

Estudos de solubilidade de compostos fenólicos em água e em solventes orgânicos

Sérgio M. Vilas-Boas¹; Fernandes, Luciano²; Ferreira, Olga³; Pinho, Simão P.⁴

¹sergioamvboas@gmail.com, Instituto Politécnico de Bragança, Portugal

²fernandes@utfpr.edu.br Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Brasil

³oferreira@ipb.pt, Instituto Politécnico de Bragança, Laboratório de Separação e Engenharia de Reação (LSRE), Portugal

⁴spinho@ipb.pt, Instituto Politécnico de Bragança, Laboratório de Separação e Engenharia de Reação (LSRE), Portugal

Resumo

Muitos compostos fenólicos agem como antioxidantes e sequestradores de radicais livres, possuindo diversas aplicações práticas nas indústrias farmacêutica, alimentar e petrolífera. Entre esses compostos, os ácidos fenólicos representam um importante grupo presente em muitos produtos naturais. Neste contexto, os estudos de solubilidade desempenham um papel chave no projeto de novos processos de cristalização e fracionamento.

O principal objetivo deste trabalho é a medição da solubilidade dos ácidos gálico, protocatechuico, gentísico e α -resorcílico em água e em solventes orgânicos (metanol, etanol, 1-propanol, 2-propanol, 2-butanona, acetato de etilo, acetonitrilo e dimetilformamida) a 298,15 e 313,15 K e a aplicação do modelo termodinâmico NRTL-SAC combinado com a abordagem do solvente de referência para descrever os dados de solubilidade.

A metodologia experimental utilizada foi o método do frasco agitado combinado com o método de análise gravimétrico e, em geral, os resultados obtidos foram consistentes com a reduzida informação disponível na literatura para os ácidos gálico e protocatechuico. Em relação aos ácidos gentísico e α -resorcílico, nenhum estudo de solubilidade foi encontrado nas temperaturas analisadas. Para esses ácidos, as solubilidades mais elevadas ocorreram em sistemas contendo dimetilformamida, metanol e etanol.

Finalmente, os descritores de segmentos NRTL-SAC foram obtidos através do ajuste de dados de solubilidade em sete solventes, obtendo-se um erro relativo médio (ARD) entre 25 e 34%. O modelo foi então aplicado na previsão da solubilidade em 1-propanol e em dimetilformamida e os ARD% foram de 70 e 78%, respectivamente. Esses valores são satisfatórios para modelos semipreditivos, com base no pequeno conjunto de solventes estudado.

Palavras-chave: solubilidade; ácidos fenólicos; NRTL-SAC.

Studies on the solubility of phenolic compounds in water and organic solvents

Sérgio M. Vilas-Boas¹; Fernandes, Luciano²; Ferreira, Olga³; Pinho, Simão P.⁴

¹sergioamvboas@gmail.com, Instituto Politécnico de Bragança, Portugal

²fernandes@utfpr.edu.br Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Brasil

³oferreira@ipb.pt, Instituto Politécnico de Bragança, Laboratory of Separation and Reaction Engineering (LSRE), Portugal

⁴spinho@ipb.pt, Instituto Politécnico de Bragança, Laboratory of Separation and Reaction Engineering (LSRE), Portugal

Abstract

Many phenolic compounds act as antioxidants and free radical scavengers, having several practical applications in the pharmaceutical, food and oil industrial processes. Among those compounds, phenolic acids represent an important group present in many natural products. In this context, the solubility is a key parameter for the design of new crystallization and fractionation processes.

The main objective of this work is to measure the solubility of gallic, protocatechuic, gentisic and α -resorcylic acids in water and organic solvents (methanol, ethanol, 1-propanol, isopropanol, 2-butanone, ethyl acetate, dimethylformamide and acetonitrile) at 298.15 and 313.15 K and to apply the NRTL-SAC thermodynamic model combined with the Reference Solvent Approach (RSA) to describe the solubility data.

The experimental methodology was the shake-flask method coupled to the gravimetric method of analysis and, in general, the results obtained were satisfactorily consistent with the scarce information available in literature for gallic and protocatechuic acids. For gentisic and α -resorcylic acids, no solubility data were found at the analyzed temperatures. In this work, the higher solubilities found for gentisic and α -resorcylic acids occurred in systems containing dimethylformamide, methanol and ethanol.

Finally, the NRTL-SAC segment descriptors were obtained by fitting the solubility data in seven solvents, obtaining average relative deviations (ARD) between 25 and 34%. The model was then applied to predict the solubility in 1-propanol and dimethylformamide and the ARD% were 70 and 78%, respectively. Those values are satisfactory for semi-predictive models, using a limited set of solvents.

Keywords: solubility; phenolic acids; NRTL-SAC.