Издание официальное

СССР Комитет стандартов, мер и измерительных приборов при Совете Министров Союза ССР	ГОСУДАРСТВЕННЫЙ СТАНДАРТ	ГОСТ 9471—60
	Газы нефтяные МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА С ПРИМЕНЕНИЕМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРА Petroleum gases. Method for the determination of chemical composition by using the mass spectrometer	Группа Б19

Метод заключается в следующем: исследуемая смесь газообразных соединений в условиях, обеспечивающих молекулярный характер натекания, вводится в ионный источник масс-спектрометра; в результате действия электронов образуются положительно заряженные ионы различной массы, которые вытягиваются, ускоряются электрическим полем и поступают в магнитное поле, напряженность которого изменяется таким образом, чтобы на выходную щель и коллектор попадали ионы определенной массы; ионный ток, поступающий на коллектор, усиливается, измеряется и записывается на ленте потенциометра.

Совокупность ионов, возникающих при определенных условиях работы прибора, образует масс-спектр. Каждое вещество имеет свой спектр, зависящий от его строения и молекулярного веса.

Применение метода предусматривается в стандартах и технических условиях на нефтяные газы.

А. АППАРАТУРА И ЭТАЛОНЫ

1. При определении химического состава нефтяных газов применяют:

а) масс-спектрометр типа МХ 1302 или иного типа, имеющий соответствующую систему напуска и обеспечивающий проведение анализа в диапазоне молекулярных весов испытуемых газов;

б) систему для введения испытуемых газов в ионный источник, состоящую из сосуда, в котором содержится исследуемый газ, манометра для измерения давления газа и диафрагмы с отверстиями 10—20 *мк*; вакуум в системе создается механическим и диффузионным насосами; конструкция системы должна обеспечивать постоянное давление газа и молекулярный режим его натекания, т. е. линейную зависимость между интенсивностью пиков в спектре и давлением испытуемого газа в напускном баллоне;

Внесен Всесоюзным научно-исследовательским институтом по переработке нефти и газа и получению искусственного жидкого топлива	Утвержден Комитетом стандартов, мер и измерительных приборов 27/VI 1960 г.	Срок введения 1/I 1961 г.

Несоблюдение стандарта преследуется по закону. Перепечатка воспрещена

gost.e-ecolog.ru

в) индивидуальные углеводороды от C_1 до C_5 и неуглеводородные компоненты, применяемые в качестве эталонов при калибровании прибора; при отсутствии всех необходимых индивидуальных веществ можно ограничиться применением 3—4 компонентов.

Б. ПОДГОТОВКА К ИСПЫТАНИЮ

2. Установку и наладку масс-спектрометра и снятие масс-спектров исследуемых газов производят в соответствии с инструкцией, приложенной к прибору.

3. Калибрование масс-спектрометра. Прибор калибруют по всем имеющимся индивидуальным соединениям. Индивидуальное соединение вводят в систему напуска масс-спектрометра, предварительно подготовленного к анализу, в таком количестве, чтобы давление его находилось в пределах, обеспечивающих молекулярный режим натекания в ионный источник (при диафрагме 20 *мк* — до 1 *мм рт. ст.*), измеряют его давление и регистрируют ионные токи в диапазоне массовых чисел от 15 до $M + 14$, где M — молекулярный вес калибровочного соединения.

Для получения масс-спектра анализируемого соединения измеряют высоты пиков, соответствующие ионному току для каждого из зарегистрированных массовых чисел. Все величины приводят к одной шкале измерений.

Высоту пика массового числа, соответствующего молекулярному весу анализируемого соединения (молекулярного пика), принимают за 100%. Высоты пиков других массовых чисел выражают в процентах от молекулярного. Результаты измерений сводят в табл. 1 приложения.

При отсутствии всех необходимых индивидуальных соединений можно ограничиться исследованием имеющихся соединений, внеся на основании полученных данных коррективы в табл. 1 приложения.

Абсолютную чувствительность (S) данного соединения вычисляют по формуле

$$S = \frac{I}{P},$$

где:

I — высота молекулярного пика в *мм*;

P — давление анализируемого соединения в напускной системе в *мм рт. ст.*

За относительную чувствительность принимают отношение абсолютной чувствительности индивидуального соединения к абсолютной чувствительности н-бутана.

Для определения относительной чувствительности составляют смесь каждого соединения с н-бутаном, снимают масс-спектр смеси и измеряют высоты молекулярных пиков н-бутана и данного соединения.

Коэффициент относительной чувствительности (K) вычисляют по формуле:

$$K = \frac{I_1}{C_1} : \frac{I_2}{C_2} = \frac{I_1 \cdot C_2}{I_2 \cdot C_1},$$

где:

I_1 — высота молекулярного пика индивидуального соединения в *мм*;

C_1 — содержание индивидуального соединения в смеси в молярных процентах;

I_2 — высота молекулярного пика н-бутана в *мм*;

C_2 — содержание н-бутана в смеси в молярных процентах.

Пример:

Взята смесь этана с н-бутаном. Исходные данные и результаты измерений молекулярных пиков указаны в следующей таблице:

Наименования компонентов	Молекулярный вес	Содержание компонента в смеси в молярных процентах	Интенсивность пиков в *мм*		
			I_{29}	I_{30}	I_{58}
Этан	30	42,6	482	175	110
Н-бутан	58	55			

Расчет ведется по высотам пиков масс 30 и 58, являющихся молекулярными для этана и н-бутана.

Предварительно в интенсивность пика массового числа 30 вводят поправку на изотопное наложение от массового числа 29:

испр.

$$I_{30} = I_{30} - 0{,}022 \cdot I_{29} = 175 - 0{,}022 \cdot 482 = 164{,}4 \ мм.$$

Находим коэффициент относительной чувствительности для этана:

$$K = \frac{I_{30} \cdot C_2}{I_{58} \cdot C_1} = \frac{164{,}4 \cdot 55}{110 \cdot 42{,}6} = 1{,}93.$$

В. ПРОВЕДЕНИЕ ИСПЫТАНИЯ

4. Исследуемый газ вводят в систему напуска масс-спектрометра, как указано в п. 3 настоящего стандарта, записывают количество введенного газа и регистрируют ионные токи в диапазоне массовых чисел от 1 до 80.

При записи ионных токов на разных шкалах все величины приводят к одной шкале измерений.

Результаты измерений записывают в табл. 2 приложения, в графу «Высота пика в *мм*».

В табл. 2 записывают также следующие величины, необходимые для расчета:

а) коэффициенты для вычисления изотопной поправки — 0,022 для C_2, 0,033 для C_3, 0,044 для C_4, 0,055 для C_5;

б) коэффициенты для вычисления доли участия каждого индивидуального соединения в пиках, по которым производится расчет; эти коэффициенты берут по табл. 1, разделив соответствующие значения высот пиков на 100;

в) коэффициенты для приведения пиков осколочных ионов метана, этилена и пропана к молекулярным;

г) коэффициенты относительной чувствительности, которые берут из нижней строки табл. 1.

Г. ПОРЯДОК РАСЧЕТА

5. Расчет химического состава смеси углеводородных газов производят, используя величины, указанные в табл. 2 приложения. Результаты вычислений записывают в эту же таблицу.

Расчет начинают с вычисления величины молекулярных пиков н-пентана и изопентана, исходя из того, что доля участия этих соединений в пике массового числа 72 равна 1, а в пике массового числа 71 равна 0,08 и 0,31 (по данным табл. 1 и 2 приложения при калибровании прибора величина этих коэффициентов может быть иной).

Предварительно из пиков массовых чисел 71 и 72 вычитают изотопную поправку.

Для вычисления составляют систему уравнений:

$$x + y = I_{72},$$

$$0{,}08x + 0{,}31y = I_{71},$$

где:

x — высота молекулярного пика н-пентана в *мм*;

y — высота молекулярного пика изопентана в *мм*;

I_{72} — высота пика массового числа 72 с учетом изотопной поправки в *мм*;

I_{71} — высота пика массового числа 71 с учетом изотопной поправки в *мм*.

Полученные значения x и y записывают во вторую вертикальную графу табл. 2 приложения.

Записанные во второй вертикальной графе значения молекулярных пиков н-пентана и изопентана умножают на коэффициенты для вычисления участия н-пентана и изопентана в расчетных пиках других соединений.

Вычитая из величины пика массового числа 70 изотопную поправку и сумму полученных наложений н-пентана и изопентана, получают значение высоты молекулярного пика амиленов, которое записывают во вторую вертикальную графу.

Далее вычитают из пиков массовых чисел 57 и 58 изотопную поправку и сумму наложений на эти пики н-пентана, изопентана

и амиленов, а затем составляют систему уравнений для вычисления молекулярных пиков н-бутана и изобутана:

$$l + w = I_{58},$$

$$0{,}22l + 1{,}13w = I_{57},$$

где:

l — высота молекулярного пика н-бутана в *мм*;

w — высота молекулярного пика изобутана в *мм*;

I_{58} — высота пика массового числа 58 с учетом изотопной поправки и всех наложений в *мм*;

I_{57} — высота пика массового числа 57 с учетом изотопной поправки и всех наложений в *мм*.

Полученные значения l и w записывают во вторую вертикальную графу. Записанные во второй вертикальной графе значения молекулярных пиков н-бутана и изобутана умножают на коэффициенты для вычисления участия н-бутана и изобутана в расчетных пиках других соединений.

Вычитая из величины пика массового числа 56 изотопную поправку и сумму наложений н-пентана, изопентана, амиленов, н-бутана и изобутана, получают значение высоты молекулярного пика бутиленов, которое записывают во вторую вертикальную графу, а затем умножают на коэффициенты для вычисления участия бутиленов в расчетных пиках других соединений.

Высоту молекулярного пика пропана целесообразно вычислять по величине пика массового числа 43.

Для этого из величины пика массового числа 43 вычитают изотопную поправку и сумму наложений н-пентана, изопентана, амиленов, н-бутана, изобутана и бутиленов.

Для получения молекулярного пика пропана исправленную величину пика массового числа 43 делят на 0,8 (отношение пиков массовых чисел 43 и 44 в масс-спектре пропана). Полученное значение молекулярного пика пропана записывают во вторую вертикальную графу, а затем умножают на коэффициенты для вычисления участия пропана в расчетных пиках других соединений.

Вычитая из величины пика массового числа 42 изотопную поправку и сумму наложений н-пентана, изопентана, амиленов, н-бутана, изобутана, бутиленов и пропана, получают значение высоты молекулярного пика пропилена, которое записывают во вторую вертикальную графу, а затем умножают на коэффициенты для вычисления участия пропилена в расчетных пиках этилена и метана.

Вычитая из величины пика массового числа 30 изотопную поправку и сумму наложений н-пентана, изопентана, амиленов, н-бутана, изобутана и пропана, получают значение высоты молекулярного пика этана, которое записывают во вторую вертикальную графу, а затем умножают на коэффициенты для вычисления участия этана в расчетных пиках этилена и метана.

Высоту молекулярного пика этилена целесообразно вычислять по величине пика массового числа 27 или по величине пика массового числа 26 аналогично вычислению молекулярного пика пропана, деля полученную величину пика массового числа 27 на 0,54, а пика массового числа 26 на 0,52.

Высоту молекулярного пика метана целесообразно вычислять по величине массового числа 15, деля полученную величину пика массового числа 15 на 0,8.

Если сумма всех наложений и изотопной поправки равна какому-либо расчетному пику, то это означает, что в исследуемой смеси газов нет компонента, к которому относится данный расчетный пик.

По окончании вычисления высот молекулярных пиков всех компонентов исследуемого газа переписывают значения этих высот в графу «Высота молекулярного пика» табл. 3 приложения и делят их на соответствующие коэффициенты относительной чувствительности.

Полученные значения парциальных высот записывают в графу «Парциальная высота» табл. 3 приложения и суммируют.

Содержание каждого компонента в исследуемом газе в молярных процентах (X) вычисляют по формуле:

$$X = \frac{a \cdot 100}{C},$$

где:

a — парциальная высота данного компонента в *мм*;

C — сумма всех парциальных высот в *мм*.

Д. ДОПУСКАЕМЫЕ РАСХОЖДЕНИЯ ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ОПРЕДЕЛЕНИЙ

6. Расхождения между параллельными определениями содержания компонента в смеси газов не должны превышать следующих величин:

Содержание компонента в смеси газов в %	Допускаемые расхождения в % от среднего арифметического
До 1	20
От 1 до 5 вкл.	5
Более 5	2

Е. ПРОВЕРКА ПОКАЗАНИЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТРА И ПРАВИЛЬНОСТИ ПРОВЕДЕНИЯ ИСПЫТАНИЯ

7. Показания масс-спектрометра и правильность проведения испытания проверяют путем анализа искусственной смеси, приготовленной из эталонных соединений; наименьшее содержание компонента в смеси должно быть не менее 5%.

Максимальная величина отклонения результата анализа от истинного содержания компонента в смеси не должна превышать ±6% от величины истинного содержания компонента.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Таблица 1

Масс-спектры индивидуальных углеводородов и компонентов газа

m/e	Метан 16	Этилен 28	Этан 30	Пропилен 42	Пропан 44	Бутилены 56	Н-бутан 58	Изобутан 58	Амилены 70	Н-пентан 72	Изопентан 72	*m/e*
12	0,5	1							0,6		1,6	12
13											1,6	13
14	16	4							3,5		11	14
15	80	0,5	18	7	22	9	40	213	18	37	294	15
16	100		9	5	0,2		0,4	2	5	0,4		16
26		52	72	14	22	14	55	112	15	9	70	26
27		54	108	42	108	56	329	760	88	196	701	27
28		100	371	5	190	38	281	206	33	44	123	28
29			79	2	230	28	324	232	74	148	694	29
30			100		6		7	5	2	2,6	17	30
31			2,8						1,4	1		31
32									1,6	0,6		32
37				17,5	7	11	9	60	6	2	17	37
38				23	14	20	19	142	13	6,5	47	38
39				90	49	134	157	998	121	104	470	39
40				36	7,5	28	20	132	20	15	68	40
41				145	42	245	290	1849	194	285	1328	41
42				100	18	13	115	1227	135	486	1357	42
43				3,5	80	5	791	3790	12	724	1585	43

Продолжение

m/e	Метан 16	Этилен 28	Этан 30	Пропилен 42	Пропан 44	Бутилены 56	Н-бутан 58	Изобутан 58	Амилены 70	Н-пентан 72	Изопентан 72	m/e
44					100	3	26	122	21	24	54	44
45					3,3							45
49						4	3,4	10,6	2		5,8	49
50						15	14,6	45	12	4	26	50
51						12	12,5	39	14	4	35	51
52						3	2,8	8,3	5	2,6	12	52
53						14	9	25,5	31	6	49	53
54						5	2,2	3,8	10	2,6	13	54
55						40	12	21	289	39	95	55
56						100	14	20	36	18	280	56
57						5	22	113	1	108	913	57
58							100	100	0,5		40	58
59												59
66									0,5			66
67									5		3,1	67
68									1,1		1,5	68
69									7		3	69
70									100	18	4	70
71									5	8	31	71
72										100	100	72
73										4,5	6,7	73
K	4,6	5,6	1,93	3,2	1,66	3,4	1,0	0,26	2,3	0,27	0,13	*K*

ПРИМЕР ВЫЧИСЛЕНИЯ СОСТАВА ГАЗА

При снятии масс-спектра испытуемого газа получены следующие значения расчетных пиков:

$I_{15} = 247{,}9$ *мм*
$I_{16} = 32{,}6$ »
$I_{25} = 105{,}6$ »
$I_{26} = 672{,}9$ »
$I_{27} = 1654{,}2$ »
$I_{28} = 2046{,}6$ »
$I_{29} = 1124{,}3$ »
$I_{30} = 199{,}9$ »
$I_{41} = 2347{,}3$ »
$I_{42} = 1106{,}5$ »
$I_{43} = 1968{,}4$ *мм*
$I_{44} = 297{,}0$ »
$I_{55} = 623{,}4$ »
$I_{56} = 455{,}5$ »
$I_{57} = 172{,}7$ »
$I_{58} = 129{,}3$ »
$I_{69} = 10{,}3$ »
$I_{70} = 150{,}1$ »
$I_{71} = 12{,}35$ »
$I_{72} = 21{,}88$ »

Записываем все значения расчетных пиков в табл. 2.

Вычисляем высоты пиков I_{71} и I_{72} с учетом изотопных поправок:

$$I_{71} = 12{,}35 - 0{,}055 \times 150{,}1 = 4{,}09 \text{ мм}$$

$$I_{72} = 21{,}28 - 0{,}055 \times 12{,}35 = 21{,}20 \text{ мм}.$$

Для вычисления молекулярных пиков н-пентана и изопентана составляем систему уравнений:

$$x + y = 21{,}20$$
$$0{,}08x + 0{,}31y = 4{,}09.$$

Решив эти уравнения, получаем:

$$x = 10{,}8 \text{ мм}; \quad y = 10{,}4 \text{ мм}.$$

Записываем полученные значения молекулярных пиков н-пентана и изопентана во вторую вертикальную графу табл. 2 и умножаем их на коэффициенты для вычисления участия н-пентана и изопентана в расчетном пике I_{70}:

$$10{,}8 \times 0{,}18 = 1{,}94 \text{ мм}$$
$$10{,}4 \times 0{,}04 = 0{,}42 \text{ мм}.$$

Вычисляем изотопную поправку для расчетного пика I_{70}:

$$10{,}3 \times 0{,}055 = 0{,}57 \text{ мм}.$$

Суммируем все поправки для расчетного пика I_{70}:

$$1{,}94 + 0{,}42 + 0{,}57 = 2{,}9 \text{ мм}.$$

Вычитая из величины расчетного пика I_{70} сумму поправок, получаем высоту молекулярного пика амиленов:

$$150{,}1 - 2{,}9 = 147{,}2 \text{ мм}.$$

Записываем полученное значение молекулярного пика амиленов во вторую вертикальную графу табл. 2.

Вычисляем изотопные поправки для расчетных пиков I_{57} и I_{58}:

$$455{,}5 \times 0{,}044 = 20{,}04 \text{ мм}$$
$$172{,}7 \times 0{,}044 = 7{,}60 \text{ мм}.$$

Умножаем значения молекулярных пиков н-пентана, изопентана и амиленов на коэффициенты для вычисления участия этих соединений в расчетных пиках I_{57} и I_{58}:

I_{57}

$10{,}8 \times 1{,}08 = 11{,}66$ *мм*
$10{,}4 \times 9{,}13 = 94{,}95$ *мм*
$147{,}2 \times 0{,}01 = 1{,}47$ *мм*

I_{58}

$10{,}4 \times 0{,}40 = 4{,}16$ *мм*
$147{,}2 \times 0{,}005 = 0{,}74$ *мм*.

Суммируем все поправки для расчетного пика I_{57}:

$$20{,}04 + 11{,}66 + 94{,}95 + 1{,}47 = 128{,}1 \text{ мм}.$$

Вычитая из расчетного пика I_{57} сумму поправок, получаем величину пика I_{57} от наложения н-бутана и изобутана:

$$172{,}7 - 128{,}1 = 44{,}6 \text{ мм}.$$

Суммируем все поправки для расчетного пика I_{58}:

$$7{,}60 + 4{,}16 + 0{,}74 = 12{,}5 \text{ мм}.$$

Вычитая из расчетного пика I_{58} сумму поправок, получаем величину пика I_{58} от наложения н-бутана и изобутана:

$$129{,}3 - 12{,}5 = 116{,}8 \text{ мм}.$$

Для вычисления молекулярных пиков н-бутана и изобутана составляем систему уравнений:

$$\begin{gathered} l + w = 116{,}8 \\ 0{,}22l + 1{,}13\, w = 44{,}6. \end{gathered}$$

Решив эти уравнения получаем:

$$l = 96{,}0 \text{ мм}, \quad w = 20{,}8 \text{ мм}.$$

Записываем полученные значения молекулярных пиков *н*-бутана и изобутана во вторую вертикальную графу табл. 2.

Вычисляем изотопную поправку для расчетного пика I_{56}:

$$623{,}4 \times 0{,}044 = 27{,}43 \text{ мм}.$$

Умножаем значения молекулярных пиков н-пентана, изопентана, амиленов, н-бутана и изобутана на коэффициенты для вычисления участия этих соединений в расчетном пике I_{56}:

$$\begin{gathered} 10{,}8 \times 0{,}18 = 1{,}94 \text{ мм} \\ 10{,}4 \times 2{,}80 = 29{,}12 \text{ »} \\ 147{,}2 \times 0{,}36 = 59{,}99 \text{ »} \\ 96 \times 0{,}14 = 13{,}44 \text{ »} \\ 20{,}8 \times 0{,}20 = 4{,}16 \text{ »} \end{gathered}$$

Суммируем все поправки для расчетного пика I_{56}:

$$27{,}43 + 1{,}94 + 29{,}12 + 52{,}99 + 13{,}44 + 4{,}16 = 129{,}1 \text{ мм}.$$

Вычитая из величины расчетного пика I_{56} сумму поправок, получаем высоту молекулярного пика бутиленов:

$$455{,}5 - 129{,}1 = 326{,}4 \text{ мм}.$$

Записываем полученное значение молекулярного пика бутиленов во вторую вертикальную графу табл. 2.

Вычисляем изотопную поправку для расчетного пика I_{43}:

$$1106{,}5 \times 0{,}033 = 36{,}51 \text{ мм}.$$

Умножаем значения молекулярных пиков н-пентана, изопентана, амиленов, н-бутана, изобутана и бутиленов на коэффициенты для вычисления участия этих соединений в расчетном пике I_{43}:

$$\begin{gathered} 10{,}8 \times 7{,}24 = 78{,}19 \text{ мм} \\ 10{,}4 \times 15{,}85 = 164{,}84 \text{ »} \\ 147{,}2 \times 0{,}12 = 17{,}66 \text{ »} \\ 96{,}0 \times 7{,}91 = 759{,}36 \text{ »} \\ 20{,}8 \times 37{,}90 = 788{,}32 \text{ »} \\ 326{,}4 \times 0{,}05 = 16{,}32 \text{ »} \end{gathered}$$

Суммируем все поправки для расчетного пика I_{43}:

$$36{,}51 + 78{,}19 + 164{,}84 + 17{,}66 + 759{,}36 + 788{,}32 + 16{,}32 = 1862{,}2 \text{ мм}.$$

Вычитая из величины расчетного пика I_{43} сумму поправок, получаем высоту пика I_{43} от наложения пропана:

$$1968{,}4 - 1862{,}2 = 106{,}2 \text{ мм}.$$

Для получения молекулярного пика пропана делим исправленную величину пика I_{43} на 0,8:

$$106{,}2 : 0{,}8 = 132{,}8 \text{ мм}.$$

Записываем полученное значение молекулярного пика пропана во вторую вертикальную графу табл. 2.

Вычисляем изотопную поправку для расчетного пика I_{42}:

$$2347{,}3 \times 0{,}033 + 77{,}46 \text{ мм}.$$

Умножаем значения молекулярных пиков н-пентана, изопентана, амиленов, н-бутана, изобутана, бутиленов и пропана на коэффициенты для вычисления участия этих соединений в расчетном пике I_{42}:

$$\begin{aligned}
10{,}8 \times 4{,}86 &= 52{,}49 \text{ мм} \\
10{,}4 \times 13{,}57 &= 141{,}13 \text{ »} \\
147{,}2 \times 1{,}35 &= 198{,}72 \text{ »} \\
96 \times 1{,}15 &= 110{,}40 \text{ »} \\
20{,}8 \times 12{,}27 &= 255{,}22 \text{ »} \\
326{,}4 \times 0{,}13 &= 42{,}43 \text{ »} \\
132{,}8 \times 0{,}18 &= 23{,}90 \text{ »}
\end{aligned}$$

Суммируем все поправки для расчетного пика I_{42}:

$$77{,}46 + 52{,}49 + 141{,}13 + 198{,}72 + 110{,}40 + 255{,}22 + 42{,}43 + 23{,}90 = 901{,}7 \text{ мм}.$$

Вычитая из величины расчетного пика I_{42} сумму поправок, получаем высоту молекулярного пика пропилена:

$$1106{,}5 - 901{,}7 = 204{,}8 \text{ мм}.$$

Записываем полученное значение молекулярного пика пропилена во вторую вертикальную графу табл. 2.

Вычисляем изотопную поправку для расчетного пика I_{30}:

$$1124{,}3 \times 0{,}022 = 24{,}73 \text{ мм}.$$

Умножаем значения молекулярных пиков н-пентана, изопентана, амиленов, н-бутана, изобутана и пропана на коэффициенты для вычисления участия этих соединений в расчетном пике I_{30}:

$$\begin{aligned}
10{,}8 \times 0{,}026 &= 0{,}28 \text{ мм} \\
10{,}4 \times 0{,}17 &= 1{,}77 \text{ »} \\
147{,}2 \times 0{,}02 &= 2{,}94 \text{ »} \\
96{,}0 \times 0{,}07 &= 6{,}72 \text{ »} \\
20{,}8 \times 0{,}05 &= 1{,}04 \text{ »} \\
132{,}8 \times 0{,}06 &= 7{,}97 \text{ »}
\end{aligned}$$

Суммируем все поправки для расчетного пика I_{30}:

$$24{,}73 + 0{,}28 + 1{,}77 + 2{,}94 + 6{,}72 + 1{,}04 + 7{,}97 = 45{,}5 \text{ мм}.$$

Вычитая из величины расчетного пика I_{30} сумму поправок, получаем высоту молекулярного пика этана:

$$199{,}9 - 45{,}5 = 154{,}4 \text{ мм}.$$

Записываем полученное значение молекулярного пика этана во вторую вертикальную графу табл. 2.

Вычисляем изотопную поправку для расчетного пика I_{26}:

$$105{,}6 \times 0{,}022 = 2{,}32 \text{ мм}.$$

Умножаем значения молекулярных пиков н-пентана, изопентана, амиленов, н-бутана, изобутана, бутиленов, пропана, пропилена и этана на коэффициенты для вычисления участия этих соединений в расчетном пике I_{26}:

$$\begin{aligned}
10{,}8 \times 0{,}09 &= 0{,}97 \text{ мм} \\
10{,}4 \times 0{,}70 &= 7{,}28 \text{ »} \\
147{,}2 \times 0{,}15 &= 22{,}08 \text{ »} \\
96{,}0 \times 0{,}55 &= 52{,}80 \text{ »} \\
20{,}8 \times 1{,}12 &= 23{,}30 \text{ »} \\
326{,}4 \times 0{,}14 &= 45{,}70 \text{ »} \\
132{,}8 \times 0{,}22 &= 29{,}22 \text{ »} \\
204{,}8 \times 0{,}14 &= 28{,}67 \text{ »} \\
154{,}4 \times 0{,}72 &= 111{,}17 \text{ »}
\end{aligned}$$

Суммируем все поправки для расчетного пика I_{26}:

$$2{,}32 + 0{,}97 + 7{,}28 + 22{,}08 + 52{,}80 + 23{,}30 + 45{,}70 + 29{,}22 + 28{,}67 + 111{,}17 = 323{,}5 \text{ мм}.$$

Вычитая из величины расчетного пика I_{26} сумму поправок, получаем высоту пика I_{26} от наложения этилена:

$$672{,}9 - 323{,}5 = 349{,}4 \text{ мм}.$$

Для получения молекулярного пика этилена делим исправленную величину пика I_{26} на 0,52:

$$349{,}4 : 0{,}52 = 672 \text{ мм}.$$

Записываем полученное значение молекулярного пика этилена во вторую вертикальную графу табл. 2.

Умножаем значения молекулярных пиков н-пентана, изопентана, амиленов, н-бутана, изобутана, бутиленов, пропана, пропилена, этана и этилена на коэффициенты для вычисления участия этих соединений в расчетном пике I_{15}:

$$\begin{aligned}
10{,}8 \times 0{,}37 &= 4{,}00 \text{ мм} \\
10{,}4 \times 2{,}94 &= 30{,}58 \text{ »} \\
147{,}2 \times 0{,}18 &= 26{,}50 \text{ »} \\
96{,}0 \times 0{,}40 &= 38{,}40 \text{ »} \\
20{,}8 \times 2{,}13 &= 44{,}30 \text{ »} \\
326{,}4 \times 0{,}09 &= 29{,}38 \text{ »} \\
132{,}8 \times 0{,}22 &= 29{,}22 \text{ »} \\
204{,}8 \times 0{,}07 &= 14{,}34 \text{ »} \\
154{,}4 \times 0{,}18 &= 27{,}79 \text{ »} \\
672{,}0 \times 0{,}005 &= 3{,}36 \text{ »}
\end{aligned}$$

Суммируя все наложения на пик I_{15}, получаем 247,9 мм, т. е. величину, равную расчетному пику I_{15}.

Таблица 2

Расчет состава газа по масс-спектрам

Наименования рассчитываемых величин	Высота молекулярного пика	Метан		Этилен			Этан		Про	пилен	Пропан		Бутилены		Бутаны		Амилены		Пентаны	
Расчетные пики	—	I_{15}	I_{16}	I_{26}	I_{27}	I_{28}	I_{29}	I_{30}	I_{41}	I_{42}	I_{43}	I_{44}	55	56	57	58	69	70	71	72
Высота пика в *мм*	—																			
Фон	—																			
Изотопная поправка	—			×0,022=	×0,022=	×0,022=	×0,022=	×0,022=	×0,033=	×0,033=	×0,033=	×0,033=	×0,044=	×0,044=	×0,044=	×0,044=	×0,055=	×0,055=	×0,055=	×0,055=
Н-пентан		×0,37=	×0,004=	×0,09=	×1,96=	×0,44=		×0,026=		×4,86=	×7,24=			×0,18=	×1,08=			×0,18=	×0,08=	
Изопентан		×2,94=		×0,70=	×7,01=	×1,23=		×0,17=		×13,57=	×15,85=			×2,80=	×9,13=	×0,40=		×0,04=	×0,31=	
Амилены		×0,18=	×0,05=	×0,15=	×0,88=	×0,33=		×0,02=		×1,35=	×0,12=			×0,36=	×0,01=	×0,005=				
Н-бутан		×0,40=	×0,004=	×0,55=	×3,29=	×2,81=		×0,07=		×1,15=	×7,91=			×0,14=	×0,22=					
Изобутан		×2,13=	×0,02=	×1,12=	×7,60=	×2,06=		×0,05=		×12,27=	×37,90=			×0,20=	×1,13=					
Бутилены		×0,09=		×0,14=	×0,56=	×0,38=				×0,13=	×0,05=									
Пропан		×0,22=	×0,002=	×0,22=	×1,08=	×1,90=		×0,06=		×0,18=										
Пропилен		×0,07=	×0,05=	×0,14=	×0,42=	×0,05=														
Этан		×0,18=	×0,09=	×0,72=	×1,08=	×3,71=														
Этилен		×0,005=																		
Сумма наложений																				

Таблица 3

Наименования индивидуальных газов	Метан		Этилен			Этан	Про-пилен	Пропан		Бутилены	Изобутан	Н-бутан	Амилены	Изопентан	Н-пентан
Высота молекулярного пика	$\frac{I_{15}}{:0,8=}$	I_{16}	$\frac{I_{26}}{:0,52=}$	$\frac{I_{27}}{:0,54=}$	I_{28}			$\frac{I_{43}}{:0,8=}$	I_{44}						
Коэффициент относительной чувствительности	4,6		5,6			1,93	3,2	1,66		3,4	0,26	1,0	2,3	0,13	0,27
Парциальная высота															
Содержание компонента в молярных процентах															

Это указывает на отсутствие в испытуемом газе метана.

Полученные высоты молекулярных пиков этилена, этана, пропилена, пропана, бутиленов, изобутана, н-бутана, амиленов, изопентана и н-пентана переписываем в горизонтальную строку и, разделив каждую величину на соответствующий коэффициент относительной чувствительности, получаем значения парциальных высот:

Этилен	672	: 5,6	= 120	*мм*
Этан	154,4	: 1,93	= 80	*мм*
Пропилен	204,8	: 3,2	= 64	*мм*
Пропан	132,8	: 1,66	= 80	*мм*
Бутилены	326,4	: 3,4	= 96	*мм*
Изобутан	20,8	: 0,26	= 80	*мм*
Н-бутан	96	: 1	= 96	*мм*
Амилены	147,2	: 2,3	= 64	*мм*
Изопентан	10,4	: 0,13	= 80	*мм*
Н-пентан	10,8	: 0,27	= 40	*мм*
Сумма парциальных высот			800	*мм*

Вычисляем содержание каждого компонента в молярных процентах:

$$\text{Этилен} \quad \frac{120 \times 100}{800} = 15\%$$

$$\text{Этан} \quad \frac{80 \times 100}{800} = 10\%$$

$$\text{Пропилен} \quad \frac{64 \times 100}{800} = 8\%$$

$$\text{Пропан} \quad \frac{80 \times 100}{800} = 10\%$$

$$\text{Бутилены} \quad \frac{96 \times 100}{800} = 12\%$$

$$\text{Изобутан} \quad \frac{80 \times 100}{800} = 10\%$$

$$\text{Н-бутан} \quad \frac{96 \times 100}{800} = 12\%$$

$$\text{Амилены} \quad \frac{64 \times 100}{800} = 8\%$$

$$\text{Изопентан} \quad \frac{80 \times 100}{800} = 10\%$$

$$\text{Н-пентан} \quad \frac{40 \times 100}{800} = 5\%$$

gost.e-ecolog.ru