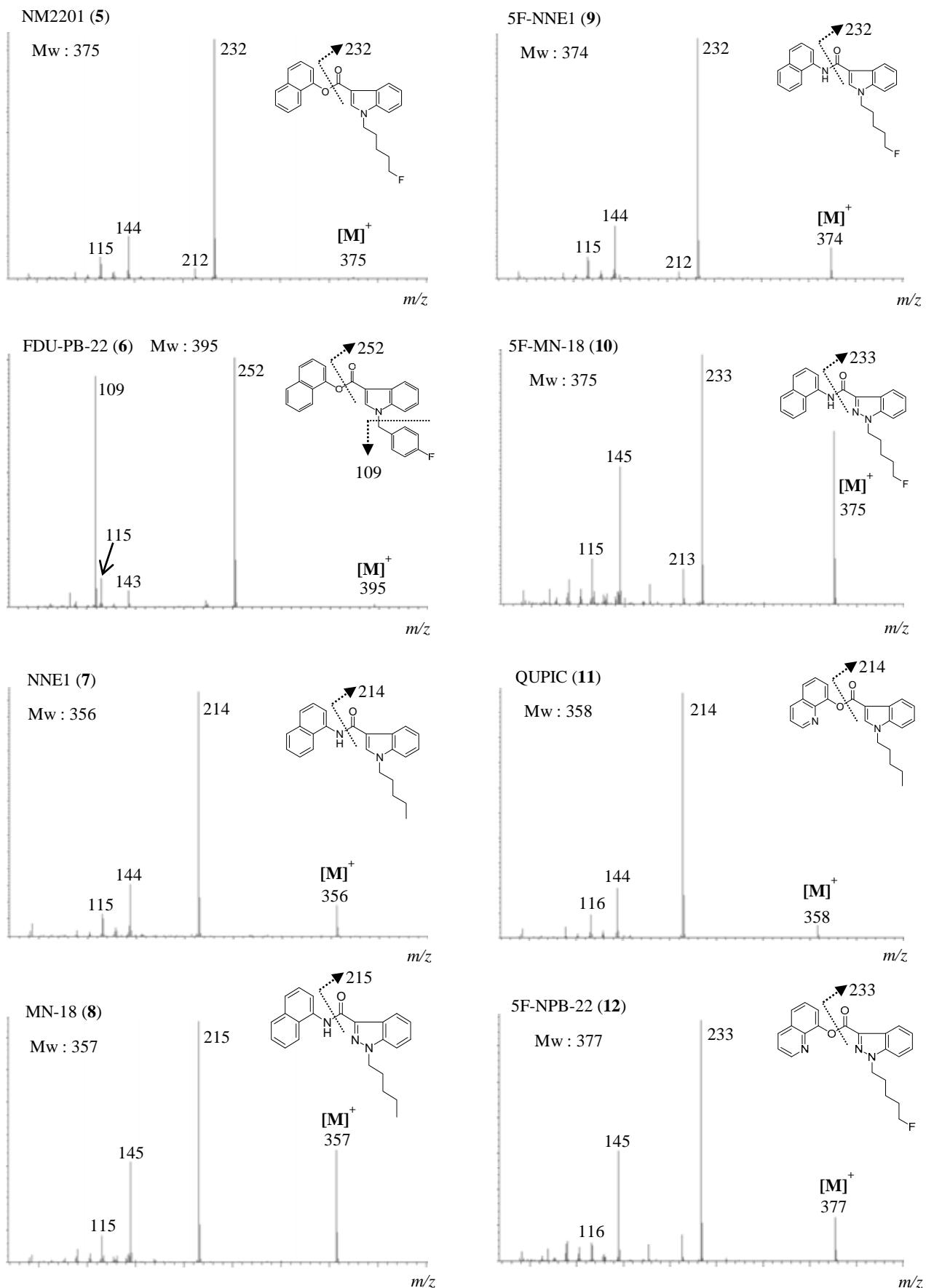
IRスペクトルにより、カルボニル基の種類(ケトン、エステル結合及びアミド結合)を識別可能であった。

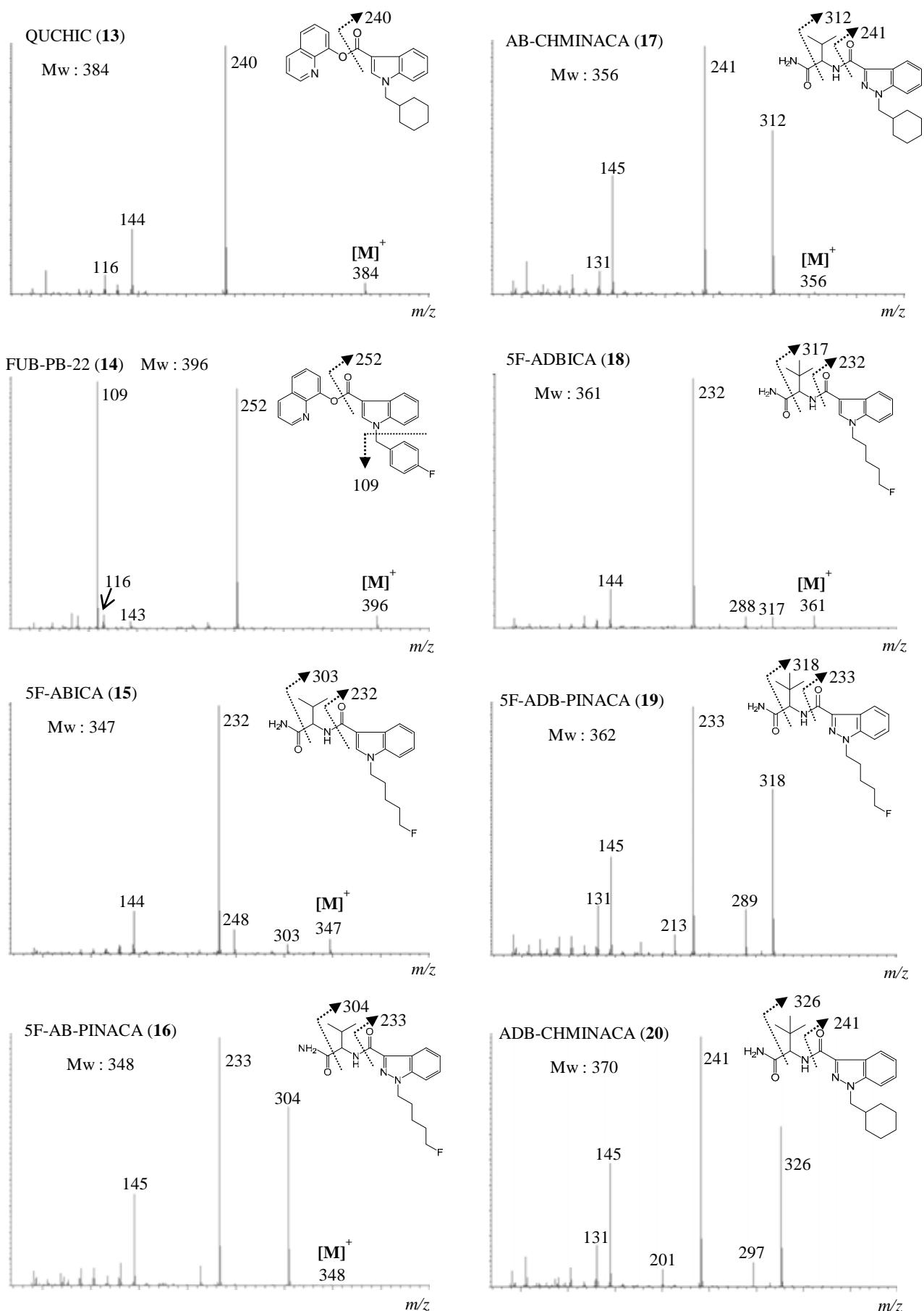
ケトンの構造をもつものは、複素環の種類によって、EIマススペクトルにおいて異なるフラグメントパターンを示すほか、UVスペクトルにおける極大吸収波長にも違いが認められた。

ケトンとエステル結合・アミド結合をもつものは、EIマススペクトルにおいて異なるフラグメントパターンを示した。エステル結合・アミド結合をもつものについては、EIマススペクトルのフラグメントパターン及びESIマススペクトルで観測された分子イオンから、類似した化学構造を持つか否かの推定が可能と考えられる。

## 文 献

- 1) 厚生労働省報道発表,(2014.7.4)
- 2) R. M Silverstein, F. X. Webster：“有機化合物のスペクトルによる同定法 MS, IR, NMR の併用”，第7版, p.97 (2006), (東京化学同人)
- 3) 内木太一、片木聖子、荻野雅人、石川順一、小曾根一欽、山崎光廣：関税中央分析所報, 51, 101 (2011)
- 4) 泉美治他：“機器分析のてびき(データ集)”, 第2版, P.71 (1996), (化学同人)





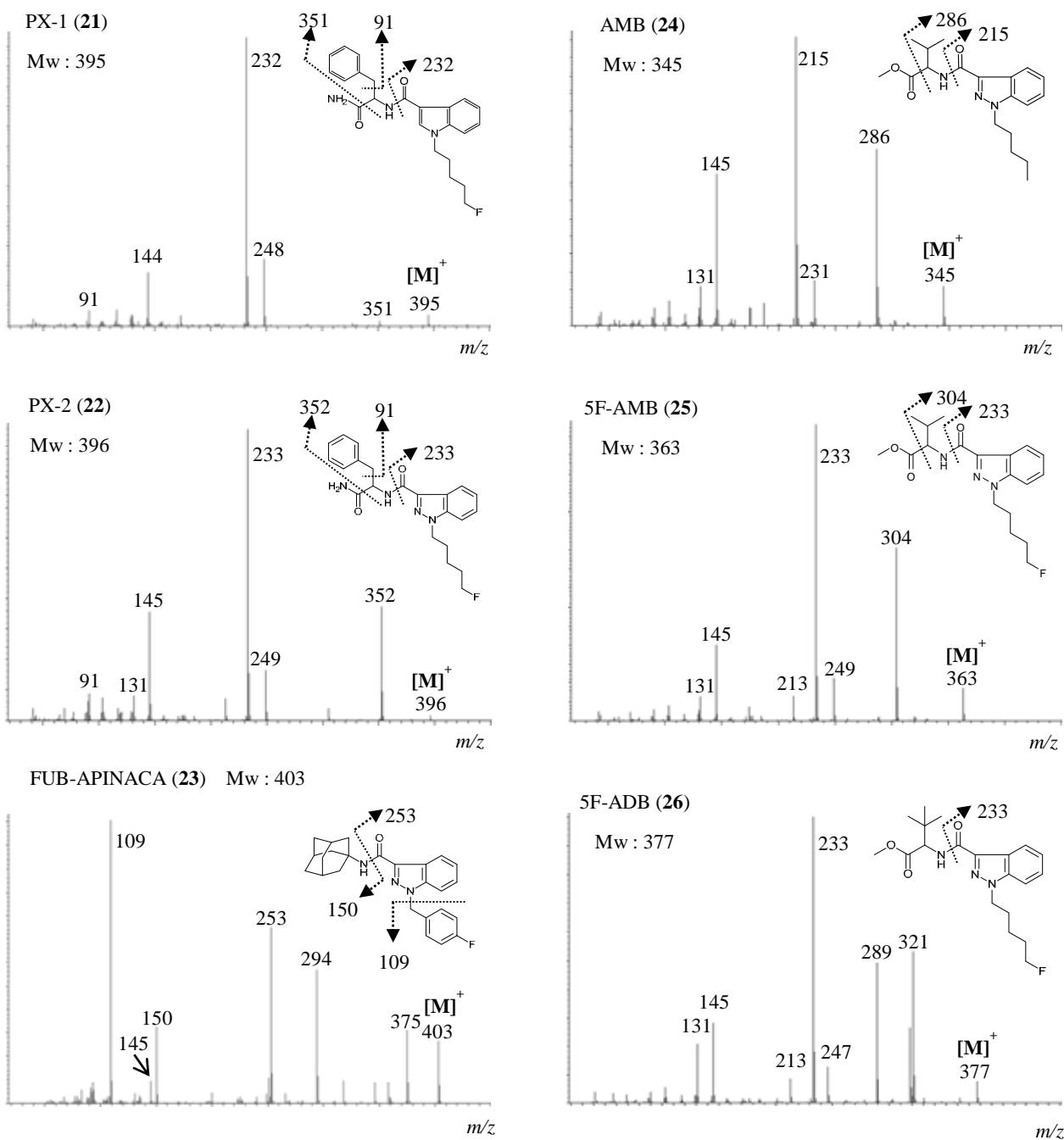


Fig.4 EI-MS spectra of compounds 5-16