

UNIVERSIDAD DE BURGOS

ESCUELA DE DOCTORADO

TESIS DOCTORALES

- TÍTULO:** ENSURING ANALYTICAL QUALITY IN REGULATED MARKETS THROUGH MULTIVARIATE, MULTIWAY AND DoE STRATEGIES
- AUTORA:** OCA CASADO, MARÍA LETICIA.
- PROGRAMA DE DOCTORADO:** QUÍMICA AVANZADA
- ACTO Y FECHA DE LECTURA:** EL ACTO PÚBLICO DE DEFENSA DE TESIS SE DESARROLLARÁ EL DÍA 18 DE MARZO DE 2022, A LAS 12:00 HORAS, EN EL SALÓN DE ACTOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UNIVERSIDAD DE BURGOS Y DE MANERA TELEMÁTICA A TRAVÉS DE MICROSOFT TEAMS.
- DIRECTORES:** D. LUIS ANTONIO SARABIA PEINADOR
DÑA. MARÍA CRUZ ORTIZ FERNÁNDEZ
- TRIBUNAL:** D. JORDI COELLO BONILLA
DÑA. MARÍA SAGRARIO SÁNCHEZ PASTOR
DÑA. MARÍA DEL SOL VEGA ALEGRE
D. JOSÉ MANUEL AMIGO
D. JUAN ANTONIO FERNÁNDEZ PIERNA
- RESUMEN:** Al abordar un problema de determinación analítica, han de tenerse en cuenta tanto aspectos fisicoquímicos como características instrumentales de cara a desarrollar un procedimiento de análisis válido. Estas variables no son realmente independientes unas de otras: una estrategia multivariante donde la correlación y la covarianza juegan un papel esencial refuerza el camino al éxito, como evidencia esta tesis doctoral. Herramientas quimiométricas multivariantes como la regresión PLS, la estimación de la capacidad de detección multivariante, las funciones de deseabilidad y el diseño de experimentos, junto con técnicas multivía como las descomposiciones PARAFAC y PARAFAC2 demuestran a lo largo de esta tesis su idoneidad para aumentar la exactitud, sensibilidad, especificidad y robustez de procedimientos multiresiduo basados en espectroscopía o en cromatografía acoplada a espectrometría de masas destinados a la determinación de la composición de alimentos (Queso Zamorano) y la detección de distintas familias químicas (tranquilizantes, bisfenoles y plastificantes) en alimentos (carne, productos lácteos mediante simulantes alimentarios) y en productos en contacto con alimentos (vajilla, vasos y tetinas infantiles). En concreto, la especificidad requerida para todo procedimiento analítico diseñado para sustancias altamente reguladas es perfectamente asegurada mediante el uso de descomposiciones PARAFAC. Dicha especificidad, basada en la denominada ventaja de segundo orden que presenta, por ejemplo, la cromatografía acoplada a espectrometría de

masas, puede no alcanzarse si se siguen metodologías tradicionales cuando no es posible conseguir una resolución de picos completa o existen interferentes en la muestra.

Por otro lado, esta tesis revela la importancia de la elección de la variable respuesta en un estudio analítico, hecho clave en el proceso de desarrollo de todo Espacio de Diseño Analítico, en consonancia con las recientes aproximaciones de autoridades regulatorias y de organismos internacionales para trasladar el paradigma de la Calidad por el Diseño (Quality by Design, QbD) al laboratorio

PALABRAS CLAVE: Calidad, Identificación inequívoca, Cromatografía–Espectrometría de masas, Análisis multivía, Diseño de experimentos.

KEYWORDS: Quality, Unequivocal identification, Chromatography–Mass spectrometry, Multiway analysis, Design of experiments.