

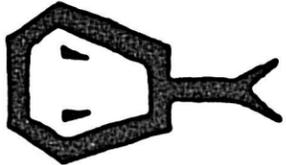


GESELLSCHAFT FÜR TOXIKOLOGISCHE UND FORENSISCHE CHEMIE

Toxichem

+

Krimtech



TOXICHEM + KRIMTECH

MITTEILUNGSBLATT DER
GESELLSCHAFT FÜR TOXIKOLOGISCHE UND FORENSISCHE CHEMIE

Bericht über den Workshop 1986

W. Arnold (Hamburg)

Veranstaltungen

Aus den Laboratorien:

MS-SEARCH ein Programm zur Verarbeitung massenspektrometrischer
Daten im Rahmen forensisch-toxikologischer Untersuchungen.
P. Rösner, R. Kühnle, T. June, P. Müller (Kiel)

MDMA

Methylendioximethamphetamin

A. Jeger, J. Huber, W. Bernhard (Basel)

* * * * *
*
* Seminar in Kiel *
*
* 14. - 16. Oktober 1987 *
*
* DATENVERARBEITUNG IM TOXIKOLOGISCHEN LABORATORIUM *
*
* Vorm. : Einführung in die elektr. Datenverarbeitung, *
* höhere Programmiersprachen, Datenbankprogramme. *
* Nachm.: Praktische Uebungen an Mikrocomputern. *
*
* Teilnehmerzahl : max. 20 Personen *
*
* Auskunft und Anmeldung bei P. R o e s n e r, Kiel *
* (Tel. 0431-5983662) *
*
* * * * *

W O R K S H O P 1986 in H O M B U R G /Saar

W. Arnold (Hamburg)

44 Damen und Herren, alles Mitglieder der GTFCh hatten sich zum Workshop "Instrumentelle Analytik und Datenverarbeitung" vom 2.-3.10.86 angemeldet. Nach dem Echo zu urteilen, war diese Veranstaltung eine der interessantesten und instruktiven Fortbildungstagungen dieser Art, die seit geraumer Zeit jedes Jahr mit wechselnden Themen von der GTFCh durchgeführt werden. Organisation und wissenschaftlich-technische Leitung lag in den bewährten Händen von Prof. K. Pflieger und Prof. M. Möller und ihren Mitarbeitern. Es war der 3. Workshop in Homburg.

Dankenswerterweise hatten verschiedene Herstellerfirmen ihre Geräte zur Verfügung gestellt, sodass sich Theorie und Praxis durch Vorträge und Vorführungen an entsprechenden Geräten einander in geeigneter Weise ergänzten. U.a. wurde über Erfahrungen mit dem HPLC-Diodenarray-Detektor und die Kopplung der HPLC mit einem Massenspektrometer berichtet. Weitere Themen waren Problemen der Bibliotheksauswertung von unbekanntem MS-Spektren gewidmet und hierbei verschiedene Möglichkeiten zu einer erfolgreichen Lösung angegeben. Besonders zu erwähnen ist in diesem Zusammenhang der Vortrag von P. Rösner, der sowohl theoretisch als auch praktisch ein leistungsfähiges Spektrensuchprogramm mit einem Mikrocomputer in der Sprache C vorstellte. Vertreter der Firma Finnigan demonstrierten in eindrucksvoller Weise den Einsatz des Ion-Trap-Detektors, der nun anscheinend seine vielfältigen Kinderkrankheiten überwunden hat, im Rahmen chemisch-toxikologischer Untersuchungen. In gleicher Weise überzeugte aus das MSD-Gerät von Hewlett-Packard beim Nachweis und der Identifizierung von Arzneimitteln einschliesslich ihrer Metaboliten im biologischen Material.

Besonders interessant war die Vorführung des Lumineszenz-Immuno-Assay durch H. Biro, die neue Möglichkeit im Rahmen immunologischer Analysen aufzeigte. Sicherlich wird dieses Verfahren in Zukunft an Bedeutung gewinnen, da es wahrscheinlich weniger störanfälliger als enzymimmunologische Untersuchungen sein wird und nicht den gleichen Auflagen unterliegt wie RIA-Analysen.

Vorträge und praktische Vorführungen ergänzten sich bei diesem Workshop optimal. Auch wurde überzeugend aufgezeigt, dass eine moderne forensisch-toxikologische Analytik ohne Mikroprozessoren und Computerauswertung in Zukunft kaum noch denkbar und daher für jeden forensisch tätigen Chemiker eine Neuorientierung in dieser Richtung erforderlich ist.

Karl Pflieger und Manfred Möller sowie ihren Mitarbeitern sei bestens gedankt - ich glaube, ich kann dies im Namen aller Beteiligten sagen - für diesen interessanten Workshop, der auch zusätzlich genügend Gelegenheit gab, dass der private und wissenschaftliche Gedankenaustausch unter den Teilnehmern nicht zu kurz kam.

SYMPOSIUM IN MOSBACH 24.-25. April 1987

Anmeldung nicht vergessen !

WORKSHOP 1987 in M ü n c h e n

8.-9. Oktober 1987

Thema : Anorganische Giftstoffe

B E G L E I T S T O F F A N A L Y T I K
=====

* * * * *
*
* 6. - 7. September 1987 *
*
* INTERNATIONALER WORKSHOP IN DUESSELDORF *
*
* * * * *

Im Auftrag des "Intern. Committee on Alcohol, Drugs and Traffic Safety" organisiert Prof. W. Bonte einen Workshop über

CONGENERS OF ALCOHOLIC BEVERAGES
Pharmacology, Pharmacokinetics, Analytical
Procedures, Forensic Significance

Daten: 15.3.87 Voranmeldungen und Vortragsanmeldungen
15.7.87 Anmeldefrist
15.8.87 Abgabe der Abstracts
6.- 7.9.87 Workshop in Düsseldorf
8.-12.9.87 Anschliessend findet im nahegelegenen Bonn die Jahrestagung der Deutsch. Gesellschaft für Rechtsmedizin statt.

Auskunft: Prof. Dr. W. Bonte
Institut für Rechtsmedizin
Moorenstrasse 4
D-4000 Düsseldorf

RINGVERSUCH BEGLEITSTOFFE

Der 1986 geplante Ringversuch musste wegen mangelndem Interesse verschoben werden. Es ist aber vorgesehen, in diesem Jahr Proben zu verschicken. Interessenten für den Ringversuch mit Begleitstoffen bitten wir, sich möglichst bald bei Herrn Prof. W. Bonte zu melden.

Wer Begleitstoffanalysen für die Gerichte durchführt, sollte sich an dieser externen Qualitätskontrolle beteiligen.

HP LC-GRUNDLAGEN-SEMINAR

HP LC-GRUNDLAGEN-SEMINAR

Freitag, 3.4.1987
=====

08.30 - 11.00 F.A.BATTIG, W.PFANNHAUSER, H.J.BATTISTA
Einsatz in der Praxis
- Präsentation routinemäßig angewandter Verfahren
.. Beispiele aus den Labors
- Diskussion

ca. 09.45 Kaffee-Pause (30 min.)

11.00 - 11.30 Abschluß-Diskussion
12.00 Mittagessen, anschließend Abreise

E n d e d e s S e m i n a r s

Kursunterlagen: Die Kursteilnehmer erhalten vollständige
schriftliche Unterlagen zu Kursbeginn.
Seminarbetrag: ö.S. 2500.-- incl. 2 Übernachtungen m. Früh-
stück, 5 Hauptmahlzeiten und Kursunterlagen
ö.S. 2000.-- ohne Übernachtung.
Beschränkte Teilnehmerzahl; die Anmeldungen werden in der
Reihenfolge des Eingangsdatums berücksichtigt und schriftlich
bestätigt.

Bitte um schriftliche Anmeldungen an:
DDR. Hans J. Battista
c/o Institut für Gerichtl. Medizin
Müllerstraße 44
6020 INNSBRUCK
Tel. (05222) 724-2464 oder 2465 (Fr. l. Gogge)

* BESTIMMUNG EXOGENER UND ENDOGENER SUBSTANZEN *
* IN BIOLOGISCHEN PROBEN *

Veranstalter

Arbeitsgruppe "Trennmethoden"
der österr. Gesellschaft für Mikrochemie und Analytische Chemie
in Zusammenarbeit mit der

Arbeitsgruppe "Medizinische und Klinische Chemie"
und der
Arbeitsgruppe "Lebensmittelchemie und Kosmetik"
in der
Gesellschaft Österreichischer Chemiker

T e r m i n :
Mittwoch, 1. April - Freitag, 3. April 1987

T a g u n g s o r t .
Sommerhaus Linz
Julius-Raab-Str. 10
4040 L I N Z
Tel.: (0732) 24 64 51 - 0

***** 4 *****

***** 1 *****

P R O G R A M M
=====

Mittwoch, 1.4.1987
=====

10.30 - 12.30 Ankunft
- Anmeldung
- Quartier

12.45 Mittagessen

14.00 Eröffnung
- Organisatorisches
- Aufbau und Zielsetzung
des Arbeitsprogrammes

14.15 - 15.00 Strategien zur HPLC-Analytik in biologischer Matrix H. J. BATTISTA
- HPLC versus Alternativmethoden
- Optimierung von Selektivität und Nachweisempfindlichkeit
- Kombination mit anderen Methoden

15.00 - 17.15 Alternative HPLC-Trennverfahren und deren Optimierung F. A. BATTIG
- Grundbegriffe
- Spezielle Aspekte der HPLC-Trennung von Makromolekülen
- Theorie und Praxis der:
"Reversed Phase"-HPLC
Ionenpaar-Technik
"Ionic suppression"-HPLC
Kaffee-Pause (30 min.)

19.00 "Hydrophobic Interaction"-HPLC
Ionenaustausch-HPLC
Abendessen, anschließend geselliges Beisammen-
sein

Donnerstag, 2.4.1987
=====

08.30 - 09.00 Theorie und Praxis der: G. SEIDL
- "Size Exclusion"-Chromatographie
- Affinitäts-Chromatographie

09.00 - 11.15 Instrumentierung I G. SEIDL
- Pumpen
- Steuergeräte
Kaffee-Pause (30 min.)

11.15 - 12.15 Instrumentierung II H. MASCHER
- Eluentenvorbereitung
- Trennsäulen und Vorsäulen
- Kapillaren und Verbindungsstücke
- UV-Detektoren
- Elektrochemische Detektoren
- Fluoreszenz-Detektoren
- Leitfähigkeits-Detektoren
- Spezielle Detektoren
Mittagessen

14.00 H P L C - W O R K S H O P
Führende HPLC-Firmen demonstrieren ihre Geräte
anhand praktischer Anwendungsbeispiele (open
end)
19.30 Abendessen, anschließend geselliges
Beisammen sein und
Diskussionsmöglichkeit mit Vortragenden und
Firmenvertretern

M S S E A R C H

ein Programm zur Verarbeitung massenspektroskopischer Daten
im Rahmen forensisch-toxikologischer Untersuchungen

P. Rösner, R. Kühnle, T. Junge, P. Müller

Die Gaschromatographie-Massenspektrometrie-Kopplung stellt hinsichtlich Selektivität und Empfindlichkeit die wohl leistungsfähigste Methode zum Nachweis von Suchtstoffen, Medikamentenwirkstoffen und Giften dar.

Hierbei erfolgt die Substanzidentifikation durch Vergleich des Massenspektrums der unbekannt Substanz mit den Spektren einer geeigneten Sammlung.

Für diesen mit Hilfe der elektronischen Datenverarbeitung durchgeführten Vergleich existieren in der Regel lediglich Programme bzw. Massenspektrenbibliotheken, die nur eine begrenzte Anzahl von Fragmenten pro Bibliothekenspektrum darzustellen vermögen. Die endgültige Identifikation einer Verbindung kann jedoch häufig nur durch den Vergleich der vollständig dargestellten Massenspektren erfolgen.

Da die Namen der Verbindung oftmals nur gekürzt wiedergegeben werden, wird auch aus diesem Grund häufig ein mühsames Nachschlagen in entsprechenden Katalogen erforderlich.

Gerade im Bereich der forensischen Analytik sind aktuelle Massenspektrenbibliotheken erforderlich, die dem neuesten Stand der Medikation bzw. des Drogenmißbrauchs entsprechen. Die hierfür erforderliche Zusammenführung des Spektrenmaterials zahlreicher Institutionen wird infolge der unbekannt Formate sowie der Inkompatibilität der verschiedenen Systeme faktisch unmöglich gemacht.

Um dieser unbefriedigenden Situation zu begegnen, wurde der gesamte die Substanzidentifikation betreffende Bereich der massenspektroskopischen Datenverarbeitung auf einen separaten preiswerten Mikrocomputer übertragen.

Dies bietet den Vorteil der Detailkenntnis eines jeden Programmabschnittes, aller Formate und ermöglicht somit eine leichte Anpassung der Software an die speziellen Bedürfnisse eines Benutzers.

Die Software MS SEARCH wurde auf dem leistungsfähigen Mikrocomputer 520 ST+ der Firma ATARI implementiert.

Dieses System bietet neben einer exzellenten Graphik den mit 8 MHz getakteten 16-Bit-Mikroprozessor MC 68000 der Firma MOTOROLA 1-MByte-RAM-Speicher, zwei Disk-Laufwerke mit insgesamt 1,4 MByte-Kapazität und ein Winchester-Laufwerk von 20 MByte. Bei der Erstellung der Software wurde insbesondere auf die durchgehende Integration einer graphischen Benutzeroberfläche (GEM)* geachtet.

Dies gewährleistet eine außerordentlich leichte Bedienbarkeit der Programme durch den Anwender.

* Graphics Environment Manager (Digital Research)

Dieser wird weitgehend von fehlerträchtigen Tastatureingaben befreit, indem die gewünschten Aktionen über einen Cursor selektiert und durch Anklicken mittels einer Maus gestartet werden (Abb. 1).

MS SEARCH wurde in der Sprache C ¹⁾ geschrieben, wobei besonders zeitkritische Routinen in Assembler-Sprache ausgelegt wurden.

Die Sprache C wurde gewählt, weil es sich hierbei um eine äußerst effiziente und kompatible Sprache handelt. C liefert Maschinencodes, deren Schnelligkeit denen von Assemblerprogrammen nahekommt.

Einen Eindruck von der Leistungsfähigkeit der Sprache C liefert die Tatsache, daß das Betriebssystem UNIX nahezu ausnahmslos in dieser Sprache geschrieben wurde.

MS SEARCH besteht aus dem eigentlichen Suchprogramm, dem Graphikprogramm sowie drei Bibliotheken (Abb. 2).

Die mehr als 1500 reduzierte Massenspektren umfassende Bibliothek DRUGTOX R besteht aus je 14 Fragmenten und Intensitäten, dem vollen Namen der Bruttoformel sowie dem Molekulargewicht der Verbindungen. Sie enthält die reduzierten Daten der Massenspektren der Verbindungen in Form von 14 Fragmenten und Intensitäten.

Die Auswahl der Fragmente für die Datenreduktion ²⁾ erfolgt bei Such- und Bibliotheksdaten derart, daß das Massenspektrum in 14 Massenintervalle eingeteilt wird und aus jedem dieser Intervalle das intensivste Fragment selektiert wird. Diese Selektion erfolgt durch das Programm. Es besteht jedoch auch die Möglichkeit, Suchfragmente per Hand einzugeben. Im vorliegenden Beispiel in Abb. 3 wird im 14. Intervall das Fragment mit $m/e = 369$ selektiert, im 13. das mit 327 usw.

Zur Identifikation unbekannter Verbindungen hat sich die Auswahl von 3 oder 4 dem Augenschein nach signifikante Fragmente im höheren Massebereich des Spektrums als ausreichend erwiesen.

Im vorliegenden Fall würde man etwa als signifikante Fragmente die der Massen 369, 327, 268 und 204 auswählen.

Jeder dieser m/e -Werte des Spektrums der unbekanntes Verbindung wird vom Programm mit allen Fragmenten der reduzierten Bibliothek-Spektren verglichen und die Trefferquote gespeichert.

Die hohe Suchgeschwindigkeit basiert somit auf der hohen Leistungsfähigkeit des Mikroprozessors MC 68000 in Verbindung mit der Sprache C und der RAM-residenz der Bibliothek.

Das heißt, es werden keine geschwindigkeitssteigernde Suchalgorithmen ²⁾ oder spezielle Datenstrukturen verwendet.

Ein entsprechender Suchalgorithmus kann etwa den Vergleich von Spektren in einem frühen Stadium abbrechen, wenn nicht übereinstimmende Basispeaks gefunden werden.

Dieses Vorgehen führt zu einer starken Reduzierung der durchzuführenden Vergleiche und damit zu einem deutlichen Geschwindigkeitsvorteil. Es beinhaltet aber auch eine größere Gefahr Verbindungen deshalb nicht zu identifizieren, weil die begrenzte Reproduzierbarkeit der Fragmentintensitäten von Massenspektren zu einer falschen Entscheidung über das Vorliegen des Basispeaks geführt hat.

Da die Basis der Suchläufe die reduzierte Bibliothek DRUGTOX R RAM-resident untergebracht wurde und nicht auf externe Massenspeicher zugegriffen werden muß, ergeben sich entsprechend kurze Suchzeiten.

So ist eine Suche mit 4 Fragmenten des Spektrums einer unbekanntem Verbindung innerhalb von 3 Sekunden abgeschlossen.

Ebenfalls mögliche Suchläufe nach Molekulargewicht oder Bruttoformel erfolgen innerhalb einer Zeit von weniger als eine Sekunde.

Im Gegensatz zur Bibliothek DRUGTOX R enthält die Bibliothek DRUGTOX C die vollen Massenspektren von mehr als 1500 pharmakologisch oder toxikologisch interessanten Verbindungen.³⁾

Sie bildet die Basis der graphischen Darstellung der vollen Massenspektren der Verbindungen. Die Daten dieser Bibliotheken liegen in offener Form von ASCII-Codes vor. Es können so alle herkömmlichen Texteditoren für die Modifikation oder Erweiterung der bestehenden Bibliotheken Verwendung finden.

Die ASCII-Form der Daten bietet neben der direkten Lesbarkeit auch den Vorteil eines unkomplizierten Datentransfers über die weit verbreiteten V-24-Schnittstellen zu anderen Computern.

Den Transfer der Daten über die Telefonleitung (Akustikkoppler, Modem) stehen somit im Gegensatz zu den Formaten mit 8-Bit-Struktur keine Schwierigkeiten entgegen.

Es besteht ferner die Möglichkeit, die Daten kommerzieller Bibliotheken zu verwenden. So wird bereits die DF-Bibliothek der Firma MAT Finnigan in Kombination mit dem MS SEARCH-Programm genutzt.

Die Bibliothek DRUGTOX F schließlich enthält die Strukturformeln der Verbindungen in geeignet kodierter Form. Diese mit einem separaten Formeleditor CHEMOGRAPH erstellte Bibliothek ist im Aufbau begriffen und umfaßt z.Z. etwa 500 Strukturformeln.

Das Ergebnis eines Suchlaufes mit MS SEARCH ist somit neben den vollen Namen, den Molekulargewichten und Bruttoformeln die graphische Darstellung der vollen ungekürzten Massenspektren und Strukturformeln der Verbindungen (Abb. 4).

Die Fragmente der Spektren sind bis zu einer Intensität von 0,01 % erfaßt. Da zahlreiche graphische Spektrenmanipulationsmöglichkeiten bestehen, können etwa durch das Spreizen der Y-Achse Fragmente und Cluster geringer Intensität gefunden werden, die ohne diese Möglichkeit optisch unentdeckt geblieben wären.

Besonders bei der Identifikation leicht fragmentierender Verbindungen mit geringer Molekülpeakintensität — wie Amphetaminen — erweist sich diese Möglichkeit als sehr nützlich. Das Spreizen und die Translation der X-Achse des Massenspektrums ermöglicht dagegen die detaillierte Untersuchung beliebiger Massebereiche eines Spektrums.

Die parallelen graphischen Darstellungen der Strukturformeln ermöglichen eine unmittelbare Korrelation zwischen Partialstrukturen und entsprechenden Fragmenten einerseits sowie eine bei selteneren Substanzen wünschenswerte Korrelation zwischen den Namen und der chemischen Struktur andererseits.

In den Suchergebnissen kann wie in einem Buch nach vorwärts und rückwärts geblättert werden. Alle graphischen Darstellungen können in hoher Qualität über einen 24-Nadel-Matrixdrucker ausgegeben werden.

Neben der graphischen parallelen Darstellung von Such- und Bibliothekspektrum sind die Ergebnisse auch in numerischer Form darstellbar.

Die massenspektroskopischen Daten für das Programm MS SEARCH können von zahlreichen Massenspektrometersystemen on-line über die V-24-Schnittstelle der Terminals mit Hilfe des eingebundenen Transferprogrammes übernommen werden.⁴⁾

Dieses Transferprogramm ist z.Z. für das 1020-GC-MS-Gerät der Firma Finnigan sowie das Gerät MAT 112 der gleichen Firma adaptiert.

Eine lediglich die Software betreffende Adaption weiterer Massenspektrometersysteme kann kurzfristig erfolgen.

Die vorgestellte Software wird laufend gepflegt und kann kurzfristig entsprechenden Anforderungen der Benutzer modifiziert werden.

Die vorgestellten Bibliotheken werden laufend ergänzt.

Eine Übernahme von bereits vorliegenden 500 Spektren von Pflanzenschutzmitteln ist in Kürze vorgesehen.

Eine weitere Ergänzung betrifft die Übernahme der Massenspektren von Edukten und Zwischenprodukten illegaler Rauschgiftsynthesen.

1) B.W. KERINGHAN und D. M. RITCHIE, *The C Programming Language*, Prentice-Hall, Inc. (1977)

2) T. CLERC und F. ERNI, *Computer-aided Comparison of Spectra*, Topics in Curr. Chem. 39, Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New York.
H.S. HERTZ, R.A. HITES u. K. BIEMANN, *Anal. Chem.* 43 (1971), 681; P.R. HAEGELI u. J.T. CLERC, *Anal. Chem.* 46 (1974), 739A; G.M. PESYNA, R. VENKATARAGHAVAN, H.E. DAYRINGER u. F.W. MCLAFFERTY, *Anal. Chem.* 48 (1976), 1362; K.S. KWOK, R. VENKATARAGHAVAN u. F.W. MCLAFFERTY, *J. Am. Chem. Soc.* 95 (1973), 4185.

3) P. RÖSNER und R. KÜHNLE, *Mass Spectral Data and Index of Pharmacologically active Compounds*, Wissenschaftliche Software Fa. Nagel und Knaak, Niemannsweg 168, 2300 Kiel.

4) P. RÖSNER, R. KÜHNLE, *Comp. Anw. i. Labor*, 6 (1985) 264

Abb. 1

SEARCH FOR MASSES
SEARCH FOR MOLECULARWEIGHT
SEARCH FOR FORMULA
EXTERNAL DATA
DISK DATA FILE
PRINTERCONFIGURATION
EXIT

1. m/e:369	8. m/e:___	Please select your masses !
2. m/e:244	9. m/e:___	
3. m/e:129	10. m/e:___	
4. m/e:45	11. m/e:___	
5. m/e:___	12. m/e:___	
6. m/e:___	13. m/e:___	
7. m/e:___	14. m/e:___	
		OK

WAITING FOR EXTERNAL DATA !

19200	9600	4800	3600	2400
2000	1800	1200	600	300
200	150	134	110	75
50	SELECT BAUDRATE !			

M S S E A R C H

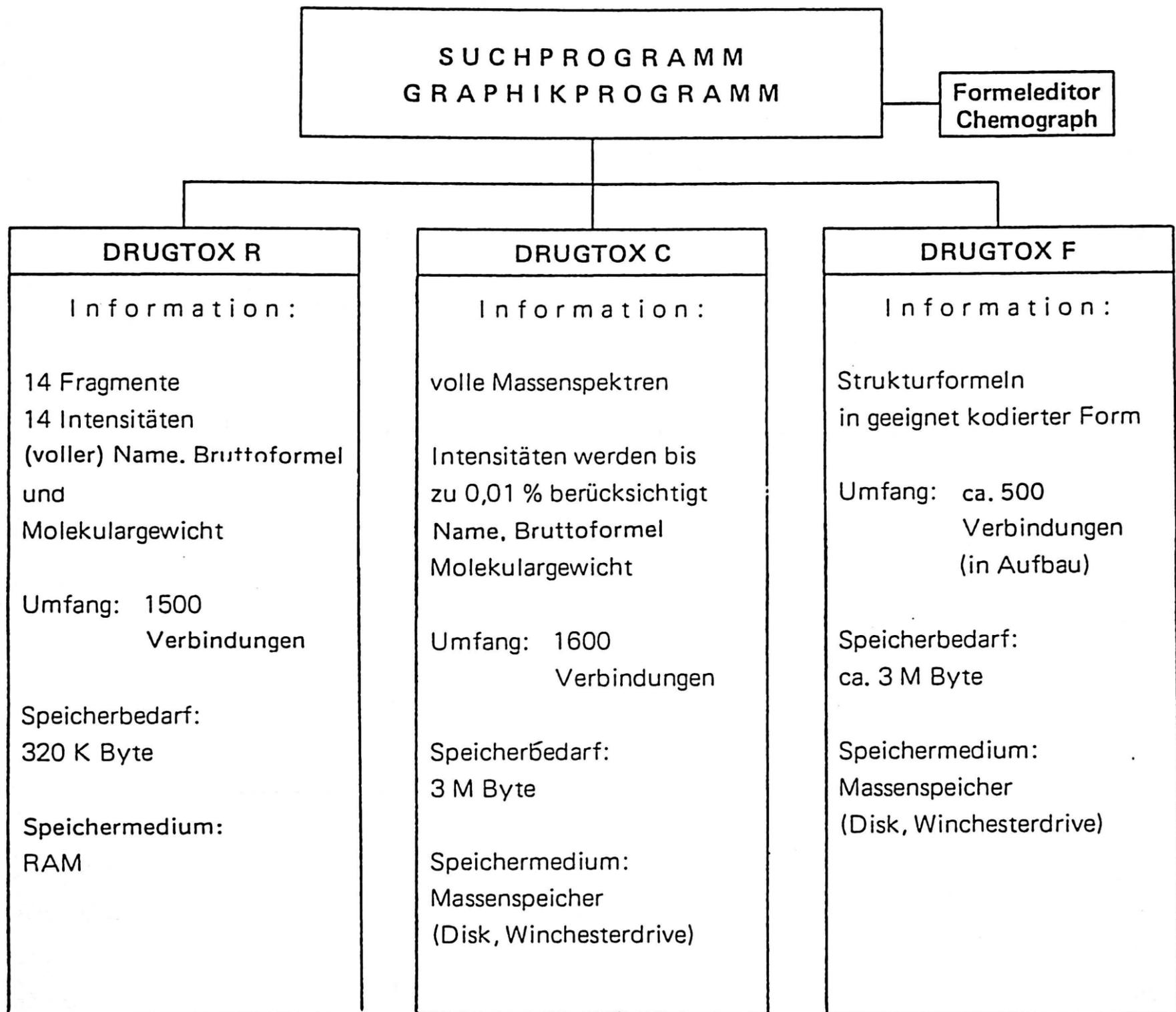


Abbildung 2

Abb. 4

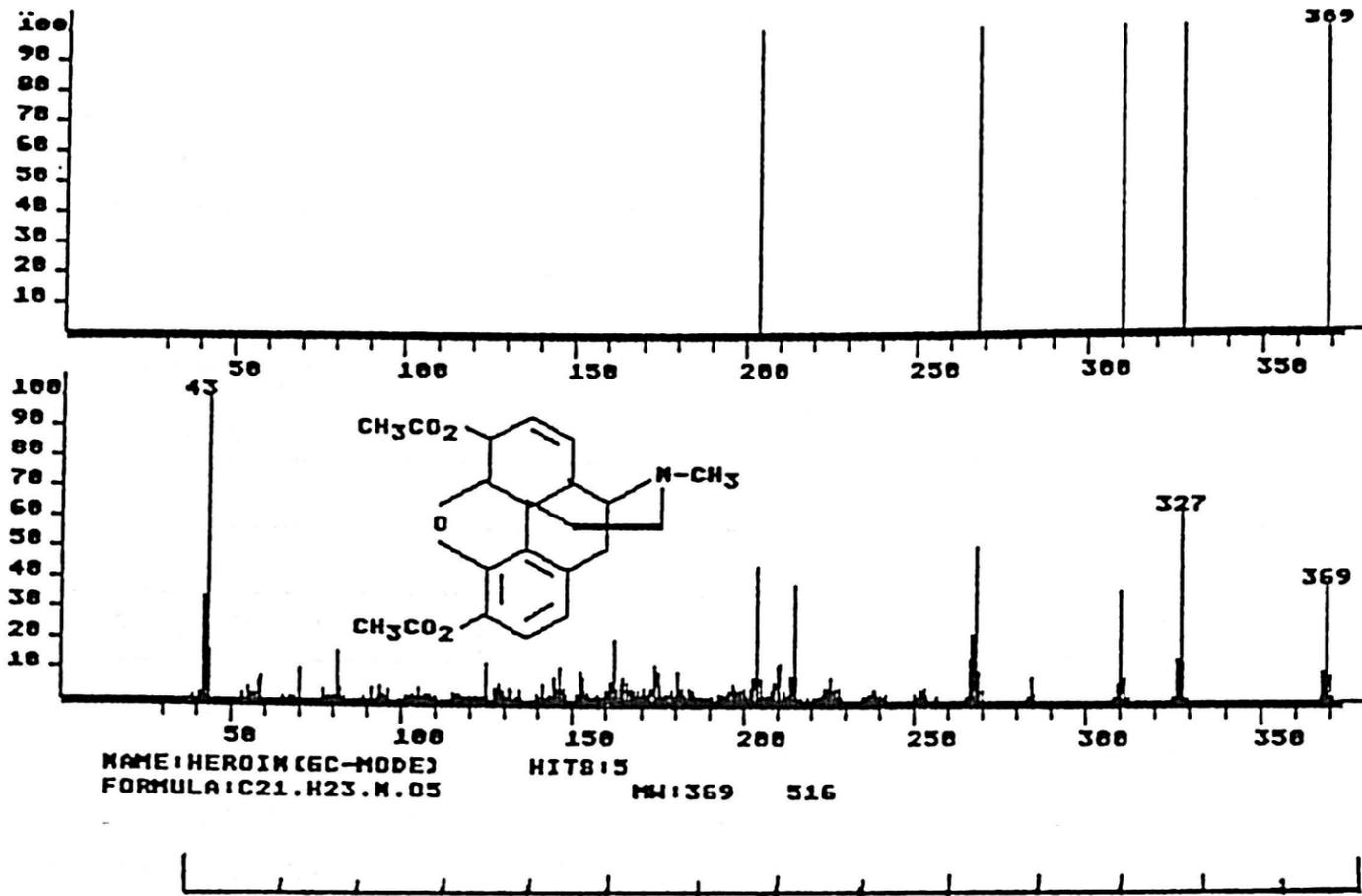
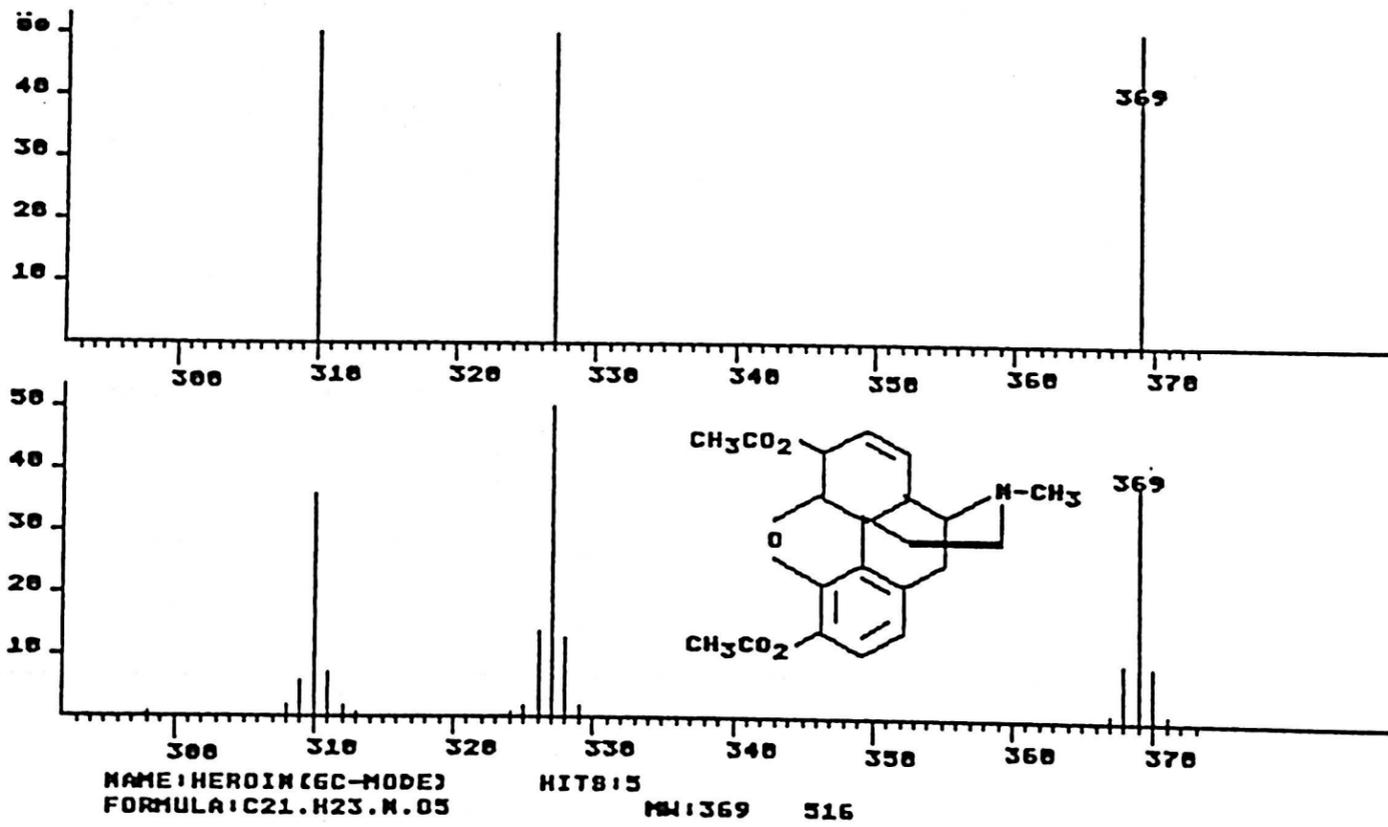
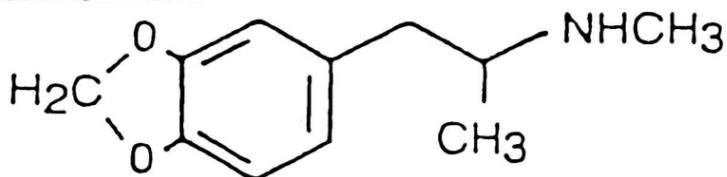


Abb. 3



MDMA

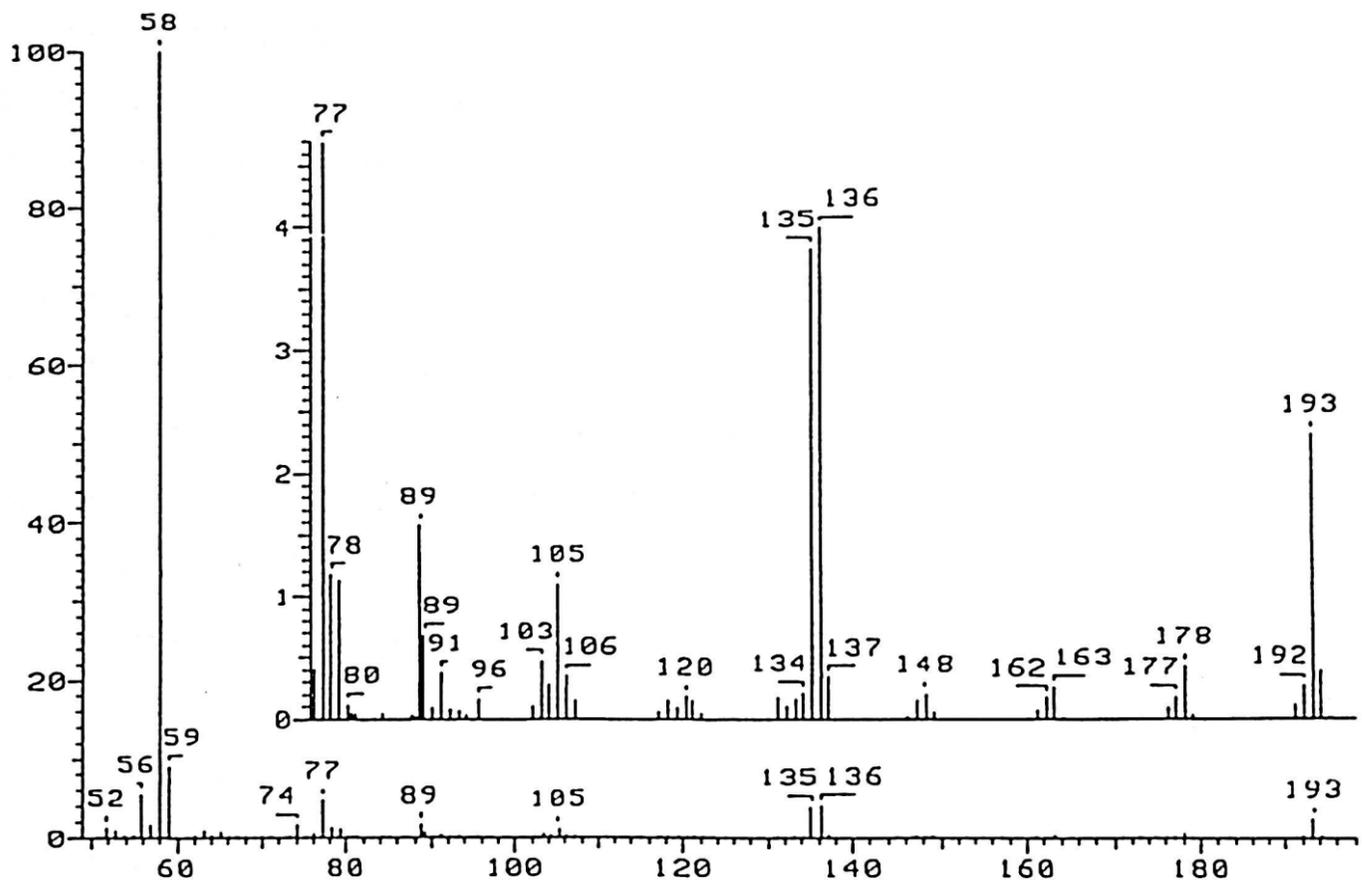
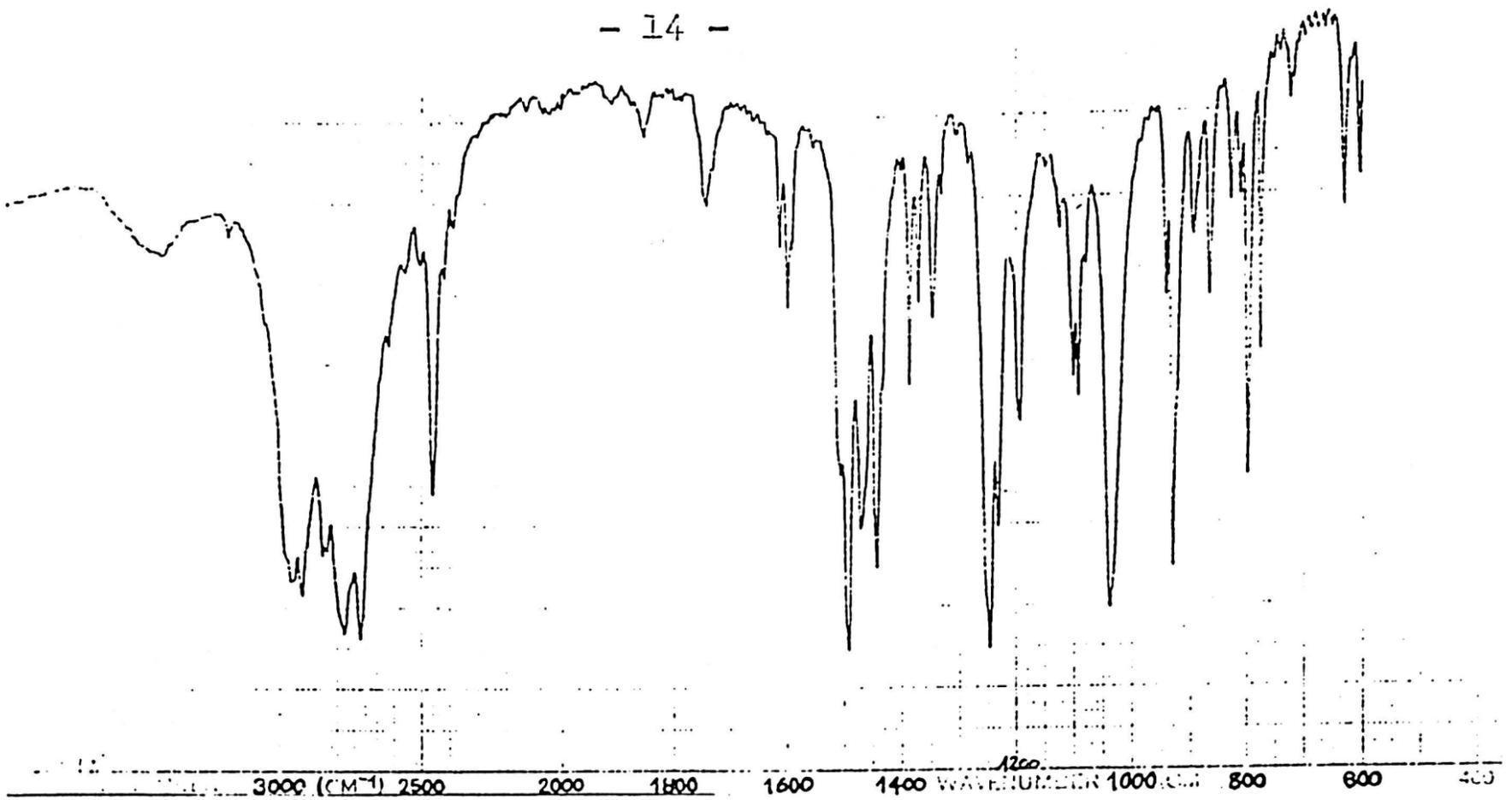


A.N. Jeger, Gerichtschemie Basel
J. Huber, Bundesamt für Gesundheitswesen Bern
W. Bernhard, ETS Macolin

MDMA (3,4-Methylenedioxyamphetamin) eine der sog. "Designer Drugs" hat eine starke psychoaktive Wirkung. Es wird von einigen Psychiatern versuchsweise verwendet. Unter kontrollierten Bedingungen dient es offenbar mit Erfolg zur Behandlung von psychischem Trauma und zur Ueberwindung von Kommunikationsbarrieren. Das illegal in den Handel gebrachte MDMA führt zu einer anscheinend angenehmen Intensivierung der Bewusstseinszustände. MDMA scheint etwa dieselben Eigenschaften wie LSD aufzuweisen, doch ohne dessen Nebenwirkungen; es ist nicht halluzinogen und wirkt auch nicht als Aufpeitschmittel. Bei regelmässiger Einnahme treten jedoch ähnliche Probleme auf wie bei Kokain und den Amphetaminen, insbesondere Depressionen, Verwirrungszustände und Angstgefühle bis hin zur Paranoia, manchmal erst Wochen nach der Einnahme der Droge.

MDMA hat eine lange Geschichte; es wurde schon 1914 bei Merck synthetisiert und als Appetitzügler patentiert, aber nicht in den Handel gebracht. Obwohl mancher Psychiater von dessen therapeutischem Wert überzeugt ist, wurde es von den Gesundheitsbehörden nicht freigegeben. Weil kein Patentschutz erhältlich ist, interessiert sich auch keine Pharmafirma für die Durchführung des überaus kostspieligen Bewilligungsverfahrens. Ueber die Wirkung von MDMA ist nichts Sicheres bekannt; möglicherweise ist es selektiv toxisch auf gewisse Klassen von Neuronen im Gehirn. Jedenfalls wird es von Untergrundchemikern in grossen Mengen synthetisiert und mit "Erfolg" vermarktet.

MDMA = 3,4-methylenedioxyamphetamine; Ecstasy; XTC;
CAS Reg. Nos. = 42542-10-9, 54946-52-0.



UV: M D M A in Ethanol

GC: OV-17 0.80 rel. DPA
OV-101 0.82 (Diphenylamin)

