

Determinação de constantes de dissociação ácida de compostos diuréticos por fluorescência molecular e PARAFAC.

Márcia C. S. Reis¹(PG), Rosylane E. C. Lopes¹(IC), Riane R. Carvalho¹(IC)*, João Antônio A. da F. Gouveia¹ (IC), Jez William B. Braga¹(PQ).

*riane.ribeiro@gmail.com

¹Laboratório de Química Analítica e Ambiental – Instituto de Química – UnB.

Palavras Chave: *Fluorescência Molecular, PARAFAC, Diuréticos.*

Introdução

A fluorescência molecular é considerada uma técnica com alta sensibilidade para a determinação de diversas classes de compostos. Diuréticos são compostos fluorescentes particularmente importantes para determinações analíticas por serem proibidos pelo Comitê Olímpico por suas propriedades. Diversas condições experimentais devem ser consideradas no desenvolvimento de métodos por fluorescência, sendo o pH uma das mais importantes.

O objetivo do presente trabalho é apresentar os resultados obtidos para a determinação das constantes de dissociação ácida (pKa) para os diuréticos: Amilorida (AML), Triantereno (TRI), Bumetanida (BUM) e Bendroflumetiazida (BDZ), utilizando fluorescência molecular e o modelo de análise de fatores paralelos (PARAFAC).

Para a determinação os quatro diuréticos foram estudados separadamente na concentração de 150 $\mu\text{g L}^{-1}$ para AML, BUM e BDZ e 13,5 $\mu\text{g L}^{-1}$ para TRI. Foram utilizadas soluções tampões com pH variando de 3,0 a 11,0 e adquiridos matrizes de excitação e emissão de fluorescência no intervalo de 220 a 400 nm e 230 a 600 nm, para excitação e emissão, respectivamente. Em seguida, os dados foram importados no programa Matlab e decompostos pelo modelo PARAFAC, utilizando o pacote N-way Toolbox¹.

Resultados e Discussão

A análise dos dados revelou que o número de fatores do PARAFAC, estimado pelo parâmetro concordância, necessário para modelar cada diurético foi: 2, 2, 3 e 2, para AML, TRI, BUM e BDZ, respectivamente, que é consistente com o número de espécies que deve estar presente pelos dados da literatura². Observou-se que para todos os diuréticos há uma grande sobreposição entre os espectros de emissão e excitação, o que impossibilita a determinação univariada convencional. A Figura 1 apresenta os perfis de concentração das três formas de BUM. Através das intersecções dos perfis de concentração das espécies ácida e básica pode-se estimar seus valores de pKas, A Tabela 1 apresenta os valores de pKas estimados para os 4 diuréticos

estudados, onde observa-se uma ótima concordância entre os valores estimados e os reportados na literatura, sendo o maior erro de 0,5 unidade de pH, obtido para BDZ.

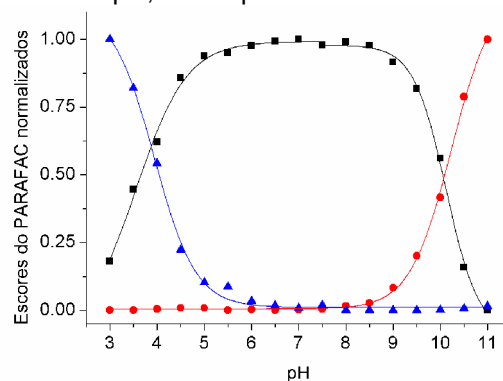


Figura 1. Perfis de concentração relativa em função do pH obtidos para as três espécies de BUM.

Tabela 1. Resultados para os valores de referência e estimados para os pKa dos diuréticos estudados.

Diurético	pKa Literatura ²	pKa Estimado
Amilorida	8,7	8,9
Triantereno	6,2	6,2
Bumetanida	4,0 e 10,0	3,9 e 10,1
Bendroflumetiazida	9,0	8,5

Observou-se que a BDZ não é estável em água, aparentemente independente do pH, se decompondo rapidamente em um subproduto com espectros de fluorescência semelhantes.

Conclusões

Os resultados demonstram que ótimas estimativas dos pKas foram obtidas com o PARAFAC. Os perfis estimados possibilitam uma escolha precisa do pH de trabalho para o desenvolvimento de métodos de determinação dos diuréticos estudados.

Agradecimentos

Ao INCTBio, CNPq e à FAPESP pelo apoio financeiro. Ao Instituto de Biologia e a Profª. Maria Sônia Freitas por viabilizar a realização das medidas de fluorescência molecular.

¹ <http://www.models.kvl.dk/nwaytoolbox>

² Carda-Broch, S.; Esteve-Romero, J.S; García-Alvarez-Coque, M.C. Anal. Chim. Acta, 1998, 375, 143.