文章编号：1006-9941(2011)03-0343-06

气相色谱-质谱法分析火箭煤油的组成

盛 涛[1,2]，彭清涛[2]，夏本立[2]，张光友[2]
(1. 第二炮兵工程学院 503 室，陕西 西安 710025；2. 总装备部后勤部防疫大队，北京 100101)

摘 要：采用气相色谱-质谱法分析了火箭煤油的组成。在选用的分析条件下，共检测出159 个峰，鉴定了其中的131 个峰，鉴定出的组分占火箭煤油总量的80.37%。分析发现，火箭煤油中有约一半是双环环烷烃，其次是单环环烷烃和异构烷烃，正构烷烃、含氧化合物、烯烃、三环环烷烃和芳烃含量较少。双环环烷烃以烷基萘烷、烷基螺[5.5]十一烷和环烷基环己烷为主，分别占双环环烷烃的49.04%、19.28%和16.64%。单环环烷烃主要是烷基环己烷和烷基环戊烷，分别占单环环烷烃的66.62%和31.10%。

关键词：分析化学；火箭煤油；组成；气相色谱-质谱法
中图分类号：TJ55；O65；V511 **文献标识码**：A **DOI**：10.3969/j.issn.1006-9941.2011.03.022

1 引 言

煤油是一种主要由 C_9 ~ C_{16}烃类组成的复杂混合物[1]，其用途广泛，除可作为喷灯和航空涡轮发动机等的燃料外，还可用作机械零部件的洗涤剂、橡胶和制药工业溶剂等。此外，因煤油价格便宜、毒性小、无污染、能量较高，符合航天运载火箭对推进剂的选用要求[2]，还被用作火箭推进剂，并将作为我国新一代大推力运载火箭的主体推进剂投入到航天发射中。火箭煤油质量的合格与否关系到航天发射的成败，而火箭煤油质量的高低又取决于其组成。因此，分析火箭煤油的组成对控制火箭煤油质量具有非常重要的意义。尽管 GJB 5425 -2005《液体火箭发动机用煤油规范》规定了密度、馏程、粘度等 17 项检测项目，用于控制火箭煤油的质量，但这些项目的经典检测方法大多存在操作繁琐、使用试剂多、耗时等缺点。而通过火箭煤油化学组成的分析，进而建立组成-性质关系模型，由组成预测性质，从而达到控制火箭煤油质量的目的，将是一种很有意义的火箭煤油质量控制方法。组成分析是这一研究方向的基础。

关于火箭煤油详细组成的分析尚未见文献报道，本研究采用气相色谱-质谱法[3-4](GC-MS)分析了克拉玛依某石化公司所产某批次的火箭煤油，共分离出159 个峰，鉴定了其中的131 个峰，并给出了各组分的相对含量。

收稿日期：2010-09-26；**修回日期**：2010-11-02
作者简介：盛涛(1986 -)，男，在读硕士研究生，从事液体推进剂研究。e-mail：shengtaojd@163.com

2 实验部分

2.1 仪 器

Agilent 6890N-5973N 气相色谱-质谱联用仪、Agilent 7683 型自动进样器。

2.2 实验条件

气相色谱条件：HP-5MS 石英毛细管柱(30 m × 0.25 mm × 0.25 μm)；柱温 50 ℃，保持 2 min，以 2 ℃ · min^{-1}升至 130 ℃；进样口温度 290 ℃；载气为高纯氦气(99.999%)，载气流量为 0.8 mL · min^{-1}；进样量 0.2 μL；分流比 100 ∶ 1。

质谱条件：接口温度 280 ℃；电子轰击离子源(EI)，电子能量 70 eV；离子源温度 230 ℃；质量分析器温度 150 ℃；质量扫描范围为 50 ~350 amu。

2.3 样品分析

按仪器工作条件对火箭煤油样品进行直接进样分析，采用峰面积归一化法确定火箭煤油中各组分的相对含量。采用 NIST02 标准谱库检索定性。

3 结果与讨论

火箭煤油中共检测出 159 个峰，鉴定了其中的 131 个峰(火箭煤油的总离子流色谱图(TIC)，见图 1)。峰面积归一化法[5]计算各组分的相对含量，鉴定出的组分占火箭煤油总量的 80.37%。

根据上述火箭煤油的 TIC 图，依次对各色谱峰进行 NIST 谱库检索，同时结合有关质谱图解析，再配合峰纯度检验，鉴定出各组分。分析结果表明，火箭煤油的碳数分布为 C_9 ~ C_{15}，检测出的的组分可以分成烷烃、烯烃、单环环烷烃、双环环烷烃、三环环烷烃、芳烃[4,6-7]和含氧化合物[8]7 类。各类化合物包含的具体组分如下。

3.1 烷 烃

共检测到 26 种烷烃，占火箭煤油总量的16.34%，其中 C_9 ~ C_{14} 的 5 种正构烷烃占火箭煤油总量的 3.71%，21 种异构烷烃占火箭煤油总量的 12.63%，具体组分见表 1。表 1 中用斜体标示的化合物相似度低于 60%，有待进一步确证分析。

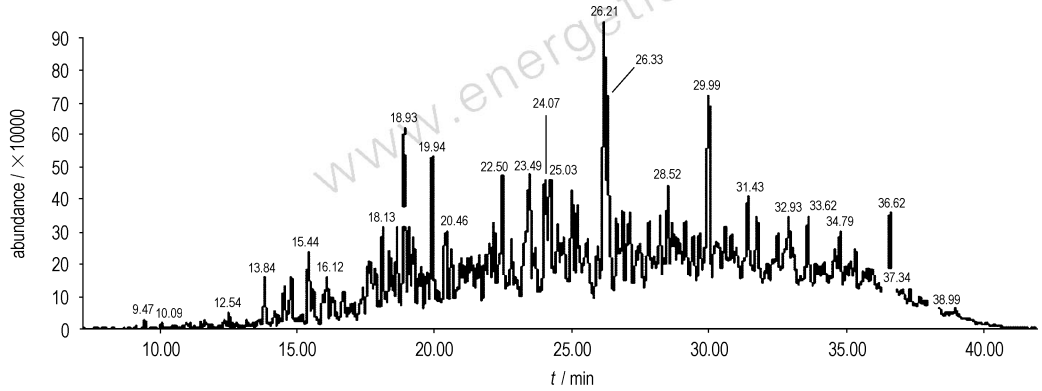

图 1 火箭煤油的总离子流图(TIC 图)

Fig. 1 Total ion current chromatogram of rocket kerosene

表 1 火箭煤油中各烷烃组分表

Table 1 List of alkanes identified

types	No.	retention time /min	compounds	M_W	molecular formula	characteristic ions	similarity /%	relative peak area/%
n-alkanes	1	12.45	*n*-decane	142	$C_{10}H_{22}$	57、71、142	91	0.07
	2	18.66	*n*-undecane	156	$C_{11}H_{24}$	57、71、156	91	0.83
	3	25.22	*n*-dodecane	170	$C_{12}H_{26}$	57、71、170	92	0.97
	4	31.77	*n*-tridecane	184	$C_{13}H_{28}$	57、71、184	95	1.57
	5	38.05	*n*-tetradecane	198	$C_{14}H_{30}$	57、71、198	74	0.32
iso-alkanes	1	9.14	2,6-dimethyloctane	142	$C_{10}H_{22}$	57、71、142	83	0.01
	2	9.48	2-methyl-3-ethyl-heptane	142	$C_{10}H_{22}$	57、98、142	83	0.03
	3	10.50	4-methylnonane	142	$C_{10}H_{22}$	57、98、142	74	0.01
	4	13.43	3-methyl-3-ethyl-heptane	142	$C_{10}H_{22}$	57、71、85	42	0.02
	5	13.84	4-methyldecane	156	$C_{11}H_{24}$	57、71、156	90	0.28
	6	15.95	5-methyldecane	156	$C_{11}H_{24}$	57、85、156	76	0.22
	7	16.34	2-methyldecane	156	$C_{11}H_{24}$	57、71、156	45	0.17
	8	16.69	3-methyldecane	156	$C_{11}H_{24}$	57、71、156	53	0.43
	9	18.50	3,7-dimethylnonane	156	$C_{11}H_{24}$	57、71、127	64	0.40
	10	19.11	2,3,6,7-tetramethyl-octane	170	$C_{12}H_{26}$	71、85、127	50	0.64
	11	19.78	2,6-dimethyldecane	170	$C_{12}H_{26}$	57、71、170	93	0.31
	12	20.40	5-methylundecane	170	$C_{12}H_{26}$	57、71、170	64	0.61
	13	22.19	6-methylundecane	170	$C_{12}H_{26}$	57、98、170	38	0.79
	14	23.63	dimethylundecane	184	$C_{13}H_{28}$	57、71、184	53	0.41
	15	24.23	4,4-dipropylheptane	184	$C_{13}H_{28}$	57、71、85	72	2.00
	16	26.21	2,6-dimethyl-undecane	184	$C_{13}H_{28}$	57、71、184	93	2.50
	17	32.52	7-methyltridecane	198	$C_{14}H_{30}$	57、71、112	90	1.10
	18	32.92	6-methyltridecane	198	$C_{14}H_{30}$	57、71、126	76	1.32
	19	36.61	2,6,11-trimethyl-dodecane	212	$C_{15}H_{32}$	57、71、127	94	0.95
	20	38.30	4,8-dimethyl-tridecane	212	$C_{15}H_{32}$	57、71、141	49	0.27
	21	38.99	2,6,10-trimethyl-dodecane	212	$C_{15}H_{32}$	57、71、127	43	0.16

3.2 环烷烃

共检测到91种环烷烃,占火箭煤油总量的60.03%,其中包括32种单环环烷烃,占火箭煤油总量的14.95%;57种双环环烷烃,占火箭煤油总量的44.70%;2种三环环烷烃,占火箭煤油总量的0.38%。

3.2.1 单环环烷烃

单环环烷烃包括25种烷基环己烷,占火箭煤油总量的9.90%;5种烷基环戊烷,占火箭煤油总量的4.65%;1种烷基环丙烷,占火箭煤油总量的0.05%;1种环十四烷占火箭煤油总量的0.35%。具体组分见表2。表中出现不同保留时间名称相同化合物系该化合物的同分异构体,下表同。

3.2.2 双环环烷烃

双环环烷烃包括2种烷基八氢化茚,占火箭煤油总量的0.43%;5种烷基螺[4.5]癸烷,占火箭煤油总量的2.30%;11种烷基螺[5.5]十一烷,占火箭煤油总量的8.62%;9种环烷基环己烷,占火箭煤油总量的7.44%;2种烷基螺[4.4]壬烷,占火箭煤油总量的2.17%;3种烷基双环[4.1.0]庚烷,占火箭煤油总量的1.82%;25种烷基萘烷,占火箭煤油总量的21.92%。具体组分见表3。

表2 火箭煤油中各单环环烷烃组分

Table 2 Monocyclo-paraffins identified

types	No.	retention time/min	compounds[1)]	M_W	molecular formula	characteristic ions	similarity /%	relative peak area/%
alkyl-cyclo-hexanes	1	10.09	1,2,3,4-tetramethyl-cyclohexane	140	$C_{10}H_{20}$	56、69、83	93	0.03
	2	10.85	1,1,2,3-tetramethyl-cyclohexane	140	$C_{10}H_{20}$	55、69、125	90	0.02
	3	11.12	2,3-dimethyl-1-ethyl-cyclohexane	140	$C_{10}H_{20}$	55、69、111	50	0.03
	4	11.51	1-methyl-3-propyl-cyclohexane	140	$C_{10}H_{20}$	55、69、97	86	0.03
	5	11.64	1-methyl-4-(1-methylethyl)-cyclohexane[1)]	140	$C_{10}H_{20}$	55、97、140	68	0.04
	6	11.89	1-methyl-4-(1-methylethyl)-cyclohexane[1)]	140	$C_{10}H_{20}$	55、97、140	52	0.02
	7	12.20	1-methyl-2-propyl-cyclohexane	140	$C_{10}H_{20}$	55、69、97	78	0.02
	8	12.43	1-methyl-3-(1-methylethyl)-cyclohexane	140	$C_{10}H_{20}$	55、69、97	59	0.03
	9	12.69	1-methyl-3-(1-methylethyl)-cyclohexane	140	$C_{10}H_{20}$	55、69、97	80	0.03
	10	13.57	1-methyl-3-propyl-cyclohexane	140	$C_{10}H_{20}$	55、69、97	43	0.03
	11	14.22	pentylcyclohexane	154	$C_{11}H_{22}$	55、67、83	64	0.13
	12	14.36	1-ethyl-2-propyl-cyclohexane	154	$C_{11}H_{22}$	55、69、111	43	0.07
	13	14.80	2,6,6-trimethyl-1-ethylcyclohexane	154	$C_{11}H_{22}$	55、69、84	93	0.42
	14	15.05	1-ethyl-2-propyl-cyclohexane	154	$C_{11}H_{22}$	55、69、111	64	0.08
	15	15.62	2,6,6-trimethyl-1-ethylcyclohexane	154	$C_{11}H_{22}$	55、69、84	43	0.35
	16	16.45	1-ethyl-2-propyl-cyclohexane	154	$C_{11}H_{22}$	55、69、111	76	0.10
	17	20.64	(3-methylpentyl)-cyclohexane	168	$C_{12}H_{24}$	55、69、83	43	0.79
	18	21.25	1-methyl-4-(1-methylbutyl)-cyclohexane	168	$C_{12}H_{24}$	55、69、97	30	0.61
	19	21.57	1-methyl-2-pentyl-cyclohexane	168	$C_{12}H_{24}$	55、97、168	47	0.51
	20	21.87	1-isobutyl-2,5-dimethylcyclohexane	168	$C_{12}H_{24}$	55、69、111	52	0.67
	21	24.89	hexylcyclohexane	168	$C_{12}H_{24}$	55、67、83	46	0.23
	22	26.33	1,1,3-trimethyl-2-butylclohexane	182	$C_{13}H_{26}$	55、69、83	97	2.44
	23	27.14	1,1,3-trimethyl-2-butylcyclohexane	182	$C_{13}H_{26}$	55、69、83	70	1.63
	24	32.15	1,2,4,5-tetraethyl-cyclohexane	196	$C_{14}H_{28}$	69、97、111	15	0.94
	25	36.79	1,1,3-trimethyl-2-(3-methylpentyl)-cyclohexane	210	$C_{15}H_{30}$	55、69、83	81	0.65
alkyl-cyclo-pentanes	1	10.98	1-methyl-3-(2-methylpropyl)-cyclopentane	140	$C_{10}H_{20}$	55、83、97	43	0.04
	2	16.11	1,2-dipropyl-cyclopentane	154	$C_{11}H_{24}$	55、69、111	49	0.47
	3	16.99	1-ethyl-2-butyl-cyclopentane	154	$C_{11}H_{22}$	55、69、111	41	0.17
	4	29.99	1-butyl-2-pentyl-cyclopentane	196	$C_{14}H_{28}$	55、69、83	30	3.23
	5	32.76	1- butyl-2-pentyl-cyclopentane	196	$C_{14}H_{28}$	55、69、83	84	0.74
alkyl-cyclo-propanes	1	12.37	1,2-dimethyl-1-pentylcyclopropane	140	$C_{10}H_{20}$	55、69、84	46	0.05
alkyl-cyclo-tetra-decanes	1	37.34	cyclotetradecane	196	$C_{14}H_{28}$	55、83、196	35	0.35

Note: These compounds in Tables with same names are isomers.

表 3 火箭煤油中双环环烷烃组分表
Table 3 List of bicyclo-paraffins identified

types	No.	retention time/min	compounds	M_W	molecular formula	characteristic ions	similarity /%	relative peak area/%
alkyl-octahydro-indene	1	11.74	octahydroindene	124	C_9H_{16}	67、81、96	55	0.03
	2	19.56	7a-methyl-1-ethyl-octahydroindene	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、152	60	0.40
alkylspiro-[4.5]-decanes	1	12.82	spiro[4.5]decane	138	$C_{10}H_{18}$	67、96、138	41	0.03
	2	20.85	1,6-dimethyl-spiro[4.5]decane	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	87	0.33
	3	21.67	1,8-dimethyl-spiro[4.5]decane	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	68	0.50
	4	22.38	1,6-dimethyl-spiro[4.5]decane	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	97	0.57
	5	22.83	1,6-dimethyl-spiro[4.5]decane	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	90	0.87
alkylspiro-[5.5]-undecanes	1	23.70	1,8-dimethyl-spiro[5.5]undecane	180	$C_{13}H_{24}$	55、95、180	25	0.67
	2	26.88	1,9-dimethyl-spiro[5.5]undecane	180	$C_{13}H_{24}$	81、95、180	43	0.99
	3	27.37	2,8-dimethyl-spiro[5.5]undecane	180	$C_{13}H_{24}$	81、95、137	43	0.75
	4	27.98	2,8-dimethyl-spiro[5.5]undecane	180	$C_{13}H_{24}$	81、95、137	30	0.70
	5	28.14	1,9-dimethyl-spiro[5.5]undecane	180	$C_{13}H_{24}$	81、95、180	64	0.33
	6	28.38	2,9-dimethyl-spiro[5.5]undecane	180	$C_{13}H_{24}$	81、95、180	38	0.47
	7	28.52	1,7-dimethyl-spiro[5.5]undecane	180	$C_{13}H_{24}$	82、95、180	46	1.26
	8	28.91	2,9-dimethyl-spiro[5.5]undecane	180	$C_{13}H_{24}$	81、95、180	46	1.17
	9	30.20	2,9-dimethyl-spiro[5.5]undecane	180	$C_{13}H_{24}$	81、95、180	55	0.48
	10	30.28	2,8-dimethyl-spiro[5.5]undecane	180	$C_{13}H_{24}$	81、95、137	53	0.62
	11	31.01	1,7-dimethyl-spiro[5.5]undecane	180	$C_{13}H_{24}$	81、95、137	53	1.18
naphtheniccyclo-hexanes	1	27.49	1,1′-methylenebis-cyclohexane	180	$C_{13}H_{24}$	55、67、83	59	1.14
	2	30.84	3-methyl-1-(cyclo-hexylmethyl)-cyclohexane	194	$C_{14}H_{26}$	55、83、97	30	0.96
	3	33.62	1,1′-ethylidenebis-cyclohexane	194	$C_{14}H_{26}$	55、69、111	43	1.54
	4	34.05	1-cyclopentyl-4-(1-methylethyl)-cyclohexane	194	$C_{14}H_{26}$	69、95、151	30	0.52
	5	34.21	1,1′-(1,2-ethanediyl)-bis-cyclohexane	194	$C_{14}H_{26}$	55、83、194	38	0.83
	6	34.79	2-methyl-1-(cyclo-hexylmethyl)-cyclohexane	194	$C_{14}H_{26}$	55、83、97	43	0.87
	7	35.02	4-methyl-1-(cyclo-hexylmethyl)-cyclohexane	194	$C_{14}H_{26}$	55、83、97	25	0.69
	8	35.17	1,1′-ethylidenebis-cyclohexane	194	$C_{14}H_{26}$	55、69、111	49	0.72
	9	37.84	1-ethyl-4-(cyclo-hexylmethyl)-cyclohexane	208	$C_{15}H_{28}$	55、69、83	38	1.17
alkylspiro-[4.4]-nonanes	1	25.97	1,1,6,6-tetramethyl-spiro[4.4]nonane	180	$C_{13}H_{24}$	95、109、165	55	0.97
	2	29.45	1,1,6,6-tetramethyl-spiro[4.4]nonane	180	$C_{13}H_{24}$	95、109、165	62	1.20
alkyl-bicyclo-[4.1.0] heptanes	1	12.99	3,7,7-trimethyl-bicyclo[4.1.0]-heptane	138	$C_{10}H_{18}$	67、81、95	43	0.01
	2	26.76	3-methyl-7-pentyl-bicyclo[4.1.0]-heptane	180	$C_{13}H_{24}$	67、81、95	50	0.37
	3	27.84	2-methyl-7-pentyl-bicyclo[4.1.0]-heptane	180	$C_{13}H_{24}$	67、81、95	76	1.44
alkyl-decalin	1	15.44	trans-decalin	138	$C_{10}H_{18}$	67、82、138	95	0.59
	2	16.27	2-methyldecalin	152	$C_{11}H_{20}$	81、95、152	86	1.17
	3	17.32	1-methyldecalin	152	$C_{11}H_{20}$	67、81、96	62	0.20
	4	17.87	4a-methyldecalin	152	$C_{11}H_{20}$	81、95、137	58	0.58
	5	18.13	2-methyldecalin	152	$C_{11}H_{20}$	81、95、152	72	0.71
	6	18.39	2-methyl-cis-decalin	152	$C_{11}H_{20}$	81、95、152	90	0.57
	7	18.93	2-methyl-trans-decalin	152	$C_{11}H_{20}$	81、95、152	97	1.75
	8	19.26	2-ethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、137	81	0.86
	9	19.45	1,5-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、151	52	0.41
	10	20.15	2,3-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	95、151、166	45	0.25
	11	20.46	2-ethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、137	58	0.56
	12	20.98	1,5-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、151	49	0.57
	13	21.10	2,6-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	55	0.49
	14	21.37	1,5-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	53	0.69
	15	22.03	1,5-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	53	0.93
	16	22.50	2,6-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	93	1.38
	17	22.67	1,2-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	49	0.24
	18	22.99	1,2-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	60	0.45
	19	23.49	2,6-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	94	2.75
	20	24.07	2,6-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	83	1.66
	21	24.51	2,6-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	94	1.03
	22	24.71	1,2-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	30	1.35
	23	25.03	2,6-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	95	1.41
	24	25.31	1,6-dimethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、166	81	0.47
	25	25.59	3-ethyldecalin	166	$C_{12}H_{22}$	81、95、137	90	1.85

3.2.3 三环环烷烃

共检测出 2 种三环环烷烃占火箭煤油总量的 0.38%。它们均为全氢化多环芳烃,具体组分见表 4。

3.3 烯烃、芳烃和含氧化合物

除以上检测到的烷烃和环烷烃,还检测到4种烯烃,占火箭煤油总量的 0.31%; 1 种芳烃占火箭煤油总量的0.54%; 9 种含氧化合物(均为酮类)占火箭煤油总量的 3.15%。它们包含的具体组分见表 5。

表 4 火箭煤油中三环环烷烃组分

Table 4 Tricyclo-aromatics identified

types	No.	retention time/min	compounds	M_W	molecular formula	characteristic ions	similarity /%	relative peak area/%
perhydro-polycyclo-aromatics	1	37.68	perhydro-phenanthrene	192	$C_{14}H_{24}$	96、135、192	50	0.26
	2	38.19	dodecahydro-fluorene	178	$C_{13}H_{22}$	67、81、97	78	0.12

表 5 火箭煤油中烯烃、芳烃和含氧化合物组分

Table 5 Alkenes, aromatics and oxygen-containing compounds identified

types	No.	retention time/min	compounds	M_W	molecular formula	characteristic ions	similarity /%	relative peak area/%
alkenes	1	13.19	1-methyl-4-(1-methylethenyl)-cyclohexane	138	$C_{10}H_{18}$	81、95、138	78	0.03
	2	14.69	1-methyl-3-(1-methylethenyl)-cyclohexane	138	$C_{10}H_{18}$	81、95、138	68	0.07
	3	14.91	4-methyl-1-(1-methylethyl)-cyclohexene	138	$C_{10}H_{18}$	67、81、95	52	0.03
	4	23.87	1-cyclohexyl-heptene	180	$C_{13}H_{24}$	55、67、96	53	0.18
aromatics	1	37.07	dimethyl-1,2,3,4-tetrahydro-naphthalene	160	$C_{12}H_{16}$	145、160	90	0.54
oxygen-containing compounds	1	14.56	3-butyl-cyclohexanone	154	$C_{10}H_{18}O$	97、111、154	46	0.29
	2	15.21	2-methyl-5-(1-methylethyl)-cyclohexanone	154	$C_{10}H_{18}O$	55、111、154	55	0.11
	3	16.87	3-butyl-cyclohexanone	154	$C_{10}H_{18}O$	97、111、154	50	0.10
	4	17.68	1,7,7-trimethyl-bicyclo[2.2.1]-heptan-2-one	152	$C_{10}H_{16}O$	81、95、152	58	0.65
	5	18.01	2-methyl-5-(1-methylethenyl)-cyclohexanone	152	$C_{10}H_{16}O$	67、82、95	50	0.11
	6	18.26	4-methyl-1-(1-methylethyl)-bicyclo[3.1.0]-heptan-2-one	152	$C_{10}H_{16}O$	69、95、152	70	0.15
	7	28.78	4a-methyl-decahydrobenzo-cycloheptan-2-one	180	$C_{12}H_{20}O$	55、81、109	38	0.60
	8	30.36	4a-methyl-decahydrobenzo-cycloheptan-2-one	180	$C_{12}H_{20}O$	55、81、109	38	0.73
	9	34.44	4a,7,7-trimethyl-octahydro-naphthalenone	194	$C_{13}H_{22}O$	55、81、95	41	0.41

4 结 论

分析研究发现,火箭煤油中有接近一半是双环环烷烃,其次是含量较多的单环环烷烃和异构烷烃,另外还含有少量的正构烷烃、含氧化合物、烯烃、三环环烷烃和芳烃。双环环烷烃以烷基萘烷、烷基螺[5.5]十一烷和环烷基环己烷的含量居多,分别占双环环烷烃的 49.04%、19.28% 和 16.64%。单环环烷烃主要是烷基环己烷和烷基环戊烷,分别占单环环烷烃的 66.62% 和 31.10%。

由于火箭煤油组成复杂,且不同产地不同批次的产品间的组成也存在较大差异,因而对其各组分的定性分析造成了较大的难度。对于本研究中一些库检索匹配度较低的组分,有待在今后的工作中进一步确证分析。

参考文献:

[1] Gómez-Carracedo M P, Andrade J M, Calviño M, et al. Multivariate prediction of eight kerosene properties employing vapour-phase mid-infrared spectrometry[J]. *Fuel*, 2003, 82(10): 1211 –1218.

[2] 马瀚英. 航天煤油[M]. 北京: 中国宇航出版社, 2003.
MA Han-ying. Space Kerosene[M]. Beijing: China Aerospace Press, 2003.

[3] 吕振波, 庄丽宏. 吸附色谱/质谱法定性分析柴油烃类组成[J]. 石油化工, 1999, 28(12): 835 –837.
Lü Zhen-bo, ZHUANG Li-hong. Analysis of hydrocarbon constituents in diesel oil by adsorption chromatography/mass spectrography[J]. *Chinese Journal of Petrochemical Technology*, 1999, 28(12): 836 –837.

[4] LIU Guo-zhu, WANG Li, QU Hai-jie, et al. Artificial neural network approaches on composisition-property relationships of jet fuels based on GC-MS[J]. *Fuel*, 2007, 86(16): 2551 –2559.

[5] 曹桂红, 杨占南, 周欣, 等. 气相色谱-质谱法测定金铁锁根挥发油化学成分[J]. 理化检验-化学分册, 2009, 45(11): 1276 –1277.

CAO Gui-hong, YANG Zhan-nan, ZHOU Xin, et al. GC-MS determination of chemical components in volatile oil of psammosilene tunicoides[J]. *Chinese Journal of Physical Testing and Chemical Analysis-Part B: Chemical Analysis*, 2009, 45(11): 1276-1277.

[6] Bernabei M, Reda R, Galiero R, et al. Determination of total and polycyclic aromatic hydrocarbons in aviation jet fuel[J]. *Journal of Chromatography A*, 1995, 985(1-2): 197-203.

[7] Katherine D, Jerry L, Michael G, et al. Validation of a gas chromatography/mass spectrometry method for the quantification of aerosolized jet propellant[J]. *Journal of Chromatography A*, 2005, 1093(1-2): 11-20.

[8] Begak O Y, Syroezhko A M. Identification of oxygen-containing compounds in benzine and kerosene oil fractions and determination of sulfur and halogen content in them[J]. *Russian Journal of Applied Chemistry*, 2004, 77(4): 653-656.

Determination of Components in Rocket Kerosene by GC-MS

SHENG Tao[1,2], **PENG Qing-tao**[2], **XIA Ben-li**[2], **ZHANG Guang-you**[2]

(1. *The Second Artillery Engineering College, Xi'an* 710025, *China*; 2. *Epidemic Prevention Team of the General Equipment Logistics of CPLA, Beijing* 100101, *China*)

Abstract: Components in rocket kerosene were analyzed by gas chromatography-mass spectrometry. In the condition adopted, 159 peaks were detected in total ion current chromatogram (TIC) of rocket kerosene, 131 peaks among them were identified. The components identified account for 80.37% of total amount of rocket kerosene. It is found in rocket kerosene that, almost half of all components are bicyclo-paraffins, followed by monocyclo-paraffins and iso-alkanes, still by little *n*-alkanes, oxygen-containing compounds, alkenes, tricyclo-paraffins and aromatics. Most bicyclo-paraffins are alkyldecalins, alkylspiro[5.5]undecanes, and naphthenic cyclohexanes, which respectively account for 49.04%, 19.28% and 16.64% of bicyclo-paraffins. Monocyclo-paraffins are mostly alkylcyclohexanes and alkylcyclopentanes, which respectively account for 66.62% and 31.10% of monocyclo-paraffins.

Key words: analytical chemistry; rocket kerosene; component; gas chromatography-mass spectrometry

CLC number: TJ55; O65; V511 **Document code**: A **DOI**: 10.3969/j.issn.1006-9941.2011.03.022

读者·作者·编者

中国兵工学会火工烟火专业第十六届学术年会征文通知

为促进我国火工烟火行业的创新发展，中国兵工学会火工烟火专业第十六届学术年会拟于2011年三季度召开。

会议征文内容包括：

1、国内外火工品及相关药剂、烟火剂的基础理论，关键技术；
2、国内外火工品、爆破器材、烟火器材的发展趋势及动态分析；
3、国内外火工品及相关药剂的新工艺、新材料、新方法；
4、火工品及相关药剂、爆破器材、烟火器材安全生产、贮运及销毁新技术；
5、火工品安全性、可靠性评估新方法、新理论；
6、火工品及相关药剂测试分析新技术、新方法及仪器设备；
7、火工品及烟火器材应用研究；
8、十二五火工烟火技术的发展趋势及动态分析。

来稿请写明作者姓名、性别、职称、职务、单位名称、从事研究工作内容、通信地址、邮编、电话、手机、E-mail，以便联系。征文截稿日期为2011年7月10日。

联系人：王建华 电话：029-85333470、13152441200 E-mail：hgxh2005@163.com
地址：西安市99号信箱兵工学会 邮编：710061