

ПРОЦЕНА ЛИПОФИЛНОСТИ α НЕЗАСИЋЕНИХ КИСЕЛИНА ПРИМЕНОМ ТАНКОСЛОЈНЕ ХРОМАТОГРАФИЈЕ И КОМПЈУТЕРСКИХ МЕТОДА

Аутори: Теодора Чкаловски, Вања Петрић

e-mail: teodorakv@gmail.com, vanjapetric789@gmail.com

Ментори: доц. др Јелена Савић, доц. др Милкица Цревар Сакач

Катедра за фармацеутску хемију, Фармацеутски факултет Универзитета у Београду

Увод: Липофилност је једна од најважнијих физичко-хемијских особина неког лека и представља афинитет према липидној фази. Код антимикробних лекова је нарочито значајна са аспекта пенетрације у ћелију микроорганизама. Изражава се преко подеоног коефицијента (P), односно његове логаритамске вредности ($\log P$) и може се одредити: методом мућкања (*shake flask method*), танкослојном хроматографијом, високоефикасном хроматографијом.

Циљ: Циљ овог рада је процена $\log P$ вредности рачунарским методама и танкослојном хроматографијом за 10 новосинтетисаних једињења за које је претходно испитана антимикробна активност и поређење добијених резултата.

Материјал и методе: У испитивању је коришћено 10 α незасићених киселина, које су растворене у ДМСО-у, а потом разблажене метанолом. На хроматографске плоче је микрошприцем наносено 6 μ L сваког раствора. Плоче су развијане у три RP-TLC система са по четири различита односа растварача. Добијене мрље су детектоване под UV лампом на 254 nm. R_f и R_M вредности су израчунате за свако испитивано једињење. Израчунате су одговарајуће $\log P$ вредности применом софтвера *MarvinSketch* и *ChemDraw*. Применом линеарне регресионе једначине $R_M = R_M^0 + aC$, израчунате су вредности C_0 и корелисане са израчунатим $\log P$ вредностима.

Резултати: Резултати овог испитивања показују исти тренд хроматографских параметра испитиваних једињења у ацетону и израчунатих $\log P$ вредности. Најниже вредности има једињење 8 (најхидрофилније), док највише вредности има једињење 10 (најлипофилније).

Закључак: Хроматографски параметри испитиваних једињења у систему ацетон-вода су у најбољој корелацији са израчунатим $\log P$ вредностима, па се може закључити да је овај систем најпогоднији за испитивање липофилности ових једињења.

Кључне речи: липофилност; $\log P$; танкослојна хроматографија

LIPOPHILICITY ASSESSMENT OF α UNSATURATED ACIDS USING CHROMATOGRAPHIC AND COMPUTATIONAL METHODS

Authors: Teodora Čkalovski, Vanja Petrić

e-mail: teodorakv@gmail.com, vanjapetric789@gmail.com

Mentors: Assist. Prof. Jelena Savić, Assist. Prof. Milkica Crevar Sakač

Department of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Pharmacy University of Belgrade

Introduction: Lipophilicity is one of the most important physico-chemical properties of a drug which represents affinity towards lipide. Within antimicrobial drugs lipophilicity is very important from the aspect of drug penetration into microbial cells. It is expressed via partition coefficient (P), respectively its logarithmic value ($\log P$) and can be determined by: shake flask method, thin-layer chromatography, high-pressure chromatography.

The Aim: The aim of this work was assessment of $\log P$ values by computational methods and thin-layer chromatography for then newly-synthesized compounds for which antimicrobial activity was previously examined and comparison of the obtained results.

Material and methods: In the study, 10 α unsaturated acids were used, which were dissolved in DMSO and then diluted with methanol. 6 μ L of each solution was applied on the chromatographic plate, using a microsyringe. The plates were developed in three RP-TLC systems using four different ratios of solutions. Obtained spots were detected under the UV lamp at 254 nm. R_f and R_M values were calculated for each examined compound. Appropriate $\log P$ values were calculated using softwares *MarvinSketch* and *ChemDraw*. Values C_0 were calculated using the regression equation $R_M = R_M^0 + aC$ and correlated to calculated $\log P$ values.

Results: Obtained results of this study showed the same trend for C_0 values in acetone-water system and $\log P$. Results of this study showed the same trend of chromatographic parameters of tested compounds in acetone-water system and calculate $\log P$ values. The lowest values has compound 8 (the most hydrophilic), while the highest values has compound (the most lipophilic).

Conclusion: Chromatographic parameters of examined compounds in acetone-water systems are in the best correlation to calculated $\log P$ values, so it can be concluded that this system is optimal for lipophilicity examination of these compounds.

Keywords: lipophilicity; $\log P$; thin-layer chromatography