



Application Note AN-NIR-098

Control de calidad de granulado de PVC

Determine el peso molecular fácilmente en segundos

El PVC (cloruro de polivinilo) tiene propiedades únicas en comparación con otros plásticos derivados de olefinas que solo contienen átomos de carbono e hidrógeno en su estructura química. Algunas características del PVC incluyen una mayor estabilidad química y mecánica, así como propiedades ignífugas. El peso molecular del polímero tiene una influencia significativa en estas propiedades. El peso molecular se define aquí como el peso promedio de las moléculas que forman un polímero, y este valor da una indicación de la longitud de las cadenas del polímero. Para monitorear la calidad del PVC, es

importante medir el peso molecular durante el proceso de producción. El método estándar para determinar el peso molecular del PVC es por cromatografía de exclusión por tamaño (SEC). Este método analítico requiere una inversión de tiempo considerable y personal cualificado para realizarlo. La determinación del peso molecular del PVC es más fácil con la espectroscopía del infrarrojo cercano (NIRS). NIRS proporciona resultados en **solo unos segundos** y puede indicar rápidamente cuándo es necesario realizar ajustes en el proceso de producción.

EQUIPO EXPERIMENTAL

Se midieron 33 muestras de PVC con pesos moleculares variables de 113 000 a 192 000 g/mol en el analizador de sólidos DS2500. 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

tabla 1. Descripción general del equipo de hardware y software

| Equipo | Número de metrohmios |
|-----------------------------------|----------------------|
| Analizador de sólidos NIRS DS2500 | 2.922.0010 |
| Vision Air 2.0 completo | 6.6072.208 |
| Vaso de muestra grande NIRS | 6.7402.050 |

RESULTADO

Los 33 espectros Vis-NIR medidos (Figura 2) se utilizaron para crear un modelo de predicción para la cuantificación del peso molecular. La calidad del modelo de predicción se evaluó utilizando el algoritmo de validación cruzada que muestra una

correlación muy alta entre la predicción Vis-NIR y los valores de referencia. Las respectivas cifras de mérito (FOM) muestran la precisión esperada de una predicción NIRS durante el análisis de rutina (Ejército de reservaBel 2).

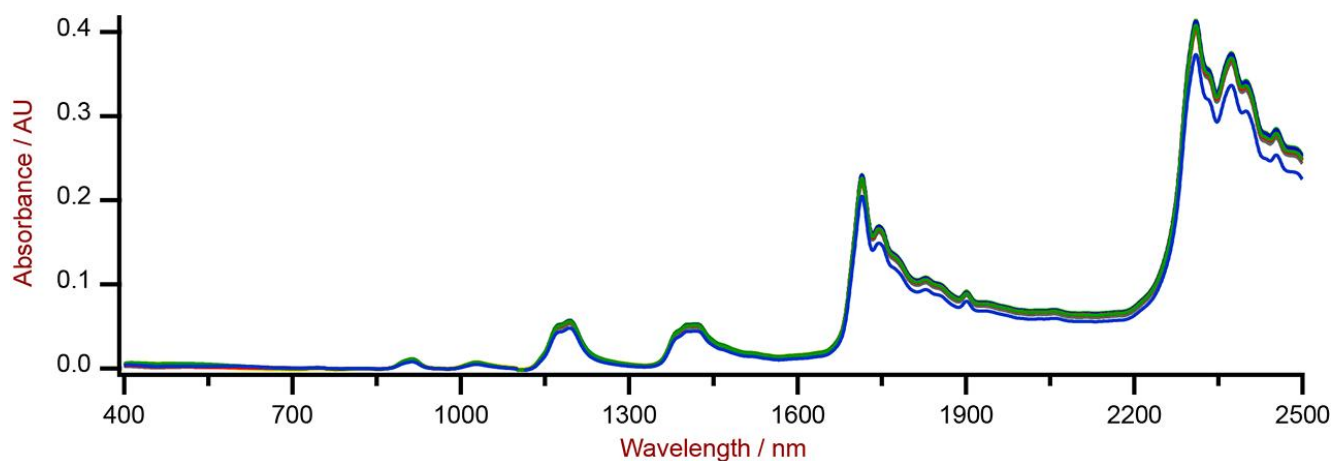


Figure 2. Espectros Vis-NIR de muestras de granulado de PVC con diferentes pesos moleculares medidos en un analizador de sólidos DS2500.

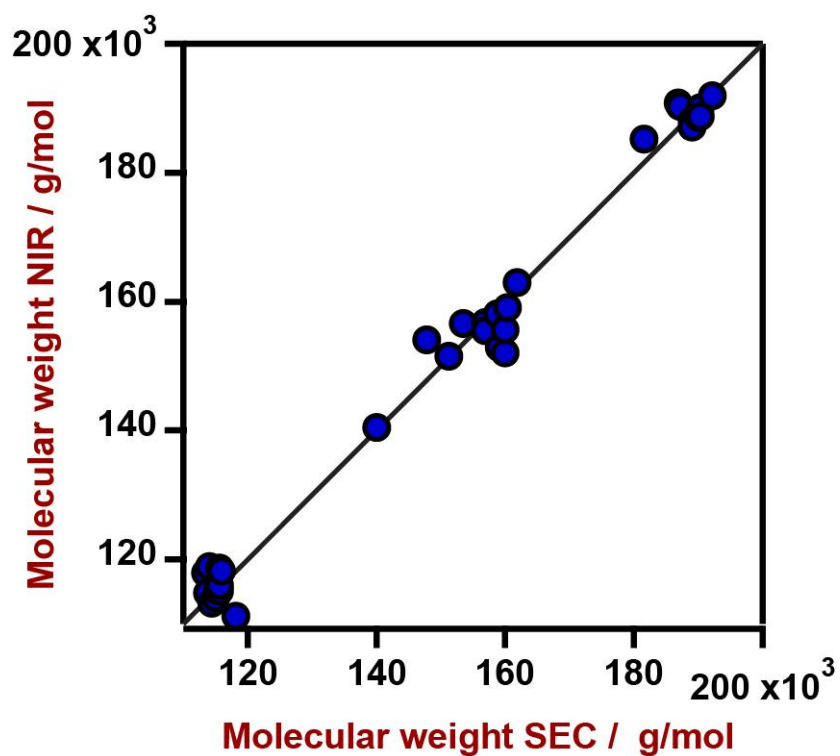


Figure 3. Diagrama de correlación para la predicción del peso molecular del PVC utilizando un analizador de sólidos DS2500.

Tabla 2. Cifras de mérito para la predicción del peso molecular de muestras de granulado de PVC usando un Analizador de Sólidos DS2500.

| Figuras de mérito | Valor |
|--------------------------------------|------------|
| R ² | 0,988 |
| Error estándar de calibración | 3640 g/mol |
| Error estándar de validación cruzada | 5375 g/mol |

CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación demuestra la viabilidad de determinar el peso molecular en muestras de granulado de PVC con espectroscopia NIR. El peso molecular del PVC se determinó con éxito con NIRS y solo difirió de los datos de referencia con un

promedio de 1,5 %. La espectroscopia Vis-NIR permite una determinación rápida sin preparación de muestras y ha demostrado ser un método adecuado para medir el peso molecular del PVC.

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.