



中华人民共和国石油化工行业标准

SH/T 0797—2007

点燃式发动机燃料中苯含量的测定 中红外光谱法

Standard test method for determination of benzene in spark-ignition
engine fuels using mid infrared spectroscopy

2007-08-01 发布

2008-01-01 实施

中华人民共和国国家发展和改革委员会 发布

前 言

本标准修改采用美国试验与材料协会标准 ASTM D6277 - 01《点燃式发动机燃料中苯含量测定法(中红外光谱法)》。

本标准根据 ASTM D6277 - 01 重新起草。

为了适合我国国情,本标准在采用 ASTM D6277 - 01 时进行了修改。本标准与 ASTM D6277 - 01 的主要差异如下:

——本标准仅采用了 ASTM D6277 - 01 中用傅立叶变换中红外光谱仪测定,用经典最小二乘法进行校正(CLS)的方法(c法),未采用使用滤光片型中红外光谱仪测定的方法(a法)及用傅立叶变换中红外光谱仪测定,用偏最小二乘法进行校正(PLS)的方法(b法)的相关内容。

——修改 ASTM D6277 - 01 中 3.1.1.1 和 3.1.1.2“讨论”为注 1 和注 2。

——为方便使用,第 5 章增加“5.4 本方法在应用中,使用模式识别方法将待测样品的红外光谱特征与校正集样本光谱特征比对,判断所用的模型对该样品是否适用。”

——为方便使用,第 7 章增加“注:也可以使用能达到相同试验要求的其他材质仪器配件。”

——本标准在将苯质量分数换算为体积分数的时,采用了组分在 20℃ 时的密度,代替 ASTM D6277 - 01 中组分在 15.56℃/15.56℃ 下的相对密度。

——在附录 A 中增加了关于验证集合并标准差(PSEQ)和验证集合并标准差自由度(DOF)的公式。

为方便使用,本标准还做了如下编辑性修改:

——对采用的条款,重新编排章节。

——重复性和再现性的文字表述按我国习惯进行了修改。

本标准的附录 A 为规范性附录。

本标准由中国石油化工集团公司提出。

本标准由中国石油化工股份有限公司石油化工科学研究院归口。

本标准起草单位:天津商学院、中国石化销售有限公司华北研究所。

本标准主要起草人:巩运兰、詹月辰、陈家旺。

点燃式发动机燃料中苯含量的测定 中红外光谱法

1 范围

1.1 本标准规定了点燃式发动机燃料中苯含量的测定方法，适用于范围为0.1% (体积分数) ~ 5% (体积分数) 苯含量的测定。

1.2 本标准采用国际单位制[SI]单位。

1.3 本标准没有提出其应用时有关的全部安全问题。因此，用户在使用本标准之前应建立适当安全和防护措施，并明确其受限制的适用范围。

2 规范性引用文件

下列文件中的条款通过本标准的引用而成为本标准的条款。凡是注日期的引用文件，其随后所有的修改单(不包括勘误的内容)或修订版均不适用于本标准，然而，鼓励根据本标准达成协议的各方研究是否可使用这些文件的最新版本。凡是不注日期的引用文件，其最新版本适用于本标准。

GB/T 1884 原油和液体石油产品密度实验室测定法(密度计法)(GB/T 1884—2000, eqv ISO 3675: 1998)

GB/T 1885 石油计量表(GB/T 1885—1998, eqv ISO 91-2: 1991)

GB/T 4756 石油液体手工取样法(GB/T 4756—1998, eqv ISO 3170: 1988)

SH/T 0604 原油和石油产品密度测定法(U形振动管法)(SH/T 0604—2000, eqv ISO 12185: 1996)

ASTM E168 红外光谱定量分析通用技术规范

ASTM E1655 红外多元校正分析标准

ASTM E2056 用于多元分析的光谱仪和分光光度计的校验规范

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

3.1

多元校正 multivariate calibration

对一组已知组成浓度或特征值的校正样品与测量的吸光度相关联，用多元校正数学建立校正模型的过程。

注1：多元校正模型用于未知试样的光谱分析，并对未知试样的组成浓度或特征值提供估计。

注2：多元校正算法包括偏最小二乘法、多元线性回归、经典最小二乘谱线拟合法。

3.2

含氧化合物 oxygenate

含氧有机化合物可作为燃料或补充燃料使用，如各种醇类和醚类化合物。

4 方法概要

点燃式发动机燃料样品加入液体样品池中，红外光源发出的光束通过样品后，用检测器检测，对检测器的响应信号进行测量。全波长测量仪器，在对应苯的测量谱带范围内，测量光谱响应。根据未知样品在特定区域的光谱吸收和用多元校正方法建立的分析模型进行分析，将未知试样的检测器响应信号转换成苯含量。