



Application Note AN-NIR-121

Contenido de agua en el éter monometílico de propilenglicol (PGME)

Determinación de agua posible en segundos usando NIRS

El éter monometílico de propilenglicol (1-metoxi-2-propanol o PGME) es uno de los muchos solventes de éter de glicol con una amplia variedad de aplicaciones. Se utiliza como intermedio y en formulaciones para aplicaciones industriales, profesionales o de consumo, principalmente en recubrimientos de superficies, tintas para impresión, soluciones de limpieza, formulaciones antihielo y descongelantes y fines agroquímicos. También se utiliza como extractante, agente coalescente y

mejorador de fluidez en pinturas a base de agua. El agua en el metil éter de propilenglicol generalmente se mide mediante titulación Karl Fischer (KF), que requiere productos químicos y demora aproximadamente cinco minutos por determinación. Esta nota de aplicación describe cómo se puede utilizar la espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) como una alternativa más rápida y rentable para la determinación de agua en PGME.

EQUIPO

Se midieron muestras de 1-metoxi-2-propanol con contenido de agua variable (de 0,03% a 2%) con un analizador de líquidos OMNIS NIR en modo de transmisión (1000–2250 nm). La adquisición del espectro reproducible se logró utilizando el control de temperatura incorporado a 30 °C. Para mayor comodidad, se utilizaron viales desechables con un recorrido óptico de 8 mm, lo que hizo innecesaria la limpieza de los recipientes de muestra. Se utilizó el software OMNIS para toda la adquisición de datos y el desarrollo del modelo de predicción.



Figure 1. Analizador OMNIS NIR y muestra envasada en un vial desechable.

Tabla 1. Descripción general del equipo de hardware y software.

Equipo	Número de artículo
Analizador de líquidos OMNIS NIR	2.1070.0010
Soporte OMNIS NIR, vial, 8 mm	6.07401.070
Vial desechable, 8 mm, transmisión	6.7402.240
Licencia autónoma de OMNIS	6.06003.010
Licencia de software de desarrollo cuantitativo	6.06008.002

Los espectros NIR obtenidos (**Figura 2**) se utilizaron para crear un modelo de predicción para la cuantificación del agua en 1-metoxi-2-propanol. La calidad del modelo de predicción se evaluó utilizando el diagrama de correlación en **Figura 3** que muestra

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

RESULTADO

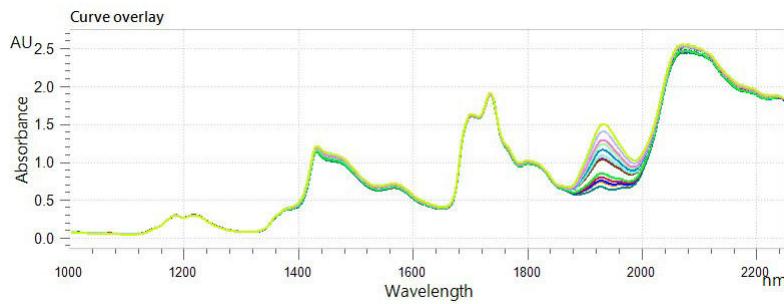


Figure 2. Espectros NIR superpuestos de muestras de éter monometílico de propilenglicol analizadas en un analizador líquido NIR OMNIS.

RESULTADO CONTENIDO DE AGUA EN 1-METOXI-2-PROPANOL

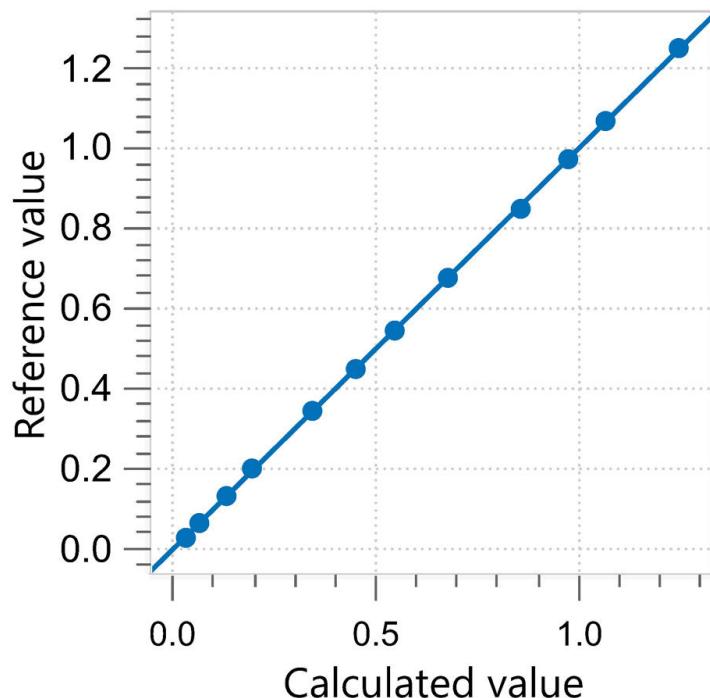


Figure 3. Diagrama de correlación y las respectivas figuras de mérito para la predicción del contenido de agua en éter monometílico de propilenglicol utilizando un analizador OMNIS NIR Liquid. El valor de laboratorio se evaluó mediante titulación KF.

SEC (%)	SECV (%)
www.metrohm.com	3

R^2		
1,000	0,0042	0,0048

CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación demuestra la viabilidad de determinar un parámetro clave para el control de calidad del éter monometílico de propilenglicol (contenido de agua) con espectroscopia NIR. Las principales ventajas de la espectroscopia NIR sobre los métodos químicos húmedos son que los costos de

funcionamiento son significativamente más bajos y el tiempo para obtener resultados se reduce significativamente. Además, no se requieren productos químicos y la técnica no es destructiva para las muestras.

Tabla 2. Resumen del tiempo hasta obtener resultados para la determinación del contenido de agua mediante titulación KF.

Parámetro	Método	Es hora de obtener resultados
Agua	Titulación Karl Fischer	5 minutos

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es

CONFIGURACIÓN



OMNIS NIR Analyzer Liquid

Espectrómetro del infrarrojo cercano para muestras líquidas.

El OMNIS NIR Analyzer es la solución de espectroscopía del infrarrojo cercano (NIRS) desarrollada y producida conforme a los estándares de calidad suizos para los análisis de rutina a lo largo de toda la cadena de producción. El empleo de las tecnologías más avanzadas y la integración en el moderno OMNIS Software se reflejan en la velocidad, la manejabilidad y el uso flexible de estos espectrómetros NIR.

Información general sobre las ventajas del OMNIS NIR Analyzer Liquid:

- Medidas de muestras líquidas en menos de 10 segundos
- Control de temperatura de la muestra: 25 °C...80 °C
- Detección automática de la colocación y la retirada del recipiente de muestras
- Fácil integración en un sistema de automatización o vinculación con otras tecnologías de análisis (titulación)
- Compatible con numerosos recipientes de muestras con distintas longitudes de recorrido



Soporte OMNIS NIR, vial, 8 mm

Soporte de viales para el OMNIS NIR Analyzer para viales desechables de 8 mm (6.7402.240).



Vial desechable, 8 mm, para transmisión, 100 unidades

100 viales desechables de vidrio (borosilicato) con una longitud de recorrido óptico de 8 mm para el análisis de líquidos en transmisión. Los viales desechables se suministran con los correspondientes tapones de cierre (100 unidades).

Compatibles con:

- Soporte OMNIS NIR para vial de 8 mm
(6.07401.070)
- Soporte DS2500 para viales desechables de 8 mm
(6.7492.020)

Licencia "Stand-Alone" de OMNIS

Habilita el modo "Stand-Alone" del software OMNIS en un ordenador con WindowsTM.

Características:

- Se incluye una licencia de los aparatos OMNIS.
- Debe activarse en el portal de licencias de Metrohm.
- No se puede aplicar a otro ordenador.

Software license Quant Development

Software license for the creation and editing of quantification models in a stand-alone OMNIS Software installation.

OMNIS

A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

OMNIS

A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE