

DIN EN ISO 22854



ICS 75.080

Einsprüche bis 2023-10-18
Vorgesehen als Ersatz für
DIN EN ISO 22854:2021-10

Entwurf

**Flüssige Mineralölerzeugnisse –
Bestimmung von Kohlenwasserstoffgruppen und sauerstoffhaltigen
Verbindungen in Ottokraftstoffen und in Ethanolkraftstoff (E85) –
Multidimensionales gaschromatographisches Verfahren
(ISO/DIS 22854:2023);
Deutsche und Englische Fassung prEN ISO 22854:2023**

Liquid petroleum products –

Determination of hydrocarbon types and oxygenates in automotive-motor gasoline and in ethanol (E85) automotive fuel –

Multidimensional gas chromatography method (ISO/DIS 22854:2023);

German and English version prEN ISO 22854:2023

Produits pétroliers liquides –

Détermination des groupes d'hydrocarbures et de la teneur en composés oxygénés de l'essence pour moteurs automobiles et du carburant éthanol pour automobiles E85 –

Méthode par chromatographie multidimensionnelle en phase gazeuse

(ISO/DIS 22854:2023);

Version allemande et anglaise prEN ISO 22854:2023

Anwendungswarnvermerk

Dieser Norm-Entwurf mit Erscheinungsdatum 2023-08-18 wird der Öffentlichkeit zur Prüfung und Stellungnahme vorgelegt.

Weil die beabsichtigte Norm von der vorliegenden Fassung abweichen kann, ist die Anwendung dieses Entwurfs besonders zu vereinbaren.

Stellungnahmen werden erbeten

- vorzugsweise online im Norm-Entwurfs-Portal von DIN unter www.din.de/go/entwuerfe bzw. für Norm-Entwürfe der DKE auch im Norm-Entwurfs-Portal der DKE unter www.entwuerfe.normenbibliothek.de, sofern dort wiedergegeben;
- oder als Datei per E-Mail an stellungnahme@fam-hamburg.de möglichst in Form einer Tabelle. Die Vorlage dieser Tabelle kann im Internet unter www.din.de/go/stellungnahmen-norm-entwuerfe oder für Stellungnahmen zu Norm-Entwürfen der DKE unter www.dke.de/stellungnahme abgerufen werden;
- oder in Papierform an den Fachausschuss Mineralöl- und Brennstoffnormung (FAM) des NMP, Große Elbstr. 131, 22767 Hamburg.

Die Empfänger dieses Norm-Entwurfs werden gebeten, mit ihren Kommentaren jegliche relevanten Patentrechte, die sie kennen, mitzuteilen und unterstützende Dokumentationen zur Verfügung zu stellen.

Gesamtumfang 68 Seiten

DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP)
Fachausschuss Mineralöl- und Brennstoffnormung (FAM) des NMP

Nationales Vorwort

Dieses Dokument (prEN ISO 22854:2023) wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 28 „Petroleum and related products, fuels and lubricants from natural or synthetic sources“ in Zusammenarbeit mit dem Technischen Komitee CEN/TC 19 „Gasförmige und flüssige Kraft- und Brennstoffe, Schmierstoffe und verwandte Produkte aus Erdöl und mit biologischem oder synthetischem Ursprung“ erarbeitet, dessen Sekretariat von NEN (Niederlande) gehalten wird.

Das zuständige deutsche Normungsgremium ist der Arbeitsausschuss NA 062-06-14 AA „Chromatographische Analyse“ im DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP).

Um Zweifelsfälle in der Übersetzung auszuschließen, ist die englische Originalfassung beigelegt. Die Nutzungsbedingungen für den deutschen Text des Norm-Entwurfes gelten gleichermaßen auch für den englischen Text.

Für die in diesem Dokument zitierten Dokumente wird im Folgenden auf die entsprechenden deutschen Dokumente hingewiesen:

ISO 3170	siehe	DIN EN ISO 3170
ISO 3171	siehe	DIN EN ISO 3171
ISO 4259:2006	siehe	DIN EN ISO 4259:2006-10
ISO 4259-1:2017	siehe	DIN EN ISO 4259-1:2018-04

Aktuelle Informationen zu diesem Dokument können über die Internetseiten von DIN (www.din.de) durch eine Suche nach der Dokumentennummer aufgerufen werden.

Änderungen

Gegenüber DIN EN ISO 22854:2021-10 wurden folgende Änderungen vorgenommen:

- a) der Anwendungsbereich und die Präzision in Bezug auf den Gesamtgehalt an sauerstoffhaltigen Verbindungen präzisiert und frühere Fehler bei den Gehalten an Sauerstoff und Ethanol korrigiert sowie die Rundung gemäß den Berichterstattungsanforderungen berichtigt;
- b) ein neues Verfahren C eingeführt (und dessen Präzision durch einen Ringversuch bestimmt), um die Bestimmung von sehr niedrigen Aromaten-, Benzol-, Toluol- und Hexangehalten zu ermöglichen, die für Ottokraftstoffe für kleine Motoren erforderlich sind und für die CEN/TC 19 eine Spezifikation entwickelt hat;
- c) der Text mit ASTM D6839 harmonisiert;
- d) Norm redaktionell überarbeitet.

Nationaler Anhang NA (informativ)

Literaturhinweise

DIN EN ISO 3170, *Flüssige Mineralölerzeugnisse — Manuelle Probenahme (ISO 3170)*

DIN EN ISO 3171, *Flüssige Mineralölerzeugnisse — Automatische Probenahme aus Rohrleitungen (ISO 3171)*

DIN EN ISO 4259:2006-10, *Mineralölerzeugnisse — Bestimmung und Anwendung der Werte für die Präzision von Prüfverfahren (ISO 4259:2006); Deutsche Fassung EN ISO 4259:2006*

DIN EN ISO 4259-1:2018-04, *Mineralölerzeugnisse — Präzision von Messverfahren und Ergebnissen — Teil 1: Bestimmung der Präzisionsdaten von Prüfverfahren (ISO 4259-1:2017 + Amd 1:2019 + Amd 2:2020); Deutsche Fassung EN ISO 4259-1:2017 + A1:2019 + A2:2020*

– *Entwurf* –

E DIN EN ISO 22854:2023-09

– Leerseite –

Flüssige Mineralölerzeugnisse – Bestimmung von Kohlenwasserstoffgruppen und sauerstoffhaltigen Verbindungen in Ottokraftstoffen und in Ethanolkraftstoff (E85) – Multidimensionales gaschromatographisches Verfahren (ISO/DIS 22854:2023)

Liquid petroleum products – Determination of hydrocarbon types and oxygenates in automotive-motor gasoline and in ethanol (E85) automotive fuel – Multidimensional gas chromatography method (ISO/DIS 22854:2023)

Produits pétroliers liquides – Détermination des groupes d'hydrocarbures et de la teneur en composés oxygénés de l'essence pour moteurs automobiles et du carburant éthanol pour automobiles E85 – Méthode par chromatographie multidimensionnelle en phase gazeuse (ISO/DIS 22854:2023)

Inhalt

	Seite
Europäisches Vorwort	4
Vorwort	5
Einleitung	6
1 Anwendungsbereich	7
2 Normative Verweisungen	8
3 Begriffe	8
4 Kurzbeschreibung	9
5 Reagenzien und Materialien	10
5.1 Gase	10
6 Prüfeinrichtung	11
7 Probenahme	12
8 Durchführung	12
8.1 Vorbereitung	12
8.2 Herstellung der Probe	12
8.2.1 Nur Verfahren B — Verdünnung der Probe	12
8.2.2 Alle Verfahren — Kühlung der Probe	12
8.3 Einspritzvolumen der zu prüfenden Probe	12
8.4 Feineinstellung des Geräts (Verfahren C)	12
8.5 Überprüfung des Gerätes und der Prüfbedingungen	13
8.6 Validierung	13
8.7 Vorbereitung der zu prüfenden Probe	13
8.8 Vorbereitung des Gerätes und Prüfbedingungen	13
9 Berechnung	13
9.1 Allgemeines	13
9.2 Berechnung als % (m/m)	14
9.3 Berechnung als % (V/V)	15
9.4 Berechnung des Gesamtsauerstoffgehalts als % (m/m)	17
9.5 Angabe der Ergebnisse nach Kraftstoffspezifikationen	17
10 Angabe der Ergebnisse	17
10.1 Verfahren A und C	17
10.2 Verfahren B	18
11 Präzision	18
11.1 Allgemeines	18
11.2 Wiederholbarkeit, r	18
11.3 Vergleichbarkeit, R	18
12 Prüfbericht	20
Anhang A (informativ) Geräteanforderungen	21
A.1 Allgemeines	21
A.2 Bereiche der Temperaturregelung von Systemkomponenten	22
A.3 Gasdurchflussmengen	22
A.4 Typischer Geräteaufbau	23
Anhang B (informativ) Beispiele für übliche Chromatogramme	24
B.1 Allgemeines	24
B.2 Konventioneller Kraftstoff oder BOB	24
B.3 Ein Kraftstoff mit ein oder zwei bekannten sauerstoffhaltigen Verbindungen	25
B.4 Ein Kraftstoff mit einem Gemisch aus (unbekannten) sauerstoffhaltigen Verbindungen	27
B.5 Kraftstoff mit bis zu 85 % Ethanol (E85)	28
B.6 Kraftstoff für Kleinmotoren	29
B.7 Allgemeine gute analytische Praxis	32
Literaturhinweise	33

Bilder

Bild A.1 — Typischer Geräteaufbau	23
Bild B.1 — Chromatogramm eines konventionellen Kraftstoffs oder einer Grundmischung von sauerstoffhaltigen Verbindungen für die Beimischung (BOB, en: blend stock for oxygenate blending)	25
Bild B.2 — Chromatogramm eines Kraftstoffs mit 5 % (V/V) Ethanol	26
Bild B.3 — Chromatogramm eines Kraftstoffs mit 10 % ETBE und 1 % (V/V) Ethanol	27
Bild B.4 — Ein Kraftstoff mit einem Gemisch aus (unbekannten) sauerstoffhaltigen Verbindungen	28
Bild B.5 — Typisches Chromatogramm eines E85-Kraftstoffes	29
Bild B.6 — Typisches Chromatogramm einer Feineinstellungslösung für das Verfahren C	31
Bild B.7 — Anteil von n-Paraffinen einer beispielhaften QC-Probe	32

Tabellen

Tabelle 1 — Anwendungsbereich für jedes Verfahren	7
Tabelle 2 — Beispiel für die Zusammensetzung einer Feineinstellungslösung	10
Tabelle 3 — FID-relative Responsefaktoren für Kohlenwasserstoffgruppen	14
Tabelle 4 — FID-relative Responsefaktoren für sauerstoffhaltige Verbindungen	14
Tabelle 5 — Dichte der Kohlenwasserstoffgruppen bei 15 °C	15
Tabelle 6 — Dichte für sauerstoffhaltige Verbindungen bei 15 °C	16
Tabelle 7 — Wiederholbarkeit und Vergleichbarkeit für Verfahren A	18
Tabelle 8 — Wiederholbarkeit und Vergleichbarkeit für Verfahren B (Kraftstoffe mit hohem Ethanolgehalt)	19
Tabelle 9 — Wiederholbarkeit und Vergleichbarkeit (vorläufig) für Verfahren C	19
Tabelle A.1 — Vorgeschlagene Säulenanforderungen	21
Tabelle A.2 — Bereiche der Temperaturregelung von Systemkomponenten	22
Tabelle A.3 — Typische Gasdurchflussmengen	22

Europäisches Vorwort

Dieses Dokument (prEN ISO 22854:2023) wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 28 „Petroleum and related products, fuels and lubricants from natural or synthetic sources“ in Zusammenarbeit mit dem Technischen Komitee CEN/TC 19 „Gasförmige und flüssige Kraft- und Brennstoffe, Schmierstoffe und verwandte Produkte aus Erdöl und mit biologischem oder synthetischem Ursprung“ erarbeitet, dessen Sekretariat von NEN gehalten wird.

Dieses Dokument ist derzeit zur parallelen Umfrage vorgelegt.

Rückmeldungen oder Fragen zu diesem Dokument sollten an das jeweilige nationale Normungsinstitut des Anwenders gerichtet werden. Eine vollständige Liste dieser Institute ist auf den Internetseiten von CEN abrufbar.

Anerkennungsnotiz

Der Text von ISO/DIS 22854:2023 wurde von CEN als prEN ISO 22854:2023 ohne irgendeine Abänderung genehmigt.

Vorwort

ISO (die Internationale Organisation für Normung) ist eine weltweite Vereinigung nationaler Normungsinstitute (ISO-Mitgliedsorganisationen). Die Erstellung von Internationalen Normen wird üblicherweise von Technischen Komitees von ISO durchgeführt. Jede Mitgliedsorganisation, die Interesse an einem Thema hat, für welches ein Technisches Komitee gegründet wurde, hat das Recht, in diesem Komitee vertreten zu sein. Internationale staatliche und nichtstaatliche Organisationen, die in engem Kontakt mit ISO stehen, nehmen ebenfalls an der Arbeit teil. ISO arbeitet bei allen elektrotechnischen Normungsthemen eng mit der Internationalen Elektrotechnischen Kommission (IEC) zusammen.

Die Verfahren, die bei der Entwicklung dieses Dokuments angewendet wurden und die für die weitere Pflege vorgesehen sind, werden in den ISO/IEC-Directives, Teil 1 beschrieben. Es sollten insbesondere die unterschiedlichen Annahmekriterien für die verschiedenen ISO-Dokumentenarten beachtet werden. Dieses Dokument wurde in Übereinstimmung mit den Gestaltungsregeln der ISO/IEC-Directives, Teil 2 erarbeitet (siehe www.iso.org/directives).

Es wird auf die Möglichkeit hingewiesen, dass einige Elemente dieses Dokuments Patentrechte berühren können. ISO ist nicht dafür verantwortlich, einige oder alle diesbezüglichen Patentrechte zu identifizieren. Details zu allen während der Entwicklung des Dokuments identifizierten Patentrechten finden sich in der Einleitung und/oder in der ISO-Liste der erhaltenen Patenterteilungen (siehe www.iso.org/patents).

Jeder in diesem Dokument verwendete Handelsname dient nur zur Unterrichtung der Anwender und bedeutet keine Anerkennung.

Für eine Erläuterung des freiwilligen Charakters von Normen, der Bedeutung ISO-spezifischer Begriffe und Ausdrücke in Bezug auf Konformitätsbewertungen sowie Informationen darüber, wie ISO die Grundsätze der Welthandelsorganisation (WTO, en: World Trade Organization) hinsichtlich technischer Handelshemmnisse (TBT, en: Technical Barriers to Trade) berücksichtigt, siehe www.iso.org/iso/foreword.html.

Dieses Dokument wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 28, *Petroleum and related products, fuels and lubricants from natural or synthetic sources*, in Zusammenarbeit mit dem Europäischen Komitee für Normung (CEN), Technisches Komitee CEN/TC 19, *Gasförmige und flüssige Kraft- und Brennstoffe, Schmierstoffe und verwandte Produkte aus Erdöl und mit biologischem oder synthetischem Ursprung*, in Übereinstimmung mit der Vereinbarung zur technischen Zusammenarbeit zwischen ISO und CEN (Wiener Vereinbarung) erarbeitet.

Diese fünfte Ausgabe ersetzt die vierte Ausgabe (ISO 22854:2021), die technisch überarbeitet wurde. Die wesentlichen Änderungen im Vergleich zur Vorgängerausgabe sind folgende:

- der Anwendungsbereich und die Präzision wurden im Hinblick auf die gesamten sauerstoffhaltigen Verbindungen geklärt und in Bezug auf vorherige Fehler des Sauerstoff- und Ethanolgehalts sowie die durch die Anforderungen an die Berichterstattung geforderte Rundung korrigiert;
- ein neues Verfahren C wurde implementiert (und dessen Präzision durch einen ILS bestimmt), um die Bestimmung von Benzol-, Toluol- und Hexangehalten mit sehr geringer Aromatizität zu ermöglichen, die für Ottokraftstoff für Kleinmotoren, für die CEN/TC 19 eine Spezifikation entwickelt hat, erforderlich ist;
- der Text wurde darüber hinaus mit ASTM D6839 [7] harmonisiert.

Rückmeldungen oder Fragen zu diesem Dokument sollten an das jeweilige nationale Normungsinstitut des Anwenders gerichtet werden. Eine vollständige Auflistung dieser Institute ist unter www.iso.org/members.html zu finden.

Einleitung

Die Vorgängerausgaben dieses Dokuments wurden zur Bestimmung von gesättigten, olefinischen, aromatischen und sauerstoffhaltigen Kohlenwasserstoffen in Ottokraftstoffen, die den Europäischen Kraftstoffspezifikationen entsprechen, eingesetzt.

Ein Ringversuch hat gezeigt, dass das Verfahren für Kraftstoffe mit einer höheren Konzentration von sauerstoffhaltigen Verbindungen, einschließlich Methanol, angewendet werden kann. Der Ringversuch lieferte auch Daten zur Berechnung der Präzision für Toluol in Kraftstoff. Eine weitere Studie befasste sich mit höheren Ethergehalten. Anhang B enthält Beispiel-Chromatogramme von Kraftstoffen mit einer Vielzahl von sauerstoffhaltigen Verbindungen für die Verwendung zur korrekten Identifizierung dieser sauerstoffhaltigen Verbindungen.

Ein weiterer Ringversuch hat gezeigt, dass die Methode für Kraftstoffe mit sehr geringer Aromatizität anwendbar ist. Die Studie ermöglichte die Optimierung eines Validierungsschritts (Verfahren C).

Das in diesem Dokument beschriebene Prüfverfahren ist mit ASTM D6839 [7], mit Ausnahme des Verfahrens C, das sich rein auf europäische Produkte konzentriert, harmonisiert.

1 Anwendungsbereich

Dieses Dokument legt ein Verfahren zur gaschromatographischen Bestimmung (GC) von gesättigten, olefinischen und aromatischen Kohlenwasserstoffen in Ottokraftstoffen für Kleinmotoren und Ethanol-Automobilkraftstoff (E85) fest. Zusätzlich können die Gehalte an Benzol und Toluol, sauerstoffhaltigen Verbindungen sowie der Gesamtsauerstoffgehalt bestimmt werden.

ANMERKUNG 1 Für die Zwecke dieses Dokuments wird zur Angabe des Massenanteils, w , einer Substanz der Ausdruck „% (m/m)“ und für den Volumenanteil, φ , einer Substanz der Ausdruck „% (V/V)“ verwendet.

Dieses Dokument definiert drei Verfahren A, B und C. Die Anwendungsbereiche sind in Tabelle 1 angegeben.

ANMERKUNG 2 Das Verfahren A wurde im Hinblick auf seinen Gesamtgehalt an sauerstoffhaltigen Verbindungen und später auf einzelne sauerstoffhaltige Verbindungen beurteilt. Die angegebenen Bereiche gelten als für einzelne sauerstoffhaltige Verbindungen oder die gesamte Gruppe der sauerstoffhaltigen Verbindungen (unidentifiziert, nicht weiter präzisiert) anwendbar.

Obwohl dieses Verfahren speziell für die Analyse von Ottokraftstoffen mit sauerstoffhaltigen Verbindungen entwickelt wurde, kann es auch auf andere Kohlenwasserstoffe mit ähnlichen Siedebereichen, wie z. B. Naphthas und Reformate, angewendet werden.

ANMERKUNG 3 Für Verfahren A wurde die Anwendbarkeit dieses Dokuments spezifisch für die Bestimmung von *n*-Propanol, Aceton und Diisopropylether (DIPE) überprüft. Es wurden jedoch für diese Verbindungen keine Präzisionsdaten bestimmt.

Verfahren B beschreibt die Analyse von sauerstoffhaltigen Verbindungen (Ethanol, Methanol, Ether, C3- bis C5-Alkohole) in Ethanolkraftstoffen (E85) mit einem Ethanolgehalt zwischen 50 % (V/V) und 85 % (V/V). Das Benzin wird mit einer sauerstofffreien Komponente verdünnt, um den Ethanolgehalt vor der GC-Analyse auf einen Wert unter 20 % (V/V) zu senken.

Die Probe kann einschließlich der Kohlenwasserstoffe vollständig analysiert werden. Präzisionsdaten für die verdünnte Probe sind nur für die Gruppe der Sauerstoffverbindungen vorhanden.

ANMERKUNG 4 Es kann eine Überlappung zwischen C9- und C10-Aromaten auftreten. Das Gesamtergebnis ist jedoch korrekt. Isopropylbenzol wird von den C8-Aromaten abgetrennt und mit den anderen C9-Aromaten erfasst.

Verfahren C beschreibt die Analyse von Ottokraftstoff für Kleinmotoren mit geringem Gehalt an aromatischen und olefinischen Kohlenwasserstoffen.

Tabelle 1 — Anwendungsbereich für jedes Verfahren

Komponente oder Gruppe	Verfahren A	Verfahren B	Verfahren C
Gesättigte Kohlenwasserstoffe, % (V/V)	26,9 bis 79,3		
Gesamte aromatische Kohlenwasserstoffe, % (V/V)	19,3 bis 46,3		0,4 bis 2,7
Gesamte olefinische Kohlenwasserstoffe, % (V/V)	0,4 bis 26,9		0,1 bis 2,4
Benzol, % (V/V)	0,38 bis 1,98		0,04 bis 0,11
Toluol, % (V/V)	5,85 bis 31,65		
<i>n</i> -Hexan, % (V/V)			0,1 bis 2,1
Naphthene, % (V/V)			0,2 bis 3,8
Sauerstoffhaltige Verbindungen ^a , % (V/V)	0,61 bis 9,85		0,08 bis 0,86
Gehalt an Gesamtsauerstoff % (m/m)	0,50 bis 12,32		
Methanol, % (V/V)	1,05 bis 16,96	1,05 bis 16,96	

Tabelle 1 (*fortgesetzt*)

Komponente oder Gruppe	Verfahren A	Verfahren B	Verfahren C
Ethanol, %(V/V)	0,50 bis 17,86	> 50,0 und < 85,0	0,06 bis 0,39
C3- bis C5-Alkohole, %(V/V)		> 1,4 und < 2,5	
Ether, %(V/V)		> 0,5 und < 1,6	
MTBE, %(V/V)	bis zu 22,79	1,0 bis 15,7	0,01 bis 0,70
ETBE, %(V/V)	bis zu 21,36	1,0 bis 15,5	0,09 bis 0,73
TAME, %(V/V)		1,0 bis 5,9	
TAEF, %(V/V)	0,98 bis 15,59	1,0 bis 15,6	
^a Sauerstoffhaltige Verbindungen (als einzelne Komponente oder als Gruppe)			

2 Normative Verweisungen

Die folgenden Dokumente werden im Text in solcher Weise in Bezug genommen, dass einige Teile davon oder ihr gesamter Inhalt Anforderungen des vorliegenden Dokuments darstellen. Bei datierten Verweisungen gilt nur die in Bezug genommene Ausgabe. Bei undatierten Verweisungen gilt die letzte Ausgabe des in Bezug genommenen Dokuments (einschließlich aller Änderungen).

ISO 3170, *Petroleum liquids — Manual sampling*

ISO 3171, *Petroleum liquids — Automatic pipeline sampling*

3 Begriffe

Für die Anwendung dieses Dokuments gelten die folgenden Begriffe.

ISO und IEC stellen terminologische Datenbanken für die Verwendung in der Normung unter den folgenden Adressen bereit:

— ISO Online Browsing Platform: verfügbar unter <https://www.iso.org/obp>

— IEC Electropedia: verfügbar unter <https://www.electropedia.org/>

3.1

Kohlenwasserstoff

Kohlenwasserstoffgruppe

HG

Familie von Kohlenwasserstoffen, wie gesättigte Kohlenwasserstoffe, olefinische Kohlenwasserstoffe

3.1.1

Gesättigte

gesättigter Kohlenwasserstoff

Kohlenwasserstoff (3.1) mit 3 bis 12 Kohlenstoffatomen, der keine Doppelbindungen aufweist

BEISPIEL *n*-Paraffine, *iso*-Paraffine, Naphthene und Polynaphthene.

3.1.2

Olefin

olefinischer Kohlenwasserstoff

Kohlenwasserstoff (3.1) mit 3 bis 10 Kohlenstoffatomen, der Doppel- oder Dreifachbindungen aufweist

BEISPIEL *n*-Olefine, *iso*-Olefine und cyclische Olefine.

3.1.3

Aromat

aromatischer Kohlenwasserstoff

cyclischer Kohlenwasserstoff (3.1) mit abwechselnden Einfach- und Doppelbindungen zwischen den Kohlenstoffatomen im Ringsystem

BEISPIEL Benzol, Toluol und höhere homologe Reihen mit 6 bis 10 Kohlenstoffatomen und Naphthaline mit bis zu 12 Kohlenstoffatomen.

3.2

sauerstoffhaltige Verbindung

Kohlenwasserstoff (3.1), der eine Sauerstoffgruppe enthält und dessen Zugabe nach den aktuellen Kraftstoffspezifikationen gestattet ist

BEISPIEL Alkohole und Ether.

Anmerkung 1 zum Begriff: Siehe Anmerkung 2 zu Abschnitt 1.

4 Kurzbeschreibung

4.1 Alle beschriebenen Verfahren verwenden die gleiche Trenntechnik- und das gleiche Analyseverfahren. Der Unterschied zwischen dem Hauptverfahren A und Verfahren B besteht in der Verdünnung der Probe. Das zur Verdünnung eingesetzte Lösemittel wird bei der Integration nicht berücksichtigt. Dies ermöglicht nach Normierung auf 100 % die Ergebnisangabe für die unverdünnte Probe.

Verfahren C unterscheidet sich dahingehend von Verfahren A, dass es einen zusätzlichen Feineinstellungsschritt erfordert, um sicherzustellen, dass die einzelnen sauerstoffhaltigen, aromatischen und olefinischen Kohlenwasserstoffe korrekt durch Optimierung der Vorsäulentemperaturen und Ventileinstellungen identifiziert werden.

4.2 Die zu untersuchende Kraftstoff-Probe wird durch GC-Analyse mithilfe spezieller, nacheinander geschalteter Trennsäulen und Säulenschaltungs-Verfahren in Kohlenwasserstoffgruppen aufgetrennt.

Die Probe wird in das GC-System eingespritzt und nach Verdampfen in die verschiedenen Gruppen aufgetrennt. Die Detektion erfolgt immer durch einen Flammenionisationsdetektor (FID).

4.3 Die Massenkonzentration jeder erkannten Komponente oder Kohlenwasserstoffgruppe wird aus den relativen Responsefaktoren (siehe 9.2) und den Flächen der detektierten Spitzen bestimmt, gefolgt von der Normierung auf 100 %. Für Ottokraftstoff-Proben, die sauerstoffhaltige Verbindungen enthalten, welche nicht mit diesem Prüfverfahren bestimmt werden können, werden die Kohlenwasserstoffergebnisse auf 100 % abzüglich des entsprechenden, mit einem anderen Verfahren bestimmten Werts an sauerstoffhaltigen Verbindungen normiert. Die Flüssigvolumenkonzentration jeder detektierten Verbindung oder Kohlenwasserstoffgruppe wird über die Dichtewerte (siehe 9.3) der berechneten Massenkonzentrationen der ermittelten Peaks und anschließender Normierung auf 100 % bestimmt.

WICHTIG — Es ist wesentlich für die korrekte Durchführung des Verfahrens, dass mit größter Vorsicht verfahren wird, um sicherzustellen, dass alle Verbindungen richtig identifiziert werden. Aufgrund des großen Bereichs an Responsefaktoren gilt dies insbesondere für die Identifikation von sauerstoffhaltigen Verbindungen. Daher wird für eine korrekte Identifikation dringend empfohlen, mögliche unbekannte sauerstoffhaltige Verbindungen mittels einer Referenzmischung, welche diese reinen Verbindungen enthält, zu bestimmen.

4.4 Nach dieser Analyse wird der Ottokraftstoff zunächst nach Kohlenwasserstoffgruppen und anschließend nach Anzahl der Kohlenstoffatome aufgetrennt. Unter Anwendung der entsprechenden relativen Responsefaktoren kann die Massenverteilung der Gruppen in der Ottokraftstoff-Probe berechnet werden.

5 Reagenzien und Materialien

5.1 Gase

Für die Helium-, Wasserstoff- und Stickstoff-Versorgung wird die Installation von geeigneten Feuchtigkeitsfiltern empfohlen.

5.1.1 Wasserstoff, Reinheit 99,995 %.

WARNUNG — Wasserstoff ist in Mischungen mit Luft bei Konzentrationen von 4 % (V/V) bis 75 % (V/V) explosiv. Die Bedienungsanleitung des Herstellers bezüglich Leckagen muss gelesen werden.

5.1.2 Helium oder Stickstoff, Reinheit 99,995 %.

Die Betriebsparameter des Systems wie Temperaturen der Säule und der Falle, die Strömungsgeschwindigkeit des Trägergases und Ventil-Schaltzeiten sind abhängig vom eingesetzten Trägergas. Der Einsatz von Stickstoff als Trägergas ist nicht für alle Konfigurationen möglich. Beim Einsatz von Stickstoff muss der Gerätehersteller bezüglich spezifischer Informationen oder Anweisungen kontaktiert werden.

5.1.3 Druckluft.

5.2 Probengefäße, luftdicht und inert, z. B. mit Gummimembran-Verschluss mit selbstdichtendem Polytetrafluorethylen (PTFE) beschichtet.

5.3 Standardlösungen, handelsübliche(r) Ottokraftstoff(e) verwendet als Referenz, der/die mit der zu untersuchenden Probe vergleichbare Komponenten in ähnlichen Konzentrationen enthält/enthalten.

Die Zusammensetzung der Standardlösung sollte mittels Ringversuch oder anderer Verfahren bestimmt worden sein.

Für das Verfahren C muss sichergestellt werden, dass der Gehalt an aromatischen Kohlenwasserstoffen sowie von Benzol und Olefinen ausreichend gering und mit dem Gehalt der Prüfprobe vergleichbar ist.

WARNUNG — Die Standardlösungen sind entflammbar und bei Einatmen gesundheitsschädlich.

5.4 Lösemittel zur Verdünnung, in Verfahren B verwendet, darf jegliche andere Verbindungen im zu analysierenden Kraftstoff nicht stören. Dodecan ($C_{12}H_{26}$) oder Tridecan ($C_{13}H_{28}$) sind empfohlene Lösemittel.

5.5 Feineinstellungslösung, in Verfahren C verwendet, die eine Mischung aus sauerstoffhaltigen Verbindungen (Ethanol, MTBE und ETBE) und Benzol am Ende der oder knapp über den Bereichen dieser Verfahren (siehe 1), und ergänzt durch eine Basislösung, die mehrere Aromaten und Olefine enthält, beinhaltet.

Ein regulärer sauerstofffreier Raffineriestrom (BOB) wird als Basislösung empfohlen. Tabelle 2 enthält ein Beispiel für eine Feineinstellungslösung.

Tabelle 2 — Beispiel für die Zusammensetzung einer Feineinstellungslösung

Komponente oder Gruppe	Inhalt % (V/V)
Ethanol	0,87
MTBE	0,87

Tabelle 2 (fortgesetzt)

Komponente oder Gruppe	Inhalt % (V/V)
ETBE	0,87
Benzol	1,00

6 Prüfeinrichtung

6.1 Gaschromatograph, computergesteuerte, mehrdimensionale GC-Ausstattung, Injektor, FID, geeignete Säulen, Fallen und Hydrierkatalysatoren, von denen ein Beispiel in Anhang A beschrieben wird.

6.2 Schaltventile, geeignete Schaltventile, die im Gaschromatographen für die Überführung von Verbindungen von einer Trennsäule zur anderen benutzt werden.

Sie müssen chemisch inerte Oberflächen und ein kleines Totvolumen aufweisen.

6.3 Fallen, geeignete kurze Säulen (siehe Beispiel in Anhang A) zum Zurückhalten von ausgewählten chemischen Gruppen im Ottokraftstoff durch Temperaturprofile.

Die Absorption der zurückgehaltenen Verbindungen muss reversibel sein.

BEISPIEL Eine typische Sequenz verläuft wie folgt:

- Die Alkohole und hochsiedenden Aromaten werden in einer Falle absorbiert (Sulfatsäule I). Die verbleibenden Aromaten werden von den anderen Komponenten mittels einer polaren Säule getrennt (z. B. OV 275).
- Die Ether werden von der verbleibenden Fraktion durch eine andere Falle getrennt (Sulfatsäule II).
- Die Olefine werden von den gesättigten Verbindungen durch die Olefinfalle (z. B. Silbersalz) in zwei Schritten getrennt. Dies ist aufgrund der begrenzten Kapazität solcher Fallen, hohe Gehalte an Buten oder Gesamtolefinen zurückzuhalten, erforderlich. Ist die Kapazität der Falle für den Olefingehalt ausreichend, kann die Trennung auch in einem Schritt erfolgen.
- Mittels einer 13X-Molekularsieb-Säule werden die zurückgehaltenen gesättigten Kohlenwasserstoffe entsprechend ihrer Kohlenstoffzahl in Paraffine und Naphthene getrennt.
- Die Ether werden dann von der Falle (Sulfatsäule II) eluiert und nach Siedepunkten getrennt und detektiert.
- Die Olefine werden von der Olefinfalle desorbiert und in der Pt-Säule hydriert. Durch ein 13X-Molekularsieb werden sie als korrespondierende gesättigte Verbindungen getrennt und detektiert.
- Die Alkohole und höher siedenden Aromaten werden von der polaren Säule und der Falle (Sulfatsäule I) eluiert, mit einer unpolaren Säule (z. B. OV 101, Methylsilikon) getrennt und nach Siedepunkten detektiert.

In Bild B.1 bis Bild B.4 sind Beispiele für typische Chromatogramme für diese Elutionsreihenfolge der Kohlenwasserstofffraktionen dargestellt. Speziell für Verfahren B ist in Bild B.5 ein typisches Chromatogramm abgebildet. Für das Verfahren C sind beispielhafte Chromatogramme der Feineinstellung in Bild B.6 dargestellt.

WICHTIG — Verbindungen, die Schwefel enthalten, werden irreversibel von der Olefinfalle adsorbiert und können deren Rückhaltekapazität für Olefine verringern. Schwefel kann auch in den Alkohol- und Ether-Alkohol-Aromaten-Fallen adsorbieren. Obwohl die Auswirkung geringer Schwefelmengen auf die verschiedenen Fallen oder Säulen sehr gering ist, ist es wichtig, bei Ottokraftstoff-Proben mit hohen Schwefelgehalten Sorgfalt walten zu lassen.

7 Probenahme

Die Probenahme muss, wenn nicht anders in z. B. nationalen Kraftstoffanforderungsnormen oder Vorschriften für die Probenahme von Ottokraftstoff festgelegt, bei manueller Probenahme nach ISO 3170 oder bei automatischer Probenahme aus Rohrleitungen nach ISO 3171 vorgenommen werden.

8 Durchführung

8.1 Vorbereitung

Nach Stillständen muss das Vorbereiten der Geräte nach den Herstelleranweisungen erfolgen.

8.2 Herstellung der Probe

8.2.1 Nur Verfahren B — Verdünnung der Probe

Das in diesem Unterabschnitt beschriebene Verfahren dient zur Analyse von Kraftstoffproben mit höheren Anteilen an Ethanol, wie Ethanolkraftstoff (E85) für Kraftfahrzeuge mit Ethanolanteilen zwischen 50 % (V/V) und 85 % (V/V).

Da die Fülle der Sulfatsäule I (siehe Tabelle A.1) hohe Ethanolanteile nicht zurückhalten kann, muss die Probe verdünnt werden. Das gewählte Lösemittel zur Verdünnung (5.4) darf die Analyse nicht stören. Der Verdünnungsgrad sollte so gewählt werden, dass der abschließende Ethanolgehalt in der verdünnten Probe 20 % (V/V) nicht überschreitet. Wenn der Ethanolgehalt unbekannt ist, wird empfohlen, eine Verdünnung von 4 : 1 bei der Analyse zu verwenden.

8.2.2 Alle Verfahren — Kühlung der Probe

Die zu prüfende Probe muss zur Vermeidung von Verdampfungsverlusten gekühlt werden. Ein ausreichender Probenteil der zu prüfenden Probe muss in ein Probengefäß (5.2) überführt und unverzüglich mit einem selbst-dichtenden PTFE-Verschluss dicht verschlossen werden (siehe 5.2). Es wird empfohlen, die zu prüfende Probe auf eine Temperatur zwischen 0 °C und 5 °C zu kühlen.

8.3 Einspritzvolumen der zu prüfenden Probe

Das Einspritzvolumen der zu prüfenden Probe muss so bemessen werden, dass die Kapazität der Säulen nicht überschritten wird und die Linearität des Detektors sichergestellt ist.

ANMERKUNG Bewährt hat sich ein Einspritzvolumen von 0,1 µl.

8.4 Feineinstellung des Geräts (Verfahren C)

Dieser Feineinstellungsschritt ist für Kraftstoffprodukte für Kleinmotoren erforderlich, die einen geringen Olefingehalt aufweisen und im Wesentlichen frei von aromatischen Verbindungen, insbesondere Benzol, sind. Dieser Schritt erfordert die Optimierung der Vorsäulentemperaturen und der Ventileinstellungen.

Die Feineinstellungslösung (5.5) muss eingespritzt werden, und anhand dieses Laufs muss auf korrekte Geräteparameter, Schnittzeiten und Gruppenzeiten geprüft werden. Es muss geprüft werden, dass alle einzelnen Komponenten korrekt identifiziert sind, wie in den Beispielen in Bild B.6.

Eine gewisse Abweichung von den Zielwerten ist zulässig, aber es muss besonders auf die MTBE- und ETBE-Werte in Verbindung mit den Benzolwerten geachtet werden. TBE und ETBE neigen dazu, mit Benzol zu co-eluierten, wenn die Vorsäulentemperatur zu hoch ist. Die Vorsäulentemperatur muss in Schritten von 10 °C gesenkt werden und die Feineinstellungslösung muss erneut eingespritzt werden, bis alle Komponenten korrekt identifiziert werden können.

8.5 Überprüfung des Gerätes und der Prüfbedingungen

Die Standardlösung (5.3) muss eingespritzt und anhand dieses Laufs muss auf korrekte Geräteparameter, Schnittzeiten und Gruppenzeiten geprüft werden. Wenn sie nicht korrekt sind, muss das Gerät entsprechend den Herstellerempfehlungen erneut justiert und die Überprüfung mit der Standardlösung muss wiederholt werden.

Auf Komponenten wie Benzol, Olefine und sauerstoffhaltige Verbindungen, die nahe der Trenngrenze der gruppenselektiven Säulen liegen, sollte geachtet werden. Auf die genaue Bestimmung der sauerstoffhaltigen Verbindungen sollte geachtet werden. Es wird empfohlen, die Identität der möglichen sauerstoffhaltigen Verbindungen mittels eines Referenzmaterials zu überprüfen, das die relevante Verbindung in reiner Form enthält. In Anhang B werden mehrere Chromatogramme, insbesondere für sauerstoffhaltige Verbindungen, mit Angaben zu Retentionszeiten und denkbaren Störungen gezeigt.

ANMERKUNG Die aktuelle Studie, siehe CEN/TR 15745 [6] hat gezeigt, dass Isopropanol häufig in zwei Spitzen eluiert. Dies kann ungeachtet des Warnhinweises in 4.3 passieren und in diesem Fall müssen beide Spitzen korrekt identifiziert werden. Wenn die Spitzen korrekt identifiziert sind, ist die Vergleichbarkeit wie in 11.3 anwendbar.

8.6 Validierung

Die validierte Standardlösung (5.3) muss erneut analysiert und die erhaltenen Ergebnisse müssen mit den Erwarteten verglichen werden. Die absolute Abweichung von den erwarteten Werten darf nicht größer als die in Abschnitt 11 für die Parameter angegebene Vergleichbarkeit sein.

Es wird dringend empfohlen, die Validierung mit der Standardlösung wöchentlich durchzuführen, um die ordnungsgemäße Funktionsfähigkeit der Geräte zu überprüfen.

Die validierte(n) Standardlösung(en) sollte(n) die Komponenten in möglichst ähnlichen Mengen wie die zu prüfende Probe aufweisen. Vor der Analyse neuer sauerstoffhaltiger Verbindungen sollte eine Validierung des Gerätes erfolgen.

8.7 Vorbereitung der zu prüfenden Probe

Die zu prüfende Probe muss wie in 8.2 festgelegt vorbereitet werden.

8.8 Vorbereitung des Gerätes und Prüfbedingungen

Das Gerät muss nach 8.1 eingerichtet und nach 8.5 überprüft werden.

Für das Verfahren C müssen die Bereiche zwischen den Anteilen auf „unerwartete Spitzen“ geprüft werden. Diese können Komponenten sein, die in dem falschen Anteil eluieren und eine Anpassung der Temperatur(en) kann erforderlich sein. Darüber hinaus müssen die Spitzenformen geprüft werden, doppelte Spitzen oder schiefe Spitzen können auf eine falsche Eluierungsreihenfolge hindeuten. Die Ventilzeiten müssen mithilfe der Feineinstellungs- und Standardlösungen eingestellt werden.

9 Berechnung

9.1 Allgemeines

Für Verfahren A und C muss dieser Abschnitt vollständig befolgt werden.

Für Verfahren B darf in den Schlussberechnungen die Peakfläche des Lösemittels zur Verdünnung (5.4) nicht integriert werden, sodass im Schlussbericht nach der Normierung auf 100 % die Ergebnisse für alle Gruppen und Komponenten für die unverdünnte Probe angegeben werden.

ANMERKUNG Bei der Anwendung dieses Verfahrens auf Proben mit hohem Ethanolgehalt können spezielle Analysen- und Berichtsverfahren sowie Kompetenzen erforderlich sein (siehe Herstelleranweisungen).

9.2 Berechnung als % (m/m)

Für die Berechnung werden die integrierten Peakflächen verwendet. Die Peakflächen werden nach ihrem Auftreten in die in Abschnitt 3 beschriebenen Gruppen eingeordnet. Die relativen Responsefaktoren für die Kohlenwasserstoffgruppen und für die sauerstoffhaltigen Verbindungen sind in Tabelle 3 und Tabelle 4 angegeben.

ANMERKUNG Die Responsefaktoren werden auf Methan normalisiert und die Faktoren für sauerstoffhaltige Verbindungen wurden experimentell bestimmt.

Nach Korrektur mit den Responsefaktoren werden die Massenanteile aller Kohlenwasserstoffgruppen berechnet und auf 100 % (m/m) normiert. Die Kohlenwasserstoffgruppen werden anschließend entsprechend ihres Kohlenwasserstofftyps und ihrer Kohlenstoffzahl klassifiziert.

Tabelle 3 — FID-relative Responsefaktoren für Kohlenwasserstoffgruppen

Kohlenstoffzahl	Relativer Responsefaktor				
	$F_{RR,HG}$				
	Paraffine, <i>n</i> -plus <i>iso</i> -	Naphthene	Olefine, <i>n</i> - plus <i>iso</i> -	Olefine, cyclische	Aromaten
3	0,916	—	0,916	—	—
4	0,906	—	0,906	—	—
5	0,899	0,874	0,899	0,874	—
6	0,895	0,874	0,895	0,874	0,811
7	0,892	0,874	0,892	0,874	0,820
8	0,890	0,874	0,890	0,874	0,827
9	0,888	0,874	0,888	0,874	0,832
10	0,887	0,874	0,887	0,874	0,837
11+	0,887	—	—	—	0,840

Tabelle 4 — FID-relative Responsefaktoren für sauerstoffhaltige Verbindungen

Sauerstoffhaltige Verbindung	Relativer Responsefaktor
	$F_{RR,HG}$
MTBE	1,334
DIPE	1,317
ETBE	1,242
TAME	1,242
Methanol	3,000
Ethanol	1,870
<i>n</i> -Propanol	1,867
<i>iso</i> -Propanol	1,742
<i>n</i> -Butanol	1,546
<i>iso</i> -Butanol	1,390
<i>sec</i> -Butanol	1,390
<i>tert</i> -Butanol	1,230
2-Methyl-2-butanol	1,400

Werden einzelne Komponenten, z.B. sauerstoffhaltige Verbindungen, durch andere zulässige Verfahren, z.B. nach EN 1601 [4], ASTM D4815 [8], EN 13132 [5] oder ASTM D5599 [9] bestimmt, müssen sie von der Integration ausgeschlossen werden. Die Gesamtfläche wird dann nicht auf 100 % normiert, sondern auf 100 % minus der ausgeschlossenen, extern quantifizierten Komponenten. Die externe Quantifizierung muss im Bericht angegeben werden.

Die theoretischen relativen Responsefaktoren, $F_{RR,HG}$, einer bestimmten Kohlenstoffzahl für eine Art von Kohlenwasserstoffgruppe (der Responsefaktor von Methan wird gleich 1 gesetzt) nach Gleichung (1) müssen berechnet werden (siehe Tabelle 1 und Tabelle 2):

$$F_{RR,HG} = \frac{[(M_C \cdot n_C) + (M_H \cdot n_H)] \cdot 0,748\,7}{M_C \cdot n_C} \quad (1)$$

Dabei ist

M_C die Molmasse des Kohlenstoffs, entspricht 12,011, in g/mol;

n_C die Anzahl der Kohlenstoffatome innerhalb der Gruppe;

M_H die Molmasse des Wasserstoffs, entspricht 1,008, in g/mol;

n_H die Anzahl der Wasserstoffatome innerhalb der Gruppe;

0,748 7 der Korrekturfaktor, um den Wert für Methan gleich 1 zu setzen.

Für jede Kohlenwasserstoffgruppe (HG) wird der % (m/m), w_{HG} , nach Gleichung (2) berechnet:

$$w_{HG} = \frac{100 \cdot A_{HG} \cdot F_{RR,HG}}{\sum_i (A_{HG,i} \cdot F_{RR,HG,i})} \quad (2)$$

Dabei ist

A_{HG} die korrigierte Gesamtfläche der Signale für die Kohlenwasserstoffgruppe (HG).

9.3 Berechnung als % (V/V)

Die Umrechnung von % (m/m) in % (V/V) erfolgt mithilfe der Dichten der Kohlenwasserstoffgruppen. Die Dichtewerte bei 15 °C von Kohlenwasserstoffgruppen, angegeben in Kilogramm je Kubikmeter, sind in Tabelle 5 angegeben, und die der sauerstoffhaltigen Verbindungen bei 15 °C in Tabelle 6 (abgeleitet aus [10]).

Tabelle 5 — Dichte der Kohlenwasserstoffgruppen bei 15 °C

Kohlenstoff- zahl	Dichte ρ_{HG} kg/m ³				
	Paraffine, <i>n</i> - plus <i>iso</i> -	Naphthene	Olefine, <i>n</i> - plus <i>iso</i> -	Olefine, cyclische	Aromaten
3	506,5	—	520,4	—	—
4	577,9	—	613,7	—	—
5	626,9	750,3	656,5	773,3	—
6	662,2	760,6	685,9	785,3	884,3
7	688,8	762,1	704,0	790,5	871,6

Tabelle 5 (fortgesetzt)

Kohlenstoff- zahl	Dichte ρ_{HG} kg/m ³				
	Paraffine, <i>n</i> - plus <i>iso</i> -	Naphthene	Olefine, <i>n</i> - plus <i>iso</i> -	Olefine, cyclische	Aromaten
8	708,4	780,5	719,3	805,2	871,9
9	728,1	792,5	738,2	812,5	878,0
10	734,0	812,8	748,6	817,6	892,8
11+	759,0	—	—	—	894,4

Tabelle 6 — Dichte für sauerstoffhaltige Verbindungen bei 15 °C

Sauerstoffhaltige Verbindung	Dichte ρ_{HG} kg/m ³
MTBE	745,3
DIPE	729,2
ETBE	745,6
TAME	775,2
Methanol	795,8
Ethanol	794,8
<i>n</i> -Propanol	813,3
<i>iso</i> -Propanol	789,5
<i>n</i> -Butanol	813,3
<i>iso</i> -Butanol	805,8
<i>sec</i> -Butanol	810,6
<i>tert</i> -Butanol	791,0
2-Methyl-2-butanol	813,5

Der % (V/V), ϕ_{HG} , der Kohlenwasserstoffgruppe (HG) wird aus dem % (m/m), w_{HG} , nach Gleichung (3) berechnet:

$$\phi_{\text{HG}} = \frac{100 \cdot \frac{w_{\text{HG}}}{\rho_{\text{HG}}}}{\sum_i \left(\frac{w_{\text{HG},i}}{\rho_{\text{HG},i}} \right)} \quad (3)$$

Dabei ist

ρ_{HG} die Dichte der Kohlenwasserstoffgruppe (HG), in kg/m³;

ρ_{HG} der % (m/m) für die Kohlenwasserstoffgruppe (HG).

9.4 Berechnung des Gesamtsauerstoffgehalts als % (m/m)

Der Sauerstoffgehalt, w_O , muss für jede identifizierte sauerstoffhaltige Verbindung, i , nach Gleichung (4) berechnet werden:

$$w_O = \sum_i \left(\frac{n_O \cdot M_O}{M_i} \cdot w_i \right) \quad (4)$$

Dabei ist

n_O die Anzahl der Sauerstoffatome im Molekül (generell 1);

M_O die Molmasse von Sauerstoff, in g/mol;

M_i die Molekülmasse der sauerstoffhaltigen Verbindung, in g/mol;

w_i der % (m/m) der Komponente in der Mischung.

BEISPIEL Diese Beispielberechnung verwendet nur MTBE ($C_5H_{12}O$) als sauerstoffhaltige Verbindung und die folgenden Molmassen:

— C: 12,011

— H: 1,008

— O: 16,000

$$w_O = \sum_i \left(\frac{n_O \cdot M_O}{M_i} \cdot w_i \right) = \frac{1 \cdot 16,000}{5 \cdot 12,011 + 12 \cdot 1,008 + 1 \cdot 16,000} \cdot w_i = 0,1815 \cdot w_i$$

9.5 Angabe der Ergebnisse nach Kraftstoffspezifikationen

Zur Angabe der Übereinstimmung mit zurzeit gültigen Kraftstoffspezifikationen kann eine spezifische Rundung oder Summierung der Ergebnisse erforderlich sein. Die folgenden Ergebnisse werden angegeben.

- Der Gesamtgehalt der gesättigten Kohlenwasserstoffe wird durch Summieren (der Volumenanteile) der Paraffine, Naphthene und hochsiedenden Polynaphthene bestimmt. Der Inhalt solcher gesättigten Kohlenwasserstoffe (wie etwa *n*-Hexan) wird in % (V/V) angegeben.
- Der Gesamtolefingehalt wird durch Summieren (der Volumenanteile) der Olefine und der cyclischen Olefine bestimmt und in % (V/V) angegeben.
- Der Gesamtaromatengehalt wird unverändert in % (V/V) angegeben.
- Der Benzolgehalt wird in % (V/V) angegeben.
- Der Gehalt der sauerstoffhaltigen Verbindungen wird als % (V/V) angegeben.
- Der Gesamtsauerstoffgehalt wird nach 9.4 berechnet. Er wird als % (m/m) angegeben.

10 Angabe der Ergebnisse

10.1 Verfahren A und C

Die Ergebnisse werden als Volumenanteil, in %, oder Massenanteil, in %, (siehe 9.5) nach den folgenden Vorgaben angegeben: