



Application Note AN-NIR-095

Control de calidad de desinfectantes para manos

Determinación multiparamétrica en un minuto

Los desinfectantes de manos más efectivos contienen entre 62 y 95 % de alcohol. Los alcoholes son efectivos contra la mayoría de las formas vegetativas de bacterias, hongos y virus envueltos, pero no son efectivos contra las esporas bacterianas. La adición de peróxido de hidrógeno (3%) al producto puede solucionar esto, pero debido a su naturaleza corrosiva debe ser manejado con precaución durante la producción. Además, el agua y pequeñas cantidades de emoliente (por ejemplo, glicerol) son añadidos para proteger la piel. Dependiendo del porcentaje exacto de estos constituyentes, el desinfectante de manos es

se encuentra en forma de líquido o gel. La determinación de las concentraciones de estos reactivos se realiza normalmente con cromatografía de gases (para glicerol y etanol), valoración de Karl Fischer (para agua) y valoración redox (para H_2O_2). La desventaja es que se necesitan dos métodos diferentes que consumen mucho tiempo y requieren reactivos químicos. La espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS), por otro lado, permite la **simultáneo rápido y fiable cuantificación** de etanol, glicerol, peróxido de hidrógeno y contenido de agua en formulaciones de desinfectantes para manos.

EQUIPO EXPERIMENTAL

Se recolectaron un total de 98 muestras de gel desinfectante para manos con diferentes concentraciones de glicerol (0,5–3 p/p %), etanol (70–85 p/p %) y agua (20–22 p/p %) para crear un modelo de predicción para la cuantificación. Se midió un total de 91 muestras de desinfectante líquido para manos utilizado para toallitas desinfectantes con diferentes concentraciones de etanol (70–95 p/p %), agua (2–40 p/p %) y peróxido de hidrógeno (0–4 p/p). w %). Todas las muestras se midieron con un analizador de líquidos DS2500 en modo de transmisión (400–2500 nm). La adquisición del espectro reproducible se logró utilizando el control de temperatura integrado a 40 °C: por comodidad, se utilizaron viales desechables con una longitud de paso de 8 mm, lo que hizo innecesaria la limpieza de los recipientes de muestras. El paquete de software Metrohm Vision Air Complete se utilizó para toda la adquisición de datos y el desarrollo del modelo de predicción.



Figure 1. Analizador de líquidos DS2500 y una muestra en un vial desechable.

Tabla 1. Descripción general del equipo de hardware y software

Equipo	Número de metrohmios
Analizador de líquidos DS2500	2.929.0010
DS2500 Soporte viales de 8 mm	6.7492.020
Viales desechables, 8 mm	6.7402.000
Vision Air 2.0 completo	6.6072.208

RESULTADOS

Todos los espectros Vis-NIR medidos (**Figura 2**) se utilizaron para crear un modelo de predicción para la cuantificación de los parámetros clave de calidad de las formulaciones de gel y desinfectante líquido. La calidad del modelo de predicción. se evaluó utilizando

diagramas de correlación, que muestran una correlación muy alta entre la predicción de Vis-NIR y los valores de referencia. Las respectivas cifras de mérito (FOM) muestran la precisión esperada de una predicción durante el análisis de rutina.

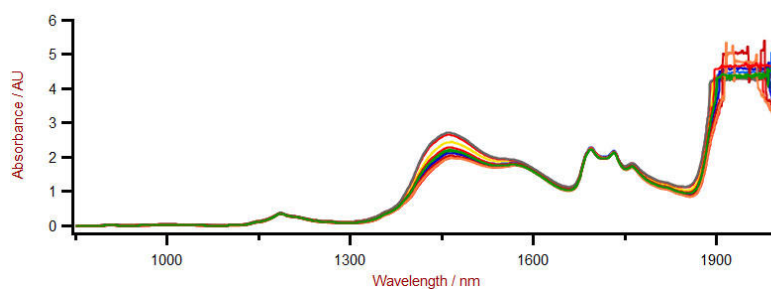


Figure 2. Muestras de gel desinfectante para manos Vis-NIR Spectra analizadas en un analizador de líquidos DS2500.

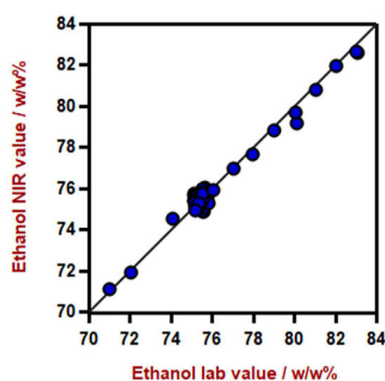


Figure 3. Diagrama de correlación para la predicción del contenido de etanol en gel desinfectante para manos utilizando un analizador de líquidos DS2500. El valor de laboratorio se evaluó mediante cromatografía de gases.

Tabla 2. Cifras de mérito para la predicción del contenido de etanol en gel desinfectante para manos utilizando un analizador de líquidos DS2500.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,9832
Error estándar de calibración	0,33 p/p%
Error estándar de validación cruzada	0,37 p/p%

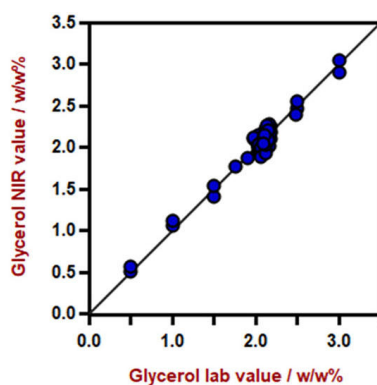


Figure 4. Diagrama de correlación para la predicción del contenido de glicerol en gel desinfectante para manos utilizando un analizador de líquidos DS2500. El valor de laboratorio se evaluó por cromatografía de gases.

Tabla 3. Cifras de mérito para la predicción del contenido de glicerol en gel desinfectante para manos utilizando un analizador de líquidos DS2500.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,9632
Error estándar de calibración	0,08 p/p%
Error estándar de validación cruzada	0,11 p/p%

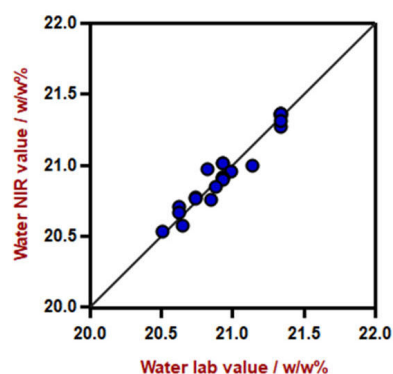


Figure 5. Diagrama de correlación para la predicción del contenido de agua en gel desinfectante para manos utilizando un analizador de líquidos DS2500. El valor de laboratorio se evaluó mediante titulación de Karl Fischer.

Tabla 4. Cifras de mérito para la predicción del contenido de agua en gel desinfectante para manos utilizando un analizador de líquidos DS2500.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,941
Error estándar de calibración	0,07% p/p
Error estándar de validación cruzada	0,09 p/p%

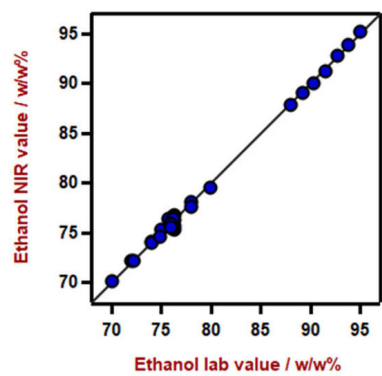


Figure 6. Diagrama de correlación para la predicción del contenido de etanol en toallitas desinfectantes para manos utilizando un analizador de líquidos DS2500. El valor de laboratorio se evaluó por cromatografía de gases.

Tabla 5. Cifras de mérito para la predicción del contenido de etanol en toallitas desinfectantes para manos utilizando un analizador de líquidos DS2500.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,9964
Error estándar de calibración	0,36 p/p%
Error estándar de validación cruzada	0,36 p/p%

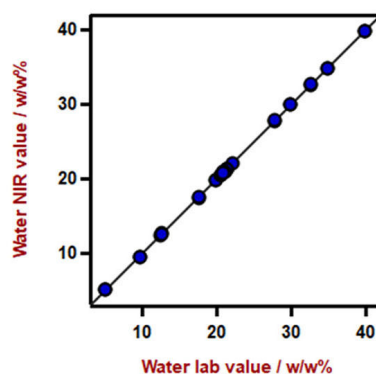


Figure 7. Diagrama de correlación para la predicción del contenido de agua en toallitas desinfectantes para manos utilizando un analizador de líquidos DS2500. El valor de laboratorio se evaluó mediante titulación de Karl Fischer.

Tabla 6. Cifras de mérito para la predicción del contenido de agua en toallitas desinfectantes para manos utilizando un analizador de líquidos DS2500.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,9999
Error estándar de calibración	0,12 p/p%
Error estándar de validación cruzada	0,18 p/p%

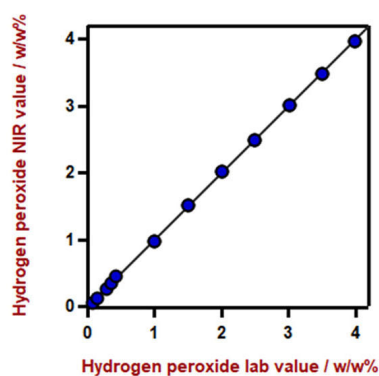


Figure 8. Diagrama de correlación para la predicción del contenido de peróxido de hidrógeno en toallitas desinfectantes para manos utilizando un analizador de líquidos DS2500. El valor de laboratorio se evaluó por titulación de permanganato.

Tabla 7. Cifras de mérito para la predicción del contenido de peróxido de hidrógeno en toallitas desinfectantes para manos utilizando un analizador de líquidos DS2500.

Figuras de mérito	Valor
R^2	0,9986
Error estándar de calibración	0,05 p/p%
Error estándar de validación cruzada	0,06 p/p%

CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación demuestra la viabilidad de determinar múltiples parámetros clave del control de calidad de productos desinfectantes para manos líquidos y de tipo gel con espectroscopia NIR. La

espectroscopia Vis-NIR permite una alternativa rápida a los métodos primarios con alta precisión y, por lo tanto, representa una alternativa adecuada al estándar métodos de determinación.

Tabla 8. Visión general del tiempo hasta el resultado para los diferentes parámetros

Parámetro	método	tiempo de resultado
Etanol	CG	5 minutos (preparación) + 5 minutos (GC)
Glicerol	CG	5 minutos (preparación) + 5 minutos (GC)
Agua	Valoración Karl Fischer	5 minutos
Peróxido de hidrógeno	Titulación de permanganato	~5 minutos

CONTACT

Metrohm México
Calle. Xicoténcatl #181, Col.
Del Carmen, Alcaldía
Coyoacán.
04100. Ciudad de México
México

info@metrohm.mx



DS2500 Liquid Analyzer

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

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

El DS2500 Liquid Analyzer cubre todo el rango espectral de 400 a 2500 nm, calienta las muestras hasta 80°C y es compatible con diferentes viales desechables y cubetas de cuarzo. El DS2500 Liquid Analyzer puede, por tanto, adaptarse a sus necesidades individuales de muestras y le ayuda a obtener resultados precisos y reproducibles en menos de un minuto. El reconocimiento integrado del portamuestras y el software intuitivo Vision Air garantizan además un funcionamiento fácil y seguro para el usuario.

En el caso de cantidades de muestra más grandes, la productividad se puede aumentar considerablemente utilizando una celda de flujo continuo en combinación con un robot de muestras Metrohm.



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)



DS2500 Soporte para viales desechables de 8 mm

Soporte inteligente para viales desechables de vidrio de 8 mm de diámetro