

## Espectroscopía UV asistida por análisis multivariado para la identificación de filtros UV inorgánicos nano y no-nano en protectores solares

Guerrero, Analía; Fernandez, Cintia J.; Lassalle, Verónica L.; Grünhut, Marcos

INQUISUR (UNS-CONICET), Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, Argentina

mgrunhut@uns.edu.ar

Área temática: F. Nanotecnología y salud

El uso de filtros UV inorgánicos (UVFs) basados en ZnO y TiO<sub>2</sub> ha crecido sostenidamente debido a su desempeño de amplio espectro, fotoestabilidad y adecuada tolerancia cutánea. Las nanopartículas (NPs) presentan ventajas frente a las formas micronizadas (MPs), como mayor transparencia y mejores propiedades sensoriales. Sin embargo, su clasificación como nano o no-nano tiene implicancias regulatorias directas; en la Unión Europea, el Reglamento (CE) N°1223/2009 establece requisitos específicos para filtros UV en escala nanométrica<sup>1</sup>, lo que resalta la necesidad de contar con herramientas analíticas capaces de discriminar entre ambas formas en matrices cosméticas complejas. En este sentido, técnicas no supervisadas de reconocimiento de patrones aplicadas a datos espectrométricos<sup>2</sup> puede ser una estrategia confiable y sostenible para la clasificación de muestras de distinta naturaleza.

En este trabajo se analizaron 10 filtros UV inorgánicos basados en ZnO y TiO<sub>2</sub> en su forma de MPs grado pigmento y NPs tanto desnudas como con recubrimientos lipídicos, dispersos en dos emulsiones (o/w) con tamaño de gota nanométrico (~18 nm) y micrométrico (~1 μm). El tamaño de cristalito de cada UVF fue estimado por difracción de rayos X y contrastado con la información provista por el fabricante. Se midió la absorbancia de las formulaciones entre 290 y 400 nm utilizando un espectrofotómetro UV-Vis con esfera de integración (ThermoFisher Scientific, USA). El sustrato utilizado fue cinta quirúrgica Transpore® 3M sobre placa de cuarzo liso. Los datos se analizaron mediante análisis jerárquico de clústeres (HCA)<sup>3</sup>, aplicado sobre los espectros crudos y empleando distancia de correlación con método de enlace de Ward. La calidad del agrupamiento se evaluó mediante las métricas estadísticas de índice de Rand ajustado (ARI) y de información mutua normalizada (NMI) obteniéndose valores de 0,52 y 0,75, respectivamente. Adicionalmente se empleó un criterio de coherencia química basado en el conocimiento previo del conjunto de datos (composición-tamaño). De esta manera, se logró una clasificación consistente de los UVFs según su composición y tamaño de partícula, observándose una clara separación entre filtros basados en ZnO, TiO<sub>2</sub> y sus mezclas, así como entre formas nanométricas y micronizadas. Asimismo, la clasificación no se vio afectada por la naturaleza de la emulsión base, lo que sugiere robustez del método frente a matrices de distinta naturaleza.

### REFERENCIAS

1. Sohn, M.; Wohlleben, W.; Müller, P.; Botin, D.; Schnyder, M.; Kruš, S.; Acke, r S.; Herzog, B. Nano or Non-Nano: the Key Aspect of the Measurement Method. SOFW Journal. Volume 148, Germany 2022
2. Beebe, K. R.; Pell, R. J.; & Seasholtz, M. B. (1998). *Chemometrics: A practical guide*. Wiley-Interscience.
3. Everitt, B. S.; Landau, S.; Leese, M.; & Stahl, D. (2011). *Cluster analysis (5<sup>th</sup> ed.)*. Wiley.