



Application Note AN-NIR-054

Quality Control of Shampoo

Chemical-free and fast determination of surfactants in shampoo

Determination of sodium laureth sulfate (SLES), cocamidopropyl betaine (CABP), cocamidopropylamine oxide (CAW), cocamide diethanolamine (DEA), and carbopol in shampoo is a cost- and time-intensive process due to the use of large volumes of chemicals per analysis.

This application note demonstrates that the DS2500 Solid Analyzer operating in the visible and near-infrared spectral region (Vis-NIR) provides a **cost-**

efficient and fast solution for a **simultaneous determination** of sodium laureth sulfate (SLES), cocamidopropyl betaine (CABP), cocamidopropylamine oxide (CAW), cocamide diethanolamine (DEA), and carbopol in shampoo. With **no sample preparation or chemicals needed**, Vis-NIR spectroscopy allows for the analysis of these parameters in **less than a minute**.

EXPERIMENTAL EQUIPMENT

Shampoo samples were measured with a DS2500 Solid Analyzer in transflection mode over the full wavelength range (400–2500 nm). A DS2500 Slurry Cup was employed, which simplifies the positioning of the sample and cleaning of the sample vessel. The 1 mm gold diffuse reflector defines the same path length for all measurements to guarantee reproducible results. As displayed in **Figure 1**, samples were measured without any preparation. The Metrohm software package Vision Air Complete was used for all data acquisition and prediction model development.

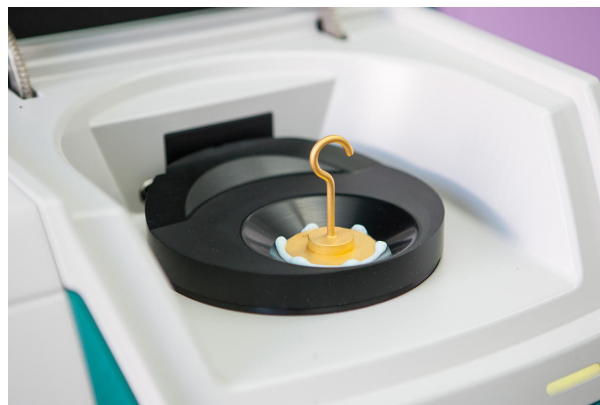


Figure 1. DS2500 Solid Analyzer and a shampoo sample present in the rotating DS2500 Slurry Cup.

Table 1. Hardware and software equipment overview

Equipment	Metrohm number
DS2500 Solid Analyzer	2.922.0010
DS2500 Slurry Cup	6.7490.430
Gold Diffuse Reflector 1 mm	6.7420.000
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

RESULTS

The obtained Vis-NIR spectra (**Figure 2**) were used to create prediction models for quantification of the sodium laureth sulfate (SLES), cocamidopropyl betaine (CABP), cocamidopropylamine oxide (CAW), cocamide diethanolamine (DEA), and carbopol in shampoo. The quality of the prediction models was

evaluated using correlation diagrams, which display the relationship between Vis-NIR prediction and primary method values. The respective figures of merit (FOM) display the expected precision of a prediction during routine analysis.

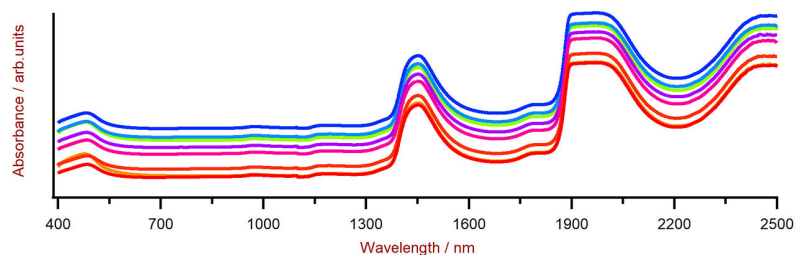


Figure 2. A selection of shampoo Vis-NIR spectra obtained using a DS2500 Analyzer and a DS2500 Slurry Cup. For display reasons a spectra offset was applied.

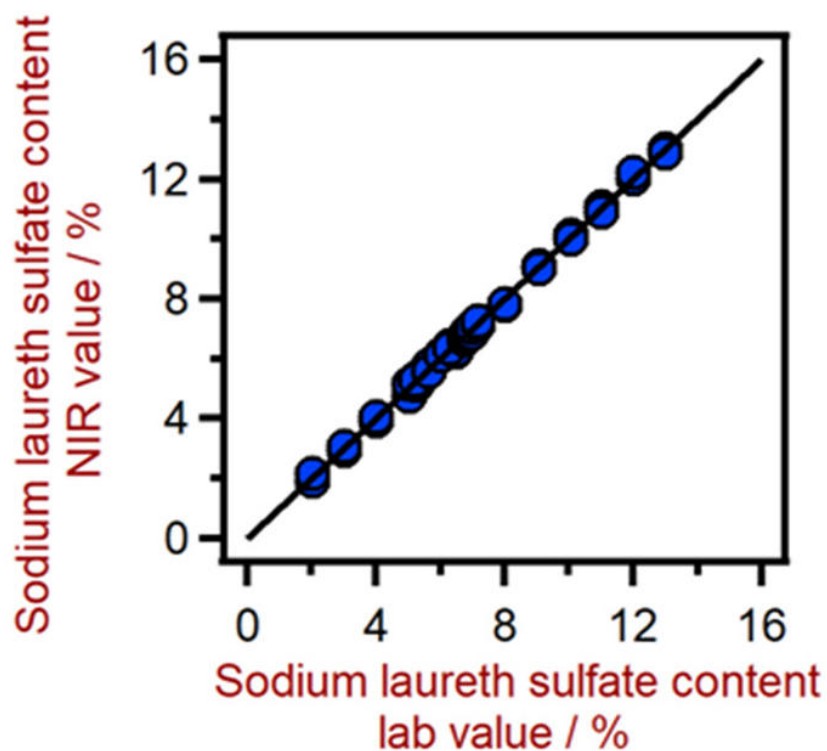


Figure 3. Correlation diagram for the prediction of the sodium laureth sulfate (SLS) content using a DS2500 Solid Analyzer. The SLS lab value was evaluated using titration.

Table 2. Figures of merit for the prediction of the sodium laureth sulfate (SLS) content in shampoo using a DS2500 Solid Analyzer.

Figures of merit	Value
R^2	0.998
Standard error of calibration	0.13%
Standard error of cross-validation	0.14%

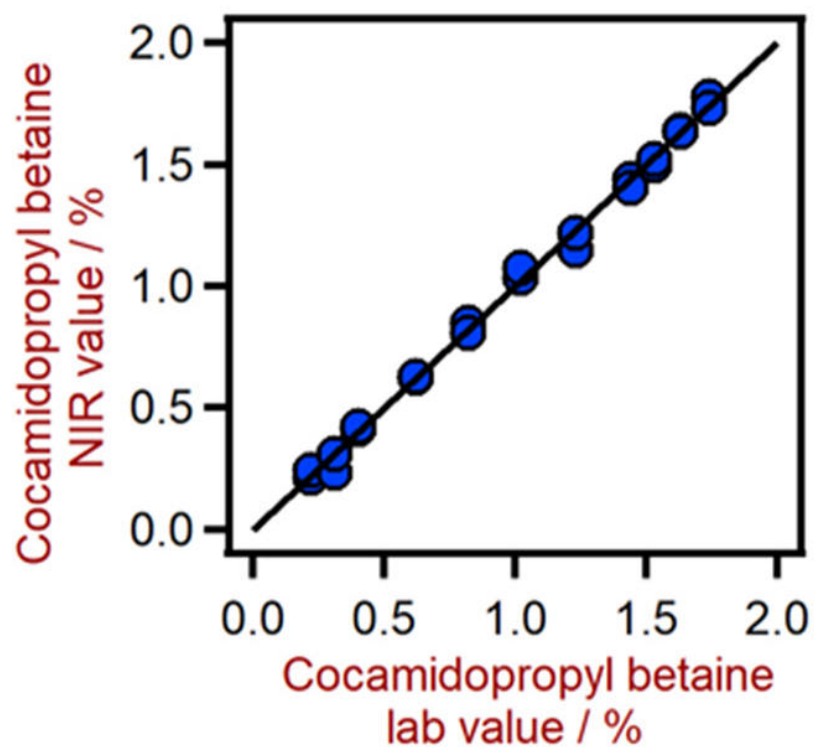


Figure 4. Correlation diagram for the prediction of the cocamidopropyl betaine (CABP) content using a DS2500 Solid Analyzer. The CABP was evaluated using titration.

Table 3. Figures of merit for the prediction of cocoamidopropyl betaine (CABP) content in shampoo using a DS2500 Solid Analyzer.

Figures of merit	Value
R^2	0.996
Standard error of calibration	0.04%
Standard error of cross-validation	0.05%

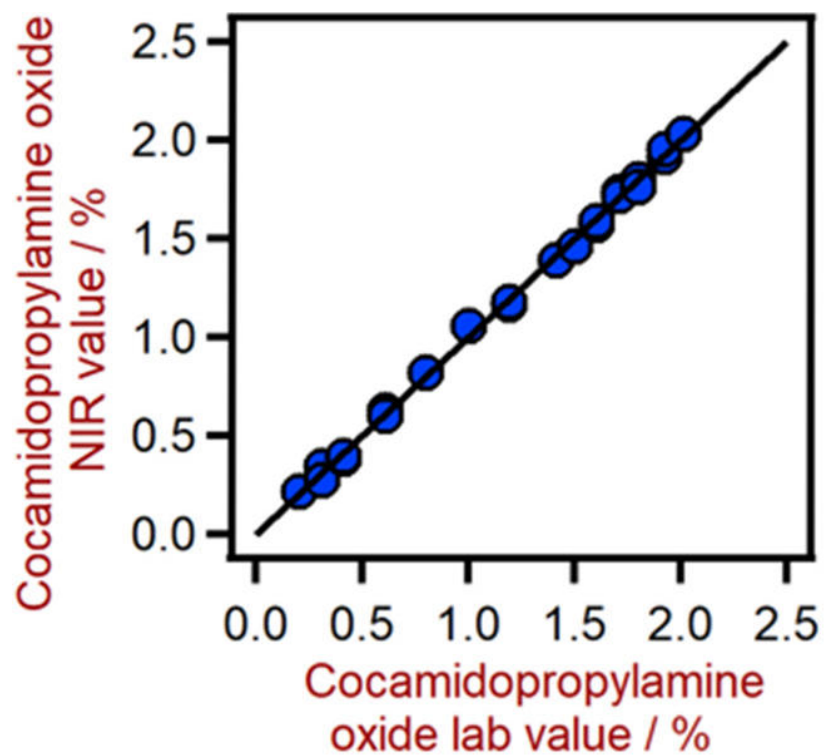


Figure 5. Correlation diagram for the prediction of cocamidopropylamine oxide (CAW) using a DS2500 Solid Analyzer. The CAW lab value was evaluated using titration.

Table 4. Figures of merit for the prediction of cocoamidopropylamine oxide (CAW) content in shampoo using a DS2500 Solid Analyzer.

Figures of merit	Value
R^2	0.998
Standard error of calibration	0.031%
Standard error of cross-validation	0.058%

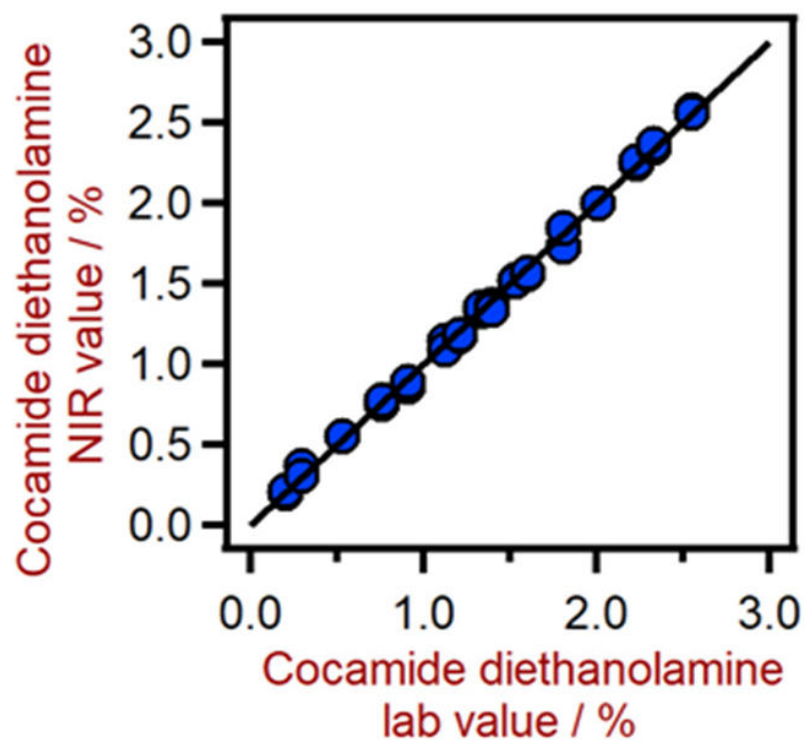


Figure 6. Correlation diagram for the prediction of the cocamide diethanolamine (DEA) using a DS2500 Solid Analyzer. The DEA lab value was evaluated using titration.

Table 5. Figures of merit for the prediction of cocoaminde diethanolamine (DEA) content in shampoo using a DS2500 Solid Analyzer.

Figures of merit	Value
R^2	0.998
Standard error of calibration	0.034%
Standard error of cross-validation	0.036%

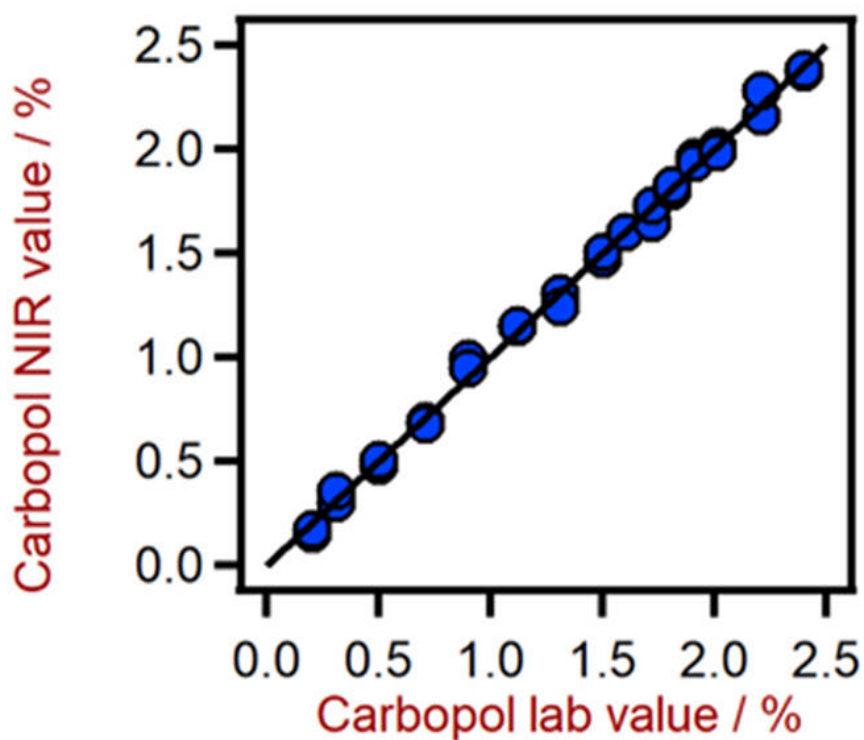


Figure 7. Correlation diagram for the prediction of the carbopol content using a DS2500 Solid Analyzer. The carbopol lab value was evaluated using titration.

Table 6. Figures of merit for the prediction of carbopol content in shampoo using a DS2500 Solid Analyzer.

Figures of merit	Value
R^2	0.969
Standard error of calibration	0.290%
Standard error of cross-validation	0.410%

CONCLUSION

This application note demonstrates the feasibility of NIR spectroscopy for the analysis of sodium laureth sulfate (SLES), cocamidopropyl betaine (CABP), cocamidopropylamine oxide (CAW), cocamide

diethanolamine (DEA), and carbopol in shampoo. In comparison to wet chemical methods **running costs are significantly lower** when using NIR spectroscopy (Tabel 7 and Figure 8).

Table 7. Comparison of running costs for the determination of the key quality parameters in shampoo with titration/HPLC and NIR spectroscopy.

	Lab method	NIR method
Number of analyses per day	10	10
Cost of operator per hour	\$25	\$25
Costs of consumables and chemicals (SLS, CABP, CAW, DEA, carbopol)	\$5	\$1
Time spent per analysis (SLS, CABP, CAW, DEA, carbopol)	5 min	1 min
Total running costs (per year)	\$18,188	\$2,063

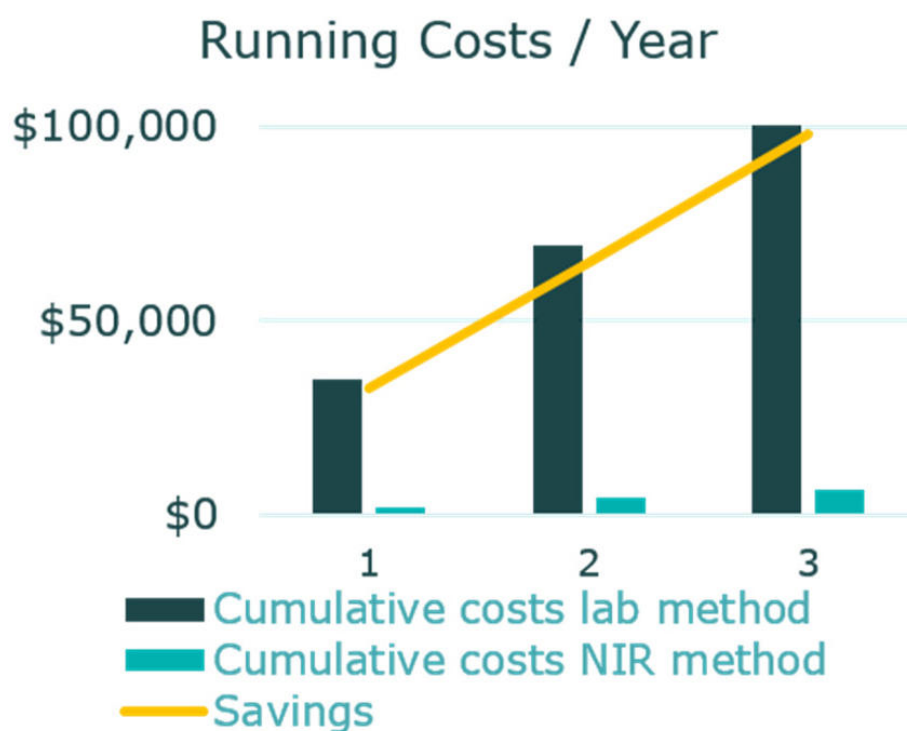


Figure 8. Comparison of the cumulative costs costs for the determination of key quality parameters in shampoo with titration/HPLC and NIR spectroscopy.

CONTACT

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

info@metrohm.fr



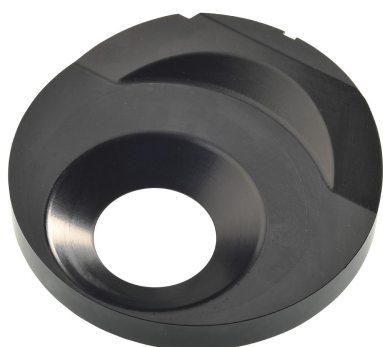
DS2500 Solid Analyzer

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.



DS2500 Slurry Cup

Le récipient d'échantillon Slurry Cup est idéal pour l'analyse de substances de haute viscosité avec le DS2500. Le positionnement des pâtes et des crèmes dans le Slurry Cup est très simple grâce à sa conception ouverte, il permet également un nettoyage rapide et efficace.

En association avec le Liquid Kit (6.7400.010), des échantillons clairs et visqueux peuvent également être examinés.



NIRS Réflecteur en or, épaisseur de revêtement totale de 1 mm

Réflecteur en or pour la mesure des liquides par transflexion. Peut se combiner avec les appareils suivants :

- NIRS DS2500 Analyzer (numéro de commande : **2.922.0010**)
- NIRS XDS MasterLab Analyzer (numéro de commande : **2.921.1310**)
- NIRS XDS MultiVial Analyzer (numéro de commande : **2.921.1120**)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer (numéro de commande : **2.921.1110**)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer – Solids (numéro de commande : **2.921.1210**)



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)