



# 中华人民共和国国家标准

GB/T 18340.3—2010  
代替 GB/T 18340.3—2001

---

## 地质样品有机地球化学分析方法 第3部分：石油重馏分中饱和烃 族组分测定 质谱法

Organic geochemical analysis method for geological samples—  
Part 3: Determination of saturated hydrocarbon group components  
in heavy fraction of oil—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 发布  
中国国家标准化管理委员会

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 3 部分:石油重馏分中饱和烃  
族组分测定 质谱法  
GB/T 18340.3—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](http://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 1 字数 24 千字  
2010 年 12 月第一版 2010 年 12 月第一次印刷

\*

书号: 155066 · 1-41038

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



## 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 3 部分。

本部分参考了美国材料与试验协会标准 ASTM D 2786-91(2006)《瓦斯油饱和烃馏分烃类组成高电离电压质谱测定法》。

本部分代替 GB/T 18340.3—2001《地质样品有机地化测试 重馏分石油饱和烃族组成质谱分析方法》，与 GB/T 18340.3—2001 相比，主要变化如下：

- 标准的名称由《地质样品有机地化测试 重馏分石油饱和烃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 3 部分：石油重馏分中饱和烃族组分测定 质谱法》；
- 增加了警示、警告章节；
- 将原标准第 1 章范围中的沸程范围改为 205 ℃～540 ℃；
- 对原标准进行了结构和内容的调整，并做了适当的文字修改；部分章节参照 ASTM D 2786-91(2006)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：张志荣、张渠、宋晓莹、曹寅。

本部分所代替标准的历次版本发布情况为：GB/T 18340.3—2001。





# 地质样品有机地球化学分析方法

## 第3部分:石油重馏分中饱和烃族组分测定 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 的本部分规定了石油重馏分中饱和烃族组分的质谱分析方法、定量计算和精密度要求。

本部分适用于石油重馏分(沸程范围 205 °C~540 °C)饱和烃馏分中的 7 种饱和烃及 1 种芳香烃族组分的定量分析。样品中不含烯烃,芳烃含量小于 5%。

### 2 原理

原油用柱层析法分离,得到的饱和烃馏分通过直接进样系统气化后进入质谱仪,经离子源电子轰击,得到该饱和烃馏分的混合质量色谱图。将质谱数据中各烃类的特征峰强度加和后与对应的逆阵系数相乘,即可求得饱和烃族组分的相对含量。

### 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。
- 3.4 正己烷:分析纯。
- 3.5 硅胶:层析用。
- 3.6 氧化铝:层析用。

### 4 仪器和设备

- 4.1 质谱仪: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:可程序升温至 125 °C~350 °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  $\mu$ L~10  $\mu$ L)。
- 4.4 层析柱(长:40 cm~60 cm,内经:0.8 cm~1.2 cm)。

### 5 样品制备

称取 30 mg~50 mg 原油样品,用 30 mL 正己烷溶解过夜沉淀沥青质;溶液用 60 °C 水浴浓缩至 1 mL~2 mL,样品转移至装有 4 mg 硅胶和 2 mg 氧化铝的层析柱中,用 20 mL 正己烷分四次淋洗得到饱和烃馏分,饱和烃溶液用 40 °C 浓缩后转移到具塞小口样品瓶中备用。

### 6 分析步骤

#### 6.1 分析条件

- 6.1.1 质量分辨率:不小于 500。

6.1.2 电离方式:EI。

6.1.3 电子轰击能量:70 eV。

6.1.4 电离室温度:250 ℃。

6.1.5 进样器加热温度:125 ℃~300 ℃(50 ℃/min)。

6.1.6 质量扫描方式:全扫描。

6.1.7 质量扫描范围:60 amu~460 amu。

6.1.8 扫描速度:500 amu/s。

6.2 仪器校准

6.2.1 各种仪器校准和分析工作均应在仪器运转稳定时进行。

6.2.2 用 PFK(FC-43 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  $m/z60 \sim m/z460$  范围内的质量偏差不超过  $\pm 0.2$  amu。

6.2.3 用正十六烷校准质谱裂解模型,使  $\sum 69/\sum 71$  比值在  $0.18 \pm 0.03$ ,  $m/z127$  与  $m/z226$  的峰高比在  $1.4 \pm 0.1$ 。

这里:  $\sum 69 = m/z69 + m/z83 + m/z97 + m/z111 + m/z125 + m/z139$

$\sum 71 = m/z71 + m/z85 + m/z99 + m/z113$ 。

6.3 质谱分析

6.3.1 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。

6.3.2 用微量注射器或者恒体积移液器吸取一定量的经二氯甲烷稀释的饱和烃样品注入进样系统。

6.3.3 启动质谱扫描并采集数据。

7 结果计算

7.1 提取下面各系列的质量数峰强,并对所有相关质量峰前面相邻的两个质量峰进行重同位素校正:

a) 链烷烃  $\sum 71 = 71 + 85 + 99 + 113$ ;

b) 单环烷烃  $\sum 69 = 69 + 83 + 97 + 111 + 125 + 139$ ;

c) 双环烷烃  $\sum 109 = 109 + 123 + 137 + 151 + 165 + 179 + 193$ ;

d) 三环烷烃  $\sum 149 = 149 + 163 + 177 + 191 + 205 + 219 + 233 + 247$ ;

e) 四环烷烃  $\sum 189 = 189 + 203 + 217 + 231 + 245 + 259 + 273 + 287 + 301$ ;

f) 五环烷烃  $\sum 229 = 229 + 243 + 257 + 271 + 285 + 299 + 313 + 327 + 341 + 355$ ;

g) 六环烷烃  $\sum 269 = 269 + 283 + 297 + 311 + 325 + 339 + 353 + 367 + 381 + 395 + 409$ ;

h) 单环芳烃  $\sum 91 = 91 + 105 + 117 + 119 + 129 + 131 + 133 + 143 + 145 + 147 + 157 + 159 + 171$ 。

7.2 对上述所列特征质量系列质谱峰强度进行加和。

7.3 选取合适的逆阵系数。

a) 用正构烷烃系列谱峰最大谱峰的碳数作为平均碳数;

b) 公式(1)可用来确定使用正构逆阵系数还是异构逆阵系数:

$$r = (ab) / [(ab) + (cd)] \quad \dots\dots\dots (1)$$

式中:

$a$ ——正构烷烃的相对灵敏度因子(从表 1 中查出);

$b$ ——扣除重同位素贡献后的平均正构烷烃谱峰(相当于正构烷烃的分子量);

$c$ ——异构烷烃的相对灵敏度因子,从表 1 中查出;

$d$ ——比所选最大正构烷烃谱峰少两个碳数的正构烷烃谱峰的峰强(即最大正构烷烃减去 29 的谱峰的强度);

$r$ ——比值。

- c) 根据平均碳数和  $r$  值,由表 2 中选取合适的逆阵系数。如果  $r \geq 0.50$  时,使用正构烷烃型系数,否则使用异构烷烃构型系数。

表 1 灵敏度因子

平均碳数	正构烷烃	异构烷烃
16	0.347	0.036 4
20	0.606	0.050 5
24	1.250	0.073 5
28	2.439	0.106 1
32	4.000	0.138 0

注:当质谱中的正十六烷的  $m/z127$  与  $m/z226$  比值等于 1.4 的时候,灵敏度系数是有效的。如果达不到这个比例,需要调整仪器的灵敏度。

表 2  $C_{16} \sim C_{32}$  逆阵系数

	$\Sigma 71$	$\Sigma 69$	$\Sigma 109$	$\Sigma 149$	$\Sigma 189$	$\Sigma 229$	$\Sigma 269$	$\Sigma 91$
$C_{16}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.534 4	-0.029 2	-0.006 6	0.021 5	0.029 9	...	...	-0.015 1
单环烷烃	-0.061 0	0.340 3	-0.214 6	-0.11 62	-0.036 2	...	...	-0.011 2
双环烷烃	-0.003 9	0.017 0	0.849 1	-0.696 8	-0.342 0	...	...	-0.004 8
三环烷烃	0.000 0	-0.000 4	+0.011 5	1.722 0	-1.354 5	...	...	0.015 2
四环烷烃	0.000 1	0.000 4	0.003 9	-0.013 8	3.259 4	...	...	-0.048 5
单环芳烃	-0.000 7	-0.002 9	-0.023 7	-0.156 6	-0.349 4	...	...	0.352 1
异构烷烃								
链烷烃	0.654 3	-0.035 8	-0.008 1	0.026 4	0.036 6	...	...	-0.018 5
单环烷烃	-0.086 6	0.341 6	-0.214 3	-0.117 1	-0.037 7	...	...	-0.010 1
双环烷烃	-0.005 3	0.017 2	0.849 2	-0.696 8	-0.342 0	...	...	-0.004 6
三环烷烃	0.000 1	-0.000 4	0.011 5	1.722 0	-1.354 5	...	...	0.015 2
四环烷烃	0.000 0	0.000 4	0.003 9	-0.013 8	3.259 4	...	...	-0.048 5
单环芳烃	0.000 1	-0.002 9	-0.023 7	-0.1565	-0.349 3	...	...	0.352 1
$C_{17}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.524 3	-0.031 1	-0.007 5	0.022 7	0.032 2	...	...	-0.016 3
单环烷烃	-0.066 0	0.340 3	-0.213 0	-0.116 4	-0.038 5	...	...	-0.012 1
双环烷烃	-0.003 8	0.015 4	0.837 5	-0.682 6	-0.331 8	...	...	-0.005 2
三环烷烃	0.000 0	-0.000 4	0.009 5	1.682 4	-1.311 1	...	...	0.016 6
四环烷烃	0.000 1	0.000 4	0.003 9	-0.014 7	3.124 7	...	...	-0.052 7
单环芳烃	-0.000 7	-0.002 7	-0.022 0	-0.151 4	-0.333 1	...	...	0.361 2
异构烷烃								
链烷烃	0.643 5	-0.038 2	-0.009 2	0.027 9	0.039 5	...	...	-0.020 0
单环烷烃	-0.094 2	0.341 8	-0.212 5	-0.117 6	-0.040 3	...	...	-0.011 2
双环烷烃	-0.005 4	0.015 5	0.837 5	-0.682 6	-0.331 9	...	...	-0.005 2

表 2 (续)

	$\Sigma 71$	$\Sigma 69$	$\Sigma 109$	$\Sigma 149$	$\Sigma 189$	$\Sigma 229$	$\Sigma 269$	$\Sigma 91$
三环烷烃	0.000 0	-0.000 2	0.009 0	1.682 5	-1.311 1	...	...	0.016 6
四环烷烃	0.000 0	0.000 4	0.004 0	-0.014 7	3.124 7	...	...	-0.052 7
单环芳烃	0.000 0	-0.002 7	-0.022 0	-0.151 4	-0.333 1	...	...	0.361 2
$C_{18}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.517 5	-0.033 8	-0.008 5	0.023 4	0.034 4	...	...	-0.017 8
单环烷烃	-0.072 0	0.340 4	-0.209 1	-0.118 3	-0.040 4	...	...	-0.013 6
双环烷烃	-0.003 9	0.013 8	0.818 3	-0.662 6	-0.321 3	...	...	-0.005 7
三环烷烃	0.000 0	-0.000 3	0.006 2	1.642 6	-1.278 4	...	...	0.017 9
四环烷烃	0.000 1	0.000 4	0.004 0	-0.015 8	3.015 8	...	...	-0.056 7
单环芳烃	-0.000 7	-0.002 5	-0.020 6	-0.144 5	-0.301 0	...	...	0.367 7
异构烷烃								
链烷烃	0.633 5	-0.041 4	-0.010 3	0.028 6	0.042 2	...	...	-0.021 5
单环烷烃	-0.101 6	0.342 4	-0.208 6	-0.119 7	-0.042 4	...	...	-0.012 6
双环烷烃	-0.005 4	0.014 0	0.818 4	-0.662 6	-0.321 4	...	...	-0.005 6
三环烷烃	0.000 0	-0.000 3	0.006 2	1.642 6	-1.278 4	...	...	0.017 9
四环烷烃	0.000 0	0.000 4	0.004 0	-0.015 8	3.015 8	...	...	-0.056 6
单环芳烃	-0.000 2	-0.002 5	-0.020 6	-0.144 5	-0.320 0	...	...	0.367 7
$C_{19}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.510 9	-0.036 3	-0.009 4	0.020 2	0.040 4	...	...	-0.019 0
单环烷烃	-0.077 3	0.339 6	-0.208 0	-0.116 1	-0.041 3	...	...	-0.015 4
双环烷烃	-0.003 8	0.011 8	0.807 6	-0.649 1	-0.318 4	...	...	-0.006 1
三环烷烃	0.000 0	-0.000 3	0.003 2	1.606 8	-1.243 2	...	...	0.019 3
四环烷烃	0.000 1	0.000 4	0.004 1	-0.017 9	2.919 2	...	...	-0.061 4
单环芳烃	-0.000 8	-0.002 3	-0.019 2	-0.136 9	-0.298 0	...	...	0.376 4
异构烷烃								
链烷烃	0.623 9	-0.044 3	-0.011 5	0.024 6	0.049 4	...	...	-0.023 2
单环烷烃	-0.107 9	0.341 8	-0.207 3	-0.117 3	-0.043 8	...	...	-0.014 2
双环烷烃	-0.005 3	0.012 0	0.807 7	-0.649 3	-0.318 4	...	...	-0.006 1
三环烷烃	0.000 0	-0.000 2	0.003 0	1.606 8	-1.243 2	...	...	0.019 3
四环烷烃	0.000 1	0.000 4	0.004 1	-0.017 9	2.919 2	...	...	-0.061 4
单环芳烃	-0.000 4	-0.002 3	-0.019 2	-0.136 9	-0.298 0	...	...	0.376 4
$C_{20}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.509 9	-0.039 7	0.010 5	0.018 3	0.045 8	0.041 2	...	-0.022 3
单环烷烃	-0.083 5	0.340 3	-0.206 6	-0.113 7	-0.041 8	0.037 5	...	-0.019 0
双环烷烃	-0.003 6	0.009 7	0.797 2	-0.641 2	-0.310 6	-0.154 2	...	0.000 0
三环烷烃	0.000 0	-0.000 3	-0.001 4	1.563 4	-1.217 9	-0.594 4	...	0.046 8
四环烷烃	0.000 0	0.000 0	0.001 2	-0.040 9	2.769 0	-1.465 6	...	-0.002 9

表 2 (续)

	$\Sigma 71$	$\Sigma 69$	$\Sigma 109$	$\Sigma 149$	$\Sigma 189$	$\Sigma 229$	$\Sigma 269$	$\Sigma 91$
五环环烷	0.000 4	0.001	0.008 5	0.063 0	0.099 6	4.205 5	...	-0.183 1
单环芳烃	-0.000 8	-0.002 2	-0.018 8	-0.138 2	-0.291 0	-0.452 1	...	0.404 9
异构烷烃								
链烷烃	0.618 8	-0.048 1	-0.012 7	0.022 2	0.055 5	0.049 9	...	-0.027 0
单环烷烃	-0.115 1	0.342 7	-0.205 9	-0.114 9	-0.044 6	0.035 0	...	-0.017 6
双环烷烃	-0.005 1	0.009 8	0.797 2	-0.641 2	-0.310 7	-0.154 4	...	0.000 1
三环烷烃	0.000 1	-0.000 3	-0.001 4	1.563 4	-1.217 9	-0.594 4	...	0.046 8
四环烷烃	0.000 0	0.000 0	0.001 2	-0.040 9	2.769 0	-1.465 6	...	-0.002 9
五环环烷	0.000 3	0.001 0	0.008 5	0.063 0	0.099 6	4.205 4	...	-0.183 1
单环芳烃	-0.000 7	-0.002 2	-0.018 8	-0.138 2	-0.291 0	-0.452 1	...	0.404 9
$C_{21}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.507 7	-0.043 1	-0.011 9	0.019 5	0.045 4	0.044 1	...	-0.024 2
单环烷烃	-0.088 8	0.339 3	-0.202 5	-0.114 7	-0.042 9	0.033 4	...	-0.021 2
双环烷烃	-0.003 3	0.007 4	0.780 8	-0.617 6	-0.308	-0.147 0	...	-0.000 3
三环烷烃	-0.000 1	-0.000 2	-0.003 7	1.519 2	-1.169 8	-0.559 6	...	0.048 3
四环烷烃	0.000 0	0.000 0	0.001 4	-0.041 6	2.671 5	-1.424 3	...	-0.005 6
五环环烷	0.000 4	0.000 9	0.007 8	0.059 2	0.089 8	3.978 1	...	-0.185 1
单环芳烃	-0.000 9	-0.002 0	-0.017 3	-0.130 8	-0.271 7	-0.417 2	...	-0.412 3
异构烷烃								
链烷烃	0.614 0	-0.052 2	-0.014 4	0.023 5	0.055 0	0.053 3	...	-0.029 2
单环烷烃	-0.121 6	0.342 1	-0.201 6	-0.115 8	-0.045 8	0.030 5	...	-0.019 6
双环烷烃	-0.004 8	0.007 6	0.781 1	-0.617 6	-0.308 2	-0.147 2	...	-0.000 1
三环烷烃	-0.000 1	-0.000 2	-0.003 7	1.519 2	-1.169 8	-0.559 6	...	0.048 3
四环烷烃	0.000 0	0.000 0	0.001 4	-0.041 6	2.671 5	-1.423 2	...	-0.005 6
五环环烷	0.000 5	0.000 9	0.007 8	0.059 2	0.089 3	3.978 1	...	-0.185 1
单环芳烃	-0.001 0	-0.002 0	-0.017 3	-0.130 8	-0.271 7	-0.417 2	...	0.412 3
$C_{22}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.508 4	-0.047 4	-0.013 3	0.021 0	0.043 5	0.048 4	...	-0.026 3
单环烷烃	-0.094 6	0.339 7	-0.199 5	-0.114 5	-0.044 0	0.030 7	...	-0.024 0
双环烷烃	-0.003 0	0.005 0	0.766 1	-0.601 6	-0.301 6	-0.144 4	...	-0.000 5
三环烷烃	-0.000 2	0.000 0	-0.007 2	1.477 8	-1.121 4	-0.555 9	...	0.051 7
四环烷烃	0.000 0	0.000 0	0.001 8	-0.041 1	2.562 9	-1.317 9	...	-0.011 7
五环环烷	0.000 4	0.000 8	0.007 2	0.056 4	0.082 9	3.761 9	...	-0.189 0
单环芳烃	-0.001 0	-0.001 8	-0.016 1	-0.125 2	-0.257 4	-0.389 7	...	0.423 7
异构烷烃								
链烷烃	0.609 6	0.056 8	-0.016 0	0.025 2	0.052 1	0.058 0	...	-0.031 6
单环烷烃	-0.126 7	0.342 7	-0.198 6	-0.115 8	-0.046 8	0.027 7	...	-0.022 3
双环烷烃	-0.004 4	0.005 3	0.766 2	-0.601 6	-0.301 8	-0.144 5	...	-0.000 4

表 2 (续)

	$\Sigma 71$	$\Sigma 69$	$\Sigma 109$	$\Sigma 149$	$\Sigma 189$	$\Sigma 229$	$\Sigma 269$	$\Sigma 91$
三环烷烃	-0.000 3	0.000 0	-0.007 2	1.477 8	-1.121 3	-0.555 9	...	0.051 7
四环烷烃	0.000 1	0.000 0	0.001 8	-0.041 1	2.562 9	-1.317 9	...	-0.017 7
五环烷烃	0.000 7	0.000 8	0.007 2	0.056 4	0.082 9	3.761 9	...	-0.189 0
单环芳烃	-0.001 5	-0.001 8	-0.016 1	-0.125 3	-0.257 4	-0.389 7	...	0.423 8
$C_{23}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.509 3	-0.051 8	-0.015 3	0.022 6	0.040 7	0.052 1	...	-0.028 5
单环烷烃	-0.100 3	0.340 4	-0.197 6	-0.114 2	-0.044 6	0.028 2	...	-0.026 9
双环烷烃	-0.002 4	0.002 1	0.758 0	-0.588 0	-0.301 1	-0.140 5	...	-0.000 8
三环烷烃	-0.000 2	0.000 1	-0.010 3	1.439 3	-1.083 9	-0.541 4	...	0.054 2
四环烷烃	0.000 1	0.000 0	0.002 0	-0.042 5	2.480 6	-1.284 0	...	-0.014 9
五环烷烃	0.000 5	0.000 7	0.006 6	0.053 9	0.075 0	3.601 5	...	-0.192 7
单环芳烃	-0.001 1	-0.001 7	-0.014 8	-0.118 9	-0.240 9	-0.356 0	...	0.430 0
异构烷烃								
链烷烃	0.609 3	-0.061 9	-0.018 3	0.027 0	0.048 7	0.062 4	...	-0.034 1
单环烷烃	-0.133 8	0.343 9	-0.196 5	-0.115 6	-0.047 3	0.024 8	...	-0.025 0
双环烷烃	-0.003 8	0.002 3	0.758 0	-0.588 2	-0.301 3	-0.140 6	...	-0.000 8
三环烷烃	-0.000 4	0.000 1	-0.010 3	1.439 3	-1.083 9	-0.541 5	...	0.054 2
四环烷烃	0.000 1	0.000 0	0.002 0	-0.042 6	2.480 6	-1.284 0	...	-0.014 9
五环烷烃	0.000 9	0.000 7	0.006 6	0.053 9	0.075 0	3.601 6	...	-0.192 7
单环芳烃	-0.019 0	-0.001 6	-0.014 8	-0.118 9	-0.241 0	-0.356 1	...	0.430 0
$C_{24}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.510 5	-0.056 6	-0.017 4	0.024 9	0.043 4	0.052 8	0.037 2	-0.032 4
单环烷烃	-0.106 1	0.341 4	-0.196 0	-0.112 8	-0.042 0	0.028 8	0.076 1	-0.033 7
双环烷烃	-0.001 6	-0.001 1	0.750 5	-0.580 7	-0.290 8	-0.141 8	0.004 7	-0.001 1
三环烷烃	-0.000 3	0.000 4	-0.014 6	1.409 8	-1.056 4	-0.537 1	-0.298 7	0.070 6
四环烷烃	0.000 0	-0.000 1	0.001 4	-0.050 6	2.367 3	-1.232 8	-0.656 0	0.008 5
五环烷烃	0.000 4	0.000 5	0.004 8	0.0407	0.045 7	3.382 7	-0.937 6	-0.154 4
六环烷烃	0.000 5	0.000 6	0.005 5	0.045 7	0.091 1	0.113 8	3.980 9	-0.176 3
单环芳烃	-0.001 2	-0.001 5	-0.014 3	-0.119 0	-0.236 9	-0.338 8	-0.413 6	0.459 4
异构烷烃								
链烷烃	0.609 4	-0.067 5	-0.020 8	0.029 7	0.051 8	0.063 1	0.044 4	-0.039 7
单环烷烃	-0.140 3	0.345 1	-0.194 8	-0.114 5	-0.044 9	0.025 3	0.073 6	-0.031 5
双环烷烃	-0.003 2	-0.000 9	0.750 6	-0.580 8	-0.291 0	-0.142 0	0.004 5	-0.001 0
三环烷烃	-0.000 6	0.000 4	-0.014 5	1.409 8	-1.056 4	-0.535 2	-0.298 6	0.070 6
四环烷烃	0.000 0	-0.000 1	0.001 4	-0.050 6	2.367 3	-1.232 8	-0.656 0	0.008 5
五环烷烃	0.000 9	0.000 5	0.004 8	0.040 7	0.045 7	3.382 8	-0.937 6	-0.154 4
六环烷烃	0.001 0	0.000 5	0.005 5	0.045 7	0.091 1	0.113 9	3.980 9	-0.176 4
单环芳烃	-0.002 6	-0.001 4	-0.014 2	-0.119 0	-0.237 0	-0.338 9	-0.413 7	0.459 5

表 2 (续)

	$\Sigma 71$	$\Sigma 69$	$\Sigma 109$	$\Sigma 149$	$\Sigma 189$	$\Sigma 229$	$\Sigma 269$	$\Sigma 91$
$C_{25}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.513 2	-0.062 1	-0.019 6	0.026 2	0.047 1	0.049 3	0.038 3	-0.034 4
单环烷烃	-0.111 5	0.342 5	-0.193 0	-0.113 3	-0.043 5	0.030 2	0.075 3	-0.038 0
双环烷烃	-0.000 9	-0.004 0	0.737 8	-0.562 3	-0.282 1	-0.145 0	-0.003 2	-0.000 5
三环烷烃	-0.000 5	0.000 6	-0.018 5	1.376 3	-1.022 9	-0.522 9	-0.285 8	0.074 1
四环烷烃	0.000 0	-0.000 1	0.001 9	-0.052 0	2.283 4	-1.177 7	-0.621 3	0.003 4
五环烷烃	0.000 5	0.000 5	0.004 3	0.038 9	0.040 9	3.234 7	-0.891 5	-0.157 7
六环烷烃	0.000 5	0.000 5	0.004 8	0.042 4	0.083 6	0.130 4	3.717 4	-0.175 3
单环芳烃	-0.001 3	-0.001 4	-0.012 8	-0.112 5	-0.221 3	-0.315 7	-0.373 8	0.465 2
异构烷烃								
链烷烃	0.609 6	-0.073 8	-0.023 3	0.031 1	0.055 9	0.058 6	0.045 5	-0.040 9
单环烷烃	-0.144 9	0.346 5	-0.191 8	-0.115 0	-0.046 1	0.025 6	0.072 7	-0.035 8
双环烷烃	-0.002 3	-0.003 9	0.737 8	-0.562 4	-0.282 1	-0.145 2	-0.003 2	-0.000 5
三环烷烃	-0.000 8	0.000 7	-0.018 5	1.376 2	-1.022 9	-0.522 9	-0.285 7	0.074 1
四环烷烃	0.000 0	-0.000 1	0.001 9	-0.052 0	2.283 4	-1.177 7	-0.621 3	0.003 4
五环烷烃	0.001 1	0.000 4	0.004 3	0.038 9	0.041 0	3.234 7	-0.891 4	-0.157 8
六环烷烃	0.001 2	0.000 4	0.004 8	0.042 4	0.083 6	0.103 4	3.717 5	-0.175 4
单环芳烃	-0.003 2	-0.001 2	-0.012 7	-0.112 6	-0.221 5	-0.315 9	-0.374 0	0.465 3
$C_{26}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.516 1	-0.067 9	-0.022 5	0.028 2	0.050 0	0.049 6	0.038 8	-0.036 9
单环烷烃	-0.116 6	0.342 9	-0.191 2	-0.114 6	-0.044 5	0.029 1	0.076 4	-0.042 5
双环烷烃	0.000 3	-0.008 0	0.731 3	-0.548 6	-0.277 6	-0.139 1	-0.009 6	-0.000 6
三环烷烃	-0.000 5	0.001 0	-0.022 5	1.344 1	-0.998 1	-0.498 6	-0.278 6	0.077 9
四环烷烃	0.000 0	-0.000 1	0.002 3	-0.052 6	2.214 5	-1.132 3	-0.591 6	-0.001 4
五环烷烃	0.000 5	0.000 4	0.003 9	0.037 2	0.035 5	3.060 5	-0.843 3	-0.160 3
六环烷烃	0.000 5	0.000 5	0.004 4	0.040 2	0.077 6	0.091 4	3.489 3	-0.177 3
单环芳烃	-0.001 4	-0.001 2	-0.011 8	-0.107 9	-0.208 0	-0.288 3	-0.345 0	0.476 2
异构烷烃								
链烷烃	0.610 6	-0.080 4	-0.026 7	0.033 4	0.059 2	0.058 6	0.045 9	-0.043 6
单环烷烃	-0.151 3	0.347 5	-0.189 7	-0.116 5	-0.047 9	0.025 4	0.070 0	-0.040 1
双环烷烃	-0.001 2	-0.007 8	0.731 5	-0.548 7	-0.277 8	-0.139 3	-0.010 0	-0.000 2
三环烷烃	-0.001 1	0.001 1	-0.022 5	1.344 1	-0.998 1	-0.498 6	-0.278 6	0.077 9
四环烷烃	0.000 1	-0.000 1	0.002 3	-0.052 6	2.214 5	-1.132 3	-0.591 6	-0.001 4
五环烷烃	0.001 3	0.000 3	0.003 9	0.037 2	0.035 6	3.060 6	-0.843 3	-0.160 4
六环烷烃	0.001 5	0.000 3	0.004 4	0.040 2	0.077 7	0.091 5	3.489 4	-0.177 4
单环芳烃	-0.004 0	-0.000 9	-0.011 7	-0.108 1	-0.208 3	-0.288 5	-0.345 2	0.476 3
$C_{27}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.520 7	-0.074 2	-0.025 9	0.030 1	0.054 3	0.050 4	0.037 4	-0.039 3
单环烷烃	-0.211 9	0.343 0	-0.187 2	-0.113 5	-0.046 1	0.027 6	0.069 6	-0.047 7
双环烷烃	0.001 4	-0.011 8	0.720 3	-0.534 7	-0.275 4	-0.141 8	-0.015 8	0.000 0
三环烷烃	-0.000 8	0.001 4	-0.027 0	1.314 4	-0.967 6	-0.478 9	-0.265 0	0.081 0

表 2 (续)

	$\Sigma 71$	$\Sigma 69$	$\Sigma 109$	$\Sigma 149$	$\Sigma 189$	$\Sigma 229$	$\Sigma 269$	$\Sigma 91$
四环烷烃	0.000 1	-0.000 1	0.002 7	-0.053 2	2.137 5	-1.076 3	-0.566 6	-0.008 3
五环环烷	0.000 5	0.000 4	0.003 5	0.035 5	0.031 0	2.905 9	-0.784 2	-0.162 9
六环环烷	0.000 6	0.000 4	0.003 9	0.037 3	0.070 4	0.081 4	3.253 3	-0.175 6
单环芳烃	-0.001 5	-0.001 1	-0.010 6	-0.102 7	-0.193 3	-0.267 8	-0.312 5	0.483 4
异构烷烃								
链烷烃	0.611 7	-0.087 2	-0.030 5	0.035	40.063 7	0.059 2	0.043 9	-0.046 2
单环烷烃	-0.156 2	0.347 9	-0.185 5	-0.115 5	-0.049 7	0.023 8	0.067 2	-0.045 0
双环烷烃	0.000 0	-0.011 6	0.720 4	-0.534 8	-0.275 6	-0.142 0	-0.016 0	0.000 1
三环烷烃	-0.001 4	0.001 5	-0.027 0	1.314 4	-0.967 7	-0.478 9	-0.265 0	0.081 1
四环烷烃	0.000 1	-0.000 2	0.002 7	-0.053 2	2.137 5	-1.076 3	-0.566 6	-0.008 3
五环环烷	0.001 6	0.000 2	0.003 5	0.035 6	0.030 0	2.906 0	-0.784 2	-0.163 0
六环环烷	0.001 7	0.000 2	0.003 8	0.037 4	0.070 6	0.081 5	3.253 4	-0.175 7
单环芳烃	-0.004 8	-0.000 6	-0.010 5	-0.102 8	-0.1937	-0.268 1	-0.312 7	0.483 6
$C_{28}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.524 5	-0.081 5	-0.029 6	0.033 2	0.057 9	0.052 5	0.034 6	-0.041 9
单环烷烃	-0.127 5	0.344 8	-0.184 8	-0.114 0	-0.046 6	0.025 3	0.069 8	-0.054 5
双环烷烃	0.003 2	-0.016 5	0.714 8	-0.523 0	-0.267 0	-0.139 6	-0.020 8	0.000 3
三环烷烃	-0.001 0	0.001 9	-0.030 4	1.277 1	-0.928 2	-0.472 4	-0.258 2	0.085 5
四环烷烃	0.000 1	-0.000 2	0.003 1	-0.053 8	2.056 8	-1.024 3	-0.543 0	-0.014 2
五环环烷	0.000 6	0.000 3	0.003 2	0.034 0	0.026 3	2.771 6	-0.762 2	-0.166 6
六环环烷	0.000 6	0.000 3	0.003 5	0.035 5	0.066 7	0.072 5	3.094 9	-0.179 1
单环芳烃	-0.001 7	-0.000 9	-0.009 7	-0.098 1	-0.183 7	-0.244 4	-0.289 2	0.494 5
异构烷烃								
链烷烃	0.6174	-0.095 9	-0.034 9	0.039 0	0.068 2	0.061 8	0.040 8	-0.049 3
单环烷烃	-0.162 5	0.350 2	-0.182 7	-0.116 3	-0.050 4	0.021 7	0.067 6	-0.501 6
双环烷烃	0.001 6	-0.016 2	0.714 9	-0.523 2	-0.267 1	-0.139 6	-0.020 9	0.000 4
三环烷烃	-0.001 8	0.002 1	-0.030 4	1.277 1	-0.028 3	-0.472 5	-0.258 3	0.085 5
四环烷烃	0.000 2	-0.000 2	0.003 1	-0.053 8	2.056 8	-1.024 3	-0.543 0	-0.014 2
五环环烷	0.002 0	0.000 1	0.003 1	0.034 1	0.026 4	2.771 7	-0.762 1	-0.166 7
六环环烷	0.002 1	0.000 1	0.003 4	0.035 6	0.066 9	0.072 6	3.095 0	-0.179 2
单环芳烃	-0.005 8	-0.000 3	0.009 4	-0.098 3	-0.184 1	-0.244 8	-0.289 5	0.494 8
$C_{29}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.530 5	-0.090 2	-0.033 7	0.035 3	0.063 9	0.056 5	0.034 7	-0.044 1
单环烷烃	-0.134 2	0.348 2	-0.182 5	-0.114 3	-0.049 5	0.022 5	0.066 8	-0.061 3
双环烷烃	0.004 9	-0.021 4	0.705 4	-0.508 9	-0.262 8	-0.137 1	-0.026 1	0.000 7
三环烷烃	-0.001 3	0.002 5	-0.035 6	1.252 0	-0.899 1	-0.461 9	-0.249 2	0.090 0
四环烷烃	0.000 2	-0.000 2	0.003 7	-0.055 8	1.984 9	-0.977 3	-0.5067	-0.023 7
五环环烷	0.000 6	0.000 3	0.002 7	0.032 2	0.021 6	2.644 5	-0.7174	-0.168 5

表 2 (续)

	$\Sigma 71$	$\Sigma 69$	$\Sigma 109$	$\Sigma 149$	$\Sigma 189$	$\Sigma 229$	$\Sigma 269$	$\Sigma 91$
六环环烷	0.000 6	0.000 3	0.002 9	0.032 7	0.061 2	0.065 6	2.8747	-0.177 3
单环芳烃	-0.001 8	-0.000 8	-0.008 6	-0.092 5	-0.172 4	-0.230 0	-0.260 3	0.501 6
异构烷烃								
链烷烃	0.620 2	-0.105 5	-0.039 4	0.041 3	0.074 7	0.066 1	0.040 6	-0.051 5
单环烷烃	-0.168 4	0.354 0	-0.180 3	-0.116 6	-0.053 6	0.018 9	0.064 4	-0.058 4
双环烷烃	0.003 3	-0.021 1	0.705 4	-0.509 1	-0.263 1	-0.137 2	-0.026 3	0.000 8
三环烷烃	-0.002 3	0.002 7	-0.035 6	1.252 0	-0.899 2	-0.462 0	-0.249 4	0.090 1
四环烷烃	0.000 4	-0.000 3	0.003 6	-0.055 7	1.985 0	-0.977 3	-0.506 7	-0.023 7
五环环烷	0.002 3	0.000 0	0.002 7	0.032 3	0.021 8	2.644 7	-0.717 2	-0.168 6
六环环烷	0.002 4	0.000 0	0.003 0	0.032 8	0.061 4	0.065 8	2.874 8	-0.177 5
单环芳烃	-0.006 8	0.000 1	-0.007 9	-0.092 8	-0.173 0	-0.230 5	-0.260 6	0.502 0
$C_{30}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.535 2	-0.098 9	-0.038 8	0.038 5	0.070 7	0.060 0	0.035 9	-0.046 8
单环烷烃	-0.139 7	0.350 8	-0.180 1	-0.112 5	-0.052 6	0.019 6	0.064 7	-0.068 7
双环烷烃	0.007 1	-0.027 2	0.701 4	-0.501 0	-0.256 2	-0.135 5	-0.031 7	0.001 2
三环烷烃	-0.001 5	0.003 3	-0.040 8	1.227 6	-0.868 9	-0.446 4	-0.234 3	0.094 2
四环烷烃	0.000 2	-0.000 3	0.004 2	-0.056 0	1.916 7	-0.935 7	-0.485 9	-0.032 7
五环环烷	0.000 7	0.000 2	0.002 4	0.030 1	0.017 6	2.513 9	-0.684 2	-0.171 2
六环环烷	0.000 7	0.000 2	0.002 7	0.030 0	0.057 0	0.056 3	2.698 0	-0.178 1
单环芳烃	-0.002 0	-0.000 6	-0.007 9	-0.086 4	-0.163 2	-0.208 0	-0.235 9	0.512 1
异构烷烃								
链烷烃	0.623 2	-0.115 1	-0.045 2	0.044 5	0.082 3	0.069 9	0.041 7	-0.054 5
单环烷烃	-0.173 5	0.357 0	-0.177 6	-0.114 8	-0.057 0	0.015 8	0.062 4	-0.065 7
双环烷烃	0.005 5	-0.026 8	0.701 6	-0.501 0	-0.256 5	-0.135 6	-0.031 8	0.002 1
三环烷烃	-0.002 7	0.003 6	-0.040 7	1.227 5	-0.869 1	-0.446 6	-0.234 4	0.094 4
四环烷烃	0.000 6	-0.000 4	0.004 1	-0.056 0	1.916 8	-0.945 6	-0.485 9	-0.032 7
五环环烷	0.002 7	-0.000 2	0.002 3	0.030 2	0.017 8	2.514 2	-0.684 1	-0.171 4
六环环烷	0.002 8	-0.000 2	0.002 6	0.030 2	0.057 3	0.056 6	2.698 1	-0.178 2
单环芳烃	-0.007 9	0.000 5	-0.007 0	-0.086 8	-0.164 0	-0.208 6	-0.236 3	0.512 7
$C_{31}$								
正构烷烃								
链烷烃	0.543 4	-0.108 6	-0.044 6	0.041 1	0.074 9	0.063 7	0.037 5	-0.048 8
单环烷烃	-0.146 1	0.352 9	-0.175 7	-0.113 4	-0.052 9	0.017 8	0.060 1	-0.078 4
双环烷烃	0.009 7	-0.033 4	0.693 7	-0.489 5	-0.246 3	-0.137 1	-0.034 8	0.003 0
三环烷烃	-0.002 0	0.004 4	-0.047 1	1.205 5	-0.844 0	-0.431 6	-0.225 8	0.099 0
四环烷烃	0.000 3	-0.000 4	0.004 8	-0.058 3	1.851 2	-0.891 2	-0.464 5	-0.041 3
五环环烷	0.000 7	0.000 2	0.002 2	0.029 2	0.014 4	2.384 8	-0.646 7	-0.174 1
六环环烷	0.000 7	0.000 2	0.002 3	0.028 7	0.053 5	0.049 6	2.529 7	-0.179 4
单环芳烃	-0.002 1	-0.000 5	-0.006 8	-0.083 7	-0.155 0	-0.189 3	-0.215 5	0.522 3

表 2 (续)

	$\Sigma 71$	$\Sigma 69$	$\Sigma 109$	$\Sigma 149$	$\Sigma 189$	$\Sigma 229$	$\Sigma 269$	$\Sigma 91$
异构烷烃								
链烷烃	0.628 6	-0.125 6	-0.051 5	0.047 5	0.086 7	0.073 7	0.043 4	-0.056 4
单环烷烃	-0.178 8	0.359 4	-0.173 1	-0.116 0	-0.057 3	0.013 8	0.057 9	-0.075 5
双环烷烃	0.008 1	-0.033 1	0.693 8	-0.489 6	-0.246 4	-0.137 4	-0.037 0	0.003 3
三环烷烃	-0.003 5	0.004 7	-0.047 1	1.205 4	-0.844 2	-0.431 8	-0.226 0	0.099 0
四环烷烃	0.000 9	-0.000 5	0.004 7	-0.058 2	1.851 2	-0.891 2	-0.464 5	-0.041 3
五环烷烃	0.003 1	-0.000 3	0.002 0	0.029 4	0.014 7	2.385 1	-0.646 5	-0.174 3
六环烷烃	0.003 1	-0.000 3	0.002 1	0.028 9	0.053 8	0.049 9	2.529 9	-0.179 6
单环芳烃	-0.009 2	0.001 0	-0.006 2	-0.084 3	-0.155 9	-0.190 1	-0.216 0	0.523 0
C <sub>32</sub>								
正构烷烃								
链烷烃	0.552 4	-0.119 9	-0.052 2	0.045 1	0.083 0	0.069 0	0.039 3	-0.051 3
单环烷烃	-0.152 7	0.356 8	-0.172 4	-0.113 2	-0.056 7	0.014 5	0.057 6	-0.088 6
双环烷烃	0.013 0	-0.040 9	0.690 7	-0.475 5	-0.244 2	-0.133 3	-0.039 0	0.005 0
三环烷烃	-0.002 6	0.005 6	-0.052 3	1.170 3	-0.814 4	-0.418 0	-0.214 2	0.102 7
四环烷烃	0.000 4	-0.000 5	0.005 3	-0.059 4	1.783 2	-0.845 8	-0.442 7	-0.049 4
五环烷烃	0.000 8	0.000 1	0.001 9	0.028 2	0.010 6	2.265 9	-0.601 3	-0.179 0
六环烷烃	0.000 8	0.000 1	0.002 0	0.026 7	0.048 7	0.044 3	2.357 5	-0.178 6
单环芳烃	-0.002 3	-0.000 3	-0.005 8	-0.079 7	-0.144 4	-0.177 4	-0.192 6	0.532 8
异构烷烃								
链烷烃	0.634 9	-0.137 8	-0.060 0	0.051 9	0.095 4	0.079 3	0.045 1	-0.059 0
单环烷烃	-0.184 1	0.363 6	-0.169 4	-0.115 8	-0.061 5	0.010 6	0.055 3	-0.085 6
双环烷烃	0.011 9	-0.040 5	0.690 8	-0.475 6	-0.244 4	-0.133 5	-0.041 4	0.005 1
三环烷烃	-0.004 2	0.006 0	-0.052 1	1.170 2	-0.811 4	-0.418 3	-0.214 4	0.102 9
四环烷烃	0.001 2	-0.000 7	0.005 3	-0.059 4	1.783 3	-0.845 7	-0.442 6	-0.049 5
五环烷烃	0.003 5	-0.000 5	0.001 6	0.028 4	0.011 0	2.266 3	-0.601 1	-0.179 2
六环烷烃	0.003 5	-0.000 5	0.001 8	0.026 9	0.049 1	0.044 7	2.357 7	-0.178 9
单环芳烃	-0.010 5	0.001 5	-0.005 0	-0.080 3	-0.145 7	-0.178 5	-0.193 2	0.533 6

7.4 选择好合适的逆阵系数后,用式(2)计算链烷烃的离子峰强度:

$$a = (b_1 c_1) \pm (b_2 c_2) \pm (b_3 c_3) \pm (b_4 c_4) \pm (b_5 c_5) \pm (b_6 c_6) \pm (b_7 c_7) \pm (b_8 c_8) \dots\dots\dots (2)$$

式中:

$a$ ——链烷烃的离子峰强度;

$b_1 = \Sigma 71$  峰强,  $b_2 = \Sigma 69$  峰强,  $b_3 = \Sigma 109$  峰强,  $b_4 = \Sigma 149$  峰强,  $b_5 = \Sigma 189$  峰强,  $b_6 = \Sigma 229$  峰强,  $b_7 = \Sigma 269$  峰强,  $b_8 = \Sigma 91$  峰强;

$c_1 = \Sigma 71$  逆阵系数,  $c_2 = \Sigma 69$  逆阵系数,  $c_3 = \Sigma 109$  逆阵系数,  $c_4 = \Sigma 149$  逆阵系数,

$c_5 = \Sigma 189$  逆阵系数,  $c_6 = \Sigma 229$  逆阵系数,  $c_7 = \Sigma 269$  逆阵系数,  $b_8 = \Sigma 91$  逆阵系数。

重复上述相应计算,可分别得到单环烷烃、双环烷烃、三环烷烃、四环烷烃、五环烷烃、六环烷烃、单环芳烃的离子峰强度。

7.5 将所有离子峰强度归一化后,得到各烃族的体积分数。

8 精密度

饱和烃族组成测定的方法精密度见表 3。

表 3 饱和烃族组分的重复性(*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	2.0	4.0
5~20	1.5	2.5
1~5	0.8	2.0
<1	0.4	1.0



参 考 文 献

- [1] ASTM D2786-91(2006) Standard Method for Hydrocarbon Types Analysis of GAS-Oil Saturates Fractions by High Ionizing Voltage Mass Spectrometry
  - [2] SY/T 5119—2008 岩石可溶有机物和原油族组分柱层析分析方法
- 



GB/T 18340.3-2010

版权专有 侵权必究

\*

书号:155066 • 1-41038