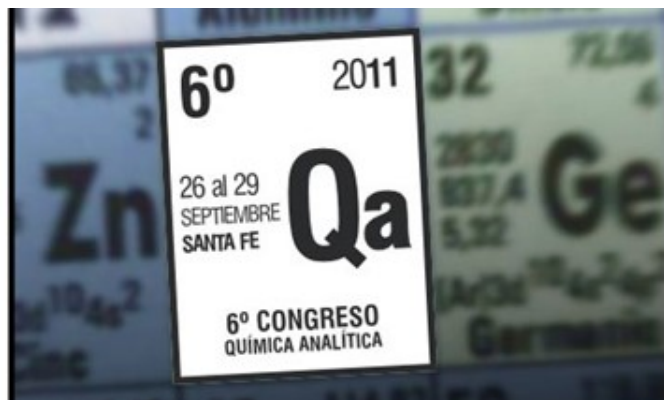




Asociación Argentina de Químicos Analíticos



6º Congreso Argentino de Química Analítica

Qa

6º CONGRESO ARGENTINO de QUÍMICA ANALÍTICA

2011

Libro de Resúmenes

VI Congreso Argentino de Química Analítica

26 al 29 de septiembre de 2011

Santa Fe, Argentina



ASOCIACIÓN
ARGENTINA
DE QUÍMICOS
ANALÍTICOS

CONICET

AGENCIA



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL
FACULTAD DE BIOQUÍMICA Y CIENCIAS BIOLÓGICAS
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

FBCB

UNL

FIQ

UNL

Aplicación del método multivariante PLS y RPLC de Aminoácidos en el modelado del umbral al sabor amargo de 48 dipeptidos

Autores:

Delamarre, M. J.*; Flores, Patrocinio I.**; Marchevsky, E.*; Antón, R. I.*; Luco, J. M.*

Lugar:

(**) Instituto de Geología y Minería, Universidad Nacional de Jujuy. (*) Área de Química Analítica, Departamento de Química, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia. Universidad Nacional de San Luis. Chacabuco y Pedernera (5700) San Luis, Argentina. jmluco@unsl.edu.ar

Área temática:

Quimiometría

Resumen:

Los péptidos y polipéptidos son estructuras similares a las proteicas, es decir que están constituidas por aminoácidos, pero obviamente de menor tamaño que éstas. Los péptidos y sus análogos pueden cumplir funciones biológicas de gran importancia para la vida del individuo.

De hecho, en los últimos años dichos compuestos han atraído considerable interés en la comunidad científica no sólo debido a sus propiedades como mensajeros y reguladores de procesos bioquímicos, sino también por su rol esencial en el mantenimiento de diversas funciones biológicas del organismo[1]. En el presente trabajo, y utilizando la caracterización cromatográfica realizada sobre los 20 aminoácidos naturales con respecto a su comportamiento lipofílico mediante HPLC-RP, se realizó un estudio de QSAR con el objeto de modelar el umbral al sabor amargo de 48 dipéptidos. Para la construcción del modelo de QSAR, se utilizaron técnicas de análisis multivariado tales como el método de mínimos cuadrados parciales (PLS)[2] usando los parámetros de retención cromatográficos determinados por nuestro grupo de trabajo para los 20 AAs naturales con diversas fases estacionarias ODS y fases móviles acuosas a tres valores diferentes de pH (5, 7 y 10)[3].

El resultado del modelo de QSAR obtenido mostró los siguientes valores estadísticos: QSAR-PLS-1, A = 2, n = 48, r = 0.953, Q = 0.946, s = 0.195. La interpretación del modelo reveló que la hidrofobicidad y el tamaño del AA en ambas posiciones son los factores que gobiernan el sabor amargo para los Dipéptidos estudiados.

Bibliografía:

- [1] Daffre, S.; Bulet, P.; Spisni, A.; Ehret-Sabatier, L.; Rodrigues, E. G.; Travassos, L.R. Bioactive Natural Peptides, in Studies in Natural Products Chemistry, Volume 35, 597-691, (2008).
 [2] Luco, J.M.; Marchevsky, E. Current Computer-Aided Drug Design 2(2006)31
 [3] Silva, M. F.; Chipre, L. F.; Raba, J.; Luco, J.M. Chromatographia 53(2001)392

Evaluación de datos de curvas de disolución mediante métodos quimiométricos de segundo orden. Estudio del sistema hidrocortizida-fumarato de bisoprolol

Autores:

Rivero, María A.; Maggio, Rubén M.; Kaufman, Teodoro S.

Lugar:

Área Análisis de Medicamentos e Instituto de Química Rosario (IQUIR, CONICET-UNR). Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario, Suipacha 531(S2002LRK), Rosario, Argentina. E-mail: kaufman@iquir-conicet.gov.ar

Área temática:

Quimiometría

Resumen:

Las curvas de disolución farmacéutica proveen información acerca de la liberación de los principios activos contenidos en una formulación sólida en función del tiempo [1]. Presentamos un estudio sobre la utilidad de PARAFAC [2] y MCR-ALS [3] como métodos quimiométricos para evaluar datos de pruebas in vitro de disolución de comprimidos de la asociación farmacológica entre Hidrocortizida y Fumarato de Bisoprolol. Las condiciones de la prueba de disolución fueron las recomendadas por la Farmacopea Norteamericana (USP 32) para la mencionada asociación farmacéutica y se evaluaron 12 comprimidos según indica la norma [4].

Las disoluciones fueron monitoreadas de modo continuo entre 200 y 350 nm utilizándose una bomba peristáltica Minipuls 3 y un espectrofotómetro UV-VIS (Shimadzu 1601PC). Paralelamente se prepararon y midieron con el mismo sistema dos conjuntos de soluciones de calibración conteniendo los principios activos en concentraciones similares a las presentadas en la prueba de disolución.

Se observó que las curvas de velocidad de disolución cambian levemente entre una muestra y otra, por lo que PARAFAC no resultó apto para procesar los datos adquiridos, por fallar el cumplimiento de la condición de tri-linearidad. En consecuencia, la posibilidad de agrupar las muestras de calibración con los perfiles de disolución para su proporcionalización también fue descartada.

Por otro lado, al modelar el sistema con MCR-ALS, el mismo grupo de datos produjo resultados satisfactorios. En este caso, los espectros puros hallados fueron similares a los obtenidos para las soluciones de calibración, mientras que los perfiles de disolución resultaron correspondientes con los esperados, observándose una tasa de disolución levemente más elevada para el Fumarato de Bisoprolol, como especifica la USP 32.

Esta investigación permite sugerir que el uso de métodos quimiométricos para el monitoreo del espectro completo durante la evaluación de los datos de las pruebas de disolución, puede ser explotado como una alternativa para evaluar la disolución de analitos individuales en muestras con más de un principio activo. De este modo se evitaría la aplicación de técnicas separativas como la cromatografía de líquidos.

Esta estrategia proporciona además la oportunidad de investigar la relación entre las tasas de disolución de los componentes activos en formulaciones complejas y podría ser utilizada para correlacionar estos datos con la biodisponibilidad de los principios activo in vivo, lo cual resultaría en la adquisición más rápida y económica de resultados de bioequivalencia.

Bibliografía:

- [1] Dressman, J. J.; Kramer, J. Pharmaceutical dissolution testing, Marcel Dekker (2005)
 [2] Bro, R. Chemom. Intell. Lab. Syst. 38 (1997) 149
 [3] Jaumot, J.; Gargallo, R.; de Juan, A.; Tauler, R. Chemom. Intell. Lab. Syst. 76 (2005) 101
 [4] USP Convention. USP Pharmacopoeia, 32th Ed. (2009)