

国立衛研 違法ドラッグデータ閲覧システムについて

田中理恵, 河村麻衣子, 内山奈穂子, 瀬川勝智, 中野達也, 斎藤嘉朗, 緒方潤,
最所和宏, 花尻 (木倉) 瑠理[#], 袴塚高志

Data search system for new psychoactive substances provided by the National Institute of Health Sciences in Japan

Rie Tanaka, Maiko Kawamura, Nahoko Uchiyama, Katsunori Segawa, Tatsuya Nakano, Yoshiro Saito,
Jun Ogata, Kazuhiro Saisho, Ruri Kikura-Hanajiri[#], Takashi Hakamatsuka

In the last few decades, many analogs of narcotic substances were widely distributed in Japan as easily available psychoactive substances and became a serious problem. To counter the spread of these new psychoactive substances (NPS), the Pharmaceutical Affairs Law in Japan was amended in 2006 to establish a new category, "Designated Substances (Shitei-Yakubutsu)" in order to more promptly control them. However, new analogs of controlled substances, especially synthetic cannabinoids and cathinone derivatives, have appeared continuously. Because information sharing among laboratories is the key to a fight against these NPS, we opened "Data Search System for New Psychoactive Substances (NPSDB)" (<http://npsdb.nihs.go.jp/Search/>) on the web site in March 2014. This NPSDB provides information on products of NPS sold in Japan, as well as analytical data (such as spectra of GC-MS and LC-PDA-MS) and the pharmacological properties of NPS detected in the products. This database is available in both English and Japanese. As of April 2016, 710 NPSs and 2,128 products are listed in this database, and more than 300 laboratories or offices, including international organizations, are registered. To avoid health problems and abuse caused by NPS, we have to continuously monitor the distribution of these substances.

Keywords: Database, New Psychoactive Substances, Designated Substances

1. はじめに

日本において、危険ドラッグ (いわゆる脱法ドラッグ) 含有製品の流通は1990年代後半頃より報告されている。2011年頃からは、危険ドラッグが関与する救急搬送事例や自動車事故の報告が増加し深刻な社会問題となった。これまでに危険ドラッグの社会への蔓延を防ぐために、地方自治体や国により様々な対策がなされてきた。

2006年6月に薬事法 (現在は医薬品医療機器等法) が改正され指定薬物制度が導入されて、2007年4月に最初

に31化合物が指定薬物として指定された。その後、一時期危険ドラッグ流通は減少したが、2008年頃から乾燥植物細片にカンナビノイド受容体に対し強い親和性を有する化合物群 (合成カンナビノイド) が添加された、いわゆる「脱法ハーブ」と呼ばれる製品の流通が問題となった。2014年6月には東京の池袋で「脱法ハーブ」を吸引した運転手による自動車の暴走事件がおこり1人が死亡、6名が重軽傷を負った。これが契機となり、これまで以上に危険ドラッグに対する規制が強化され、翌月の2014年7月には指定薬物制度下、事件に関与した危険ドラッグ製品に含まれていた2化合物に対して初の緊急指定が実施された。以降、指定薬物として規制される化合物数は増加し、2016年4月時点で個別に規制されている指定薬物は239化合物となった。また、その他、2013年3月に合成カンナビノイドの包括規制 (770化合物)、2014年1月、2015年5月に2回にわたりカチノン類の包括規制 (計1334化合物) が行われた。さらに、これま

[#] To whom correspondence should be addressed:
Ruri Kikura-Hanajiri; Division of Pharmacognosy,
Phytochemistry and Narcotics, National Institute of
Health Sciences, 1-18-1, Kamiyoga, Setagaya-ku, Tokyo
158-8501, Japan; Tel: +81-03-3700-8764; Fax: 03-3707-
6950; E-mail: kikura@nihs.go.jp

でに22化合物が指定薬物から麻薬へと規制強化された。

危険ドラッグに含まれる化合物を指定薬物として規制すると、その規制化合物の構造を一部変えた別の化合物が規制を逃れて新しく危険ドラッグ市場に出現する。これら続々と出現する化合物においては、試薬として流通していれば標準品として入手可能であるが、多くの場合、入手は困難であり、費用を差し置いたとしても、すべての指定薬物及び関連化合物の物性情報や分析データを個々の分析鑑定機関が独自に準備することは困難である。従って、国内外の研究機関の間で情報を公開し、共有化することが待望されていた。

国立衛研では、危険ドラッグ及び関連化合物に関するデータベースである「違法ドラッグデータ閲覧システム」を構築して2014年3月より公開している。この「違法ドラッグデータ閲覧システム」には2016年4月の時点で710化合物、2128製品が掲載され、海外の機関も含め306機関が登録している。本データ閲覧システムには、指定薬物やその構造類似化合物、また今後流通が予想される未規制化合物について、各化合物情報及び実測分析データを掲載するとともに、これまで国立衛研が入手した危険ドラッグ製品の含有化合物一覧が掲載され、内容が検索可能となっている。日本語とともに、英語でも利

用が可能である。

違法ドラッグデータ閲覧システムが公開されてから、2016年4月で2年が経過した。その間の利用状況や成果なども含めて以下に報告する。

2. 利用状況

違法ドラッグデータ閲覧システム <http://npsdb.nihs.go.jp/Search/> (以下、データシステム) は、ユーザーとして危険ドラッグ関連の業務・研究に携わる公的分析機関(都道府県の地方衛生研究所、税関、警察等)及び大学研究室(法医学教室等)に所属する人を対象としている。利用には事前の申請が必要で、承認後にアカウントとパスワードが発効される。

データシステムには、2016年4月時点で、国内277機関、海外29機関が登録している。国内の登録機関の内訳は、警察、税関、地方衛研が20%前後と同程度で、ついで各都道府県の薬務課、大学である (Fig. 1)。海外の機関には国連薬物犯罪事務所 (United Nations Office on Drug and Crime, UNODC) や欧州薬物・薬物依存監視センター (European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction, EMCDDA) も含む。

データシステム公開後2年間の利用状況について、月別のアクセス数を Fig. 2 に示した。2014年6月に前述の池袋の自動車暴走事件がおり、その後に行なわれた緊急指定を含む規制強化に伴いデータシステムへのアクセス数が増加した。特に2014年8～10月はひと月あたり1000件前後のアクセス数となり、一日に100件近いアクセスが認められた日もあった。2015年6月及び7月は、外部からのアクセスを一時期遮断していたために、利用数が減少している。2015年7月には、厚生労働省が国内の危険ドラッグ販売実店舗数がゼロとなったことを報告している。その頃から、データシステムへのアクセス数は減少しているが、2016年4月現在でも、毎月400件ほどのアクセスがある。

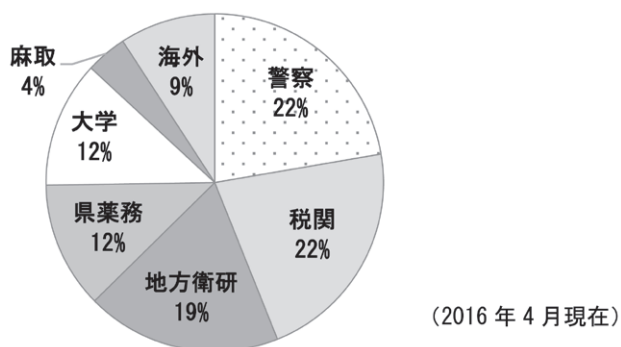


Fig. 1 違法ドラッグデータ閲覧システムの登録機関

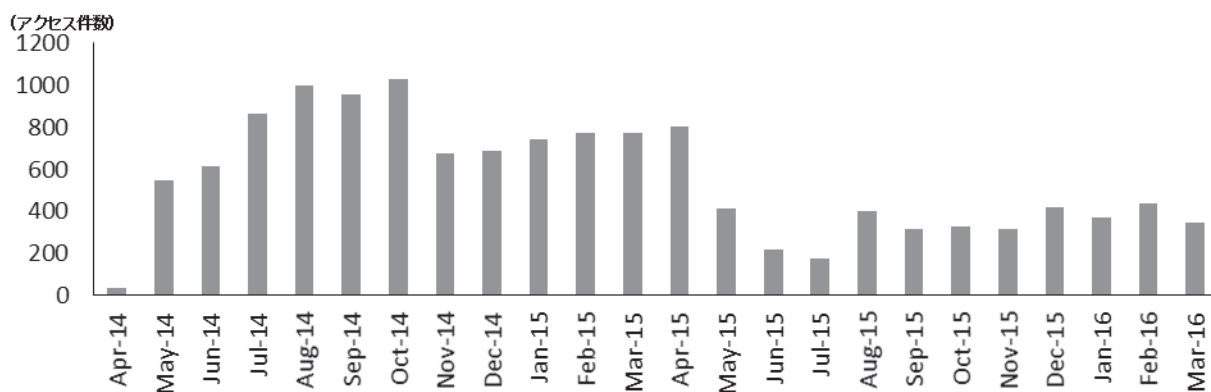


Fig. 2 違法ドラッグデータ閲覧システムへの月別アクセス件数

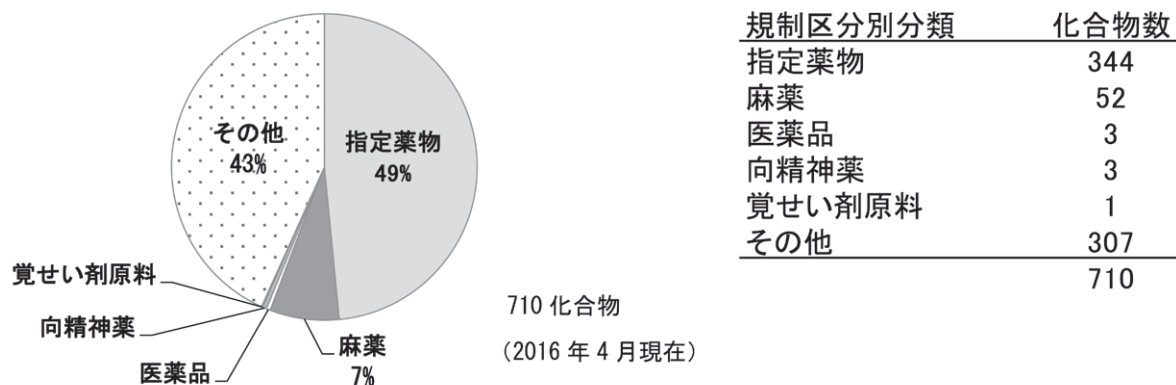


Fig. 3 違法ドラッグデータ閲覧システムに掲載されている化合物内訳（規制区分別）

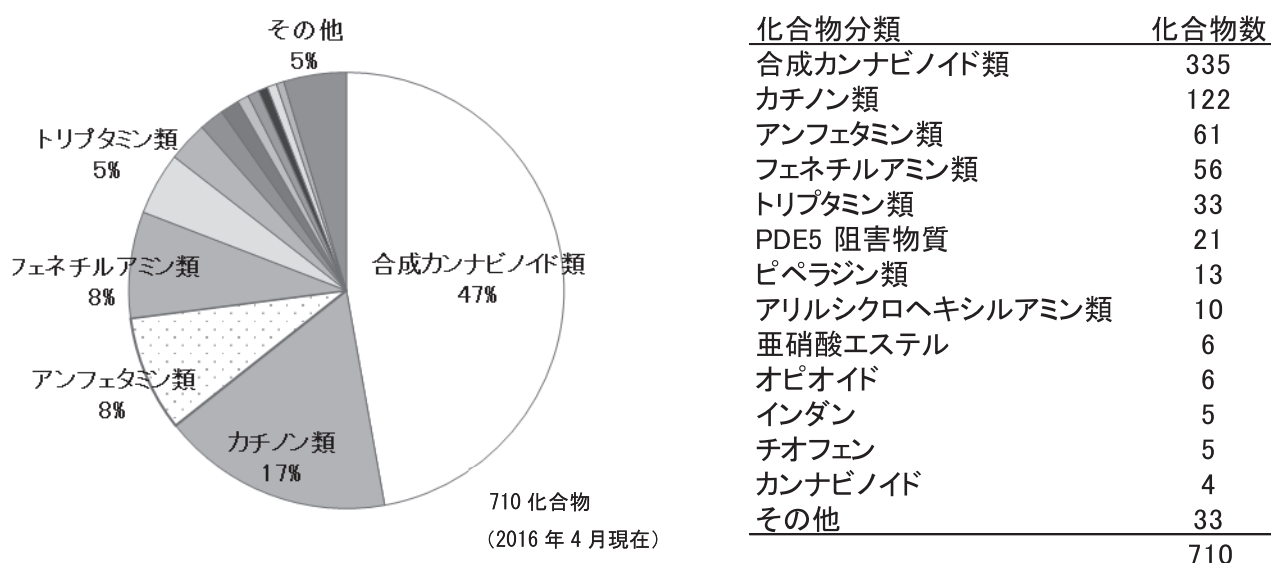


Fig. 4 違法ドラッグデータ閲覧システムに掲載されている化合物内訳（化合物種別）

3. 違法ドラッグデータ閲覧システムの構成

データシステムは主に化合物情報と製品情報のデータベースで構成されている。データベース作成は ChemBioFinder が用いられている。以下にデータシステムの掲載化合物と掲載含有製品について述べる。

3-1. 掲載化合物について

データシステムには710化合物が掲載されている(2016年4月現在)。これらの化合物の内訳を規制区分別にみると、指定薬物がほぼ半数を占め、次に麻薬で、この中にはこれまでに指定薬物から麻薬へ指定強化された化合物を含む。未規制の化合物の中には、指定薬物の構造異性体、代謝物、分解物が含まれる。また、過去に強壮用健康食品などからの検出事例が報告されている ED 治療薬の構造類似化合物も含む (Fig. 3)。

化合物の分類についてみてみると、合成カンナビノイド類が最も多く、ほぼ半数を占めている。ついでカチノ

ン類、アンフェタミン類、フェネチルアミン類、トリプタミン類、ピペラジン類となっている。その他に分類した化合物には、近年流通が問題となっている向精神薬の構造類似化合物も含まれる (Fig. 4)。

これまでに個別指定された指定薬物はすべてデータシステムに収載しており、今後指定される化合物についても随時収載していく予定である。

3-2. 掲載製品について

現在、データシステムには、2008年以降入手し、当所で分析した危険ドラッグ 2128 製品が掲載されている(2016年4月現在)。これらの内訳は形態別にみると、乾燥植物細片が最も多く、次いでいわゆるアロマリキッドなどの液体、パウダーと呼ばれる粉末の製品であり、これらで全体の99%を占める。その他の製品形態は、煙草状のもの、シート状の紙片、固形物や樹脂状のものがある。

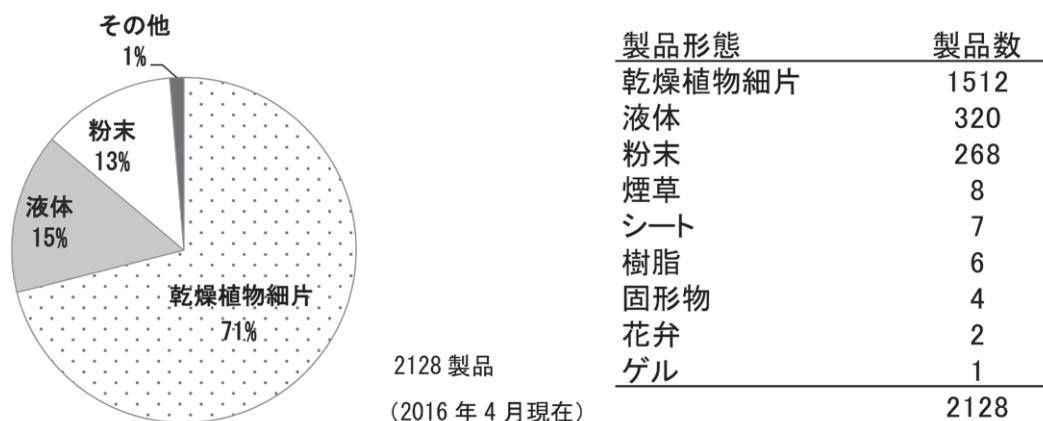


Fig. 5 違法ドラッグデータ閲覧システムに掲載されている危険ドラッグ製品の内訳

4. 違法ドラッグデータ閲覧システムの機能について

データシステムは、主に掲載化合物一覧、掲載含有製品一覧、検索、化合物検索、化合物詳細データ、参考情報（指定薬物一覧、参考文献）の項目で構成されている。

1) 掲載化合物一覧

掲載化合物一覧ではデータシステムに掲載された化合物の一覧が表示される。化合物のカテゴリ、化合物名、別名、IUPAC名、モノアイソトピック質量、規制区分、規制日、詳細データの項目があり、別名と詳細データ以外の項目について並び替えが可能である。各化合物について「詳細」をクリックすると後に説明する化合物詳細データのページが表示される。

2) 掲載含有製品一覧

掲載含有製品一覧では製品の一覧が表示される。入手日、製品名、パッケージ名、形態、含有化合物、写真の項目があり、含有化合物と写真以外の項目で並び替えができる。含有される化合物のうちデータシステムに掲載されているものについては、クリックすることで、それぞれの化合物詳細ページが表示可能である。また「写真」をクリックすると、製品パッケージと内容物の写真を見ることが可能である。

3) 検索

本データシステムにおいて、化合物検索と含有製品検索が可能である。化合物検索では化合物名、別名、CAS番号、分子式、分子量、モノアイソトピック質量、GC-MS、LC-MSのフラグメントイオンにより、候補化合物の検索ができ、分子量とモノアイソトピック質量は下限値と上限値で絞り込みができる。構造未知の危険ドラッグの構造推定に有効に使える。含有製品検索では、製品の名称、含有化合物名で、候補製品の検索ができる。

4) 化合物詳細データ

化合物検索の検索結果から化合物詳細データの画面が別ウィンドウで開く。この画面は掲載化合物一覧から

も開く。化合物詳細データでは構造式をはじめ化合物の別名、IUPAC名、化合物分類、CAS番号、組成式、規制区分、規制日、試薬情報、文献情報などの基本情報を見ることができる。さらにGC-MSスペクトル及びLC-MSスペクトルのフラグメントイオン、UVスペクトルの極大波長等の分析データも記載されている。また「GC-MSスペクトル」、「LC-PDA-MSスペクトル」、「IRスペクトル」をクリックすると別ウィンドウで実測したスペクトルデータが表示される。またその化合物が検出された製品が登録されている場合、化合物詳細の検出含有製品数の「表示」から含有製品一覧を見ることが可能である。

5) 参考情報

参考情報には指定薬物一覧と参考文献がある。指定薬物一覧では個別に指定された指定薬物、包括的に指定された指定薬物、また指定薬物から麻薬になった化合物が、規制日順に一覧表としてまとめられている。参考文献はこれまで国立衛研で報告した危険ドラッグ関連論文をまとめている。

5. 新機能の追加

2016年3月に、これまでの使用経験やユーザーの要望をもとに、さらなる利便性の向上をめざしてシステムの機能の一部変更・追加を行なった。このうち最も大きな変更が「化合物スペクトルデータの並列表示」機能の追加である。化合物検索の検索結果の画面から表示したいスペクトルデータにチェックを入れ「スペクトル一覧表示」をクリックすると、同一画面上、選択した複数のデータが表示可能となった。これによりスペクトルデータの比較が容易になった。次に検索機能を向上させた。化合物検索と含有製品検索について検索名に記載されているスペース、ハイフン、ドット、カンマの検索枠が広がる仕様となり検索しやすくなった。その他、一部の画面表

化合物検索

化合物検索

化合物名 (ex: A and B or C and D ...)

検索 クリア

化合物名	別名	IUPAC名	Monoisotopic Mass	規制区分	規制日	詳細データ	CG-MS スペクトル	LC-PDA-MS スペクトル	IRスペクトル
AB-CHMINACA		N-(1-amino-3-methyl-1-oxobutan-2-yl)-1-(cyclohexylmethyl)-1H-indazole-3-carboxamide	356.2212	Designated Substances	2014.07.25	詳細	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
ADB-CHMINACA	MAB-CHMINACA	N-(1-amino-3,3-dimethyl-1-oxobutan-2-yl)-1-(cyclohexylmethyl)-1H-indazole-3-carboxamide	370.2369	Designated Substances	2014.09.29	詳細	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
CHMINACA-BA	MA-CHMINACA carboxylic acid isomer	(1-(cyclohexylmethyl)-1H-indazole-3-carbonyl)valine	357.2052	Designated Substances	2014.09.29	詳細	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
MA-CHMINACA	AMB N-methylcyclohexyl analog	methyl (1-(cyclohexylmethyl)-1H-indazole-3-carbonyl)valine	371.2365	Designated Substances	2015.1.5	詳細	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
				Designated Substances	2015.1.5	詳細	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

化合物詳細データ

CC(C)C(=O)Nc1ccc2c(c1)nc(C3CCCCC3)c2

化合物名 AB-CHMINACA

化合物名 (別名・通称)

化合物分類 Synthetic cannabinoids 規制区分 Designated Substances

規制日 2014.07.25

販売会社/販売製品名/製品番号 Cayman/AB-CHMINACA/15434

GC-MSスペクトル LC-PDA-MSスペクトル IRスペクトル

GC-MSフラグメントイオン m/z 241, 312, 145, 242, 313, 131, 55, 103, 146, 41

LC-MSフラグメントイオン m/z 357, 340

極大波長 nm 303 nm

Marquis' Reagent Ehrlich Reagent Simon's Reagent Liebermann's Reagent Mandelin Reagent other reagents

検出含有製品数: 30 製品 表示

GC-MS スペクトル

AB-CHMINACA

LC-PDA-MS スペクトル

AB-CHMINACA

含有製品検索

含有製品検索

含有製品名 (ex: A and B or C and D ...)

化合物名 (ex: A and B or C and D ...)

検索 クリア

検索結果

No.	入手日	製品名	パッケージ名	形態	含有化合物	写真
1	2008	Spice diamond		Dried leaf (cutting)	Cannabicyclohexanol, 3-trans-Cannabicyclohexylphenol, α -Tocopherol	写真
2	2009.01.05	Spice diamond pipe		Dried leaf (cigarette)	Cannabicyclohexanol, 3-trans-Cannabicyclohexylphenol, α -Tocopherol	写真
3	2009.05.12	Spice diamond spirit		Dried leaf (cutting)	WH-018, α -Tocopherol	写真
4	2009.11.02	original diamond spirit		Dried leaf (cutting)	WH-073, α -Tocopherol	写真
5	2011.05.26	Original spice diamond		Dried leaf (cutting)	WH-203	写真

製品写真

Close

Fig. 6 違法ドラッグデータ閲覧システムの化合物検索と含有製品検索

示の変更や更新履歴の表示機能追加等を行なった。またこれまで公開していなかったIRスペクトルデータについて、財務省関税中央研究所よりデータの提供を受け、

GC-MSやLC-PDA-MSのスペクトルデータと同様に、化合物詳細画面や検索結果の画面から表示が可能となるように機能追加を行った。

6. 今後の予定

データシステム公開後、2014年度に95化合物、2015年度には63化合物と包括827化合物が、指定薬物に追加された。2014年度以降の規制・取締り強化により、危険ドラッグ流通は減少したが、インターネット販売等が消失したわけではない。今後も危険ドラッグの新規出現を継続的に監視し、それらの化合物情報及び分析データについて、データシステムに収載して活用できるようにしていく予定である。また引き続きシステムの機能改善、掲載項目の追加も検討していく予定である。これにはユーザーからの意見も反映させていきたいと考えている。

最後にこの違法ドラッグデータ閲覧システムが危険ドラッグ並びにその他の違法薬物の社会への蔓延を防ぐ一助となることを切に望む。

謝辞

本データシステム構築にご協力いただいた株式会社ヒューリンクスに深謝します。