



Application Note AN-NIR-024

# 熱分解カソリンの品質管理 - NIRSを用いた1分以内でのシエン価の測定

## Determination of diene value within one minute using NIRS

熱分解カソリン(Pygas)はエチレン製造の副産物であり、不要な共役シオレフィンが含まれているため、モーター燃料としては不適切です。この限界を克服するためには、選択的水素化ユニット (SHU) におけるオレフィン含量が 2 mg/g pygas まで縮減される必要があります。シエン値、または無水マレイン酸値(MAV)は、通常、ティールスアルター湿式化学法

(UOP326-17)によって決定されます。

この湿式化学法は、高度な訓練を受けたアナリストが実行するのに数時間かかります。一次メソッドとは対照的に、近赤外分光法 (NIRS) は、熱分解カソリン中のシエン価を測定するための、コスト効率が高く迅速な分析ソリューションです。

## EXPERIMENTAL EQUIPMENT

99個のpygasサンプルを、8mmの使い捨てガラスハイアルを備えたNIRS XDS RapidLiquidAnalyzerで分析しました。すべての測定は、400 nm~2500nmの透過モードで実行されました。安定したサンプル環境を提供するために、温度制御は40° Cに設定されました。便宜上、パス長8 mmの使い捨てハイアルが使用されたため、洗浄手順が廃止されました。MetrohmソフトウェアパッケージVisionAir Completeは、データ取得と予測モデルの開発に使用されました。



Figure 1. パス長8mmの使い捨てペイルにサンプルを充填。

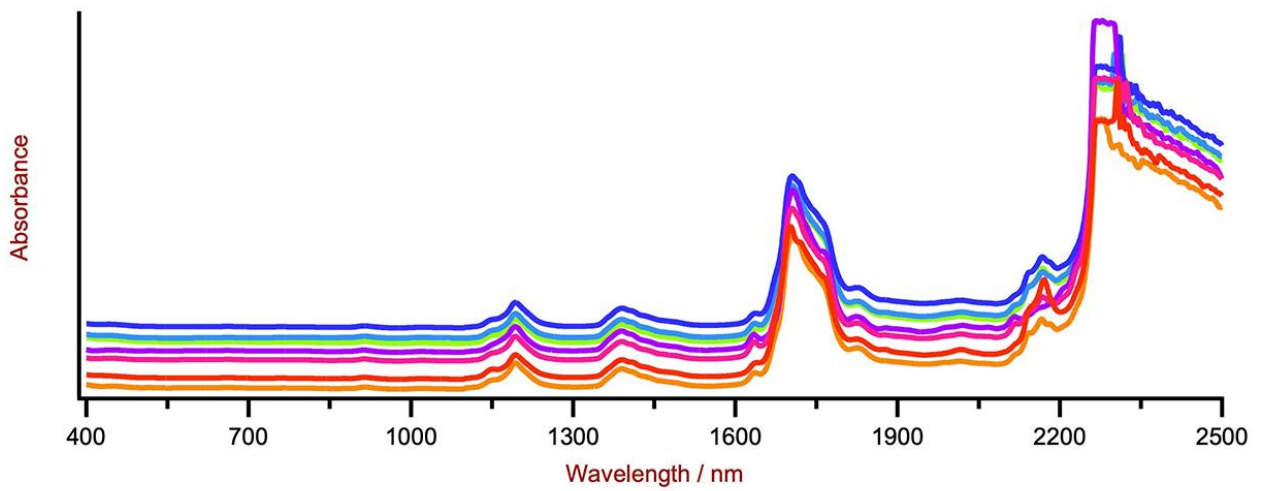
表1. ハードウェアおよびソフトウェア機器の概要

装置	メトローム番号
XDSRapidLiquidアナライザー	2.921.1410
使い捨てハイアル、直径8 mm、トランスミッション	6.7402.000
Vision Air2.0コンフリート	6.6072.208

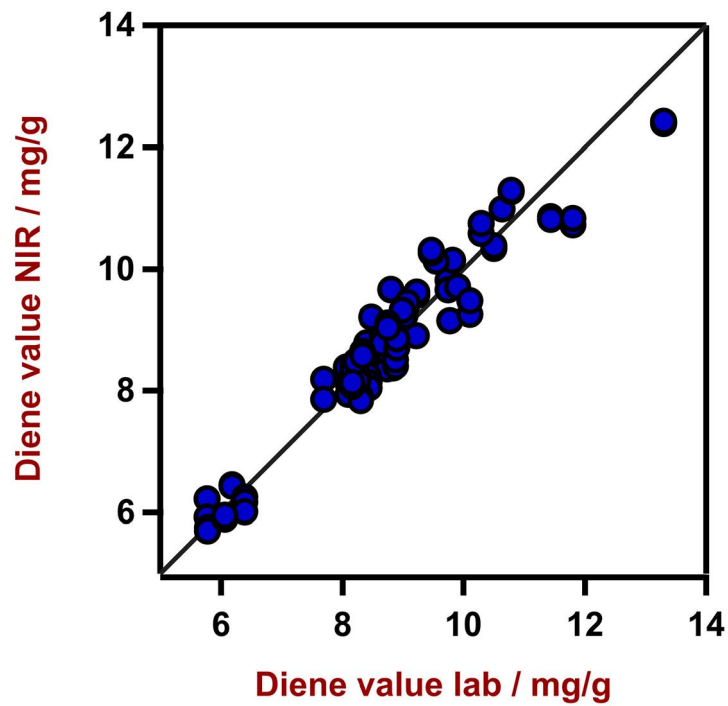
## RESULT

得られたVis-NIRスペクトル(図2)は、シエン値決定の予測モデルを作成するために使用されました。予測モデルの品質を検証するために、Vis-NIR予測と主

要なメソット値(図3)。それぞれの性能指数(FOM)は、ルーチン分析中の予測の期待される精度を示しています。



**Figure 2.** XDSRapidLiquidアナライザーと8mm使い捨てバイアルを使用して得られた熱分解ガソリンVis-NIRスペクトルの選択。表示上の理由から、スペクトルオフセットが適用されました。



**Figure 3.** XDSRapidLiquidアナライザーを使用してジエン値を予測するための相関図。ラボ値は、UOP326-17メソッドに従って決定されました。

表2。XDSRapidLiquidアナライザーを使用してシエン値を予測するメリットの数値。

性能指数	値
R <sup>2</sup>	0.9253
校正の標準誤差	0.42 mg / g
交差検定の標準誤差	0.46 mg / g

## CONCLUSION

このアプリケーションノートは、熱分解カソリン中のシエン値の分析のためのNIR分光法の実現可能性

を示しています。湿式化学法UOP326-17(表3)、単一の測定は1分以内に行われます。

表3。従来のUOP-326湿式化学分析で結果を出すまでの時間

パラメータ	メソッド	結果とワークフローまでの時間
シエン値	ティールス・アルター(UOP326-17)	~6時間;逆流、加水分解、滴定

## CONTACT

メトロームジャパン株式会社  
143-0006 東京都大田区平和島6-1-1  
null 東京流通センター アネックス9階

metrohm.jp@metrohm.jp



### NIRS XDS RapidLiquid Analyzer

あらゆる種類の液体および懸濁液の迅速で正確な分析。

NIRS XDS RapidLiquid Analyzerは、液体製剤および物質の迅速で正確な分析を可能にします。ボタンを押すだけで正確な測定結果が得られるため、NIRS XDS RapidLiquid Analyzerはラボおよびプロセスにおける品質管理のための信頼性が高くシンプルなソリューションです。サンプルは、再使用可能な石英製キュベットまたは使い捨てガラス製ハイアルに置かれます。温度調整されたサンプルコンパートメントは、再現性のある分析条件、およびそれによる正確な測定結果を保証します。



### 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)