

UV-Spektren der Designerdrogen 4-Brom-2,5-dimethoxybenzylpiperazin, 2C-B-Fly und Bromo-Dragonfly

Fritz Pragst und Abdulsallam Bakdash

Institut für Rechtsmedizin am Universitätsklinikum Charité, Hittorfstr. 18, 14195 Berlin

Neben den GC-MS-Methoden kann auch die Hochleistungsflüssigchromatographie mit Photodiodenarray-Detektor (HPLC-DAD) ein nützlicher Weg zu Identifizierung von Wirkstoffen sowohl in Substanz als auch aus biologischer Matrix sein [1]. Basis hierfür ist eine unter standardisierten Bedingungen aufgenommene Datenbank von UV-Spektren und Retentionsparametern, die möglichst viele Verbindungen mit toxikologischer Relevanz bzw. Missbrauchspotential enthält [2]. Die im vorstehenden Beitrag von Westphal et al. [3] beschriebenen relativ seltenen Designerdrogen wurden daher von ihm auch für die Aufnahme in die HPLC-DAD-Datenbank zur Verfügung gestellt. Die UV-Spektren sind in Abb. 1-3 dargestellt.

Die Chromatogramme und Spektren wurden unter den für die Datenbank geltenden Bedingungen gemessen [1,2]: Säule RP8ec, 5 µm, 250 x 4,0 mm (Merck, Darmstadt, Germany), mobile Phase Acetonitril/0.1 M Phosphatpuffer pH 2.3 (37:63 v/v), Fluss 1 ml/min, Raumtemperatur, Referenzstandard zur Berechnung der relativen Retentionszeiten 5-(4-Methylphenyl)-5-phenylhydantoin (MPPH, RRT = 1,000).

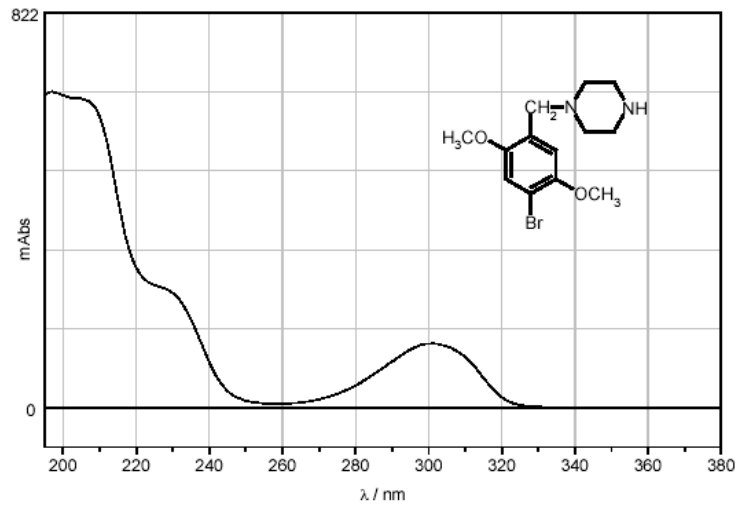


Abb. 1. UV-Spektrum von 4-Brom-2,5-dimethoxybenzylpiperazin. RRT = 0,050

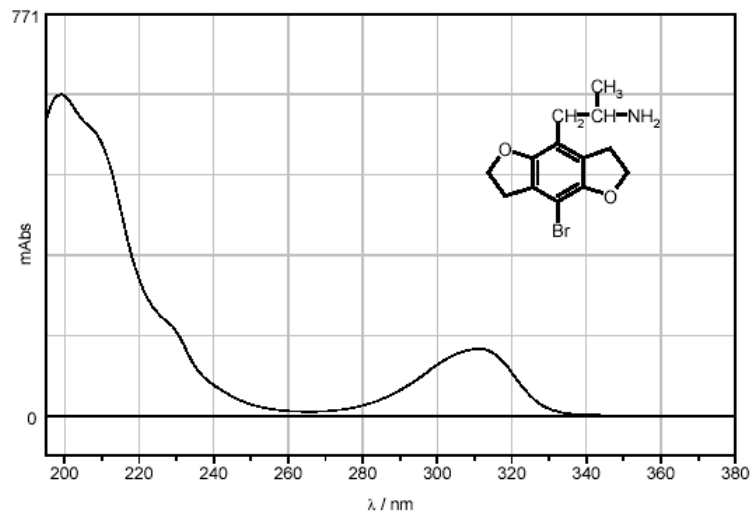


Abb. 2. UV-Spektrum von 2-(8-Bromo-2,3,6,7-tetrahydro[2,3-f][1]benzofuran-4-yl)-ethanamine (2C-B-Fly). RRT = 0,182

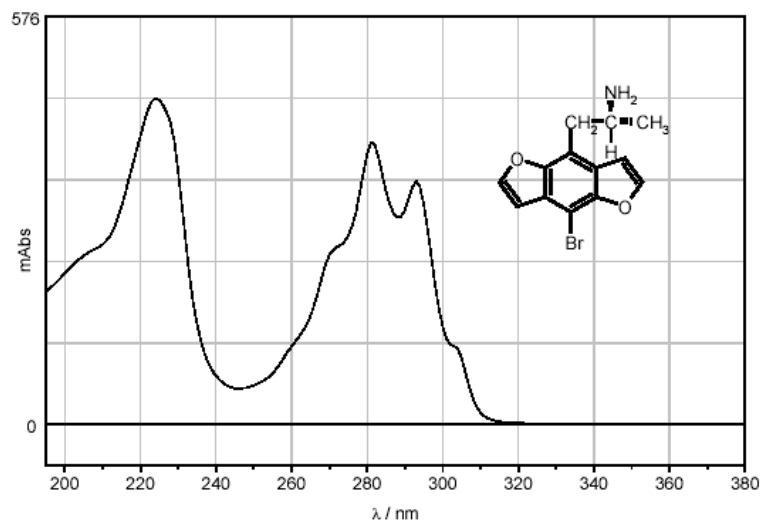


Abb. 1. UV-Spektrum von 1-(8-Bromobenzo[1,2-b;4,4-b']difuran-4-yl)-2-aminopropan (Bromo-Dragonfly). RRT = 0,389

Die Spektren von 4-Brom-2,5-dimethoxybenzylpiperazin und 2C-B-Fly weisen die typische, durch den 2,5-Dimethoxy-4-brombenzyl-Chromophoren bestimmte Gestalt auf, die auch bei DOB (2,5-Dimethoxy-4-bromamphetamin) gefunden wird, jedoch unterscheiden sie sich eindeutig bezüglich der Maxima und Minima und werden auch durch die DAD-Software klar voneinander unterschieden. Weiterhin besitzen DOM und 2C-B-Fly längere Retentionszeiten als das Piperazinderivat.

Aromatisierung der beiden Dihydrofuranogruppen im Bromo-Dragonfly führt hingegen zu einem völlig anderen Chromophoren, der wegen seiner starren, mit dem Anthracen isosteren Struktur die Schwingungsteilbanden klar erkennen lässt.

Literatur

- [1] Pragst F, Herzler M, Erxleben B-T. Systematic toxicological analysis by high performance liquid chromatography with diode array detection (HPLC-DAD).
- [2] Pragst F, Herzler M, Herre S, Erxleben B-T, Rothe M. UV-Spectra of Toxic Compounds. Database of photodiode array UV spectra of illegal and therapeutic drugs, pesticides, ecotoxic substances and other poisons. Book and CD-ROM. Heppenheim: Edition Dieter Helm, 2001:1034pp. Update 2007, about 3,300 substances.
- [3] Westphal F, Junge T, Girreser U, Stobbe S, Pérez SB, Pufahl M. Ein neues Designer-Benzylpiperazin: 4-Brom-2,5-dimethoxybenzylpiperazin. *Toxichem + Krimtech* 74 (2007) 137, voranstehende Arbeit.