



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**).

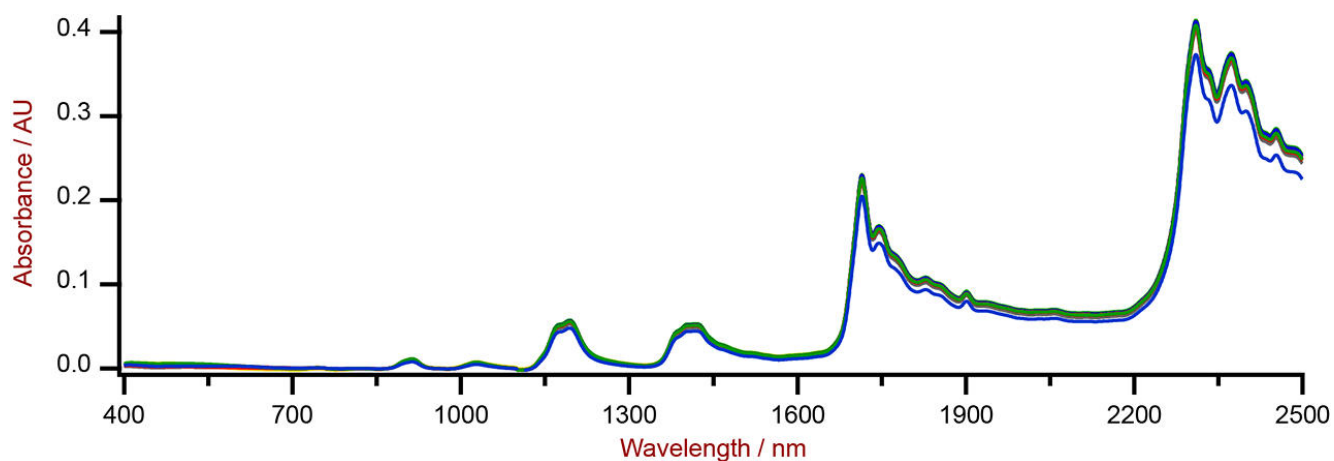


Figure 2. Vis-NIR spectra of PVC granulate samples with different molecular weights measured on a DS2500 Solid Analyzer.

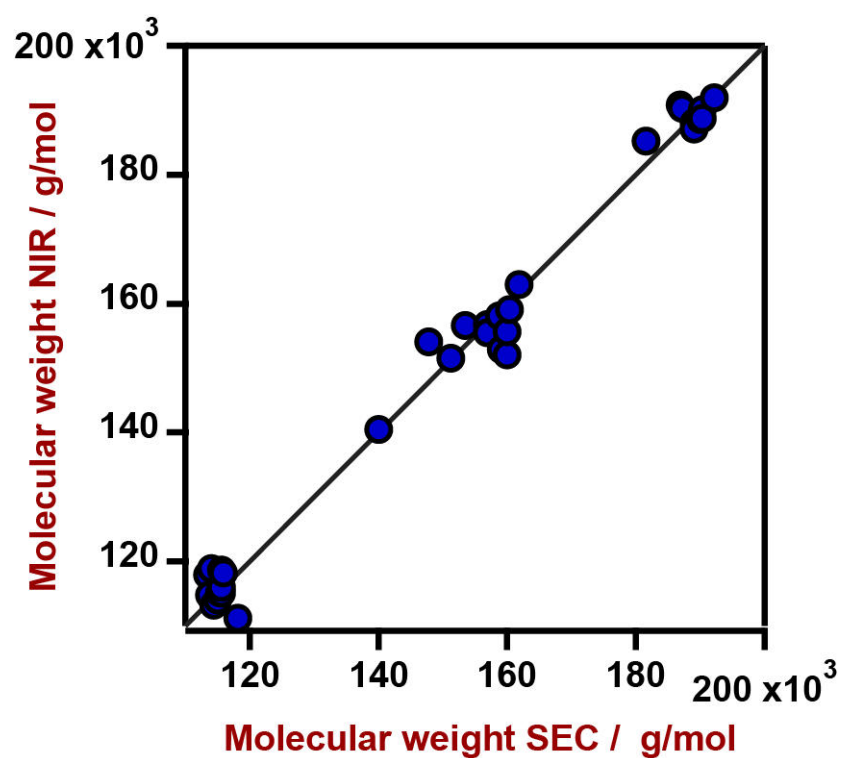


Figure 3. Correlation diagram for the prediction of PVC molecular weight using a DS2500 Solid Analyzer.

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^2	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 Inula
Shuttleworthstraße 25
1210 Wien

office@metrohm.at



DS2500 Solid Analyzer

Robuste Nahinfrarotspektroskopie für die Qualitätskontrolle im Labor sowie im Produktionsumfeld.

Der DS2500 Analyzer ist die bewährte, flexible Lösung für die Routineanalytik von Feststoffen, Cremes und optional auch Flüssigkeiten entlang der gesamten Produktionskette. Das robuste Design macht den DS2500 Analyzer unempfindlich gegen Staub, Feuchtigkeit, Vibrationen sowie Temperaturschwankungen und damit hervorragend geeignet für den Einsatz im rauen Produktionsumfeld.

Der DS2500 deckt den gesamten Spektralbereich von 400 bis 2500 nm ab und liefert in weniger als einer Minute genaue und reproduzierbare Ergebnisse. Der DS2500 Analyzer erfüllt die Anforderungen der pharmazeutischen Industrie und unterstützt durch die einfache Bedienung die Anwender in ihren täglichen Routineaufgaben.

Durch perfekt auf das Gerät abgestimmtes Zubehör werden bei jedem noch so herausfordernder Probentyp, wie z.B. grobkörnige Feststoffe wie Granulate oder halb fest-flüssige Proben wie Cremes, bestmögliche Ergebnisse erzielt. Bei Messungen von Feststoffen kann die Produktivität gesteigert werden durch Einsatz des MultiSample Cups, welches automatisierte Messungen in Serie von bis zu 9 Proben ermöglicht.



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - Universelle Spektroskopie Software.

Vision Air Complete ist eine moderne und einfach zu bedienende Softwarelösung für den Einsatz im regulierten Umfeld.

Die Vorteile von Vision Air im Überblick:

- Individuelle Softwareanwendungen mit angepassten Nutzeroberflächen gewährleisten eine intuitive und einfache Bedienung
- Einfache Erstellung und Wartung von Arbeitsvorschriften
- SQL Datenbank für ein sicheres und einfaches Datenmanagement

Die Version Vision Air Complete (66072208) beinhaltet alle Anwendungen für die Qualitätssicherung mittels Vis-NIR Spektroskopie:

- Anwendung für das Instrumenten- und Datenmanagement
- Anwendung für die Methodenentwicklung
- Anwendung für die Routineanalyse

Weitere Vision Air Complete Lösungen:

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



DS2500 Probengefäß, gross

Grosses Probengefäß für die Spektrenaufnahme von Pulvern und Granulaten in Reflektion an unterschiedlichen Probenstellen mittels NIRS DS2500 Analyzer.