



Application Note AN-NIR-113

# Bestimmung der Research-Oktanzahl (ROZ) im Isomerat

NIRS bietet Nutzern eine schnelle, effiziente Analyse mit niedrigen Betriebskosten

Die Isomerisierung von leichtem Naphtha wird von Raffinerien genutzt, um Isomere mit hoher Oktanzahl herzustellen, die den aktuellen Benzinspezifikationen entsprechen. Die Isomerisierung erhöht die Oktanzahl von leichtem Naphtha, indem sie den Verzweigungsgrad der Paraffinmoleküle erhöht. Die Research-Oktanzahl (ROZ) des Zielprodukts hängt von verschiedenen Produktionsparametern der Anlage ab (z. B. Temperatur oder Verhältnis von Wasserstoff zu Kohlenwasserstoff). Um den Anlagenprozess zu

optimieren, ist eine zuverlässige und schnelle Analysemethode von entscheidender Bedeutung.

Die Standardmethode zur Bestimmung der ROZ im Isomerat erfolgt bei teuren und wartungsintensiven Motoren. Im Gegensatz dazu kann die Research-Oktanzahl auch mittels Nahinfrarotspektroskopie (NIRS) analysiert werden. NIRS liefert innerhalb einer Minute genaue Ergebnisse, ohne dass Probenvorbereitung oder Chemikalien erforderlich sind.

## EXPERIMENTELLE GERÄTE

63 verschiedene Isomeratproben mit unterschiedlichen ROZ-Werten wurden mit dem Metrohm DS2500 Liquid Analyzer gemessen (Abbildung 1) im Transmissionsmodus über den gesamten Wellenlängenbereich von 400–2500 nm. Der eingebaute Temperaturregler sorgte für Messstabilität bei einer konstanten Proben-temperatur

von 35 °C. Der Einfachheit halber wurden Einwegvials mit einer Schichtdicke von 8 mm verwendet, wodurch ein Reinigungsvorgang überflüssig wurde. Für die Datenerfassung und Vorhersagemodellentwicklung wurde das Softwarepaket Vision Air Complete von Metrohm verwendet.

**Tabelle 1.** Übersicht über die Hardware- und Softwareausstattung.

| Equipment                          | Artikelnummer |
|------------------------------------|---------------|
| DS2500 Liquid Analyzer             | 2.929.0010    |
| DS2500 Halter für 8 mm Einwegvials | 6.7492.020    |
| Vision Air 2.0 Complete            | 6.6072.208    |

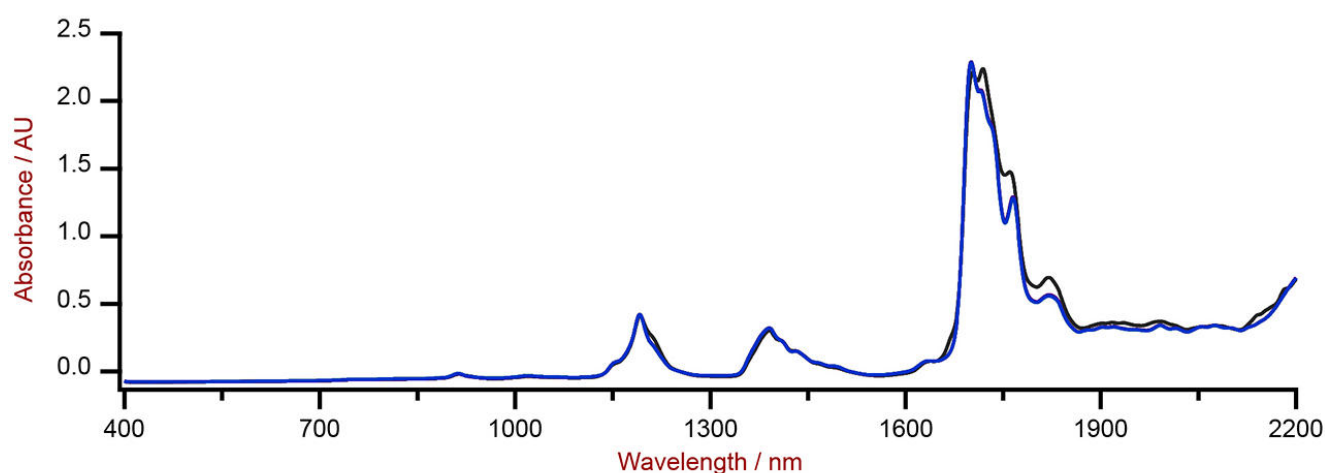


**Abbildung 1.** Metrohm DS2500 Flüssigkeitsanalysator zur Bestimmung der Research-Oktanzahl (ROZ) in Isomeraten.

## ERGEBNIS

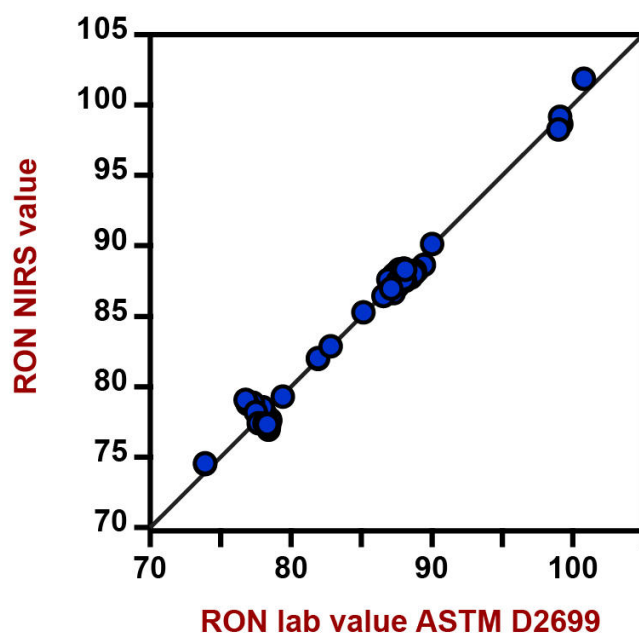
Die erhaltenen Vis-NIR-Spektren (**Abbildung 2**) wurden verwendet, um ein Vorhersagemodell für die Quantifizierung der Research-Oktananzahl in Isomeraten zu erstellen. Die Qualität der Vorhersagemodelle wurde anhand von Korrelationsdiagrammen auf Basis des

Kreuzvalidierungsalgorithmus bewertet. Ein Wert von  $R^2 > 0,98$  zeigt eine hohe Korrelation zwischen der Vis-NIR-Vorhersage und der Referenz-ASTM-Methode an. Die jeweiligen Gütezahlen (FOM) zeigen die erwartete Präzision bei der Routineanalyse (**Abbildung 3**).



**Abbildung 2.** Auswahl von Vis-NIR-Spektren von Isomeratproben, die auf einem DS2500-Flüssigkeitsanalysator mit 8-mm-Vials analysiert wurden.

## ERGEBNIS ROZ-WERT



**Abbildung 3.** Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Gütezahlen für die Vorhersage des ROZ-Werts mit einem DS2500-Flüssigkeitsanalysator. Der Laborwert wurde gemäß ASTM D2699 bewertet.

| Leistungsmerkmale                   | Wert  |
|-------------------------------------|-------|
| $R^2$                               | 0.986 |
| Standardfehler der Kalibrierung     | 0.73  |
| Standardfehler der Kreuzvalidierung | 0.76  |

## FAZIT

Diese Application Note demonstriert die Machbarkeit der NIR-Spektroskopie für die Analyse von RON in isomeren Proben. Im Vergleich zur herkömmlichen Methode gelangt man schneller zum Ergebnis

(Tabelle 2) mit der Vis-NIR-Spektroskopie. Bei NIRS wird eine einzelne Messung innerhalb einer Minute durchgeführt, während es bei dem CFR-Motortest viel länger dauert.

**Tabelle 2.** Zeit bis zum Ergebnis für die Bestimmung des ROZ-Werts mit der Standardreferenzmethode ASTM D2699.

| Parameter | Methode       | Zeit zum Ergebnis    |
|-----------|---------------|----------------------|
| ROZ       | CFR-Motortest | 30 Minuten pro Probe |

## CONTACT

Metrohm Schweiz AG  
Industriestrasse 13  
4800 Zofingen

[info@metrohm.ch](mailto:info@metrohm.ch)

## KONFIGURATION



### DS2500 Liquid Analyzer

Robuste Nahinfrarotspektroskopie für die Qualitätskontrolle im Labor sowie im Produktionsumfeld.

Der DS2500 Liquid Analyzer ist die bewährte, flexible Lösung für die Routineanalytik von Flüssigkeiten entlang der gesamten Produktionskette. Das robuste Design macht den DS2500 Liquid Analyzer unempfindlich gegen Staub, Feuchtigkeit, und Vibrationen und damit hervorragend geeignet für den Einsatz im rauen Produktionsumfeld.

Der DS2500 Liquid Analyzer deckt den gesamten Spektralbereich von 400 bis 2500 nm ab, heizt Proben bis auf 80°C hoch und ist kompatibel mit verschiedenen Einwegvials und Quartzküvetten. Der somit auf Ihre individuellen Probenanforderungen anpassbare DS2500 Liquid Analyzer unterstützt Sie genaue und reproduzierbare Ergebnisse in weniger als einer Minute zu erhalten. Mit Hilfe der integrierten Probenhaltererkennung und der selbsterklärenden Vision Air Software wird ausserdem eine einfache und sichere Bedienung durch den Anwender gewährleistet.

Im Falle grösserer Probenmengen kann die Produktivität durch den Einsatz einer Durchflussszelle in Kombination mit einem Metrohm Probenroboter erheblich gesteigert werden.



### DS2500 Halter für 8 mm Einwegvials

Intelligenter Halter für die Einwegvials aus Glas mit 8 mm Durchmesser





## 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)