

## 第 4 回知事指定薬物のスペクトルデータと平成 18 年度薬物分析調査

長嶋 真知子, 瀬戸 隆子, 高橋 美佐子, 鈴木 仁,  
安田 一郎

**Spectrum Data of 4<sup>th</sup> Governor-designated Drugs and the Analyses of Illegal Drugs Purchased Apr.2006-Mar.2007**

Machiko NAGASHIMA, Takako SETO, Misako TAKAHASHI, Jin SUZUKI,  
and Ichirou YASUDA

## 第4回知事指定薬物のスペクトルデータと平成18年度薬物分析調査

長嶋 真知子\*, 瀬戸 隆子\*, 高橋 美佐子\*, 鈴木 仁\*,  
安田 一郎\*

### Spectrum Data of 4<sup>th</sup> Governor-designated Drugs and the Analyses of Illegal Drugs Purchased Apr.2006-Mar.2007

Machiko NAGASHIMA\*, Takako SETO\*, Misako TAKAHASHI\*, Jin SUZUKI\*,  
and Ichirou YASUDA\*

**Keywords** : 知事指定薬物 governor-designated drugs, PMMA 1-(4-methoxyphenyl)-*N*-methylpropan-2-amine, Methylone 2-methylamino-1-(3,4-methylenedioxyphenyl)-propan-1-one, 違法ドラッグ illegal drugs, 市販薬物調査 marketing research of illegal drugs

### はじめに

東京都は平成17年4月1日に「東京都薬物の濫用防止に関する条例」を定めて以来、4回にわたり、9種の薬物(2C-I, 5-MeO-MIPT, MBDB, 3CPP, 5-MeO-AMT, TMA-2, 2C-T-2, PMMA 及び Methylone)を違法ドラッグ(いわゆる脱法ドラッグ)として指定し、取り締まりを行ってきた。これをうけて国も麻薬への指定や薬事法の改正など取り締まりの強化を進めている。9種の薬物は、麻薬指定により失効したものが4種(MBDB, 3CPP, TMA-2 及び Methylone)あり、残る5種は平成19年4月1日に薬事法指定薬物となり、これらも条例から除外された。著者らは知事指定薬物の指定にあたり薬物の物理恒数及びスペクトルデータ等を測定するとともに分析法について検討し、その一方で新規薬物の構造決定などを行ってきた。今回、平成18年9月8日に指定された知事指定薬物のPMMA 及び Methylone について報告するとともに、平成18年度の違法ドラッグの試買調査及び都民等からの任意提出物の結果をあわせて報告する。

### 実験方法

#### 1. 2種の知事指定薬物

薬事監視員が、都内の違法ドラッグ販売店あるいはインターネットで化学薬品として購入した製品を原料として薬物の精製・単離を行った。

#### 2. 平成18年度試買及び任意提出検体

薬事監視員が都内の違法ドラッグ販売店、露店あるいはインターネットで試買あるいは都民等からの任意提出物により試験依頼されたケミカル系ドラッグ99製品について分析を行った。

### 3. 分析方法

2種の知事指定薬物は、既報<sup>1)</sup>にしたがって分析を行った。また平成18年度試買検体は、既報<sup>1, 2, 3)</sup>にしたがってフォトダイオードアレイ検出器付液体クロマトグラフィー(以下LC/PDAと略す)、薄層クロマトグラフィー(以下TLCと略す)、電子イオン化質量分析法(以下EI/MSと略す)、エレクトロスプレーイオン化質量分析法(以下ESI/MSと略す)、高分解能飛行時間型質量分析法(以下HR-TOF/MSと略す)、質量分析計付液体クロマトグラフィー(以下LC/MSと略す)、質量分析計付ガスクロマトグラフィー(以下GC/MSと略す)及び核磁気共鳴分析スペクトル測定法(以下NMRと略す)を適宜組み合わせることで薬物の確認、同定を行った。

### 結果

#### 1. 知事指定薬物PMMA 及び Methylone

PMMAは平成17年度の試買調査により、東京都ではじめて検出された薬物であり<sup>4)</sup>、麻薬であるPMA及び覚せい剤であるメタンフェタミンに構造が類似している。またMethyloneは麻薬に指定されているMDMAに構造が類似しており、bk-MDMAとも呼ばれている薬物である。これらは強い中枢興奮作用があることから麻薬と同様の幻覚・興奮作用を引き起こすことが知られており、重大な健康被害や犯罪を引き起こす恐れがある。Methyloneは平成16年度の東京都の試買調査で、はじめて検出された薬物であり<sup>5)</sup>、平成16年度に3件、平成17年度に7件、平成18年度には11件と検出件数の多いものである。Methyloneは平成18年9月8日に知事指定薬物に指定後、同19年2月3日に麻薬に指定された。またPMMAも平成19年4月1日から薬事法指定薬物に

\* 東京都健康安全研究センター医薬品部医薬品研究科 169-0073 東京都新宿区百人町 3-24-1

\* Tokyo Metropolitan Institute of Public Health

3-24-1, Hyakunin-cho, Shinjuku-ku, Tokyo 169-0073 Japan

指定された。PMMA及びMethyloneの構造式を図1に示す。

#### PMMA 物理恒数, スペクトルデータ及び分析結果

$C_{11}H_{17}NO$ ; 融点(塩酸塩として): 176-177°C; UV  $\lambda_{max}$  (MeOH) nm( $\epsilon$ ): 283(1,200), 277(1,400), 226(9,300); IR  $\nu_{max}$  (KBr,  $cm^{-1}$ ): 図2に示す; HR-TOF/MS  $m/z$ : 180.1380 [calcd. for  $C_{11}H_{18}NO$ , (M+H)<sup>+</sup> 180.1383]; EI/MS( $m/z$ , %): 121(8), 78(6), 58(100); <sup>1</sup>H-NMR(500MHz,  $CDCl_3$ ,  $\delta$ ): 1.04(3H, d,  $J=6.3$ , 3-H), 1.82(br.s, NH), 2.37(3H, br.s, N-Me), 2.56(1H, dd,  $J=13.2$ , 5.7, 1-H), 2.63(1H, dd,  $J=13.2$ , 6.9, 1-H), 2.73(1H, m, 2-H), 3.77(3H, s, OMe), 6.08(2H, d,  $J=8.6$ , ph-3, 5), 6.82(2H, d,  $J=8.6$ , ph-2, 6-H); <sup>13</sup>C-NMR(125MHz,  $CDCl_3$ ,  $\delta$ ): 19.5(3), 33.9(N-Me), 42.4(1), 55.2(OMe), 56.4(2), 113.8(ph-3, 5), 130.2(ph-2, 6), 131.3(ph-1), 158.0(ph-4); TLC: 分析結果は表1に示す; LC/PDA: カラム: L-column(4.6 mm.i.d.×150mm), カラム温度: 40°C, 移動相: A液 アセトニトリル/ $H_2O$ /リン酸(300:700:1)ドデシル硫酸ナトリウム(SDS)2.8 g/L含有, B液 アセトニトリル/ $H_2O$ /リン酸(700:300:1)SDS 2.8g/L含有 グラジエント条件: 0→10min A液75%, 10→30min A液75→10%, 30→31min A液10→75%, 31→45min A液75%; 流量: 1 mL/min, 注入量10  $\mu$ L, 検出器: PDA検出器, 測定波長 200~400 nm, クロマトグラム及び吸収スペクトルは図3に示す。

#### Methylone 物理恒数, スペクトルデータ及び分析結果

$C_{11}H_{13}NO_3$ ; 融点(塩酸塩として): 223°C(分解温度); UV  $\lambda_{max}$  (MeOH) nm( $\epsilon$ ): 231(16,000), 277(6,500), 312(8,000); IR  $\nu_{max}$ (KBr, $cm^{-1}$ ): 図2に示す; HR-TOF/MS  $m/z$ , 208.0977 [calcd. for  $C_{11}H_{14}NO_3$ , (M+H)<sup>+</sup> 208.0974]; EI/MS( $m/z$ , %): 207(M<sup>+</sup>, 1), 149(7), 121(5), 91(3), 58(100); ESI/MS( $m/z$ , %): 208 [M+H]<sup>+</sup>(8), 190(36), 175(19), 160(100), 149(18), 132(67); <sup>1</sup>H-NMR (500MHz,  $CDCl_3$ ,  $\delta$ ): 1.28(3H, d,  $J=7.5$ , 3-H), 2.34(3H, s, N-Me), 4.13(1H, q,  $J=7.5$ , 2-H), 6.03(2H, s, -O-CH<sub>2</sub>-O-), 6.84(1H, d,  $J=8.0$ , 5' -H), 7.43(1H, d,  $J=1.7$ , 2' -H), 7.55(1H, dd,  $J=8.0$ , 1.7, 6' -H); <sup>13</sup>C-NMR(125MHz,  $CDCl_3$ ,  $\delta$ ): 19.9(C-3), 34.6(N-Me), 59.2(C-2), 101.8(-O-CH<sub>2</sub>-O-), 108.0(C-2'), 124.4(C-6'), 130.4(C-1'), 148.3(C-3'), 152.0(C-4'), 200.9(C-1); TLC: 表1に示す; LC/PDA: 分析条件はPMMAと同様,

クロマトグラム及び吸収スペクトルは図3に示す。

## 2. 平成18年度試買及び任意提出検体調査結果

平成18年度に試買あるいは任意提出により試験依頼されたケミカル系99製品についてLC/PDA, TLC, LC/MS, GC/MS及びNMRを適宜組み合わせ分析を行った。その結果, 表2に示したように, 70製品から35種, 85件の薬物を検出した。知事指定薬物に指定された薬物は急速に店頭から姿を消し, 18年度検出された知事指定薬物はMethylone (2製品), PMMA及び3CPP (各1製品) の3種であった。Methylone及びPMMAは平成18年9月8日と18年度途中に指定されたものであり, 特にMethyloneは18年9月の指定前には9製品から検出される, 非常に汎用される薬物であったことから, 都条例の効果は顕著であるといえる。なおその後, 3CPPは平成18年10月13日, Methyloneは平成19年2月3日に麻薬に, また, PMMAは平成19年4月1日薬事法指定薬物に指定された。

このほか薬事法指定薬物に指定された薬物ではIsobutyl nitrite, Isopropyl nitrite, 4-AcO-DIPT, 2C-E, 2C-T-2, 2C-C, 5-MeO-DALT, TMA-6, 4-HO-DIPT, 4FMP, BDB, 5-MeO-DPT, 5-MeO-DMT, 4MPP, MMDA-2及び2C-T-4の16種が検出された。そのほか, 4FMA, *n*-amyl nitrite, 2AI, 4-HO-MIPT, 1,4-BD, 4-AcO-MIPT及びDOIの7種の既知薬物が検出された。さらに新規薬物として2-methylbutyl nitrite, 2C-C-3, 2C-T-2-OH, FLEA, DOC, MDPV, *N*-ethylcathinone, PEA及び5-HO-tryptophanの9種が検出された。新規薬物の詳細については別途報告<sup>6)</sup>する。

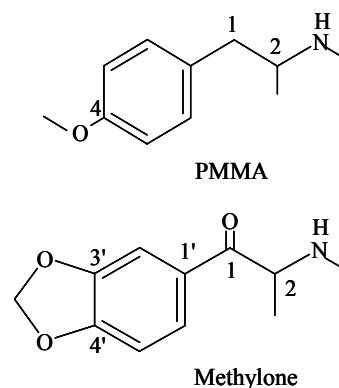


図1. 2種の知事指定薬物の構造式

表1. PMMA及びMethyloneのTLCデータ

|           | Rf値  |       | UV366nm | ニンヒドリン試薬  | ドラーゲンドルフ試薬<br>及び10%硫酸溶液 |
|-----------|--|-------|---------|-----------|-------------------------|
|           | 展開溶媒A                                      | 展開溶媒B |         |           |                         |
| PMMA      | 0.44                                       | 0.30  | —       | 淡紫        | 橙                       |
| Methylone | 0.60                                       | 0.33  | 淡青蛍光    | 赤紫        | ±                       |
|           | 展開溶媒A: $CHCl_3/CH_3OH/28\%NH_4OH(75:25:1)$ |       |         | ±: わずかに呈色 |                         |
|           | 展開溶媒B: $BuOH/AcOH/H_2O(7:1:2)$             |       |         | —: 呈色しない  |                         |

表 2. 平成 18 年度検出薬物

| 略称                       | IUPAC 名  | 検出件数** | 備考 |
|--------------------------|--|--------|----|
| <b>Methylone*</b>        | 2-methylamino-1-(3,4-methylenedioxyphenyl)propan-1-one   | 11(2)  | 1) |
| 3CPP                     | 1-(3-chlorophenyl)-piperazine  | 1(1)   | 2) |
| <b>PMMA*</b>             | 1-(4-methoxyphenyl)- <i>N</i> -methylpropan-2-amine  | 1      |    |
| Isobutyl nitrite         | 2-methylpropyl nitrite   | 18     |    |
| Isopropyl nitrite        | 2-propyl nitrite   | 2      |    |
| 4-AcO-DIPT               | 3-{2-[di(2-propyl)amino]ethyl}-1 <i>H</i> -indol-4-yl acetate                                  | 4      |    |
| 2C-E                     | 2-(4-ethyl-2,5-dimethoxyphenyl)ethanamine  | 1      |    |
| 2C-T-2                   | 2-[4-(ethylthio)-2,5-dimethoxyphenyl]ethanamine  | 1      |    |
| 2C-C                     | 2-(4-chloro-2,5-dimethoxyphenyl)ethanamine   | 2      |    |
| 5-MeO-DALT               | <i>N</i> -(2-propenyl)- <i>N</i> -[2-(5-methoxy-1 <i>H</i> -indol-3-yl)ethyl]prop-2-en-1-amine | 4      | 3) |
| TMA-6                    | 1-(2,4,6-trimethoxyphenyl)propan-2-amine   | 4      |    |
| 4-HO-DIPT                | 3-{2-[di(2-propyl)amino]ethyl}-1 <i>H</i> -indol-4-ol  | 3      |    |
| 4FMP                     | 1-(4-fluorophenyl)propan-2-amine   | 5      |    |
| BDB                      | 1-(benzo[ <i>d</i> ][1,3]dioxol-5-yl)butan-2-amine   | 1      |    |
| 5-MeO-DPT                | <i>N</i> -[2-(5-methoxy-1 <i>H</i> -indol-3-yl)ethyl]- <i>N</i> -propylpropan-1-amine          | 3      |    |
| 5-MeO-DMT                | 2-(5-methoxy-1 <i>H</i> -indol-3-yl)- <i>N,N</i> -dimethylethanamine                           | 1      |    |
| 4MPP                     | 1-(4-methoxyphenyl)-piperazine   | 1      |    |
| MMDA-2                   | 1-(6-methoxybenzo[ <i>d</i> ][1,3]dioxol-5-yl)propan-2-amine                                   | 2      |    |
| 2C-T-4                   | 2-[4-(2-propylthio)-2,5-dimethoxyphenyl]ethanamine   | 1      |    |
| 4FMA                     | 1-(4-fluorophenyl)- <i>N</i> -methylpropan-2-amine   | 1      |    |
| 4-HO-MIPT                | 3-{2-[isopropyl(methyl)amino]ethyl}-1 <i>H</i> -indol-4-ol                                     | 2      |    |
| <i>n</i> -amyl nitrite   | pentyl nitrite   | 1      |    |
| 1,4-BD                   | butane-1,4-diol  | 1      | 4) |
| 2AI                      | 2,3-dihydro-1 <i>H</i> -inden-2-amine  | 2      |    |
| 4-AcO-MIPT               | 3-{2-[methyl(2-propyl)amino]ethyl}-1 <i>H</i> -indol-4-yl acetate                              | 1      |    |
| DOI                      | 1-(4-iodo-2,5-dimethoxyphenyl)propan-2-amine   | 1      |    |
| 2-methylbutyl nitrite    | 2-methylbutyl nitrite  | 1      |    |
| 2C-C-3                   | 2-(2,4,5-trichloro-3,6-dimethoxyphenyl)ethanamine  | 2      |    |
| 2C-T-2-OH                | 2-[4-(2-aminoethyl)-2,5-dimethoxyphenylthio]ethanol  | 1      |    |
| FLEA                     | <i>N</i> -[1-(benzo[ <i>d</i> ][1,3]dioxol-5-yl)propan-2-yl]- <i>N</i> -methylhydroxylamine    | 2      | 5) |
| MDPV                     | 1-(benzo[ <i>d</i> ][1,3]dioxol-5-yl)-2-(pyrrolidin-1-yl)pentan-1-one                          | 1      |    |
| <i>N</i> -ethylcathinone | 2-(ethylamino)-1-phenylpropan-1-one  | 1      |    |
| DOC                      | 1-(4-chloro-2,5-dimethoxyphenyl)propan-2-amine   | 1      |    |
| PEA                      | 2-phenylethanamine   | 1      |    |
| 5-HO-tryptophan          | 2-amino-3-(5-hydroindolin-3-yl)propanoic acid  | 1      |    |
| 検出薬物 35 種                |  | 85 件   |    |

\* 知事指定薬物 (太字 : 第 4 回指定) \*\* ( ) 内は知事指定薬物件数  
 1)平成 19.2.3 麻薬指定 2)平成 18.10.13 麻薬指定 3)平成 19.4.1 薬事法指定薬物 4)既知薬物 5)新規薬物

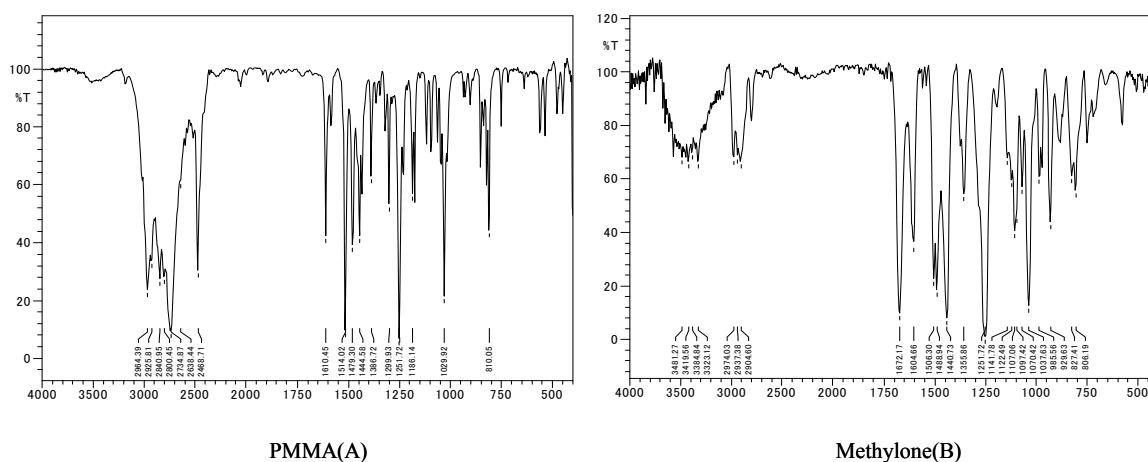


図2. PMMA(A)及びMethlyone(B)のIRスペクトル

## まとめ

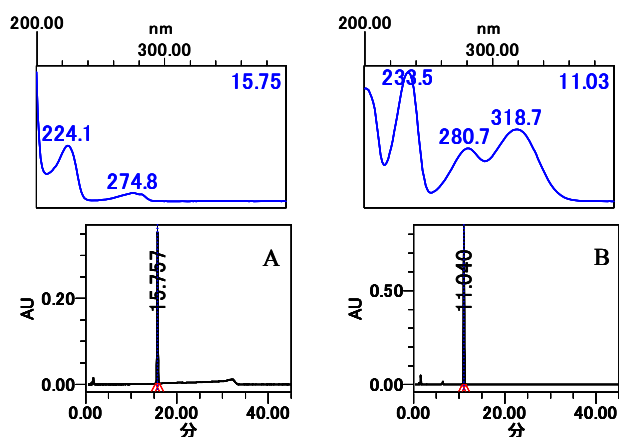


図3. PMMA(A)及びMethlyone(B)のLC/PDAスペクトル

## 考察

条例制定後、東京都の違法ドラッグ対策が効を奏し、ドラッグ取扱店の縮小や、都外への移転が続いている。同時にインターネット上での販売も様変わりし、フリーではなく、個人会員でなければ購入できないサイトが増えるなど、販売形態が巧妙化している。さらに化学構造の一部を変化させた新規ドラッグの出現も続いている<sup>6)</sup>。知事指定薬物の一部は麻薬に指定されたり、薬事法の改正によって、知事指定薬物が薬事法指定薬物となるなど、現在は条例による指定薬物は無い。新規薬物の出現が続いている状況から、今後も薬事法指定薬物の試験検査を引き続き行っていくと共に、条例による知事指定薬物の追加と取り締まりは必要であると考えている。

1. 第4回知事指定薬物 Methlyone 及び PMMA の融点、UV, IR, HR-TOF/MS, EI/MS, ESI/MS, TLC, LC/PDA 及び NMR の各種スペクトルデータを測定した。

2. 平成18年度に試買あるいは試験依頼された、ケミカル系ドラッグ99製品の分析を行った。その結果、70製品から35種、85件の薬物を検出した。このうち知事指定薬物は Methlyone (2製品), PMMA及び3CPP (各1製品) の3種であった。その後3CPP及びMethlyoneは、平成18年10月13日及び平成19年2月3日に麻薬に指定された。また、本年度東京都として始めて検出した薬物は、2-methylbutyl nitrite, 2C-T-2-OH, FLEA, DOC, MDPV, 5-HO-tryptophan, N-ethylcathinone, PEA及び2C-C-3の9種であった。

3. 検出された、PMMAを含むIsobutyl nitrite, Isopropyl nitrite, 4-AcO-DIPT, 2C-E, 2C-T-2, 2C-C, BDB, 5-MeO-DALT, TMA-6, 4-HO-DIPT, 4FMP, 5-MeO-DPT, 5-MeO-DMT, 4MPP, MMDA-2 及び2C-T-4の17種の薬物は平成19年4月1日から薬事法指定薬物に該当するものである。

## 文献

- 1) 長嶋真知子, 瀬戸隆子, 高橋美佐子, 他: 東京健安研七周年報, **56**, 59-64, 2005
- 2) 長嶋真知子, 瀬戸隆子, 高橋美佐子, 他: 東京健安研七周年報, **55**, 67-71, 2004
- 3) 鈴木仁, 高橋美佐子, 瀬戸隆子, 他: 東京健安研七周年報, **57**, 115-120, 2006
- 4) 長嶋真知子, 瀬戸隆子, 高橋美佐子, 他: 東京健安研七周年報, **57**, 109-113, 2006
- 5) 瀬戸隆子, 高橋美佐子, 長嶋真知子, 他: 東京健安研七周年報, **56**, 75-80, 2005
- 6) 高橋美佐子, 鈴木仁, 瀬戸隆子, 他: 東京健安研七周年報, **58**, 83-87, 2007