

Das EU-Projekt ADEBAR zur Strukturaufklärung unbekannter Substanzen

Svenja Fischmann und Folker Westphal

Landeskriminalamt Schleswig-Holstein,
SG 432 (Betäubungsmittel/Toxikologie), Mühlenweg 166, 24116 Kiel

1. Einleitung

Der Projektname **ADEBAR** steht für **A**ufbau analytischer **D**atenbanken, **E**rhebung und bundesweite **B**ereitstellung von analytischen Daten und **R**eferenzmaterialien im Bereich neuer psychoaktiver Substanzen. Dieses Projekt wurde von Juli 2017 bis Juni 2019 durch den Inneren Sicherheitsfond der Europäischen Union gefördert. Bei dem in diesem Ausmaß bisher bundesweit einmaligen Projekt handelte es sich um ein Kooperationsprojekt zwischen dem Bundeskriminalamt, sieben Landeskriminalämtern (Baden-Württemberg, Bayern, Berlin, Hessen, Nordrhein-Westfalen, Rheinland-Pfalz und Schleswig-Holstein) sowie dem Bildungs- und Wissenschaftszentrum der Bundesfinanzverwaltung (Generalzolldirektion).



2. Projektziele

Das Projekt diente der Erhebung und Bereitstellung analytischer Daten für neu auf dem Drogenmarkt auftretende Stoffe und somit für polizei- und zollkriminaltechnische Untersuchungslabore mit den Routinemethoden nicht identifizierbare Substanzen. Ziele des Projektes waren unter anderem: die Koordination von strukturanalytischen Arbeiten, die Bündelung der analytisch-technischen Kompetenzen sowie die Förderung und Verbesserung der Zusammenarbeit der deutschen polizei- und zollkriminaltechnischen Untersuchungsstellen. Sämtliche Substanzen zur Strukturabsicherung insbesondere von Isomeren und zur Differenzierung von im Betäubungsmittelgesetz gelisteten Verbindungen konnten ebenfalls eingeschickt werden. Die für die analysierten Substanzen erhaltenen validen analytischen Vergleichsdaten wurden in elektronisch importierbaren Austauschformaten und in einem Analytical Report für alle deutschen Polizei- und Zolluntersuchungslabore sowie für forensisch arbeitende Untersuchungslabore europa- und weltweit in verschiedenen Foren (DrugNews-Forum der GTFCh¹, EDND der EMCDDA² und NPS Data Hub³) bereitgestellt. Außerdem wurde Referenzmaterial von sonst nicht käuflichen Substanzen hergestellt und mit einem Analysenzertifikat an alle polizei- und zollkriminaltechnischen Untersuchungslabore verteilt. Die Herstellung und Verteilung von Referenzmaterial aus Sicherstellungen entsprechender Reinheit und von sonst nicht käuflichen Verbindungen ist für die Quantifizierung solcher Substanzen in den Untersuchungslaboren enorm wichtig, gerade bei dem derzeitigen schnelllebigen Drogenmarkt.

¹Zugang für GTFCh-Mitglieder kostenfrei

²European Database on New Drugs by the European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction

³www.nps-datahub.com; weltweite, im Projekt ADEBAR aufgebaute Plattform, zu der forensisch-analytisch arbeitende Institutionen nach Registrierung einen kostenfreien Zugang erhalten

3. Projektdurchführung

Bei dem Projekt erfolgte die wissenschaftliche Koordination der praktischen und inhaltlichen Aufgaben zentral durch das LKA Schleswig-Holstein. Für die administrative Abwicklung des Projektes gegenüber der EU war das BKA zuständig. Durch das LKA Schleswig-Holstein wurden die Analysentätigkeit und der Substanztausch zwischen den Projektpartnern koordiniert. Zur Strukturaufklärung und Datenerhebung der eingeschickten (unbekannten) Substanzen standen verschiedene Analysemethoden, wie GC-(EI/CI)-MS, IR (solid, (base) neat), NIR, GC-sIR, LC-MS, Raman und NMR, zur Verfügung. Nach Abschluss der Analytik und der eindeutigen Identifizierung wurden durch das LKA Schleswig-Holstein Analysenbefunde erstellt sowie die Daten und Ergebnisse zentral aufbereitet und qualitätsgesichert nicht nur für die polizei- und zollkriminaltechnischen Labore, sondern auch für andere forensische Untersuchungslabore zur Verfügung gestellt. Außerdem wurden verschiedene Teilprojekte durchgeführt, um beispielsweise die Eignung oder Vergleichbarkeit verschiedener Methoden und Geräte zur NPS-Analytik zu überprüfen.

4. Projektergebnisse

Über die gesamte Projektlaufzeit von Juli 2017 bis Juni 2019 wurden 263 Substanzen zur Untersuchung eingeschickt. Der überwiegende Anteil waren Substanzen, die für die polizei- und zollkriminaltechnischen Labore nicht zu identifizieren, also unbekannt, waren. Ungefähr ein Viertel der Substanzen waren bereits bekannt, aber auf den Analysedaten-Plattformen fehlten noch die umfangreichen analytischen Daten zur Identifikation. Weiterhin wurden einige Substanzen zur Strukturabsicherung eingeschickt und wenige Substanzgemische zur Trennung mit anschließender Identifizierung.

Die zu untersuchenden Substanzen wurden von einer Vielzahl verschiedener Institute eingeschickt. Darunter befanden sich fast alle Landeskriminalämter und zollkriminaltechnischen Untersuchungslabore, das BKA, aber auch rechtsmedizinische Institute und Institute verschiedener EU-Länder sowie der Schweiz.

Innerhalb der Projektlaufzeit konnten 236 der 263 eingegangenen ADEBAR-Proben abgeschlossen werden. Insgesamt wurden 109 neue Substanzen in ihrer Struktur aufgeklärt. Weiterhin wurden von 63 Substanzen, die bereits bekannt waren, analytische Daten nacherhoben, um auf einen breiten Spektrendatenpool bei der zweifelsfreien Identifizierung zurückgreifen zu können. Bei 10 der insgesamt 60 Strukturabsicherungen wurden zudem analytische Daten der Substanzen nacherhoben. Am Ende der Projektlaufzeit befanden sich noch 24 unbekannte Substanzen in Aufklärung sowie eine bekannte Substanz zur Datennacherhebung in Bearbeitung. Weiterhin war die Identifizierung von unbekanntem Komponenten in zwei Substanzgemischen noch nicht abgeschlossen. Die noch offenen Substanzen werden auch nach Abschluss des Projektes noch bearbeitet. Vier Substanzen konnten trotz Anwendung der im Projekt vorhandenen modernsten Analysetechnik nicht aufgeklärt werden (Abb. 1).

Die aufgeklärten und damit abgeschlossenen ADEBAR-Proben aufgliedert nach Substanzklassen zeigt Abbildung 2. Es wird deutlich, dass viele Cannabimimetika, Cathinone und Opiode im Projekt eingegangen sind, die auch jetzt auf dem europäischen Designerdrogenmarkt vorherrschen, aber auch viele weitere psychoaktive Substanzen aus anderen Substanzklassen. Weiterhin sind auch einige ADEBAR-Proben dabei, in denen keine psychoaktiven Substanzen nachgewiesen werden konnten, deren Identifikation und analytischen Daten jedoch für alle kriminaltechnischen Untersuchungslabore wichtig sind, da sie im Untersuchungsgut auftreten.

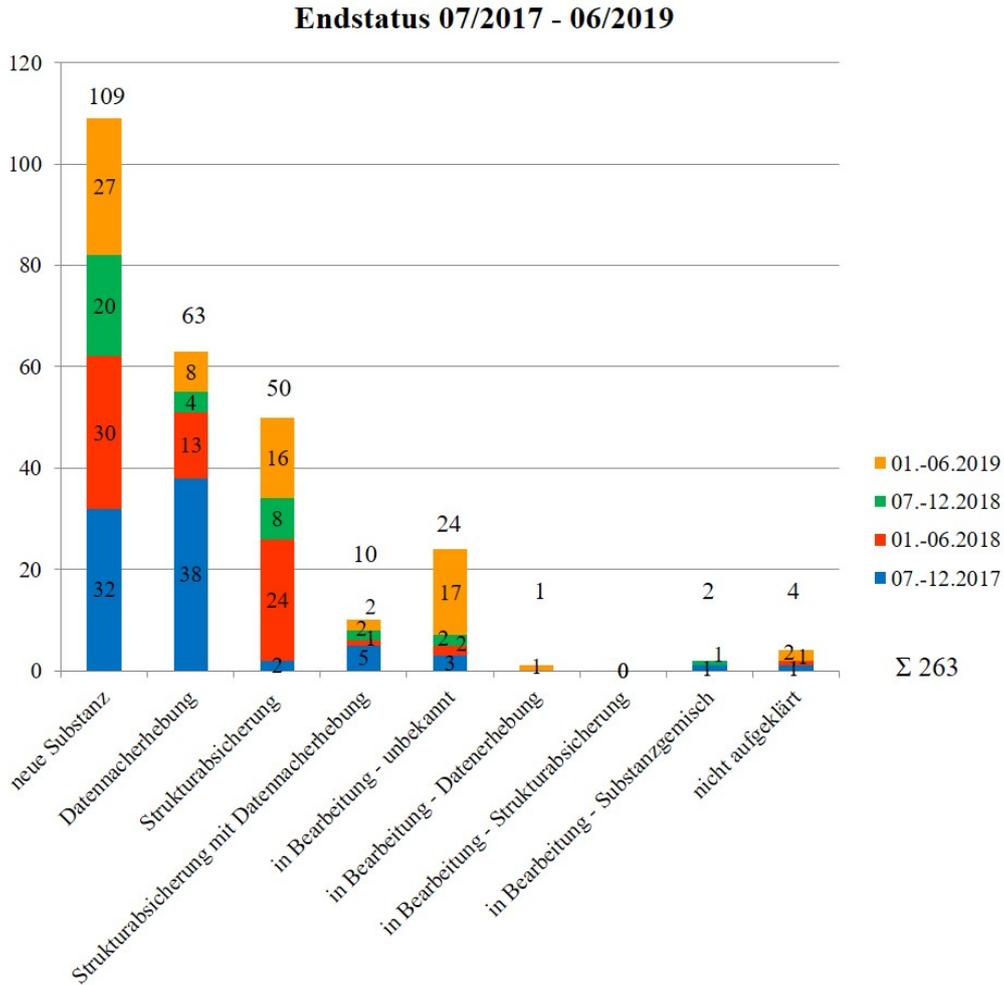


Abb. 1. Endstatus der eingegangenen Substanzen (getrennt in die vier Projekthälften).

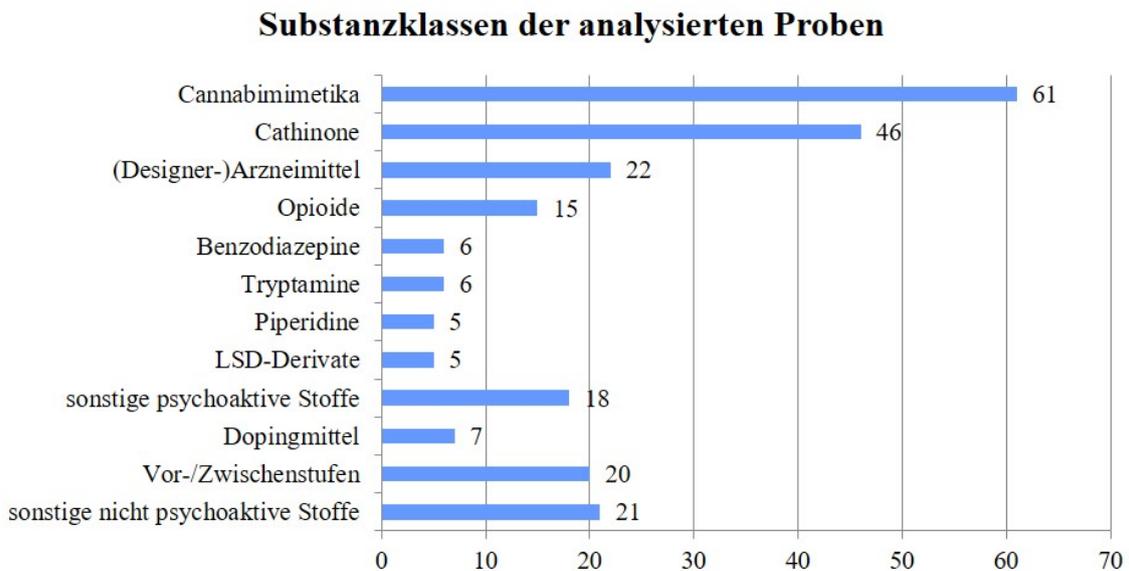


Abb. 2. Eingruppierung in der Struktur aufgeklärter ADEBAR-Proben in die Substanzklassen.

Innerhalb der Projektlaufzeit wurden von 183 Substanzen die analytischen Daten und der Analytical Report im DrugNews-Forum der GTFCh und im NPS Data Hub veröffentlicht (Abb. 3). Bei der EMCDDA wurden 139 Substanzen gemeldet. Davon waren 68 Neumeldungen, d. h. die Substanzen waren noch nicht als in Deutschland aufgetreten gemeldet. Von 71 Substanzen wurden die analytischen Daten in elektronisch importierbaren Austauschformaten nachgemeldet. Bei der EMCDDA wurden Daten bisher hauptsächlich als Bilder veröffentlicht und nur wenige in elektronischen Formaten und davon die weitaus meisten nicht in universell importierbaren Formaten. Die Anzahl der Publikationen bei der EMCDDA ist geringer als im DrugNews-Forum und im NPS Data Hub, da bei der EMCDDA nur solche Substanzen gelistet werden, denen psychoaktive Effekte zugeschrieben werden. Für die täglich forensisch-chemisch arbeitenden LKÄ, BKA und Zoll wichtige Verbindungsklassen, wie beispielsweise Dopingmittel, Synthesestufen und -zwischenprodukte, Chemikalien und Pflanzenschutzmittel, werden bei der EMCDDA nicht geführt.

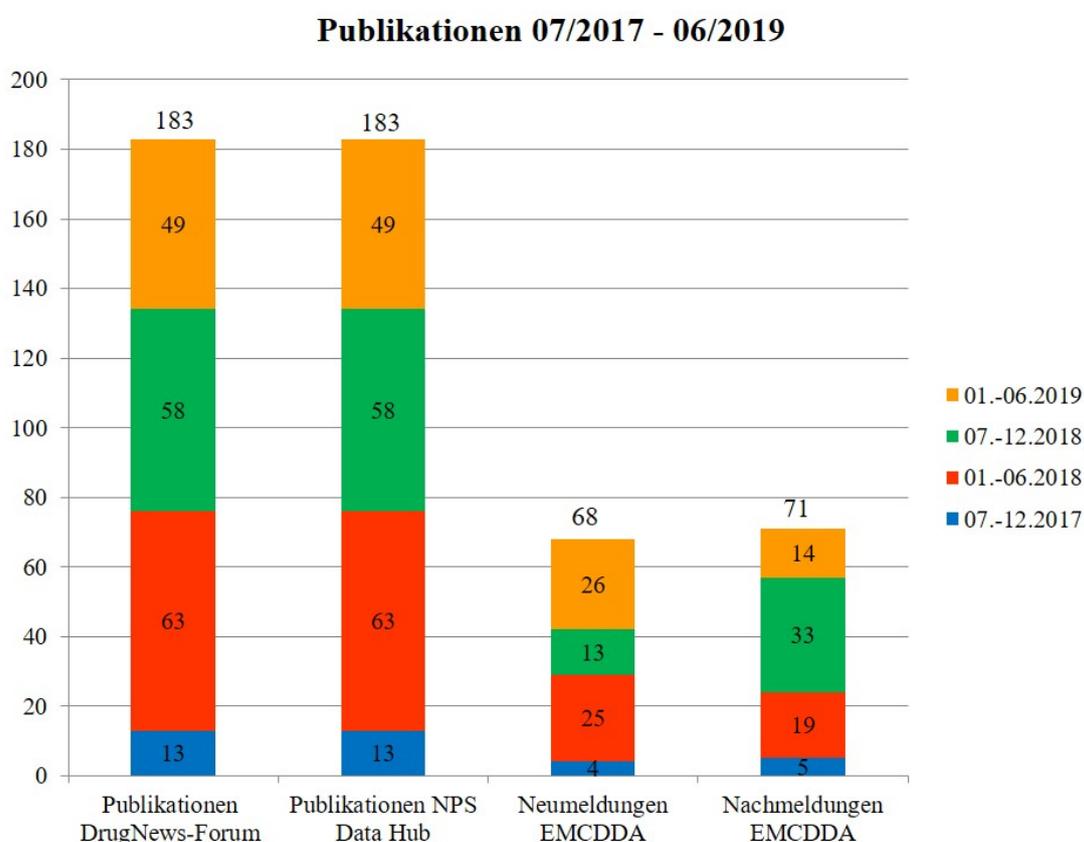


Abb. 3. Übersicht über die Publikationen in den Foren (getrennt in die vier Projekthalbjahre).

Von vielen Substanzen, die funktionelle Gruppen zur Derivatisierung enthalten, wurden bis zu sechs verschiedene Derivate hergestellt, gaschromatographisch-massenspektrometrisch vermessen und veröffentlicht. Diese Spektren sind auch wichtig, da die Routineanalytik nicht nur über unveränderte Reinsubstanzen erfolgt. Hohe Relevanz haben Derivatspektren zudem für die Analyse von biologischen Flüssigkeiten, wie beispielsweise Blut und Urin. Sie sind außer für die kriminaltechnischen Untersuchungslabore auch für rechtsmedizinische oder klinische Labore von hoher Wichtigkeit und können über die beschriebenen Publikationswege der analytischen Daten auch von solchen Einrichtungen genutzt werden.

Durch das EU-Projekt ADEBAR wurden 39 Substanzen in ihrem Gehalt bestimmt, als zertifiziertes Referenzmaterial aufbereitet und an alle polizei- und zollkriminaltechnischen Untersuchungslabore verteilt. Als Referenzmaterial liegen 22 Cannabimimetika, 11 Cathinone, 1 Opioid und weitere 5 Substanzen verschiedener Substanzklassen vor.

Im EU-Projekt ADEBAR wurden 12 Substanzen identifiziert, die erstmals in der EU aufgetreten sind. Dazu gehören 7 Cannabimimetika (Abb. 4), 1 Cathinon, 2 Opioide, davon 1 Fentanyl-derivat, und 2 Benzylanilinopiperidine (Fentanyl-Homologe) (Abb. 5).

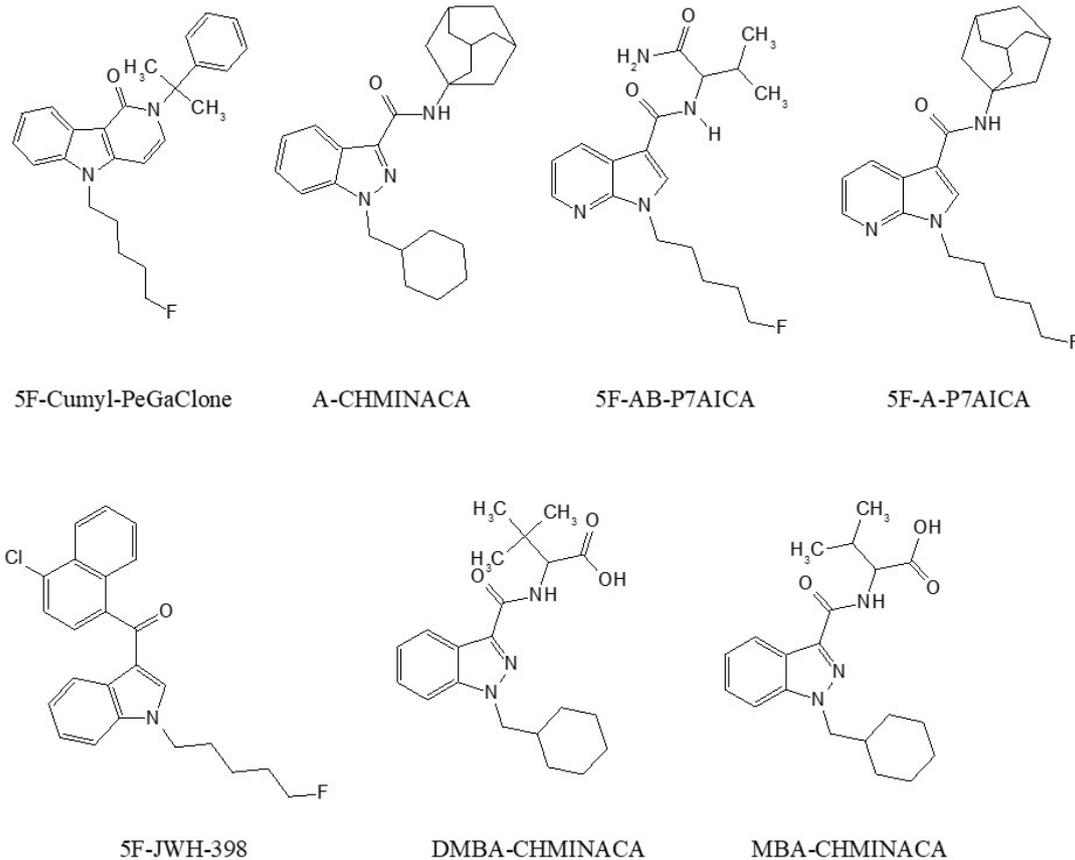


Abb. 4. Erstmals in der EU aufgetretene Cannabimimetika.

5. Zusammenfassung

Seit Projektbeginn wurden 263 Substanzen, die für die polizei- und zollkriminaltechnischen Untersuchungslabore nicht identifizierbar waren, von denen eine vollständige Datenerhebung sinnvoll war bzw. die in ihrer Struktur abgesichert werden sollten, zur Untersuchung eingeschickt. Von den eingeschickten Substanzen wurden innerhalb der Gesamtprojektlaufzeit 236 Substanzen in der Bearbeitung abgeschlossen (90 %). Anhand dieser hohen Anzahl an Einsendungen wird deutlich, wie wichtig dieses Projekt zur gezielten und koordinierten Strukturaufklärung ist. Auch wenn insgesamt, verglichen mit den Vorjahren, weniger neue psychoaktive Substanzen auf dem (europäischen) Drogenmarkt aufgetreten sind, werden doch viele für die polizei- und zollkriminaltechnischen Untersuchungslabore nicht identifizierbare Substanzen sichergestellt. Die Strukturaufklärung dieser Verbindungen und die Veröffentlichung der analytischen Daten ist für die tägliche Arbeit der Polizei- und Zolllabore außerordentlich wichtig.

Außerdem wurden analytische Daten relevanter Nebenprodukte veröffentlicht, die sich durch verwendete Reagenzien oder Lösungsmittel während der Untersuchung bzw. durch die Untersuchungsmethode gebildet haben. Das Wissen um solche sogenannten analytischen Artefakte ist bei der Interpretation von Analyseergebnissen enorm wichtig.

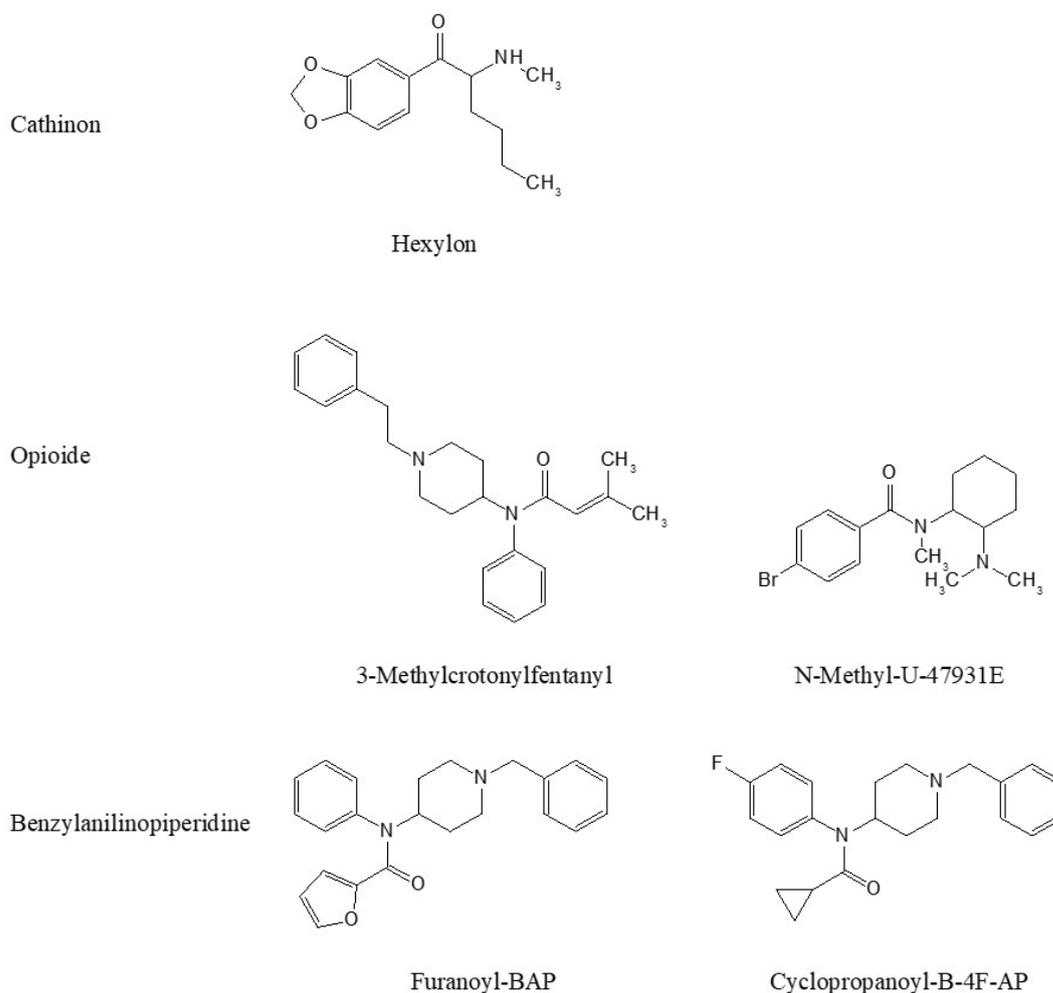


Abb. 5. Erstmals in der EU aufgetretene Substanzen unterschiedlicher Substanzklassen.

Im Rahmen der Strukturaufklärung im EU-Projekt ADEBAR wurden 12 Substanzen verschiedener Substanzklassen erstmalig in Europa identifiziert, d. h. es bestand bisher kein Eintrag bei der EDND. Es handelte sich um sieben Cannabimimetika (5F-Cumyl-PeGaCLONE, A-CHMINACA, 5F-AB-P7AICA, 5F-A-P7AICA, 5F-JWH-398, DMBA-CHMINACA und MBA-CHMINACA), ein Cathinon (Hexylon), ein Fentanylderivat (3-Methylcrotonylfentanyl), ein Opioid (N-Methyl U-47931E) und zwei Benzylanilinopiperidine (Furanoyl-BAP und Cyclopropanoyl-B-4F-AP) (Abb. 4 und 5).

Im Projekt ADEBAR wurden nicht nur die analytischen Daten der Reinsubstanzen veröffentlicht, sondern es wurden auch von den zur Derivatisierung geeigneten Substanzen bis zu sechs verschiedene Derivate hergestellt und die Massenspektren davon bereitgestellt. Derivatspektren haben für die kriminaltechnischen Untersuchungslabore, aber noch viel stärker für andere forensisch-analytische Untersuchungseinrichtungen, die Körperflüssigkeiten und Organe untersuchen, eine hohe Relevanz.

Durch die separat durchgeführten Teilprojekte wurden analytische Fragestellungen zentral und tiefgehend bearbeitet. Die Teilprojekte lieferten Ergebnisse sowohl zur Überprüfung der Eignung von neuen Methoden für die NPS-Analytik als auch zur Vergleichbarkeit und Übertragbarkeit von Daten unterschiedlicher Methoden bzw. Geräte unterschiedlicher Hersteller. Berichte zu den Teilprojekten sind ebenfalls im DrugNews-Forum der GTFCh veröffentlicht.

Das Projekt ADEBAR war aufgrund der Zentralfunktion **die** zentrale Meldestelle für neu in Deutschland auf dem Drogenmarkt aufgetretene Stoffe gegenüber der EMCDDA. Die Strukturidentifizierungen des Projektes ADEBAR hatten daher auch Auswirkungen auf die Weiterentwicklung der nationalen Gesetzgebung im Bereich der Anlagen des Betäubungsmittelgesetzes (BtMG) und des Neue-psychoaktive-Stoffe-Gesetzes (NpSG). Das Auftreten und der Verbreitungsgrad sowie die Gesundheitsgefahren, die von diesen Stoffen ausgehen, führten zu Ergänzungen der Anlagen des BtMG und zur Einführung neuer Stoffgruppendefinitionen in den Anlagen des NpSG. Vertreter der Projektpartner des Projektes ADEBAR sind sowohl im Sachverständigenausschuss für Betäubungsmittel der Bundesopiumstelle des Bundesinstituts für Arzneimittel und Medizinprodukte (BfArM) (Bayerisches LKA und BKA) als auch im wissenschaftlichen Beirat des Bundesgesundheitsministeriums für die Ausarbeitung der Stoffgruppendefinitionen des NpSG (BKA, LKA Baden-Württemberg, Bayerisches LKA und LKA Schleswig-Holstein) vertreten.

Dadurch, dass die gesteckten Ziele weit übertroffen wurden, zeigte sich die hohe Relevanz des Projektes ADEBAR für die tägliche Arbeit aller polizei- und zollkriminaltechnischen Labore. Darüber hinaus wurde durch die Publikation der analytischen Daten auf europäischer und weltweiter Ebene auch ein EU-weiter bzw. sogar ein weltweiter Mehrwert erzielt.

6. Ausblick

Seit September 2019 wird die Strukturaufklärung unbekannter Substanzen im gleichen Umfang im Folgeprojekt ADEBAR *plus* (Laufzeit bis Juni 2022) fortgeführt. In diesem Projekt werden zudem pharmakologische Parameter zu NPS und Designerdrogenvarianten erhoben oder auch neue Designerdrogenvarianten gezielt synthetisiert sowie charakterisiert. Weiterhin sollen effiziente Gehaltsbestimmungsmethoden mittels HPLC-UV für NPS entwickelt und etabliert werden. Informationen zum Projekt ADEBAR *plus* können auch unter www.projekt-adebar.eu abgerufen werden.

7. Danksagung

Folker Westphal und Svenja Fischmann (wissenschaftliche Koordinierungsstelle des Projektes ADEBAR im LKA Schleswig-Holstein) danken allen Projektpartnern für ihren hohen Einsatz neben der täglichen Routine in ihren eigenen Instituten. Außerdem danken sie dem Bundeskriminalamt, Referat IZ 26, für die Administration des Projektes. Ein weiterer Dank gilt den Einsendern der zu untersuchenden Substanzen und allen, die am Projekt auf sonstige Weise beteiligt waren. Abschließend danken sie der Europäischen Union für die Förderung des Projektes ADEBAR, ohne die diese Ergebnisse nicht hätten produziert werden können.

Das Projekt ADEBAR wurde aus Mitteln des Fonds für die Innere Sicherheit der Europäischen Union kofinanziert (Fördernummer: IZ25-5793-2016-27).

