

# 指定薬物3,4-ジクロロメチルフェニデートの合成と分析

## Synthesis and analysis of 3,4-dichloromethylphenidate

ユーザー氏名：辻川健治 Kenji Tsujikawa

(科学警察研究所 National Research Institute of Police Science)

実施機関担当者：井上三佳 Mika Inoue, 東林修平 Shuhei Higashibayashi (分子科学研究所

Institute of Molecular Science, National Institutes of Natural Sciences)

### Key Words

3,4-Dichloromethylphenidate, Synthesis, GC/MS

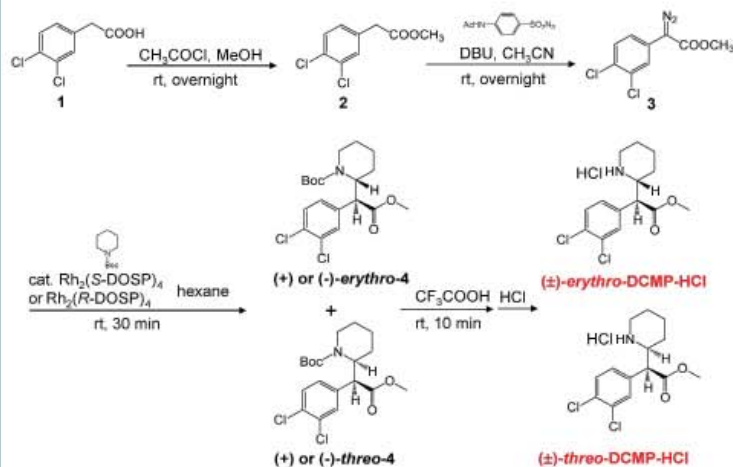
### 概要 / Overview

3,4-ジクロロメチルフェニデート (DCMP) は中枢興奮薬メチルフェニデートのアナログである。この化合物は危険ドラッグの一種であり、医薬品医療機器法の指定薬物として規制されている。本研究では、DCMPの各ジアステレオマーについて標準品を合成するとともに、得られた標準品を用いてGC/MSによる分析法を検討した。その結果、DCMPは遊離塩基の状態ではガスクロマトグラフ内で容易に熱分解を受けることが明らかとなった。DCMPをトリフルオロアセチル(TFA)誘導体化することで、熱分解は完全に防止されるとともに、各ジアステレオマーはクロマトグラム上で分離され、両者の識別が可能となった。

We synthesized two diastereomers of 3,4-dichloromethylphenidate (DCMP). Freebases of DCMP were easily decomposed in the GC/MS system. By trifluoroacetyl derivatization, this decomposition was completely prevented and the diastereomers were separated on the gas chromatogram.

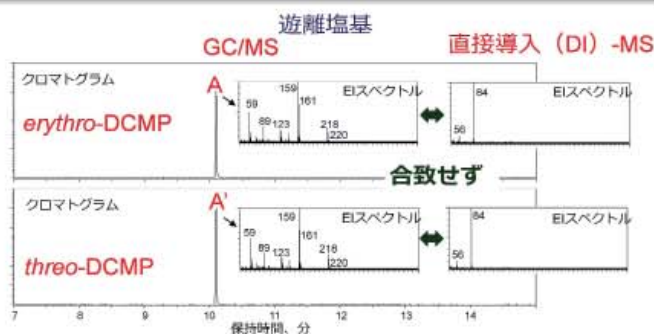
### DCMPの各ジアステレオマーの合成

Synthesis of two diastereomers of DCMP

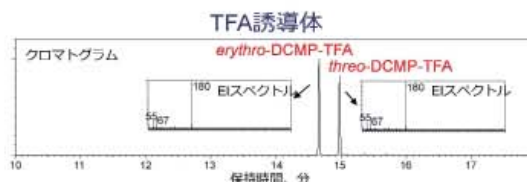
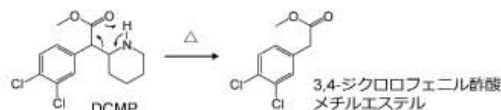


### DCMPのGC/MS分析結果

GC/MS analytical results of DCMP



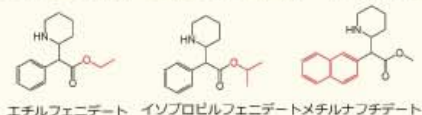
- 両ジアステレオマーの遊離塩基は、同一の保持時間・質量スペクトルを有するピーク (A及びA') を与えた
- ピークA及びA'のEISベクトルは、DI法によるEISベクトルと合致しなかった  
→ガスクロマトグラフ内での熱分解が強く示唆された
- ピークA及びA'は3,4-ジクロロフェニル酢酸メチルエステルであることが判明した  
→ガスクロマトグラフ内において、下記の反応が起きたと推測された



- TFA誘導体化により熱分解は防止され、また、両ジアステレオマーのピークは良好に分離された

### 終わりに

・DCMP以外にも様々なメチルフェニデートのアナログが指定薬物として規制されている (下図)。本研究によって得られた知見は、これらの薬物の合成及び分析への応用が期待される。



### Reference

K. Tsujikawa, Y.T. Iwata, M. Inoue, S. Higashibayashi, H. Inoue, *Forensic Sci. Int.*, 251(2015)e15-e17.

### Contact

Name: 井上三佳 (分子科学研究所)