



Application Note AN-NIR-054

洗发液的质量控制

Chemical-free and fast determination of surfactants in shampoo

对洗发水中的月桂酸钠(SLES)、椰油酰胺丙基甜菜碱(CABP)、椰油酰胺丙基氧化胺(CAW)、椰油酰胺二乙醇胺(DEA)和聚羧乙烯的测定,是一个高成本且耗时的流程,因为每项分析都需要用到大量的化学品。

本应用报告展示了在可见光和近红外光谱区域 (Vis-NIR) 运行的 DS2500 固体分析仪提供了一个 **经济高**

效且快速的解决方案 为一个 **同时测定** 月桂基聚醚硫酸钠 (SLES)、椰油酰胺丙基甜菜碱 (CABP)、椰油酰胺丙基氧化胺 (CAW)、椰油酰胺二乙醇胺 (DEA) 和卡波普在洗发水中的含量。无需**样品制备或所需很少化学品**, Vis-NIR 光谱可在不到一分钟分析这些参数。

EXPERIMENTAL EQUIPMENT

使用 DS2500 固体分析仪在全波长范围 (400–2500 nm) 以半透反射模式测量洗发水样品。采用了 DS2500 浆液杯,简化了样品的定位和样品容器的清洁。1 mm 金色漫反射镜为所有测量定义了相同的路径长度,以保证结果的可重复性。如图所示 图1, 样品在没有任何准备的情况下进行测量。Metrohm 软件包 Vision Air Complete 用于所有数据采集和预测模型开发。

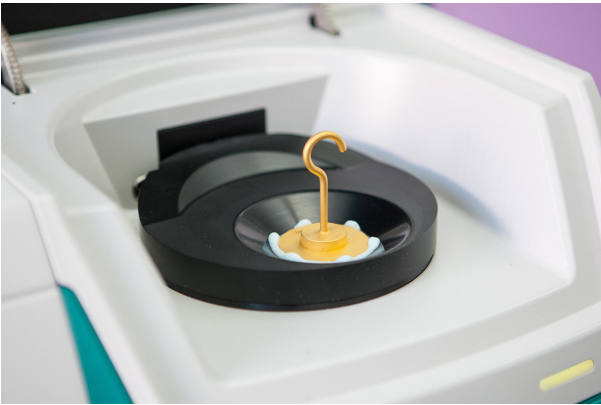


Figure 1. DS2500 固体分析仪和旋转的 DS2500 浆液杯中的洗发水样品。

表格1。 软硬件设备概述

设备	万通数
DS2500 Solid Analyzer	2.922.0010
DS2500 浆料杯	6.7490.430
金色漫反射镜 1 mm	6.7420.000
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

RESULTS

获得的 Vis-NIR 光谱 (图 2) 用于创建预测模型,以量化洗发水中的月桂基聚醚硫酸钠 (SLES)、椰油酰胺丙基甜菜碱 (CABP)、椰油酰胺丙基氧化胺 (CAW)、椰油酰胺二乙醇胺 (DEA) 和卡波姆。使用相关图评估预测

模型的质量,相关图显示 Vis-NIR 预测与主要方法值之间的关系。各自的品质因数 (FOM) 显示了常规分析期间预测的预期精度。

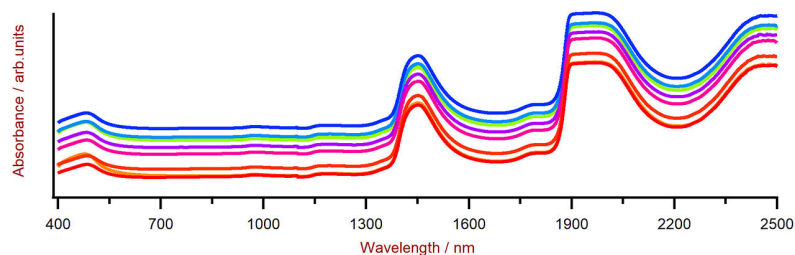


Figure 2. 使用 DS2500 分析仪和 DS2500 Slurry Cup 获得的一系列洗发水 Vis-NIR 光谱。出于显示原因，应用了光谱偏移。

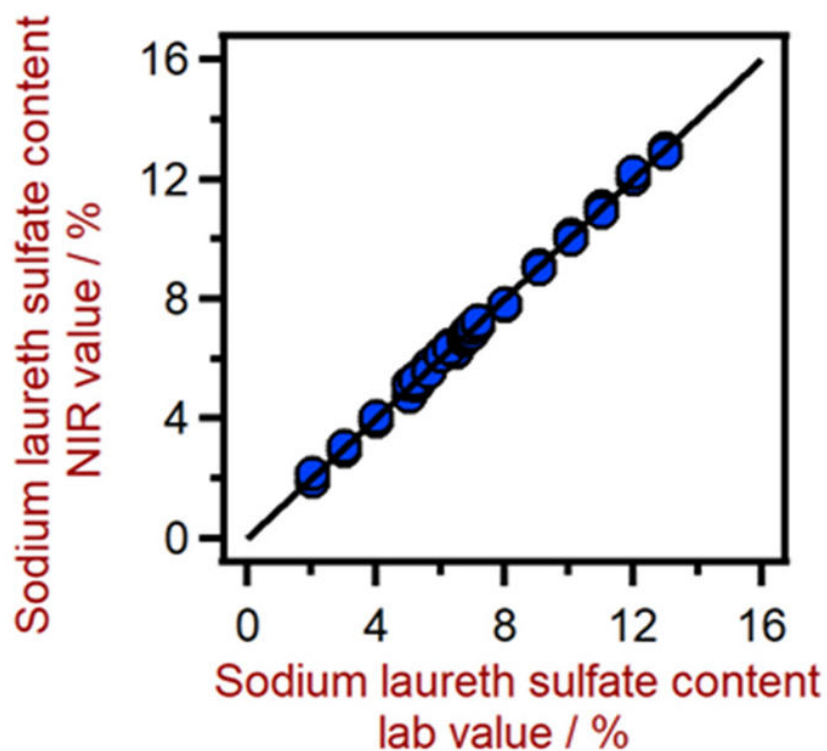


Figure 3. 使用 DS2500 固体分析仪预测月桂基聚醚硫酸钠 (SLS) 含量的相关图。使用滴定法评估 SLS 实验室值。

表 2. 月桂基聚醚硫酸钠 (SLS) 预测的品质因数 使用 DS2500 固体分析仪测定洗发水中的含量。

绩效指标	数值
R^2	0.998
校准的标准误差	0.13%
交叉验证的标准误差	0.14%

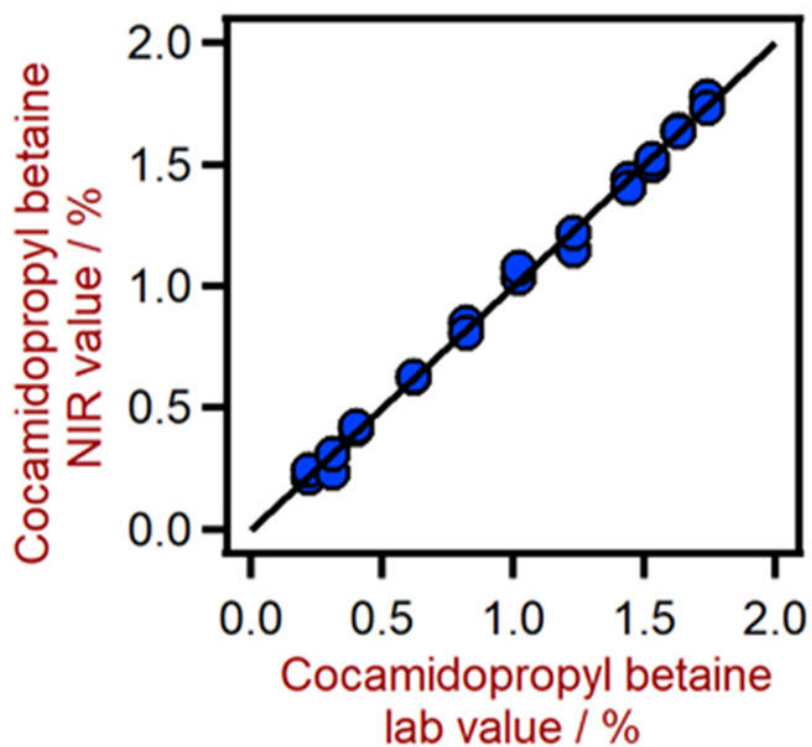


Figure 4. 使用 DS2500 固体分析仪预测椰油酰胺丙基甜菜碱 (CABP) 含量的相关图。使用滴定法评估 CABP。

表3。 预测洗发水中椰油酰胺丙基甜菜碱 (CABP) 含量的品质因数 使用 DS2500 固体分析仪。

绩效指标	数值
R^2	0.996
校准的标准误差	0.04%
交叉验证的标准误差	0.05%

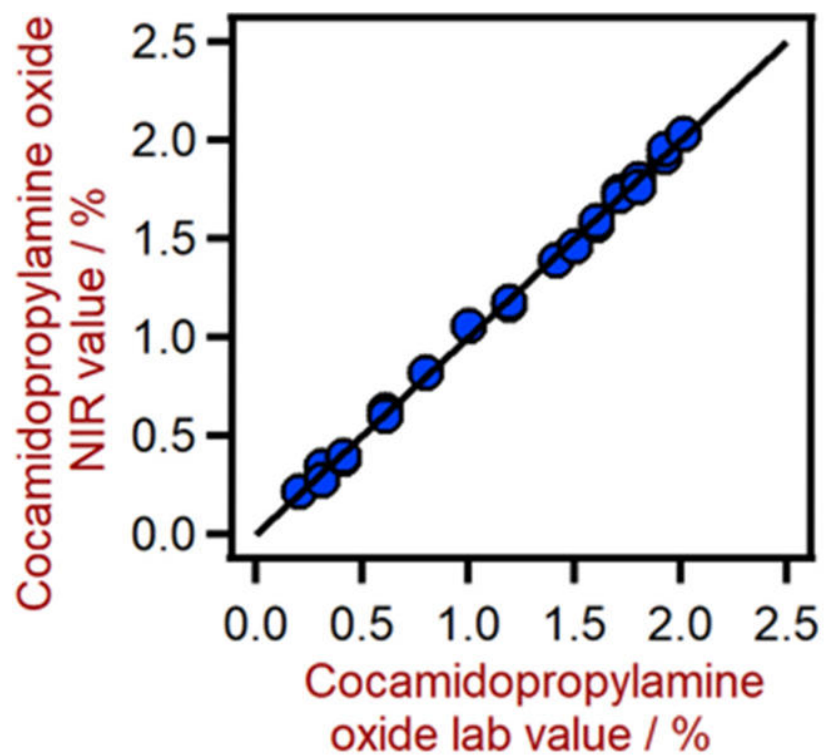


Figure 5. 使用 DS2500 固体分析仪预测椰油酰胺丙基氧化胺 (CAW) 的相关图。使用滴定法评估 CAW 实验室值。

表 4。 预测洗发水中椰油酰胺丙基氧化胺 (CAW) 含量的品质因数 使用 DS2500 固体分析仪。

绩效指标	数值
R^2	0.998
校准的标准误差	0.031%
交叉验证的标准误差	0.058%

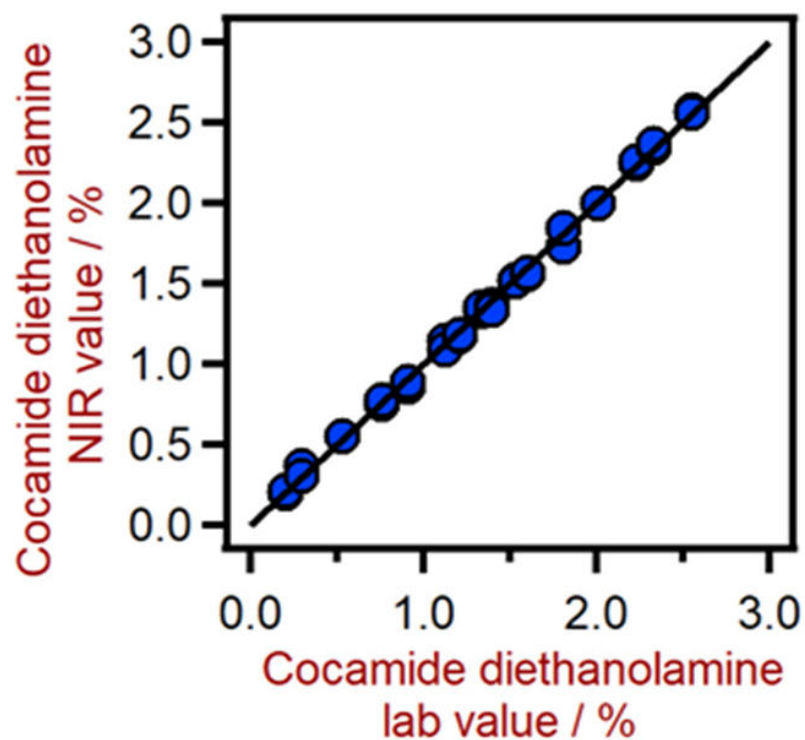


Figure 6. 使用 DS2500 固体分析仪预测椰油酰胺二乙醇胺 (DEA) 的相关图。使用滴定法评估 DEA 实验室值。

表 5。 预测洗发水中可可胺二乙醇胺 (DEA) 含量的品质因数 使用 DS2500 固体分析仪。

绩效指标	数值
R^2	0.998
校准的标准误差	0.034%
交叉验证的标准误差	0.036%

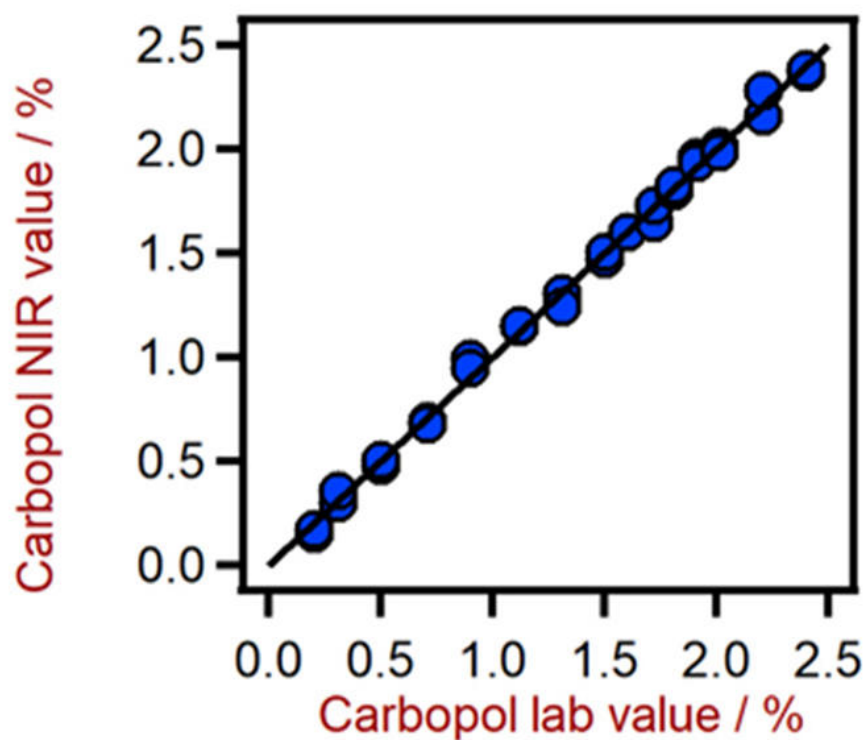


Figure 7. 使用 DS2500 固体分析仪预测卡波普含量的相关图。使用滴定法评估 carbopol 实验室值。

表 6. 用于预测 carbopol 的品质因数 使用 DS2500 固体分析仪测定洗发水中的含量。

绩效指标	数值
R^2	0.969
校准的标准误差	0.290%
交叉验证的标准误差	0.410%

CONCLUSION

本应用简报展示了 NIR 光谱在分析洗发水中的月桂基聚醚硫酸钠 (SLES)、椰油酰胺丙基甜菜碱 (CABP)、椰油酰胺丙基氧化胺 (CAW)、椰油酰胺二乙醇胺

(DEA) 和卡波姆的可行性。与湿化学方法相比 **运行成本显著降低** 当使用近红外光谱时(表 7 和 图 8)。

表 7。使用滴定/高效液相色谱法和近红外光谱法测定洗发水关键质量参数的运行成本比较。

	实验室方法	近红外法
每天的分析次数	10	10
每小时操作员成本	\$25	\$25
消耗品和化学品的成本(SLS、CABP、CAW、DEA、carbopol)	\$5	\$1
每次分析花费的时间 (SLS、CABP、CAW、DEA、卡波姆)	5分钟	1分钟
总运行成本(每年)	\$18188	\$2063

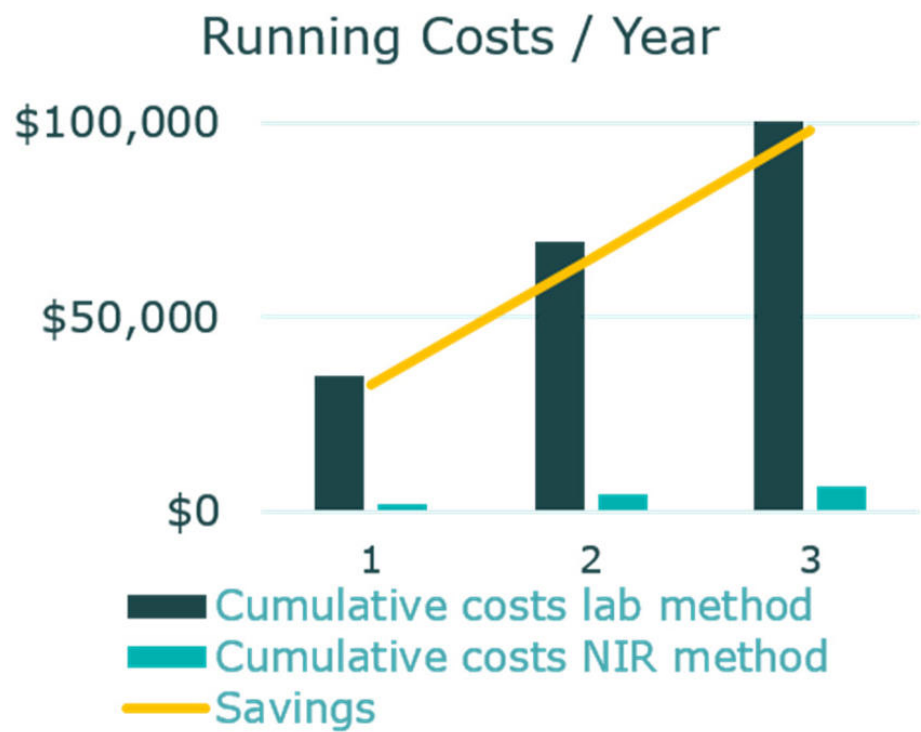


Figure 8. 使用滴定/高效液相色谱法和近红外光谱法测定洗发水关键质量参数的累积成本成本比较。

CONTACT

瑞士万通中国
北京市海淀区上地东路1号
院1号楼7层702
100085 北京

marketing@metrohm.com.cn



DS2500 Solid Analyzer

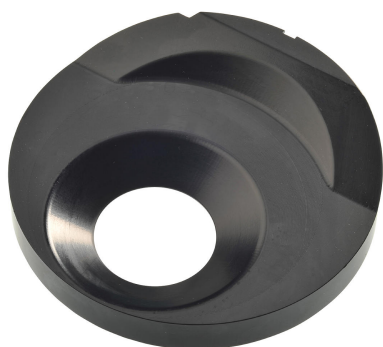
坚固结实的近红外光谱仪,用于生产环境和试验室中的质量检查。

DS2500 分析仪是经过验证的灵活解决方案,用于对整个生产链过程中的固体、乳膏和液体进行常规分析。其坚固结实的设计使 DS2500 Analyzer 分析仪不受灰尘、湿度、振动和温度波动的影响,因此非常适用于在恶劣的生产环境中使用。

DS2500 涵盖了从 400 到 2500 nm 的整个光谱范围,并能在不到一分钟时间内提供准确和可再现的结果。

DS2500 Analyzer 满足制药行业的要求,并由于操作简便而能帮助用户完成其日常工作任务。

由于与设备匹配,附件可以承受任何具有挑战性的样品类型,例如:粒料之类的粗颗粒固体或乳膏之类的半固体样品,可获得结果。测量固体的时候,使用 MultiSample Cup 可以提高生产率,可以自动批量测量多 9 个样品。



DS2500 Slurry Cup

Slurry Cup 是使用 DS2500 分析高粘度物质的理想样品容器。由于采用开放式设计,在 Slurry Cup 中定位膏和油十分简便,同样可以进行快速有效的清洁。

与 Liquid Kit (6.7400.010) 相组合,也可以检查透明的粘性样品。



NIRS 1 mm

对液体进行透射反射测量的金反射器。可与下列设备组合使用:

- NIRS DS2500 Analyzer(订货号:2.922.0010)
- NIRS XDS MasterLab Analyzer(订货号:2.921.1310)
- NIRS XDS MultiVial Analyzer(订货号:2.921.1120)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer(订货号:2.921.1110)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer - Solids(订货号:2.921.1210)



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air – 通用的光谱分析软件。

Vision Air Complete 是用于监管规范环境的先进易用的软件解决方案。

Vision Air 优点一览:

- 便捷的软件应用和经过适配的用户界面保证了直观简单的操作方式
- 操作过程的创建与维护方式简单
- SQL 数据库,可安全且简单地管理数据

Vision Air Complete (66072208) 版本包含所有用于可见近红外光谱分析质量保证过程的应用:

- 仪器和数据管理应用
- 方法开发应用
- 常规分析应用

其它 Vision Air Complete 解决方案:

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