

## 規制薬物等の位置異性体識別方法の検討

西村 康彦\*, 田中 聡司\*, 池田 英貴\*, 山崎 幸彦\*

### Study of methods for identifying regioisomers of controlled drugs

Yasuhiko NISHIMURA\*, Satoshi TANAKA\*, Hideki IKEDA\* and Yukihiro YAMAZAKI\*

\*Yokohama Customs Laboratory

2-1-10, Shin-urashima-cho, Kanagawa-ku, Yokohama, Kanagawa 221-0031 Japan

Controlled drugs have many regioisomers. Since some regioisomers are controlled under various regulations but others are not, it is necessary to accurately identify these regioisomers. In general, infrared spectroscopy (IR) and nuclear magnetic resonance spectroscopy (NMR) are commonly used for the identification of regioisomers, but often these methods are not appropriate for mixtures. Accordingly, in this study, for five types of controlled drugs which have regioisomers (Methoxyphenylpiperazine (MPP), 2-Aminopropyl-2,3-dihydrobenzofuran (APDB), Methylmethcathinone (MMC), Fluoroamphetamine (FMP) and 2-Aminopropylbenzofuran (APB)), we studied whether it is possible to identify these regioisomers by using gas chromatography/mass spectrometry (GC/MS), liquid chromatography/photodiode array/mass spectrometry (LC/PDA/MS) and liquid chromatography/tandem mass spectrometry (LC/MS/MS). As a result, for MPP, APDB and MMC, it was found to be possible to identify regioisomers by a comparison of combined analysis data obtained by GC/MS, LC/PDA/MS and LC/MS/MS. On the other hand, for FMP and APB, it was not possible to identify their regioisomers even using GC/MS, LC/PDA/MS and LC/MS/MS, and thus for these latter cases, it is considered necessary to use standard reference materials for their identification.

## 1. 緒 言

昨今、規制薬物（覚醒剤、大麻、麻薬、向精神薬、あへん及びけしがらをいう。）及び指定薬物（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2条第15項に規定する指定薬物をいう。以下同じ。）（以下、「規制薬物等」と略記する。）を含む危険ドラッグの乱用者による犯罪・重大な交通死亡事故が後を絶たず、深刻な社会問題となっている<sup>1,2)</sup>。このことを背景に、平成27年4月に指定薬物が関税法上の「輸入してはならない貨物」に追加され、税関分析部門においては、多種多様な薬物に対し正確かつ迅速な分析が必要とされている。

規制薬物等には、その化学構造上の置換基の位置だけが異なる位置異性体が多く存在する。これら位置異性体の中には、各種法令により規制を受けないもの及び規制法令が異なるものが存在するため、位置異性体の正確な識別が重要である。

規制薬物等の分析には、ガスクロマトグラフィー/質量分析法（以下、「GC/MS」と略記する。）、高速液体クロマトグラフィー（以下、「HPLC」と略記する。）、液体クロマトグラフィー/質量分析法、赤外分光法、核磁気共鳴分光法等が一般的に使用されているが、このうち赤外分光法及び核磁気共鳴分光法では多成分を同

時に同定することが困難であり、分析試料が混合物の場合に分析法として適さないことが多い。GC/MSは混合物の分析に有効であるが、位置異性体が存在する場合、位置異性体間で得られるMSスペクトルに特異な差が見られない場合は識別が困難となる<sup>3-6)</sup>。GC/MSまたはHPLCでは、保持時間の相違により位置異性体を識別する方法が検討されているが<sup>3-7)</sup>、この場合、構造等が既知の物質（以下、「標準品」と略記する。）と保持時間を比較する必要がある。しかし、規制薬物等の増加に伴い標準品の入手が困難となっており、位置異性体の存在が危惧される混合物の分析において、標準品が入手困難な場合であっても識別が可能な方法が求められている。

本研究では、GC/MS、液体クロマトグラフィー/フォトダイオードアレイ/質量分析法（以下、「LC/PDA/MS」と略記する。）及び液体クロマトグラフィー/タンデム質量分析法（以下、「LC/MS/MS」と略記する。）を用いて、位置異性体が存在する薬物（5種類：メトキシフェニルピペラジン（通称：MPP）、2-アミノプロピル-2,3-ジヒドロベンゾフラン（通称：APDB）、メチルメトカチノン（通称：MMC）、フルオロアンフェタミン（通称：FMP）及び2-アミノプロピルベンゾフラン（通称：APB））について分析を行い、位置異性体の識別が可能か否かを検討した。

\* 横浜税関業務部 〒221-0031 神奈川県横浜市神奈川区新浦島町 2-1-10

## 2. 実 験

### 2.1 試料及び試薬

#### 2.1.1 試料

- 1-(2-メトキシフェニル)ピペラジン (2-MPP)  
 1-(3-メトキシフェニル)ピペラジン (3-MPP)  
 1-(4-メトキシフェニル)ピペラジン二塩酸塩 (4-MPP) \*\*  
 4-(2-アミノプロピル)-2,3-ジヒドロベンゾフラン塩酸塩 (4-APDB)  
 5-(2-アミノプロピル)-2,3-ジヒドロベンゾフラン塩酸塩 (5-APDB) \*\*  
 6-(2-アミノプロピル)-2,3-ジヒドロベンゾフラン塩酸塩 (6-APDB)  
 2-メチルメトカチノン塩酸塩 (2-MMC) \*\*  
 3-メチルメトカチノン塩酸塩 (3-MMC) \*\*  
 4-メチルメトカチノン塩酸塩 (4-MMC) \*  
 2-フルオロアンフェタミン塩酸塩 (2-FMP) \*\*  
 3-フルオロアンフェタミン塩酸塩 (3-FMP) \*\*  
 4-フルオロアンフェタミン塩酸塩 (4-FMP) \*\*  
 4-(2-アミノプロピル)ベンゾフラン塩酸塩 (4-APB)  
 5-(2-アミノプロピル)ベンゾフラン塩酸塩 (5-APB)  
 6-(2-アミノプロピル)ベンゾフラン塩酸塩 (6-APB) \*\*  
 7-(2-アミノプロピル)ベンゾフラン塩酸塩 (7-APB)  
 (\*: 麻薬 \*\*: 指定薬物 無印: 規制対象外 (平成 27 年 3 月 31 日現在))

化学名後の ( ) 内は通称名であり、以下、各試料の名称については、通称名により略記する。また、各試料の構造式を Fig.1 に示す。

なお、2-MPP、3-MPP 及び 4-MPP については、東京化成工業製のもの、4-APDB、5-APDB、6-APDB、2-MMC、3-MMC、4-APB、5-APB、6-APB 及び 7-APB については、Cayman Chemical 製のものの、4-MMC、2-FMP、3-FMP 及び 4-FMP については、財務省関税中央分析所より譲り受けたものをそれぞれ使用した。

#### 2.1.2 試薬

- 0.25 mol/L 水酸化ナトリウム溶液：1 mol/L 水酸化ナトリウム溶液 (和光純薬工業) を 4 倍希釈したもの  
 クロロホルム (特級、関東化学)  
 アセトニトリル (LC/MS 用、和光純薬工業)  
 メタノール (LC/MS 用、和光純薬工業)  
 トリフルオロ酢酸無水物 (東京化成工業)

### 2.2 装置及び測定条件

#### 2.2.1 GC/MS

- 装置 : 7890A/5975C (Agilent Technologies)  
 カラム : DB-5MS (30 m x 0.25 mm i.d., 膜厚 0.25 µm)  
 (Agilent Technologies)  
 キャリアーガス : ヘリウム (流量 : 1.0 mL/min)  
 注入口温度 : 320°C

- カラム温度 : 100°C (3 min) → (15°C/min) → 320°C (10 min)  
 インターフェース温度 : 280°C  
 検出器 : 四重極型質量分析装置  
 イオン化法 : 電子衝撃イオン化法 (EI 法)

#### 2.2.2 LC/PDA/MS 及び LC/MS/MS

- 装置 : 6530 Accurate-Mass Q-TOF LC-MS  
 (Agilent Technologies)  
 カラム : Eclipse Plus C18 (2.1 mm i.d. x 100 mm,  
 粒子径 1.8 µm) (Agilent Technologies)  
 移動相 : A ギ酸 : アセトニトリル : 水 = 0.1 : 5 : 95  
 B ギ酸 : アセトニトリル : メタノール = 0.1 : 60 : 40  
 A : B 95 : 5 (0 min) → 30 : 70 (15 min) → 10 : 90 (15 min)  
 カラム温度 : 40°C  
 流速 : 0.2 mL/min  
 イオン化法 : エレクトロスプレーイオン化法 (ESI 法)  
 イオン化条件 : ポジティブモード  
 乾燥ガス温度 : 280°C  
 キャピラリー電圧 : 3500 V  
 フラグメンター電圧 : 150 V  
 検出器 : フォトダイオードアレイ検出器 (210–450 nm)  
 及び飛行時間型質量分析計  
 LC/MS/MS については、以上の条件に加え、以下に示す条件により分析を行った。  
 検出器 : 四重極飛行時間型タンデム質量分析計  
 コリジョンガス : 窒素  
 コリジョン電圧 : 10 V, 20 V, 30 V, 40 V, 50 V, 60 V, 70 V, 80 V

### 2.3 実験

#### 2.3.1 GC/MS

##### 2.3.1 (1) 遊離塩基

2-MPP 及び 3-MPP については、試料をクロロホルムに溶解したものについて上記 2.2.1 の測定条件により分析を行った。

2-MPP 及び 3-MPP 以外の塩酸塩となっている試料については、試料に 0.25 mol/L 水酸化ナトリウム溶液を加えた後、等量のクロロホルムを加えて振とう抽出を行い、その有機層について上記 2.2.1 の測定条件により分析を行った。

##### 2.3.1 (2) トリフルオロ酢酸誘導体化 (以下、「TFA 誘導体化」と略記する。)

試料を誘導体化することにより位置異性体間で MS スペクトルが異なる例が報告されており<sup>8)</sup>、誘導体化は位置異性体の識別についても有用な方法であるといえることから、TFA 誘導体化したものについても分析を検討した。

試料にトリフルオロ酢酸無水物を加え、ホットプレート上で蒸発乾固させた後、クロロホルムに溶解したものについて上記 2.2.1 の測定条件により分析を行った。

#### 2.3.2 LC/PDA/MS 及び LC/MS/MS

試料をメタノールに溶解したものについて上記 2.2.2 の測定条件により分析を行った。

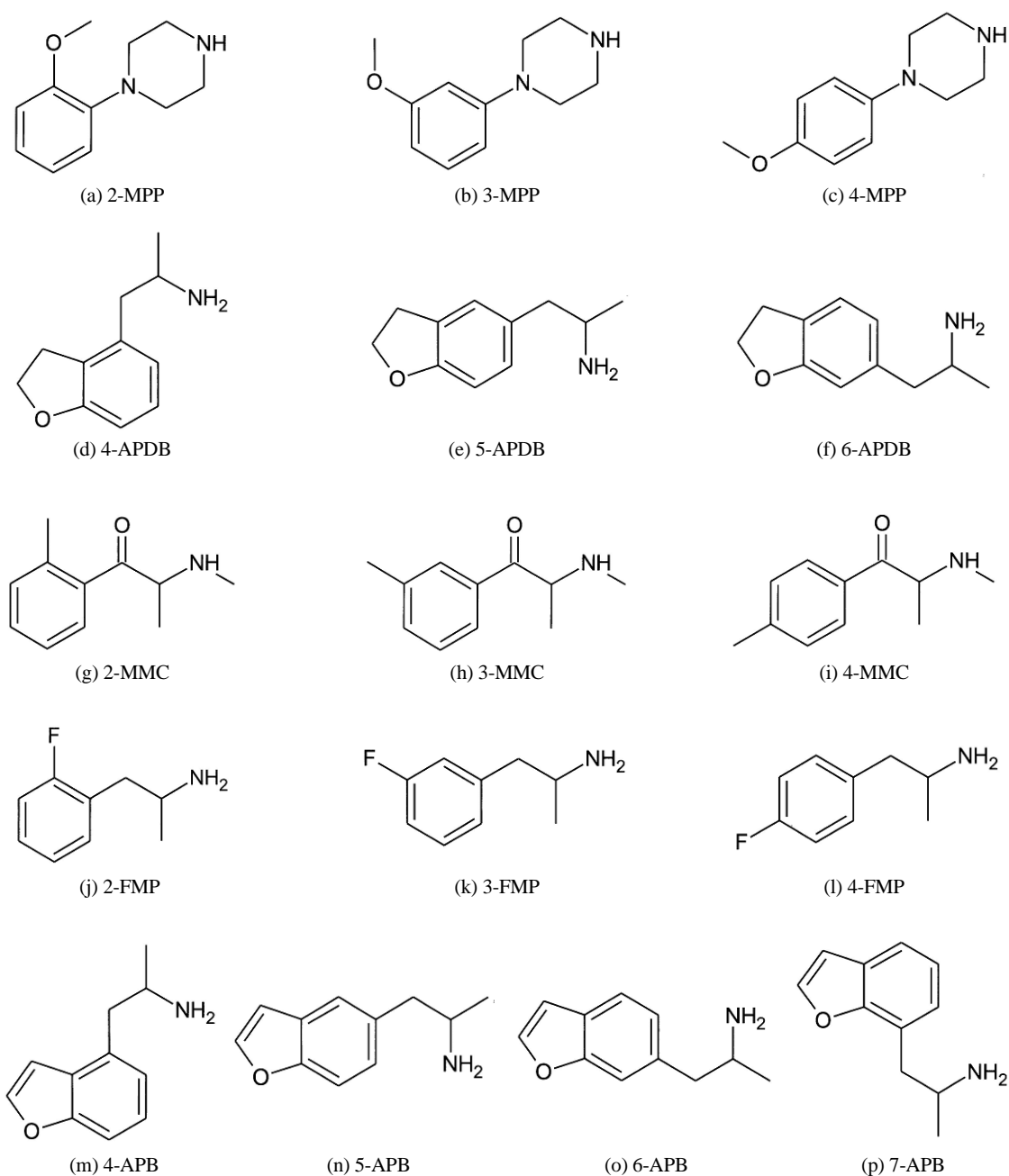


Fig.1 Chemical structure of samples

(a) 2-MPP, (b) 3-MPP, (c) 4-MPP, (d) 4-APDB, (e) 5-APDB, (f) 6-APDB, (g) 2-MMC, (h) 3-MMC, (i) 4-MMC, (j) 2-FMP, (k) 3-FMP, (l) 4-FMP, (m) 4-APB, (n) 5-APB, (o) 6-APB, (p) 7-APB

### 3. 結果及び考察

#### 3.1 GC/MS による識別

##### 3.1.1 MS スペクトル

各試料の遊離塩基及び TFA 誘導体化物の MS スペクトルを Fig.2-6 に示す。

MPP の遊離塩基については、 $m/z$  120 のフラグメントイオンが

検出されなかった 3-MPP のみ識別が可能であった (Fig.2(a), (b), (c))。

MPP の TFA 誘導体化物については、全ての異性体間で  $m/z$  120、134、135 及び 273 のフラグメントイオンの強度比に差異が確認されたため、全ての位置異性体の識別が可能であった (Fig.2(d), (e), (f))。

APDB の遊離塩基については、 $m/z$  133 及び 134 のフラグメント

イオンの強度比に差異が確認された 4-APDB のみ識別が可能であった (4-APDB のみ  $m/z$  133 及び 134 のフラグメントイオンの相対強度が  $m/z$  133 > 134) (Fig.3(a), (b), (c))。

APDB の TFA 誘導体化物については、 $m/z$  133、140 及び 160 のフラグメントイオンの強度比に差異が確認されたため、今回検討した全ての位置異性体の識別が可能であった (Fig.3(d), (e), (f))。

MMC、FMP 及び APB については、遊離塩基、TFA 誘導体化物とも、異性体間で特異な差が確認されず、識別は困難であった (Fig.4, 5, 6)。

### 3.1.2 保持時間

各試料の遊離塩基及び TFA 誘導体化物の保持時間を Table 1 に示す。

今回検討した全ての試料については、保持時間が同一となる位置異性体は確認されなかったことから、全ての位置異性体の識別が可能であった。

Table 1 Retention time of samples by GC/MS

sample	retention time (min)	
	free base	TFA delivative
2-MPP	9.94	11.31
3-MPP	11.07	12.21
4-MPP	10.91	12.10
4-APDB	9.07	10.05
5-APDB	9.25	10.24
6-APDB	9.29	10.30
2-MMC	7.71	8.91
3-MMC	8.14	8.95
4-MMC	8.34	9.21
2-FMP	4.87	6.56
3-FMP	4.97	6.76
4-FMP	5.00	6.80
4-APB	8.46	9.64
5-APB	8.67	9.85
6-APB	8.70	9.89
7-APB	8.37	9.50

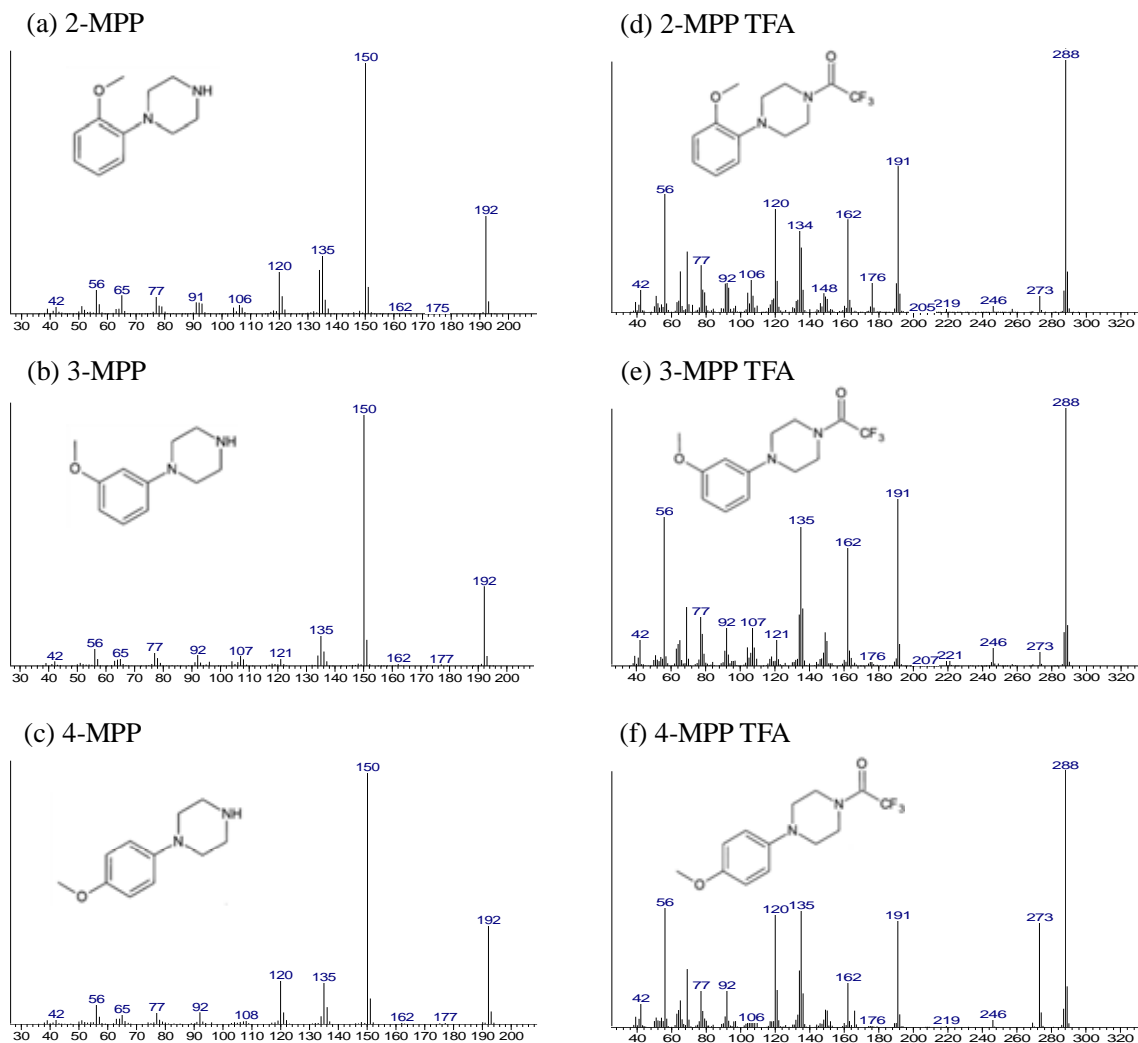


Fig.2 MS spectra of free bases and TFA derivatives of MPP by GC/MS

(a) 2-MPP, (b) 3-MPP, (c) 4-MPP, (d) 2-MPP TFA, (e) 3-MPP TFA, (f) 4-MPP TFA

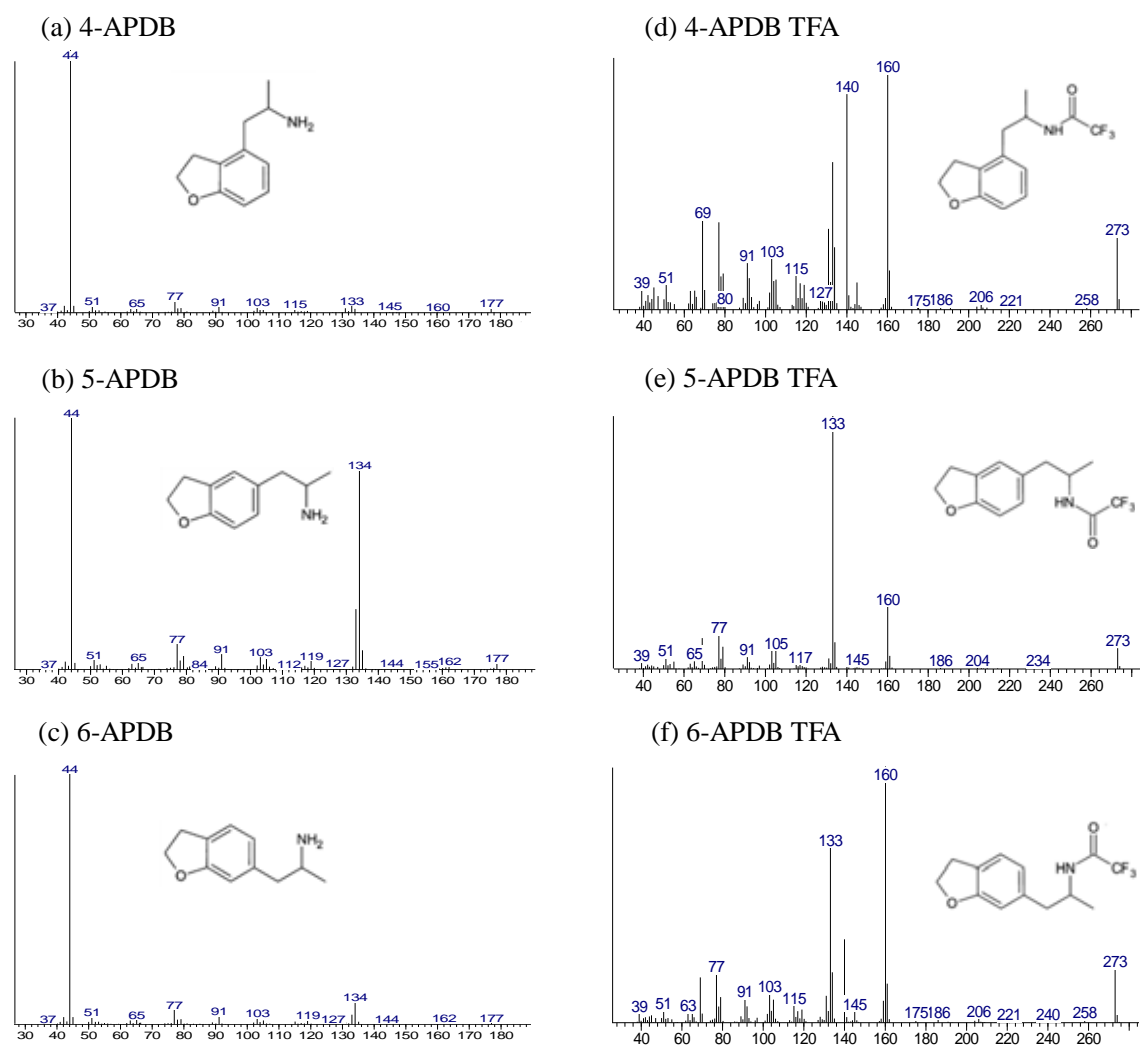


Fig.3 MS spectra of free bases and TFA derivatives of APDB by GC/MS  
 (a) 4-APDB , (b) 5-APDB , (c) 6-APDB , (d) 4-APDB TFA , (e) 5-APDB TFA , (f) 6-APDB TFA

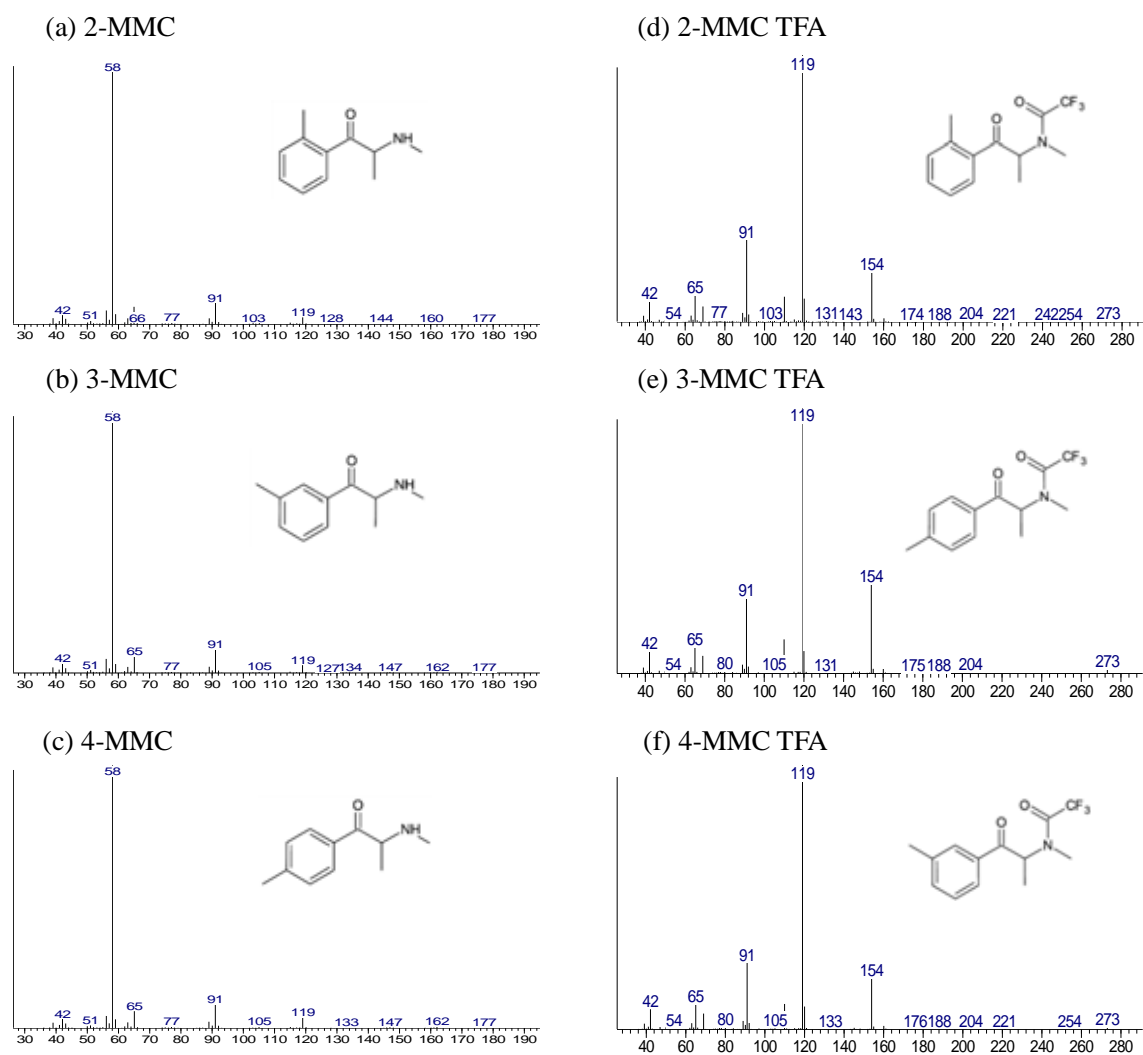


Fig.4 MS spectra of free bases and TFA derivatives of MMC by GC/MS  
(a) 2-MMC , (b) 3-MMC , (c) 4-MMC , (d) 2-MMC TFA , (e) 3-MMC TFA , (f) 4-MMC TFA

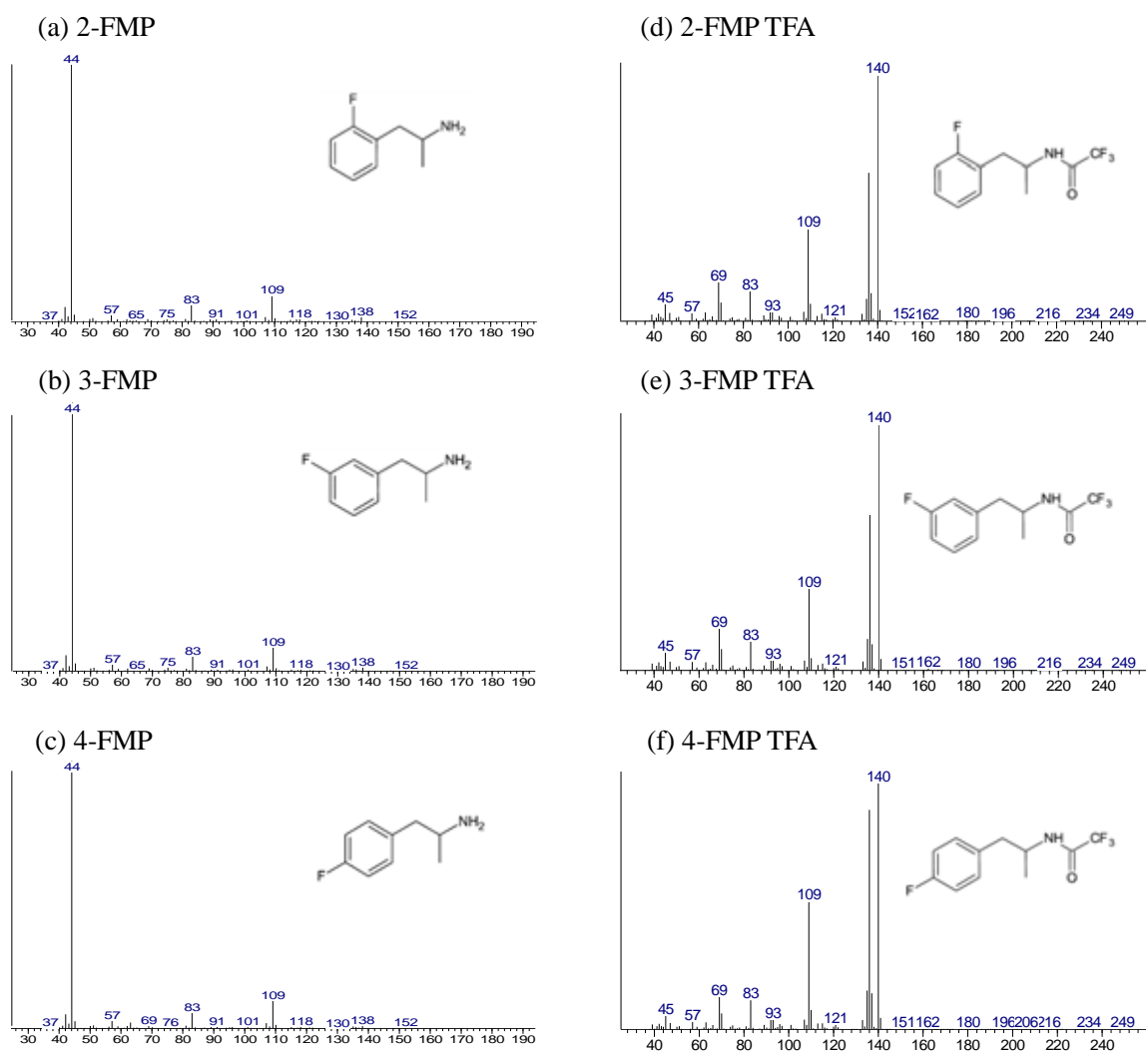


Fig.5 MS spectra of free bases and TFA derivatives of FMP by GC/MS  
(a) 2-FMP , (b) 3- FMP , (c) 4- FMP , (d) 2- FMP TFA , (e) 3- FMP TFA , (f) 4- FMP TFA

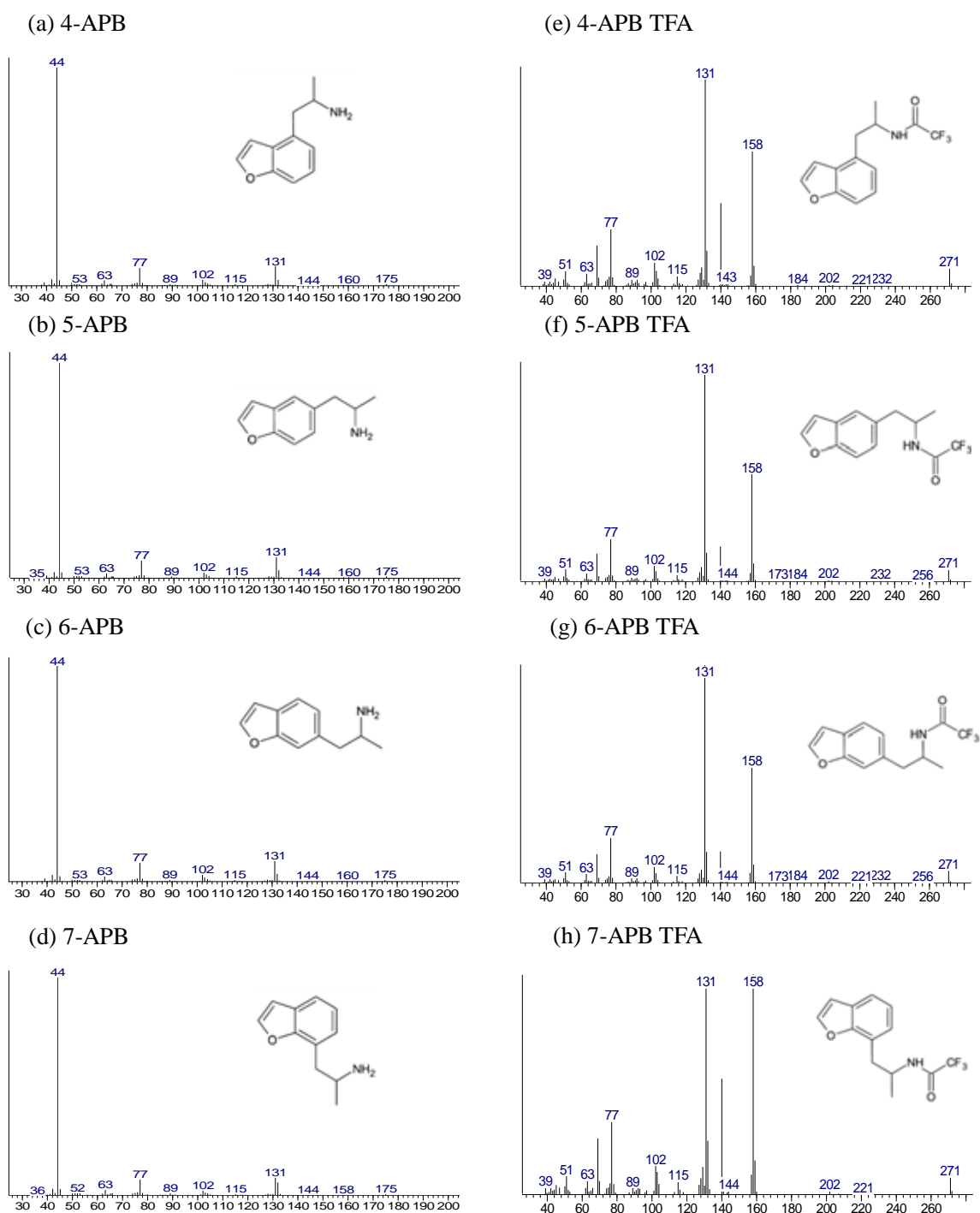


Fig.6 MS spectra of free bases and TFA derivatives of APB by GC/MS

(a) 4-APB , (b) 5-APB , (c) 6-APB , (d) 7-APB , (e) 4-APB TFA , (f) 5-APB TFA , (g) 6-APB TFA , (h) 7-APB TFA



### 3.2 LC/PDA/MS による識別

#### 3.2.1 UV スペクトル

各試料の UV スペクトルを Fig.7-11 に示す。

MPP 及び MMC については、極大吸収波長に差異が確認されたため、全ての位置異性体の識別が可能であった (Fig.7, 9)。

APDB については、極大吸収波長に差異が確認された 5-APDB のみ識別が可能であった (Fig.8)。

APB 及び FMP については、極大吸収波長に明確な差異が確認されなかったため、識別は困難であった (Fig.10, 11)。

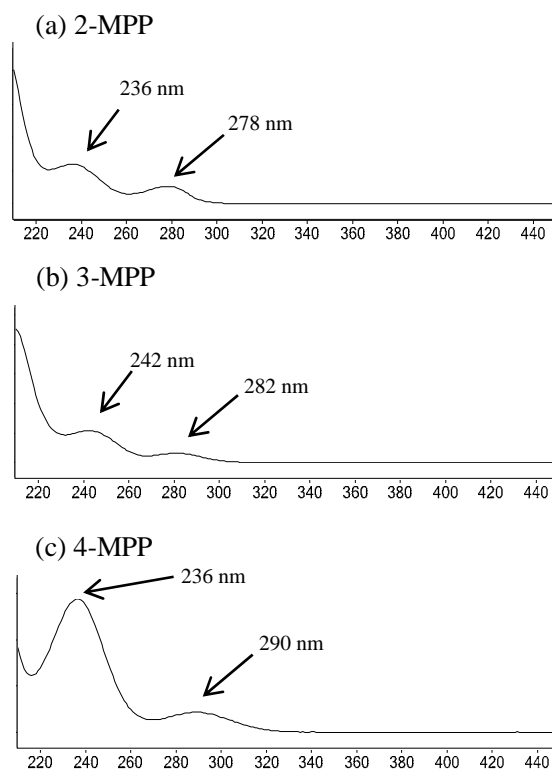


Fig.7 UV spectra of MPP by LC/PDA/MS  
(a) 2-MPP, (b) 3-MPP, (c) 4-MPP

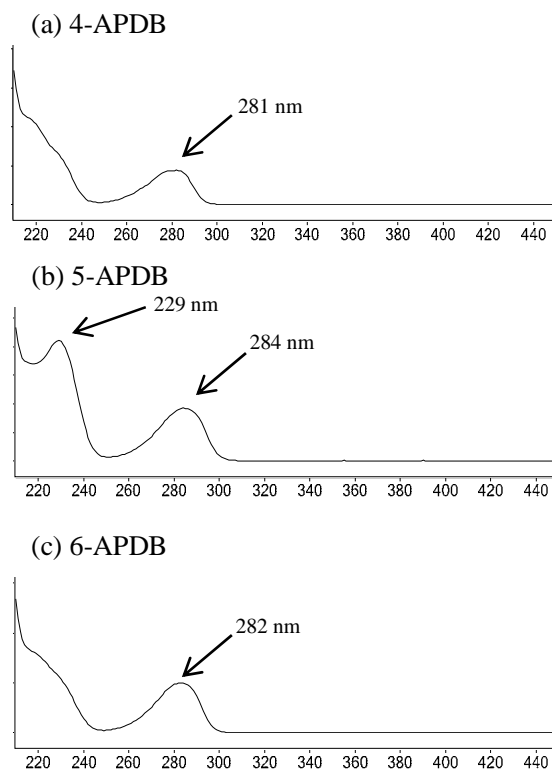


Fig.8 UV spectra of APDB by LC/PDA/MS  
(a) 4-APDB, (b) 5-APDB, (c) 6-APDB

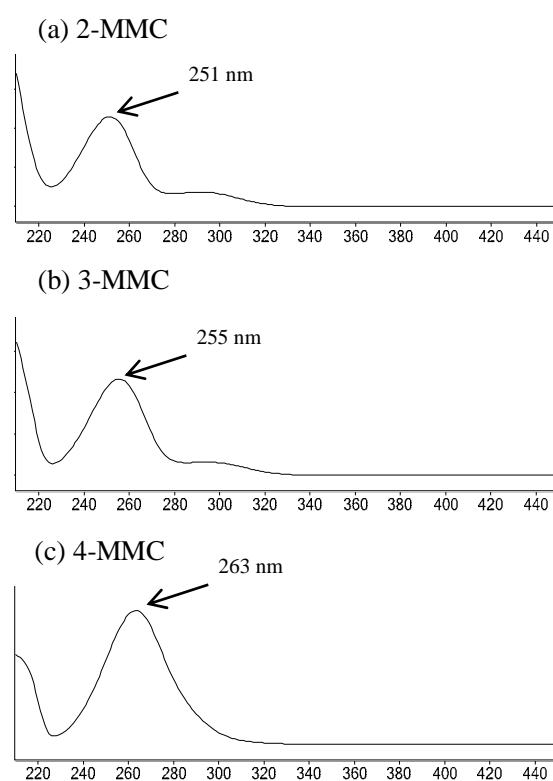


Fig.9 UV spectra of MMC by LC/PDA/MS  
(a) 2-MMC , (b) 3-MMC , (c) 4-MMC

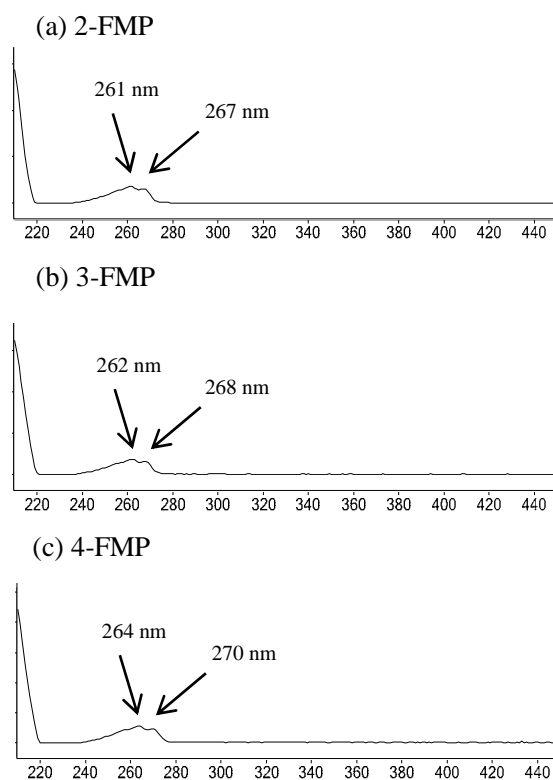


Fig.10 UV spectra of FMP by LC/PDA/MS  
(a) 2-FMP , (b) 3-FMP , (c) 4-FMP

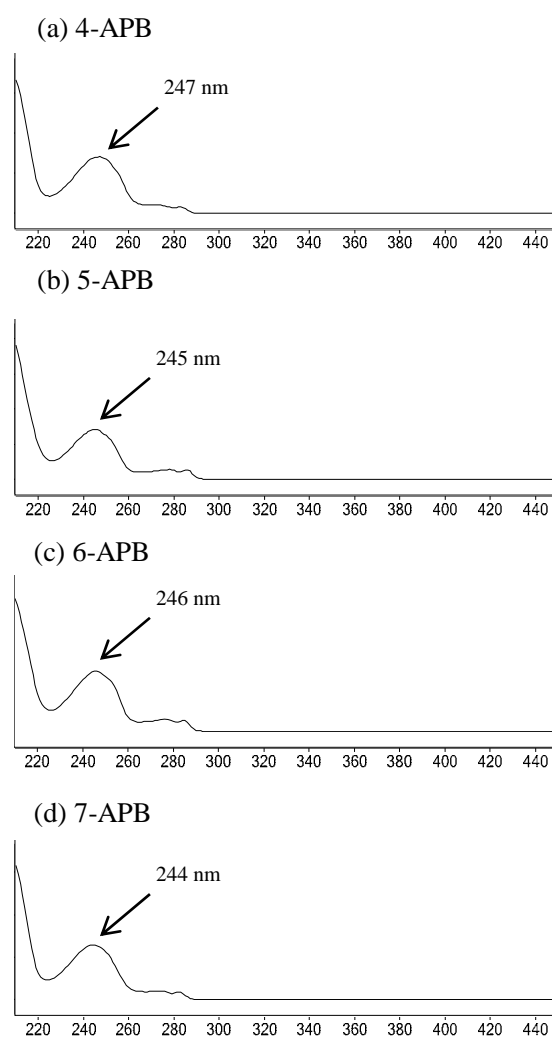


Fig. 11 UV spectra of APB by LC/PDA/MS  
(a) 4-APB , (b) 5-APB , (c) 6-APB , (d) 7-APB

### 3.2.2 MS スペクトル

各試料の MS スペクトルを Fig.12-16 に示す。

APDB については、検出されるイオンの強度比に差異が確認された 5-APDB のみ識別が可能であった (5-APDB のみ検出されるイオンの相対強度が  $m/z$  161 > 178) (Fig.13)。

MPP、MMC、APB 及び FMP については、MS スペクトルに特異な差異が確認されなかったため、識別は困難であった (Fig.12, 14, 15, 16)。

### 3.2.3 MS スペクトルに対する考察

LC/PDA/MS の MS スペクトルは、使用する機種、移動相、イオン化等の測定条件によりスペクトルパターン、MS スペクトル等が変化する場合があることから<sup>9,10)</sup>、測定条件だけではなく、機種の違いによる検討も必要と思料される。

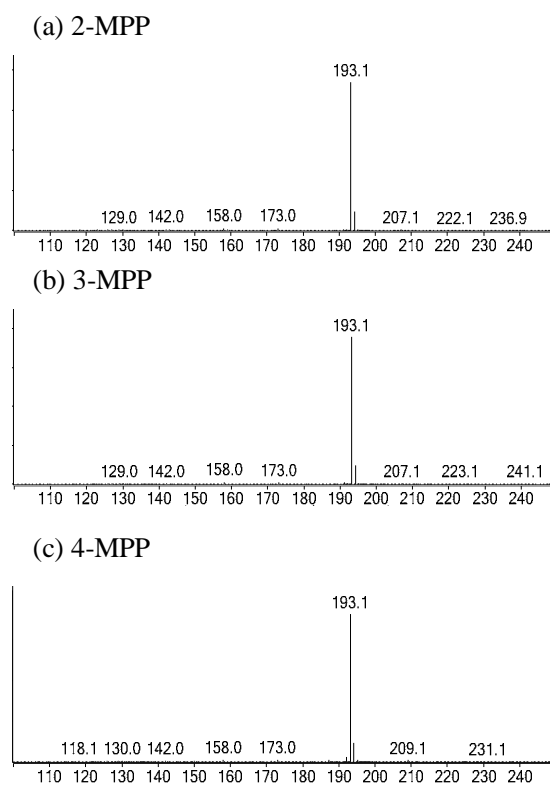


Fig.12 MS spectra of MPP by LC/PDA/MS  
(a) 2-MPP, (b) 3-MPP, (c) 4-MPP

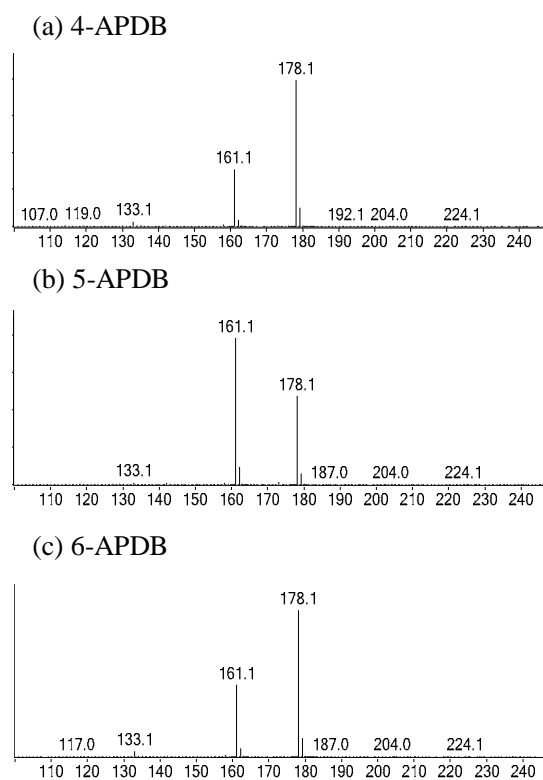


Fig.13 MS spectra of APDB by LC/PDA/MS  
(a) 4-APDB, (b) 5-APDB, (c) 6-APDB

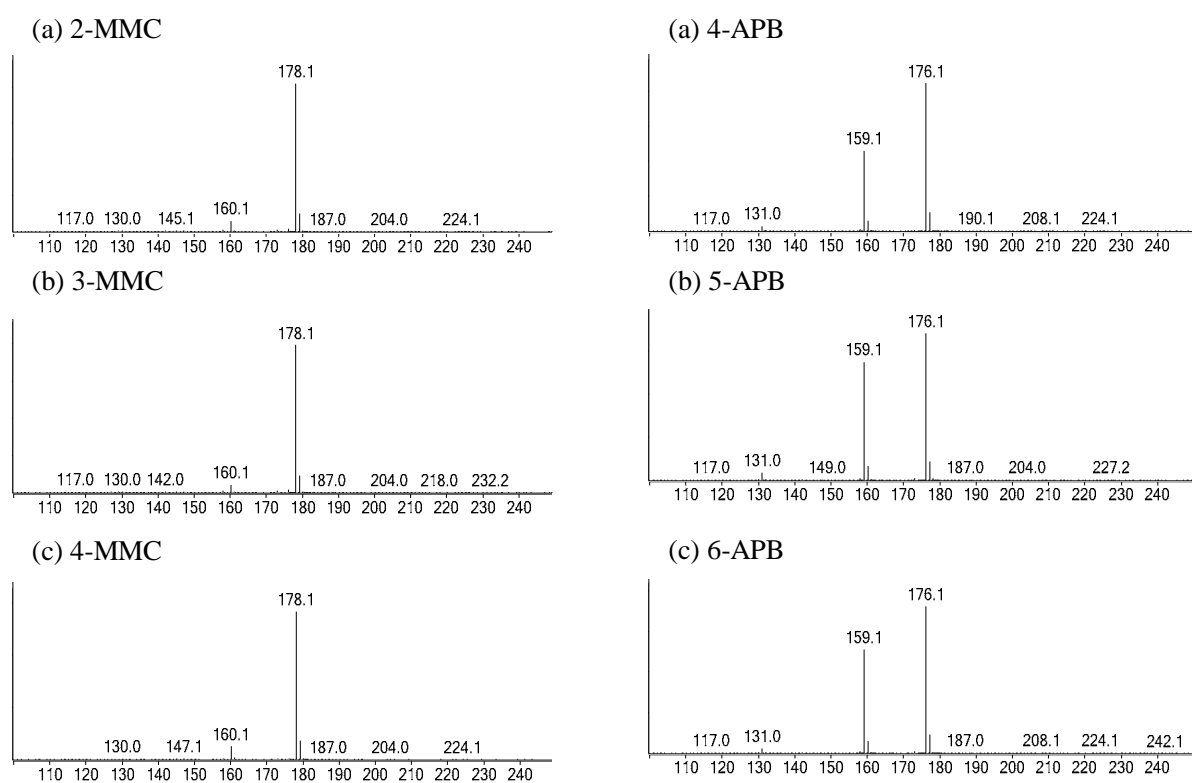


Fig.14 MS spectra of MMC by LC/PDA/MS  
(a) 2-MMC , (b) 3-MMC , (c) 4-MMC



Fig.16 MS spectra of APB by LC/PDA/MS  
(a) 4-APB , (b) 5-APB , (c) 6-APB , (d) 7-APB

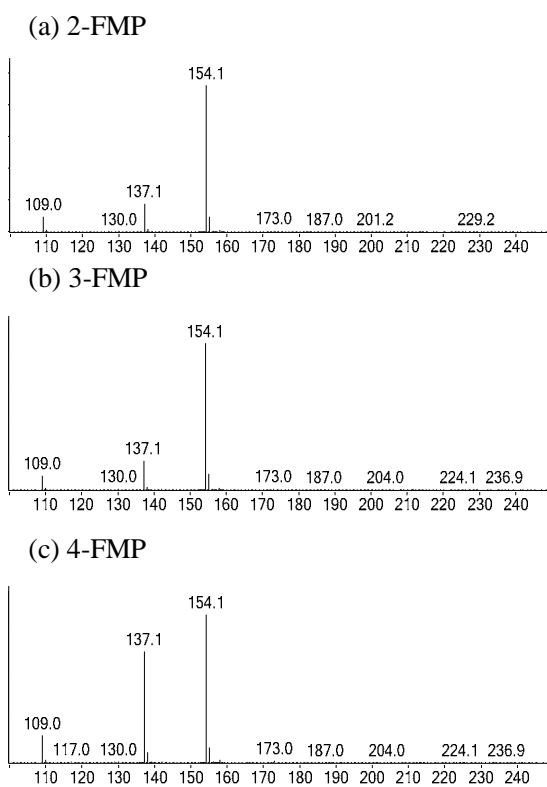


Fig.15 MS spectra of FMP by LC/PDA/MS  
(a) 2-FMP , (b) 3-FMP , (c) 4-FMP

### 3.3 LC/MS/MSによる識別

#### 3.3.1 プリカーサーイオンの選択

プリカーサーイオンについては、LC/PDA/MS で検出されたプロトン化分子イオン（以下、「 $[M+H]^+$ 」と略記する。）及びフラグメントイオンを選択した。

##### 3.3.1 (1) プリカーサーイオンとして $[M+H]^+$ を選択した場合

各試料については、 $[M+H]^+$ （MPP :  $m/z$  193、APDB :  $m/z$  178、MMC :  $m/z$  178、FMP :  $m/z$  154、APB :  $m/z$  176）をプリカーサーイオンとして、コリジョン電圧を 10、20、30 及び 40 V に設定した。

各試料の MS/MS スペクトルを Fig.17-21 に示す。

MPP については、コリジョン電圧が 30 V 及び 40 V の場合において、異なる MS/MS スペクトルが得られたことから、全ての位置異性体の識別が可能であった（Fig.17）。

APDB については、コリジョン電圧が 40 V の場合において、 $m/z$  91 及び 133 のプロダクトイオンの強度比に差異が確認された 4-APDB のみ識別が可能であった（4-APDB のみ  $m/z$  91 及び 133 のプロダクトイオンの相対強度が  $m/z$  91 > 133）（Fig.18）。

APB については、コリジョン電圧が 40 V の場合において、 $m/z$  77 及び 91 のプロダクトイオンの強度比に差異が確認された 7-APB のみ識別が可能であった（7-APB のみイオン  $m/z$  77 及び 91 のプロダクトイオンの相対強度が  $m/z$  77 > 91）（Fig.21）。

MMC 及び FMP については、いずれのコリジョン電圧においても、MS/MS スペクトルに特異な差異が確認されず、識別は困難であった（Fig.19, 20）。

識別が困難であった APDB、MMC、FMP 及び APB については、

コリジョン電圧を 50、60、70 及び 80 V に設定し、再度検討を行った。

APDB、MMC 及び FMP については、コリジョン電圧が 10、20、30、40 V の場合と同様、特異な差異は確認されず、識別は困難であった。（コリジョン電圧が 50、60、70 及び 80 V の場合の MS/MS スペクトルについては割愛。）

APB については、コリジョン電圧が 60 V の場合において、 $m/z$  51 及び 115 のプロダクトイオンの強度比に差異が確認された 7-APB のみ識別が可能であった（Fig.22）。

##### 3.3.1 (2) プリカーサーイオンとしてフラグメントイオンを選択した場合

各試料については、LC/PDA/MS で検出されたフラグメントイオン（APDB :  $m/z$  161、MMC : 160、FMP :  $m/z$  109, 137、APB :  $m/z$  159）をプリカーサーイオンとして、コリジョン電圧を 10、20、30 及び 40 V に設定した。

各試料の MS/MS スペクトルを Fig.23 及び 24 に示す。（APDB 及び APB の MS/MS スペクトルのみ。MMC 及び FMP については割愛。）

APDB については、コリジョン電圧が 30 V の場合において、 $m/z$  77、91、105 及び 133 のプロダクトイオンの強度比に差異が確認されたため、今回検討した全ての位置異性体について識別が可能であった（Fig.23）。

APB については、コリジョン電圧が 30 V の場合において、 $m/z$  77 及び 91 のプロダクトイオンの強度比に差異が確認された 7-APB のみ識別が可能であった（Fig.24）。

MMC 及び FMP については、いずれのコリジョン電圧においても、特異な差異が確認されず、識別は困難であった。

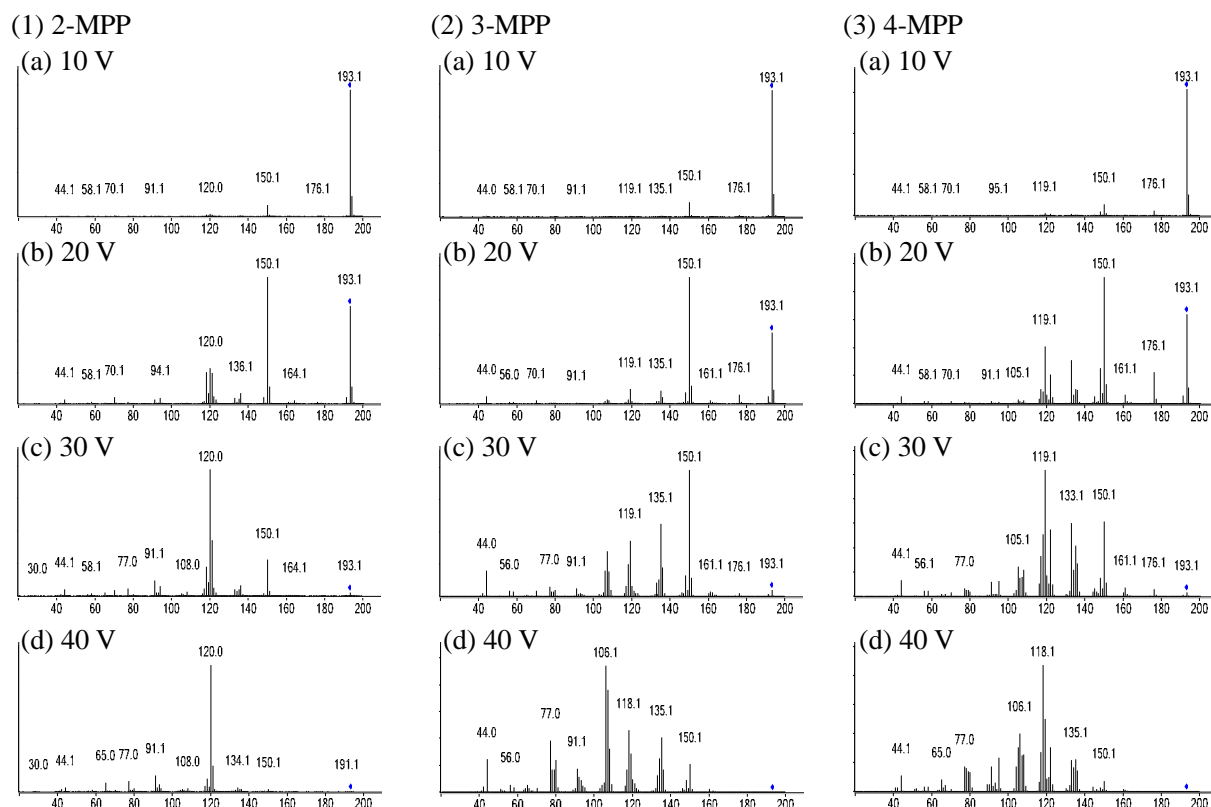
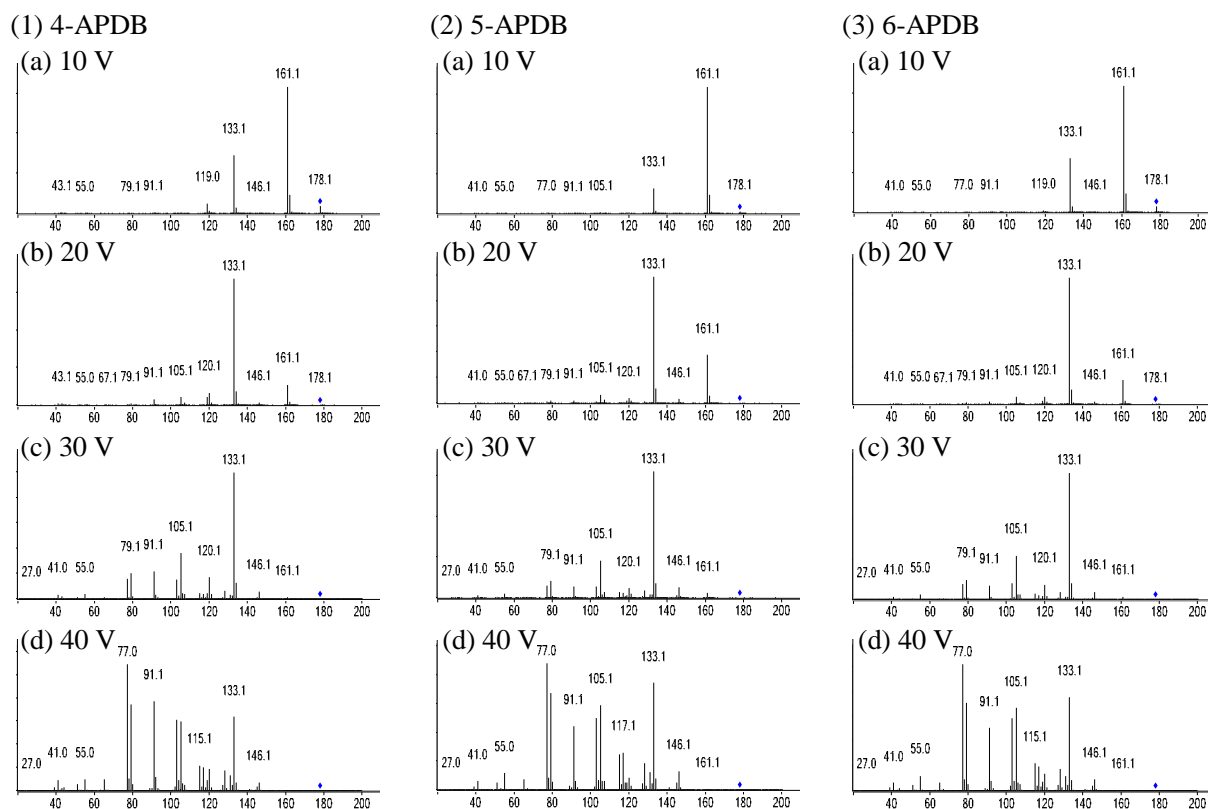
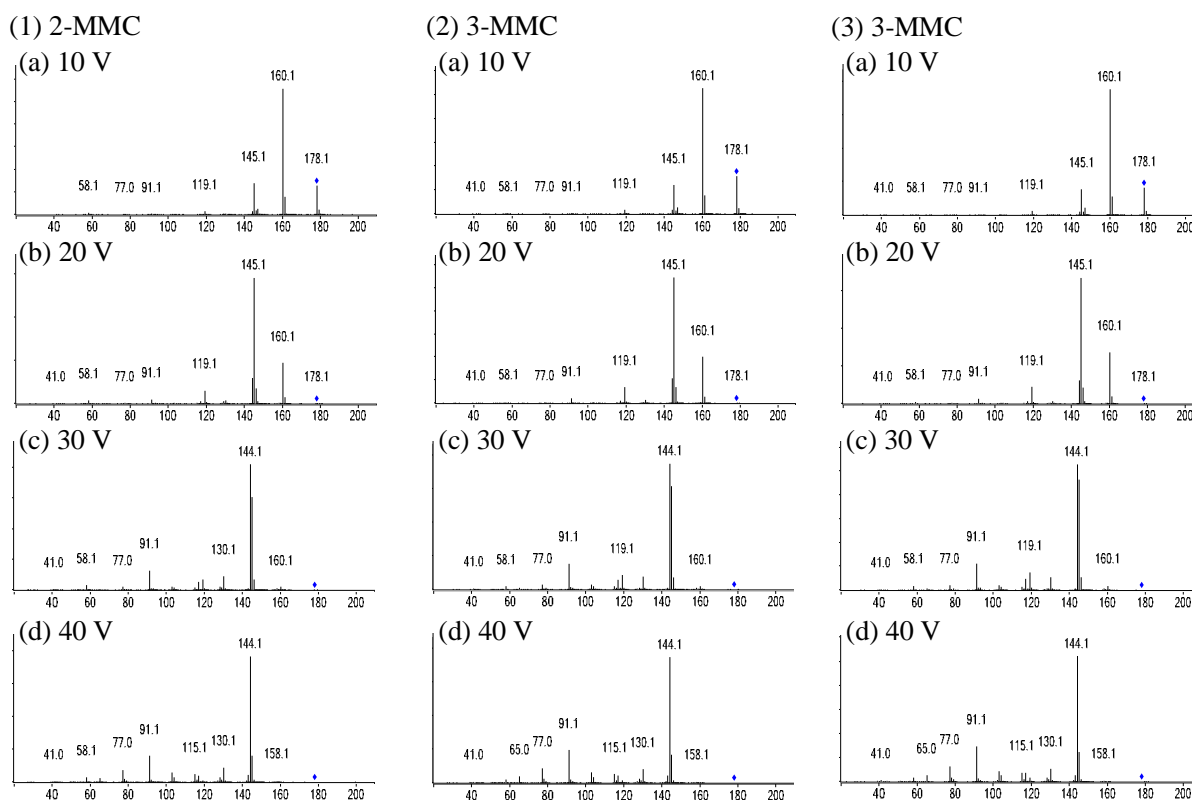


Fig.17 MS/MS spectra of MPP by LC/MS/MS (Precursor ion:  $m/z$  193)  
(1) 2-MPP, (2) 3-MPP, (3) 4-MPP  
Collision energy was set at (a) 10 V, (b) 20 V, (c) 30 V, (d) 40 V.

Fig.18 MS/MS spectra of APDB by LC/MS/MS (Precursor ion:  $m/z$  178)

(1) 4-APDB, (2) 5-APDB, (3) 6-APDB

Collision energy was set at (a) 10 V, (b) 20 V, (c) 30 V, (d) 40 V.

Fig.19 MS/MS spectra of MMC by LC/MS/MS (Precursor ion:  $m/z$  178)

(1) 2-MMC, (2) 3-MMC, (3) 4-MMC

Collision energy was set at (a) 10 V, (b) 20 V, (c) 30 V, (d) 40 V.

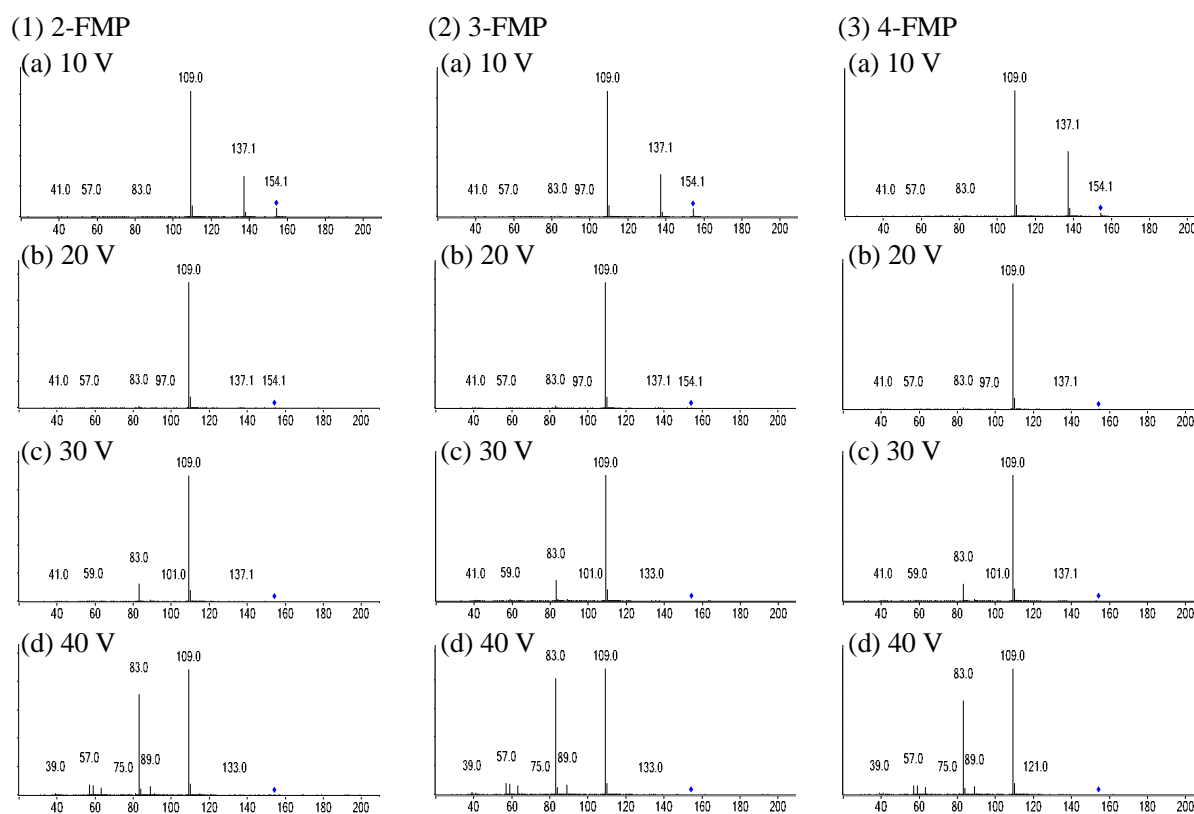
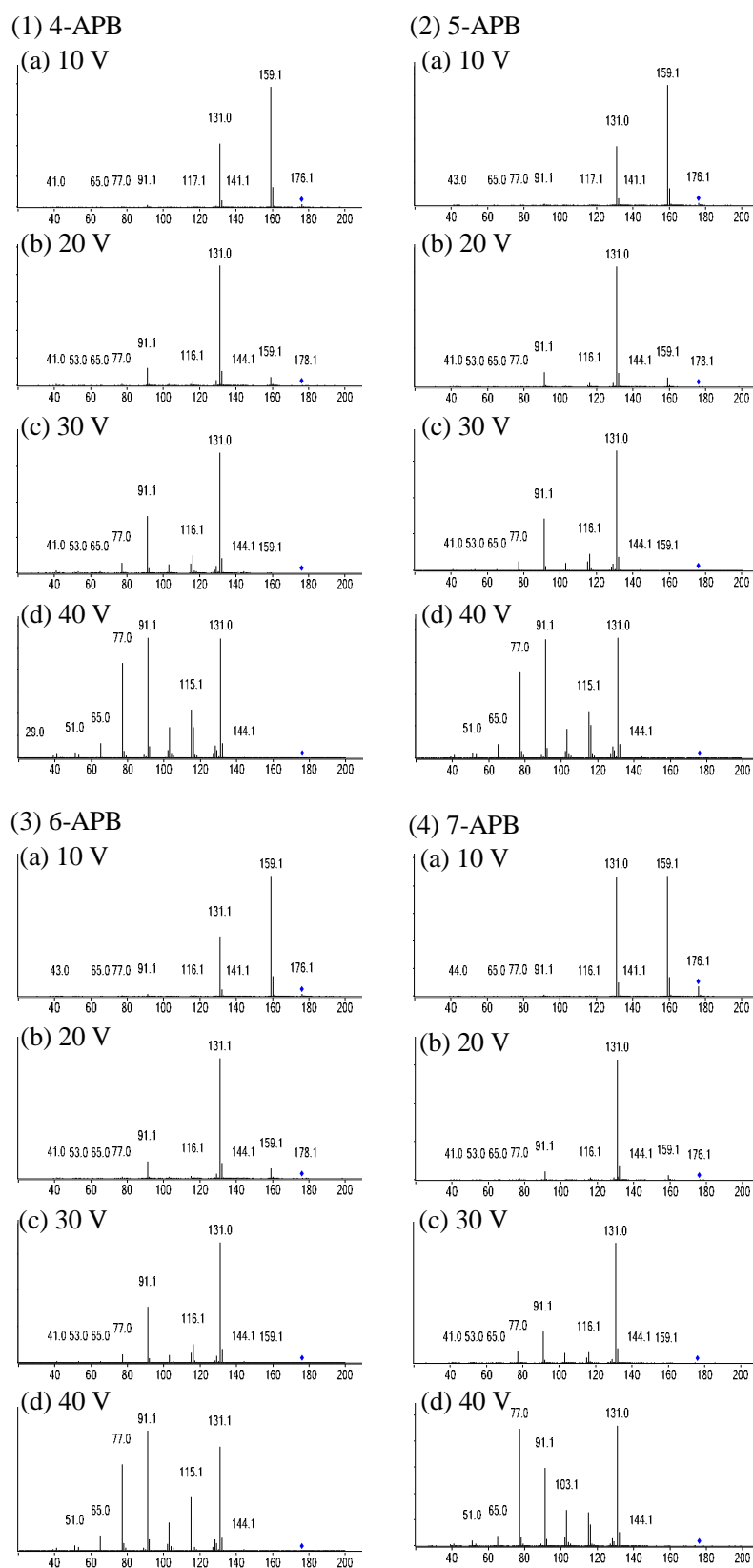


Fig.20 MS/MS spectra of FMP by LC/MS/MS (Precursor ion: m/z 154)  
 (1) 2-FMP, (2) 3-FMP, (3) 4-FMP  
 Collision energy was set at (a) 10 V, (b) 20 V, (c) 30 V, (d) 40 V.

Fig. 21 MS/MS spectra of APB by LC/MS/MS (Precursor ion:  $m/z$  176)

(1) 4-APB, (2) 5-APB, (3) 6-APB, (4) 7-APB

Collision energy was set at (a) 10 V, (b) 20 V, (c) 30 V, (d) 40 V.



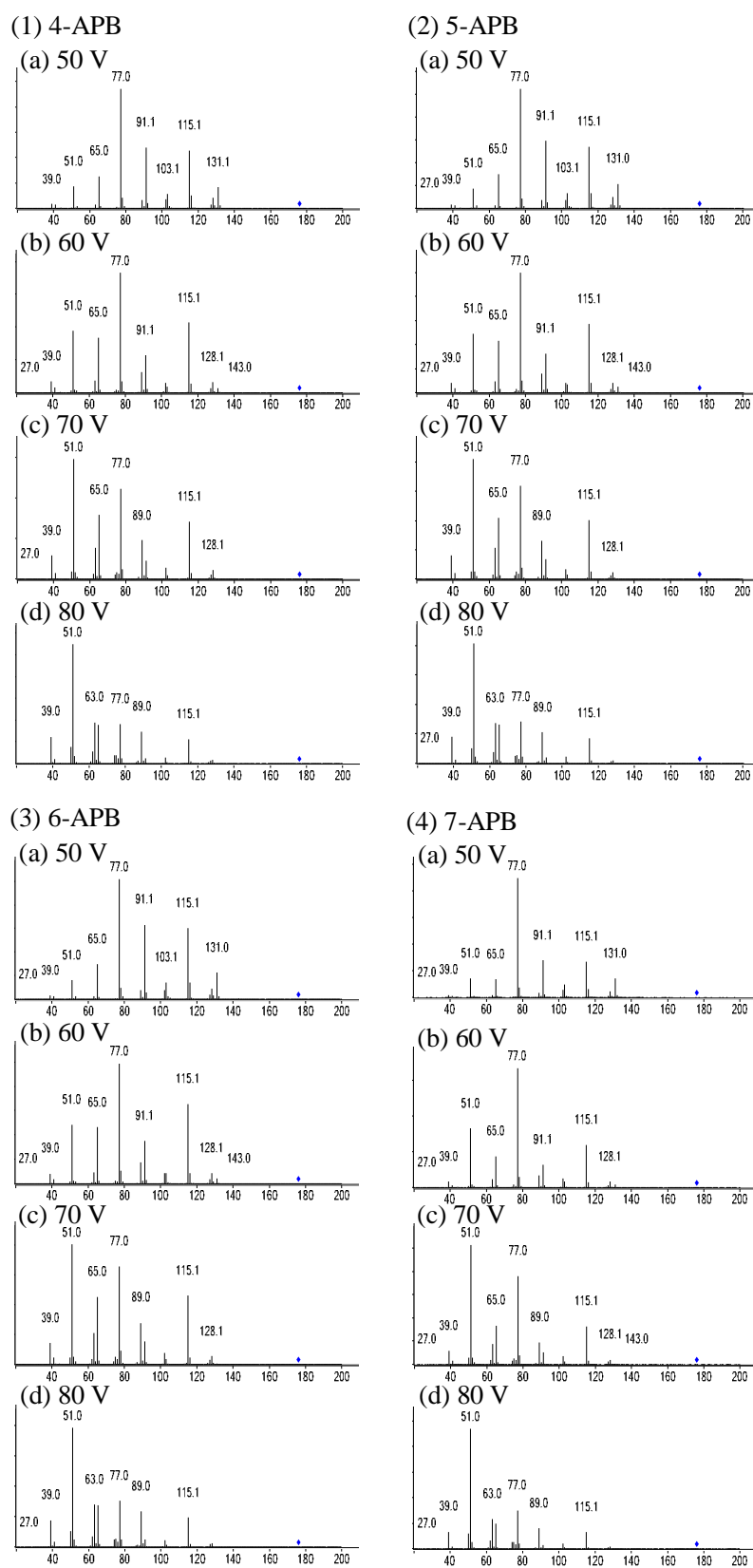


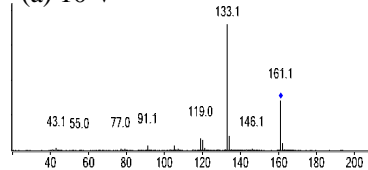
Fig.22 MS/MS spectra of APB by LC/MS/MS (Precursor ion: m/z 176)

(1) 4-APB, (2) 5-APB, (3) 6-APB, (4) 7-APB

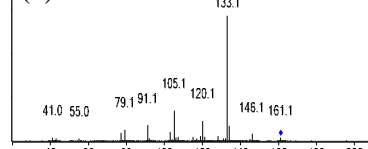
Collision energy was set at (a) 50 V, (b) 60 V, (c) 70 V, (d) 80 V.

## (1) 4-APDB

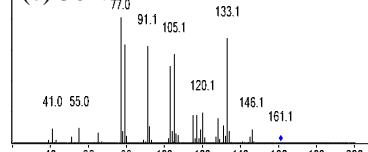
(a) 10 V



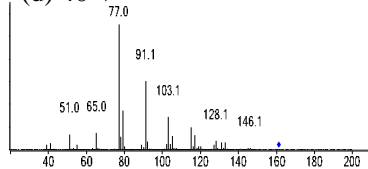
(b) 20 V



(c) 30 V

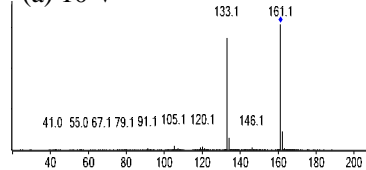


(d) 40 V

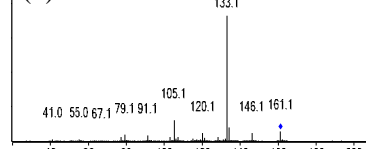


## (2) 5-APDB

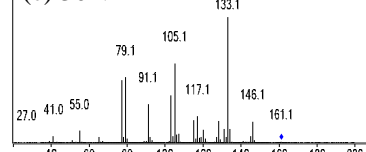
(a) 10 V



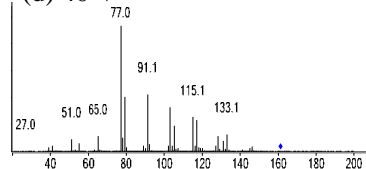
(b) 20 V



(c) 30 V

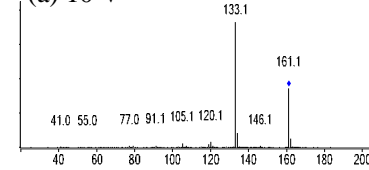


(d) 40 V

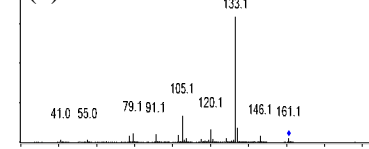


## (3) 6-APDB

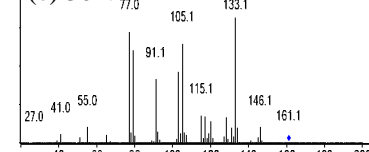
(a) 10 V



(b) 20 V



(c) 30 V



(d) 40 V

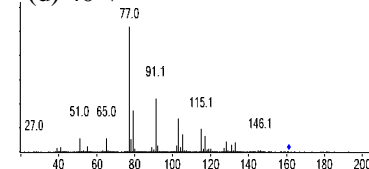


Fig.23 MS/MS spectra of APDB by LC/MS/MS (Precursor ion: m/z 161)

(1) 4-APDB, (2) 5-APDB, (3) 6-APDB

Collision energy was set at (a) 10 V, (b) 20 V, (c) 30 V, (d) 40 V.

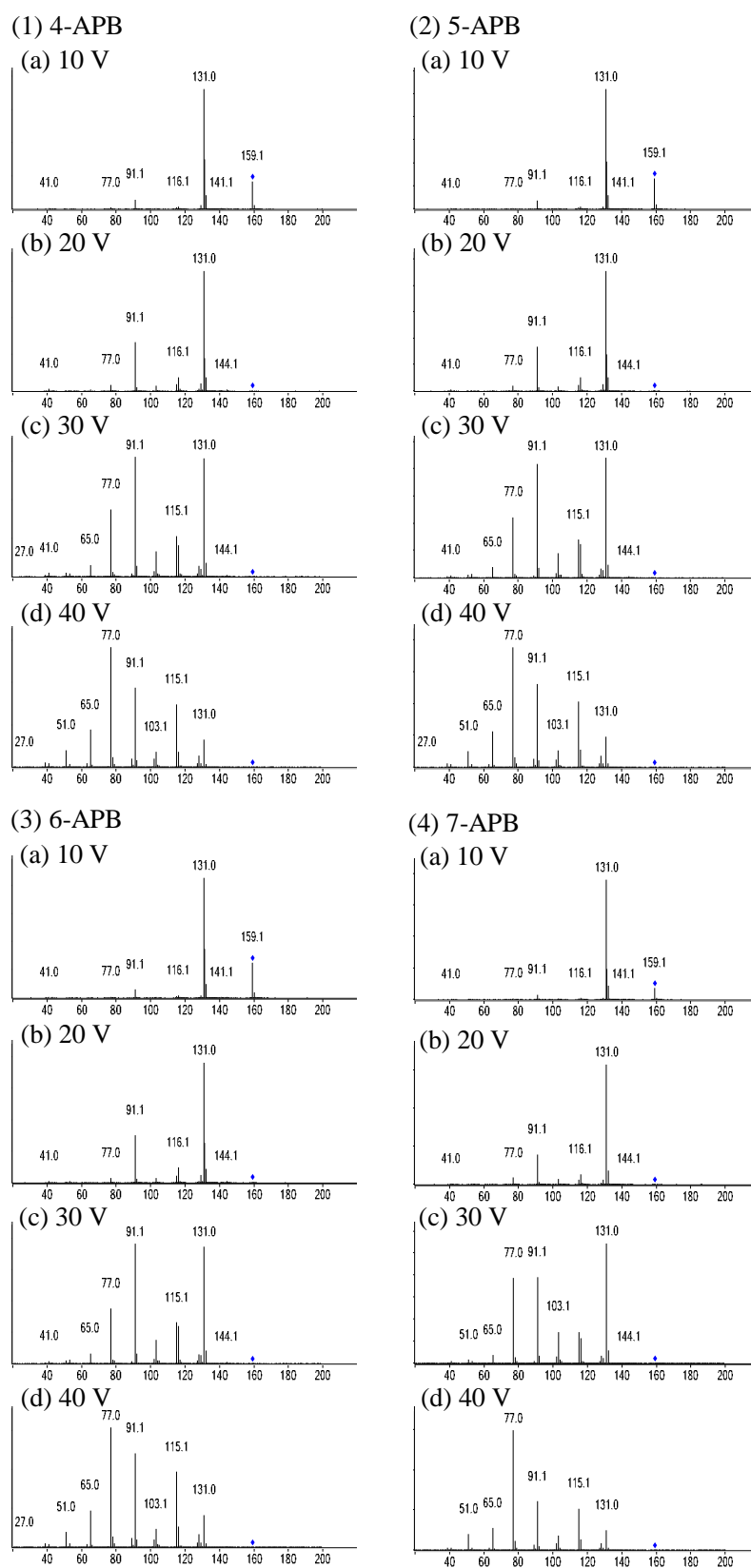


Fig.24 MS/MS spectra of APB by LC/MS/MS (Precursor ion: m/z 159)

(1) 4-APB, (2) 5-APB, (3) 6-APB, (4) 7-APB

Collision energy was set at (a) 10 V, (b) 20 V, (c) 30 V, (d) 40 V.

### 3.3.2 MS/MS スペクトルに対する考察

コリジョン電圧及びブリカーサーイオンの設定により識別の可否が変わることから、試料ごとの適切な設定が必要であると思料される。

MS/MS スペクトルについては、使用する機器のメーカー及び条件が同一であれば、異なる機種であっても MS/MS スペクトルが一致するとの報告<sup>11)</sup>があることから、今回識別が可能であった試料については、今回と同一のメーカーの機器及び条件であれば識別が可能であると思料される。異なるメーカーの機器については、今回と同様の結果が得られるか否かの検討が必要であると思料される。

今回検討した LC/MS/MS のようなタンデム質量分析法については、メトキシエチルアンフェタミン及びメトキシジメチルアンフ

ェタミンの位置異性体の識別を行った報告<sup>12)</sup>もあり、規制薬物等の位置異性体の識別に有効であると思料される。

### 3.4 各試料の位置異性体の識別結果

各試料の位置異性体の識別の可否を示したものを Table 2 に示す。

MPP、APDB 及び MMC については、GC/MS、LC/PDA/MS または LC/MS/MS のいずれかの分析法により差異が確認され、全ての位置異性体の識別が可能であった。

APB 及び FMP については、7-APB 以外は識別が困難であった。これらについては、保持時間が同一となる位置異性体は確認されなかったことから、GC/MS による標準品の保持時間との比較が必要と思料される。

Table 2 Suitability of identification of regioisomers by each analysis method

sample	GC/MS		LC/PDA/MS		LC/MS/MS
	free base	TFA delivative	UV	MS	
2-MPP					
3-MPP	△	○	○	×	○
4-MPP	(3-MPP only)				
4-APDB					
5-APDB	△	○	△	△	○
6-APDB	(4-APDB only)		(5-APDB only)	(5-APDB only)	
2-MMC					
3-MMC	×	×	○	×	×
4-MMC					
2-FMP					
3-FMP	×	×	×	×	×
4-FMP					
4-APB					
5-APB	×	×	×	×	△
6-APB					
7-APB					(7-APB only)

○ : All identifiable    △ : Some identifiable    × : Identification difficult

## 4. 要 約

位置異性体の存在が危惧される混合物の分析において、標準品の入手が困難な場合であっても位置異性体の識別が可能な方法が求められていることから、GC/MS、LC/PDA/MS 及び LC/MS/MS を用いて、位置異性体が存在する薬物（5 種類：MPP、APDB、MMC、APB 及び FMP）について分析を行い、その位置異性体の識別が可能か否かを検討した。

その結果、MPP、APDB 及び MMC については、GC/MS、LC/PDA/MS または LC/MS/MS のいずれかの分析法により、位置異性体において差異が確認されたことから、識別が可能であることが確認された。

FMP 及び APB については、GC/MS の保持時間以外に特異な差異が確認されなかったことから、識別には GC/MS による標準品の保持時間との比較が必要と思料された。

## 文 献

- 1) 平成 27 年 3 月 5 日警察庁報道発表「平成 26 年の薬物・銃器情勢（確定値）」
- 2) 神奈川県ホームページ「危険ドラッグに係る、主な事件・事故」(<http://www.pref.kanagawa.jp/cnt/f5618/p510749.html>)
- 3) 根岸祥子、中園裕紀子、神田康司、辻川健治、桑山健次、金森達之、岩田祐子、宮本和奈、糟谷史代、井上博之：法科学技術学会誌, **19**, 111 (2014).
- 4) 佐貫薫、杉山真士、森藤一志、松本啓嗣、秋枝毅：関税中央分析所報, **46**, 43 (2006).
- 5) 宇田川晃、長沼宏美、倉嶋直樹、山崎光廣、熊澤勉：関税中央分析所報, **49**, 51 (2009).
- 6) 松下孝也、石橋浩、森尾広志：関税中央分析所報, **54**, 91 (2014).
- 7) 片木聖子、杉山真士、松本啓嗣、渡瀬順司：関税中央分析所報, 50, 35 (2010).
- 8) Zaitse K, Katagi M, Kamata H, Kamata T, Shima N, Miki A, Iwamura T, Tsuchihashi H : *Journal of Mass Spectrometry*, **43**, 528 (2008).
- 9) 上堀美知子、石井義昭、長谷川敦子、吉田寧子、鈴木茂、今村清：分析化学, **54**, 211 (2005).
- 10) 環境省ホームページ「LC/MS データベースの構築について」([http://www.env.go.jp/chemi/anzen/lcms\\_method/1-2.pdf](http://www.env.go.jp/chemi/anzen/lcms_method/1-2.pdf))
- 11) 豊田安基江、杉村光永、松尾健、寺内正裕、伊達英代、井原紗弥香、森田晃祥、山辺真一、肥塚加奈江、藤原美智子、立野幸治：広島県立総合技術研究所保健環境センター研究報告, **16**, 1 (2008).
- 12) Zaitse K, Miyagawa H, Sakamoto Y, Matsuta S, Tsuboi K, Nishioka H, Katagi M, Sato T, Tatsuno M, Tsuchihashi H, Suzuki K, Ishii A : *Forensic Toxicology*, **31**, 292 (2013).