



# 中华人民共和国国家标准

GB/T 18340.4—2010  
代替 GB/T 18340.4—2001

---

## 地质样品有机地球化学分析方法 第 4 部分：石油重馏分中芳香烃族 组分测定 质谱法

Organic geochemical analysis methods for geological samples—  
Part 4: Determination of aromatic hydrocarbon group component  
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 4 部分:石油重馏分中芳香烃族  
组分测定 质谱法

GB/T 18340.4—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 1.5 字数 39 千字

2010 年 12 月第一版 2010 年 12 月第一次印刷

\*

书号: 155066 · 1-41039

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 4 部分。

本部分参考了美国材料与试验协会标准 ASTM D 3239-91(2006)《瓦斯油中芳烃馏分烃类组成高电离电压质谱测定法》。

本部分代替 GB/T 18340.4—2001《地质样品有机地化测试 重馏分石油芳香烃族组成质谱分析方法》，与 GB/T 18340.4—2001 相比，有如下变动：

- 标准的名称由《地质样品有机地化测试 重馏分石油芳香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 4 部分：石油重馏分中芳香烃族组分测定 质谱法》；
- 增加了警示、警告；
- 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 3239-91 (2006)的相关章节作了较大的改变。

本部分的附录 A 为资料性附录。

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：张渠、宋晓莹、张志荣、钱志浩。

本部分所代替标准的历次版本发布情况为：

- GB/T 18340.4—2001。



地质样品有机地球化学分析方法  
第 4 部分：石油重馏分中芳香烃族  
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芳香烃族组成的质谱分析方法、定量计算过程和分析质量要求。

本部分适用于石油重馏分(沸程范围 205 ℃～540 ℃)芳香烃馏分中的 18 个芳香烃及 3 种芳香噻吩族组成的定量分析。样品中应不含烯烃，总硫量应低于总重量的 1%，非芳烃化合物的含量小于 5%。

2 原理

原油用柱层析法分离，得到的芳香烃馏分通过直接进样系统进入质谱仪，经电子轰击，得到该芳香烃馏分的混合质量色谱图。将质谱数据中的 I～Ⅶ类芳烃的特征峰组强度加和，每一特征质量峰组包括多同位素分子离子峰系列和单同位素分子离子峰减 1 系列，根据纯芳烃化合物导出的 7×7 逆阵计算出 7 个芳烃族的相对含量。又根据基线法每个芳香烃族分为标称型(0 型)、第一重叠型(1 型)和第二重叠型(2 型)。最后计算出 7 类 3 型共计 21 种芳香烃族(表 1)的相对含量。

表 1 石油芳香烃的类别、类型、名称以及分子通式

类 别	类 型	名 称	分 子 式
I	0	烷基苯	$C_n H_{2n-6}$
	1	苯并噻吩	$C_n H_{2n-10} S$
	2	环烷菲	$C_n H_{2n-20}$
II	0	环烷基苯	$C_n H_{2n-8}$
	1	茈类	$C_n H_{2n-22}$
	2	未鉴定	—
III	0	二环烷基苯	$C_n H_{2n-10}$
	1	屈类	$C_n H_{2n-24}$
	2	未鉴定	—
IV	0	萘类	$C_n H_{2n-12}$
	1	二苯并噻吩	$C_n H_{2n-16} S$
	2	未鉴定	—
V	0	茈及二苯并呋喃	$C_n H_{2n-14}$ 及 $C_n H_{2n-16} O$
	1	北类	$C_n H_{2n-28}$
	2	未鉴定	—
VI	0	茈类	$C_n H_{2n-16}$
	1	二苯并蒽	$C_n H_{2n-30}$
	2	未鉴定	—

表 1 (续)

类 别	类 型	名 称	分 子 式
Ⅶ	0	菲类	$C_n H_{2n-18}$
	1	萘苯并噻吩	$C_n H_{2n-22} S$
	2	未鉴定	—
注：在总计 21 种烃族中，只有 15 种已定名，其余 6 种为相应于各自同系物的未鉴定芳烃。			

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:可升温至 125 ℃~350 ℃(升温速率:30 ℃/min~130 ℃/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)。
- 4.4 层析柱(长:40 cm~60 cm,内径: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 ℃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 4 次淋洗得到饱和烃馏分;再用 20 mL 二氯甲烷和正己烷(2 : 1)的混合溶剂分 4 次淋洗芳烃馏分,芳烃馏分溶液用 40 ℃水浴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 800。
- 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~760 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达到稳定时进行。
- 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  $m/z$ 60~ $m/z$ 760 范围内的质量偏差不超过±0.2 amu。
- 6.2.3 用正十六烷校准质谱裂解模型,使  $\Sigma 69/\Sigma 71$  比值在  $0.18\pm 0.03$ , $m/z$  127 与  $m/z$ 226 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 提取下面所有系列峰的峰高和其相应的质量数：

- a)  $\sum 78 = 78 + 92 + 106 + 120 + \cdots$  到结束 (多同位素) + 91 + 105 + 119 +  $\cdots$  到结束 (单同位素)；
- b)  $\sum 104 = 104 + 118 + 132 + 146 + \cdots$  到结束 (多同位素) + 117 + 131 + 145 +  $\cdots$  到结束 (单同位素)；
- c)  $\sum 129 = 130 + 144 + 158 + 172 + \cdots$  到结束 (多同位素) + 129 + 143 + 157 +  $\cdots$  到结束 (单同位素)；
- d)  $\sum 128 = 128 + 142 + 156 + 170 + \cdots$  到结束 (多同位素) + 141 + 155 + 169 +  $\cdots$  到结束 (单同位素)；
- e)  $\sum 154 = 154 + 168 + 182 + 196 + \cdots$  到结束 (多同位素) + 167 + 181 + 195 +  $\cdots$  到结束 (单同位素)；
- f)  $\sum 166 = 166 + 180 + 194 + 208 + \cdots$  到结束 (多同位素) + 179 + 193 + 207 +  $\cdots$  到结束 (单同位素)；
- g)  $\sum 178 = 178 + 192 + 206 + 220 + \cdots$  到结束 (多同位素) + 191 + 205 + 219 +  $\cdots$  到结束 (单同位素)。

7.2 参照附录 A 的计算公式进行芳香烃族组成的计算,附录 A 中列出的所有计算公式包括了那些计算单同位素峰高的程序。使用者可以直接使用该程序,也可按附录 A 的计算方法、计算公式和计算流程自行编程进行计算。

8 精密度

芳香族组成测定的方法精密度见表 2。

表 2 芳香族组分的重复性(*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

附 录 A  
(资料性附录)  
石油芳香烃族组分计算程序

石油芳香烃族组成计算公式程序见表 A.1。

表 A.1 石油芳香烃族组成计算程序

C	
C	IN THIS PROGRAM THE VARIABLE "H(M)" REPRESENTS THE HEIGHT OF THE
C	POLYISOTOPIC PEAK AT MASS M. THE VARIABLE "HDI(M)" IS THE HEIGHT
C	OF THE DEISOTOPED PEAK AT MASS M.
C	
C	THIS IS A POSSIBLE MAIN PROGRAM THAT READS INPUT DATA AND CALLS FIRST
C	THE DEISOTOPING ROUTINE "SUBROUTINE DEISO" AND THEN THE
C	CALCULATING AND REPORTONG ROUTINE "SUBROUTINE AROMTC".
	COMMON TITLE(20),H(758),HDI(758)
	DIMENSION MASS(8), HITE(8)
1	READ(5,10,END=99) (TITLE(I), I=1,20)
10	FORMAT(20A4)
C	A TITLE CARD FOR SAMPLE NAME, ETC. PRECEDRES SPECTRAL DATA CARDS.
C	FORMAT FOR TITLE IS 20A4 (20 4—CHARACTER WORDS IN 80 COLUMNS).
C	FORMAT FOR SPECTRAL DATA IS MASS (I6) FOLLOWED BY HEIGHT (F4.0)
C	WITH B PEAKS PER 80—COLUMN CARD.
C	
	DO 20 I=12,758
	H(I)=0,0
20	HDI(I)=0,0
30	READ(5,40) (MASS(I),HITE(I), I=1,8)
40	FORMAT(8(I6,F4.0)
	DO 50 I=1,8
	IF (MASS(I).EQ.999999) GO TO 60
C	
C	ENTER "999999" IN A MASS POSITION ON A CARD TO DENOTE SPECTRUM END.
C	
	IF (MASS(I).EQ.0) GO TO 50
	M=MSAA(I)
	H(M)=HITE(I)
50	CONTINUE
	GO TO 30
60	CALL DEISO
	CALL AROMTC
	GO TO 1
C	
C	"GO TO 1" ALLOWS SUCCESSIVE SAMPLES TO BE COMPUTED BEFORE RELEASING
C	COMPUTER

表 A.1 (续)

```

C
  99 STOP
    END
    SURROUTINE DEISO
C
  C THIS SUBROUTINE COMPUTES MONOISOTOPIC PEAKS ASSUMING ALL IONS HAVE
  C Z NUMBERS FROM +2 TO -11 IN THE FORMULA C(N)H(2N+Z)
C DO 10 I=12,758
  COMMON TITLE(20),H(758),HDI(758)
  DIMENSION NCARB(758),NHVD(758)NCARB(I)=0
10 NHVD(I)=0
  DO 20 K=12,758
    NCARB(K)=(K+11)/14
    NHVD(K)=K-12*NCARB(K)
    IF(NHVD(K).LT.0) NHVD(K)=0
20 CONTINUE
  DO 30 K=14,758
    HDI(K)=H(K)-HDI(K-1)*(.010811*FLOAT(NCARB(K-1))+.00015*
1    FLOAT(NHVD(K-1)))
    HDI(K)=HDI(K)+HDI(K-2)*(.00005844*FLOAT(NCARB(K-2)*
1    (1-NCARB(K-2)))+.1125E-7*FLOAT(NHVD(K-2)*(1-NHVD(K-2)))
1    -.162165E-5*FLOAT(NCARB(K-2)*NHVD(K-2)))
    IF(HDI(K).LT.0.0) HDI(K)=0.0
30 CONTINUE
  RETURN
  END
  SUBROUTINE AROMTC
C
C THIS ROUTINE GIVES THE ANALYSIS OF AROMATICS FRACTIONS FROM PETROLEUM
C USING THE PROCEDURE DESCRIBED IN ANAL CHEM 41, 1548-54(1969)
C
  COMMON TITLE(20),H(758),HDI(758)
  DIMENSION AIN(7,7),BA(7),BB(7),SR(758)
1 DATA AIN /+1.8094,-.1952,+.0124,-.0027,-.0015,-.0011,-.0028,
2          -.1601,+2.0479,-.2806,-.0401,+.0082,+.0012,+.0000,
3          -.0943,-.2287,+2.3024,-.4936,-.0601,-.0155,-.0089,
4          -.0292,+.0033,-.0580,+1.9404,-.1337,-.0117,-.0043,
5          -.0022,-.0003,-.0026,-.0195,+1.9773,-.1823,+.0123,
6          -.0420,+.0026,-.0018,-.0151,-.0584,+2.0616,-.4193,
7          -.2346,-.1069,-.0267,-.0019,-.0057,-.0904,+1.9904/
C
C INITIALIZE SQUARE ROOT ARRAY
C
  DO 2132 I=12,750
2132 SR(I)=0.0

```

表 A.1 (续)

C	
C	ASSEMBLE APPROPRIATE PEAKS IN MASS SPECTRUM OF AROMATIC FRACTION
C	FOR PROCESSING IN A 7x7 MATRIX. QUANTITIES A6,A7,A8,ETC. REFER
C	INITIALLY TO SUMA OF PEAKS AT Z NUMBERS 6,7,8,ETC. A6, A8,ETC. ARE
C	LATER REDEFINED TO INCLUDE THE ODD Z—NUMBER SUM CORRESPONDING TO
C	THE PARENT—1 SERIES (A6=A6+A7,A8=A8+A9,ETC)
C	
	A6=0.0
	DO 2106 M=78,750,14
	2106 A6=A6+H(M)
	2107 A7=0.0
	DO 2107 M=91,750,14
2107	A7=A7+HDI(M)
	A6=A6+A7
	IF(A6.LT.1.0) A6=1.0
	A8=0.0
	DO 2108 M=104,750,14
2108	A8=A8+H(M)
	A9=0.0
	DO 2109 M=117,750,14
2109	A9=A9+HDI(M)
	A8=A8+A9
	IF(A8.LT.1.0) A8=1.0
	A10=0.0
	DO 2110 M=130,750,14
2110	A10=A10+H(M)
	A11=0.0
	DO 2111 M=129,750,14
2111	A11=A11+HDI(M)
	A10=A10+A11
	IF(A10.LT.1.0) A10=1.0
	A12=0.0
	DO 2112 M=128,750,14
2112	A12=A12+H(M)
	A13=0.0
	DO 2113 M=141,750,14
2113	A13=A13+HDI(M)
	A12=A12+A13
	IF(A12.LT.1.0) A12=1.0
	A14=0.0
	DO 2114 M=154,750,14
2114	A14=A14+H(M)
	A15=0.0
	DO 2115 M=167,750,14

表 A.1 (续)

2115	$A15 = A15 + HDI(M)$ $A14 = A14 + A15$ IF(A14, LT, 1.0) A14=1.0 $A16 = 0.0$ DO 2116 M=166,750,14
2116	$A16 = A16 + H(M)$ $A17 = 0.0$ DO 2117 M=179,750,14
2117	$A17 = A17 + HDI(M)$ $A16 = A16 + A17$ IF(A16, LT, 1.0) A16=1.0 $A18 = 0.0$ DO 2118 M=178,750,14 2118 $A18 = A18 + H(M)$ $A19 = 0.0$ DO 2119 M=191,750,14
2119	$A19 = A19 + HDI(M)$ $A18 = A18 + A19$
C	
C	CORRECT THE PEAK SUM FOR THE PRESENCE OF IRRELEVANT IONS AT
C	MASSSES 175,176,189,190,200,213
C	
	$CDI175 = HDI(161) - (HDI(161) - HDI(203))/3.0$ IF(HDI(175).GE.CDI175) GO TO 1046 $CDI175 = HDI(175)$
C	
C	ABOVE STATEMENTS CORRECT HDI(175)
C	NEXT STATEMENTS CORRECT H(176)
C	
1046	$CH176 = H(162) - (H(162) - H(204))/3.0$ IF(H(176).GE.CH176) GO TO 1048 $CH176 = H(176)$
C	
C	NEXT STATEMENTS CORRECT HDI(189)
C	
1048	$CDI189 = CDI175 - (CDI175 - HDI(203))/2.0$ IF(HDI(189).GE.CDI189) GO TO 1049 $CDI189 = HDI(189)$
C	
C	NEXT STATEMENTS CORRECT H(190)
C	
1049	$CH190 = CH176 - (CH176 - H(204))/2.0$ IF(H(190).GE.CH190) GO TO 2101 $CH190 = H(190)$

表 A.1 (续)

C	
C	NEXT STATEMENTS CORRECT 正 H(200)
C	
2101	CH200=(H(186)+H(214))/2.0 IF(H(200).GE.CH200) GO TO 2102 CH200=H(200)
C	
C	NEXT STATEMENTS CORRECT HDI(213)
C	
2102	CDI213=(HDI(199)+HDI(227))/2.0 IF(HDI(213).GE.CDI213) GO TO 2103 CDI213=HDI(213)
C	
C	NEXT STATEMENTS CORRECT THE A6,A8,ECT. SUMS
C	
2103	A6=A6-(HDI(175)+HDI(189)+H(176)+H(190)) 1 +CDI175+CDI189+CH176+CH190 A10=A10-(H(200)+HDI(213))+CH200+CDI213
C	
C	REDEFINE A6,A8, ECT. AS SUBSCRIPTED VARIABLE ANDMULTIPLY BY THE
C	AROMATICS JNVERSE AIN(I,J)
C	
	BA(1)=A6 BA(2)=A8 BA(3)=A10 BA(4)=A12 BA(5)=A14 BA(6)=A16 BA(7)=A18 DO 2125 J=1,7 BB(J)=0.0 DO 2124 I=1,7
2124	BB(J)=BB(J)+BA(I)*AIN(J,I)
2125	CONTINUE DO 2127 J=1,7 IF(BB(J)) 2126,2127,2127
2126	BB(J)=0.0
2127	CONTINUE AA6=BB(1) AA8=BB(2) AA10=BB(3) AA12=BB(4) AA14=BB(5) AA16=BB(6) AA18=BB(7) SUMAA=0.0 DO 2128 J=1,7

表 A.1 (续)

2128	SUMAA=SUMAA+BB(J)
C	
C	VALUES OF AA6,AA8, ECT. ARE DIVISIONS CALCULATED FOR NOMINAL Z=-6,
C	-8,ECT. SUMAA IS SUM OF THE AA VALUES AND REPRESENTS THE TOTAL
C	DIVISIONS OF AROMATICS CALCULATED.
C	THE FOLLOWING STATEMENTS RESOLVE OVERLAPPING TYPES IN Z=-6 ,
C	
	A7=A7-HDI(175)-HDI(189)+CDI175+CDI189
	HDI(175)=CDI175
	HDI(189)=CDI189
	DO 2130 M=105,750,14
	IF(HDI(M)) 2130,2131,2130
2130	CONTINUE
2131	MM=M-14
	SLOPE=((((0.72 * HDI(105)) * * 0.5)-(HDI(MM)) * * 0.5)/
1	(90.71-(1000.0/FLOAT(MM)) * * 2)
	B=((0.72 * HDI(105)) * * 0.5-90.71 * SLOPE
	DO 2133 M=147,MM,14
	REALM=M
2133	SR(M)=SLOPE * (1000.0/REALM) * * 2+B
C	
C	ABOVE IS FOR Z=-6 AND ATOMES SQUARE ROOTS OF ALKYL BENZENE PEAK 组中
C	HEIGHTS IN ARRAY SR(I). RELOW IS FOR Z=-8
C	
	DO 2134 M=215,750,14
	IF(HDI(M)) 2134,2135,2134
2134	CONTINUE
2135	MN=M-14
	SLOPE=((((0.66 * HDI(173)) * * 0.5)-(HDI(MN)) * * 0.5)/
1	(34.12-(1000.0/FLOAT(MN)) * * 2)
	B=((0.66 * HDI(173)) * * 0.5-34.12 * SLOPE
	DO 2136 M=215,MN,14
	REALM=M
2136	SR(M)=SLOPE * (1000.0/REALM) * * 2+B
C	
C	RELOW IS FOR Z=-10
C	
	A11=A11-HDI(213)+CDI213
	HDI(213)=CDI213
	DO 2137 M=241,750,14
	IF(HDI(M)) 2137,2138,2137
2137	CONTINUE
2138	MO=M-14
	SLOPE=((HDI(185)) * * 0.5-(HDI(MO)) * * 0.5)/

表 A.1 (续)

1	(29.22 - (1000.0 / FLOAT(MO)) * * 2)
	B = HDI(185) * * 0.5 - 29.22 * SLOPE
	DO 2139 M = 241, MO, 14
	REALM = M
2139	SR(M) = SLOPE * (1000.0 / REALM) * * 2 + B
C	
C	RELOW IS FOR Z = -12
C	
	DO 2140 M = 197, 750, 14
	IF(HDI(M)) 2140, 2141, 2140
2140	CONTINUE
2141	MP = M - 14
	SLOPE = (((0.25 * HDI(183)) * * 0.5) - (HDI(MP)) * * 0.5) /
1	(29.86 - (1000.0 / FLOAT(MP)) * * 2)
	B = (0.25 * HDI(183)) * * 0.5 - 29.86 * SLOPE
	DO 2142 M = 197, MP, 14
	REALM = M
2142	SR(M) = SLOPE * (1000.0 / REALM) * * 2 + B
C	
C	RELOW IS FOR Z = -14 重叠型
C	
	DO 2143 M = 265, 750, 14
	IF(HDI(M)) 2143, 2144, 2143
2143	CONTINUE
2144	MQ = M - 14
	SLOPE = (((0.64 * HDI(251)) * * 0.5) - (HDI(MQ)) * * 0.5) /
1	(15.87 - (1000.0 / FLOAT(MQ)) * * 2)
	B = (0.64 * HDI(251)) * * 0.5 - 15.87 * SLOPE
	DO 2145 M = 265, MQ, 14
	REALM = M
2145	SR(M) = SLOPE * (1000.0 / REALM) * * 2 + B
C	
C	RELOW IS FOR Z = -16
C	
	DO 2146 M = 291, 750, 14
	IF(HDI(M)) 2146, 2147, 2146
2146	CONTINUE
2147	MR = M - 14
	SLOPE = (((0.7 * HDI(277)) * * 0.5) - (HDI(MR)) * * 0.5) /
1	(13.03 - (1000.0 / FLOAT(MR)) * * 2)
	B = (0.7 * HDI(277)) * * 0.5 - 13.03 * SLOPE
	DO 2148 M = 291, MR, 14
	REALM = M
2148	SR(M) = SLOPE * (1000.0 / REALM) * * 2 + B

表 A.1 (续)

```

C
C      RELOW IS FOR Z=-18
C
      DO 2149 M=247,750,14
      IF(HDI(M)) 2149,2150,2149
2149  CONTINUE
2150  MS=M-14
      SLOPE=((0.58 * HDI(233)) * * 0.5)-(HDI(MS)) * * 0.5)/
1      (18.42-(1000.0/FLOAT(MS)) * * 2)
      B=(0.58 * HDI(233)) * * 0.5-18.42 * SLOPE
      DO 2151 M=247,MS,14
      REALM=M
2151  SR(M)=SLOPE * (1000.0/REALM) * * 2+B
C
C      THE SQUARE ROOT ARRAY HAS BEEN CALCULATED. FOR CERTAIN SPECTRA IT
C      MAY BE POSSIBLE TO GET SLOPE AND INTERCEPT VALUES IN REGIONS OF
C      ZERO PEAK HEIGHT. IF THIS OCCURS, ERRORS MIGHT BE ENTERED IN THE
C      SR ARRAY. THE FOLLOWING SETS SR TO ZERO AT MASSES WHERE HDI=0.0 时
C
      DO 2153 I=12,750
      IF(HDI(I)) 2152,2152,2153
2152  SR(I)=0.0
2153  CONTINUE
C
C      THE SR ARRAY IS SQUARED TO GIVE UNCORRECTED PEAK HEIGHTS OF THE
C      NOMINAL Z TYPES
C
      DO 2154 I=12,750
2154  SR(I)=SR(I) * * 2
C
C      CORRECT CERTAIN VALUES IN SR(I) FOR NONLINEARITY OF SQ RT RELATION
C
      SR(147)=SR(147) * 1.44
      SR(197)=SR(197) * 3.10
      SR(211)=SR(211) * 2.52
      SR(225)=SR(225) * 2.07
      SR(239)=SR(239) * 1.83
      SR(253)=SR(253) * 1.59
      SR(267)=SR(267) * 1.39
      SR(281)=SR(281) * 1.28
      SR(295)=SR(295) * 1.26
      SR(309)=SR(309) * 1.14
      SR(323)=SR(323) * 1.06
      SR(265)=SR(265) * 1.42
      SR(279)=SR(279) * 1.24

```

表 A.1 (续)

	SR(293)=SR(293) * 1.12
	SR(307)=SR(307) * 1.06
	SR(291)=SR(291) * 1.24
	SR(305)=SR(305) * 1.15
	SR(319)=SR(319) * 1.07
	SR(333)=SR(333) * 1.06
	SR(347)=SR(347) * 1.05
	SR(361)=SR(361) * 1.03
	SR(247)=SR(247) * 1.61
	SR(261)=SR(261) * 1.50
	SR(275)=SR(275) * 1.44
	SR(289)=SR(289) * 1.37
	SR(303)=SR(303) * 1.28
	SR(317)=SR(317) * 1.28
	SR(331)=SR(331) * 1.21
	SR(345)=SR(345) * 1.10
	SR(359)=SR(359) * 1.09
	SR(373)=SR(373) * 1.07
	SR(387)=SR(387) * 1.05
C	
C	IT IS NECESSARY THAT NO VALUE SR(M) EXCEEDS THE CORRESPONDING VALUE HDI(M)
C	
	DO 2156 M=12,750
	IF(SR(M) - HDI(M)) 2156,2156,2155
2155	SR(M) = HDI(M)
2156	CONTINUE
C	
C	CALCULATE PORTIONS OF A7 DUE TO A6A,A10S,A20A, AND OTHER TYPES
C	
	A6A=0.0
	DO 2157 M=91,133,14
2157	A6A=A6A+HDI(M)
	DO 2158 M=147,MM,14
2158	A6A=A6A+SR(M)
	A10S=0.0
	DO 2159 M=147,189,14
2159	A10S=A10S+HDI(M)-SR(M)
	A10S=A10S/0.75
	A20A=A7-A6A-A10S
	IF(A20A) 2160,2161,2161
2160	A20A=0.0
	A10S=A7-A6A
2161	CONTINUE
C	
C	CALCULATE DIVISIONS OF A6A,A10S, AND A20A

表 A.1 (续)

C	$\text{TRASH} = (\text{A6} - \text{AA6} * 0.5579) * (\text{A7} / \text{A6})$ $\text{IF}(\text{TRASH}, \text{LT}, 0.0) \text{ TRASH} = 0.0$ $\text{A7} = \text{A7} - \text{TRASH}$ $\text{A6A} = \text{A6A} - \text{TRASH}$ $\text{IF}(\text{A6A}, \text{LT}, 0.0) \text{ A6A} = 0.0$ $\text{IF}(\text{A6A}, \text{EQ}, 0.0) \text{ A7} = \text{A10S} + \text{A20A}$ $\text{IF}(\text{A7}, \text{EQ}, 0.0) \text{ THEN}$ $\text{A6A} = 0.0$ $\text{A10S} = 0.0$ $\text{A20A} = 0.0$ $\text{ELSE}$ $\text{A6A} = (\text{A6A} / \text{A7}) * \text{AA6}$ $\text{A10S} = (\text{A10S} / \text{A7}) * \text{AA6}$ $\text{A20A} = (\text{A20A} / \text{A7}) * \text{AA6}$
C	
C	CALCULATE PORTIONS A9 DUE TO A8A, A22A, AND OTHER TUPES
C	
	$\text{A8A} = 0.0$ $\text{DO } 2162 \text{ } M = 117, 201, 14$
2162	$\text{A8A} = \text{A8A} + \text{HDI}(M)$ $\text{DO } 2163 \text{ } M = 215, \text{MN}, 14$
2163	$\text{A8A} = \text{A8A} + \text{SR}(M)$ $\text{A22A} = 0.0$ $\text{DO } 2164 \text{ } M = 215, 257, 14$
2164	$\text{A22A} = \text{A22A} + \text{HDI}(M) - \text{SR}(M)$ $\text{A22A} = \text{A22A} / 0.75$ $\text{A36A} = \text{A9} - \text{A8A} - \text{A22A}$ $\text{IF}(\text{A36A}) \text{ } 2165, 2166, 2166$
2165	$\text{A36A} = 0.0$ $\text{A22A} = \text{A9} - \text{A8A}$
2166	CONTINUE
C	
C	CALCULATE DIVISIONS OF A8A, A22A, AND OTHER TYPES
C	
	$\text{TRASH} = (\text{A8} - \text{AA8} * 0.4997) * (\text{A9} / \text{A8})$ $\text{IF}(\text{TRASH}, \text{LT}, 0.0) \text{ TRASH} = 0.0$ $\text{A9} = \text{A9} - \text{TRASH}$ $\text{A8A} = \text{A8A} - \text{TRASH}$ $\text{IF}(\text{A8A}, \text{LT}, 0.0) \text{ A8A} = 0.0$ $\text{IF}(\text{A8A}, \text{EQ}, 0.0) \text{ A9} = \text{A22A} + \text{A36A}$ $\text{IF}(\text{A9}, \text{EQ}, 0.0) \text{ THEN}$ $\text{A8A} = 0.0$ $\text{A22A} = 0.0$ $\text{A36A} = 0.0$

表 A.1 (续)

	ELSE
	$A8A = (A8A/A9) * AA8$
	$A22A = (A22A/A9) * AA8$
	$A36A = (A36A/A9) * AA8$
C	
C	CALCULATE PORTIONS OF A11 DUE TO A10A, A24A, AND OTHER TYPES
C	
	$A10A = 0.0$
	DO 2167 M=129,227,14
2167	$A10A = A10A + HDI(M)$
	DO 2168 M=241,MO,14
2168	$A10A = A10A + SR(M)$
	$A24A = 0.0$
	DO 2169 M=241,283,14
2169	$A24A = A24A + HDI(M) - SR(M)$
	$A24A = A24A/0.75$
	$A38A = A11 - A10A - A24A$
	IF(A38A) 2170,2171,2171
2170	$A38A = 0.0$
	$A24A = A11 - A10A$
2171	CONTINUE
C	
C	CALCULATE DIVISIONS OF A10A, A24A, AND OTHER TYPES
C	
	$TRASH = (A10 - AA10 * 0.4435) * (A11/A10)$
	IF(TRASH, LT. 0.0) TRASH=0.0
	$A11 = A11 - TRASH$
	$A10A = A10A - TRASH$
	IF(A10A, LT. 0.0) A10A=0.0
	IF(A10A, EQ. 0.0) A11=A24A+A38A
	IF(A11, EQ. 0.0) THEN
	$A10A = 0.0$
	$A24A = 0.0$
	$A38A = 0.0$
	ELSE
	$A10A = (A10A/A11) * AA10$
	$A24A = (A24A/A11) * AA10$
	$A38A = (A38A/A11) * AA10$
C	
C	CALCULATE PORTIONS OF A13 DUE TO A12A, A16S, AND OTHER TYPES
C	
	$A12A = 0.0$
	DO 2172 M=141,183,14
2172	$A12A = A12A + HDI(M)$
	DO 2173 M=197,MR,14

表 A.1 (续)

2173	A12A=A12A+SR(M) A16S=0.0 DO 2174 M=197,225,14
2174	A16S=A16S+HDI(M)-SR(M) A16S=A16S/0.625 A26A=A13-A12A-A16S IF(A26A) 2175,2176,2176
2175	A26A=0.0 A16S=A13-A12A
2176	CONTINUE
C	
C	CALCULATE DIVISIONS OF A12A, A16S, A26A
C	
	TRASH=(A12-AA12*0.5192)*(A13/A12) IF(TRASH.LT.0.0) TRASH=0.0 A13=A13-TRASH A12A=A12A-TRASH IF(A12A.LT.0.0) A12A=0.0 IF(A12A.EQ.0.0) A13=A16S+A26A IF(A13.EQ.0.0) THEN A12A=0.0 A16S=0.0 A26A=0.0 ELSE A12A=(A12A/A13)*AA12 A16S=(A16S/A13)*AA12 A26A=(A26A/A13)*AA12
C	
C	CALCULATE PORTION OF A15 DUE TO A14A, A28A, AND OTHER TYPES
C	
	A14A=0.0 DO 2177 M=167,251,14
2177	A14A=A14A+HDI(M) DO 2178 M=265,MQ,14
2178	A14A=A14A+SR(M) A28A=0.0
DO 2179	M=265,307,14
2179	A28A=A28A+HDI(M)-SR(M) A28A=A28A/0.75 A42A=A15-A14A-A28A IF(A42A) 2180,2181,2181
2180	A42A=0.0 A28A=A15-A14A
2181	CONTINUE

表 A.1 (续)

C	
C	CALCULATE DIVISIONS OF A14A, A28A, AND OTHER TYPES
C	
	TRASH = (A14 - AA14 * 0.5075) * (A15/A14)
	IF (TRASH, LT, 0.0) TRASH = 0.0
	A15 = A15 - TRASH
	A14A = A14A - TRASH
	IF (A14A, LT, 0.0) A14A = 0.0
	IF (A14A, EQ, 0.0) A15 = A28A + A42A
	IF (A15, EQ, 0.0) THEN
	A14A = 0.0
	A28A = 0.0
	A42A = 0.0
	ELSE
	A14A = (A14A/A15) * AA14
	A28A = (A28A/A15) * AA14
	A42A = (A42A/A15) * AA14
	END IF
C	
C	CALCULATE DIVISIONS OF A17 DUE TO A16A, A30A, AND OTHER TYPES
C	
	A16A = 0.0
	DO 2182 M = 179, 277, 14
2182	A16A = A16A + HDI(M)
	DO 2183 M = 291, MR, 14
2183	A16A = A16A + SR(M)
	A30A = 0.0
	DO 2184 M = 291, 333, 14
2184	A30A = A30A + HDI(M) - SR(M)
	A30A = A30A / 0.75
	A44A = A17 - A16A - A30A
	IF (A44A) 2185, 2186, 2186
2185	A44A = 0.0
	A30A = A17 - A16A
2186	CONTINUE
C	
C	CALCULATE DIVISIONS OF A16A, A30A, AND OTHER TYPES
C	
	TRASH = (A16 - AA16 * 0.4910) * (A17/A16)
	IF (TRASH, LT, 0.0) TRASH = 0.0
	A17 = A17 - TRASH
	A16A = A16A - TRASH
	IF (A16A, LT, 0.0) A16A = 0.0
	IF (A16A, EQ, 0.0) A17 = A30A + A44A
	IF (A17, EQ, 0.0) THEN

表 A.1 (续)

	A16A=0.0
	A30A=0.0
	A44A=0.0
	ELSE
	A16A=(A16A/A17)*AA16
	A30A=(A30A/A17)*AA16
	A44A=(A44A/A17)*AA16
C	
C	CALCULATE PORTION OF A19 DUE TO A18A,A22S,A32A
C	
	A18A=0.0
	DO 2187 M=191,233,14
2187	A18A=A18A+HDI(M)
	DO 2188 M=247,MS,14
2188	A18A=A18A+SR(M)
	A22S=0.0
	DO 2189 M=247,289,14
2189	A22S=A22S+HDI(M)-SR(M)
	A22S=A22S/0.75
	A32A=A19-A18A-A22S
	IF(A32A) 2190,2191,2191
2190	A32A=0.0
	A22S=A19-A18A
2191	CONTINUE
C	
C	CALCULATE DIVISIONS OF A18A,A22S, AND OTHER TYPES
C	
	TRASH=(A18-AA18*0.5073)*(A19/A18)
	IF(TRASH.LT.0.0) TRASH=0.0
	A19=A19-TRASH
	A18A=A18A-TRASH
	IF(A18A.LT.0.0) A18A=0.0
	IF(A18A.EQ.0.0) A19=A22S+A32A
	IF(A19.EQ.0.0) THEN
	A18A=0.0
	A22S=0.0
	A32A=0.0
	ELSE
	A18A=(A18A/A19)*AA18
	A22S=(A22S/A19)*AA18
	A32A=(A32A/A19)*AA18
	END IF
C	
C	THIS COMPLETES CALCULATION OF AROMATICS BREAKDOWN
C	VOLUME PERCENTS ARE NEXT CALCULATED

表 A.1 (续)

C	$V6A = 100.0 * A6A / SUMAA$ $V10S = 100.0 * A10S / SUMAA$ $V20A = 100.0 * A20A / SUMAA$ $V8A = 100.0 * A8A / SUMAA$ $V22A = 100.0 * A22A / SUMAA$ $V36A = 100.0 * A36A / SUMAA$ $V10A = 100.0 * A10A / SUMAA$ $V24A = 100.0 * A24A / SUMAA$ $V38A = 100.0 * A38A / SUMAA$ $V12A = 100.0 * A12A / SUMAA$ $V16S = 100.0 * A16S / SUMAA$ $V26A = 100.0 * A26A / SUMAA$ $V14A = 100.0 * A14A / SUMAA$ $V28A = 100.0 * A28A / SUMAA$ $V42A = 100.0 * A42A / SUMAA$ $V16A = 100.0 * A16A / SUMAA$ $V30A = 100.0 * A30A / SUMAA$ $V44A = 100.0 * A44A / SUMAA$ $V18A = 100.0 * A18A / SUMAA$ $V22S = 100.0 * A22S / SUMAA$ $V32A = 100.0 * A32A / SUMAA$
C	$AMONO = A6A + A8A + A10A$ $VMONO = V6A + V8A + V10A$ $ADI = A12A + A14A + A16A$ $VDI = V12A + V14A + V16A$ $ATRI = A18A + A20A$ $VTRI = V18A + V20A$ $ATETRA = A22A + A24A$ $VTETRA = V22A + V24A$ $APENTA = A28A + A30A$ $VPENTA = V28A + V30A$ $ATHIO = A10S + A16S + A22S$ $VTHIO = V10S + V16S + V22S$ $AUNID = A36A + A38A + A26A + A42A + A44A + A32A$ $VUNID = V36A + V38A + V26A + V42A + V44A + V32A$
C	$WRITE(6,2500)$ $WRITE(6,2501) (TITLE(I), I=1,20)$ $WRITE(6,2502) AMONO,VMONO,A6A,V6A,A8A,V8A,A10A,V10A$ $WRITE(6,2503) ADI,VDI,A12A,V12A,A14A,V14A,A16A,V16A$ $WRITE(6,2504) ATRI,VTRI,A18A,V18A,A20A,V20A$ $WRITE(6,2505) ATETRA,VTETRA,A22A,V22A,A24A,V24A$ $WRITE(6,2506) APENTA,VPENTA,A28A,V28A,A30A,V30A$

表 A.1 (续)

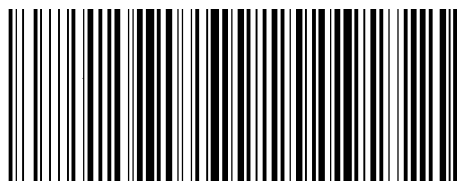
```

WRITE(6,2507) ATHIO,VTHIO,A10S,V10S,A16S,V16S,A22S,V22S
WRITE(6,2508) AUNID,VUNID,A36A,V36A,A38A,V38A,A26A,V26A,A42A,V42A
1  A42A,V42A,A44A,V44A,A32A,V32A
2500  FORMAT (IHI 9X,44HMass Spectral Analysis of Aromatic Fractions)
2501  FORMAT (IHO,20A4//38X,27HCALC. ION SUMS  VOLUMT PCT)
2502  FORMAT(IHO,8X,13HMONOAROMATICS,24X,F7.0,6X,F7.13HALKYBENZENES NES
1  ,15X,F7.0,6X,F7.1/10X,17HNAPHTHENE BENZENES,11X,F7.0,6X,F7.1/10X
2  ,19HDINAPHTHENE BENZENES,9X,F7.0,6X,F7.1)
2503  FORMAT(1H0,8X,11HDIAROMATICS,26X,F7.0,6X,F7.1/10X,12HNAPHTHALENES,
1  16X,F7.0,6X,F7.1/10X,28HACENAPHTHENES,DIBENZOFURANS,F7.0,6X,F7.1
2  /10X,9HFLUORENES,19X,F7.0,6X,F7.1)
2504  FORMAT(1H0,8X,12HTRIAROMATICS,25X,F7.0,6X,F7.1/10X,13HPHENANTHRENES,
1  15X,F7.0,6X,F7.1/10X,22HNAPHTHENEPHENANTHRENES,6X,F7.0,6X,F7.1)
2505  FORMAT(1H0,8X,14HTETRAAROMATICS,23X,F7.0,6X,F7.1/10X,7HPYRENES,21 X,
1  F7.0,6X,F7.1/10X,9HCHRYSENE,19X,F7.0,6X,F7.1)
2506  FORMAT(1H0,8X,14HPENTAAROMATICS,23X,F7.0,6X,F7.1/10X,9HPERYLENES,
1  19X,F7.0,8X,F7.1/10X,17HDIBENZANTHRACENES,11X,F7.0,6X,F7.1)
2507  FORMAT(1H0,8X,19HTHIOPHENO AROMATICS,18X,F7.0,6X,F7.1/10X,
1  15HBENZOTHIOPHENES,13X,F7.0,6X,F7.1/10X,17HDIBENZOTHIOPHENES,11X,F7.0,6X,
2  F7.1/10X,22HNAPHTHOBENZOTHIOPHENES,6X,F7.0,8X,F7.1)
2508  FORMAT(1H0,8X,22HUNIDENTIFIED AROMATICS,15X,F7.0,6X,F7.1/10X,37HCLASS
1  I INCL WITH NAPH PHENANTHRENES/10X,8HCLASS II,20X,F7.0,6X,F7.
2  1/10X,,9HCLASS III,19X,F7.0,6X,F7.1/10X,8HCLASS IV,20X,F7.0,6X,
3  F7.1/10X,7HCLASS V,21X,F7.0,6X,F7.1/10X,8HCLASS VI,20X,F7.0,6X,
4  F7.1/10X,9HCLASS VII,19X,F7.0,6X,F7.1)
RETURN
END

```

参 考 文 献

- [1] ASTM D3239-91 (2006) Standard Method for Aromatic 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 18340.4—2010

版权专有 侵权必究

\*

书号:155066 • 1-41039