

Application Note AN-NIR-146

Control de calidad de desodorantes mediante espectroscopia de infrarrojo cercano

Determinación de pH, densidad, viscosidad y contenido de aluminio en pocos segundos.

Los productos de cuidado personal, como los desodorantes, se analizan mediante diversos métodos analíticos que requieren mucho tiempo, tanto durante la producción como después de la fabricación del producto final. Esta nota de aplicación demuestra cómo se pueden medir parámetros de calidad como la viscosidad, el pH, la densidad y el contenido de aluminio en desodorantes mediante espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) simultáneamente y sin preparación de muestras. NIRS es una tecnología rápida, sin químicos y muy fácil de usar. La espectroscopia NIR puede utilizarse tanto en línea durante el proceso de producción como fuera de línea en un laboratorio de control de calidad.

EQUIPO EXPERIMENTAL

Se midieron sesenta muestras de desodorante en un analizador OMNIS NIR Solid (Figura 1). Todas las mediciones se realizaron en modo de transflexión (1000–2250 nm) utilizando un reflector grande con una abertura de 1 mm y un recipiente de transflexión. Los valores de referencia del contenido de aluminio se midieron mediante titulación (AN-T-228), los valores de pH con un pH-metro, y la viscosidad y la densidad con un viscosímetro y un densímetro, respectivamente.

Se utilizó el software OMNIS para la adquisición de datos y el desarrollo del modelo de predicción.



Figura 1. Analizador OMNIS NIR Sólido con vaso de transflexión y reflector de gran tamaño.

Tabla 1. Descripción general de equipos de hardware y software.

Equipo	Número de parte
OMNIS NIR Analyzer solid	2.1071.0010
Large reflector OMNIS NIR, 1mm	6.07402.940
Transflection vessel OMNIS NIR, 60mm	6.07402.260
OMNIS Stand-Alone license	6.06003.010
Software license Quant Development	6.06008.002

RESULTADO

Los espectros NIR obtenidos de las muestras de desodorante (Figura 2) se utilizaron para crear modelos de predicción de pH, viscosidad, densidad y contenido de aluminio. La calidad de los modelos de predicción se evaluó mediante diagramas de correlación, que muestran una alta correlación entre la predicción NIR y los valores de referencia. Las respectivas figuras de mérito (FOM) muestran la precisión esperada de una predicción durante el análisis de rutina (Figuras 3-6).

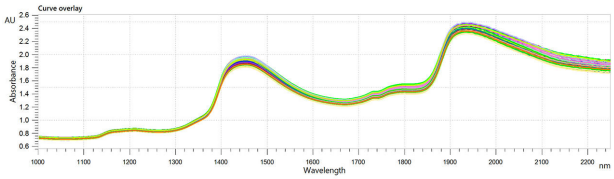


Figura 2. Espectros NIR de varias muestras de desodorante analizadas en un analizador NIR de sólidos OMNIS.

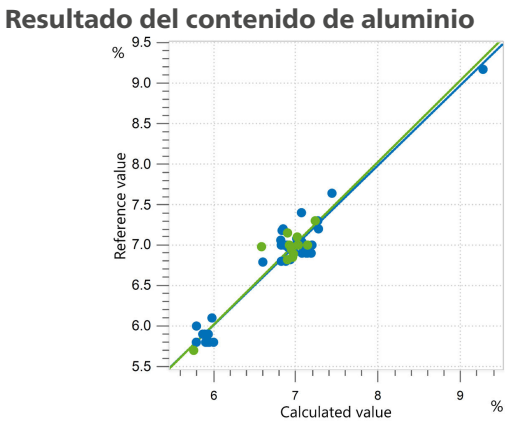


Figura 3. Diagrama de correlación y sus respectivas figuras de mérito para la predicción del contenido de aluminio en desodorante utilizando un analizador OMNIS NIR Solid. El conjunto de datos de calibración se muestra en azul y el conjunto de datos de validación externa, en verde. La titulación se utilizó como método de referencia para la determinación del aluminio en desodorante.

R^2	SEC (%)	SECV (%)	SEP (%)
0.908	0.12	0.16	0.14

Densidad de resultados

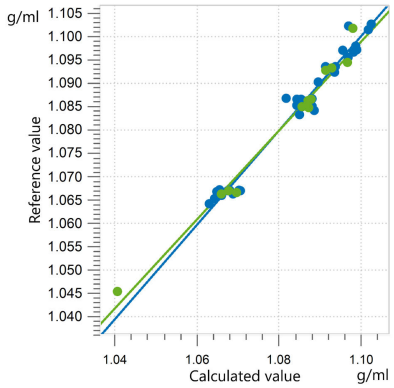


Figura 4. Diagrama de correlación y sus respectivas cifras de mérito para la predicción de la densidad en desodorante utilizando un analizador OMNIS NIR Solid. El conjunto de datos de calibración se muestra en azul y el conjunto de datos de validación externa, en verde. Se utilizó un densímetro como método de referencia.

R^2	SEC (g/mL)	SECV (g/mL)	SEP (g/mL)
0.979	0.0017	0.0020	0.0023

Viscosidad resultante

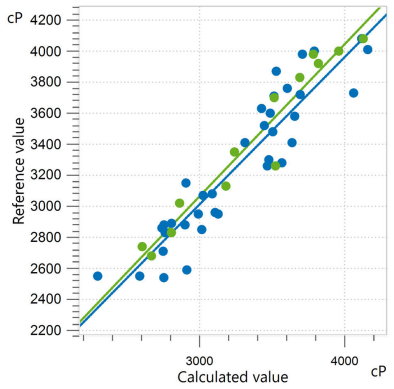


Figura 5. Diagrama de correlación y sus respectivas cifras de mérito para la predicción de la viscosidad en desodorante utilizando un analizador OMNIS NIR Solid. El conjunto de datos de calibración se muestra en azul y el conjunto de datos de validación externa, en verde. Los valores de referencia se obtuvieron con un viscosímetro.

R^2	SEC (cP)	SECV (cP)	SEP (cP)
0.941	147.05	176.05	133.74

Resultado de pH

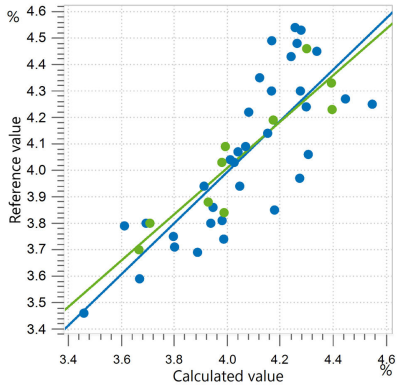


Figura 6. Diagrama de correlación y sus respectivas figuras de mérito para la predicción del valor de pH en desodorante utilizando un analizador OMNIS NIR Solid. El conjunto de datos de calibración se muestra en azul y el conjunto de datos de validación externa, en verde. Se utilizó un medidor de pH como método de referencia para la medición del pH del desodorante.

R^2	SEC	SECV	SEP
0.832	0.13	0.18	0.10

CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación muestra la viabilidad de utilizar la espectroscopia NIR para el análisis del contenido de aluminio, el pH, la viscosidad y la densidad en desodorantes. Con la NIRS, la medición se puede realizar en segundos y no requiere productos químicos. Esta solución es más sencilla y mucho más rápida que otras técnicas convencionales, y puede utilizarse en línea en varias etapas de la cadena de producción o durante el control de calidad del producto final, ahorrando tiempo y dinero a los fabricantes.

CONTACT

Metrohm México
Calle. Xicoténcatl #181, Col
Del Carmen, Alcaldía
Coyoacán.
04100. Ciudad de México
México

info@metrohm.mx

CONFIGURACIÓN



OMNIS NIR Analyzer Solid

Espectrómetro del infrarrojo cercano para el análisis de muestras de materia sólida y muestras viscosas.

Desarrollado y producido de conformidad con las normas de calidad suizas, el OMNIS NIR Analyzer es la solución de espectroscopía del infrarrojo cercano (NIRS) para realizar análisis de rutina en toda la cadena de producción. La aplicación 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 este espectrómetro NIR.

Visión conjunta de las ventajas del OMNIS NIR Analyzer Solid:

- Medidas de muestras de materia sólida y muestras viscosas en menos de 10 segundos
- Medidas automatizadas en múltiples posiciones que permiten obtener resultados reproducibles, incluso con muestras no homogéneas
- Sencilla integración en un sistema de automatización o vinculación con tecnologías de análisis adicionales (titulación)
- Permite usar numerosos recipientes de muestras



Reflector grande OMNIS NIR, 1 mm

Reflector con un tamano de rendija de 1 mm (longitud de recorrido óptico de 2 mm) para la medida de la transflexión de líquidos.

Adecuado para recipientes de transflexión (6.07402.260 y 6.7401.000).



Recipiente de transflexión OMNIS NIR, 60 mm

Recipiente de transflexión ópticamente plano para la medida espectral de líquidos.

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

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.

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

Licencia de software de Quant Development

Licencia de software para la creación y edición de modelos de cuantificación en una instalación de OMNIS Software "Stand-Alone".