

令和 4 年 5 月 29 日現在

機関番号：99999

研究種目：奨励研究

研究期間：2021～2021

課題番号：21H04185

研究課題名 定量NMR法を利用した大麻濃縮物中のカンナビノイド類の迅速定量法の開発

研究代表者

立入 直紀 (Tachiiri, Naoki)

宮城県警察科学捜査研究所・警察職員

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 470,000円

研究成果の概要：違法薬物の新たな形状である大麻濃縮物は、従来大麻よりも9-テトラヒドロカンナビノール（9-THC）の含有量が多く、さらに8-テトラヒドロカンナビノール（8-THC）の含有も確認されており、大麻事犯は複雑化している。大麻濃縮物中の9-THC、8-THCの含有量は様々で、それらの含有量を明らかにすることは、人体への影響、流通ルート把握のため重要である。そこで、標準品や検量線が不要で迅速な定量分析が可能である定量NMRを用い、大麻濃縮物中の9-THC、8-THCの定量を行ったところ、溶媒に重クロロホルムを用いることで、迅速に定量が可能であった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

定量NMRは、純度既知の標準品を準備する必要がなく、また検量線の作製が不要となるため、検査時間が大幅に短縮可能である。本研究成果により、大麻濃縮物に含有する9-THC、8-THCの定量分析が迅速に測定可能となり、違法に流通する大麻濃縮物中の9-THC、8-THCの定量値を比較し、製品間の異同識別や流通ルートを把握するなど、薬物規制のための分析技術に大きく貢献することが可能である。また、本手法は、大麻濃縮物以外、例えば、危険ドラッグ類の定量や品質管理における異物混入や犯罪捜査における毒物混入事案など、様々な分野で役立つ技術となり得る。

研究分野：裁判化学

キーワード：NMR 定量 大麻濃縮物 9-THC 8-THC

1. 研究の目的

違法薬物の新たな形状である大麻濃縮物は、従来大麻よりも 9-テトラヒドロカンナビノール (9-THC) の含有量が多く、さらに 8-テトラヒドロカンナビノール (8-THC) の含有も確認されており、大麻事犯は複雑化している。大麻濃縮物中の 9-THC、8-THC の含有量は様々で、それらの含有量を明らかにすることは、人体への影響、流通ルート把握のため重要である。通常 9-THC の定量は、標準品が入手困難であるためカンナビノールを用いた GC による定量が行われている。一方、定量 NMR 法では、標準品や検量線が不要のため迅速な定量分析が可能である。また、大麻濃縮物中に 9-THC の前駆体 9-テトラヒドロカンナビノール酸 (9-THCA-A) が存在した場合、熱分解により 9-THC が生成されるため、GC での定量には注意を要するが、NMR では、熱による影響がないため、9-THC と 9-THCA-A を区別して分析が可能と考えられる。

そこで本研究では、定量 NMR 法を用い、大麻濃縮物に含有する 9-THC、8-THC の迅速な定量法の開発を目的とする。

2. 研究成果

(1) 9-THC、8-THC、9-THCA-A の化学シフト値の確認及び定量条件の決定

9-THC、8-THC を NMR で定量するためには、内部標準物質及び各化合物の化学シフト値が重複せずかつ溶液中で相互作用しないことが絶対条件である。9-THC、8-THC、9-THCA-A 及びそれらの混合物を重クロロホルム、重メタノールで NMR 測定を行った結果を図 1 に示す。重メタノール溶液では、9-THC、8-THC、9-THCA-A の各化学シフト値は、類似しており、混合物においては、ベースライン分離したピークを確認することができなかった。一方、重クロロホルム溶液では、ベースライン分離したピークを確認でき、定量が可能と考えられた。そこで重クロロホルムに溶解し、9-THC、8-THC、9-THCA-A と重複しない内部標準物質として、1,2,4,5-テトラクロロニトロベンゼンを用いて 9-THC、8-THC 及びそれら混合物について NMR により定量値を求めた。得られた定量値をカンナビノールを利用した GC による定量法による定量値と比較した結果、同様の値が得ることが可能であり、定量 NMR の有効性を確認することができた。

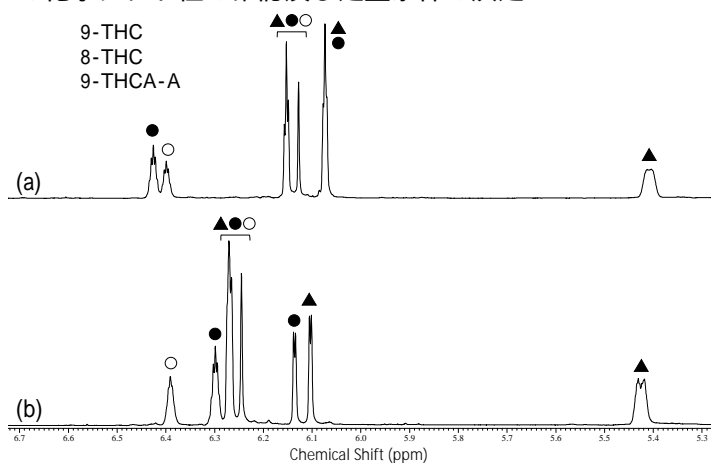


図1 9-THC、8-THC、9-THCA-Aの混合溶液の¹H NMR (a) 重メタノール、(b) 重クロロホルム

(2) NMR と GC による大麻濃縮物中の 9-THC の含有量の比較

実際に 9-THC を含有する大麻濃縮物 4 試料について、NMR と GC により大麻濃縮物中の 9-THC の含有量の比較を行った。大麻濃縮物及び 1,2,4,5-テトラクロロニトロベンゼンを正確に 20 mg 秤量し、重クロロホルムで 2 mL にメスアップしたものを NMR 及び GC の測定試料として、大麻濃縮物中の 9-THC の含有量を求めた。それらの結果を図 2 に示す。NMR により求めた大麻濃縮物中の 9-THC の含有量は、いずれの試料においても、GC と同様の結果を得ることができた。

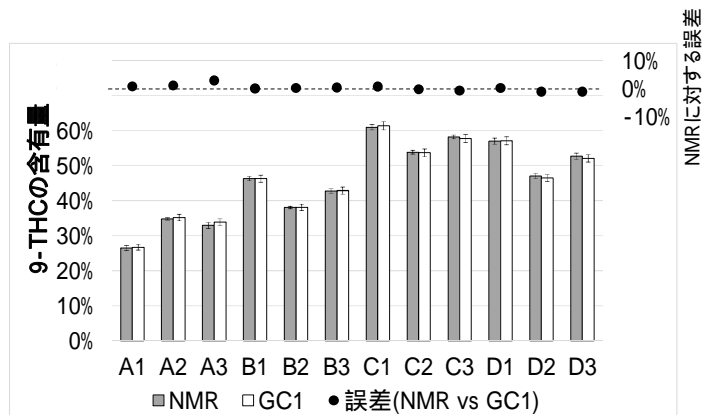


図2 試料A ~ D中の 9-THCのNMRとGCによる定量結果

9-THC 及び 9-THCA-A を含有する大麻濃縮物 1 試料についても、同様に含有量を求めたところ、GC では含有する 9-THCA-A が熱分解により 9-THC に変化するため 9-THC の含有量は 18.1%となった。一方 NMR では、9-THC と 9-THCA-A を区別して含有量を求めること

ができ、それぞれ 5.6%、14.8%であった。NMR では、溶媒に重クロロホルムを用いることで 9-THC と 9-THCA-A を明確に区別可能であり、9-THC のみの含有量を求めることが可能であった。

NMR を用いた定量は、純度既知の標準品を準備する必要がなく、また熱分解の影響や検量線の作製が不要となるため、検査時間が大幅に短縮することができる。このため、大麻濃縮物の定量分析におけるボトルネックを排除することができ、定量 NMR は、大麻濃縮物中の 9-THC、8-THC の迅速な定量に有効と考えられた。

主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 立入 直紀
2. 発表標題 定量NMR法を利用した大麻濃縮物中のカンナビノイド類の迅速定量法の開発
3. 学会等名 日本薬学会
4. 発表年 2022年

〔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
----	--------