



Application Note AN-NIR-076

# Alcoholisis de alcohol polivinílico: control de calidad de polímeros mejorado con espectroscopía NIR

## Control de calidad de polímero mejorado con espectroscopia NIR

El alcohol polivinílico (PVA) se usa en una variedad de productos médicos (por ejemplo, gotas para los ojos) debido a su baja toxicidad, baja adhesión de proteínas y propiedades de formación de películas. El PVA es un polímero lineal que forma copolímeros de acetato de vinilo y alcohol vinílico. El grado de alcoholisis es el porcentaje de funciones hidroxilo con respecto al total de funciones accesibles en la molécula. Es un índice importante para la solubilidad en agua, la viscosidad y la adhesión del producto.

La determinación de alcoholisis convencional requiere que cada muestra se pese, disuelva, caliente, enfríe y titule. Este procedimiento puede durar hasta seis horas por muestra. En comparación con el método primario, el análisis con espectroscopía del infrarrojo cercano (NIRS) solo precisa un minuto. La siguiente Application Note describe la determinación del grado de alcoholisis mediante NIRS. Aparte de la alcoholisis, se pueden establecer métodos de cuantificación adicionales para acetato de sodio y volátiles.

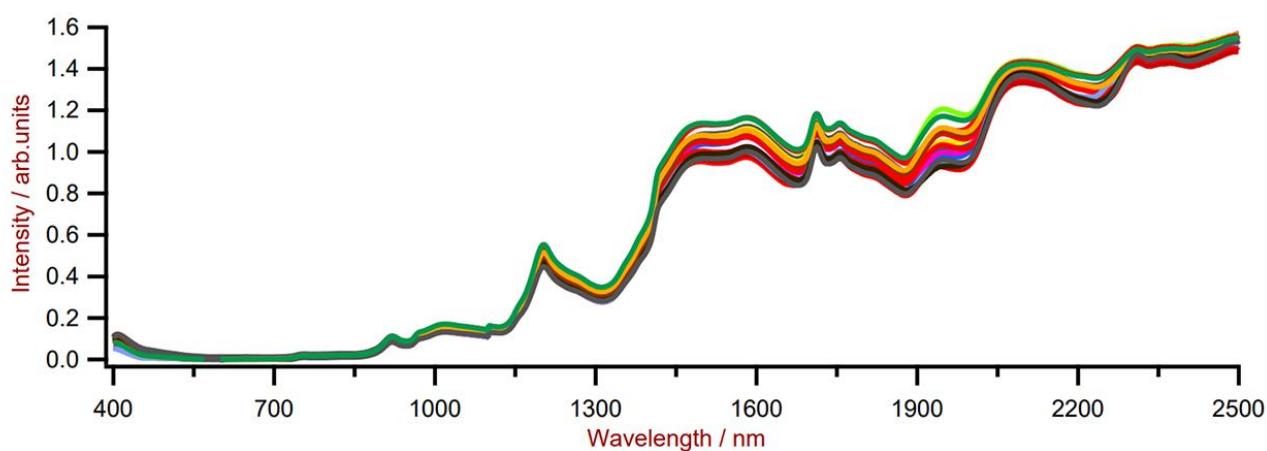
## CONDICIONES EXPERIMENTALES

Se recopilaron 54 espectros de 18 lotes de muestras diferentes utilizando un analizador de sólidos Metrohm DS2500 en combinación con el software de espectroscopia Vision Air Complete. Para superar la falta de homogeneidad de la muestra, la medición se realizó con una copa de muestra grande en rotación. Los valores de referencia se obtuvieron por titulación. La detección de valores atípicos se realizó en espectros preprocesados ( $2^{\text{Dakota del Norte}}$  derivada) usando una distancia máxima en el algoritmo del espacio de longitud de onda. El modelo de predicción NIRS se creó con la configuración descrita en la siguiente tabla y se validó mediante validación cruzada.



**Figure 1.** Se utilizó el analizador de sólidos DS2500 para recopilar los espectros del polímero de PVA.

Preprocesamiento	Algoritmo	Tipo de validación
$2^{\text{Dakota del Norte}}$ derivado	por favor	Validación cruzada



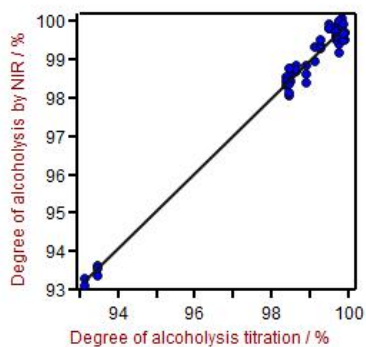
**Figure 2.** Selección de espectros de polímeros con diferentes grados de alcoholisis.

## RESULTADO Y CONCLUSIÓN

El gráfico de correlación obtenido muestra una alta correlación ( $R^2 = 0,98$ ) entre el grado de alcoholisis predicho por NIRS y el método de laboratorio

primario. Una relación cercana entre SEC y SECV (< 10%), demuestra que el método es válido.

# Factores	$R^2$	SEGUNDO	SECV
------------	-------	---------	------



**Figure 3.** Gráfico de correlación para el grado de alcoholisis predicho por NIRS vs. método de laboratorio.

## CONTACT

Metrohm Hispania  
Calle Aguacate 15  
28044 Madrid

[mh@metrohm.es](mailto:mh@metrohm.es)

## CONFIGURACIÓN



### DS2500 Solid Analyzer

Sólida espectroscopía del infrarrojo cercano para control de calidad en laboratorio y entorno de producción.

El DS2500 Analyzer es la solución probada y flexible para los análisis rutinarios de sólidos, cremas y, opcionalmente, también líquidos a lo largo de toda la cadena de producción. Su diseño robusto hace que el DS2500 Analyzer sea resistente al polvo, la humedad, las vibraciones y los cambios de temperatura, lo que hace que sea especialmente adecuado para el uso en entornos de producción muy difíciles.

El DS2500 cubre toda la gama espectral de 400 a 2500 nm y proporciona en menos de un minuto resultados precisos y reproducibles. El DS2500 Analyzer cumple los requisitos de la industria farmacéutica y gracias a su manejo sencillo ayuda al usuario a realizar las tareas rutinarias diarias.

Gracias a los accesorios perfectamente adaptados al aparato se logran los mejores resultados posibles incluso con los tipos de muestra más difíciles, por ejemplo, la materia sólida de grano grueso como los gránulos o las muestras semilíquidas como las cremas. Al medir la materia sólida, se puede aumentar la productividad con el uso de la MultiSample Cup, que permite realizar medidas automatizadas en serie de hasta 9 muestras.



### 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)



#### Recipiente de muestras DS2500, grande

Recipiente de muestras grande para el registro espectral de polvos y granulados en reflexión en diferentes puntos de muestra por medio del NIRS DS2500 Analyzer.