

THERMODYNAMICKÉ DISOCIAČNÍ KONSTANTY IONIZOVATELNÉHO ANTIDEPRESIVA VORTIOXETINU S POUŽITÍM UV-VIS MULTIVALENČNÍCH DAT S MALÝMI SPEKTRÁLNÍMI ZMĚNAMI

Aneta Čápková, Lucie Pilařová a Milan Meloun

Katedra analytické chemie, Univerzita Pardubice, CZ 532 10 Pardubice, Česká republika

st38457@student.upce.cz

Vortioxetin patří mezi antidepresiva. Byly na něm provedeny potenciometrické a spektrofotometrické pH-titrace pro stanovení disociačních konstant. Léčivo se používá pro léčbu chronické lymfocytární a Waldenstromovy makroglobulinémie a zaměřuje se na malignitu B-buněk.

Byly stanoveny tři disociační konstanty pomocí nelineární regrese pH-spekter (REACTLAB, SQUAD84) a pH-titrací (ESAB). U LH_2^+ (mírně rozpustný) došlo k protonaci za vzniku rozpustných kationtů LH_3^{2+} a LH_4^{3+} v čisté vodě. V rozmezí od pH 3 do 10 lze spolehlivě odhadnout tři disociační konstanty ve spektrech při koncentraci Vortioxetinu 9.2×10^{-5} M.

Byly stanoveny tři thermodynamické disociační konstanty $\text{p}K_{a1}^T = 5.38$, $\text{p}K_{a2}^T = 7.12$, $\text{p}K_{a3}^T = 9.22$ při 25°C a $\text{p}K_{a1}^T = 5.01$, $\text{p}K_{a2}^T = 7.10$, $\text{p}K_{a3}^T = 8.87$ při 37°C . Tři thermodynamické konstanty při koncentraci Vortioxetinu 3×10^{-4} M byly stanoveny regresní analýzou potenciometrických titračních křivek na $\text{p}K_{a1}^T = 5.10$, $\text{p}K_{a2}^T = 8.30$, $\text{p}K_{a3}^T = 9.20$ při 25°C a $\text{p}K_{a1}^T = 5.02$, $\text{p}K_{a2}^T = 8.22$, $\text{p}K_{a3}^T = 9.20$ při 37°C .

Predikce disociačních konstant byla stanovena použitím programu MARVIN a ACD/pK a byly stanoveny dvě disociační konstanty.

Literatura

- [1] Meloun, M.; Militký, J.: Interaktivní statistická analýza dat, Karolinum, Praha 2012.
- [2] Meloun, M.; Militký, J.: Kompendium statistického zpracování dat, Karolinum, Praha 2012.
- [3] Meloun, M.; Militký, J.; Hill, M.: Statistická analýza vícerozměrných dat v příkladech, Academia, Praha 2012.