



Application Note AN-NIR-074

# Tensid in Waschmitteln mittels Vis-NIR-Spektroskopie

## Schnelle Bestimmung ohne Einsatz von Chemikalien

Flüssigwaschmittel enthalten Weichspüler, Bleichmittel, Tenside und Enzyme. Von diesen ist das Tensid der wichtigste Faktor für die Reinigungswirkung, da es die Grenzfläche zwischen polaren und unpolaren Verbindungen aufricht. Dadurch kann das Waschmittel sowohl gegen Fette als auch gegen Flecken durch Schmutz oder Getränke wirksam sein. Die Quantifizierung des Tensidgehalts erfolgt meist durch Primäranalysen (z. B. zweiphasige

potentiometrische Titration). Zu den Nachteilen gehören manuelle Probenvorbereitungsschritte wie Verdünnung und pH-Einstellung, und die Methode selbst ist zeitaufwändig. Im Gegensatz dazu ist die Vis-NIR-Spektroskopie in weniger als einer Minute ergebnisbereit und erfordert keine Probenvorbereitung oder Chemikalien für qualitativ hochwertige Daten.

## VERSUCHSDURCHFÜHRUNG

Insgesamt 37 Proben mit unterschiedlichem Tensidgehalt wurden von einem Kunden zur Verfügung gestellt. Die Vis-NIR-Spektren (**Abbildung 2**) wurden mit einem Metrohm NIRS XDS RapidLiquid Analyzer aufgenommen, der mit einer 1-mm-Quarzküvette ausgestattet ist (**Abbildung 1**). Die Proben wurden im Ist-Zustand ohne jegliche Probenvorbereitung gemessen. Die Datenerfassung und die Modellentwicklung erfolgten mit dem Softwarepaket Vision Air.



**Abbildung 1.** Der NIRS XDS RapidLiquid Analyzer mit einer 1 mm Quarzküvette, die zur Erfassung der Spektren von Tensidproben verwendet wird.

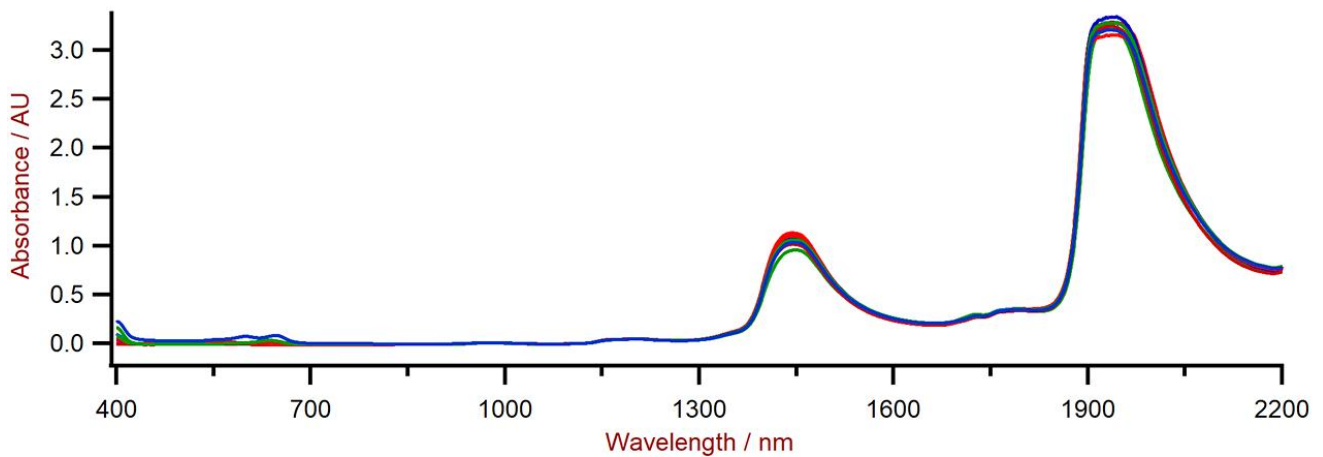
**Tabelle 1.** Übersicht über die Hardware- und Softwareausstattung.

Ausrüstung	Metrohm-Nummer
XDS RapidLiquid Analyzer	2.921.1410
NIRS 1 mm Quarzküvette	6.7401.200
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

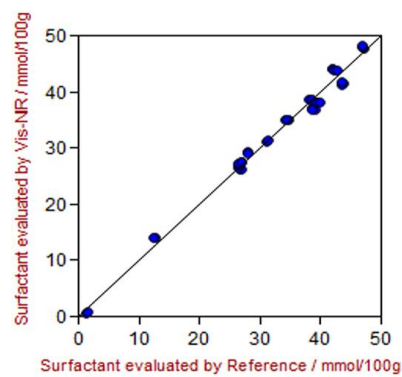
## ERGEBNISSE

Das erhaltene Diagramm (**Abbildung 3**) zeigt eine hohe Korrelation ( $r^2 = 0,97$ ) zwischen den durch NIRS vorhergesagten Werten und der Referenzmethode.

Das nahezu perfekte Verhältnis von SEC und SECV verdeutlicht die Gültigkeit des Modells.



**Abbildung 2.** Auswahl von Vis-NIR-Spektren von Flüssigwaschmitteln, die mit einem XDS RapidLiquid Analyzer und einer 1-mm-Quarzküvette aufgenommen wurden.



**Abbildung 3.** Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Leistungszahlen für die Vorhersage von Tensiden in Flüssigwaschmitteln mit einem XDS RapidLiquid Analyzer. Der Laborwert des Tensids wurde mittels HPLC ausgewertet.

**Tabelle 2.** Leistungskennzahlen für die Vorhersage des Tensidgehalts in Flüssigwaschmitteln unter Verwendung eines XDS RapidLiquid Analyzers.

Leistungsmerkmale	Wert
$R^2$	0,97
Standardfehler der Kalibrierung	2,20 mmol/100 g
Standardfehler der Kreuzvalidierung	2,38 mmol/100 g

## FAZIT

Die hier vorgestellten Ergebnisse zeigen, dass die Vis-NIR-Methode hervorragend für die schnelle Quantifizierung der Tensidkonzentration in

Detergenzien geeignet ist. Die Verwendung von Vis-NIR für diese Anwendung spart im Vergleich zu anderen Methoden 10 Minuten pro Probe (**Tabelle 3**).

**Tabelle 3.** Übersicht über die Zeit bis zum Ergebnis für die verschiedenen Parameter.

Parameter	Methode	Zeit zum Ergebnis
Tensid (anionisch)	Potentiometrische Titration	10 Min. (Zugabe von Lösungen, Rühren, pH-Anpassung, Bestimmung)

Interne Referenz: AW NIR CN-0015-102018

## CONTACT

Metrohm Deutschland  
In den Birken 3  
70794 Filderstadt

[info@metrohm.de](mailto:info@metrohm.de)



### NIRS XDS RapidLiquid Analyzer

Schnelle, präzise Analysen von Flüssigkeiten und Suspensionen aller Art.

Der NIRS XDS RapidLiquid Analyzer ermöglicht schnelle, präzise Analysen von flüssigen Rezepturen und Substanzen. Präzise Messergebnisse auf Knopfdruck machen den NIRS XDS RapidLiquid Analyzer zu einer ebenso zuverlässigen wie einfachen Lösung für die Qualitätskontrolle in Labor und Prozess. Die Proben werden in mehrfach verwendbaren Quarzküvetten oder Einwegvials aus Glas vorgelegt; eine temperierte Probenkammer sorgt für reproduzierbare Analysenbedingungen und somit für genaue Messergebnisse.



### Quarzküvette, 1 mm

Quarzglasküvette mit einem Fenster aus Quarzglas in höchster Reinheit und Homogenität. Die Küvetten haben eine Transmission von über 80% im Wellenlängenbereich von 200 nm - 2500 nm.

Kompatibel mit:

- NIRS Spacer für 12.5 mm Küvettenset (6.7403.180)
- DS2500 Halter für 1 mm Küvette (6.7492.100)
- Halter OMNIS NIR, Küvette, 1 mm (6.07401.010)



### 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)