

## Solicitud de ensayo potenciométrico: PKa, logP/LogD y solubilidad (SIRIUS T3) Servicio de Análisis Instrumental. Instituto de Química Médica

<b>Fecha:</b>	<b>Empresa:</b>
<b>Persona de contacto:</b>	<b>Teléfono:</b>
<b>Mail:</b>	
<b>CIF de empresa:</b>	
<b>Dirección facturación:</b>	
<b>FIRMA:</b>	

### Requisitos de la muestra:

- El compuesto debe poseer al menos un PKa en el rango 3-10 y no debe descomponerse en el rango de pH de trabajo del equipo (2-12). Consultar con algún miembro del laboratorio si se desconoce.
- Cantidad de muestra: 3-5 mg por ensayo. Para solubilidad con cosolvente entregar mínimo 10mg. La muestra se aportará liofilizada en un vial, indicando la cantidad entregada.
- La pureza del compuesto debe ser elevada ( $\geq 95\%$ ) para que el ensayo sea representativo, todas las muestras deben necesariamente proceder del mismo lote.

DATOS DEL ENSAYO		
<b>Ensayo solicitado</b>	<input type="checkbox"/> <b>pKa acuoso</b> <input type="checkbox"/> <b>pKa con cosolvente. Metanol, DMSO, contactar para otro</b> <input type="checkbox"/> <b>logP/LogD</b> <input type="checkbox"/> <b>Solubilidad acuosa</b> <input type="checkbox"/> <b>Solubilidad con cosolvente. Metanol, DMSO, contactar para otro</b>	
DATOS DE LA MUESTRA		
<b>Referencia:</b>	<b>Peso molecular:</b> (incluyendo contraiones, etc)	<b>Pureza:</b>
<b>Estructura:</b>		
<p>Imprescindible aportar información sobre la estructura; dibujarla/ enviar archivo de la misma por email o indicar nº de PK's y si es ácido o base, si tiene contraiones ...</p>		
<b>Observaciones:</b>		

### Información relevante sobre los experimentos:

- Todos los ensayos se realizan a una fuerza iónica similar a la de los medios biológicos, 0.15M.
- El ensayo de PKa acuoso se realiza en una disolución 0.15M de KCl. El compuesto debe ser soluble en todo el rango de pH para concluir el ensayo con éxito.
- El ensayo de PKa con cosolvente se realiza en mezclas agua-cosolvente con 0.15M de KCl. El equipo calcula el PKa en tres proporciones durante el ensayo y extrapola el resultado a 100% de agua.
- Para la realización del ensayo de logP y solubilidad acuosa es imprescindible realizar previamente el ensayo de PKa acuoso o PKa con cosolvente.
- Para la realización del ensayo de solubilidad con cosolvente es necesario realizar previamente el PKa en el mismo cosolvente. Es necesario repetir este ensayo 3 veces, a distintas proporciones de cosolvente, para extrapolar el resultado a 100% de agua.