



Application Note AN-NIR-098

# Quality Control of PVC granulate

Determine molecular weight easily within seconds

PVC (polyvinyl chloride) has unique properties when compared to other olefin-derived plastics that only contain carbon and hydrogen atoms in their chemical structure. Some PVC features include increased chemical and mechanical stability as well as fire retardant properties. The molecular weight of the polymer has a significant influence on these properties. Molecular weight is defined here as the average weight of the molecules that make up a polymer, and this value gives an indication of the length of the polymer chains. To monitor the PVC

quality, it is important to measure the molecular weight during the production process. The standard method to determine PVC molecular weight is by size exclusion chromatography (SEC). This analytical method is time-intensive and requires trained personnel to perform.

Determining the molecular weight of PVC is easier with near-infrared spectroscopy (NIRS). NIRS provides results in **just a few seconds** and can quickly indicate when adjustments to the production process are necessary.

## EXPERIMENTAL EQUIPMENT

33 PVC samples with varying molecular weights from 113000–192000 g/mol were measured on the DS2500 Solid Analyzer. The Metrohm software package Vision Air Complete was used for all data acquisition and prediction model development.



**Figure 1.** DS2500 Solid Analyzer

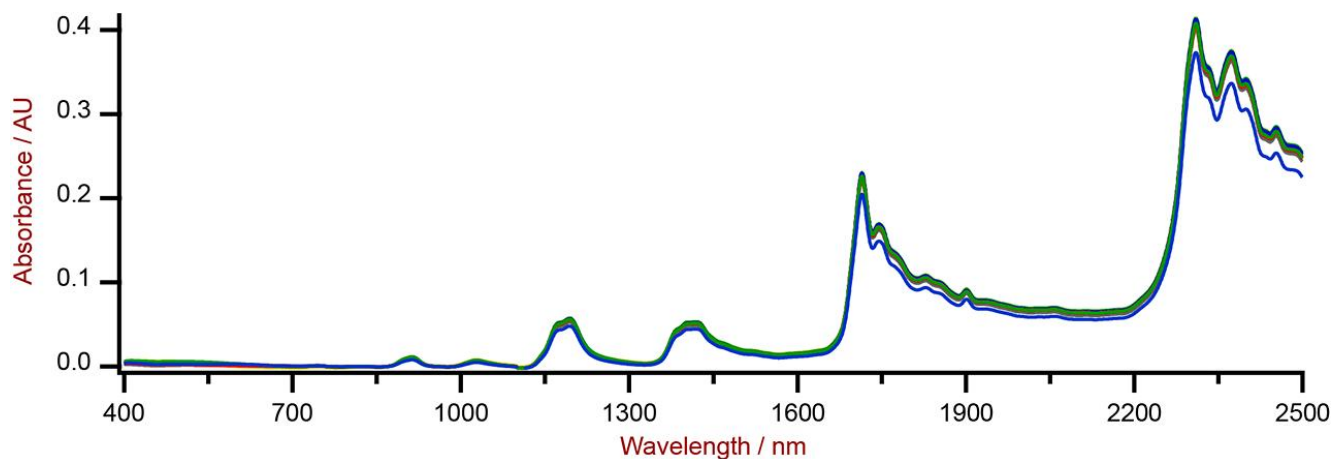
**Table 1.** Hardware and software equipment overview

Equipment	Metrohm number
NIRS DS2500 Solid Analyzer	2.922.0010
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208
NIRS large sample cup	6.7402.050

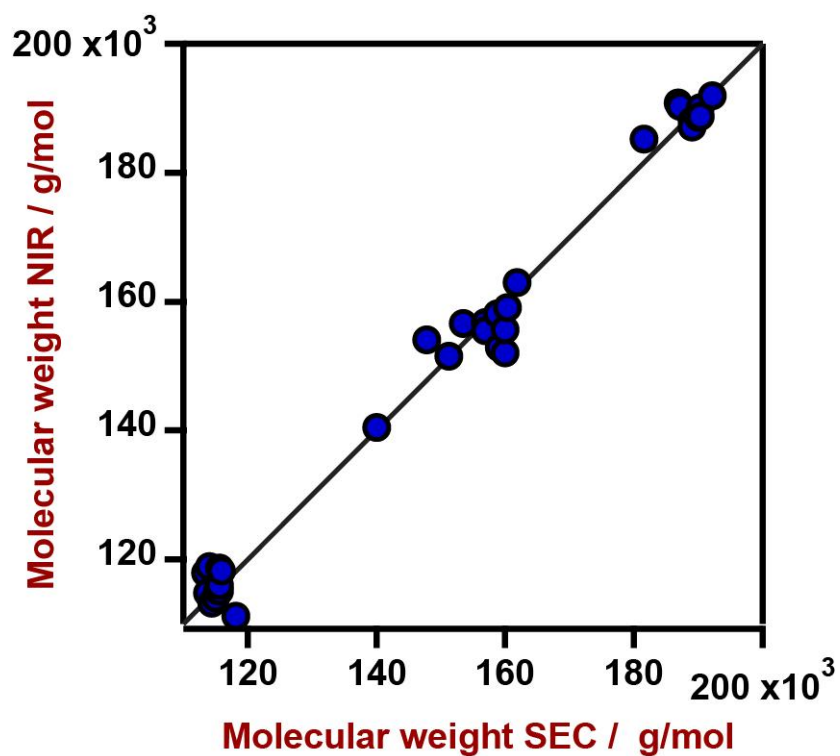
## RESULT

All 33 measured Vis-NIR spectra (**Figure 2**) were used to create a prediction model for quantification of molecular weight. The quality of the prediction model was evaluated using the cross-validation algorithm which displays a very high correlation between Vis-

NIR prediction and the reference values. The respective figures of merit (FOM) display the expected precision of a NIRS prediction during routine analysis (**Table 2**).



**Figure 2.** Vis-NIR spectra of PVC granulate samples with different molecular weights measured on a DS2500 Solid Analyzer.



**Figure 3.** Correlation diagram for the prediction of PVC molecular weight using a DS2500 Solid Analyzer.

**Table 2.** Figures of merit for the prediction of the molecular weight of PVC granulate samples using a DS2500 Solid Analyzer.

Figures of merit	Value
R <sup>2</sup>	0.988
Standard error of calibration	3640 g/mol
Standard error of cross-validation	5375 g/mol

## CONCLUSION

This application note demonstrates the feasibility to determine the molecular weight in PVC granulate samples with NIR spectroscopy. The PVC molecular weight was successfully determined with NIRS only differing from the reference data with an average of

1.5%. Vis-NIR spectroscopy enables a fast determination with no sample preparation and has proven itself as a suitable method to measure PVC molecular weight.

## CONTACT

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

[info@metrohm.fr](mailto:info@metrohm.fr)



### DS2500 Solid Analyzer

Spectroscopie proche infrarouge robuste pour le contrôle de la qualité en laboratoire et en environnement de production.

L'analyseur DS2500 Analyzer est la solution éprouvée et souple destinée aux analyses de routine de matières solides, de crèmes et, en option, de liquides, tout au long de la chaîne de fabrication. Sa conception robuste fait du DS2500 Analyzer un appareil insensible à la poussière, à l'humidité, aux vibrations ainsi qu'aux variations de température, et donc particulièrement adapté aux rudes conditions d'un environnement de production.

Le DS2500 couvre l'ensemble de la gamme spectrale de 400 à 2 500 nm et fournit des résultats exacts et reproductibles en moins d'une minute. Le DS2500 Analyzer répond aux exigences de l'industrie pharmaceutique et représente une aide précieuse pour les opérations de routine quotidiennes grâce à sa simplicité d'utilisation.

Grâce à des accessoires parfaitement adaptés à l'appareil, il atteint des performances sans précédent avec tous les types d'échantillons, quel que soit le défi qu'ils opposent (matières solides à gros grains comme les granulats ou échantillons semi-solides ou liquides telles les crèmes). La productivité lors de mesures de matières solides peut encore être augmentée par l'utilisation du MultiSample Cup, lequel permet des mesures automatisées en série jusqu'à un maximum de 9 échantillons.



### 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)



### DS2500 Récipient d'échantillon, grand

Grand récipient d'échantillon pour l'enregistrement de spectre par réflexion de poudres et de granulés en différents points de l'échantillon avec le NIRS DS2500 Analyzer.