



Application Note AN-NIR-068

# Control de calidad de los isocianatos: determinación rápida, sin productos químicos, del contenido de isocianatos con NIRS

## Determinación rápida y sin productos químicos del contenido de isocianato con NIRS

La determinación de los isocianatos (ASTM D7252) es un procedimiento sumamente difícil debido a la reactividad de estas especies orgánicas con la humedad atmosférica, así como su toxicidad. Además, el análisis por HPLC que se utiliza

normalmente para este tipo de análisis implica pasos de preparación de la muestra y uso de productos químicos, y cada medida tarda hasta 20 minutos en completarse.

Esta nota de aplicación demuestra que el XDS

RapidLiquid Analyzer que funciona en la región espectral visible e infrarroja cercana (Vis-NIR) proporciona una **solución rápida y libre de químicos** para la determinación del contenido de isocianato.

## EQUIPO EXPERIMENTAL

Las muestras de isocianato se midieron con un XDS RapidLiquid Analyzer en modo de transmisión en todo el rango de longitud de onda (400–2500 nm). La adquisición del espectro reproducible se logró mediante el control de temperatura integrado (a 30 °C) del XDS RapidLiquid Analyzer. Por conveniencia, se utilizaron viales desechables con una longitud de paso de 8 mm, lo que hizo innecesaria la limpieza de los recipientes de muestra. El paquete de software Metrohm Vision Air Complete se utilizó para toda la adquisición de datos y el desarrollo del modelo de predicción.

Con **no se necesita preparación de muestras**, la espectroscopia Vis-NIR permite el análisis de isocianatos en **menos de un minuto**.



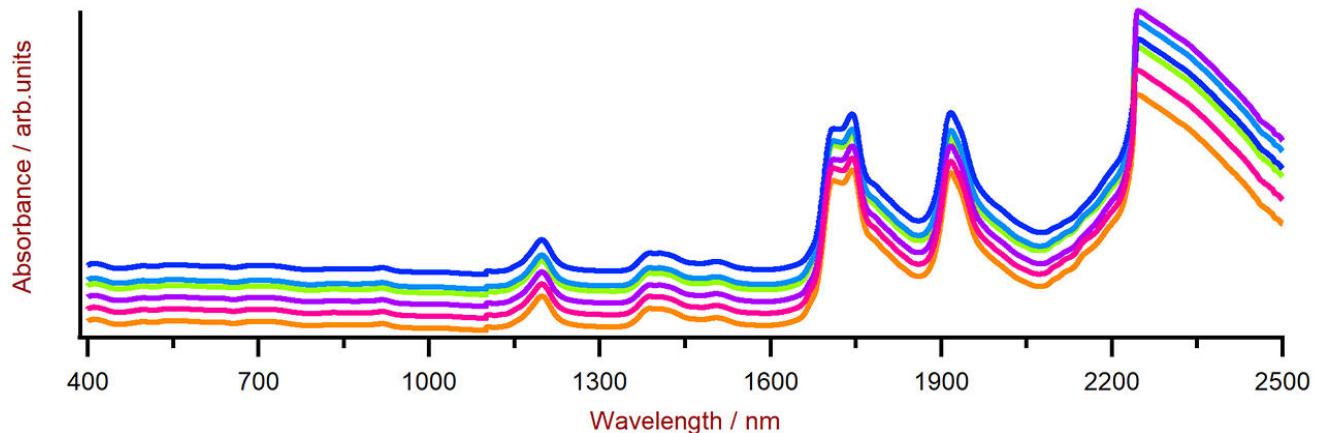
**Figura 1.** XDS RapidLiquid Analyzer y una muestra de isocianato presente en el vial desechable de 8 mm.

**Tabla 1.** Resumen de equipos de hardware y software.

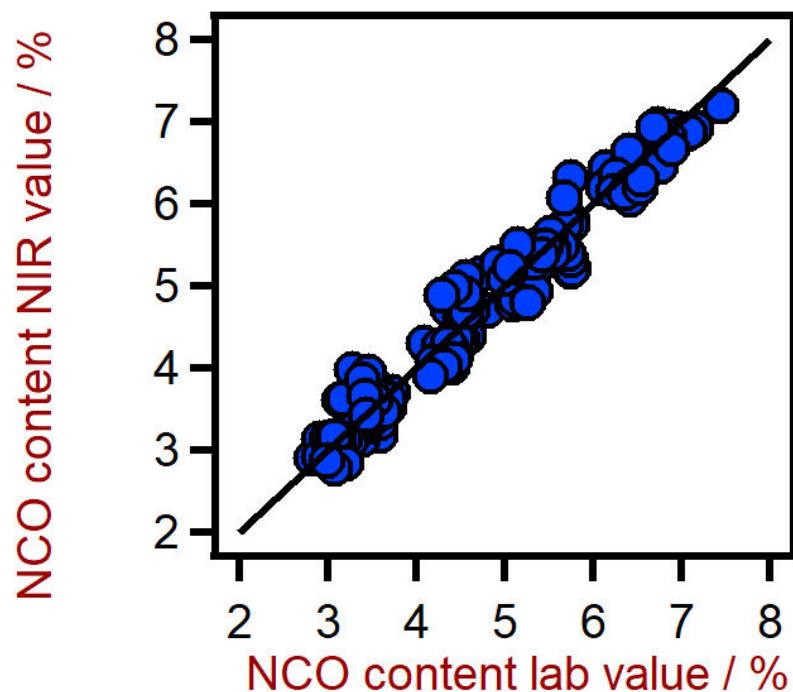
Equipo	Número de metrohmios
Analizador de líquidos XDS Rapid	2.921.1410
Viales desechables, 8 mm de diámetro, transmisión	6.7402.000
Vision Air 2.0 completo	6.6072.208

Los espectros Vis-NIR obtenidos (**Figura 2**) se utilizaron para crear modelos de predicción para la cuantificación del contenido de isocianato. La calidad de los modelos de predicción se evaluó mediante diagramas de correlación, que muestran la relación

entre la predicción de Vis-NIR y los valores del método principal. Las respectivas cifras de mérito (FOM) muestran la precisión esperada de una predicción durante el análisis de rutina.



**Figure 2.** Selección de espectros Vis-NIR de isocianato obtenidos con un analizador XDS RapidLiquid y viales desechables de 8 mm. Por razones de visualización, se aplicó una compensación de espectros.



**Figure 3.** Diagrama de correlación para la predicción del contenido de isocianato (NCO) utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer. El valor de laboratorio del contenido de isocianato se evaluó mediante titulación.

**Tabla 2.** Cifras de mérito para la predicción del isocianato (NCO) contenido utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer.

Figuras de merito	Valor
$R^2$	0,968
Error estándar de calibración	0,24
Error estándar de validación cruzada	0,26

## CONCLUSIÓN

Este estudio demuestra la viabilidad de la espectroscopía NIR para el análisis de isocianatos. En comparación con los métodos químicos húmedos (Tabla 3), el tiempo hasta el resultado es una gran

ventaja de la espectroscopía NIR, ya que el contenido de isocianato se determina **sin necesidad de preparación de muestras en menos de un minuto**.

**Tabla 3.** Visión general del tiempo hasta el resultado para los diferentes parámetros

Parámetro	Método	tiempo de resultado
isocianato	HPLC	20 min (preparación) + 20 min (HPLC)

## CONTACT

Metrohm Hispania  
Calle Aguacate 15  
28044 Madrid

mh@metrohm.es

## EQUIPO EXPERIMENTAL



### NIRS XDS RapidLiquid Analyzer

Análisis rápidos y precisos de líquidos y suspensiones de toda clase.

El NIRS XDS RapidLiquid Analyzer permite análisis rápidos y precisos de sustancias y fórmulas líquidas. Los resultados de medida precisos se obtienen pulsando un botón, lo que hace que el NIRS XDS RapidLiquid Analyzer se convierta también en una solución tan sencilla como fiable para el control de calidad en el laboratorio y el proceso. Las muestras se presentan en cubetas de cuarzo reutilizables o viales de vidrio desechables; una cámara de muestras con temperatura regulada proporciona unas condiciones de análisis reproducibles y por consiguiente unos resultados de medición exactos.



### Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - Software de espectroscopía universal.

Vision Air Complete es una solución de software moderna y fácil de usar para su empleo en entornos regulados.

Las ventajas de Vision Air son las siguientes:

- Aplicaciones de software individuales con interfaces de usuario personalizadas para garantizar un manejo intuitivo y fácil
- Fácil creación y mantenimiento de procedimientos operativos
- Base de datos SQL para una gestión de datos segura y sencilla

La versión Vision Air Complete (66072208) incluye todas las aplicaciones para el aseguramiento de la calidad mediante la espectroscopía Vis-NIR:

- Aplicación para la gestión de datos y aparatos
- Aplicación para el desarrollo de métodos
- Aplicación para análisis rutinarios

Más soluciones Vision Air Complete:

- 66072207 (Vision Air Network Complete)
- 66072209 (Vision Air Pharma Complete)
- 66072210 (Vision Air Pharma Network Complete)