

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

DƯƠNG THỊ THU HÀ

**XÁC ĐỊNH ĐỒNG THỜI PARACETAMOL, CAFFEIN VÀ
PHENYLEPHIN HYDROHLORIT TRONG THUỐC
PANADOL THEO PHƯƠNG PHÁP TRẮC QUANG
SỬ DỤNG THUẬT TOÁN LỘC KALMAN**

LUẬN VĂN THẠC SĨ KHOA HỌC HÓA HỌC

THÁI NGUYÊN - NĂM 2013

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

DƯƠNG THỊ THU HÀ

**XÁC ĐỊNH ĐỒNG THỜI PARACETAMOL VÀ CAFEIN VÀ
PHENYLEPHIN HYDROCLORIT TRONG THUỐC
PANADOL THEO PHƯƠNG PHÁP TRẮC QUANG
SỬ DỤNG THUẬT TOÁN LỘC KALMAN**

Chuyên ngành: Hóa phân tích

Mã số: 60.44.0118

LUẬN VĂN THẠC SĨ KHOA HỌC HÓA HỌC

Hướng dẫn khoa học: TS. MAI XUÂN TRƯỜNG

THÁI NGUYÊN - NĂM 2013

LỜI CẢM ƠN

Luận văn này được thực hiện tại phòng thí nghiệm của bộ môn Hóa học Phân tích, Trường Đại học Sư phạm - Đại học Thái Nguyên.

Để hoàn thành được luận văn này tôi đã nhận được rất nhiều sự động viên, giúp đỡ của nhiều cá nhân và tập thể.

Trước hết, tôi xin bày tỏ lòng biết ơn sâu sắc đến thầy giáo TS. Mai Xuân Trường đã tận tình chỉ bảo, động viên và giúp đỡ tôi trong quá trình học tập, nghiên cứu và thực hiện luận văn.

Xin bày tỏ lòng biết ơn chân thành tới các thầy cô giáo, người đã đem lại cho tôi những kiến thức bổ trợ vô cùng có ích trong những năm học vừa qua.

Xin gửi lời cảm ơn chân thành tới Ban giám hiệu, Khoa sau Đại học, Khoa Hoá học và các cán bộ phòng thí nghiệm Khoa Hoá học Trường Đại Học Sư Phạm - Đại học Thái Nguyên, đã tạo điều kiện cho tôi trong quá trình học tập, nghiên cứu và hoàn thiện luận văn.

Cuối cùng tôi xin bày tỏ lòng biết ơn sâu sắc đến gia đình, bạn bè, đồng nghiệp những người đã luôn bên tôi, động viên và khuyến khích tôi trong quá trình thực hiện đề tài nghiên cứu của mình.

Xin chân thành cảm ơn !

Thái Nguyên, tháng 4 năm 2013

Tác giả

Dương Thị Thu Hà

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan: đề tài "*Xác định đồng thời paracetamol, cafein và phenylephin hydroclorit trong thuốc Panadoltheo phương pháp trắc quang sử dụng thuật toán lọc Kalman*" do bản thân tôi thực hiện. Các số liệu, kết quả trong đề tài là trung thực. Nếu sai sự thật tôi xin chịu trách nhiệm.

Thái nguyên, tháng 04 năm 2013

Tác giả luận văn

Dương Thị Thu Hà

XÁC NHẬN
CỦA TRƯỞNG KHOA HOÁ HỌC

XÁC NHẬN
CỦA GIÁO VIÊN HƯỚNG DẪN

TS. Mai Xuân Trường

MỤC LỤC

Trang

Lời cảm ơn	
Lời cam đoan	
Mục lục.....	i
Danh mục các từ viết tắt của luận văn	ii
Danh mục các bảng của luận văn.....	iii
Danh mục các hình của luận văn	iv
MỞ ĐẦU	1
Chương 1. TỔNG QUAN TÀI LIỆU	2
1.1. Tổng quan về paracetamol, cafein, phenylephin hydroclorit.....	2
1.1.1. Paracetamol	2
1.1.1.1. Giới thiệu chung	2
1.1.1.2. Tính chất vật lý.....	2
1.1.1.3. Tính chất hóa học	3
1.1.1.4. Tổng hợp	3
1.1.1.5. Dược lý cơ chế tác dụng	4
1.1.1.6. Độc tính của paracetamol	8
1.1.1.7. Dạng thuốc và hàm lượng.....	9
1.1.2. Cafein.....	11
1.1.2.1. Giới thiệu chung	11
1.1.2.2. Tính chất vật lý.....	11
1.1.2.3. Tính chất hóa học	12
1.1.2.4. Dược lý cơ chế tác động	13
1.1.2.5. Điều chế	14
1.1.3. Phenylephin hydroclorit	17
1.1.3.1. Giới thiệu chung	17
1.1.3.2. Dược lý và cơ chế tác dụng	17
1.1.3.3. Chống chỉ định	20
1.1.3.4. Thận trọng	20
1.1.3.5. Tương tác thuốc.....	22
1.2. Các định luật cơ sở của sự hấp thụ ánh sáng.....	24
1.2.1. Định luật Bughe - Lămbe – Bia	24
1.2.2. Định luật cộng tính.....	24
1.2.3. Những nguyên nhân làm cho sự hấp thụ ánh sáng của dung dịch không tuân theo định luật Bughe – Lămbe – Bia	25
1.3. Một số phương pháp xác định đồng thời các cấu tử	26
1.3.1. Phương pháp Vierordt	26
1.3.2. Phương pháp phổ đạo hàm.....	28

1.3.3. Phương pháp mạng nơ ron nhân tạo.....	30
1.3.4. Phương pháp lọc Kalman.....	32
Chương 2.....	33
THỰC NGHIỆM.....	33
2.1. Nội dung và phương pháp nghiên cứu	33
2.1.1. Nội dung nghiên cứu	33
2.1.2. Phương pháp nghiên cứu	34
2.2. Thiết bị, dụng cụ và hóa chất.....	34
2.2.1. Thiết bị.....	34
2.2.2. Dụng cụ.....	34
2.2.3. Hóa chất	34
2.2.4. Chế phẩm Panadol cảm cúm.....	35
2.3. Chuẩn bị các dung môi để hoà tan mẫu	35
2.4. Đánh giá độ tin cậy của quy trình phân tích.....	36
2.4.1. Giới hạn phát hiện (LOD).....	36
2.4.2. Giới hạn định lượng (LOQ)	36
2.4.3. Đánh giá độ tin cậy của phương pháp.....	36
2.4.4. Đánh giá kết quả phép phân tích theo thống kê.....	38
Chương 3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ THẢO LUẬN.....	39
3.1. Khảo sát phổ hấp thụ phân tử của paracetamol, cafein và phenylephin hydroclorit	39
3.2. Khảo sát sự phụ thuộc độ hấp thụ quang của PRC, CFI và PNH vào pH.....	40
3.3. Khảo sát sự phụ thuộc độ hấp thụ quang của PRC, CFI và PNH theo thời gian.....	41
3.4. Khảo sát sự phụ thuộc độ hấp thụ quang của PRC, CFI và PNH theo nhiệt độ.....	42
3.5. Kiểm tra tính cộng tính độ hấp thụ quang của dung dịch hỗn hợp PRC, CFI và PNH.....	44
3.5.1 Kiểm tra tính cộng tính độ hấp thụ quang của dung dịch hỗn hợp PRC và CFI	44
3.5.2 Kiểm tra tính cộng tính độ hấp thụ quang của dung dịch hỗn hợp PRC và PNH.....	46
3.5.3 Kiểm tra tính cộng tính độ hấp thụ quang của dung dịch hỗn hợp CFI và PNH.....	48
3.6. Khảo sát khoảng tuyến tính tuân theo định luật bughe - lambe - bia của PRC, CFI và PNH. Xác định LOD và LOQ	50
3.6.1. Khảo sát khoảng tuyến tính của PRC	50
3.6.2. Xác định LOD và LOQ của PRC	52
3.6.3. Khảo sát khoảng tuyến tính của CFI	52

3.6.4. Xác định LOD và LOQ của CFI	54
3.6.5. Khảo sát khoảng tuyến tính của PNH	54
3.6.6. Xác định LOD và LOQ của PNH	56
3.7. Khảo sát, đánh giá độ tin cậy của phương pháp nghiên cứu trên các mẫu tự pha	56
3.7.1. Xác định hàm lượng PRC và CFI trong hỗn hợp tự pha	56
3.7.2. Xác định hàm lượng PRC và PNH trong hỗn hợp tự pha	58
3.7.3. Xác định hàm lượng CFI và PNH trong hỗn hợp tự pha	61
3.7.4. Xác định hàm lượng PRC, CFI và PNH trong các hỗn hợp tự pha	62
3.8. Xác định hàm lượng PRC, CFI và PNH trong thuốc Panadol và đánh giá độ đúng theo phương pháp thêm chuẩn	65
KẾT LUẬN	70
TÀI LIỆU THAM KHẢO	71

DANH MỤC CÁC TỪ VIẾT TẮT CỦA LUẬN VĂN

Tiếng việt	Tiếng Anh	Viết tắt
Paracetamon	Paracetamol	PRC
Cafein	Caffeine	CFI
Phenylephin hydroclorit	Phenylephrine hydrochloride	PNH
Giới hạn phát hiện	Limit Of Detection	LOD
Giới hạn định lượng	Limit Of Quantity	LOQ
Bình phương tối thiểu	Least Squares	LS
Sai số tương đối	Relative Error	RE
Độ lệch chuẩn	Standard Deviation	S hay SD

DANH MỤC CÁC BẢNG CỦA LUẬN VĂN

Bảng 3.1. Độ hấp thụ quang của PRC, CFI và PNH ở các giá trị pH	40
Bảng 3.2. Sự phụ thuộc độ hấp thụ quang của PRC , CFI và PNH theo thời gian.....	41
Bảng 3.3 Sự phụ thuộc độ hấp thụ quang của PRC , CFI và PNH theo nhiệt độ.....	43
Bảng 3.4. Độ hấp thụ quang của PRC, CFI và hỗn hợp ở một số bước sóng (với tỉ lệ nồng độ PRC:CFI là 1:1).....	45
Bảng 3.5. Độ hấp thụ quang của PRC , PNH và hỗn hợp ở một số bước sóng (với tỉ lệ nồng độ PRC:PNH là 1:1)	47
Bảng 3.6. Độ hấp thụ quang của CFI , PNH và hỗn hợp ở một số bước sóng (với tỉ lệ nồng độ CFI:PNH là 1:1).....	49
Bảng 3.7. Độ hấp thụ quang của dung dịch PRC ở các giá trị nồng độ.	51
Bảng 3.8. Kết quả xác định LOD và LOQ của PRC.....	52
Bảng 3.9. Sự phụ thuộc độ hấp thụ quang của CFI theo nồng độ.....	53
Bảng 3.10. Kết quả tính LOD và LOQ của CFI.	54
Bảng 3.11. Sự phụ thuộc độ hấp thụ quang của PNH theo nồng độ.....	55
Bảng 3.12. Kết quả tính LOD và LOQ của PNH.....	56
Bảng 3.13. Pha chế các dung dịch hỗn hợp PRC và CFI.....	57
Bảng 3.14. Kết quả tính nồng độ, sai số của PRC và CFI trong hỗn hợp	58
Bảng 3.15. Pha chế các dung dịch hỗn hợp PRC và PNH.....	59
Bảng 3.16. Kết quả tính nồng độ, sai số của PRC và PNH trong hỗn hợp.....	60
Bảng 3.17. Pha chế các dung dịch hỗn hợp CFI và PNH.....	61
Bảng 3.18. Kết quả tính nồng độ, sai số của CFI và PNH trong hỗn hợp	62
Bảng 3.19. Pha chế dung dịch chuẩn PRC, CFI, PNH và hỗn hợp	63

Bảng 3.20. Kết quả tính nồng độ, sai số của PRC, CFI và PNH trong các hỗn hợp.....	64
Bảng 3.21. Hàm lượng PRC, CFI và PNH trong mẫu thuốc Panadol.....	65
Bảng 3.22. Kết quả tính nồng độ, sai số PRC, CFI, PNH trong mẫu thuốc Panadol.....	66
Bảng 3.23. Thành phần các dung dịch chuẩn PRC, CFI, PNH thêm vào dung dịch mẫu thuốc Panadol.....	67
Bảng 3.24. Kết quả tính nồng độ, sai số của PRC, CFI và PNH trong dung dịch mẫu thuốc Panadol.....	68