

CỘNG HÒA XÃ HỘI CHỦ NGHĨA VIỆT NAM
Độc lập – Tự do – Hạnh phúc

**THÔNG TIN VỀ NHỮNG ĐÓNG GÓP MỚI
CỦA LUẬN ÁN TIẾN SĨ**

Tên luận án: Nghiên cứu xác định đồng thời một số dược chất có phổ hấp thụ UV-Vis xen phủ nhau bằng phương pháp bình phương tối thiểu riêng phần

Ngành: Hóa phân tích

Mã số: 9440118

Nghiên cứu sinh: Nguyễn Duy Lưu

Khóa đào tạo: 2022 - 2025

Người hướng dẫn khoa học: 1.PGS.TS. Trần Thúc Bình

2.PGS.TS Nguyễn Đình Luyện

Cơ sở đào tạo: Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế

NỘI DUNG

1- Luận án đã xây dựng và tối ưu hóa mô hình bình phương tối thiểu riêng phần (PLS) để xác định đồng thời các dược chất có phổ hấp thụ UV-Vis xen phủ nhau, góp phần mở rộng ứng dụng của phương pháp PLS trong phân tích định lượng không phá hủy các chế phẩm dược.

2- Đề xuất quy trình thực nghiệm hoàn chỉnh bao gồm thiết kế tập hiệu chuẩn theo phương pháp CCD, ghi phổ UV-Vis, lựa chọn số biến tiềm ẩn bằng phân tích PRESS và đánh giá mô hình bằng các chỉ số thống kê (RMSECV, RMSEP, R^2 , kiểm định Shapiro–Wilk), bảo đảm độ chính xác và tính tin cậy của phương pháp.

3- Lần đầu tiên tại Việt Nam, mô hình PLS đã được ứng dụng thành công để định lượng đồng thời hai và ba hoạt chất trong các thuốc thương mại (AgimDogyl, Zoamco-A, Spirosemid-40, Natrixam, Turbezid), chứng minh tính khả thi và hiệu quả của phương pháp so với HPLC ($p > 0,05$).

4- Luận án đã đề xuất và áp dụng ba thuật toán lựa chọn bước sóng tối ưu gồm tỉ lệ chọn lọc (SR), lựa chọn biến ngược (BVE) và giải thuật di truyền (GA) kết hợp với PLS, giúp rút gọn phổ, loại nhiễu và nâng cao hiệu suất dự đoán. Các phương pháp lựa chọn bước sóng tối ưu góp phần đa dạng các phương pháp xử lý dữ liệu trước khi thực hiện mô hình PLS.

Các kết quả nghiên cứu đã được công bố trên các tạp chí khoa học quốc tế thuộc danh mục SCIE và các tạp chí chuyên ngành uy tín trong nước.

Đại diện tập thể hướng dẫn

(Ký và ghi rõ họ tên)

Nghiên cứu sinh

(Ký và ghi rõ họ tên)

PGS TS Trần Thúc Bình

Nguyễn Duy Lưu

INFORMATION OF THE NOVEL CONTRUBUTIONS OF THE DOCTORAL DISSERTATION

Thesis Title: Simultaneous determination of several pharmaceutical compounds with overlapping UV-Vis absorption spectra using the Partial Least Squares method

Major: Analytical Chemistry

Code: 9440118

PhD Candidate: Nguyễn Duy Lư

Course: 2022 - 2025

Supervisors: 1. Assoc. Prof Tran Thuc Binh

2. Assoc. Prof Nguyen Dinh Luyen

Educational institution: Hue University of Sciences

CONTENT

1. The dissertation has developed and optimized Partial Least Squares (PLS) models for the simultaneous determination of active pharmaceutical ingredients with overlapping UV-Vis absorption spectra, contributing to the expanded application of PLS in non-destructive quantitative analysis of pharmaceutical formulations.
2. A complete experimental procedure was proposed, including the design of calibration sets using the Central Composite Design (CCD), UV-Vis spectral recording, selection of latent variables via PRESS analysis, and model evaluation using statistical indicators (RMSECV, RMSEP, R^2 , Shapiro–Wilk test), ensuring the accuracy and reliability of the method.
3. For the first time in Vietnam, PLS models were successfully applied to simultaneously quantify two- and three-component active ingredients in commercial drugs (AgimDogyl, Zoamco-A, Spirosemid-40, Natrixam, Turbezid), demonstrating the feasibility and efficiency of the method compared to HPLC ($p > 0.05$).
4. The dissertation proposed and applied three optimal wavelength selection algorithms—Selectivity Ratio (SR), Backward Variable Elimination (BVE), and Genetic Algorithm (GA)—combined with PLS, which allowed spectral reduction, noise elimination, and improved prediction performance. These wavelength selection methods contribute to diversifying data preprocessing approaches prior to PLS modeling.

The research results have been published in international SCIE-listed journals as well as reputable national scientific journals.

Supervisory Committee

PhD candidate

Assoc. Prof Tran Thuc Binh

Nguyen Duy Luu