

Neues Update der Massenspektrensammlung forensisch bedeutender Verbindungen (Designer Drugs 2004)

Folker Westphal

Landeskriminalamt Schleswig-Holstein, Mühlenweg 166, 24116 Kiel, Tel: 0431/160-4724,
E-Mail dr.-folker.westphal@polizei.landsh.de

Wie bereits in den vorangehenden Jahren wurde auch für das Jahr 2004 von den Kollegen Rösner, Girreser, Junge, Fritschi und Stobbe der Landeskriminalämter Kiel, Hamburg und Hessen sowie vom Pharmazeutischen Institut der Universität Kiel eine Massenspektrensammlung von Designerdrogen, Betäubungsmitteln, Medikamentenwirkstoffen und deren Metaboliten sowie chemischen Kampfstoffen erstellt. Seit der letzten Ausgabe 2003 sind 1400 neue Verbindungen dazu gekommen, sodass das Update derzeit 3547 Massenspektren von 2336 verschiedenen chemischen Verbindungen umfasst. Alle Spektren sind Full-Spektren (keine reduzierten Spektren), die zum größten Teil ab einer Masse von 30 Dalton aufgenommen wurden. Neben den EI-Spektren wurden insbesondere bei Designerdrogen auch CI-Spektren aufgenommen, um eine sichere Identifikation dieser Verbindungen zu gewährleisten. Aus diesem Grunde wurden auch Spektren unterschiedlicher GC/MS-Systeme (Quadrupol/Ion Trap) aufgenommen und besonders interessante Massenbereiche expandiert.

Mit Ausnahmen von sensiblen oder sehr seltenen Verbindungen wurden ausschließlich Spektren in die Datensammlung aufgenommen, deren elektronisch überprüfte Qualität einen Qualitätsindex oberhalb 900 (von maximal möglichen 1000) aufwies. Bei dieser Überprüfung¹ werden die Massenspektren unter anderem auf unlogische Neutralverluste, auf die Übereinstimmung des Isotopenpatterns des Molekülpeaks mit dem theoretisch zu erwartenden Muster, auf die Anzahl der Fragmente in Relation zum Molekulargewicht und andere Kriterien untersucht. Diese Überprüfung gewährleistet von Standardfehlern freie Massenspektren. Die besondere Stärke dieser Massenspektrensammlung liegt in der Fülle der Massenspektren von Designerdrogen und ihrer hohen Aktualität. So sind z. B. alle neu aufgetretenen Fluor- und Fluormethoxyamphetamine sowie viele Derivate von Designerdrogen und Medikamentenwirkstoffen dazugekommen. Alle bis zum Jahre 2004 bekannt gewordenen Designerdrogen und zahlreiche bisher nicht aufgetretene eigens neu synthetisierte Derivate wurden erfasst.

Neben der Darstellung der Massenspektren wird die Strukturformel, der INN-Name der Verbindung, der UIPAC-Name, gegebenenfalls Synonyma, eine Referenz auf PiHKAL² und THiKAL³, die Bruttoformel, die CAS-Nummer (soweit bekannt), das Molekulargewicht, das massenspektroskopische Molekulargewicht, ein berechneter Retentionsindex, die Indikation und die rechtliche Klassifizierung nach den deutschen, amerikanischen sowie nach den Betäubungsmittelgesetzen der UNO aufgeführt. Die Sortierung der Massenspektren nach ihrem Basispeak und ein ausführlicher Substanzindex gewährleisten eine leichte Identifikation der Verbindungen.

Die Massenspektrensammlung wird auch zukünftig weiter ausgebaut und in jährlichen Updates veröffentlicht. Die Autoren sind an neuen Verbindungen daher sehr interessiert und wären für eine entsprechende Kontaktaufnahme (Tel. 0431-322427, p.roesner@t-online.de) dankbar. Ebenso werden Hinweise zur Fehlerkorrektur gern entgegengenommen. Ein Ausdruck der Sammlung kann unter obiger Kontaktadresse angefordert werden. Eine elektronische Version der Massenspektrensammlung in allen gängigen Bibliotheksformaten kann vom Wiley Verlag (<http://eu.wiley.com/WileyCDA/WileyTitle/productCd-0471473561.html>) bezogen werden.

Der Aufbau der Massenspektrenbibliothek, die Qualitätssicherung und alle weiteren Berechnungen erfolgten mit dem Programm Chemograph Plus Version 6.4 (www.Chemograph.de).

Dank

Der Aufbau dieser Datenbank wäre ohne die Mithilfe zahlreicher Kollegen nicht möglich gewesen, denen wir an diese Stelle danken möchten. Vielen Dank an alle, insbesondere an: H. Bergkvist (Linköping), S. Borth (Kiel), T. A. Dal Cason (Chicago), M. Erkens (Aachen), G. Fritschi (Wiesbaden), M. Gimbel (München), U. Girreser (Kiel), M. Hanke (München), W. Hänsel (Kiel), H. Huizer (Rijswijk), A. Jacobsen-Bauer (Stuttgart), F. Pragst (Berlin), B. Quednow (Magdeburg), G. Rochholz (Kiel), E. Schneider (Stuttgart), J. Schäfer (Kiel), H.W. Schütz (Kiel), S. Stobbe (Hamburg), R. Strömmer (Munster), A. Schmoltdt (Hamburg), J. Tenczer (Berlin), M. Weber (Munster), R. Wennig (Luxembourg), F. Westphal (Kiel), Zechlin (Mainz).

Literatur

- 1 David D. Speck, Rengachari Venkataraghavan and Fred W. McLafferty, A Quality Index for Reference Mass Spectra, *Org. Mass Spectrom.* 13, 209 (1978).
P. Ausloos, C.L. Clifton, S.G. Lias, A.I. Mikaya, S.E. Stein and D.V. Tchekhovskoi, The critical Evaluation of a Comprehensive Mass Spectral Library, *J. Am. Mass Spectrom.* 10, 565 (1999).
- 2 Alexander Shulgin, Ann Shulgin, *PIHKAL A Chemical Lovestory*, Transform Press, Box 13675, Berkeley, CA 94701, 1991.
- 3 Alexander Shulgin, Ann Shulgin, *TiHKAL, The Continuation*, Transform Press, Box 13675, Berkeley, CA 94701, 1997.