



Application Note AN-NIR-074

Quality control of liquid laundry detergents by NIR spectroscopy

Fast determination without using chemicals

Liquid laundry detergents contain fabric softeners, bleaching agents, surfactants, as well as enzymes. Out of these, the surfactant is the most important factor for the cleaning effect, as it breaks down the interface between polar and nonpolar compounds. This allows the detergent to be effective against greases as well as stains from soil or drinks.

Quantification of surfactant content is most

commonly performed by primary analyses (e.g., two-phase potentiometric titration). Disadvantages include manual sample preparation steps such as dilution and pH adjustment, and the method itself is time-consuming. In contrast, Vis-NIR spectroscopy has a time-to-result of less than 1 minute and does not require any sample preparation or chemicals for high quality data.

EXPERIMENTAL

A total of 37 samples with varying surfactant content were provided by a customer. The Vis-NIR spectra (**Figure 2**) were acquired on a Metrohm NIRS XDS RapidLiquid Analyzer equipped with 1 mm quartz cuvette (**Figure 1**). The samples were measured as-is, without any sample preparation steps. Data collection and model development was carried out with the Vision Air complete software package.



Figure 1. The NIRS XDS RapidLiquid Analyzer with a 1 mm quartz cuvette, used to collect the spectra of surfactant samples.

Table 1. Hardware and software equipment overview.

Equipment	Metrohm number
XDS RapidLiquid Analyzer	2.921.1410
NIRS 1mm quartz cuvette	6.7401.200
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

RESULT

The obtained graph (**Figure 3**) displays a high correlation ($R^2 = 0.97$) between the values predicted by NIRS and the reference method.

The nearly perfect ratio of the SEC and SECV illustrates the validity of the model.

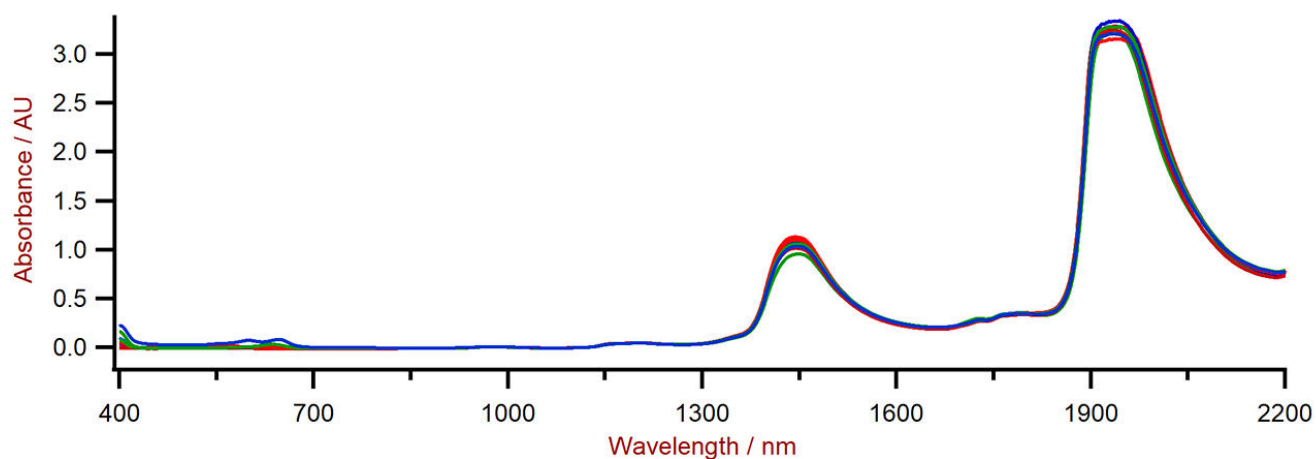


Figure 2 Selection of liquid detergent Vis-NIR spectra obtained using a XDS RapidLiquid Analyzer and a 1 mm quartz cuvette.

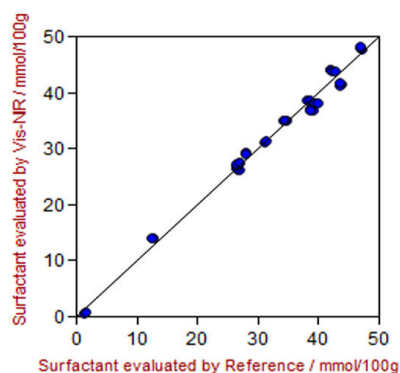


Figure 3 Correlation diagram and the respective figures of merit for the prediction of surfactant in liquid detergent using a XDS RapidLiquid Analyzer. The surfactant lab value was evaluated using HPLC.

Table 2. Figures of merit for the prediction of the surfactant content in liquid detergent using a XDS RapidLiquid Analyzer.

Figures of merit	Value
R^2	0.97
Standard error of calibration	2.20 mmol/100 g
Standard error of cross-validation	2.38 mmol/100 g

CONCLUSION

The results presented herein show that the Vis-NIR method is excellently suited for the fast quantification of surfactant concentration in

detergents. Using Vis-NIR for this application saves 10 minutes per sample compared to other methods (Table 3).

Table 3. Time to result overview for the different parameters

Parameter	Method	Time to result
Surfactant (anionic)	Potentiometric titration	~10 min (adding solutions, stirring, pH-adjustments, determination)

CONTACT

メトロームジャパン株式会社
143-0006 東京都大田区平和島6-1-1
null 東京流通センター アネックス9階

metrohm.jp@metrohm.jp



NIRS XDS RapidLiquid Analyzer
あらゆる種類の液体および懸濁液の迅速で正確な分析。

NIRS XDS RapidLiquid Analyzerは、液体製剤および物質の迅速で正確な分析を可能にします。ボタンを押すだけで正確な測定結果が得られるため、NIRS XDS RapidLiquid Analyzerはラボおよびプロセスにおける品質管理のための信頼性が高くシンプルなソリューションです。サンプルは、再使用可能な石英製キュベットまたは使い捨てガラス製バイアルに置かれます。温度調整されたサンプルコンパートメントは、再現性のある分析条件、およびそれによる正確な測定結果を保証します。



1 mm

最高の純度と均質性を備えたクォーツガラス製のウィンドウを有するクォーツキュベットです。キュベットは、200 nm~2500 nm の波長範囲において80% 以上の透過性を有します。

次の製品と互換性があります:

- 12.5 mm のキュベットセット用 NIRS Spacer (6.7403.180)
- 1 mm のキュベット用 DS2500 ホルダー (6.7492.100)
- ホルダー OMNIS NIR、キュベット、1 mm (6.07401.010)



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - 汎用性に優れた分光法ソフトウェア。

Vision Air Complete は、規制環境下での使用のための、操作の容易な最新のソフトウェアソリューションです。

Vision Air の利点の概要:

- 調整済みのユーザーインターフェースを伴う個別のソフトウェアアプリケーションにより、直観的かつ容易な操作が保証されます。
- 作業手順の容易な作成およびメンテナンス
- 安全かつ容易なデータ管理のための SQL データベース

バージョン Vision Air Complete (66072208) には、可視近赤外分光法を用いた品質管理のための全てのアプリケーションが含まれています:

- 装置管理およびデータ管理のためのアプリケーション
- メソッド開発のためのアプリケーション
- ルーチン分析のためのアプリケーション

その他の Vision Air Complete ソリューション:

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