

利用紫外-可见光谱法测定航空燃料中 萘系烃总含量

使用 Agilent Cary 3500 紫外-可见分光光度计优化
光度测量准确度并简化数据处理



作者

Yasurika Heenatigala
安捷伦科技有限公司

摘要

本研究探索了紫外-可见光谱法作为一种高效、简便的检测方法，在航空燃料萘系烃定性和定量分析中的应用。使用 Agilent Cary 3500 紫外-可见分光光度计和 Agilent Cary UV Workstation 软件，开发了一种简单的工作流程，用于测定三种 Jet A-1 燃料样品中萘系烃的总浓度。实验获得了优异的方法精密度数据，证实了该技术在评估燃料质量、燃烧特性及潜在环境影响方面的应用潜力。

前言

紫外-可见光谱法可通过测量航空涡轮机燃料样品中各烃类组分的浓度，对航空发动机性能进行便捷、快速的定性分析。

评估航空发动机性能的其中一种方法就是表征燃料燃烧特性。萘是由两个芳香环组成的一种多环芳烃^[1]，是煤油中常用的燃料添加剂。喷气燃料中也可能存在少量萘以及这些烃类化合物的烷基化衍生物。尽管这些萘类化合物在燃料中的占比很小，但却会严重影响发动机尾气中的颗粒物水平^[2]。此外，由于燃烧不完全，它们还可能产生烟灰、烟雾和热辐射^[3]。这些燃烧特性表明燃料效率较低，污染物排放风险较高^[4]，因此准确测定航空燃料中萘系烃的总浓度至关重要。

利用紫外-可见光谱法进行定性吸光度测量和定量计算，可以测定喷气燃料样品中萘系烃的总浓度。本应用简报介绍了 Agilent Cary 3500 紫外-可见分光光度计和 Agilent Cary UV Workstation v1.6 在测定三种 Jet A-1 燃料样品中萘系烃总浓度方面的优势。

实验部分

样品前处理

溶剂对照：光谱级异辛烷（2,2,4-三甲基戊烷，Sigma-Aldrich，部件号 1047182500，CAS 号 540-84-1）。取 3 mL 异辛烷转移至标准 3.5 mL、10 mm 光程石英比色皿（安捷伦科技公司，部件号 5061-3387）。准备三份溶剂对照并用作样品空白。

样品 1-3：将三种当地购买的 Jet A-1 燃料样品各取 0.075 mL 置于洁净、干燥、已称重的 100 mL 容量瓶中。记录每个样品的质量（分别为 64.1、63.4、65.5 mg，精确至 0.0001 g），然后用光谱级异辛烷稀释至刻度，塞紧瓶塞并充分混匀。然后各取 3 mL 溶液转移到 10 mm 石英比色皿中，以备分析。

仪器

准备好溶剂对照和样品比色皿后，使用 Agilent Cary 3500 多池紫外-可见分光光度计（图 1）测量吸光度，具体参数如表 1 所示。用户通过多池模块可以同时测量最多七个样品和一个参比。在本实验中，三种燃料样品同步测量，并将吸收光谱采集到一张图上。然后将样品的吸光度测量结果与 285 nm 处的光谱级异辛烷（溶剂对照）的测量结果进行比较。



图 1. Agilent Cary 3500 多池紫外-可见分光光度计

表 1. Agilent Cary 3500 多池紫外-可见分光光度计数据采集参数

参数	设定值
光谱波段	240–350 nm
信号平均时间	0.1 s
数据间隔	1 nm
光谱带宽	1 nm

结果与讨论

样品定性与定量分析

Cary UV Workstation v1.6 包含多种功能工具，使用户能够在同一程序内完成结果生成与分析，从而简化分析流程。操作参数和计算方法均在 Scan（扫描）应用程序中使用新批次进行设置。用户可以选择采集某个波长范围内或者一个或多个指定波长下的吸光度。本研究选择在 240–350 nm 波长范围内进行扫描，以便分析吸收光谱的特征。

为了评估喷气燃料样品中萘系烃的总浓度，在“End of sequence analysis”（序列后分析）功能中输入了三组计算公式，如图 2 所示。

Analysis 1 用于计算样品中萘系烃的体积百分比（体积 %），使用的计算参数包括质量百分比（质量 %）以及萘系烃 (1) 和燃料 (0.8) 的相对密度值^[5]。

Analysis 2 用于计算喷气燃料样品中萘系烃的质量百分比（质量 %），使用的计算参数包括 285 nm 处的吸光度值 (A)、相应样品的质量 (W，以 g 为单位) 以及两个常数 0.10 (K) 和 C₁₀ 至 C₁₃ 萘系烃在 285 nm 处的平均吸光系数 (33.7 L/g·cm)^[3]。通过自定义参数功能，将重量添加到序列分析设置中，该功能允许用户根据自己的需求自行设定变量和单位（图 2）。

Analysis 3 用于找出 285 nm 处的吸光度 (Abs)，需要使用“value at (285)”公式。

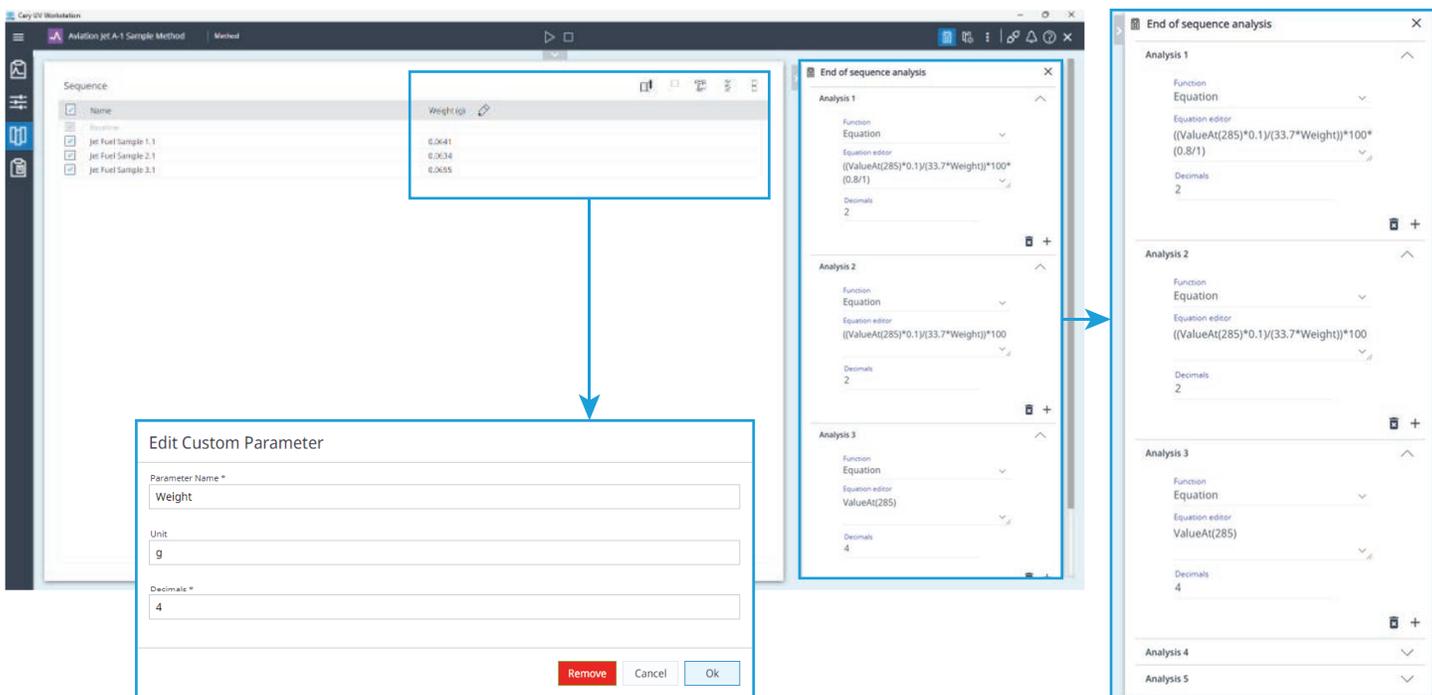


图 2. Agilent Cary UV Workstation v1.6 中的序列设置页面，用户可以创建测试和计算方法。增加样品重量作为自定义参数（底部），并在页面的 End of sequence analysis（序列后分析）部分分别输入三项计算（右侧）

样品测量完成后，Cary UV Workstation v1.6 会生成指定波长范围内的可缩放谱图，如图 3 所示。所有三组序列后分析计算均会以表格形式返回结果，便于查看。吸光度值保留四位小数，质量 % 和体积 % 保留两位小数。然后会报告各喷气燃料样品中萘系烃的体积百分比（精确到 0.01%），如表 2 所示。

表 2. 每种喷气燃料样品中萘系烃的体积百分比，报告至小数点后两位

	样品 1	样品 2	样品 3
喷气燃料样品中萘系烃的体积百分比	1.00	1.08	1.36

Cary UV Workstation v1.6 可直接确定喷气燃料样品中萘系烃的体积百分比，而无需进行任何离线计算或将数据导出到另一个程序。将数据采集参数和数据分析方法保存为测试方法模板，以简化后续实验的设置。创建用于萘系烃分析的测试方法模板可避免重复进行分析设置，从而实现更快、更高效的工作流程，让用户能够专注于分析，不必将时间花费在方法设置上。

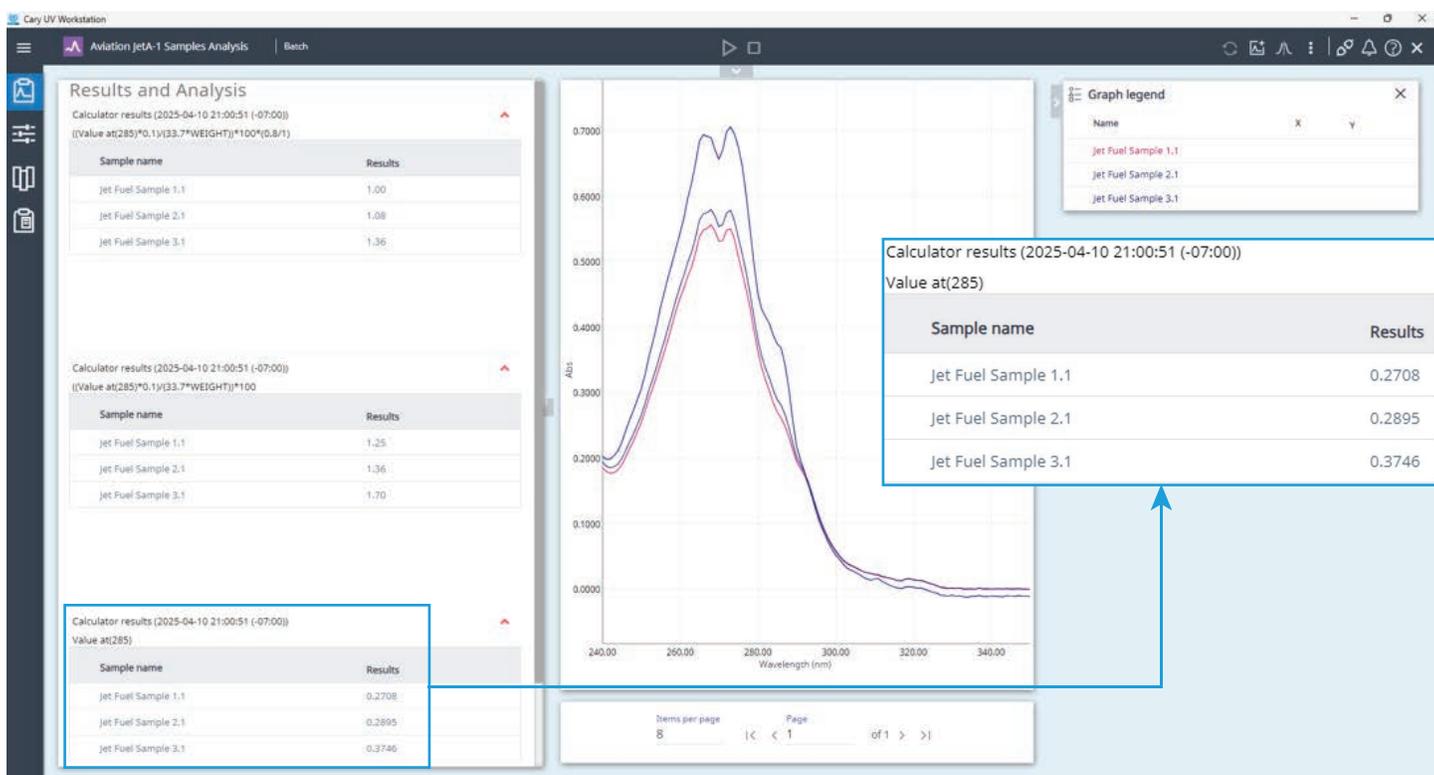


图 3. Agilent Cary UV Workstation v1.6 以便于阅读的表格形式返回数据，使用户能够在测量后进行相关的定量分析

生成报告

Cary UV Workstation v1.6 可将定性和定量结果合并到一份报告中。如图 4 所示，本研究的报告经过定制化设置，其中包含数据计算公式以及表格形式的结果、放大的谱图（显示 285 nm 区域）以及其他可选内容。报告的内容偏好也可以保存为测试方法的一部分。然后将三种喷气燃料样品的报告生成为 PDF 格式。

方法精密度

通过重复性和重现性测试考察 Cary 3500 紫外-可见分光光度计方法的精密度。

重复性：在恒定的操作条件下对每个样品进行了 20 次连续测量，以评估重复性。如表 3 所示，各测量结果的标准偏差较低，表明吸光度读数具有出色的稳定性。这种稳定性对于光度测量准确度非常重要。

表 3. 各喷气燃料样品 20 次吸光度测量结果的平均值和差异

	样品 1	样品 2	样品 3
285 nm 处的平均吸光度 (Abs)	0.2691	0.2933	0.3748
标准偏差 (Abs)	0.0004	0.0004	0.0005

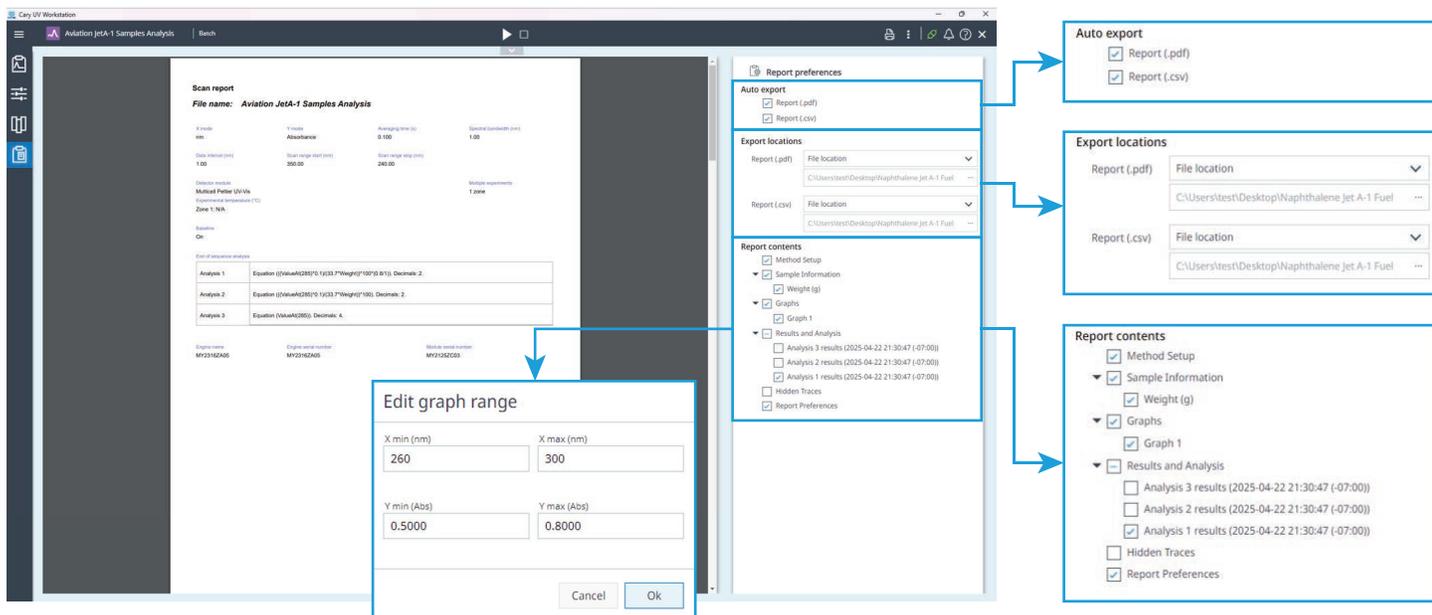


图 4. Agilent Cary UV Workstation v1.6 能够在序列采集结束时自动以 PDF 或 CSV 格式导出报告。用户可以自行定义这些报告的导出位置，根据自己的需求选择或取消选择特定内容来实现报告的定制化，还可以放大谱图来仅显示目标区域

扫描报告

文件名: 航空 Jet-A-1 样品分析

扫描速度	1.00	扫描速度 (mm)	0.100	扫描速度 (mm)	1.00
扫描范围 (mm)	1.00	扫描范围 (mm)	350.00	扫描范围 (mm)	240.00

扫描位置: 多个位置
扫描速度: UV-VIS
第一级: NA

样品

分析名称	方程
Analysis 1	Equation ((ValueAt(255)(t)))/(33.7*Weight(100)(t)), Decimals: 2
Analysis 2	Equation ((ValueAt(245)(t)))/(33.7*Weight(100)(t)), Decimals: 2
Analysis 3	Equation (ValueAt(255)), Decimals: 4

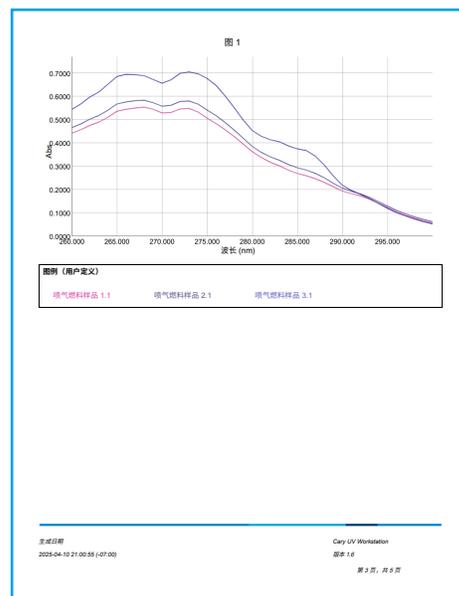
主文件名	MY21162A05	主文件名	MY21162A05	主文件名	MY21162C03
------	------------	------	------------	------	------------

生成日期: 2025-04-10 21:00:55 (07:00) Cary UV Workstation 版本 1.6 第 1 页, 共 5 页

样品信息

喷气燃料样品 1.1	重量 (g)	0.0041
喷气燃料样品 2.1	重量 (g)	0.0034
喷气燃料样品 3.1	重量 (g)	0.0055

生成日期: 2025-04-10 21:00:55 (07:00) Cary UV Workstation 版本 1.6 第 2 页, 共 5 页



Analysis 1 结果 (2025-04-22 21:30:47 (07:00))

(Value at(255) 0.1)/(33.7*WEIGHT)*100 (0.8/1)

样品名称	结果
喷气燃料样品 1.1	1.00
喷气燃料样品 2.1	1.08
喷气燃料样品 3.1	1.36

生成日期: 2025-04-10 21:00:55 (07:00) Cary UV Workstation 版本 1.6 第 4 页, 共 5 页

报告偏好设置

导出位置

报告 (pdf) - C:\User\test\Desktop\Naphthalene Jet A-1 Fuel
报告 (csv) - C:\User\test\Desktop\Naphthalene Jet A-1 Fuel

报告内容

- 方法设置
- 样品信息
 - 重量 (g)
- 图
 - 图 1
- 结果与分析
 - Analysis 3 结果 (2025-04-22 21:30:47 (07:00))
 - Analysis 2 结果 (2025-04-22 21:30:47 (07:00))
 - Analysis 1 结果 (2025-04-22 21:30:47 (07:00))
- 隐藏曲线
- 报告偏好设置

生成日期: 2025-04-10 21:00:55 (07:00) Cary UV Workstation 版本 1.6 第 4 页, 共 5 页

图 5. 软件生成的三个喷气燃料样品的扫描报告

根据各喷气燃料样品在恒定条件下 20 次测量中测得的萘系烃的平均体积百分比，计算得到可接受范围^[3]。如表 4 所示，经计算，样品 1 的可接受范围为 $\pm 0.18\%$ ，样品 2 为 $\pm 0.19\%$ ，样品 3 为 $\pm 0.21\%$ 。同时还计算了各样品在整个测量中的萘系烃体积百分比变化（标准偏差），以评估各次测量结果与平均值的偏离程度。

Cary 3500 多池紫外-可见分光光度计提供了一致且可重复的测量结果，计算出的变化值为：样品 1 $\pm 1.42 \times 10^{-3}\%$ 、样品 2 $\pm 1.61 \times 10^{-3}\%$ 、样品 3 $\pm 1.96 \times 10^{-3}\%$ 。如表 4 所示，每个样品中萘系烃的体积百分比变化都在可接受的重复性范围内，表明该仪器能够实现高精度测量。

表 4. 对三个喷气燃料样品进行测量的重复性测试结果，n = 20

	样品 1	样品 2	样品 3
平均值（萘系烃体积百分比）	1.00	1.10	1.36
重复性标准 (%)	± 0.18	± 0.19	± 0.21
标准偏差（萘系烃体积百分比）	1.42×10^{-3}	1.61×10^{-3}	1.96×10^{-3}

重现性：为考察不同仪器间吸光度测量的精密度和一致性，使用第二台 Agilent Cary 3500 对相同的三种样品测试材料进行了另外 20 次连续测量。通过独立样品分析获得的结果标准偏差很小，证明了该方法和仪器具有出色重现性（表 5）。

表 5. 各喷气燃料样品 20 次吸光度测量结果的平均值和差异，由第二名操作人员进行测量

	样品 1	样品 2	样品 3
285 nm 处的平均吸光度 (Abs)	0.2715	0.2916	0.3755
标准偏差 (Abs)	0.0002	0.0003	0.0002

根据操作人员之间测量结果的差异计算了重线性的可接受范围^[3]。使用第二台 Cary 3500 多池紫外-可见分光光度计计算萘系烃的平均体积百分比，并计算得到各样品的可接受范围：样品 1 为 $\pm 0.24\%$ ，样品 2 为 $\pm 0.26\%$ ，样品 3 为 $\pm 0.29\%$ （表 6）。通过比较不同操作人员之间测量结果的差异，可以得到不同仪器间的测量精密度。

表 6. 对三个喷气燃料样品进行测量的重线性测试结果，由第二名操作人员进行测量，n = 20

	样品 1	样品 2	样品 3
平均值（萘系烃体积百分比）	1.01	1.09	1.36
重线性标准 (%)	± 0.24	± 0.26	± 0.29
标准偏差（萘系烃体积百分比）	7.73×10^{-4}	1.18×10^{-3}	8.10×10^{-4}

各样品测量结果的差异（标准偏差）为：样品 1 $\pm 7.73 \times 10^{-4}\%$ ，样品 2 $\pm 1.18 \times 10^{-3}\%$ ，样品 3 $\pm 8.10 \times 10^{-4}\%$ ，均完全在可接受的重线性范围内。

如表 7 中的汇总结果所示，两台仪器测得的样品吸光度值和计算出的萘系烃体积百分比非常接近，证明了该方法的一致性。此外，仪器之间标准偏差的差值表明操作人员引入的差异非常低。标准偏差计算结果表明，仪器能够在多次测量中提供可重复、可重现且可靠的吸光度测量结果。

表 7. 比较两台仪器测量相同的三种喷气燃料样品的吸光度和萘系烃体积百分比差异

		仪器 1	仪器 2
285 nm 处的吸光度	样品 1	0.2691 ± 0.0004 Abs	0.2715 ± 0.0002 Abs
	样品 2	0.2933 ± 0.0004 Abs	0.2916 ± 0.0003 Abs
	样品 3	0.3748 ± 0.0005 Abs	0.3755 ± 0.0002 Abs
萘系烃，体积百分比	样品 1	$1.00 \pm 1.42 \times 10^{-3}\%$	$1.01 \pm 7.73 \times 10^{-4}\%$
	样品 2	$1.10 \pm 1.61 \times 10^{-3}\%$	$1.09 \pm 1.18 \times 10^{-3}\%$
	样品 3	$1.36 \pm 1.96 \times 10^{-3}\%$	$1.36 \pm 8.10 \times 10^{-4}\%$

结论

Agilent Cary 3500 多池紫外-可见分光光度计和 Agilent Cary UV Workstation v1.6 软件能够高效便捷地分析航空涡轮燃料中萘系烃的总浓度。准确、可重复的吸光度测量结果证明了 Cary 3500 具有出色的可靠性。

软件可以调用之前保存的方法并使用序列内自动计算功能，简化了数据采集和分析，无需手动输入、离线计算或外部软件。此外，软件内的集成报告功能可确保高效整合检测结果，以便于查看相关信息，提高审查效率。

搭配 Cary UV Workstation v1.6 的 Cary 3500 多池紫外-可见光光度计为燃料质量评估提供了一种快速、可靠、稳健且易用的方法。

参考文献

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. 7. Retrieved from [https://airbpmsds.bp.com/usds/amersdsf.nsf/AllFiles_AIR_BP_FUELS/B53D844EC4BB273780258ACF00588ADF/\\$File/3075780.pdf](https://airbpmsds.bp.com/usds/amersdsf.nsf/AllFiles_AIR_BP_FUELS/B53D844EC4BB273780258ACF00588ADF/$File/3075780.pdf)

查找当地的安捷伦客户中心：

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com

DE-005997

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2025
2025年4月30日，中国出版
5994-8266ZHCN