

## ANÁLISE DE SOLUBILIDADE PELO MÉTODO SHAKE-FLASK DE COMPOSTOS ORGÂNICOS INÉDITOS

VI Congresso Online Nacional de Química, 1ª edição, de 22/04/2024 a 24/04/2024  
ISBN dos Anais: 978-65-5465-089-2

**BARDUCO; Jenifer <sup>1</sup>, TREVISAN; Jerusa Simone Garcia <sup>2</sup>**

### RESUMO

O desenvolvimento de novas substâncias candidatas a fármaco é um processo complexo, implicando na análise de sua solubilidade, uma vez que o ciclo de vida biológico de um fármaco em um ser humano, da sua absorção à sua eliminação, envolve sistemas aquosos. Neste trabalho foram estudados três compostos heteroaromáticos triazólicos inéditos, que possuem potencial para serem aplicados em química medicinal. Esses compostos, codificados como PQM-277, PQM-249 e PQM-242 por estarem protegidos por patente, foram obtidos por meio de síntese no Grupo de Pesquisa em Química Medicinal (PeQUIM) da UNIFAL-MG. Os mesmos apresentaram diversos desafios em sua obtenção, sendo necessário elevadas temperaturas e longos períodos de reação, resultando em baixos rendimentos. Portanto, o objetivo foi realizar testes de solubilidade em escala reduzida, avaliando a reprodutibilidade e repetibilidade dos ensaios. Para as análises, em escala reduzida, foi aplicado método shake-flask utilizando 1,5 mL de tampão fosfato 0,1 mol.L<sup>-1</sup>, pH 7,4, simulando o plasma sanguíneo. O sistema foi mantido em banho sob agitação de 100 rpm, por 4 horas à 37 °C. Foi testado também a solubilidade dos compostos em água nas mesmas condições descritas, para fins comparativos. Após o tempo de incubação, as soluções foram filtradas com membrana hidrofílica e diluídas em seus respectivos meios para determinação da concentração por espectrofotometria de absorção molecular UV/VIS. Foi testado também a estabilidade das soluções de maneira a avaliar o comportamento das substâncias tanto em metanol (solução-estoque) como em tampão e água (meios de aplicação do composto). Primeiramente preparou-se solução-estoque de cada composto pela dissolução de 2,5 mg em 50 mL de metanol. Essa solução foi submetida a uma varredura (190 - 900 nm) para a obtenção do comprimento de onda de maior absorbância. Para a construção da curva de calibração com regressão linear foram preparadas cinco diluições a partir da solução-estoque, resultando em diferentes intervalos de concentração para cada composto estudado. Os compostos PQM-277, PQM-249 e PQM-242 apresentaram solubilidade de 0,67, 33,54 e 7,17 mg.L<sup>-1</sup>, respectivamente, em tampão fosfato e 0,85, 24,96 e 7,69 mg.L<sup>-1</sup>, respectivamente em água. Em nenhum dos meios usados, a partir do teste t realizado à 95% de confiança, verificou-se diferença significativa em termos de solubilidade. Em relação a estabilidade dos compostos,

<sup>1</sup> Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL), jeniferbarduco@gmail.com

<sup>2</sup> Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL), jerusa.garcia@unifal-mg.edu.br

constatou-se que todos eles são estáveis em metanol no intervalo de 48 horas e que apenas o composto PQM-277 é instável em tampão pH 7,4 e em água. Portanto, a solubilidade de um triazol, assim como de qualquer substância química, varia de acordo com sua estrutura e dos grupos funcionais constituintes no composto, além de depender de fatores como o tamanho da molécula, e as condições específicas do sistema, como temperatura e pH.

**PALAVRAS-CHAVE:** Solubilidade, Composto, Análise, Farmáco