

Título: DETERMINACIÓN DE MULTICOMPONENTES POR CALIBRACIÓN UNIVARIADA Y MULTIVARIANTE; ANÁLISIS DE FÁRMACOS

Nombre: LUIS LUIS M. LUZ

Universidad: Universidad de La Laguna

Departamento: QUIMICA ANALITICA, NUTRICION Y BROMALOGIA

Fecha de lectura: 18/07/2003

Programa de doctorado: QUÍMICA ANALÍTICA PURA Y APLICADA

Dirección:

> **Director:** ARIAS LEÓN JUAN JOSÉ

> **Codirector:** JIMÉNEZ ABIZANDA ANA ISABEL

Tribunal:

> **presidente:** VENERANDO GONZÁLEZ DÍAZ

> **secretario:** FRANCISCO JIMÉNEZ MORENO

> **vocal:** DOMINGO BLANCO GOMIS

> **vocal:** JOSE JUAN SANTANA RODRIGUEZ

> **vocal:** ZORAIDA ZOSA FERRERA

Descriptor:

El fichero de tesis ya ha sido incorporado al sistema

> <http://dialnet.unirioja.es/servlet/tesis?codigo=1142>

Resumen: La memoria aplica la calibración univariada y multivariante a la determinación simultánea de varios principios activos en mezclas. Los principios activos estudiados pertenecen a las familias de los antihipertensivos y antiepilépticos.

En el capítulo primero se presentan las características físico-químicas y farmacológicas más importantes de los principios activos objeto de estudio, así como, su acción en el organismo. El segundo capítulo está dedicado a los fundamentos teóricos de los distintos métodos de calibración que se utilizarán en los capítulos siguientes y que permitirán llevar a cabo las multideterminaciones.

En el tercer capítulo se aborda la resolución de las diferentes mezclas binarias estudiadas: dihidralazina-hidroclorotiazida, clortalidona-espironolactona y fenitoína-fenobarbital, aplicando calibración univariada: métodos del "cruce por cero" y "espectros cocientes derivados" y, calibración multivariante: regresión lineal múltiple (MLR) y regresión en mínimos cuadrados parciales

(PLS).

En el capítulo cuarto se hace uso de la calibración multivariante para la resolución y cuantificación de las mezclas ternarias dihidralazina-hidroclorotiazida-reserpina y clortalidona-espironolactona-reserpina, resolviéndose la primera por regresión lineal múltiple y por mínimos cuadrados parciales. La mezcla clortalidona-espironolactona-reserpina se resuelve por regresión por mínimos cuadrados parciales.

La capacidad predictora de los diferentes métodos de calibración desarrollados en los capítulos anteriores se evalúa mediante el cálculo de los parámetros estimativos del error cometido en las determinaciones, el error estándar de la predicción (RSE), el error relativo medio de la predicción (RMSE) y la suma de los cuadrados del error residual de predicción (PRESS).

Los métodos desarrollados se aplican con buenos resultados a la determinación de los principios activos en mezclas sin