

## 平成26年度 トピックス

## 分子・物質合成プラットフォームにおける利用成果

## 危険ドラッグの合成とGC-MSによる分析方法の検討

(S-14-MS-0032)

A 科学警察研究所, b 分子科学研究所

a 辻川健治, b 井上三佳、東林修平

## 【目的】

危険ドラッグの正確な薬物鑑定方法確立のため、ジアステレオマーを単離した3,4ジクロロメチルフェニデート(DCMP)の合成を行った。

DCMPは、国内外で広く乱用されている薬物である。この薬物は1組のジアステレオマー(エリスロ体、スレオ体)を有するが、いずれのジアステレオマーとも指定薬物として規制を受けている。薬物の鑑定には、ガスクロマトグラフィー質量分析(GC-MS)法が第一選択肢として用いられているが、GCによる分析時に熱分解を起こす可能性があり、ジアステレオマーの分離に関する知見も得られていなかった。

標準品は現時点では市販されておらず、また、当研究所での合成も困難であったため、分子科学研究所でDCMPの各ジアステレオマーを合成し、得られた標準品を用いて、GC-MSによる分析条件の検討を行った。

## 【成果】

3,4-ジクロロメチルフェニデート(DMCP)は図1のスキームにより合成した。ジアステレオマー(エリスロ体とスレオ体)は混合物として得、両異性体をクロマトグラフィーで分離した。得られた化合物はNMRスペクトルの文献値との比較により構造を確認した。図2(a)

GC-MSによる分析時のDCMPの熱分解の防止に加え、ジアステレオマーの分離を目的として、DCMPをトリフルオロアセチル(TFA)誘導体(図2(b))に変換した後にGC-MSを行った。その結果、各ジアステレオマーは異なるクロマトグラム(図3)を与え、質量スペクトルからも熱分解も防止されたことが明らかとなった。

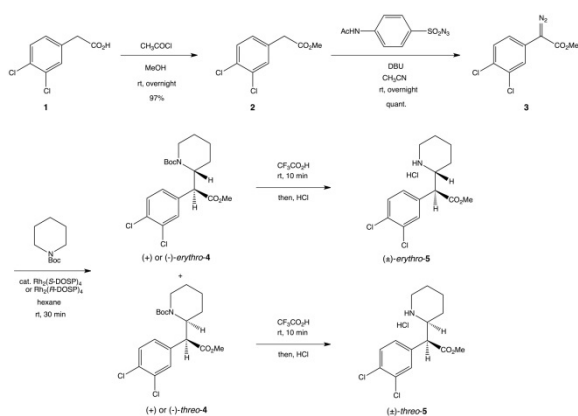


図1: DCMPの合成スキーム

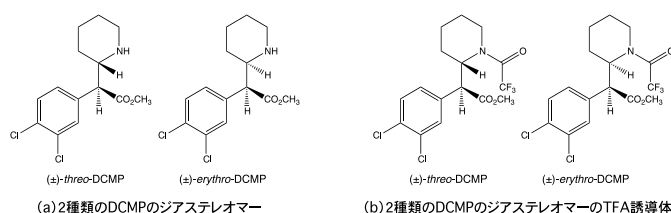


図2: 図 (a) 危険ドラッグ3,4-ジクロロメチルフェニデートDCMPのそれぞれのジアステレオマーの構造式、(b) それぞれのDCMPのトリフルオロ酢酸誘導体の構造式。

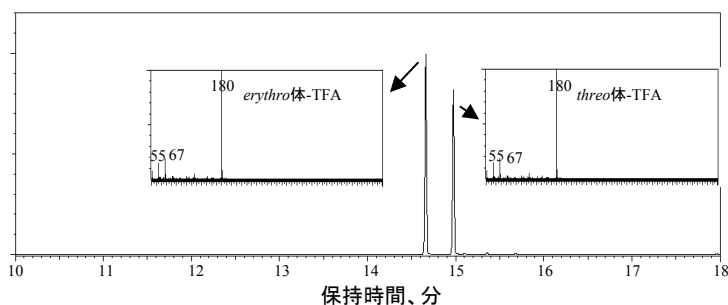


図3: DCMPのTFA誘導体のGC-MSスペクトル