



Application Note AN-NIR-081

Control de Calidad de Polietileno

Determinación fiable de la densidad de PE en un minuto mediante NIRS

La determinación de la densidad del polietileno (PE) (ASTM D792) es normalmente un procedimiento sumamente difícil debido a las dificultades de reproducibilidad. Dado que este parámetro se usa con mayor frecuencia para determinar el tipo de PE, también son comunes los métodos alternativos que son sensibles a la estructura molecular, como la espectroscopia FT-IR. Sin embargo, la medición a través de FT-IR también puede ser problemática cuando se deben analizar tamaños de muestra más grandes debido a la falta de homogeneidad de la

muestra.

Esta nota de aplicación demuestra que el analizador de sólidos DS2500 que opera en la región espectral visible e infrarroja cercana (Vis-NIR) proporciona una **solución fiable y rápida** para la determinación de la densidad de PE. Con **no se necesita preparación de muestras ni productos químicos**, la espectroscopia Vis-NIR permite el análisis de tamaños de muestra más grandes y no homogéneos de PE en **menos de un minuto**.

EQUIPO EXPERIMENTAL

Los gránulos de PE se midieron en modo de reflexión en todo el rango de longitud de onda (400–2500 nm) del analizador de sólidos DS2500. Se empleó un vaso de muestra grande DS2500 giratorio para superar la distribución de diversos tamaños de partículas y componentes químicos. Esto permitió mediciones automatizadas en diferentes ubicaciones de muestra para una adquisición de espectro reproducible. 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.

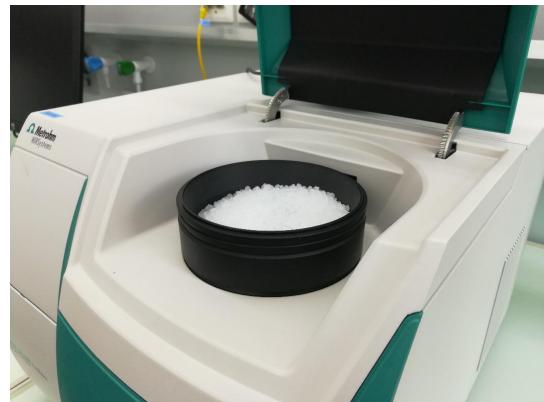


Figura 1. Analizador de sólidos DS2500 y gránulos de PE presentes en el vaso de muestras grande giratorio DS2500.

Tabla 1. Descripción general del equipo de hardware y software

Equipo	Número de metrohmios
Analizador de sólidos DS2500	2.922.0010
Copa de muestra grande DS2500	6.7402.050
Vision Air 2.0 completo	6.6072.208

RESULTADO

Los espectros Vis-NIR obtenidos (**Figura 2**) se utilizaron para crear modelos de predicción para la cuantificación del contenido de densidad. 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.

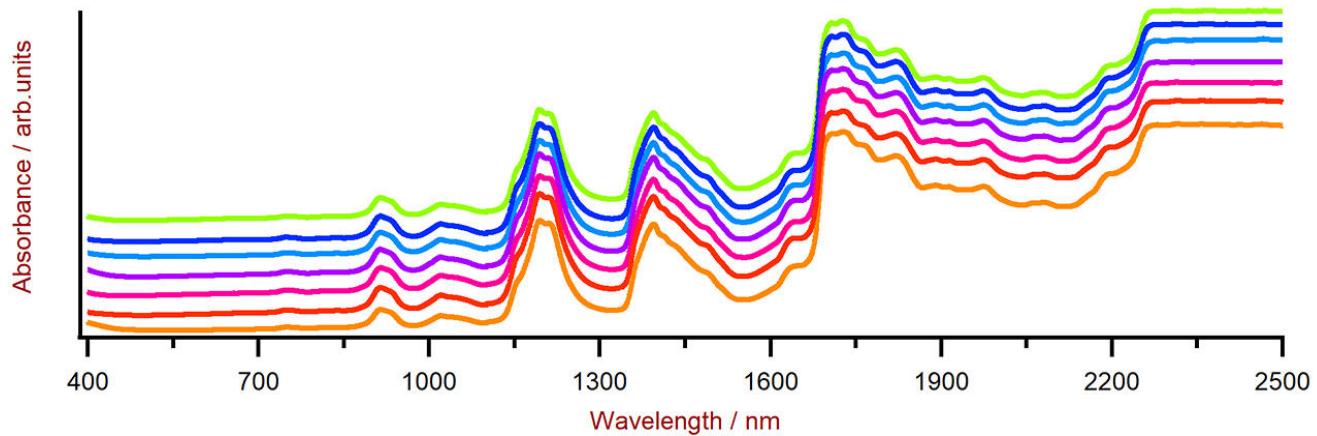


Figure 2. Selección de espectros PE Vis-NIR obtenidos con un analizador DS2500 y un vaso de muestra grande DS2500 giratorio. Por razones de visualización, se aplicó una compensación de espectros.

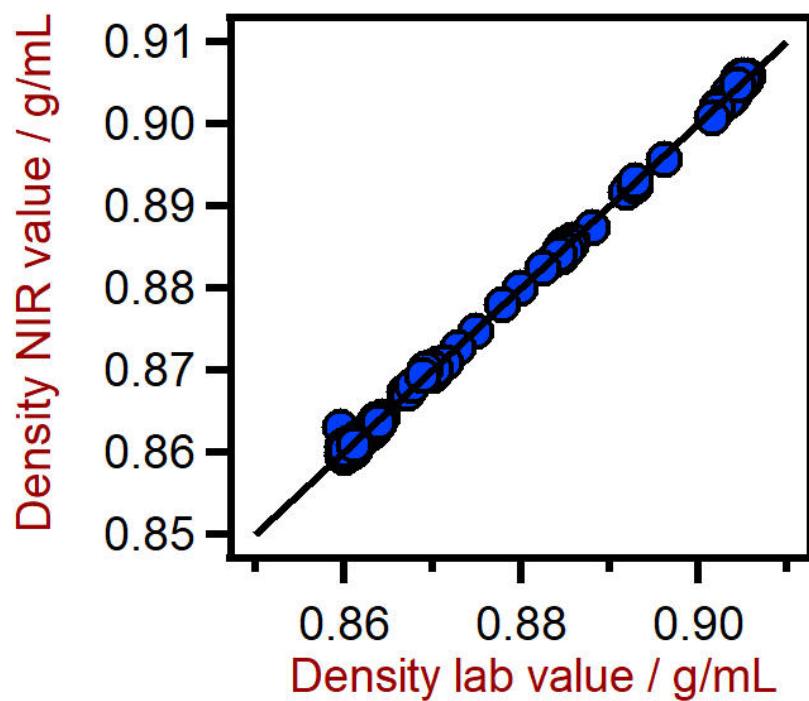


Figure 3. Diagrama de correlación para la predicción de la densidad de PE usando un Analizador de Sólidos DS2500. El valor de laboratorio de densidad se evaluó mediante densimetría.

Tabla 2. Cifras de mérito para la predicción de la densidad de PE usando un Analizador de Sólidos DS2500.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,991
Error estándar de calibración	0,0005 g/ml
Error estándar de validación cruzada	0,0005 g/ml

CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación demuestra que la densidad de PE se puede determinar fácilmente con espectroscopia NIR. Ya que **no se necesita preparación de muestras**, las muestras se analizan tal

cual, lo que permite una operación sencilla que conduce a resultados de alta precisión (0,0005 g/mL, consulte **Tabla 2**).

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es



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.



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)



Recipiente de muestras DS2500, grande

Recipiente de muestras grande para el registro espectral de polvos y granulados en reflexión en diferentes puntos de muestra por medio del NIRS DS2500 Analyzer.