

Estimation of the Aqueous Solubility of Some Acetanilide Derivatives from Octanol-Water Partition Coefficients and Entropies of Fusion

Yolima BAENA ¹, Helber J. BARBOSA ¹, Jorge A. PINZÓN ² and Fleming MARTÍNEZ ^{1*}

¹ Área de Tecnología Farmacéutica, Departamento de Farmacia.

² Área de Fisicoquímica, Departamento de Química,

Universidad Nacional de Colombia, A.A. 14490, Bogotá D.C., Colombia

SUMMARY. Some semi empirical equations developed by Yalkowsky *et al.* were used to estimate the aqueous solubility (S_W), of acetaminophen, phenacetin, and acetanilide, using experimental octanol-water partition coefficients (P_C), entropies of fusion (ΔS_f), and melting points (t_m). The calculated solubilities were compared with those experimentally determined. In almost all cases for acetanilide and phenacetin a good agreement was found, while this is not valid for acetaminophen.

RESUMEN. "Estimación de la Solubilidad Acuosa de Derivados de la Acetanilida a Partir de Coeficientes de Reparto Octanol-Agua y Entropías de Fusión". Se utilizaron algunas ecuaciones empíricas desarrolladas por Yalkowsky *et al.* para la estimación de la solubilidad en medios acuosos (S_W), del acetaminofén, la fenacetina y la acetanilida, utilizando valores experimentales de coeficiente de reparto (P_C) y, de temperaturas (t_m) y entropías de fusión (ΔS_f). Las solubilidades calculadas fueron comparadas con las determinadas experimentalmente, encontrando buena concordancia para la acetanilida y la fenacetina en la mayoría de los casos, mientras que para el acetaminofén ningún modelo ofrece resultados confiables.

PALABRAS CLAVE: Estimación de solubilidad, Coeficiente de reparto, Ecuaciones de Yalkowsky-Valvani y Jain-Yalkowsky.

KEY WORDS: Estimation of solubility, Partition coefficient, Yalkowsky-Valvani and Jain-Yalkowsky equations.

* Author to whom correspondence should be addressed. E-mail: fmartinezr@unal.edu.co