

Determinação Espectrofotométrica da Constante de Acidez de uma Benzofenona Natural em Misturas Etanol-Água

Éderson D' M. Costa (IC)^{1*}; Isael A. Rosa (IC)¹; Marcelo H. dos Santos (PQ)¹.

Unifal-MG, Rua Gabriel Monteiro da Silva 714, Centro, Alfenas, 37130-000, MG. – ¹Lab. de Fitoquímica e Química Medicinal, Depto. de Farmácia, Unifal-MG. e-mail: edm_quimica@yahoo.com.br

Palavras Chave: Benzofenona, Espectrofotometria, Constante de acidez.

Introdução

Constantes de dissociação ácida são parâmetros importantes para se indicar a extensão de ionização de substâncias em função do pH. A extensão de ionização influi diretamente na farmacocinética, farmacodinâmica, além de ser importante em diversos processos analíticos¹.

Muitas moléculas apresentam baixa solubilidade em água, dificultando a obtenção da constante de acidez por métodos tradicionais. Alternativamente pode-se determinar esse parâmetro em misturas de solventes e extrapolar para o valor em solução aquosa utilizando-se uma titulação espectrofotométrica.

A molécula estudada nesse trabalho é a 7-epiclusianona (Epi), uma benzofenona poliisoprenilada isolada de plantas do gênero *Rheedia* com inúmeras propriedades biológicas².

Resultados e Discussão

Realizou-se titulações espectrofotométricas com soluções de concentrações em torno de $4,00 \times 10^{-5}$ mol.kg⁻¹, utilizando-se 50,0 g das misturas de solventes apropriadas. Utilizou-se um espectrofotômetro duplo feixe UV/Vis, Shimadzu, modelo UV-2550 equipado com controlador de temperatura, Shimadzu, TCC-Controller, cubetas de quartzo de passo óptico 1,0 cm, potenciômetro Metrohm, 827 pH lab, acoplado a um eletrodo de vidro com eletrodo de referência interna Ag/AgCl. Os valores de pH foram corrigidos segundo Bates³.

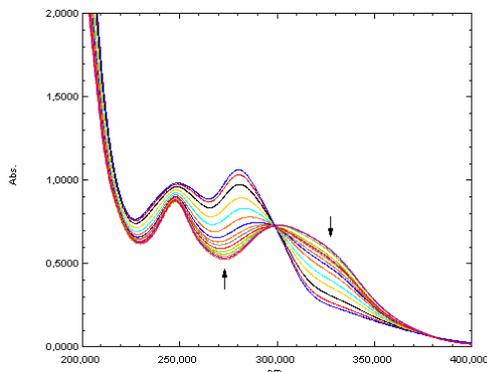


Figura 1. Espectros para Epi, pH 3,121-8,377.

As constantes de dissociação foram determinadas realizando-se regressões não lineares no gráfico da absorbância em 282,0 nm em função do pH,

fitando-se uma sigmóide (Botzmann), utilizando-se o programa OriginPro 7.5.

A constante de dissociação da substância é a inflexão da curva, um parâmetro da equação produzida pela regressão.

Tabela 1. Valores de pKa nas misturas (25°C).

%m/m EtOH	pKa ^a	R
0	3,756 ^b	-
35	4,366±0,012	1,000
50	4,494±0,008	1,000
65	4,863±0,009	1,000
80	5,261±0,020	0,999
90	5,990±0,029	0,998
100	8,645±0,032	0,995

^a pKa±erro padrão.

^b Valor extrapolado.

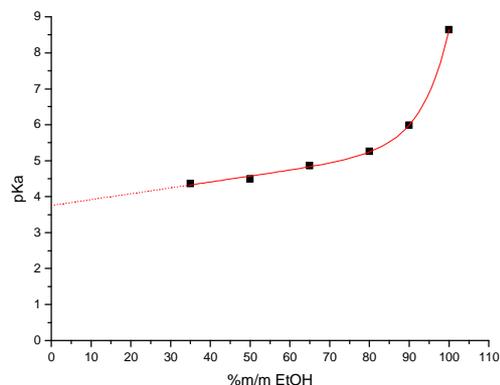


Figura 2. pKa em função da proporção de etanol.

Conclusões

Com esse trabalho foi possível descrever o comportamento da constante de acidez em função da proporção de solventes e determinar o valor para solução aquosa. Este trabalho poderá auxiliar no entendimento das diversas propriedades biológicas já constatadas para substância.

Agradecimentos

Ao PIBIC/CNPq, à FAPEMIG e a FINEP.

¹ Jahanbakhsh, G. et al. *J. Chem. Eng. Data*, **2006**, *51*, 1530-1535.

² Alves T. M. A. et al. *J. of Natural Products*, **1999**, *62*, 369-371.

³ Bates, R. G. **Determination of pH: Theory and Practice**. 2. ed. New York: Wiley Interscience, 1972.