



Application Note AN-NIR-022

Qualitätskontrolle von Benzin

Schnelle Bestimmung von ROZ, MON, AKI, Aromatengehalt und Dichte

In den letzten Jahren wurden erhebliche Anstrengungen unternommen, um die Umweltauswirkungen von Kraftstoffen durch Verbesserungen der Kraftstoffqualität zu verringern. Dazu müssen die Motoren effizienter werden und der Oktangehalt des Kraftstoffs erhöht werden, damit Motoren mit höherer Verdichtung eingesetzt werden können. Die Bestimmung der wichtigsten Qualitätsparameter von Benzin, nämlich Research-Oktanzahl (ROZ, ASTM D2699-19), Motor-Oktanzahl

(MON, ASTM D2700-19), Klopfestigkeitsindex (AKI), Aromatengehalt (ASTM D5769-15) und Dichte, erfordert herkömmlich mehrere verschiedene Analysemethoden, die aufwändig sind und geschultes Personal erfordern. Dieser Anwendungsbericht zeigt, dass der XDS RapidLiquid Analyzer, der im sichtbaren und nahen Infrarot-Spektralbereich (Vis- NIR) arbeitet, eine kostengünstige und schnelle Lösung für die Multiparameteranalyse von Benzin bietet.

EXPERIMENTELLE AUSRÜSTUNG

Benzinproben wurden mit dem XDS RapidLiquid Analyzer (RLA) im Transmissionsmodus über den gesamten Wellenlängenbereich (400-2500 nm) gemessen. Mit dem eingebauten temperaturgesteuerten Probenhalter wurde eine reproduzierbare Spektrenerfassung erreicht. Der Einfachheit halber wurden Einwegfläschchen mit einer Schichtdicke von 8 mm verwendet, was ein Reinigungsverfahren überflüssig machte. Das Metrohm-Softwarepaket Vision Air Complete wurde für die Datenerfassung und die Entwicklung von Vorhersagemodellen verwendet.



Abbildung 1 XDS RapidLiquid-Analyzer und 8-mm-Einwegfläschchen, gefüllt mit einer Benzinprobe.

Tabelle 1. Übersicht über die Hardware- und Softwareausstattung

Ausrüstung	Metrohm-Nummer
XDS RapidLiquid-Analysator	2.921.1410
Einwegfläschchen, 8 mm Durchmesser, Getriebe	6.7402.000
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

Die erhaltenen Vis-NIR-Spektren (**Abbildung 2**) wurden zur Erstellung von Vorhersagemodellen für die Bestimmung mehrerer wichtiger Kraftstoffparameter verwendet. Die Qualität der Vorhersagemodelle wurde anhand von Korrelationsdiagrammen bewertet, die eine

Korrelation zwischen der Vis-NIR-Vorhersage und den Werten der Primärmethode anzeigen. Die jeweiligen Leistungszahlen (FOM) zeigen die erwartete Genauigkeit einer Vorhersage während der Routineanalyse.

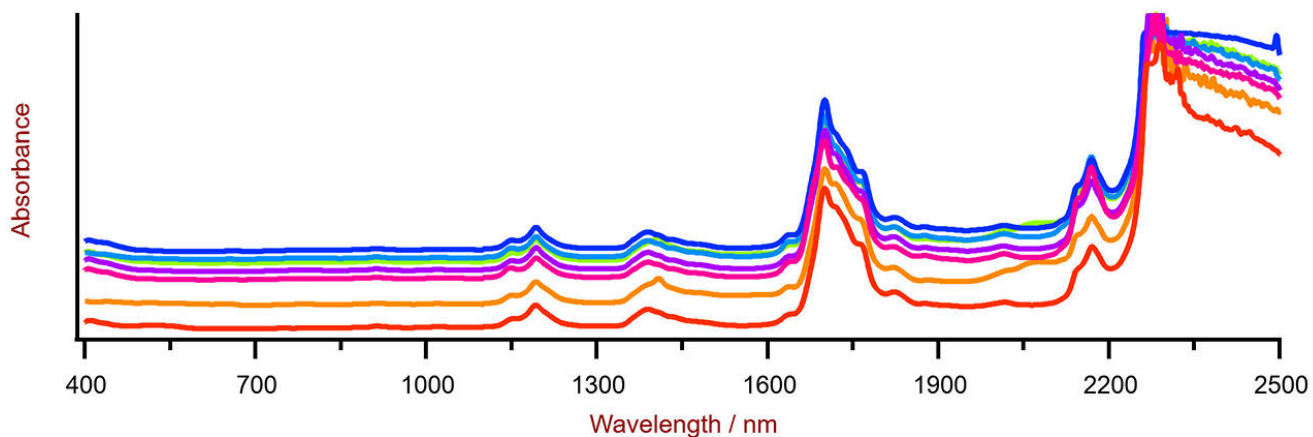


Abbildung 2. Diese Auswahl an Benzin-Vis-NIR-Spektren wurde mit einem XDS RapidLiquid-Analyzer und 8-mm-Einwegfläschchen erhalten. Aus Darstellungsgründen wurde ein Spektrenversatz angewendet.

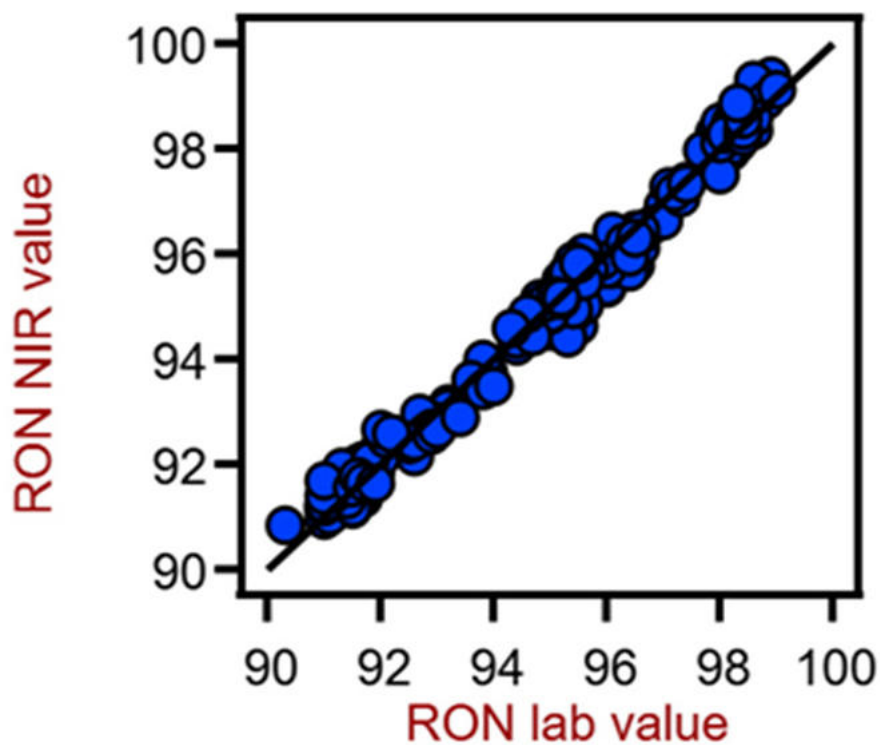


Abbildung 3. Korrelationsdiagramm für die Vorhersage des ROZ-Wertes in Benzin unter Verwendung eines XDS RapidLiquid Analyzers. Die Referenzlaborwerte wurden anhand von CFR-Motortests unter kontrollierten Bedingungen ermittelt.

Tabelle 2. Leistungskennzahlen für die Vorhersage des MON-Wertes in Benzin unter Verwendung eines XDS RapidLiquid Analyzers.

Leistungsmerkmale	Wert
R^2	0.989
Standardfehler der Kalibrierung	0.26
Standardfehler der Kreuzvalidierung	0.29

ERGEBNISSE

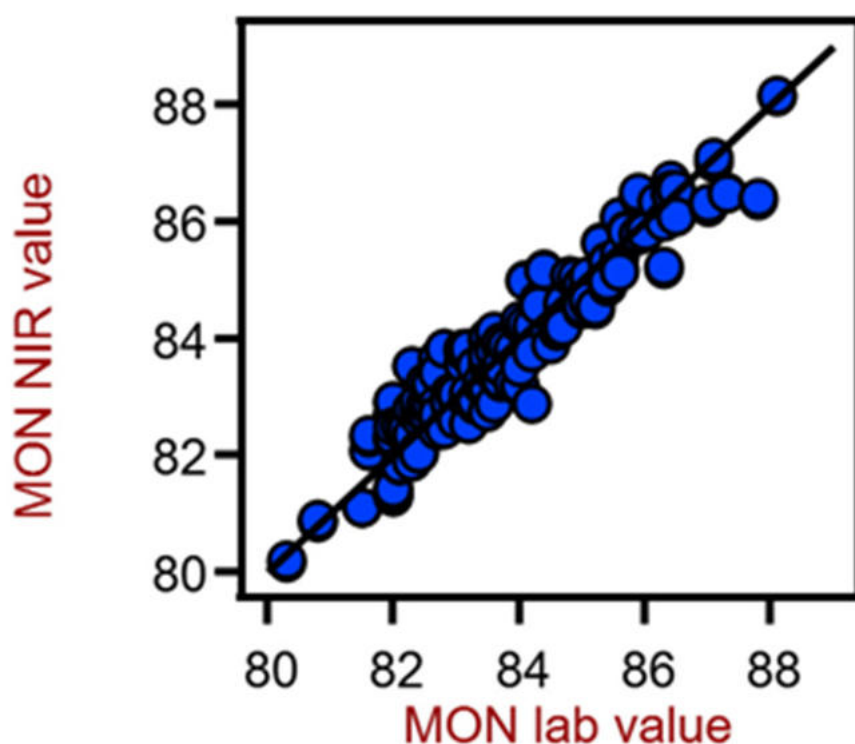


Abbildung 4. Korrelationsdiagramm für die Vorhersage des Aromatengehalts in Benzin unter Verwendung eines XDS RapidLiquid Analyzers. Die Laborwerte wurden mit Gaschromatographie/Massenspektrometrie-Techniken bestimmt.

Tisch 3. Gütezahlen für die Vorhersage des MON-Werts in Benzin mithilfe eines XDS RapidLiquid-Analysators.

Leistungsmerkmale	Wert
R^2	0.889
Standardfehler der Kalibrierung	0.50
Standardfehler der Kreuzvalidierung	0.53

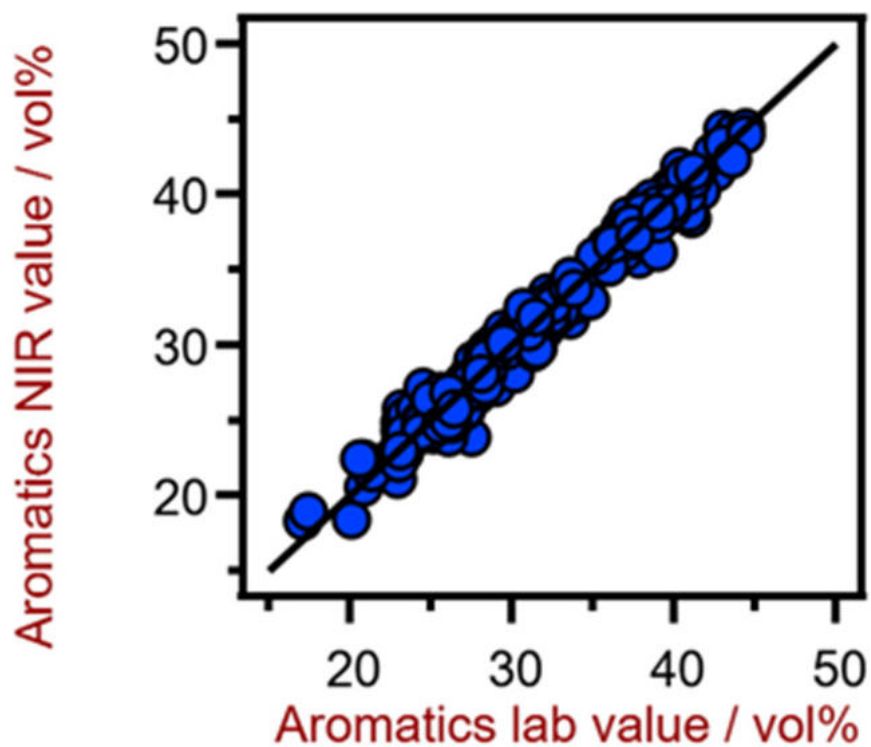


Abbildung 5. Korrelationsdiagramm für die Vorhersage des Aromatengehalts in Benzin unter Verwendung eines XDS RapidLiquid Analyzers. Die Laborwerte wurden mit Gaschromatographie/Massenspektrometrie-Techniken bestimmt.

Tabelle 4. Leistungskennzahlen für die Vorhersage des Aromatengehalts in Benzin unter Verwendung eines XDS RapidLiquid Analyzers.

Leistungsmerkmale	Wert
R^2	0.974
Standardfehler der Kalibrierung	0,97 Vol.-%
Standardfehler der Kreuzvalidierung	1,07 Vol.-%

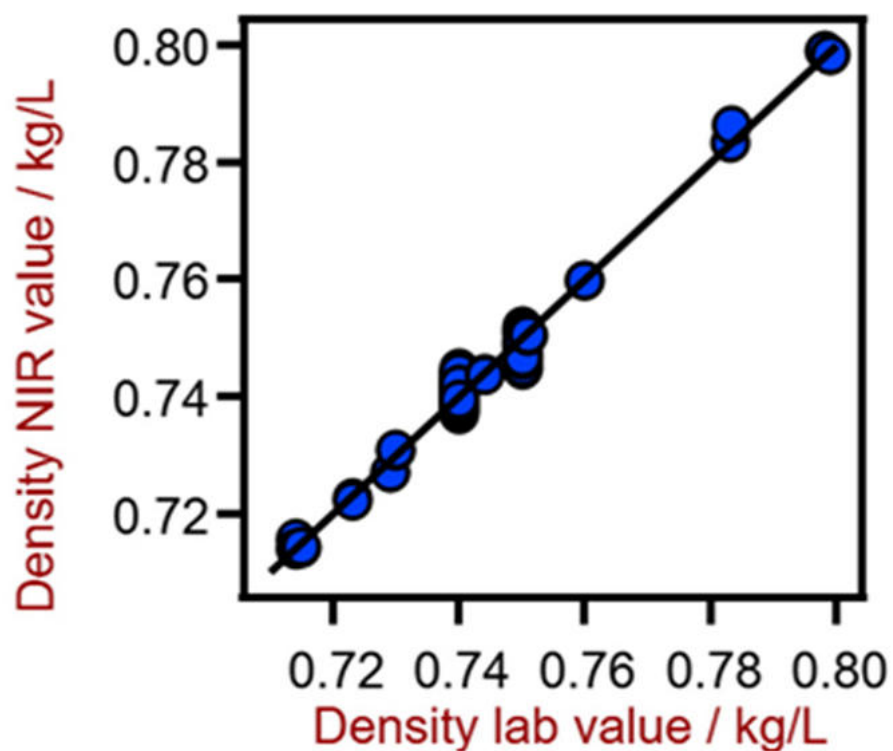


Abbildung 6. Korrelationsdiagramm für die Vorhersage der Benzindichte mit einem XDS RapidLiquid Analyzer. Die Laborwerte wurden mit einem Dichtemessgerät ermittelt.

Tabelle 5. Leistungskennzahlen für die Vorhersage der Benzindichte mit einem XDS RapidLiquid Analyzer.

Leistungsmerkmale	Wert
R^2	0.973
Standardfehler der Kalibrierung	0,0021 kg/L
Standardfehler der Kreuzvalidierung	0,0023 kg/L

ERGEBNISSE

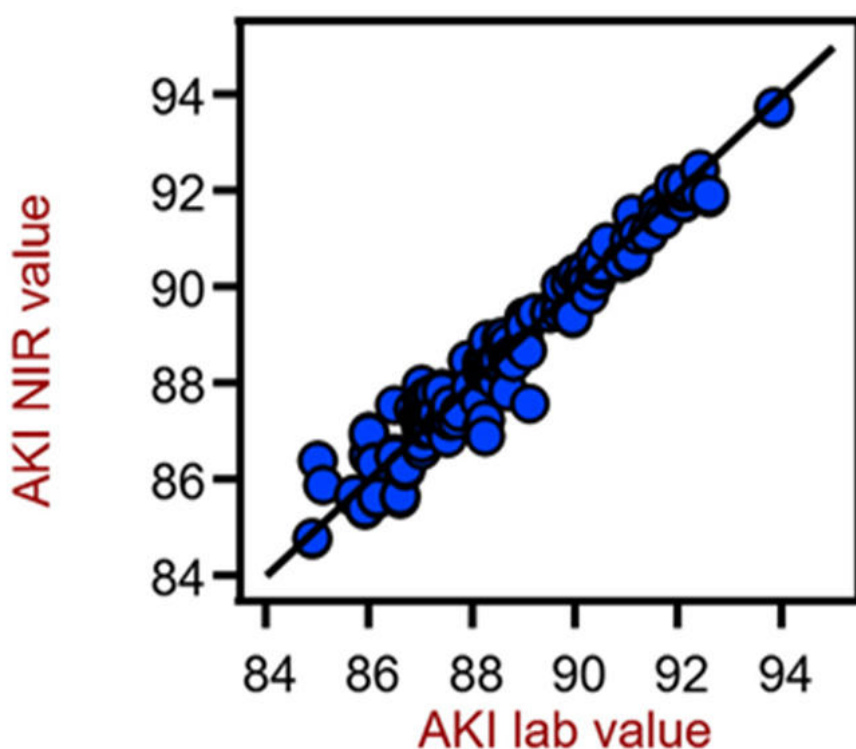


Abbildung 7. Korrelationsdiagramm für die Vorhersage des AKI-Wertes in Benzin unter Verwendung eines XDS RapidLiquid Analyzers. Die Referenzlaborwerte wurden anhand von CFR-Motortests unter kontrollierten Bedingungen ermittelt.

Tabelle 6. Leistungskennzahlen für die Vorhersage des AKI-Wertes in Benzin unter Verwendung eines XDS RapidLiquid Analyzers.

Leistungsmerkmale	Wert
R^2	0.945
Standardfehler der Kalibrierung	0.45
Standardfehler der Kreuzvalidierung	0.46

FAZIT

Diese Application Note zeigt die Durchführbarkeit der NIR-Spektroskopie für die Analyse von RON, MON, AKI, Aromatengehalt und Dichte. Im Vergleich zu nasschemischen Methoden (Tabelle 7) ist die Zeit bis

zum Ergebnis ein großer Vorteil der NIR-Spektroskopie, da eine einzige Messung innerhalb einer Minute durchgeführt werden kann.

Tabelle 7. Zeit bis zum Ergebnis mit herkömmlichen Testmethoden

Parameter	Methode	Zeit zum Ergebnis
RON	CFR-Motortest	30 Minuten pro Probe
MO	CFR-Motortest	30 Minuten pro Probe
AKI	CFR-Motortest	30 Minuten pro Probe
Aromatengehalt	Gaschromatographie	45 Minuten pro Probe

Um die Informationen für alle wichtigen Parameter zu sehen und die neuesten Informationen zu erhalten, besuchen Sie bitte die Seite mit unseren Vorkalibrierungen:

[Vorkalibrierungen](#)

CONTACT

Metrohm Inula
Shuttleworthstraße 25
1210 Wien

office@metrohm.at



NIRS XDS RapidLiquid Analyzer

Schnelle, präzise Analysen von Flüssigkeiten und Suspensionen aller Art.

Der NIRS XDS RapidLiquid Analyzer ermöglicht schnelle, präzise Analysen von flüssigen Rezepturen und Substanzen. Präzise Messergebnisse auf Knopfdruck machen den NIRS XDS RapidLiquid Analyzer zu einer ebenso zuverlässigen wie einfachen Lösung für die Qualitätskontrolle in Labor und Prozess. Die Proben werden in mehrfach verwendbaren Quarzküvetten oder Einwegvials aus Glas vorgelegt; eine temperierte Probenkammer sorgt für reproduzierbare Analysenbedingungen und somit für genaue Messergebnisse.



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - Universelle Spektroskopie Software.

Vision Air Complete ist eine moderne und einfach zu bedienende Softwarelösung für den Einsatz im regulierten Umfeld.

Die Vorteile von Vision Air im Überblick:

- Individuelle Softwareanwendungen mit angepassten Nutzeroberflächen gewährleisten eine intuitive und einfache Bedienung
- Einfache Erstellung und Wartung von Arbeitsvorschriften
- SQL Datenbank für ein sicheres und einfaches Datenmanagement

Die Version Vision Air Complete (66072208) beinhaltet alle Anwendungen für die Qualitätssicherung mittels Vis-NIR Spektroskopie:

- Anwendung für das Instrumenten- und Datenmanagement
- Anwendung für die Methodenentwicklung
- Anwendung für die Routineanalyse

Weitere Vision Air Complete Lösungen:

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