ICS 75.160.20
E 49

SH

中华人民共和国石油化工行业标准

SH/T 0714—2002

石脑油中单体烃组成测定法（毛细管气相色谱法）

Standard test method for detailed analysis of petroleum naphthas through *n*-nonane by capillary gas chromatography

2002-05-31 发布　　2002-07-01 实施

国家石油和化学工业局　发布

前　言

本标准等效采用美国试验与材料协会标准 ASTM D 5134-98《石脑油中至正壬烷的详细烃组成的毛细管气相色谱测定标准方法》。

本标准与 ASTM D 5134-98 的主要差异：

1. 本标准在 ASTM D 5134-98 提供的色谱方法条件外，根据我国的情况增加了采用氮气作载气的色谱条件。

本标准的附录 A 和附录 B 都是标准的附录。

本标准由中国石油化工股份有限公司提出。

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。

本标准主要起草人：李长秀、杨海鹰。

ASTM 前 言

尽管仪器技术的发展使毛细管气相色谱获得了惊人的分离度，但实践证明对于分析石脑油这种非常复杂的混合物，分析方法的标准化是非常困难的。由于有大量的同一类型的商品色谱柱可以选择，同时可以选择不同的液膜厚度、色谱柱内径及色谱柱长等等，色谱操作参数也各不相同，因此，许多实验室采用相似但不完全相同的毛细管气相色谱方法进行石脑油馏分组成的分析。例如，即使色谱柱极性或温度条件的微小变化，也可以改变色谱分离度或组分的流出顺序，使得定性过程需个别解释，而不是所期望的采用标准保留数据的客观过程。为避免这种情况，本标准方法中规定了严格的色谱柱性能指标、色谱温度和流量条件，以确保组分流出顺序和分离度的一致性以及保留时间的再现性。严格按照这些条件进行实验对于本方法的成功应用至关重要。

中华人民共和国石油化工行业标准

石脑油中单体烃组成测定法（毛细管气相色谱法）

SH/T 0714—2002

Standard test method for detailed analysis of petroleum naphthas through *n*-nonane by capillary gas chromatography

1 范围

1.1 本标准规定了用毛细管气相色谱法测定石脑油中各烃类组分(见表1和表2)的方法，正壬烷(沸点150.8℃)以后的组分作为一组峰测定。

1.2 本标准适用于不含烯烃(烯烃含量(体积分数)小于2%)的液态烃的混合物，包括直馏石脑油、重整汽油和烷基化油等，其烯烃含量采用GB/T 11132测定；此烃类混合物98%的蒸发温度不应超过250℃，其馏程采用GB/T 6536测定。

1.3 本标准可测定含量大于或等于0.05%质量分数的组分。

1.4 本标准采用国际单位制(SI)。

1.5 本标准没有对所涉及到的所有安全问题提出建议。因此在使用本标准以前，用户必须建立适当的安全措施管理制度。对于一些特殊的预防说明见第7章。

2 引用标准

下列标准包括的条文，通过引用而构成为本标准的一部分。除非在标准中另有明确规定，下列引用标准都应是现行有效标准。

GB/T 4756 石油液体手工取样法

GB/T 6536 石油产品蒸馏测定法

GB/T 11132 液体石油产品烃类测定法(荧光指示剂吸附法)

ASTM D 3700 液态烃类取样法(浮动活塞筒法)

3 方法概要

3.1 将具有代表性的石脑油试样导入气相色谱仪，色谱仪配备有含甲基硅酮固定相的熔融石英毛细管色谱柱，氦气(或氮气)载气将汽化的试样带入色谱柱将组分分离，用火焰离子化检测器检测馏出的组分。检测器信号由电子积分系统或计算机处理。将每一流出的色谱峰的保留指数与已知的保留指数表进行对照，并结合标准谱图以鉴别每个色谱峰。保留指数表通过在相同条件下测定标样或采用气相色谱-质谱联用技术(GC/MS)测定参考样品或同时采用上述两种方法来建立。

3.2 通过校正因子归一化法测定组分的质量分数。将正壬烷后的峰累加并报告为 C_{10}^{+}。

4 意义和用途

4.1 获知石脑油、重整汽油或烷基化油的烃类组成对于原油评价、烷基化和重整工艺过程控制、产品质量评定和日常管理目的都是有用的。详细的烃类组成数据也是炼制过程数学模拟的基础数据。

国家石油和化学工业局 2002-05-31 批准　　2002-07-01 实施

表 1　石脑油组分典型保留特性(氦气载气)

化　合　物	英文名称或缩写	保留时间/min	调整保留时间/min	Kovats 保留指数(35℃)	线性保留指数
甲烷	Methane	3.57	0.00	100.0	—
乙烷	Ethane	3.65	0.08	200.0	—
丙烷	Propane	3.84	0.27	300.0	—
异丁烷	Isobutane	4.14	0.57	367.3	—
正丁烷	*n*-Butane	4.39	0.82	400.0	—
2,2-二甲基丙烷	2,2-DMC3	4.53	0.96	415.5	—
异戊烷	Isopentane	5.33	1.76	475.0	—
正戊烷	*n*-Pentane	5.84	2.27	500.0	—
2,2-二甲基丁烷	2,2-DMC4	6.81	3.24	536.2	—
环戊烷	CYC5	7.83	4.26	564.1	—
2,3-二甲基丁烷	2,3-DMC4	7.89	4.32	565.5	—
2-甲基戊烷	2-MC5	8.06	4.49	569.5	—
3-甲基戊烷	3-MC5	8.72	5.15	583.4	—
正己烷	*n*-Hexane	9.63	6.06	600.0	—
2,2-二甲基戊烷	2,2-DMC5	11.22	7.65	624.2	—
甲基环戊烷	MCYC5	11.39	7.82	626.5	—
2,4-二甲基戊烷	2,4-DMC5	11.68	8.11	630.3	—
2,2,3-三甲基丁烷	2,2,3-TMC4	12.09	8.52	635.4	—
苯	Benzene	13.29	9.72	649.1	—
3,3-二甲基戊烷	3,3-DMC5	13.84	10.27	654.8	—
环己烷	CYC6	14.19	10.62	658.3	—
2-甲基己烷	2-MC6	15.20	11.63	667.8	—
2,3-二甲基戊烷	2,3-DMC5	15.35	11.78	669.1	—
1,1-二甲基环戊烷	1,1-DMCYC5	15.61	12.04	671.4	—
3-甲基己烷	3-MC6	16.18	12.61	676.2	—
顺-1,3-二甲基环戊烷	*cis*-1,3-DMCYC5	16.88	13.31	681.8	—
反-1,3-二甲基环戊烷	*trans*-1,3-DMCYC5	17.22	13.65	684.4	—
3-乙基戊烷	3-EC5	17.44	13.87	686.1	—
反-1,2-二甲基环戊烷	*trans*-1,2-DMCYC5	17.57	14.00	687.0	—
2,2,4-三甲基戊烷	2,2,4-TMC5	17.80	14.23	688.7	—
正庚烷	*n*-Heptane	19.43	15.86	700.0	—
甲基环己烷+顺-1,2-二甲基环戊烷	MCYC6 + *cis*-1,2-DMCYC5	22.53	18.96	718.6[a]	—
1,1,3-三甲基环戊烷+2,2-二甲基己烷	1,1,3-TMCYC5 + 2,2-DMC6	23.05	19.48	721.4[a]	—
乙基环戊烷	ECYC5	24.59	21.02	729.3[a]	—
2,5-二甲基己烷+2,2,3-三甲基戊烷	2,5-DMC6 + 2,2,3-TMC5	25.12	21.55	731.9[a]	—
2,4-二甲基己烷	2,4-DMC6	25.47	21.90	733.5[a]	—
1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	1,*trans*-2,*cis*4-TMCYC5	26.43	22.86	738.0[a]	—
3,3-二甲基己烷	3,3-DMC6	26.79	23.22	739.6[a]	—
1,反-2,顺-3-三甲基环戊烷	1,*trans*-2,-*cis*-3-TMCYC5	28.01	24.44	744.9[a]	—

表 1(续)

化　合　物	英文名称或缩写	保留时间/min	调整保留时间/min	Kovats 保留指数(35℃)	线性保留指数
2,3,4-三甲基戊烷	2,3,4-TMC5	28.70	25.13	747.8[a]	—
甲苯+2,3,3-三甲基戊烷	Toluene+2,3,3-TMC5	29.49	25.92	751.1[a]	730.2[b]
1,1,2-三甲基环戊烷	1,1,2-TMCYC5	31.21	27.64	—	741.7[b]
2,3-二甲基己烷	2,3-DMC6	31.49	27.92	—	743.6[b]
2-甲基-3-乙基戊烷	2-M-3EC5	31.69	28.12	—	744.9[b]
2-甲基庚烷	2-MC7	33.06	29.49	—	754.1[b]
4-甲基庚烷+3-甲基-3-乙基戊烷	4-MC7+3-M-3EC5	33.34	29.77	—	756.0[b]
3,4-二甲基己烷	3,4-DMC6	33.49	29.92	—	757.0[b]
1,顺-2,反-4-三甲基环戊烷+1,顺-2,顺-4-三甲基环戊烷	1,*cis*-2,*trans*-4-TMCYC5+1,*cis*-2,*cis*-4-TMCYC5	33.73	30.16	—	758.6[b]
顺-1,3-二甲基环己烷	*cis*-1,3-DMCYC5	34.45	30.88	—	763.4[b]
3-甲基庚烷+1,顺-2,反-3-三甲基环戊烷	3-MC7+1,*cis*-2,*trans*-3-TMCYC5	34.64	31.07	—	764.7[b]
3-乙基己烷+反-1,4-二甲基环己烷	3-EC6+*trans*-1,4-DMCYC6	34.83	31.26	—	766.0[b]
1,1-二甲基环己烷	1,1-DMCYC6	35.81	32.24	—	772.5[b]
2,2,5-三甲基己烷+反-1-甲基-3-乙基环戊烷	2,2,5-TMC6+*trans*-1,3-EMCYC5	36.75	33.18	—	778.8[b]
顺-1-甲基-3-乙基环戊烷	*cis*-1,3-EMCYC5	37.14	33.57	—	781.4[b]
反-1-甲基-2-乙基环戊烷	*trans*-1,2-EMCYC5	37.39	33.82	—	783.1[b]
2,2,4-三甲基己烷+1-甲基-1-乙基环戊烷	2,2,4-TMC6+1,1-EMCYC5	37.68	34.11	—	785.1[b]
反-1,2-二甲基环己烷	*trans*-1,2-DMCYC6	38.14	34.57	—	788.1[b]
1,顺-2,顺-3-三甲基环戊烷	1,*cis*-2,*cis*-3-TMCYC5	39.21	35.64	—	795.3[b]
反-1,3-二甲基环己烷+顺-1,4-二甲基环己烷	*trans*-1,3-DMCYC6+*cis*-1,4-DMCYC6	39.54	35.97	—	797.5
正辛烷	*n*-Octane	39.91	36.34	—	800.0
异丙基环戊烷+2,4,4-三甲基己烷	IC3CYC5+2,4,4-TMC6	40.76	37.19	—	805.7
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	40.88	37.31	—	806.5
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	41.52	37.95	—	810.8
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	41.88	38.31	—	813.2
顺-1,2-乙基甲基环戊烷+2,3,5-三甲基己烷	*cis*-1,2-EMCYC5+2,3,5-TMC5	42.55	38.98	—	817.7
2,2-二甲基庚烷	2,2-DMC7	43.20	39.63	—	822.0
顺-1,2-二甲基环己烷	*cis*-1,2-DMCYC6	43.43	39.86	—	823.6
2,2,3-三甲基己烷+C_9 环烷烃	2,2,3-TMC6+C9-N	43.76	40.19	—	825.8
2,4-二甲基庚烷	2,4-DMC7	43.88	40.31	—	826.6
4,4-二甲基庚烷+C_9 环烷烃	4,4-DMC7+C9-N	44.09	40.52	—	828.0
乙基环己烷+正丙基环戊烷	ECYC6+NC3CYC5	44.36	40.79	—	829.8
2-甲基-4-乙基己烷	2-M-4-EC6	44.74	41.17	—	832.4
2,6-二甲基庚烷+C_9 环烷烃	2,6-DMC7+C9-N	44.95	41.38	—	833.8
1,1,3-三甲基环己烷	1,1,3-TMCYC6	45.21	41.64	—	835.5
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	45.56	41.99	—	837.8

表 1(续)

化 合 物	英文名称或缩写	保留时间/min	调整保留时间/min	Kovats 保留指数(35℃)	线性保留指数
2,5-二甲基庚烷 + C_9 链烷烃	2,5-DMC7 + C9-N	45.92	42.35	—	840.3
3,5-二甲基庚烷 + 3,3-二甲基庚烷 + 环烷烃	3,5-DMC7 + 3,3-DMC7 + N	46.09	42.52	—	841.4
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	46.31	42.74	—	842.9
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	46.55	42.98	—	844.5
乙苯	Ethyl Benzene	47.15	43.58	—	848.5
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	47.37	43.80	—	850.0
未确定的环烷烃 + 2,3,4-三甲基己烷	Unidentified N + 2,3,4-TMC6	47.53	43.96	—	851.0
未确定的环烷烃	Unidentified N	47.78	44.21	—	852.7
未确定的环烷烃 + 链烷烃	Unidentified N + P	48.13	44.56	—	855.1
间-二甲苯	*m*-Xylene	48.49	44.92	—	857.5
对-二甲苯	*p*-Xylene	48.63	45.06	—	858.4
2,3-二甲基庚烷	2,3-DMC7	48.93	45.36	—	860.4
3,4-二甲基庚烷[c] + 环烷烃	3,4-DMC7 + N	49.10	45.53	—	861.6
3,4-二甲基庚烷[c]	3,4-DMC7	49.29	45.72	—	862.8
未确定的环烷烃	Unidentified N	49.41	45.84	—	863.6
4-乙基庚烷 + 环烷烃	4-EC7 + N	49.65	46.08	—	865.2
4-甲基辛烷	4-MC8	50.10	46.53	—	868.3
2-甲基辛烷	2-MC8	50.26	46.69	—	869.3
未确定的环烷烃	Unidentified N	50.41	46.84	—	870.3
未确定的环烷烃	Unidentified N	50.73	47.16	—	872.5
3-乙基庚烷 + 环烷烃	3-EC7 + N	50.96	47.39	—	874.0
3-甲基辛烷	3-MC8	51.15	47.58	—	875.3
未确定的环烷烃	Unidentified N	51.35	47.78	—	876.6
邻-二甲苯 + 1,1,2-三甲基环己烷	*o*-Xylene + 1,1,2-TMCYC6	51.54	47.97	—	877.9
未确定的环烷烃 + 2,4,6-三甲基庚烷	Unidentified N + 2,4,6-TMC6	51.74	48.17	—	879.2
未确定的环烷烃	Unidentified N	52.12	48.55	—	881.8
未确定的链烷烃	Unidentified P	52.24	48.67	—	882.6
未确定的环烷烃	Unidentified N	52.56	48.99	—	884.7
未确定的环烷烃	Unidentified N	52.85	49.28	—	886.7
未确定的环烷烃 + 链烷烃	Unidentified N + P	53.06	49.49	—	888.1
未确定的环烷烃	Unidentified N	53.26	49.69	—	889.4
未确定的环烷烃	Unidentified N	53.46	49.89	—	890.8
未确定的环烷烃	Unidentified N	54.02	50.45	—	894.5
未确定的环烷烃	Unidentified N	54.40	50.83	—	897.1
正壬烷	*n*-Nonane	54.84	51.27	—	900.0
未确定的环烷烃	Unidentified N	54.98	51.41	—	900.9

[a] 由 n-C_6 和 n-C_7 外推而得,见附录(A1.1.3)。

[b] 由 n-C_8 和 n-C_9 外推而得,见附录(A1.2.3)。

[c] 异构体。

表 2　石脑油组分典型保留特性(氮气载气)[1]

化　合　物	英文名称或缩写	保留时间/min	调整保留时间/min	Kovats 保留指数(35℃)	线性保留指数
甲烷	Methane	6.91	0.00	100.0	—
乙烷	Ethane	7.13	0.22	200.0	—
丙烷	Propane	7.50	0.50	300.0	—
异丁烷	Isobutane	8.06	1.15	366.0	—
正丁烷	*n*-Butane	8.54	1.63	400.0	—
2,2-二甲基丙烷	2,2-DMC3	8.79	1.88	414.5	—
异戊烷	Isopentane	10.31	3.40	474.8	—
正戊烷	*n*-Pentane	11.27	4.36	500.0	—
2,2-二甲基丁烷	2,2-DMC4	13.09	6.18	535.3[a]	—
环戊烷	CYC5	15.02	8.11	563.1[a]	572.3[b]
2,3-二甲基丁烷	2,3-DMC4	15.11	8.20	—	573.1[b]
2-甲基戊烷	2-MC5	15.42	8.50	—	575.8[b]
3-甲基戊烷	3-MC5	16.59	9.68	—	586.2[b]
正己烷	*n*-Hexane	18.15	11.23	—	600.0
2,2-二甲基戊烷	2,2-DMC5	20.54	13.62	—	621.2
甲基环戊烷	MCYC5	20.83	13.92	—	623.8
2,4-二甲基戊烷	2,4-DMC5	21.18	14.27	—	626.9
2,2,3-三甲基丁烷	2,2,3-TMC4	21.79	14.87	—	632.3
苯	Benzene	23.39	16.48	—	646.5
3,3-二甲基戊烷	3,3-DMC5	23.99	17.07	—	651.8
环己烷	CYC6	24.46	17.54	—	655.9
2-甲基己烷	2-MC6	25.43	18.52	—	664.6
2,3-二甲基戊烷	2,3-DMC5	25.65	18.73	—	666.5
1,1-二甲基环戊烷	1,1-DMCYC5	26.00	19.09	—	669.6
3-甲基己烷	3-MC6	26.47	19.55	—	673.7
顺-1,3-二甲基环戊烷	*cis*-1,3-DMCYC5	27.25	20.34	—	680.7
反-1,3-二甲基环戊烷+3-乙基戊烷	*trans*-1,3-DMCYC5 + 3-EC5	27.59	20.67	—	683.7
反-1,2-二甲基环戊烷	*trans*-1,2-DMCYC5	27.91	21.00	—	686.6
2,2,4-三甲基戊烷	2,2,4-TMC5	28.06	21.15	—	687.9
正庚烷	*n*-Heptane	29.43	22.52	—	700.0
甲基环己烷+顺-1,2-二甲基环戊烷	MCYC6 + *c*-1,2-DMCYC5	31.94	25.02	—	720.6
2,2-二甲基己烷	2,2-DMC6	32.08	25.17	—	721.8
1,1,3-三甲基环戊烷	1,1,3-TMCYC5	32.24	25.33	—	723.1
乙基环戊烷+2,5-二甲基己烷	ECYC5 + 2,5-DMC6	33.30	26.39	—	731.8
2,4-二甲基己烷+2,2,3-三甲基戊烷	2,4-DMC6 + 2,2,3-TMC5	33.56	26.65	—	733.9
1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	1,*trans*-2,*cis*-4-TMCYC5	34.33	27.42	—	740.2

采用说明：

1] 本标准增加了采用氮气作载气的组分表。

表 2(续)

化 合 物	英文名称或缩写	保留时间/min	调整保留时间/min	Kovats 保留指数(35℃)	线性保留指数
3,3-二甲基己烷	3,3-DMC6	34.46	27.55	—	741.3
1,反-2,顺-3-三甲基环戊烷	1,*trans*-2,*cis*-3-TMCYC5	35.23	28.31	—	747.5
2,3,4-三甲基戊烷	2,3,4-TMC5	35.55	28.64	—	750.2
甲苯+2,3,3-三甲基戊烷	Tolene+2,3,3-TMC5	36.11	29.20	—	754.8
2,3-二甲基己烷	2,3-DMC6	36.82	29.91	—	760.6
2-甲基-3-乙基戊烷+1,1,2-三甲基环戊烷	2-M-3EC5+1,1,2-TMCYC5	37.02	30.11	—	762.3
2-甲基庚烷	2-MC7	37.53	30.62	—	766.4
4-甲基庚烷	4-MC7	37.71	30.79	—	767.9
3,4-二甲基己烷+3-甲基-3-乙基戊烷	3,4-DMC6+3-M-3-EC5	37.96	31.04	—	769.9
1,顺-2,反-4-三甲基环戊烷	1,*cis*-2,*trans*-TMCYC5	38.13	31.22	—	771.3
3-甲基庚烷	3-MC7	38.45	31.54	—	774.0
3-乙基己烷	3-EC6	38.59	31.68	—	775.1
顺-1,3-二甲基环己烷+1,顺2,反3-三甲基环戊烷	*cis*-1,3-DMCYC6+1,*cis*-2,*trans*-3-TMCYC5	38.83	31.92	—	777.1
反-1,4-二甲基环己烷	*trans*-1,4-DMCYC6	39.05	32.14	—	778.9
2,2,5-三甲基己烷+1,1-二甲基环己烷	2,2,5-TMC6+1,1-DMCYC6	39.76	32.84	—	784.7
反-1-甲基-3-乙基环戊烷	*trans*-1,3-EMCYC5	40.08	33.16	—	787.3
顺-1-甲基-3-乙基环戊烷	*cis*-1,3-EMCYC5	40.34	33.42	—	789.4
反-1,2-乙基甲基环戊烷	*trans*-1,2-EMCYC5	40.50	33.58	—	790.8
2,2,4-三甲基己烷	2,2,4-TMC6	40.65	33.73	—	792.0
1-甲基-1-乙基环戊烷	1,1-EMCYC5	40.80	33.89	—	793.2
反-1,2-二甲基环己烷	*trans*-1,2-DMCYC6	41.18	34.27	—	796.4
正辛烷	*n*-Octane	41.63	34.71	—	800.0
1,顺2,顺3-三甲基环戊烷	1,*cis*-2,*cis*-3-TMCYC5	41.83	34.92	—	801.8
反-1,3-二甲基环己烷+顺-1,4-二甲基环己烷	*trans*-1,3-DMCYC6+*cis*-1,4-DMCYC6	42.02	35.11	—	803.5
2,4,4-三甲基己烷	2,4,4-TMC6	42.58	35.67	—	808.4
异丙基环戊烷	IC3CYC5	42.82	35.91	—	810.6
未确定的 C_8 环烷烃	Unidentified C8-N	43.25	36.33	—	814.3
2,3,5-三甲基己烷+C_9 环烷烃	2,3,5-TMC6+C9-N	43.54	36.62	—	816.9
2,2-二甲基庚烷	2,2-DMC7	43.90	36.99	—	820.2
顺-1,2-乙基甲基环戊烷	*cis*-1,2-EMCYC5	43.99	37.08	—	821.0
2,4-二甲基庚烷	2,4-DMC7	44.37	37.45	—	824.3
2,2,3-三甲基己烷	2,2,3-TMC6	44.49	37.58	—	825.3
顺-1,2-二甲基环己烷+4,4-二甲基庚烷	*cis*-1,2-DMCYC6+4,4-DMC7	44.78	37.87	—	827.9

表 2(续)

化 合 物	英文名称或缩写	保留时间/min	调整保留时间/min	Kovats 保留指数(35℃)	线性保留指数
2,6-二甲基庚烷 + C_9 环烷烃	2,6-DMC7 + C9-N	45.11	38.20	—	830.9
乙基环己烷 + 正丙基环戊烷	ECYC6 + NC3CYC5	45.36	38.44	—	833.0
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	45.64	38.73	—	835.6
1,1,3-三甲基环己烷 + 2.5-二甲基庚烷	1,1,3-TMCYC6 + 2,5-DMC7	45.98	39.06	—	838.5
3,5-二甲基庚烷 + 3,3-二甲基庚烷 + 环烷烃	3,5-DMC7 + 3,3-DMC7 + N	46.17	39.25	—	840.2
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	46.26	39.35	—	841.1
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	46.41	39.50	—	842.4
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	46.55	39.63	—	843.6
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	46.71	39.80	—	845.0
乙苯	Ethyl Benzene	47.34	40.43	—	850.6
2,3,4-三甲基己烷	2,3,4-TMC6	47.47	40.56	—	851.7
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	47.70	40.78	—	853.7
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	48.04	41.14	—	856.9
未确定的 C_9 环烷烃	Unidentified C9-N	47.78	44.21	—	852.7
2,3-二甲基庚烷 + 3,4-二甲基庚烷	2,3-DMC7 + 3,4-DMC7	48.23	41.32	—	858.5
间二甲苯	*m*-Xylene	48.31	41.40	—	859.2
对二甲苯	*p*-Xylene	48.43	41.52	—	860.2
4-乙基庚烷 + 环烷烃	4-EC7 + N	48.71	41.80	—	862.7
4-甲基辛烷	4-MC8	49.03	42.11	—	865.5
2-甲基辛烷	2-MC8	49.12	42.21	—	866.4
3-乙基庚烷	3-EC7	49.22	42.31	—	867.2
3-甲基辛烷	3-MC8	49.90	42.98	—	873.2
未确定的环烷烃	Unidentified N	50.20	43.29	—	875.9
未确定的环烷烃	Unidentified N	50.31	43.40	—	876.9
未确定的环烷烃	Unidentified N	50.44	43.53	—	878.1
未确定的环烷烃	Unidentified N	50.62	43.71	—	879.6
邻二甲苯	*o*-Xylene	50.88	43.97	—	881.9
1,1,2-三甲基环己烷	1,1,2-TMCYC6	51.11	44.20	—	883.9
未确定的环烷烃	Unidentified N	51.39	44.48	—	886.5
未确定的环烷烃	Unidentified N	51.63	44.71	—	888.5
未确定的链烷烃	Unidentified N	51.89	44.98	—	890.9
未确定的环烷烃	Unidentified N	52.13	45.22	—	893.0
未确定的环烷烃	Unidentified N	52.23	45.32	—	893.9
正壬烷	*n*-Nonane	52.92	46.01	—	900.0

[a] 由 n-C_4 和 n-C_5 外推而得,见附录(A1.1.3)。

[b] 由 n-C_6 和 n-C_7 外推而得,见附录(A1.2.3)。

4.2 用本方法规定的试验步骤分离石脑油组分会存在一些混峰，本方法不能确定混峰中同时流出的组分的相对浓度。在缺乏混峰的组成信息时，需要获知此类组分相对含量，不推荐使用本方法。

5 干扰

5.1 如果含有烯烃，沸点低于150℃的烯烃可以和饱和烃、芳烃分离和检出。有些烯烃将与饱和烃或芳烃同时流出，并且使这些组分的测定值偏高。

5.2 醇类、醚类和具有相近挥发性的有机物也会与饱和烃或芳烃一起流出干扰测定，使被测组分浓度偏高。

6 仪器设备

6.1 仪器

能够实现色谱柱箱温度从35℃到200℃，升温速率1℃/min的程序升温过程的气相色谱仪，配有可提供样品的线性分流进样(如200:1)的闪蒸汽化进样器以保证合适的进样。相应的载气控制器必须足够精确，可提供重复的柱流量和分流比以保证分析的稳定性。对毛细管色谱柱有最佳响应的火焰离子化检测器(包括气体控制和电子线路)必须满足或优于下列各项指标：

操作温度	100℃～300℃
灵敏度	>0.015C/g
检测限	5×10^{-12}gC/s
线性范围	$>10^7$

6.2 进样系统

将样品注入分流进样器的手动或自动液体进样器均可使用。合适的进样量为0.2μL～1.0μL，应注意，不合适的分流器或进样技术，能导致样品歧化。按第11章所述确定操作条件以避免样品畸化。

6.3 电子数据采集系统

任何用于定量的数据采集和积分设备必须满足或优于下列最低要求：

6.3.1 峰容量至少250个峰/每次分析。

6.3.2 可对面积积分，并可采用校正因子归一计算结果。

6.3.3 采用保留时间进行单个组分定性。

6.3.4 具有对干扰的剔除能力。

6.3.5 快速采样频率保证快峰(<1s)的响应。

6.3.6 正和负偏离基线的校正。

6.3.7 对于窄峰和宽峰有足够的检测灵敏度。

6.3.8 需要时可进行垂线积分和切线撇除。

6.4 色谱柱

本方法采用一根50m(内径0.21mm)熔融石英毛细管柱，该柱采用键合(交联)甲基硅酮作固定相，液膜厚度0.5μm，符合这些规定尺寸的其他色谱柱也可应用。但是所有色谱柱必须满足第10章对色谱柱柱效、分离度和极性的要求。

7 试剂和材料

7.1 载气：氦气或氮气，纯度不小于99.99%。

警告：高压气体。

7.2 燃气：氢气，纯度不小于99.9%。

警告：高压气体，极易燃。

7.3 补偿气：氦气或氮气，纯度不小于 99.99%。

警告：高压气体。

7.4 正庚烷：纯度 99%以上。

警告：易燃，吸入有害。

7.5 甲烷：

警告：极易燃气体。

7.6 2-甲基庚烷：纯度 99%以上。

警告：易燃，吸入有害。

7.7 4-甲基庚烷：纯度 99%以上。

警告：易燃，吸入有害。

7.8 2-甲基戊烷：纯度 99%以上。

警告：极易燃，吸入有害。

7.9 正辛烷：纯度 99%以上。

警告：易燃，吸入有害。

7.10 甲苯：纯度 99%以上。

警告：易燃，蒸气有害。

7.11 2，3，3-三甲基戊烷：纯度 99%以上。

警告：极易燃，吸入有害。

7.12 柱评价混合物：纯液体烃的定性混合物组分为约 0.5%甲苯、1%正庚烷、1%的 2，3，3-三甲基戊烷、1%的 2-甲基庚烷、1%的 4-甲基庚烷和 1%的正辛烷的 2-甲基戊烷溶液。

7.13 烷基化油参考油：实际精制烷基化油，用以获得图 1 和图 4。

警告：极易燃，吸入有害。

7.14 石脑油参考油：实际精制石脑油，用以获得图 2 和图 5。

警告：极易燃，吸入有害。

7.15 重整汽油参考油：实际重整汽油，用以获得图 3 和图 6。

警告：极易燃，吸入有害。

8 取样

8.1 采取雷德蒸汽压不大于 110kPa 的液态烃混合物(包括石脑油)至浮动活塞筒或开口容器中。

8.1.1 浮动活塞筒取样 按照 ASTM D 3700 的说明，从管线采取有代表性的液态烃混合物样品至浮动活塞筒中。向平衡端充填惰性气体使浮动活塞筒中的压力比样品的蒸气压高 350kPa。

8.1.2 开口容器取样 按照 GB/T 4756 的说明，手工从原料贮存处采取样品进入开口容器，在吸入样品后立即塞住容器开口。

8.2 冷却到大约 4℃保存样品，在进行分析前，一直将样品保存在此温度下。

8.3 转移部分冷却的样品到预先冷却有盖的小瓶中，然后密封小瓶。此小瓶中试样可直接用于分析。可采用手动或自动进样器进样。

9 仪器准备

9.1 按厂家或供货商的说明书安装和老化色谱柱，把老化后的色谱柱出口连接到火焰离子化检测器进口，对系统检漏，如果发现漏气，上紧或更换密封垫，然后进行下面的操作。

9.2 使用独立的电子温度测量装置，如热电偶或铂金电阻温度测量器，对气相色谱柱柱箱温度传感器进行校正。

9.2.1 将独立的温度测量探头置于色谱柱箱中色谱柱所占区域，不允许探头接触柱箱壁。

9.2.2 设置柱箱温度到 35℃，并平衡至少 15min，然后观察温度读数。

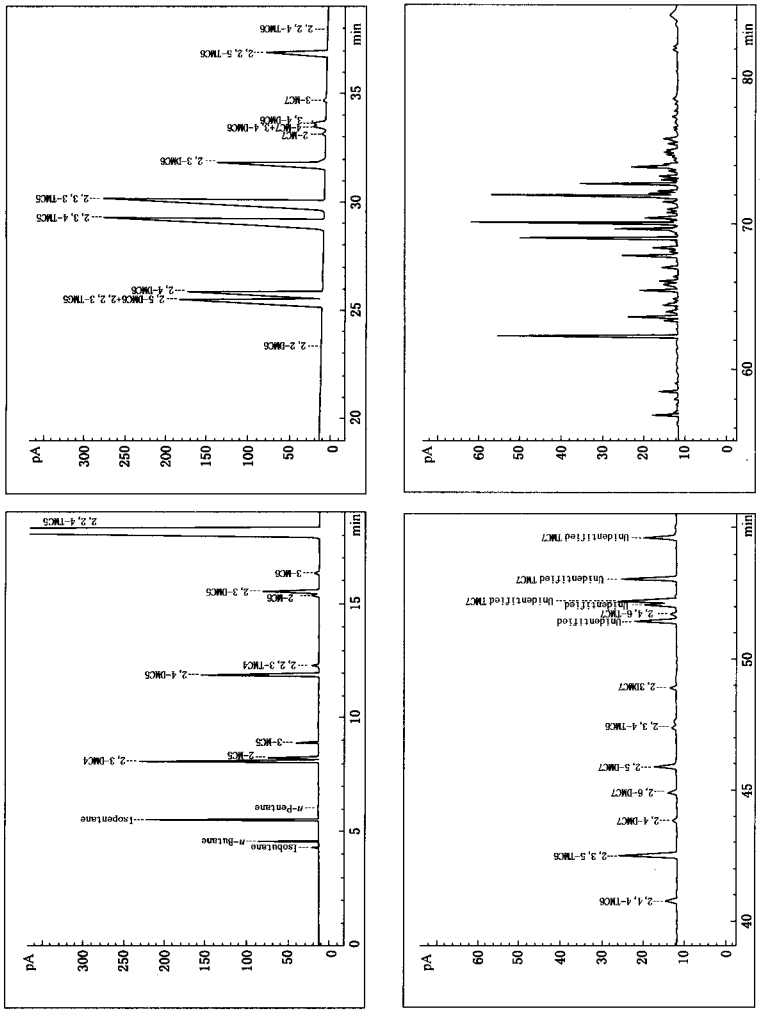

图 1　烷基化油参考油色谱图(氮气载气)

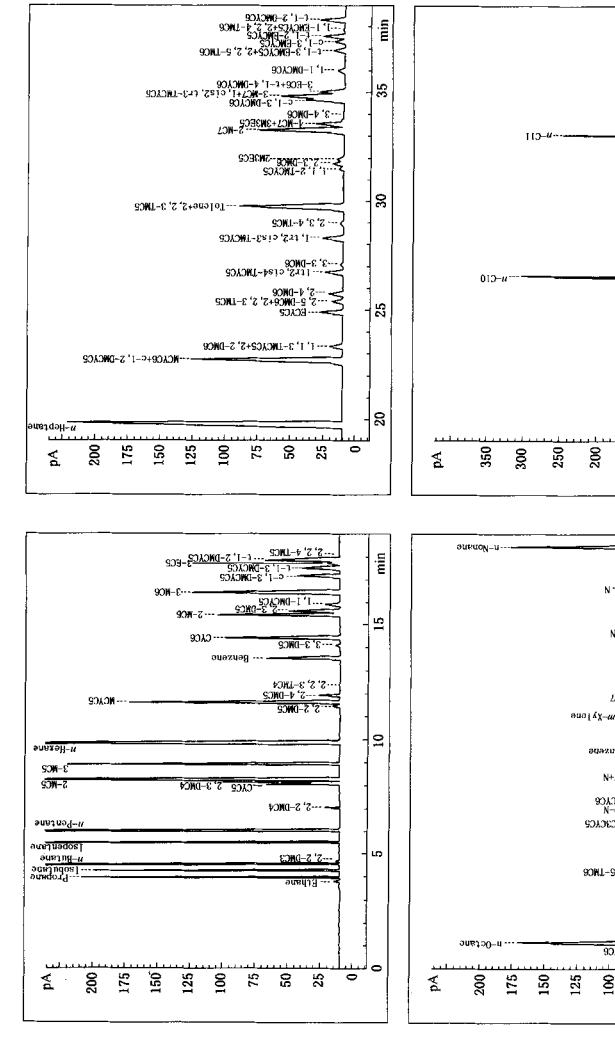

图 2 石脑油参考油色谱图(氦气载气)

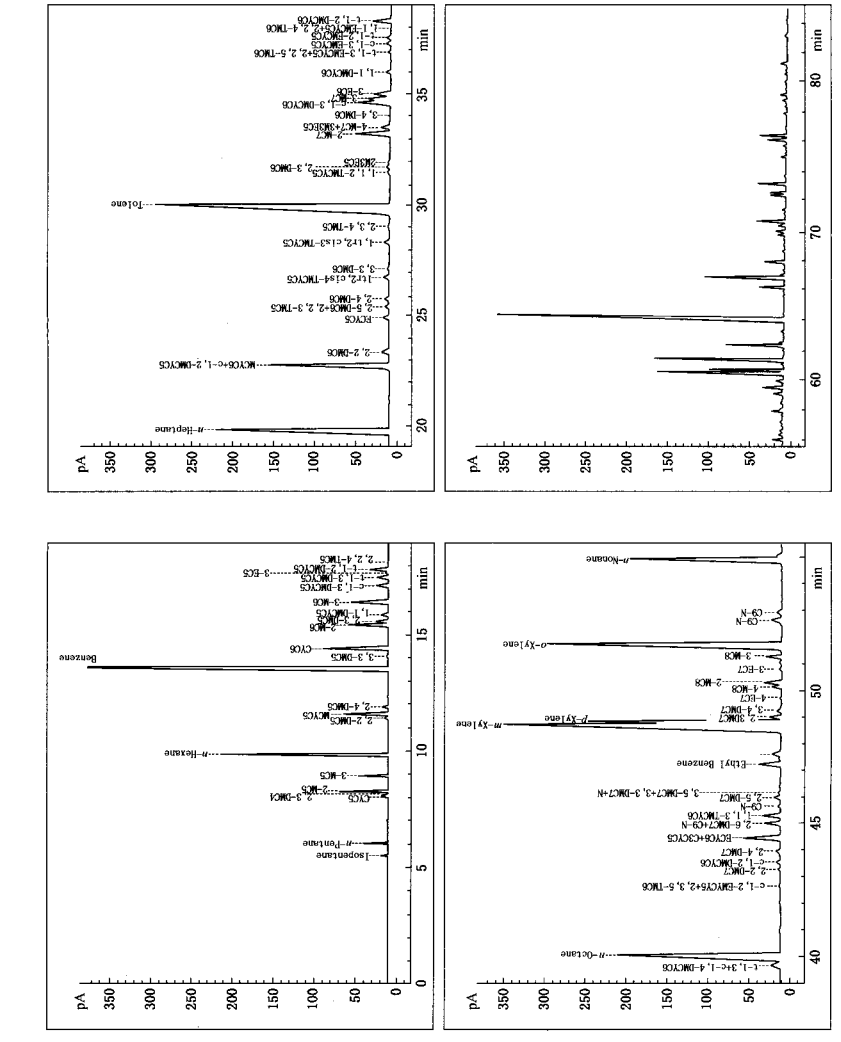

图 3 重整汽油参考油气色谱图(氮气载气)

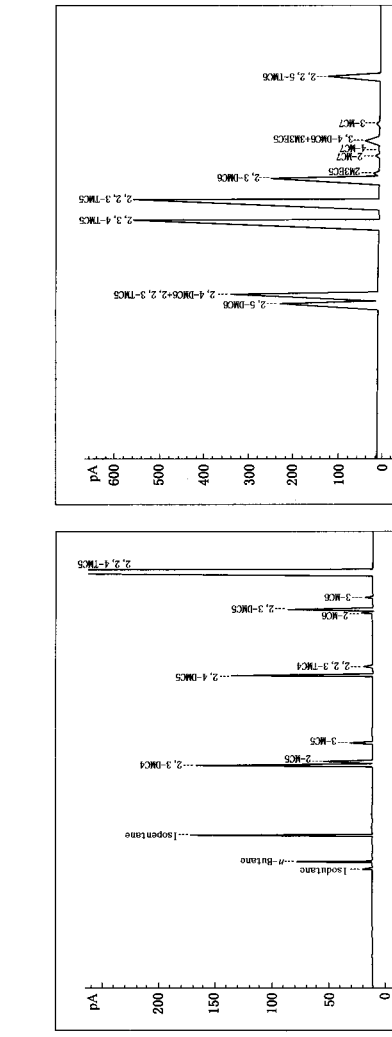

图 4 烷基化油参考油色谱图(氮气载气)

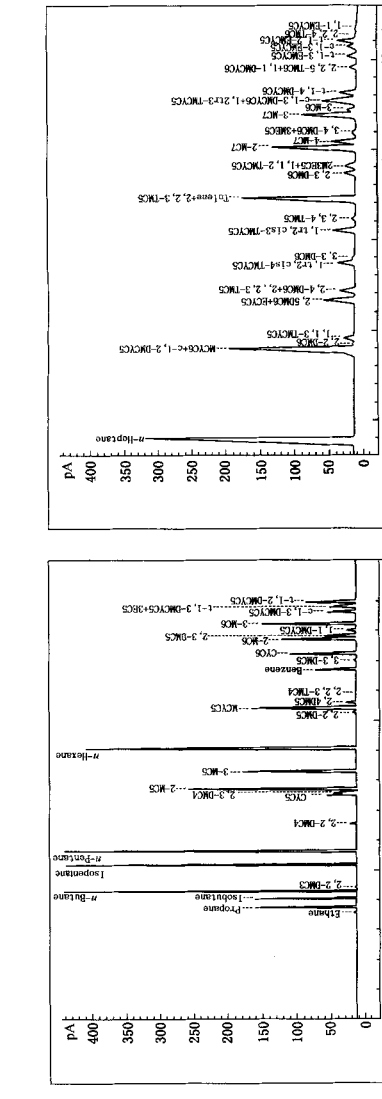

图 5　石脑油参考油色谱图(氮气载气)

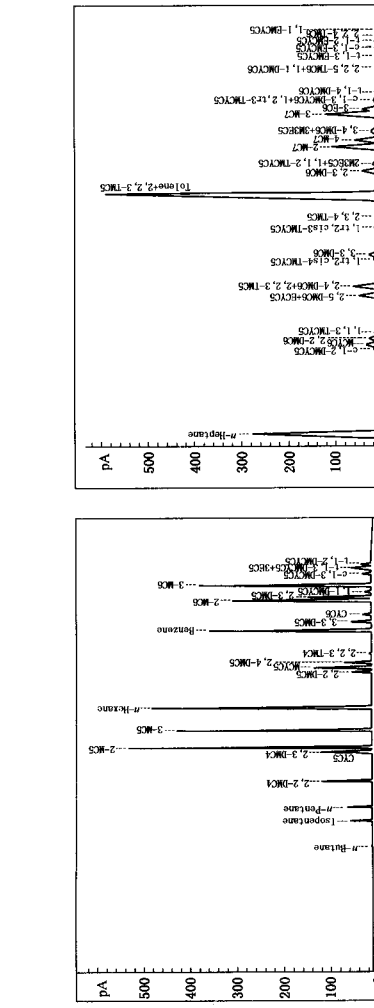

图 6　重整汽油参考油色谱图(氮气载气)

9.2.3 如果独立传感器的读数与35℃相差超过0.5℃，按厂家说明书调整校验色谱柱箱温度。

注：色谱柱箱温度相差1℃能改变二个相邻流出峰的分离度(不同烃类型的峰)，足以影响积分和定量，而相差2℃～3℃，可导致无法分离这些峰，甚至峰序颠倒。

9.3 调整气相色谱仪的操作条件使符合表3[1]的要求，打开检测器并点火，并使系统平衡。

表3 操 作 条 件

	条件1(氦气载气)	条件2(氮气载气)
色谱柱升温程序		
初始温度	35℃±0.5℃	35℃±0.5℃
平衡时间	5min	5min
初温停留时间	30min	30min
升温速率	2℃/min	2℃/min
最终温度	200℃	200℃
终温停留时间	10min	10min
进样器		
温度	200℃	230℃
分流比	200:1	200:1
样品量	0.2μL～1.0μL	0.2μL～1.0μL
检测器		
类型	火焰离子化	火焰离子化
温度	250℃	250℃
燃气	氢气(～30mL/min)	氢气(～30mL/min)
助燃气	空气(～250mL/min)	空气(～250mL/min)
补偿气	氮气(～30mL/min)	氮气(～30mL/min)
载气		
类型	氦气	氮气
平均线速	～23cm/s,35℃(见9.4)	～12cm/s,35℃(见9.4)

9.4 调整载气流量，使35℃时甲苯的保留时间是29.6min±0.2min(氦气载气)或55.0min±0.2min(氮气载气)。

9.4.1 实际中，较为简便的方法是先测定甲烷获得近似正确的流量，做法是，调整载气流量(或柱前压)直到甲烷在50m柱中的保留时间是3.6min(氦气载气)或6.9min(氮气载气)。

9.4.2 最后调整流量，使得甲苯的保留时间为要求的29.6min±0.2min(氦气载气)或55.0min±0.2min(氮气载气)，由于此项要求对于在不同实验室达到保留时间的再现性至关重要，必须注意甲苯在色谱柱上不能过载，否则导致峰变形而引起峰尖位置的漂移，注射1%的甲苯溶液将排除这种可能性。

10 色谱柱的评价

10.1 为了确保色谱柱可以实现所需的分离，色谱柱的柱效、分离度和极性必须满足一定的规格要求。对于新色谱柱测定下列数据。对于老色谱柱进行定期检查以确保色谱柱性能没有明显的下降，不满足这些规定的色谱柱不适合使用。

采用说明：

1] 本标准增加了氮气作载气时的操作条件。

10.2　设定炉温参数至恒温操作状态，在35℃的恒温条件下，注射25μL的甲烷并记录保留时间，同样在35℃下，分析在7.12条中描述的柱评价混合物，记录保留时间和每个组分的半峰宽。

10.2.1　用式(1)计算柱效。理论塔板数(n)必须大于225000(氦气载气)或240000(氮气载气)[1]。

$$n = 5.545(t_R/W_h)^2 \quad \cdots\cdots(1)$$

式中：

n——理论塔板数；

t_R——正辛烷的保留时间，min；

W_h——正辛烷半峰宽，min。

10.2.2　用式(2)计算2-甲基庚烷和4-甲基庚烷之间的分离度，R必须不小于1.35(氦气载气)或1.38(氮气载气)[2]。

$$R = \frac{2(t_{R(A)} - t_{R(B)})}{1.699(W_{h(A)} + W_{h(B)})} \quad \cdots\cdots(2)$$

式中：

R——分离度；

$t_{R(A)}$——4-甲基庚烷的保留时间，min；

$t_{R(B)}$——2-甲基庚烷的保留时间，min；

$W_{h(A)}$——4-甲基庚烷的半峰宽，min；

$W_{h(B)}$——2-甲基庚烷的半峰宽，min。

10.2.3　使用甲苯和2,3,3-三甲基戊烷的Kovats保留指数(见附录A)的差来测定色谱柱的相对极性。色谱柱的相对极性在35℃时，$I_{(2,3,3\text{-TMP})}-I_{(甲苯)}$必须是0.4±0.4。

注：注意此要求非常关键，色谱柱极性看起来微小的不同对组分流出顺序有明显的影响，使峰的鉴别困难。

10.2.3.1　Kovats保留指数按式(3)计算：

$$I_A = 700 + 100 \times \frac{\log t'_{R(A)} - \log t'_{R(C7)}}{\log t'_{R(C8)} - \log t'_{R(C7)}} \quad \cdots\cdots(3)$$

式中：

I_A——n-C_7和n-C_8之间馏出的组分的保留指数，min；

$t'_{R(A)}$——组分的调整保留时间，min；

$t'_{R(C7)}$——正庚烷的调整保留时间，min；

$t'_{R(C8)}$——正辛烷的调整保留时间，min。

10.2.3.2　通过从峰的保留时间减去不保留物质(甲烷)的保留时间，求得峰的调整保留时间。

10.2.3.3　如果2,3,3-三甲基戊烷和甲苯不能分离开，分别分析仅含其中一种组分和n-C_7、n-C_8的2-甲基戊烷溶液。

11　分流进样的线性范围

11.1　分流比的选择取决于采用的分流进样器线性特性和柱容量，色谱柱过载可引起某些组分的分离度下降，同时由于过载引起的峰变形可导致保留时间变化，这样能导致定性错误。在色谱柱评价和研究分流线性时，注意观察任何可以说明色谱柱过载的变形峰，注意组分的量，并尽量避免在实际分析时此种问题的出现。

采用说明：

1] 本标准增加了氦气作载气时柱效的要求。

2] 本标准增加了氦气作载气分离度的要求。

11.2 为确定合适的定量参数和范围，应确立分流进样器线性范围。使用已知质量分数为 10% ~ 20%(纯度 99%以上)烃类的标准混合物，沸点范围覆盖本试验方法的沸点范围。为了防止由于蒸发的损失，不能使用比正己烷轻的组分。

11.3 在下列条件下，对此标准混合物进样并积分，使用的操作条件列于表 3。通过直接的流量测量或根据附录 B 中的计算可以测得分流比。只要洗提组分都是单一峰，可以使用快速升温程序。

进样温度：200℃ 分流比：100:1 进样量：0.2μL，0.5μL，1.0μL
分流比：200:1 进样量：0.2μL，0.5μL，1.0μL
进样温度：250℃ 分流比：100:1 进样量：0.2μL，0.5μL，1.0μL
分流比：200:1 进样量：0.2μL，0.5μL，1.0μL

11.4 用校正因子归一化法计算混合物中每个组分的浓度，除苯(0.90)和甲苯(0.95)，所有组分使用的校正因子为 1，已知浓度与计算浓度的相对误差由式(4)得出。

$$\text{相对误差} = \frac{\text{计算浓度} - \text{已知浓度}}{\text{已知浓度}} \times 100\% \quad \cdots\cdots(4)$$

11.5 仅使用 11.3 条中结果的相对误差小于 3%的组合条件，这是分流器的线性范围。

12 样品分析步骤

12.1 调整仪器操作参数在表 3 规定的界限内变化，如果需要，改变分流比、进样量或进样口温度，或几项同时改变，以确保符合按第 11 章确立的分流线性。

12.2 确定在恒温 35℃下，甲苯保留时间如 9.4 条所述为 29.6min ± 0.2min(氦气载气)或 55.0min ± 0.2min(氮气载气)。

12.3 设定记录器或积分仪参数或同时设定二者，以使数据精确。设定仪器灵敏度，使得可以检测、积分和报告质量分数不小于 0.05%的任一组分。

12.4 注射 0.2μL ~ 1.0μL 的试样进入进样口，开始分析。试样量必须符合按照第 11 章测定的分流线性范围。得到一个色谱图和色谱峰的积分报告。

注：石脑油样品可能含有相当量的高挥发性组分，在打开进行二次取样或转移(见第 8 章)前，样品在最初容器中应密闭并在 4℃下冷藏保存。

13 计算

13.1 将每个峰与合适的标准谱图(图 1 ~ 图 6)中相应的部分相对照，对色谱峰定性。允许不同样品的有关峰的大小不同。正壬烷以后的组分峰无法一一鉴别。

注：为了帮助分析人员建立此试验方法，并对色谱图中色谱峰进行识别，实际用于获得图 1 ~ 图 6 的色谱图的定性参考标样可以购得。分析每一个标样，所得色谱图直接与相应的标准图比较，以帮助色谱峰的鉴定。

13.2 也可将每一色谱峰的保留指数与表 1 或表 2 中所列化合物进行比较，进行色谱峰定性。计算保留指数的公式在附录 A 中给出。在最初恒温过程流出的组分的保留指数必须用 Kovats 公式计算，所有其他组分的保留指数必须用线性保留指数计算公式计算。由于色谱柱、温度和流量轻微的不同，允许保留指数值与表中有所不同。如 11.1 条中所述，保留时间和保留指数也会由于色谱柱过载而发生变化。

13.3 如果使用计算机自动鉴别，则需仔细检查结果报告，保证色谱峰定性准确。

警告：仔细检查峰的定性结果极其重要，不作此项检查可导致严重错误。

13.4 累计正壬烷以后流出的所有峰的面积，作为一组组分 C_{10}^{+}处理。

13.5 按式(5)计算每个组分的质量分数 ω_i(包括 C_{10}^{+})。

$$\omega_i = \frac{A_i \times B_i}{\sum(A_i \times B_i)} \times 100 \quad \cdots\cdots(5)$$

式中：

ω_i——组分的质量分数，%；

A_i——i 组分峰的面积；

B_i——i 组分的相对质量校正因子，除去苯(0.9)和甲苯(0.95)外所有组分的校正因子为 1.00。

注：用定量校正标样测得的相对质量校正因子可代替 13.5 条中规定的校正因子，然而本试验方法的再现性(表4)是基于用规定因子计算得出的。如使用试验测得的校正因子，对于同一试样，不同实验室间测定的结果的差可能会超过规定的再现性值。

14 报告

14.1 报告各个组分的定性结果及质量分数连续至正壬烷，精确到 0.01%。

14.2 报告 C_{10}以上组分(C_{10}^{+})的质量分数，精确到 0.01%。

14.3 报告至正壬烷组分无法鉴别的所有组分累计质量分数。

15 精密度和偏差

15.1 精密度

按下述规定判断试验结果的可靠性(95%置信水平)。

采用本标准方法，各自测定的精密度取决于包括组分挥发性、组分浓度和同与它接近的流出组分的分离程度在内的几个因素。由于不可能测定通过本方法分离的每一个(或一组)组分的精密度，因此表 4 给出了所选择的有代表性的组分的重复性和再现性。

15.1.1 重复性(r)

用同一台仪器、同一操作人员、对同一试样得到的两个测定结果之差不能超过表 4 中重复性数值。

15.1.2 再现性(R)

由不同的操作人员、在不同的实验室、对同一试样得到的两个独立的、单独的测定结果之差不能超过表 4 中的再现性数值。

15.2 偏差

由于没有合适的标准物质可用于偏差的测定，本标准的偏差未确定。

表 4 选择的石脑油组分的重复性和再现性数值

组　分	英文及缩写	重 复 性	再 现 性
异丁烷	Isobutane	$0.071(X)^{0.85}$	$0.13(X)^{0.85}$
正丁烷	Butane	$0.091(X)^{0.85}$	$0.17(X)^{0.85}$
异戊烷	Isopentane	$0.072(X)^{0.67}$	$0.17(X)^{0.67}$
正戊烷	*n*-Pentane	$0.051(X)^{0.67}$	$0.14(X)^{0.67}$
环戊烷[a]	CYC5	$0.026(X)^{0.50}$	$0.087(X)^{0.50}$
2,3-二甲基丁烷[a]	2,3-DMC4	$0.027(X)^{0.67}$	$0.12(X)^{0.67}$
3-甲基戊烷	3-MC5	$0.015(X)$	$0.034(X)$
甲基环戊烷	MCYC5	$0.016(X)$	$0.038(X)$
苯	Benzene	$0.037(X)^{0.67}$	$0.092(X)^{0.67}$
2,3-二甲基戊烷[a]	2,3-DMC4	$0.014(X)$	$0.051(X)$
3-乙基戊烷[a,b]	3-EC5	$0.019(X)$	$0.094(X)$

表 4(续)

组　分	英文及缩写	重　复　性	再　现　性
正庚烷	*n*-Heptane	$0.012(X)^{0.50}$	$0.030(X)^{0.50}$
反 1,2- 二甲基环戊烷[a]	*trans*- 1,2 -DMCYC5	$0.016(X)$	$0.053(X)$
甲基环己烷	MCYC6	$0.065(X)^{0.50}$	$0.16(X)^{0.50}$
甲苯	Toluene	$0.015(X)$	$0.031(X)$
2,5 -二甲基己烷[b]	2,5 -DMC6	$0.012(X)$	$0.030(X)$
2-甲基庚烷	2-MC7	$0.037(X)^{0.50}$	$0.094(X)^{0.50}$
正辛烷	*n*-Octane	$0.010(X)$	$0.070(X)$
反 1,2- 二甲基环己烷	*trans*- 1,2 -DMCYC6	$0.010(X)$	$0.024(X)$
1,1- 二甲基环己烷	1,1 -DMCYC6	0.0095	0.023
对二甲苯[a]	*p*-Xylene	$0.018(X)$	$0.15(X)$
2,2 -二甲基庚烷	2,2 -DMC7	0.0050	0.0099
4-甲基辛烷[a]	4-MC7	$0.029(X)^{0.50}$	$0.073(X)^{0.50}$
正壬烷[a]	*n*-Nonane	$0.017(X)$	$0.050(X)$

注：X 指组分的质量分数。

[a] 未完全分离的组分。

[b] 采用氮气作载气时为混峰，精密度不适用。

附 录 A
(标准的附录)
Kovats 保留指数和线性保留指数

A1 Kovats 对数保留指数是溶质在指定(恒定)温度下，在指定的固定液上的气相色谱保留特性参数。它是一种非常有用的色谱峰的定性工具。

A1.1 基于观测到在恒温条件下，同系物组分的调整保留时间的对数与碳数呈线性关系，Kovats 保留指数是化合物相对于正构烷烃(对数量上)的保留值。(调整保留时间是实际保留时间减去不被保留的组分如甲烷的保留时间而得的值)。

A1.2 用于计算化合物 A 的 Kovats 保留指数 I_{iso}的公式如下(A1)所示：

$$I_{iso} = 100 \times N + 100 \times \frac{\log t'_{R(A)} - \log t'_{R(N)}}{\log t'_{R(N+1)} - \log t'_{R(N)}} \quad \cdots\cdots(A1)$$

式中，$t'_{R(N)}$和 $t'_{R(N+1)}$是碳数为 N 和 $N+1$ 的正构烷烃的调整保留时间。化合物 A 的调整保留时间 $t'_{R(A)}$刚好介于两者之间。

A1.3 在有限的范围内及损失一定准确度的情况下，Kovats 保留指数也可以通过外推而不是内插获得，在这种情形下，N 和 $N+1$ 定义为两个连续的正构烷烃，均刚好在化合物 A 之前(或之后)流出，而计算保留指数的公式保持不变。

A1.4 正构烷烃的 Kovats 保留指数定义为 $100 \times N$(如对于正己烷，$I=600$，正庚烷，$I=700$)。

A1.5 Kovats 保留指数由严格的恒温过程或程序升温(如果使用的话)的恒温区流出的组分的调整保留时间计算得来。不可以使用在一次分析中经过升温阶段后的恒温阶段的数据来计算。

A1.6 Kovats 保留指数独立于其他的操作参数，只要采用相同的温度和色谱固定相，由一适当的色谱系统计算而得的保留指数可直接与其他适当的系统获得的保留指数相比较。已出版汇集的保留指数是定性的极好依据。

A2 线性保留指数是 Kovats 保留指数的概念在程序升温过程的引伸。溶质的线性保留指数不仅取决于色谱固定相，还取决于其他的操作条件，它是溶质在色谱系统上在相同或近似相同的条件下一个非常有用的相对保留值。

A2.1 基于在程序升温条件下，同系物组分的实际保留时间的增加与碳数的增加呈线性关系，线性保留指数是化合物相对于正构烷烃的(线性)保留数值。

A2.2 化合物 A 的线性保留指数 I_{prog}计算公式如式(A2)所示：

$$I_{prog} = 100 \times N + 100 \times \frac{t_{R(A)} - t_{R(N)}}{t_{R(N+1)} - t_{R(N)}} \quad \cdots\cdots(A2)$$

式中，t_R 为实际保留时间，下标 A、N、$N+1$ 同 A1.2 中定义。

A2.3 在有限的范围及损失一定准确度的情况下，线性保留指数可以由外推而不是内插求得。在这种情形下，N 和 $N+1$ 定义为两个连续的正构烷烃，均刚好在化合物 A 之后(或之前)出峰。计算公式保持不变。

A2.4 正构烷烃的线性保留指数定义为 $100 \times N$(如，对于正辛烷 $I=800$，正壬烷，$I=900$)。

A2.5 通常线性保留指数适用于不含有恒温过程(即使分析开始阶段也如此)的线性程序升温过程。然而，由于保留指数一般仅在完全相同的操作条件下使用，所以一些分析人员也在复杂的温度程序中应用它来获得数据。虽然理论上，这种保留指数不严格，但是对于标准方法来说是非常有用的相对保留值。

附 录 B
(标准的附录)
流量参数的测量和计算

B1 在一些仪器上，可以直接使用皂膜流量计从火焰离子化检测器喷嘴测定柱流量，只要测量过程中其余的气路流量可以关闭，就可以采用此方法。

B2 柱流量也可以按照柱尺寸和流量参数，采用下列公式计算得来。

B2.1 死时间 t_m(s)按式(B1)计算：

$$t_m = \text{甲烷的保留时间} \quad \cdots\cdots(B1)$$

B2.2 载气平均线速度 $\overline{u}$(cm/s)按式(B2)计算：

$$\overline{u} = L/t_m \quad \cdots\cdots(B2)$$

式中：

L——色谱柱长，cm。

B2.3 气体压缩校正因子 j 按式(B3)计算：

$$j = \frac{3}{2} \times \frac{(p^2 - 1)}{(p^3 - 1)} \quad \cdots\cdots(B3)$$

式中：

p——柱入口和出口的绝对压力比值。

B2.4 柱出口线速度 μ_0(cm/s)按式(B4)计算：

$$\mu_0 = \overline{u}/j \quad \cdots\cdots(B4)$$

B2.5 柱截面积 A_c(cm^2)按式(B5)计算：

$$A_c = \frac{\pi(d_i)^2}{4} \quad \cdots\cdots(B5)$$

式中：

d_i——色谱柱内径，cm。

B2.6 色谱柱载气流量 F_c(cm^3/min)按式(B6)计算：

$$F_c = \mu_0 \times A_c \times 60 \quad \cdots\cdots(B6)$$

B3 进样分流比按式(B7)计算：

$$\text{分流比} = \frac{F_c + F_v}{F_c} \quad \cdots\cdots(B7)$$

式中：

F_v——直接从分流出口测得的流量，cm^3/min。

B4 举例

一根 50m 的色谱柱，内径 0.21mm，入口压力 220kPa(表压)，出口压力 101kPa(绝对压力)，甲烷保留时间 3.62min，分流出口流量 200cm^3/min，柱流量和分流比计算如下：

$$t_m = 3.62\text{min} = 217\text{s}$$

$$\overline{u} = 5000/217 = 23.0\text{cm/s}$$

$$p = \frac{(200\text{kPa} + 101\text{kPa})}{101\text{kPa}} = 3.18$$

$$j = 3/2 \times [(3.18^2 - 1)/(3.18^3 - 1)] = 0.438$$

$$\mu_0 = 23.0/0.438 = 52.5\text{cm/s}$$

$$A_c = \frac{\pi \times (0.021)^2}{4} = 0.000346\text{cm}^2$$

$$F_c = 52.5 \times 0.000346 \times 60 = 1.09\text{cm}^3/\text{min}$$

$$\text{分流比} = (200 + 1.09)/1.09 = 184 : 1$$