

## 实验室台式核磁共振分析仪器

工业 NMR 平台

多物性参数快速分析

以色列技术



- 流程生产关键物性实验室快速分析  
核心工具
- 多物流分析
- 多参数分析
- 更好的生产控制、微观管理
- 运行成本低
- 炼油，化工，生物技术，农业&食品，  
研究机构&研发中心，烯烃，聚合物  
行业应用

# 实验室 NMR 分析仪器

## 仪表参数

共振核	H <sup>1</sup> , F <sup>19</sup> , P <sup>31</sup>
工作频率	60±0.5MHz, H <sup>1</sup>
NMR 探头	常温探头, 设计用于 5mm、8mm 或者 10mm 核磁管的样品分析。



## 工作环境温度

无空调	20°C 到 30°C, 允许温度波动 < 5°C
有空调	25°C, 允许温度波动 < ±10°C
环境湿度	小于 70%
电源要求	标准 220v, 3A / 110v, 5A

## 典型应用

- 原油离线快评
- 原油在线快评
- 馏分油离线快速分析
- 馏分油在线实时分析
- 成品油在线实时分析
- 汽油分子管理
- 柴油分子管理
- 烯烃厂
- 生物技术
- 生物化工
- 农业/食品
- R&D – 研究机构和工业领域
- 聚合物

## 磁体系统

磁体	温度恒定自压缩场永久磁体, 计算机控制磁场梯度线圈
场强	45°C - 1.47 特斯拉
边缘场	磁体壳外小于 1 高斯.
净腔径	直径 30mm
频率稳定性	环境温度变化 5°C, 频率漂移不超过 1000 Hz, H <sup>1</sup> 频率

## 探头参数

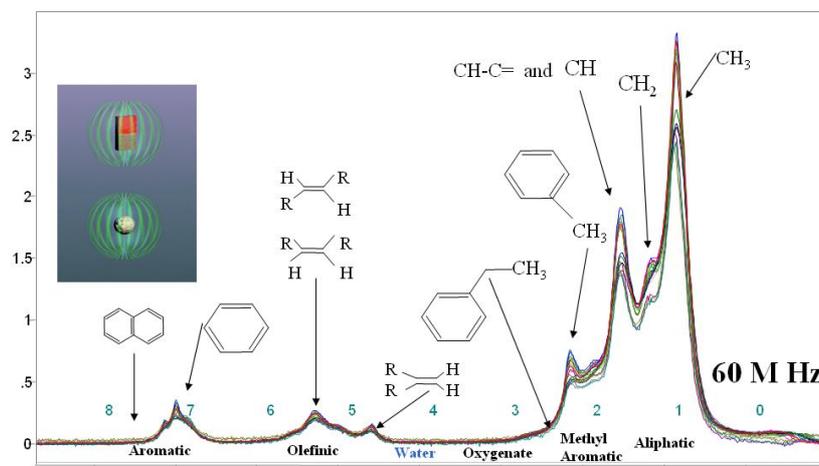
H<sup>1</sup> 线圈的空载 Q > 180

匹配 50Ω 阻抗 Q > 20 dB

## 质子信号参数

质子分辨率, (无自旋) < 1 Hz

H<sup>1</sup> 线形 1% 氯仿, C<sup>13</sup>  
卫星峰平均峰高 线宽  
(0.55%) < 25Hz



典型的汽油 NMR 频谱图

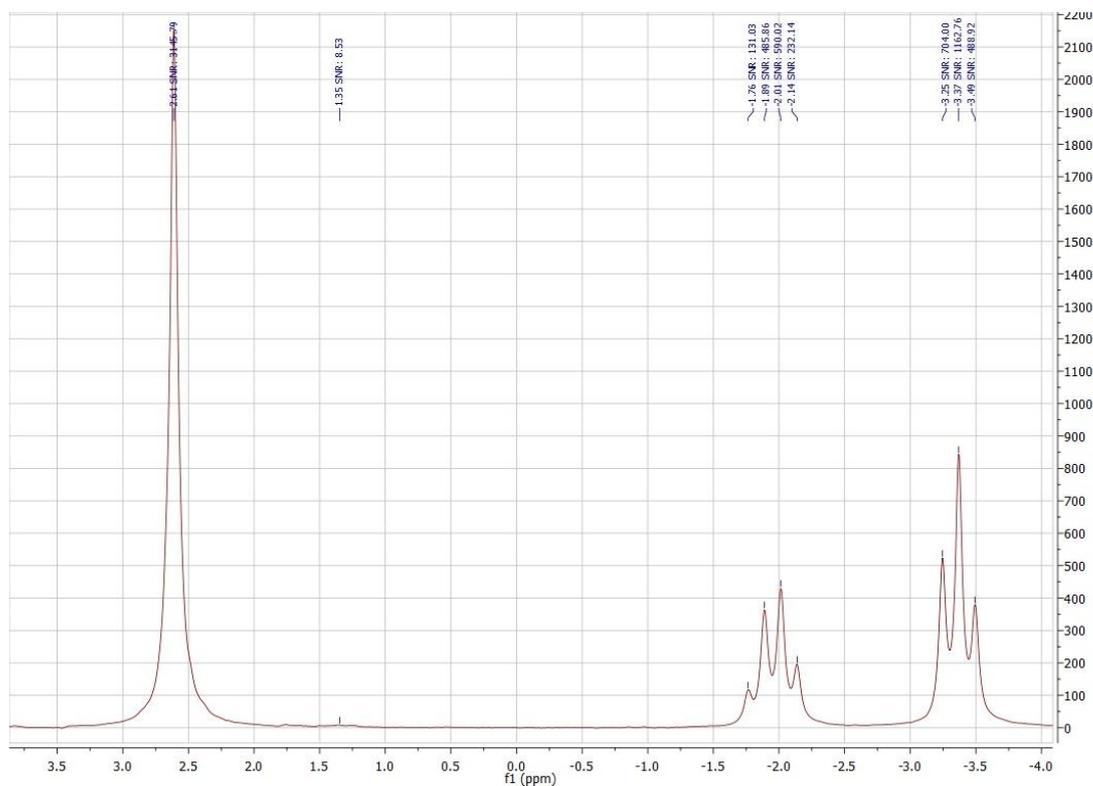
变温探头	20°C 到 90°C, 可接 5mm、8mm 核磁管	
质子分辨率	匀场前	无离子水, 半峰高小于 300Hz, 10%峰高小于 500Hz
	匀场后	无离子水, 半峰高小于 4Hz, 10%峰高小于 20Hz, 线宽小于 90Hz at 0.55%
质子线型	1% 氯仿, 峰高 0.55% 线型分辨率: 小于 25Hz,	
质子灵敏度	1 次脉冲扫描, 1% 乙苯四重峰最强信号与平均噪声的信噪比 > 60:1.	
	1 次脉冲扫描, 1% 乙苯最强信号与平均噪声的信噪比 > 300:1.	
均值灵敏度	15 次脉冲扫描, 1% 乙苯四重峰最强信号与平均噪声的信噪比 > 250:1	
	15 次脉冲扫描, 1% 乙苯最强信号与平均噪声的信噪比 > 3000:1	
脉冲宽度	功率 6W, 90 度翻转脉冲宽度小于 25 微秒.	
定量精度	5% 乙苯溶液, 波谱中三组信号峰积分比值:	
	准确度	苯环与 CH <sub>2</sub> +CH <sub>3</sub> 基团信号积分比值平均: 1:1 ± 0.05
	精度	10 次连续积分标准偏差不超过 0.01

## 炼油应用

实验室离线分析不透明、重质粘稠的液体介质, 包括原油、馏分油、渣油、成品油等。实验室离线的谱图和数据与 NMR 在线分析系统的谱图和数据通用。

## 不同管径信号分辨率和信噪比

核磁管径 \ 分辨率	半峰高分辨率	10%峰高分辨率	线形 (1%氯仿 0.55%处峰高)	SNR (1次脉冲) (1% 乙苯四重峰信号与噪声平均值的信噪比)
5mm 核磁管	<1Hz	<12Hz	<25Hz	>60
8mm 核磁管	<2Hz	<15Hz	<35Hz	>120
10mm 核磁管	<4Hz	<24Hz	<120Hz	>200
变温探头 5mm 核磁管	<1Hz	<15Hz	<25Hz	>40
变温探头 8mm 核磁管	<4Hz	<15Hz	<35Hz	>120



SNR 信号测试 (单次脉冲)

- 1% 乙苯单次脉冲四重峰信号与噪声平均值的信噪比好于 60:1
- 1%乙苯单次脉冲最强信号与平均噪声的信噪比好于 300:1

## 60MHz 1H NMR反应跟踪监测

由于需要把“反应”放置在标准的“超导”NMR实验室环境，将NMR做为一个简单的流量检测器，用于台式反应监测，混合监测，稀释监测或者转换监测应用方面，一直受到限制。4IR的AI-60系统连续流量NMR，现在就可以应用在反应工作台上。系统分辨率高，工作频率60MHz，使用永磁体，有一个简单的样品流通池。系统内部总体积2到5ml，体积大小取决于样品输送管内径和长度尺寸。更重要的是，在不使用典型的NMR氘代溶剂条件下，分析物的检出限可以达到200ppm。流速1到20+ml/分钟条件下，5到20秒钟的分析时间即可完成分析。

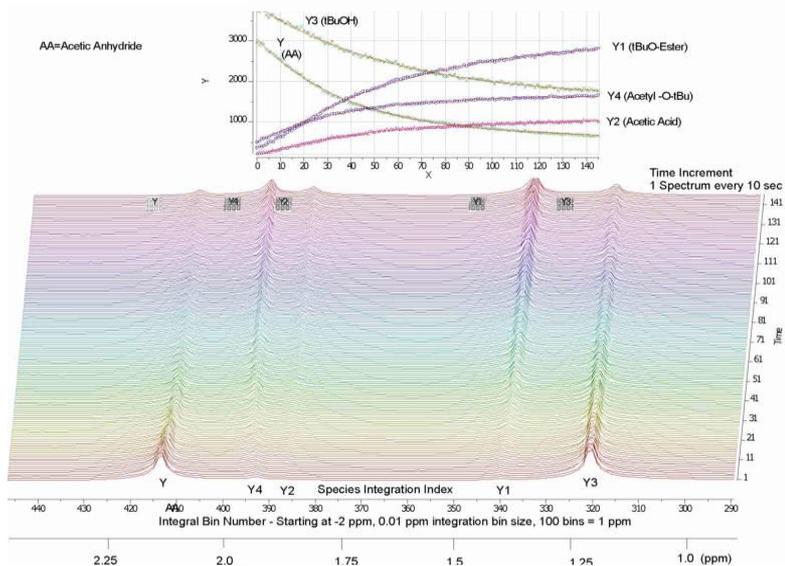
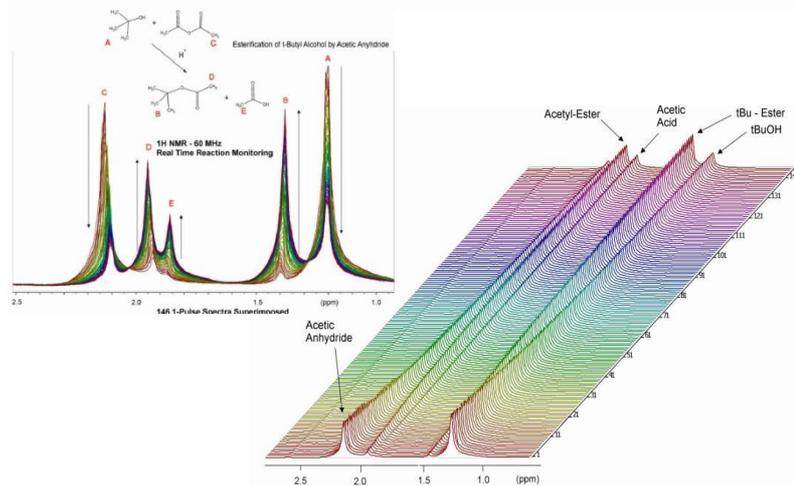
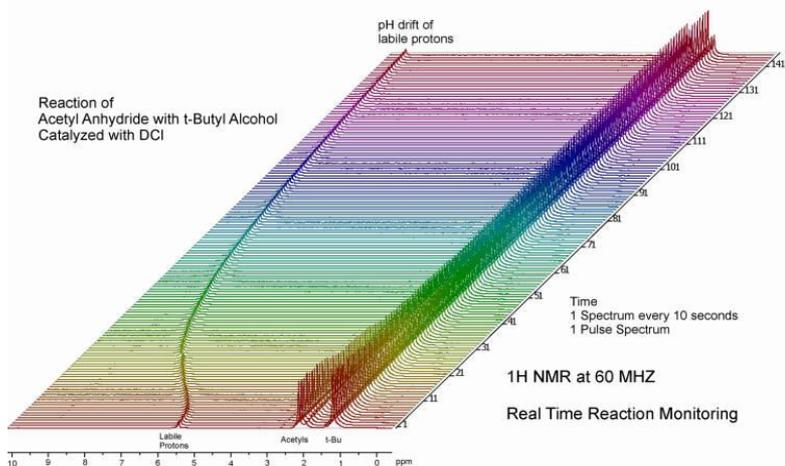
以叔丁醇与乙酸酐在酸性条件下酯化反应为例，整个反应过程持续25分钟，每10秒1次脉冲，得到60MHz核磁监测下的快速反应轮廓和可视化数据。

右上角显示的是整个25分钟反应的全部频谱绘制的叠加曲线图，从图上可以看到，随着时间的推移，频谱随着反应的进行不断变化。这些频谱中，依赖于羟基（OH）质子的PH值的变化，从图上可以很容易的观察到。

图中最右侧绘制对应的是CH<sub>3</sub>的1H NMR信号，反应各组分对应的峰信号依次排列。出色的分辨率使得反应中各组分（叔丁醇，乙酸酐，叔丁基甲基酯和乙酸）上每个CH<sub>3</sub>的共振信号都能够很好的被区分开来。

对每个峰信号进行积分，可以定量分析整个反应过程中每种组分的浓度，如右下图所示，能够计算出反应动力学。

4IR AI-60系统体积小，灵敏度高，出色的分辨率和自动处理程序，为用核磁共振技术监测化学反应过程，提供了新的机遇和应用选择。



# Aspect AI-60 60 MHz 高分辨率 FT-NMR系统 实验室分析检测和反应跟踪在线应用



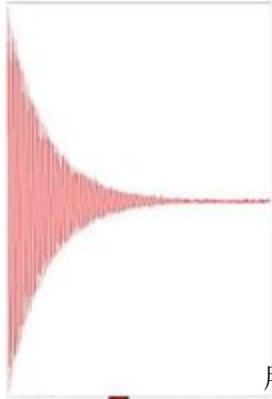
## 优势

4IR AI-60系统使用永久磁体，不需要冷却剂，系统使用标准的墙上插座（110/220V）供电。样品可以是纯样，也可以是溶解在传统的质子溶剂或者氘代NMR溶剂中。氘代溶剂不是必须的。探头可以接受标准的5mm或者10mm核磁管。也可以选择样品流通池。软件运行操作系统为 Windows® 7 或者 Windows® 10。所有NMR任务（信号接收，信号处理，积分处理，结果报告）完全自动，用户不需要太多培训和NMR经验即可操作。处理后的频谱，还为多种化学计量学程序使用提供了便利，可用于多个物性分析。

## 技术参数

45°C场强	1.4 2Tesla
边缘场强	低于 1 高斯 净腔径30 mm
工作频率	60.1 ± 1MHz <sup>1</sup> H 54.6 ± 1MHz <sup>19</sup> F 24.3 ± 1MHz <sup>31</sup> P
尺寸 (HxWxD)	37.5 x 22 x 24 inches 960 x 560 x 560 mm
重量	~325 lbs ~160 Kg
实验室探头	5 mm, 10 mm, 和流通管
非自旋分辨率	半峰高小于4 Hz 1/10峰高小于 20 Hz
线形 (5 mm)	平均值小于 80 Hz <sup>13</sup> C 卫星峰高 (0.55%)
<sup>1</sup> H 灵敏度 溶液	>300:1 (S/N), 1脉冲, 1% 乙苯CDCl <sub>3</sub>
<sup>1</sup> H 脉冲	<20 μsec 90° 翻转角, 6瓦特 RF功耗, 5mm探头 (Q of 150)

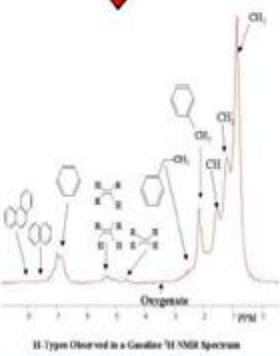
### 自由振荡衰减(FID)



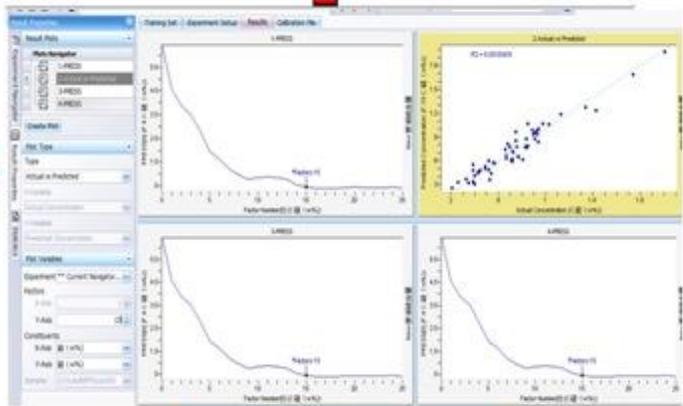
用户备选

### 物性数据

物性 ID	IVT ID	FVT ID	最小值	最大值	平均值	最小值任务编号	最大值任务编号
API	IBP	FBP	26.93	32.68	30.14	20191111YY01	20191112YY04
酸值	IBP	FBP	0.83	2.37	1.46	20191112YY05	20191111YY06
凝点	IBP	FBP	-15.75	-11.27	-12.54	20191112YY04	20191111YY05
倾	IBP	FBP	50.76	57.24	55.21	20191112YY04	—
碱	IBP	FBP	12.06	15.06	13.76	20191112YY02	20191112YY01
硫含量	IBP	FBP	0.65	2.35	1.41	20191112YY02	20191111YY05
氮	IBP	FBP	-2019.88	2600	2169.71	20191112YY05	20191112YY01
残炭	IBP	FBP	4.68	6.16	5.44	20191226YY02	20191111YY06
胶质	IBP	FBP	18.65	21.16	20.32	20191112YY02	20191111YY05
沥青质	IBP	FBP	1.05	2.53	1.66	20191128YY02	—



### NMR谱图



### 物性模型库

多物流多参数实验室快评分析方案

# 实验室 NMR 快评分析—快速高效感知物性的魅力

北京凯利安能科技有限公司  
 北京市通州区富力运河 10 号  
 邮编: 101100  
 电话: 18511751428  
 邮箱: peterweits@163.com  
 网站: www.bjklan.com