



Application Note AN-NIR-076

聚乙烯醇中的醇类 - 借助近红外光谱 改进了聚合物的质量控制

Improved polymer quality control with NIR spectroscopy

聚乙烯醇 (PVA) 因其低毒性、低蛋白质粘附性和成膜特性而用于各种医疗产品(例如滴眼液)。PVA是一种线型聚合物,它形成醋酸乙烯酯和乙烯醇的共聚物。醇解度是羟基官能团相对于分子中可接近的总官能团的百分比。它是衡量产品水溶性、粘度和附着力的重要指标。

传统的醇解测定需要对每个样品进行称重、溶解、加热、冷却和滴定。此过程每个样品至多可能需要六个小时。与主要方式相比,用近红外光谱(NIRS)进行分析只需要一分钟。下列使用说明描述了用 NIRS 对醇解度进行的测定。除醇解外,还可建立乙酸钠和挥发物的其他定量方法。

EXPERIMENTAL CONDITIONS

使用 Metrohm DS2500 固体分析仪与 Vision Air Complete 光谱软件相结合,收集了来自 18 个不同样品批次的 54 个光谱。为了克服样品的不均匀性,使用旋转的大样品杯进行测量。参考值通过滴定获得。异常值检测是在预处理的光谱上进行的(2nd 导数)使用波长空间算法中的最大距离。NIRS 预测模型是使用下表中描述的设置创建的,并使用交叉验证进行验证。



Figure 1. DS2500 固体分析仪用于收集 PVA 聚合物的光谱。

预处理	算法	验证类型
2 nd 衍生物	PLS	交叉验证

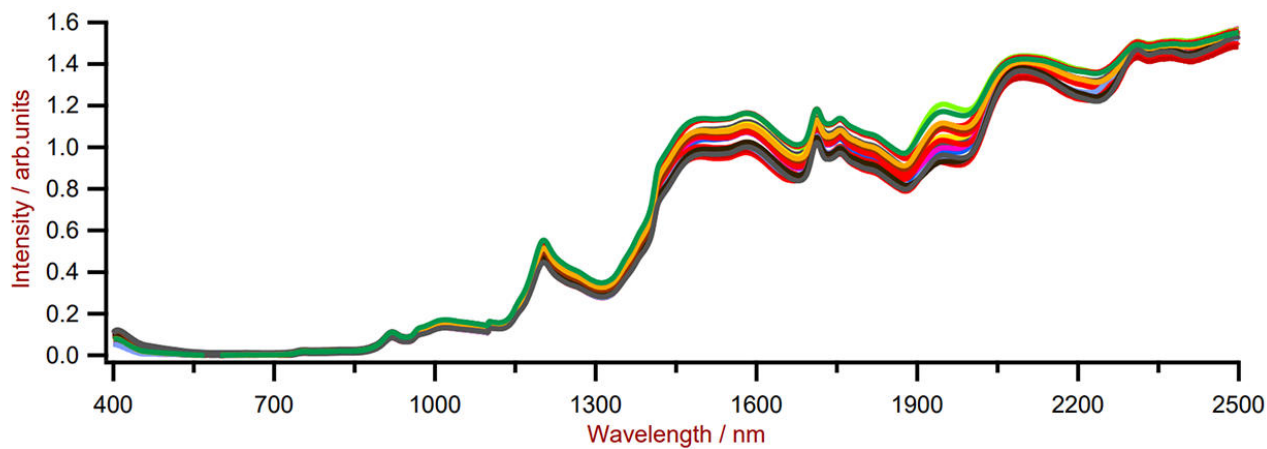


Figure 2. 选择具有不同醇解度的聚合物光谱。

RESULT & CONCLUSION

获得的相关图显示了高相关性($R^2 = 0.98$)在 NIRS 预测的醇解度与主要实验室方法之间。SEC 和 SEC

间的接近比率(< 10%)证明该方法是有效的。

# 因素	R^2	证监会	证监会
3	0.98	0.24%	0.25%

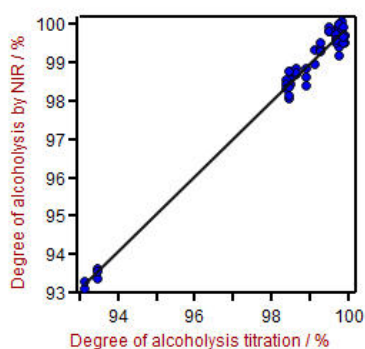


Figure 3. NIRS 与实验室方法预测的醇解度相关图。

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

CONFIGURATION



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。



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)



DS2500

用于在不同样品位置处使用 NIRS DS2500 Analyzer 采集粉末和颗粒反射光谱的大号样品容器。