

Mesure de la teneur totale en hydrocarbures naphthaléniques dans les carburants d'aviation par spectroscopie UV-Vis

Optimisation de la précision photométrique et rationalisation du traitement de données à l'aide du spectrophotomètre UV-Vis Agilent Cary 3500



Auteur

Yasurika Heenatigala
Agilent Technologies, Inc.

Résumé

Cette étude explore l'application de la spectroscopie UV-Vis comme une méthode efficace et simple pour l'analyse qualitative et quantitative des hydrocarbures naphthaléniques dans les carburants d'aviation. En utilisant le spectrophotomètre UV-Vis Agilent Cary 3500 et le logiciel UV-Vis de station de travail Agilent Cary UV, un flux de travail simple a été développé pour mesurer la concentration totale de naphthalènes dans trois échantillons de carburant Jet A-1. Il en résulte d'excellentes données de précision de la méthode, confirmant le potentiel de cette technique pour évaluer la qualité, les propriétés de combustion et l'impact environnemental potentiel des carburants.

Introduction

La spectroscopie UV-Vis peut être utilisée pour fournir une analyse qualitative simple et rapide des performances des moteurs d'aviation en mesurant la concentration des hydrocarbures composants dans les échantillons de turbocombustible.

Une méthode d'évaluation des performances des moteurs d'aviation inclut la caractérisation de la combustion du carburant. Le naphthalène, un hydrocarbure composé de deux cycles aromatiques et classé comme hydrocarbure aromatique polycyclique¹, est couramment utilisé comme additif pour le kérosène. De faibles niveaux d'acénaphthène et de dérivés alkylés de ces hydrocarbures peuvent également être présents dans les carburéacteurs. Bien que ces naphthalènes ne constituent qu'un faible pourcentage du volume d'un échantillon de carburant, ils contribuent de manière disproportionnée au niveau de particules dans les gaz d'échappement des moteurs.² Ils contribuent également à la suie, à la fumée et au rayonnement thermique en raison d'une combustion incomplète.³ Étant donné que ces propriétés de combustion indiquent une efficacité énergétique inférieure et un risque plus élevé d'émissions polluantes⁴, il est essentiel de calculer la concentration totale en naphthalènes dans le carburéacteur.

Grâce à des mesures qualitatives de l'absorbance et des calculs quantitatifs, la concentration totale de naphthalènes dans un échantillon de carburéacteur peut être déterminée par spectroscopie UV-Vis. Cette note d'application démontre les avantages du spectrophotomètre UV-Vis Agilent Cary 3500 et de la station de travail Agilent Cary UV v1.6 pour déterminer la concentration totale en hydrocarbures naphthaléniques dans trois échantillons de carburant de Jet A-1.

Méthode expérimentale

Préparation d'échantillons

Témoin solvant : isooctane de grade spectroscopique (2,2,4-triméthylpentane, Sigma-Aldrich, référence 1047182500, numéro CAS 540-84-1). Trois millilitres d'isooctane ont été ajoutés dans une cuve en quartz standard de 3,5 mL et de 10 mm de trajet optique (Agilent Technologies, référence 5061-3387). Trois témoins solvant ont été préparés et utilisés comme blanc pour les échantillons.

Échantillons 1 à 3 : des aliquotes de 0,075 mL de trois échantillons de carburant de Jet A-1 (achetés localement) ont été prélevées par pipette dans des fioles jaugées de 100 mL propres, sèches et tarées. La masse de chaque échantillon a été enregistrée à 0,0001 g près (64,1, 63,4, et 65,5 mg,

respectivement), puis diluée avec de l'isooctane de grade spectroscopique jusqu'au repère, bouchée et mélangée soigneusement. Trois millilitres de la solution ont ensuite été transférés dans une cuve en quartz de 10 mm, prêts pour l'analyse.

Instruments

Une fois le témoin solvant et les cellules échantillons préparés, l'absorbance a été mesurée à l'aide du spectrophotomètre UV-Vis Cary 3500 Multicuves Agilent (figure 1), avec les paramètres listés dans le tableau 1. Le module Multicuves permet à un utilisateur de mesurer jusqu'à sept échantillons et une référence simultanément. Dans cette expérience, les trois échantillons de carburant ont été mesurés ensemble, et les spectres d'absorbance ont été collectés sur un graphique. Les mesures de l'absorbance des échantillons ont ensuite été comparées à l'isooctane spectroscopique (témoin solvant) à 285 nm.



Figure 1. Le spectrophotomètre UV-Vis Cary 3500 Multicuves Agilent.

Tableau 1. Paramètres de collecte des données avec le spectrophotomètre UV-Vis Agilent Cary 3500 Multicuves.

Paramètre	Valeur
Gamme spectrale	240 à 350 nm
Durée d'intégration du signal	0,1 s
Intervalle de données	1 nm
Bande passante spectrale	1 nm

Résultats et discussion

Analyse qualitative et quantitative des échantillons

La station de travail Cary UV v1.6 comprend des outils fonctionnels qui aident les utilisateurs à produire et analyser les résultats dans un seul programme, simplifiant ainsi l'analyse. Les paramètres opérationnels et les méthodes de calcul ont été configurés à l'aide d'une nouvelle séquence dans le programme d'application « Scan » (Balayage). Les utilisateurs peuvent choisir de collecter l'absorbance sur une gamme de longueurs d'onde ou à une longueur d'onde spécifiée. Dans cette étude, le domaine des longueurs d'onde de 240 à 350 nm a été scanné afin que la forme du spectre d'absorbance puisse être analysée.

Pour évaluer la concentration totale de naphthalènes dans les échantillons de carburéacteur, trois calculs ont été entrés dans la fonction « analyse de fin de séquence », comme le montre la figure 2.

L'analyse 1 a été utilisée pour calculer le pourcentage volumique (% en volume) des naphthalènes dans les échantillons, en utilisant le pourcentage massique (% en masse), et les valeurs de densité relative des naphthalènes (1) et du carburant (0,8).⁵

L'analyse 2 a été utilisée pour calculer le pourcentage massique (% en masse) des naphthalènes dans les échantillons de carburéacteur en utilisant la valeur d'absorbance à 285 nm (A), la masse de l'échantillon respectif en grammes (W), et deux constantes, 0,10 (K) et l'absorptivité moyenne des naphthalènes C_{10} à C_{13} à 285 nm, 33,7 L/g cm.³ Le poids a été ajouté dans la configuration de l'analyse de séquence, en utilisant la fonction des paramètres personnalisables, ce qui permet à l'utilisateur d'adapter la variable et l'unité à son choix (figure 2).

L'analyse 3 a été utilisée pour trouver l'absorbance (Abs) à 285 nm, en utilisant l'équation « valeur à (285) ».

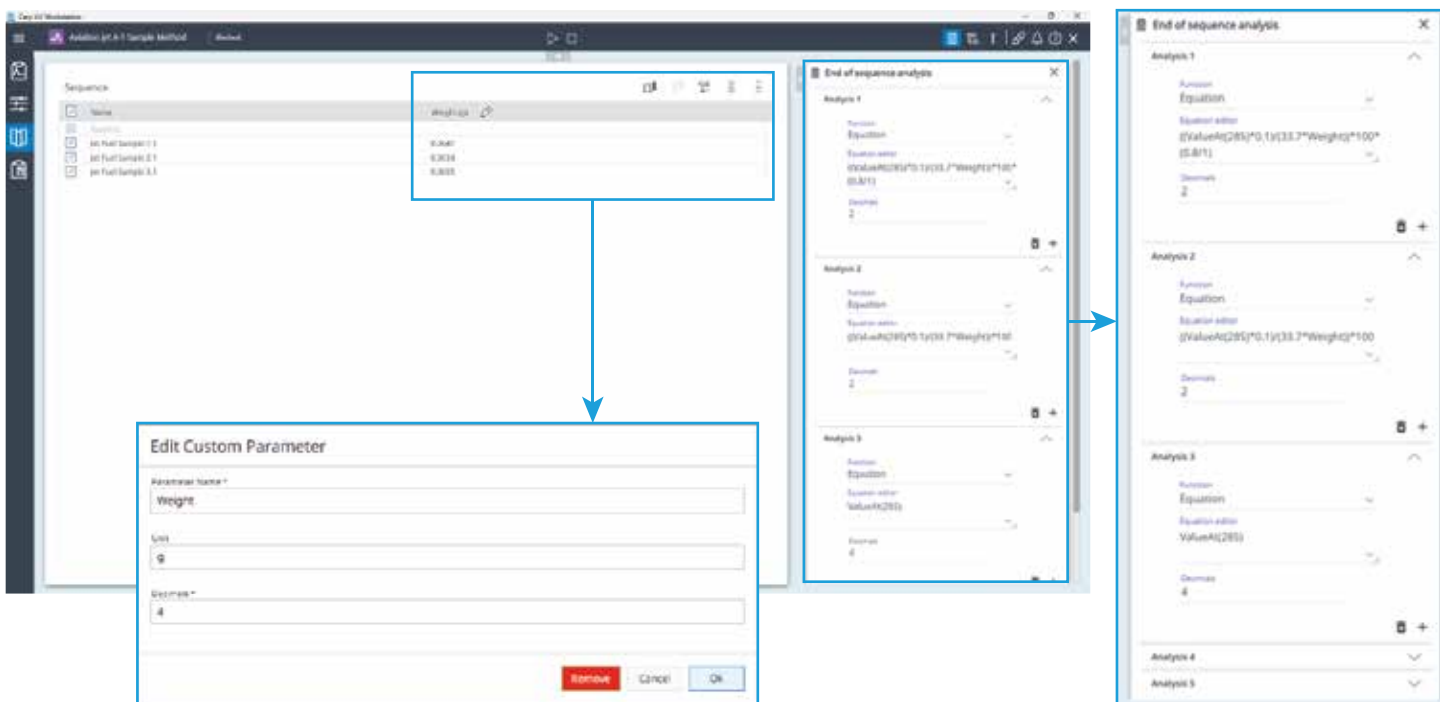


Figure 2. La page de configuration des séquences dans la station de travail Agilent Cary UV v1.6, qui permet aux utilisateurs de créer les méthodes de test et de calcul. Le poids de l'échantillon a été ajouté comme paramètre personnalisé (en bas) et trois calculs (à droite) ont été entrés dans la section d'analyse de fin de séquence de la page.

Une fois la mesure des échantillons terminée, la station de travail Cary UV v1.6 a produit un graphique évolutif du domaine de longueurs d'ondes spécifié, comme indiqué sur la figure 3. Les trois calculs d'analyse de fin de séquence ont donné lieu à des tables de valeurs faciles à lire. Les décimales ont été définies à quatre pour Abs et à deux pour la masse et le volume en %. Le pourcentage volumique de naphthalènes dans chaque échantillon de carburéacteur respectif a ensuite été rapporté à 0,01 % près, comme indiqué dans le tableau 2.

Tableau 2. Pourcentage en volume des naphthalènes dans chaque échantillon de carburéacteur, exprimé avec deux décimales.

	Échantillon 1	Échantillon 2	Échantillon 3
% en volume des naphthalènes dans l'échantillon de carburéacteur	1,00	1,08	1,36

La station de travail Cary UV v1.6 a déterminé le pourcentage volumique de naphthalènes dans les échantillons de carburéacteur sans avoir besoin d'effectuer des calculs hors ligne ou d'exporter des données vers un autre programme. Les paramètres de collecte des données et la méthode de traitement des données ont été sauvegardés en tant que méthode de test pour rationaliser la configuration des expériences futures. La création d'une méthode de test pour l'analyse des naphthalènes évite d'avoir à ressaisir les paramètres d'analyse, permettant un flux de travail plus rapide et plus efficace et permettant aux utilisateurs de se concentrer sur leur analyse plutôt que sur la configuration de méthode.

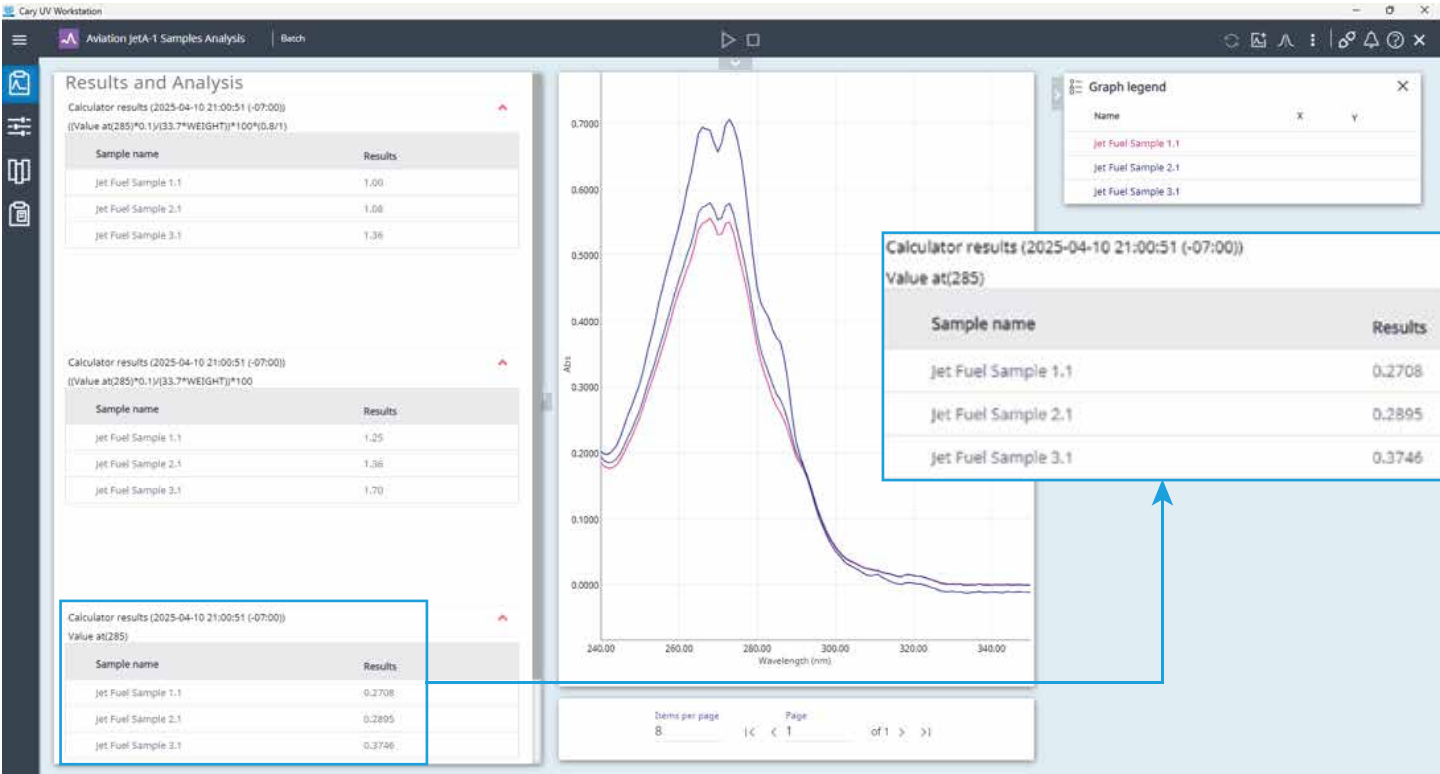


Figure 3. La station de travail Agilent Cary UV v1.6 restitue les données dans un format simple de tableau de valeurs, permettant aux utilisateurs d'effectuer une analyse quantitative pertinente lors de la mesure.

Génération de rapports

La station de travail Cary UV v1.6 regroupe les résultats qualitatifs et quantitatifs dans un rapport. Comme le montre la figure 4, le rapport de cette étude a été personnalisé pour inclure du contenu tel que des calculs de données avec tableau de valeurs, un graphique à l'échelle pour montrer la région de 285 nm, plus d'autres options. Les préférences de contenu du rapport peuvent également être enregistrées dans le cadre de la méthode de test. Le rapport pour les trois échantillons de carburéacteur a ensuite été généré sous forme de PDF.

Précision de la méthode

La précision de la méthode du spectrophotomètre UV-Vis Cary 3500 a été évaluée par des tests de répétabilité et de reproductibilité.

Répétabilité : en vue de l'évaluation de la répétabilité, 20 mesures successives ont été effectuées sur chaque échantillon dans des conditions de fonctionnement constantes. Comme indiqué dans le tableau 3, les faibles valeurs d'écart-type calculées pour les mesures respectives mettent en évidence la cohérence des lectures de l'absorbance. Ce niveau de stabilité est important pour la précision photométrique.

Tableau 3. Moyenne et écart de 20 mesures de l'absorbance de chaque échantillon de carburéacteur.

	Échantillon 1	Échantillon 2	Échantillon 3
Moyenne de l'absorbance à 285 nm (Abs)	0,2691	0,2933	0,3748
Écart-type (Abs)	0,0004	0,0004	0,0005

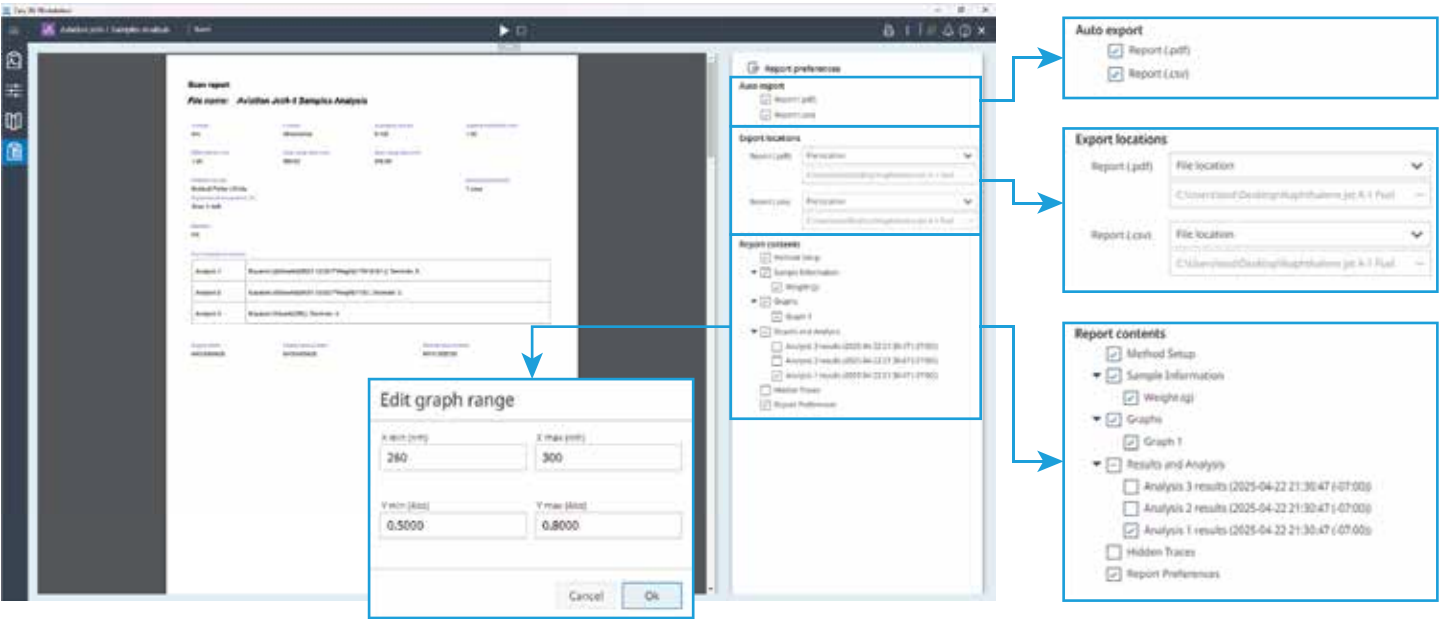


Figure 4. La station de travail Agilent Cary UV v1.6 permet aux utilisateurs d'exporter automatiquement des rapports au format PDF ou CSV à la fin de l'acquisition de la séquence. Les utilisateurs peuvent définir un emplacement d'exportation personnalisé pour ces rapports, personnaliser le contenu du rapport en sélectionnant ou en désélectionnant des éléments spécifiques en fonction de leurs préférences, et mettre en évidence la région d'intérêt sur des graphiques à l'échelle.

Scan report

File name: Aviation JetA-1 Samples Analysis

2 reads

7 reads

Averaging time (s)

Scanned bandwidth (nm)

nm

Absorbance

0.100

1.00

Data interval (nm)

Scan range start (nm)

Scan range stop (nm)

1.00

350.00

240.00

Detector module

Multiple experiments

Multical Potter UV-VIS

1 zone

Experiments temperature (°C)

Zone 1: N/A

Baseline

OK

End of sequence analysis

Analysis 1

Equation ((ValueA(285)*(1/(33.7*ln(e^((710/5.81))

Decimal: 2

Analysis 2

Equation ((ValueA(285)*(1/(33.7*ln(e^((710/5.81))

Decimal: 2

Analysis 3

Equation (ValueA(285)), Decimal: 4

Engine name

Engine serial number

Module serial number

MY2152A05

MY2152A05

MY2152C03

Generated on

2025-04-10 21:00:55 (-07:00)

Cary UV Workstation

Version 1.6

Page 1 of 5

Sample information

Jet Fuel Sample 1.1

Weight (g)

0.0001

Jet Fuel Sample 2.1

Weight (g)

0.0004

Jet Fuel Sample 3.1

Weight (g)

0.0005

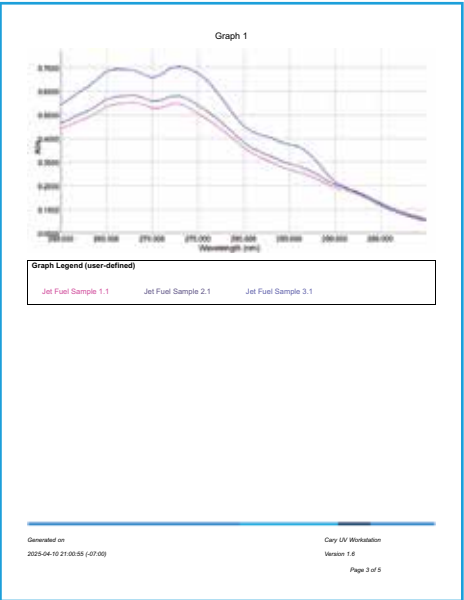
Generated on

2025-04-10 21:00:55 (-07:00)

Cary UV Workstation

Version 1.6

Page 2 of 5



Analysis 1 results (2025-04-10 21:00:55 (-07:00))

Equation ((ValueA(285)*(1/(33.7*ln(e^((710/5.81))

Decimal: 2

Sample name

Results

Jet Fuel Sample 1.1

0.100

Jet Fuel Sample 2.1

0.100

Jet Fuel Sample 3.1

0.100

Generated on

2025-04-10 21:00:55 (-07:00)

Cary UV Workstation

Version 1.6

Page 4 of 5

Report preferences

Export locations

Report (.pdf) - C:\Users\user\Desktop\FlightInstruments_Jet-A-1 Fuel

Report (.xml) - C:\Users\user\Desktop\FlightInstruments_Jet-A-1 Fuel

Report contents

Method Setup

Sample Information

Weight (g)

Graphs

Graph 1

Results and Analysis

Analysis 1 results (2025-04-10 21:00:55 (-07:00))

Analysis 2 results (2025-04-10 21:00:55 (-07:00))

Analysis 3 results (2025-04-10 21:00:55 (-07:00))

Printer Setup

Report Preferences

Generated on

2025-04-10 21:00:55 (-07:00)

Cary UV Workstation

Version 1.6

Page 5 of 5

Figure 5. Le rapport de balayage généré pour les trois échantillons de carburéacteur.

Une plage d'acceptation a été calculée sur la base du % volumique moyen de naphtalènes mesuré dans l'échantillon de carburéacteur respectif sur les 20 analyses dans des conditions constantes.³ Comme le montre le tableau 4, les valeurs d'acceptation pour les échantillons ont été calculées à $\pm 0,18\%$ pour l'échantillon 1, $\pm 0,19\%$ pour l'échantillon 2 et $\pm 0,21\%$ pour l'échantillon 3. La variation (écart-type) en pourcentage volumique des naphtalènes entre les analyses a également été calculée pour chaque échantillon afin d'évaluer comment les mesures individuelles s'écartaient de la moyenne.

Le spectrophotomètre UV-Vis Cary 3500 Multicuves a fourni des mesures cohérentes et répétables, comme le démontrent les valeurs de variation calculées de $\pm 1,42 \times 10^{-3}\%$ pour l'échantillon 1, $\pm 1,61 \times 10^{-3}\%$ pour l'échantillon 2, et $\pm 1,96 \times 10^{-3}\%$ pour l'échantillon 3. Comme le montre le tableau 4, la variation observée du pourcentage volumique de naphtalènes pour chaque échantillon était bien dans la gamme de répétabilité acceptée, ce qui confirme la capacité de l'instrument à effectuer des mesures précises.

Tableau 4. Résultats du test de répétabilité pour les mesures de trois échantillons de carburéacteur, n = 20.

	Échantillon 1	Échantillon 2	Échantillon 3
Moyenne (% en volume des naphtalènes)	1,00	1,10	1,36
Critères de répétabilité (%)	$\pm 0,18$	$\pm 0,19$	$\pm 0,21$
Écart-type (% en volume des naphtalènes)	$1,42 \times 10^{-3}$	$1,61 \times 10^{-3}$	$1,96 \times 10^{-3}$

Reproductibilité : en vue de l'établissement de la précision et de la cohérence des mesures de l'absorbance entre les instruments, un deuxième Agilent Cary 3500 a été utilisé, et 20 autres analyses successives ont été effectuées au moyen des mêmes trois échantillons de matériaux de test. Le petit écart-type des résultats obtenus à partir de l'analyse séparée et indépendante d'échantillons a démontré une excellente reproductibilité de la méthode et des instruments (tableau 5).

Tableau 5. Moyenne et écart sur 20 mesures de l'absorbance de chaque échantillon de carburéacteur, effectuées par un deuxième opérateur.

	Échantillon 1	Échantillon 2	Échantillon 3
Moyenne de l'absorbance à 285 nm (Abs)	0,2715	0,2916	0,3755
Écart-type (Abs)	0,0002	0,0003	0,0002

Une plage d'acceptation pour la reproductibilité a été calculée sur la base de la variation des mesures entre les opérateurs.³ Le pourcentage volumique moyen de naphtalènes a été calculé à l'aide du deuxième spectrophotomètre UV-Vis Cary 3500 Multicuves, et les valeurs d'acceptation pour les échantillons ont été calculées à $\pm 0,24\%$ pour l'échantillon 1, $\pm 0,26\%$ pour l'échantillon 2, et $\pm 0,29\%$ pour l'échantillon 3 (tableau 6). La précision de la mesure entre les instruments a pu être obtenue grâce à la comparaison de la variation des résultats obtenus par différents opérateurs.

Tableau 6. Résultats du test de reproductibilité pour les mesures de trois échantillons de carburéacteur, réalisé par un second opérateur, n = 20.

	Échantillon 1	Échantillon 2	Échantillon 3
Moyenne (% en volume des naphtalènes)	1,01	1,09	1,36
Critères de reproductibilité (%)	$\pm 0,24$	$\pm 0,26$	$\pm 0,29$
Écart-type (% en volume des naphtalènes)	$7,73 \times 10^{-4}$	$1,18 \times 10^{-3}$	$8,10 \times 10^{-4}$

Les valeurs de variation (écart-type) pour les mesures de $\pm 7,73 \times 10^{-4}\%$ pour l'échantillon 1, $\pm 1,18 \times 10^{-3}\%$ pour l'échantillon 2, et $\pm 8,10 \times 10^{-4}\%$ pour l'échantillon 3 étaient bien dans la plage de reproductibilité acceptée.

Comme le montre le résumé fourni dans le tableau 7, les valeurs d'absorbance et le pourcentage volumique calculé de naphtalènes des échantillons étaient significativement similaires entre les deux instruments, démontrant la cohérence de la méthode. De plus, les différences dans les écarts-types entre les instruments indiquaient un faible degré de variation basée sur l'opérateur. Les écarts-types calculés illustrent la capacité des instruments à fournir des mesures de l'absorbance répétables, reproductibles et fiables, sur plusieurs analyses.

Tableau 7. Comparaison de la variation de l'absorbance et du % en volume du naphtalène pour les trois mêmes échantillons de carburéacteur mesurés par deux instruments.

		Instrument 1	Instrument 2
Abs à 285 nm	Échantillon 1	$0,2691 \pm 0,0004$ Abs	$0,2715 \pm 0,0002$ Abs
	Échantillon 2	$0,2933 \pm 0,0004$ Abs	$0,2916 \pm 0,0003$ Abs
	Échantillon 3	$0,3748 \pm 0,0005$ Abs	$0,3755 \pm 0,0002$ Abs
Naphtalène, % en volume	Échantillon 1	$1,00 \pm 1,42 \times 10^{-3}\%$	$1,01 \pm 7,73 \times 10^{-4}\%$
	Échantillon 2	$1,10 \pm 1,61 \times 10^{-3}\%$	$1,09 \pm 1,18 \times 10^{-3}\%$
	Échantillon 3	$1,36 \pm 1,96 \times 10^{-3}\%$	$1,36 \pm 8,10 \times 10^{-4}\%$

Conclusion

Le spectrophotomètre Agilent UV-Vis Cary 3500 Multicuves et le logiciel de station de travail Agilent Cary UV v1.6 ont permis une analyse efficace et directe de la concentration totale en naphtalènes dans les carburants pour turbines à réaction. La fiabilité du spectrophotomètre Cary 3500 a été démontrée par les mesures précises et répétables de l'absorbance.

La récupération des méthodes sauvegardées et l'utilisation des calculs automatisés en séquence dans le logiciel ont rationalisé la collecte et le traitement des données, éliminant ainsi le besoin d'une saisie manuelle, de calculs hors ligne ou d'un logiciel externe. De plus, la fonctionnalité de reporting intégrée au sein du logiciel a assuré une consolidation efficace des résultats et facilité la révision facile des informations.

Le spectrophotomètre UV-Vis Cary 3500 Multicuves et la station de travail Cary UV v1.6 fournissent une méthodologie rapide, fiable, robuste et conviviale pour l'évaluation de la qualité du carburant.

Références

1. Mckee, R. H.; Adenuga, M. D.; Carrillo, J.-C. Characterization of the Toxicological Hazards of Hydrocarbon Solvents. *Critical Reviews in Toxicology* **2015**, 45(4), 273–365. doi:10.3109/10408444.2015.1016216
2. Batterman, S.; Chin, J.-Y.; Jia, C.; Godwin, C.; Parker, E.; Robins, T.; Max, P.; Lewis, T. Sources, Concentrations and Risks of Naphthalene in Indoor and Outdoor Air. *Indoor Air* **2012**, 22(4), 266–278. doi:10.1111/j.1600-0668.2011.00760.x
3. ASTM International. ASTM D1840-24 (2024) Standard Test Method for Naphthalene Hydrocarbons in Aviation Turbine Fuels by Ultraviolet Spectrophotometry. ASTM Volume 05.01: Petroleum Products, Liquid Fuels, and Lubricants (I): C1234–D4176. doi:10.1520/D1840-24
4. Yeh, C.-K.; Tzu, F.-M.; Chen, P.-Y.; Shen, H.-C.; Yuan, C.-S.; Lin, C.; Pu, H.-P.; Ngo, H.-H.; Bui, X.-T. Emission Characteristics of Naphthalene from Ship Exhausts Under Global Sulfur Cap. *Science of The Total Environment* **2023**, 902. doi:10.1016/j.scitotenv.2023.166172
5. BP Australia. (2024). Fiche de données de sécurité du Jet A-1. 7. Publié sur [https://airbpmsds.bp.com/ussds/amersdsf.nsf/AllFiles_AIR_BP_FUELS/B53D844EC4BB273780258ACF00588ADF/\\$File/3075780.pdf](https://airbpmsds.bp.com/ussds/amersdsf.nsf/AllFiles_AIR_BP_FUELS/B53D844EC4BB273780258ACF00588ADF/$File/3075780.pdf)