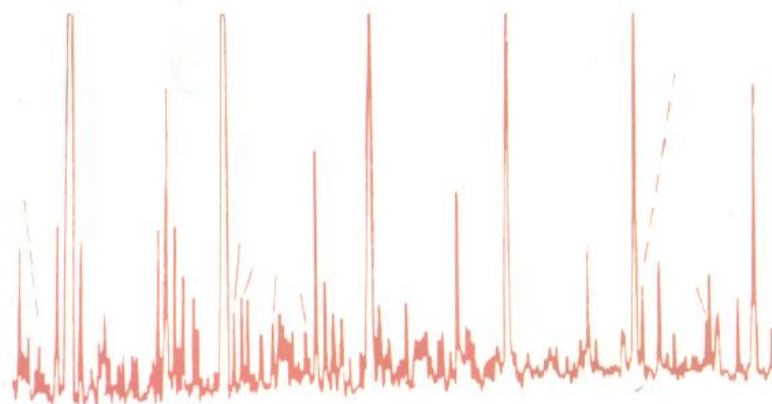


王培荣 主编

生物标志物

质量色谱图集



学(北京)

32

16

石油工业出版社

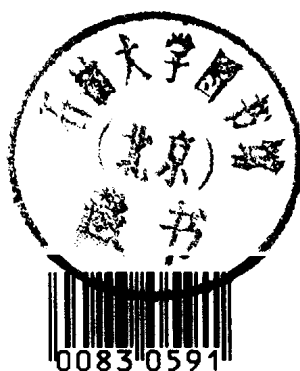
登录号	087719
分类号	P632
种次号	016

生物标志物质量色谱图集

王培荣 主编



20035574



SY50/20

石油工业出版社

(京)新登字 082 号

内 容 提 要

本书是一本有关用色谱-质谱方法分析化石燃料中生物标志物的工具书,它与储存在软盘中并可用 IBM 机进行检索的 JH 生物标志物谱库配套成为一部当前内容最丰富的“生物标志物词典”。

本书以江汉石油学院测试中心多年积累的分析资料为基础,并收集散见于国、内外有关刊物发表的图件汇编而成。全书主要包括饱和烃类、芳烃类和含硫化合物的质量色谱图共计 114 张,各图件注有样品来源、年代、色谱条件和参考文献等;附录部分主要内容是 JH 生物标志物谱库索引,它包括上述三类化合物共计 1626 个样本,具有中、英文名称对照,并录有保留指数值(926 个)等重要参数。

本书适用于石油勘探领域研究生油的科技工作者和石油地质专业大专院校师生,也可供海洋、大气、环境和生命科学等领域的研究人员和院校师生参考。

生物标志物质量色谱图集

王培荣 主编

*

石油工业出版社出版发行
(北京安定门外安华里二区一号楼)
北京仰山印刷厂印刷

*

787×1092 毫米 16 开本 12 印张 347 千字 印 1—1000

1993 年 1 月北京第 1 版 1993 年 1 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5021-0902-1/TE·843

定价: 11.50 元

序

当前,石油、煤和沉积岩中生物标志物(地球化学化石)的研究,已成为国内外有机地球化学中最为活跃的前沿领域之一,并在生命起源及其化学进化、海洋考察、环境污染,特别是在油气勘探中得到了日益广泛的应用。借助于生物标志物的研究,石油地质和地球化学工作者获得了许多有关油气田形成和分布规律中古环境、成烃母质、有机质成烃演化(成熟度)、油气运移、油源判识和原油蚀变的可贵信息。我国的有机地球化学工作者也在这一领域中特别是在陆相油、岩的生物标志物的研究方面进行了许多出色的工作。

有机地球化学是化学与地质学相结合的一门边缘学科。自 60 年代以来,随着油气勘探和现代分析实验技术的迅速发展,在有机质成烃作用和生物标志物的研究中,有机地球化学进入了以揭示地质体中有机分子组成和结构特征为主的崭新的发展阶段。其中,在生物标志物(包括碳同位素组成)的检测、确认和应用上,人们进行了坚持不懈的探索,随着色谱-质谱-计算机联用技术的发展和完善,仅 20 多年的时间,生物标志物的研究完成了从基础性研究到高度应用性研究的转变。人们不仅已经从有机可燃矿产和沉积岩中发现了大量生物标志物,其种类和数量与日俱增,而且它们在组成和构型上的地球化学意义也日益为人们所认识。现在,已经查明了相当一部分分子化石的广义的或专属的生源以及在生物化学进化上的重要意义。

国内外已经发表了大量有机地球化学的文章,而且大多都涉及生物标志物。自 1985 年以来,国内外有关生物标志物的专著相继出版了 6 本(R. P. Philp, 1985; R. B. Johns, 1986; 曾宪章和梁狄刚等, 1989; 王铁冠等, 1990; J. M. Moldowan, P. Albrecht 和 R. P. Philp, 1992; K. E. Peters 和 J. M. Moldowan, 1992),而其中属于手册性质的工具书,唯有 1985 年 R. P. Philp 教授所著《化石燃料生物标志物——应用与谱图》一书。当时该书所能汇编的资料有限,而近几年生物标志物的发展很快,在深度和广度上都有显著进展,已经被确认出来的生物标志物不仅在数量上增加了几倍,芳香生物标志物得到了极大的丰富,而且又出现了含硫化合物等新的类型。在这种情况下,把散见于大量文献中的生物标志物集中起来汇编成计算机谱,则将是一件十分有益于生物标志物检索、鉴定和研究的工作。应该感谢王培荣教授和他的同事们为我们完成了这件很有意义的工作,为石油地球化学工作者提供了一本当前最好的“生标词典”。

本书及其有关的 JH 生标谱库,是王培荣教授及同事们历时 5 年(1987~1992)而建立的。其中不仅收集了文献和现有谱库中有关饱和烃、芳烃和有机硫化物的大量有机地球化学生物标志物的质量—色谱、质谱和数据,而且还收录了他们实验室多年来在陆相油、岩研究中所积累的资料。为了方便检索和提高检索精度,他们在保留指数(I 值)和有关技术上都作了有益的改进。因此,它有很强的实用性,是生标研究的得力工具。

应该说明,本书和谱库主要是为色谱—质谱分析和石油地球化学研究的需要而建立的,因此并没有囊括整个生物标志物领域,不包括碳同位素的资料和近代沉积物中大量存在的原始的含氧生物标志化合物。同时,新近发展起来的含氮生物标志物也有待汇编。因此,我希望这套谱库能够两三年充实一次,把新发现的生物标志物收集进去,跟上生物标志物发展的步伐,

补充和完善它。

本书和谱库的主要编者王培荣教授,就读于清华大学化工系,后因院系调整转入北京石油学院,1954年毕业。他长期从事教育工作,1970年开始从事石油地球化学工作,1985年初在江汉石油学院随着“TSQ-45型”色谱—质谱—质谱—计算机联用仪的引进而重点转入了生物标志物的检测、鉴定和应用研究,做了许多有价值的工作。王培荣教授是一位优秀的有机地球化学工作者,在生物标志化合物色谱—质谱检测方面有很强的技术能力,且工作态度严谨。他那种在科学研究上孜孜不倦、锲而不舍的精神尤其令人钦佩。我们共事多年,也是挚友。他帮助我完成了大量色—质分析,为我在生物标志物地球化学研究方面做了许多很出色的基础工作。我是很感谢的。本书和谱库的建成和正式发表,王培荣教授和他的同事付出了许多辛劳,是他们近几年为石油地球化学作出的一项有重要意义的贡献。

黄第藩

1992. 11: 24

目 录

前言	(1)
第一章 饱和烃类生物标志物的质量色谱图	(5)
图 1.1 部分规则、不规则异戊间二烯类化合物的色谱图和 m/e 183 质量色谱图	(7)
图 1.2 甲基和二甲基取代支链烷烃($nC_{10} \sim nC_{17}$)气相色谱图	(8)
图 1.3 部分长支链烷烃的保留位置图	(9)
图 1.4 $C_{30} \sim C_{33}$ 葡萄藻烷类在不同极性色谱柱上的保留位置图	(9)
图 1.5 环己烷系列的质量色谱图	(10)
图 1.6 长侧链取代环己烷系列质量色谱图	(10)
图 1.7 类胡萝卜烷系列的质量色谱图	(11)
图 1.8 十氢化萘系列的质量色谱图	(11)
图 1.9 部分倍半萜烷的质量色谱图	(12)
图 1.10 补身烷、桉叶油烷标样与样品共注的质量色谱图	(13)
图 1.11 补身烷和甲基补身烷的质量色谱图	(14)
图 1.12 二环烷系列的质量色谱图	(14)
图 1.13 脱-A,B 环-甾烷的质量色谱图	(15)
图 1.14 降半日花烷类的质量色谱图	(16)
图 1.15 部分二萜烷的质量色谱图	(17)
图 1.16 部分二萜烷的质量色谱图	(18)
图 1.17 部分 $C_{18} \sim C_{21}$ 三环烷的质量色谱图	(18)
图 1.18 13α (烷基)-三环萜烷的质量色谱图	(19)
图 1.19 某未成熟样品三环萜烷的质量色谱图	(19)
图 1.20 $C_{19} \sim C_{36}$ 三环萜烷的质量色谱图	(20)
图 1.21 某些 C_{18}, C_{20} 未知三环烷和 C_{23}, C_{24} 四环烷的质量色谱图	(20)
图 1.22 A 环 1~10 位或 4~5 位 C-C 键断的甾烷和 4-甲基甾烷系列质量色谱图	(21)
图 1.23 17,21-断藿烷、甲基-17,21-断藿烷和甲基三环萜烷质量色谱图	(22)
图 1.24 某些四环二萜烷质量色谱图	(22)
图 1.25 某样品的甾烷分布图	(23)
图 1.26 27-降、24-降和 21-降胆甾烷的质量色谱图	(24)
图 1.27 某样品的重排甾烷和规则甾烷质量色谱图	(25)
图 1.28 某成熟样品的规则甾烷质量色谱图	(25)
图 1.29 某未成熟样品的部分规则甾烷和 4-甲基甾烷的质量色谱图	(26)
图 1.30 C_{31} 甲基甾烷的质量色谱图	(27)
图 1.31 2α -甲基和 3β -甲基甾烷的质量色谱图	(28)

图 1.32	$C_{29} \sim C_{31}$, 3 β -乙基甾烷类和 $C_{27} \sim C_{29}$ 甾烷、 $C_{28} \sim C_{30}$ 甲基甾烷相对分布的质量色谱图	(29)
图 1.33	甲藻甾烷、4-甲基甾烷、 C_{29} 和 C_{30} 甾烷的质量色谱图	(30)
图 1.34	$C_{30} \sim C_{32}$ 羊毛甾烷的质量色谱图	(32)
图 1.35	达玛-13(17)-烯的色谱图和达玛烷的 m/e 301 质量色谱图	(32)
图 1.36	$C_{27} \sim C_{29}$, 螺旋甾烯质量色谱图	(33)
图 1.37	10 α ,10 β 和 4 β -甲基-10 α -重排甾烯及 10 α ,10 β 和 4 α -甲基-10 β -重排螺旋甾烯的质量色谱图	(34)
图 1.38	某样品中 $\Delta^{8(14)}5\alpha$ -和 $\Delta^{14}5\alpha$ 甾烯的总离子流图	(36)
图 1.39	九个甾烯标样的 RIC 图	(37)
图 1.40	某样品藿烷类的质量色谱图	(37)
图 1.41	25,28,30-三降藿烷, 莫烷和 28,30-二降莫烷的质量色谱图	(38)
图 1.42	$\beta\beta$ 藿烷质量色谱图	(39)
图 1.43	脱甲基三环萜烷类和 17 α (H)-25-降藿烷类质量色谱图	(40)
图 1.44	甲基藿烷类的质量色谱图	(41)
图 1.45	重排藿烷类的质量色谱图	(42)
图 1.46	藿-17(21)-烯类的质量色谱图	(42)
图 1.47	甲基藿-17(21)-烯类的质量色谱图	(43)
图 1.48	部分藿-17(21)-,13(18)-,12-,22(29)-,21-烯的质量色谱图	(43)
图 1.49	部分藿烯、甾烯的质量色谱图	(44)
图 1.50	几种 24-降-五环三萜(奥利烯、乌散烯、羽扇烷)的质量色谱图	(45)
图 1.51	六环藿类烷烃质量色谱图	(46)
图 1.52	与双杜松烷有关的未知物的质量色谱图	(46)
图 1.53	部分杜松烷类和七或八环的三杜松烷(Tricadinane)类的总离子流和质量色谱图	(47)
图 1.54	金刚烷类化合物的分布图	(48)
表 1.1	部分甾烷和三萜烷类标样的卡瓦指数值表	(50)
饱和烃类部分的参考文献		(53)

第二章	芳烃类生物标志物的质量色谱图	(57)
图 2.1	萘系列质量色谱图	(59)
图 2.2	联苯系列质量色谱图	(59)
图 2.3	二氢茈系列质量色谱图	(60)
图 2.4	氧茈系列质量色谱图	(60)
图 2.5	茈系列质量色谱图	(61)
图 2.6	菲系列质量色谱图	(61)
图 2.7	2-苯基萘系列质量色谱图	(62)
图 2.8	二苯并噻吩系列质量色谱图	(62)

图 2.9	萤蒽和芘系列质量色谱图	(63)
图 2.10	蒽系列质量色谱图	(64)
图 2.11	$m/e252$ 质量色谱图	(65)
图 2.12	苯并蒽并噻吩系列质量色谱图	(65)
图 2.13	环己基-苯系列质量色谱图	(66)
图 2.14	$C_2 \sim C_4$ 取代苯的质量色谱图	(66)
图 2.15	苯基萘烷~十五烷的质量色谱图	(67)
图 2.16	部分长链烷基取代的苯、甲苯、二甲苯等系列的质量色谱图	(68)
图 2.17	1-烷基-2,3,6-三甲基苯系列质量色谱图	(69)
图 2.18	1,2-二氢化茚系列质量色谱图	(70)
图 2.19	茚系列的质量色谱图	(70)
图 2.20	部分芳构化倍半萜质量色谱图	(71)
图 2.21	部分 $C_{11} \sim C_{14}$ 芳烃化合物的质量色谱图	(72)
图 2.22	二甲基烷基萘类($C_{18}H_{2n-12}$)质量色谱图	(73)
图 2.23	三甲基-1-烷基萘系列质量色谱图	(74)
图 2.24	基峰为 $m/e133/134$ 的双芳化合物系列质量色谱图	(74)
图 2.25	α -脱羟基维生素 E 降解系列的质量色谱图	(75)
图 2.26	脱羟基维生素 E 类的质量色谱图	(76)
图 2.27	部分芳构化二萜类的质量色谱图	(76)
图 2.28	部分单芳二萜和三环烷质量色谱图	(77)
图 2.29	部分单芳二萜类质量色谱图	(78)
图 2.30	C 环单芳三环萜烷系列 $m/e145+159+171+173+185$ 的质量色谱图	(79)
图 2.31	部分双芳二萜烷质量色谱图	(80)
图 2.32	部分双芳三环烷类的 $m/e209$ 质量色谱图	(81)
图 2.33	部分双芳三环烷类的 $m/e223$ 质量色谱图	(82)
图 2.34	部分双芳三环烷类的 $m/e237$ 质量色谱图	(83)
图 2.35	部分 A,B 环-双芳-二萜烷的质量色谱图	(84)
图 2.36	部分芳构化的断-双杜松烷(seco-bicadinane)类和三杜松烷(tricadinane)类的 总离子流和质量色谱图	(85)
图 2.37	双芳/三芳-脱 A 环羽扇烷、乌散烷和奥利烷的质量色谱图	(86)
图 2.38	A/B 环-单芳甾烷的质量色谱图	(87)
图 2.39	C 环-单芳甾烷的质量色谱图	(88)
图 2.40	A,B 环-双芳-甾烷和甲基甾烷的质量色谱图	(89)
图 2.41	三芳甾烷和甲基三芳甾烷的质量色谱图	(90)
图 2.42	$C_{27} \sim C_{35}$, 单芳-8,14 断藿烷的质量色谱图	(90)
图 2.43	8,14 断-D 和 D,E 环芳构化降藿烷/烯的质量色谱图	(91)
图 2.44	部分芳构化 8,14 断五环三萜类的质量色谱图	(92)
图 2.45	部分 A 环-单芳-五环三萜类的质量色谱图	(93)
图 2.46	部分 A,B 环-双芳-五环三萜类的质量色谱图	(94)

图 2.47 三芳以上芳构化五环三萜类质量色谱图	(95)
图 2.48 苯并藿烷质量色谱图	(98)
芳烃类部分的参考文献	(99)
第三章 含硫化合物的质量色谱图	(101)
图 3.1 富硫干酪根热裂解产物中低相对分子质量的含硫化合物(上图:FPD 色谱图; 下图:C ₁ ~C ₆ 烷基噻吩的质量色谱图)	(103)
图 3.2 两种典型干酪根热裂解的 FPD 色谱图	(106)
图 3.3 某样品极性馏分经 MeLi/MeI 处理后的二或多硫键合化合物的色谱图	(107)
图 3.4 某样品极性馏分经 MeLi/MeI 处理后的 <i>m/e</i> 75,89,328,418 质量色谱图	(108)
图 3.5 具直链或异戊间二烯链的环二硫,三硫杂环化合物的质量色谱图	(110)
图 3.6 各长链烷基噻吩系列的质量色谱图	(111)
图 3.7 各长链烷基四氢噻吩系列的质量色谱图	(113)
图 3.8 各长链烷基苯并噻吩系列的质量色谱图	(115)
图 3.9 长链烷基苯并二氢噻吩系列的质量色谱图	(116)
图 3.10 二环、四环萜类硫化物和三环硫化合物的质量色谱图	(117)
图 3.11 藿烷类硫化物的质量色谱图	(119)
含硫化合物部分的参考文献	(120)
附 录 JH 生物标志物谱库说明	(121)
A 生物标志物保留指数的重复性研究	(123)
B 谱库化合物命名说明	(128)
C 谱库索引(按谱库号为序)	(129)
C.1 J1 子库索引(饱和烃类)	(129)
C.2 J2 子库索引(芳烃类)	(148)
C.3 J3 子库索引(含硫化合物)	(165)
D 谱库使用操作说明	(180)
附录部分的参考文献	(182)

前言

80年代以来,我国石油有机地球化学的研究发展非常迅速,至今用来研究生物标志物的主要仪器设备“色谱/质谱/数据系统”及“色谱/质谱/质谱/数据系统”在各大油田和研究机构中已相当普及,在石油、天然气勘探中应用生物标志物资料作为评价和对比指标已成为不可缺少的内容之一。然而,不少研究人员在应用色/质分析资料时常常遇到一些困难,首先是有关生物标志物的鉴定,所以一般研究人员目前仅仅使用在 m/e 217, 191 质量色谱图上辨认的几种常见甾、萜烷部分。也就是说,仅仅利用了样品色/质分析资料中所蕴藏的部分地化信息。这乃是石油有机地球化学研究领域有必要解决的一个问题。

在鉴定生物标志物时,将样品色/质分析资料与已发表的谱图、保留指数和质量色谱图等资料进行对比,仍是目前使用的一个主要途径,但已发表的大量生物标志物谱图、质量色谱图等资料尚散见于各种地化文献中,商业性化合物谱库,如 NB 谱库虽包含 42000 张标准谱图,其中却只有少数在鉴定生物标志物时才是有用的。R. P. Philp 在 1985 年第一次系统地总结了截止到 1984 年底世界上已刊和部分未刊资料,发表了一本专著“化石燃料生物标志物”,书中共计发表了 373 张谱图(国内有傅家谟、盛国英译本,1987 年),在一定程度上满足了当时国内外的急需。但随着研究工作日益深入,生物标志物的数量几乎呈指数增长,尤其是多环芳烃部分,芳构化的甾、萜类化合物数量比饱和烃类的多几倍,此外含硫化合物也是近年来新发现且数量较多的一类,这使得 R. P. Philp 的专著已不能满足现实需要。何况该书只发表了生物标志物的质谱图,随着标志物的种类和数量日益繁多,几种标志物,其质谱图近似的现象屡见不鲜,单靠对比质谱图进行定性鉴定已日益困难,增加对比标志物在毛细柱上的保留指数和参考同类标志物的质量色谱图对提高鉴定的可靠程度具有重要意义。

自 1984 年江汉石油学院分析测试研究中心引进我国第一台 TSQ-45 型色谱/质谱/质谱/数据系统以来,已分析数千个不同类型、年代和成熟度的样品,由于我国陆相生油特点,标志物尤为丰富,故已积累了大量资料,色/质组同志都希望将此整理、总结成谱库,以填补该领域的空白。这一愿望得到包括中国石油天然气总公司科技发展局在内各级领导的大力支持,从 1987 年开始至今已历时五年之久,本书即是建成的 JH 生物标志物谱库的一个配套部分。

书中收录了在不同地质条件下不同类型样品中各类生物标志物的质量色谱图;藉此可了解其特定的分布模式以及与其他类型标志物相互间的保留位置关系。这对快速地从众多的色/质数据中发现标志物或提取想找的标志物和提高标志物鉴定的可靠性具有极为重要的参考价值,并对所获样品的色/质分析数据作地化解释时也很有帮助。

书中发表的除本实验室积累的资料外,还广泛收集了分散在各种文献中参考价值较高的质量色谱图。对个别罕见的质量色谱图,如图 1.24 也收录了,图中许多峰的质量色谱图和保留指数与常见的甾烷不同,编者认为发表这些图有助于今后生物标志物的研究工作。图的总数是 114 张,与 JH 谱库对应也分成三个部分,其中饱和烃类部分 55 张,芳烃类部分 48 张及含硫化合物部分 11 张。一般每张图附有该类化合物的结构图,部分峰的顶部标有该峰所对应标志物

的 JH 谱库号。对取得该图的色谱条件、样品类型、年代、主要参考文献等均作了注明。

书的附录是 JH 生物标志物谱库的说明,报道了在本实验室条件下留、萜烷类和多环芳烃化合物各种保留指数(I 值)重复性的统计结果,得出了“用与化合物同类型的参比物计算 I 值时误差最小”的结论。提出用 C_{23} , 三环萜烷和 C_{29} , $17\alpha(H)$, $21\beta(H)$ -30-降藿烷作参比计算萜烷类标志物 I 值的新方法,统计结果还证实,所得 I 值可应用于全扫描或单/多离子检测这两种不同质谱扫描方式。后者所得 I 值的重复性略优于前者。这些统计结果为建库选择最佳 I 值计算方法和分析用 I 值检索结果的可靠性时提供了定量的依据。附录还包括 JH 谱库软件使用说明和索引。索引以谱库号为序,列有标志物的中文名称、英文名称、基峰、相对分子质量、分子式、保留参数和鉴定依据。

JH 谱库则建在 5-1/4' 和 3.5' 软盘或 1/4' 盒式磁带上。考虑到 TSQ-45 型仪器所采用的 INCOS 数据处理系统在国内外均不普及,故自行研制软件,实现了 INCOS 数据系统与 IBM 微机间的谱库数据传输,使谱库不仅能在 INCOS 数据处理系统上,还能在 IBM 微机上实现检索、显示和打印,从而大大提高了该谱库应用的广泛性。

软盘/磁带中收录了用 TSQ-45 型仪器分析鉴定的谱图和从书刊或商业性化合物谱库中收集的谱图共 1626 张,为了减少化合物保留参数、相对分子质量间的重叠现象,提高检索结果的吻合程度,将全库按化合物类型分成三个子库:饱和烃类(J1)有 625 张谱图;芳烃类(J2)有 525 张;含硫化合物(J3)476 张。鉴于在色谱柱上的 I 值对鉴定工作的重要性,谱库中标志物最多可能有两种 I 值:一是卡瓦指数;另一是用同类型化合物作参比计算所得。发表的 I 值总计 926 个。

谱库可分别按谱库号、基峰、相对分子质量、分子式、保留指数 1 或保留指数 2 作单因子检索,也可按以上六个因子任意组合进行多因子检索,故检索不仅速度快,且效果良好。

谱库还附有部分化合物的结构图,可与谱图同时显示或打印。这对研究生物标志物是非常有用的,尤其是当某些石油地质研究人员对生物标志物的名称尚不很熟悉,难以定性时,会很有帮助。

将前人鉴定某类标志物所用的质量色谱图(包括其色谱条件、所用样品类型、年代和参考文献等资料)汇编成册,配以可用在各研究机关已普及的 IBM 微机上检索的 JH 谱库,无疑将起实用性很强的“生物标志物辞典”的作用。尽管目前它还有待进一步充实和完善,如谱库中大都不是标准谱图;有的谱图不完整,仅有分子离子峰和几个特征碎片峰;不少化合物的定性很笼统甚至是未知物;且所收集标志物谱图和质量色谱图的数量、类型等还远不能包括其全部;有时不同条件下同一标志物所得 I 值的误差大于不同标志物 I 值之差等等,但编者认为从实用角度出发,这些标准或不标准、完整或不完整的资料目前对研究人员仍有重要的参考价值而应兼收并蓄。本书和谱库已基本能满足当前的急需,既使对专职从事生物标志物研究的高级科研人员也不失为一个重要的工具。我们也准备将来不断完善它。

由于软件具有修改和增加谱图等编辑功能,为修改原有谱图不足之处和增加新资料提供了方便。编者希望在广大同行的共同努力下,本书和谱库将日益完善成为具有我国陆相生油特色的“生物标志物大辞典”,对促进有机地球化学学科和我国石油勘探事业的发展起到有益的作用。

本书和谱库是一集体创作,具体分工如下:

总负责人:王培荣

生物标志物质量色谱图集:

编写:王培荣;编辑:张泽波 虞永合

图件清绘:郑光春

JH 谱库:

J1 库:包建平 谈俊雄 朱翠山 赵红 王培荣

J2 库:王培荣 张泽波 代允健

J3 库:姚焕新 陈奇 王培荣 朱翠山

生物标志物保留参数的重复性研究:赵红

INCOS 数据系统和 IBM 间谱库数据传输:代允健

化合物结构图软件编制:朱翠山

IBM 用谱库软件编制:郭麦成 陈天传

为了提高质量,特先后邀请有关专家来院对谱图、质量色谱图和命名等进行审核和修改。
他们是:

盛国英(研究员,中科院广州地化所):芳香甙、萜和含硫化合物部分

张大江(高工,石油勘探开发科学研究院):芳香甙萜部分

蒋助生(高工,石油勘探开发科学研究院廊坊分院):三环萜烷和胡萝卜烷等

曾宪章(高工,华北石油管理局研究院):甾烷类等

宋一涛(高工,胜利油田研究院):藿烷类

此外,林壬子院长(原分析测试研究中心主任)全力支持并作了大量组织工作,黄第藩教授提供了宝贵的标样,王铁冠教授,盛国英研究员,曾宪章、蒋助生、宋一涛高工热情提供参考文献或谱图,梅博文、蒋基平副教授对某些化合物的定性问题提供了帮助。本项目获中国石油天然气总公司科技发展局经费支持并承科技发展局石宝珩副局长、关德范处长和我院科技处有关领导的大力支持和帮助,在此一并致以衷心的感谢。

第一章 饱和烃类生物标志物的 质量色谱图

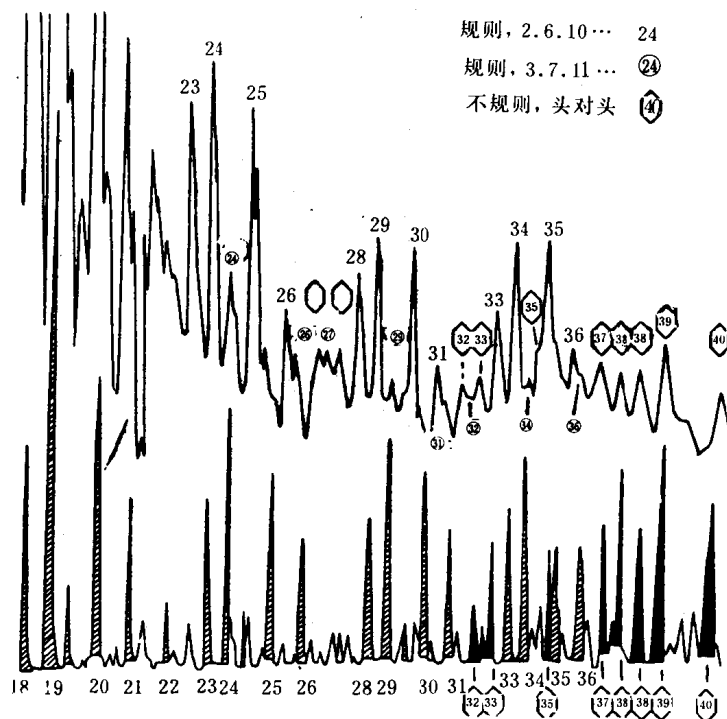


图 1.1 部分规则、不规则异戊间二烯类化合物的色谱图和 $m/e183$ 质量色谱图

(据 Thompson, K. F. M., et al, 1992)

样品:原油,中新世,其中 $m/e183$ 的质量色谱图系作者引用 Moldowan 和 Seifert 的, 1979;

参考文献:[13],[28],[72],[76],[77],[85],[86]

色谱条件:OV-101, 25m

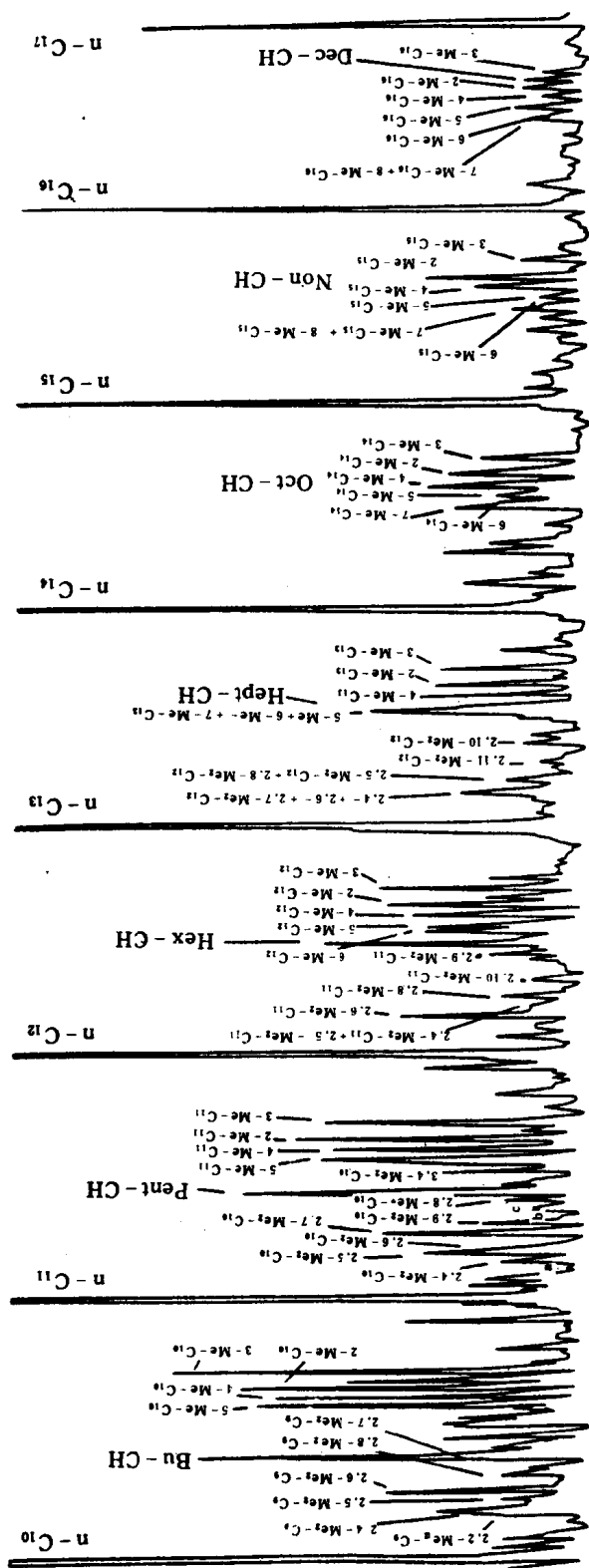
注:为了有助于定性,摘录其他文献发表的异戊间二烯类的 Kovats 指数值如下:

I. Albaiges, J. 发表于[13], 固定液为阿匹松 L

C ₂₀ (植烷)	1790	C ₂₁	1872	C ₂₂	1960	C ₂₃	2052
C ₂₄	2106	C ₂₅	2208	C ₂₆	2293	C ₂₈	2470
C ₂₉	2523	C ₃₀	2627	C ₃₁	2710	C ₃₃	2870
C ₃₄	2937	C ₃₅	3039	C ₃₆	3135	C ₃₈	3288
C ₃₉	3350	C ₄₀	3444				

II. Damste, J. S. S 发表于[28], 固定液为 cp-sil5(130~300°C, 速率 4°C/min)

2,6,10,14,19-五甲基二十烷	2224
2,6,10,14,18-五甲基二十烷	2237
i-C ₂₅	2270
i-C ₂₆	2311
2,6,10,14,19-五甲基二十一烷	2321
2,6,10,14,18-五甲基二十一烷	2338
i-C ₂₆	2367

图 1.2 甲基和二甲基取代支链烷烃($nC_{10} \sim nC_{17}$)气相色谱图

样品:原油; 参考文献:[42],[76]

Bu-CH---n-butylcyclohexane; Hex-CH---n-hexylcyclohexane; 余类推

注: 对照文献〔42〕报道: a—4,6-二甲基-C₁₀; b—3,7-二甲基-C₁₀; c—3,6-二甲基-C₁₀。

6-甲基-C₁₁在5-甲基-C₁₁之前,柱效不够时共逸出。