

消毒剤中のアルコール濃度の分析

ラボでも現場でもすぐに結果が得られる Agilent FTIR



1 分以内に合否結果が判明

アルコールの定量分析は、一般的な FTIR 測定の 1 つです。Agilent FTIR なら、標準溶液の測定とルーチン分析メソッドの作成に専門知識はあまり必要なく、作業が 15 分程で完了します。サンプルの測定から色分けによる正確な合格/不合格の結果がサンプルあたり 1 分以内で判定可能です。しかも、場所を選ばずにラボでも現場でも分析できます。

アルコールベースの消毒剤に推奨される配合

アルコールベースの消毒剤は、新型コロナウイルス感染症（COVID-19）の世界的大流行の原因である SARS-CoV-2 などのウイルスの感染予防に推奨されています。この世界的大流行に起因する需要の拡大を受け、米国 FDA は、特定の事業体にアルコールベースの消毒剤調合を許可する暫定方針を示しました (1)。米国疾病予防管理センター（CDC）は、アルコールベースの消毒剤を有効なものとするためには少なくとも 60 % のアルコールを含有する必要があると勧告しています (2)。表 1 に示すように、世界保健機関（WHO）も 2 種類の配合 (3) を推奨しています。

表 1. WHO が推奨するアルコールベースの消毒剤の配合。以下の用量の残りは、滅菌精製水または一度沸騰させた冷水で補います。

配合 1 - エタノールベース	配合 2 - イソプロピルアルコールベース
エタノール 80 % (v/v)	イソプロピルアルコール 75 % (v/v)
過酸化水素 0.125 % (v/v)	過酸化水素 0.125 % (v/v)
グリセロール 1.45 % (v/v)	グリセロール 1.45 % (v/v)

消毒剤のアルコール濃度の要件を確実に満たすことは、メーカーにとって非常に重要です。不正な希釈や異物混入についても、出荷時に必ず再試験を実施する必要があります。

FTIR 分光分析は、消毒用アルコール製品のアルコール濃度の測定と識別を迅速かつ確実に実行できる手法です。ここでは、Agilent Cary 630 FTIR 分光光度計を用いてアルコール消毒剤中のエタノールおよびイソプロピルアルコールを高速かつ正確に定量する方法の概要を説明します。

コンパクトな Cary 630 FTIR を使用することで、消毒剤中のアルコールの高速かつ正確で信頼性の高い定量分析が可能になるだけでなく、未知サンプル中のアルコールの種類も識別できるようになります。

消毒剤の QC を出荷時に現場で実施する場合は、Agilent 4500 ポータブル FTIR が、同じ分析手法に基づく柔軟で携帯性に優れたソリューションとなります。



図 1. 高性能かつコンパクトな多目的機器 Agilent Cary 630 FTIR



図 2. バッテリー式の堅牢なポータブルアナライザ Agilent 4500 FTIR は、現場での分析に最適です。

参考文献

1. Temporary Policy for Preparation of Certain Alcohol-Based Hand Sanitizer Products During the Public Health Emergency (COVID-19), U.S. Department of Health and Human Services, Food and Drug Administration, Center for Drug Evaluation and Research, Washington D.C. June 1, 2020.
2. Centers for Disease Control and Prevention, <https://www.cdc.gov/handwashing/show-me-the-science-hand-sanitizer.html> (accessed Jun 15, 2020).
3. Guide to Local Production: WHO-recommended Handrub Formulations, World Health Organization, April 2010.

測定例

エタノール標準溶液とイソプロピルアルコール標準溶液は、目的の濃度のアルコールと、グリセロールまたは過酸化水素を混合して調製しました。この標準溶液に、Milli-Q でろ過した水を加えました。リファレンスサンプルには、アルコールベースの市販製品を用いました。2つのサンプルを 55 % と 75 % のエタノールとイソプロピルアルコールでもそれぞれ調製しました。図 3 に示すとおり、ATR アタッチメントを取り付けた Cary 630 FTIR で、FTIR スペクトルを収集しました。

アルコール型の識別

図 4 に示すように、エタノールとイソプロピルアルコールは、IR 指紋領域において明確なスペクトル差があります。エタノールはピークが 880 cm^{-1} 付近、イソプロピルアルコールは 950 cm^{-1} 付近と明確に分かれており、これを未知のサンプル中のアルコールの種類の識別に用いました。

$1000 \sim 1120\text{ cm}^{-1}$ 間の第 1 級アルコールと第 2 級アルコール見られる特徴的な C-O 伸縮バンドを利用し、ベールの法則に基づいて、この 2 つのアルコールの種類の定量分析モデルを開発しました。帯域に基づく、2 つの検量線が生成されました。いずれのアルコール型の場合も、標準溶液の測定からモデルの開発、ルーチン分析メソッドの作成までが、12 分未満で完了しました。このメソッドを実行すると、データ取り込み後すぐに濃度の最終結果を示すレポートが生成されました。このメソッドは、殺菌剤、香料、保湿剤など、より多くの成分を含む市販製品に合わせて変更することも可能です。

Cary 630 FTIR メソッドによって、アルコール濃度を非常に正確に測定できました。表 2 にまとめたデータに示すとおり、標的とするアルコール含有量 (3) の $\pm 5\%$ とする WHO のガイドラインに十分収まる結果が得られました。

表 2. Cary 630 FTIR 分光光度計で測定した、各サンプルのアルコール濃度

サンプル	算出濃度	濃度測定値
サンプル 1 (エタノール)	55 %	55.7 %
サンプル 2 (エタノール)	75 %	76.0 %
サンプル 1 (イソプロピルアルコール)	55 %	54.1 %
サンプル 2 (イソプロピルアルコール)	75 %	75.4 %
市販のサンプル (イソプロピルアルコール)	70 %*	71.8 %

*商品ラベルに示された値

Agilent MicroLab ソフトウェアを活用することで、定量結果に対して最小閾値および最大閾値を設定できます。この例では、アルコール濃度 60 % の最小閾値を設定しました。図 5 の色分け結果は、サンプル 1 のものです。サンプル 1 はエタノールを含むものの、含有率 55 % で、60 % の閾値を下回ります。

高速かつ高精度のアルコール測定

Cary 630 FTIR 機器と MicroLab ソフトウェアにより、アルコールベースの消毒剤を高速かつ簡単に定量できるワークフローが実現します。このシステムには次のような利点があります。

- サンプル中のアルコールの種類を識別
- 結果の色分けにより、アルコール濃度が極めて低いサンプルをフラグ付け
- 手早く簡単なメソッド開発が可能のため、より成分の多いサンプルに合わせて変更が可能

Cary 630 FTIR 分光光度計は、消毒剤のラボベース分析に最適ですが、同じメソッドを Agilent 4500 ポータブル FTIR 分光光度計にも適用できます。このモバイル機器は、現場でも倉庫や商品搬入口でも、その場で測定が行えます。



図 3. Cary 630 FTIR に取り付けられた ATR アクセサリー上に、希釈していない消毒剤のサンプルをセットします。Agilent MicroLab ソフトウェアには画像によるワークフローが用いられているため、洗浄やサンプリングなど、測定の各ステップに従って実行できるようになっています。

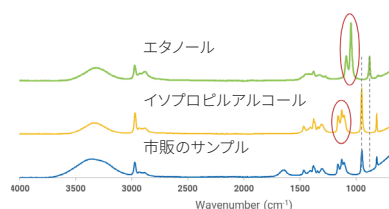


図 4. 純エタノール (緑)、イソプロピルアルコール (黄)、市販のサンプル (青) の FTIR スペクトル。破線は、エタノールサンプルとイソプロピルアルコールサンプルを識別するために用いられたピークを示しています。赤丸は、定量分析に用いられた C-O 伸縮バンドを示しています。

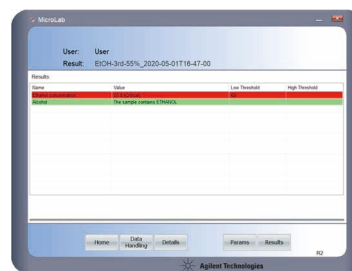
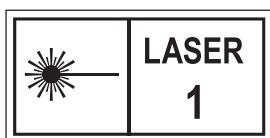


図 5. 合格/不合格の結果が 1 分未満で表示されます。QC ルーチンメソッドでアルコールの種類を自動で識別し、正確な結果が得られます。このサンプルはエタノールを含むものの、指定された合格閾値 60 % に達していません。55.8 % という結果は赤でフラグ付けされます。



ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタムコンタクトセンター

0120-477-111

email_japan@agilent.com

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、医薬品医療機器等法に基づく登録を行っていません。本文書に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2020
Printed in Japan, June 16, 2020
5994-2014JAJP
DE.6363310185