

การวิเคราะห์ยาผสมพร้อมกันโดยใช้วิธี  
สเปกโตรโฟโตเมตรีแบบอาศัยเคโมเมตริก

นายศรฎา ศรีบุญเรือง  
นายอภิรักษ์ ฐิติพงศ์

โครงการพิเศษนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร

ปริญญาเภสัชศาสตรบัณฑิต

คณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล

พ.ศ. 2552

SIMULTANEOUS DETERMINATION OF COMBINED  
DRUGS BY USING CHEMOMETRICS - ASSISTED  
SPECTROPHOTOMETRIC METHOD

MR.SORADA SRIBUNRUANG  
MR.APINUN THITIPHONG

A SPECIAL PROJECT SUBMITTED IN PARTIAL FULFILMENT  
OF THE REQUIREMENTS FOR  
THE BACHELOR DEGREE OF SCIENCE IN PHARMACY  
FACULTY OF PHARMACY  
MAHIDOL UNIVERSITY

โครงการพิเศษ  
เรื่อง การวิเคราะห์หาผลสัมฤทธิ์ร่วมกันโดยใช้วิธีสเปกโตรโฟโตเมตริก  
แบบอาศัยเคโมเมตริก

(นายศรภูภา ศรีบุญเรือง)

(นายอภิรักษ์ จิตติพงษ์)

(ดร.ชุติมา เพชรกระจ่าง)

อาจารย์ที่ปรึกษา

**บทคัดย่อ**  
**การวิเคราะห์ยาผสมพร้อมกันโดยใช้วิธีสเปกโตรโฟโตเมตรี**  
**แบบอาศัยเคโมเมตริก**

ศรฎา ศรีบุญเรือง, อภินันท์ จูติพงษ์

อาจารย์ที่ปรึกษา: ชุตติมา เพชรกระจำง

ภาควิชาเภสัชเคมี คณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล

**คำสำคัญ:** พาราเซตามอล, คลอร์ซอกซาโซน, เคโมเมตริก

การศึกษานี้เป็นการนำเสนอวิธีสเปกโตรโฟโตเมตรีแบบอาศัยเคโมเมตริก เพื่อหาปริมาณยาพาราเซตามอล และคลอร์ซอกซาโซนพร้อมกันในรูปแบบยาเม็ด ชุดของตัวอย่างปรับเทียบกำหนดโดยวิธี Central Composite Design (CCD) และค่าการดูดกลืนแสงของชุดตัวอย่างดังกล่าวนำไปสร้างสมการเปรียบเทียบชนิด partial least square regression (PLS-1) และ principle component regression (PCR) จำนวน factors ที่เหมาะสมในวิธีทั้งสองได้จากการพิจารณาค่า PRESS ที่ได้จากวิธี leave-one-out cross validation ส่วนวิธีการ HPLC ในการวิเคราะห์ยาสองชนิดได้ถูกพัฒนาขึ้น เพื่อเปรียบเทียบกับวิธีสเปกโตรโฟโตเมตรีแบบอาศัยเคโมเมตริกผลการวิเคราะห์ที่ได้จากวิธี PLS-1, PCR และ HPLC ที่ได้พัฒนาขึ้น สำหรับใช้หาปริมาณยา paracetamol และ chlorzoxazone ชุดตัวอย่างทดสอบซึ่งเป็นชุดสารละลายที่เตรียมขึ้นแบบสุ่มและไม่ได้นำไปใช้ในการสร้างสมการเปรียบเทียบ ปริมาณยาพาราเซตามอล และคลอร์ซอกซาโซนที่ได้จาก วิธี PCR มีค่าเท่ากับ 102.15 ( $\pm 1.47\%$ ) และ 101.58 ( $\pm 4.18\%$ ) วิธี PLS-1 มีค่าเท่ากับ 102.15 ( $\pm 1.47\%$ ) และ 101.93 ( $\pm 4.22\%$ ) และวิธี HPLC มีค่าเท่ากับ 100.61 ( $\pm 2.12\%$ ) และ 101.16 ( $\pm 1.94\%$ ) ตามลำดับ วิธีทั้งสามคือ HPLC, PLS-1 และ PCR ได้ถูกนำไปวิเคราะห์ปริมาณยาพาราเซตามอล และคลอร์ซอกซาโซนในยาเม็ดเช่นกัน ผลวิเคราะห์แสดงให้เห็นว่าข้อมูลที่ได้จากวิธี PLS-1 และ PCR สามารถเทียบเคียงได้กับข้อมูลที่ได้จากวิธี HPLC

## Abstract

### Simultaneous determination of combined drugs by using chemometrics - assisted spectrophotometric method

Sorada Sribunruang, Apinun Thitipong

Project advisor: Chutima Phechkrajang

Department of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Mahidol University

**Keyword:** Paracetamol, Chlorzoxazone, Chemometrics

In this study, a chemometrics-assisted spectrophotometric method was proposed for simultaneous determination of paracetamol (PCM) and chlorzoxazone (CZX) in tablets. A set of calibration samples was created by using a central composite design (CCD). The UV absorbance spectra of the resulting samples were subjected to partial least square regression (PLS-1) and principal component regression (PCR). The optimum numbers of PLS-1 and PCR factors were selected according to the predictive residual sum of squares (PRESS) values of leave-one-out cross-validation. A HPLC method was developed and also employed for comparison. The mean recoveries of PCM and CZX in validation set were 102.15 ( $\pm 1.47\%$ ) and 101.58 ( $\pm 4.18\%$ ) for PCR 102.15 ( $\pm 1.47\%$ ) and 101.93 ( $\pm 4.22\%$ ) for PLS-1 and 100.61 ( $\pm 2.12\%$ ) and 101.16 ( $\pm 1.94\%$ ) for HPLC. The developed HPLC method, PLS-1 and PCR were used to quantitate PCM and CZX in tablets as well. The determination results showed that the data obtained by PLS-1 and PCR were comparable with those obtained by HPLC method.