

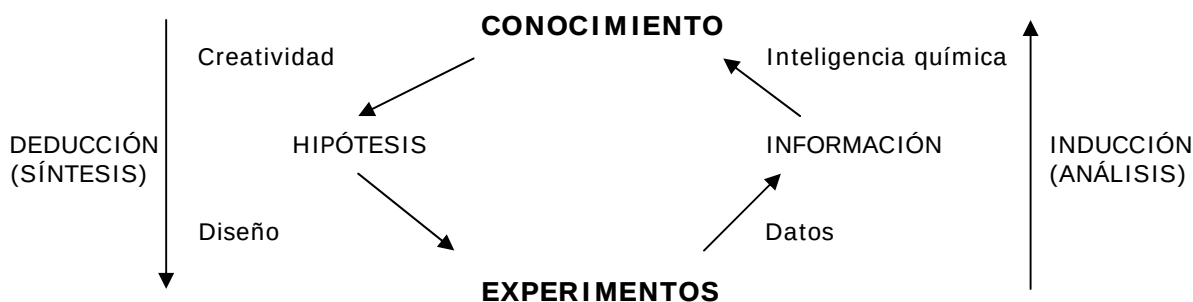
LA QUIMIOMETRÍA Y EL PROCESO ANALÍTICO

- 1 Introducción
- 2 Definición de Quimiometría
- 3 Quimiometría y Proceso Analítico

LA QUIMIOMETRÍA Y EL PROCESO ANALÍTICO**QUIMIOMETRÍA**

DISCIPLINA QUÍMICA QUE UTILIZA MATEMÁTICAS, ESTADÍSTICA Y LÓGICA FORMAL PARA (a) DISEÑAR O SELECCIONAR PROCEDIMIENTOS EXPERIMENTALES OPTIMIZADOS, (b) PROPORCIONAR INFORMACIÓN QUÍMICA RELEVANTE ANALIZANDO DATOS QUÍMICOS, Y (c) OBTENER CONOCIMIENTOS SOBRE SISTEMAS QUÍMICOS (MASSART)

CIENCIA QUE RELACIONA MEDIDAS HECHAS SOBRE UN SISTEMA O PROCESO QUÍMICO, CON EL ESTADO DEL SISTEMA MEDIANTE LA APLICACIÓN DE MÉTODOS ESTADÍSTICOS O MATEMÁTICOS (International Chemometrics Society)

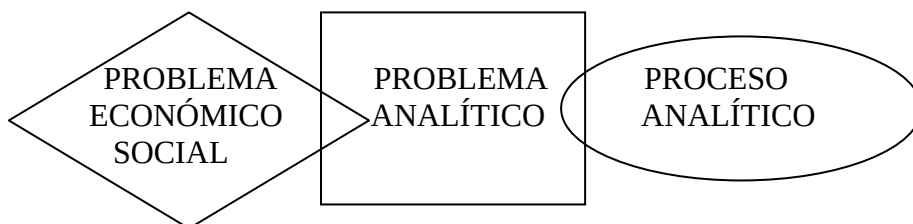
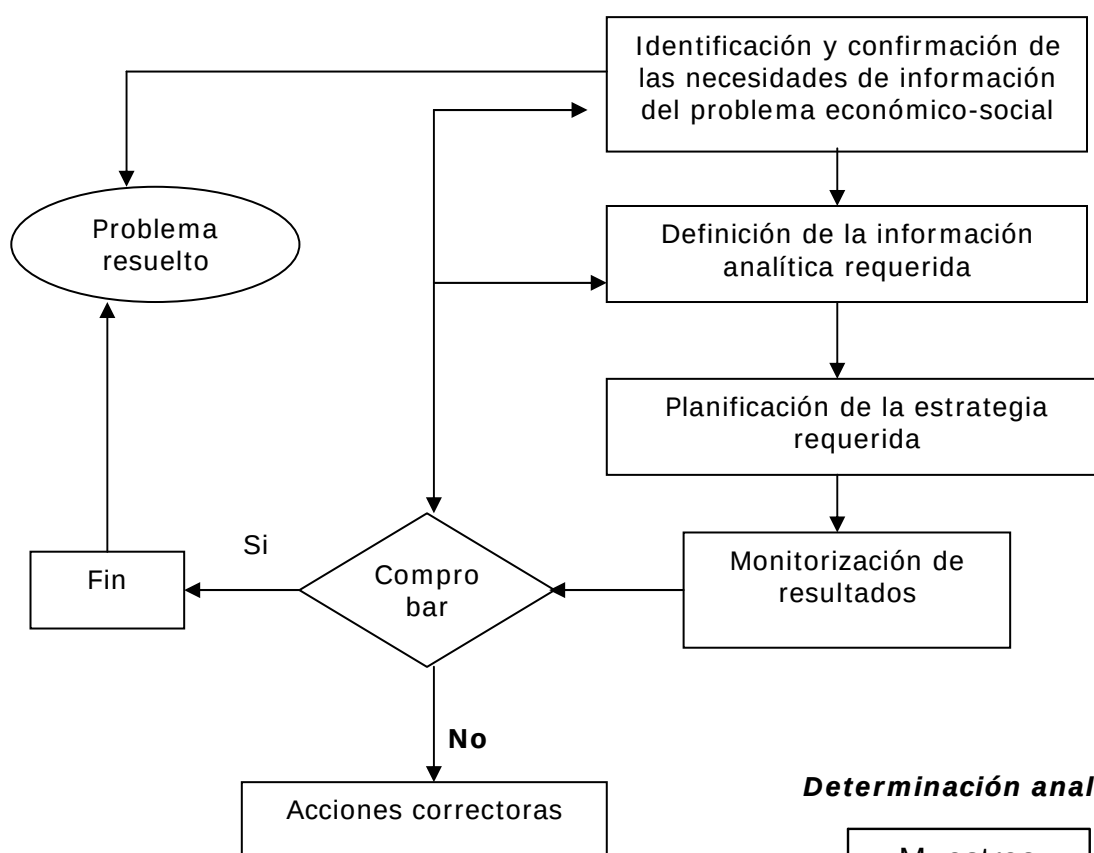
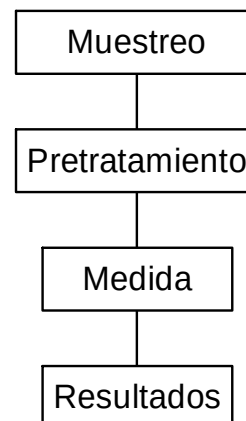
EL ARCO DEL CONOCIMIENTO**QUIMIOMETRÍA Y CALIDAD**

No siempre está implicada en la obtención de conocimiento

Muchas técnicas se utilizan para mejorar procesos y/o productos y para controlar la calidad

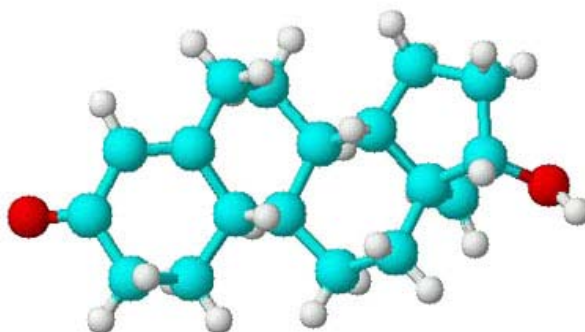
Hoy día se trata de igualar CHEMOMETRICS Y QUALIMETRICS

Las herramientas quimiométricas son fundamentales en la espiral de la calidad y en las políticas de CALIDAD y de QUALITY ASSURANCE

Relación con el entorno**Etapas generales para el planteamiento y resolución de un problema analítico****Determinación analítica**

NANDROLONA (19-norandrosterona)

Esteroides anabolizantes derivados de la testosterona.



EFFECTOS

- Objeto de debate.
- Mejora la capacidad para entrenar y competir al reducir la fatiga asociada al entrenamiento y disminuir el tiempo de recuperación después del esfuerzo.
- Estimula la producción de proteínas lo que favorece el desarrollo de masa muscular lo que origina un aumento de la potencia muscular.

RIESGOS

- Daños hepáticos al metabolizarse el compuesto
- Riesgos cardíacos ya que se pueden producir ataques al corazón debido al aumento de tamaño del músculo cardíaco
- Crecimiento desmesurado de huesos faciales, sobre todo la mandíbula y los dientes.

NIVELES NORMALES

- Los niveles normales en orina 0,03-0,32 ng/ml
- El límite permitido es 2 ng/ml.

DETERMINACIÓN ANALÍTICA*

- En muestras de orina
- Se hace una ruptura enzimática con beta-glucuronidasa
- Se derivatiza con metil-N-trimetilsililfluoroacetamida
- Se determina mediante GC-MS

* K. M. Höld, C. R. Borges, D. G. Wilkins, D. E. Rollins and R. E. Joseph. Detection of Nandrolone, Testosterone, and their Esters in Rat and Human Hair Samples. *Journal of Analytical Toxicology*, **23(6)**, 416-423, 1999

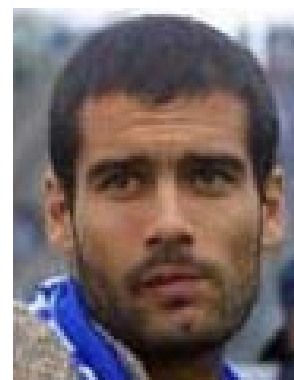
DEPORTISTAS IMPLICADOS EN DOPING CON NANDROLONA



F. de Boer



E. Davis



J. Guardiola

Después del Barcelona-Celta (15 de marzo de 2001, cuartos de final copa de la UEFA) Frank de Boer dio resultados positivo a la nandrolona: 8,6 ng/ml.

La UEFA lo suspende inicialmente por un año (hasta el 14 de junio de 2002). La apelación del jugador se basa en los hechos siguientes:

- Durante la competición el nivel de testosterona aumenta de forma natural, por lo que también lo hace el nivel de nandrolona.
- Se calcula que hasta un 0,01% de atletas podría dar falsos positivos.
- Algunos suplementos alimenticios contienen esteroides que pueden ser convertidos en nandrolona.

La suspensión se redujo a 11 semanas (finalizó el 31 de agosto de 2001), al considerar la UEFA que de Boer había ingerido la sustancia de forma involuntaria.

El jugador holandés de la Juventus Edgar Davids fue suspendido al dar 6,2 ng/ml en la muestra A. Ese resultado fue luego rebajado a 2,8 ng/ml. La muestra B dio 2,7 ng/ml.

TODA DETERMINACIÓN ANALÍTICA VA ACOMPAÑADA DE UN ERROR

$$e_i = x_i - \mu_0$$
$$e_i = (\underbrace{x_i - \bar{x}}_{\text{error aleatorio}}) + (\underbrace{\bar{x} - \mu_0}_{\text{error sistemático}})$$

EL VALOR A INFORMAR TIENE UN **INTERVALO DE CONFIANZA** (habitualmente del 95%) DENTRO DEL CUAL SE ENCONTRARÁ EL VALOR VERDADERO

Si el límite permitido es **2 ng/ml** y el resultado de la muestra de orina es **2,7 ng/ml** eso no significa necesariamente que el atleta se haya dopado

Hay varios casos:

2,7 ± 0,9 ⇒ Entre 1,8 y 3,6 ng/ml **NO HAY DOPING** (el valor frontera está dentro del intervalo)

2,7 ± 0,3 ⇒ Entre 2,4 y 3,0 ng/ml **HAY DOPING**

Se debe conocer y estudiar:

El error mínimo asociado al método de determinación: **BIAS del MÉTODO** que debe ser mínimo (o cero si es posible)

El error mínimo que comete nuestro Laboratorio: **BIAS del LABORATORIO** que también debe ser mínimo (o cero si es posible)

Hay que minimizar la dispersión de nuestros resultados analíticos, aumentando la **REPRODUCIBILIDAD** y la **REPETITIVIDAD**

TODO CONDUCE AL CONTROL DE CALIDAD QUE ADEMÁS DE SER UNA FILOSOFÍA TIENE UNAS HERRAMIENTAS MATEMÁTICAS QUE ESTUDIA LA **QUIMIOMETRÍA**

HAY MUCHO EN JUEGO