

Czesław KAJDAS

Katedra Technologii Nafty i Paliw Płynnych

SPEKTROSKOPIA MAS - NIEZBĘDNE NARZĘDZIE ANALITYCZNE
W BADANIU PRODUKTÓW NAFTOWYCH

Ropa naftowa stanowi nie tylko podstawowy surowiec do produkcji głównie paliw silnikowych i różnego rodzaju środków smarowych, ale jest również cennym surowcem do syntez chemicznych. Właściwe i ekonomiczne wykorzystanie tego cennego surowca, tak w przemyśle rafineryjnym jak i petrochemicznym, zależy m.in. od możliwości szybkiego określenia składu poszczególnych frakcji naftowych.

Z uwagi na fakt, że ropa naftowa jest skomplikowaną mieszaniną związków organicznych, oznaczanie jej składników, szczególnie wysokowrzących, należy do trudniejszych zadań analitycznych. Znaczna liczba możliwych składników, mało zróżnicowanych pod względem wielkości cząsteczki i polarności struktury wymaga stosowania najbardziej czułych metod analizy instrumentalnej. Spośród szybko rozwijających się nowoczesnych metod analiz fizykochemicznych, czołowe miejsce w analizie węglowodorów zajmuje spektroskopia mas. Połączenie natomiast tej metody z chromatografią gazową i spektrofotometrią w podczerwieni, pozwala uzyskać już bardzo szeroki zakres informacji o badanych mieszaninach związków naftowych (tablica 1).

Celem pracy jest przedstawienie możliwości wykorzystania spektrografii mas jonów ujemnych w badaniu wysokowrzących nasyconych składników ropy naftowej. Metoda ta w odróżnieniu od klasycznej spektrometrii mas jonów dodatnich pozwala uzyskać widmo mas składające się prawie wyłącznie z jonów cząsteczkowych. Mechanizm two-

Tablica 1

Rodzaje informacji uzyskiwanych w analizie wieloskładnikowych mieszanin węglowodorów różnymi metodami fizykochemicznymi

Metoda	Oznaczenie:					
	średniego ciężaru cząsteczkowego M_s	składu strukturalno-grupowego	grup funkcyjnych	typów węglowodorów	izomerów poszczególnych typów węglowodorów	typów związków zawierających heteroatomy (S, O, N)
Chromatografia gazowa (GC)	możliwe w odniesieniu do niżej wrzających składników					
Spektrofotometria w podczerwieni (IR)	-	++	++	-	-	-
Spektrofotometria w nadfioletcie (UV)	-	+(A)	+(A)	-	-	-
Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR)	-	++	++	-	-	-
Spektroskopia masowa (MS)	++	++	+	++	+	+
Połączenie: GC - MS	++	++	++	++	++	++
Połączenie: GC - IR - MS	++	++	++	++	++	++

+++ łatwe

++ możliwe

+ możliwe z ograniczeniem

- niemożliwe

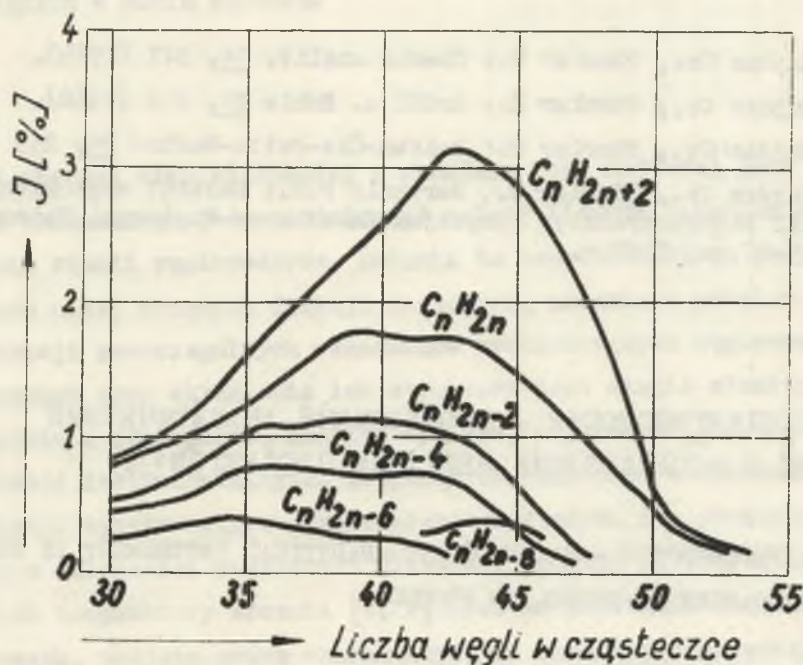
(A) węglowodory aromatyczne

według ich ciężaru cząsteczkowego

rzenia jonów ujemnych w przypadku węglowodorów nasyconych przebiega według mechanizmu jonowo-cząsteczkowego:



dając jony o $M/e = M_C + 17$.



Rys. 1. Skład frakcji stałych węglowodorów nasyconych oznaczony za pomocą spektrografii mas

Przeprowadzone dotychczas badania potwierdziły przydatność tej metody do badania węglowodorów naftowych [1-4]. Na rysunku 1 przedstawiono skład frakcji stałych węglowodorów nasyconych wydzielonych z rop polskich. Jak widać z rysunku, badana mieszanina obejmuje sześć szeregów homologicznych węglowodorów, od alkanów do penta-cyklanów, o liczbie węgli w cząsteczce od 30 do 52.

Najnowsze badania wykazują, że istnieje możliwość oznaczania węglowodorów zawierających do 70 węgli w cząsteczce.

LITERATURA

- [1] Kajdas Cz., Tümmler R.: *Chemia analit.* 14, 347 (1969).
- [2] Kajdas Cz., Tümmler R.: *Erdöl u. Kohle* 21, 213 (1968).
- [3] Kajdas Cz., Tümmler R.: *Seifen-Öle-Fette-Wachse* 95, 259 (1969).
- [4] Kajdas Cz., Tümmler R., Berthold P.H.: Referat wygłoszony na III Międzynarodowym Sympozjum Parafinowo-Woskowym. Weimar 15-17 maj 1969 r.

МАСС-СПЕКТРОСКОПИЯ - НЕОБХОДИМЫЙ АНАЛИТИЧЕСКИЙ
МЕТОД В ИССЛЕДОВАНИИ НЕФТЯНЫХ ПРОДУКТОВ

MASS SPECTROSCOPY - AN IMPORTANT ANALYTICAL INSTRUMENT IN THE
INVESTIGATION OF PETROLEUM PRODUCTS