



Application Note AN-NIR-024

裂解汽油的质量控制 - 利用近红外光谱在一分钟内测定二烯值

Determination of diene value within one minute using NIRS

裂解汽油 (Pygas) 是乙烯生产的副产品,其中含有不需要的共轭二烯烃,因此不适合用作汽车燃料。为了克服这一限制,其选择加氢装置(SHU)中的烯烃含量必须降至 2 mg/g pygas。二烯值或马来酸酐值 (MAV) 通常由 Diels-Alder 湿化学方法 (UOP326-17) 测定。

这种湿化学方法需要训练有素的分析人员几个小时才能完成。相比于主要的方式,近红外光谱(NIRS)是一种性价比高且分析快速的解决方案,适用于裂解汽油中的二烯值测定。

EXPERIMENTAL EQUIPMENT

在配备 8 mm 一次性玻璃瓶的 NIRS XDS RapidLiquid Analyzer 上分析了 99 个 pygas 样品。所有测量均在 400 nm 至 2500 nm 的透射模式下进行。温度控制设置为 40 ° C,以提供稳定的样品环境。为方便起见,使用了路径长度为 8 mm 的一次性小瓶,这使得清洁程序过时。Metrohm 软件包 Vision Air Complete 用于数据采集和预测模型开发。



Figure 1. 样品填充在路径长度为 8 毫米的一次性小瓶中。

表格1。软硬件设备概述

设备	万通数
XDS 快速液体分析仪	2.921.1410
一次性小瓶,直径 8 mm,透射式	6.7402.000
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

RESULT

获得的 Vis-NIR 光谱 (图 2) 用于创建用于确定二烯值的预测模型。为了验证预测模型的质量,创建了相关图,显示了 Vis-NIR 预测和主要方法值之间的相关性(图

3)。各自的品质因数 (FOM) 显示了常规分析期间预测的预期精度。

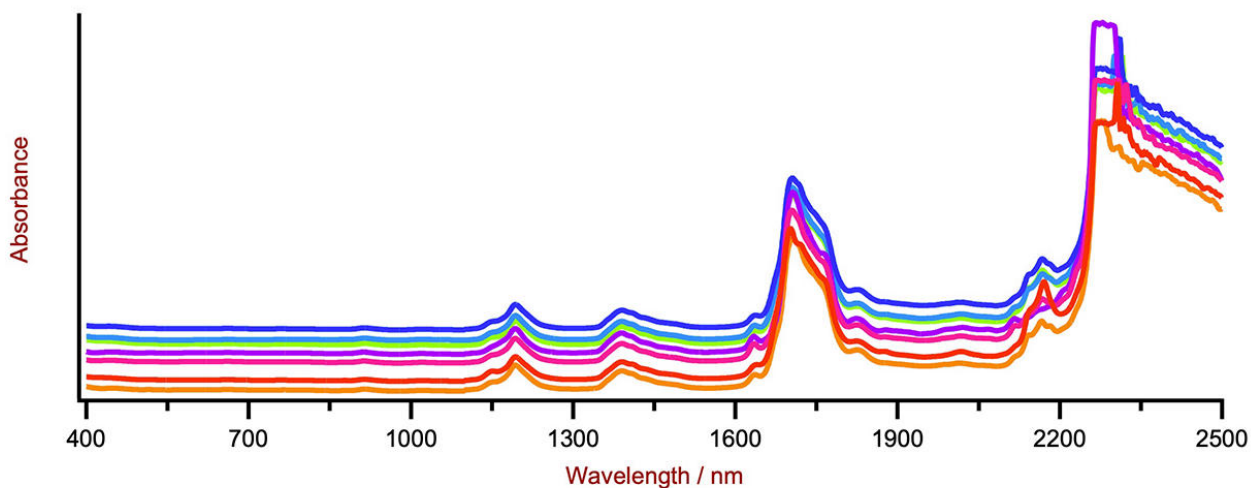


Figure 2. 选择使用 XDS RapidLiquid Analyzer 和 8 mm 一次性样品瓶获得的裂解汽油 Vis-NIR 光谱。出于显示原因，应用了光谱偏移。

RESULT

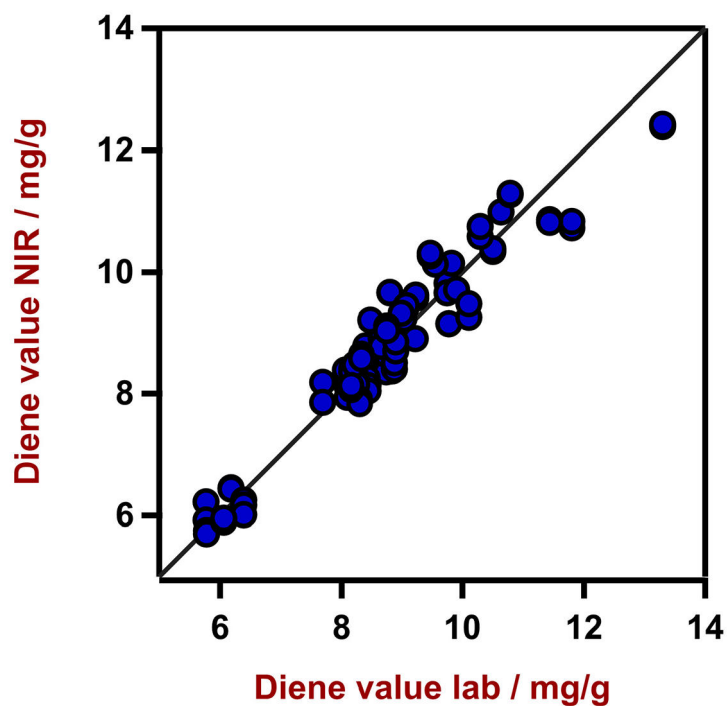


Figure 3. 使用 XDS RapidLiquid Analyzer 预测二烯值的相关图。实验室值根据 UOP326-17 方法确定。

表 2。使用 XDS RapidLiquid Analyzer 预测二烯值的品质因数。

绩效指标	数值
R^2	0.9253
校准的标准误差	0.42 毫克/克
交叉验证的标准误差	0.46 毫克/克

CONCLUSION

本应用简报展示了近红外光谱分析裂解汽油中二烯值的可行性。与湿化学法 UOP326-17 (表3),获得结果

的时间是近红外光谱的主要优势,因为单个 测量在一分钟内完成。

表3。使用传统 UOP-326 湿化学分析得出结果的时间

参数	方法	得出结果的时间和工作流程
二烯值	迪尔斯桤木 (UOP326-17)	~6小时;回流、水解、滴定

CONTACT

Metrohm Taiwan Ltd.
 開封街二段 46 號 5 樓
 108 台北市

info@metrohm.com.tw



NIRS XDS RapidLiquid Analyzer
 快速精确地分析各种液体和悬浮液。

NIRS XDS RapidLiquid Analyzer 分析仪可快速精确地分析液体制剂和物质。按下按钮即可得到精确的测量结果,NIRS XDS RapidLiquid Analyzer 是适用于实验室和工艺过程中质量控制的可靠且方便的解决方案。样品将被预置在可重复使用的石英比色皿或一次性玻璃瓶中;可控制温度的样品室确保可重现的分析条件,由此得到精确的测量结果。



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air – 通用的光谱分析软件。

Vision Air Complete 是用于监管规范环境的先进易用的软件解决方案。

Vision Air 优点一览:

- 便捷的软件应用和经过适配的用户界面保证了直观简单的操作方式
- 操作过程的创建与维护方式简单
- SQL 数据库,可安全且简单地管理数据

Vision Air Complete (66072208) 版本包含所有用于可见近红外光谱分析质量保证过程的应用:

- 仪器和数据管理应用
- 方法开发应用
- 常规分析应用

其它 Vision Air Complete 解决方案:

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