



中华人民共和国国家标准

GB/T 18340.6—2010
代替 GB/T 18340.6—2001

地质样品有机地球化学分析方法 第6部分：汽油族组成测定 质谱法

Organic geochemical analysis methods for geological samples—
Part 6: Determination of gasoline group component—Mass spectrometry

2010-11-10 发布

2011-02-01 实施

中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局
中国国家标准化管理委员会 发布

前 言

GB/T 18340《地质样品有机地球化学分析方法》共有 6 个部分：

- 第 1 部分：轻质原油分析 气相色谱法；
- 第 2 部分：有机质稳定碳同位素测定 同位素质谱法；
- 第 3 部分：石油重馏分中饱和烃族组分测定 质谱法；
- 第 4 部分：石油重馏分中芳香烃族组分测定 质谱法；
- 第 5 部分：岩石提取物和原油中饱和烃分析 气相色谱法；
- 第 6 部分：汽油族组成测定 质谱法。

本部分为 GB/T 18340 的第 6 部分。

本部分参考了美国材料与试验协会标准 ASTM D 2789-95(2005)《低烯烃汽油烃类组成质谱测定法》。

本部分代替 GB/T 18340.6—2001《地质样品有机地化测试 汽油族组成质谱分析方法》，与 GB/T 18340.6—2001 相比，有如下变动：

- 标准名称由《地质样品有机地化测试 汽油族组成质谱分析方法》改为《地质样品有机地球化学分析方法 第 6 部分：汽油族组成测定 质谱法》；
- 增加了警示、警告、术语和定义章节；
- 对原标准进行了结构和内容的调整，并作了适当的文字的修改；部分章节参照 ASTM D 2789-95(2005)的相关章节作了较大的改变。

本部分由中华人民共和国国土资源部提出。

本部分由全国国土资源标准化技术委员会归口。

本标准负责起草单位：国家地质实验测试中心。

本部分起草单位：中国石油化工股份有限公司石油勘探开发研究院无锡石油地质研究所。

本部分主要起草人：宋晓莹、张志荣、张渠、钱志浩。

本部分所代替标准的历次版本发布情况为：GB/T 18340.6—2001。

地质样品有机地球化学分析方法

第6部分:汽油族组成测定 质谱法

警示——使用本部分的人员应有正规实验室工作的实践经验。本部分并未指出所有可能的安全问题。使用者有责任采取适当的安全和健康措施,并保证符合国家有关法规规定的条件。

1 范围

GB/T 18340 的本部分规定了汽油族组成的质谱分析方法、计算方法和分析质量要求。

本部分适用于测定凝析油或轻质原油(95%馏出物温度低于 196 °C)中的 3 种饱和烃及 3 种芳香烃的族组成。样品中烯烃含量小于 3%。

2 原理

试样由直接进样系统气化后进入质谱仪,经离子源电子轰击,得到该试样的混合质量色谱图。将各烃族的特征峰强度加和与对应的逆阵系数相乘,求得试样族组分的含量。

3 试剂及材料

3.1 全氟煤油(PFK)、全氟三丁胺(FC-43)或其他已知准确质量的参考物。

3.2 正十六烷:色谱纯。

3.3 二氯甲烷:分析纯。

4 仪器和设备

4.1 质谱计:具有 EI 离子源并配有直接进样系统和数据采集处理系统的质谱仪。

4.2 进样系统:可升温至 180 °C(升温速率:30 °C/min~130 °C/min)的直接进样系统。

4.3 微量注射器或者恒体积移液器(1 μL~10 μL)。

5 分析步骤

5.1 分析条件

5.1.1 质量分辨率:不小于 500。

5.1.2 电离方式:EI。

5.1.3 电子轰击能量:70 eV。

5.1.4 电离室温度:250 °C。

5.1.5 进样器加热温度:125 °C~300 °C(50 °C/min)。

5.1.6 质量扫描方式:全扫描。

5.1.7 质量扫描范围:35 amu~250 amu。

5.1.8 扫描速度:500 amu/s。

5.2 仪器校准

5.2.1 各种仪器校准和分析工作均应在仪器运转达到稳定时进行。

5.2.2 用 PFK(或其他已知准确质量的参考物)校准质谱仪的质量标尺,使在 m/z 35~ m/z 250 范围内的质量偏差不超过 ± 0.2 amu。

5.2.3 用正十六烷校准质谱裂解模型,使 $\Sigma 69/\Sigma 71$ 比值在 0.18 ± 0.03 , m/z 127 与 m/z 226 的峰高比在 1.4 ± 0.1 。

5.3 质谱分析

5.3.1 检查质谱计各部分的工作状态,确定在 6.1 和 6.2 规定的分析条件下运行且是稳定的。

5.3.2 使用微量注射器或者恒量移液管注入 $1\ \mu\text{L}\sim 3\ \mu\text{L}$ 的样品。

5.3.3 启动质谱扫描得到质谱图。

6 结果计算

6.1 提取以下质荷比的峰强(或峰高): m/z 41, 43, 55, 57, 67, 68, 69, 71, 77, 78, 79, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 91, 92, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 103, 104, 105, 106, 112, 113, 114, 117, 118, 119, 120, 126, 127, 128, 131, 132, 133, 134, 140, 141, 142, 145, 146, 147, 148, 154, 155, 156, 160, 162, 168, 169, 170。

6.2 特征质量系列的峰强(或峰高):

6.2.1 $\Sigma 43(\text{链烷烃}) = 43 + 57 + 71 + 85 + 99$ 。

6.2.2 $\Sigma 41(\text{单环烷烃}) = 41 + 55 + 69 + 83 + 97$ 。

6.2.3 $\Sigma 67(\text{双环烷烃}) = 67 + 68 + 81 + 82 + 95 + 96$ 。

6.2.4 $\Sigma 77(\text{烷基苯}) = 77 + 78 + 79 + 91 + 92 + 105 + 106 + 119 + 120 + 133 + 134 + 147 + 148 + 161 + 162$ 。

6.2.5 $\Sigma 103(\text{茚满或者四氢化萘}) = 103 + 104 + 117 + 118 + 131 + 132 + 145 + 146 + 159 + 160$ 。

6.2.6 $\Sigma 128(\text{萘}) = 128 + 141 + 142 + 155 + 156$ 。

6.2.7 $T(\text{总离子强度}) = \Sigma 41 + \Sigma 67 + \Sigma 77 + \Sigma 103 + \Sigma 128$ 。

6.3 根据质谱数据计算碳数:

6.3.1 计算烷基苯近似碳数:

6.3.1.1 计算 m/z 92, 106, 120, 134, 148 和 162 单同位素峰:

单同位素 $92 = 92^+ - 0.076\ 9(91^+)$;

单同位素 m/z 106 $= 106^+ - 0.088\ 0(105^+)$;

单同位素 m/z 120 $= 120^+ - 0.099\ 1(119^+)$;

单同位素 m/z 134 $= 134^+ - 0.110\ 2(133^+)$;

单同位素 m/z 148 $= 148^+ - 0.121\ 2(147^+)$;

单同位素 m/z 162 $= 162^+ - 0.132\ 3(161^+)$ 。

6.3.1.2 把 78 组分混合物及单同位素的峰强度转化为摩尔单位:

多组分 78×1.0 ;

单同位素 92×1.7 ;

单同位素 106×2.2 ;

单同位素 120×2.4 ;

单同位素 134×2.7 ;

单同位素 148×2.8 ;

单同位素 162×2.9 。

6.3.1.3 归一化所有产物以得到 $\text{C}_6\sim\text{C}_{12}$ 烷基苯的相对摩尔组分。根据总计每摩尔组分产物和每摩尔的相对碳原子数可计算近似碳数。此碳数应用于烷基苯、茚满或者四氢化萘和萘等。

6.3.2 计算链烷烃近似碳数:

6.3.2.1 计算 m/z 86, 100, 114, 128, 142, 156, 170 的单同位素峰:

单同位素 m/z 86 $= 86^+ - 0.066\ 8(85^+) + 0.002\ 6(84^+) - 0.014(\text{单同位素 } 92^+) - 0.008(\text{单同位素 } 106^+) - 0.008(\text{单同位素 } 120^+)$;

单同位素 m/z 100 $= 100^+ - 0.077\ 9(99^+) + 0.003\ 4(98^+)$;

单同位素 $m/z114=114^{+}-0.089\ 0(113^{+})+0.004\ 4(112^{+})$;
单同位素 $m/z128=128^{+}-0.100\ 1(127^{+})+0.005\ 5(126^{+})$;
单同位素 $m/z142=142^{+}-0.113(141^{+})+0.006\ 8(140^{+})$;
单同位素 $m/z156=156^{+}-0.122\ 4(155^{+})+0.008\ 1(154^{+})$;
单同位素 $m/z170=170^{+}-0.133\ 5(169^{+})+0.009\ 6(168^{+})$ 。

6.3.2.2 把单同位素的峰强度转化为摩尔单位：

单同位素 86×1.0 ;
单同位素 100×0.92 ;
单同位素 114×1.4 ;
单同位素 128×1.8 ;
单同位素 142×1.9 ;
单同位素 156×2.0 ;
单同位素 170×2.1 。

6.3.2.3 归一化所有得到 C₆~C₁₀ 链烷烃的相对摩尔组成。根据总计每摩尔组分产物和每摩尔的相对碳原子数计算近似碳数。此碳数可以应用于所有链烷烃和环烷烃。

6.4 计算化合物类型——根据样品碳数合理使用表 1,计算每种烃类的体积百分数。根据样品链烷烃和芳烃碳数的不同,这种选择有所不同。例如如果链烷烃碳数是 7.0,烷基苯是 8.0,应该使用碳数为 7 的公式来计算链烷烃和环烷烃的体积分数。而碳数为 8 的公式应该用来计算芳烃。体积分数应该归一化。

当不能得到整数的碳数的时候,应该用 2 个公式计算,结果要加系数。例如,如果链烷烃碳数是 7.4,应该用 7 和 8 碳数的 2 个公式来计算链烷烃和环烷烃。体积分数应该在用碳数为 7 的公式计算结果加上碳数 7 和碳数 8 公式计算结果的差值的 0.4 倍。

表 1 C₆~C₁₀ 逆阵系数

	Σ 71	Σ 69	Σ 109	Σ 149	Σ 189	Σ 229
C ₆						
链烷烃	+0.009 016	-0.001 368	+0.000 257	-0.000 003
一环烷烃	-0.004 471	+0.010 285	-0.002 391	-0.000 002
二环烷烃	+0.000 100	-0.000 258	+0.004 325	+0.000 000
烷基苯	+0.000 017	-0.000 048	-0.000 149	+0.005 117
C ₇						
链烷烃	+0.007 241	-0.000 655	+0.000 105	-0.001 00	-0.000 100	...
一环烷烃	-0.002 542	+0.007 283	-0.001 695	-0.000 051	-0.000 035	...
二环烷烃	+0.000 167	-0.000 523	+0.004 387	+0.000 001	+0.000 003	...
烷基苯	+0.000 010	-0.000 044	-0.000 134	+0.004 576	-0.000 897	...
茚满和萘满	+0.000 000	+0.000 000	-0.000 002	+0.000 000	+0.005 424	...
C ₈						
链烷烃	+0.006 449	-0.000 584	+0.000 090	-0.000 011	-0.000 105	-0.000 082
一环烷烃	-0.001 902	+0.006 132	-0.001 428	-0.000 063	-0.000 029	+0.000 006
二环烷烃	+0.000 128	-0.000 469	+0.004 375	+0.000 001	+0.000 003	-0.000 004
烷基苯	+0.000 007	-0.000 049	-0.000 125	+0.004 375	-0.000 857	-0.000 271
茚满和萘满	+0.000 000	+0.000 002	+0.000 004	-0.000 207	+0.005 465	-0.000 026
萘	+0.000 000	+0.000 000	+0.000 000	+0.000 000	+0.000 000	+0.005 757



表 1 (续)

	Σ 71	Σ 69	Σ 109	Σ 149	Σ 189	Σ 229
C ₉						
链烷烃	+0.006 043	−0.000 673	+0.000 071	−0.000 018	−0.000 095	−0.000 075
一环烷烃	−0.001 933	+0.006 183	−0.001 929	−0.000 130	−0.000 017	+0.000 011
二环烷烃	+0.000 212	−0.000 822	+0.006 809	+0.000 003	+0.000 004	−0.000 006
烷基苯	+0.000 007	−0.000 040	−0.000 261	+0.004 015	−0.000 787	−0.000 248
茚满和萘满	+0.000 001	+0.000 002	+0.000 020	−0.000 361	+0.005 496	−0.000 016
萘	−0.000 090	+0.000 008	+0.000 000	+0.000 000	+0.000 001	+0.005 759
C ₁₀						
链烷烃	+0.005 766	−0.001 562	+0.000 606	+0.000 001	−0.000 025	−0.000 070
一环烷烃	−0.001 897	+0.007 443	−0.003 315	−0.000 270	−0.000 004	+0.000 015
二环烷烃	+0.000 666	−0.002 792	+0.007 592	+0.000 087	−0.000 032	−0.000 009
烷基苯	−0.000 006	+0.000 021	−0.000 201	+0.003 903	−0.001 240	−0.000 238
茚满和萘满	+0.000 002	−0.000 001	+0.000 029	−0.000 709	+0.007 315	−0.000 007
萘	−0.000 120	+0.000 033	−0.000 012	−0.000 006	−0.000 174	+0.005 761

7 精密度



汽油族组成测定的方法精密度见表 2。

表 2 汽油族组分的重复性(*r*)值和再现性(*R*)值 % (体积分数)

族组分含量	重复性(<i>r</i>)值	再现性(<i>R</i>)值
>20	2.5	4.5
5~20	2.0	4.0
1~5	1.0	2.5
<1	0.5	1.2

参 考 文 献

- [1] ASTM D2789-95(2005) Standard Method for Hydrocarbon Types in Low Olefinic Gasoline by Mass Spectrometry.
-

中 华 人 民 共 和 国
国 家 标 准
地质样品有机地球化学分析方法
第 6 部分：汽油族组成测定 质谱法
GB/T 18340.6—2010

*

中国标准出版社出版发行
北京复兴门外三里河北街 16 号
邮政编码：100045

网址 www.spc.net.cn
电话：68523946 68517548

中国标准出版社秦皇岛印刷厂印刷
各地新华书店经销

*

开本 880×1230 1/16 印张 0.75 字数 11 千字
2010 年 12 月第一版 2010 年 12 月第一次印刷

*

书号：155066·1-41041

如有印装差错 由本社发行中心调换
版权专有 侵权必究
举报电话：(010)68533533



GB/T 18340.6—2010