

EI-MS/MSによるフルオロベンジル基を有する合成カンナビノイドの *o*-, *m*-, *p*-位置異性体識別

Differentiation of *o*-, *m*-, *p*-positional isomers of synthetic cannabinoids containing a fluorobenzyl group by EI-MS/MS

ユーザー氏名: 村上貴哉/Takaya Murakami, 岩室嘉晃/Yoshiaki Iwamuro, 石丸麗子/Reiko Ishimaru, 地中啓/Satoshi Chinaka

(石川県警察本部科学捜査研究所/Forensic Science Laboratory, Ishikawa Prefectural Police H.Q.)

実施機関担当者: 東林修平/Shuhe Higashibayashi, 野田一平/Ippei Noda, 大原三佳/Mika Ohara
(分子科学研究所/Institute for Molecule Science)

概要/Overview

危険ドラッグの主たる薬物群『合成カンナビノイド』に分類され、フルオロベンジル基をN-1位に有する新規乱用薬物は、芳香環上のフッ素の置換位置によって法規制の適用の可否が異なるにも関わらず、位置異性体間でマススペクトルが酷似することから、フッ素の*ortho*, *meta*, *para*の置換位置を同定することが困難である。本研究では、上記のような合成カンナビノイドと同様なフラグメンテーションを生起させる*o*-, *m*-, *p*-モデル化合物を合成し、コリジョンエネルギーを変化させながら電子イオン化-トリプル四重極質量分析(EI-MS/MS)を行った。得られたモデル化合物の解析データを指標とし、これを実際の危険ドラッグ成分の解析データと照合することによって、フッ素の置換位置を同定できるか検討したところ、有効な結果を得たので報告する。

Mass spectrometric differentiation of positional isomers is crucial for the analysis of forensic samples. However, it is difficult to differentiate *o*-, *m*-, and *p*-fluorine positional isomers on the phenyl ring of synthetic cannabinoids containing a fluorobenzyl group at the N-1 position. In this study, we synthesized *o*-, *m*-, and *p*-model compounds of the synthetic cannabinoids, and investigated the product ion spectra as a function of collision energy using electron ionization-triple quadrupole mass spectrometry (EI-MS/MS).

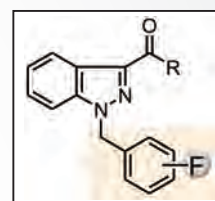


Fig. 1 Synthetic cannabinoid containing a fluorobenzyl group.

成果/Results

① モデル化合物の合成

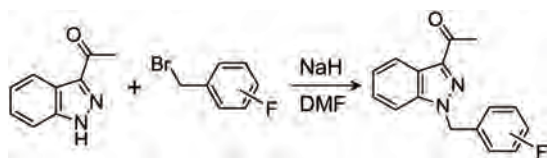
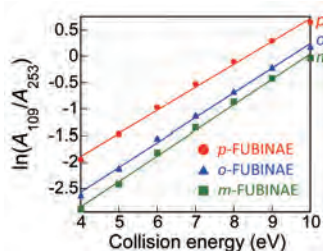


Fig. 2 Syntheses of *o*-, *m*-, and *p*-FUBINAE.

本合成は、協力研究(ナノプラット)を通じ
東林修平氏, 野田一平氏に依頼した

③ モデル化合物の $\ln(A_{109}/A_{253})$ プロット

m/z 109と m/z 253の強度比の対数値 $\ln(A_{109}/A_{253})$ vs. コリジョンエネルギー



各コリジョンエネルギーにおいて
• *meta* < *ortho* < *para*
• 高い直線近似性

o-, *m*-, *p*-FUBINAEを明確に識別可能

Fig. 4 Logarithmic plots of the abundance ratio of the ion at m/z 109 to m/z 253 for the precursor ion at m/z 253.

② 電子イオン化-トリプル四重極質量分析

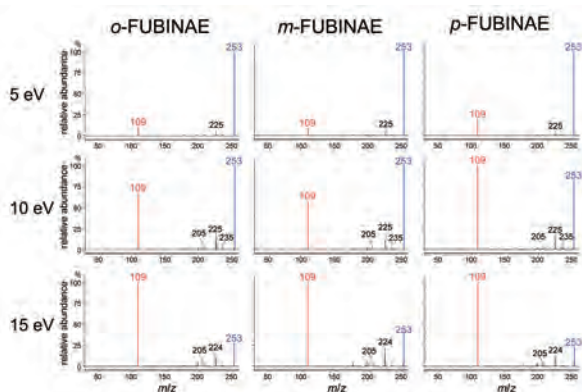


Fig. 3 Product ion spectra of *o*-, *m*-, and *p*-FUBINAE for the precursor ion at m/z 253 at the collision energies of 5, 10, and 15 eV.

④ 危険ドラッグ成分との照合

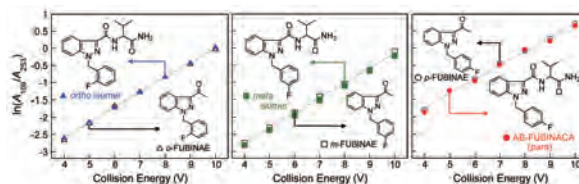


Fig. 5 Comparisons of the $\ln(A_{109}/A_{253})$ plots of the AB-FUBINACA isomers with those of *o*-, *m*-, and *p*-FUBINAE.

フッ素の置換位置に応じて
モデル化合物と
各種危険ドラッグ成分
のプロットは一致

Fig. 6 Comparisons of the $\ln(A_{109}/A_{253})$ plots of ADB-FUBINACA, FUB-APINACA, FUB-NPB-22, and FU-PX-2 with a set of *o*-, *m*- and *p*-FUBINAE.

結論/Conclusion

- ✓ プロダクトイオンのシグナル強度に着目した新たな位置異性体識別法を確立した
- ✓ モデル化合物と分析対象である危険ドラッグのプロットを照合することで、フッ素の置換位置を識別できた

References: T. Murakami et al, *J. Mass Spectrom.*, 51, 1016–1022 (2016)
T. Murakami et al, *Jpn. J. Forensic Sci. Tech.*, 22, 133–143 (2017)