

论分子有机地球化学若干名词与术语的辨析和厘定

王铁冠

石油大学教育部油气成藏机理重点实验室,北京,102200

内容提要 本文对多年来地质学中文文献中常见的约20个分子有机地球化学名词与术语概念上的不规范现象,提出质疑、辨析和讨论,其中有些名词与术语的使用,还不限于有机地球化学的学科范畴。笔者期望通过讨论得到有关专家的指正和厘定,防止以讹传讹,使某些谬误得到进一步的流传,并促进相关学科之间的学术交流。

关键词 分子有机地球化学 生物标志物 分子标志物 环状萜类 留烷

作为一门新兴的边缘学科,近20年来分子有机地球化学涵盖的范畴,已经从化石燃料、能源地质学、沉积学等传统的研究领域,迅速扩展到黄土学、湖沼学、海洋学与古海洋学、大气科学与古气候学、古生物化学和分子生物学、分子地层学、环境科学以及考古学等新的研究方向。多学科的交叉研究大大促进了分子有机地球化学的发展,文献中分子有机地球化学的新成果层出不穷;同时,分子有机地球化学名词与术语概念上的混乱现象也屡见不鲜,这种情况势必会影响学科的发展以及国内、外的学术交流。近几年来,笔者有感于从文献上见到的分子有机地球化学名词、术语概念上的若干不规范现象,乃至某些谬误的流传不止,斗胆借助这篇拙文,试图对此加以辨析、澄清或提出商榷,以期得到相关学科专家们的指正和厘定。

1 生物标志物与分子标志物

生物标志物(biomarkers)是指存在于地壳和大气圈中,分子结构与特定天然产物之间具有明确联系,或与特定生物类别的分子结构之间具有相关性的天然有机化合物(Eglinton, 1969; Philp, 1985a; 王铁冠, 1990)。事实上,从地质的和当代环境的样品中,检测出的诸多留、萜类化合物,大都已经在生物体中,发现与其分子结构相关的前身物,从而建立起“前身物-产物(products-precursors)”的关系,已确认属于“生物标志物”的范畴。此外,还有一些烃类,其单个化合物的分子结构不具明确的生源意义,但是,其同系列的组合型式,却具有相当明确的生源意义

(如正烷烃、异构烷烃系列),或者通过与其他烃类同系列的对比,建立起两者在成因上的联系,从而确认生源意义(如某些烷基环己烷系列),致使这些化合物也可归属于“生物标志物”的范畴(Philp, 1985a)。

然而,在当今的文献中,屡屡见到把不符合上述定义的化合物称为“生物标志物”,从而将“生物标志物”扩大化的现象。例如,很多常见的化合物,像轻烃化合物(如甲基戊烷、环己烷等)、某些复杂结构的烃类(如金刚烷)、绝大多数多环芳烃类(如联苯、萘、苊、菲、蒽、芘、苊、芴、苊、蒄等系列)以及若干杂环化合物(如二苯并呋喃、二苯并噻吩、噻吩类、咔唑类等),都不存在与任何生物分子之间的“前身物-产物”关系。尽管有些分子也可能起源于某种或多种生物前身物,但是在其演化过程中,已丧失了其前身物的分子结构特征,不再具有生源意义,显然不在“生物标志物”之列。但是,这里丝毫不应排除从这些化合物获取其他地质-地球化学信息的可能性。

在地质的和当代环境的样品中,借助于分子立体化学结构与构型、同系列组合型式或同位素组成特征,很多天然有机化合物可以“携带”与其所经历的生物、化学、物理和地质过程相关的信息。在近期文献中,将这些有机分子可称之为分子标志物(molecular markers),又称为过程探针(process probes; Eganhouse, 1997)。显然,在“分子标志物”的范畴中,既包含具有明确生源意义的“生物标志物”,又包括虽不具生源意义,但含有明确过程意义的其他有机分子。显然,生物标志物的涵义具有严格的专属性,而分子标志物的涵义则更具广泛性。前面

收稿日期:2001-10-22;改回日期:2002-01-25;责任编辑:周健。

作者简介:王铁冠,男,1937年生。现为石油大学(北京)资源与信息学院教授、博士生导师,长期从事有机地球化学及石油地质学的教学与研究。通讯地址:102200,北京昌平,石油大学资源与信息学院。

提到的诸多不属于生物标志物范畴的天然有机化合物,大多可以作为分子标志物,成为指示沉积-成岩环境的氧化-还原性、成熟过程、有机质迁移、热蚀变作用、生物降解作用,以及环境污染程度的标志。例如,由芴、硫芴(二苯并噻吩)、氧芴(二苯并呋喃)构成的“三芴”系列的组成,常作为表征沉积水体氧化-还原环境的标志(程克明等,1995);由烷基萘、甲基菲、烷基苯并噻吩异构体组成的分子参数,可作为有机质成熟度指标(Radke et al., 1982),咔唑类含氮化合物参数作为示踪油气运移与油藏充注途径的有效指标(Li et al., 1995)。目前,随着研究领域的扩展,分子有机地球化学的研究,已不限于地质样品中的分子标志物,还包括当代环境中的天然有机化合物、人类活动及工业生产的产物,例如城市沙尘暴(Kumata et al., 1997),化石燃料污染(Fraser et al., 1999; Oros et al., 2000)和洗涤剂(Reiser et al., 1997)中的有机分子,也已成为分子标志物的研究内容,服务于环境科学与社会人文科学。

2 无环链烷烃类

2.1 正烷烃与“蜡”

在国内文献中,也常见混淆石蜡烃、石蜡、高等植物蜡等概念的现象。在有机化学中,正烷烃(n -alkanes)又称脂肪族烃、石蜡烃(paraffins),分子式为 C_nH_{2n+2} ,可以由高等植物的上表皮蜡、细菌蜡以及微生物的类脂物(即脂肪酸、脂肪醇)等生源母质形成。高等植物蜡的成分主要是由高级脂肪酸与高级脂肪醇所组成的酯类(esters),分子式为 $C_nH_{2n+2}O_2$ (Oros et al., 2000)。这些酯类经水解、脱羧或脱水过程,即可形成正烷烃(Bonner et al., 1976)。在原油中,由高等植物蜡生源输入形成的正烷烃,以富含具有奇偶优势的 $n-C_{23} \sim n-C_{35}$ +高碳数正烷烃为特征;当然,随成熟度增高,奇偶优势还会消失。而细菌蜡以相对富含异构烷烃和反异构烷烃为特征,微生物生源的正烷烃则以低碳数同系物占优势,同样可含有少量的高碳数正烷烃,但是,细菌蜡和微生物生源的正烷烃都不具备任何奇偶优势(Tissot et al., 1984)。因此,正烷烃同系物的分布型式,往往具有一定生源指示信息。

实际上,无论海相生源,还是陆相成因,正烷烃是大多数石油的主要成分;以环烷烃和芳香烃为主的石油并不多见。作为石油工业的加工产品,从石油中析出的固体链烷烃类混合物,称为石蜡(paraffins)。石蜡的成分主要是 $n-C_{25} \sim n-C_{90}$ 正烷烃,

并以 $n-C_{30}^+$ 高分子量正烷烃占优势,也含异构烷烃(Philp et al., 1995)。通常,在实验室采用蒸馏或吸附方法,从原油中晶析出石蜡,以测定其含蜡量;含蜡量高于10%(或15%) 的石油为高蜡原油。高等植物蜡生源的陆相石油大都是高蜡原油,以富含高碳数正烷烃为特征。微生物生源的海相石油也可能含有相当数量的 $n-C_{23} \sim n-C_{35}^+$ 正烷烃,因此不能以是否含有高碳数正烷烃作为海、陆相原油的区分标准。但是,海相石油的正烷烃不具奇偶优势,高分子量正烷烃含量很低,含蜡量一般也不高。

2.2 粘球形藻生源的正烷烃

作为正烷烃分布型式的特例,Martin等(1963)最早报道一种奥陶系成熟原油,以 $n-C_{11} \sim n-C_{19}$ 低碳数正烷烃为主,并具有明显奇偶优势。以后,世界其他地区(包括中国的塔里木盆地),也陆续发现这种原油。这种原油的奥陶系烃源岩,富含一种化石藻,由于与现代蓝绿藻纲的粘球藻属(*Gloeocapsa* Kutzting, 1898)的形态非常相似,因此命名为粘球形藻(*Gloeocapsamorpha prisca* Zalewsky, 1916)(Reed et al., 1986)。这种原油的低碳数正烷烃的奇偶优势与其成熟度并不相干,却反映粘球形藻生源母质特征。但是,有些中文文献的作者把“粘球形藻”混称为“粘球藻”,尽管仅一字之差,显然是不正确的。

2.3 姥鲛烷、植烷与姥植比

姥鲛烷与植烷是常见的类异戊二烯烷烃,主要是由叶绿素-a的烷基侧链烃衍生的。根据两者相对丰度建立的姥植比(Pr/Ph)也是常用的分子参数,通常与其他指标相结合,用于判断沉积环境。一般高姥植比(>3)表征沼泽环境,或氧化条件下陆源有机质的生源输入;低姥植比(<0.6)则指示缺氧的盐水环境;其间通常属于一般的湖泊环境(Peters et al., 1993)。但是值得注意的是,在中国塔里木和华北以及加拿大等地区,从既无陆源有机质生源输入,又非沼泽氧化环境的高成熟—过成熟奥陶系海相原油或碳酸盐岩中,都检测出姥植比高达1~3以上的异常现象,曾引起地质学家的困惑。事实上,在高演化条件下,这种高姥植比现象,可能是姥鲛烷分子的热稳定性高于植烷分子所致(Macauley et al., 1990; Wang et al., 2001)。因此,对于高成熟—过成熟的烃源岩和原油,姥植比不再是判别沉积水体环境的有效指标。

2.4 丛粒藻烷?还是“葡萄球藻烷”?

丛粒藻烷(botryococcane)在有机地球化学(甚

至微古生物学)的中文文献中,常有不少人称之为“葡萄藻烷”或“葡萄球藻烷”。众所周知,botryococcane 的生源母质来自丛粒藻属布朗种(*Botryococcus braunii* Kütz)。在藻类学分类上,并无“葡萄球藻”之词,但确实另有一个葡萄藻属(*Botryocladia* Kylin),它与丛粒藻属分别为两个不同的属名(藻类名称及名词,1978)。在西文文献中,*Botryococcus braunii* Kütz 和 botryococcane 的“生源产物”关系都是公认的,不存在任何争议或混淆。唯在中文文献中,对于 botryococcane 的译名却是混乱的。据《藻类名词及名称》一书中“绿藻门”的主编、中国科学院水生生物研究所饶钦止先生的私人通信(1987),丛粒藻属(*Botryococcus braunii* Kütz)为陆生藻类,由于能合成叶绿体和淀粉,所以归属于绿藻门,但又因其含有脂肪酸,也有人主张列入黄藻门;而葡萄藻属(*Botryocladia* Kylin)则为海生藻类。目前分子有机地球化学文献中所报道的 botryococcane,也无不见诸于湖沼环境的沉积物或陆相原油。因此,无论对其采用“葡萄藻烷”,还是“葡萄球藻烷”的称谓,都是不正确的,只能将其称作丛粒藻烷。

3 环状萜类

3.1 “萜”与“萜烷”

天然产物萜或萜类(terpenoids)与萜烷类(terpanes)在西文中是词尾不同的两个名词,而用中文表达,两者仅有一字之差。但是,在内涵上,萜烷类专指具萜类骨架的烷烃,多见于成熟的沉积有机质和化石燃料;而萜或萜类则不限于烷烃类,还包括具有相同骨架的烯烃类、酸类、醇类、酮类和醛类等,常见于天然产物和未成熟的沉积有机质(约纳斯,1991)。因此,这两个词的涵义各有所指,不得混用。然而,在中文文献中,混用萜和萜烷、萜烯三个词,或将“萜烷”、“萜烯”不恰当地简化为萜或萜类者比比皆是,例如,《全国自然科学名词审定委员会公布石油名词1994》中就将倍半萜烯(sesquiterpene)、二萜烯(diterpene)和三萜烯(triterpene)三个条目全都译成“倍半萜”、“二萜”和“三萜”。特别是,萜烷类中的“三环萜烷”(tricyclic terpanes,也称作长侧链三环萜烷,即 extended tricyclic terpanes)和“四环萜烷”(tetracyclic terpanes),分别是两个特定生物标志物系列的专属名词,在文献中却经常被人擅自简写成“三环萜”和“四环萜”,极易被误解为泛指具有三个和四个环的萜类,显然,这是一种错误的称谓。

3.2 三环萜烷与三环二萜烷

文献中,三环萜烷与三环二萜烷的混淆现象,也时而有之。环状二萜烷类是指由 C₁₆~C₂₀ 组成的环状萜烷,通常可具有1~4个环不等。虽然三环萜烷的环系,与具3个环的二萜烷很相似,但是三环萜烷的碳数范围一般为 C₁₉~C₄₅ 不等,因此根本不属于二萜烷的范畴。尽管 C₂₀ 三环萜烷与 C₂₀ 三环二萜烷都由3个环组成,但是两者的分子结构差异在于:三环萜烷在 C 环的 C—8 位上有一个甲基,而3个环的二萜烷则绝无此甲基,由此也就导致两者质谱图特征的明显差别(Philp, 1985b)。

从生源上看,一般公认,二萜类生物标志物均属裸子植物的树脂生源产物;而三环萜烷则属菌藻类微生物的生源标志物(Philp, 1985a; 王铁冠等,1990; Peters et al., 1993; 约翰斯,1991)。早期的文献中,曾有国外学者根据不全面的初步统计,提出过三环萜烷是“海相生物标志物”的观点(Aquino Neto et al., 1982),但是后续的大量文献报道(尤其是我国的文献)均表明,在陆相沉积物和化石燃料中,同样检测出了三环萜烷,已纠正了这种片面认识。然而令人遗憾的是,直到近期仍然有国内刊物,因袭前人过时的认识,把三环萜烷当作“海相标志物”来论述,这足以表明作为论文作者和审稿人,充分了解分子有机地球化学学科进展的必要性。

3.3 贝壳杉烷? 还是“贝壳松烷”?

四环二萜烷中,有一类贝壳杉烷(kauranes),中国化学会(1980)颁布的《有机化学命名原则》将其命名为“贝壳松烷”。在古植物学分类上,贝壳杉(*Agathis*)是松柏植物门松柏纲南洋杉科(Araucariaceae)的一个属。松柏纲中,南洋杉科与杉科、松科等并列为不同的独立物种(泰勒,1992)。南洋杉科植物在地质历史上,全球都有分布(王铁冠等,1990; Thomas, 1969)。在现代植物学上,南洋杉科只分布在南半球和东南亚地区,而且仅存南洋杉和贝壳杉两个属。贝壳杉的拉丁文学名为 *Agathis*,源于现代贝壳杉属澳大利亚种 *Agathis australis* (Thomas, 1969)。因此,贝壳杉就是贝壳杉,既非松,亦非杉,“贝壳松烷”的中译名显然是误解。

贝壳杉烷的英文名称 Kaurane 是从 *Agathis australis* 的澳大利亚土著毛利语的同义语 Kauri 派生出来的。贝壳杉烷前身物是贝壳杉叶树脂中的一种树脂酸 Agathic acid,中文名称为“贝壳杉酸”。在成岩作用过程中,二环的“贝壳杉酸”进一步环化、还原成具有一个桥环的四环成岩产物贝壳杉烷

(Thomas, 1969)。在西文中,这种四环二萜烷 Kaurane 与它的二环二萜酸前身物 Agathic acid,前者源于毛利语,后者出自拉丁文和英文,两个术语泾渭分明。但是,与之对应的中译名中,却共用一个相同的“贝壳杉”词干,仅在词尾上有“烷”和“酸”的差别。在论述前身物“贝壳杉酸”与成岩产物“贝壳杉烷”时,两者分子的环数与结构都是有区别的,这一点必须注意。

3.4 伽马蜡烷? 还是“ γ -蜡烷”?

伽马蜡烷 (gammacerane) 又称四膜虫烷 (tetrahymane),一般认为,由原生动物或光合细菌的细胞膜成分四膜虫醇 (tetrahymanol) 还原形成的 (Hill et al., 1966; Sinninghe et al., 1995)。通常将较高丰度的伽马蜡烷看作是沉积水体高盐度,或具有盐跃层的分层水体环境标志 (Hill et al., 1966; Peters et al., 1993)。需要指出的是,在国内文献中,多年来对于伽马蜡烷,已形成了一种非常盛行的,但是绝对错误的书写方式,将其简写成“ γ -蜡烷”。这种写法已见诸于不少专著和刊物中,甚至连《全国自然科学名词审定委员会公布石油名词1994》也采纳了这种错误表达方式。众所周知,在有机化学和天然产物化学中,凡是出现在化合物名称中的希腊字母前缀,都是用来标明某种异构体或衍生物的特定分子结构的。例如,胡萝卜烷有 γ -胡萝卜烷和 β -胡萝卜烷之分,还有 α -、 β -、 γ -和 δ -羟基维生素 E 的多个异构体和衍生物等,不一而足。这种“ γ -蜡烷”的表达方式,在字面上会使人误解为某种特定结构的“蜡烷”。事实上,无论从西文名词的原义、化学组成、分子结构看,还是从生源、成因上来看, gammacerane 一词与“蜡”毫不相干,它的中译名“伽马蜡烷”前两个汉字属音译,第三个汉字“蜡”纯属早期翻译时多余的误译。因此,如今绝对不应再以讹传讹,继续把伽马蜡烷误写成“ γ -蜡烷”了。如在一些图谱中需要简写标注时,不妨按国外出版物的惯例,采用西文名词的首字母“G”来表示伽马蜡烷,正如用“H”标注藿烷一样。

3.5 关于藿烷和奥利烷

藿烷 (hopanes) 和奥利烷 (oleananes) 两个词,分别是我国有机地球化学界通用的两个三萜烷的音译名,而在天然产物化学和《有机化学命名原则》(1980) 中,则分别称作“何帕烷”和“齐墩果烷”(又称“土当归烷”)。在不同学科领域,这种一物多名,或者生物标志物与其天然产物前身物的中文名称相差甚远的现象,显然是不利于科学发展与学科之间交流

的;即便对于分子有机地球化学自身而言,也不利于探讨与追索生物标志物的生源前身物。鉴于在各自学科领域中,这相同名词的两个不同称谓,已使用时日久远,难以更改。但是今后也要引为教训,如再有新化合物或新词出现,应尽可能地多加强学科之间的交流,尽量少用音译,可能的话,多遵循化合物的系统命名法则命名为好。

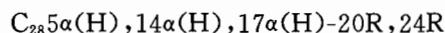
4 留类

4.1 留烷系列的规范化命名

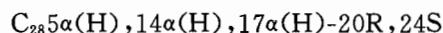
留烷是最常见的生物标志物类别之一。留烷环系骨架上,规则留烷的 C—5、C—14、C—17位,重排留烷的 C—13、C—17位以及两者侧链上的 C—20、C—24位,都是手性中心。每个手性中心均可导致两个差向异构体。其中 C—24位手性中心的 24S 与 24R 两个差向异构体,采用常规的气相色谱-质谱(GC-MS) 分析方法是分辨不出来的。因此,常规的 GC-MS 分析,对每个碳数的留烷,包含不同构型的重排留烷、留烷和异构留烷的差向异构体在内,共计可检测出 8 个化合物。在整个 C₂₇~C₂₉ 留烷系列中,总共检测出 24 个化合物组成的 20 个峰(其中有 4 个共溢出峰)(Philp, 1985b)。20世纪 70 年代早期,对于上述留烷系列的命名,国际上很多文献上惯于统称 C₂₇ 留烷为胆留烷 (cholestane), C₂₈ 留烷为“麦角留烷 (ergostane)”, C₂₉ 留烷为“豆留烷 (stigmastane)”或“谷留烷 (sitosterane)”。但是,后来进一步发现 C₂₈~C₂₉ 生物构型留烷的 C—24 位上,各有 24S 与 24R 两个差向异构体,而“麦角留烷”和“豆留烷”等分别只是其中的一个差向异构体 (Mulheirn et al., 1975), 即:



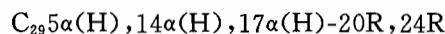
胆留烷 (cholestane)



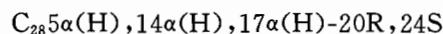
菜油留烷 (campestan)



麦角留烷 (ergostane)



豆留烷 (stigmastane)



多孔留烷 (poriferastane)

因此,仍以“麦角留烷”与“豆留烷”分别称谓整个 C₂₈ 和 C₂₉ 留烷,显然已经是不全面的。自此,在国际文献中,近来已几乎见不到这种留烷命名方式了。可是,在国内文献中,这种老习惯似乎尚未绝迹,也应当注

意。

当前文献上,除了上列包括碳数、构型在内的全称以外,对甾烷系列有两种较为规范的命名方式,也是值得借鉴的。其一是在胆甾烷的基础上的命名法:

$C_{27}5\alpha(H)$ -cholestane

$C_{27}5\alpha(H)$ -胆甾烷

$C_{28}24$ -Methyl- $5\alpha(H)$ -cholestane

C_{28} 甲基- $5\alpha(H)$ -胆甾烷

$C_{29}24$ -Ethyl- $5\alpha(H)$ -cholestane

C_{28} 乙基- $5\alpha(H)$ -胆甾烷

其二是简单命名法,在“甾烷”名词前直接加碳数命名,即称为 C_{27} 甾烷、 C_{28} 甾烷和 C_{29} 甾烷。第二种简单命名法,在国内、外文献中,业已多见。

4.2 甲藻甾烷

甲藻甾烷(dinostane)是一种特殊的 C_{30} 甾烷(即4,23,24-三甲基胆甾烷),其前身物是发现于沟鞭藻(Dinoflagellate)体内的 C_{30} 甲藻甾醇(dinosterol)。沟鞭藻的生存环境较为广泛,淡水湖相、盐湖相以及海相沉积物中都有沟鞭藻发现(Summons et al., 1987)。Volkman等(1990)报道从一种海生甲藻中分离、检测出 C_{30} 甲藻甾醇。有的研究者以此为依据,单纯依据甲藻甾烷的分布,判断陆相沉积盆地内的海侵方向,其作法是值得商榷的。因为,甲藻甾烷是一种生源专属性很强,而生境较为广适性,指相意义不明确的生物标志物,海生和陆生沟鞭藻体内,都可以有 C_{30} 甲藻甾醇存在,否则就谈不上甲藻甾烷对于沟鞭藻的生源专属性了。

参 考 文 献

- 帮纳 J, 瓦纳 J N. 1984. 植物生物化学. 北京: 科学出版社, 284~288.
- 彼得斯 K E, 莫多万 J M. 1995. 生物标记化合物指南——古代沉积物和石油中分子化石的解释. 姜乃煌等译. 北京: 石油工业出版社, 105~114.
- 程克明, 王铁冠, 钟宁宁, 等. 1995. 烃源岩地球化学. 北京: 科学出版社, 56~58.
- 全国自然科学名词审定委员会公布石油名词1994. 1995. 北京: 科学出版社, 17~18.
- 泰勒 T N. 1992. 古植物学——化石植物生物学导论. 梅美棠等译. 北京: 科学出版社, 325~339.
- 王铁冠, 等. 1990. 生物标志物地球化学研究. 武汉: 中国地质大学出版社, 2~3.
- 约纳斯 R B. 1991. 沉积记录中的生物标志物. 王铁冠等译. 北京: 科学出版社, 25~69.
- 藻类名词及名称. 1978. 北京: 科学出版社, 44.
- 中国化学会. 1984. 有机化学命名原则1980. 北京: 科学出版社, 147~160.
- References
- Aquino Neto F R, Restle A, Connan J, et al. 1982. Novel tricyclic terpanes (C_{19} , C_{20}) in sediments and petroleum. Tetrahedron Letts., 23:2027~2030.
- Bonner J, Varner J E. 1976. Plant Biochemistry (Third Edition). Academic Press.
- Cheng Keming, Wang Tieguan, Zhong Ningning, et al. 1995. Source Rock Geochemistry. Beijing: Petroleum Industry Press (in Chinese).
- Chinese Chemical Society. 1984. The Nomenclature of Organic Compounds 1980. 147~160 (in Chinese).
- Eganhouse R P. 1997. Molecular markers and environmental organic geochemistry: An over-view. In: Eganhouse R P, ed. Molecular Markers in Environmental Geochemistry. ACS Symposium Series 671, American Chemical Society, Washington DC, 1~20.
- Eglinton G. 1969. Organic geochemistry: the organic chemist's approach. In: Eglinton J, Murphy M T, ed. Organic Geochemistry: Methods and Results. Berlin: Springer-Verlag, 20~73.
- Fraser M P, Cass G R, Simoneit B R T. 1999. Particulate organic compounds emitted from motor vehicle exhaust and in the urban atmosphere. Proceeding of 6th International Carbon Particle Conference, Atmosphere Environment, 33:2715~2724.
- Hill I R, Whithead E V. 1966. An optically active triterpane, Gammacerane in Green River, Colorado, oil shale bitumen. Chem. Commun., 20:752~754.
- Johns R B. 1986. Biological Markers in The Sedimentary Record. Elsevier, Amsterdam.
- Kumata H, Takada H, Ogura N. 1997. 2-(4-Morholinyl) benzothiazole as an indicator of tire-wear particles and road dust in the urban environment. In: Eganhouse P, ed. Molecular Markers in Environmental Geochemistry. ACS Symposium Series 671, American Chemical Society, Washington DC, 291~305.
- Li M, Larter S R, Stoddart D H, et al. 1995. Fraction of pyrrolic nitrogen compounds in petroleum during migration: derivation of migration-related geochemical parameters. In: Cubitt J M, England W A, ed. The Geochemistry of Reservoirs. The Geological Society, London, 103~123.
- Macaulay G, Fowler M G, Goodarzi F, et al. 1990. Ordovician oil shale-source rock sediments in the central and eastern Canada Mainland and eastern Arctic, and their significance for frontier exploration. Geological Survey of Canada Paper No. 90~14.
- Martin R L, Winters J C, Williams J A. 1963. Distribution of n -paraffins in crude oils and their implications to the origin of petroleum. Nature, 199:110~113.
- Mulheirn L J, Ryback G R. 1975. Stereochemistry of some steranes from geological sources. Nature, 256:301~302.
- Oros D R, Simoneit B R T. 2000. Identification and emission rates of molecular tracers in coal smoke particulate matter. Fuel, 79:515~536.
- Petroleum Terms Announced by the National Nature Science Committee 1994. 1994. Beijing: Science Press (in Chinese).
- Peters K E, Moldowan J M. 1993. The Biomarker Guide—Interpreting Molecular Fossils in Petroleum and Ancient Sediments. Prentice Hall, New Jersey.

- Philp R P. 1985a. Biological markers in fossil fuel production. *Mass Spectrometry*, 4;1~54.
- Philp R P. 1985b. *Fossil Fuel Biomarkers—Application and Spectra*. Elsevier, Amsterdam.
- Philp R P, Bishop A N, Del Rio J -C, Allen J. 1995. Characterization of high molecular weight hydrocarbons ($> C_{40}$) in oils and reservoir rocks. In: Cubitt J M, England W A, ed. *The Geochemistry of Reservoirs*. The Geological Society, London, 71 ~85.
- Radke M R, Welte D H, Willsch H. 1982. Geochemical study on a well in the Western Canada Basin: relation of the aromatic distribution pattern to maturity of organic matter. *Geocimica et Cosmochimica Acta*, 46:1~10.
- Reed J D, Illich H A, Horsfield B. 1986. Biochemical evolution of Ordovician oils and their sources. *Organic Geochemistry*, 10:347 ~358.
- Reiser R, Toljander H, Albrecht A, et al. 1997. Alkylbenzenesulfonates in Recent lake sediments as molecular markers for the environmental behavior of detergent-derived chemicals. In: Eganhouse R P, ed. *Molecular Markers in Environmental Geochemistry*, ACS Symposium Series 671, American Chemical Society, Washington DC, 196~212.
- Sinninghe Damste J S, Kenig F, Koopans M P, et al. 1995. Evidence for gammacerane as a widespread source of tetrahymanol and hopan- β -ol in sediments. *Geochemica et Cosmochimica Acta*, 59:1895~1900.
- Summons R E, Volkman J K, Boreham C J. 1987. Dinosteranes and other steroidal hydrocarbons of dinoflagellate origin in sediments and petroleum. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 51: 3075 ~3082.
- Taylor T N. 1981. *Paleobotany—An Introduction to Fossil Plant Biology*. McGraw-Hill, New York.
- The Nomenclature and Terms of Algae. 1978. Beijing: Science Press, 44 (in Chinese).
- Thomas B R. 1969. Kauri resins—modern and fossil. In: Eglinton J, Murphy M T, ed. *Organic Geochemistry: Methods and Results*. Springer-Verlag, Berlin, 599~618.
- Tissot B P, Welte D H. 1984. *Petroleum Formation and Occurrence* (2nd. revision). Springer-Verlag, New York, 100~111.
- Volkman J K, Barrett S M, Dunstan G A, et al. 1990. Geochemical significance of the occurrence of dinosterol and other sterols in a marine diatom. *Organic Geochemistry*, 20(1):7~15.
- Wang Tieguan, et al. 1990. *Approach to Biomarker Geochemistry*. Wuhan: China Geology University Press, 2~3 (in Chinese).
- Wang Tieguan, Wang Feiyu, Lu Hong, et al. 2001. Oil source and entrapment epoch of the Ordovician oil reservoir in the Kongxi Burial-hill Zone, Huanghua Depression, North China. *Acta Geologica Sinica*, 75(2):212~219.

Discrimination and Stipulation of Some Terms of Molecular Organic Geochemistry

WANG Tieguan

*The Key Laboratory of Petroleum Entrapment Mechanism of Ministry of Education,
University of Petroleum, Beijing, 102200*

Abstract

In the paper non-normative concepts of about 20 molecular organic geochemical terms commonly appearing in the geological and geochemical literature in the past several years are put forward for discussion, discrimination and stipulation. The application of some terms of them is not only limited to the category of organic geochemistry. The author hopes that by means of the discussion with related exports these terms could be stipulated in order to avoid the further spreading of erroneous messages and promote the academic exchange between related disciplines.

Key words: molecular organic geochemistry; biomarker; molecular marker; cyclic terpenoids; steroids