

ノート

コンピュータによる麻薬、医薬品類の鑑別

印出 進, 宇野徳克, 石黒昌孝, 難波茂*

Discrimination of Narcotics and Drugs with a Computer

Susumu INDE, Yoshikatsu UNO, Masataka ISHIGURO, and Shigeru NANBA*

*Tokyo Customs Laboratory,

5-5-30, Konan, Minato-ku, Tokyo, 108 Japan

An attempt was made to discriminate narcotics and drugs with a personal computer and soft ware available on the market.

A data base for the Marquis test and infrared spectra in about 1,600 cases of narcotics and drugs was prepared as data for retrieval.

In discriminating cases, unknown samples were subjected to the Marquis test and infrared spectrometry. Data obtained were retrieved with a personal computer. As for the Marquis test, the color test is inputted, and therefore, inputting only one color enables retrieval of all the names of products that have the color concerned.

As for the infrared absorption spectrum, the distance between 1800 cm^{-1} and 500 cm^{-1} including the finger print region is divided at the interval of 50 cm^{-1} and not more than 10 peaks are inputted in the order of intensity therefore, a variety of retrieval and free retrieval can be done by inputting characteristic peaks or inputting peaks in the order of intensity. This, coupled with maximum utilization of the dialogue type characteristic of the personal computer, will produce a high discrimination rating and possibility of a similar product being retrieved even in the case of a product name for which no data are available.

- Received June 2, 1987 -

1 緒 言

麻薬、覚せい剤、医薬品の分析については、初めにウマルキス反応、シモン反応、コバルトチオシアネート

反応などの呈色反応を行い、赤外線吸収スペクトルを測り、どのような麻薬か見当をつけて、薄層クロマトグラフィーやガスクロマトグラフィー等で同定を行っている。しかし、ここ数年、麻薬類の犯則件数は、急

*東京税關輸入部分析室 〒108 東京都港区港南5 5 30

激に増え、昭和61年では、今までの最高である、883件を記録した。また、未知の試料、特に医薬品について同定することは、非常にむずかしい仕事である。このような状況に対処するため、今回、マルキス反応を行い、赤外線吸収スペクトルを測って、それらの分析データをパーソナルコンピュータで解析するシステムを開発したので報告する。

2 実験

2.1 使用機種

コンピュータは NEC N 5200 モデル 05 MK II

2.2 ソフトウェア

LANFILE 3 または 4

2.3 データベースの作製

2.3.1 マルキス反応におけるデータ入力

マルキス反応における呈色の変化を入力する。入力は Table 1 のように略号で入力する。

しかし、赤紫色のように二色の色によって表わさなければならぬ場合、R. V. というように、二色の略号を入力した。

2.3.2 赤外線吸収スペクトルのデータ入力

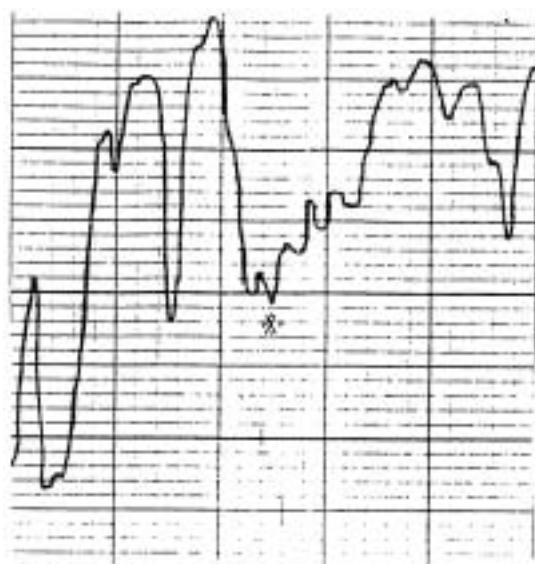


Fig. 1 Infrared spectrum

赤外線吸収スペクトルについて、指紋領域を含む波数 1800cm^{-1} から 500cm^{-1} の間を 50cm^{-1} ごとに区切り、吸収の大きな順に、10本以内の吸収を取り、データとして入力した。また、10本以内の吸収を選ぶ規則は次による。

- (1) 吸収の取り方は、たとえば、 1799cm^{-1} から 1750cm^{-1} の間にある吸収の場合、180と入力する。

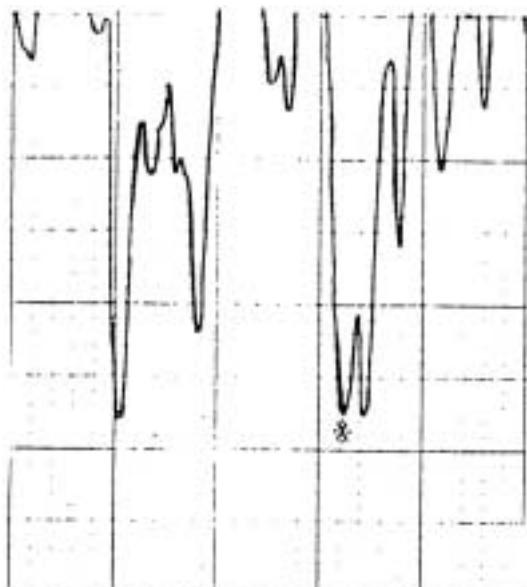


Fig. 2 Infrared spectrum

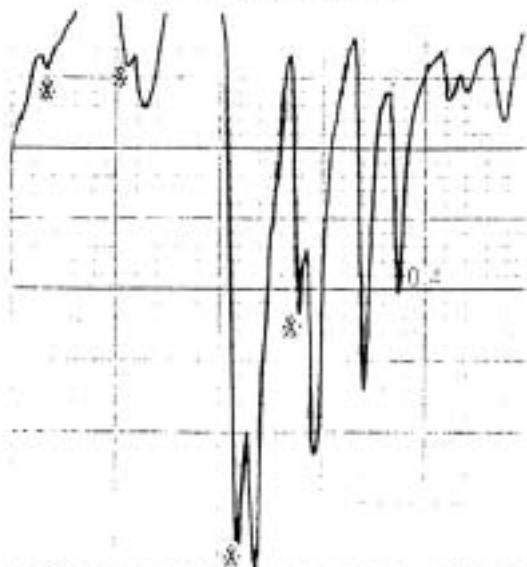


Fig. 3 Infrared spectrum

ノート コンピュータによる麻薬、医薬品類の鑑別

- (2) 一つのピーク先端が小さく、いくつかに分裂している場合は、Fig. 1 の ような、最も吸収の大きな位置をとる。¹⁾
- (3) ピークの先端が小さく、同じ強度のものが 2 本以上ある Fig. 2 のような場合、のように、高波数側の吸収をとる。¹⁾
- (4) 小さな吸収、たとえば、Fig. 3 の ような吸収は、データとして取らない。

2.4 データベース

赤外線吸収スペクトルとマルキス反応のデータを 1600 件程度入力した。データは下記の文献を使用した。

- (1) INFRARED SEARCH SYSTEM ²⁾
- (2) ISOLATION and IDENTIFICATION of DRUGS ³⁾
- (3) 第九改正、日本薬局方解説書 ⁴⁾
- (4) 大蔵省関税中央分析所 参考分析法、No.14 ⁵⁾
- (5) 国連の資料 ⁶⁾
- (6) MERCK INDEX ⁷⁾
- (7) 筆者らの研究資料および分析実績 ⁸⁾

2.5 検索方法

2.5.1 マルキス反応検索

Table 1 Code for the color test for Marquis reagent

| Code | Color |
|------|-----------------|
| B | BLACK |
| BLU | BLUE |
| BR | BROWN |
| GY | GRAY |
| G | GREEN |
| R | RED |
| O | ORANGE |
| P | PINK |
| V | VIOLET & PURPLE |
| Y | YELLOW |

Table 2 Code for Narcotic Control Law, Awakening Drug Control Law and Cannabis Control Law

| Code (RESULT) | Narcoticsdrug |
|---------------|---------------------------------|
| K | Methamphetamine (覚せい剤) |
| LSD | LSD |
| M | Narcotics drug (麻薬) |
| M (S) | Synthetic narcotics drug (合成麻薬) |
| T | Cannabis (大麻) |

Table 3 Place of statement in data

| Code (PAGE) | Place of statement |
|-------------|---|
| J | ANALYSIS OF DRUG (U.S. DEPARTMENT OF JUSTICE) |
| M | MERCK INDEX |
| SN | 関税中央分析所 参考分析法 No.14 |
| IR | 手持ちの赤外吸収スペクトル集 |
| C | 第九改正日本薬局方解説書(C) |
| D | 第九改正日本薬局方解説書(D) |

Table 1 における、色の略号を入力すると、コンピューターから色の略号を持つすべての品名が列出される。たとえば、AMPHETAMINE を例にすると、マルキス反応の呈色は燈赤色 赤色 汚褐色 汚緑色で略号は O. R. BR. G. で O. と G. を入力すると Table 4 が列出される。

Table 4 A method of retrieval in the color test for Marquis reagent. Orange and green are inputted

複合条件式 $\#B = 'O.' \text{ AND } \#B = 'G.' \text{ THEN :}$

| | NAME | MARQUIS |
|---|---|-----------|
| 1 | ACEMETACIN | O.Y.G. |
| 2 | BENACTYZINE | O.G.BLU. |
| 3 | BENACTYZINE HCL | O.G.BLU. |
| 4 | BENZILONIUM BROMIDE | O.G.BLU. |
| | BROMIDE | |
| 5 | CEFRADINE | O.G. |
| 6 | DEXTROAMPHETAMINE SULFATE (AMPHETAMINE) | O.R.BR.G. |
| 7 | DL-AMPHETAMINE HCL | O.R.G.BR. |
| 8 | DL-CHLORO EPHEDRINE HCL | O.Y.G. |
| 9 | PIPENZOLATE BROMIDE | O.G.BLU. |

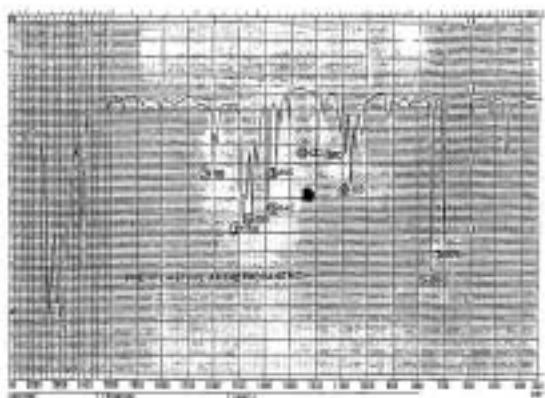


Fig. 4 Infrared spectrum

2.5.2 赤外線吸収スペクトルの検索

Fig. 4 の PHENYL METHYL AMINOPROPAN · HCl(覚せい剤)を例にとって説明する。

(1) 赤外線吸収スペクトルから 6 つ程度のピークを入力する。例 から まで、から までのピークを入力すると、Table 5 が出力される。

Table 5 A method of retrieval whereby about 6 peaks in the infrared absorption spectrum are inputted

複合条件式 $\#C = '080' \text{ AND } \#C = '075' \text{ AND } \#C = '150' \text{ AND } \#C = '140' \text{ AND } \#C = '110' \text{ AND } \#C = '165' \text{ THEN;}$

| | NAME | IR-SPECTRA |
|---|--------------------------------|--|
| 1 | BENZETHONIUM CHLORIDE | 125 155 115 150 140 085 110 080 075 165 |
| 2 | CAPTODIAME | 145 075 150 080 110 105 105 140 165 130 |
| 3 | LEVOMORAMIDE | 165 140 110 075 145 090 070 080 105 150 |
| 4 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCl | 080 075 150 150 140 110 165 140 110 120 |
| 5 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCl | 080 075 150 140 110 140 165 110 120 105 |
| 6 | PHENYL METHYL AMINOPROPANE HCl | 080 075 150 155 140 110 110 165 140 120 |
| 7 | THIAMINE HCl | 170 165 140 155 150 110 080 075 |

(2) 赤外線吸収スペクトルの強い順に入力する。例 強い順に から まで入力すると、Table 6 が出力される。

Table 6 A method of retrieval whereby peaks in the infrared absorption spectrum are inputted in the order of intensity

複合条件式 $\#C = '080 075 150' \text{ THEN;}$

| | NAME | IR-SPECTRA |
|---|--|--|
| 1 | S-BENZYLOXY-N,N-DIBENZYLTRYPTAMINE HCl | 080 075 150 075 125 085 150 075 |
| 2 | AMITRIPTYLINE HCl | 080 150 080 075 150 145 100 145 |
| 3 | BROMODIPHENHYDRAMINE HCl | 105 080 075 150 115 150 140 |
| 4 | CHILOPHEDIANOL | 080 075 150 105 080 120 075 075 100 110 |
| 5 | GLUTETHIMIDE | 170 125 130 140 080 075 150 090 150 065 |
| 6 | METHYL SALICYLATE | 170 080 075 150 135 130 125 165 120 110 |
| 7 | MITOTANE | 080 075 150 105 075 055 150 |
| 8 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCl | 080 075 150 150 140 110 165 140 110 120 |

| | | |
|----|---|--|
| 9 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCl | 080 075 150 140 110 140 165 110 120 105 |
| 10 | PHENYL METHYL AMINOPROPANE HCl (BUNSEKI NO 60-3223) | 080 075 150 140 160 110 140 120 115 135 |
| 11 | PHENYL METHYL AMINOPROPANE HCl | 080 075 150 155 140 110 110 165 140 120 |

(3) 赤外線吸収スペクトルの強度番号を指定する場合。例 一番目の、二番目の、三番目の まで指定すると、Table 7 が出力される。

Table 7 A method of retrieval whereby the number of intensity of peaks in the infrared absorption spectrum is specified

複合条件式 $\#C = '080 075 150 : 1' \text{ THEN;}$

| | NAME | IR-SPECTRA |
|---|---|--|
| 1 | S-BENZYLOXY-N,N-DIBENZYLTRYPTAMINE HCl | 080 075 150 075 125 085 150 075 |
| 2 | CHILOPHEDIANOL | 080 075 150 105 080 120 075 100 110 |
| 3 | MITOTANE | 080 075 150 105 075 055 150 |
| 4 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCl | 080 075 150 150 140 110 165 140 110 120 |
| 5 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCl | 080 075 150 140 110 140 120 115 135 |
| 6 | PHENYL METHYL AMINOPROPANE HCl (BUNSEKI NO 60-3223) | 080 075 150 140 160 110 140 120 115 135 |
| 7 | PHENYL METHYL AMINOPROPANE HCl | 080 075 150 155 140 110 165 140 120 |

また、別の例として、二番目の、四番目の、六番目の を指定すると、Table 8 が出力される。

Table 8 A method of retrieval whereby the number of intensity of peaks in the infrared absorption spectrum in specified 075 150 110

複合条件式 $\#C = '075 : 5' \text{ AND } \#C = '150 : 13' \text{ AND } \#C = '110 : 21' \text{ THEN;}$

| | NAME | IR-SPECTRA |
|---|-------------------------------|--|
| 1 | D-DESOXYEPHEDRINE HCl | 080 075 140 150 150 110 145 110 |
| 2 | METHADON HCl | 175 075 080 150 115 110 115 095 140 145 |
| 3 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCl | 080 075 150 150 140 110 165 140 110 120 |

(4) 赤外線吸収スペクトルの吸収位置が明瞭でない

ノート コンピュータによる麻薬、医薬品類の鑑別

場合、 50cm^{-1} でなく 100cm^{-1} の区間を指定する。例から、からまでのピークを取り、の 700cm^{-1} について、 749cm^{-1} から 650cm^{-1} までの 100cm^{-1} の区間を取ると、Table 9 が outputされる。

(5) 上記の方法を組合せる検索。例から、からのピークと、二番目のを指定すると、Table 10 が outputされる。

Table. 9 A method of retrieval whereby an interval of 100cm^{-1} instead of 50cm^{-1} is taken in case the position of absorbance of peaks in the infrared absorption spectrum is not clear

検索条件式 $\#C='080' \text{ AND } (\#C='075' \text{ OR } \#C='070') \text{ AND } \#C='150' \text{ AND } \#C='140' \text{ AND } \#C='110' \text{ AND } \#C='165' \text{ THEN:}$

| | NAME | IR-SPECTRA |
|---|--------------------------------|--|
| 1 | BENZETHONIUM CHLORIDE | 125 165 115 150 140 085 110 080 075 165 |
| 2 | CAPTOBIAMINE | 145 075 150 080 110 105 105 140 165 130 |
| 3 | ERGOMETRINE MALEATE | 160 165 150 140 110 080 090 120 070 060 |
| 4 | LEVOMORAMIDE | 165 140 110 075 145 090 070 080 105 150 |
| 5 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCL | 080 075 150 150 140 110 165 140 110 120 |
| 6 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCL | 080 075 150 140 110 140 165 130 120 105 |
| 7 | PHENYL METHYL AMINOPROPANE HCL | 080 075 150 155 140 110 110 165 140 120 |
| 8 | THIAMINE HCL | 170 165 140 155 150 110 080 075 |

Table 10 A method of retrieval with the above mentioned retrieval methods combined

検索条件式 $\#C='080' \text{ AND } \#C='075' \text{ AND } \#C='150' \text{ AND } \#C='140' \text{ AND } \#C='110' \text{ AND } \#C='165' \text{ AND } \#C='070' \text{ THEN:}$

| | NAME | IR-SPECTRA |
|---|--------------------------------|--|
| 1 | CAPTOBIAMINE | 145 075 150 080 110 105 105 140 165 130 |
| 2 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCL | 080 075 150 150 140 110 165 140 110 120 |
| 3 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCL | 080 075 150 140 110 140 165 110 120 105 |
| 4 | PHENYL METHYL AMINOPROPANE HCL | 080 075 150 155 140 110 110 165 140 120 |

(6) マルキス反応と赤外線吸収スペクトルの組合せによる検索。例から、からまでのピークとマルキス反応、燈色(O.)を入力すると、Table 11 が outputされる。

Table 11 A method of retrieval with the Marquis test and infrared absorption spectrum combined

複合条件式 $\#C='080' \text{ AND } \#C='075' \text{ AND } \#C='150' \text{ AND } \#C='140' \text{ AND } \#C='110' \text{ AND } \#C='165' \text{ AND } \#B='O.' \text{ THEN:}$

| | NAME | MARQUIS | IR-SPECTRA |
|---|--------------------------------|---------|--|
| 1 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCL | 0. | 080 075 150 150 140 110 165 140 110 120 |
| 2 | PHENYL METHYL AMINOPROPAN HCL | 0. | 080 075 150 140 110 140 165 110 120 105 |
| 3 | PHENYL METHYL AMINOPROPANE HCL | 0. | 080 075 150 155 140 110 110 165 140 120 |

3. 結果及び考察

3.1 マルキス反応からの検索

マルキス反応だけで、検索するのは非常に難しいが、赤外線吸収スペクトルと組合せすることにより、検索の精度は高くなる。また、色によって、Table 12 のようにアヘン系、覚せい剤系の区別が出来る。

Table 12 Discrimination of opiiums, methamphetamine and synthetic narcotics drug by color in the Marquis test (case)

| Color for Marquis reagent | Opiums | Methamphetamine | Synthetic narcotics drug |
|---------------------------|-------------|--------------------|--------------------------|
| VIOLET & PURPLE | 27 | 1 (Phenyl-acetone) | 1 (LSD) |
| RED | 5 | 3 | — |
| ORANGE | 1 (Tebaine) | 13 | 2 (Pethidine, LSD) |
| BLUE | 0 | 0 | 2 |

3.2 赤外線吸収スペクトルからの検索

赤外線吸収スペクトルの検索については、Table 5 の結果のとおり、6 つ程度のピークを入力して、検索されたものから、同定することが可能であるが、検索方法の組合せにより、識別はより高くなる。

3.3 麻薬、覚せい剤等に該当するかどうか

Table 2 の麻薬等における略号を入力し、赤外線吸収スペクトルのデータを入力すると、麻薬に該当するものかどうか検索範囲が狭まる。

3.4 資料の記載場所について

検索された、データは、Table 13 のように、品名、マルキス反応、赤外線吸収スペクトル、麻薬に該当か、およびデータの記載場所が表示される。記載場所の略号は、Table 3 による。

Table 13 File for narcotics and drugs

| NAME | MARQUIS | IR-SPECTRA | RESULT | PAGE |
|----------------------------------|---------|---|--------|-----------|
| 1 BENZETHONIUM CHLORIDE | | 121 138 115 100 149 075 119 086 078 146 | | C328 |
| 2 CAPTOPRIME | V. | 145 075 159 086 110 100 145 146 130 | | M1771R35 |
| 3 LEVOMORAMIDE | | 148 140 110 078 149 090 079 086 105 120 | M [6] | I1131 |
| 4 PHENYL METHYL AMINOPROPANE HCL | 8. | 080 075 159 100 140 110 145 146 110 120 | K | C4881R222 |
| 5 PHENYL METHYL AMINOPROPANE HCL | 9. | 080 075 159 140 110 140 100 110 120 100 | K | C4881R203 |
| 6 PHENYL METHYL AMINOPROPANE HCL | 8. | 080 075 140 100 140 110 110 140 140 120 | K | C488 |
| † THIAMINE HCL | | 170 165 140 115 150 110 080 075 | | C488 |

以上により、今回、開発したシステムは、検索が自由に出来、識別が高く、薬物を特定することができた。また、市販のソフトウェアを使用したので、難しいプログラムを組まなくてすんだ。今後は、コンピュータの知識がなくても、Aldrich Library of Infrared Spectra⁹⁾などの赤外線吸収スペクトル集を入力し、検索することが、簡単に出来ると考えられる。

4 要 約

パーソナルコンピュータと市販のソフトウェアを用いて、麻薬や医薬品類の鑑別を試みた。検索資料として約 1600 件の麻薬、医薬品等におけるマルキス反応、

赤外線吸収スペクトルのデータベースを作製した。

鑑別する時は、未知なる資料に対して、マルキス反応を行い、赤外線吸収スペクトルを測り、データをパーソナルコンピュータにより検索を行った。

マルキス反応の検索方法については、呈色の変化を入力してあるので、一色だけ入力するだけで、その色を持つ品名すべてを検索することができた。また、赤外線吸収スペクトルについては、指紋領域を含む 1800cm⁻¹ から 500cm⁻¹ の間を 50cm⁻¹ ごとに区切り、ピークを強度順に 10 以内入力してあるので、検索する場合、特徴的なピークを入力したり、ピークを強度順に入力することなどにより、検索方法が多数考えられ、自由な検索ができた。これらにより、麻薬、医薬品類に対して、高い確率で識別が可能であった。

Table 14 A method of retrieval for methamphetamine

| A method of retrieval | Rate of retrieval |
|--|-------------------|
| The 6 peaks in the infrared absorption spectrum are inputted | 5 |
| The 3 peaks in the infrared absorption spectrum are inputted in the order of intensity | 8 |
| The number of intensity of 3 peaks in the infrared absorption spectrum is specified | 4 |
| The number of intensity of 3 peaks in the infrared absorption spectrum is specified ② 075 ④ 150 ③ 110 | 3 |
| An interval of 100 cm ⁻¹ instead of 50 cm ⁻¹ is taken in case the position of absorbance of peaks in the infrared absorption spectrum is not clear | 6 |
| The above-mentioned retrieval methods combined | 2 |
| The Marquis test and infrared absorption spectrum combined | 1 |

文 献

1) 田中善正著；化学マイコン入門 (1984) P.160

2) Compiled and Edited by James A. Heagy Gary J. Sorgen

Drug Enforcement Administration / U. S Department of Justice

ANALYSIS OF DRUGS SUPPLEMENTAL TRANSMITTAL Appendix 1 INFRARED SEARCH SYSTEM

3) E. G. C CLAKE : Isolation and Identification of Drugs

The Pharmaceutical Prese, England

4) 第九改正 日本薬局方解説書 1976

5) 大蔵省関税中央分析所 参考分析法 No 14

ノート コンピュータによる麻薬、医薬品類の鑑別

- 6) Bulletin on Narcotics , Vol. V
- 7) The MERCK INDEX NINTH EDITION
- 8) 印出進、松岡千恵子、和田一夫：本誌、26、119（1986）
- 9) The Aldrich Library of Infrared Spectra EDITION Charles J. Poucher