

Neue Software

Molecular Index of Cannabimimetics

Peter Rösner und Giselher Fritsch, ca. 200 Seiten, Stand 31.01.2013, kostenlos als pdf-File auf Anfrage bei den Autoren (p.roesner@t-online.de) erhältlich

Fritz Pragst

Institut für Rechtsmedizin der Charité Berlin, Turmstraße 21, 10559 Berlin

In der letzten Dekade hat die Zahl neuer Designerdrogen auf dem illegalen Markt dramatisch zugenommen. Dabei spielen die Agonisten der Cannabinoid-Rezeptoren CB1 und CB2, die unter der Bezeichnung „Legal highs“ als legale Alternativen zum THC den Markt überfluten, eine besonders große Rolle. Die strukturelle Vielfalt und die Geschwindigkeit, mit der diese Substanzen auf dem Markt erscheinen und wieder verschwinden, stellen Ermittlungsbehörden und toxikologische Labors gleichermaßen vor Schwierigkeiten. Die beiden führenden Experten auf dem Gebiet der Designerdrogen Dr. Peter Rösner und Dr. Giselher Fritsch, die früher sehr erfolgreich in den Landeskriminalämtern Kiel und Wiesbaden tätig waren, haben sich nun der Mühe unterzogen, 637 aktuell bekannten Cannabimimetika in einem Index geordnet zusammenzustellen. Dabei wurden 97 Originalliteraturstellen und 23 Internetzitate ausgewertet, darunter eine größere Zahl von Arbeiten von J. W. Huffmann, Alexandros Makriyanis und Romano Silvestri, auf die die Akronyme JWH xxx, AM xxx und SR xxx für viele dieser Substanzen zurückgehen.

Der Index besteht aus zwei Teilen: (1) Einer nach zunehmender Masse der häufigsten Isotope geordnete Tabelle, die neben den akkuraten Isotopenmassen der Wirkstoffe (z. B. 347,10769) auch die mittlere Molmasse bei Berücksichtigung aller Isotope (z. B. 347,84376) und die zugehörige Summenformel ($C_{22}H_{18}ClNO$) sowie die Kurzbezeichnung (JWW 400) oder den Substanznamen enthält. Diese Liste sollte vor allem für Suchoperationen mit hochauflösender Massenspektrometrie sehr nützlich sein.

Der zweite, weitaus umfangreichere Teil gibt für jede dieser Substanzen an: den „International Nonproprietary Name“ (INN, als solche gelten hier teilweise die den Substanzen gegebenen Kürzel wie „A-796,260“ oder „AEA“, z. T. wird auch die IUPAC-Bezeichnung benutzt), die IUPAC-Bezeichnung der Substanz, weitere Synonyme falls vorhanden, die Strukturformel, die CAS-Nr., erneut die aus den häufigsten Isotopen und aus den mittleren Atommassen berechneten Molmassen und soweit bekannt, die Kovats-Indizes. Weiterhin ist unter „IND“ eine Charakterisierung vorgenommen worden, z. B. cannabimimetic, designer drug, artifact or side product, cannabimimetic analog, cannabimimetic analog derivative, analgesic. Alphabetisches Ordnungsprinzip ist der INN.

Die Strukturen sind, wenn man die gleiche Wirkung bedenkt, erstaunlich vielfältig. Es fallen neben den von den natürlichen Cannabinoiden abgeleiteten Verbindungen in erster Linie die zahlreichen Indolderivate auf. Es sind aber auch zahlreiche aromatisch substituierte Cyclohexanole, Abkömmlinge der Arachidonsäure und sogar Tetrazolderivate dabei. Angaben zur Wirkungsstärke sind nicht gegeben.

Nach Angaben der Autoren kann dieser sehr nützliche Index Interessenten als pdf-File per E-Mail zugesendet werden.