

**Autor:** Vanessa Cárdenas Espitia

**Title:** Use of NIR spectroscopy and multivariate process spectra calibration methodology for pharmaceutical solid samples analysis

**Year:** 2012

**Directors:** Prof Dr. Marcel Blanco Romía, Dr. Manel Alcalà Bernàrdez

**Type of work:** Master thesis

**Degree:** Master of chemistry

**Applied chemometrics research group, Analytical chemistry unite, Department of Chemistry, Universitat Autònoma de Barcelona**

## **ABSTRACT**

Accomplish high quality of final products in pharmaceutical industry is a challenge that requires the control and supervision of all the manufacturing steps. This request created the necessity of developing fast and accurate analytical methods.

Near infrared spectroscopy together with chemometrics, fulfill this growing demand. The high speed providing relevant information and the versatility of its application to different types of samples lead these combined techniques as one of the most appropriated.

This study is focused on the development of a calibration model able to determine amounts of API from industrial granulates using NIR, chemometrics and process spectra methodology.

**KEYWORDS:** API determination, Calibration model, Near infrared spectroscopy (NIR), pharmaceutical industry, Process spectra.

**Autor:** Vanessa Cárdenas Espitia

**Títol:** Ús de l'espectroscòpia NIR i metodologia de calibratge multivariable de l'espectre de procés per anàlisis de mostres farmacèutiques sòlides

**Any d'elaboració:** 2012

**Directors del Treball:** Prof Dr. Marcel Blanco Romía, Dr. Manel Alcalà Bernàrdez

**Tipus de Treball:** Tesis de màster

**Titulació:** química

**Grup de Recerca en Quimiometria Aplicada, Unitat de Química Analítica, Department de Química, Universitat Autònoma de Barcelona**

## **RESUM**

Aconseguir una alta qualitat dels productes en la indústria farmacèutica és un repte que requereix el control i la supervisió de tots els passos de la manufactura. Això crea la necessitat de desenvolupar mètodes analítics precisos i ràpids.

L'espectroscòpia en l'infraroig proper juntament amb la quimiometria, compleix amb aquesta demanda creixent. La informació rellevant s'obté amb rapidesa i la versatilitat d'aplicació a diferents tipus de mostres fan que la combinació d'aquestes tècniques una de les més apropiades.

Aquest estudi es centra en el desenvolupament de models de calibratge capaços de determinar quantitats de API de granulats industrials fent servir el NIR, la quimiometria i la metodologia de l'espectre de procés.

**PARAULES CLAU:** Determinació de API, model de calibratge, espectroscòpia en l'infraroig proper (NIR), indústria farmacèutica, espectre de procés