



Application Note AN-NIR-121

Wassergehalt in Propylenglykolmonomethylether (PGME)

Wasserbestimmung innerhalb von Sekunden mit NIRS möglich

Propylenglykolmonomethylether (1-Methoxy-2-propanol, oder PGME) ist eines von vielen Glykoether-Lösungsmitteln mit einer Vielzahl von Anwendungen. Es wird als Zwischenprodukt und in Formulierungen für industrielle, gewerbliche oder Verbrauchernwendungen verwendet, vor allem in Oberflächenbeschichtungen, Druckfarben, Reinigungslösungen, Enteisungs-/Anti-Eis-Formulierungen und in der Agrochemie. Es wird auch als Extraktionsmittel und als Koaleszenzmittel und

Fließverbesserer in Farben auf Wasserbasis verwendet.

Der Wassergehalt von Propylenglykolmethylether wird in der Regel durch Karl-Fischer-Titration (KF) gemessen, die Chemikalien erfordert und etwa fünf Minuten pro Bestimmung dauert. In dieser Application Note wird beschrieben, wie die Nahinfrarotspektroskopie (NIRS) als schnellere und kostengünstigere Alternative zur Wasserbestimmung in PGME eingesetzt werden kann.

EXPERIMENTELLE AUSRÜSTUNG

Proben von 1-Methoxy-2-propanol mit unterschiedlichem Wassergehalt (von 0,03 % bis 2 %) wurden mit einem OMNIS NIR Analyzer Liquid im Transmissionsmodus (1000-2250 nm) gemessen. Eine reproduzierbare Spektrenaufnahme wurde durch die eingebaute Temperaturkontrolle bei 30 °C erreicht. Der Einfachheit halber wurden Einweggefäße mit einer Schichtdicke von 8 mm verwendet, was eine Reinigung der Probengefäße überflüssig machte. Die OMNIS-Software wurde für die gesamte Datenerfassung und die Entwicklung von Vorhersagemodellen verwendet.



Abbildung 1. OMNIS NIR Analyzer und eine in ein Einwegfläschchen gefüllte Probe.

Tabelle 1. Übersicht der Hard- und Software

Ausrüstung	Artikelnummer
OMNIS NIR Analyzer Liquid	2.1070.0010
Halter OMNIS NIR, für Vials, 8 mm	6.07401.070
Einwegvial, 8 mm, Transmission	6.7402.240
OMNIS Stand-Alone Lizenz	6.06003.010
Quant Development Softwarelizenz	6.06008.002

ERGEBNIS

Die erhaltenen NIR-Spektren (**Abbildung 2**) wurden zur Erstellung eines Vorhersagemodells für die Quantifizierung von Wasser in 1-Methoxy-2-propanol verwendet. Die Qualität des Vorhersagemodells wurde anhand des Korrelationsdiagramms in

Abbildung 3 bewertet, das eine sehr hohe Korrelation zwischen der NIR-Vorhersage und den Referenzwerten zeigt. Die jeweiligen Leistungszahlen (FOM) zeigen die erwartete Genauigkeit einer Vorhersage während der Routineanalyse.

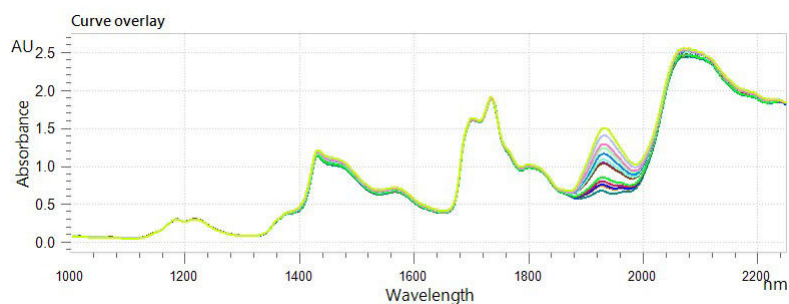


Abbildung 2. Überlagerte NIR-Spektren von Propylenglykolmonomethylether-Proben, die mit einem OMNIS NIR Analyzer Liquid analysiert wurden.

ERGEBNIS WASSERGEHALT IN 1-METHOXY-2-PROPANOL

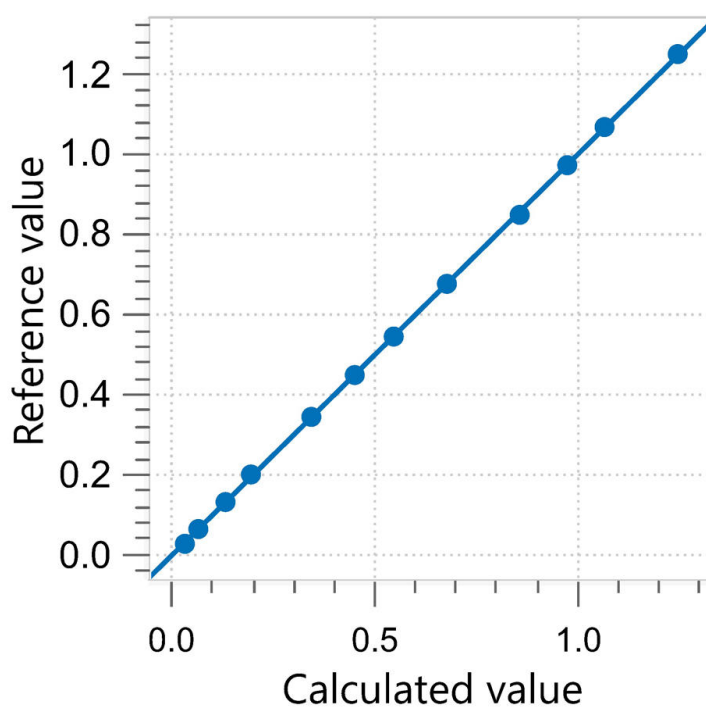


Abbildung 3. Korrelationsdiagramm und die entsprechenden Gütezahlen für die Vorhersage des Wassergehalts in Propylenglykolmonomethylether

R^2	SEC (%)	SECV (%)
1.000	0.0042	0.0048

FAZIT

Diese Application Note demonstriert die Möglichkeit, einen Schlüsselparameter für die Qualitätskontrolle von Propylenglykolmonomethylether (Wassergehalt) mit NIR-Spektroskopie zu bestimmen. Die Hauptvorteile der NIR-Spektroskopie gegenüber

nasschemischen Methoden sind die deutlich niedrigeren Betriebskosten und die deutlich kürzere Zeit bis zum Vorliegen eines Ergebnisses. Außerdem sind keine Chemikalien erforderlich, und die Technik zerstört die Proben nicht.

Tabelle 2. Zeit bis zur Ergebnisübersicht für die Wassergehaltsbestimmung mittels KF-Titration.

Parameter	Methode	Zeit bis zum Ergebnis
Wasser	Karl-Fischer-Titration	5 Minuten

CONTACT

Metrohm Deutschland
In den Birken 3
70794 Filderstadt

info@metrohm.de

KONFIGURATION



OMNIS NIR Analyzer Liquid

Nahinfrarot-Spektrometer für Flüssigproben.

Der OMNIS NIR Analyzer ist die nach Schweizer Qualitätsstandards entwickelte und produzierte Nahinfrarot-Spektroskopie (NIRS) Lösung für die Routineanalytik entlang der gesamten Produktionskette. Die Nutzung neuester Technologien und die Einbindung in die moderne OMNIS Software spiegeln sich in der Geschwindigkeit, der Bedienbarkeit und dem flexiblen Einsatz dieser NIR-Spektrometer wider.

Die Vorteile des OMNIS NIR Analyzer Liquid im Überblick:

- Messungen von Flüssigproben in weniger als 10 Sekunden
- Temperaturkontrolle an der Probe von 25°C – 80°C
- Automatische Erkennung des Einsetzen und der Entnahme des Probengefäßes
- Einfache Einbindung in ein Automationssystem oder Verknüpfung mit weiteren Analysetechnologien (Titration)
- Unterstützung zahlreicher Probengefäße mit unterschiedlicher Pfadlänge



Halter OMNIS NIR, Vial, 8 mm

Vialhalter für den OMNIS NIR Analyzer für 8 mm Einwegvials (6.7402.240).



OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

Einwegvial, 8 mm, Transmission, Anz. 100

100 Einwegvials aus Glas (Borosilikat) mit einer optischen Pfadlänge von 8 mm für Analysen von Flüssigkeiten in Transmission. Die Einwegvials werden mit den zugehörigen Verschlussstopfen (Stückzahl = 100) geliefert.

Kompatibel mit:

- Halter OMNIS NIR, Vial, 8 mm (6.07401.070)
- DS2500 Halter für 8 mm Einwegvials (6.7492.020)

OMNIS Stand-Alone Lizenz

Ermöglicht den Stand-Alone Betrieb der OMNIS Software auf einem Windows™ Computer.

Merkmale:

- Die Lizenz enthält bereits eine OMNIS Geräte Lizenz.
- Muss über das Metrohm Lizenzierungsportal aktiviert werden.

Softwarelizenz Quant Development

Softwarelizenz für die Erstellung und Bearbeitung von Quantifizierungsmodellen in einer Stand-Alone OMNIS Software Installation.