



## Modelling the Solubility and Preferential Solvation of Bergenin in DMSO + Water Mixtures

Fleming MARTÍNEZ <sup>1</sup>\*, Abolghasem JOUYBAN <sup>2,3</sup> & William E. ACREE Jr. <sup>4</sup>

<sup>1</sup> Grupo de Investigaciones Farmacéutico-Físicoquímicas, Departamento de Farmacia, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia –Sede Bogotá, Cra. 30 No. 45-03, Bogotá D.C., Colombia.

<sup>2</sup> Pharmaceutical Analysis Research Center and Faculty of Pharmacy, Tabriz University of Medical Sciences, Tabriz 51664, Iran

<sup>3</sup> Kimia Idea Pardaz Azarbayjan (KIPA) Science Based Company, Tabriz University of Medical Sciences, Tabriz 51664, Iran

<sup>4</sup> Department of Chemistry, University of North Texas, Denton, TX 76203-5070, USA

**SUMMARY.** The main aim of this communication was to expand the results of numerical analyses performed by Shakeel *et al.* [(2016) *J. Mol. Liq.* **220**: 823-8] on the equilibrium solubility of bergenin in dimethyl sulfoxide + water mixtures at different temperatures in terms of the solubility data modeling according to the Jouyban-Acree model which reduces to the log-linear model for this data set and also the evaluation of the preferential solvation of this natural compound by both solvents in the saturated binary mixtures based on the inverse Kirkwood-Buff integrals.

**RESUMEN.** El principal objetivo de esta comunicación es expandir los resultados del análisis numéricos desarrollados por Shakeel *et al.* [(2016) *J. Mol. Liq.* **220**: 823-8] sobre la solubilidad en equilibrio de la bergenina en mezclas dimetil sulfóxido + agua a diferentes temperaturas en términos de la modelación de los datos mediante la expresión de Jouyban-Acree, lo cual redujo el comportamiento de estos datos al modelo logarítmico-decimal, y de la evaluación de la solvatación preferencial de este compuesto natural en las mezclas binarias saturadas basado en las integrales inversas de Kirkwood-Buff.

**KEY WORDS:** bergenin, DMSO + water mixtures, Inverse Kirkwood-Buff Integrals, Jouyban-Acree model, preferential solvation.

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