



Application Note AN-NIR-087

Ethanolgehalt in Händedesinfektionsmitteln

Schnelle und reagenzienfreie Bestimmung des Ethanolgehalts

Im Jahr 2020 stieg die Nachfrage nach Händedesinfektionsmitteln aufgrund der COVID-19-Pandemie sprunghaft an. Viele Unternehmen schalteten einen Gang zurück und rationalisierten ihre Abläufe, um Händedesinfektionsmittel in großen Mengen herzustellen. Wie bei jedem Produktherstellungsprozess sorgt eine genaue Formulierung für gute Qualität und minimiert den Abfall. Der Alkoholgehalt in Händedesinfektionsmitteln muss mehr als 60 % (v/v) betragen, um ein wirksames Antiseptikum zu sein. Die üblicherweise in diesen Lösungen verwendeten

Reagenzien sind Wasser, Alkohol (in der Regel Ethanol oder Isopropanol), geringe Mengen eines Weichmachers (z. B. Glycerin) und ein Oxidationsmittel (z. B. Wasserstoffperoxid) zur Minimierung der mikrobiellen Kontamination. Eine sichere und schnelle Methode zur Überwachung des Ethanolgehalts in diesen Desinfektionslösungen ist die **reagenzienfreie** Nahinfrarotspektroskopie, die in **wenigen Sekunden zuverlässige Ergebnisse** liefert und schnell anzeigt, wann Anpassungen der Rezeptur erforderlich sind.

EXPERIMENTELLE GERÄTE

Gemische von Ethanol/Wasser-Standards mit einem Ethanolgehalt von 58 % bis 82 % (v/v) wurden im Transmissionsmodus mit einem DS2500 Liquid Analyzer über den gesamten Wellenlängenbereich (400-2500 nm) gemessen. Eine reproduzierbare Spektrenaufnahme wurde durch die eingebaute Temperaturkontrolle bei 40 °C erreicht. Der Einfachheit halber wurden Einwegfläschchen mit einer Schichtdicke von 8 mm verwendet, was die Reinigung der Probengefäße überflüssig machte. Das Metrohm-Softwarepaket Vision Air Complete wurde für die gesamte Datenerfassung und die Entwicklung von Vorhersagemodellen verwendet.



Abbildung 1. DS2500 Liquid Analyzer und eine in ein Einwegfläschchen gefüllte Probe.

Tabelle 1. Übersicht über die Hardware- und Softwareausstattung

Ausrüstung	Metrohm-Nummer
DS2500 Liquid Analyzer	2.929.0010
DS2500 Halter für 8-mm-Fläschchen	6.7492.020
Einwegfläschchen, 8 mm	6.7402.000
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

ERGEBNISSE

Alle 13 gemessenen Vis-NIR-Spektren (**Abbildung 2**) wurden verwendet, um ein Vorhersagemodell für die Quantifizierung des Ethanolgehalts zu erstellen. Die Qualität der Vorhersagemodelle wurde anhand von Korrelationsdiagrammen bewertet, die eine sehr hohe

Korrelation zwischen der VisNIR-Vorhersage und den Werten der Primärmethode zeigen. Die jeweiligen Gütezahlen (FOM) zeigen die erwartete Genauigkeit einer Vorhersage während der Routineanalyse.

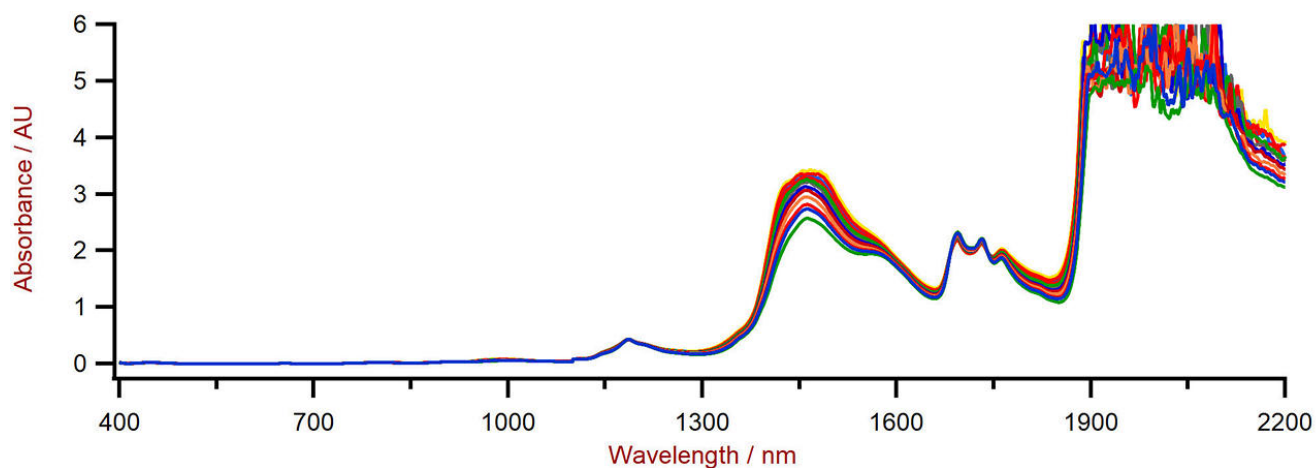


Abbildung 2. Vis-NIR-Spektren von Handdesinfektionsmitteln mit unterschiedlichem Ethanolgehalt, gemessen mit einem DS2500 Liquid Analyzer.

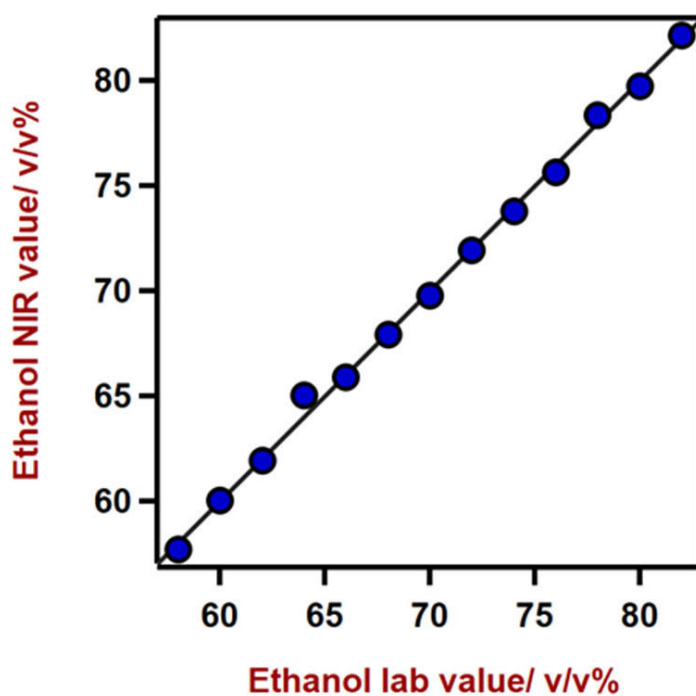


Abbildung 3. Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Leistungszahlen für die Vorhersage des Ethanolgehalts in Handdesinfektionsmitteln unter Verwendung eines DS2500 Flüssigkeitsanalysators.

Tabelle 2. Leistungszahlen für die Vorhersage des Ethanolgehalts in Handdesinfektionsmitteln unter Verwendung eines DS2500 Liquid Analyzers.

Leistungsmerkmale	Wert
R^2	0.9977
Standardfehler der Kalibrierung	0,41 v/v %
Standardfehler der Kreuzvalidierung	0,56 v/v %

FAZIT

Diese Application Note demonstriert die Machbarkeit des DS2500 Liquid Analyzers für die Bestimmung von Ethanol in Handdesinfektionsmitteln. Die Vis-NIR-

Spektroskopie ermöglicht eine schnelle Bestimmung mit hoher Genauigkeit und stellt daher eine geeignete Alternative zur Standardmethode dar.

Tabelle 3. Zeit bis zum Ergebnis für die Bestimmung des Ethanolgehalts in Händedesinfektionsmitteln mittels Gaschromatographie.

Parameter	Methode	Zeit bis zum Ergebnis und Workflow
Ethanolgehalt	GC	5 Min. (Vorbereitung) + 5 Min. (GC)

CONTACT

Metrohm Deutschland
In den Birken 3
70794 Filderstadt

info@metrohm.de



DS2500 Liquid Analyzer

Robuste Nahinfrarotspektroskopie für die Qualitätskontrolle im Labor sowie im Produktionsumfeld.

Der DS2500 Liquid Analyzer ist die bewährte, flexible Lösung für die Routineanalytik von Flüssigkeiten entlang der gesamten Produktionskette. Das robuste Design macht den DS2500 Liquid Analyzer unempfindlich gegen Staub, Feuchtigkeit, und Vibrationen und damit hervorragend geeignet für den Einsatz im rauen Produktionsumfeld.

Der DS2500 Liquid Analyzer deckt den gesamten Spektralbereich von 400 bis 2500 nm ab, heizt Proben bis auf 80°C hoch und ist kompatibel mit verschiedenen Einwegvials und Quartzküvetten. Der somit auf Ihre individuellen Probenanforderungen anpassbare DS2500 Liquid Analyzer unterstützt Sie genaue und reproduzierbare Ergebnisse in weniger als einer Minute zu erhalten. Mit Hilfe der integrierten Probenhaltererkennung und der selbsterklärenden Vision Air Software wird ausserdem eine einfache und sichere Bedienung durch den Anwender gewährleistet.

Im Falle grösserer Probenmengen kann die Produktivität durch den Einsatz einer Durchflusszelle in Kombination mit einem Metrohm Probenroboter erheblich gesteigert werden.



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - Universelle Spektroskopie Software.

Vision Air Complete ist eine moderne und einfach zu bedienende Softwarelösung für den Einsatz im regulierten Umfeld.

Die Vorteile von Vision Air im Überblick:

- Individuelle Softwareanwendungen mit angepassten Nutzeroberflächen gewährleisten eine intuitive und einfache Bedienung
- Einfache Erstellung und Wartung von Arbeitsvorschriften
- SQL Datenbank für ein sicheres und einfaches Datenmanagement

Die Version Vision Air Complete (66072208) beinhaltet alle Anwendungen für die Qualitätssicherung mittels Vis-NIR Spektroskopie:

- Anwendung für das Instrumenten- und Datenmanagement
- Anwendung für die Methodenentwicklung
- Anwendung für die Routineanalyse

Weitere Vision Air Complete Lösungen:

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



DS2500 Halter für 8 mm Einwegvials

Intelligenter Halter für die Einwegvials aus Glas mit 8 mm Durchmesser