

## Allegato A

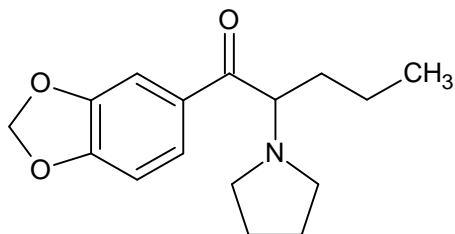
# Scheda tecnica: "3,4-metilendiossirovalerone (MDPV)"

Agosto 2010

### Nome

3,4-metilendiossirovalerone (3,4-Methylenedioxypropylvalerone; MDPV)

### Struttura molecolare



### Formula di struttura

$C_{16}H_{21}NO_3$

### Numero CAS

687603-66-3

24622-62-6 (sale cloridrato)

### Nome IUPAC

1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-2-pyrrolidin-1-ylpentan-1-one

### Altri nomi

1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-2-(pyrrolidin-1-yl)pentan-1-one; 1-(3,4-methylenedioxy-phenyl)-2-pyrrolidin-1-yl-pentan-1-one; 1-(3,4-methylenedioxyphenyl)-2-pyrrolidinyl-pentan-1-one; 1-(benzo[d][1,3]dioxol-5-yl)-2-(pyrrolidin-1-yl)pentan-1-one; 1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-2-(1-pyrrolidinyl)-1-pentanone; MDPK.

### Peso molecolare

275.343 g/mol

### Aspetto

Polvere fine bianco/grigia

Dipartimento Politiche Antidroga  
Via della Vite, 13 – 00187 – Roma  
Tel. +39 06 67793666  
Fax +39 06 67796452  
ewsita@governo.it

N.E.W.S. info line  
Tel. +39 045 8076278  
Fax: +39 045 8076272  
E-mail: allerta@allertadroga.it  
Website: www.allertadroga.it  
Pagina 1 di 7

Di seguito si riportano alcune informazioni disponibili sull'MDPV<sup>1</sup>:

L'MDPV è un pirrolidinofenone ed è una sostanza psicotropa che appartiene al gruppo dei catinoni. E' una molecola di sintesi e rappresenta un analogo del pirovalerone, farmaco ad attività stimolante, inibitore della ricaptazione della dopamina e della norepinefrina. Il pirovalerone, analogo dell'MDPV, è incluso nella Tabella IV della Convenzione ONU del 1971 e in Italia è incluso nella Tabella II Sez. B del D.P.R. 309/90 e s.m.i. L'MDPV differisce dal pirovalerone per la presenza della sostituzione 3,4-metilendioxi sull'anello aromatico al posto del 4-metile.

*EMCDDA, 2010.*

Le dosi di uso generalmente riportate dai consumatori giungono fino a 5 mg. Vengono riportati inoltre fenomeni di craving dopo l'uso di MDPV.

*ACMD report, Consideration of the cathinones, 31 March 2010.*

## Farmacologia

L'MDPV è stato sintetizzato per la prima volta nell'ambito della ricerca di molecole della serie degli 1-[(3,4-Metilendioxi)fenil]-2-pirrolidino-1-alcanoni, per valutarne l'azione stimolante.

*Patent: 1-[(3,4-Methylenedioxy)phenyl]-2-pyrrolidino-1-alkanones as stimulants. (Boehringer Ingelheim G.m.b.H.). Brit. (1969).*

La pubblicazione riporta uno studio di "molecular modelling" per predire alcune proprietà molecolari di una serie di catinoni e delle corrispondenti fenetilamine. Tra i catinoni, viene riportato anche l'MDPV per il quale è stata calcolata una bassa lipofilia e un logBBB (ovvero il logaritmo del rapporto tra la concentrazione della molecola nel cervello rispetto alla concentrazione nel sangue), pari a 0.59.

Di questi valori calcolati, il LogBBB dell'MDPV risulta essere il più elevato tra i catinoni riportati nella pubblicazione (ad esempio viene portato un LogBBB pari a 0.25 per il mefedrone, 0.33 per il butilone), indicando una potenziale capacità dell'MDPV di penetrare la barriera ematoencefalica più elevata rispetto ad altri suoi analoghi.

*Gibbons S, Zloh M. An analysis of the 'legal high' mephedrone. Bioorg Med Chem Lett. 2010 Jul 15;20(14):4135-9. Epub 2010 Jun 9.*

## Metabolismo

Lo studio valuta il metabolismo dell'MDPV *in vitro* usando microsomi epatici umani e frazioni cellulari S9 per studiare il metabolismo di fase I ad opera del CYP450 e uridina 5'-difosfoglucuronosiltransferasi (UGT) e solfotransferasi (SULT) per studiare il metabolismo di fase II.

I metaboliti ottenuti sono stati analizzati per gas cromatografia accoppiata alla spettrometria di massa (GC-MS) dopo derivatizzazione con TMS.

Lo studio ha dimostrato che i principali metaboliti dell'MDPV sono catecol- e metilcatecol-pirovalerone che vengono coniugati successivamente come sulfonati e glucuronati. Il metodo è stato validato per la determinazione di MDPV nelle urine, determinando inoltre i limiti di rilevamento e quantificazione, la linearità, la ripetibilità e l'accuratezza.

*Sabina Strano-Rossi, Amy B. Cadwallader, Xavier de la Torre, Francesco Botrè. Toxicological determination and in vitro metabolism of the designer drug methylenedioxypropylpyrovalerone (MPDV) by gas chromatography/mass spectrometry and liquid chromatography/quadrupole time-of-flight mass spectrometry. Rapid Communications in Mass Spectrometry. Volume 24, Issue 18, pages 2706–2714, September 2010.*

---

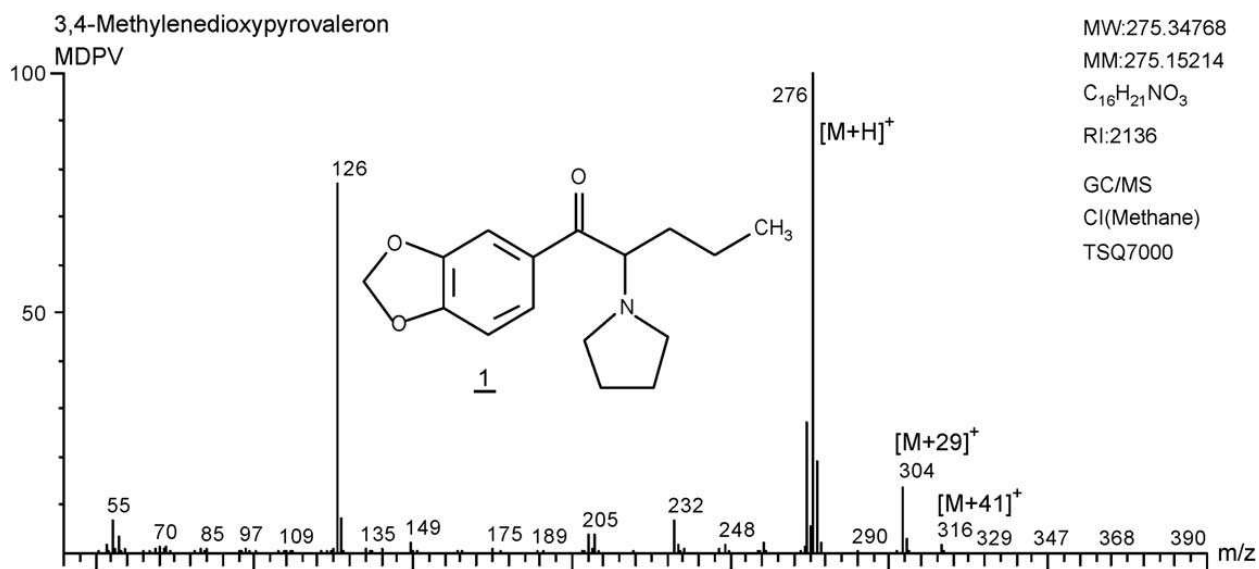
<sup>1</sup> FONTE:

- EMCDDA
- PubMed

## Caratterizzazione analitica

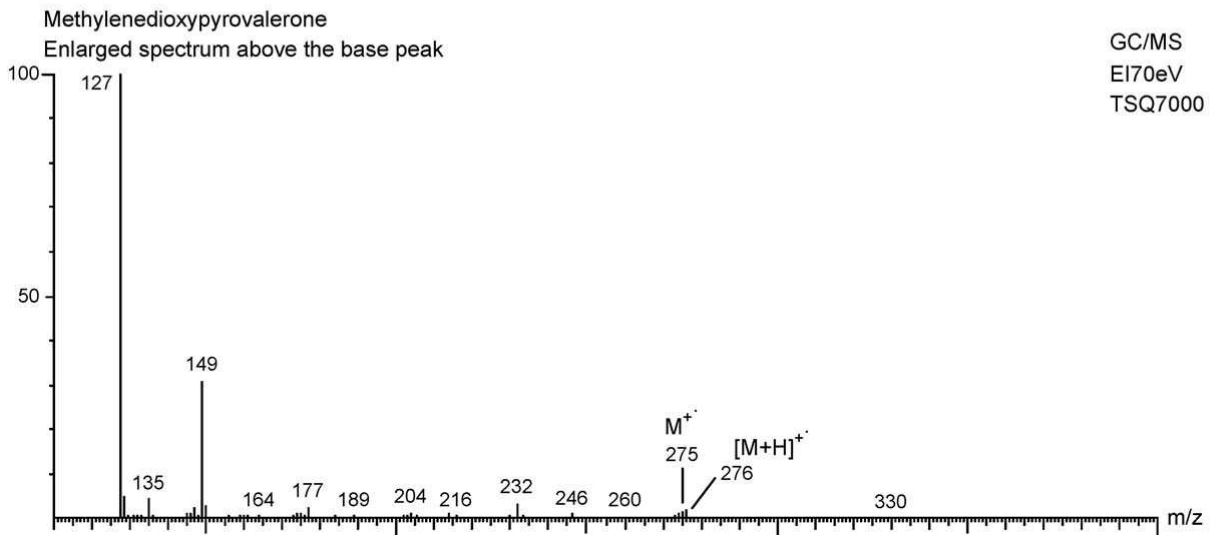
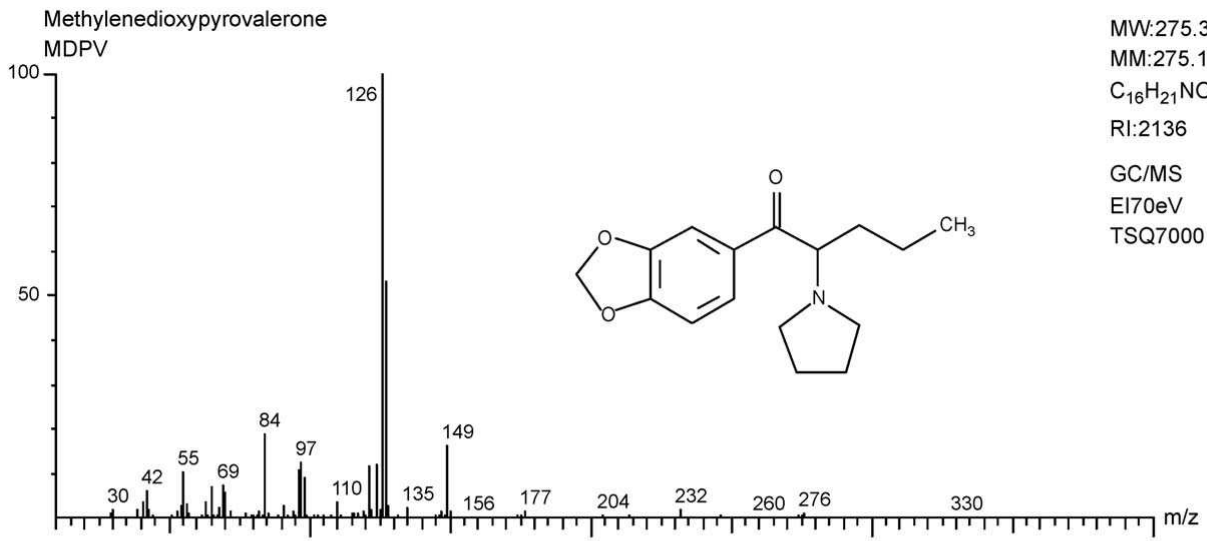
Di seguito vengono riportati alcuni dati analitici disponibili in letteratura.

Figura 1 - Spettro CI (70 eV, metano) dell'MDPV (1)



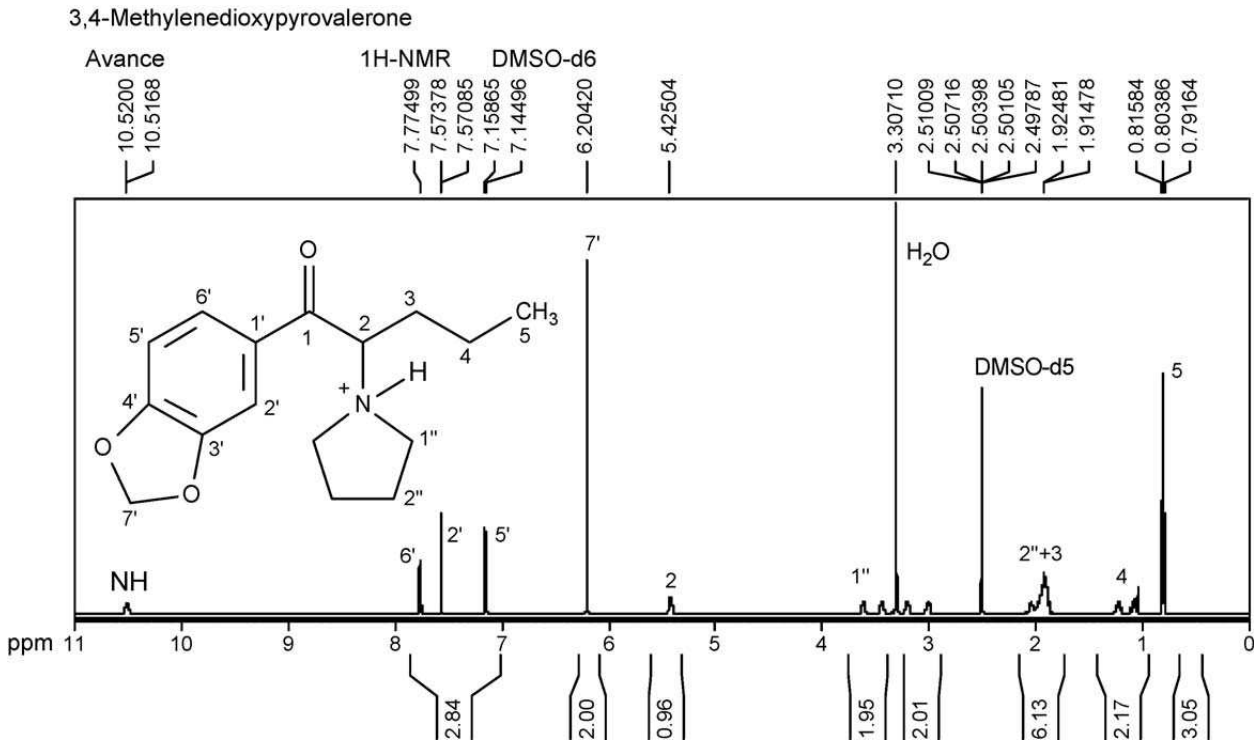
Fonte: Westphal, F., Mass and NMR spectroscopic characterization of 3,4-methylenedioxypropylone: A designer drug with  $\alpha$ -pyrrolidinophenone structure, *Forensic Science International* 190 (2009) 1–8.

Figura 2 - Spettro EI (70 eV) dell'MDPV (1) (in alto) e ingrandimento di una porzione dello spettro (in basso).



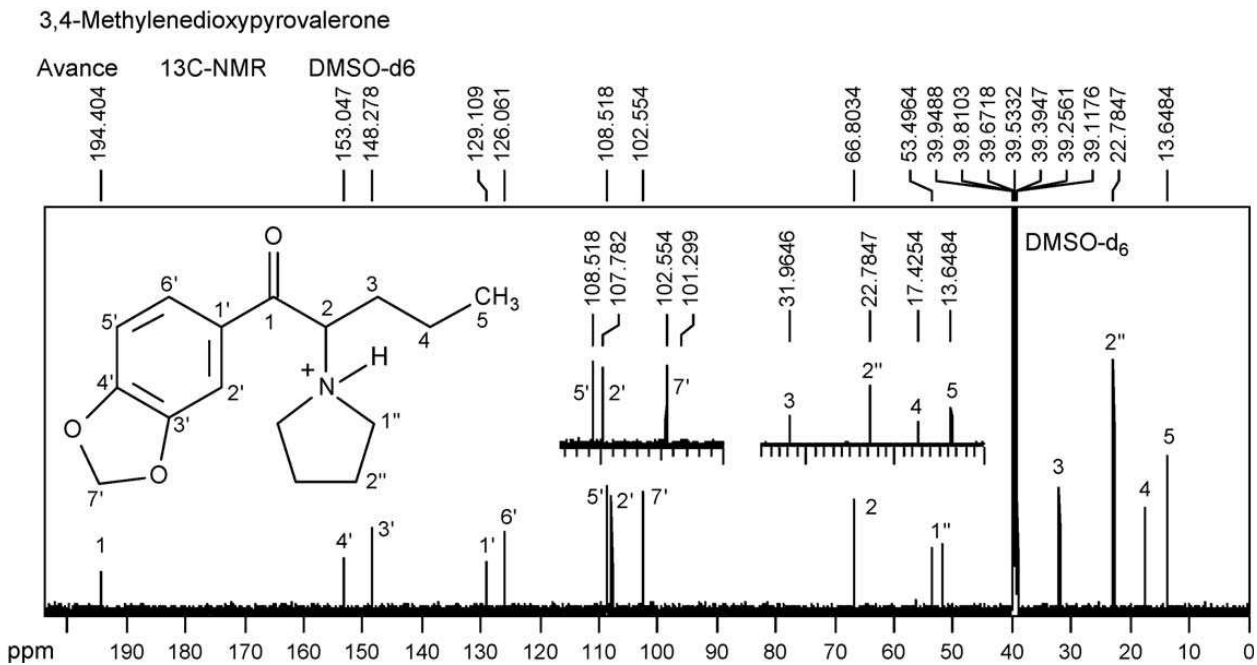
Fonte: Westphal, F., Mass and NMR spectroscopic characterization of 3,4-methylenedioxypropylvalerone: A designer drug with  $\alpha$ -pyrrolidinophenone structure, *Forensic Science International* 190 (2009) 1–8.

Figura 3- Spettro  $^1\text{H}$  NMR dell'MDPV protonato.



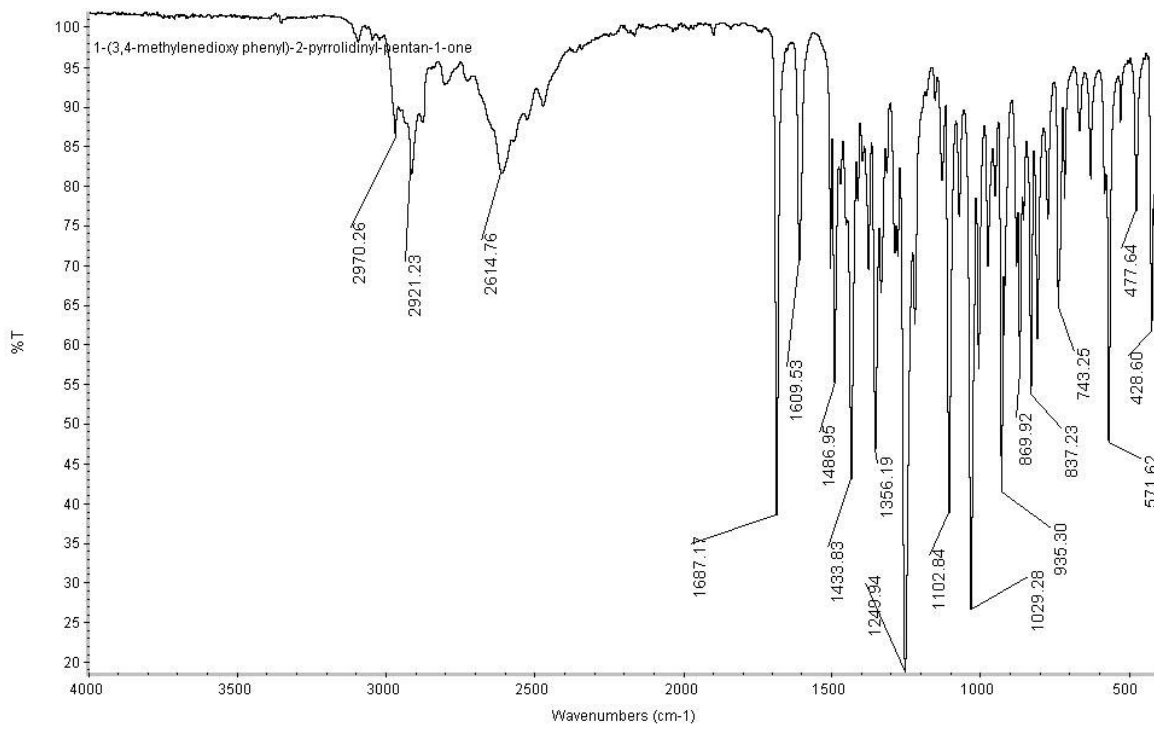
Fonte: Westphal, F., Mass and NMR spectroscopic characterization of 3,4-methylenedioxypropylvalerone: A designer drug with  $\alpha$ -pyrrolidinophenone structure, *Forensic Science International* 190 (2009) 1–8.

Figura 4- Spettro  $^{13}\text{C}$  NMR dell'MDPV protonato.



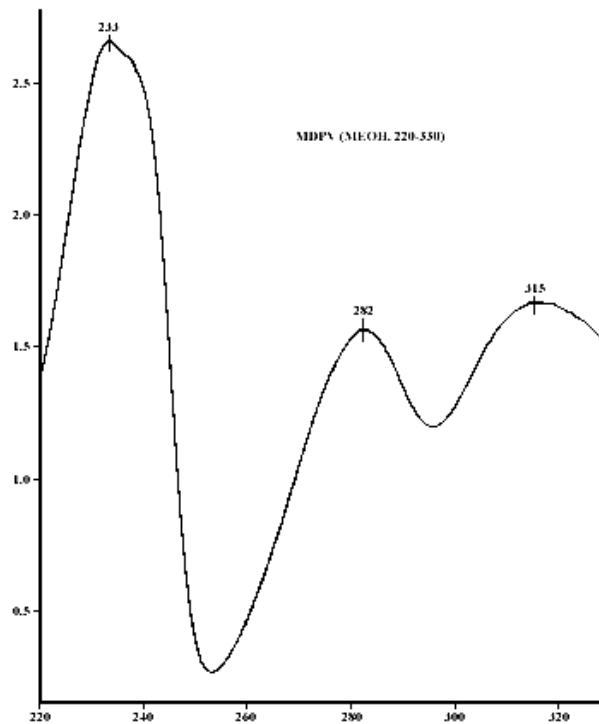
Fonte: Westphal, F., Mass and NMR spectroscopic characterization of 3,4-methylenedioxypropylvalerone: A designer drug with  $\alpha$ -pyrrolidinophenone structure, *Forensic Science International* 190 (2009) 1–8.

Figura 5- Spettro FTIR-ATR dell'MDPV cloridrato.



Fonte: Yohannan JC and Bozenko JS. The Characterization of 3,4-Methylenedioxypropylvalerone (MDPV). Microgram Journal, Volume 7, Number 1 (March 2010).

Figura 6- Spettro Ultravioletto-visibile dell'MDPV in metanolo.



Fonte: Yohannan JC and Bozenko JS. The Characterization of 3,4-Methylenedioxypropylvalerone (MDPV). Microgram Journal, Volume 7, Number 1 (March 2010).

## Stato legale

L'MDPV risulta essere una sostanza posta sotto controllo in:

- Svezia: dal 2010 l'MDPV ed il butilone sono classificate come droghe narcotiche.
- Danimarca: da marzo 2009 l'MDPV è stato aggiunto alla lista delle sostanze controllate.
- Finlandia: l'MDPV è stato inserito nel Narcotics Act da giugno 2010.
- Romania: dal 21 luglio 2010 sono state messe sotto controllo MDPV, etcatinone, MBZP, JWH-250, JWH-073, 2C-C e 5-MeO-DALT.
- Irlanda: da maggio 2010 l'MDPV è inserito nella lista delle sostanze sottoposte a controllo, insieme a cannabinoidi sintetici, altri catinoni e derivati delle benzilpiperazine.
- Regno Unito: da aprile 2010, il Misuse of Drugs order vede l'MDPV nella lista delle sostanze dall'uso controllato.

Scheda tecnica preparata sulla base delle fonti sotto riportate da Catia Seri<sup>1</sup> e supervisionata da Carlo Locatelli<sup>2</sup>.

## Fonti

- EMCDDA, EDND database, MDPV, 2010.
- ACMD report, Consideration of the cathinones, 31 March 2010.
- Gibbons S, Zloh M. An analysis of the 'legal high' mephedrone. *Bioorg Med Chem Lett.* 2010 Jul 15;20(14):4135-9. Epub 2010 Jun 9.
- Sabina Strano-Rossi, Amy B. Cadwallader, Xavier de la Torre, Francesco Botrè. Toxicological determination and in vitro metabolism of the designer drug methylenedioxypropylvalerone (MPDV) by gas chromatography/mass spectrometry and liquid chromatography/quadrupole time-of-flight mass spectrometry. *Rapid Communications in Mass Spectrometry.* Volume 24, Issue 18, pages 2706–2714, September 2010.
- Westphal, F., Mass and NMR spectroscopic characterization of 3,4-methylenedioxypropylvalerone: A designer drug with  $\alpha$ -pyrrolidinophenone structure, *Forensic Science International* 190 (2009) 1–8.
- Yohannan JC and Bozenko JS. The Characterization of 3,4-Methylenedioxypropylvalerone (MDPV). *Microgram Journal*, Volume 7, Number 1 (March 2010)

<sup>1</sup> Dipartimento delle Dipendenze, Azienda ULSS 20, Verona.

<sup>2</sup> Fondazione "S. Maugeri", Centro Antiveneni di Pavia.