Novos indicadores de pH de derivados da vanilina

José Matheus de Freitas Costa[1] (IC), Cristian Antonio Wieczorek Villas Boas[1] (PG), Janaína Fernandes Bonora[1] (IC), Thais de Oliveira Conceição[1] (IC), Manuela Garcia Laveli da Silva[1] (IC), Maria Cristina Marcucci[1] (PQ), Paulo Celso Pardi[1], (PQ), José Agustín Quincoces Suarez*[1] (PQ). 1: Universidade Bandeirante de São Paulo, UNIBAN

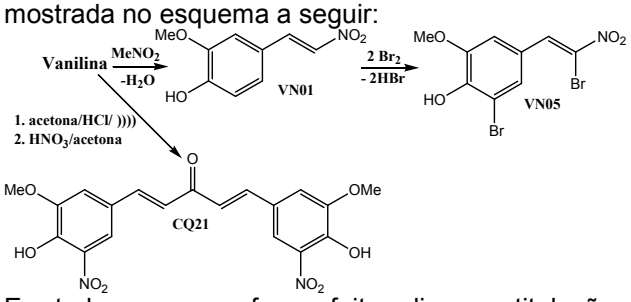
Palavras chaves: *Novos indicadores de pH, derivados vanilina, titulação*

Introdução

Levando em consideração os resultados já obtidos com HB1 e DM1 como indicadores[1] de pH foram sintetizados novos derivados para realizar os mesmos testes em várias faixas de pH. Nesta etapa foram obtidos[2] novos compostos da vanilina através da condensação Knoevenagel com nitrometano dando VN01 e a posterior bromação deste composto permitiu a síntese do VN05. A partir da reação de nitração do HB1 usando ácido nítrico e acetona formou-se o composto CQ21. As estruturas dos compostos foram caracterizadas mediante espectros de forma inequívoca.

Resultados e Discussão

A estrutura química dos compostos obtidos é mostrada no esquema a seguir:



Em todos os casos foram feitas diversas titulações de HCl determinando-se sua concentração com soluções de concentração conhecida de NaOH padronizada com biftalato de potássio. Todos os compostos possuem cor amarela (pH<7), viragem com cor laranja entorno (pH≈7) e vermelha (pH>7). No caso do CQ21 apresenta-se adicionalmente cor violeta em pH muito ácido, amarelo a partir de pH 1,83, laranja em (pH≈7), laranja escura em pH≈9 e vermelho sangue em NaOH muito concentrado tal e como se mostra na **Figura 1**.

Figura 1. Cores do indicador CQ21.

Os indicadores podem possuir duas formulações diferentes, uma formulação solúvel em água e outra em etanol, tal e como foi alcançado[1] com os indicadores de pH HB1 e DM1: 1g de composto (pureza de 100% mediante HPLC) é dissolvida em 100 mL de etanol ou água. Todos os compostos são reversíveis e atóxicos, como por exemplo, o composto[2] VN05 que possui um IC50% frente a fibroblasto humano normal igual a 816,93 µg/mL. Os indicadores de base fenólica similares à fenolftaleína são tóxicos e não reversíveis às concentrações elevadas de NaOH.

O coeficiente de variação está de acordo com as exigências da ANVISA[3] (<2,0%, para o parâmetro "precisão" e <4,0% para o parâmetro "precisão intermediária"). O volume do pH de equivalência (≈7) foi calculado por regressão linear a partir do trecho linear da curva de pH.

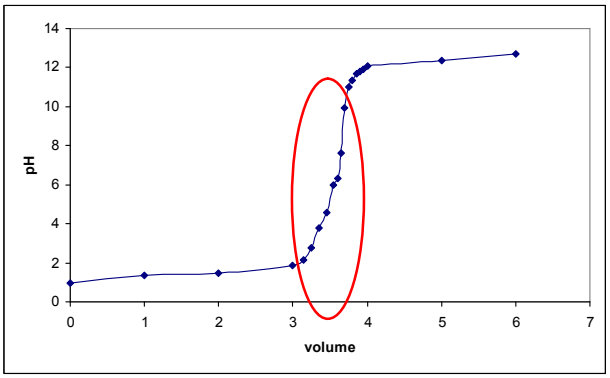


Figura 2. Titulação de HCl com NaOH.

Conclusões

Os três indicadores são de fácil obtenção e purificação e todos apresentam cores nas três faixas principais de pH, diferente da fenolftaleína. Destaca-se o CQ21 que possui seis cores a valores de pH diferentes. Todos os compostos são reversíveis em qualquer faixa de concentração e são atóxicos, quando comparados com a fenolftaleína e análogos.

Agradecimentos

À FAPESP 2011/50435-8 pelo apoio financeiro.

[1] Quincoces, J., et al., 34. Congresso da SBQ
[2] Villas Boas C. Dissertação de Mestrado em Farmácia da UNIBAN em andamento.
[3] ANVISA Resolução - RE nº 899, de 29 de maio de 2003