



Prediction of Drug Solubility Data in Polyethylene Glycols + Water Mixtures at Various Temperatures

Fatemeh KERAMATNIA ¹, Ali SHAYANFAR ², Atefeh H. BOZORGI ³,
Marjan MOTTAGHI ⁴ & Abolghasem JOUYBAN ^{5,6} *

¹ *Liver and Gastrointestinal Diseases Research Center and Student Research Committee,
Tabriz University of Medical Sciences, Tabriz 51664, Iran*

² *Drug Applied Research Center and Faculty of Pharmacy,
Tabriz University of Medical Sciences, Tabriz 51664, Iran*

³ *R & D Department, Tehran Chemie Pharmaceutical Company, Tehran, Iran*

⁴ *Osco Pharmacy, Waltham MA, 02453, United States*

⁵ *Pharmaceutical Analysis Research Center and Faculty of Pharmacy,
Tabriz University of Medical Sciences, Tabriz 51664, Iran*

⁶ *Kimia Idea Pardaz Azarbayjan (KIPA), Science Based Company,
Tabriz University of Medical Sciences, Tabriz 51664, Iran*

SUMMARY. An improved cosolvency model for predicting the solubility of drugs in polyethylene glycols (PEGs) + water mixtures at various temperatures was provided by a combination of the Jouyban-Acree model with the Abraham solvation parameters of drugs. The input data for the proposed model is drug solubility in neat PEGs and water and the computed Abraham solvation parameters of drugs. Applicability of the proposed model was tested on a number of drugs solubility data in PEGs + water mixtures and the mean percentage deviation of 22.5% was obtained. An attempt was made to provide predictive models for solubility of drugs in the mono-solvents which was failed due to the very large deviations for such models.

RESUMEN. Se proporciona un modelo mejorado de cosolvencia para predecir la solubilidad de los fármacos en polietilenglicoles (PEG) + mezclas de agua a diversas temperaturas por una combinación del modelo de Jouyban-Acree con los parámetros de solvatación de drogas de Abraham. Los datos de entrada para el modelo propuesto son la solubilidad del fármaco en los PEG puros y en agua y los parámetros computados de solvatación de drogas de Abraham. La aplicabilidad del modelo propuesto fue probado en base a datos de solubilidad en los PEG + mezclas de agua en un número de fármacos y la desviación media del porcentaje fue del 22,5%. Se hizo un intento para proporcionar modelos predictivos de la solubilidad de los fármacos en los mono-disolventes, que falló debido a las grandes desviaciones de los modelos.

KEY WORDS: Abraham solvation parameters, cosolvency model, PEG 400, solubility prediction.

* Author to whom correspondence should be addressed. *E-mail:* ajouyban@hotmail.com.