



## Application Note 可搬型FT-IRと混合物サーチ機能を用いた薬物の定性分析

### はじめに

薬物には、覚せい剤、麻薬、大麻、危険ドラッグなどが含まれ、さまざまな化学的特徴および薬理学的特徴を有します。法律では規制薬物の対象範囲が広げられてはいるものの、近年、社会問題になっている危険ドラッグについては、その規制の網をすり抜けるために化学構造や作用が類似した薬物が新たに作り出され、市場に流通する種類は絶えず増え続けています。薬物は、単一成分から成ることもありますが、多くの場合、多成分の混合物として存在します。これは、化学的性質の類似した希釈成分を加え、高価な主成分の使用量を減らすために行われます。また、一部の物理的性質の類似した希釈成分が混合され、重量や体積の調整に使用されることもあります。その結果、化学的にも物理的にも類似した性質をもつ薬物となるため、規制されている薬物か否かを簡単に見分けることは困難となります。そして、このような混合薬物の副作用がトラブルを招き、最悪の場合、死をもたらすこともあります。規制薬物の密輸や販売といった犯罪行為を摘発するためにも、薬物に含まれている各成分を迅速に同定することが今まさに強く必要とされています。ここでは、薬物の分析に最適な赤外分光計と、そのスペクトル解析ツールとして有効な混合物サーチ機能を用いた、危険ドラッグの定性分析事例について紹介します。

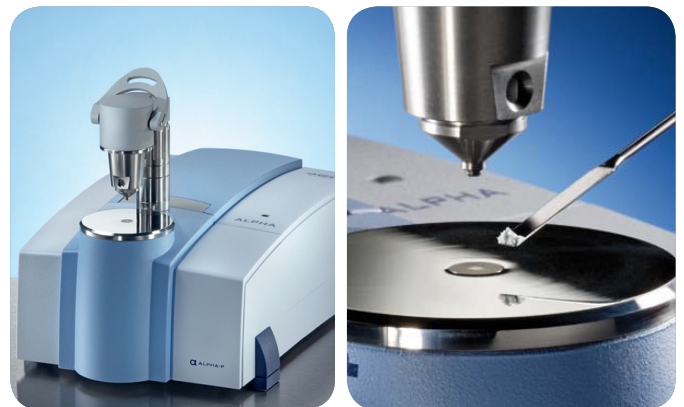


図 1. 可搬型 FT-IR ALPHA-P

### 分析方法

可搬型 FT-IR ALPHA は、A4 サイズというコンパクトさ故に使用場所を選ばず、純品の規制薬物や危険ドラッグの識別に有効な分析ツールです。測定の原理は赤外分光法に基づきます。物質に赤外 (IR) 光を照射すると分子振動が誘起され、その振動モードに伴った特定波長のエネルギーが選択的に吸収されます。測定で得られるスペクトルは、IR 光の各波長における吸収強度で表され、分析対象物の化学構造を反映することから、薬物の識別や定性にも有効

です。薬物の測定は、一回反射ダイヤモンド ATR モジュールを装備する ALPHA (ALPHA-P) により、簡単、迅速に行うことができます。試料をダイヤモンドプリズムの上に置き、圧力クランプで密着させるだけで、20 秒程度で測定が完了します。ATR 法は試料調製を必要としないため、追加で使用する薬品や消耗品もありません。

### ライブラリ・混合物サーチ機能

それぞれの薬物試料の同定は、成分が特定されている物質の IR スペクトルデータが収録されたライブラリと、ALPHA の制御およびスペクトルの解析に使用される OPUS ソフトウェアの自動スペクトルサーチ機能によって行われます。このアプリケーションノートの中で紹介する薬物のサーチ分析は、最新の薬物が 200 件以上収録された TICTAC ライブラリ (<http://www.tictac.org.uk/>) と、多分野にわたるさまざまな物質が 26,000 件以上収録された ATR コンプリートライブラリを使用して行われました。

FT-IR 分光計 ALPHA-P とこれらのライブラリとを組み合わせることで、純物質の薬物のみならず、混合薬物も同定することができます。OPUS ソフトウェアの“標準サーチアルゴリズム”は、測定したスペクトルをライブラリデータに照合させ、その中から最もスペクトルパターンが類似する物質を見つけ出す強力な機能を有します。しかし混合薬物の場合、測定したスペクトルは複数の成分に由来するピークが混在するため、各成分を同定することは困難になります。このような混合スペクトルの定性的な解析には、OPUS の“混合物サーチアルゴリズム”が威力を発揮します。混合物サーチ機能を実行すると、スペクトルパターンが最も類似する複数成分の組み合わせが自動計算され、最終的に混合物に含まれる各成分の候補が導き出されます。

### 例：純物質薬物の分析

メフェドロンは世界的に規制薬物と定められており、日本でも麻薬のひとつとして指定され、輸入や所持等が全面禁止されています。図 2 に、ALPHA-P を用いて測定したメフェドロンの IR スペクトルと、そのライブラリサーチ結果を示します。測定スペクトルとライブラリスペクトル

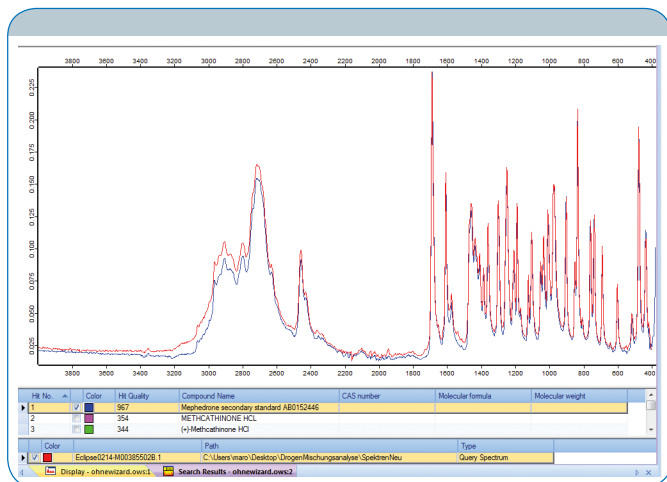


図 2. メフェドロンのライブラリサーチ結果 (赤=測定スペクトル、青=ライブラリスペクトル)

の類似性はヒットクオリティという数値で表され、1000 ポイントが最大であり、このとき、両者が完全に一致していることを示します。このサーチ結果では、ヒットクオリティは 967 ポイントと非常に高く、スペクトルパターンもほぼ一致していることから、本試料はメフェドロンの純物質であると判断できます。

しかしながら、このような純物質のケースは稀であり、現実的には、複数の成分が混合された状態で流通しています。

### 例：コカイン塩酸塩混合薬物の分析

ここでは、コカイン塩酸塩が別の物質で希釈された混合薬物の分析例を示します。図 3 に、ALPHA-P を用いて測定した混合薬物のスペクトルと、その混合物サーチの結果を示します。赤色は測定した試料のスペクトル、紫色は検索で得られた 2 成分のスペクトルを足し合わせた複合スペクトル、緑色は試料のスペクトル (赤色) から複合スペクトル (紫色) を差分した残差スペクトルを示します。

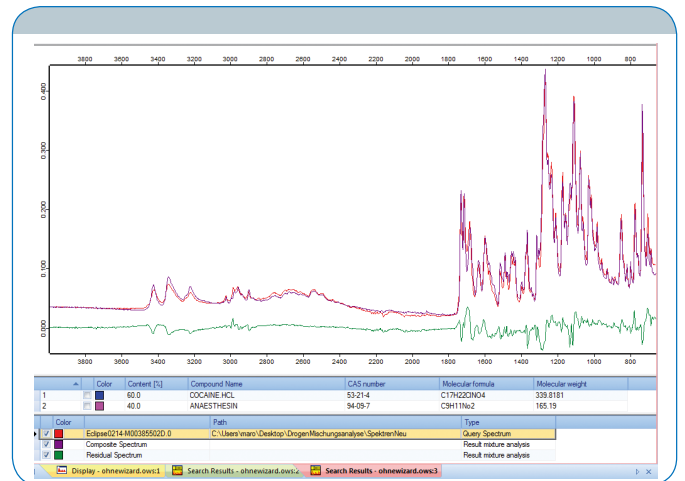


図 3. コカイン塩酸塩を含む混合薬物の混合物サーチ結果 (赤色=測定スペクトル、紫色=検索結果の 2 成分のスペクトルを足し合わせた複合スペクトル、緑色=残差スペクトル; 赤色-紫色)

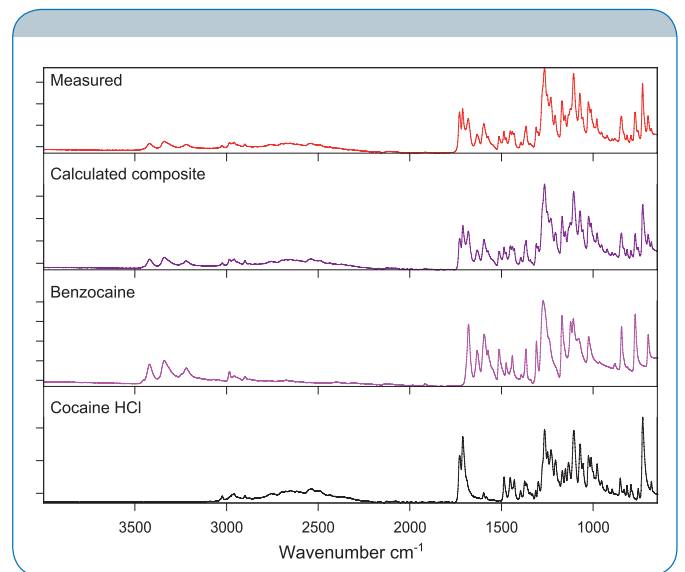


図 4. コカイン塩酸塩を含む混合薬物の測定スペクトルと検索でヒットした化合物のスペクトル

残差スペクトルが平坦に近づくほど、両者の類似性が高いことを表します。この解析結果では、残差スペクトルの強度は小さく、測定したスペクトルと複合スペクトルはほぼ一致していることから、主成分のコカイン塩酸塩に加え、局所麻酔薬のアネステジン（ベンゾカイン）が含まれていると考えられます。また、サーチ結果において成分 [%] に示される数値から、試料に含まれる各成分のおおよその濃度を見積もることもできます。図4は、図3で表示した測定スペクトルと、検索で得られた複合スペクトルおよび各単一成分のスペクトルを並べて表示したものです。コカイン塩酸塩とベンゾカインのスペクトルは非常に類似していますが、混合物サーチ機能は、混合薬物中の各成分を的確に捉えることができました。

### 例：クラックの分析

クラックは、コカイン塩（多くはコカイン塩酸塩）を炭酸水素ナトリウム（重曹）と共に加熱することにより生成される高純度コカインを主成分とします。高純度コカインはコカイン塩酸塩とは対照的に融点が低く揮発性が高いため、クラックを喫煙する形で体内に取り込まれます。クラックも通常は他の成分と混合されており、純品として扱われることは稀です。図5に、ALPHA-Pを用いて測定した実際のストリートドラッグの混合物サーチ結果を示します。その結果、本試料も局所麻酔薬のアネステジンが混合されていることがわかりました。さらに、鎮痛剤のアセトフェネチジン（フェナセチン）も相当量含まれていることが判

明しました。アセトフェネチジンは弛緩薬や抗うつ剤として使用されていましたが、その腎臓毒性により現在ではほとんどの国で使用が禁止されています。しかし現在でも、希釈物質として使用されており、この分析結果のように高濃度で検出されることがあります。

### まとめ

可搬型 FT-IR ALPHA は、使用場所を選ばず簡単な操作で、純物質の薬物および混合薬物を迅速に測定することができます。測定した IR スペクトルの定性的な解析には、最新の薬物が収録された TICTAC ライブラリと多分野にわたる化合物が収録された ATR コンプリートライブラリを使用できます。また、ユーザ自身が測定した新たな薬物のスペクトルをライブラリに追加登録することも可能です。近年、社会問題となっている危険ドラッグにおいては、類似した化合物が年々増え続けていることから、ライブラリを更新することは重要です。このようなライブラリを元に、OPUS ソフトウェアの混合物サーチ機能を用いて解析することで、広範な薬物を迅速に同定することができ、密輸や販売などの犯罪行為の摘発に役立つことが期待されます。

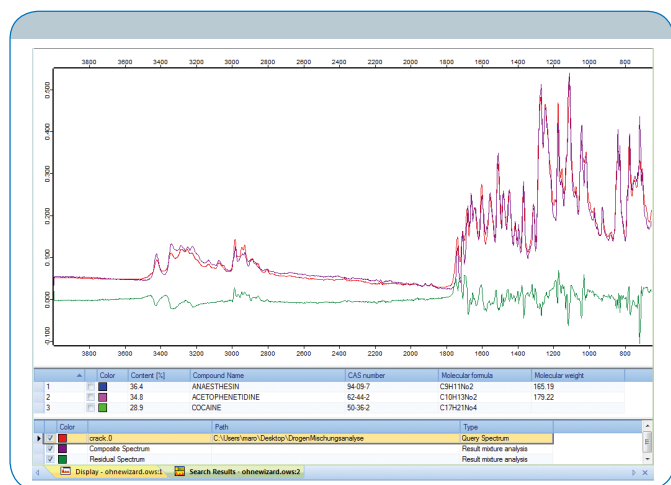


図5. クラックの混合物サーチ結果（赤色＝測定スペクトル、紫色＝検索結果の3成分のスペクトルを足し合わせた複合スペクトル、緑色＝残差スペクトル；赤色－紫色）



### ● ブルカー・オプティクス株式会社

本社：〒104-0033 東京都中央区新川 1-4-1 住友不動産六甲ビル  
 Phone: 03-3523-6870 Fax: 03-3523-6871  
 大阪営業所：〒532-0004 大阪市淀川区西宮原 1-8-29 テラサキ第2ビル  
 Phone: 06-6394-8118 Fax: 06-6394-9003  
 marketing@bruker-optics.jp