

傅里叶变换红外光谱法测定车用汽油中典型非常规添加物

FTIR-056

摘要：当前车用汽油中较为常见的非常规添加物主要有苯胺类物质、乙酸仲丁酯、甲缩醛、碳酸二甲酯等，这些非常规添加物及其燃烧物会给人们的身体健康、环境污染、车辆使用性能等带来不可估量的恶劣影响。本文参考 GB/T 33648-2017《车用汽油中典型非常规添加物的识别与测定》，使用岛津 IRSpirit-T 型傅里叶变换红外光谱仪建立了甲缩醛、醋酸仲丁酯两种非常规添加物的标准曲线，并对实际汽油样品中非常规添加物进行了识别和定量。

关键词：汽油 非常规添加物 甲缩醛 醋酸仲丁酯 傅里叶红外

随着社会的发展，汽车成为人们日常生活中越来越不可缺少的交通工具，对车用汽油的需求也将迅速增长，这给石油行业带来巨大商机的同时也将伴随着沉重的压力。在原料价格高涨的背景及利益最大化的驱使下，一些调油商使用苯胺、醋酸仲丁酯、甲缩醛、碳酸二甲酯等低价且具有潜在危害的化工原料，造成众多调合汽油质量问题。这些添加入油品中的化工原料通常被称为非常规汽油添加剂。

非常规添加剂的使用虽然能够在一定程度上改变汽油的燃烧性能，起到一定的抗爆、抗氧化等效果，但是非常规添加物及其燃烧物会给人们的身体健康、环境污染、车辆使用性能等带来不可估量的恶劣影响。

参考 GB/T 33648-2017《车用汽油中典型非常规添加物的识别与测定》，使用岛津 IRSpirit-T 型傅里叶变换红外光谱仪建立了甲缩醛、醋酸仲丁酯的定量模型，并对实际样品中非常规添加物进行了识别和定量。

实验部分

1.1 仪器

岛津 IRSpirit-T 傅里叶变化红外光谱仪
Masterflex L/S Easy-Load II 泵头 77200-60
ZnSe 楔形结构液体池



图1 IRSpirit-T及进样泵

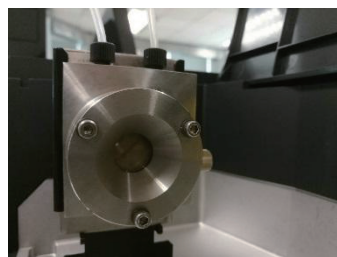


图2 ZnSe楔形液体池

1.2 测试条件

波长范围：4000~650 cm^{-1}
分辨率：4 cm^{-1}

扫描次数：32
切趾函数：Happ-Genzel

■ 实验结果

2.1 数据采集

为了方便操作,使用蠕动泵进样方式配合岛津最新 IRSpirit-T 型傅里叶变换红外光谱仪对试样进行红外光谱采集,同时为了避免光谱干涉条纹的干扰,选择了楔形结构的硒化锌材质液体池。

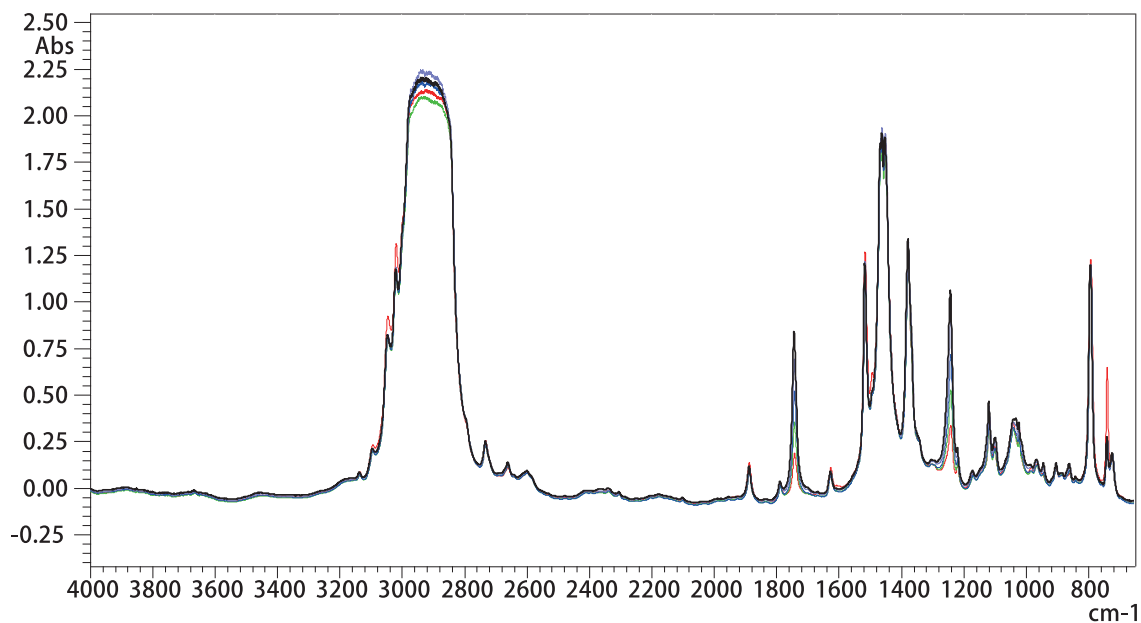


图3 醋酸仲丁酯光谱数据叠加图

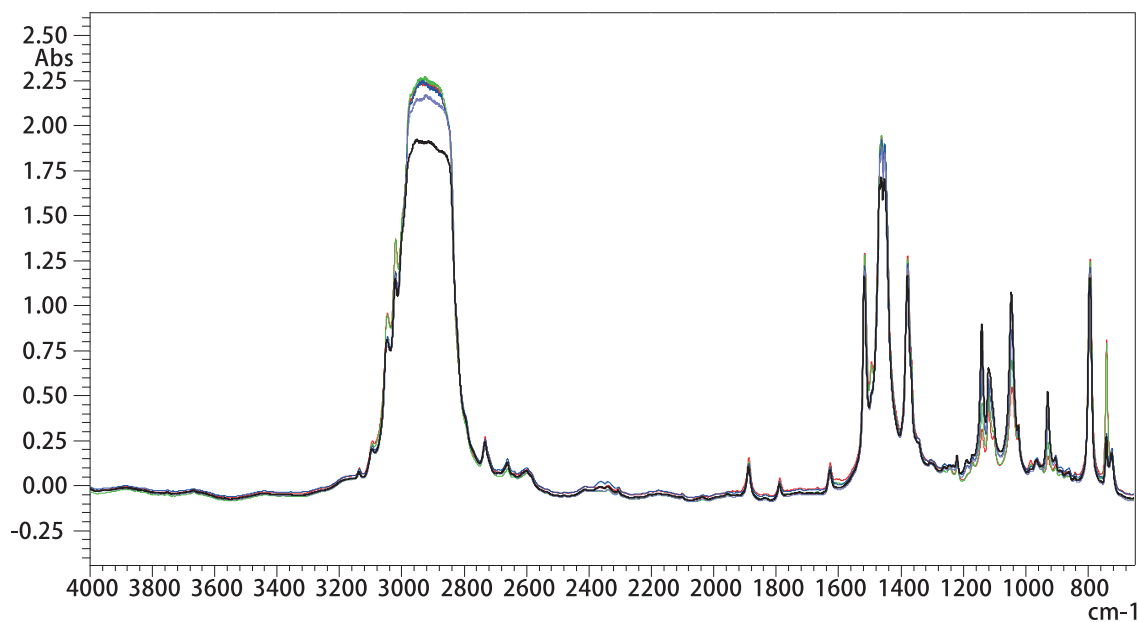


图4 甲缩醛光谱数据叠加图

2.2 光谱定量特征及工作曲线

表1 非常规添加物红外光谱特征

序号	添加物	定性识别谱带/cm ⁻¹	定量谱带(基线) /cm ⁻¹	定量基团归属
1	醋酸仲丁酯	1243±4、1743±4	1743±4 (1685-1770)	C=O
2	甲缩醛	930±4、1046±4、1141±4	1141±4 (1127-1162)	-O-CH ₂ -O-

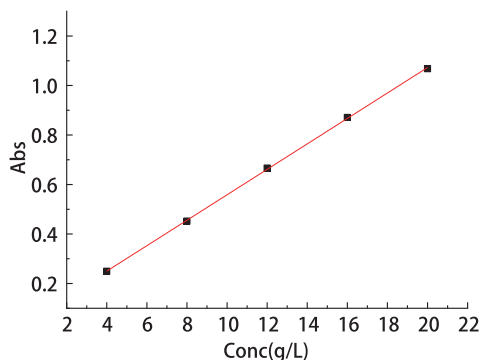
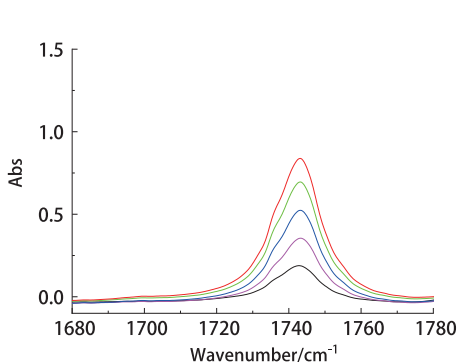


图5 醋酸仲丁酯工作曲线

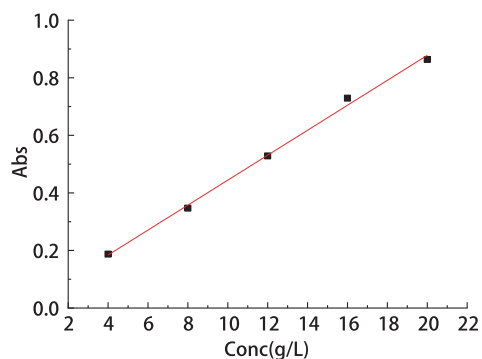
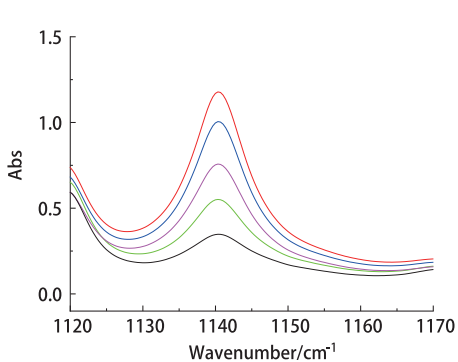


图6 甲缩醛工作曲线

2.3 样品分析

使用中国石化石油化工科学研究院《车用燃料红外光谱快速分析系统》对实验样本中非常规添加物进行识别和含量分析, 该软件能够同时分析样本中 5 种添加物并给出含量结果, 如图 7 所示。

序号	文件名	分析结果
1	汽油1.txt	光谱文件: 汽油1.txt 系统可识别添加剂: [5个] 苯胺 氮甲基苯胺 醋酸酯类 碳酸二甲酯 甲缩醛 ***** 存在如下添加剂: 未检测到任何添加剂!
2	汽油3.txt	
3	汽油4.txt	
4	汽油5.txt	

图7 车用燃料红外光谱快速分析系统分析结果截图(未检出非常规添加成分)

根据建立的标准曲线对实际样本进行分析, 汽油 1 样本未检出对应的 5 种非常规添加物, 然后在汽油 1 的基础上进行了甲缩醛加标, 得到了汽油 3、4、5 三个平行样本, 使用软件分析 RSD 结果 1.77%, 加标回收率介于 99.5%-103.0%(见表 2), 说明方法适用性良好。

序号	文件名	光谱文件: 汽油3.txt
1	汽油1.txt	系统可识别添加剂: [5个] 苯胺 氮甲基苯胺 醋酸酯类 碳酸二甲酯 甲缩醛
2	汽油3.txt	*****
3	汽油4.txt	存在如下添加剂:
4	汽油5.txt	1. 甲缩醛 [含量: 6.46 g/L] 定量峰位: 1140.34 原始峰强: 0.4505 当前峰高: 0.4465 峰高[基线]: 0.2901 基线范围: 1127.82 - 1162.87

图8 车用燃料红外光谱快速分析系统分析结果截图(检出非常规添加成分)

表2 甲缩醛加标回收实验

序号	样品名称	含量(g/L)	加标量(g/L)	加标后结果(g/L)	加标回收率(%)	RSD(%)
1	汽油 1	0	-	-	-	-
2	汽油 3	0	6.27	6.46	103.0	
3	汽油 4	0	6.27	6.39	101.9	1.77
4	汽油 5	0	6.27	6.24	99.5	

结论

使用 IRSpirit-T 型傅里叶变换红外光谱仪采集了汽油样本中典型非常规添加物红外光谱图, 结合中国石化石油化工科学研究院开发的《车用燃料红外光谱快速分析系统》定量软件, 可直接定性识别汽油中 5 种典型非常规添加物及定量分析结果。本方法无需复杂的前处理过程, 配合蠕动泵进样方法非常适合批量油品的快速准确分析, 满足质量控制的要求。