

Application Note AN-NIR-136

Analyse von Weichspülern und Waschmittelparfüms mittels NIR-Spektroskopie

Bestimmung von Trockensubstanz, pH-Wert und Viskosität in Sekundenschnelle

Weichspüler und Waschmittelparfüms (konzentrierte Duftstoffe) sind eine Kategorie von Körperpflege- und Waschmitteln, die Textilien nach dem Waschen weicher und geschmeidiger machen und ihnen einen angenehmen Duft verleihen. Zur Herstellung dieser Produkte ist eine Vielzahl von Rohstoffen erforderlich, und oft sind verschiedene Analysemethoden notwendig, bevor die Produktion beginnen kann. Die herkömmliche Analyse erfordert zeitaufwändige Methoden. In dieser Application Note wird beschrieben, wie Viskosität, Trockensubstanzgehalt und pH-Wert von Weichspülern und Waschparfüms mit Nahinfrarotspektroskopie gemessen werden. Die Nahinfrarotspektroskopie (NIRS) ist ein schnelles, chemiefreies Analyseverfahren zur Qualitätskontrolle von Weichspülern und Wäscheparfüms ohne Probenvorbereitung.

EXPERIMENTELLE AUSRÜSTUNG

Die Weichspüler- und Parfümproben wurden mit einem OMNIS NIR Analyzer Solid (Abbildung 1) im Transflexionsmodus (1000-2250 nm) unter Verwendung eines Reflektors mit 1 mm Spaltgröße und 28-mm-Einwegfläschchen gemessen.
Referenzwerte für die Trockensubstanz wurden durch Trocknungsverlust gemessen, und pH-Wert und Viskosität wurden mit einem pH-Meter bzw. einem Viskosimeter bestimmt.
Die OMNIS-Software wurde für die gesamte Datenerfassung und die Entwicklung von Vorhersagemodellen verwendet.



Abbildung 1. OMNIS NIR Analyzer Solid mit Umlenkgefäß und großem Reflektor

ERGEBNIS

Die erhaltenen NIR-Spektren (Abbildung 2) wurden zur Erstellung von Prognosemodellen für die Quantifizierung von Trockenmasse, pH-Wert und Viskosität verwendet. Die Qualität der Vorhersagemodelle wurde anhand von Korrelationsdiagrammen (Abbildungen 3-5) bewertet, die eine sehr hohe Korrelation zwischen der NIR-Vorhersage und den Referenzwerten zeigen. Die entsprechenden Gütezahlen (FOM) zeigen die erwartete Genauigkeit einer Vorhersage bei der Routineanalyse.

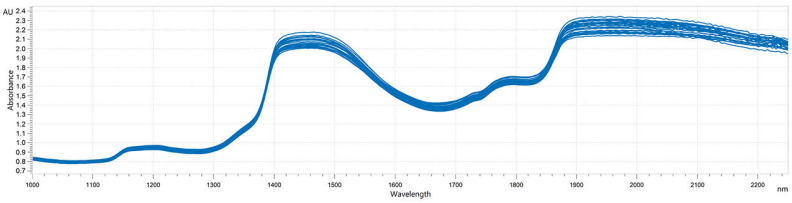


Abbildung 2. NIR-Spektren von Weichspülern und Waschmittelparfüms, analysiert mit OMNIS NIR Analyzer Solid

Ergebnis pH-Wert in Weichspülern und Waschparfüms

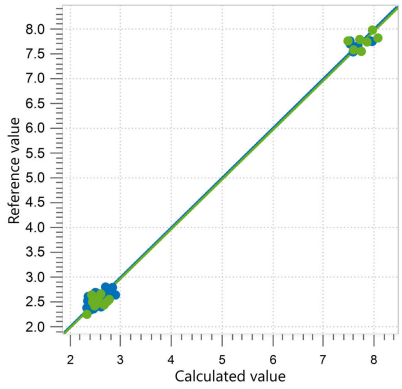


Abbildung 3. Korrelationsdiagramm und die entsprechenden Gütezahlen für die Vorhersage des pH-Werts in Weichspülern und Waschmittelparfüms .

R^2	SEC	SECV	SEP
0.997	0.11	0.14	0.15

Ergebnis Trockenmasse in Weichspülern und Waschparfüms

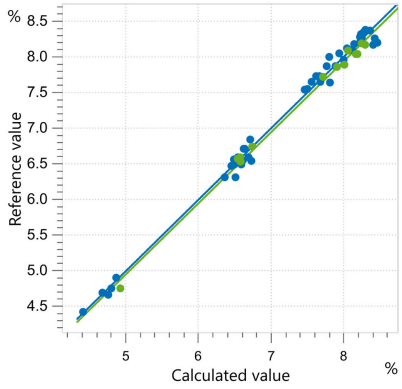


Abbildung 4. Korrelationsdiagramm und die entsprechenden Gütezahlen für die Vorhersage der Trockensubstanz in Weichspülern und Waschparfüms unter Verwendung eines OMNIS NIR Analyzer Solid.

R^2	SEC (%)	SECV (%)	SEP (%)
0.995	0.09	0.10	0.09

Ergebnis Viskosität in Weichspülern und Waschparfüms

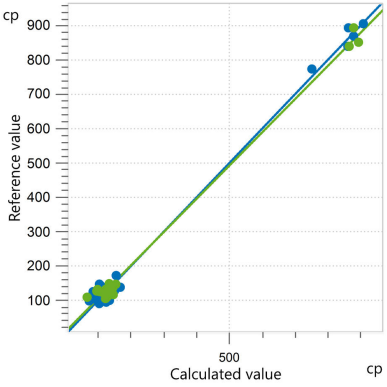


Abbildung 5. Korrelationsdiagramm und die entsprechenden Gütezahlen für die Vorhersage der Viskosität in Weichspülern und Waschparfüms.

R^2	SEC (cp)	SECV (cp)	SEP (cp)
0.994	17.16	20.25	22.18

FAZIT

Diese Application Note zeigt die Machbarkeit der Analyse von Trockensubstanz, pH-Wert und Viskosität in Waschparfüms und Weichspülern mit Nahinfrarotspektroskopie. Die Messung aller drei Qualitätsparameter kann innerhalb von Sekunden und ohne Einsatz von Chemikalien durchgeführt werden.

NIRS kann in mehreren Schritten der Produktionskette oder bei der Qualitätskontrolle des Endprodukts eingesetzt werden, was den Herstellern Zeit und Geld spart. Außerdem ist für die NIRS nur eine einzige Technologie erforderlich, im Gegensatz zu den analytischen Standardverfahren, die häufig für diese Bestimmungen eingesetzt werden (Tabelle 1).

Tabelle 1. Übersicht über die Standardmethoden zur Bestimmung verschiedener Referenzwerte in Weichspülern und Waschparfüms.

Parameter	Methode	Zeit zum Ergebnis
Trockenmasse	Verlust beim Trocknen	30 min
pH	pH-Meter	5 min
Viskosität	Viscometer	15 min (Probenvorbereitung + Messung)

CONTACT

Metrohm Inula
Shuttleworthstraße 25
1210 Wien
office@metrohm.at

KONFIGURATION



OMNIS NIR Analyzer Solid

Nahinfrarotspektrometer für feste und viskose Proben.

Der OMNIS NIR Analyzer ist die nach Schweizer Qualitätsstandards entwickelte und produzierte Nahinfrarotspektroskopie(NIRS)-Lösung für die Routineanalyse entlang der gesamten Produktionskette. Die Anwendung neuester Technologien und die Integration in die moderne OMNIS Software spiegeln sich in der Geschwindigkeit, der Bedienbarkeit und dem flexiblen Einsatz dieser NIR-Spektrometer wider.

Die Vorteile des OMNIS NIR Analyzer Solid im Überblick:

- Messungen von Feststoffen und viskosen Proben in weniger als 10 Sekunden
- Automatisierte Mehrpositionenmessungen für reproduzierbare Resultate auch bei inhomogenen Proben
- Einfache Integration in ein Automationssystem oder Verknüpfung mit weiteren Analysentechniken (Titration)
- Unterstützung zahlreicher Probengefässe



Kleiner Reflektor OMNIS NIR, 1 mm

Reflektor mit Spaltgrösse von 1 mm (optische Pfadlänge von 2 mm) für die Transflexionsmessung von Flüssigkeiten.

Passend für Einwegvials 28 mm Reflexion (6.7402.140).



Einwegvials, 28 mm, Reflexion

216 verschliesbare Einwegvials aus Glas mit einem Durchmesser von 28 mm für Analysen von Feststoffen in Reflektion. Geeignet für folgende Analyzer:

- NIRS DS2500 Analyzer
- NIRS XDS RapidContent (Solid) Analyzer
- NIRS XDS MultiVial Analyzer
- NIRS XDS Masterlab Analyzer

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

OMNIS Stand-Alone Lizenz

Ermöglicht den Stand-Alone Betrieb der OMNIS Software auf einem WindowsTM Computer.

Merkmale:

- Die Lizenz enthält bereits eine OMNIS Geräte Lizenz.
- Muss über das Metrohm Lizenzierungsportal aktiviert werden.

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

Softwarelizenz Quant Development

Softwarelizenz für die Erstellung und Bearbeitung von Quantifizierungsmodellen in einer Stand-Alone OMNIS Software Installation.