



Application Note AN-NIR-113

Determinazione del numero di ottano (RON) nell'isomerato

NIRS offre agli utenti un'analisi rapida ed efficiente con bassi costi di gestione

L'isomerizzazione della nafta leggera viene utilizzata dalle raffinerie per produrre prodotti isomerati ad alto numero di ottani che soddisfano le attuali specifiche della benzina. L'isomerizzazione aumenta il numero di ottano della nafta leggera aumentando il grado di ramificazione delle molecole di paraffina. Il numero di ottano di ricerca (RON) del prodotto target dipende da vari parametri di produzione dell'impianto (ad esempio, temperatura o rapporto idrogeno/idrocarburi). Per ottimizzare il processo

dell'impianto, è fondamentale un metodo analitico affidabile e rapido.

Il metodo standard per determinare RON in isomerato è con motori costosi e ad alta intensità di manutenzione. Al contrario, il numero di ottano può essere analizzato anche mediante spettroscopia nel vicino infrarosso (NIRS). NIRS fornisce risultati accurati entro un minuto senza la necessità di alcuna preparazione del campione o prodotti chimici.

STRUMENTI DI ANALISI

63 diversi campioni di isomerato con valori RON variabili sono stati misurati con Metrohm DS2500 Liquid Analyzer (**Figura 1**) in modalità di trasmissione sull'intero intervallo di lunghezze d'onda di 400–2500 nm. Il regolatore di temperatura integrato ha garantito la stabilità della misurazione con una temperatura costante del campione di 35 °C. Per

comodità, sono state utilizzate fiale monouso con una lunghezza del percorso di 8 mm che hanno reso obsoleta una procedura di pulizia. Il pacchetto software Vision Air Complete di Metrohm è stato utilizzato per l'acquisizione dei dati e lo sviluppo del modello di previsione.

Tabella 1. Panoramica delle apparecchiature hardware e software.

Strumenti	Codice articolo
DS2500 Liquid Analyzer	2.929.0010
DS2500 Holder 8 mm vials	6.7492.020
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208



Figure 1. Metrohm DS2500 Liquid Analyzer utilizzato per la determinazione del numero di ottano di ricerca (RON) in campioni di isomerati.

RISULTATO

Gli spettri Vis-NIR ottenuti (**Figura 2**) sono stati utilizzati per creare un modello di previsione per la quantificazione del numero di ottano di ricerca in isomerato. La qualità dei modelli di previsione è stata valutata utilizzando diagrammi di correlazione basati

sull'algoritmo di convalida incrociata. Un valore di $R^2 > 0,98$ mostra un'elevata correlazione tra la previsione Vis-NIR e il metodo ASTM di riferimento. Le rispettive cifre di merito (FOM) mostrano la precisione prevista durante l'analisi di routine (**Figura 3**).

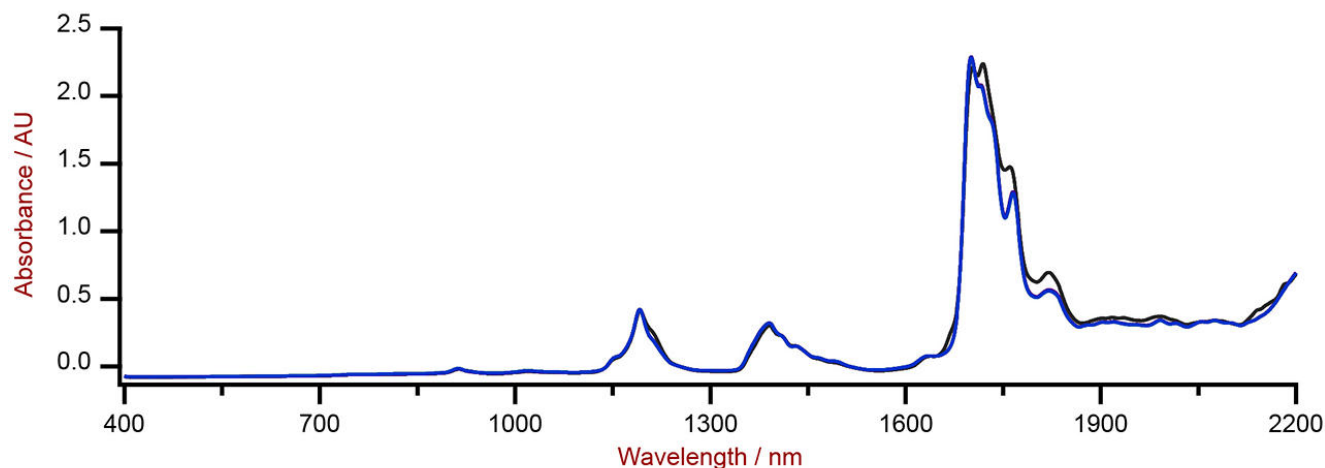


Figure 2. Selezione degli spettri Vis-NIR di campioni di isomerato analizzati su DS2500 Liquid Analyzer con fiale da 8 mm.

RISULTATO VALORE RON

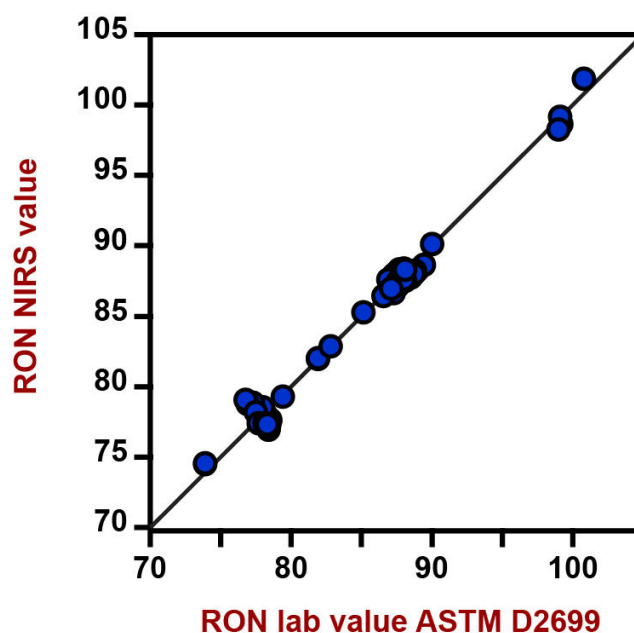


Figure 3. Diagramma di correlazione e rispettive figure di merito per la previsione del valore RON utilizzando DS2500 Liquid Analyzer. Il valore di laboratorio è stato valutato secondo ASTM D2699.

Figure di Merito	Valore
R^2	0.986
Standard Error of Calibration	0.73
Standard Error of Cross-Validation	0.76

CONCLUSIONE

Questa Application Note dimostra la fattibilità della spettroscopia NIR per l'analisi di RON in campioni di isomerati. Rispetto al metodo convenzionale, il tempo di risultato (Tabella 2) è un

grande vantaggio della spettroscopia Vis-NIR. Con NIRS, una singola misurazione viene eseguita entro un minuto, mentre il test del motore CFR è molto più lungo.

Tabella 2. Tempo al risultato per la determinazione del valore RON con il metodo di riferimento standard ASTM D2699.

Parametro	Metodo	Tempo al risultato
RON	CFR engine test	30 minuti per campione

CONTACT

Metrohm Italiana Srl
Via G. Di Vittorio, 5
21040 Origgio (VA)

info@metrohm.it

CONFIGURAZIONE



DS2500 Liquid Analyzer

Robusta spettroscopia nel vicino infrarosso per il controllo qualità in laboratorio e in campo produttivo.

Il DS2500 Liquid Analyzer è la soluzione comprovata e flessibile per l'analisi di routine di sostanze solide, creme ed eventualmente anche liquidi lungo tutta la catena produttiva. Il design robusto rende il DS2500 Liquid Analyzer insensibile a polvere, umidità e vibrazioni e quindi ideale per l'utilizzo in ambienti di produzione difficili.

Il DS2500 Liquid Analyzer copre l'intero intervallo spettrale da 400 fino a 2500 nm, riscalda i campioni fino a 80 °C ed è compatibile con diversi vial monouso e cuvette in quarzo. Essendo quindi adattabile alle proprie personali esigenze in base al campione, il DS2500 Liquid Analyzer vi aiuta a ottenere risultati precisi e riproducibili in meno di un minuto. Con l'ausilio del riconoscimento del supporto del campione integrato e del software Vision Air intuitivo l'utente ha la garanzia di un uso sicuro e semplice.

In caso di quantità più grandi di campioni, è possibile aumentare notevolmente la produttività mediante l'impiego di celle di flusso in combinazione con un robot per campioni Metrohm.



DS2500 Supporto per vial monouso da 8 mm

Supporto intelligente per vial monouso in vetro con diametro di 8 mm



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - Software universale per la spettroscopia.

Vision Air Complete è una soluzione software moderna e facile da utilizzare per l'impiego in ambiente regolamentato.

Panoramica dei vantaggi di Vision Air:

- le applicazioni software individuali con interfacce utente personalizzate garantiscono un funzionamento intuitivo e semplice
- semplice creazione e manutenzione dei protocolli
- banca dati SQL per una gestione dei dati sicura e semplice

La versione Vision Air Complete (66072208) include tutte le applicazioni per la garanzia della qualità tramite spettroscopia Vis-NIR:

- applicazione per la gestione degli strumenti e dei dati
- applicazione per lo sviluppo di metodi
- applicazione per l'analisi di routine

Altre soluzioni Vision Air Complete:

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