



Application Note AN-NIR-054

Controllo qualità dello shampoo

Determinazione rapida e priva di sostanze chimiche dei tensioattivi nello shampoo

RIASSUNTO

La determinazione di sodio lauriletere solfato (SLES), cocamidopropil betaina (CABP), ossido di propilammina di cocamide (CAW), cocamide dietanolammide (DEA) e carbopol nello shampoo è un processo costoso e lungo a causa della grande quantità di sostanze chimiche necessarie per l'analisi. Questa Application Note dimostra che l'analizzatore solido DS2500 operante nella regione spettrale del visibile e del vicino infrarosso (Vis-NIR) fornisce un

soluzione economica e veloce per un **determinazione simultanea** di sodio laureth solfato (SLES), cocamidopropil betaina (CABP), cocamidopropilammina ossido (CAW), cocamide dietanolamina (DEA) e carbopol nello shampoo. **Senza preparazione del campione o sostanze chimiche necessarie**, la spettroscopia Vis-NIR consente l'analisi di questi parametri in **meno di un minuto**.

STRUMENTI DI ANALISI

I campioni di shampoo sono stati misurati con un analizzatore solido DS2500 in modalità di trasflessione sull'intero intervallo di lunghezze d'onda (400–2500 nm). È stata impiegata una tazza per liquami DS2500, che semplifica il posizionamento del campione e la pulizia del recipiente del campione. Il riflettore diffuso in oro da 1 mm definisce la stessa lunghezza del percorso per tutte le misurazioni per garantire risultati riproducibili. Come visualizzato in **Figura 1**, i campioni sono stati misurati senza alcuna preparazione. Il pacchetto software Metrohm Vision Air Complete è stato utilizzato per l'acquisizione di tutti i dati e lo sviluppo di modelli predittivi.

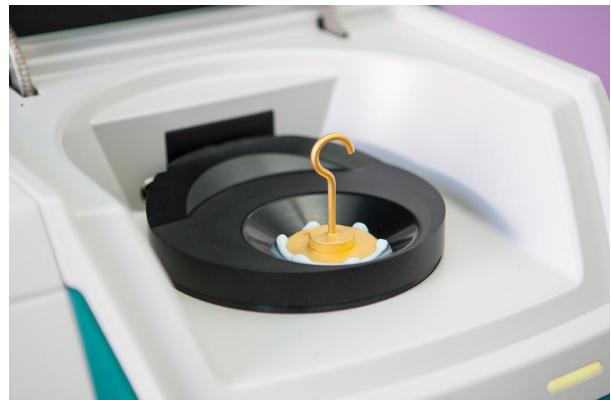


Figura 1. Analizzatore solido DS2500 e un campione di shampoo presente nella tazza rotante per liquami DS2500.

Tabella 1. Panoramica delle apparecchiature hardware e software

Attrezzatura	Numero metrohm
Analizzatore solido DS2500	2.922.0010
Tazza per liquame DS2500	6.7490.430
Riflettore Diffuso Oro 1 mm	6.7420.000
Vision Air 2.0 completo	6.6072.208

Gli spettri Vis-NIR ottenuti (**figura 2**) sono stati utilizzati per creare modelli predittivi per la quantificazione del sodio laureth solfato (SLES), della cocamidopropil betaina (CABP), della cocamidopropilammina ossido (CAW), della cocamide dietanolamina (DEA) e del carbopol nello shampoo.

La qualità dei modelli di previsione è stata valutata utilizzando diagrammi di correlazione, che mostrano la relazione tra la previsione Vis-NIR e i valori del metodo primario. I rispettivi valori di riferimento (FOM) mostrano la precisione attesa di una previsione durante l'analisi di routine.

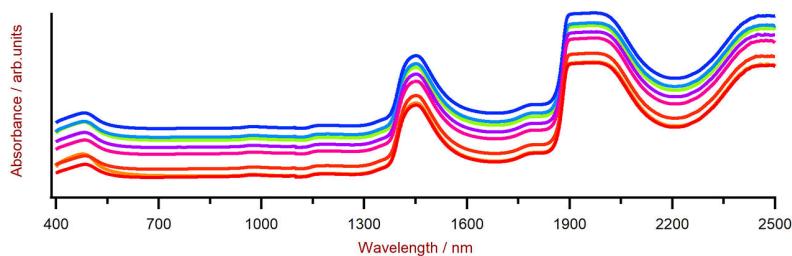


Figura 2. Una selezione di spettri Vis-NIR di shampoo ottenuti utilizzando un analizzatore DS2500 e una tazza per liquami DS2500. Per motivi di visualizzazione è stato applicato un offset dello spettro.

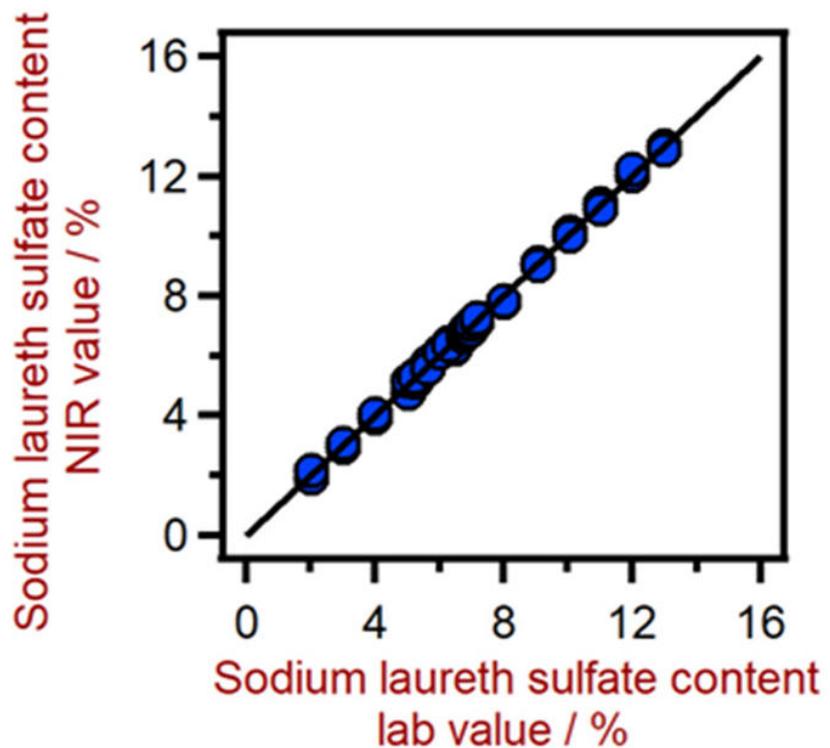


Figura 3. Diagramma di correlazione per la previsione del contenuto di sodio laureth sulfato (SLS) utilizzando un analizzatore solido DS2500. Il valore di laboratorio SLS è stato valutato mediante titolazione.

Tabella 2. Valori di riferimento per la previsione del sodio laureth sulfate (SLS) contenuto nello shampoo utilizzando un analizzatore solido DS2500.

Riferimento	Valore
R^2	0,998
Errore standard di calibrazione	0,13%
Errore standard di convalida incrociata	0,14%

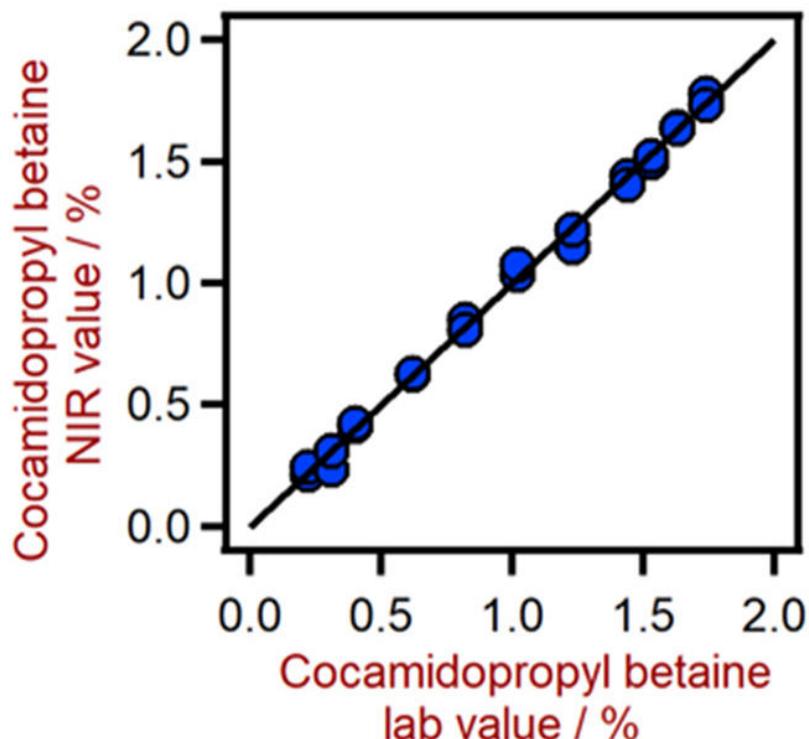


Figura 4. Diagramma di correlazione per la previsione del contenuto di cocamidopropil betaina (CABP) utilizzando un analizzatore solido DS2500. Il CABP è stato valutato mediante titolazione.

Tabella 3. Valori di riferimento per la previsione del contenuto di cacaomidopropil betaina (CABP) nello shampoo utilizzando un analizzatore solido DS2500.

Riferimento	Valore
R^2	0,996
Errore standard di calibrazione	0,04%
Errore standard di convalida incrociata	0,05%

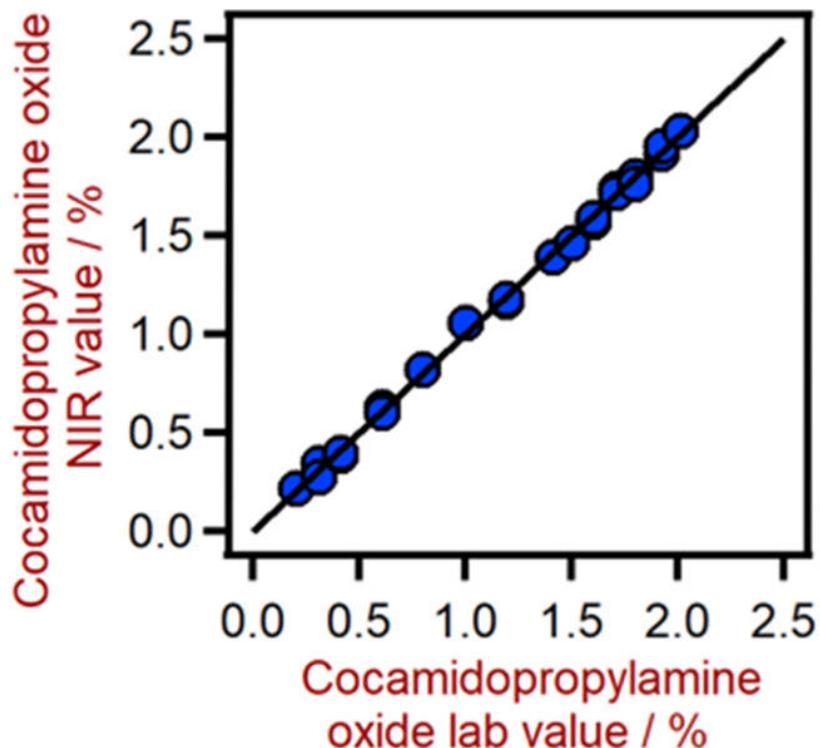


Figura 5. Diagramma di correlazione per la previsione dell'ossido di cocamidopropilammina (CAW) utilizzando un analizzatore solido DS2500. Il valore di laboratorio CAW è stato valutato mediante titolazione.

Tabella 4. Valori di riferimento per la previsione del contenuto di ossido di cacaomidopropilammina (CAW) nello shampoo utilizzando un analizzatore solido DS2500.

Riferimento	Valore
R^2	0,998
Errore standard di calibrazione	0,031%
Errore standard di convalida incrociata	0,058%

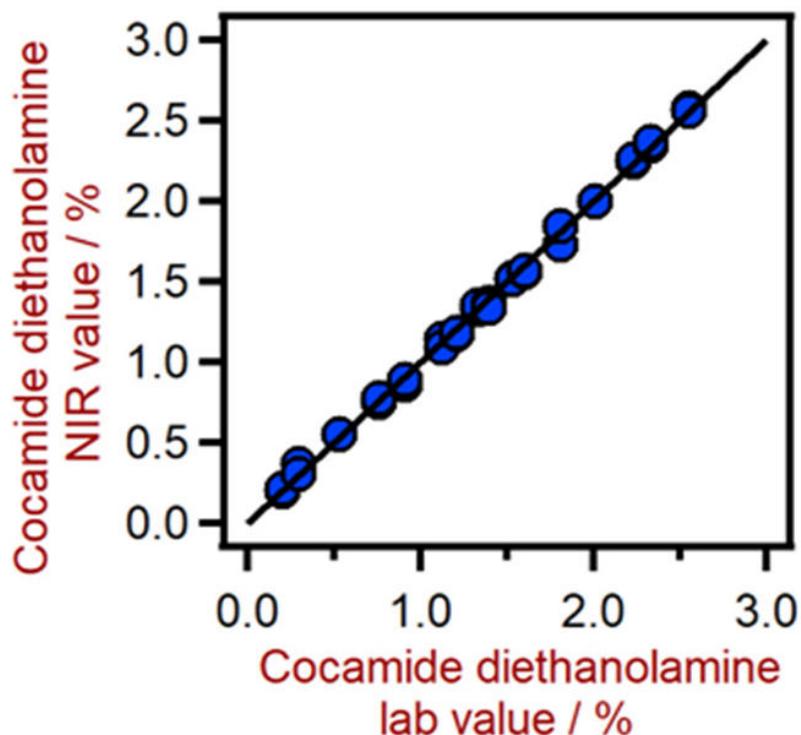


Figura 6. Diagramma di correlazione per la previsione della cocamide dietanolamina (DEA) utilizzando un analizzatore solido DS2500. Il valore di laboratorio DEA è stato valutato mediante titolazione.

Tabella 5. Valori di riferimento per la previsione del contenuto di cacaominde dietanolamina (DEA) nello shampoo utilizzando un analizzatore solido DS2500.

Riferimento	Valore
R^2	0,998
Errore standard di calibrazione	0,034%
Errore standard di convalida incrociata	0,036%

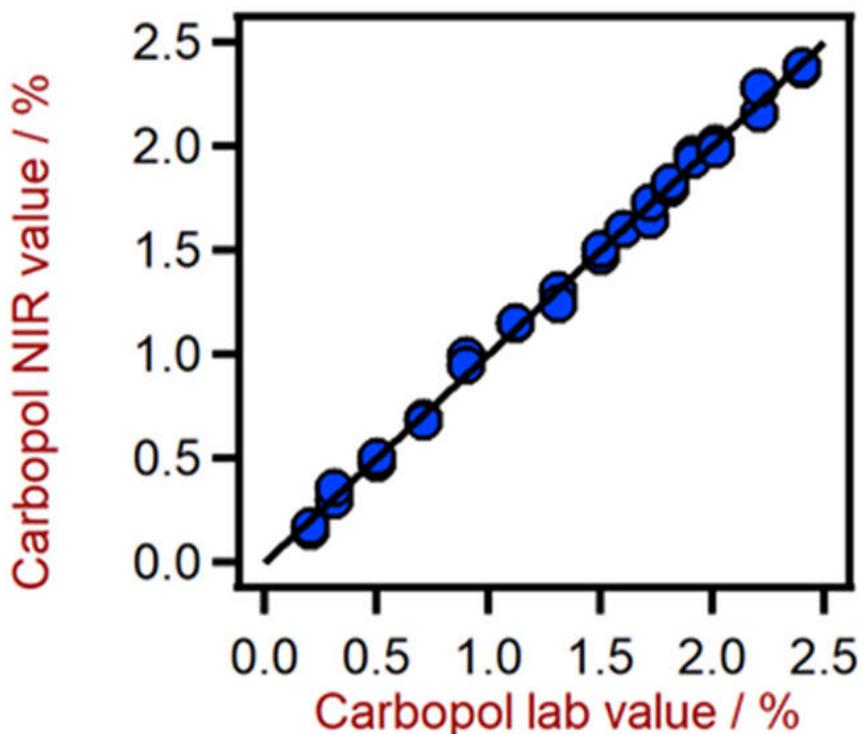


Figura 7. Diagramma di correlazione per la previsione del contenuto di carbopol utilizzando un analizzatore solido DS2500. Il valore di carbopol lab è stato valutato mediante titolazione.

Tabella 6. Valori di riferimento per la previsione del carbopol contenuto nello shampoo utilizzando un analizzatore solido DS2500.

Riferimento	Valore
R^2	0,969
Errore standard di calibrazione	0,290%
Errore standard di convalida incrociata	0,410%

CONCLUSIONE

Questa Application Note dimostra la fattibilità della spettroscopia NIR per l'analisi di sodio laureth sulfato (SLES), cocamidopropil betaina (CABP), cocamidopropilammina ossido (CAW), cocamide

dietanolamina (DEA) e carbopol nello shampoo. Rispetto ai metodi chimici a umido i **costi di gestione sono notevolmente inferiori** quando si utilizza la spettroscopia NIR (Tabella 7 e Figura 8).

Tabella 7. Confronto dei costi di gestione per la determinazione dei parametri di qualità chiave negli shampoo con spettroscopia di titolazione/HPLC e NIR.

	Metodo di laboratorio	Metodo NIR
Numero di analisi al giorno	10	10
Costo dell'operatore all'ora	\$25	\$25
Costi dei materiali di consumo e dei prodotti chimici (SLS, CABP, CAW, DEA, carbopol)	\$5	\$1
Tempo speso per analisi (SLS, CABP, CAW, DEA, carbopol)	5 minuti	1 minuto
Costi di gestione totali (all'anno)	\$18 188	\$2 063

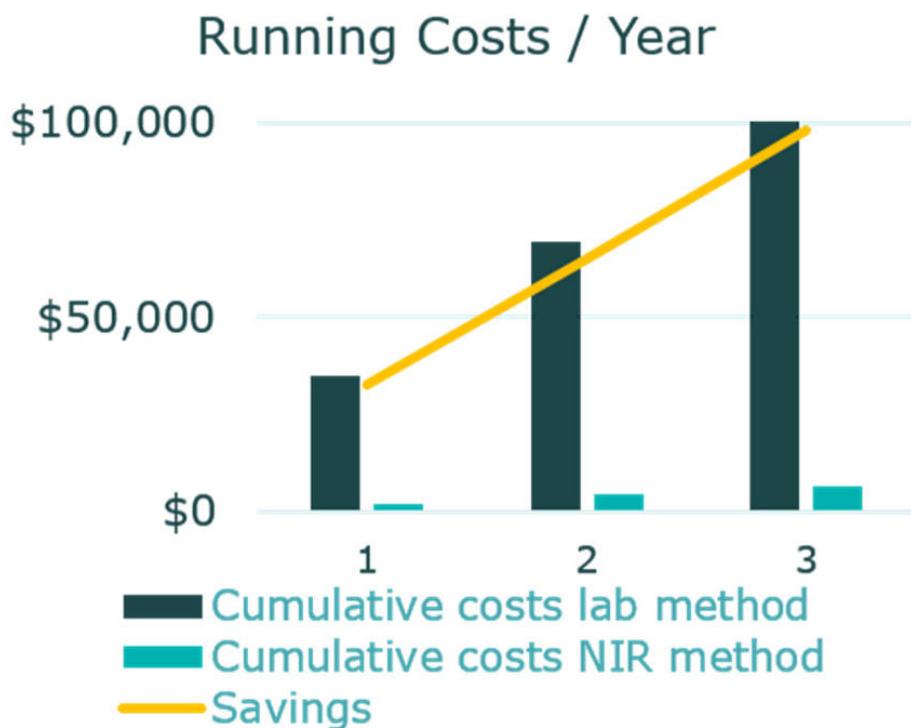


Figura 8. Confronto dei costi cumulativi per la determinazione dei parametri di qualità chiave negli shampoo con spettroscopia di titolazione/HPLC e NIR.

CONTACT

Metrohm Italiana Srl
Via G. Di Vittorio, 5
21040 Origgio (VA)

info@metrohm.it



DS2500 Solid Analyzer

Robusta spettroscopia nel vicino infrarosso per il controllo di qualità in laboratorio e nell'ambiente di produzione.

DS2500 Analyzer è la soluzione comprovata e flessibile per l'analisi di routine di sostanze solide, creme ed eventualmente anche liquidi lungo tutta la catena produttiva. Il design robusto rende lo strumento DS2500 Analyzer insensibile a polveri, umidità, vibrazioni e oscillazioni di temperatura e quindi ideale per l'utilizzo in ambienti di produzione difficili.

DS2500 copre l'intero campo spettrale da 400 a 2.500 nm e fornisce risultati precisi e riproducibili in meno di un minuto. DS2500 Analyzer soddisfa i requisiti dell'industria farmaceutica e supporta gli utenti, grazie alla facilità di utilizzo, nelle loro attività di routine quotidiane.

Grazie agli accessori perfetti per l'apparecchio, è possibile ottenere risultati ottimali anche con i tipi di campioni più impegnativi, quali per esempio sostanze solide a grana grossa come i granulati oppure i campioni semisolidi-liquidi come creme. Nella misurazione delle sostanze solide è possibile migliorare la produttività grazie all'impiego di MultiSample Cup, che consentono misure automatiche in serie fino a 9 campioni.



DS2500 Slurry Cup

Lo Slurry Cup è il contenitore per campione ideale per l'analisi di sostanze ad alta viscosità con il DS2500. Grazie al design aperto, il posizionamento di paste e creme nello Slurry Cup è agevole e consente anche una pulizia rapida ed efficace.

In combinazione con il Liquid Kit (**6.7400.010**) è possibile analizzare anche campioni viscosi chiari.



Riflettore in oro NIRS, 1 mm di spessore complessivo
Riflettore in oro per la misura della transflessione di liquidi. Combinabile con i seguenti dispositivi:

- NIRS DS2500 Analyzer (**numero ordine d'acquisto: 2.922.0010**)
- NIRS XDS MasterLab Analyzer (**numero ordine d'acquisto: 2.921.1310**)
- NIRS XDS MultiVial Analyzer (**numero ordine d'acquisto: 2.921.1120**)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer (**numero ordine d'acquisto: 2.921.1110**)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer – Solids (**numero ordine d'acquisto: 2.921.1210**)



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - Software universale per la spettroscopia.

Vision Air Complete è una soluzione software moderna e facile da utilizzare per l'impiego in ambiente regolamentato.

Panoramica dei vantaggi di Vision Air:

- le applicazioni software individuali con interfacce utente personalizzate garantiscono un funzionamento intuitivo e semplice
- semplice creazione e manutenzione dei protocolli
- banca dati SQL per una gestione dei dati sicura e semplice

La versione Vision Air Complete (66072208) include tutte le applicazioni per la garanzia della qualità tramite spettroscopia Vis-NIR:

- applicazione per la gestione degli strumenti e dei dati
- applicazione per lo sviluppo di metodi
- applicazione per l'analisi di routine

Altre soluzioni Vision Air Complete:

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