



Application Note AN-NIR-054

# Quality Control of Shampoo

## Chemical-free and fast determination of surfactants in shampoo

シャンプーに含まれるラウレス硫酸ナトリウム (SLES)、ココミトフロヒルヘタイン (CABP)、ココミトフロヒルアミンオキシド (CAW)、ココミトシエタノールアミン (DEA)、カーホールの測定は分析一回当たり大量の化学薬品を使用するため、コストと時間がかかるプロセスです。

このアプリケーションノートは、可視および近赤外スペクトル領域 (Vis-NIR) で動作する DS2500

SolidAnalyzerが **費用対効果の高い高速ソリューション** のために **同時決定** ラウレス硫酸ナトリウム (SLES)、ココミトフロヒルヘタイン (CABP)、ココミトフロヒルアミンオキシド (CAW)、ココミトシエタノールアミン (DEA)、およびカーホールのシャンプー中の濃度。n<sub>テ</sub>oサンプル準備または必要な化学物質、Vis-NIR分光法では、これらのパラメータの分析が可能で、**一分未満**。

## EXPERIMENTAL EQUIPMENT

シャンプーサンプルは、DS2500 Solid Analyzerを使用して、全波長範囲(400~2500 nm)でトランスフレクションモードで測定しました。DS2500スラリーカップが採用され、サンプルの配置とサンプル容器の洗浄が簡単になりました。1 mmの金の拡散反射器は、再現性のある結果を保証するために、すべての測定で同じ経路長を定義します。に表示されるように 図1、サンプルは準備なして測定されました。MetrohmソフトウェアパッケージVisionAir Completeは、すべてのデータ取得と予測モデルの開発に使用されました。



Figure 1. DS2500ソリッドアナライザーと回転するDS2500スラリーカップにあるシャンプーサンプル。

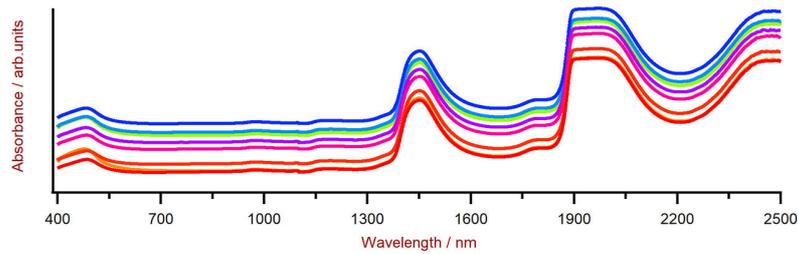
表1. ハードウェアおよびソフトウェア機器の概要

装置	メトローム番号
DS2500ソリッドアナライザー	2.922.0010
DS2500スラリーカップ	6.7490.430
コールト拡散反射板1mm	6.7420.000
Vision Air2.0コンフリート	6.6072.208

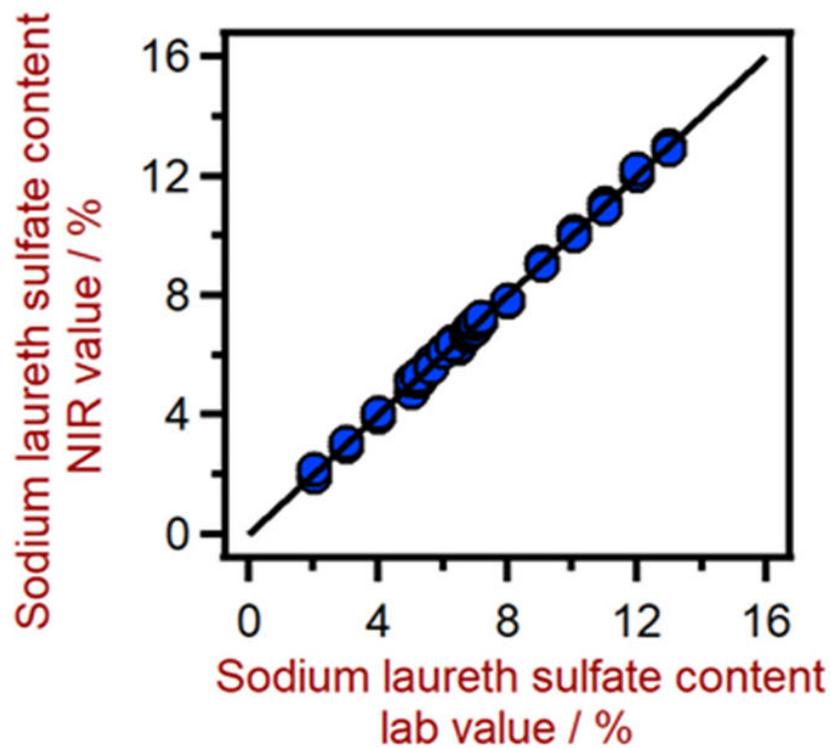
## RESULTS

得られたVis-NIRスペクトル(図2)は、ラウレス硫酸ナトリウム(SLES)、ココミトフロヒルヘタイン(CABP)、ココミトフロヒルアミンオキシド(CAW)、ココミトシエタノールアミン(DEA)、およびシャンプー中のカルホールの定量化のための予測モデル

を作成するために使用されました。予測モデルの品質は、Vis-NIR予測と主要なメソッド値との関係を示す相関図を使用して評価されました。それぞれの性能指数(FOM)は、ルーチン分析中の予測の期待される精度を示しています。



**Figure 2.** DS2500アナライザーとDS2500スラリーカップを使用して得られたシャンプーVis-NIRスペクトルの選択。表示上の理由から、スペクトルオフセットが適用されました。



**Figure 3.** DS2500 Solid Analyzerを使用してラウレス硫酸ナトリウム（SLS）含有量を予測するための相関図。SLSラボ値は滴定を使用して評価されました。

表2。ラウレス硫酸ナトリウム(SLS)の予測のメリットの図 DS2500 SolidAnalyzerを使用したサンプルの内容。

性能指数	値
$R_2$	0.998
校正の標準誤差	0.13%
交差検定の標準誤差	0.14%

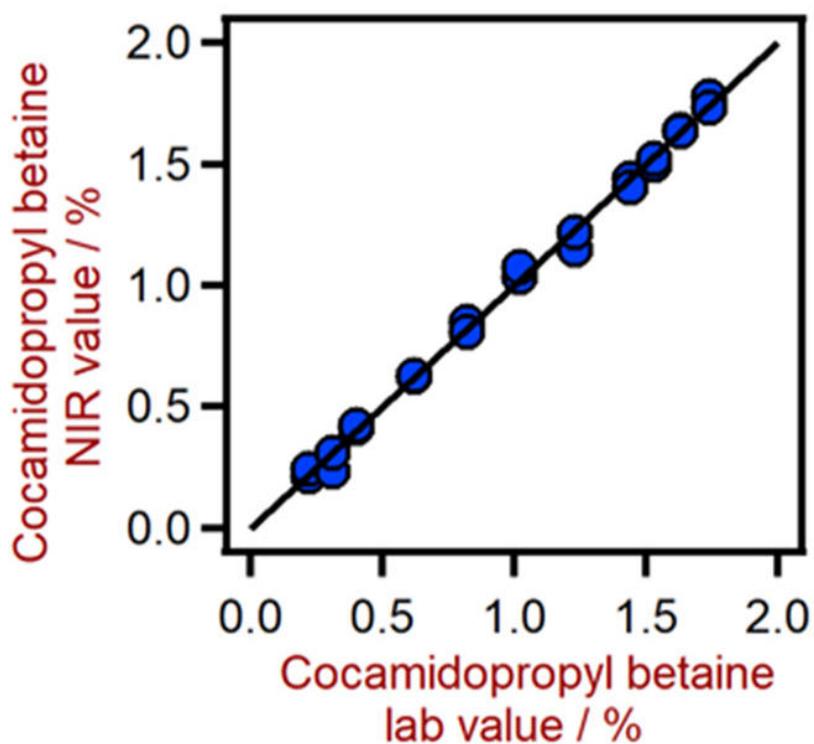


Figure 4. DS2500 Solid Analyzerを使用してココミドプロピルベタイン (CABP) 含有量を予測するための相関図。CABPIは滴定を使用して評価されました。

表3. シャンフー中のココアミトフロヒルヘタイン(CABP)含有量の予測のメリットの図 DS2500 SolidAnalyzerを使用します。

性能指数	値
R <sub>2</sub>	0.996
校正の標準誤差	0.04%
交差検定の標準誤差	0.05%

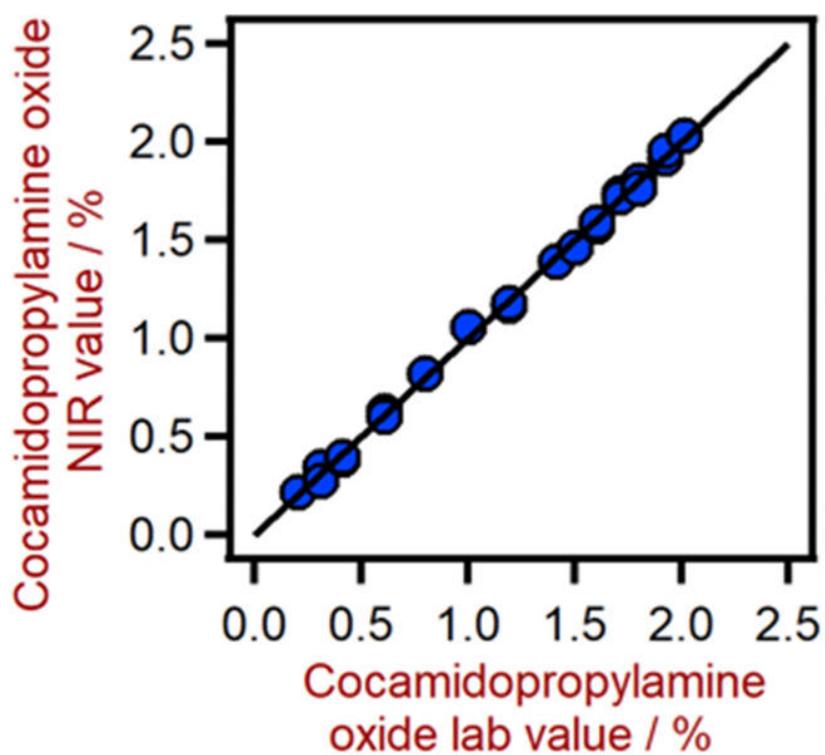


Figure 5. DS2500 SolidAnalyzerを使用したココミドプロピルアミンオキシド (CAW) の予測の相関図。CAWラボの値は、滴定を使用して評価されました。

表4. シャンプー中のココアミトフロヒルアミノキシト(CAW)含有量の予測のメリットの図 DS2500 SolidAnalyzerを使用します。

性能指数	値
$R_2$	0.998
校正の標準誤差	0.031%
交差検定の標準誤差	0.058%

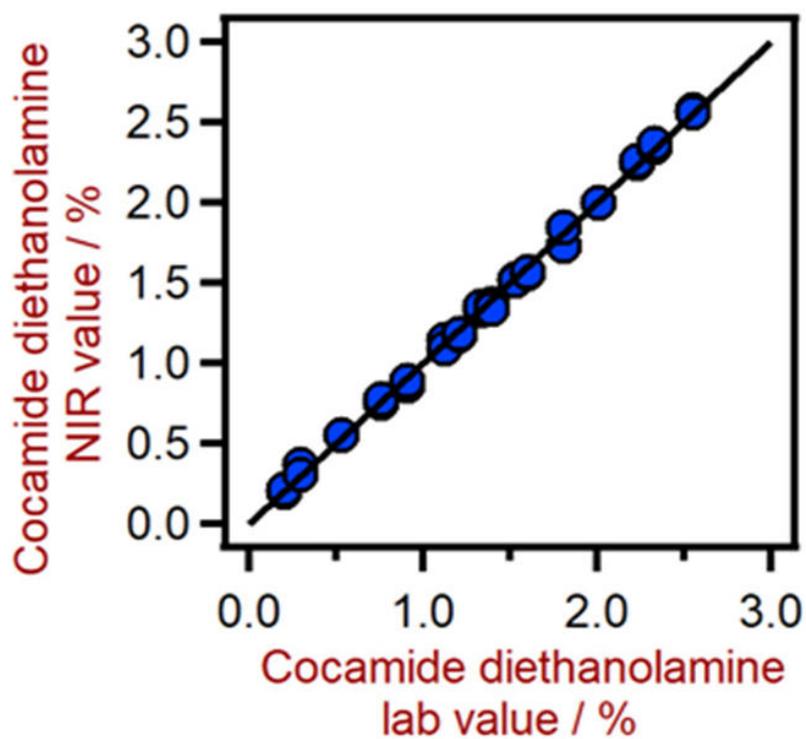


Figure 6. DS2500固体分析装置を使用したココミドジエタノールアミン (DEA) の予測の相関図。DEAラボ値は、滴定を使用して評価されました。

表5. シャンプー中のココアミンシエタノールアミン(DEA)含有量の予測のメリットの図 DS2500 SolidAnalyzerを使用します。

性能指数	値
$R_2$	0.998
校正の標準誤差	0.034%
交差検定の標準誤差	0.036%

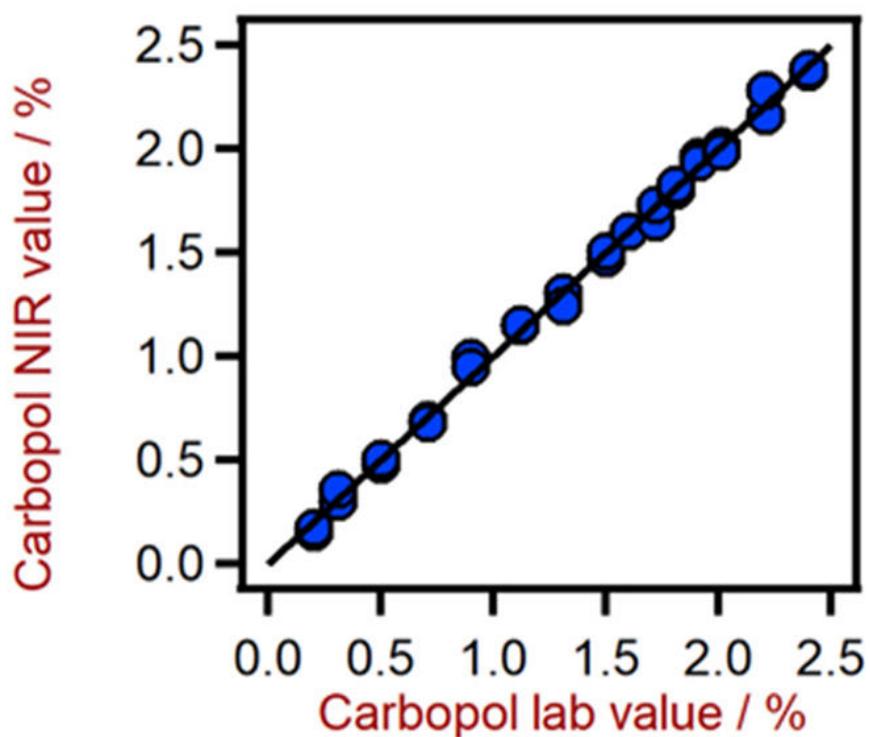


Figure 7. DS2500 SolidAnalyzerを使用してカルボポール含有量を予測するための相関図。カルボポールラボの値は、滴定を使用して評価されました。

表6。カルホールの予測のメリットの数字 DS2500 SolidAnalyzerを使用したサンプルの内容。

性能指数	値
R <sub>2</sub>	0.969
校正の標準誤差	0.290%
交差検定の標準誤差	0.410%

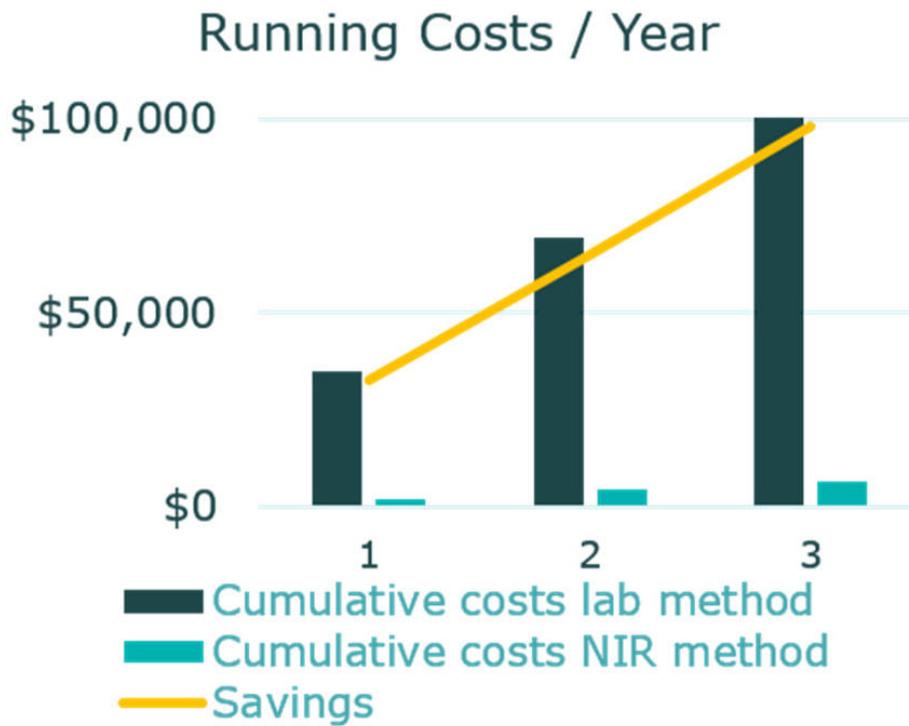
## CONCLUSION

このアプリケーションノートは、ラウレス硫酸ナトリウム(SLES)、ココミトフロヒルヘタイン(CABP)、ココミトフロヒルアミンオキシド(CAW)、ココミトシエタノールアミン(DEA)、およびサンプル中の

カルホールの分析のためのNIR分光法の実現可能性を示しています。湿式化学法と比較して **ランニングコストは大幅に低くなります** NIR分光法を使用する場合(表7と図8)。

表7。滴定/ HPLCおよびNIR分光法によるサンプルの主要な品質パラメーターを決定するためのランニングコストの比較。

	ラホ方式	NIR法
1日あたりの分析数	10	10
1時間あたりのオペレーターのコスト	\$25	\$25
消耗品と化学薬品のコスト(SLS、CABP、CAW、DEA、carbopol)	\$5	\$1
分析ことに費やされた時間(SLS、CABP、CAW、DEA、カルホール)	5分	1分
<b>総ランニングコスト(年間)</b>	<b>\$18188</b>	<b>\$2063</b>



**Figure 8.** 滴定/ HPLCおよびNIR分光法を使用したサンプルの主要な品質パラメーターを決定するための累積コストコストの比較。

## 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



### DS2500 Solid Analyzer

ラボおよび生産環境における品質管理用の堅牢な近赤外分光法。

DS2500 Analyzerは、生産チェーン全体に沿った固形物、クリーム、およびオフショーンとしての液体のルーチン分析に実績のあるフレキシブルなソリューションです。頑丈な仕様により、DS2500 Analyzerは粉塵、湿気、振動や温度変動に強い為、過酷な生産環境での使用に理想的です。

DS2500は400 ~ 2500 nmのスペクトル範囲全体をカバーし、1分以内に正確で再現性の高い結果を提供します。DS2500 Analyzerは製薬業界の要件を満たしており、簡単な操作により日常的な作業においてユーザーをサポートします。

装置に完全に適応した付属品により、顆粒のような粒の荒い固形物、またはクリームのような半固形液体サンプルなどのあらゆる困難なタイプのサンプルにおいても、最良の結果を得ることかてきます。固形物の測定においては、9つまでのサンプルのシリーズの自動測定を可能にするMultiSample Cupを使用することて、生産性を高めることかてきます。



### DS2500 Slurry Cup

Slurry Cupは、DS2500を用いた高粘度の物質の分析に最適なサンプル容器です。開放型のデザインにより、Slurry Cupにペーストおよびクリームを簡単に配置することかてき、洗浄も迅速かつ効率的に行うことかてきます。

Liquid Kit (6.7400.010) と組み合わせることて、透明で粘性のあるサンプルも検査することかてきます。



### NIRS 1 mm

液体のトランスフレクション測定のための金製リフレクタ。以下の装置との組み合わせが可能です:

- NIRS DS2500 Analyzer (注文番号: **2.922.0010**)
- NIRS XDS MasterLab Analyzer (注文番号: **2.921.1310**)
- NIRS XDS MultiVial Analyzer (注文番号: **2.921.1120**)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer (注文番号: **2.921.1110**)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer - Solids (注文番号: **2.921.1210**)



### 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)