

Misurazione degli idrocarburi totali a base di naftalene nei combustibili per aviazione mediante spettroscopia UV-Vis

Ottimizzare l'accuratezza fotometrica e semplificare la gestione dei dati con lo spettrofotometro UV-Vis Agilent Cary 3500



Autore

Yasurika Heenatigala
Agilent Technologies, Inc.

Abstract

Questo studio analizza l'applicazione della spettroscopia UV-Vis come metodo efficiente e diretto per l'analisi qualitativa e quantitativa degli idrocarburi a base di naftalene nei combustibili per aviazione. Utilizzando lo spettrofotometro UV-Vis Agilent Cary 3500 e il software Cary UV Workstation, è stato sviluppato un flusso di lavoro semplice per misurare la concentrazione totale di naftaleni in tre campioni di combustibile Jet A-1. Vengono presentati dati relativi all'eccellente precisione del metodo, confermando il potenziale di questa tecnica nella valutazione della qualità, delle proprietà di combustione e dell'impatto ambientale potenziale dei combustibili.

Introduzione

La spettroscopia UV-Vis può essere utilizzata per fornire un'analisi qualitativa semplice e rapida delle prestazioni dei motori per aviazione, misurando la concentrazione degli idrocarburi componenti nei campioni di combustibile per aviazione.

Uno dei metodi per valutare le prestazioni dei motori aeronautici consiste nella caratterizzazione della combustione del combustibile. Il naftalene, un idrocarburo composto da due anelli aromatici e classificato come idrocarburo policiclico aromatico¹, è comunemente utilizzato come additivo nei combustibili per aviazione. Bassi livelli di acenaftene e derivati alchilati di questi idrocarburi possono essere presenti anche nei combustibili per aviogetti. Sebbene questi naftaleni rappresentino solo una piccola percentuale del volume totale di un campione di combustibile, contribuiscono in misura sproporzionata al livello di particolato nei gas di scarico dei motori.² Contribuiscono inoltre alla formazione di fuliggine, fumo e radiazione termica a causa della combustione incompleta.³ Poiché queste proprietà di combustione indicano una minore efficienza e un maggiore rischio di emissione di inquinanti⁴, è essenziale calcolare la concentrazione totale di idrocarburi a base di naftalene nei combustibili per aviazione.

Attraverso misure di assorbanza qualitative e calcoli quantitativi, la concentrazione totale di naftalene in un campione di combustibile per aviogetti può essere determinata mediante spettroscopia UV-Vis. Questa nota applicativa illustra i vantaggi dello spettrofotometro UV-Vis Agilent Cary 3500 e del software Agilent Cary UV Workstation v1.6 per determinare la concentrazione totale di idrocarburi a base di naftalene in tre campioni di combustibile Jet A-1.

Condizioni sperimentali

Preparazione del campione

Controllo solvente: Isoottano di grado spettroscopico (2,2,4-trimetilpentano, Sigma-Aldrich, codice: 1047182500, N. CAS: 540-84-1). Tre millilitri di isoottano sono stati trasferiti in una cuvetta standard in quarzo da 3,5 mL con percorso ottico da 10 mm (Agilent Technologies, codice: 5061-3387). Sono stati preparati tre controlli del solvente, utilizzati come bianco per i campioni.

Campioni 1–3: aliquote da 0,075 mL di tre campioni di combustibile Jet A-1 (acquistati localmente) sono state pipettate in matracci tarati da 100 mL puliti e asciutti. La massa di ciascun campione è stata registrata con un'approssimazione

di 0,0001 g (64,1, 63,4 e 65,5 mg, rispettivamente), quindi portata al volume con isoottano di grado spettroscopico, chiusa con tappo e miscelata accuratamente. Tre millilitri della soluzione sono stati quindi trasferiti in una cuvetta in quarzo da 10 mm, pronta per l'analisi.

Strumentazione

Una volta preparate le celle dei campioni e i controlli del solvente, l'assorbanza è stata misurata utilizzando uno spettrofotometro UV-Vis multicella Cary 3500 di Agilent (Figura 1), impiegando i parametri riportati nella Tabella 1. Il modulo multicella consente di misurare simultaneamente fino a sette campioni e un riferimento. In questo esperimento, i tre campioni di combustibile sono stati misurati insieme e gli spettri di assorbanza sono stati raccolti su un unico grafico. Le misure di assorbanza dei campioni sono state quindi confrontate con l'isoottano di grado spettroscopico (controllo del solvente) a 285 nm.



Figura 1. Spettrofotometro UV-Vis multicella Cary 3500 di Agilent.

Tabella 1. Parametri di raccolta dati utilizzando UV-Vis multicella Cary 3500 Agilent.

Parametro	Valore
Intervallo spettrale	da 240 a 350 nm
Tempo per la media del segnale	0,1 s
Intervallo dati	1 nm
Larghezza di banda spettrale	1 nm

Risultati e discussione

Analisi qualitativa e quantitativa dei campioni

Il software Cary UV Workstation v1.6 include strumenti funzionali che aiutano l'utente a generare e analizzare i risultati all'interno di un unico programma, semplificando l'analisi. Sia i parametri operativi sia i metodi di calcolo sono stati impostati utilizzando un nuovo batch all'interno del programma Scan dell'applicazione. Gli utenti possono scegliere di acquisire l'assorbanza su un intervallo di lunghezze d'onda o su una o più lunghezze d'onda specifiche. In questo studio, è stato scansionato l'intervallo di lunghezza d'onda 240–350 nm in modo da poter analizzare la forma dello spettro di assorbimento.

Per valutare la concentrazione totale di naftaleni presenti nei campioni di combustibile per aerei, sono stati inseriti tre calcoli nella funzione "end of sequence analysis" (analisi di fine sequenza), come mostrato nella Figura 2.

"Analysis 1" (Analisi 1) è stata utilizzata per calcolare la percentuale in volume (% in volume) di naftaleni nei campioni, usando la percentuale in massa (% in massa) e i valori di densità relativa dei naftaleni (1) e del combustibile (0,8).⁵

"Analysis 2" (Analisi 2) è stata utilizzata per calcolare la percentuale in massa (% in massa) di naftaleni nei campioni di combustibile per aerei, utilizzando l'assorbanza a 285 nm (A), la massa del rispettivo campione in grammi (W) e due costanti: 0,10 (K) e l'assorbanza media dei naftaleni da C₁₀ a C₁₃ a 285 nm, pari a 33,7 L/g·cm.³ Il peso è stato inserito nella configurazione dell'analisi in sequenza tramite la funzione di personalizzazione dei parametri, che consente all'utente di adattare la variabile e l'unità di misura secondo le proprie esigenze (Figura 2).

"Analysis 3" (Analisi 3) è stata utilizzata per calcolare l'assorbanza (Abs) a 285 nm tramite l'equazione "value at (285)" (valore a 285).

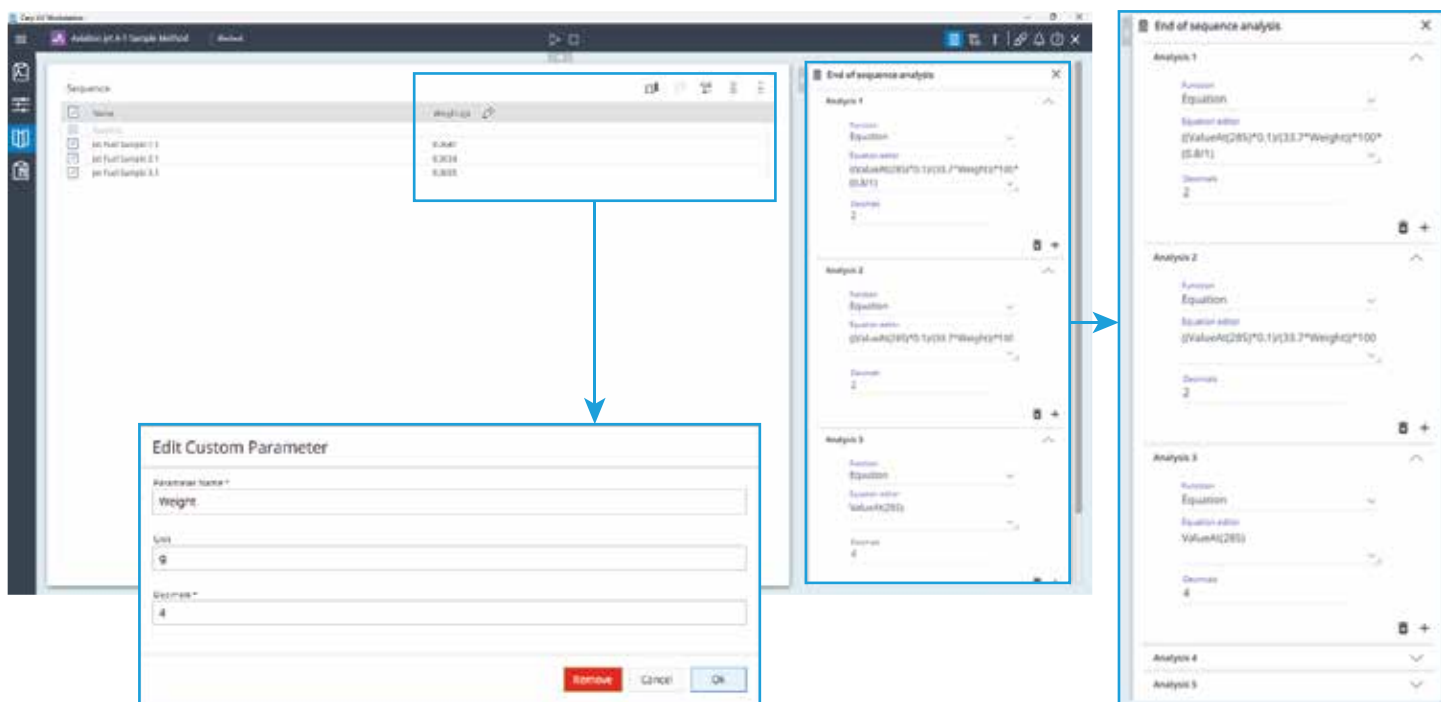


Figura 2. La pagina di configurazione della sequenza in Agilent Cary UV Workstation v1.6, che consente all'utente di creare i metodi di test e di calcolo. Il peso del campione è stato aggiunto come parametro personalizzato (in basso) e tre calcoli (a destra) sono stati inseriti nella sezione di analisi di fine sequenza della pagina.

Una volta completata la misurazione dei campioni, il software Cary UV Workstation v1.6 ha prodotto un grafico scalabile dell'intervallo di lunghezze d'onda selezionato, come mostrato nella Figura 3. Tutti i calcoli dell'analisi di fine sequenza hanno restituito tabelle di valori di facile lettura. Il numero di cifre decimali è stato impostato fino a quattro per l'assorbanza e fino a due per la massa e per la % in volume. La % in volume di idrocarburi a base di naftalene in ciascun campione di combustibile per aviogetti è stata quindi riportata con un'approssimazione a 0,01 %, come mostrato nella Tabella 2.

Tabella 2. Percentuale in volume di naftalene in ciascun campione di combustibile per aviogetti, arrotondata a due decimali.

	Campione 1	Tm (°C)	Tm (°C)
% in volume di naftalene nel campione di combustibile per aviogetti	1,00	1,08	1,36

Il software Cary UV Workstation v1.6 ha determinato la % in volume di naftaleni nei campioni di combustibile per aviogetti senza la necessità di effettuare calcoli offline o di esportare i dati in un altro programma. Sia i parametri di raccolta dati che il metodo di analisi dei dati sono stati salvati come metodo di prova, per semplificare l'impostazione di esperimenti futuri. Creare un metodo di prova per l'analisi dei naftaleni elimina la necessità di reinserire le impostazioni dell'analisi, consentendo un flusso di lavoro più rapido ed efficiente e permettendo agli utenti di concentrarsi sull'analisi piuttosto che sulla configurazione del metodo.

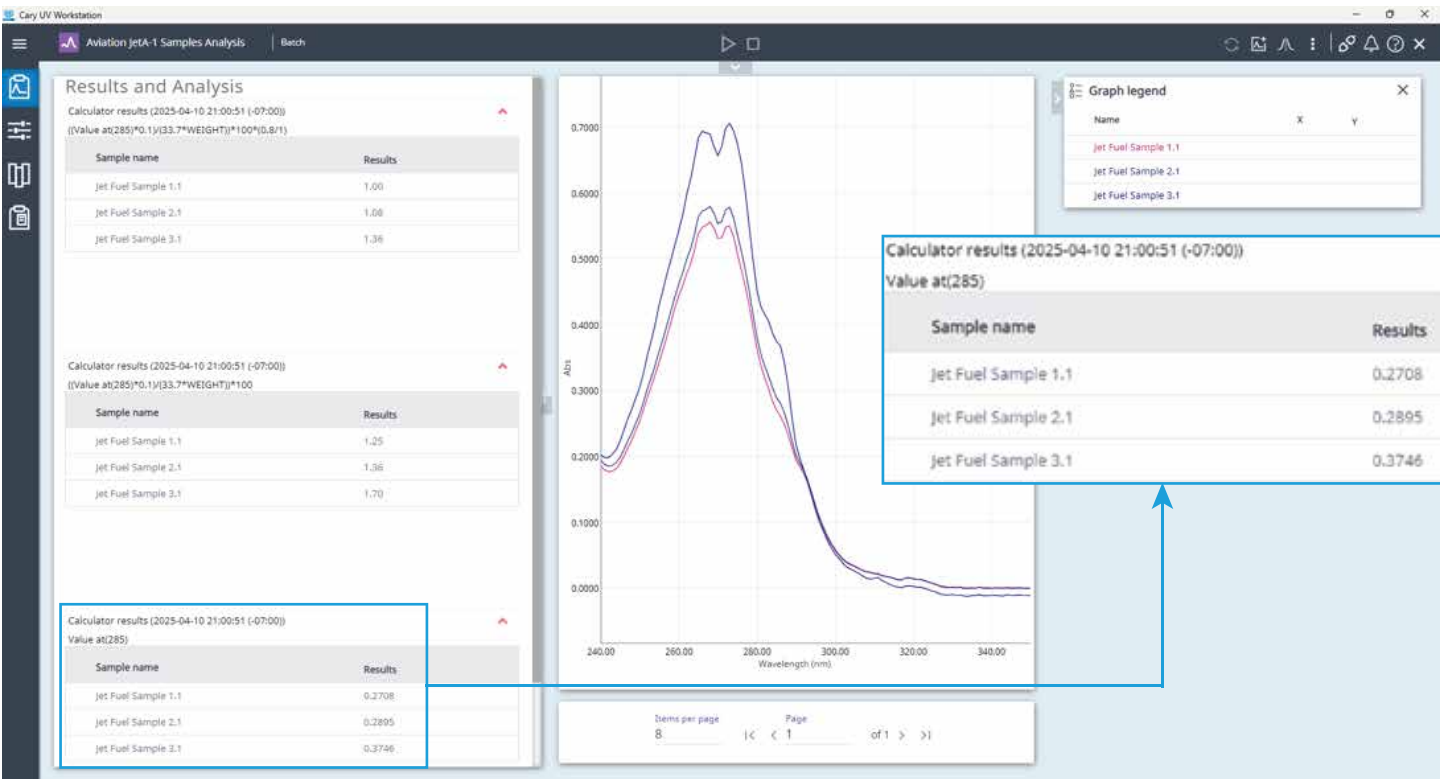


Figura 3. Agilent Cary UV Workstation v1.6 restituisce i dati in una semplice tabella in formato di valori, consentendo all'utente di eseguire un'analisi quantitativa rilevante al termine della misurazione.

Generazione del report

Il software Cary UV Workstation v1.6 consolida i risultati qualitativi e quantitativi in un unico report. Come mostrato nella Figura 4, il report di questo studio è stato personalizzato per includere contenuti come i calcoli dei dati con tabelle di valori, un grafico in scala per visualizzare la regione dei 285 nm e altre opzioni. Le preferenze relative al contenuto del report possono anche essere salvate come parte del metodo di prova. Il report per i tre campioni di combustibile per aviogetti è stato quindi generato in formato PDF.

Precisione del metodo

La precisione del metodo UV-Vis Cary 3500 è stata valutata tramite test di ripetibilità e riproducibilità.

Ripetibilità: per valutare la ripetibilità, sono state eseguite 20 misurazioni successive su ciascun campione, in condizioni operative costanti. Come mostrato nella Tabella 3, i bassi valori di deviazione standard calcolati per le rispettive misure evidenziano la coerenza delle letture di assorbanza. Questo livello di stabilità è importante per garantire l'accuratezza fotometrica.

Tabella 3. Media e variazione di 20 misure di assorbanza di ciascun campione di combustibile per aviogetti.

	Campione 1	Tm (°C)	Tm (°C)
Media dell'assorbanza a 285 nm (Abs)	0,2691	0,2933	0,3748
Deviazione standard (Abs)	0,0004	0,0004	0,0005

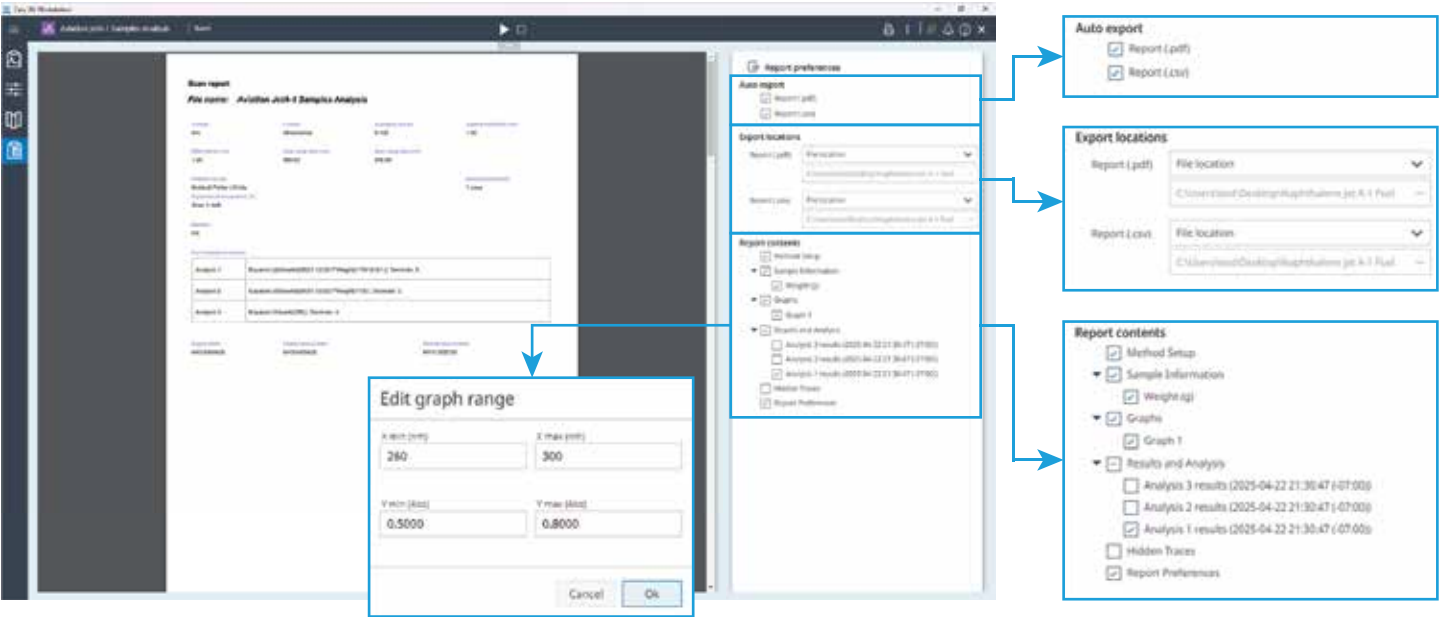


Figura 4. Agilent Cary UV Workstation v1.6 consente all'utente di esportare automaticamente i report in formato PDF o CSV al termine dell'acquisizione della sequenza. L'utente può definire una cartella di esportazione personalizzata per questi report, personalizzare il contenuto selezionando o deselectando elementi specifici in base alle proprie preferenze, e ridimensionare i grafici per evidenziare le aree di interesse.

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*Wavelength)^100/5.81)), Decimal: 2

Analysis 2

Equation ((ValueA(285)*(1/33.7*Wavelength)^100)), Decimal: 2

Analysis 3

Equation (ValueA(285)), Decimal: 4

Engine name

Engine serial number

Module serial number

MY23162A05

MY23162A05

MY23162C03

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

Graph 1

Graph Legend (user-defined)

Jet Fuel Sample 1.1 Jet Fuel Sample 2.1 Jet Fuel Sample 3.1

Generated on

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

Cary UV Workstation

Version 1.6

Page 3 of 5

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

Equation ((ValueA(285)*(1/33.7*Wavelength)^100/5.81))

Sample name

Results

Jet Fuel Sample 1.1

0.00

Jet Fuel Sample 2.1

0.00

Jet Fuel Sample 3.1

0.00

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))

☐ Method Traces

☒ Report Preferences

Generated on

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

Cary UV Workstation

Version 1.6

Page 5 of 5

Figura 5. Il report di scansione generato per i tre campioni di combustibile per aerei.

6

Un intervallo di accettazione è stato calcolato sulla base della % in volume media di naftalene misurata nel rispettivo campione di combustibile per aviogetti, in 20 ripetizioni eseguite in condizioni coerenti.³ Come mostrato nella Tabella 4, i valori di accettazione per i campioni sono stati calcolati come $\pm 0,18\%$ per il Campione 1, $\pm 0,19\%$ per il Campione 2 e $\pm 0,21\%$ per il Campione 3. È stata inoltre calcolata, per ciascun campione, la variazione (deviazione standard) della % in volume di naftalene nelle ripetizioni, per valutare quanto le singole misurazioni si discostassero dalla media.

Lo spettrofotometro UV-Vis multicella Cary 3500 ha fornito misurazioni coerenti e ripetibili, come dimostrato dai valori di variazione calcolati: $\pm 1,42 \times 10^{-3}\%$ per il Campione 1, $\pm 1,61 \times 10^{-3}\%$ per il Campione 2 e $\pm 1,96 \times 10^{-3}\%$ per il Campione 3. Come riportato nella Tabella 4, la variazione osservata della % in volume di naftalene per ciascun campione rientrava ampiamente nell'intervallo di accettazione della ripetibilità, confermando la capacità dello strumento di eseguire misurazioni precise.

Tabella 4. Risultati del test di ripetibilità per le misurazioni di tre campioni di combustibile per aviogetti, n = 20.

	Campione 1	Tm (°C)	Tm (°C)
Media (% in volume di naftalene)	1,00	1,10	1,36
Criteri di ripetibilità (%)	$\pm 0,18$	$\pm 0,19$	$\pm 0,21$
Deviazione standard (% in volume di naftalene)	$1,42 \times 10^{-3}$	$1,61 \times 10^{-3}$	$1,96 \times 10^{-3}$

Riproducibilità: per valutare la precisione e la coerenza delle misure di assorbanza tra strumenti diversi, è stato utilizzato un secondo spettrofotometro Cary 3500 di Agilent e sono state eseguite altre 20 misurazioni successive utilizzando gli stessi tre materiali di prova. La bassa deviazione standard dei risultati ottenuti dalle analisi separate e indipendenti dei campioni ha dimostrato un'eccellente riproducibilità del metodo e degli strumenti (Tabella 5).

Tabella 5. Media e variazione di 20 misure di assorbanza di ciascun campione di combustibile per aviogetti, effettuate da un secondo operatore.

	Campione 1	Tm (°C)	Tm (°C)
Media dell'assorbanza a 285 nm (Abs)	0,2715	0,2916	0,3755
Deviazione standard (Abs)	0,0002	0,0003	0,0002

Un intervallo di accettazione per la riproducibilità è stato calcolato sulla base delle variazioni nelle misurazioni tra operatori.³ La % media in volume di naftalene è stata calcolata utilizzando il secondo spettrofotometro UV-Vis multicella Cary 3500, e i valori di accettazione per i campioni sono stati determinati come: $\pm 0,24\%$ per il Campione 1, $\pm 0,26\%$ per il Campione 2 e $\pm 0,29\%$ per il Campione 3 (Tabella 6). Il confronto delle variazioni nei risultati ottenuti da operatori diversi ha permesso di stabilire la precisione delle misurazioni tra strumenti diversi.

Tabella 6. Risultati del test di riproducibilità per le misurazioni di tre campioni di combustibile per aviogetti effettuate da un secondo operatore, n = 20.

	Campione 1	Tm (°C)	Tm (°C)
Media (% in volume di naftalene)	1,01	1,09	1,36
Criteri di riproducibilità (%)	$\pm 0,24$	$\pm 0,26$	$\pm 0,29$
Deviazione standard (% in volume di naftalene)	$7,73 \times 10^{-4}$	$1,18 \times 10^{-3}$	$8,10 \times 10^{-4}$

Le variazioni (deviazioni standard) delle misurazioni, pari a $\pm 7,73 \times 10^{-4}\%$ per il Campione 1, $\pm 1,18 \times 10^{-3}\%$ per il Campione 2 e $\pm 8,10 \times 10^{-4}\%$ per il Campione 3, rientravano ampiamente nell'intervallo di accettazione della riproducibilità.

Come riportato nel riepilogo della Tabella 7, i valori di assorbanza e le % in volume calcolate di naftalene nei campioni erano significativamente simili tra i due strumenti, a dimostrazione della coerenza del metodo. Inoltre, le differenze tra le deviazioni standard dei due strumenti indicavano un basso grado di variazione dovuta all'operatore. Le deviazioni standard calcolate hanno dimostrato la capacità dello strumento di fornire misure di assorbanza ripetibili, riproducibili e affidabili, su più esecuzioni.

Tabella 7. Confronto della variazione dell'assorbanza e della % in volume di naftalene per gli stessi tre campioni di combustibile per aviogetti misurati con due strumenti.

		Strumento 1	Strumento 2
Abs a 285 nm	Campione 1	$0,2691 \pm 0,0004$ Abs	$0,2715 \pm 0,0002$ Abs
	Tm (°C)	$0,2933 \pm 0,0004$ Abs	$0,2916 \pm 0,0003$ Abs
	Tm (°C)	$0,3748 \pm 0,0005$ Abs	$0,3755 \pm 0,0002$ Abs
Naftalene, % in volume	Campione 1	$1,00 \pm 1,42 \times 10^{-3}\%$	$1,01 \pm 7,73 \times 10^{-4}\%$
	Tm (°C)	$1,10 \pm 1,61 \times 10^{-3}\%$	$1,09 \pm 1,18 \times 10^{-3}\%$
	Tm (°C)	$1,36 \pm 1,96 \times 10^{-3}\%$	$1,36 \pm 8,10 \times 10^{-4}\%$

Conclusione

Lo spettrofotometro UV-Vis multicella Cary 3500 di Agilent e il software Cary UV Workstation v1.6 di Agilent hanno permesso un'analisi efficiente e diretta della concentrazione totale di idrocarburi a base di naftalene nei combustibili per aviogetti. L'affidabilità del Cary 3500 è stata dimostrata grazie a misure di assorbanza precise e ripetibili.

Il recupero dei metodi salvati e l'uso di calcoli automatizzati in sequenza tramite il software hanno semplificato la raccolta e l'analisi dei dati, eliminando la necessità di input manuali, calcoli offline o software esterni. Inoltre, la funzione di reportistica integrata nel software ha garantito un consolidamento efficiente dei risultati e ha facilitato la consultazione delle informazioni.

Lo spettrofotometro UV-Vis multicella Cary 3500 e il software Cary UV Workstation v1.6 forniscono una metodologia rapida, affidabile, solida e intuitiva per la valutazione della qualità dei combustibili.

Bibliografia

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). Jet A-1 Safety Data Sheet. Retrieved from [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)

www.agilent.com

DE-005997

Le informazioni fornite possono essere soggette a modifica senza preavviso.

© Agilent Technologies, Inc. 2025
Stampato negli Stati Uniti, 30 aprile 2025
5994-8266ITE