



中华人民共和国石油化工行业标准

SH/T 0741—2004

汽油中烃族组成测定法 (多维气相色谱法)

Standard test method for determination of hydrocarbon types composition
in gasoline by multidimensional gas chromatography

2004-04-09 发布

2004-04-30 实施

中华人民共和国国家发展和改革委员会 发布

前 言

本方法考虑我国汽油组成的特点和规格要求，采用多维气相色谱方法测定汽油中的饱和烃、烯烃、芳烃等烃族组成及苯含量。本方法采用直接进样，允许测定试样的烯烃含量上限为 65%，除测定烯烃含量外，本方法还可直接测定出汽油中的芳烃含量和苯含量。

本标准的附录 A 为规范性附录，本标准的附录 B 为资料性附录。

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：中国石油化工股份有限公司石油化工科学研究院。

本标准参加起草单位：中国石油化工股份有限公司安庆分公司、齐鲁分公司、高桥分公司、沧州分公司、扬子石化股份有限公司。

本标准主要起草人：徐广通、杨婷婷。

汽油中烃族组成测定法(多维气相色谱法)

1 范围

- 1.1 本标准规定了用多维气相色谱的方法测定汽油中饱和烃、烯烃、芳烃和苯含量。
- 1.2 本标准适用于终馏点 205℃ 以下的石油馏分中饱和烃、烯烃、芳烃和苯含量的测定。浓度范围适用于烯烃含量 5% (体积分数) ~ 65% (体积分数)、芳烃含量 5% (体积分数) ~ 50% (体积分数) 和苯含量 0.3% (体积分数) ~ 5% (体积分数) 的汽油样品。
- 1.3 对含醚或醇类等含氧化合物组分的汽油, 醚类或醇类化合物将随特定的烃族组分出峰, 此时应根据相关方法 (SH/T 0663) 测得的含氧化合物含量对本标准测定的烃族组成进行必要的校正。附录 A 中给出了含有甲基叔丁基醚或乙醇的汽油样品烃族组成结果的校正方法。
- 1.4 本标准不适合测定除苯外的各烃族中的单体组分含量。
- 1.5 本标准采用 SI 国际单位制单位。
- 1.6 本标准没有对所涉及到的所有安全问题提出建议。因此, 在使用本标准前, 用户必须建立适当的安全和保护措施并制订相应的管理制度。

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 17930—1999 车用无铅汽油

SH/T 0663 汽油中某些醇类和醚类测定法 (气相色谱法)

ASTM D6623 火花点火式发动机燃料中单体烃测定法 (高分辨气相色谱法)

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

3.1

饱和烃 saturates

链烷烃和环烷烃的总量。

3.2

烯烃 olefins

链烯烃、环烯烃和某些二烯烃的总量。

3.3

苯 benzene

最小碳数的芳烃。

3.4

非苯芳烃 non-benzene aromatics

非苯芳烃包括单环取代芳烃、芳烯烃和大于六元环的环二烯烃, 不包括苯。

3.5

芳烃 aromatics

芳烃为苯含量 (3.3) 和非苯芳烃含量 (3.4) 之和。

3.6

N,N -双(α -氰乙基)甲酰胺(BCEF) N,N -bis(α -cyanoethyl)formamide
气相色谱固定液。

3.7

烯烃捕集阱 olefins trap

分析系统中用于从饱和烃和烯烃混合的脂肪烃中选择性保留烯烃组分的色谱柱,该柱在特定的温度下对烯烃组分的捕集与释放具有良好的可逆性,因而可以重复使用。在一定温度下该柱能从饱和烃和烯烃的混合物中选择性保留烯烃组分,通过饱和烃组分;提高温度后保留的烯烃组分又定量释放出来。

4 方法原理和概要

4.1 多维气相色谱测定汽油烃族组分的分析原理见图1。汽油样品进入色谱系统后首先通过极性分离柱(BCEF柱)使脂肪烃组分和芳烃组分得到分离。由饱和烃和烯烃构成的脂肪烃组分通过烯烃捕集阱时烯烃组分被选择性保留,饱和烃组分则穿过烯烃捕集阱进入氢火焰离子化检测器检测。待饱和烃组分通过烯烃捕集阱后,此时芳烃组分中的苯尚未到达极性分离柱柱尾,通过一个六通阀切换使烯烃捕集阱暂时脱离载气流路,此时苯通过平衡柱进入检测器检测;苯洗脱后,通过另一个六通阀切换对非芳烃组分进行反吹,非芳烃组分进入检测器检测,待非芳烃检测完毕后,再次通过阀切换使烯烃捕集阱置于载气流路中,在适当的条件下使烯烃捕集阱中捕集的烯烃完全脱附并进入检测器检测,色谱出

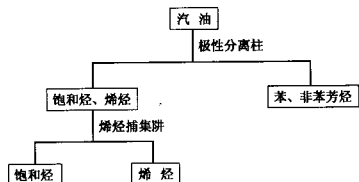


图1 多维气相色谱分析汽油烃族组成原理图

步骤测量汽油试样中各烃族组分的色谱峰面积,采用校正的面积归一化方法定量,计算试样中各烃族组分的体积分数或质量分数。一个汽油样品的色谱分析时间约12min。

5 意义和应用

5.1 汽油中烯烃、芳烃和苯含量已成为汽油规格中重要的质量指标。本方法测定汽油中的饱和烃、烯烃、芳烃和苯的体积分数或质量分数。这些数据对监测有关炼油装置的工艺状况提供了重要手段。对确定汽油的调合比例、了解不同汽油的质量特征非常重要。

5.2 色谱方法影响分析结果的因素较少,分析结果精度较高,试验步骤简单,分析周期较短,并有利于改善实验环境、减轻劳动强度、降低试验成本。

6 干扰物质

6.1 样品中的高碳数脂肪烃(C_{12} 以上)在极性柱中与苯的分离将不完全,影响苯和芳烃组分的检测。

6.2 汽油样品中的甲基叔丁基醚会在烯烃捕集阱中保留,与烯烃一起出峰,此时得到的烯烃含量包括甲基叔丁基醚;甲醇、乙醇会在芳烃的保留时间范围内出峰,此时得到的芳烃含量包括醇类化合物;可根据相关方法如 SH/T 0663 测定的醚或醇类化合物的含量对烯烃或芳烃结果进行校正。

6.3 汽油中的少量含硫、氮的化合物在烯烃捕集阱中可能产生不可逆吸附,最终可能降低烯烃捕集阱的容量或使用寿命,经多种燃料的实验表明,未发现对测定结果产生影响。

6.4 汽油中抗氧剂、清净剂和含锰抗爆剂未发现对分析结果产生影响。

6.5 汽油中溶解的少量水不干扰测定,如存在游离水可由无水硫酸钠或滤纸过滤去除。

7 仪器

气相色谱仪：色谱仪器至少应包括汽化室、控温色谱柱箱、火焰离子化检测器(FID)、色谱工作站和一些必须的硬件设备。这些硬件设备包括色谱柱、烯烃捕集阱、平衡柱、切换阀及相应的控温装置。符合下列性能和参数要求的任何气相色谱仪均可采用。仪器及分离系统的示意图见图2。

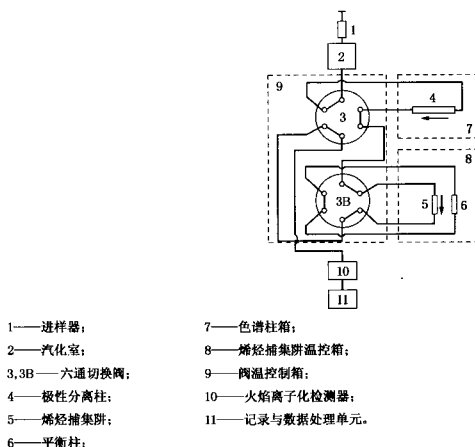


图2 多维气相色谱仪及分离系统示意图

7.1 进样系统：能将约0.1 μ L的汽油试样导入气相色谱仪的汽化室。微量注射器、自动进样器都能很好的进样。

7.2 载气及检测器气体流量控制：稳定的载气和检测器气体流速控制对获得准确、可靠、重复性好的分析结果非常关键。

7.3 火焰离子化检测器(FID)：检测器必须满足或优于表1中的要求。

表1 火焰离子化检测器性能要求

性 能	典型值	性 能	典型值
噪声/ Δ	$10^{-13} \sim 10^{-12}$	检测限/ $(g/s)(n - C_6)$	$10^{-11} \sim 10^{-10}$
漂移/ (Δ/h)	10^{-12}	线性范围	$10^5 \sim 10^6$

7.4 烯烃捕集阱：在80~120 $^{\circ}$ C范围内，该烯烃捕集阱必须定量保留所有C₄~C₁₁烯烃，通过所有沸点200 $^{\circ}$ C以下的饱和烃组分。在140~260 $^{\circ}$ C，该烯烃捕集阱释放所有保留的组分，具体温度根据烯烃捕集阱的具体情况确定。

注：如发现烯烃捕集阱有烯烃逃逸现象，建议调整操作条件直至更换烯烃捕集阱。

7.5 平衡柱：对烃族组分无保留或吸附，只起压力平衡作用，以保证阀切换后基线的平稳。

7.6 切换阀：按本标准规定的分析步骤进行操作，分析系统应包括两个两点位六通阀，阀的切换可以是手动也可以是自动。

7.7 分析系统组件的温度控制：极性分离柱、烯烃捕集阱、切换阀都应具有独立的温度控制系统，接触样品的所有部件都应保持一定的温度以防止样品冷凝。表2列出一些组件典型的控制温度范围。一些组件要求采用等温操作，一些要求采用可重复的程序升温操作。表中所列温度只是一个典型的操

作温度范围，具体使用时可以根据极性分离柱或烯烃捕集阱的具体情况进行适当调整，温度控制可以采用各种方式满足分析系统的要求。

表 2 系统组件的温度控制

系统组件	典型操作温度/℃	加热方式	系统组件	典型操作温度/℃	加热方式
极性分离柱	100~120	恒温	切换阀	100~160	恒温
烯烃捕集阱	80~260	程序升温~30℃/min	样品管线	100~200	恒温

7.8 阀切换驱动系统：如阀切换采用气动驱动系统，要注意供给气动系统的空气压力满足驱动的要求，以迅速实现阀的切换。

7.9 载气纯化装置：为保障烯烃捕集阱的使用寿命，除气相色谱常规使用的分子筛、活性炭等净化器脱除载气中的水和烃类杂质外，须安装专门的脱氧净化器，确保载气中的氧含量在 1mg/L 以下。

7.10 色谱柱：极性分离柱，该柱要实现芳烃中苯与脂肪烃组分的分离及苯与甲苯的分离，保证阀切换时不影响苯和非苯芳烃的测定，推荐采用 BCEF 作固定液，涂渍量 25%，Chromosorb P(AW)200~300 μ m 载体，柱管材料为内衬石英的不锈钢管或内壁脱活的不锈钢管，长 5m，内径 2mm。其他能满足上述分离要求的等效色谱柱均可使用。

7.11 记录与数据处理单元建议采用色谱工作站，并具有下列功能。

7.11.1 可显示采集的色谱图；

7.11.2 显示色谱峰的峰面积及面积百分比数据；

7.11.3 校正因子的计算及使用；

7.11.4 具有处理噪音和鬼峰的功能；

7.11.5 能进行必要的手动积分处理；

7.11.6 测定结果通过色谱峰面积或面积分数、对应的相对质量校正因子和有关参数通过校正的面积归一化方法计算。

8 试剂与材料

8.1 试剂的纯度：在所有试验中应使用分析纯或以上纯度的试剂。

8.2 校正物质：下列化合物可以用来校正检测器的响应，正戊烷、正己烷、正庚烷、异辛烷、正辛烷、正壬烷、1-戊烯、1-己烯、1-庚烯、1-辛烯、1-壬烯、苯、甲苯、二甲苯、异丙基苯。

警告：这些化合物均为易燃或有毒化合物，若摄取、吸入或通过皮肤吸收将对人体产生伤害或致命。

8.3 校正样品的制备：为减少配制过程中经组分挥发对实验结果的影响，建议按照纯物质的挥发性由低到高的次序，以质量比制备校正样品：建议先配制饱和烃、烯烃和芳烃各自的混合组分，称量的比例范围参照表 3，校正样品配制时可根据测量实际样品的具体情况进行配制，使校正样品与待测试样的浓度接近，表 4 列出一组典型校正样品的配制比例。

表 3 校正样品中各烃族组分的配制比例

饱和烃			烯 烃			芳 烃		
化合物名称	质量分数/%	体积分数/%	化合物名称	质量分数/%	体积分数/%	化合物名称	质量分数/%	体积分数/%
正戊烷	20.0	22.0	1-戊烯	32.0	35.0	甲苯	32.0	32.0
正己烷	24.0	24.0	1-己烯	28.0	30.0	二甲苯	40.0	40.0
正庚烷	18.0	18.0	1-庚烯	24.0	22.0	异丙基苯	28.0	28.0
异辛烷	18.0	18.0	1-辛烯	10.0	8.0			
正辛烷	12.0	11.0	1-壬烯	6.0	5.0			
正壬烷	8.0	7.0						
合 计	100	100	合 计	100	100	合 计	100	100

注：表中的体积和质量分数间并非完全一致的对应关系，建议按表中所列的体积分数量取，然后进行准确的称量，以得到精确的质量分数，计算校正因子。

表4 典型校正样品的配制

序 号	饱和烃		烯 烃		非苯芳烃		苯	
	质量分数/ %	体积分数/ %	质量分数/ %	体积分数/ %	质量分数/ %	体积分数/ %	质量分数/ %	体积分数/ %
1	37.0	39.0	43.5	45.0	18.3	15.0	1.20	1.00
2	36.6	39.0	38.2	40.0	24.0	20.0	1.20	1.00
3	35.8	39.0	32.8	34.5	29.6	25.0	1.80	1.50
4	35.2	38.5	28.0	30.0	35.0	30.0	1.80	1.50
5	33.9	38.5	23.5	25.0	40.8	35.0	1.80	1.50

注：表中的体积和质量分数间并非完全一致的对对应关系，建议按表中所示的体积分数量取，然后进行准确的称量，以得到精确的质量分数，计算校正因子。

8.4 压缩空气：助燃气，纯度不小于99.9%。

警告：高压气体，注意安全。

8.5 氢气：燃气，纯度不小于99.9%。

警告：高压气体，极易燃。

8.6 空气和氢气都需要净化，使用分子筛、活性炭净化器脱除气体中的水和烃类物质。

8.7 载气：高纯氮气或氦气，按7.9条要求净化。

8.8 样品瓶：使用上面有压盖或螺旋扣盖且盖中衬有外层为聚四氟乙烯面的橡胶密封垫的玻璃小瓶。

8.9 质量控制检查样品：用于常规监测色谱系统和分离系统的可靠性，监测烯烃捕集阱的捕集能力，通过对质量控制检查样品的分析确证测定的结果是否在方法的精度范围之内。质量控制检查样品应由与被测试样相近的烃类化合物配制或购买得到。质量控制检查样品应与校正样品分开制备，要充分混合均匀。质量控制检查样品要采用安培瓶封装后在低温下储存，并在储存期间保持不变。

9 仪器系统的建立和准备

9.1 分析仪系统的集成(色谱仪及独立的温控元件)见图2，如采用商品化系统，安装、定位和系统优化可以与生产厂联系。

9.2 载气中的杂质将对色谱柱和烯烃捕集阱的性能产生有害的影响，因此必须按7.9条要求安装可靠的载气净化系统以保证系统的正常运行。

9.3 通过实际样品、质量控制检查样品或校正样品检验极性柱对脂肪烃和芳烃的分离效果及苯和非苯芳烃组分的出峰时间，以此确定第一次和第二次阀的切换时间。通过校正样品实验调整烯烃捕集阱的温度直至满足校正标准条件。典型的色谱操作条件见表5。

表5 典型色谱操作条件

操作条件	典型参数	操作条件	典型参数
汽化室温度/℃	220	检测器气体流量/(mL/min)	
极性分离柱控温/℃	110	空气	400
烯烃捕集温度/℃	85 ~ 125	氢气	40
烯烃释放温度/℃	140 ~ 190	进样量/ μ L	0.1
载气流量/(mL/min)	45	阀切换驱动压力/kPa	200

10 校正和标准化

10.1 保留时间的确定

通过校正样品确定饱和烃、苯、非苯芳烃和烯烃组分的保留时间范围。表6给出了按表5条件通过柱长5m的BCEF柱及烯烃捕集阱各烃族组分的保留时间,图3为校正样品的色谱图。

表6 各烃族组分的典型保留时间

组 分	保留时间/min	组 分	保留时间/min
饱和烃	0.6~2.8	非苯芳烃	5~8.5
苯	2.8~3.5	烯 烃	9~10.5

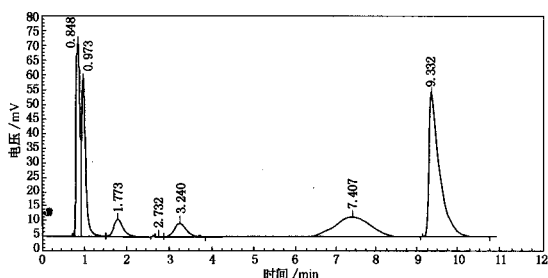


图3 含饱和烯、烯烃、非苯芳烃及苯混合物的色谱图

10.2 校正步骤

10.2.1 各烃族组分的相对质量校正因子按式(1)计算:

根据校正样品中饱和烃、烯烃、非苯芳烃和苯所占的质量分数 m_i 和色谱测定的峰面积分数 P_i , 以非苯芳烃为标准物质计算相应组分的相对质量校正因子。

$$f'_i = \frac{m_i P_A}{m_A P_i} \quad (1)$$

式中:

f'_i ——相对质量校正因子(以非苯芳烃组分为标准物质);

m_A ——非苯芳烃在校正样品中的质量分数;

P_A ——色谱测定的芳烃峰面积分数;

m_i ——校正样品中饱和烃、烯烃或苯的质量分数;

P_i ——色谱测定的饱和烃、烯烃或苯的峰面积分数。

11 试验步骤

11.1 样品准备: 为防止样品中轻组分挥发, 样品如不立即分析应密封后保存在冰箱中。分析前使试样温度达到室温。

11.2 分析系统准备: 开机后, 检查分析系统的参数设置是否准确, 为净化分析系统, 分析样品前需按样品的分析步骤将仪器空运行一遍, 以驱除色谱柱和烯烃捕集阱中的残留杂质。

11.3 取约 0.1 μL 有代表性的试样在准备就绪的气相色谱系统上进样, 试样首先通过极性分离柱,

在极性分离柱上, C_{12} 以下的脂肪烃(含 C_{12})与芳烃组分完全分离, 由极性分离柱中洗脱出的饱和烃组分与烯烃组分的混合物进入烯烃捕集阱, 烯烃被选择性保留而饱和烃则通过烯烃捕集阱, 由 FID 检测器检测(见图 2); 在苯流出极性分离柱前, 切换六通阀 3B 改变色谱载气流路, 烯烃捕集阱脱离载气流路, 此时从极性柱中流出的苯通过平衡柱进入 FID 检测(见图 4a), 待苯洗脱完毕后, 切换另一六通阀 3, 使 C_7 (含 C_7)以上的非芳芳烃反吹出极性柱, 再通过平衡柱进入 FID 检测(见图 4b)。在非芳芳烃反吹洗脱的同时, 开始升高烯烃捕集阱的温度, 待非芳芳烃组分完全洗脱后, 再次切换六通阀 3B 使烯烃捕集阱重新进入载气流路, 烯烃由烯烃捕集阱中脱附进入 FID 检测(见图 4c)。得到的色谱图经色谱工作站及相应的分析软件处理, 计算各组分的质量分数或体积分数。典型的汽油色谱图见图 5。

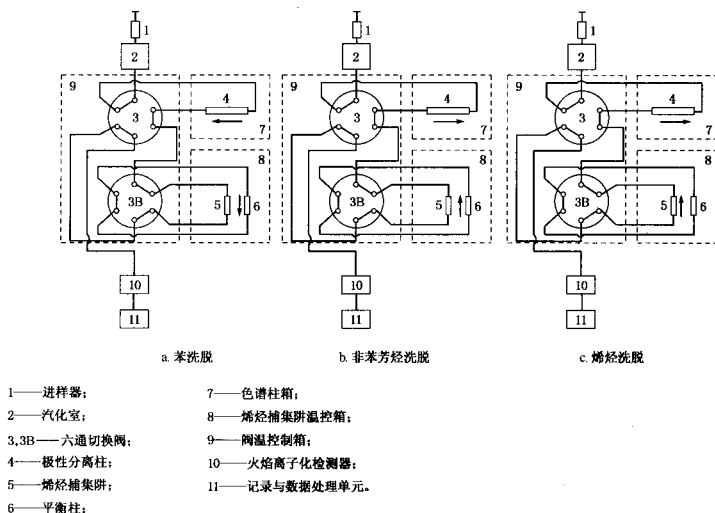


图4 汽油组成分析色谱操作流程

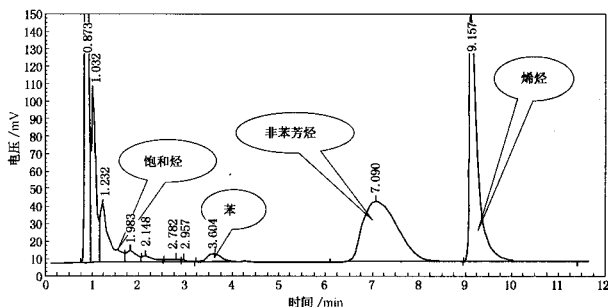


图5 典型的汽油色谱图

12 质量控制检查

为确认分析系统的可靠性,在仪器运行一段时间后,应分析两次质量控制检查样品。质量控制检查样品的分析步骤应与汽油样品分析步骤一致。两次质量控制检查样品的结果差值应符合方法规定的重复性要求。如测定结果超出要求,应确定误差源,并进行必要的修正。

13 计算和报告

13.1 试样烃族组成的计算

13.1.1 检查积分仪或色谱工作站对谱图的积分状况,以确定对所有的色谱峰都进行了合理的积分,如不合理可以采用工作站的手动积分功能进行重新积分。

注:由于汽油中的苯含量较低,不合理的基线切割和积分将对分析结果产生较大的影响。

13.1.2 试样中饱和烃、烯烃、非苯芳烃和苯的质量分数(%)可按式(2)进行计算。

$$m_i = \frac{P_i f'_i}{\sum P_i f'_i} \times 100 \quad \text{..... (2)}$$

式中:

m_i ——试样中某组分 i 的质量分数, %;

f'_i —— i 组分的相对质量校正因子;

P_i —— i 组分色谱测定的峰面积分数。

13.1.3 试样中饱和烃、烯烃、非苯芳烃和苯的体积分数(%)可按式(3)进行计算。

$$V_i = \frac{P_i f'_i / d_i}{\sum P_i f'_i / d_i} \times 100 \quad \text{..... (3)}$$

式中:

V_i ——试样中某组分 i 的体积分数, %;

f'_i —— i 组分的相对质量校正因子;

P_i —— i 组分色谱测定的峰面积分数;

d_i ——饱和烃、烯烃和非苯芳烃的加权相对密度及苯的相对密度, 见 13.1.4。

13.1.4 对符合 GB 17930—1999 馏程要求的汽油馏分, 各烃族组分的加权相对密度取值见表 7, 对特殊馏分的汽油, 各烃族组分加权相对密度的计算参见附录 B。

表 7 各烃族组分的加权相对密度

烃族组分	饱和烃	烯 烃	非苯芳烃	苯
加权相对密度	0.6860	0.6880	0.8700	0.8789

13.1.5 对含有甲基叔丁基醚或乙醇的汽油, 各烃族组成结果的校正计算见附录 A。

13.2 试验结果的报告

报告试样中饱和烃、烯烃、芳烃的体积分数(或质量分数), 精确至 0.1%, 芳烃含量为非苯芳烃含量和苯含量之和。苯的体积分数(或质量分数), 精确至 0.01%。

14 精密度

按下述规定判断试验结果的可靠性(95%的置信水平)。

14.1 重复性: 由同一操作者使用同一台仪器对同一试样连续测定的两个试验结果之差不应超过表 8 或表 9 所列数值。

14.2 再现性: 不同实验室的不同操作者对同一试样进行试验, 所测的两个独立的试验结果之差

应超过表 8 或表 9 所列数值。

表 8 精密度

%(体积分数)

组 分	重复性	再现性	范 围
饱和烃	1.9	3.3	28 ~ 78
烯 烃	$0.27X^{0.50}$	$0.28X^{0.65}$	5 ~ 65
苯	$0.06X^{0.82}$	$0.09X^{0.75}$	0.3 ~ 5.0
非苯芳烃	$0.18X^{0.65}$	$0.28X^{0.65}$	5 ~ 50
芳 烃	$0.18X^{0.65}$	$0.29X^{0.65}$	5 ~ 55

注: X 是组分的平均体积分数, %。

表 9 典型含量水平下的精密度要求

%(体积分数)

组 分	组分含量	重复性	再现性
烯 烃	5	0.6	0.8
	10	0.9	1.3
	15	1.0	1.6
	20	1.2	2.0
	25	1.4	2.3
	30	1.5	2.6
	35	1.6	2.8
	40	1.7	3.1
	45	1.8	3.3
	50	1.9	3.6
	55	2.0	3.8
芳 烃	60	2.1	4.0
	5	0.5	0.8
	10	0.8	1.3
	15	1.0	1.7
	20	1.3	2.0
	25	1.5	2.3
	30	1.6	2.6
	35	1.8	2.9
苯	40	2.0	3.2
	45	2.1	3.4
	0.3	0.02	0.04
	0.5	0.03	0.05
	1.0	0.06	0.09
	1.5	0.08	0.12
	2.0	0.11	0.15
	2.5	0.13	0.18

附录 A (规范性附录)

含甲基叔丁基醚或乙醇汽油样品烃族组成的结果校正

A.1 含甲基叔丁基醚汽油烃族组成结果的校正

对含甲基叔丁基醚(MTBE)的汽油,需对多维气相色谱测定的烯烃含量进行校正,校正后试样中实际的烯烃体积分数(%)按式(A.1)计算:

$$V_{OLE}^T = V_{OLE} - f_{MTBE} C_{MTBE} / d_{MTBE} \quad \text{..... (A.1)}$$

式中:

V_{OLE}^T ——校正后试样中实际的烯烃体积分数, %;

V_{OLE} ——多维气相色谱直接测定的试样中烯烃的体积分数, %;

C_{MTBE} ——根据 SH/T 0663 测定的试样中甲基叔丁基醚的质量分数, %;

f_{MTBE} ——甲基叔丁基醚在 FID 检测器上相对质量校正因子;

d_{MTBE} ——甲基叔丁基醚的相对密度。

A.2 含乙醇汽油烃族组成结果的校正

对含乙醇的汽油,需对多维气相色谱测定的芳烃含量进行校正,校正后试样中实际的芳烃体积分数(%)按式(A.2)计算:

$$V_{ARO}^T = V_{ARO} - f_{乙醇} C_{乙醇} / d_{乙醇} \quad \text{..... (A.2)}$$

式中:

V_{ARO}^T ——校正后试样中实际的芳烃体积分数, %;

V_{ARO} ——多维气相色谱直接测定的试样中芳烃的体积分数, %;

$C_{乙醇}$ ——根据 SH/T 0663 测定的试样中乙醇的质量分数, %;

$f_{乙醇}$ ——乙醇在 FID 检测器上相对质量校正因子;

$d_{乙醇}$ ——乙醇的相对密度。

附录 B (资料性附录)

各烃族组分加权相对密度计算

B.1 各烃族不同碳数组分引用的相对密度见表 B.1

表 B.1 不同碳数组分的相对密度(20℃)

碳原子数	链烷烃 <i>P</i>	环烷烃 <i>N</i>	烯烃 <i>O</i>	芳烃 <i>A</i>
4	0.5788		0.6037	
5	0.6262	0.7454	0.6474	
6	0.6594	0.7636	0.6794	0.8789
7	0.6837	0.7649	0.7023	0.8670
8	0.7025	0.7747	0.7229	0.8681

表 B.1(续)

碳原子数	链烷烃 P	环烷烃 N	烯烃 O	芳烃 A
9	0.7176	0.7853	0.7327	0.8707
10	0.7300	0.8103	0.7408	0.8724
11 +	0.7402		0.7503	0.8730
注:相对密度取自 ASTM D 4A, 烃类化合物的物性常数。				

B.2 各烃族中不同碳数组分的组成测定

采用 ASTM D 6623 测定出烃族中不同碳数组分的组成见表 B.2。

表 B.2 不同碳数组分的组成 % (质量分数)

碳原子数	链烷烃 P	环烷烃 N	烯烃 O	芳烃 A
4	P_4		O_4	
5	P_5	N_5	O_5	
6	P_6	N_6	O_6	A_6
7	P_7	N_7	O_7	A_7
8	P_8	N_8	O_8	A_8
9	P_9	N_9	O_9	A_9
10	P_{10}	N_{10}	O_{10}	A_{10}
11 +	P_{11}^+		O_{11}^+	A_{+11}

B.3 各烃族组分加权相对密度的计算

B.3.1 链烷烃的加权相对密度按式(B.1)计算:

$$d_P = \frac{\sum_i P_i \cdot d_{Pi}}{P_T} \dots\dots\dots (B.1)$$

式中:

d_P ——链烷烃的加权相对密度;

P_i ——不同碳数链烷烃的质量分数;

d_{Pi} ——不同碳数链烷烃的相对密度值;

P_T ——不同碳数链烷烃的质量分数之和。

B.3.2 环烷烃的加权相对密度按式(B.2)计算:

$$d_N = \frac{\sum_i N_i \cdot d_{Ni}}{N_T} \dots\dots\dots (B.2)$$

式中:

d_N ——环烷烃的加权相对密度;

N_i ——不同碳数环烷烃的质量分数;

d_{Ni} ——不同碳数环烷烃的相对密度值;

N_T ——不同碳数环烷烃的质量分数之和。

B.3.3 饱和烃的加权相对密度按式(B.3)计算:

$$d_S = \frac{P_T \cdot d_P + N_T \cdot d_N}{S_T} \dots\dots\dots (B.3)$$

式中:

S_T ——饱和烃的质量分数, 其值为 P_T 、 N_T 之和。

B.3.4 烯烃的加权相对密度按式(B.4)计算:

$$d_o = \frac{\sum_i O_i \cdot d_{oi}}{O_T} \dots\dots\dots (B.4)$$

式中:

d_o ——烯烃的加权相对密度;

O_i ——不同碳数烯烃的质量分数;

d_{oi} ——不同碳数烯烃的相对密度值;

O_T ——不同碳数烯烃的质量分数之和。

B.3.5 非苯芳烃的加权相对密度按式(B.5)计算:

$$d_A = \frac{\sum_i A_i \cdot d_{Ai}}{A_T} \dots\dots\dots (B.5)$$

式中:

d_A ——非苯芳烃的加权相对密度;

A_i ——不同碳数非苯芳烃的质量分数;

d_{Ai} ——不同碳数非苯芳烃的相对密度值;

A_T ——不同碳数非苯芳烃的质量分数之和。