

令和 3 年 7 月 1 日現在

機関番号：99999
研究種目：奨励研究
研究期間：2020～2020
課題番号：20H01134
研究課題名 フルオロフェニル基を有するカチノン類薬物に対する新規位置異性体識別法の開発

研究代表者

内川 貴志 (Uchikawa, Takashi)

佐賀県警察本部刑事部科学捜査研究所・・・警察職員

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 390,000円

研究成果の概要： フッ素の結合位置に異性体が存在するフルオロフェニル基（F-Ph基）を有するカチノン類薬物は、ガスクロマトグラフ赤外分光光度計（GC-IR）で測定すると、得られる赤外吸収スペクトル上の1500cm⁻¹付近と1600cm⁻¹付近の2か所にF-Ph基の構造に由来するピークが確認された。この2つのピークは、フッ素の結合位置が同じ異性体同士では、ほぼ等しい波数で出現し、異なる異性体間では異なる波数に出現した。この2つのピークの波数に着目することで、F-Ph基を有するカチノン類薬物の位置異性体が容易に識別可能であることが判明した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

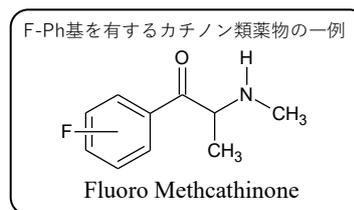
本研究は、一般的な分析手法では識別が困難なフルオロフェニル基（F-Ph基）を有するカチノン類薬物とその位置異性体が、ガスクロマトグラフ赤外分光光度計（GC-IR）での測定で得られた、赤外吸収スペクトル上に出現するピークを考察することで、容易に識別が可能なることを見出したものである。本研究成果によって、薬物特定能力が向上し、より高精度な薬物鑑定業務を実施することが可能となり、薬物関連事件における捜査の早期解決にも一定の貢献が期待できる。

研究分野：法科学

キーワード：フルオロフェニル基 カチノン類 位置異性体識別 ガスクロマトグラフ赤外分光光度計

1. 研究の目的

フルオロフェニル基 (F-Ph 基) を有する違法薬物は多数存在しているが、そのオルト、メタ、パラの各位置異性体の識別は、質量分析等の一般的な検査では非常に困難であることが知られている。本研究では、F-Ph 基を有するカチノン類薬物をガスクロマトグラフ赤外分光光度計 (GC-IR) を用いて分析し、得られた赤外吸収スペクトル上に出現する位置異性体由来の特徴を詳細に解析することで、有効な異性体識別法を開発することを目的とする。



2. 研究成果

(1) 研究方法

① 試薬

オルト、メタ、パラの3種類の異性体が揃った F-Ph 基を有するカチノン類薬物 6 種、合計 18 種 (表 1 参照) を分析対象とした。対象薬物には、熱分解を起こしやすいものがあるので、本研究では、まず遊離塩基で分析し、その後熱分解対策としてアセチル誘導体化処理を施して分析した。

② GC-IR 条件

上述のとおり、対象薬物には熱分解を起こしやすいものが含まれるため、GC での熱影響を極力避ける目的で、注入口温度及びカラム温度を低く抑えることが可能なオンカラム注入法を採用した。IR は、ZnSe ディスク温度 -50°C 、分解能 4cm^{-1} 、積算回数 64 回で測定した。

(2) 結果及び考察

昨年度の科研費奨励研究成果と分子構造計算による解析で、F-Ph 基に由来するピークが、 1500cm^{-1} 付近と 1600cm^{-1} 付近に出現することが判明している。本研究の対象薬物である F-Ph 基を有するカチノン類薬物も同様の兆候を示し、遊離塩基及びアセチル誘導体化物のいずれからでも 1500cm^{-1} 付近と 1600cm^{-1} 付近にピークが出現した。なお *ortho*-Fluoro Octedrone については、測定時の熱分解を抑えられなかったため遊離塩基状態での測定結果は得られなかった。図 1 ~ 3 に本研究結果の一部であるアセチル誘導体化物の分析結果を示したが、本薬物は、フッ素の結合位置が同じ異性体同士では、ほぼ等しい波数にピークが出現し、異なる異性体間では、オルトとメタの 1500cm^{-1} 付近のピークの波数が類似することを除き、有意な差をもってピークが出現した。

本実験で得られた 1500cm^{-1} 付近と 1600cm^{-1} 付近に出現したピークの極大波数を読み取り、

表 1 検討したF-Ph基を有するカチノン類薬物

No.	試薬名
①	<i>o,m,p</i> - Fluoro Methcathinone
②	<i>o,m,p</i> - Fluoro Ethcathinone
③	<i>o,m,p</i> - Fluoro Pentedrone
④	<i>o,m,p</i> - Fluoro Octedrone
⑤	<i>o,m,p</i> - Fluoro-N-ethylorpentedrone
⑥	<i>o,m,p</i> - Fluoro IPV

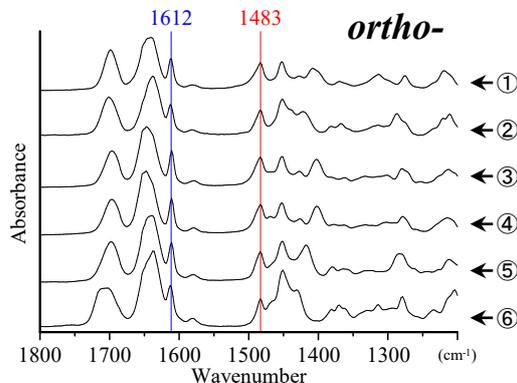


図 1 表 1 のオルト位の薬物のアセチル誘導体化物の赤外吸収スペクトル

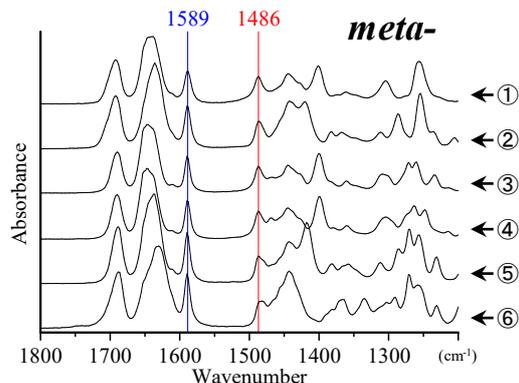


図 2 表 1 のメタ位の薬物のアセチル誘導体化物の赤外吸収スペクトル

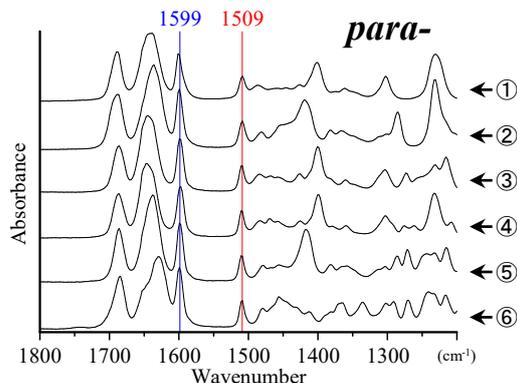


図 3 表 1 のパラ位の薬物のアセチル誘導体化物の赤外吸収スペクトル

各異性体ごとに平均化したものを表 2 に示した。上述したオルトとメタの 1500cm^{-1} 付近のピークの波数が接近しているが、他のスペクトルについては、標準偏差から判断しても十分に有意差を示すものであり、各異性体の判別に有効と考えられた。オルトとメタについても、 1600cm^{-1} 付近のピークは非常に有意な差をもって出現していた。また表 2 に示すとおり、対象薬物にアセチル誘導体化の処理を行っても、波数に若干の変化はあるが、結果に遊離塩基と比較して大きな影響は見られなかった。このことから熱分解対策としてアセチル誘導体化処理を行うことは有効な手段と判断された。

F-Ph 基を有するカチノン類薬物の位置異性体は、赤外吸収スペクトル上の 1500cm^{-1} 付近と 1600cm^{-1} 付近の 2 か所のピークの波数に着目することで、容易に識別が可能であり、本研究手法が有効な識別法であることが判明した。またこの特徴は、F-Ph 基を有するカチノン類薬物と構造が類似する薬物であれば、同様に出現する可能性が高いことから、対照標準試薬が入手不可能な新規乱用薬物への対策としても有効と考えられる。

表 2 表 1 の薬物の測定結果から得られた 1500cm^{-1} 付近と 1600cm^{-1} 付近のピークの極大波数

		1600 cm^{-1} 付近のピーク		1500 cm^{-1} 付近のピーク	
		平均値	標準偏差	平均値	標準偏差
遊離塩基	<i>ortho-</i>	1610	0.33	1481	0.15
	<i>meta-</i>	1589	0.07	1486	0.56
	<i>para-</i>	1599	0.29	1508	0.22
アセチル化	<i>ortho-</i>	1612	0.67	1483	0.16
	<i>meta-</i>	1589	0.24	1486	1.57
	<i>para-</i>	1599	0.83	1509	0.35

主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計0件

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

研究組織（研究協力者）

氏名	ローマ字氏名
神田 康司	(Kanda Kouji)
日下部 幸祐	(Kusakabe Kousuke)