

Constantes Ácidas para a 7-epiclusianona em Misturas Etanol-Água: Efeitos do Solvente

Éderson D'M. Costa^{1*}(IC), Nelson H. T. Lemes¹(PQ), João P. Braga²(PQ), Marcelo H. dos Santos³(PQ)

¹ Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Alfenas, Alfenas-MG.

² Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte-MG.

³ Instituto de Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal de Alfenas, Alfenas-MG.

*edm_quimica@yahoo.com.br

Palavras Chave: constantes de equilíbrio, titulação espectrofotométrica, 7-epiclusianona.

Introdução

O pK_a de um ácido, é um parâmetro importante para se indicar a extensão de ionização em diferentes condições de pH. Nesse sentido a constante afeta condições de solubilidade, toxicidade, atividade farmacológica entre outras propriedades.

Nesse trabalho determinou-se por espectrofotometria UV/Vis as constantes para a 7-epiclusianona¹ em misturas etanol-água. A molécula é uma benzofenona natural, com importantes atividades biológicas, que pode ser isolada de plantas do gênero *Rheedia*, família *Guttiferae*.

Resultados e Discussão

Coletou-se os espectros no UV/Vis na faixa de pH_w entre 3 e 12 à 25 °C. As soluções tituladas apresentaram as composições 40, 45, 50, 55 e 60% etanol (m/v), 7-epiclusianona $4,66 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ e NaCl $0,01 \text{ molL}^{-1}$. Abaixo de 40% a molécula apresenta baixa solubilidade.

Os dados foram avaliados pelo método iterativo proposto por Ghasemi e colaboradores² acoplada a uma rede neural artificial (Modelo Generalizado de Hopfield) desenvolvido por Lemes e colaboradores.³ A eficiência da rede foi avaliada por comparação com o método Simplex². Os valores de pK_a recuperados pelos dois métodos foram iguais até o sexto algarismos significativo (**Tabela 1**).

Tabela 1. Constantes recuperadas.

% Etanol (m/v)	pK_a	$R/10^{-3}$ *	$\pm \delta$ **
40,0	4,770	8,330	0,036
45,0	4,892	9,352	0,035
50,0	4,989	8,728	0,036
55,0	5,124	6,810	0,034
60,0	5,299	6,875	0,035

* Erro quadrado médio.

** Erros obtidos através do princípio da discrepância.

Os valores de pK_a nas misturas binárias mostram uma relação linear com a composição da mistura. A **Figura 1** apresenta a reta que minimiza o erro quadrático dos dados da tabela 1.

$$pK_a = 2,6156 \times 10^{-2} x (\%m/v) + 3,7063 \quad (R^2 = 0,98768)$$

O coeficiente linear da equação é uma boa estimativa do pK_a em água pura, pK_a .

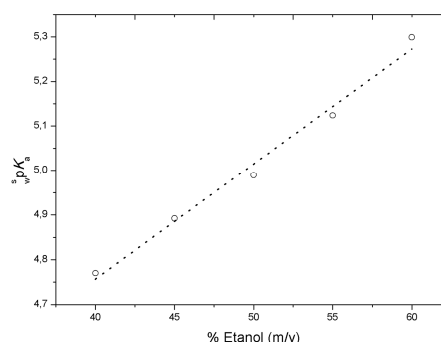


Figura 1. Valores de pK_a em função do %Etanol (m/v).

A variação da constante em função do solvente pode ser explicada com base na estabilidade dos produtos da ionização. Nesse caso a habilidade de solvatação é um parâmetro importante, a água é um solvente com alta habilidade de solvatação, com constante dielétrica $\epsilon = 78,3$ que estabiliza os íons em solução. A adição de etanol, com constante dielétrica $\epsilon = 24,3$ na solução, diminui a capacidade de solvatação da mistura. A medida que se tem mais água, há uma maior capacidade de solvatação estabilizando os íons formados na ionização, situação que os produtos da ionização são mais favoráveis. Neste caso, ocorre um decréscimo do pK_a .

Conclusões

Verificou-se uma relação linear para a constante da 7-epiclusianona, $R^2 = 0,98768$. Por extrapolação pode-se estimar o valor de $pK_a = 3,706$ em água pura.

Agradecimentos

FAPEMIG, CAPES, CNPq e FINEP.

¹ Santos, M. H.; Nagem, T. J.; Oliveira, T. T. e Braz-Filho, R. *Quím. Nova* **1999**, 22, 654.

² Ghasemi J.; Nayebi, Sh.; Kubista, M.; Sjogreen, B. *Talanta* **2006**, 68, 1201.

³ Lemes, N. H. T.; Borges, E.; Braga, J. P. J. *Braz. Chem. Soc.* **2007**, 18, 1342.