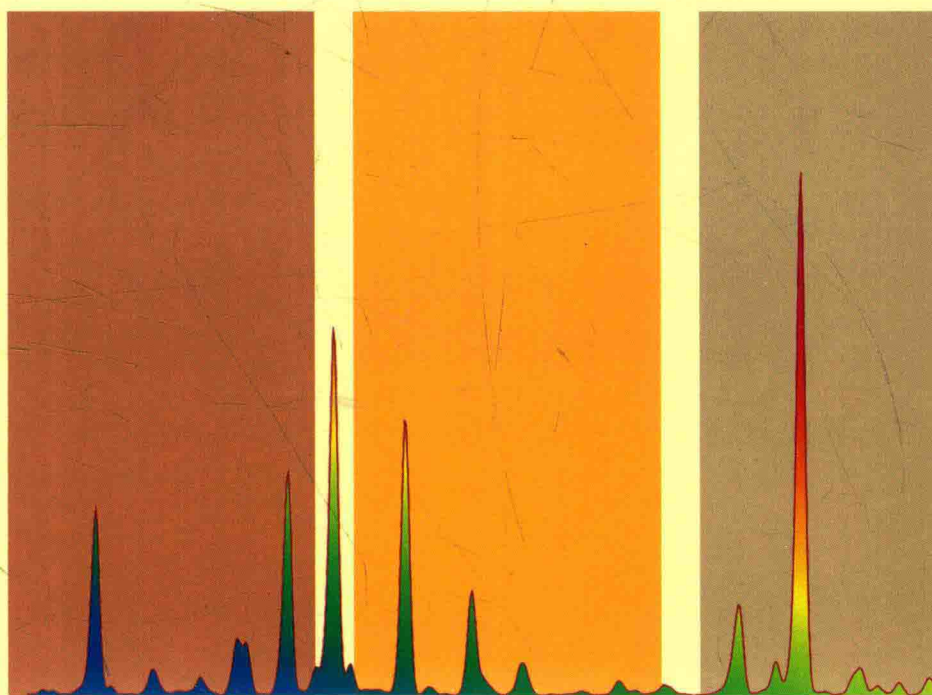


分子标志物 质量色谱图集

王培荣 何文祥 陈 奇 朱翠山 张春明 编著



科学出版社

分子标志物质量色谱图集

王培荣 何文祥 陈 奇 朱翠山 张春明 编著

科学出版社

北 京

版权所有,侵权必究

举报电话:010-64030229;010-64034315;13501151303

内 容 简 介

本书为“有机地球化学终身成就奖”获得者王培荣教授及其团队在《生物标志物质量色谱图集》的基础上修订而成,汇集常规生物标志物系列和一些在化石燃料中生物来源尚不明确的分子标志物系列的质量色谱图共 296 幅。

本书可供从事有机地球化学研究人员、研究生及环境保护等相关专业的科研人员使用。

图书在版编目(CIP)数据

分子标志物质量色谱图集/王培荣等编著. —北京:科学出版社, 2018.7

ISBN 978-7-03-055701-8

I. ①分… II. ①王 III. ①生物标志化合物—质谱—图集 IV. ①P593-64

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 294199 号

责任编辑:杨光华 何 念 / 责任校对:邵 娜

责任印制:彭 超 / 封面设计:苏 波

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

武汉中远印务有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

开本:787×1092 1/16

2018 年 7 月第 一 版 印张:20

2018 年 7 月第一次印刷 字数:470 000

定价:168.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)



序

最近我欣然拜读了王培荣教授凭借三十多年分子有机地球化学分析实验与研究的积淀,领銜与他的合作者们共同完成的《分子标志物质量色谱图集》书稿,联想到早在1993年王培荣教授就曾主编出版《生物标志物质量色谱图集》,这两部图集的出版为有机地球化学工作者对生物标志物与分子标志物的精确鉴定提供了非常实用而有效的工具书。

尽管在国际上 R. P. Philp 率先在1985年出版了 *Fossil Fuel Biomarkers: Applications and Spectra*, K. E. Peters 等在1992年和2004年分别出版了 *The Biomarker Guide: Interpreting Molecular Fossils in Petroleum and Ancient Sediments*, *The Biomarker Guide: Biomarkers and Isotopes in the Environment and Human History*, 但是前者仅含有文献中发表的373个化合物的单幅质谱图,后者主要是生物标志物的综述性理论专著,相关生物标志物谱图分散在上千页的巨著中,可作为教科书,并非实用性工具书。王培荣等的两部工具书汇集几乎全部常规生物标志物系列与分子标志物系列的质量色谱图,其中绝大部分是作者在实验室中检测到的谱图。作为成系列地鉴定化合物的质量色谱图集,与1993版《生物标志物质量色谱图集》相比,2018版《分子标志物质量色谱图集》不仅包含具有生源意义的已知生物标志物系列,而且内容拓展到 $C_5 \sim C_{13}$ 轻烃、17个多环芳烃系列以及含 O、S、N 非烃化合物系列,这些化合物虽然目前还不知其生源意义,但是大多可作为分子标志物,指示有机质所经受的物理、化学和地质环境与演化过程,亦称为“过程探针”;并且在图幅数量上也从1993版的166幅增加到现在的296幅质量色谱图,对于年轻学者来说,无疑是有了一条学习与工作的捷径,因此这两部工具书实属有机地球化学领域的一项难得的创举。

《分子标志物质量色谱图集》的出版,不禁使我对王培荣教授在本应尽享天伦之乐的耄耋之年,贡献其大半生心血所作出的这一学术壮举肃然起敬,这不仅是因为从青年时代算起,他是我亦师亦友六十二年的至交,而且我是他在有机地球化学分析实验与研究领域辛勤耕耘、孜孜以求、探索创新三十二年的一个见证者。欲在有机地球化学领域做出突出贡献,并非朝夕之间举手之劳的易事。曾记得早在1983年王培荣与合作者最先引进罐装岩屑 $C_2 \sim C_7$ 轻烃的分析鉴定技术,成功应用于我国海域油气井的勘探实践,次年荣获石油工业部科技进步二等奖;2011年他发表 $C_5 \sim C_{13}$ 114个轻烃化合物的色谱-质谱定性鉴定成果,并出版《烃源岩与原油中轻馏分烃测定及其地球化学应用》一书;1986年在第三届全国有机地球化学学术会议上,他发表了对15个系列105个多环芳烃化合物的色谱-

质谱分析鉴定的论文和相应的保留指数;2002年他又出版国内第一部《非烃地球化学和应用》。王培荣教授的上述科研成果有力地推动了国内地球化学界对轻烃、多环芳烃和非烃分子标志物的研究。鉴于对有机地球化学学科的诸多贡献,在2015年全国第十五届有机地球化学学术会议上,王培荣教授荣获“有机地球化学终身成就奖”,为有机地球化学领域的后学者树立了光辉的楷模。

最后,我热烈祝贺王培荣与其合作者所撰《分子标志物质量色谱图集》一书的出版,并期待这部图集能在有机地球化学的科研领域开花结果。

中国科学院院士

王铁冠

2016年10月12日于中国石油大学(北京)

前言

生物标志化合物地球化学是二十世纪七十年代兴起的一门学科,业已成功应用于油气勘探与开发实践。长江大学(原江汉石油学院)于1984年引进美国Finnigan公司生产的TSQ-45型色谱/质谱/质谱/数据系统大型仪器,该仪器是亚洲第一次引进,并率先开展生物标志化合物的色谱/质谱和色谱/质谱/质谱分析。通过多年努力,完成了我国各油田大量的烃源岩和原油分析工作,并在此基础上出版了《生物标志物质量色谱图集》,这是我国第一本有关生物标志物的工具书。该书于1993年出版,目前已销售一空。自该书出版以来的二十多年中,生物标志化合物研究发展迅猛,又发现了许多新成果。为满足地质勘探工作者的需要,我们对《生物标志物质量色谱图集》进行了补充、修改与完善。具体表现在:增加了“轻烃”和“非烃”的内容;增补了各类化合物典型质谱图范例;部分章节增加了解释文字,用以说明化合物种类、特征碎片、立体构型区别方法、简明地球化学意义等;将原书中质量色谱图上的谱库号改为化合物名称,增加 m/z 85的质量色谱图或萘、菲、蒽的保留位置。鉴此,本书定名《分子标志物质量色谱图集》,以为读者提供内容完整、检索方便、实用性强的“生标字典”。

全书分四章,共296张质量色谱图和4张表格,具体内容如下:

第一章由轻馏分烃($C_5 \sim C_{13}$)的12张图谱组成,其中图1.1~图1.8通过介绍ASTM D5134-98测定石脑油标准的色谱图、定性表和保留指数、114个标样的色谱图、质谱特征和保留指数以及平湖四井原油用全二维色谱-飞行时间质谱测定的 $n-C_6 \sim n-C_8$ 的三维立体图”帮助读者掌握轻馏分烃的定性;图1.9~图1.12介绍 $C_5 \sim C_{13}$ 轻馏分烃在油源对比、沉积环境和“蒸发分馏”方面的应用。

第二章包含105张饱和烃图谱,包含《生物标志物质量色谱图集》一书第一章所有的质量色谱图,增加了正构烷烃的高温气相色谱图(宏晶蜡 $<n-C_{40}$ 、微晶蜡 $>n-C_{40}$);大环烷烃的部分质谱图和质量色谱图;加氢松节油的单萜类烷烃质谱图和质量色谱图;加氢丝柏油的倍半萜类质谱图和质量色谱图; $C_{19} \sim C_{41}$ 三环萜烷的质量色谱图;盐湖相、沼泽相、湖相等源岩的 m/z 191质量色谱图;28-、25,28-降藿烷的质量色谱图;羽扇烷、降羽扇烷的质量色谱图;17 α (H),21 α (H)-藿烷类的质量色谱图; $C_{36} \sim C_{45}$ 藿烷、莫烷类的质量色谱图;罕见的六环、七环等多环烷烃的质量色谱图;新颖的 C_{34} 和 C_{35} 六环藿烷烃; C_{26} 甾烷的GC/MS/MS质量色谱图;甲藻甾烷质量色谱图; C_{30} ,24-异丙基和正异丙基胆甾烷的 m/z 414 $\rightarrow$ 217谱图;异藿烷(isohopanes)类等。

第三章由 75 张芳烃类化合物谱图组成,包含芳烃馏分中常见的分子标志物和芳烃馏分中的生物标志物。其中,常见的芳烃类分子标志化合物包括烷基苯、茚、萘、四氢化萘、环己基苯、联苯、二氢化茚、氧茚、茚、菲、2-苯基萘、二苯并噻吩、苯并萘并噻吩、萤蒽、苊、蒽、 m/z 252 等。芳构化生物标志物包括长链烷基苯系列等、芳构化的二环萘类、芳构化的三环萘类、芳构化的四环萘类、芳构化的五环萘类和芳构化的甾烷类等。增加了部分五、六甲基取代萘、多甲基取代的二苯并噻吩类的质量色谱图、 $C_4 \sim C_6$ 烷基苯的质量色谱图、芳构化的胡萝卜烷类的质量色谱图、四氢化萘系列的 GC/GC/TOFMS 质量色谱图、甲基三芳甾烷和芳构化甲藻甾烷的质量色谱图等。

第四章包括非烃类标志化合物 77 张谱图,由含氧、含硫和含氮的非烃类标志化合物图谱组成。其中含氧非烃类生物标志化合物包括开链无环含氧化合物(开链脂肪酸类、开链醇类、开链酮类和其他),环状甾、萘类含氧化合物(甾醇、酸、酮类;萘类脂肪酸、醇、酮;其他);含硫非烃类标志化合物包括开链的含硫化合物,环状甾、萘类含硫化合物和噻吩类杂环化合物;含氮非烃类标志化合物包括烷基吡唑和烷基苯并吡唑。

本书编写分工:何文祥教授为总负责人,全面协调各项工作,并承担第一章的编写;王培荣教授承担全书初稿的编写和统稿;张春明教授负责第二章的编写;朱翠山高工负责第三章编写;陈奇讲师承担第四章编写。

本书的出版得到国家科技重大专项课题“致密油甜点预测方法与甜点区评价”(2016ZX05046-002)的资助;本书的编写得到中国科学院院士王铁冠教授的鼓励和支持;中国石油大学(北京)油气资源与探测国家重点实验室钟宁宁副主任、王广利副教授,以及中国石油勘探开发研究院石油地质实验与研究中心张大江教授和张水昌主任给予了很多帮助和建议;本书还得到与我们长期共事的赵红高级工程师的帮助和支持,在此一并致以衷心感谢。

限于编者水平,疏漏之处,恳请读者批评指正。

作 者
2017 年 6 月

目 录

第一章 化石燃料中轻馏分烃($C_5 \sim C_{13}$)	1
第一节 轻烃化合物的分离和定性	1
图 1.1 同一油样用不同极性色谱柱分析的对比图	2
图 1.2 ASTM D5134-98 测定石脑油的参考用色谱图	4
图 1.3 114 个标样的色谱图	7
图 1.4 GC×GC/TOFMS 分析 $n-C_6 \sim n-C_8$ 的三维立体图	12
图 1.5 $C_2 \sim C_4$ 烷基取代苯的质量色谱图	14
图 1.6 $C_9 \sim C_{13}$ 部分异构链烷烃的 m/z 85 质量色谱图	15
图 1.7 $C_9 \sim C_{13}$ 部分异构链烷烃的质谱图	16
图 1.8 $n-C_{10} \sim n-C_{13}$ 中金刚烷类化合物的质量色谱图	17
第二节 轻烃用于地球化学研究的列举	18
图 1.9 烃源岩具不同水体盐度油样的 I/P 与 N/I 关系图	18
图 1.10 几种不同沉积环境的 C_7 轻烃族组成分布图	19
图 1.11 原油中 $C_6 \sim C_{13}$ 族组成比值的分布图	20
图 1.12 研究准噶尔盆地南缘油样中存在蒸发分馏现象用图	21
表 1.1 PONA 柱轻烃分析 $C_5 \sim C_{13}$ 部分化合物的流出程序参考用表	22
参考文献	27
第二章 化石燃料中饱和烃类化合物	28
图 2.1 饱和烃组分类别及其结构列举	28
第一节 链烷烃(开链)	29
图 2.2 正构烷烃及短链类异戊二烯烃图	30
图 2.3 部分规则类异戊间二烯烃类图	30
图 2.4 部分规则、不规则类异戊二烯烃的检出	31
图 2.5 甲基-和二甲基-链烷烃($n-C_{10} \sim n-C_{17}$)气相色谱图	32

图 2.6	甲基-链烷烃($n\text{-C}_{17} \sim n\text{-C}_{22}$)气相色谱图	33
图 2.7	部分长支链烷烃的保留位置图	33
图 2.8	丛粒藻烷在不同极性色谱柱上的保留位置图	34
图 2.9	正构烷烃高温气相色谱图 1	34
图 2.10	正构烷烃高温气相色谱图 2	35
第二节 环状萜类		35
一、单萜类		35
图 2.11	加氢松节油的单萜类质谱图和质量色谱图	36
二、倍半萜类		38
图 2.12	部分倍半萜烷的质量色谱图及质谱图 1	38
图 2.13	部分倍半萜烷的质量色谱图及质谱图 2	39
图 2.14	部分倍半萜烷的质量色谱图及质谱图 3	40
图 2.15	降半日花烷类的质量色谱图	41
图 2.16	加氢丝柏油的倍半萜烷类质量色谱图和质谱图	42
三、二萜类		43
图 2.17	部分二萜烷的质量色谱图 1	43
图 2.18	部分二萜烷的质量色谱图 2	44
图 2.19	部分二萜烷的质量色谱图及质谱图	45
图 2.20	部分二萜烷质谱图列举	46
图 2.21	部分 $\text{C}_{18} \sim \text{C}_{21}$ 三环烷与标样共注的质量色谱图	47
图 2.22	一些四环二萜烷质量色谱图	47
图 2.23	部分四环萜烷质谱图列举	48
四、三萜类		49
(一) 藿烷(烯)类		49
图 2.24	典型五环三萜类化合物的结构及编号	49
图 2.25	藿烷类质谱图列举	50
图 2.26	藿烷类的质量色谱图 1	51
图 2.27	藿烷类的质量色谱图 2	51
图 2.28	藿烷类的质量色谱图 3	52
图 2.29	藿烷类的质量色谱图 4	53
图 2.30	藿烷类的质量色谱图 5	54

图 2.31	藿烷类气相色谱图	55
图 2.32	$\beta\beta$ 藿烷质量色谱图 1	56
图 2.33	$\beta\beta$ 藿烷质量色谱图 2	56
图 2.34	$\beta\beta$ 藿烷质量色谱图 3	57
图 2.35	长链藿烷类质量色谱图	58
图 2.36	部分藿烯类质谱图列举	59
图 2.37	藿烯类质量色谱图 1	60
图 2.38	藿烯类质量色谱图 2	61
图 2.39	藿烯类质量色谱图 3	62
图 2.40	藿烯类质量色谱图 4	63
(二)	藿烷类衍生物	64
图 2.41	重排藿烷类的 GC/MS/MS 质量色谱图	64
图 2.42	藿烷与甲基藿烷类的质量色谱图	65
图 2.43	藿烷-异藿烷(isohopanes)类的质量色谱图	66
图 2.44	藿烷-重排异藿烷的 GC/MS/MS 质量色谱图	67
图 2.45	28-降藿烷的质量色谱图	68
图 2.46	28-降藿烷、25,28-双降藿烷的质量色谱图	69
图 2.47	脱甲基三环萜烷类和 17 α (H)-25-降藿烷类质量色谱图	70
图 2.48	8,14-断藿烷质量色谱图及质谱图	71
图 2.49	(甲基)-17,21-断藿烷类和(甲基)-三环萜烷质量色谱图	72
(三)	非藿烷类三萜烷	73
图 2.50	奥利烷、蒲公英烷的 GC/MS/MS 图及质谱图	73
图 2.51	重排奥利烷 GC/MS/MS 图及质谱图	74
图 2.52	非藿烷类五环三萜烷质谱图	76
图 2.53	几种非藿烷类的质量色谱图	77
五、	多萜类	78
图 2.54	与双杜松烷有关的未知物的质量色谱图	78
图 2.55	与双杜松烷有关的未知物的质量色谱图和质谱图	79
图 2.56	部分杜松烷类和七环-八环三杜松烷类质量色谱图和质谱图	80
图 2.57	30-降藿烷和六环藿烷烃的 GC/MS/MS 质量色谱图	81
图 2.58	六环藿烷烃的质量色谱和质谱图	82

图 2.59	新颖 C_{34} 和 C_{35} 六环萜烷烃的 GC/MS/MS 图和质谱图	83
图 2.60	类胡萝卜烷系列的质量色谱图及部分质谱图	84
六、长侧链环状萜烷类		85
图 2.61	长侧链取代环己烷系列质量色谱图 1	85
图 2.62	长侧链取代环己烷系列质量色谱图 2	86
图 2.63	二环萜烷系列的质量色谱图	86
图 2.64	13 α -(烷基)-三环萜烷的质量色谱图	87
图 2.65	某未成熟样品三环萜烷的质量色谱图	88
图 2.66	$C_{19} \sim C_{41}$ 三环萜烷的质量色谱图	89
七、其他		90
图 2.67	大环烷烃的质谱图和质量色谱图	90
图 2.68	十氢化萘系列的质量色谱图	91
图 2.69	特殊三环、四环萜烷质量色谱图和质谱图	92
图 2.70	一类罕见的多环烷烃的检出	93
第三节 甾类		94
图 2.71	甾体化合物的结构和碳位编号图	94
一、短侧链甾烷类		94
图 2.72	某样品的甾烷分布图	95
图 2.73	孕甾烷和升孕甾烷质谱图	96
图 2.74	A 环脱甲基甾烷分布图及质谱图	97
二、 C_{26} 甾烷		98
图 2.75	C_{26} , 降胆甾烷的质量色谱图 1	98
图 2.76	C_{26} , 降胆甾烷的质量色谱图 2	99
图 2.77	C_{26} 甾烷的质谱图列举	100
三、规则甾烷/烯类		100
图 2.78	甾烷的质量色谱图	101
图 2.79	甾烷 $C_{21} \sim C_{29}$ 的 GC/MS/MS 质量色谱图	102
图 2.80	规则甾烷质谱图列举	103
图 2.81	含甾烯样品总离子流图	104
图 2.82	九个甾烯标样的 RIC 图	105
图 2.83	甾烯类质量色谱图	106

图 2.84 甾烯类质谱图列举	107
四、重排甾烷/烯类	109
图 2.85 重排甾烷和规则甾烷质量色谱图 1	109
图 2.86 重排甾烷和规则甾烷质量色谱图 2	110
图 2.87 重排甾烷/烯类质谱图列举	111
图 2.88 (甲基-)重排甾烯、(甲基-)重排螺旋甾烯的质量色谱图	112
五、甲基甾烷类	114
图 2.89 规则甾烷和 4-甲基甾烷的质量色谱图	114
图 2.90 4-甲基甾烷质谱图列举	115
图 2.91 2 α -和 3 β -甲基甾烷的质量色谱图	116
图 2.92 甾烷、甲基甾烷、乙基甾烷类的质量色谱图	117
图 2.93 3 β -烷基-24-乙基胆甾烷的质量色谱图	118
图 2.94 甲藻甾烷、4-甲基甾烷、甾烷的质量色谱图	119
图 2.95 甲藻甾烷质量色谱图及质谱图	120
图 2.96 C ₃₀ , 甲基甾烷的 GC/MS/MS 质量色谱图	121
图 2.97 24-异丙基和正丙基胆甾烷的 GC/MS/MS 质量色谱图	121
图 2.98 四个系列 C ₃₀ , 甲基甾烷的 GC/MS/MS 质量色谱图	122
六、其他	123
图 2.99 脱-A,B 环-甾烷和 1,10 或 4,5 位断的甾烷质谱图列举	123
图 2.100 断甾烷和 4-甲基甾烷系列质量色谱图	124
图 2.101 断甾烷及相关质谱图	125
图 2.102 脱-A,B 环-甾烷质量色谱图	126
图 2.103 C ₃₀ ~C ₃₂ 羊毛甾烷的质量色谱图	127
图 2.104 达玛-13(17)-烯与和达玛烷的检出	128
图 2.105 C ₂₇ ~C ₂₉ -螺旋甾烯质量色谱图	128
表 2.1 部分甾烷和三萜烷类标样的卡瓦指数值表	129
表 2.2 典型甾类的流出顺序(SE-54 色谱柱)	132
表 2.3 部分五环三萜类化合物的流出顺序(60 m-DB-5 柱,供参考)	134
参考文献	138

第三章 化石燃料中芳烃类化合物 143

第一节 芳烃馏分中常见的分子标志物 143

图 3.1	样品芳烃馏分中部分 PAH 母体结构图	144
图 3.2	PAH 母体的质谱图列举	145
图 3.3	PAH 分子通常的质谱裂分途径图	146
图 3.4	C ₂ ~C ₄ 烷基苯的质量色谱图	146
图 3.5	C ₄ ~C ₆ 烷基苯的质量色谱图	147
图 3.6	茚满系列的质量色谱图	148
图 3.7	四氢化萘系列 GC/GC/TOFMS 质量色谱图	149
图 3.8	环己基苯系列质量色谱图	150
图 3.9	萘系列的质量色谱图	151
图 3.10	联苯系列质量色谱图	152
图 3.11	1,2 二氢化萘系列质量色谱图	152
图 3.12	氧芴系列质量色谱图	153
图 3.13	芴系列质量色谱图	154
图 3.14	菲系列质量色谱图	155
图 3.15	2-苯基萘系列质量色谱图	156
图 3.16	二苯并噻吩系列质量色谱图	157
图 3.17	二苯并噻吩类化合物分布的质量色谱图	158
图 3.18	苯并萘并噻吩系列质量色谱图	159
图 3.19	萤蒽和芘系列质量色谱图	159
图 3.20	萤蒽系列质量色谱图	160
图 3.21	芘系列质量色谱图	160
图 3.22	蒽系列质量色谱图	161
图 3.23	<i>m/z</i> 252 质量色谱图	161
第二节	芳烃馏分中的生物标志物	162
一、长链烷基苯系列类等		162
图 3.24	芳构化类胡萝卜烷系列的质量色谱图	162
图 3.25	苯基癸烷~十五烷的质量色谱图	163
图 3.26	1-烷基-2,3,6-三甲基苯系列质量色谱图	164
图 3.27	部分长链烷基取代系列的质量色谱图	165
图 3.28	部分长链烷基萘系列 <i>m/z</i> 141 的质量色谱图	166
图 3.29	部分长链烷基菲系列 <i>m/z</i> 191 的质量色谱图	166
图 3.30	长链烷基取代 PAH 质谱图列举	167

二、芳构化的二环萜类	168
图 3.31 部分芳构化倍半萜质量色谱图	168
图 3.32 部分 $C_{11} \sim C_{14}$ 芳烃化合物的质量色谱图	169
图 3.33 二甲基烷基萜类($C_n H_{2n-12}$)质量色谱图	170
图 3.34 三甲基-1-烷基萜系列质量色谱图	171
图 3.35 基峰为 m/z 133/134 的双芳化合物系列质量色谱图	171
图 3.36 芳构化二环萜类质谱图列举	172
三、芳构化的三环萜类	173
图 3.37 部分芳构化二萜类的质量色谱图	173
图 3.38 部分单芳二萜和三环烷质量色谱图	174
图 3.39 部分单芳二萜类质量色谱图	175
图 3.40 C 环-单芳三环萜烷系列的质量色谱图	176
图 3.41 部分双芳二萜烷质量色谱图	177
图 3.42 部分芳构化二萜烷质谱图列举	178
图 3.43 部分双芳三环烷类的 m/z 209 质量色谱图	179
图 3.44 部分双芳三环烷类的 m/z 223 质量色谱图	180
图 3.45 部分双芳三环烷类的 m/z 237 质量色谱图	181
图 3.46 部分芳构化三环烷质谱图列举	182
图 3.47 部分 A,B 环-双芳二萜烷的质量色谱图	184
四、芳构化的四环萜类	185
图 3.48 部分芳构化杜松烷类的总离子流和质量色谱图	185
图 3.49 部分芳构化断双杜松烷和三杜松烷质谱图列举	186
图 3.50 双芳/三芳脱-A-羽扇烷、乌散烷和奥利烷的质量色谱图	187
图 3.51 芳构化脱-A-五环三萜烷质谱图列举	188
图 3.52 $C_{27} \sim C_{35}$, 单芳-8,14-断藿烷的质量色谱图	190
图 3.53 8,14-断-D 和 D,E 环芳构化降藿烷/烯的质量色谱图	191
图 3.54 单芳-8,14-断藿烷/烯的质谱图列举	192
图 3.55 部分芳构化 8,14-断五环三萜烷类的质量色谱图	193
图 3.56 芳构化 8,14-断非藿烷类五环三萜烷的质谱图列举	194
五、芳构化的五环萜类	195
图 3.57 部分 A 环-单芳五环三萜类的质量色谱图	195

图 3.58 部分 A 环-单芳五环三萜类的质谱列举	196
图 3.59 部分 A,B 环-双芳五环三萜类的质量色谱图	197
图 3.60 部分 A,B 环-双芳五环三萜类的质谱图列举	198
图 3.61 黑色泥岩抽提物芳烃馏分的质量色谱图	199
图 3.62 不同芳构化程度的藿烷的质谱图列举	200
图 3.63 三芳以上芳构化五环三萜类的质量色谱图	201
图 3.64 三芳以上非藿烷类五环三萜的质谱图列举	205
图 3.65 苯并藿烷类的质量色谱图	206
图 3.66 苯并藿烷类的质谱图列举	206
六、芳构化的甾烷类	207
图 3.67 A/B 环-单芳甾烷的质量色谱图	207
图 3.68 A/B 环-单芳甾烷的质谱图列举	208
图 3.69 C 环-单芳甾烷的质量色谱图	209
图 3.70 C 环-单芳甾烷的结构和质谱图列举	210
图 3.71 A,B 环-双芳甾烷和甲基甾烷的质量色谱图	211
图 3.72 双芳甾烷和双芳甲基甾烷质谱图列举	212
图 3.73 三芳甾烷和甲基三芳甾烷的质量色谱图	213
图 3.74 三芳甾烷和甲基三芳甾烷的质谱图列举	214
图 3.75 三芳甾烷和芳构化甲藻甾烷的质量色谱图	215
参考文献	216
第四章 化石燃料中非烃类标志化合物	219
第一节 石油中含氧的非烃类生物标志化合物	219
一、开链(无环)含氧化合物	219
(一) 开链脂肪酸类	219
图 4.1 一元直链脂肪酸 m/z 74 的质量色谱图	219
图 4.2 正十六酸甲酯、正三十四酸甲酯的质谱图	220
图 4.3 二元直链羧酸甲酯系列和一元直链羧酸甲酯系列的质量色谱图	221
图 4.4 二元直链羧酸二甲酯的质谱图列举	222
图 4.5 支链烷酸甲酯和类异戊二烯烷酸甲酯的质量色谱图	223
图 4.6 甲基链烷酸甲酯的质谱图列举	224

图 4.7 姥鲛烷酸甲酯和植烷酸甲酯的质谱图	225
图 4.8 羧基酸质谱图列举 1	226
图 4.9 羧基酸质谱图列举 2	227
(二) 开链醇类	229
图 4.10 直链一元伯醇类的 m/z 75 质量色谱图	229
图 4.11 正十四伯醇和正三十二伯醇的 TMS 质谱图	229
图 4.12 非烃组分经衍生化后测得的 RIC 图	230
图 4.13 仲醇类化合物的 TMS 质量色谱图	231
图 4.14 类异戊二烯醇 m/z 131 的质量色谱图	232
图 4.15 部分直链仲醇 TMS 质谱图	233
图 4.16 1,15-二羟基三十烷 TMS 质谱图	235
(三) 开链酮类	235
图 4.17 直链一元酮类化合物的质谱图列举	235
图 4.18 中性非烃组分直链一元酮 m/z (57+58) 的质量色谱图	236
图 4.19 植酮的质谱图	236
图 4.20 11-羟基二十七烷-11-酮的质谱图	237
图 4.21 2-,3-,4- n -十二烷基环己烷酮的质谱图	238
图 4.22 环己烷基正十八烷-4,8-二酮的质谱图	239
二、环状甾、萜类含氧化合物	239
(一) 甾醇、甾烷酸、甾酮类	239
图 4.23 胆甾醇三甲基硅醚酯(TMS)骨架和碳数编号图	239
图 4.24 游离甾醇(TMS)的色谱图	240
图 4.25 游离甾醇(TMS)总离子流图和 m/z 129 质量色谱图	242
图 4.26 部分甾烷醇(TMS)的质谱图	243
图 4.27 部分 δ^5 -甾烯醇(TMS)的质谱图	244
图 4.28 部分 $\delta^{5,22}$ -甾烯醇(TMS)的质谱图	245
图 4.29 部分 $\delta^{5,24(28)}$ -甾烯醇(TMS)的质谱图	246
图 4.30 部分 δ^{22} -甾烯醇(TMS)的质谱图	247
图 4.31 部分 $\delta^{24(28)}$ -甾烯醇(TMS)的质谱图	248
图 4.32 部分 δ^7 -甾烯醇(TMS)的质谱图	248
图 4.33 甾醇类化合物的质量色谱图	249

图 4.34	甾烷酸类的质量色谱图	253
图 4.35	甾、萜烷酸类相对位置的质量色谱图	254
图 4.36	部分甾烷酸甲酯类质谱图列举	255
图 4.37	乙基胆甾烯酮质谱图	256
(二)	萜类脂肪酸、醇、酮	256
图 4.38	三环萜烷酸系列的 m/z 191 质量色谱图	256
图 4.39	C_{22} , 三环萜烷酸甲酯的质谱图	257
图 4.40	四种芳构化松香酸甲酯的质谱图	257
图 4.41	藿烷酸甲酯类的化学结构、碳位编号和特征碎片断裂方式图	258
图 4.42	藿烷酸甲酯类化合物的质量色谱图	259
图 4.43	部分藿烷酸甲酯的质谱图列举	260
图 4.44	藿醇和藿酮类质谱图列举	263
图 4.45	部分奥利、乌散类五环三萜酸、醇、酮类的质谱图	264
图 4.46	别桦木(烷、酮)类的质谱图	266
图 4.47	伽马蜡烷酸甲酯和酮的质谱图	267
(三)	其他类含氧化合物	268
图 4.48	苯羧酸类的 TIC 和质量色谱图	268
图 4.49	苯羧酸质谱图列举	269
图 4.50	苯酚类化合物的 TIC 和质量色谱图	270
图 4.51	苯酚类化合物的 TMS 质谱图列举	271
图 4.52	α -脱羟基维生素 E 降解系列的质量色谱图	272
图 4.53	脱羟基维生素 E 类的质量色谱图	273
图 4.54	脱羟基维生素 E 的质谱图列举	273
图 4.55	9-苄酮的结构、碳数编号和质量色谱图	274
图 4.56	苄酮与呋唑类的色谱保留位置图	275
图 4.57	苄醇类质谱图列举	275
第二节	石油中含硫的非烃类标志化合物	276
一、	开链的含硫化合物	276
图 4.58	烷基硫醇、硫醚质谱图列举	276
图 4.59	异戊间二烯链的硫醚质谱图列举	277
图 4.60	直链或异戊间二烯链的硫杂环化合物的质谱图列举	278