

薬毒物

Drugs and Poisons

情報インデックス

監
修

鈴木 修

浜松医科大学 理事・副学長

大野曜吉

日本医科大学大学院医学研究科 法医学分野 教授

須崎紳一郎

武蔵野赤十字病院 救命救急センター 部長

花尻(木倉)瑠理

国立医薬品食品衛生研究所 生薬部第3室 室長

凡例

本書は、1.化合物名索引(和名, 英名), 製品名索引, 由来物質名索引, 2. 巻頭レビュー, 3. 薬毒物データベース, より構成され, 薬毒物データベースはさらに, 1. 中枢神経作用薬など, II. 農薬, III. 自然毒, IV. 規制薬物・危険ドラッグに分類した。学術用語はなるべく文部科学省学術用語集 化学編(最新刊)などによった。

化合物名(和名, 英名)

法規制

法規制については該当するものを赤で記した。処方せん/毒薬/劇薬/麻薬/麻原(麻薬原料植物・麻薬向精神薬原料)/向精神薬/覚せい剤/覚原(覚せい剤原料)/習慣性/毒物/劇物/有害性/大麻/指定薬物

化学名

国際純正応用化学連合(International Union of Pure and Applied Chemistry:IUPAC)名あるいは組織名(systematic name)を用いた。複雑な表記は省略した。

分子式

分子量:小数点以下2桁まで記載。

モノアイトピック質量:

小数点以下4桁まで記載。

CAS (CAS番号):

Chemical Abstracts Service Number [Chemical Abstracts誌(米国化学会発行)で使用される化合物番号]。(遊)は遊離体を示す。

pKa:酸解離定数

性状

溶解性:

化合物の溶解性(易溶~不溶)を記載。

構造式:

原則として光学異性体の立体表記はしないこととした。ただし, 光学活性体が薬効を示すものとして販売されている化合物を除く。

塩化合物名(和名)

塩化合物の分子式

塩化合物の分子量:小数点以下2桁まで記載。

塩化合物備考:別名あるいは法律名。主な薬理作用, 由来物質などを記載。

分析方法

Triage

トライエージDOA 特異度表(シスメックス株式会社ホームページに記載)より転載。単位はng/mL。
<http://products.sysmex.co.jp/pr2/pdf/TriageDOAadoaSpecificity.pdf>

HPLC, LC-MS, GC, GC-MS(※)

以下に記載した①スペクトル判定の基準ならびに②クロマトグラフィー判定の基準により総合的に判断した。

①スペクトル判定の基準

○:筆者らの用いた方法にて分析可能

◎:注入量を増やす, 誘導体化など最適化することにより分析可能

△:市販のライブラリあるいは文献データ

種類

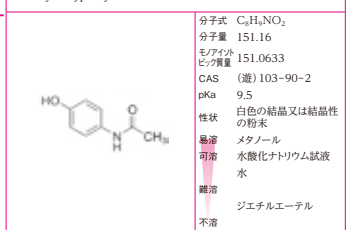
薬効ならびに構造より分類した。

アミノフェノール系解熱消炎鎮痛剤

▶**アセトアミノフェン** Acetaminophen

処方せん 毒薬 劇薬 麻薬 向精神薬 覚せい剤 覚原 習慣性

N-(4-Hydroxyphenyl)acetamide



塩化合物名	塩化合物の分子式	塩化合物の分子量
別名:パラセタモール(Paracetamol)。剤形によって法規制が異なる。薬理作用:シクロオキシゲナーゼ阻害。		

分析方法	Triage	HPLC	LC-MS	GC	GC-MS
	x	○	◎	◎	◎



GC-MS マスペクトルデータ

筆者らの用いた分析法(絶対量10ng)により測定。一部, 誘導体化データが含まれる。

薬効分類番号

中枢神経作用薬については日本標準商品分類に基づき3桁を表示(薬効分類番号一覧p32を参照)。

薬効分類番号:114

製品名	製薬会社	剤形・含有量
アセトアミノフェン	東洋製化・小野・健栄, 吉田, 丸石	原末
ピリナジン	長生堂・田辺三菱	原末
アルビニール	久光・三和化学	錠:50, 100, 200mg
アンババ	アボット	錠:50, 100, 200mg
カロナール	昭和薬化・和光堂	錠:200, 300mg, 細:20, 50%, 錠:100, 200mg, シ:2%
SG配合顆粒	塩野義	顆:250mg(アリル・イプロブロン・アセチル尿素・イプロブロン・アセチル・黒カカオフェイン配合)
PL配合顆粒	塩野義	顆:150mg(サリチル酸・黒カカオフェイン・プロメタジンメフェンジサリチル酸配合)
多数の市販薬		

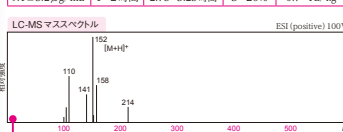
主な中毒症状

肝細胞・腎臓細管壊死, 嗜眠, 昏睡, 脳浮腫, 過呼吸, 呼吸抑制, 呼吸不全, 心筋壊死, ショック, 悪心・嘔吐, 胃痛, 胃・十二指腸のびらん, 出血, 食欲不振, 下痢, 出血性膀胱炎, 代謝性アシドーシス, DIC, 体温低下, 過敏症, 毒麻痺, 発汗, めまい, 耳鳴, 興奮, 譫言, 痙攣, 凝固異常, 頻脈, 血圧低下, 低血糖。

薬物動態(代謝・排泄)

投与量の約3%が未変化体のままで排泄され, 残りの大部分は主代謝産物であるグルクロン酸結合体及び硫酸結合体として排泄される。

健康成人男子に400mgを絶食単回経口投与。



LC-MS マスペクトルデータ

筆者らの用いた分析法(絶対量10ng)により測定。一部, トリプル四重極LC-MSデータが含まれる。

製品名

先発品はゴシック体, 後発品は明朝体で記載(2014年6月現在)。後発品は主要なものを取載した。また, 製品名が一般名と同じ場合, 先発品は取載し, 後発品は省略した。製薬会社名(略号はp34を参照)。

剤形一覧

錠:錠剤, 細:細粒剤, 顆:顆粒剤, 散:散剤, カ:カプセル剤, 舌下:舌下錠剤, D錠:速崩錠剤, OD錠:口腔内崩壊錠剤, 徐放錠:徐放性錠剤, 徐放顆:徐放性顆粒剤, 徐放カ:徐放性カプセル剤, シ:シロップ剤, 坐:坐剤, 注:注射用液剤, 注シリンジ:注射用キット, 軟:軟膏剤, 眼軟:眼軟膏剤, 点眼:点眼液剤, 貼:貼付剤, 筋注:筋肉内注射用剤, 静注:静脈内注射用剤, 吸入:吸入剤, 液:液剤

主な中毒症状

治療域, 中毒域, 致死域:下記参考文献の血清(血漿あるいは血液)中濃度より引用した。

- Schulz M, Iwersen-Bergmann S, Andresen H, Schmidt A:Therapeutic and toxic blood concentrations of nearly 1,000 drugs and other xenobiotics. Crit Care. 2012;16(4):R136.
- Baselt RC:Disposition of toxic drugs and chemicals in man. 9th ed. Biomedical Publications, 2011.
- Moffat AC, Osselton MD, Widdop B, Watts B:Clarke's analysis of drugs and poisons in pharmaceuticals. 4th ed. Pharmaceutical Press, 2011.

薬物投与量の補足データ

薬物投与量の補足データとして, Cmax(最高血中濃度), Tmax(最高血中濃度到達時間), T1/2(半減期), 蛋白結合率, 分布容積を記載。

※用いた分析法

HPLC :high performance liquid chromatography(高速液体クロマトグラフィー)

LC-MS :liquid chromatography-mass spectrometry(液体クロマトグラフィー質量分析法)

GC :gas chromatography(ガスクロマトグラフィー)

GC-MS :gas chromatography-mass spectrometry(ガスクロマトグラフィー質量分析法)

②クロマトグラフィー判定の基準

○:筆者らの用いた方法にて分析可能

△:市販のライブラリあるいは文献データ

×:当該分析法では不適当

—:該当データなし

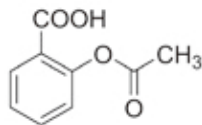
分析方法備考

分析に際しての特記事項を記載。

▶ アスピリン Aspirin

処方せん 毒薬 劇薬 麻薬 麻原 向精神薬 覚せい剤 覚原 習慣性

2-Acetoxybenzoic acid



分子式 $C_9H_8O_4$

分子量 180.16

モノアイソ
ピック質量 180.0423

CAS (遊) 50-78-2

pKa 3.5

性状 白色の結晶, 粒又は粉末。湿った空气中で徐々に加水分解してサリチル酸及び酢酸になる

易溶 エタノール

ジエチルエーテル

可溶 水酸化ナトリウム試液

難溶 水

不溶

塩化合物名	塩化合物の分子式	塩化合物の分子量
—	—	—

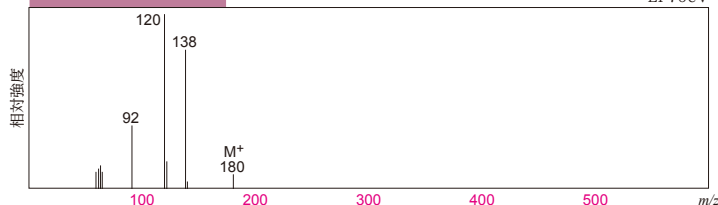
別名: アセチルサリチル酸 (Acetylsalicylic acid)。
薬理作用: シクロオキシゲナーゼ阻害。

分析方法

Triage	HPLC	LC-MS	GC	GC-MS
×	229nm, 277nm	△	△	○

GC-MS マスペクトル

EI 70eV



製品名	製薬会社	剤形・含有量
バファリン	エーザイ	錠: 81, 330mg
バイアスピリン	バイエル	錠: 100mg
アスピリン	ジェネリック多数社あり	原末
パッサミン	テバ	錠: 81mg
多数の市販薬		

主な中毒症状

耳鳴, めまい, 頭痛, 悪心・嘔吐, 消化管出血, 潰瘍, 難聴, 頻呼吸, 過呼吸, 呼吸性アルカローシス, 代謝性アシドーシス, 痙れん, 昏睡, 心血管虚脱, 呼吸不全, 口渇, 心窩部不快感, 下痢, 顔面潮紅, 傾眠, 興奮, せん妄, 運動失調, 視力障害, 発熱, 発汗, 脱水, 低体温, チアノーゼ, 肺水腫, 心悸亢進, 腎障害, 血糖値異常。

薬物動態 (代謝・排泄)

腸管での吸収過程及び生体内 (主として肝臓) でサリチル酸に加水分解され, サリチル酸は生体内でグリシン抱合及びグルクロン酸抱合を受け, ごく一部は水酸化を受けゲンチジン酸に代謝される。サリチル酸の腎クリアランスは尿 pH 依存性を示し, 低 pH では 5% 未満, pH > 6.5 では 80% 以上。

治療域	中毒域	致死域
20~200 $\mu\text{g}/\text{mL}^1$	300~350 $\mu\text{g}/\text{mL}^1$	400~500 $\mu\text{g}/\text{mL}^1$ 61~7320 $\mu\text{g}/\text{mL}$ (サリチル酸) ²⁾

健康成人男子に 100mg を空腹時単回投与。

Cmax	Tmax	T1/2	蛋白結合率	分布容積
455.3 $\mu\text{g}/\text{L}$	4 時間	0.44 時間	約 75~90%	—

LC-MS マスペクトル



▶ **アセフェート** Acephate

毒物 劇物 有害性

(RS)-*N*-[Methoxy(methylthio)phosphinoyl]acetamide分子式 C₄H₁₀NO₃PS

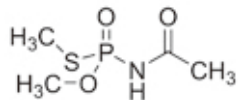
分子量 183.16

モノアイソ
ビック質量 183.0119

CAS (遊) 30560-19-1

pKa 8.35

性状 白色の結晶



易溶 水, アセトン, エタノール

可溶 酢酸エチル

難溶

不溶 ヘキサン

塩化合物名	塩化合物の分子式	塩化合物の分子量
—	—	—

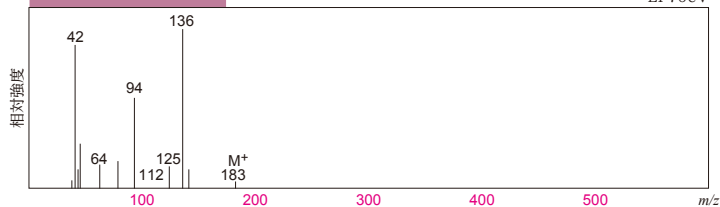
コリンエステラーゼ (ChE) によるアセチルコリンの分解を阻害する。

分析手法

Triage	HPLC	LC-MS	GC	GC-MS
—	○	◎	○	○

GC-MS マスペクトル

EI 70eV



製品名	製薬会社	剤形・含有量
オルトラン水和剤	アリスタライフサイエンス	類白色水和性粉末・アセフェート50.0%
オルトラン粒剤	アリスタライフサイエンス	類白色細粒・アセフェート5.0%

主な中毒症状

ChE 阻害作用による中毒症状。頭痛、めまい、錯乱、昏睡、呼吸抑制、呼吸筋麻痺、縮瞳、発汗、流涎、痙攣、意識障害、気管支分泌過多。

薬物動態 (代謝・排泄)

動植物体内で加水分解される。生物学的半減期は一般に速い。単回投与では24時間以内に99%以上が消失する。投与後24時間の尿中排泄物の90%以上が未変化の親化合物。代謝物としてメタミドホスが知られている。

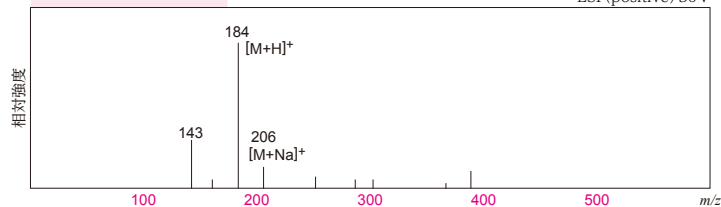
治療域	中毒域	致死域
—	—	—

SDラットに100mg/kg投与時♂(上段), ♀(下段)。

Cmax	Tmax	T1/2	蛋白結合率	分布容積
83.6 μg/mL 98.4 μg/mL	0.5時間 0.5時間	49.4時間 51.8時間	—	—

LC-MS マスペクトル

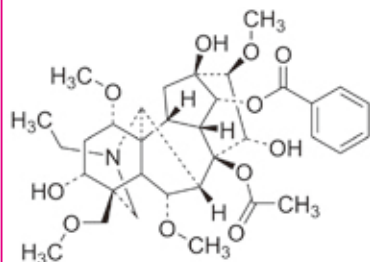
ESI (positive) 50V



▶ **アコニチン** Aconitine

毒物 劇物 麻薬

(1 α ,3 α ,6 α ,14 α ,15 α ,16 β)-8-Acetoxy-20-ethyl-3,13,15-trihydroxy-1,6,16-trimethoxy-4-(methoxymethyl)aconitan-14-yl benzoate



分子式 C₃₄H₄₇NO₁₁
 分子量 645.75
 モノアイソ
 ピック質量 645.3149
 CAS (遊) 302-27-2
 pKa 5.15, 12.14,
 性状 白色~ほとんど白色,
 結晶性粉末~粉末
 易溶
 可溶 エタノール
 難溶
 不溶 水, 石油エーテル

塩化合物名	塩化合物の分子式	塩化合物の分子量
—	—	—

トリカブト (*Aconitum*) 含有成分。

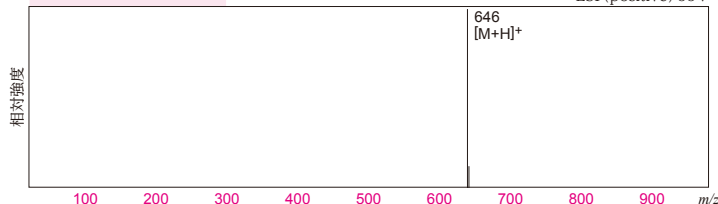
分析手法

Triage	HPLC	LC-MS	GC	GC-MS
—	△	◎	○	○

GC-MS 分析では誘導体化後分析可能。

LC-MS マススペクトル

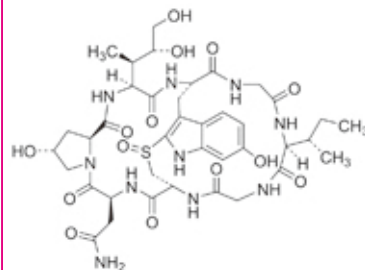
ESI (positive) 66 V



▶ **α-アマニチン** α-Amanitin

毒物 劇物 麻薬

省略



分子式 C₃₉H₅₄N₁₀O₁₄S
 分子量 918.98
 モノアイソ
 ピック質量 918.3541
 CAS (遊) 23109-05-9
 pKa 9.63
 性状 白色~淡黄色の粉末
 易溶
 可溶 メタノール, 水
 難溶
 不溶

塩化合物名	塩化合物の分子式	塩化合物の分子量
—	—	—

タマゴテングタケ, シロタマゴテングタケ, ドクツルタケなどテングタケ属含有成分。8つのアミノ酸が結合した環状ペプチド。

分析手法

Triage	HPLC	LC-MS	GC	GC-MS
—	△	◎	×	×

LC-MS マススペクトル

ESI (positive) 66 V

