

FAKTOROVÁ ANALÝZA V PROTONAČNÍCH ROVNOVÁHÁCH VYBRANÝCH LÉČIV

TOMÁŠ SYROVÝ a MILAN MELOUN

Katedra analytické chemie, Univerzita Pardubice, Čs. legii 565, 532 10 Pardubice

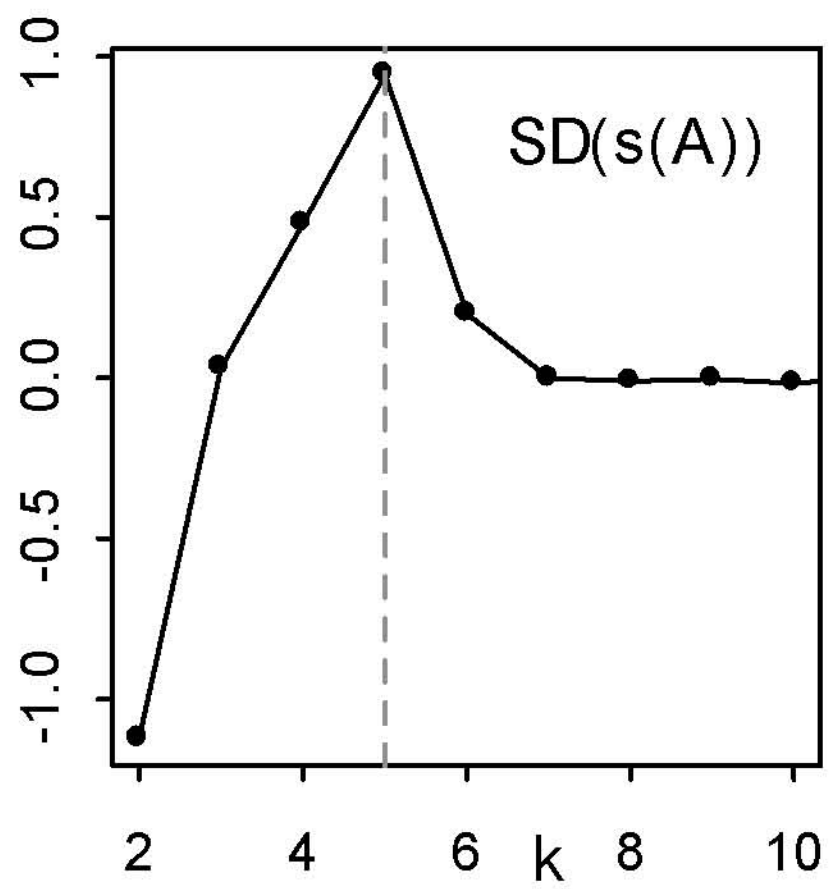
E-mail: tomas.syrovy@upce.cz, milan.meloun@upce.cz

Znalost počtu světlo-absorbujících částic v roztoku je nezbytná pro navržení chemického modelu, který je následně použit při kvalitativně-kvantitativním popisu protonačních rovnovah vybraných léčiv. K určení hodnoty matice spekter bylo kriticky porovnáno 12 metod faktorové analýzy. Analýza dat byla provedena algoritmem *INDICES* v software *S-PLUS*. Aplikované metody je možno rozdělit do dvou skupin, kde první tvoří „precizní“ metody, které určují počet komponent ve směsi porovnáním reziduální směrodatné odchylky $s_k(A)$ pro k -tou částici s instrumentální chybou přístroje $s_{inst}(A)$. Druhou skupinu tvoří metody „aproximativní“, které ke stanovení počtu barevných částic nepotřebují znát směrodatnou odchylku přístroje $s_{inst}(A)$ a počet složek ve směsi určují dle svých specifických kritérií. U systémů s počtem částic větším jak 3 je výhodné použít derivační metody *SD*, *TD* a *ROD* popsané Elbergalim¹. Derivační přístup se ukázal jako velmi užitečný při řešení rovnovah složitějších systémů obsahujících až 6 komponent ve směsi. Stanovený počet částic pro daný systém byl porovnáván s regresní analýzou programu *SQUAD(84)*, kterým byly stanovovány disociační konstanty pK_{ai} a molární absorpční koeficienty všech světlo-absorbujících částic $\varepsilon_{\lambda i}$. Obr. 1. odhaluje počet latentních proměnných ($k = 5$) v spektrálních datech léčiva silybin pomocí derivací metod algoritmu *INDICES*. Svislá přerušovaná čára značí nalezené řešení. V prvním řádku vlevo: druhá derivace $SD(s_k(A))$ Kankareho metody; uprostřed: třetí derivace $TD(s_k(A))$ Kankareho metody; vpravo: poměr derivací $ROD(s_k(A))$ Kankareho metody. Druhý řádek: Druhá derivace z funkcí $SD(RSD)$, $SD(AE)$ a $SD(\chi^2)$. Třetí řádek: druhá derivace z Exnerovy funkce $SD(psi)$, grafu úpatí $SD(RPV)$ a zabudované chyby $SD(IE)$. Čtvrtý řádek: druhá derivace indikátorové funkce $SD(IND)$, 3D – absorpční spektra různě protonovaných částic silybinu pro různé hodnoty pH. 3D – mapa reziduí po regresní analýze absorbančních spekter léčiva silybin v závislosti na pH.

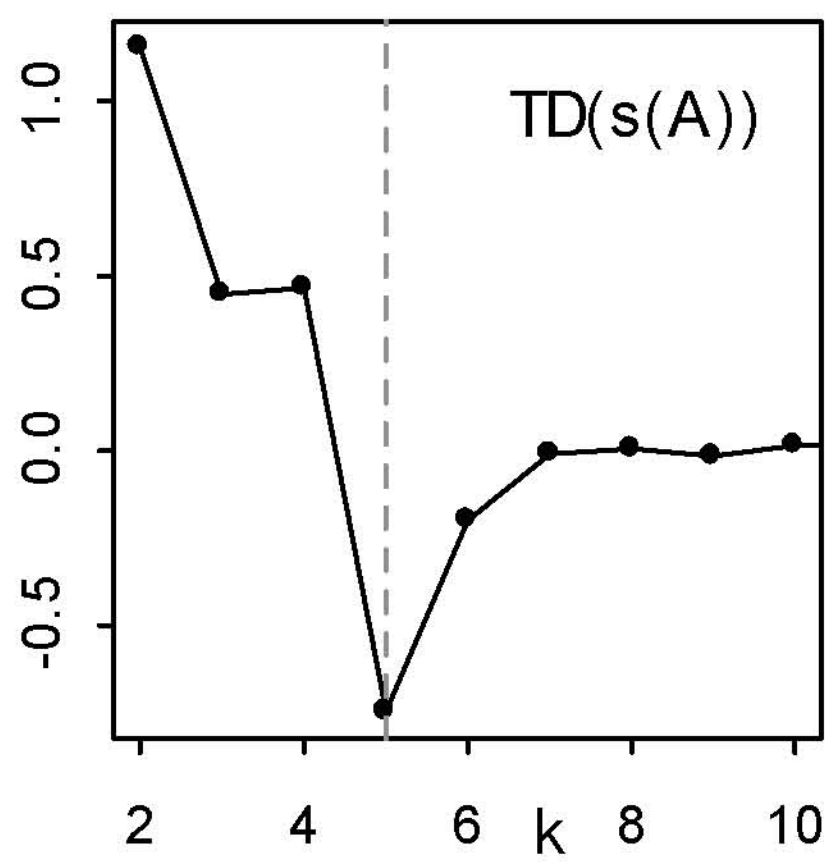
Literatura

1. Elbergali A. K., Nygren J. and Kubista M., *An automated procedure to predict the number of components in spectroscopic data*, Anal. Chim. Acta, 379 (1999) 143.

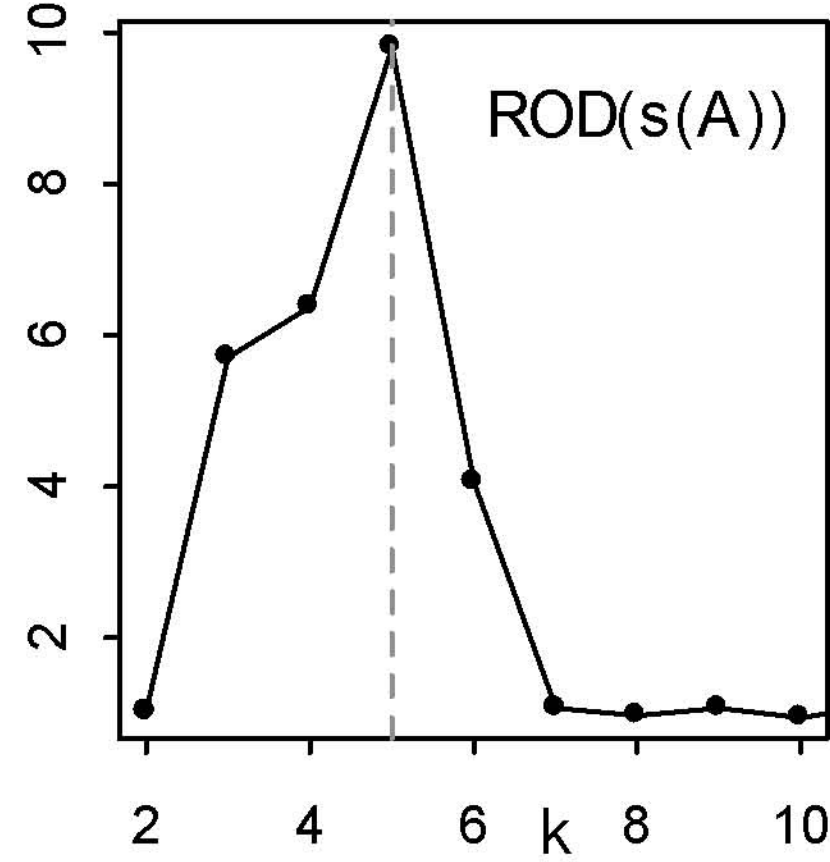
Kankare - Second derivative



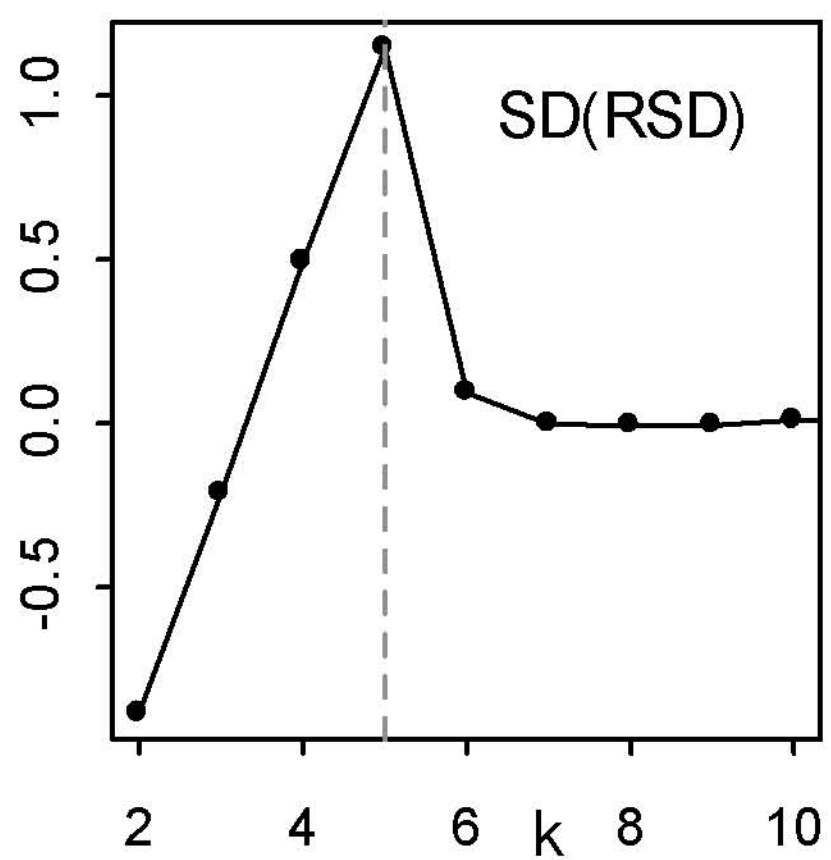
Kankare - Third derivative



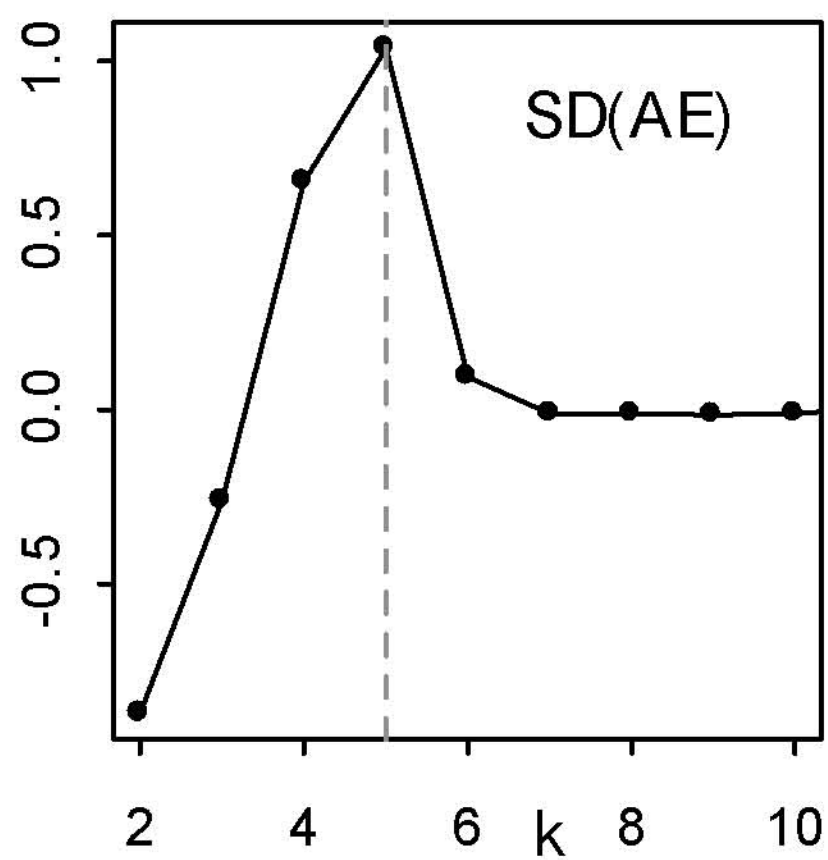
Kankare - Derivatives ratio



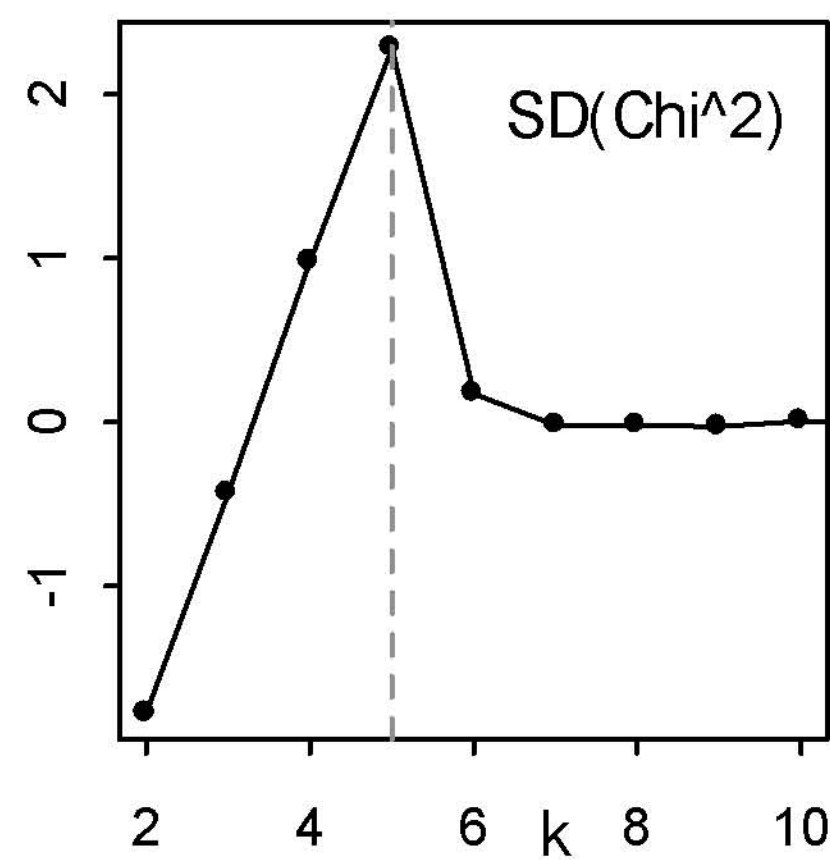
Residual standard deviation



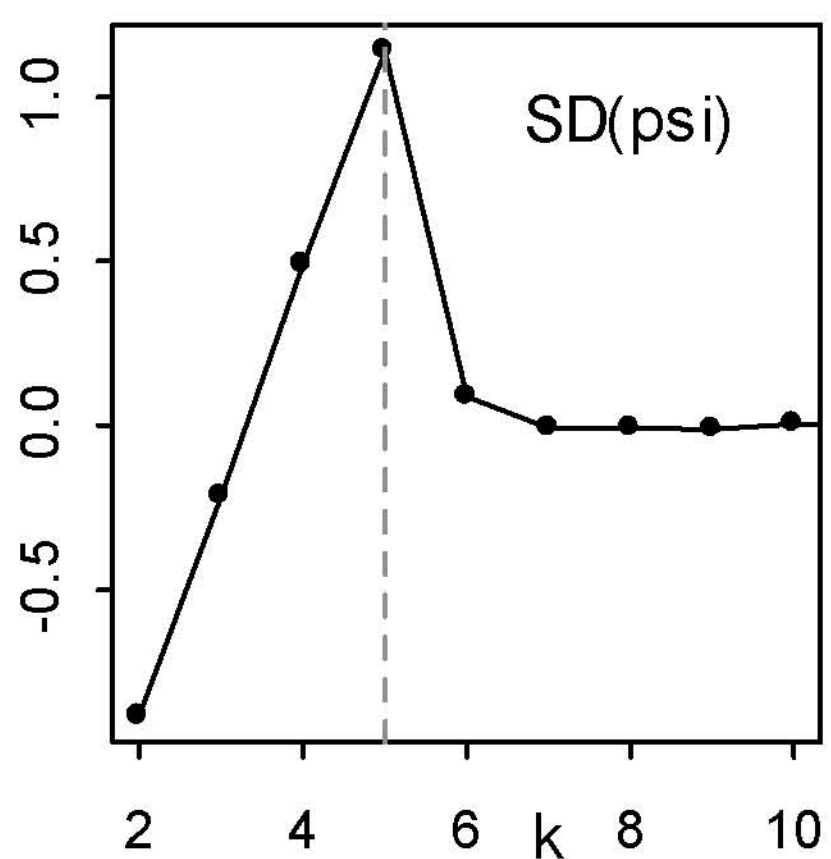
Average error criterion



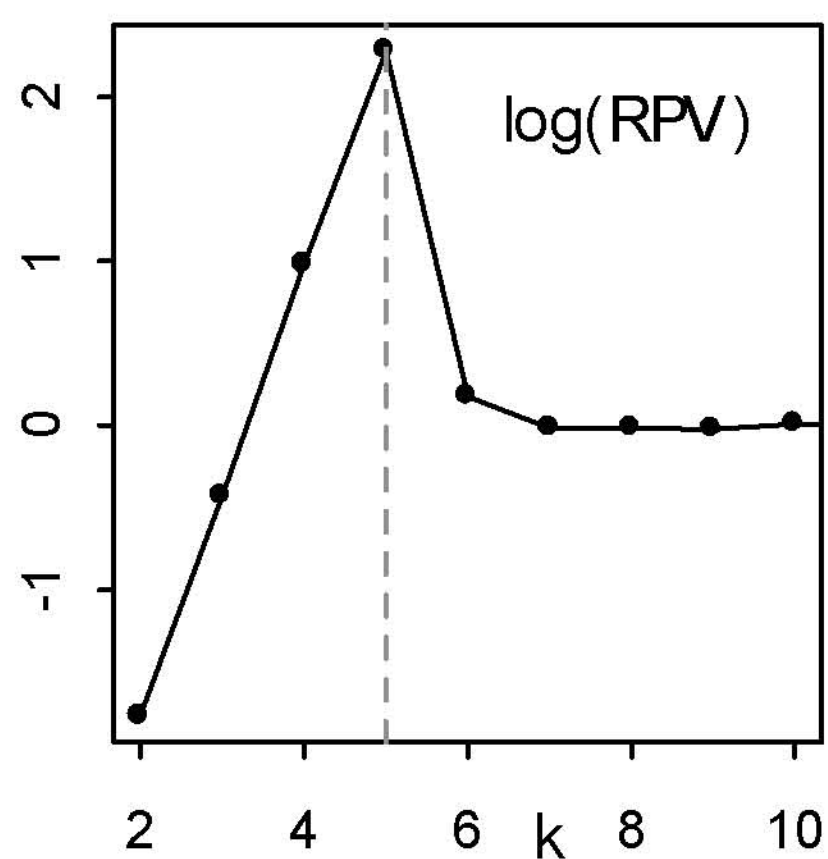
Bartlett chi-2 criterion



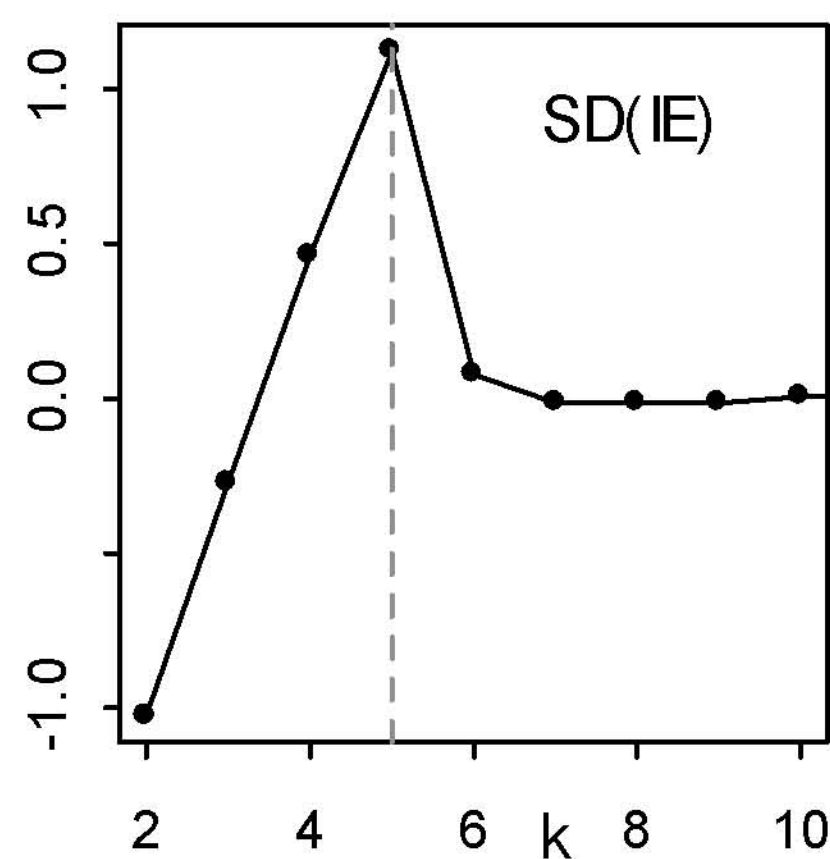
Exner function



Scree test



Imbedded error



Factor indicator function

