



Application Note AN-NIR-094

近赤外分析計(NIR)による熱分解ガソリン中の臭素価の測定

試薬なしで臭素価の迅速定量

熱分解ガソリン(pygas)とその蒸留物には高レベルの反応性不飽和化合物を含むことが多く、原動機用燃料として使用できません。ジオレフィンの量(Diels-Alder法により測定)に加えて、脂肪族オレフィン成分の総量もモニタリングする必要があります。不飽和炭化水素中の不飽和度(臭素価)を定量化する標準的な方法は滴定による湿式化学法になります。

。この湿式化学法では、酸化や置換などの副反応を最小限に抑えるために、試料を5 ° C以下に冷却する必要があります。この湿式化学法とは対照的に、近赤外分析計(NIR)はサンプルの前処理が不要で、臭素価を1分以内に測定することが可能です。ASTM基準D8321とD6122を満たします。

実験

メトローム社のDS2500リキッドアナライザーを用いて、内径8mmの使い捨てガラスバイアルにて180サンプルのバイガスを測定しました。測定は全て400nm~2500nmのVis-NIR領域を透過モードで行いました。温度制御を40° Cに設定し、サンプルを安定した測定条件にて測定を行いました。光路長8mmの使い捨てガラスバイアルを使用し、洗浄不要で簡便に測定しました。スペクトルデータの測定及び検量線モデル計算は、Vision Airコンプリーソフトウェアにて行いました。



図1. DS2500リキッドアナライザー

表1:ハードウェアおよびソフトウェアの構成

装置	メトローム 製品番号
DS2500 Liquid Analyzer	2.929.0010
Disposable vials, 8 mm diameter, transmission	6.7402.000
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

結果

得られたVis-NIRスペクトル(図2)を用いて、熱分解ガソリン中の臭素価を予測する検量線モデルを作成しました。予測検量線モデルの精度を検証するため

、NIR予測値と従来分析値間の相関を表示する相関図を作成しました。それぞれの統計値(FOM)を図3に示します。

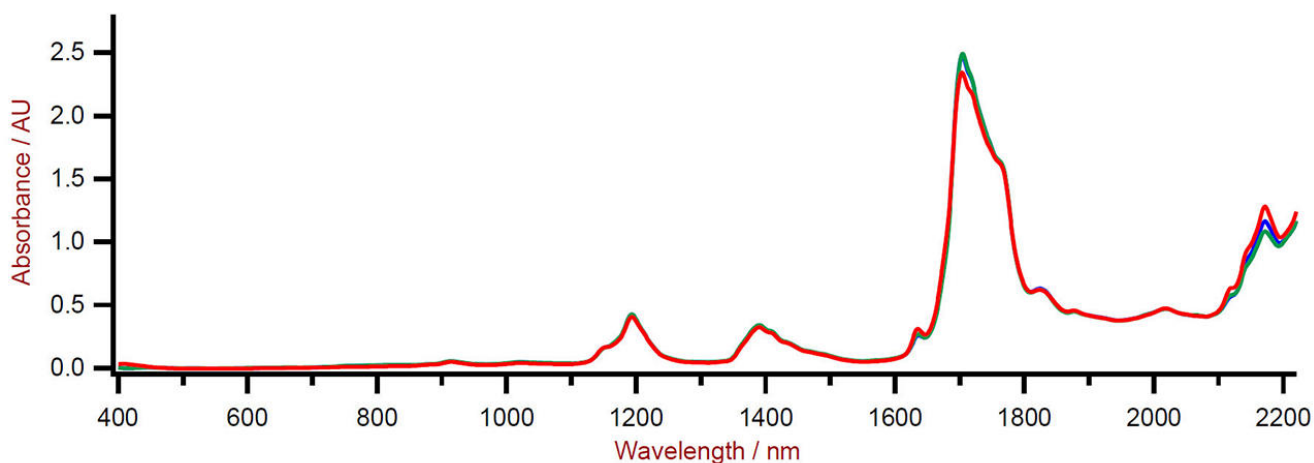


図2. DS2500リキッドアナライザーと8mm使い捨てガラスバイアルを用いて測定された種々の熱分解ガソリンのVis-NIRスペクトル

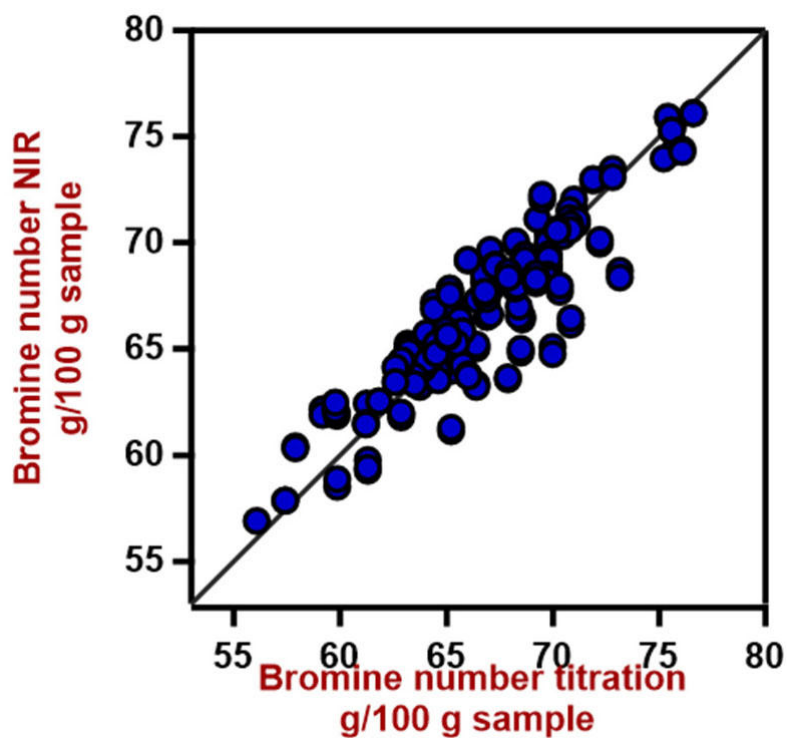


図3. DS2500リキッドアナライザーを用いた臭素価の予測値と従来分析値の相関モデル図

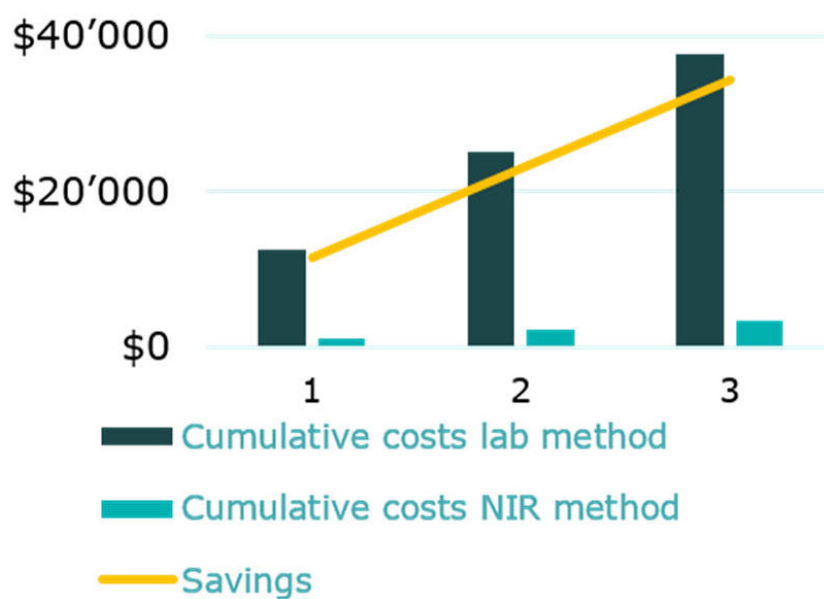
DS2500リキッドアナライザーを用いた臭素価の予測検量線モデルの統計値(FOM)

R^2	0.836
(SEC)	1.84
(SECV)	1.89

(Pygas)(NIR)

ASTM D1159(43)NIRNIR

Running Costs / Year



4. NIR

3. NIR

		NIR
(1)	10	10
	\$6	\$0.50
1	30	1
/	\$12,533	\$1,125

CONTACT

143-0006 6-1-1
null 9

metrohm.jp@metrohm.jp



DS2500 Liquid Analyzer

Robust near-infrared spectroscopy for quality control, not only in laboratories but also in production environments. The DS2500 Liquid Analyzer is the tried and tested, flexible solution for routine analysis of liquids along the entire production chain. Its robust design makes the DS2500 Liquid Analyzer resistant to dust, moisture and vibrations, which means that it is eminently suited for use in harsh production environments. The DS2500 Liquid Analyzer covers the full spectral range from 400 to 2500 nm, heats samples up to 80° C and is compatible with various disposable vials and quartz cuvettes. The DS2500 Liquid Analyzer is thus adaptable to your individual sample requirements and helps you obtain accurate and reproducible results in less than one minute. The integrated sample holder detection and the self-explanatory Vision Air Software also ensure simple and safe operation by the user. In the case of larger-sized sample quantities, productivity can be considerably increased by using a flow-through cell in combination with a Metrohm sample robot.



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)



8mmDS2500

直径8 mmのガラス製使い捨てバイアル用インテリジェントホルダー