

„Badesalz“ für die Nase - Fluormethcathinon neu auf dem Drogenmarkt

Folker Westphal¹, Thomas Junge¹, Ulrich Girreser², Andrea Jacobsen-Bauer³, Peter Rösner⁴

¹Landeskriminalamt Schleswig-Holstein, Mühlenweg 166, 24116 Kiel

²Pharmazeutisches Institut der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Gutenbergstr. 76, 24118 Kiel

³Landeskriminalamt Baden-Württemberg, Taubenheimstrasse 85, 70372 Stuttgart

⁴Otto-Diels-Institut für Organische Chemie der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Olshausenstr. 40, 24098 Kiel

Abstract

In Baden-Württemberg, a federal state of Germany, powdery compounds have been dealt on the illegal drug market with the labelling “Charge +”. They contained caffeine and lidocaine as well as another unknown compound. The unknown was identified as a fluoromethcathinone isomer according to the results of gas chromatography mass spectrometry (GC-MS) and product ion spectrometry after electron ionization (EI) and chemical ionization (CI). The compound was completely characterized with nuclear magnetic resonance spectroscopy (¹H-, ¹³C-, and ¹⁹F-NMR) and the position of the fluoro atom was identified in meta position (3-fluoromethcathinone, 3-FMC). The structure elucidation is discussed and mass spectra of 3-fluoromethcathinone and some of its derivatives are presented.

Zusammenfassung

In Baden-Württemberg wurden Mitte 2009 pulvrige Substanzen unter der Bezeichnung „Charge+“ in der einschlägigen Drogenszene vertrieben. Sie enthielten neben Coffein und Lidocain eine unbekannte Substanz. Es handelte sich dabei nach den Ergebnissen der Analysen mittels Gaschromatographie-Massenspektrometrie (GC-MS) nach Elektronenstoßionisation (EI) und Chemischer Ionisation (CI) sowie nach tochterionenspektroskopischer Untersuchung (GC-MS/MS) unter EI um ein Fluormethcathinon-Isomer. Die Substanz wurde vollständig NMR-spektroskopisch charakterisiert (¹H-, ¹³C-, and ¹⁹F-NMR) und die Position des Fluoratoms im Aromaten als *meta*-Position bestimmt (3-Fluormethcathinon/*meta*-Fluormethcathinon, 3-FMC). In der vorliegenden Arbeit wird die Strukturaufklärung beschrieben und einige Massenspektren von *meta*-Fluormethcathinon und einigen seiner Derivate präsentiert.

1. Einleitung

In Baden-Württemberg wurde 2009 eine Vielzahl von bunten Papierbriefchen unter der Bezeichnung Charge+ (siehe Abb. 1 – 3) sichergestellt, die jeweils ca. 1 g einer beigefarbenen Substanz enthielten (Abb. 2). Charge+ wird in den einschlägigen Internetforen als so genanntes „Badesalz“ (Abb. 3) verkauft. Es konnten in den sichergestellten Proben, die eine zunächst unbekannte Verbindung (**1**) enthielten, Coffein und in weiteren Sicherstellungen als dritte Komponente zusätzlich das Lokalanästhetikum Lidocain nachgewiesen werden. Lidocain ist dort offensichtlich als Folge, der in den einschlägigen Internetforen geäußerten „Beschwerden“, dass Charge+ unangenehm beißend in der Nase wirke, zugesetzt worden.

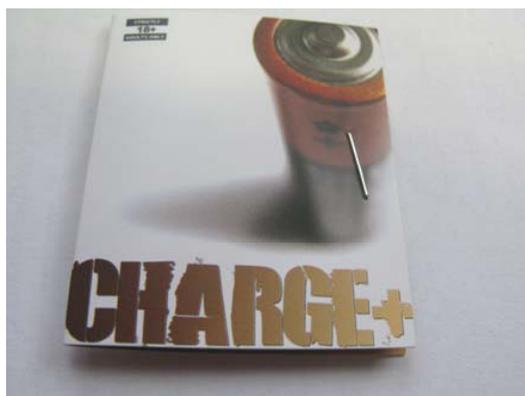


Abb. 1



Abb. 2



Abb. 3

2. Material und Methoden

2.1. Chemikalien

Das Fluormethcathinon stammte aus einer Sicherstellung des Landeskriminalamtes Baden-Württemberg. Die benutzten Chemikalien waren jeweils p.a., sofern nicht anders angegeben.

2.2. Massenspektrometrie (GC-MS und GC-MS-MS)

Probenvorbereitung: Eine Probe des sichergestellten Pulvers wurde zweimal mit je 2 mL Chloroform ausgeschüttelt. Lidocain und Coffein lösten sich dabei, im unlöslichen Anteil verblieb das Fluormethcathinonsalz. Diese Probe wurde dem LKA Kiel zur Analyse zur Verfügung gestellt.

Für die GC-MS-Analyse wurden ca. 2 mg des Pulvers in 1 mL Wasser suspendiert, mit 5%-iger Natronlauge alkalisiert und mit 2 mL Diethylether extrahiert. 1 µL dieses Extraktes wurde in das GC-MS-System injiziert.

Zur Herstellung der Derivate wurde das übersandte Asservat in Wasser gelöst, mit 5 % NaOH alkalisiert und die freie Base mit Diethylether extrahiert. Anschließend wurde der Extrakt geteilt und jeweils bei 30 °C im Stickstoffstrom zur Trockene gebracht. Folgende Reagenzien wurden zur Derivatisierung (70 °C, 60 min) hinzugegeben: Acetanhydrid, Trifluoressigsäureanhydrid (TFAA), Pentafluorpropionsäureanhydrid (PFPA) und N,O-Bis(trimethylsilyl)-

trifluoracetamide mit 10 % Trimethylchlorsilan (BSTFA/TMSCl). Das Trifluoracetat (TFA) und das Pentafluorpropionat (PFP) wurden anschließend bei 30 °C im Stickstoffstrom abgedampft und die Rückstände in Diethylether aufgenommen. Das Acetat (AC) wurde zur GC-MS-Analyse in Diethylether die silylierte Verbindung (TMS) in Chloroform gelöst. Zur Methylierung wurde 1 µL des basischen Etherextraktes der Verbindungen **1** mit 20 µL Methyljodid 1 h bei 70 °C erhitzt. Von den Lösungen der Derivate wurde jeweils 1 µL in das GC-MS-System injiziert. Das TMS-Derivat konnte nicht durch Reaktion des Hydrochlorids oder der freien Base mit N-Methyl,N-trimethylsilyltrifluoracetamid (MSTFA) hergestellt werden.

Geräte: Die Analysen erfolgten auf einem GC-MS-System bestehend aus einem Gaschromatograph (Trace GC Ultra) der Firma Thermo Electron mit Autosampler CTC CombiPAL (CTC Analytics, Schweiz), gekoppelt mit einem TSQ7000 Triple-Quadrupol-Massenspektrometer der Firma Thermo-Finnigan.

GC-Parameter: Die Aufgabe erfolgte splitless. Die Injektortemperatur betrug 220 °C. Trägergas war Helium (1 mL/min, constant flow). Für die Trennung wurde eine Fused Silica DB-1 Säule der Firma J&W, Länge 30 m, Innendurchmesser 0,32 mm, Filmdicke 0,25 µm verwendet. Das Temperaturprogramm startete bei 80 °C mit einer Haltezeit von 1 min und heizte anschließend mit 15 °C/min auf eine Endtemperatur von 280 °C auf, die 20 min gehalten wurde. Die Temperatur der Transferline zum Massenspektrometer betrug 280 °C.

MS-Parameter: Es wurde ein Massenbereich von $m/z = 29 - 600$ mit einem Scan pro Sekunde gemessen. Zur Aufnahme der Elektronenstoß-Ionisations (EI)-Massenspektren wurde eine Ionisationsenergie von 70 eV bei einer Emissionsstromstärke von 400 µA verwendet. Die Temperatur der Ionenquelle betrug 175 °C.

Die Chemische Ionisation (CI) wurde mittels Methan als Reaktandgas bei einem Druck von 1.5 mmTorr bei sonst gleichen Ionisationsbedingungen durchgeführt. Bei den CI-Spektren wurde ein Massenbereich von $m/z = 50 - 600$ aufgenommen.

Bei der Tochterionenspektroskopie (EI-MS/MS) wurde als Kollisionsgas Argon unter den oben beschriebenen Ionisationsbedingungen verwendet. Die Kollisionsenergie wurde mit ca. 20 eV und der Kollisionsgasdruck mit ca. 1.5 mmTorr vorgegeben. Die exakten Parameter für Kollisionsenergie und Kollisionsgasdruck wurden mithilfe von n-Butylbenzol über die Fragmentintensitätsverhältnisse von m/z 92/91 auf 0.2 sowie m/z 65/91 auf 0.02 eingestellt [1]. Dies gewährleistet die Reproduzierbarkeit der aufgenommenen Tochterionenspektren und die Nutzung einer Tochterionenspektren-Bibliothek zur Identifizierung der Struktur der Tochterionen [2].

2.3. ¹H- und ¹³C-NMR-Untersuchungen

10 mg des in Chloroform unlöslichen Anteils des sichergestellten Materials wurde zum einen in DMSO-d₆ angelöst. Eine zweite Probe (17 mg) wurde mit 5 %iger Natronlauge versetzt und mit Chloroform-d₁ ausgeschüttelt (jeweils 1 mL), die organische Phase wurde zweimal mit gesättigter Ammoniumchloridlösung und mit Wasser gewaschen (jeweils 1 mL) und über wasserfreies Natriumsulfat in das NMR-Rohr filtriert.

Die Aufnahme der NMR-Spektren erfolgte mit einem Bruker Avance III 300 NMR-Spektrometer bei 300 K unter Verwendung von Standardpulsprogrammen des Herstellers. ¹H-(300 MHz)- und ¹³C-(75 MHz)-Verschiebungen wurden auf internes Tetramethylsilan kalibriert. ¹⁹F-(282 MHz)-Verschiebungen wurden auf CFC₃ im jeweiligen Lösungsmittel kalibriert [3].

3. Ergebnisse und Diskussion

3.1. GC/MS und GC/MS-MS Untersuchungsergebnisse

Erste GC-MS-Ergebnisse wiesen bereits darauf hin, dass es sich bei der Verbindung **1** um ein Fluormethcathinon handeln könnte (Abb. 4).

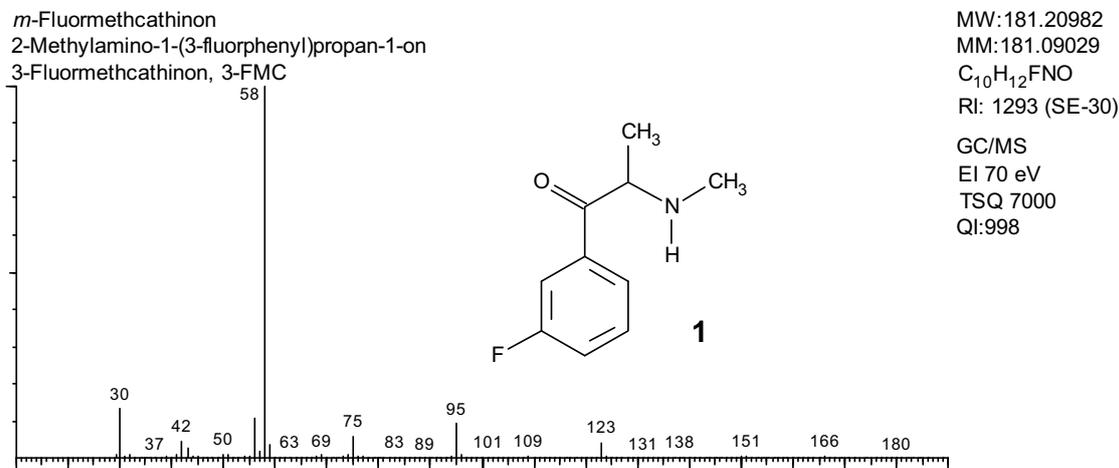


Abb. 4. MS-Spektrum von **1** nach Elektronenstoßionisation.

Das Massenspektrum nach Elektronenstoßionisation zeigte das nur sehr schwach vorhandene vermutete Molekularion bei $m/z = 181$ bzw. sein $[M-1]$ -Fragment. Für das Fluoratom im Aromaten sprachen das nach α -Spaltung des am Ketosauerstoff ionisierten Moleküls zu erwartende Fluorbenzoylkation mit $m/z = 123$ sowie seine Folgeprodukte bei $m/z = 95$ (Fluorphenylkation, nach Verlust von CO) und das hochungesättigte Fragment $m/z = 75$ ($C_6H_4^+$, nach Verlust von HF). Auch das nach α -Spaltung des am Stickstoffatom ionisierten Moleküls zu erwartende Immoniumion als Basispeak mit $m/z = 58$ war mit der Struktur von Fluormethcathinon zu vereinbaren.

Archer veröffentlichte 2009 die EI-Massenspektren von *ortho*-, *meta*- und *para*-Fluormethcathinon (Flephedron) sowie ihrer Acetylderivate, ihre 1H -, ^{13}C - und ^{19}F -NMR-Spektren in D_2O sowie die ATR-IR-Spektren ihrer Hydrochloride[4]. Die Massenspektren der drei Isomere sind praktisch identisch. Das *ortho*-Isomer besitzt, wie oft bei isomer substituierten Aromaten eine deutlich andere Retentionszeit. Das *meta*- und *para*-Isomer sind über die Retentionszeiten auch der Acetylderivate nicht sicher zu differenzieren. Mithilfe dieser Daten waren die GC-MS-Ergebnisse und die ATR-IR-Spektren der sichergestellten Charge+-Pulver nicht einem der möglichen Fluormethcathinonisomere zuzuordnen. Zur weiteren Strukturaufklärung wurden die Zusatzstoffe Lidocain und Coffein durch Anlösen mit Chloroform entfernt. Der dabei erhaltene unlösliche Rückstand zeigte im GC-MS-Spektrum nur noch ein Signal des Fluormethcathinonisomers. Jedoch konnte auch mithilfe des IR-ATR-Spektrums dieses Rückstands nach Literaturvergleich mit dem Artikel von Archer keine Identifizierung vorgenommen werden.

Die GC/MS-Spektren nach Chemischer Ionisation mit Methan (Abb. 5) bestätigt die nominale Molekülmasse von 181 durch Bildung des protonierten Molekülions bei $m/z = 182$ und den typischen Anlagerungsprodukten bei $m/z = 210$ $[M+29]^+$ und $m/z = 222$ $[M+41]^+$. Die Sauerstofffunktion im Molekül zeigt sich durch die Abspaltung eines Neutralteils mit der Masse 18 (H_2O). Die Abspaltung von Wasser offensichtlich nach Protonierung am Carbonylsauerstoff und anschließender Umlagerung ist bei Cathinonderivaten typisch [5]. Die Abspaltung eines

Neutralteils mit der Masse 20 belegt die Anwesenheit von Fluor im Molekül ($M - HF$). Die zu erwartende induktive Abspaltung von Methylamin ist überraschenderweise nur im untergeordneten Maß im Spektrum zu erkennen ($m/z = 151$). Stattdessen wird bei m/z 105 die Masse eines Benzoylkations beobachtet, die nur durch Verlust von HF sowie der gesamten N-Methyl-ethylamin-Partialstruktur entstanden sein kann. Offensichtlich verläuft diese Reaktion so schnell, dass die induktive Methylaminabspaltung nicht zum Zuge kommen kann.

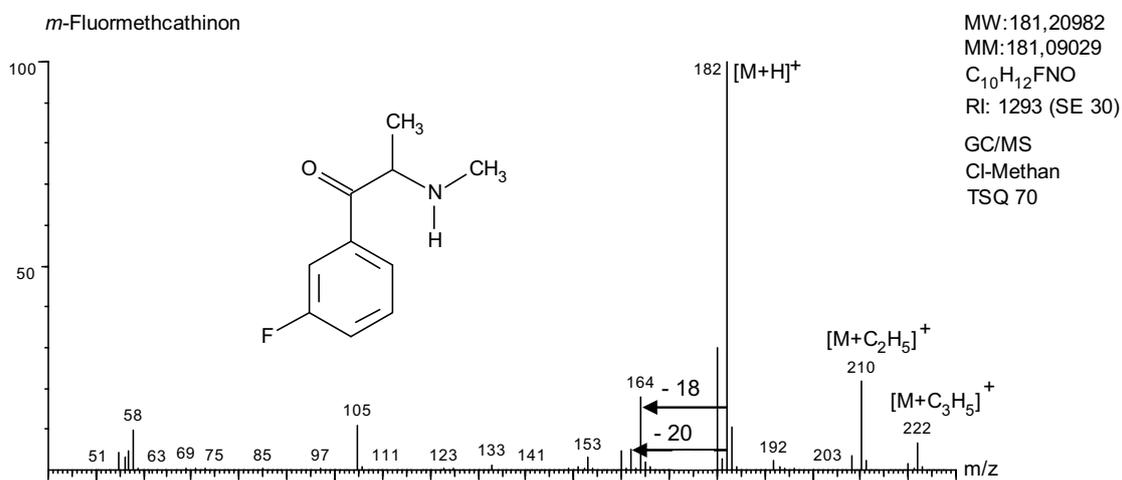


Abb. 5. MS-Spektrum nach Chemischer Ionisation (Methan) von **1**.

Die Substitution am Stickstoff und an dem benachbarten α -Kohlenstoffatom wurde nach tochterionenspektroskopischer Untersuchung des Immoniumions mit der Masse 58 bestätigt [6,7]. Danach handelte es sich um das in α -Position methylsubstituierte und am Stickstoff monomethylsubstituierte Immoniumion, wie es beim Fluormethcathinon zu erwarten ist. Zur Zuordnung der Fluorposition im Aromaten wurden anschließend NMR-spektroskopische Untersuchungen durchgeführt.

3.2. NMR-spektroskopische Untersuchungsergebnisse

Die ermittelten chemischen Verschiebungen in den beiden Lösungsmitteln sind tabellarisch in Tabelle 1 zusammengefasst. Exemplarisch für die Komplexität der Multiplettaufspaltungen in den ¹H-NMR-Spektren sind die jeweiligen aromatischen Bereiche in Abb. 7 dargestellt.

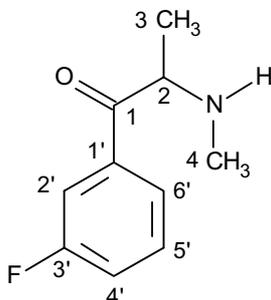


Abb. 6. Nummerierung der Atome in 3-Fluormethcathinon für die NMR-Zuordnung

Tabelle 1: NMR-Verschiebungen und Kopplungskonstanten von 3-Fluormethcathinon in CDCl_3 .

| Atom | ^1H -Verschiebung (300 MHz, TMS, δ , m, J) ^{a)} bzw. ^{19}F -Verschiebung (282 MHz, CFCl_3 , δ , m, J) ^{b)} | ^{13}C -Verschiebung (75 MHz, TMS, δ , m, J) ^{a)} |
|-----------|---|--|
| 1 | | 202,0 (breit) |
| 2 | 1,31 (d, $J_{2,3} = 7,0$) | 59,9 |
| 3 | 4,16 (q, $J_{2,3} = 7,0$) | 19,4 |
| 4 | 2,39 (s) ^{c)} | 34,5 |
| 1' | | 137,8 (d, $J_{1',\text{F}} = 6,0$) |
| 2' | 7,67 (tdd, $J_{2',\text{F}} = 9,5$; $J_{2',6'} = 1,6$; $J_{2',4'} = 2,5$) | 115,1 (d, $J_{2',\text{F}} = 22,5$) |
| 3' | ^{19}F -111,9 (ddd, $J_{\text{F},2'} = 9,5$, $J_{\text{F},4'} = 8,5$, $J_{\text{F},5'} = 5,5$) | 164,5 (d, $J_{3',\text{F}} = 247,5$) |
| 4' | 7,29 (tdd, $J_{4',\text{F}} = 8,2$; $J_{4',5'} = 8,2$; $J_{4',2'} = 2,5$ $J_{4',6'} = 1,0$) | 120,4 (d, $J_{4',\text{F}} = 21,8$) |
| 5' | 7,47 (td, $J_{5',4'} = 8,2$; $J_{5',6'} = 8,2$; $J_{5',\text{F}} = 5,5$) | 130,5 (d, $J_{5',\text{F}} = 7,5$) |
| 6' | 7,75 (tdd, $J_{6',5'} = 7,7$; $J_{6',4'} = 1,0$; $J_{6',2'} = 1,5$) | 124,0 (d, $J_{6',\text{F}} = 3,0$) |

a) δ : chemische Verschiebung in ppm, m: Multiplizität, s: Singulett, d: Dublett, t: Triplet usw., J in Hz: Kopplungskonstante

b) Es ist jeweils die aus dem jeweiligen Multipllett ermittelte apparente Kopplungskonstante angegeben

c) Das NH-Proton ist wegen schnellen Austauschs nicht sichtbar

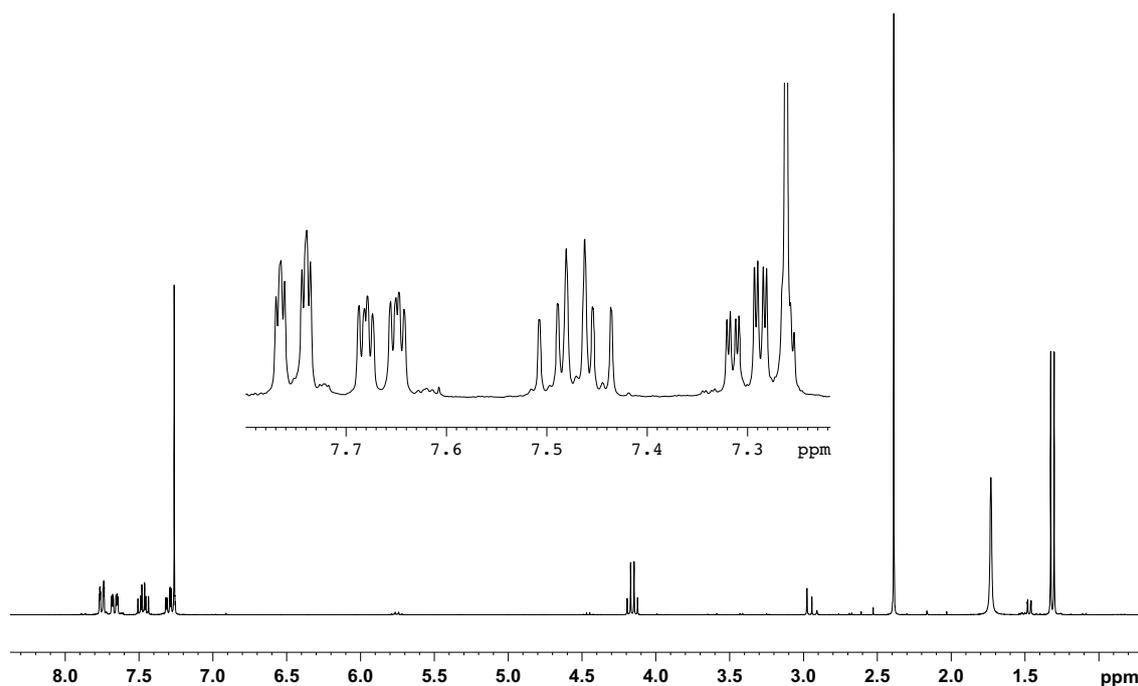


Abb. 7. ^1H -NMR-Spektrum der Fluormethcathinonbase in CDCl_3 . Der Ausschnitt zeigt den Aromatenbereich.

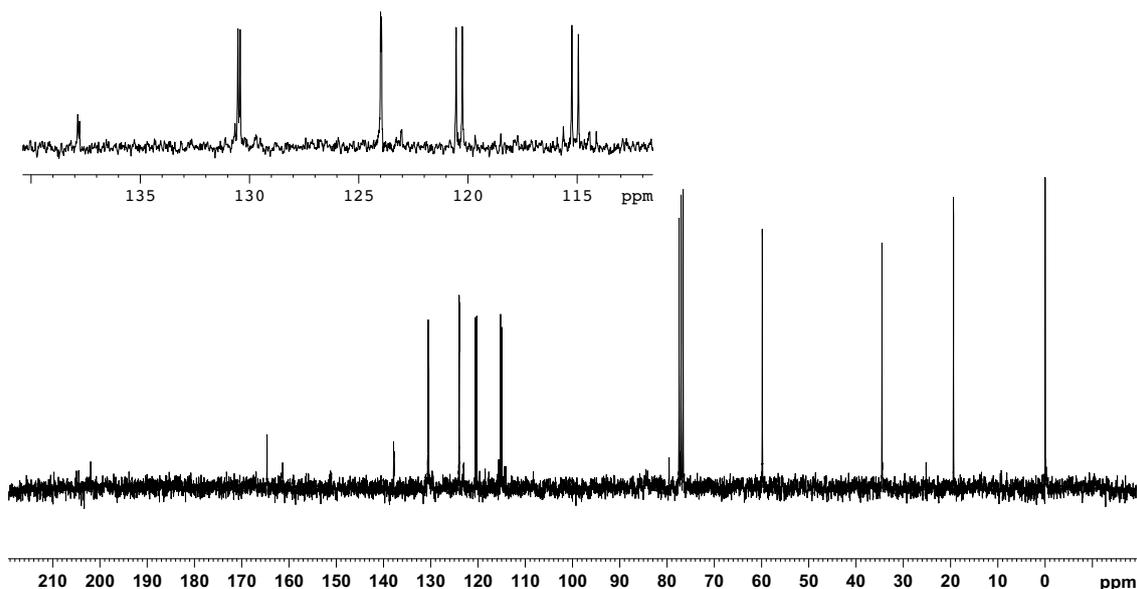


Abb. 8. ^{13}C -NMR-Spektrum der Fluormethcathinonbase in CDCl_3 . Der Ausschnitt zeigt den Aromatenbereich.

Tabelle 2: NMR-Verschiebungen und Kopplungskonstanten von 3-Fluormethcathinonhydrochlorid in DMSO-d_6

| Atom | ^1H -Verschiebung (300 MHz, TMS, δ , m, J) ^{a)} bzw. ^{19}F -Verschiebung (282 MHz, CFCl_3 , δ , m, J) ^{b)} | ^{13}C -Verschiebung (75 MHz, TMS, δ , m, J) ^{a)} |
|------|---|--|
| 1 | | 195,5 (d, $J_{1,\text{F}} = 2,0$) |
| 2 | 1,45 (d, $J_{2,3} = 7,2$) | 55,5 |
| 3 | 5,16 (q, $J_{2,3} = 7,2$) | 15,2 |
| 4 | 2,61 (s) ^{c)} | 30,7 |
| 1' | | 135,1 (d, $J_{1',\text{F}} = 6,5$) |
| 2' | 7,84 (dddd, $J_{2',\text{F}} = 9,6$; $J_{2',6'} = 2,6$, $J_{2',4'} = 1,4$, $J_{2',5'} = 0,4$) | 115,3 (d, $J_{2',\text{F}} = 22,9$) |
| 3' | ^{19}F -111,1 (ddd, $J_{\text{F},2'} = 9,6$, $J_{\text{F},4'} = 8,6$, $J_{\text{F},5'} = 5,8$) | 162,3 (d, $J_{3',\text{F}} = 245,8$) |
| 4' | 7,61 (tdd, $J_{4',\text{F}} = 8,6$; $J_{4',5'} = 8,3$; $J_{4',2'} = 2,6$, $J_{4',6'} = 1,2$) | 121,7 (d, $J_{4',\text{F}} = 21,7$) |
| 5' | 7,67 (tdd, $J_{5',4'} = 8,3$; $J_{5',6'} = 8,0$; $J_{5',\text{F}} = 5,8$, $J_{5',2'} = 0,4$) | 130,5 (d, $J_{5',\text{F}} = 8,0$) |
| 6' | 7,89 (tdd, $J_{6',5'} = 7,5$; $J_{6',4'} = 1,4$; $J_{6',2'} = 1,4$) | 125,1 (d, $J_{6',\text{F}} = 2,6$) |

a) δ : chemische Verschiebung, m: Multiplizität, s: Singulett, d: Dublett, t: Triplett usw., J in Hz: Kopplungskonstante

b) Es ist jeweils die aus dem jeweiligen Multipllett ermittelte apparente Kopplungskonstante angegeben

c) Die NH_2 -Protonen finden sich bei 9,33 ppm, sehr breit

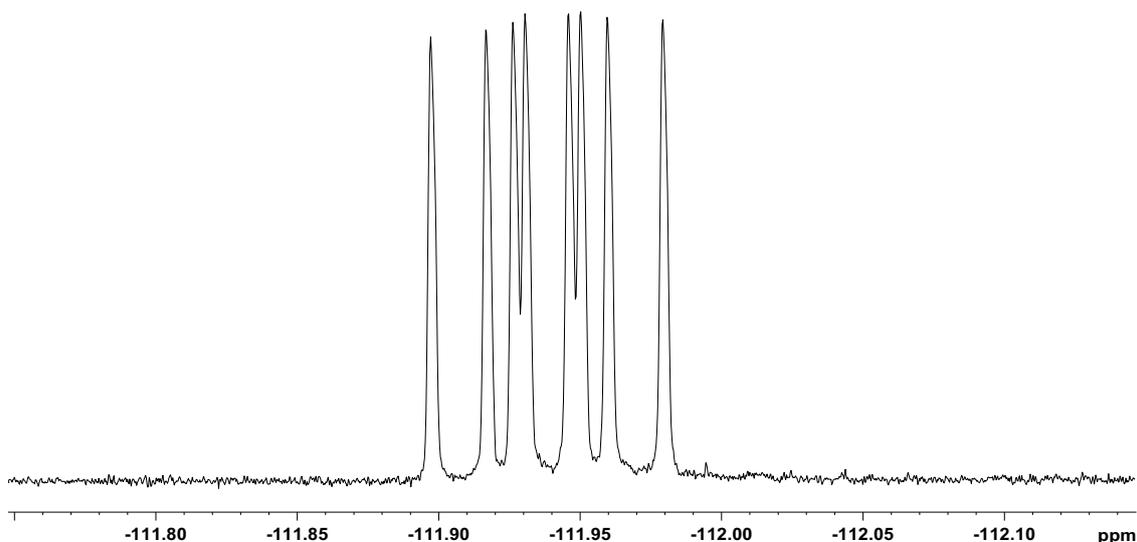


Abb. 9. ^{19}F -NMR-Spektrum der Fluormethcathinonbase in CDCl_3 .

Die ^1H - und ^{13}C -NMR-Verschiebungen stimmen sehr gut mit tabellierten Werten bzw. aus Inkrementen berechneten Werten überein, ebenso die beobachteten Kopplungskonstanten für die Kopplung von Protonen mit Fluoratomen in Aromaten ($^3\text{J}_{\text{H,F}} = 8\text{-}9\text{ Hz}$, $^4\text{J}_{\text{H,F}} = 5\text{-}6\text{ Hz}$, $^5\text{J}_{\text{H,F}} = 0\text{ Hz}$). Dies gilt auch für die Aufspaltungen der ^{13}C -Resonanzen des Aromaten ($1\text{J}_{\text{C,F}} = 245\text{ Hz}$, $^2\text{J}_{\text{C,F}} = 18\text{-}22\text{ Hz}$, $^3\text{J}_{\text{C,F}} = 6\text{-}9\text{ Hz}$, $^4\text{J}_{\text{C,F}} = 2\text{-}3\text{ Hz}$) [8]. Eine genaue, wenn auch aufwändige Auswertung des Aromatenbereichs des ^1H -NMR-Spektrums nach 1. Ordnung erlaubt die eindeutige Zuordnung des Fluorsubstituenten zur 3-Position. Ein Fluorsubstituent in 4-Position kann sofort wegen der fehlenden Symmetrie ausgeschlossen werden.

Die Information über die Position des Substituenten ergibt sich auch eindeutig und unabhängig vom ^1H -NMR-Spektrum. Für das 3-Isomere ergibt sich eine gute Übereinstimmung der chemischen Verschiebungen und eine logische Zuordnung der beobachteten ^{13}C , ^{19}F -Kopplungskonstanten aus dem ^{13}C -NMR-Spektrum (Abb. 8). Auch das ^{19}F -NMR-Spektrum liefert eine klare Zuordnung des Substitutionsmusters (Abb. 9). Die Aufspaltung (Dublett von Dubletts von Dubletts) mit Kopplungskonstanten von zweimal ca. 8 - 9 Hz und einmal ca. 5,6 Hz ist nur bei einem Fluoratom in *meta*-Position zum Erstsubstituenten möglich. Somit kann in einer einfachen Analyse der Kopplungen im Fluorspektrum schnell eine eindeutige Aussage getroffen werden. Im Gegensatz dazu können die ^{19}F -Verschiebungen in Chloroform oder Dimethylsulfoxid nicht zur Strukturzuordnung herangezogen werden. So werden für die 2-, 3- und 4-Fluoracetophenone chemische Verschiebungen von -110,6, -113,1 und -107,1 ppm in Aceton- d_6 angegeben. In DMSO- d_6 findet man entsprechend -110,0, -112,0 und -105,9 ppm, jeweils relativ zu CFCl_3 [9]. Archer berichtet chemische Verschiebungen für die 2-, 3- und 4-Fluormethcathinone von -112,1, -114,2 und -104,5 ppm in D_2O unter Verwendung von Trifluoressigsäure- d_1 als internem Standard (-78 ppm) [4]. Wir haben für die untersuchte Probe chemische Verschiebungen von -111,1 (in DMSO- d_6 relativ zu CFCl_3), -111,9 (in CDCl_3 relativ zu CFCl_3) und -114,3 ppm (in D_2O , interner Standard CF_3COOD bei -78 ppm) gefunden. Auch hier ergibt sich eine gute Übereinstimmung.

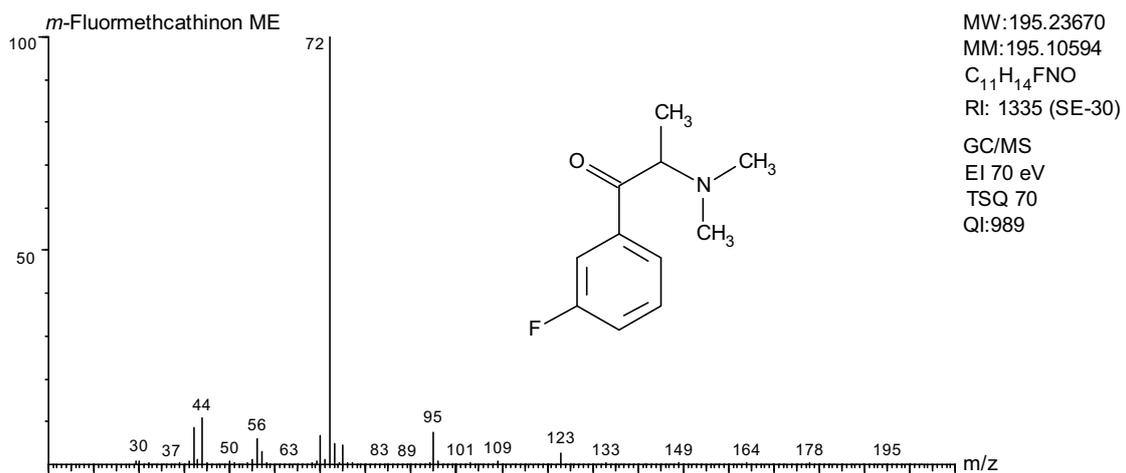
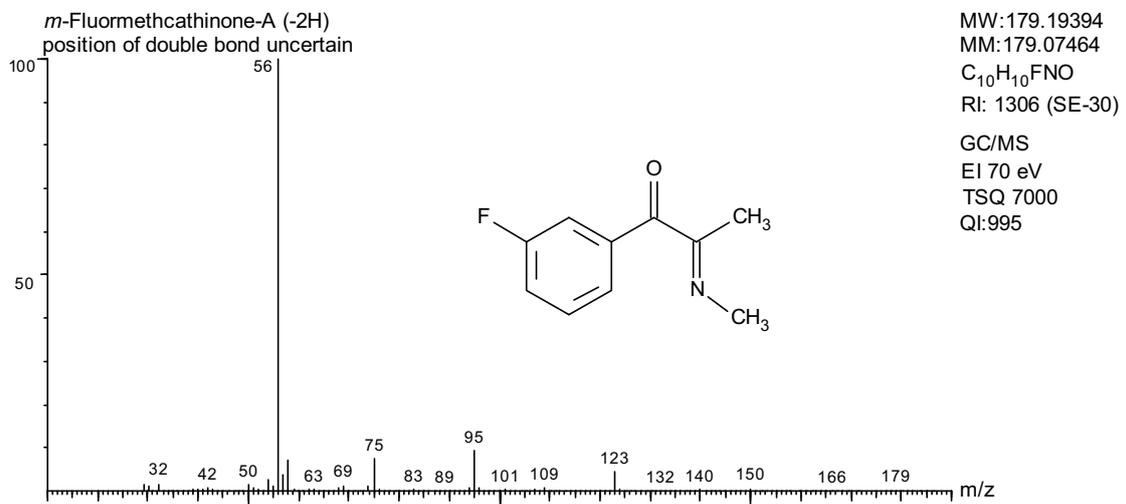
Durch den Vergleich von ^{13}C - und ^{19}F -Spektren wurde eine bei der alkalischen Aufarbeitung teilweise eintretende Zersetzung der Substanz sowohl durch die Probenvorbereitung als auch durch mehrstündiges Stehenlassen der freigesetzten Base in Chloroform bei Raumtemperatur

festgestellt, d. h. die relevanten Spektren mussten umgehend nach der Präparation aufgenommen werden. Die Probe in DMSO-d₆ zeigte eine hohe Stabilität.

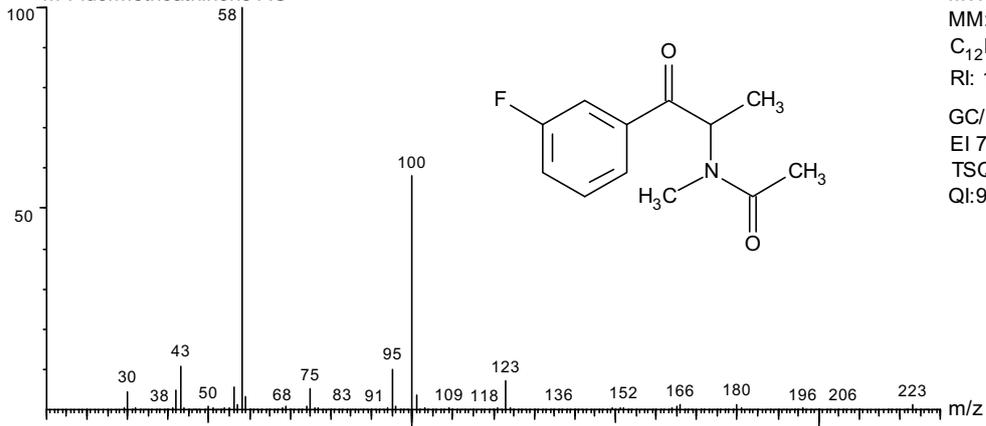
Bei den NMR-spektroskopischen Untersuchungen des Fluormethcathinon-Hydrochlorids in DMSO-d₆ sowie bei der Silylierung eines Fluormethcathinon-Base-Extraktes stellte sich weiterhin die Anwesenheit von Fettsäuren (Palmitin-, Stearin, Linol- und Ölsäure) heraus. Damit ließ sich auch die fehlende Zuordnungsmöglichkeit über die IR-Daten des in Chloroform unlöslichen Rückstands erklären.

3.3. Massenspektren einiger Derivate

In den folgenden Abbildungen (Abb. 10) sind die EI-MS-Spektren der Acetyl- (AC), Trifluoracetyl- (TFA), Perfluorpropionyl- (PFP), und Trimethylsilyl-Derivate (TMS) sowie des methylierten Homologs (ME) von 3-Fluormethcathinon abgebildet. Ferner wird das dehydrierte Artefakt von 3-Fluormethcathinon und die silylierte Carbaminsäure bei GC-MS-Messungen gefunden.

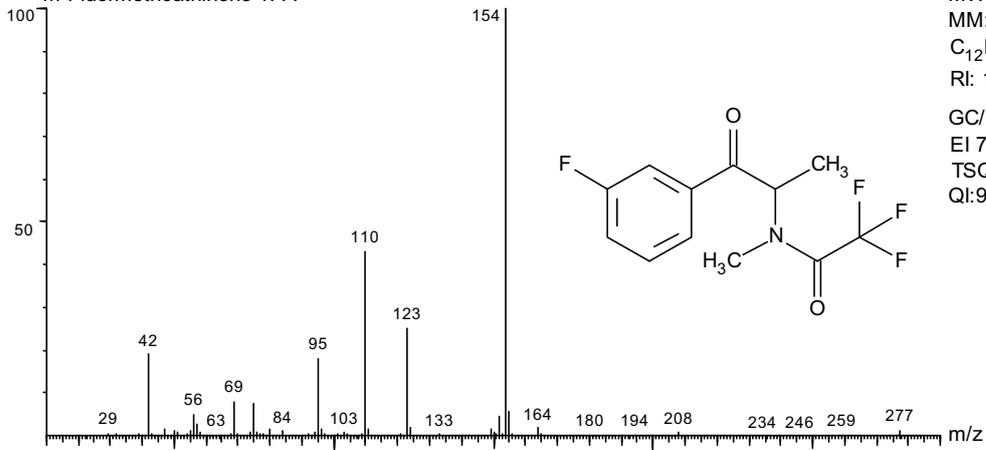


m-Fluormethcathinone AC



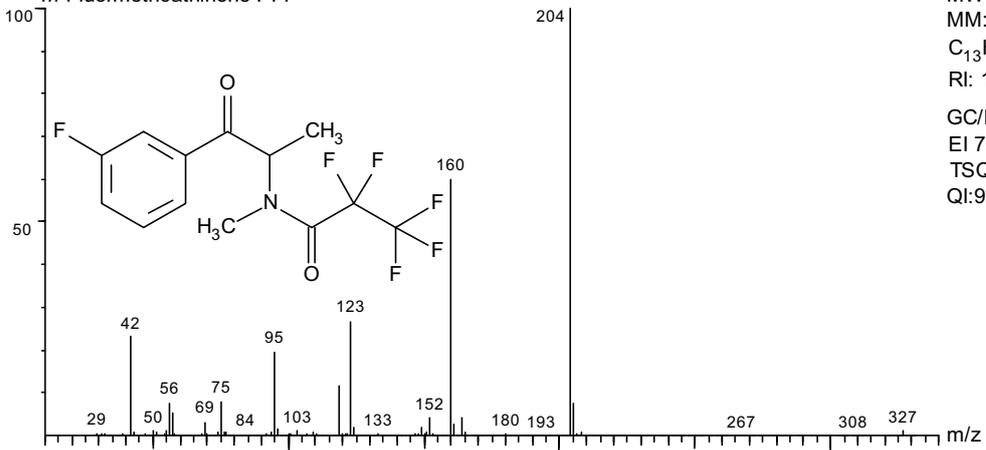
MW:223.24710
 MM:223.10086
 $C_{12}H_{14}FNO_2$
 RI: 1602 (SE-30)
 GC/MS
 EI 70 eV
 TSQ 7000
 QI:994

m-Fluormethcathinone TFA



MW:277.21849
 MM:277.07259
 $C_{12}H_{11}F_4NO_2$
 RI: 1396 (SE-30)
 GC/MS
 EI 70 eV
 TSQ 7000
 QI:995

m-Fluormethcathinone PFP



MW:327.22630
 MM:327.06940
 $C_{13}H_{11}F_6NO_2$
 RI: 1410 (SE-30)
 GC/MS
 EI 70 eV
 TSQ 7000
 QI:998

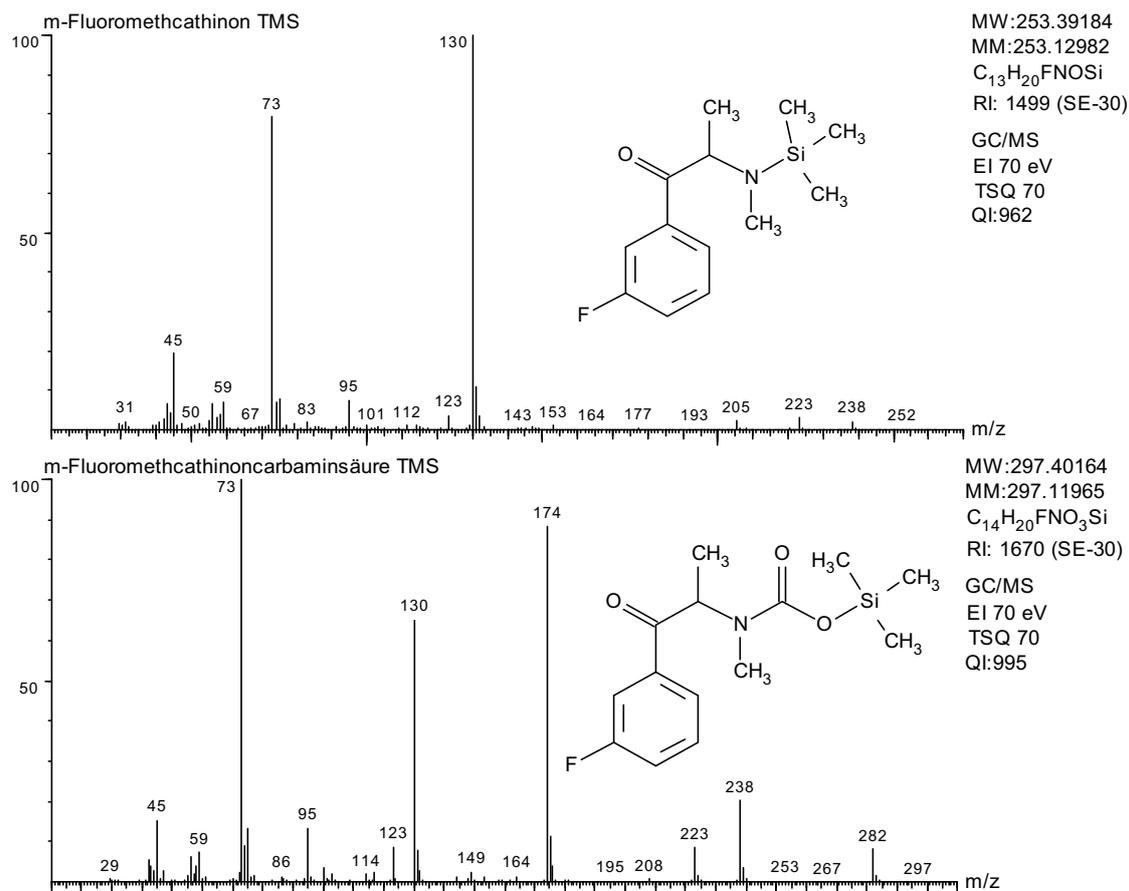


Abb. 10. GC/MS-Spektren (EI, 70 eV) einiger Derivate von 1.

3-Fluormethcathinon unterliegt im Gegensatz zum Cathinon, Methcathinon (Ephedron) und zum 4-Methylmethcathinon (Mephedron) (24. BtMGÄndV vom 22.1.2010) in Deutschland bisher keinen BtM-rechtlichen Bestimmungen. Wegen der chemischen Struktur ist von einer ähnlichen stimulierenden Wirkung wie bei den analogen substituierten Cathinonen auszugehen.

4. Literatur

- 1 Dawson PH, Sun WF. A round robin on the reproducibility of standard operating conditions for the acquisition of library MS/MS spectra using triple quadrupols. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc.* 1984;55:155-170.
- 2 Junge Th, Rösner P, Westphal F. Product ion mass spectra of important organic ions, eine kostenlose Printversion der Datenbank kann bei den Autoren angefordert werden.
- 3 Berger S, Braun S. 200 and More NMR Experiments, Wiley-VCH, Weinheim, 2005:336.
- 4 Archer RP. Fluoromethcathinone, a new substance of abuse, *Forensic Sci. Int.* 2009;185:10-20.
- 5 DalCason TA, Young R, Glennon RA. Cathinone: An investigation of several N-alkyl and methylenedioxy-substituted analogs. *Pharmacol. Biochem. Behavior* 1997;58(4):1109-1116.
- 6 Rösner P, Junge Th. Investigation of the alkylamino group of aliphatic an arylaliphatic amines by collision-induced dissociation mass spectra of C₄H₁₀N⁺ immonium ions. *J. Mass. Spectrom.* 1996;31:1047-1053.
- 7 Rösner P, Junge Th. Structure elucidation of new designer drugs by daughter ion mass spectroscopy. In: Pragst F, Aderjan R (Hrsg.) XII. GTFCh-Symposium in Mosbach, Verlag Dr. Dieter Heppenheim, Heppenheim, 2001:130-142.
- 8 Pretsch E, Bühlmann P, Affolter C, Badertscher M. *Spektroskopische Daten zur Strukturaufklärung organischer Verbindungen*, 4. Aufl. Springer, Berlin, 2001.
- 9 Dolbier WR Jr. *Guide to Fluorine NMR for Organic Chemists*, Wiley, Hoboken, 2009:79.