

ハイブリッド四重極-オービトラップ質量分析計を用いた危険ドラッグ一斉分析法の構築

高橋和長、山崎翠、印南佳織、松尾千鶴子、吉田智也

Simultaneous Determination of Dangerous Drugs with Hybrid Quadrupole-Orbitrap Mass Spectrometer

Kazunaga TAKAHASHI, Midori YAMAZAKI, Kaori INNAMI, Chizuko MATSUO and Tomoya YOSHIDA

要旨

危険ドラッグの分析をより迅速かつ検出の漏れがないようにするため、新たに導入された超高速液体クロマトグラフ-四重極-オービトラップ質量分析計を用いて危険ドラッグの一斉分析法を検討した。コアシェル型カラム及び高極性化合物用カラムを併用することで、分析を行った麻薬や指定薬物を良好に検出することができた。また、超高速分離用のカラムを用いたことで、従来よりも分析に要する時間を短縮することができた。さらに、標準品の分析により得られた保持時間やプロダクトイオンスペクトルの情報を予め解析ソフトに入力することで、指定薬物等を自動解析により容易に検出することが可能になった。

キーワード：危険ドラッグ、指定薬物、超高速液体クロマトグラフ-四重極-オービトラップ質量分析計、一斉分析法

Keywords : dangerous drug, shitei-yakubutu, desinated substance, UHPLC-Q-Orbitrap MS, simultaneous analysis

(平成 28 年 7 月 4 日受付 平成 28 年 7 月 28 日受理)

はじめに

危険ドラッグは興奮や幻覚作用等を得ることを目的として乱用されているもので、以前は脱法ドラッグや合法ドラッグといった名称で呼ばれていたが、それを摂取した者の死亡事例が後を絶たず、また、その使用者による交通事故も多発したため、これらの危険性が明示される危険ドラッグという名称に変わった。相次ぐ事件や事故により、危険ドラッグが社会的に重大な問題であると認識され、それに伴い規制や取り締まりの強化が行われた。その危険ドラッグへの粘り強い対策によって、国内で危険ドラッグを販売する店舗がなくなるなど、一見、危険ドラッグの問題は解決したかに見えるが、デリバリー販売などにより、危険ドラッグの流通はなくなってはいない。

国内で流通している危険ドラッグは、各都道府県の条例で規制されるほかに、「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」で指定薬物に指定されることで主に規制されている。その指定薬物に指定されている物質は、既存の規制薬物の構造の一部を変えるなどして、新たな成分が次々と流通したことによって¹⁻⁸⁾、その数を増やし、3 度の包括規制を含め、現在 2000 以上にもなっている。そのため、危険ドラッグの検査では、その 2000 以上もの指定薬物の有無を判断しなければならず、検出漏れのリスクや結果の解析に時間を要すること、さらに、標準品の確保などの困難な問題がある。

千葉県では、危険ドラッグ対策事業に基づき、危険ドラッグの試験検査を行っており、これらの危険ドラッグ検査の問題に対応するために、新たに導入

された超高速液体クロマトグラフ-四重極-オービトラップ質量分析計 (UHPLC-Q-Orbitrap MS) を用いた危険ドラッグの一斉分析法を構築したので報告する。

実験方法

1. 試薬及び標準品

1) 試薬

アセトニトリルは SIGMA-ALDRICH 製の LC/MS 用を用いた。ギ酸は和光純薬工業製の LC/MS 用を用いた。メタノールは和光純薬工業製の特級品を用いた。水は Merck Millipore 製 MILLI-Q Labo 超純水製造装置により精製した超純水を用いた。

2) 標準品

PMEA 塩酸塩、2,3-DCPP 塩酸塩、Desoxy-D2PM 及び 4-Benzylpiperidine は東京化成工業製を用いた。MBDB 塩酸塩、BDB 塩酸塩、Ethcathinone、PMMA、Pyrovalerone 塩酸塩、1-(3-Methylbenzyl)piperazine、Org27569 及び 2C-P 塩酸塩は SIGMA-ALDRICH 製を用いた。AMT、3CPP 塩酸塩、Ketamine 塩酸塩、4MPP、2-Aminoindan、1,4-Butanediol (1,4-BD)、GBL、4FPP 及び 2C-H は和光純薬工業製を用いた。MBZP、MDBP 及び Diphenylprolinol は Alfa Aesar 製を用いた。5-MeO-DMT は MP BioMedicals 製を用いた。Dimethocaine 塩酸塩、Methoxetamine 塩酸塩、Methiopropamine 塩酸塩、4-Fluoroamphetamine 塩酸塩及び BMDP 塩酸塩は LGC Standards 製を用いた。Diphenidine マレイン酸塩は R&D Systems 製を用いた。Diclofensine 塩酸塩は Tronto Research Chemicals 製を用いた。その他の標準品は Cayman Chemical 製を用いた。

2. 標準溶液の調製

1,4-BD、GBL 及び MDBP とそれ以外を分けて、標準溶液を調製し、UHPLC-Q-Orbitrap MS に供した。

1) 1,4-BD、GBL 及び MDBP 以外の成分

各標準品をメタノールに溶解させ 100 µg/mL (as free base) の標準溶液となるように用時調製した。

2) 1,4-BD、GBL 及び MDBP

各標準品を 10%メタノール溶液に溶解させ 100 µg/mL (as free base) の標準溶液となるように用時調製した。

3. 陽性検体

構築した一斉分析法で、危険ドラッグ中の各成分を問題なく検出することが可能であるか調べるため、平成18年度から平成27年度までに試買し指定薬物等が検出された検体を陽性検体として、試験を行った。

4. 試験溶液の調製

陽性検体から試験溶液を調製する方法は、1,4-BD 及び GBL を含む陽性検体とそれ以外を分けて行った。

1) 1,4-BD、GBL 及び MDBP 以外の成分

指定薬物の分析法の通知（通知法）⁹⁾に準じ、次のとおり行った。

(1)分析試料

粉末：10 mg、植物細片：フィンガーマッシャー（ザルスタット製）で粉碎均一化した 100 mg、液体：50 µL を試験管にとり 10 分間減圧下蒸発乾固したもの、シート：ハサミで中心部分を含むように 1/4 に切ったもの

(2)調製方法

分析試料にメタノール 2 mL を加え、5 分間超音波抽出後、0.20 µm メンブランフィルター（Merck Millipore 製）でろ過したろ液を試験原液とした。その試験原液をメタノールで 10 倍に希釈した液を試験溶液として UHPLC-Q-Orbitrap MS に供した。

2) 1,4-BD、GBL 及び MDBP

1) で調製した試験原液を水で 10 倍に希釈した液を 0.20 µm メンブランフィルター（Merck Millipore 製）でろ過し、そのろ液を試験溶液として UHPLC-Q-Orbitrap MS に供した。

5. 分析条件

UHPLC は、デガッサー、ポンプ、オートサンプラー、カラムオーブン及びフォトダイオードアレイ検出器から構成される ThermoFisher Scientific 製 Ultimate 3000 RSLC システムを、Q-Orbitrap MS は ThermoFisher Scientific 製 Q-Exactive を用いた。キャリブレーションは毎回測定前に実施した。装置の制御は Xcalibur 3.0 ソフトウェア（ThermoFisher Scientific 製）で行った。

分析条件は 1,4-BD、GBL 及び MDBP とそれ以外の成分を分けて行った。

1) 1,4-BD、GBL 及び MDBP 以外の成分

(1)UHPLC の条件

カラム：CORTECS UPLC C18（2.1 mm i.d. ×100 mm、1.6 µm、Waters 製）、カラム温度：40℃、サンプル温度：15℃、移動相 A 液：0.1%ギ酸水溶液、移動相 B 液：0.1%ギ酸含有アセトニトリル、グラジエント条件：0-1 分；移動相 A 液/移動相 B 液（9：1）→21 分；移動相 A 液/移動相 B 液（1：9）、分析時間：21 分間、流速：0.5 mL/分、注入量：1 µL、測定波長：190 nm～400nm

(2)Q-Orbitrap MS 条件

イオン化法：加熱エレクトロスプレーイオン化（HESI）、イオン極性モード：正イオン極性モード及び負イオン極性モード、シースガス流量：60、補助ガス流量：20、スウィープガス流量：0、スプレー電圧：3.00 kV（正イオン極性モード）；-2.50 kV（負イオン極性モード）、キャピラリー温度：380℃、S-レンズ RF レベル：50、ヒーター温度：350℃

データ取得法：full MS/data-dependent acquisition モード（full MS/dd-MS² モード）、測定質量範囲： m/z 100～700、分解能（ m/z 200 における半値幅）：70000（full MS）；17500（dd-MS²）、Automatic gain control (AGC) target: 1e6（full MS）；1e5（dd-MS²）、Maximum Injection time (Maximum IT)：200 ms（full MS）；50 ms（dd-MS²）、Loop count：3（正イオン極性モード）；2（負イオン極性モード）、MSX count：1、Stepped normalized collision energy (Stepped NCE)：10、30 及び 60

2) 1,4-BD、GBL 及び MDBP

(1)UHPLC の条件

カラム：ACQUITY UPLC HSS T3（2.1 mm i.d. ×100 mm、1.8 µm、Waters 製）、カラム温度：35℃、サンプル温度：15℃、移動相 A 液：0.1%ギ酸水溶液、移動相 B 液：0.1%ギ酸含有メタノール、アイソクラティック条件：移動相 A 液/移動相 B 液（19：1）、分析時間：4 分間、流速：0.45 mL/分、注入量：5 µL、測定波長：190 nm～400 nm

(2) Q-Orbitrap MS の条件

イオン化法：HESI、イオン極性モード：正イオン極性モード、シースガス流量：60、補助ガス流量：10、スウィープガス流量：0、スプレー電圧：3.00 kV、キャピラリー温度：280℃、S-レンズ RF レベル：40、ヒーター温度：200℃

データ取得法：full MS モード及び Parallel reaction monitoring (PRM) モード、測定質量範囲： m/z 50～250、分解能（ m/z 200 における半値幅）：35000（full MS）；17500 (PRM)、AGC target: 1e6、Maximum IT: 100 ms、PRM 測定用プリカーサーイオン：91.0754（1,4-BD）；87.0441（GBL）；221.1285（MDBP）、Normalized collision energy (NCE)：10（1,4-BD 及び

GBL) ; 35 (MDBP)

6. データ解析

full MS/dd-MS²モードや PRM モードにより標準溶液から得られたプロダクトイオンスペクトルはライブラリーソフトウェア (ThermoFisher Scientific 製 Library Manager 2.0) に登録し、陽性検体から得られた試験溶液におけるライブラリーサーチに使用した。データ解析は TraceFinder 3.2 ソフトウェア (ThermoFisher Scientific 製) で行った。

結果及び考察

1. 分析条件の検討と標準品の分析結果

危険ドラッグの分析に用いたカラムは、超高速分離を目的として、全多孔性型カラムと比べて高い理論段数と低いカラム背圧を実現することが可能なコアシェル型カラムである CORTECS UPLC C18 を用いた。

マススペクトルの取得方法は、含まれている成分が不明な危険ドラッグ中の各成分についての化学式及びプロダクトイオンスペクトルの情報を短時間で網羅的に取得するために、full MS/dd-MS²モードを採用した。この full MS/dd-MS²モードは full MS モードでマススペクトルを取得すると同時に、その取得したマススペクトル中のピーク強度の高いイオンを、その強度の高い順に、指定した Loop count の回数だけプリカーサーイオンとして設定し、プロダクトイオンスペクトルを取得する方法である。この方法を用いることで、1 回の分析で、検出した成分の化学式を推定するのに利用するプロトン付加分子 ([M+H]⁺) の情報とそれをプリカーサーイオンとしたプロダクトイオンスペクトルを同時に取得することを可能とした。NCE は、多くのプロダクトイオンの情報を得ること及び最適な NCE の値が異なる様々な成分に対応するため、一つの値とせず、10、30 及び 60 の Stepped NCE とした。

分析を行った指定薬物等の成分はいずれもイオン極性モードを正イオン極性モードとして、[M+H]⁺を検出することが可能であったが、CP-47,497 (表-1 保持時間 15.75 分) の [M+H]⁺に相当するピークは小さく、full MS/dd-MS²モードでは、CP-47,497 の [M+H]⁺をプリカーサーイオンとして自動選択させることはできなかった。イオン極性モードが陰イオン極性モードの場合に得られる CP-47,497 の脱プロトン分子 ([M-H]⁻) に相当するピークは基準ピークとなるほど大きく、full MS/dd-MS²モードで [M-H]⁻をプリカーサーイオンとしたプロダクトイオンスペクトルを取得することが可能であった。そのため、CP-47,497 やその他の多様な成分に対応することを目的として、分析中にイオン極性モードを正イオン極性モードと負イオン極性モードに交互に切り替えて、データを

取得することとした。そして、CP-47,497 のみ [M-H]⁻とそれをプリカーサーイオンとし取得したプロダクトイオンスペクトルの情報を、その他の成分は [M+H]⁺とそれをプリカーサーイオンとし取得したプロダクトイオンスペクトルの情報を得ることとした。

この設定した UHPLC-Q-Orbitrap MS 条件で、指定薬物等の標準品を測定した結果を表-1、表-2、表-3 及び表-4 に示した (各表中の化合物の並び順は保持時間の短い順とした)。これらの表で示される [M+H]⁺又は [M-H]⁻の計算精密質量 (calculated exact mass) と実際に標準品を測定した際に得られた測定精密質量 (measured accurate mass) との差は、多くても 3 ppm を超えず、大部分の化合物は 1 ppm 以内に収まっていた。表中のプロダクトイオンはプロダクトイオンスペクトルでのピーク強度が高く、化合物の構造的な特徴を示していると考えられるプロダクトイオンを選び示した。また、Mass Frontier 7.0 ソフトウェア (ThermoFisher Scientific 製) により予想される化合物のフラグメントイオンと実際の測定により得られたプロダクトイオンの精密質量の差が 3 ppm 以内である場合に、Mass Frontier 7.0 ソフトウェアにより予想されたフラグメントイオンが検出されているものと推定し、そのフラグメントイオンの化学式とその化学式から計算される精密質量を表に示した。

CORTECS UPLC C18 をカラムに使用した分析法では、分析を行った標準品のうち、1,4-BD、GBL 及び MDBP 以外の成分はいずれも full MS モードで得られる全イオン電流クロマトグラム上で十分に確認できるほどのピーク強度を示し、[M+H]⁺又は [M-H]⁻をプリカーサーイオンとして得たプロダクトイオンスペクトル中で判別可能な程度のプロダクトイオンが検出できていた。そのことから、設定した移動相やその流速及び NCE などの条件で 1,4-BD、GBL 及び MDBP 以外の成分は分析が可能と考えられた。なお、超高速分離用のカラムを使用することで、1 検体に係る分析時間は、当室で従来行っていた分析法³⁾と比べて、半分以下に短縮することができた。

FUB-NPB-22、5-Fluoro NPB-22、4-AcO-DET、SDB-005 及び Mephtramine の分析結果では化合物に由来するピーク以外の不明なピークが検出された。これらの化合物の標準溶液の溶媒をメタノールからアセトニトリルに変えたところ、いずれの化合物でも、不明なピークは検出されなくなった。そのため、不明なピークは化合物がメタノールにより分解して生成したものに由来するものと思われた。なお、Mephtramine 以外の 4 物質については、その構造式中にエステル結合を有し、不明ピークのマスマスペクトル中の [M+H]⁺の精密質量及びそれをプリカーサーイオンとして得られたプロダクトイオンスペク

トルより、標準溶液の溶媒であるメタノールと一部反応してメチルエステルとなった化合物が不明ピークとして検出されたものと推定された。これらメタノールで一部が分解すると思われる化合物を含む危

険ドラッグを分析する際には、その点を留意しておく必要があると思われる。

包括規制されている指定薬物を除いた指定薬物を分析した結果を表-1で示した。BDB(表-1 保持時間

表-1 危険ドラッグ一斉分析法における指定薬物の保持時間及び主なプロダクトイオン

化合物	化学式	保持時間 (分)	プリカーサーイオン*1		プロダクトイオン*3		
			精密質量*2		精密質量/推定化学式*4		
MBZP	C ₁₂ H ₁₈ N ₂	0.64	191.1543	99.0917/C ₃ H ₁₁ N ₂ ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺	58.0561/C ₃ H ₈ N ⁺	
1-(3-Methylbenzyl)piperazine	C ₁₂ H ₁₈ N ₂	0.70	191.1543	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺	85.0760/C ₄ H ₉ N ₂ ⁺	79.0543	
2-Amoinodan	C ₉ H ₁₁ N	0.85	134.0964	117.0699/C ₉ H ₉ ⁺	115.0544	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺	
MDAI	C ₁₀ H ₁₁ NO ₂	0.93	178.0863	161.0597/C ₁₀ H ₉ O ₂ ⁺	131.0491/C ₉ H ₇ O ⁺	103.0543	
Methiopropamine	C ₈ H ₁₃ NS	0.94	156.0841	125.0419/C ₈ H ₉ S ⁺	97.0106/C ₃ H ₅ S ⁺	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺	
4-OH-MET	C ₁₃ H ₁₈ N ₂ O	0.96	219.1492	160.0757/C ₁₀ H ₁₀ NO ⁺	132.0806	72.0807/C ₄ H ₁₀ N ⁺	
N-Methyl-2-AI	C ₁₀ H ₁₃ N	0.99	148.1121	117.0699/C ₉ H ₉ ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺		
4MPP	C ₁₁ H ₁₆ N ₂ O	1.13	193.1335	176.1070/C ₁₁ H ₁₄ NO ⁺	150.0913/C ₉ H ₁₂ NO ⁺	133.0524	119.0732
5-IT	C ₁₁ H ₁₄ N ₂	1.17	175.1230	158.0964/C ₁₁ H ₁₂ N ⁺	143.0730	130.0651/C ₉ H ₈ N ⁺	117.0575
2-Fluoroamphetamine	C ₉ H ₁₂ FN	1.23	154.1027	137.0761/C ₉ H ₁₀ F ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺		
α-PBT	C ₁₂ H ₁₇ NOS	1.28	224.1104	153.0369/C ₈ H ₉ OS ⁺	125.0420	112.1121/C ₈ H ₁₄ N ⁺	97.0106/C ₃ H ₅ S ⁺
4-OH DET	C ₁₄ H ₂₀ N ₂ O	1.29	233.1648	160.0757/C ₁₀ H ₁₀ NO ⁺	115.0540	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
4-OH-MIPT	C ₁₄ H ₂₀ N ₂ O	1.32	233.1648	160.0757/C ₁₀ H ₁₀ NO ⁺	132.0806	115.0540	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺
3-Fluoroamphetamine	C ₉ H ₁₂ FN	1.37	154.1027	137.0761/C ₉ H ₁₀ F ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺		
4-Fluoroamphetamine	C ₉ H ₁₂ FN	1.40	154.1027	137.0761/C ₉ H ₁₀ F ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺		
4FPP	C ₁₀ H ₁₃ FN ₂	1.42	181.1136	164.0870/C ₁₀ H ₁₁ FN ⁺	138.0714/C ₈ H ₉ FN ⁺	124.0557/C ₈ H ₉ FN ⁺	
5-APDB	C ₁₁ H ₁₅ NO	1.46	178.1226	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	133.0648/C ₉ H ₉ O ⁺	120.0570	105.0698
2-Fluoromethamphetamine	C ₁₀ H ₁₄ FN	1.48	168.1183	137.0761/C ₉ H ₁₀ F ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺		
5-MeO-DMT	C ₁₃ H ₁₈ N ₂ O	1.62	219.1492	174.0913/C ₁₁ H ₁₂ NO ⁺	159.0681	58.0561/C ₃ H ₈ N ⁺	
6-APDB	C ₁₁ H ₁₅ NO	1.63	178.1226	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	133.0648/C ₉ H ₉ O ⁺	120.0570	105.0698
2C-H	C ₁₀ H ₁₅ NO ₂	1.64	182.1176	165.0910/C ₁₀ H ₁₃ O ₂ ⁺	150.0676	135.0441	105.0698
Mephedramine	C ₁₂ H ₁₅ NO	1.64	190.1226	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	59.5378		
3-Fluorophenmetrazine	C ₁₁ H ₁₄ FN	1.67	196.1132	178.1027/C ₁₁ H ₁₃ FN ⁺	152.0870/C ₈ H ₁₁ FN ⁺	135.0605/C ₈ H ₉ F ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
3-Fluoromethamphetamine	C ₁₀ H ₁₄ FN	1.71	168.1183	137.0761/C ₉ H ₁₀ F ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺	
4-Fluoromethamphetamine	C ₁₀ H ₁₄ FN	1.72	168.1183	137.0761/C ₉ H ₁₀ F ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺		
5-MAPDB	C ₁₂ H ₁₇ NO	1.78	192.1383	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	133.0648/C ₉ H ₉ O ⁺	105.0699	91.0540
5-MeO-AMT	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O	1.93	205.1335	188.1070/C ₁₂ H ₁₄ NO ⁺	173.0838	147.0681	
4-AcO-DMT	C ₁₄ H ₁₈ N ₂ O ₂	2.09	247.1441	202.0863/C ₁₂ H ₁₂ NO ₂ ⁺	160.0757/C ₁₀ H ₁₀ NO ⁺	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺	
2C-N	C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O ₄	2.15	227.1026	210.0761/C ₁₀ H ₁₂ NO ₄ ⁺	165.0550	151.0757	137.0597/C ₈ H ₉ O ₂ ⁺
BDB	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂	2.32	194.1176	177.0910/C ₁₁ H ₁₃ O ₂ ⁺	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	135.0441/C ₈ H ₉ O ₂ ⁺	
PMEA	C ₁₂ H ₁₉ NO	2.38	194.1539	149.0961/C ₁₀ H ₁₃ O ⁺	121.0648/C ₉ H ₉ O ⁺	109.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	91.0543
6-APB	C ₁₁ H ₁₃ NO	2.43	176.1070	159.0804/C ₁₁ H ₁₁ O ⁺	131.0491/C ₉ H ₇ O ⁺	116.0624	91.0544
5-APB	C ₁₁ H ₁₃ NO	2.44	176.1070	159.0804/C ₁₁ H ₁₁ O ⁺	131.0491/C ₉ H ₇ O ⁺	116.0622	91.0544
α-PVT	C ₁₃ H ₁₉ NOS	2.62	238.1260	167.0525/C ₉ H ₁₁ OS ⁺	126.1277/C ₈ H ₁₆ N ⁺	110.9899/C ₃ H ₅ OS ⁺	97.0106/C ₃ H ₅ S ⁺
4-OH-DIPT	C ₁₆ H ₂₂ N ₂ O	2.82	261.1961	160.0757/C ₁₀ H ₁₀ NO ⁺	114.1277/C ₉ H ₁₆ N ⁺	102.1277/C ₈ H ₁₆ N ⁺	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
Dimethocaine	C ₁₆ H ₂₆ N ₂ O ₂	2.88	279.2067	206.1176/C ₁₂ H ₁₆ NO ₂ ⁺	142.1590/C ₉ H ₂₀ N ⁺	120.0444/C ₇ H ₆ NO ⁺	89.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺
5-MAPB	C ₁₂ H ₁₅ NO	2.89	190.1226	159.0804/C ₁₁ H ₁₁ O ⁺	131.0491/C ₉ H ₇ O ⁺	91.0542	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
α-PBP piperidine analog	C ₁₅ H ₂₁ NO	2.98	232.1696	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	126.1277/C ₈ H ₁₆ N ⁺	105.0335/C ₇ H ₅ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
5-MeO-DET	C ₁₅ H ₂₂ N ₂ O	3.00	247.1805	174.0913/C ₁₁ H ₁₂ NO ⁺	159.0680	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺	
MIPT	C ₁₄ H ₂₀ N ₂	3.00	217.1699	144.0808/C ₁₀ H ₁₀ N ⁺	117.0699/C ₉ H ₉ ⁺	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺	74.0964/C ₄ H ₁₂ N ⁺
4-Chloroamphetamine	C ₉ H ₁₂ ClN	3.02	170.0731	153.0466/C ₉ H ₁₀ Cl ⁺	125.0153/C ₇ H ₆ Cl ⁺	89.0387	
2-APB	C ₁₁ H ₁₃ NO	3.06	176.1070	159.0804/C ₁₁ H ₁₁ O ⁺	133.0648/C ₉ H ₉ O ⁺	131.0491/C ₉ H ₇ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
5-MeO-MIPT	C ₁₅ H ₂₂ N ₂ O	3.09	247.1805	174.0913/C ₁₁ H ₁₂ NO ⁺	159.0680	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺	
Allylscalinine	C ₁₃ H ₁₉ NO ₃	3.30	238.1438	221.1172/C ₁₃ H ₁₇ O ₃ ⁺	180.0780	167.0703	129.0701
bk-2C-B	C ₁₀ H ₁₂ BrNO ₃	3.36	274.0073	256.9808/C ₁₀ H ₁₀ BrO ₃ ⁺	177.0784	162.0548	134.0597
4-Benzylpiperidine	C ₁₂ H ₁₇ N	3.42	176.1434	131.0855/C ₁₀ H ₁₁ ⁺	117.0698	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺	84.0808/C ₃ H ₁₀ N ⁺
4-AcO-DET	C ₁₆ H ₂₂ N ₂ O ₂	3.43	275.1754	202.0863/C ₁₂ H ₁₂ NO ₂ ⁺	160.0757/C ₁₀ H ₁₀ NO ⁺	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺	
3,4-Dimethylmethcathinone	C ₁₂ H ₁₇ NO	3.51	192.1383	174.1277/C ₁₂ H ₁₆ N ⁺	159.1045	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
5-EAPB	C ₁₃ H ₁₇ NO	3.56	204.1383	159.0804/C ₁₁ H ₁₁ O ⁺	131.0491/C ₉ H ₇ O ⁺	91.0543	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
2C-C	C ₁₀ H ₁₄ ClNO ₂	3.61	216.0786	199.0520/C ₁₀ H ₁₂ ClO ₂ ⁺	184.0288	169.0053	134.0728
5-IAI	C ₉ H ₁₀ IN	3.63	259.9931	242.9665/C ₉ H ₈ I ⁺	116.0622		
5-MeO-EIPT	C ₁₆ H ₂₄ N ₂ O	3.68	261.1961	174.0913/C ₁₁ H ₁₂ NO ⁺	159.0681	100.1121/C ₆ H ₁₄ N ⁺	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
DL-4662	C ₁₅ H ₂₃ NO ₃	3.81	266.1751	248.1645/C ₁₅ H ₂₂ NO ₃ ⁺	221.1172/C ₁₃ H ₁₇ O ₃ ⁺	151.0754/C ₉ H ₁₁ O ₂ ⁺	100.1121/C ₆ H ₁₄ N ⁺
TMA-6	C ₁₂ H ₁₉ NO ₃	3.97	226.1438	209.1172/C ₁₂ H ₁₇ O ₃ ⁺	181.0859/C ₁₀ H ₁₃ O ₃ ⁺	151.0754/C ₉ H ₁₁ O ₂ ⁺	121.0650
3,4-Dimethoxy-α-PVP	C ₁₇ H ₂₅ NO ₃	4.09	292.1907	221.1172/C ₁₃ H ₁₇ O ₃ ⁺	165.0546/C ₉ H ₉ O ₃ ⁺	151.0754/C ₉ H ₁₁ O ₂ ⁺	126.1277/C ₈ H ₁₆ N ⁺
DOC	C ₁₁ H ₁₆ ClNO ₂	4.28	230.0942	213.0677/C ₁₁ H ₁₄ ClO ₂ ⁺	185.0364/C ₉ H ₁₀ ClO ₂ ⁺	178.0989	155.0258/C ₈ H ₆ ClO ⁺
Diphenylprolinol	C ₁₉ H ₁₇ NO	4.29	254.1539	236.1434/C ₁₇ H ₁₈ N ⁺	208.1121/C ₁₅ H ₁₄ N ⁺	158.0964/C ₁₁ H ₁₂ N ⁺	130.0653
2C-B-FLY	C ₁₂ H ₁₄ BrNO ₂	4.39	284.0281	267.0015/C ₁₂ H ₁₂ BrO ₂ ⁺	188.0833	173.0598	145.0648
4F-IPV	C ₁₄ H ₂₀ FNO	4.40	238.1602	220.1496/C ₁₄ H ₁₉ FN ⁺	178.1027/C ₁₁ H ₁₃ FN ⁺	136.0557/C ₈ H ₉ FN ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺

表-1 続き

化合物	化学式	保持時間 (分)	プリカーサーイオン ^{*1}		プロダクトイオン ^{*3}		
			精密質量 ^{*2}		精密質量/推定化学式 ^{*4}		
DIPT	C ₁₆ H ₂₄ N ₂	4.41	245.2012	144.0808/C ₁₀ H ₁₀ N ⁺	114.1277/C ₇ H ₁₆ N ⁺	102.1277/C ₆ H ₁₆ N ⁺	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
5-DBFPV	C ₁₇ H ₂₃ NO ₂	4.56	274.1802	203.1067/C ₁₃ H ₁₅ O ₂ ⁺	147.0441/C ₉ H ₉ O ₂ ⁺	133.0648/C ₉ H ₉ O ⁺	126.1277/C ₈ H ₁₆ N ⁺
RH-34	C ₁₈ H ₁₉ N ₂ O ₃	4.56	326.1499	189.0659/C ₁₀ H ₉ N ₂ O ₂ ⁺	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	109.0648/C ₇ H ₉ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
Ethylphenidate	C ₁₆ H ₂₁ NO ₂	4.64	248.1645	174.1277/C ₁₂ H ₁₆ N ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺	84.0808/C ₇ H ₁₀ N ⁺	
4-AcO-DIPT	C ₁₈ H ₂₆ N ₂ O ₂	4.66	303.2067	202.0863/C ₁₂ H ₁₂ NO ₂ ⁺	160.0757/C ₁₀ H ₁₀ NO ⁺	114.1277/C ₇ H ₁₆ N ⁺	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
BMDP	C ₁₇ H ₁₇ NO ₃	4.67	284.1281	266.1176/C ₁₇ H ₁₆ NO ₂ ⁺	236.1071/C ₁₆ H ₁₄ NO ⁺	146.0600/C ₉ H ₈ NO ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
2,3-DCPP	C ₁₀ H ₁₂ Cl ₂ N ₂	4.83	231.0450	188.0028/C ₈ H ₈ Cl ₂ N ⁺	153.0342	118.0653	70.0651/C ₄ H ₈ N ⁺
Prolintane	C ₁₅ H ₂₃ N	4.93	218.1903	147.1168/C ₁₁ H ₁₅ ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
2C-E	C ₁₂ H ₁₉ NO ₂	4.99	210.1489	193.1223/C ₁₂ H ₁₇ O ₂ ⁺	178.0990	163.0754/C ₁₀ H ₁₁ O ₂ ⁺	135.0804/C ₉ H ₁₁ O ⁺
DPT	C ₁₆ H ₂₄ N ₂	5.19	245.2012	144.0808/C ₁₀ H ₁₀ N ⁺	114.1277/C ₇ H ₁₆ N ⁺	102.1277/C ₆ H ₁₆ N ⁺	86.0964/C ₄ H ₁₂ N ⁺
3,4-Dimethoxy- α -PHP	C ₁₈ H ₂₇ NO ₃	5.23	306.2064	235.1329/C ₁₄ H ₁₉ O ₃ ⁺	165.0546/C ₉ H ₉ O ₃ ⁺	151.0754/C ₁₁ H ₁₂ O ₂ ⁺	140.1434/C ₉ H ₁₈ N ⁺
Desoxy-D2PM	C ₁₇ H ₁₉ N	5.33	238.1590	167.0858/C ₁₃ H ₁₁ ⁺	143.0855/C ₁₁ H ₁₁ ⁺	117.0699	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
DOI	C ₁₁ H ₁₆ INO ₂	5.36	322.0299	305.0033/C ₁₁ H ₁₄ IO ₂ ⁺	276.9720/C ₉ H ₁₀ IO ₂ ⁺	246.9614/C ₈ H ₈ IO ⁺	178.0991
ALEPH-2	C ₁₃ H ₂₁ NO ₂ S	5.38	256.1366	239.1100/C ₁₃ H ₁₉ O ₂ S ⁺	178.0990	163.0755	135.0805
bk-IBP	C ₁₃ H ₂₁ NO	5.55	232.1696	214.1590/C ₁₅ H ₂₀ N ⁺	186.1277/C ₁₃ H ₁₆ N ⁺	170.0964/C ₁₂ H ₁₂ N ⁺	131.0855/C ₁₀ H ₁₁ ⁺
4-MeO-PCP	C ₁₈ H ₂₇ NO	5.87	274.2165	219.1429	189.1274/C ₁₃ H ₁₇ O ⁺	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺
3-MeO-PCP	C ₁₈ H ₂₇ NO	5.89	274.2165	189.1274/C ₁₃ H ₁₇ O ⁺	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	86.0964/C ₇ H ₁₂ N ⁺	81.0699/C ₆ H ₉ ⁺
Diphenidine	C ₁₉ H ₂₃ N	5.98	266.1903	181.1012/C ₁₄ H ₁₃ ⁺	166.0778	103.0542/C ₈ H ₉ ⁺	89.0964/C ₄ H ₁₂ N ⁺
2C-P	C ₁₃ H ₂₁ NO ₂	6.19	224.1645	207.1380/C ₁₃ H ₁₉ O ₂ ⁺	192.1144	163.0754/C ₁₀ H ₁₁ O ₂ ⁺	105.0699
ALEPH-4	C ₁₄ H ₂₃ NO ₂ S	6.19	270.1522	253.1257/C ₁₄ H ₂₁ O ₂ S ⁺	211.0787/C ₁₁ H ₁₅ O ₂ S ⁺	183.0474/C ₉ H ₁₁ O ₂ S ⁺	178.0989
Bromo-DragonFLY	C ₁₃ H ₁₂ BrNO ₂	6.20	294.0124	276.9859/C ₁₃ H ₁₀ BrO ₂ ⁺	248.9546/C ₁₁ H ₆ BrO ₂ ⁺	198.0679	141.0701
25H-NBOMe	C ₁₈ H ₂₃ NO ₃	6.43	302.1751	165.0910/C ₁₆ H ₁₃ O ₂ ⁺	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	109.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
25C-NBOH	C ₁₇ H ₂₆ ClNO ₃	6.47	322.1204	216.0784	199.0520/C ₁₆ H ₁₂ ClO ₂ ⁺	184.0284	107.0491/C ₇ H ₉ O ⁺
bk-IVP	C ₁₃ H ₂₃ NO	6.54	246.1852	228.1747/C ₁₆ H ₂₂ N ⁺	201.1274/C ₁₄ H ₁₇ O ⁺	170.0964/C ₁₂ H ₁₂ N ⁺	131.0855/C ₁₀ H ₁₁ ⁺
Methoxyphenidine	C ₂₀ H ₂₅ NO	6.71	296.2009	211.1117/C ₁₅ H ₁₅ O ⁺	183.1169	129.0698	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺
Naphyrone	C ₁₉ H ₂₃ NO	6.82	282.1854	211.1117/C ₁₅ H ₁₅ O ⁺	155.0491/C ₁₄ H ₉ O ⁺	141.0699/C ₁₁ H ₉ ⁺	126.1277/C ₆ H ₁₆ N ⁺
Mitragynine	C ₂₃ H ₃₀ N ₂ O ₄	6.84	399.2278	226.1438/C ₁₂ H ₂₀ NO ₃ ⁺	174.0913/C ₁₁ H ₁₂ NO ⁺	159.0680	110.0965
Mepirapim	C ₁₉ H ₂₇ N ₃ O	6.88	314.2227	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	158.0600/C ₁₀ H ₈ NO ⁺	144.0444/C ₇ H ₆ NO ⁺	116.0495/C ₈ H ₈ N ⁺
25C-NBF	C ₁₇ H ₁₉ ClFNO ₂	6.93	324.1161	199.0520/C ₁₀ H ₁₂ ClO ₂ ⁺	184.0285	165.0050	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
30C-NBOMe	C ₂₀ H ₂₆ ClNO ₃	7.03	396.1572	181.0859/C ₁₄ H ₁₃ O ₃ ⁺	148.0517	137.0596	
Cannabipiperidiethanone	C ₂₄ H ₂₈ N ₂ O ₂	7.07	377.2224	280.1332/C ₁₈ H ₁₈ NO ₂ ⁺	121.0649/C ₈ H ₉ O ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺	98.0964/C ₆ H ₁₂ N ⁺
25B-NBF	C ₁₇ H ₁₉ BrFNO ₂	7.20	368.0656	243.0015/C ₁₀ H ₁₂ BrO ₂ ⁺	227.9778	212.9545	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
<i>para</i> -Fluorobutryl fentanyl	C ₂₃ H ₂₉ FN ₂ O	7.22	369.2337	299.1918/C ₁₉ H ₂₄ FN ₂ ⁺	248.1445/C ₁₅ H ₁₉ FNO ⁺	188.1434/C ₁₃ H ₁₈ N ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
AM2233	C ₂₂ H ₂₃ IN ₂ O	7.32	459.0928	362.0036/C ₁₆ H ₁₃ INO ⁺	230.9301/C ₈ H ₄ IO ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺	98.0964/C ₄ H ₁₂ N ⁺
AM2233 azepane isomer	C ₂₂ H ₂₃ IN ₂ O	7.45	459.0928	230.9301/C ₈ H ₄ IO ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺	98.0965	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
25D-NBOMe	C ₁₉ H ₂₅ NO ₃	7.54	316.1907	179.1067/C ₁₁ H ₁₅ O ₂ ⁺	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	109.0648/C ₇ H ₉ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
JWH 200	C ₂₅ H ₂₄ N ₂ O ₂	7.61	385.1911	155.0491/C ₁₁ H ₉ O ⁺	145.0649	114.0913/C ₉ H ₁₂ NO ⁺	70.0651/C ₄ H ₈ N ⁺
25I-NBF	C ₁₇ H ₁₉ FINO ₂	7.75	416.0517	290.9877/C ₁₀ H ₁₂ IO ₂ ⁺	275.9642	260.9409	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
5-BPDI	C ₁₉ H ₂₇ NO	7.81	286.2165	215.1430/C ₁₅ H ₁₉ O ⁺	145.0648/C ₁₀ H ₉ O ⁺	140.1434/C ₉ H ₁₈ N ⁺	131.0855/C ₁₀ H ₁₁ ⁺
AM1241	C ₂₂ H ₂₂ IN ₃ O ₃	7.96	504.0779	406.9887/C ₁₆ H ₁₂ IN ₃ O ₃ ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺	98.0964/C ₄ H ₁₂ N ⁺	70.0651/C ₄ H ₈ N ⁺
Diclofensine	C ₁₇ H ₁₇ Cl ₂ NO	7.98	322.0760	291.0338/C ₁₆ H ₁₃ Cl ₂ O ⁺	279.0338/C ₁₅ H ₁₃ Cl ₂ O ⁺	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	91.0542
AM1220	C ₂₆ H ₂₆ N ₂ O	8.03	383.2118	286.1226/C ₂₀ H ₁₆ NO ⁺	155.0491/C ₁₄ H ₉ O ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺	98.0964/C ₄ H ₁₂ N ⁺
AM1220 azepane isomer	C ₂₆ H ₂₆ N ₂ O	8.17	383.2118	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺	98.0965	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
25E-NBOMe	C ₂₀ H ₂₇ NO ₃	8.50	330.2064	193.1223/C ₁₂ H ₁₇ O ₂ ⁺	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	109.0648/C ₇ H ₉ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
A-836339	C ₁₆ H ₂₆ N ₂ O ₂ S	8.77	311.1788	187.0900/C ₈ H ₁₅ N ₂ OS ⁺	155.0637/C ₇ H ₁₁ N ₂ S ⁺	125.0960/C ₈ H ₁₃ O ⁺	59.0491/C ₇ H ₉ O ⁺
Org27569	C ₂₄ H ₂₈ ClN ₂ O	9.09	410.1994	231.1492/C ₁₄ H ₁₉ N ₂ O ⁺	205.1699/C ₁₃ H ₂₁ N ₂ ⁺	188.1434/C ₁₃ H ₁₈ N ⁺	132.0808/C ₉ H ₁₀ N ⁺
5-Fluoro-ABICA	C ₁₉ H ₂₈ FN ₃ O ₂	9.12	348.2082	331.1811/C ₁₉ H ₂₄ FN ₂ O ₂ ⁺	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	212.1070/C ₁₄ H ₁₄ NO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
5-Fluoropentyl-3-pyridinoyl indole	C ₁₉ H ₁₉ FN ₂ O	9.24	311.1554	291.1492/C ₁₉ H ₁₉ N ₂ O ⁺	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	144.0444/C ₈ H ₆ NO ⁺	106.0288/C ₆ H ₄ NO ⁺
5-Fluoro-AB-PINACA	C ₁₈ H ₂₅ FN ₄ O ₂	9.38	349.2034	332.1769/C ₁₈ H ₂₃ FN ₃ O ₂ ⁺	304.1820/C ₁₇ H ₂₃ FN ₃ O ⁺	213.1022/C ₁₃ H ₁₃ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
AM1248	C ₂₆ H ₃₄ N ₂ O	9.66	391.2744	135.1168/C ₁₀ H ₁₅ ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺	98.0964/C ₄ H ₁₂ N ⁺	
5-Fluoro-ADBICA	C ₂₀ H ₂₈ FN ₃ O ₂	10.02	362.2238	345.1973/C ₂₀ H ₂₆ FN ₂ O ₂ ⁺	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	116.0495/C ₈ H ₈ N ⁺
AB-FUBINACA	C ₂₀ H ₂₁ FN ₄ O ₂	10.04	369.1721	352.1456/C ₂₀ H ₁₉ FN ₃ O ₂ ⁺	324.1507/C ₁₉ H ₁₉ FN ₃ O ⁺	253.0772/C ₁₅ H ₁₀ FN ₂ O ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
AB-FUBINACA 2-fluorobenzyl isomer	C ₂₀ H ₂₁ FN ₄ O ₂	10.07	369.1721	352.1456/C ₂₀ H ₁₉ FN ₃ O ₂ ⁺	324.1507/C ₁₉ H ₁₉ FN ₃ O ⁺	253.0772/C ₁₅ H ₁₀ FN ₂ O ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
PX-1	C ₂₃ H ₂₆ FN ₃ O ₂	10.25	396.2082	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	212.1070/C ₁₄ H ₁₄ NO ⁺	144.0444/C ₈ H ₆ NO ⁺	69.0699/C ₄ H ₉ ⁺
5F-ADB-PINACA	C ₁₉ H ₂₇ FN ₄ O ₂	10.36	363.2191	346.1925/C ₁₉ H ₂₅ FN ₃ O ₂ ⁺	318.1976/C ₁₈ H ₂₅ FN ₃ O ⁺	251.1185	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
Salvinorin A	C ₂₃ H ₂₈ O ₈	10.38	433.1857	373.1646/C ₂₁ H ₂₅ O ₆ ⁺	313.1434/C ₁₉ H ₂₁ O ₄ ⁺	295.1327	81.0335/C ₃ H ₅ O ⁺
5-Chloro-AB-PINACA	C ₁₈ H ₂₅ ClN ₄ O ₂	10.50	365.1739	320.1524/C ₁₇ H ₂₃ ClN ₃ O ⁺	213.1022/C ₁₃ H ₁₃ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺	69.0699/C ₃ H ₉ ⁺
PX-2	C ₂₂ H ₂₅ FN ₄ O ₂	10.56	397.2034	352.1820/C ₂₁ H ₂₃ FN ₃ O ⁺	251.1187	233.1085/C ₁₃ H ₁₄ FN ₂ O ⁺	145.0396/C ₄ H ₈ N ₂ O ⁺
ADB-FUBINACA	C ₂₁ H ₂₃ FN ₄ O ₂	11.00	383.1878	366.1612/C ₂₁ H ₂₁ FN ₃ O ₂ ⁺	338.1663/C ₂₀ H ₂₁ FN ₃ O ⁺	253.0772/C ₁₅ H ₁₀ FN ₂ O ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
AB-PINACA	C ₁₈ H ₂₆ N ₄ O ₂	11.03	331.2129	314.1863/C ₁₈ H ₂₄ N ₃ O ₂ ⁺	286.1914/C ₁₇ H ₂₄ N ₃ O ⁺	215.1179/C ₁₃ H ₁₅ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
FU-PX-2	C ₂₄ H ₂₁ FN _{4</}						

表-1 続き

化合物	化学式	保持時間 (分)	ブライカーサーイオン*1		プロダクトイオン*3		
			精密質量*2		精密質量/推定化学式*4		
ADB-PINACA	C ₁₉ H ₂₈ N ₄ O ₂	12.09	345.2285	328.2020/C ₁₉ H ₂₆ N ₃ O ₂ ⁺	300.2070/C ₁₈ H ₂₆ N ₃ O ⁺	215.1179/C ₁₃ H ₁₅ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
AB-CHMINACA	C ₂₀ H ₂₈ N ₄ O ₂	12.09	357.2285	340.2020/C ₂₀ H ₂₆ N ₃ O ₂ ⁺	312.2070/C ₁₉ H ₂₆ N ₃ O ⁺	241.1335/C ₁₅ H ₁₇ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
CUMYL-THPINACA	C ₂₃ H ₂₇ N ₃ O ₂	12.61	378.2176	260.1394/C ₁₄ H ₁₅ N ₃ O ₂ ⁺	243.1128/C ₁₄ H ₁₅ N ₃ O ₂ ⁺	119.0855/C ₉ H ₁₁ ⁺	99.0804/C ₆ H ₁₁ O ⁺
5-Fluoro-NPB-22	C ₂₂ H ₂₀ FN ₃ O ₂	12.67	378.1612	251.1186	233.1085/C ₁₃ H ₁₄ FN ₂ O ⁺	213.1022/C ₁₃ H ₁₃ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
5-Fluoro-AMB	C ₁₉ H ₂₆ FN ₃ O ₃	12.90	364.2031	251.1187	233.1085/C ₁₃ H ₁₄ FN ₂ O ⁺	213.1022/C ₁₃ H ₁₃ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
ADB-CHMINACA	C ₂₁ H ₃₀ N ₄ O ₂	13.12	371.2442	326.2227/C ₂₀ H ₂₈ N ₃ O ⁺	241.1335/C ₁₅ H ₁₇ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺	97.1012/C ₇ H ₁₃ ⁺
FUB-NPB-22	C ₂₄ H ₁₆ FN ₃ O ₂	13.32	398.1299	271.0877	253.0772/C ₁₅ H ₁₀ FN ₂ O ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺	
5-Fluoro-NNE1	C ₂₄ H ₂₃ FN ₂ O	13.39	375.1867	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	116.0495/C ₈ H ₆ N ⁺	69.0699/C ₅ H ₉ ⁺
CHMINACA-BA	C ₂₀ H ₂₇ N ₃ O ₃	13.43	358.2125	312.2070/C ₁₉ H ₂₆ N ₃ O ⁺	241.1335/C ₁₅ H ₁₇ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺	97.1012/C ₇ H ₁₃ ⁺
FUB-AMB	C ₂₁ H ₂₂ FN ₃ O ₃	13.45	384.1718	324.1507/C ₁₉ H ₁₉ FN ₃ O ⁺	271.0874	253.0772/C ₁₅ H ₁₀ FN ₂ O ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
CUMYL-5F-PICA	C ₂₃ H ₂₇ FN ₃ O	13.49	367.2180	249.1398/C ₁₄ H ₁₈ FN ₂ O ⁺	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	206.1338	119.0855/C ₉ H ₁₁ ⁺
SDB-006	C ₂₁ H ₂₄ N ₂ O	13.52	321.1961	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	188.1434	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
FUB-PB-22	C ₂₅ H ₁₇ FN ₂ O ₂	13.69	397.1347	252.0819/C ₁₆ H ₁₁ FNO ⁺	224.0870/C ₁₅ H ₁₁ FN ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺	
AM694	C ₂₀ H ₁₉ FINO	13.74	436.0568	309.1519	230.9301/C ₈ H ₄ IO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	94.0414
FDU-NNE1	C ₂₆ H ₁₉ FN ₂ O	13.83	395.1554	252.0819/C ₁₆ H ₁₁ FNO ⁺	224.0870/C ₁₅ H ₁₁ FN ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺	
5F-ADB	C ₂₀ H ₂₈ FN ₃ O ₃	13.93	378.2187	318.1976/C ₁₈ H ₂₅ FN ₃ O ⁺	251.1186	213.1022/C ₁₃ H ₁₃ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
A-834735	C ₂₂ H ₂₉ NO ₂	14.20	340.2271	242.1176/C ₁₅ H ₁₆ NO ₂ ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	125.0961/C ₈ H ₁₃ O ⁺	97.1012/C ₇ H ₁₃ ⁺
RCS-4 o- isomer	C ₂₁ H ₂₃ NO ₂	14.26	322.1802	135.0441/C ₈ H ₉ O ₂ ⁺	95.0492	79.0543	
CUMYL-5F-PINACA	C ₂₂ H ₂₈ FN ₃ O	14.39	368.2133	250.1350/C ₁₃ H ₁₇ FN ₃ O ⁺	233.1085/C ₁₃ H ₁₄ FN ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺	119.0855/C ₉ H ₁₁ ⁺
MDMB-FUBINACA	C ₂₂ H ₂₄ FN ₃ O ₃	14.47	398.1874	366.1612/C ₂₁ H ₂₁ FN ₃ O ₂ ⁺	338.1663/C ₂₀ H ₂₁ FN ₃ O ⁺	253.0772/C ₁₅ H ₁₀ FN ₂ O ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
FUBIMINA	C ₂₃ H ₂₁ FN ₂ O	14.49	361.1711	273.1022/C ₁₈ H ₁₃ N ₂ O ⁺	177.0457	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0648/C ₁₀ H ₉ O ⁺
JWH-030	C ₂₀ H ₂₁ NO	14.61	292.1696	164.1070/C ₁₀ H ₁₄ NO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0648/C ₁₀ H ₉ O ⁺	103.0543
RCS-4	C ₂₁ H ₂₃ NO ₂	14.84	322.1802	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	135.0441/C ₈ H ₉ O ⁺	125.0599	95.0492
AMB	C ₁₉ H ₂₇ N ₃ O ₃	14.87	346.2125	286.1914/C ₁₇ H ₂₄ N ₃ O ⁺	233.1282	215.1179/C ₁₃ H ₁₅ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
QUPIC	C ₂₃ H ₂₂ N ₂ O ₂	14.93	359.1754	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	158.0600/C ₁₀ H ₈ NO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	116.0495/C ₈ H ₆ N ⁺
NNE1	C ₂₄ H ₂₃ N ₂ O ₂	14.97	357.1961	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	116.0495/C ₈ H ₆ N ⁺	
CUMYL-PICA	C ₂₃ H ₂₈ N ₂ O	15.07	349.2274	231.1492/C ₁₄ H ₁₉ N ₂ O ⁺	214.1226/C ₁₄ H ₁₉ NO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	119.0855/C ₉ H ₁₁ ⁺
FUB-JWH-018	C ₂₆ H ₁₈ FNO	15.14	380.1445	252.0819/C ₁₆ H ₁₁ FNO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0647	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
5-Fluoro-MN-18	C ₂₃ H ₂₂ FN ₃ O	15.17	376.1820	251.1185	233.1085/C ₁₃ H ₁₄ FN ₂ O ⁺	213.1022/C ₁₃ H ₁₃ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
JWH 250	C ₂₂ H ₂₅ NO ₂	15.33	336.1958	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	200.1433	121.0648/C ₉ H ₉ O ⁺	91.0542/C ₈ H ₇ ⁺
THJ-2201	C ₂₃ H ₂₇ FN ₂ O	15.41	361.1711	251.1185	233.1085/C ₁₃ H ₁₄ FN ₂ O ⁺	213.1022/C ₁₃ H ₁₃ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
STS-135	C ₂₄ H ₃₁ FN ₂ O	15.55	383.2493	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	135.1168/C ₁₀ H ₁₅ ⁺	107.0856	93.0699
5-Fluoro-SDB-005	C ₂₃ H ₂₁ FN ₂ O ₂	15.60	377.1660	251.1188	233.1085/C ₁₃ H ₁₄ FN ₂ O ⁺	213.1022/C ₁₃ H ₁₃ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
AM679	C ₂₀ H ₂₀ INO	15.61	418.0662	291.1615	230.9301/C ₈ H ₄ IO ⁺	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	94.0415
MDMB-CHMICA	C ₂₃ H ₃₂ N ₂ O ₃	15.68	385.2486	240.1383/C ₁₆ H ₁₈ NO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	97.1012/C ₇ H ₁₃ ⁺	55.0542/C ₆ H ₇ ⁺
CP-47,497	C ₂₁ H ₃₄ O ₂	15.75	317.2486	299.2376	271.2061	245.1905	159.0809
MA-CHMINACA	C ₂₁ H ₂₉ N ₃ O ₃	15.96	372.2282	312.2070/C ₁₉ H ₂₆ N ₃ O ⁺	241.1335/C ₁₅ H ₁₇ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺	97.1012/C ₇ H ₁₃ ⁺
JWH-251	C ₂₃ H ₂₅ NO	15.99	320.2009	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	188.1435	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
QUCHIC	C ₂₅ H ₂₄ N ₂ O ₂	16.04	385.1911	240.1383/C ₁₆ H ₁₈ NO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	97.1012/C ₇ H ₁₃ ⁺	55.0542/C ₆ H ₇ ⁺
XLR-12	C ₂₀ H ₂₄ F ₃ NO	16.06	352.1883	254.0787/C ₁₃ H ₁₃ F ₃ NO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	125.0961/C ₈ H ₁₃ O ⁺	97.1012/C ₇ H ₁₃ ⁺
JWH-203	C ₂₁ H ₂₂ ClNO	16.08	340.1463	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	188.1434	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	125.0153/C ₇ H ₆ Cl ⁺
NM2201	C ₂₄ H ₂₇ FN ₂ O	16.21	376.1707	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	171.0441/C ₁₁ H ₇ O ₂ ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	115.0542
FUB-144	C ₂₃ H ₂₄ FNO	16.31	350.1915	252.0819/C ₁₆ H ₁₁ FNO ⁺	125.0961/C ₈ H ₁₃ O ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺	97.1012/C ₇ H ₁₃ ⁺
FDU-PB-22	C ₂₅ H ₁₈ FN ₂ O	16.62	396.1394	252.0819/C ₁₆ H ₁₁ FNO ⁺	171.0441/C ₁₁ H ₇ O ₂ ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺	
5F-APINACA	C ₂₃ H ₃₀ FN ₃ O	16.85	384.2446	135.1168/C ₁₀ H ₁₅ ⁺	107.0857	93.0701	79.0544
MDMB-CHMINACA	C ₂₃ H ₃₁ N ₃ O ₃	17.05	386.2438	326.2227/C ₂₀ H ₂₈ N ₃ O ⁺	241.1335/C ₁₅ H ₁₇ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺	97.1012/C ₇ H ₁₃ ⁺
APICA	C ₂₄ H ₃₂ N ₂ O	17.25	365.2587	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	135.1168/C ₁₀ H ₁₅ ⁺	107.0856	93.0700
MN-18	C ₂₃ H ₂₃ N ₃ O	17.25	358.1914	233.1282	215.1179/C ₁₃ H ₁₅ N ₂ O ⁺	163.0502	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
JWH-307	C ₂₆ H ₂₄ FNO	17.34	386.1915	155.0493/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0650	127.0542/C ₁₀ H ₇ ⁺	103.0543
THJ-018	C ₂₃ H ₃₂ N ₂ O	17.35	343.1805	233.1279	215.1179/C ₁₃ H ₁₅ N ₂ O ⁺	163.0500	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
SDB-005	C ₂₃ H ₂₂ N ₂ O ₂	17.37	359.1754	233.1282	215.1179/C ₁₃ H ₁₅ N ₂ O ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺	117.0447/C ₇ H ₅ N ₂ ⁺
FUB-APINACA	C ₂₅ H ₂₆ FN ₃ O	17.38	404.2133	135.1168/C ₁₀ H ₁₅ ⁺	107.0855	93.0699	79.0542
MO-CHMINACA	C ₂₂ H ₃₀ N ₂ O ₄	17.38	387.2278	259.1441/C ₁₅ H ₁₉ N ₂ O ₂ ⁺	241.1335/C ₁₅ H ₁₇ N ₂ O ⁺	163.0502/C ₈ H ₇ N ₂ O ₂ ⁺	145.0396/C ₈ H ₅ N ₂ O ⁺
JWH-145	C ₂₄ H ₂₅ NO	17.55	368.2009	155.0493/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0650	127.0542/C ₁₀ H ₇ ⁺	103.0543
JWH-368	C ₂₆ H ₂₄ FNO	17.57	386.1915	155.0493/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0650	127.0542/C ₁₀ H ₇ ⁺	103.0543
UR-144	C ₂₁ H ₂₉ NO	17.73	312.2322	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	125.0961/C ₈ H ₁₃ O ⁺	97.1012/C ₇ H ₁₃ ⁺
JWH-370	C ₂₇ H ₂₇ NO	18.24	382.2165	155.0493/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0649	127.0542/C ₁₀ H ₇ ⁺	103.0543
AB-001	C ₂₄ H ₃₁ NO	18.87	350.2478	135.1168/C ₁₀ H ₁₅ ⁺	107.0856	93.0699	79.0543
APINACA	C ₂₃ H ₃₁ N ₃ O	19.16	366.2540	135.1168/C ₁₀ H ₁₅ ⁺	107.0856	93.0700	79.0543
EG-018	C ₂₈ H ₂₅ NO	19.39	392.2009	264.1383/C ₁₈ H ₁₈ NO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0648	103.0542
CB-13	C ₂₆ H ₂₄ O ₂	20.06	369.1849	299.1067/C ₂₁ H ₁₅ O ₂ ⁺	241.1223/C ₁₆ H ₁₇ O ₂ ⁺	171.0439/C ₁₁ H ₇ O ₂ ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺

*1 CP-47,497は[M-H]⁻を、それ以外の化合物は[M+H]⁺をブライカーサーイオンに選択した。*2 [M+H]⁺または[M-H]⁻より算出した計算精密質量(calculated exact mass)を表す。

*3 プロダクトイオンスペクトルでのピーク強度が高く、化合物の構造的な特徴を示していると考えられるプロダクトイオンを最大4つ選び示した。

*4 推定化学式が示されている場合は計算精密質量(calculated exact mass)を表し、示されていない場合は測定精密質量(measured accurate mass)を表す。

2.32 分)と PMEA(2.38 分)又は、CUMYL-THPINACA (12.61 分)と 5-Fluoro NPB-22 (12.67 分)のように保持時間が近く、その分子量も近い指定薬物どうしであっても、Orbitrap MS により取得した $[M+H]^+$ の精密質量の違いから、検出した指定薬物の識別が可能であった。また、4-MeO-PCP(5.87 分)と 3-MeO-PCP (5.89 分)のように化学式が同じであり保持時間が近い指定薬物どうしの場合は、そのプロダクトイオンスペクトルを比べることでどちらを検出したか判別することが可能と思われた(図-1 (a)及び(b))。

3-Fluoromethamphetamine (1.71 分)と 4-Fluoromethamphetamine (1.72 分)は保持時間とそのプロダクトイオンスペクトルもほぼ同じであったが、3-Fluoromethamphetamine ではプロダクトイオンスペクトル中に m/z 58.0651 のプロダクトイオンが観られるのに対して、4-Fluoromethamphetamine では、その m/z 58.0651 のプロダクトイオンが観られず、そのことにより識別が可能であった(図-1 (c)及び(d))。また、AB-FUBINACA (10.04 分)と AB-FUBINACA 2-fluorobenzyl isomer (10.07 分)については、保持

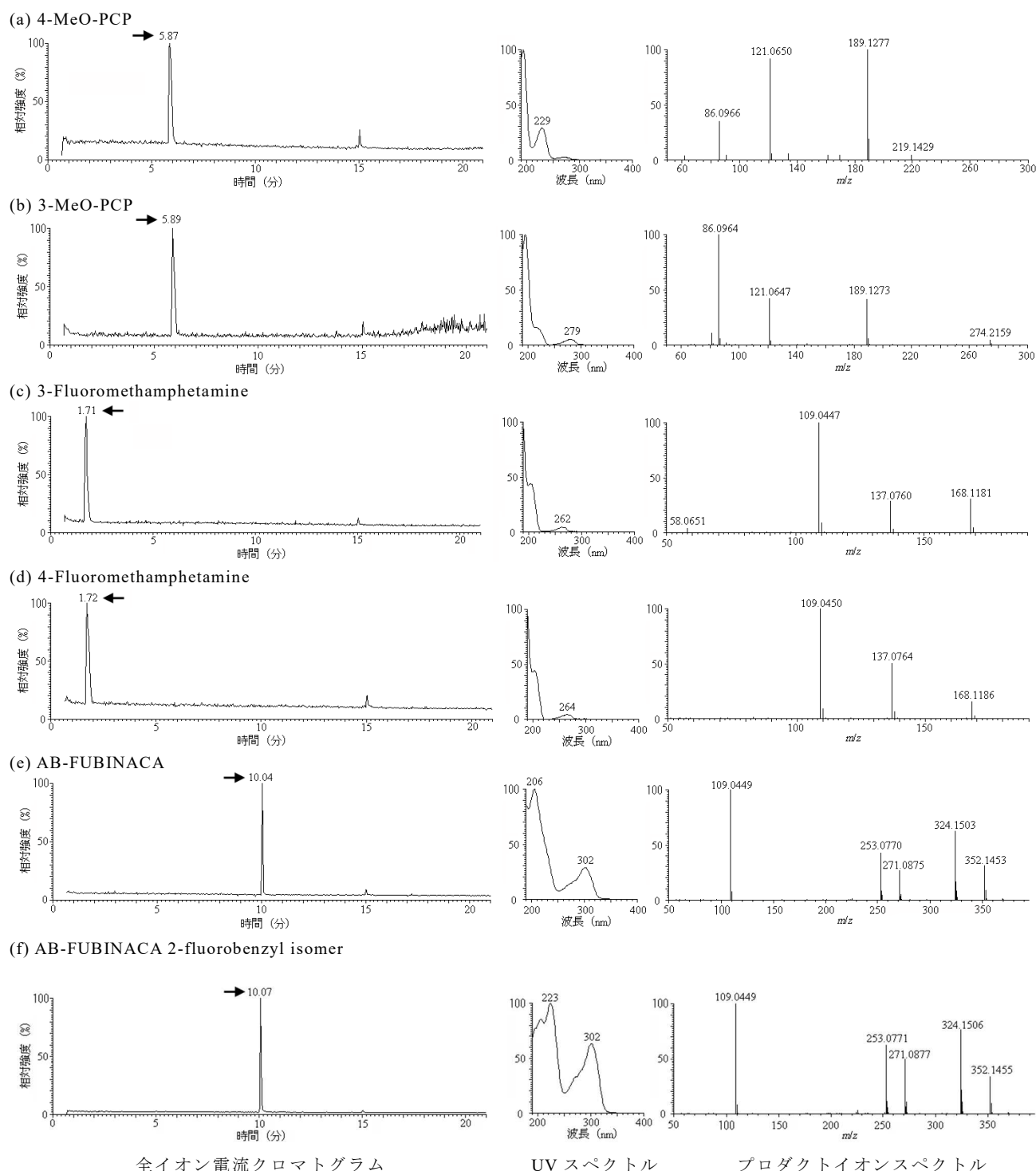


図-1 同一の化学式を有する指定薬物の全イオン電流クロマトグラム、UV スペクトル及びプロダクトイオンスペクトル

時間が近く、 $[M+H]^+$ の精密質量が同じで、プロダクトイオンスペクトルにもほとんど違いが確認できないが、UV スペクトルが異なるため、そのことにより判別することが可能と思われた(図-1 (e)及び(f))。しかし、3-Fluoroamphetamine (1.37 分) と 4-Fluoroamphetamine (1.40 分) 並びに 6-APB (2.43 分) と 5-APB (2.44 分) については、保持時間に差がほとんどなく、 $[M+H]^+$ の精密質量、UV スペクトル及びプロダクトイオンスペクトルでは区別ができなかったため、これら指定薬物が検出された場合、どちらが検出したか確認するには、別途分析を行う必要があると思われた。

カチノン系物質として包括規制されている指定薬物の標準品を分析した結果を表-2 に示した。MPHP (表-2 保持時間 6.28 分) と α -PHPP (6.33 分) のように保持時間が近く化学式が同じ指定薬物どうしであってもそのプロダクトイオンスペクトルの違いにより判別が可能な場合もあったが(図-2 (a)及び(b))、2-Methylethcathinone (2.31 分)、3-Methylethcathinone (2.56 分) 及び 4-Methylethcathinone (2.60 分) のようにベンゼン環に結合する置換基の位置のみが異なる位置異性体どうしでは、プロダクトイオンスペクトルにほとんど差は観られず、プロダクトイオンスペクトルの情報だけでは 3-Methylethcathinone と 4-Methylethcathinone のように保持時間が近い位置異性体どうしを判別することは困難であった(図-2 (c)、(d)及び(e))。UV スペクトルを比較すると、分析を行った包括規制されているカチノン系物質のうち 2 位、3 位又は 4 位に置換基を有する位置異性体では、2-Fluoroethcathinone (1.08 分) と 3-Fluoroethcathinone (1.31 分) 以外は(図-2 (f)及び(g))、Methylethcathinone のように、いずれも位置異性体ど

うしの UV スペクトルの形状は異なっていたため(図-2 (c)、(d)及び(e))、2 位、3 位又は 4 位に置換基を有する位置異性体どうしは、その UV スペクトルの形状の違いで識別が可能な場合があることが示唆された。また、Fluoroethcathinone や Methylethcathinone のように(図-2 (c)、(d)、(e)、(f)、(g)及び(h))、分析を行った包括規制されているカチノン系物質ではいずれも、ベンゼン環の 3 位に置換基が結合した位置異性体とベンゼン環の 4 位に置換基が結合した位置異性体の保持時間が近く、ベンゼン環の 2 位に置換基が結合した位置異性体の保持時間はそれらよりも短い傾向が観られ、UV スペクトルやプロダクトイオンスペクトルで識別ができなかった 2-Fluoroethcathinone と 3-Fluoroethcathinone は保持時間の違いにより識別することが可能であった。このように、包括規制されているカチノン系物質において、プロダクトイオンスペクトルだけでは識別が難しい位置異性体どうしも保持時間及び UV スペクトルの情報も合わせれば十分に識別は可能であると思われた。

分析を行った包括規制されているカチノン系物質のプロダクトイオンスペクトル中に観られる特徴的なフラグメントイオンについて、その構造を Mass Frontier 7.0 ソフトウェアで予想させた結果を図-3 に示した。図-3 の(b)は、水が脱離したフラグメントイオンの構造を示しており、包括規制されているカチノン系物質における基本骨格の 2 位のアミノ基がジメチルアミノ基、メチルエチルアミノ基、ジエチルアミノ基又は 1-ピロリジニル基に置換して第三級アミンとなった場合は、当該フラグメントピークは認められないか極めて小さいが、それら以外の場合は、包括規制されているいずれのカチノン系物質でも十分なピーク強度が得られていた。カチノン系物質に

表-2 カチノン系物質として包括規制されている指定薬物の保持時間及び主なプロダクトイオン

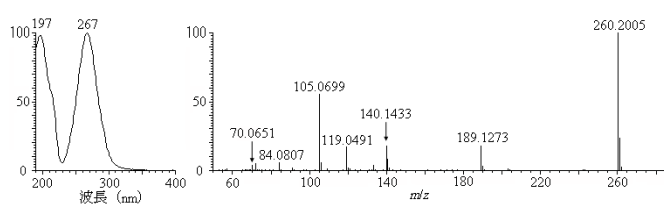
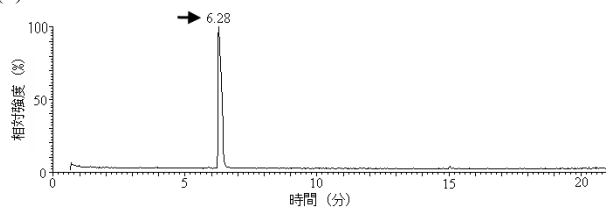
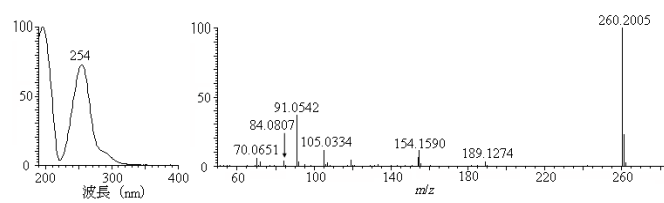
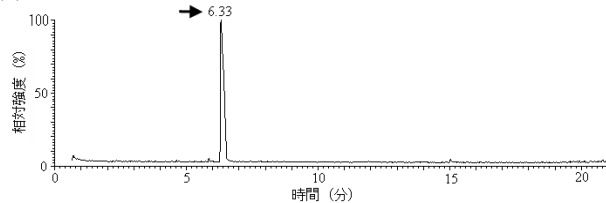
化合物	化学式	保持時間 (分)	プリカーサーイオン ^{*1}		プロダクトイオン ^{*3}		
			精密質量 ^{*2}		精密質量/推定化学式 ^{*4}		
2-Fluoromethcathinone	C ₁₀ H ₁₂ FNO	0.88	182.0976	164.0870/C ₁₀ H ₁₁ FN ⁺	151.0554/C ₉ H ₈ FO ⁺	149.0635	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
N,N-Dimethylcathinone	C ₁₁ H ₁₅ NO	0.96	178.1226	133.0648/C ₉ H ₉ O ⁺	105.0700	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺	
2-Fluoroethcathinone	C ₁₁ H ₁₄ FNO	1.08	196.1132	178.1027/C ₁₁ H ₁₃ FN ⁺	151.0554/C ₉ H ₈ FO ⁺	150.0714/C ₉ H ₉ FN ⁺	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
4-Fluoromethcathinone	C ₁₀ H ₁₂ FNO	1.10	182.0976	164.0870/C ₁₀ H ₁₁ FN ⁺	151.0554/C ₉ H ₈ FO ⁺	149.0637	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
bk-MDDMA	C ₁₃ H ₁₅ NO ₃	1.14	222.1125	177.0546/C ₁₀ H ₉ O ₃ ⁺	147.0441/C ₉ H ₇ O ₂ ⁺	119.0494	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
2,3-Methylenedioxy methcathinone	C ₁₁ H ₁₃ NO ₃	1.14	208.0968	190.0863/C ₁₁ H ₁₂ NO ₂ ⁺	160.0757/C ₁₀ H ₁₀ NO ⁺	132.0810	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
N-Ethyl-N-methylcathinone	C ₁₂ H ₁₇ NO	1.20	192.1383	146.0964/C ₁₀ H ₁₂ N ⁺	133.0648/C ₉ H ₉ O ⁺	105.0699	86.0964/C ₄ H ₁₂ N ⁺
3-Fluoroethcathinone	C ₁₁ H ₁₄ FNO	1.31	196.1132	178.1027/C ₁₁ H ₁₃ FN ⁺	151.0554/C ₉ H ₈ FO ⁺	150.0714/C ₉ H ₉ FN ⁺	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
α -Pyrrolidinopropiophenone	C ₁₃ H ₁₇ NO	1.32	204.1383	133.0648/C ₉ H ₉ O ⁺	105.0700	98.0964/C ₆ H ₁₂ N ⁺	70.0651 (C ₄ H ₈ N ⁺)
4-Fluoroethcathinone	C ₁₁ H ₁₄ FNO	1.35	196.1132	178.1027/C ₁₁ H ₁₃ FN ⁺	151.0554/C ₉ H ₈ FO ⁺	150.0714/C ₉ H ₉ FN ⁺	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
2-Methoxymethcathinone	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂	1.38	194.1176	176.1070/C ₁₁ H ₁₄ NO ⁺	163.0754/C ₁₀ H ₁₁ O ₂ ⁺	161.0835	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
3-Methoxymethcathinone	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂	1.40	194.1176	176.1070/C ₁₁ H ₁₄ NO ⁺	163.0754/C ₁₀ H ₁₁ O ₂ ⁺	161.0835	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
Buphedrone	C ₁₁ H ₁₅ NO	1.43	178.1226	160.1121/C ₁₁ H ₁₄ N ⁺	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	105.0335/C ₇ H ₅ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
2,3-Ethylone isomer	C ₁₂ H ₁₅ NO ₃	1.47	222.1125	204.1019/C ₁₂ H ₁₄ NO ₂ ⁺	174.0913/C ₁₁ H ₁₂ NO ⁺	146.0964	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
4-Methoxy-N,N-dimethylcathinone	C ₁₂ H ₁₇ NO ₂	1.53	208.1332	163.0754/C ₁₀ H ₁₁ O ₂ ⁺	135.0806	105.0700	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
3-Fluoro- α -pyrrolidinopropiophenone	C ₁₃ H ₁₆ FNO	1.61	222.1289	151.0554/C ₉ H ₈ FO ⁺	123.0604	98.0964/C ₆ H ₁₂ N ⁺	70.0651/C ₄ H ₈ N ⁺
MDPPP	C ₁₄ H ₁₇ NO ₃	1.64	248.1281	177.0546/C ₁₀ H ₉ O ₃ ⁺	147.0443/C ₉ H ₇ O ₂ ⁺	119.0493	98.0964/C ₆ H ₁₂ N ⁺
4-Fluoro- α -pyrrolidinopropiophenone	C ₁₃ H ₁₆ FNO	1.64	222.1289	151.0554/C ₉ H ₈ FO ⁺	123.0604	98.0964/C ₆ H ₁₂ N ⁺	70.0651/C ₄ H ₈ N ⁺
2-Methylmethcathinone	C ₁₁ H ₁₅ NO	1.70	178.1226	160.1121/C ₁₁ H ₁₄ N ⁺	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	145.0889	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺

表-2 続き

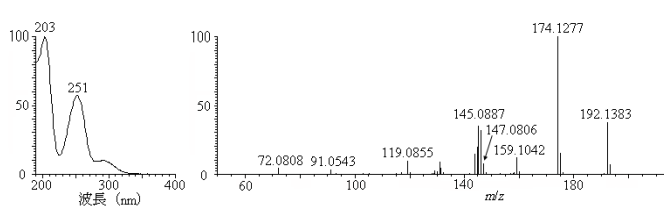
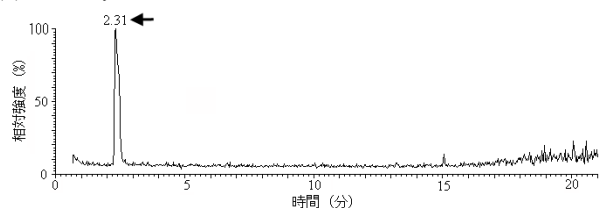
化合物	化学式	保持時間 (分)	ブライカーサーイオン ^{*1}		プロダクトイオン ^{*3}		
			精密質量 ^{*2}		精密質量/推定化学式 ^{*4}		
bk-MBDB	C ₁₂ H ₁₅ NO ₃	1.75	222.1125	204.1019/C ₁₂ H ₁₄ NO ₂ ⁺	191.0703/C ₁₁ H ₁₁ O ₃ ⁺	174.0916	72.0808/C ₇ H ₁₀ N ⁺
4-Fluorobuphedrone	C ₁₁ H ₁₄ FNO	1.84	196.1132	178.1027/C ₁₁ H ₁₃ FN ⁺	165.0710/C ₁₀ H ₁₀ FO ⁺	123.0241/C ₇ H ₆ FO ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
NEB	C ₁₁ H ₁₇ NO	1.89	192.1383	174.1277/C ₁₂ H ₁₆ N ⁺	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	130.0651/C ₉ H ₈ N ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
bk-DMBDB	C ₁₃ H ₁₇ NO	1.90	236.1281	191.0703/C ₁₁ H ₁₁ O ₃ ⁺	161.0597/C ₁₀ H ₉ O ₂ ⁺	149.0233/C ₈ H ₅ O ₃ ⁺	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺
3-Methylmethcathinone	C ₁₁ H ₁₅ NO	1.91	178.1226	160.1121/C ₁₁ H ₁₄ N ⁺	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	145.0888	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
3-Chloromethcathinone	C ₁₀ H ₁₂ ClNO	2.06	198.0680	180.0575/C ₁₀ H ₁₁ ClN ⁺	167.0258/C ₉ H ₈ ClO ⁺	145.0885	58.0561/C ₃ H ₈ N ⁺
4-Methyl- <i>N,N</i> -dimethylcathinone	C ₁₁ H ₁₇ NO	2.11	192.1383	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	119.0855	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺	72.0808/C ₇ H ₁₀ N ⁺
α -PBP	C ₁₄ H ₁₉ NO	2.16	218.1539	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺	105.0335/C ₇ H ₃ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
Eutylone	C ₁₃ H ₁₇ NO ₃	2.26	236.1281	218.1176/C ₁₃ H ₁₆ NO ₂ ⁺	188.1070/C ₁₂ H ₁₄ NO ⁺	149.0233/C ₈ H ₅ O ₃ ⁺	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺
2-Methylcathinone	C ₁₂ H ₁₇ NO	2.31	192.1383	174.1277/C ₁₂ H ₁₆ N ⁺	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	145.0887	72.0808/C ₇ H ₁₀ N ⁺
MOPPP	C ₁₄ H ₁₉ NO ₂	2.32	234.1489	163.0754/C ₁₀ H ₁₁ O ₂ ⁺	135.0806	105.0700	98.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺
4-Chloromethcathinone	C ₁₀ H ₁₂ ClNO	2.35	198.0680	180.0575/C ₁₀ H ₁₁ ClN ⁺	167.0258/C ₉ H ₈ ClO ⁺	145.0886	58.0561/C ₃ H ₈ N ⁺
3-Methylcathinone	C ₁₂ H ₁₇ NO	2.56	192.1383	174.1277/C ₁₂ H ₁₆ N ⁺	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	145.0886	72.0808/C ₇ H ₁₀ N ⁺
4-Methylcathinone	C ₁₂ H ₁₇ NO	2.60	192.1383	174.1277/C ₁₂ H ₁₆ N ⁺	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	145.0889	72.0808/C ₇ H ₁₀ N ⁺
MDPBP	C ₁₅ H ₁₉ NO ₃	2.62	262.1438	191.0703/C ₁₁ H ₁₁ O ₃ ⁺	161.0597/C ₁₀ H ₉ O ₂ ⁺	149.0233/C ₈ H ₅ O ₃ ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺
3-Bromomethcathinone	C ₁₀ H ₁₂ BrNO	2.64	242.0175	224.0069/C ₁₀ H ₁₁ BrN ⁺	145.0885	132.0569	58.0651/C ₃ H ₈ N ⁺
4-Fluoro- α -PBP	C ₁₄ H ₁₈ NO	2.65	236.1445	165.0710/C ₁₀ H ₁₀ FO ⁺	123.0241/C ₇ H ₄ FO ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
2-Methyl- α -pyrrolidinopropiophenone	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂	2.80	218.1539	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	119.0856	98.0964/C ₇ H ₁₂ N ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
4-Bromomethcathinone	C ₁₀ H ₁₂ BrNO	2.90	242.0175	224.0069/C ₁₀ H ₁₁ BrN ⁺	210.9753/C ₉ H ₈ BrO ⁺	145.0885	132.0569
Pentedrone	C ₁₂ H ₁₇ NO	2.92	192.1383	174.1277/C ₁₂ H ₁₆ N ⁺	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	132.0808/C ₉ H ₁₀ N ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
Desethylpyrovalerone	C ₁₄ H ₁₉ NO	2.97	218.1539	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	119.0857	98.0964/C ₆ H ₁₂ N ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
3-Methyl- α -pyrrolidinopropiophenone	C ₁₃ H ₁₉ NO	3.03	218.1539	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	119.0855	98.0964/C ₇ H ₁₂ N ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
α -Dimethylaminopentiophenone	C ₁₃ H ₁₉ NO	3.16	206.1539	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	105.0335/C ₆ H ₅ O ⁺	100.1121/C ₆ H ₁₄ N ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
4-Methylbuphedrone	C ₁₂ H ₁₇ NO	3.20	192.1383	174.1277/C ₁₂ H ₁₆ N ⁺	161.0961/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	145.0889	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
3-Methylbuphedrone	C ₁₂ H ₁₇ NO	3.23	192.1383	174.1277/C ₁₂ H ₁₆ N ⁺	161.0961/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	145.0886	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
4-MeO- α -PBP	C ₁₅ H ₂₁ NO ₂	3.26	248.1645	177.0910/C ₁₁ H ₁₃ O ₂ ⁺	135.0441/C ₉ H ₉ O ₂ ⁺	121.0648/C ₆ H ₉ O ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₇ N ⁺
Penty lone	C ₁₃ H ₁₇ NO ₃	3.30	236.1281	218.1176/C ₁₃ H ₁₆ NO ₂ ⁺	205.0859/C ₁₂ H ₁₃ O ₃ ⁺	188.1073	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺
4'-Chloro- α -pyrrolidinopropiophenone	C ₁₃ H ₁₆ ClNO	3.34	238.0993	167.0258/C ₉ H ₈ ClO ⁺	139.0309	98.0964/C ₆ H ₁₂ N ⁺	76.0651/C ₄ H ₈ N ⁺
4-Methyl- <i>N</i> -methylbuphedrone	C ₁₃ H ₁₉ NO	3.35	206.1539	161.0961/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	119.0491/C ₈ H ₇ O ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺
α -Ethylaminopentiophenone	C ₁₃ H ₁₉ NO	3.37	206.1539	188.1434/C ₁₃ H ₁₈ N ⁺	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	146.0964/C ₁₀ H ₁₂ N ⁺	105.0335/C ₆ H ₅ O ⁺
4-Fluoropentedrone	C ₁₂ H ₁₆ FNO	3.41	210.1289	192.1183/C ₁₂ H ₁₅ FN ⁺	179.0867/C ₁₁ H ₁₂ FO ⁺	150.0714/C ₉ H ₉ FN ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
2-Ethylmethcathinone	C ₁₂ H ₁₇ NO	3.42	192.1383	174.1277/C ₁₂ H ₁₆ N ⁺	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	145.0886	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
2,3-Penty lone isomer	C ₁₃ H ₁₇ NO ₃	3.50	236.1281	218.1176/C ₁₃ H ₁₆ NO ₂ ⁺	205.0859/C ₁₂ H ₁₃ O ₃ ⁺	188.1069	86.0964/C ₃ H ₁₂ N ⁺
<i>N,N</i> -Dimethylpenty lone	C ₁₄ H ₁₉ NO ₃	3.54	250.1438	205.0859/C ₁₂ H ₁₃ O ₃ ⁺	149.0233/C ₉ H ₉ O ₃ ⁺	135.0441/C ₆ H ₉ O ₂ ⁺	100.1121/C ₆ H ₁₄ N ⁺
4-Methyl- α -ethylaminobutienophenone	C ₁₃ H ₁₉ NO	3.68	206.1539	188.1434/C ₁₃ H ₁₈ N ⁺	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	144.0808/C ₁₀ H ₁₀ N ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
<i>N</i> -Ethylpenty lone	C ₁₄ H ₁₉ NO ₃	3.68	250.1438	232.1332/C ₁₄ H ₁₈ NO ₂ ⁺	205.0859/C ₁₂ H ₁₃ O ₃ ⁺	135.0441/C ₈ H ₇ O ₂ ⁺	100.1121/C ₆ H ₁₄ N ⁺
3-Ethylmethcathinone	C ₁₂ H ₁₇ NO	3.71	192.1383	174.1277/C ₁₂ H ₁₆ N ⁺	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	145.0886	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
4-Ethylmethcathinone	C ₁₃ H ₁₇ NO	3.72	192.1383	174.1277/C ₁₂ H ₁₆ N ⁺	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	145.0888	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
2-Methyl- α -pyrrolidinobutienophenone	C ₁₃ H ₂₁ NO	3.79	232.1696	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	119.0491/C ₈ H ₇ O ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
2-Ethylcathinone	C ₁₃ H ₁₉ NO	3.93	206.1539	188.1434/C ₁₃ H ₁₈ N ⁺	159.1043	144.0808	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
4-Methyl- α -pyrrolidinobutienophenone	C ₁₃ H ₂₁ NO	3.94	232.1696	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	119.0491/C ₈ H ₇ O ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
3-Methyl- α -pyrrolidinobutienophenone	C ₁₃ H ₂₁ NO	3.97	232.1696	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	119.0491/C ₈ H ₇ O ⁺	112.1121/C ₇ H ₁₄ N ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
4-Fluoro- α -PVP	C ₁₅ H ₂₀ FNO	4.07	250.1602	179.0867/C ₁₁ H ₁₂ FO ⁺	126.1277/C ₈ H ₁₆ N ⁺	123.0241/C ₇ H ₄ FO ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
2,3-Methylenedioxy Pyrovalerone	C ₁₆ H ₂₁ NO ₃	4.08	276.1594	205.0859/C ₁₂ H ₁₃ O ₃ ⁺	149.0233/C ₈ H ₅ O ₃ ⁺	135.0441/C ₈ H ₇ O ₂ ⁺	126.1277/C ₈ H ₁₆ N ⁺
4-Ethylcathinone	C ₁₃ H ₁₉ NO	4.20	206.1539	188.1434/C ₁₃ H ₁₈ N ⁺	159.1042	144.0807	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
3-Ethylcathinone	C ₁₃ H ₁₉ NO	4.22	206.1539	188.1434/C ₁₃ H ₁₈ N ⁺	159.1042	144.0807	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
α -Methylaminohexanophenone	C ₁₃ H ₁₉ NO	4.37	206.1539	188.1434/C ₁₃ H ₁₈ N ⁺	175.1117/C ₁₂ H ₁₅ O ⁺	132.0808/C ₉ H ₁₀ N ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
4-Methylpentedrone	C ₁₃ H ₁₉ NO	4.48	206.1539	188.1434/C ₁₃ H ₁₈ N ⁺	175.1117/C ₁₂ H ₁₅ O ⁺	119.0491/C ₈ H ₇ O ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
4-MeO- α -PVP	C ₁₆ H ₂₃ NO ₂	4.57	262.1802	191.1067/C ₁₂ H ₁₅ O ₂ ⁺	135.0441/C ₈ H ₇ O ₂ ⁺	126.1277/C ₈ H ₁₆ N ⁺	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺
4-Methyl- α -ethylaminopentiophenone	C ₁₄ H ₂₁ NO	4.92	220.1696	202.1590/C ₁₄ H ₂₀ N ⁺	175.1117/C ₁₂ H ₁₅ O ⁺	119.0491/C ₈ H ₇ O ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
α -PHP	C ₁₆ H ₂₃ NO	4.97	246.1852	175.1117/C ₁₂ H ₁₅ O ⁺	140.1434/C ₉ H ₁₈ N ⁺	105.0335/C ₇ H ₃ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
MDPH	C ₁₈ H ₂₃ NO ₃	5.22	290.1751	219.1016/C ₁₃ H ₁₅ O ₃ ⁺	149.0233/C ₈ H ₅ O ₃ ⁺	140.1434/C ₉ H ₁₈ N ⁺	135.0441/C ₈ H ₇ O ₂ ⁺
4'-Methyl- <i>N</i> -methylhexanophenone	C ₁₄ H ₂₁ NO	5.68	220.1696	202.1590/C ₁₄ H ₂₀ N ⁺	189.1274/C ₁₃ H ₁₇ O ⁺	146.0964/C ₁₀ H ₁₂ N ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
MPHP	C ₁₇ H ₂₅ NO	6.28	260.2009	189.1274/C ₁₃ H ₁₇ O ⁺	140.1434/C ₉ H ₁₈ N ⁺	119.0491/C ₈ H ₇ O ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
α -PHPP	C ₁₇ H ₂₅ NO	6.33	260.2009	189.1274/C ₁₃ H ₁₇ O ⁺	154.1590/C ₁₀ H ₂₀ N ⁺	105.0335/C ₇ H ₃ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
4-Fluoro- α -PHPP	C ₁₇ H ₂₄ FNO	6.68	278.1915	154.1590/C ₁₀ H ₂₀ N ⁺	123.0241/C ₇ H ₄ FO ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺	84.0808/C ₃ H ₁₀ N ⁺
4-Methoxy- α -PHPP	C ₁₈ H ₂₇ NO ₂	6.87	290.2115	219.1380/C ₁₄ H ₁₉ O ₂ ⁺	154.1590/C ₁₀ H ₂₀ N ⁺	135.0441/C ₈ H ₇ O ₂ ⁺	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺
α -POP	C ₁₈ H ₂₇ NO	7.52	274.2165	203.1430/C ₁₄ H ₁₉ O ⁺	168.1747/C ₁₁ H ₂₂ N ⁺	105.0335/C ₇ H ₃ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
4-Fluoro- α -POP	C ₁₈ H ₂₆ FNO	7.86	292.2071	221.1336/C ₁₄ H ₁₈ FO ⁺	168.1747/C ₁₁ H ₂₂ N ⁺	123.0241/C ₇ H ₄ FO ⁺	109.0448/C ₇ H ₆ F ⁺
4-Methoxy- α -POP	C ₁₉ H ₂₉ NO ₂	7.98	304.2271	233.1536/C ₁₅ H ₂₁ O ₂ ⁺	168.1747/C ₁₁ H ₂₂ N ⁺	135.0441/C ₈ H ₇ O ₂ ⁺	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺
α -PNP	C ₁₉ H ₂₇ NO	8.63	288.2322	217.1587/C ₁₅ H ₂₁ O ⁺	182.1903/C ₁₂ H ₂₄ N ⁺	105.0335/C ₇ H ₃ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺

^{*1} [M+H]⁺をブライカーサーイオンに選択した。

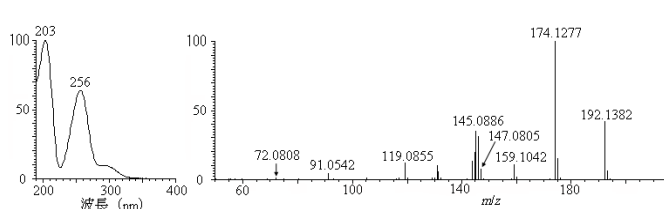
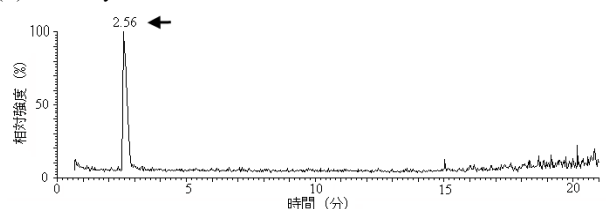
(a) MPHP

(b) α -PHPP

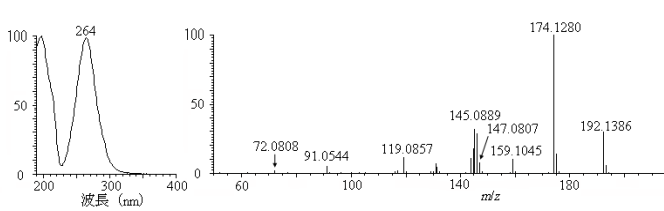
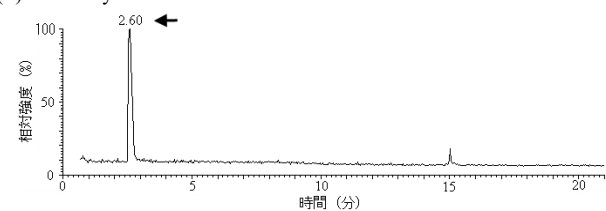
(c) 2-Methylethcathinone



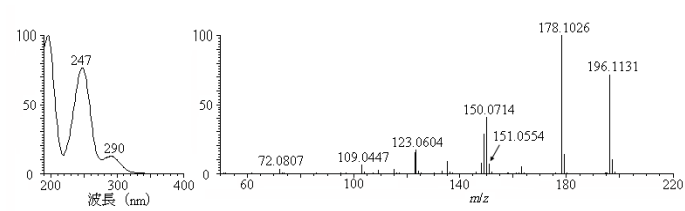
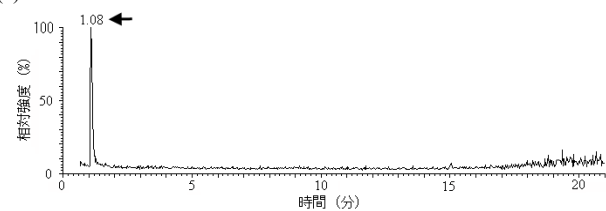
(d) 3-Methylethcathinone



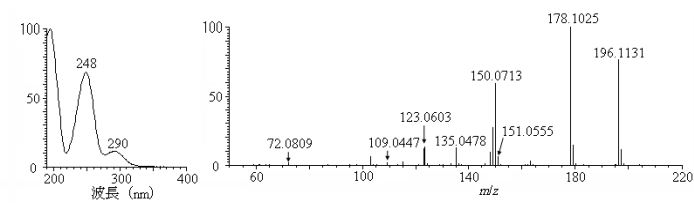
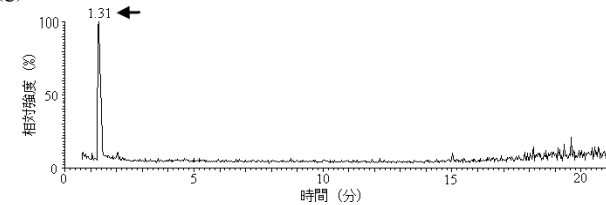
(e) 4-Methylethcathinone



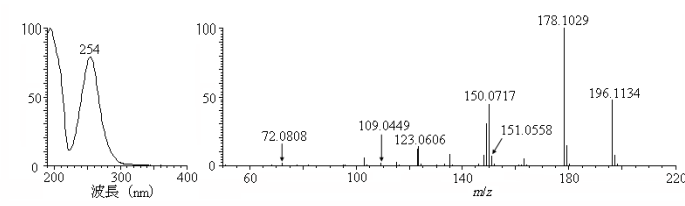
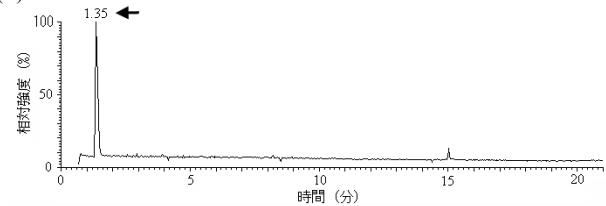
(f) 2-Fluoroethcathinone



(g) 3-Fluoroethcathinone



(h) 4-Fluoroethcathinone



全イオン電流クロマトグラム

UV スペクトル

プロダクトイオンスペクトル

図2 カチノン系物質として包括規制されている指定薬物の全イオン電流クロマトグラム、UV スペクトル及びプロダクトイオンスペクトル

おける基本骨格中のアミノ基側が脱離したフラグメントイオンである図-3の(c)は、分析した包括規制されているカチノン系物質のいずれからも検出された。図-3の(d)及び(e)のフラグメントイオンは、 α -Pyrrolidinopropiophenone のように、基本骨格の3位(図-3*2)に水素以外が結合していない場合は認められないか極めて小さいが、 α -PHP や α -PHPP などのように基本骨格の3位に直鎖状プロピル基や直鎖状ブチル基などのアルキル基が結合した場合は分析した包括規制されているカチノン系物質のいずれからも認められた。図-3の(f)は分析した包括規制されているカチノン系物質のいずれからも検出され、基本骨格中のアミノ基がジメチルアミノ基や1-ピロリジニル基などに置換し第三級アミンとなった場合や基本骨格中のベンゼン環(図-3*3)にメチレンジオキシ基が結合した場合は、当該フラグメントピークが高くなる傾向が観られた。図-3の(g)及び(h)は、フラグメントピークとして大きくはないが、基本骨

格中のアミノ基が1-ピロリジニル基に置換した場合に観られるフラグメントイオンであった。参考までに、いくつかの包括規制されているカチノン系物質のプロダクトイオンスペクトルを図-4に示した。包括規制されているカチノン系物質は1334物質もあり(平成28年7月1日時点)、そのうち標準品として市販されている物質は100にも満たない。そのため、大部分の包括規制されているカチノン系物質については、事前に標準品を分析して、そのプロダクトイオンスペクトルをライブラリーに登録しておくことができず、それら標準品を保有していないカチノン系物質を含む危険ドラッグを分析した際に、その検出の有無を判断するのは難しい。その中で、本分析条件により今回得られた図-3で示すカチノン系物質に特徴的なフラグメントイオンの情報は、標準品を保有していないカチノン系物質が検出したかどうかを判断するのに大変有用なものになると考えられた。

(a) 包括規制されているカチノン系物質が有する基本骨格の構造式

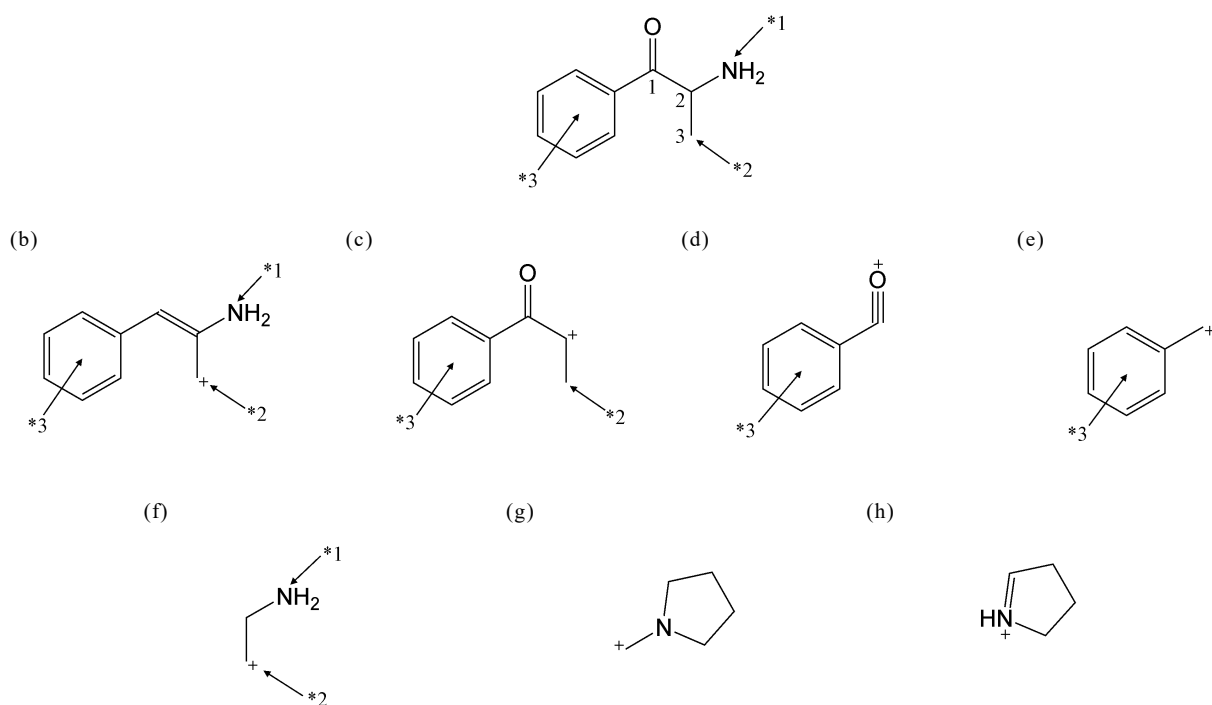


図-3 カチノン系物質として包括規制されている指定薬物に観られるフラグメントイオンの推定構造

*1 基本骨格の2位にアミノ基以外の置換基が結合していないか又は当該アミノ基の代わりに次の置換基のいずれかが結合する。

- 1 メチルアミノ基、2 エチルアミノ基、3 ジメチルアミノ基、4 メチルエチルアミノ基、5 ジエチルアミノ基、6 1-ピロリジニル基

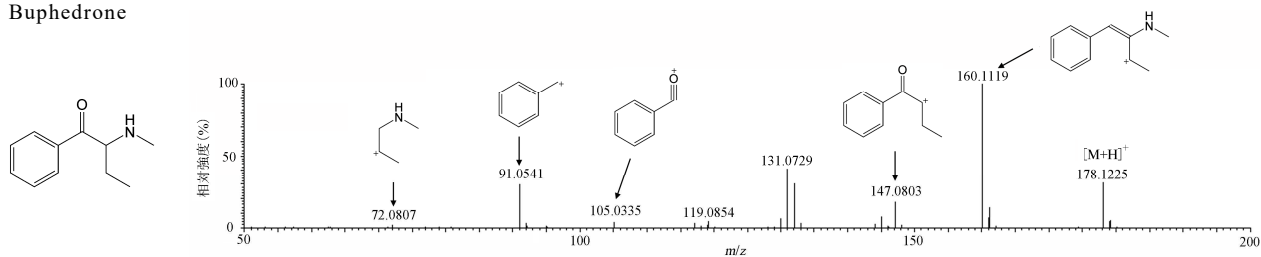
*2 基本骨格の3位に水素以外が結合していないか又は次の置換基のいずれかが結合する。

- 1 メチル基、2 エチル基、3 直鎖状プロピル基、4 直鎖状ブチル基、5 直鎖状ペンチル基、6 直鎖状ヘキシル基、7 直鎖状ヘプチル基

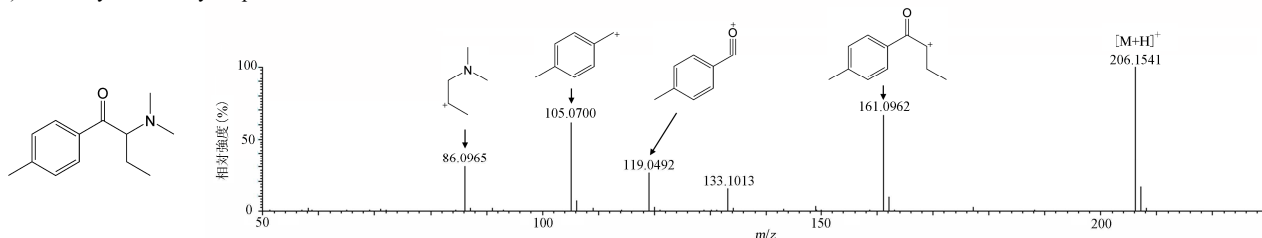
*3 ベンゼン環の2位から6位に水素以外が結合していないか又は当該ベンゼン環の2位、3位若しくは4位に次の置換基のいずれかが結合する。

- 1 メチル基、2 エチル基、3 メトキシ基、4 メチレンジオキシ基、5 フルオロ基、6 クロロ基、7 ブロモ基、8 ヨード基

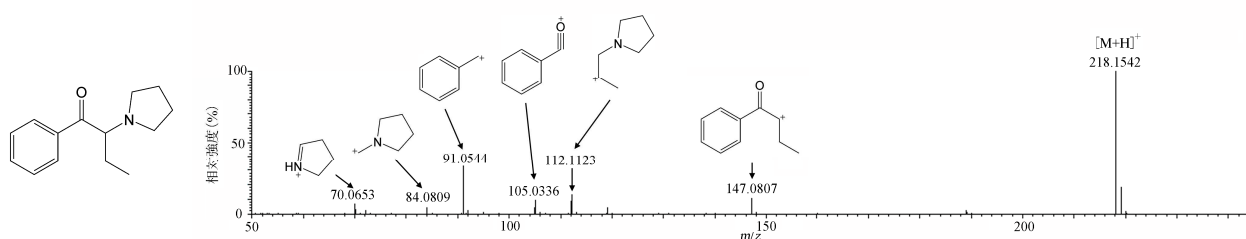
(a) Buphedrone



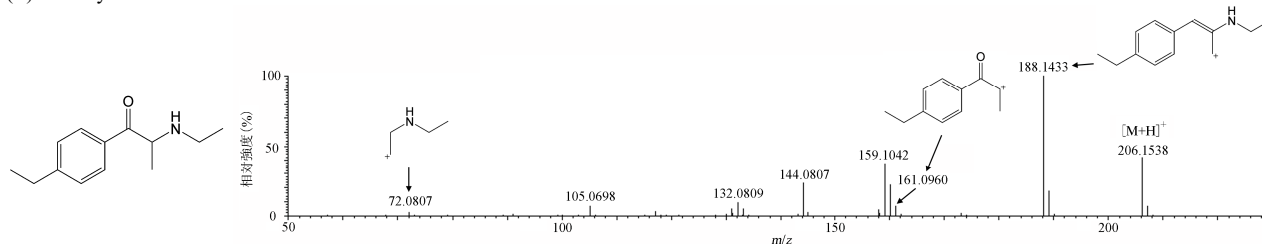
(b) 4-Methyl-N-methylbuphedrone



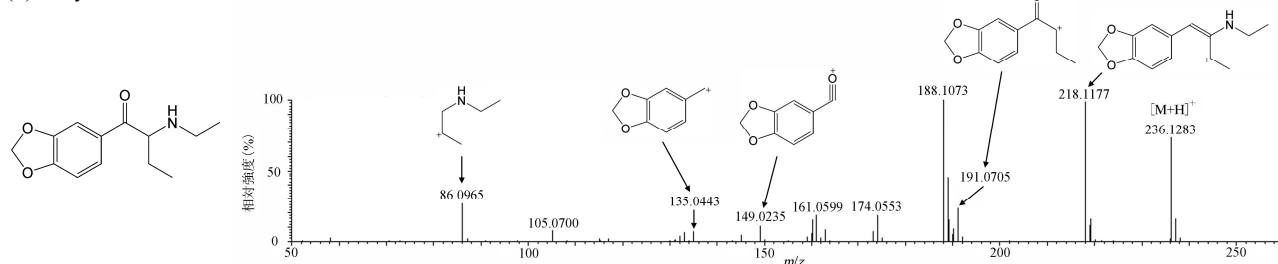
(c) α-PBP



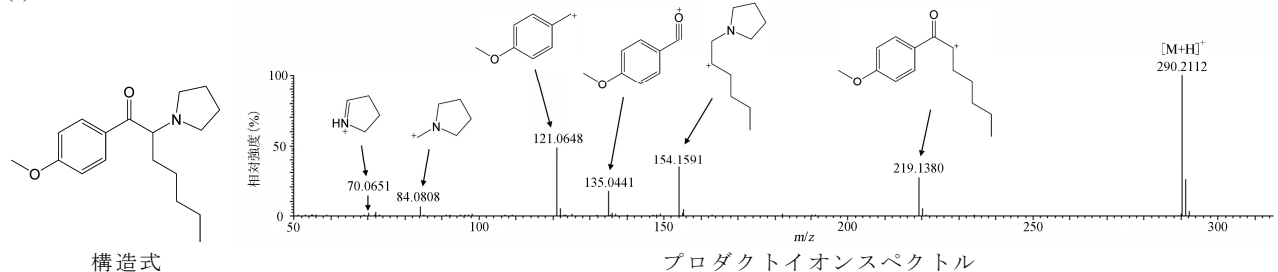
(d) 4-Ethylethcathinone



(e) Eutylone



(f) 4-MeO-α-PHPP



構造式

プロダクトイオンスペクトル

図4 カチノン系物質として包括規制されている指定薬物のプロダクトイオンスペクトル及びフラグメントイオンの推定構造

カンナビノイド系物質として包括規制されている指定薬物の標準品を分析した結果を表-3に示した。いずれのカンナビノイド系物質も、保持時間と[M+H]⁺の精密質量の情報でほぼ区別ができ、

JWH-149(表-3 保持時間 17.71分)とJWH-210(18.11分)のように[M+H]⁺の精密質量が同じで保持時間が近いカンナビノイド系物質どうしであっても検出されるプロダクトイオンの情報により十分な識別が

表-3 カンナビノイド系物質として包括規制されている指定薬物の保持時間及び主なプロダクトイオン

化合物	化学式	保持時間 (分)	ブリーカーイオン ^{*1}		プロダクトイオン ^{*3}		
			精密質量 ^{*2}		精密質量/推定化学式 ^{*4}		
JWH-073 <i>N</i> -(4-hydroxybutyl) analog	C ₂₃ H ₂₁ NO ₂	10.95	344.1645	216.1019/C ₁₃ H ₁₄ NO ₂ ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	103.0544
JWH 018 <i>N</i> -(5-hydroxypentyl) analog	C ₂₄ H ₂₃ NO ₂	11.65	358.1802	230.1176/C ₁₄ H ₁₆ NO ₂ ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0649	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-081 <i>N</i> -(5-hydroxypentyl) analog	C ₂₅ H ₂₅ NO ₂	12.13	388.1907	230.1176/C ₁₄ H ₁₆ NO ₂ ⁺	185.0597/C ₁₂ H ₉ O ₂ ⁺	175.0755	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH 122 <i>N</i> -(5-hydroxypentyl) analog	C ₂₅ H ₂₅ NO ₂	12.45	372.1958	230.1176/C ₁₄ H ₁₆ NO ₂ ⁺	169.0648/C ₁₂ H ₉ O ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	141.0699/C ₁₁ H ₉ ⁺
AM2232	C ₂₄ H ₂₀ N ₂ O	12.59	353.1648	225.1022/C ₁₄ H ₁₃ N ₂ O ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0650	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-398 <i>N</i> -(5-hydroxypentyl) analog	C ₂₄ H ₂₂ ClNO ₂	13.24	392.1412	230.1176/C ₁₄ H ₁₆ NO ₂ ⁺	189.0102/C ₁₁ H ₆ ClO ⁺	179.0260	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-210 <i>N</i> -(5-hydroxypentyl) analog	C ₂₆ H ₂₇ NO ₂	13.27	386.2115	230.1176/C ₁₄ H ₁₆ NO ₂ ⁺	183.0804/C ₁₃ H ₁₁ O ⁺	155.0855/C ₁₂ H ₁₁ ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-072	C ₂₂ H ₁₉ NO	14.45	314.1539	186.0913/C ₁₂ H ₁₂ NO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0650	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH 015	C ₂₃ H ₂₁ NO	14.78	328.1696	200.1070/C ₁₃ H ₁₄ NO ⁺	158.0600/C ₁₀ H ₈ NO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0649
F2201	C ₂₄ H ₂₁ F ₂ NO	15.19	378.1664	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	173.0397/C ₁₁ H ₆ FO ⁺	163.0554	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-022	C ₂₄ H ₂₁ NO	15.54	340.1696	212.1070/C ₁₃ H ₁₄ NO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0649	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-018 <i>N</i> -(5-chloropentyl) analog	C ₂₄ H ₂₂ ClNO	15.60	376.1463	248.0837/C ₁₄ H ₁₅ ClNO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0650	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-016	C ₂₄ H ₂₃ NO	15.89	342.1852	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	158.0600/C ₁₀ H ₈ NO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0650
JWH-018 <i>N</i> -(5-bromopentyl) analog	C ₂₄ H ₂₂ BrNO	15.91	420.0958	292.0332/C ₁₃ H ₁₅ BrO ⁺	212.1070/C ₁₄ H ₁₄ NO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-080	C ₂₄ H ₂₃ NO ₂	15.91	358.1802	200.1070/C ₁₃ H ₁₄ NO ⁺	185.0597/C ₁₂ H ₉ O ₂ ⁺	175.0752	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
EAM2201	C ₂₄ H ₂₆ FNO	16.18	388.2071	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	183.0804/C ₁₃ H ₁₁ O ⁺	155.0855/C ₁₂ H ₁₁ ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-122 <i>N</i> -(5-chloropentyl) analog	C ₂₄ H ₂₄ ClNO	16.34	390.1619	248.0837/C ₁₄ H ₁₅ ClNO ⁺	169.0648/C ₁₂ H ₉ O ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	141.0699/C ₁₁ H ₉ ⁺
JWH 122 <i>N</i> -(4-pentenyl) analog	C ₂₅ H ₂₅ NO	16.37	354.1852	212.1070/C ₁₄ H ₁₄ NO ⁺	169.0648/C ₁₂ H ₉ O ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	141.0699/C ₁₁ H ₉ ⁺
JWH-073 4-methyl naphthyl analog	C ₂₄ H ₂₃ NO	16.38	342.1852	200.1070/C ₁₃ H ₁₄ NO ⁺	169.0648/C ₁₂ H ₉ O ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	141.0699/C ₁₁ H ₉ ⁺
JWH-081	C ₂₅ H ₂₅ NO ₂	16.90	372.1958	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	185.0597/C ₁₂ H ₉ O ₂ ⁺	175.0754	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-007	C ₂₅ H ₂₅ NO	16.94	356.2009	228.1383/C ₁₅ H ₁₈ NO ⁺	158.0600/C ₁₀ H ₈ NO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0649
JWH-412	C ₂₄ H ₂₂ FNO	17.07	360.1758	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	173.0397/C ₁₁ H ₆ FO ⁺	163.0556	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-180	C ₂₅ H ₂₅ NO	17.14	356.2009	197.0961/C ₁₄ H ₁₃ O ⁺	186.0913/C ₁₂ H ₁₂ NO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	141.0700
JWH-098	C ₂₆ H ₂₇ NO ₂	17.23	386.2115	228.1383/C ₁₅ H ₁₈ NO ⁺	185.0597/C ₁₂ H ₉ O ₂ ⁺	175.0755	158.0600/C ₁₀ H ₈ NO ⁺
JWH 019	C ₂₅ H ₂₅ NO	17.51	356.2009	228.1383/C ₁₅ H ₁₈ NO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0650	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-149	C ₂₆ H ₂₇ NO	17.71	370.2165	228.1383/C ₁₅ H ₁₈ NO ⁺	169.0648/C ₁₂ H ₉ O ⁺	158.0600/C ₁₀ H ₈ NO ⁺	141.0699/C ₁₁ H ₉ ⁺
JWH-398	C ₂₄ H ₂₂ ClNO	18.09	376.1463	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	189.0102/C ₁₁ H ₆ ClO ⁺	179.0261	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-210	C ₂₆ H ₂₇ NO	18.11	370.2165	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	183.0804/C ₁₃ H ₁₁ O ⁺	155.0855/C ₁₂ H ₁₁ ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-387	C ₂₄ H ₂₂ BrNO	18.33	420.0958	232.9578	222.9749	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	126.0463
JWH-020	C ₂₆ H ₂₇ NO	18.47	370.2165	242.1539/C ₁₆ H ₂₀ NO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0649	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-213	C ₂₇ H ₂₉ NO	18.54	384.2322	228.1383/C ₁₅ H ₁₈ NO ⁺	183.0804/C ₁₃ H ₁₁ O ⁺	158.0600/C ₁₀ H ₈ NO ⁺	155.0855/C ₁₂ H ₁₁ ⁺
JWH-182	C ₂₇ H ₂₉ NO	18.99	384.2322	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	197.0961/C ₁₄ H ₁₃ O ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	141.0700

*1 [M+H]⁺をブリーカーイオンに選択した。*2 [M+H]⁺より算出した計算精密質量(calculated exact mass)を表す。

*3 プロダクトイオンスペクトルでのピーク強度が高く、化合物の構造的な特徴を示していると考えられるプロダクトイオンを最大4つ選び示した。

*4 推定化学式が示されている場合は計算精密質量(calculated exact mass)を表し、示されていない場合は測定精密質量(measured accurate mass)を表す。

(a) 包括規制されているカンナビノイド系物質が有する基本骨格の構造式

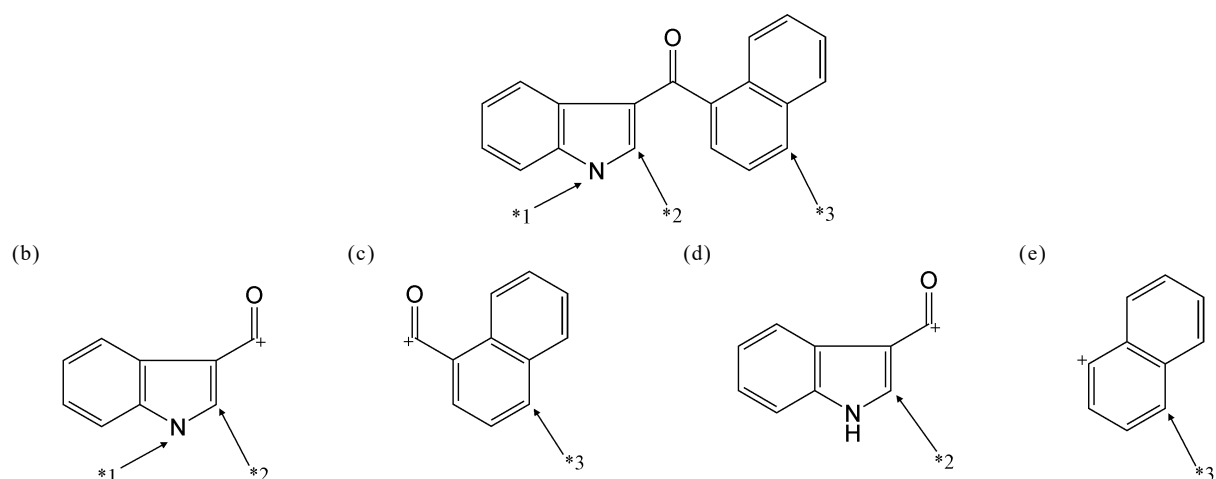


図-5 カンナビノイド系物質として包括規制されている指定薬物に観られるフラグメントイオンの推定構造

*1 基本骨格のインドール環の1位に次の置換基のいずれかが結合する。

- 1 直鎖状アルキル基(炭素数が3から8までのいずれかのものに限り)、2 直鎖状アルケニル基(炭素数が5のものに限り)、
- 3 直鎖状アルキル基(炭素数が3から8までのいずれかのものに限り)の末端の炭素に、フルオロ基、クロロ基、

*2 基本骨格のインドール環の2位に水素が結合しているか又はメチル基が結合する。

*3 基本骨格のナフタレン環の4位に水素が結合しているか又は次の置換基のいずれかが結合する。

- 1 直鎖状アルキル基(炭素数が1から6までのいずれかのものに限り)、2 アルコキシ基(炭素数が1又は2のものに限り)、
- 3 フルオロ基、4 クロロ基、5 ブロモ基、6 ヨード基

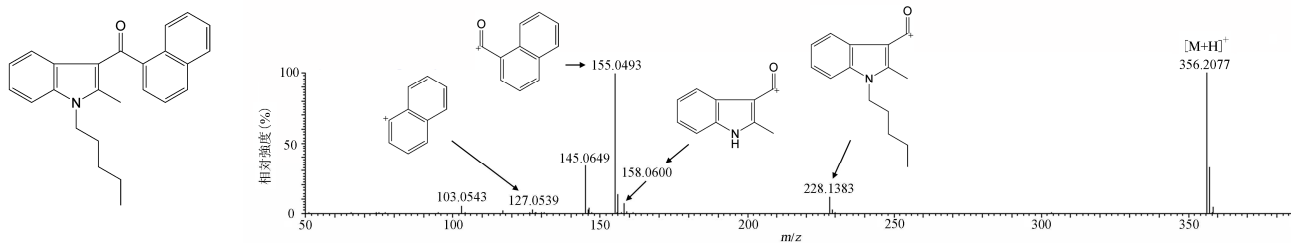
可能であった。

図-5に包括規制されているカンナビノイド系物質を分析して得たプロダクトイオンスペクトル中に観られる特徴的なフラグメントピークの構造を Mass

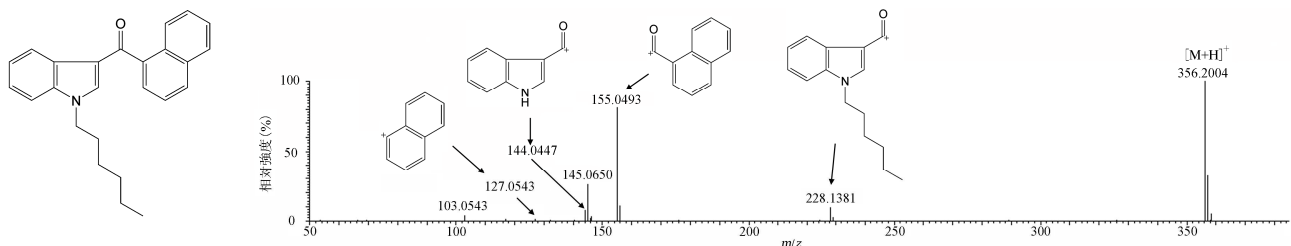
Frontier 7.0 ソフトウェアで予想させた結果を示した。

図-5 の(b)、(c)及び(d)のいずれのフラグメントイオンも、分析を行った包括規制されているカンナビノイド系物質で、そのフラグメントピークが十分に確

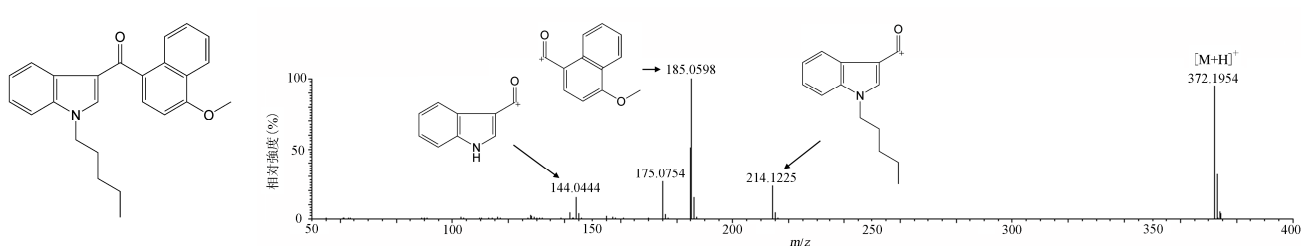
(a) JWH-007



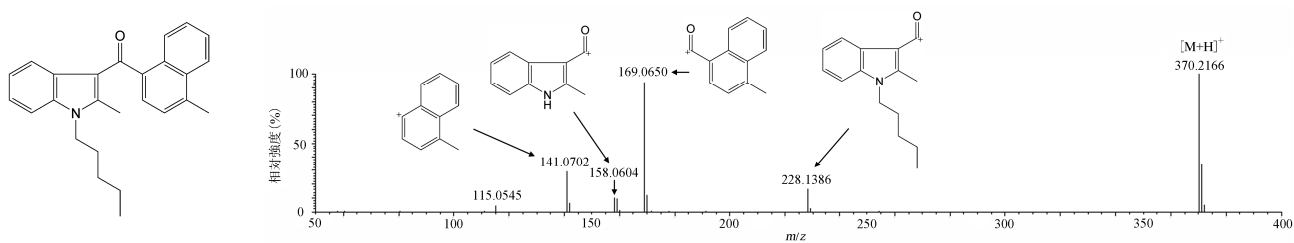
(b) JWH-019



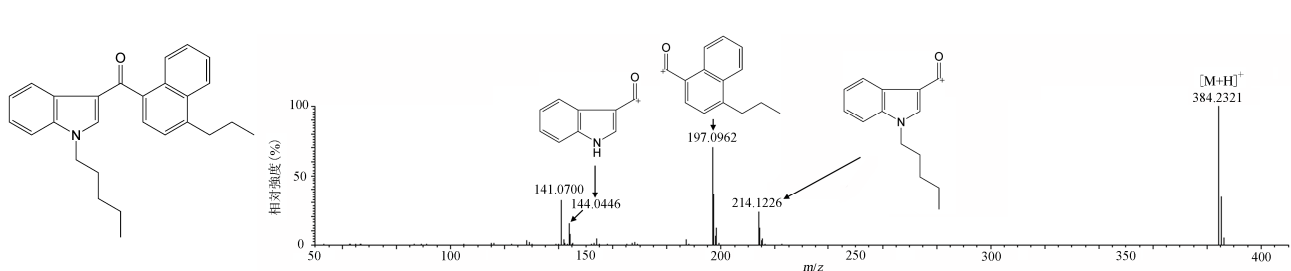
(c) JWH-081



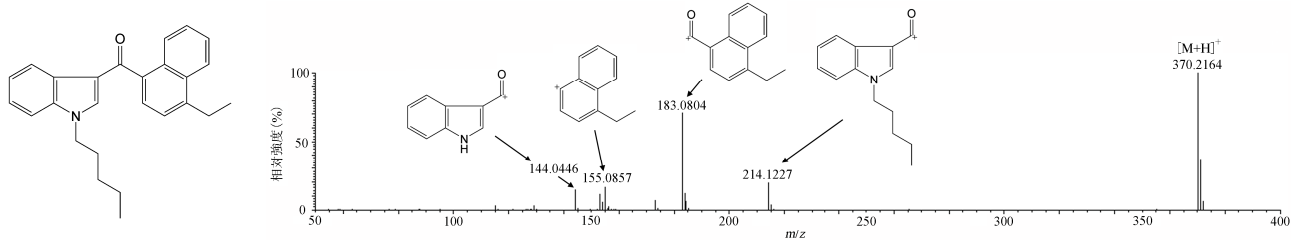
(d) JWH-149



(e) JWH-182



(f) JWH-210



構造式

プロダクトイオンスペクトル

図6 カンナビノイド系物質として包括規制されている指定薬物のプロダクトイオンスペクトル及びフラグメントイオンの推定構造

認できる程度に検出された。図-5の(e)のフラグメントイオンは、ナフタレン環の4位(図-5*3)に結合する置換基がプロピル基又はメトキシ基の場合には、そのフラグメントピークの強度が小さくなり確認が難しくなるが、それ以外の包括規制されているカンナビノイド系物質では十分なピーク強度で確認でき、ナフタレン環の4位に結合する置換基がメチル基又はエチル基の場合には、そのフラグメントピークの強度が大きくなる傾向を示した。参考までに、いくつかの包括規制されているカンナビノイド系物質のプロダクトイオンスペクトルを図-6に示した。包括規制されているカンナビノイド系物質は770物質もあり(平成28年7月1日時点)、そのほとんどは標準品が市販されていない。そのため、図-5で示した本分析条件で得られる包括規制されているカンナビノイド系物質におけるフラグメントパターンを把握しておくことは、カチノン系物質と同様に、危険ドラッグを分析した際に、標準品を保有していない包括規制されているカンナビノイド系物質が検出したかどうかを判断するのに有益であると考えられる。

危険ドラッグから検出した事例がある麻薬のPMMAや向精神薬のPyrovaleroneなどの分析結果を表-4に示した。EthcathinoneやPyrovaleroneは包括規制されているカチノン系物質と同じ基本骨格を有し、前述した包括規制されているカチノン系物質と同様なフラグメントパターンを示した。包括規制されているカンナビノイド系物質と同じ基本骨格を有

し、指定薬物としての規制を経て、現在は麻薬として規制されているAM2201、MAM2201、JWH-073、JWH-018及びJWH-122のフラグメントパターンも同様に前述した包括規制されているカンナビノイド系物質と同じであった。

2. 1,4-BD、GBL及びMDBPの分析条件と分析結果

CORTECS UPLC C18をカラムとして用いた分析法では、1,4-BD、GBL及びMDBPは、当該カラムに十分に保持させることができず、分析することができなかった。そのため、1,4-BD、GBL及びMDBPは、超高速分離用のカラムのうち高極性化合物の保持に優れているACQUITY UPLC HSS T3をカラムとして用い分析を行った。なお、当該カラムを使用して有機溶媒比率の低い移動相を流した場合、標準品をメタノールに溶かした標準溶液では、ピークが割れてしまうため、1,4-BD、GBL及びMDBPの標準溶液は10%メタノールで調製した。

1,4-BD、GBL及びMDBPを対象とした分析におけるマスマスペクトルの取得方法は、full MSモードとPRMモードを併用することを選択した。これによりfull MSモードで[M+H]⁺の情報を、PRMモードで[M+H]⁺をプリカーサーイオンとして取得できるプロダクトイオンの情報とその全イオン電流クロマトグラムを得ることができ、高感度な分析が可能となった。また、1,4-BD、GBL及びMDBP以外の成分の分析よりもキャピラリー温度とヒーター温度を下げることににより、1,4-BDの[M+H]⁺のピーク強度が増加

表-4 麻薬及び向精神薬の保持時間及び主なプロダクトイオン

化合物	化学式	保持時間 (分)	プリカーサーイオン*1		プロダクトイオン*3		
			精密質量*2		精密質量/推定化学式*4		
Ethcathinone	C ₁₁ H ₁₃ NO	1.11	178.1226	160.1121/C ₁₁ H ₁₄ N ⁺	132.0808/C ₉ H ₁₀ N ⁺	105.0700	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
PMMA	C ₁₁ H ₁₇ NO	1.72	180.1383	149.0961/C ₁₀ H ₁₃ O ⁺	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	109.0648/C ₇ H ₉ O ⁺	91.0543
AMT	C ₁₁ H ₁₄ N ₂	1.74	175.1230	158.0964/C ₁₁ H ₁₃ N ⁺	143.0730	130.0651/C ₇ H ₉ N ⁺	117.0573
Ketamine	C ₁₃ H ₁₆ ClNO	2.56	238.0993	220.0888/C ₁₃ H ₁₅ ClN ⁺	207.0571/C ₁₂ H ₁₂ ClO ⁺	179.0622/C ₁₁ H ₁₂ Cl ⁺	125.0154
MBDB	C ₁₂ H ₁₇ NO ₂	2.67	208.1332	177.0910/C ₁₁ H ₁₃ O ₂ ⁺	147.0804/C ₁₀ H ₁₁ O ⁺	135.0441/C ₈ H ₉ O ₂ ⁺	72.0808/C ₄ H ₁₀ N ⁺
3CPP	C ₁₀ H ₁₃ ClN ₂	3.32	197.0840	154.0418/C ₈ H ₉ ClN ⁺	119.0731		
Methoxetamine	C ₁₃ H ₂₁ NO ₂	3.41	248.1645	203.1067/C ₁₃ H ₂₁ O ₂ ⁺	175.1117/C ₁₂ H ₁₉ O ⁺	159.0804/C ₁₁ H ₁₇ O ⁺	121.0650/C ₈ H ₉ O ⁺
4,4'-DMAR	C ₁₁ H ₁₄ N ₂ O	3.56	191.1179	148.1121/C ₁₀ H ₁₄ N ⁺	131.0855/C ₁₀ H ₁₁ ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺	56.0495/C ₄ H ₆ N ⁺
α-PVP	C ₁₅ H ₂₁ NO	3.67	232.1696	161.0961/C ₁₁ H ₁₃ O ⁺	126.1277/C ₈ H ₉ N ⁺	105.0335/C ₇ H ₉ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
Acetyl fentanyl	C ₂₁ H ₂₆ N ₂ O	5.03	323.2118	202.1226/C ₁₃ H ₁₆ NO ⁺	188.1434/C ₁₃ H ₁₈ N ⁺	132.0808/C ₉ H ₁₀ N ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
Pyrovalerone	C ₁₆ H ₂₃ NO	5.17	246.1852	175.1117/C ₁₂ H ₁₅ O ⁺	126.1277/C ₈ H ₉ N ⁺	119.0491/C ₇ H ₉ O ⁺	105.0699/C ₈ H ₉ ⁺
AH-7921	C ₁₆ H ₂₂ Cl ₂ N ₂ O	6.31	329.1182	284.0603/C ₁₄ H ₁₆ Cl ₂ NO ⁺	172.9555/C ₇ H ₇ Cl ₂ O ⁺	95.0855/C ₇ H ₁₁ ⁺	67.0542/C ₃ H ₇ ⁺
2C-C-NBOMe	C ₁₈ H ₂₂ ClNO ₃	7.48	336.1361	199.0520/C ₁₀ H ₁₂ ClO ₂ ⁺	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	109.0648/C ₇ H ₉ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺
MT-45	C ₂₄ H ₃₂ N ₂	7.66	349.2638	181.1012/C ₁₄ H ₁₃ ⁺	169.1699/C ₁₀ H ₂₁ N ₂ ⁺	103.0542/C ₈ H ₇ ⁺	87.0916/C ₄ H ₁₁ N ₂ ⁺
25B-NBOMe	C ₁₈ H ₂₂ BrNO ₃	7.77	380.0856	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	109.0648/C ₇ H ₉ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺	
25I-NBOMe	C ₁₈ H ₂₂ INO ₃	8.30	428.0717	121.0648/C ₈ H ₉ O ⁺	109.0648/C ₇ H ₉ O ⁺	91.0542/C ₇ H ₇ ⁺	
5F-QUPIC	C ₂₃ H ₂₁ FN ₂ O ₂	13.10	377.1660	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	116.0495/C ₈ H ₆ N ⁺	69.0699/C ₃ H ₉ ⁺
AM2201	C ₂₄ H ₂₂ FNO	14.61	360.1758	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0650	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
MAM2201	C ₂₅ H ₂₄ FNO	15.36	374.1915	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	169.0648/C ₁₂ H ₉ O ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	141.0699/C ₁₁ H ₉ ⁺
JWH-073	C ₂₃ H ₂₁ NO	15.54	328.1696	200.1070/C ₁₃ H ₁₄ NO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0648	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
XLR-11	C ₂₁ H ₂₈ FNO	15.81	330.2228	232.1132/C ₁₄ H ₁₅ FNO ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	125.0961/C ₈ H ₁₃ O ⁺	97.1012/C ₇ H ₁₃ ⁺
JWH-018	C ₂₄ H ₂₃ NO	16.51	342.1852	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	155.0491/C ₁₁ H ₇ O ⁺	145.0649	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺
JWH-122	C ₂₅ H ₂₅ NO	17.33	356.2009	214.1226/C ₁₄ H ₁₆ NO ⁺	169.0648/C ₁₂ H ₉ O ⁺	144.0444/C ₉ H ₆ NO ⁺	141.0699/C ₁₁ H ₉ ⁺

*1 [M+H]⁺をプリカーサーイオンに選択した。

*2 [M+H]⁺より算出した計算精密質量(calculated exact mass)を表す。

*3 プロダクトイオンスペクトルでのピーク強度が高く、化合物の構造的な特徴を示していると考えられるプロダクトイオンを最大4つ選び示した。

*4 推定化学式が示されている場合は計算精密質量(calculated exact mass)を表し、示されていない場合は測定精密質量(measured accurate mass)を表す。

表-5 1,4-BD、GBL 及び MDBP の保持時間及びプロダクトイオン

化合物	化学式	保持時間 (分)	プリカーサーイオン*1	プロダクトイオン	
			精密質量*2	精密質量/推定化学式*3	
1,4-BD	C ₄ H ₁₀ O ₂	1.28	91.0754	73.0648/C ₄ H ₉ O ⁺	55.0542/C ₄ H ₇ ⁺
GBL	C ₄ H ₈ O ₂	1.49	87.0441	69.0335/C ₄ H ₇ O ⁺	59.0491/C ₃ H ₇ O ⁺
MDBP	C ₁₂ H ₁₆ N ₂ O ₂	1.91	221.1285	135.0441/C ₈ H ₇ O ₂ ⁺	85.0760/C ₄ H ₉ N ₂ ⁺

*1 [M+H]⁺をプリカーサーイオンに選択した。*2 [M+H]⁺より算出した計算精密質量(calculated exact mass)を表す。

*3 推定化学式より算出した計算精密質量(calculated exact mass)を表す。

表-6 陽性検体の分析結果

陽性検体番号	形状	検出成分(ライブラリー一致率)			
1	粉末	bk-MBDB (100%)			
2	植物細片	JWH-018 (100%)	JWH-073 (100%)		
3	植物細片	JWH-081 (100%)	JWH-200 (100%)	JWH-250 (100%)	
4	液体	4-Fluoromethcathinone (100%)			
5	粉末	JWH-081 (100%)	JWH-122 (100%)	Penty lone (100%)	Desethyl pyrovalerone (100%)
6	植物細片	JWH-015 (100%)	JWH-203 (90%)	JWH-251 (100%)	
7	液体	α -PVP (100%)	Desoxy-D2PM (100%)	Ethcathinone (100%)	4-Methylcathinone (100%)
8	植物細片	RCS-4 (100%)			
9	植物細片	AM694 (100%)	AM2233 (100%)	Methoxetamine (100%)	
10	植物細片	AM1220 (100%)	APICA (100%)	APINACA (100%)	
11	粉末	Dimethocaine (100%)			
12	粉末	MDPPP (100%)			
13	粉末	XLR-11 (100%)			
14	植物細片	AM2201 (100%)	UR-144 (100%)	25I-NBOMe (100%)	
15	植物細片	AH-7921 (100%)	MAM2201 (100%)	5F-APINACA (100%)	
16	植物細片	bk-MDEA (100%)	α -PBP (100%)	Pentedrone (100%)	QUPIC (100%)
17	植物細片	ADBICA (80%)	AB-PINACA (90%)	ADB-FUBINACA (100%)	
18	植物細片	5-Fluoropentyl-3-pyridinoyl indole (80%)			
19	シート	25B-NBOMe (100%)			
20	液体	α -PVT (100%)	NEB (100%)	4-Methylbuphedrone (100%)	
21	液体	Ethylphenidate (90%)			
22	植物細片	5F-QUPIC (100%)	NNE1 (100%)		
23	粉末	α -PHPP (100%)			
24	植物細片	5F-NNE1 (100%)	QUCHIC (100%)		
25	植物細片	5-APDB (80%)	5-Fluoro-AB-PINACA (100%)		
26	粉末	α -POP (100%)	Diclofensine (90%)	5-Fluoro-MN-18 (100%)	
27	植物細片	FUB-PB-22 (70%)	THJ-2201 (100%)		
28	植物細片	α -PHP (100%)	Diphenidine (100%)	Acetyl fentanyl (90%)	
29	植物細片	3-MeO-PCP (96%)	5-Fluoro-AMB (90%)		
30	粉末	Mepirapim (100%)			
31	植物細片	4-Methoxy- α -POP (100%)	5-Fluoro-AMB (100%)	AB-CHMINACA (100%)	
32	粉末	4-Fluoro- α -PHPP (100%)	4-Methoxy- α -PHPP (100%)		
33	粉末	α -POP (100%)	α -PNP (100%)	Methoxphenidine (100%)	
34	粉末	α -PBT (100%)			
35	植物細片	FDU-PB-22 (73%)	NM2201 (80%)		
36	液体	5-MeO-DALT (100%)			
37	液体	bk-IVP (100%)			
38	粉末	5-BPDI (100%)			
39	液体	1,4-BD (80%)			
40	液体	GBL (80%)			

したため、キャピラリー温度及びヒーター温度をそれぞれ、280℃及び 200℃に設定した。

この条件で 1,4-BD、GBL 及び MDBP を分析した結果を表-5 に示した。マススペクトルの取得方法として full MS モードと PRM モードを併用することでいずれの 3 物質も感度よく分析することが可能であった。また、超高速分離用のカラムを用いたことで、いずれの 3 物質とも 2 分以内に溶出させて検出することができ、1,4-BD や GBL の分析のために、従来から当室で行っていた分析法²⁾よりも分析に要する時間を半分以上に短縮することが可能であった。

3. 陽性検体への適用

過去に指定薬物等が検出された危険ドラッグを陽性検体として検討した一斉分析法に適用した。標準品の分析で得られた保持時間、 $[M+H]^+$ 又は $[M-H]^-$ の精密質量及びそれらをプリカーサーイオンとして得られるプロダクトイオンの情報を TraceFinder 3.2 ソフトウェアに、そして $[M+H]^+$ 又は $[M-H]^-$ をプリカーサーイオンとして取得したプロダクトイオンスペクトルをライブラリーソフトウェアに予め登録しておくことで、TraceFinder 3.2 ソフトウェアを用いた自動解析により、マニュアル解析をすることなく各陽性検体中に含まれる成分を容易に検出することが可能であった。また、ライブラリーとの一致率も良好であった(表-6)。危険ドラッグ中の含有量が 1%未満の微量な麻薬や指定薬物も検出することができおり、構築した危険ドラッグの一斉分析法はスクリーニング分析として十分に機能するものと考えられた。

まとめ

UPLC-Q-Orbitrap MS を用いた危険ドラッグの一斉分析法を検討した結果、超高速分離用のカラムを用いることで従来の分析法^{2),3)}よりも分析に要する時間を短くするとともに、各成分の $[M+H]^+$ 又は $[M-H]^-$ の精密質量及びプロダクトイオンスペクトルを良好に取得できる分析法を構築することができた。また、標準品を分析して得られた保持時間、 $[M+H]^+$ 又は $[M-H]^-$ の精密質量及びプロダクトイオンスペクトルの情報を利用して、自動解析により各成分の検出の有無を判断することを可能とした。

なお、標準品を保有していない指定薬物については、その $[M+H]^+$ の精密質量の情報を TraceFinder 3.2 ソフトウェアに登録しておくことで、標準品を保有していないことによる検出漏れがないようにした。さらに、標準品を保有していない包括規制されているカチノン系物質やカンナビノイド系物質については、今回、標準品の分析で得られたフラグメントパターンの情報を利用して、そのフラグメントを予想し、 $[M+H]^+$ の精密質量の情報とともに、その予想し

たフラグメントイオンの精密質量を TraceFinder 3.2 ソフトウェアに登録しておくことで、より精度よく標準品を保有していない包括規制されているカチノン系物質やカンナビノイド系物質の検出を自動解析で推定することを可能とした。

新たに流通する危険ドラッグの多くは、既存の指定薬物等の構造の一部分を変化させた物質を含むことが多い³⁻⁸⁾。そのため、今回構築した一斉分析法により取得した指定薬物等についての構造的な特徴を示すプロダクトイオンの膨大な情報は、今後、未知の成分を検出した際に、その構造を推定する一助となるものと考えられた。

今後は、指定薬物等の標準品のさらなる確保に努めるとともに、そのデータの蓄積を行い、新たな危険ドラッグの流通に備えていく予定である。

文献

- 1) 長谷川貴志, 石井俊靖, 西條雅明, 永田知子, 花尻(木倉)瑠璃, 合田幸広: 千葉県における違法ドラッグ試験検査について(平成 18 年度), 千葉県衛研年報, 55, 79-83 (2006)
- 2) 長谷川貴志, 石井俊靖, 西條雅明, 高橋市長, 永田知子: 千葉県における違法ドラッグ試験検査について(平成 19 年度), 千葉県衛研年報, 56, 52-54 (2007)
- 3) 高橋市長, 長谷川貴志, 西條雅明, 永田知子, 花尻(木倉)瑠璃, 合田幸広: 千葉県における違法ドラッグ試験検査について(平成 21 年度), 千葉県衛研年報, 58, 51-54 (2009)
- 4) Uchiyama, N., Kawamura, M., Kikura-Hanajiri, R., Goda, Y.: Identification of two new-type synthetic cannabinoids, *N*-(1-adamantyl)-1-pentyl-1*H*-indole-3-carboxamide (APICA) and *N*-(1-adamantyl)-1-pentyl-1*H*-indazole-3-carboxamide (APINACA), and detection of five synthetic cannabinoids, AM-1220, AM-2233, AM-1241, CB-13 (CRA-13), and AM-1248, as designer drugs in illegal products., *Forensic Toxicol*, 30, 114-125 (2012).
- 5) Kikura-Hanajiri, T., Uchiyama, N., Kawamura, M., Goda, Y.: Changes in the prevalence of synthetic cannabinoids and cathinone derivatives in Japan until early 2012., *Forensic Toxicol*, 31, 44-53 (2013).
- 6) Kazunaga, T., Uchiyama, N., Fukiwake, T., Hasegawa, T., Saijou, M., Motoki, Y. et al.: Identification and quantitation of JWH-213, a cannabimimetic indole, as a designer drug in a herbal product., *Forensic Toxicol*, 31, 145-150 (2013).
- 7) 鈴木仁, 牛山慶子, 中島順一, 吉田正雄, 市川

瑤子，高橋美佐子，他：平成 25 年度薬物分析調査について（平成 25 年度），東京健安研セ年報，65，61-75 (2014)

- 8) 中嶋順一，鈴木仁，牛山慶子，坂本美穂，吉田正雄，市川瑤子，他：危険ドラッグから検出された薬物に関する理化学試験結果（平成 26 年度），東京健安研セ年報，66，103-115 (2015)
- 9) 指定薬物の分析法について，薬食監麻発第 0521002 号，平成 19 年 5 月 21 日