

UV-Vis 分光光度計を用いた航空燃料中の全ナフタレン炭化水素の測定

Agilent Cary 3500 UV-Vis による測光精度の最適化とデータハンドリングの効率化



著者

Yasurika Heenatigala
Agilent Technologies, Inc.

概要

今回の研究では、航空燃料中のナフタレン炭化水素の定性分析と定量分析を行う効率的かつ容易な手段としての UV-Vis 分光光度計の活用について調査しました。Agilent Cary 3500 UV-Vis 分光光度計と Agilent Cary UV ワークステーション UV-Vis ソフトウェアを使用して、3 種類の Jet A-1 燃料サンプル中の全ナフタレン濃度を測定するシンプルなワークフローを開発しました。このメソッドでは優れたメソッド精度データが得られ、燃料の品質、燃焼特性、および潜在的な環境影響の評価におけるこの手法の可能性が確認されました。

はじめに

UV-Vis 分光光度計では、タービン燃料サンプル中の炭化水素成分の濃度を測定することにより、航空機エンジンの性能を簡単かつすばやく定性分析することができます。

航空機エンジンの性能を評価する方法の 1 つに、燃料燃焼の特性解析があります。ナフタレンは、多環芳香族炭化水素に分類される、2 つの芳香環から成る炭化水素であり¹、ケロシンへの燃料添加剤として広く使用されています。ジェット燃料中には、アセナフテンやこれらの炭化水素のアルキル化誘導体も低濃度で存在している可能性があります。こういったナフタレン類は、燃料サンプルに占める体積の割合はほんのわずかですが、それに見合わない大きな寄与をエンジン排気中の粒状物質レベルに対して与えます²。不完全燃焼の結果、すす、煙、熱放射の一因にもなります³。これらの燃焼特性は燃料効率の低さと汚染物質排出リスクの高さを示すことから⁴、航空燃料中のナフタレン炭化水素の全濃度を計算することが不可欠となっています。

ジェット燃料サンプル中の全ナフタレン濃度の測定は、UV-Vis 分光光度計を使用して定性的な吸光度測定と定量計算を行うことにより行えます。このアプリケーションノートでは、3 種類の Jet A-1 燃料サンプルに含まれるナフタレン炭化水素の全濃度の測定における Agilent Cary 3500 UV-Vis 分光光度計および Agilent Cary UV ワークステーション v1.6 の利点を明らかにします。

実験方法

サンプル調製

溶媒コントロール: 分光分析グレードのイソオクタン (2,2,4-トリメチルペンタン、Sigma-Aldrich 社、部品番号 1047182500、CAS 番号 540-84-1)。3 mL のイソオクタンを標準の 3.5 mL、光路長 10 mm の石英製キュベット (アジレント・テクノロジー、部品番号 5061-3387) に移しました。この溶媒コントロールを 3 個用意し、サンプルのブランクとして使用しました。

サンプル 1 ~ 3: 3 種類の各 Jet A-1 燃料サンプル (現地で購入) について、清潔な乾燥した 100 mL 計量フラスコをはかりに載せて風袋引きし、そこに 0.075 mL の燃料サンプルをピペットで移しました。各サンプルの質量を 0.0001 g の桁まで記録してから (それぞれ 64.1、63.4、65.5 mg)、分光分析グレードのイソオクタンを標線まで加えて希釈し、栓をして十分に混合しました。その後、3 mL の混合液を光路 10 mm の石英製キュベットに移して、分析可能な状態にしました。

装置構成

溶媒コントロールおよびサンプルのセルの準備後、Agilent Cary 3500 マルチセル UV-Vis (図 1) で表 1 のパラメータを使用して吸光度を測定しました。この機器はマルチセルモジュール設計のため、最大 7 個のサンプルと 1 つのリファレンスを同時に測定できます。今回の実験では、3 種類の燃料サンプルを一度に測定し、吸光スペクトルを 1 つのグラフにまとめました。その後、285 nm におけるサンプルの吸光度測定値を分光分析グレードのイソオクタン (溶媒コントロール) のものと比較しました。



図 1. Agilent Cary 3500 マルチセル UV-Vis 分光光度計

表 1. Agilent Cary 3500 マルチセル UV-Vis のデータ収集パラメータ

パラメータ	設定値
スペクトル範囲	240 ~ 350 nm
信号平均化時間	0.1 秒
データ間隔	1 nm
スペクトルバンド幅	1 nm

結果と考察

サンプルの定性分析と定量分析

Cary UV ワークステーション v1.6 には、結果の生成と解析を行える便利なツールが 1 つのプログラムにまとめられているため、分析および解析作業を容易に行えます。操作パラメータおよび計算方法の両方を Scan アプリケーションプログラムで新しいバッチを使用して設定しました。ユーザーは、吸光度の測定を特定の波長範囲にわたって行うか、指定した波長 (1 つまたは複数) で行うかを選択できます。今回の研究では、吸光スペクトルの形状を解析できるように、240 ~ 350 nm の波長範囲をスキャンしました。

ジェット燃料サンプル中に存在する全ナフタレン濃度を評価するために、図 2 に示すように、「End of sequence analysis (シーケンス終了時の解析)」機能に 3 つの計算式を入力しました。

「Analysis 1 (解析 1)」では、質量分率 (質量 %) と、ナフタレンおよび燃料の相対密度値 (それぞれ 1 および 0.8) を使用して、サンプル中のナフタレンの体積分率 (体積 %) を計算しました⁵。

「Analysis 2 (解析 2)」では、285 nm における吸光度値 (A)、各サンプルの g 単位の質量 (W)、および 2 つの定数 (0.10 (K) と、285 nm における $C_{10} \sim C_{13}$ のナフタレンの平均吸光度 33.7 L/g-cm) を使用して、ジェット燃料サンプル中のナフタレンの質量分率 (質量 %) を計算しました³。重量 (Weight) は、カスタマイズ可能なパラメータ機能を使用してシーケンス分析の設定に追加しました。この機能では、変数と単位を必要に応じて調整することができます (図 2)。

「Analysis 3 (解析 3)」では、式「ValueAt(285)」を使用して、285 nm における吸光度 (Abs) を特定しました。

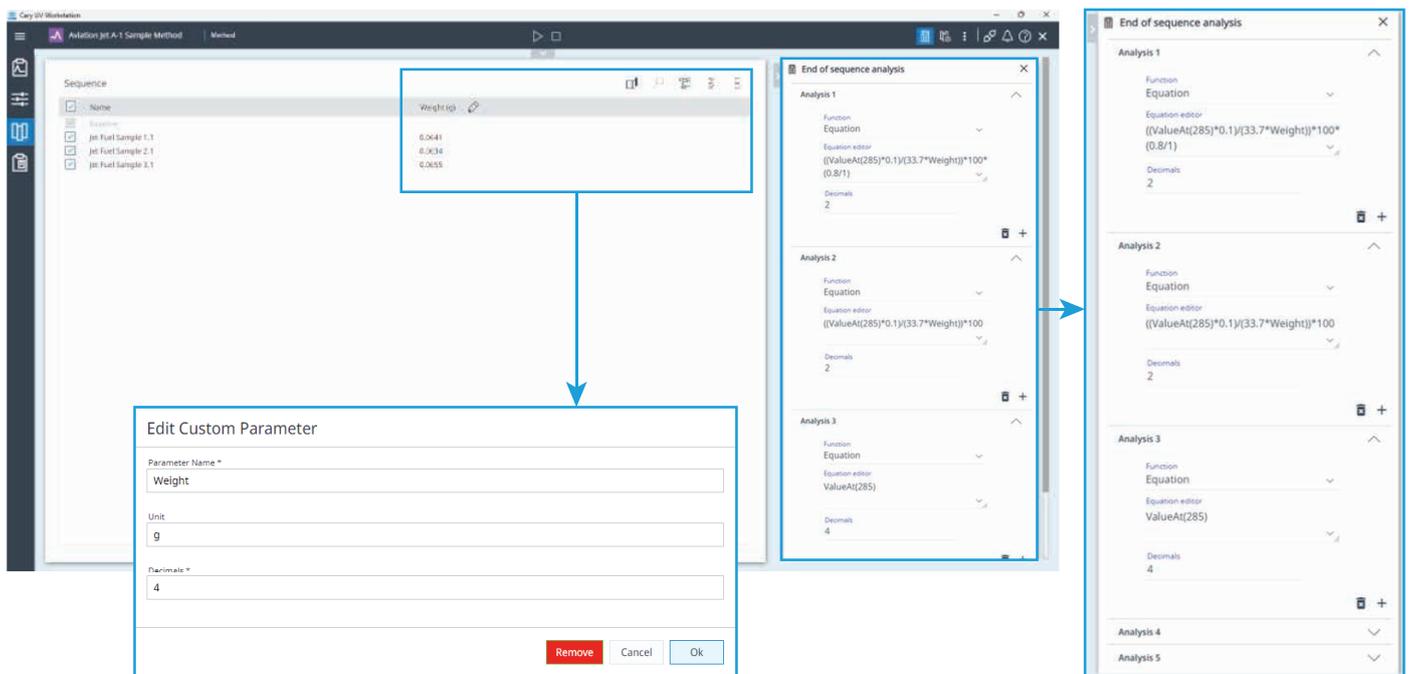


図 2. Agilent Cary UV ワークステーション v1.6 のシーケンス設定ページ。ここでは試験方法と計算方法を作成できます。カスタムパラメータとしてサンプル重量が追加され (下部)、このページの「End of sequence analysis (シーケンス終了時の解析)」セクションに 3 つの計算式 (右) が入力されています。

サンプルの測定完了後、Cary UV ワークステーション v1.6 により、指定した波長領域の拡大/縮小可能なグラフが生成されました。これを図3に示します。「End of sequence analysis (シーケンス終了時の解析)」として指定した 3 つのすべての計算値がわかりやすいテーブルで返されました。小数点以下の桁数は、Abs は 4 桁、質量 % と体積 % は 2 桁に設定しました。これにより、各ジェット燃料サンプル中のナフタレン炭化水素の体積 % は、表 2 に示すようにほぼ 0.01 % として報告されました。

表 2.各ジェット燃料サンプル中のナフタレンの体積分率 (小数点以下 2 桁まで報告)

	サンプル 1	サンプル 2	サンプル 3
ジェット燃料サンプル中のナフタレンの体積 %	1.00	1.08	1.36

このように、Cary UV ワークステーション v1.6 によってジェット燃料サンプル中のナフタレンの体積 % が特定されましたが、その際、オフラインで計算を実行したり別のプログラムにデータをエクスポートしたりする必要はありませんでした。データ収集パラメータとデータ解析方法はどちらも、今後の実験の設定を効率化するために、試験メソッドとして保存しました。ナフタレン分析の試験メソッドを作成しておけば、分析および解析設定を入力し直す必要がなくなります。ワークフローがより迅速かつ効率的になり、ユーザーはメソッドの設定よりも分析および解析に専念することができます。

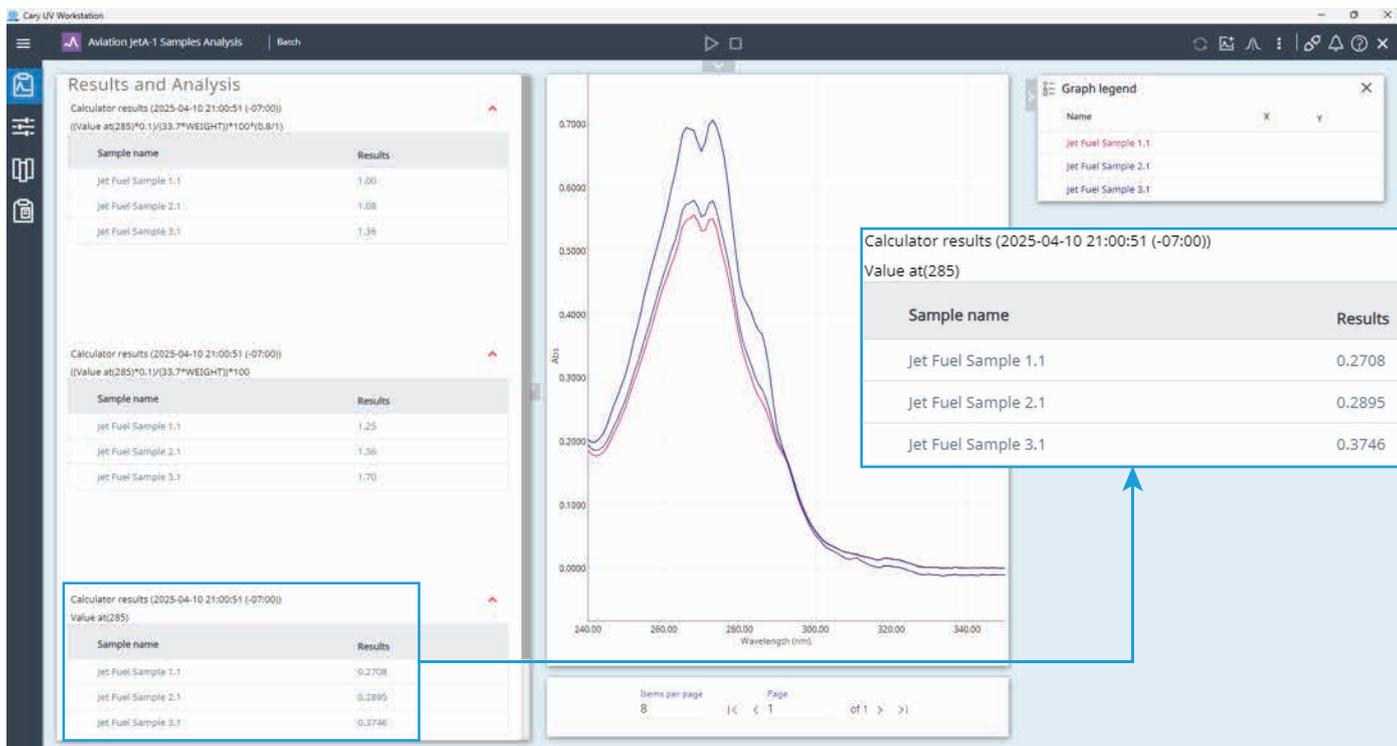


図 3. Agilent Cary UV ワークステーション v1.6 では、シンプルな値テーブル形式でデータが返され、測定に対して目的とする定量分析を実施できます。

レポート作成

Cary UV ワークステーション v1.6 では、定性分析と定量分析の結果を1つのレポートにまとめることができます。図4に示すように、今回の研究では、データの計算式と値のテーブル、285 nm 領域が表示されるように拡大したグラフ、およびその他のオプションを内容として含めるようにレポートをカスタマイズしました。レポート内容の設定も試験メソッドの一部として保存できます。3種類のジェット燃料サンプルに関するレポートはPDF形式で作成されました。

メソッドの精度

Cary 3500 UV-Vis を用いたメソッドの精度を繰り返し精度試験と再現性試験により評価しました。

再現性：繰り返し精度を評価するため、各サンプルに対し、一定の使用条件下で連続20回測定を実行しました。表3に示すように、各測定について計算された標準偏差が低い値となり、一貫した吸光度測定値が得られたことが明らかになりました。測光精度を確保するうえで、このレベルの安定性が重要になります。

表3.各ジェット燃料サンプルに対する20回の吸光度測定の平均値とばらつき

	サンプル 1	サンプル 2	サンプル 3
285 nm における吸光度の平均値 (Abs)	0.2691	0.2933	0.3748
標準偏差 (Abs)	0.0004	0.0004	0.0005

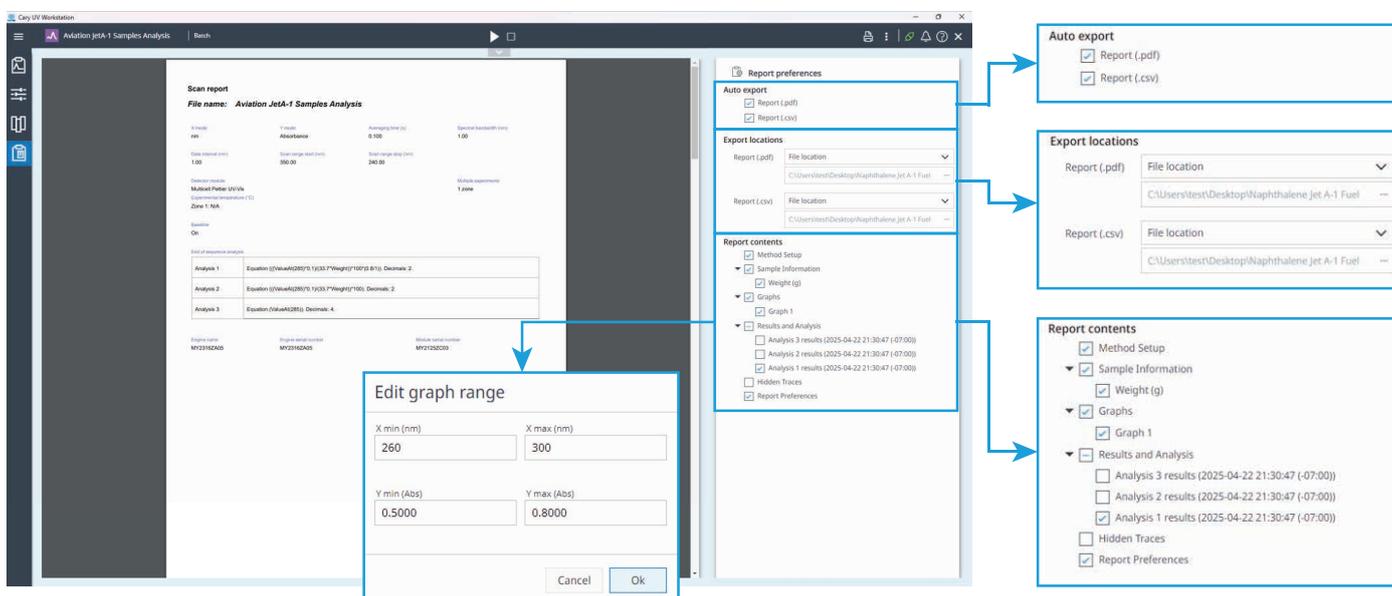


図4. Agilent Cary UV ワークステーション v1.6 では、シーケンスによるデータ取り込み終了時に、レポートをPDF形式またはCSV形式で自動的にエクスポートできます。ユーザーは、これらのレポートのエクスポート先を定義したり、必要に応じて特定の要素を選択または選択解除してレポート内容をカスタマイズしたり、目的の領域を強調するためにグラフを拡大/縮小したりできます。

Scan report
File name: Aviation JetA-1 Samples Analysis

W mode	1 mode	Averaging time (s)	Spectral bandwidth (nm)
nm	Absorbance	0.100	1.00

Date interval (min)	Scan range start (nm)	Scan range stop (nm)
1.00	350.00	240.00

Detector module: Multiple experiments
 Module serial number: 1 zone

Baseline: On

End of sequence analysis

Analysis 1	Equation ((ValueA(285)*0.1)(33.7*Weight)/100)*100, Decimals: 2
Analysis 2	Equation ((ValueA(285)*0.1)(33.7*Weight)/100), Decimals: 2
Analysis 3	Equation (ValueA(285)), Decimals: 4

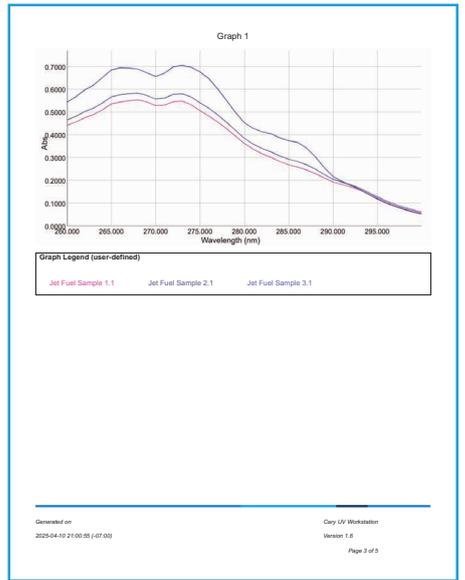
Engine name	Engine serial number	Module serial number
MF23162A05	MF23162A05	MF21232C03

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)	0.0641
Jet Fuel Sample 2.1	Weight (g)	0.0634
Jet Fuel Sample 3.1	Weight (g)	0.0655

Generated on: 2025-04-10 21:00:55 (+07:00) Cary UV Workstation Version 1.6 Page 2 of 5



Analysis 1 results (2025-04-22 21:30:47 (+07:00))
 ((Value A(285)*0.1)(33.7*Weight)/100)*100 (0.81)

Sample name	Results
Jet Fuel Sample 1.1	1.00
Jet Fuel Sample 2.1	1.08
Jet Fuel Sample 3.1	1.36

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\test\Desktop\Naphthalene Jet A-1 Fuel
 Report (.csv) - C:\Users\test\Desktop\Naphthalene Jet A-1 Fuel

Report contents

- Method Setup
- Sample Information
- Weight (g)
- Graphs
- Graph 1
- Results and Analysis
 - Analysis 3 results (2025-04-22 21:30:47 (+07:00))
 - Analysis 2 results (2025-04-22 21:30:47 (+07:00))
 - Analysis 1 results (2025-04-22 21:30:47 (+07:00))
- Hidden Traces
- Report Preferences

Generated on: 2025-04-10 21:00:55 (+07:00) Cary UV Workstation Version 1.6 Page 5 of 5

図 5.3 種類のジェット燃料サンプルについて生成されたスキャンレポート

許容範囲は、一定条件下での 20 回にわたる各ジェット燃料サンプルの測定により得られた平均体積 % にもとづいて計算しました³。表 4 に示すように、各サンプルの許容値の計算値は、サンプル 1 については ± 0.18 %、サンプル 2 については ± 0.19 %、サンプル 3 については ± 0.21 % となりました。20 回の測定にわたるナフタレンの体積 % のばらつき（標準偏差）も各サンプルについて計算し、各測定値が平均値からどの程度逸脱しているかを評価しました。

ばらつきの計算値はサンプル 1 については $\pm 1.42 \times 10^{-3}\%$ 、サンプル 2 については $\pm 1.61 \times 10^{-3}\%$ 、サンプル 3 については $\pm 1.96 \times 10^{-3}\%$ となり、Cary 3500 マルチセル UV-Vis により一貫性と繰り返し精度の高い測定値が得られたことがわかりました。表 4 に示すように、各サンプルで観察されたナフタレンの体積 % のばらつきは繰り返し精度の許容範囲に十分収まっています。このことから、この機器が高精度の測定を実行できる性能を備えていることが確認されました。

表 4. 3 種類のジェット燃料サンプルに対する測定の繰り返し精度試験の結果 (n = 20)

	サンプル 1	サンプル 2	サンプル 3
平均値 (ナフタレンの体積 %)	1.00	1.10	1.36
繰り返し精度基準 (%)	± 0.18	± 0.19	± 0.21
標準偏差 (ナフタレンの体積 %)	1.42×10^{-3}	1.61×10^{-3}	1.96×10^{-3}

再現性： 吸光度測定における機器間の精度と一貫性を明らかにするために、2 台目の Agilent Cary 3500 を使用して、同じ 3 種類のサンプル試験材料に対してさらに 20 回の連続測定を実行しました。この別途独立して実施したサンプル分析によって得られた結果の標準偏差が小さかったことから、メソッドおよび機器の優れた再現性が実証されました (表 5)。

表 5. 2 人目のオペレータによる、各ジェット燃料サンプルに対する 20 回の吸光度測定の平均値とばらつき

	サンプル 1	サンプル 2	サンプル 3
285 nm における吸光度の平均値 (Abs)	0.2715	0.2916	0.3755
標準偏差 (Abs)	0.0002	0.0003	0.0002

再現性の許容範囲は、オペレータ間の測定値のばらつきにもとづいて計算しました³。2 台目の Cary 3500 マルチセル UV-Vis で得られた測定値からナフタレンの平均体積 % を計算し、各サンプルの許容値を計算したところ、サンプル 1 については ± 0.24%、サンプル 2 については ± 0.26%、サンプル 3 については ± 0.29% となりました (表 6)。このように、異なるオペレータで得られた結果のばらつきを比較することにより、機器間の測定精度を明らかにすることができました。

表 6. 2 人目のオペレータによる、3 種類のジェット燃料サンプルに対する測定の再現性試験の結果 (n = 20)

	サンプル 1	サンプル 2	サンプル 3
平均値 (ナフタレンの体積 %)	1.01	1.09	1.36
再現性基準 (%)	± 0.24	± 0.26	± 0.29
標準偏差 (ナフタレンの体積 %)	7.73×10^{-4}	1.18×10^{-3}	8.10×10^{-4}

測定のばらつき（標準偏差）値は、サンプル 1 については $\pm 7.73 \times 10^{-4}\%$ 、サンプル 2 については $\pm 1.18 \times 10^{-3}\%$ 、サンプル 3 については $\pm 8.10 \times 10^{-4}\%$ であり、再現性の許容範囲に優に収まっています。

表 7 のまとめに示すとおり、各サンプルの吸光度値とナフタレンの体積 % の計算値は 2 台の機器間でほぼ同じでした。このことから、メソッドの一貫性が明らかになりました。また、機器間の標準偏差の差から、オペレータにもとづくばらつきの程度が低いことがわかりました。標準偏差の計算値は、複数回の測定にわたって繰り返し精度、再現性、および信頼性に優れた吸光度測定を行える機器の性能を表しています。

表 7. 同じ 3 種類のジェット燃料サンプルについて 2 台の機器で測定された吸光度およびナフタレンの体積 % のばらつきの比較

		Instrument 1	Instrument 2
285 nm における吸光度	サンプル 1	0.2691 ± 0.0004 Abs	0.2715 ± 0.0002 Abs
	サンプル 2	0.2933 ± 0.0004 Abs	0.2916 ± 0.0003 Abs
	サンプル 3	0.3748 ± 0.0005 Abs	0.3755 ± 0.0002 Abs
ナフタレンの体積 %	サンプル 1	$1.00 \pm 1.42 \times 10^{-3}\%$	$1.01 \pm 7.73 \times 10^{-4}\%$
	サンプル 2	$1.10 \pm 1.61 \times 10^{-3}\%$	$1.09 \pm 1.18 \times 10^{-3}\%$
	サンプル 3	$1.36 \pm 1.96 \times 10^{-3}\%$	$1.36 \pm 8.10 \times 10^{-4}\%$

結論

Agilent Cary 3500 マルチセル UV-Vis 分光光度計と Agilent Cary UV ワークステーション v1.6 ソフトウェアにより、ジェットタービン燃料中のナフタレン炭化水素の全濃度を効率的かつ容易に分析することができました。その吸光度測定精度と繰り返し精度から、Cary 3500 の高い信頼性が実証されました。

また、ソフトウェアでは、保存済みメソッドを読み込んだり、一連の計算を自動的に順次実行できるため、データの収集および解析作業が効率化され、手動入力、オフラインでの計算、外部ソフトウェアが不要になりました。さらに、ソフトウェアに組み込まれたレポート作成機能により、結果を効率よくまとめ、情報を容易に確認できるようになりました。

以上より、Cary UV ワークステーション v1.6 を搭載した Cary 3500 マルチセル UV-Vis は、燃料の品質評価に適した、スピード、信頼性、堅牢性、使いやすさをすべて兼ね備えた手段と言えます。

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/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)

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタムコンタクトセンター

0120-477-111

email_japan@agilent.com

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、医薬品医療機器等法に基づく登録を行っていません。本文書に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

DE-005997

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2025
Printed in Japan, April 30, 2025
5994-8266JAJP