



Application Note AN-NIR-054

Control de calidad del champú

Determinación rápida y sin productos químicos de tensioactivos en champú

La determinación del lauril éter sulfato de sodio (SLES), la cocamidopropil betaína (CABP), el óxido de cocamidopropilamina (CAW), la dietanolamina de cocamida (DEA) y el carbopol en el champú es un proceso que requiere mucho tiempo y dinero debido al uso de grandes volúmenes de productos químicos en cada análisis.

Esta nota de aplicación demuestra que el analizador de sólidos DS2500 que funciona en la región

espectral visible e infrarroja cercana (Vis-NIR) proporciona una **solución rentable y rápida** para **determinación simultánea** de laureth sulfato de sodio (SLES), cocamidopropil betaína (CABP), óxido de cocamidopropilamina (CAW), dietanolamina de cocamida (DEA) y carbopol en champú. con **no preparación de muestras o productos químicos necesarios**, la espectroscopia Vis-NIR permite el análisis de estos parámetros en **menos de un minuto**.

EQUIPO EXPERIMENTAL

Las muestras de champú se midieron con un analizador de sólidos DS2500 en modo de transflexión en todo el rango de longitud de onda (400–2500 nm). Se empleó un Slurry Cup DS2500, que simplifica el posicionamiento de la muestra y la limpieza del recipiente de muestra. El reflector difuso de oro de 1 mm define la misma longitud de trayectoria para todas las mediciones para garantizar resultados reproducibles. Como se muestra en **Figura 1**, las muestras se midieron sin ninguna preparación. El paquete de software Metrohm Vision Air Complete se utilizó para toda la adquisición de datos y el desarrollo del modelo de predicción.



Figure 1. Analizador de sólidos DS2500 y una muestra de champú presente en el vaso giratorio para lodos DS2500.

Tabla 1. Descripción general del equipo de hardware y software

Equipo	Número de metrohmios
Analizador de sólidos DS2500	2.922.0010
Copa de lodos DS2500	6.7490.430
Reflector Difuso Oro 1 mm	6.7420.000
Vision Air 2.0 completo	6.6072.208

RESULTADOS

Los espectros Vis-NIR obtenidos (**Figura 2**) se utilizaron para crear modelos de predicción para la cuantificación de laureth sulfato de sodio (SLES), cocamidopropil betaína (CABP), óxido de cocamidopropilamina (CAW), cocamida dietanolamina (DEA) y carbopol en champú. La

calidad de los modelos de predicción se evaluó mediante diagramas de correlación, que muestran la relación entre la predicción de Vis-NIR y los valores del método principal. Las respectivas cifras de mérito (FOM) muestran la precisión esperada de una predicción durante el análisis de rutina.

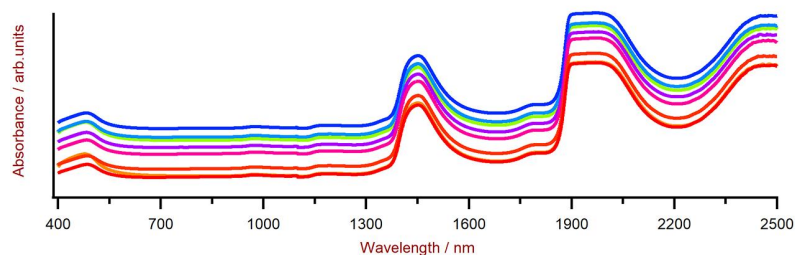


Figure 2. Una selección de espectros Vis-NIR de champú obtenidos con un analizador DS2500 y un DS2500 Slurry Cup. Por razones de visualización, se aplicó una compensación de espectros.

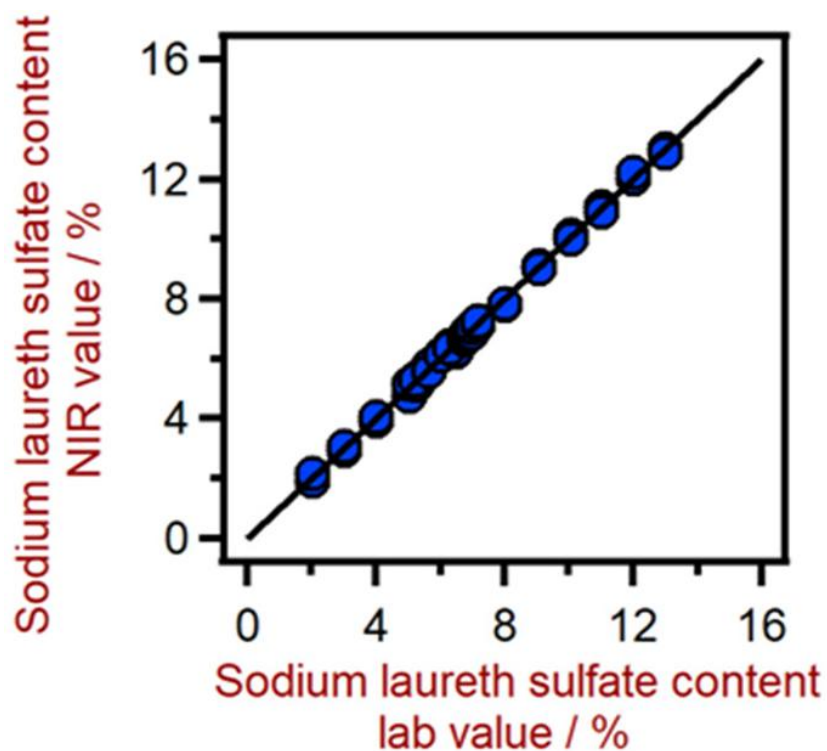


Figure 3. Diagrama de correlación para la predicción del contenido de laureth sulfato de sodio (SLS) utilizando un analizador de sólidos DS2500. El valor de laboratorio de SLS se evaluó mediante titulación.

Tabla 2. Cifras de mérito para la predicción del laureth sulfato de sodio (SLS) contenido en champú utilizando un analizador de sólidos DS2500.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,998
Error estándar de calibración	0,13%
Error estándar de validación cruzada	0,14%

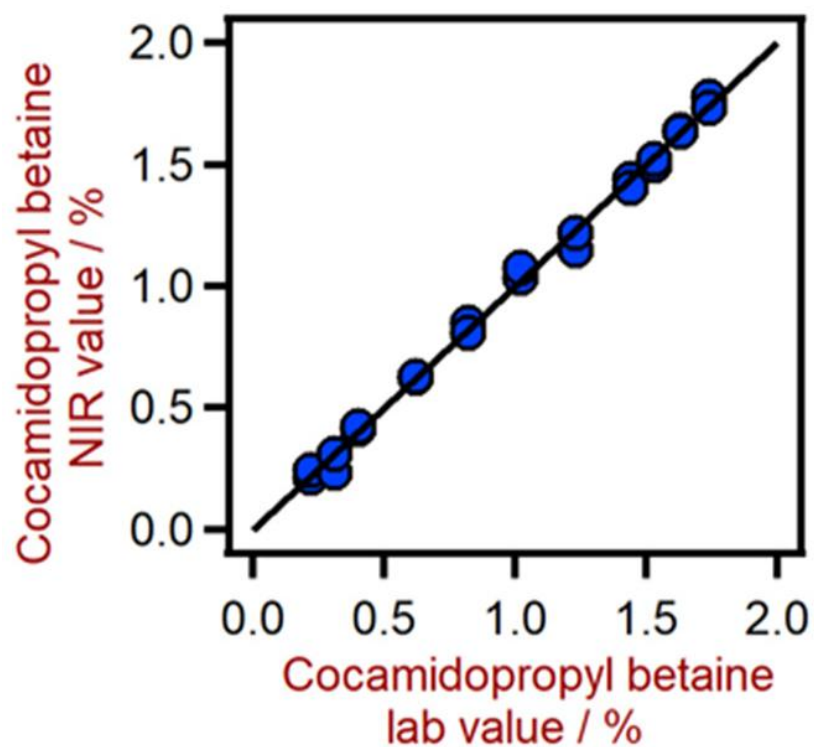


Figure 4. Diagrama de correlación para la predicción del contenido de cocamidopropil betaína (CABP) utilizando un analizador de sólidos DS2500. La CABP se evaluó mediante titulación.

Tabla 3. Cifras de mérito para la predicción del contenido de cocoamidopropil betaína (CABP) en champú utilizando un analizador de sólidos DS2500.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,996
Error estándar de calibración	0,04%
Error estándar de validación cruzada	0,05%

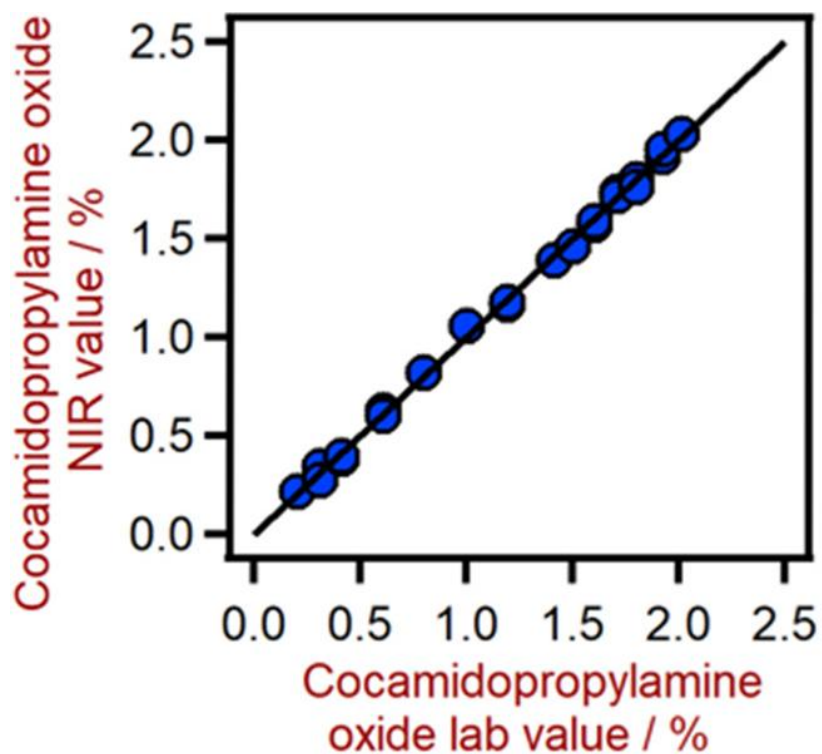


Figure 5. Diagrama de correlación para la predicción de óxido de cocamidopropilamina (CAW) utilizando un analizador de sólidos DS2500. El valor de laboratorio de CAW se evaluó mediante titulación.

Tabla 4. Cifras de mérito para la predicción del contenido de óxido de cocoamidopropilamina (CAW) en champú utilizando un analizador de sólidos DS2500.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,998
Error estándar de calibración	0,031%
Error estándar de validación cruzada	0,058%

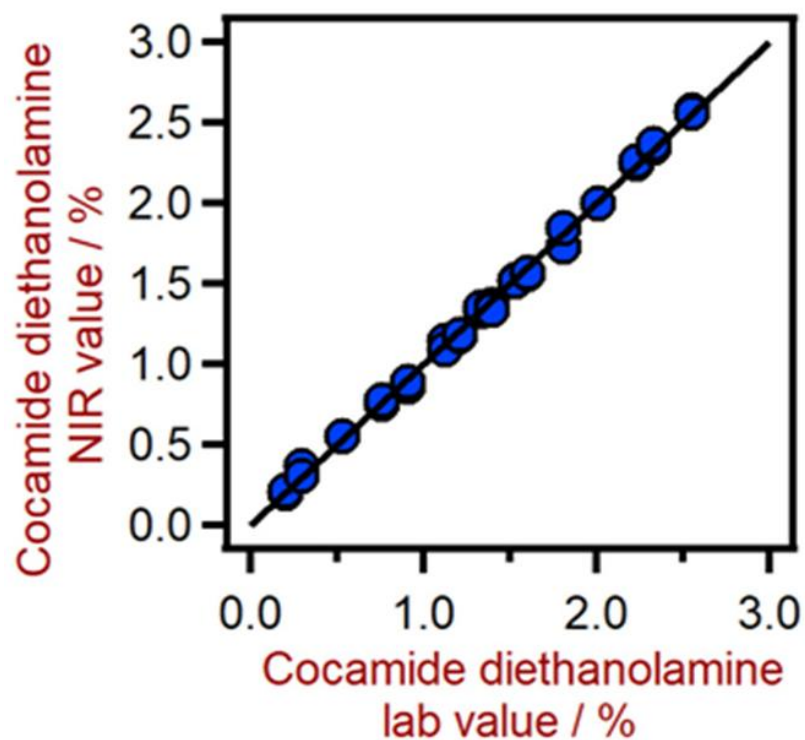


Figure 6. Diagrama de correlación para la predicción de la cocamida dietanolamina (DEA) utilizando un analizador de sólidos DS2500. El valor de laboratorio de DEA se evaluó mediante titulación.

Tabla 5. Cifras de mérito para la predicción del contenido de cocoamina dietanolamina (DEA) en champú utilizando un analizador de sólidos DS2500.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,998
Error estándar de calibración	0,034%
Error estándar de validación cruzada	0,036%

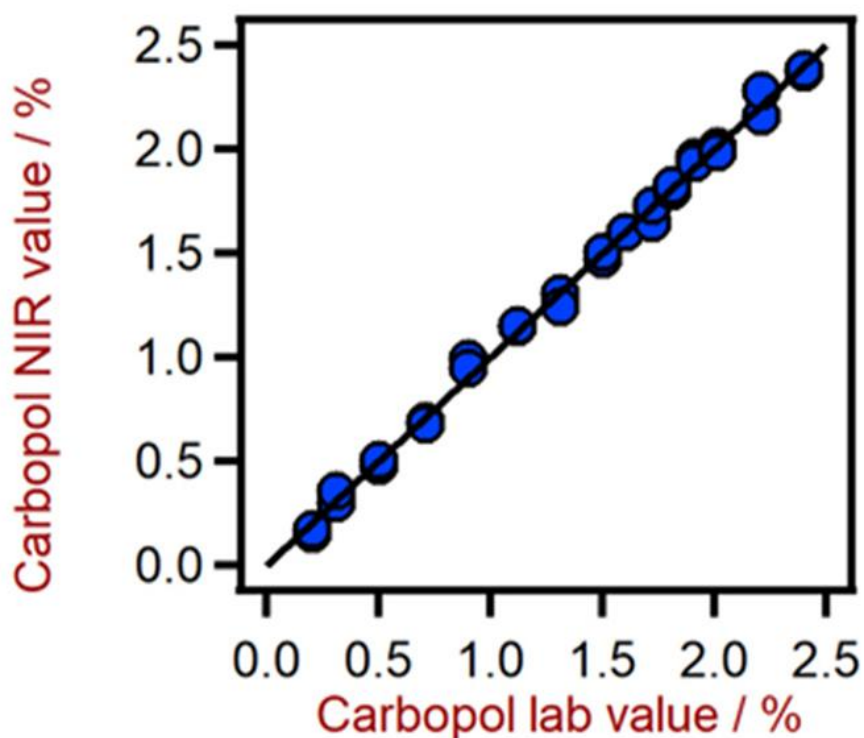


Figure 7. Diagrama de correlación para la predicción del contenido de carbopol usando un Analizador de Sólidos DS2500. El valor de laboratorio de carbopol se evaluó mediante titulación.

Tabla 6. Cifras de mérito para la predicción de carbopol contenido en champú utilizando un analizador de sólidos DS2500.

Figuras de merito	Valor
R ²	0,969
Error estándar de calibración	0,290%
Error estándar de validación cruzada	0,410%

CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación demuestra la viabilidad de la espectroscopia NIR para el análisis de laurethsulfato de sodio (SLES), cocamidopropil betaína (CABP), óxido de cocamidopropilamina (CAW), cocamida dietanolamina (DEA) y carbopol en champú. En

comparación con los métodos químicos húmedos los costos de funcionamiento son **significativamente más bajos** cuando se utiliza la espectroscopia NIR (Tabla 7 y Figura 8).

Tabla 7. Comparación de costes de funcionamiento para la determinación de los parámetros clave de calidad en champú con espectroscopia de titulación/HPLC y NIR.

	método de laboratorio	método NIR
Número de análisis por día	10	10
Costo del operador por hora	\$25	\$25
Costos de consumibles y químicos (SLS, CABP, CAW, DEA, carbopol)	\$5	\$1
Tiempo empleado por análisis (SLS, CABP, CAW, DEA, carbopol)	5 minutos	1 minuto
Costos totales de funcionamiento (por año)	\$18188	\$2063

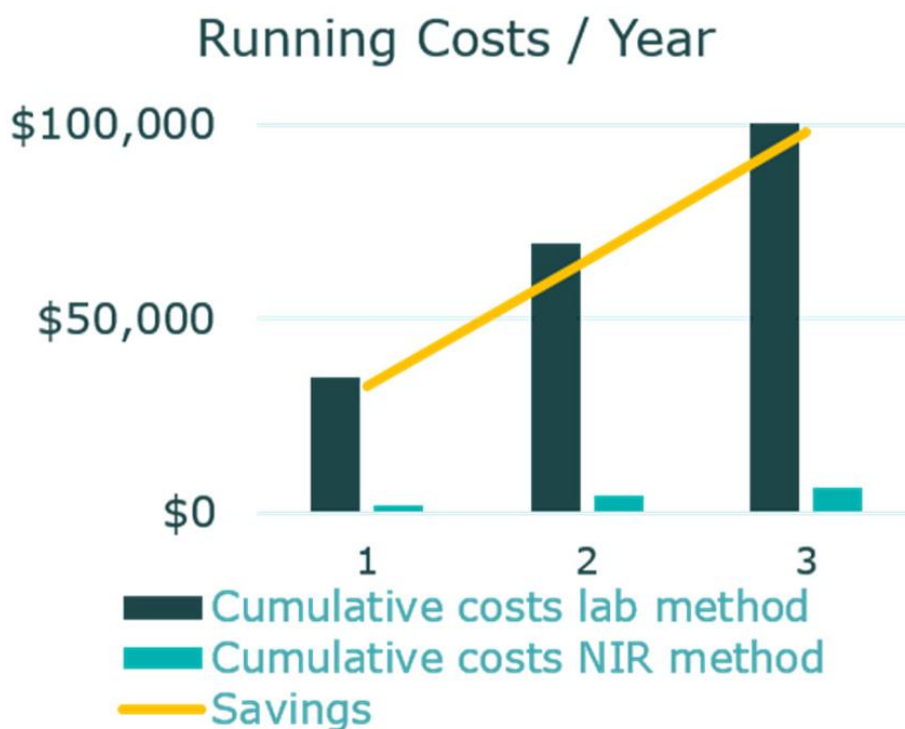


Figure 8. Comparación de los costos de costos acumulados para la determinación de parámetros clave de calidad en champú con titulación/HPLC y espectroscopia NIR.

CONTACT

Metrohm Argentina S.A.
 Avda. Regimiento de
 Patricios 1456
 1266 Buenos Aires

info@metrohm.com.ar



DS2500 Solid Analyzer

Sólida espectroscopía del infrarrojo cercano para control de calidad en laboratorio y entorno de producción.

El DS2500 Analyzer es la solución probada y flexible para los análisis rutinarios de sólidos, cremas y, opcionalmente, también líquidos a lo largo de toda la cadena de producción. Su diseño robusto hace que el DS2500 Analyzer sea resistente al polvo, la humedad, las vibraciones y los cambios de temperatura, lo que hace que sea especialmente adecuado para el uso en entornos de producción muy difíciles.

El DS2500 cubre toda la gama espectral de 400 a 2500 nm y proporciona en menos de un minuto resultados precisos y reproducibles. El DS2500 Analyzer cumple los requisitos de la industria farmacéutica y gracias a su manejo sencillo ayuda al usuario a realizar las tareas rutinarias diarias.

Gracias a los accesorios perfectamente adaptados al aparato se logran los mejores resultados posibles incluso con los tipos de muestra más difíciles, por ejemplo, la materia sólida de grano grueso como los gránulos o las muestras semilíquidas como las cremas. Al medir la materia sólida, se puede aumentar la productividad con el uso de la MultiSample Cup, que permite realizar medidas automatizadas en serie de hasta 9 muestras.



DS2500 Slurry Cup

Slurry Cup es el recipiente de muestras ideal para el análisis de sustancias altamente viscosas con el DS2500. Gracias al diseño abierto del Slurry Cup, se puede utilizar fácilmente con pastas y cremas y también permite una limpieza rápida y eficaz.

En combinación con el Liquid Kit (6.7400.010) también se pueden examinar muestras viscosas claras.



Reflector de oro NIRS, 1 mm de espesor de capa total
Reflector de oro para la medida de transflexión de líquidos. Se puede combinar con los siguientes aparatos:

- NIRS DS2500 Analyzer (número de pedido: **2.922.0010**)
- NIRS XDS MasterLab Analyzer (número de pedido: **2.921.1310**)
- NIRS XDS MultiVial Analyzer (número de pedido: **2.921.1120**)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer (número de pedido: **2.921.1110**)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer – Solids (número de pedido: **2.921.1210**)



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - Software de espectroscopía universal.

Vision Air Complete es una solución de software moderna y fácil de usar para su empleo en entornos regulados.

Las ventajas de Vision Air son las siguientes:

- Aplicaciones de software individuales con interfaces de usuario personalizadas para garantizar un manejo intuitivo y fácil
- Fácil creación y mantenimiento de procedimientos operativos
- Base de datos SQL para una gestión de datos segura y sencilla

La versión Vision Air Complete (66072208) incluye todas las aplicaciones para el aseguramiento de la calidad mediante la espectroscopía Vis-NIR:

- Aplicación para la gestión de datos y aparatos
- Aplicación para el desarrollo de métodos
- Aplicación para análisis rutinarios

Más soluciones Vision Air Complete:

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