



Application Note AN-NIR-074

Surfactant in laundry detergent by Vis-NIR spectroscopy

Fast determination without using chemicals

Liquid laundry detergents contain fabric softeners, bleaching agents, surfactants, as well as enzymes. Out of these, the surfactant is the most important factor for the cleaning effect, as it breaks down the interface between polar and nonpolar compounds. This allows the detergent to be effective against greases as well as stains from soil or drinks.

Quantification of surfactant content is most

commonly performed by primary analyses (e.g., two-phase potentiometric titration). Disadvantages include manual sample preparation steps such as dilution and pH adjustment, and the method itself is time-consuming. In contrast, Vis-NIR spectroscopy has a time-to-result of less than 1 minute and does not require any sample preparation or chemicals for high quality data.

EXPERIMENTAL

A total of 37 samples with varying surfactant content were provided by a customer. The Vis-NIR spectra (Figure 2) were acquired on a Metrohm NIRS XDS RapidLiquid Analyzer equipped with 1 mm quartz cuvette (Figure 1). The samples were measured as-is, without any sample preparation steps. Data collection and model development was carried out with the Vision Air complete software package.



Figure 1. The NIRS XDS RapidLiquid Analyzer with a 1 mm quartz cuvette, used to collect the spectra of surfactant samples.

Table 1. Hardware and software equipment overview.

Equipment	Metrohm number
XDS RapidLiquid Analyzer	2.921.1410
NIRS 1mm quartz cuvette	6.7401.200
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

RESULT

The obtained graph (Figure 3) displays a high correlation ($R^2 = 0.97$) between the values predicted by NIRS and the reference method. The nearly perfect

ratio of the SEC and SECV illustrates the validity of the model.

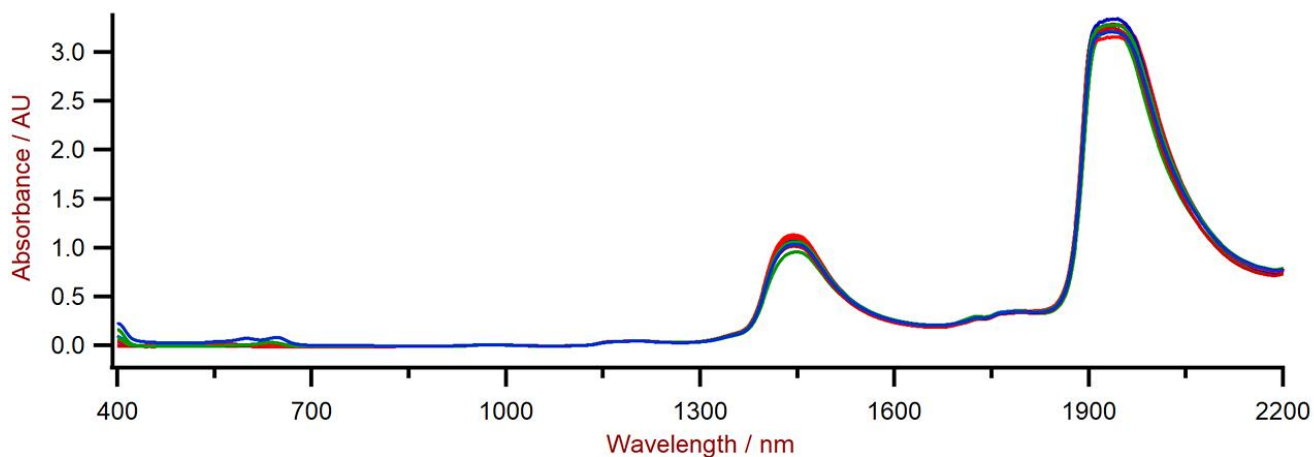


Figure 2 Selection of liquid detergent Vis-NIR spectra obtained using a XDS RapidLiquid Analyzer and a 1 mm quartz cuvette.

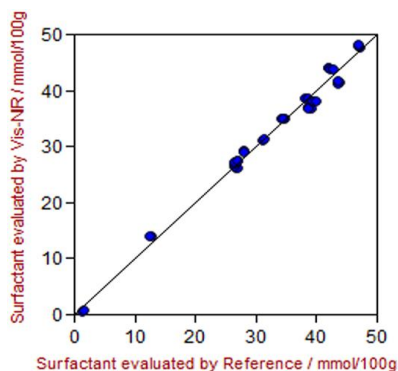


Figure 3 Correlation diagram and the respective figures of merit for the prediction of surfactant in liquid detergent using a XDS RapidLiquid Analyzer. The surfactant lab value was evaluated using HPLC.

Table 2. Figures of merit for the prediction of the surfactant content in liquid detergent using a XDS RapidLiquid Analyzer.

Figures of merit	Value
R^2	0.97
Standard error of calibration	2.20 mmol/100 g
Standard error of cross-validation	2.38 mmol/100 g

CONCLUSION

The results presented herein show that the Vis-NIR method is excellently suited for the fast quantification of surfactant concentration in detergents. Using Vis-

NIR for this application saves 10 minutes per sample compared to other methods (Table 3).

Table 3. Time to result overview for the different parameters

Parameter	Method	Time to result
Surfactant (anionic)	Potentiometric titration	10 min (adding solutions, stirring, pH-adjustments, determination)

Internal reference: AW NIR CN-0015-102018

CONTACT

Metrohm France
13, avenue du Québec - CS
90038
91978 VILLEBON
COURTABOEUF CEDEX

info@metrohm.fr



NIRS XDS RapidLiquid Analyzer

Des analyses rapides et précises de liquides et suspensions de toutes sortes.

L'analyseur NIRS XDS RapidLiquid Analyzer permet des analyses rapides et précises de formules et substances liquides. Des résultats de mesure précis obtenus par simple pression d'une touche font du NIRS XDS RapidLiquid Analyzer une solution aussi fiable que simple pour le contrôle qualité en laboratoire et en production. Les échantillons sont présentés dans des cuvettes en quartz réutilisables ou des flacons en verre à usage unique ; une chambre à échantillons tempérée assure la reproductibilité des conditions d'analyse et, par conséquent, l'exactitude des résultats de mesure.



Cuve en quartz, 1 mm

Cuve en quartz avec fenetre en verre de quartz d'une très grande pureté et homogénéité. Les cuves présentent une transmission supérieure à 80 % dans la gamme de longueurs d'ondes de 200 à 2 500 nm.

Compatible avec :

- NIRS Spacer pour ensemble de cuves de 12,5 mm (6.7403.180)
- Support DS2500 pour cuve de 1 mm (6.7492.100)
- Support OMNIS NIR, cuve, 1 mm (6.07401.010)



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - logiciel universel de spectroscopie.

Vision Air Complete est une solution logicielle moderne et simple d'utilisation pour une application dans un environnement réglementé.

Aperçu des avantages de Vision Air :

- Des applications logicielles individuelles avec interface utilisateur adaptée sont le garant d'un maniement intuitif et simple
- Établissement et suivi simples des procédures de travail
- Base de données SQL pour une gestion sûre et simple des données

La version Vision Air Complete (66072208) comprend toutes les applications d'assurance qualité par spectroscopie Vis-NIR :

- Application de gestion des instruments et des données
- Application de développement de méthodes
- Application d'analyse de routine

Autres solutions Vision Air Complete :

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