

## 第3回知事指定薬物のスペクトルデータと平成17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 the 3<sup>rd</sup> Governor-designated Drugs and the Analyses of Uncontrolled Drugs Purchased Apr. 2005-Mar. 2006

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

**Keywords:** 脱法ドラッグ uncontrolled drugs, 知事指定薬物 governor-designated drugs, 5-MeO-AMT 3-(2-aminopropyl)-5-methoxyindole, TMA-2 2,4,5-trimethoxyamphetamine, 2C-T-2 2,5-dimethoxy-4-ethylthiophenethylamine, PMMA 4-methoxyphenyl-*N*-methyl-2-propanamine, 4FMA 4-fluoro-*N*-methylamphetamine, MDBZP 1-piperonylpiperazine, MDMA-2 2-methoxy-4,5-methylenedioxyamphetamine

#### はじめに

東京都では、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」（いわゆる脱法ドラッグ条例）を定め、危険性があると判断した薬物は、条例で知事指定薬物に指定し、製造、販売ならびに濫りに使用することを規制することとなった。第1回知事指定薬物として2C-I, MBDB（平成18年4月22日に麻薬指定）及び5-MeO-MIPTを、第2回として3CPP（平成18年10月13日に麻薬指定）を指定し規制している。平成18年2月にはそれまでに指定された4種に加え、3種の薬物、すなわち3-(2-アミノプロピル)-5-メトキシインドール（以下5-MeO-AMTと略す）、2,4,5-トリメトキシアンフェタミン（以下TMA-2と略す；平成18年10月13日に麻薬指定）及び2,5-ジメトキシ-4-エチルチオフェネチルアミン（以下2C-T-2と略す）を第3回として知事指定薬物に加えた。これらの薬物は、いずれも幻覚作用を示す薬物で、都内に既に流通しており、国外では何らかの規制を受けている。2C-T-2に関しては最近の試買調査の結果からあまり多くなかったが、平成15年に2C-T-2が原因と思われる健康被害事例が発生している。既報<sup>2)</sup>に引き続きこれら3種の薬物の物理恒数及びスペクトルデータならびに平成17年度の試買調査の結果を報告する。

#### 実験方法

##### 1. 3種の知事指定薬物

著者らが都内の店頭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、知事指定薬物候補物質の精製・単離を行った。

##### 2. 平成17年度試買検体

薬事監視員が都内の店頭あるいはインターネットで試買した77検体中ラッシュ系を除くケミカル系ドラッグ35検体について分析した。

##### 3. 分析方法

3種の知事指定薬物は既報<sup>2)</sup>にしたがって分析を行った。また平成17年度試買検体は、既報<sup>1)</sup>にしたがって高速液体クロマトグラフィー-フォトダイオードアレイ検出法（以下HPLC-PDAと略す）によるライブラリー検索及び薄層クロマトグラフ法（以下TLCと略す）でスクリーニングを行い質量分析計付高速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（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。

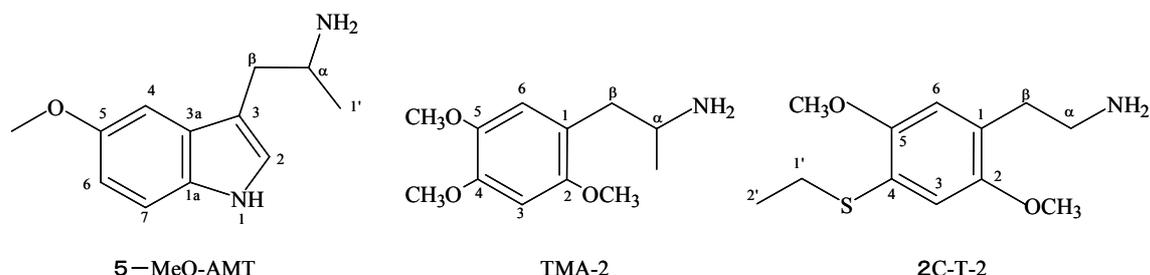


図1. 3種の知事指定薬物の構造式

\* 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

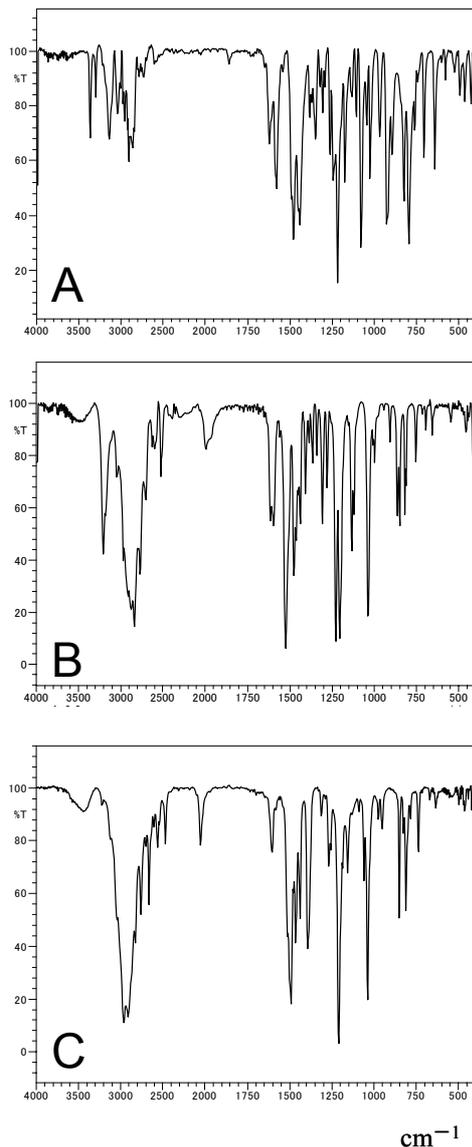


図2. 5-MeO-AMT(A), TMA-2(B)及び2C-T-2(C)のIRスペクトル

## 結果及び考察

### 1. 3種の知事指定薬物の物理恒数及びスペクトルデータ

新たに知事指定薬物に追加指定された3種の薬物5-MeO-AMT, TMA-2及び2C-T-2の構造式を図1に, 各々の物理恒数及び各種スペクトルを以下に示す.

**5-MeO-AMT**  $C_{12}H_{16}N_2O$ , 融点(塩酸塩として); 220-222°C, UV  $\lambda_{max}$  [MeOH, nm, ( $\epsilon$ ) 297 (5,000), 277 (6,300)], IR  $\nu_{max}$  (KBr,  $cm^{-1}$ ) 図2に示す, HR-TOF/MS  $m/z$ , 205.1357 [calcd. for  $C_{12}H_{17}N_2O$ , (M+H)<sup>+</sup> 205.1341], EI/MS ( $m/z$ , %) 204 (M<sup>+</sup>, 3), 161 (100), 146 (22), 117 (15), 44 (48), ESI/MS ( $m/z$ , %) 205 [M+H]<sup>+</sup> (100), 188 (50), 162 (2.5), 147 (1), <sup>1</sup>H-NMR (500MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 1.18 (3H, d,  $J=6.3$ ,  $\alpha$ -Me), 1.53 (br.s, NH<sub>2</sub>), 2.64 (1H, dd,  $J=14.3$ , 8.6,  $\beta$ -Ha), 2.85 (1H, dd,  $J=14.3$ , 5.2,  $\beta$ -Hb), 3.29 (1H, m,  $\alpha$ -H), 3.87 (3H, s, OMe), 6.87 (1H, dd,  $J=8.6$ , 2.3, 6-H), 7.02 (1H, br.s, 2-H), 7.05 (1H,

d,  $J=2.3$ , 4-H), 7.25 (1H,  $J=8.6$ , 7-H), 8.17 (br.s, NH), <sup>13</sup>C-NMR (125MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 23.8 ( $\alpha$ -Me), 36.0 ( $\beta$ ), 47.2 ( $\alpha$ ), 56.0 (5-OMe), 101.0 (4), 111.8 (7), 112.1 (6), 113.5 (3), 123.3 (2), 128.1 (3a), 131.5 (1a), 153.9 (5)

**TMA-2**  $C_{12}H_{19}NO_3$ , 融点(塩酸塩として), 189-190°C, UV  $\lambda_{max}$  [MeOH, nm, ( $\epsilon$ ) 291 (4,000), 232 (7,000)], IR  $\nu_{max}$  (KBr,  $cm^{-1}$ ) 図2に示す, HR-TOF/MS  $m/z$ , 226.1453 [calcd. for  $C_{12}H_{20}NO_3$ , (M+H)<sup>+</sup> 226.1443], EI/MS ( $m/z$ , %) 225 (M<sup>+</sup>, 2), 182 (80), 167 (34), 151 (12), 139 (7), 121 (2), 44 (100), ESI/MS ( $m/z$ , %) 50V, 226 [M+H]<sup>+</sup> (100), 209 (41), <sup>1</sup>H-NMR (500MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 1.11 (3H, d,  $J=6.3$ ,  $\alpha$ -Me), 1.47 (br.s, NH<sub>2</sub>), 2.49 (1H, dd,  $J=13.2$ , 8.0,  $\beta$ -Ha), 2.67 (1H, dd,  $J=13.2$ , 5.3,  $\beta$ -Hb), 3.16 (1H, m,  $\alpha$ -H), 3.79 (3H, s, 2-OMe), 3.83 (3H, s, 5-OMe), 3.88 (3H, s, 4-OMe), 6.53 (1H, s, 3-H), 6.70 (1H, s, 6-H), <sup>13</sup>C-NMR (125MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ), 23.4 ( $\alpha$ -Me), 40.4 ( $\beta$ ), 47.4 ( $\alpha$ ), 56.2 and 56.2 (each 2 and 4-OMe), 56.6 (5-OMe), 97.7 (3), 115.1 (6), 119.5 (1), 142.7 (5), 148.0 (4), 151.8 (2)

**2C-T-2**  $C_{12}H_{19}NO_2S$ , 融点(塩酸塩として), 202-204°C<sup>3)</sup>, UV  $\lambda_{max}$  [MeOH, nm, ( $\epsilon$ ) 305 (5,700), 255 (5,200)], IR  $\nu_{max}$  (KBr,  $cm^{-1}$ ) 図2に示す, EI/MS ( $m/z$ , %) 241 (M<sup>+</sup>, 29), 212 (100), 197 (18), 183 (38), 153 (16), 138 (7), 122 (5), 91 (5), <sup>1</sup>H-NMR (500MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 1.28 (3H, t,  $J=7.5$ , 2'), 1.78 (br.s, NH<sub>2</sub>), 2.73 (2H, t,  $J=6.9$ ,  $\beta$ -H), 2.89 (2H, q,  $J=7.5$ , 1'), 2.92 (2H, t,  $J=6.9$ ,  $\alpha$ -H), 3.77 (3H, s, 5-OMe), 3.82 (3H, s, 2-OMe), 6.67 (1H, s, 3-H), 6.83 (1H, s, 6-H), <sup>13</sup>C-NMR (125MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 14.3 (2'), 26.9 (1'), 34.4 ( $\beta$ ), 42.1 ( $\alpha$ ), 56.2 (2-OMe), 56.5 (5-OMe), 113.8 (3 or 6), 113.9 (3 or 6), 122.3 (4), 127.1 (1), 151.7 (2 or 5), 151.9 (2 or 5)

### 2. 平成17年度薬物分析調査

#### 1) 検出薬物

ケミカル系ドラッグ試買品75検体のうちラッシュ系を除く35検体について分析したが, このうち37%がインターネットで購入したものである. 分析結果を表1に示した. 特に薬物が検出されなかったもの7検体を除き28検体から18種34件の薬物を検出した. 7種の知事指定薬物のうち指定後も検出されたものは, 5-MeO-MIPT3検体だけであり, 今回新規に検出された薬物は4-methoxyphenyl-N-methyl-2-ropanamine (PMMA), 4-fluoro-N-methylamphetamine (4FMA), 1-piperonylpiperazine (MDBZP) 及び2-methoxy-4,5-methylenedioxyamphetamine (MMDA-2)の4種である.

#### 2) 新規薬物の構造とスペクトルデータ

新規に見出した4種の薬物の構造式は図3に, 各種機器分析データを, HR-TOF/MSは表2に, EI/MSは表3に, HPLC-PDAは図4に, NMRは表4~7に示した. これらのデータを

総合して4種の薬物の構造を確定し、このうちMDBZPについては試薬として販売されていた東京化成工業(株)の1-piperonylpiperazineと機器分析データが一致した。

PMMA <sup>13</sup>C-NMR で炭素シグナル9本が検出され、<sup>1</sup>H-NMRで1,4-置換ベンゼン、2重線に割れたメチル基などからα-メチルのフェネチルアミン骨格が推定されたほか、メ

トキシ基が1個、N-メチルが1個認められた。HPLC-PDAで16分に溶出し、フェネチルアミン系薬物では220 nm及び275 nm付近に極大吸収が特徴的に見られるが、本薬物はやや長波長側にシフトしており、224 nm及び277 nmに極大吸収が見られた。

表1. 平成17年度検出薬物

	略称名	IUPAC名/化合物名	検出件数	
知事指定 薬物	5-MeO-MIPT	<i>N</i> -(2-(5-methoxy-1 <i>H</i> -indol-3-yl)ethyl)- <i>N</i> -methylpropan-2-amine 3-[2-(isopropylmethylamino)ethyl]-5-methoxyindole	3	
	TMA-2*	1-(2,4,5-trimethoxyphenyl)propan-2-amine 2,4,5-trimethoxyamphetamine	2	
	5-MeO-AMT*	1-(5-methoxy-1 <i>H</i> -indol-3-yl)propan-2-amine 3-(2-aminopropyl)-5-methoxyindole	1	
新規薬物	PMMA	1-(4-methoxyphenyl)- <i>N</i> -methylpropan-2-amine 4-methoxyphenyl- <i>N</i> -methyl-2-propanamine	3	
	4FMA	1-(4-fluorophenyl)- <i>N</i> -methylpropan-2-amine 4-fluoro- <i>N</i> -methylamphetamine	2	
	MDBZP	1-(benzo[ <i>d</i> ][1,3]-dioxol-5-ylmethyl)piperazine 1-piperonylpiperazine	1	
	MMDA-2	1-(6-methoxybenzo[ <i>d</i> ][1,3]dioxol-5-yl)propan-2-amine 2-methoxy-4,5-methylenedioxyamphetamine	1	
既知薬物	2C-C	2-(4-chloro-2,5-dimethoxyphenyl)ethanamine 2,5-dimethoxy-4-chlorophenethylamine	2	
	2C-E	2-(4-ethyl-2,5-dimethoxyphenyl)ethanamine 2,5-dimethoxy-4-ethylphenethylamine	2	
	Methylone	1-(benzo[ <i>d</i> ][1,3]dioxol-5-yl)-2-(methylamino)propane-1-one 2-methylamino-1-(3,4-methylenedioxyphenyl)propane-1-one	7	
	5-MeO-DMT	2-(5-methoxy-1 <i>H</i> -indol-3-yl)- <i>N,N</i> -dimethylethanamine 5-methoxy- <i>N,N</i> -dimethyltryptamine	1	
	5-MeO-DPT	<i>N</i> -(2-(5-methoxy-1 <i>H</i> -indol-3-yl)ethyl)- <i>N</i> -propylpropan-1-amine 5-methoxy- <i>N,N</i> -dipropyltryptamine	1	
	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 5-methoxy- <i>N,N</i> -diallyltryptamine	1	
	4-AcO-DIPT	3-(2-(di(2-propyl)amino)ethyl)-1 <i>H</i> -indol-4-ylacetate 4-acetoxy- <i>N,N</i> -diisopropyltryptamine	3	
	TMA-6	1-(2,4,6-trimethoxyphenyl)propan-2-amine 2,4,6-trimethoxyamphetamine	1	
	4FMP	1-(4-fluorophenyl)propan-2-amine 4-fluoroamphetamine	1	
	2C-T-4	2-(4-(2-propylthio)-2,5-dimethoxyphenyl)ethanamine 2,5-dimethoxy-4-isopropylthiophenethylamine	1	
	4-HO-MIPT	3-(2-(isopropyl(methyl)amino)ethyl)-1 <i>H</i> -indol-4-ol <i>N</i> -isopropyl-4-hydroxy- <i>N</i> -methyltryptamine	1	
	検出薬物	18種		34件

\*指定前の試買品からの検出

表2. 新規薬物の組成式及びHR-TOF/MSデータ

薬物	組成式(分子量)	[M+H] <sup>+</sup> (理論値)
PMMA	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> NO (179)	180.1380 (180.1383)
4FMA	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> FN (167)	168.1182 (168.1183)
MDBZP	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> (220)	221.1299 (221.1296)
MMDA-2	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub> (209)	210.1141 (210.1136)

HR-TOF/MSから、分子組成C<sub>11</sub>H<sub>17</sub>NOと計算され、EI/MSではM<sup>+</sup>は認められないが、N-α位の開裂によるm/z 58がベースピークとして、m/z 121が8%の強度で観察され、4位にメトキシ基の付いたメタンフェタミンと考えられた。

**4FMA** NMRで炭素シグナル8本が検出され、ベンゼン環のプロトンが、異常に分裂していることから、4位にフッ素が置換している1,4-置換ベンゼンと考えられる。2重線に割れたメチル基などからα-メチルのフェネチルアミン骨格が推定されたほかN-メチルが認められた。HPLC-PDAで18分に溶出し、極大吸収は207 nm及び、263 nmであり、フェネチルアミン系薬物の特徴的な極大吸収からややシフトが見られた。HR-TOF/MSから、分子組成C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>FNと計算され、EI/MSではM<sup>+</sup>は認められないが、N-α開裂によるm/z 58がベースピークとして観察され、4位にフッ素の結合したメタンフェタミンと考えられ、4FMPデータとの比較からも4FMPのメチル化体が支持された。

**MDBZP** NMRで炭素シグナル10本が検出され、1,3,4-置換ベンゼンが想定され、BZPとの比較から、ピペラジン誘導体と考えられた。HPLC-PDAは26分に溶出し、241 nm及び284 nmに極大吸収を示した。HR-TOF/MSから、分子組成C<sub>12</sub>H<sub>16</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>と計算され、EI/MSではm/z 220に親ピーク、135にベースピークが観察され、ライブラリー検索(NIST02.L)の結果、piperanyl piperazineで登録された物質と一致した。

**MMDA-2** NMRで炭素シグナル11本が検出され、4置換ベンゼンと考えられる。2重線に割れたメチル基などからα-メチルのフェネチルアミン骨格が推定されたほかメトキシ基などが観察された。HPLC-PDAで15分に溶出し、238 nm

表3. 新規薬物のEI/MSデータ m/z(%)

PMMA	121(8),78(6),58(100)
4FMA	109(3),95(4),72(4),58(100)
MDBZP	220(M <sup>+</sup> ,22),178(14),135(100),85(21),56(18)
MMDA-2	209(M <sup>+</sup> ,4),166(100),151(28),44(64)

及び302 nm付近に極大吸収が見られた。HR-TOF/MSから、分子組成C<sub>11</sub>H<sub>15</sub>NO<sub>3</sub>と計算され、EI/MSではm/z 209に親ピーク、N-α位で解裂しm/z 166にベースピークが、m/z 44が64%の強度で観察され、ライブラリー検索(NIST02.L)の結果、MMDA-2で登録された物質と一致した。

脱法ドラッグ条例制定による取り締まり強化の結果、脱法ドラッグの販売は、アダルトショップやドラッグ専門店から、インターネット販売へと変化しており、今回の試買もインターネット販売での入手が約1/3となっている。知事指定薬物のうち、5-MeO-MIPTが3件、また条例指定前の試買品であるが、TMA-2が2件、5-MeO-AMTが1件検出された。これまでは条例で指定された薬物は、市場から姿を消す傾向がみられた。しかし指定以外の薬物が15種検出され、このうち、PMMA、4FMA、MDBZP及びMMDA-2の4種が新規に発見された薬物である。これらの結果から、今後も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。

### まとめ

- 3種の知事指定薬物5-MeO-AMT、TMA-2及び2 C-T-2の物理恒数とUV, IR, HR-TOF/MS, EI/MS, ESI/MS及びNMRの各種スペクトルデータを測定した。
- 試買調査の結果、知事指定薬物のうち、5-MeO-MIPTが3件、また条例指定前の試買品であるが、TMA-2が2件、5-MeO-AMTが1件検出された。またPMMA、4FMA、MDBZP及びMMDA-2の4種が新規に発見された。

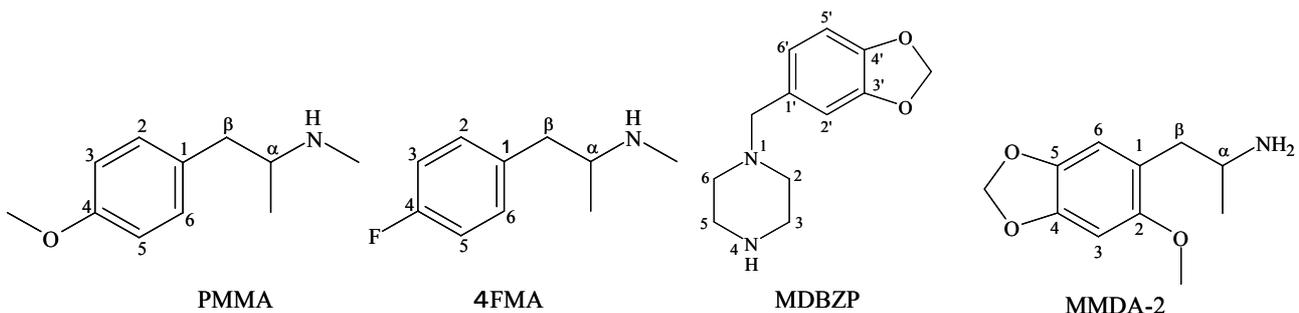


図3. 新規に確認された4種の薬物の構造式

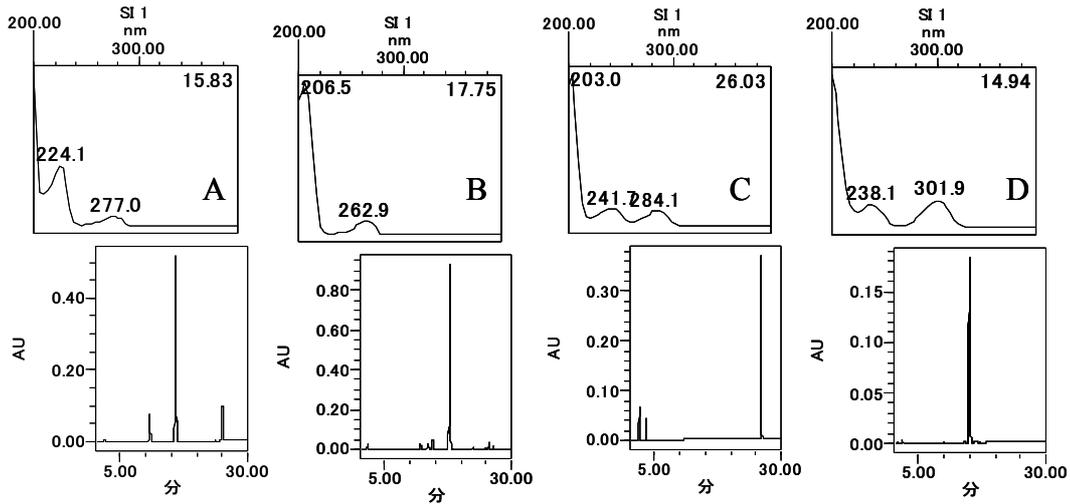


図4. PMMA(A),4FMA(B),MDBZP(C)及びMMDA-2(D)のLC-PDAスペクトル

表4. PMMAのケミカルシフト値及びカップリング定数

	<sup>13</sup> C (CDCl <sub>3</sub> )δ	<sup>1</sup> H (CDCl <sub>3</sub> )δ
1	131.3	
2, 6	130.2	7.08 (2H, d, J=8.6)
3, 5	113.8	6.82 (2H, d, J=8.6)
4	158.0	
O-Me	55.2	3.77 (3H, s)
α	56.4	2.73 (1H, br.s)
β	42.4	2.56 (2H, dd, J=13.2, 5.7) 2.63 (2H, dd, J=13.2, 6.9)
α-Me	19.5	1.04 (3H, d, J=6.3)
N-Me	33.9	2.37 (3H, br.s)
NH		1.82 (br.s)

表5. 4FMAのケミカルシフト値及びカップリング定数

	<sup>13</sup> C(CDCl <sub>3</sub> )δ	<sup>1</sup> H(CDCl <sub>3</sub> )δ
1	135.0	
2, 6	130.6 (d, J=6.3)*	7.12 (2H, ddt, J=8.6, 5.7, 2.3)
3, 5	115.2 (d, J=21.4)*	6.95 (2H, tt, J=8.6, 2.3)
4	161.5 (d, J=242.7)*	
α	56.4	2.74 (1H, sextet, J=6.3)
β	42.4	2.64 (1H, dd, J=13.2, 6.9) 2.57 (1H, dd, J=13.2, 6.3)
α-Me	19.5	1.03 (3H, d, J=6.3)
N-Me	33.9	2.83 (3H, s)

\* C-F カップリング定数

表6. MDBZPのケミカルシフト値及びカップリング定数

	<sup>13</sup> C (C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> )δ	<sup>1</sup> H (C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> )δ
2, 6	54.3	2.36 (4H, br. s)
3, 5	46.0	2.84 (4H, t, J=4.9)
N-CH <sub>2</sub> -	63.3	3.36 (2H, s)
NH		2.00 (br.s)
1'	131.9	
2'	122.2	6.70* (1H, s )
3'	147.5	
4'	146.5	
5'	107.8	6.71* (1H, s )
6'	109.6	6.82 (1H, br. s)
O-CH <sub>2</sub> -O	100.8	5.90 (2H, s)

\*:入れ替わりうる

表7. MMDA-2のケミカルシフト値及びカップリング定数

	<sup>13</sup> C (CDCl <sub>3</sub> )δ	<sup>1</sup> H (CDCl <sub>3</sub> )δ
1	120.2	
2	152.6	
3	94.7	6.52 (1H, s)
4	146.4	
5	140.7	
6	110.6	6.64 (1H,s)
α	47.4	3.12 (1H, sextet like m)
β	40.8	2.46 (1H, dd, J=13.2, 8.0) 2.63 (1H, dd, J=13.2, 5.2)
α-Me	23.5	1.09 (3H, J=6.3)
NH <sub>2</sub>		1.50
O-CH <sub>2</sub> -O	100.9	5.89 (2H, s)
OMe	56.3	3.75 (3H, s)

文 献

1) 長嶋真知子, 瀬戸隆子, 高橋美佐子, 他: 東京健安研七年報, 55, 67-71, 2004  
 2) 長嶋真知子, 瀬戸隆子, 高橋美佐子, 他: 東京健安研七

年報, 56, 59-64, 2005  
 3) Shulgin, Al. and Shulgin, An., Pihkal a chemical love story, 557-561, Transform press, Berkel