

RESUMEN

El proyecto que se presenta a continuación, se ha realizado en el departamento de Química Analítica de la Facultad de Química de la Universidad de Barcelona (UB). Su finalidad es caracterizar algunos fármacos antirretrovirales mediante valoraciones espectrofotométricas.

Para llevarlo a cabo, primeramente, se ha hecho una búsqueda bibliográfica sobre el VIH, como por ejemplo: el ciclo reproductivo del SIDA, dónde actúa cada fármaco y algunas de sus propiedades.

Seguidamente, se ha realizado la parte experimental, mediante valoraciones espectrofotométricas en continuo para la determinación de los valores de pK_a de los fármacos, utilizando un nuevo método basado en una calibración interna, con dos patrones distintos de valor de pK_a conocido, fluorouracilo y citarabina.

Los fármacos estudiados con patrón fluorouracilo son los siguientes:

- Zalcitabina
- Emtricitabina
- Tenofovir
- Nevirapina

Y para el patrón citarabina son:

- Azidotimidina
- Estavudina
- Nelfinavir

Una vez obtenidos los resultados experimentales, se han aplicado tratamientos quimiométricos, basados en la resolución multivariante de curvas por mínimos cuadrados alternados (MCR-ALS), utilizando el programa informático Matlab. Finalmente, los cálculos realizados permiten obtener los perfiles de concentración y los espectros de los diversos fármacos así como calcular los valores de pK_a de los mismos.

RESUM EN CATALÀ

El projecte que es presenta a continuació, s'ha realitzat en el departament de Química Analítica de la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona (UB). La seva finalitat, és caracteritzar alguns dels fàrmacs antirretrovirals mitjançant valoracions espectrofotomètriques.

Per portar-ho a terme, prèviament s'ha fet una recerca bibliogràfica sobre diferents aspectes del VIH com el seu cicle reproductiu, on actua cada fàrmac i algunes de les seves propietats.

Seguidament, s'ha realitzat una part experimental, on s'han fet valoracions espectrofotomètriques per a la determinació dels valors de pK_a dels fàrmacs, utilitzant un nou mètode basat en una calibració interna mitjançant dos patrons diferents de valor de pK_a conegut, fluorouracil i citarabina

Els fàrmacs estudiats amb patró fluorouracil són els següents:

- Zalcitabina
- Emtricitabina
- Tenofovir
- Nevirapina

I per el patró citarabina són:

- Azidotimidina
- Estavudina
- Nelfinavir

Una vegada obtinguts els resultats experimentals, s'han aplicat tractaments quimiomètrics, basats en la resolució multivariant de corbes per mínims quadrats alternats (MCR-ALS), utilitzant el programa informàtic Matlab; Finalment, els càlculs realitzats permeten obtenir els perfils de concentració i els espectres dels fàrmacs, així com calcular els valors de pK_a dels mateixos.

ABSTRACT

The following project has been developed in the Faculty of Chemistry of the University of Barcelona, in the department of Analytical Chemistry. Its purpose is to characterize some antiretroviral drugs by means of spectrophotometric titrations.

First, a bibliographical research about some aspects of VIH, has been done like its reproductive cycle, sites where every drug actuate and some of its properties.

After that, an experimental part has been performed by means of spectrophotometric titrations, for the determination of the pK_a values of the drugs, using a new form of intern calibration using two standards which pK_a value is already known, fluorouracile and citarabine.

Drugs studied with fluorouracile standard are:

- Zalcitabine
- Emtricitabine
- Tenofovir
- Nevirapine

And for the standard citarabine are:

- Azidothymidine
- Estavudine
- Nelfinavir

Once obtained the results of the experiments, it has been applied some chemometric treatments; based on the multivariate curve resolution by alternated least squares (MCR-ALS), by means of the computer science program Matlab.

Finally, data calculations allow obtaining the profiles of concentration and the spectro of drugs as well as the calculation of their pK_a values.

