



Application Note AN-NIR-146

Controllo di qualità del deodorante mediante spettroscopia nel vicino infrarosso

Determinazione del pH, della densità, della viscosità e del contenuto di alluminio in pochi secondi

I prodotti per la cura della persona, come i deodoranti, vengono testati utilizzando diversi metodi analitici che richiedono molto tempo, sia durante la produzione che dopo la realizzazione del prodotto finale. Questa Application Note illustra come parametri qualitativi come viscosità, pH, densità e contenuto di alluminio nei deodoranti possano essere

misurati simultaneamente e senza alcuna preparazione del campione tramite spettroscopia nel vicino infrarosso (NIRS). La NIRS è una tecnologia rapida, priva di sostanze chimiche e molto intuitiva. La spettroscopia NIR può essere utilizzata sia in linea durante il processo di produzione, sia offline in un laboratorio di controllo qualità.

STRUMENTAZIONE PER L'ANALISI

Sessanta campioni di deodorante sono stati misurati in un OMNIS NIR Analyzer Solid (**Figura 1**). Tutte le misurazioni sono state eseguite in modalità transflessione (1000–2250 nm) utilizzando un riflettore di grandi dimensioni con gap di 1 mm e un recipiente di transflessione.

I valori di riferimento del contenuto di alluminio sono stati misurati con la titolazione (AN-T-228), valori di pH con un pHmetro e viscosità e densità con un viscosimetro e un densimetro, rispettivamente.

Per l'acquisizione di tutti i dati e lo sviluppo del modello di previsione è stato utilizzato il software OMNIS.



Figure 1. OMNIS NIR Analyzer Solid con recipiente di transflessione e riflettore di grandi dimensioni.

Tabella 1. Panoramica delle apparecchiature hardware e software.

Strumento	Codice articolo
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

RISULTATO

Gli spettri NIR ottenuti dai campioni di deodorante (**Figura 2**) sono stati utilizzati per creare modelli di previsione per pH, viscosità, densità e contenuto di alluminio. La qualità dei modelli di previsione è stata valutata utilizzando diagrammi di correlazione che

mostrano un'elevata correlazione tra la previsione NIR e i valori di riferimento. Le rispettive cifre di merito (FOM) mostrano la precisione attesa di una previsione durante l'analisi di routine (**Figure 3–6**).

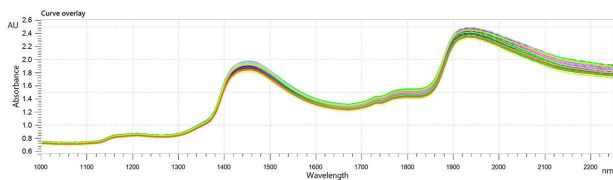


Figure 2. Spettri NIR di vari campioni di deodorante analizzati su un OMNIS NIR Analyzer Solid.

Risultato contenuto di alluminio

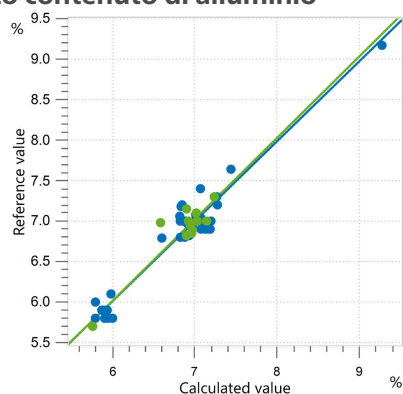


Figure 3. Diagramma di correlazione e rispettivi indici di merito per la previsione del contenuto di alluminio nel deodorante utilizzando un OMNIS NIR Analyzer Solid. Il set di dati di calibrazione è mostrato in blu, mentre il set di dati di validazione esterna è in verde. La titolazione è stata utilizzata come metodo di riferimento per la determinazione dell'alluminio nel deodorante.

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

Risultato della densità

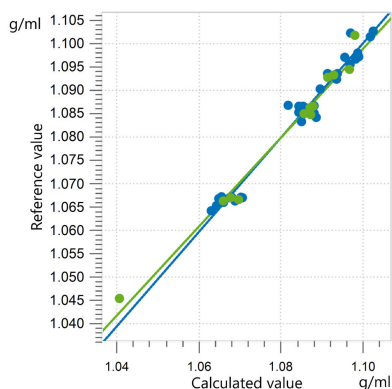


Figure 4. Diagramma di correlazione e rispettivi indici di merito per la previsione della densità del deodorante utilizzando un OMNIS NIR Analyzer Solid. Il set di dati di calibrazione è mostrato in blu, mentre il set di dati di validazione esterna è in verde. Come metodo di riferimento è stato utilizzato un densimetro.

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

Risultato della viscosità

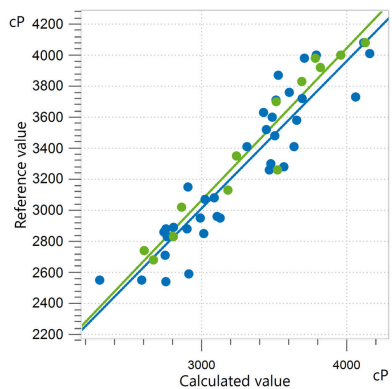


Figure 5. Diagramma di correlazione e rispettivi indici di merito per la previsione della viscosità di un deodorante utilizzando un OMNIS NIR Analyzer Solid. Il set di dati di calibrazione è mostrato in blu, mentre il set di dati di validazione esterna è in verde. I valori di riferimento sono stati ottenuti con un viscosimetro.

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

Risultato pH

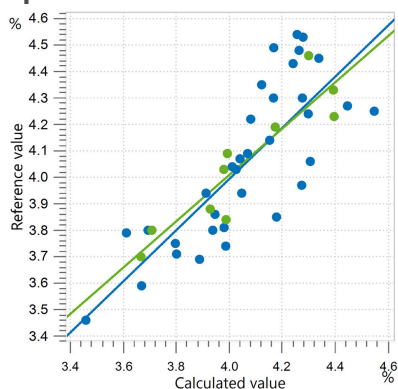


Figure 6. Diagramma di correlazione e rispettivi indici di merito per la previsione del valore di pH nel deodorante utilizzando un OMNIS NIR Analyzer Solid. Il set di dati di calibrazione è mostrato in blu, mentre il set di dati di validazione esterna è in verde. Un pHmetro è stato utilizzato come metodo di riferimento per la misurazione del pH del deodorante.

R^2	SEC	SECV	SEP
0.832	0.13	0.18	0.10

CONCLUSIONE

Questa Application Note illustra la fattibilità dell'utilizzo della spettroscopia NIR per l'analisi del contenuto di alluminio, del pH, della viscosità e della densità nei deodoranti. Con la spettroscopia NIR, la misurazione può essere eseguita in pochi secondi e non richiede l'utilizzo di sostanze chimiche. Questa

soluzione è più semplice e molto più rapida rispetto ad altre tecniche convenzionali e può essere utilizzata in linea in diverse fasi della catena di produzione o durante il controllo qualità del prodotto finale, con un risparmio di tempo e denaro per i produttori.

CONTACT

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

info@metrohm.it

CONFIGURAZIONE



OMNIS NIR Analyzer Solid

Spettrometro nel vicino infrarosso per campioni solidi e viscosi.

OMNIS NIR Analyzer è la soluzione per spettroscopia nel vicino infrarosso (NIRS) sviluppata e prodotta secondo gli standard di qualità svizzeri utilizzabile per l'analisi di routine lungo l'intera catena di produzione. L'uso delle più recenti tecnologie e l'integrazione nel moderno OMNIS Software si riflettono nella velocità, operatività e flessibilità d'uso di questo spettrometro NIR.

Panoramica dei vantaggi di OMNIS NIR Analyzer Solid:

- Misurazioni di materie solide e campioni viscosi in meno di 10 secondi
- Misurazioni automatiche su più posizioni per risultati riproducibili anche in caso di campioni non omogenei
- Facile integrazione in un sistema di automazione o collegamento con altre tecnologie di analisi (titolazione)
- Supporto di numerosi contenitori portacampione



Riflettore grande OMNIS NIR, 1 mm

Riflettore con fessura di 1 mm (lunghezza del cammino ottico di 2 mm) per la misura della transflessione di liquidi.

Adatto ai contenitori per transflessione (6.07402.260 e 6.7401.000).



Contenitore per transflessione OMNIS NIR, 60 mm

Contenitore per transflessione otticamente piano per la misurazione spettrale di liquidi.

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

Licenza OMNIS Stand-Alone

Consente l'utilizzo stand-alone del software OMNIS su un computer Windows™.

Caratteristiche:

- la licenza contiene già una licenza per strumenti OMNIS.
- Deve essere attivata tramite il portale licenze Metrohm.
- Non è trasferibile su di un altro computer.

Licenza software Quant Development

Licenza software per la creazione e l'elaborazione di modelli di quantificazione in un'installazione Stand-Alone di OMNIS Software.