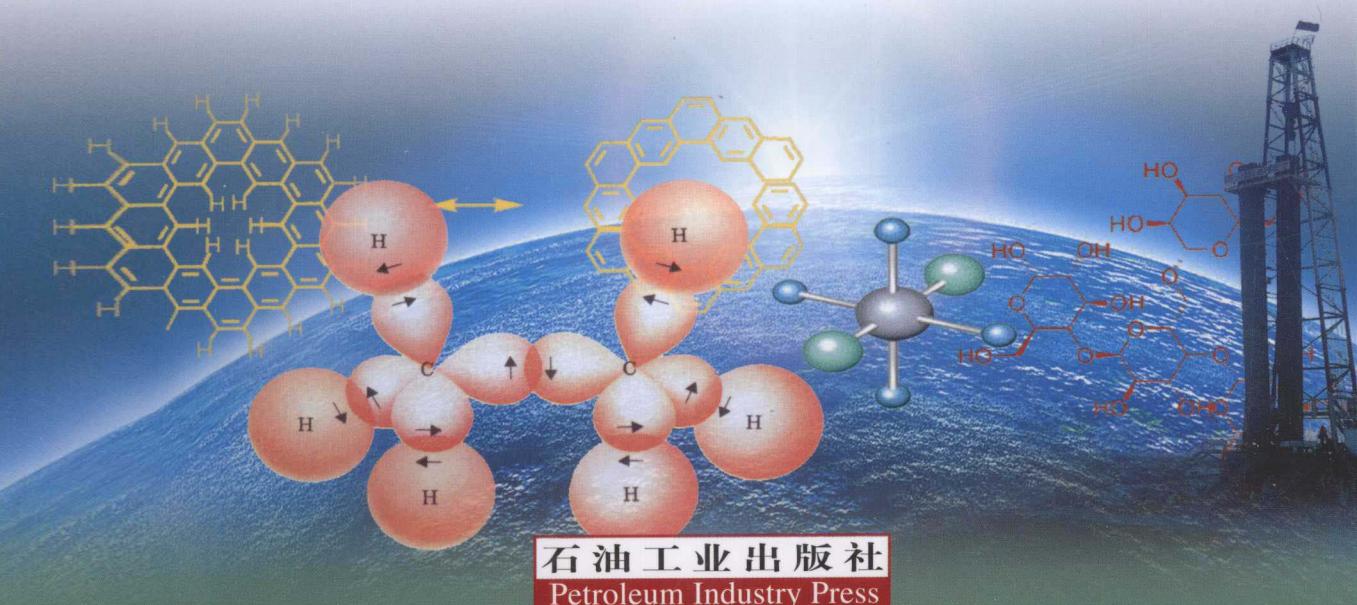


高等学校教材

油气有机地球化学

苗建宇 庞军刚 编



石油工业出版社
Petroleum Industry Press

高等学校教材

油气有机地球化学

苗建宇 庞军刚 编

石油工业出版社

内 容 提 要

本书以有机生油论的观点为基础,系统论述了从有机物质向石油演化全过程中的地球化学基本原理,内容主要包括生物地球化学基础、有机质的演化与油气的生成、油气藏地球化学等。为使理论与实践相结合,本书简述了石油地球化学在油气勘探中的应用。

本书可作为高等院校资源勘查工程、石油工程、地球化学、地球物理等专业的教材,也可供相关专业的师生和科研人员参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

油气有机地球化学 / 苗建宇, 庞军刚编 .

北京 : 石油工业出版社, 2012.9

(高等学校教材)

ISBN 978-7-5021-9235-8

I . 油…

II . ①苗…②庞…

III . 石油天然气地质 - 有机地球化学 - 高等学校 - 教材

IV . P618.130.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2012) 第 197913 号

出版发行 : 石油工业出版社

(北京安定门外安华里 2 区 1 号 100011)

网 址 : <http://pip.cnpc.com.cn>

编辑部 : (010) 64523579 发行部 : (010) 64523620

经 销 : 全国新华书店

印 刷 : 北京中石油彩色印刷有限责任公司

2012 年 9 月第 1 版 2012 年 9 月第 1 次印刷

787 × 1092 毫米 开本 : 1/16 印张 : 17.5

字数 : 450 千字

定价 : 30.00 元

(如出现印装质量问题, 我社发行部负责调换)

版权所有, 翻印必究

前　　言

油气地球化学是一门新兴的边缘学科,是有机地球化学的重要分支。这门学科的主要任务是在油气地质理论的基础上,应用化学原理和观点研究油气生成、运移、聚集和转化的地球化学作用和过程,阐明油气地球化学的基本原理和规律以及研究将它应用于油气勘探(以至开发)的实用技术和方法。

在油气地球化学领域,最有代表性的教材有两本:一本是由曾国寿、徐梦虹主编,石油工业出版社1990年出版的《石油地球化学》;另一本是由王启军、陈建渝主编,中国地质大学出版社1984年出版、1988年修订再版的《油气地球化学》。这两本教材自问世以来,受到兄弟院校师生和现场科研人员的欢迎与好评。但是,作为一门新兴的边缘学科,油气地球化学与其他发展历史更长、更为成型稳定的地学学科相比,其发展更新、更为迅速,体现在新技术、新方法、新领域、新理论的不断涌现。这使得承担油气地球化学教学任务的教师深感现有教材难以满足现今教学的要求,迫切需要一本更新、更系统、更全面的教材。为此,笔者特组织相关老师编写了本书。

本书是在系统总结现有教材内容和认真研究油气地球化学的理论与实践的基础上编写而成的。全书以烃源岩、干酪根和油气为研究对象,阐述了油气有机地球化学的基本原理及其在勘探中的应用,共分11章,包括基础理论、方法原理和实验技术与应用等内容。在章节和内容的编排上,尽量突出基本知识、基本理论、基本研究方法及其与其他学科的关系,以求有利于打好基础,拓宽知识面;同时注重理论联系实际,将基本原理及其在油气勘探开发中的应用有机地结合起来。在干酪根的结构、油气生成演化机理、天然气、油藏地球化学和生物标志物的应用与分析测试手段等方面吸收了近十几年来国内外的新理论、新成果以及新方法,并反映了石油有机地球化学研究发展的现状。

本书由西北大学的苗建宇和西安石油大学的庞军刚共同完成,其中第八章、第九章、第十章由庞军刚编写,其余章节由苗建宇编写。全书由苗建宇统稿。西北大学祝总祺教授审阅了全文,石油地质教研室石油有机地球化学教材编审小组对全书进行了讨论。长安大学李荣西教授对本书进行了评审,并提了许多宝贵意见,在此表示感谢。

由于笔者水平有限,书中错误和不足之处在所难免,恳请专家和读者批评指正。

编者
2012年5月

目 录

绪论	1
第一章 生物有机质的化学组成及特征	6
第一节 有机化合物.....	6
第二节 类脂化合物.....	13
第三节 蛋白质与氨基酸.....	21
第四节 碳水化合物.....	23
第五节 色素和木质素.....	26
第六节 生物的平均组成.....	29
第二章 沉积有机质	33
第一节 生物圈的演变.....	33
第二节 有机碳的地球化学循环.....	36
第三节 沉积有机质概况.....	37
第四节 不同环境中有机质沉积特征.....	49
第五节 成岩阶段沉积有机质的演化.....	55
第三章 生物标志化合物地球化学	64
第一节 生物标志化合物的基本特征.....	64
第二节 正构烷烃.....	70
第三节 异构和反异构支链烷烃.....	73
第四节 无环的类异戊二烯烃类.....	74
第五节 蒽类与甾族化合物.....	77
第六节 芳香烃化合物.....	85
第七节 吲哚化合物.....	86
第四章 干酪根的演化与油气生成	88
第一节 干酪根的相关基础知识.....	88
第二节 干酪根的化学反应.....	100
第三节 干酪根的性质变化.....	103
第四节 干酪根的热演化与油气生成.....	106
第五节 干酪根转化成烃中产物特征的演化.....	110
第六节 干酪根转化演化的产物.....	116
第七节 非常规油气成烃模式.....	119
第五章 天然气地球化学	129
第一节 天然气的组成及类型划分.....	129
第二节 有机成因气的主要类型及特征.....	136
第三节 气态烃的变化.....	148

第四节 天然气成因类型的综合判识	150
第五节 非常规天然气的地球化学问题	155
第六章 石油的化学组成	161
第一节 石油的元素组成及一般性质	161
第二节 石油的馏分组成	163
第三节 石油的化学组成	165
第四节 影响石油化学组成的主要因素	171
第五节 油、气运移的有机地球化学特征	178
第七章 油藏地球化学	188
第一节 油藏地球化学研究的理论基础	188
第二节 油藏地球化学描述	192
第三节 油气运聚成藏史研究	201
第四节 油藏的地球化学动态监测	204
第八章 油气地球化学的分析方法	207
第一节 有机质的分离	207
第二节 色谱法	209
第三节 光谱法	213
第四节 质谱法	217
第五节 热分析法	224
第六节 稳定同位素法	225
第九章 油气地球化学的应用	228
第一节 烃源岩评价	228
第二节 油源对比	246
第三节 烃源岩成熟史的研究	250
第十章 油气地球化学勘探方法	253
第一节 地面地球化学勘探概况	253
第二节 油气地球化学勘探理论基础	255
第三节 油气地球化学勘探方法	261
第四节 有机地球化学录井	269
参考文献	271

绪 论

一、油气有机地球化学的研究内容

油气有机地球化学是有机地球化学的重要分支学科之一。按其研究的对象，油气有机地球化学是地球化学的组成部分，故两者之间具有一定的渊源。

油气有机地球化学是研究碳化合物在地壳内所表现的性能和演化历史的学科，是用有机化学理论研究地壳内各种有机质物体的分布情况，研究它们的成因和起源的学科。

油气有机地球化学，是用有机化学和地质学知识研究地质体中有机质的时空分布、化学组成、结构、性质和它所经历的地球化学作用，演化成油气过程，并深入讨论油气形成、运移、聚集和次生变化的有机地球化学机理及其在勘探和开发中应用的科学。

简单地讲，就是研究沉积盆地或地壳中油气及其母质在各种地质作用下的特征及其演化历史的一门科学。所以，油气有机地球化学是由地质学、有机化学、物理化学、生物学、古生物学和沉积学等相互渗透而成的一门边缘学科，该课程的目的就是应用油气形成及其地球化学变化的理论指导油气勘探。当前，油气有机地球化学已成为油、气勘探的三大理论基础（石油地质、石油物探和油气有机地球化学）之一。因此，它又是石油地质勘探专业的一门专业基础理论和专业课。

油气地球化学研究的内容非常广泛，具体来讲主要有以下几个方面：

(1)与沉积作用有关的生物化学，包括生物发展与演化、生物化学组成和生物有机质沉积成岩演化和生物标志化合物等内容。

(2)石油的成因与演化，包括干酪根、可溶有机质的组成、类型、演化及其产物。

(3)天然气地球化学，主要研究天然气的成因、组成、演化及其产物。

(4)沉积成岩作用中的地球化学过程，包括油气生成、运移、聚集和次生变化。

(5)油气地球化学在油气勘探和开发中的应用，包括油气成因与盆地资源评价、油气地球化学测井、油气藏地球化学及油气地球化学勘探等内容。

二、油气有机地球化学的发展概述

油气有机地球化学是近60年内，尤其是最近30年发展起来的一门新兴学科。油气有机地球化学研究工作以及它的发展与石油和煤等能源的研究密切相关。

1. 研究发展历程

20世纪20年代初期，维尔纳特斯基就已研究了有机质的地质作用，并于1927年前苏联建立了世界上第一个有关的实验室——活性炭研究室，后来该实验室又改名为生物地球化学研究室。在他的主要著作，如《地球化学概论》和《生物圈》等书中，详细论述了石油的有机组成和石油有机成因的主要依据，提出了碳循环的模式。

30年代，德雷布斯(1933)对石油地球化学的早期发展做出了卓越的贡献。他首次发现并

证实了卟啉化合物广泛存在于不同时代、不同成因的石油、沥青等地质体中,认为这些卟啉化合物来源于植物叶绿素,为石油有机成因理论提出了一个极重要的依据。他还提出叶绿素经生物化学作用和地球化学作用可转化为脱氧叶红初卟啉(DPEP)。

50年代初,维别尔等人(1954)成功地从现代海洋沉积物中分离鉴定出微量类似于原油的烃类化合物,从而使石油直接起源于现代沉积物有机质的观点得以广泛流传。

60年代初,由于大量有机地球化学基础资料的积累和综合分析,使油气地球化学理论取得明显进展。研究发现:现代沉积物和生物体正脂肪酸和正烷烃的碳数分布具奇偶优势,而古老沉积岩和原油(或油田水)中不具此优势(Bray等,1961)。这一发现有力地批判了沉积有机质直接成油说,更重要的是,它揭开了有机质成岩演化机理研究和石油成因研究的序幕。

1963年Breger论述了色素、氨基酸、碳水化合物、脂类、腐殖质、干酪根、煤、石油、油页岩以及沉积物的地球化学。这时期他还研究了沉积物、沉积岩和原油中正烷烃和脂肪酸的分布特征和成因。Phillippi(1965)等人研究认为,沉积有机质大量转化成烃类需要一定的埋藏深度和温度。华索耶维奇(1969)提出石油生成有一个主要阶段和主要相。迄今许多生物标志物的研究仍基于这一基本思想,即地质历史时期中生物的生化转化机理可以用现代沉积的事实来解释(Baker,1969)。

Pusey(1973)提出了“地温窗”和“液态窗”概念。Albrecht等(1976)和Durand等(1976)对喀麦隆杜阿拉盆地白垩系从未成熟、成熟到过成熟的完整有机质演化系列进行了研究,为有机质热演化研究提供了系统的研究实例。

至此,石油生成和破坏的现代成因理论已完整地建立起来,它不仅符合客观地质事实,也逐渐为广大的石油地质工作者所接受,而且在指导油气勘探中发挥了重大作用。它与石油地质学、地球物理学一起构成石油勘探的三大理论基础,其重要作用逐渐为人们所认识。

2. 国内研究现状概况

我国的油气有机地球化学研究始于20世纪50年代,60年代初采用氯仿沥青“A”、族组成及元素分析等有机地球化学指标,对各油区、各层位(震旦系到新近系)的烃源岩开展了广泛地评价研究。总结了我国陆相泥岩类烃源岩的许多规律性认识,积累了大量资料,并成功地应用于油气勘探。

大庆油田等大型陆相油田的相继发现与开发,对陆相生油理论的形成、发展和完善作出了极其重要的贡献。目前我国已形成比较系统的陆相湖盆油气生成的地球化学理论与评价方法。

60年代末70年代初,我国在石油演化、碳酸盐岩生油等方面做了许多工作,对我国油气地球化学的发展起到了有力的推动作用。

80年代以来,我国油气地球化学工作者综合运用分子地球化学(生物标志化合物分析)、有机岩石学(显微组分剖析)和同位素地球化学的理论与方法,结合油气地质研究在陆相油气生成理论、煤成烃研究、天然气地球化学等方面有了新的突破。同时,在实验分析技术、资源评价以及实际应用方面也不断深入。特别是80年代末期至90年代,低(未)成熟油成因理论的提出与研究,碳酸盐岩生烃、油藏地球化学理论等新概念的建立、提出和不断发展,利用油气有机地球化学与同位素地球化学、有机岩石学等相关学科紧密结合,相互交叉渗透来研究油

气生成、运移、聚集和次生变化等规律,开拓了非常规油气地球化学的研究,拓宽了油气勘探的领域,为油气资源评价提出了新思路。

尤其是20世纪90年代以来,随着国际国内分析测试技术的进步和研究水平的提高,油气地球化学研究在油气勘探开发中发挥着日益重要的作用。在烃源岩地球化学研究基础上发展和建立了新兴学科——油气藏地球化学,将油气有机地球化学研究的重点由烃源岩扩展到油藏及其流体化学性质在空间的变化规律上,应用化学原理和一切有效的地球化学分析手段研究储层流体(油、气、水)在地质体中生成、演化、运移和聚集成藏过程中所发生的一切地球化学反应及机理,并与油藏工程相结合,服务于油气勘探与开发的全过程。

三、油气有机地球化学的研究方法

石油与天然气是流体,它的生成与聚集一般不在同一个地方。因此,油气有机地球化学的研究方法不同于金属和煤田地球化学的研究方法。

1. 全面系统地研究

研究油气有机地球化学不能脱离周围的地质条件,沉积有机质是在一定的地质条件下进行氧化或保存、演化和转化的。所以,在进行油气有机地球化学研究以前,要进行全面的野外地质观察,包括收集前人研究成果,观察钻井岩心或岩屑等,以便了解区域构造发展史、沉积相或沉积环境、地层层序、接触关系及岩性、油气在空间和时间上的分布以及地下的资料等。收集或掌握这些资料,对解释油气有机地球化学分析结果将起到重要作用。

2. 取样和分析

应用精密灵敏的化学分析仪器和分析方法是取得油气有机地球化学资料的重要手段。进行科学实验的常规仪器分析法有气相色谱分析、液相色谱分析、化学质谱分析、同位素质谱分析、红外光谱和紫外光谱分析、原子吸光谱分析、显散光度分析、萤光显微分析及有机元素分析等。

地质取样工作与仪器分析有同等的重要性。取样必须由研究者亲自动手,尽量系统地取样,样品要具有代表性且分布均匀,否则,分析仪器再精确也得不出正确的结果。

3. “将今论古”的研究方法

地质现象和地球化学现象都是地质历史上发生的事情,我们无法重现地质历史上的地球化学现象,但实践证明,尽管现代与古代的地球化学作用有许多不同之处,但也有许多相同之处。在相似的地质条件下,可以根据现代沉积物的地球化学特征类比古代沉积物的地球化学特征。这也是地质学家经常应用的方法。

根据现代生物的有机化合物数量和特征与沉积物或化石中的有机化合物的数量和特征对比,可以推断出有机质的地球化学演化机理。这也是地球化学家经常使用的研究方法。这方面的例子很多。例如,根据现代较大型湖泊(青海湖、洞庭湖)沉积的暗色淤泥的有机碳含量(达22.9%)、氯仿抽提物(达0.12%)和烃含量(达0.014%),可以论证我国古代陆相沉积中具有丰富的有机质。如果生油,足以形成特大油田。又如,布雷和伊文思发现近代沉积物中正烷烃具有奇偶优势,而古代沉积物正烷烃在生油岩中这种优势变小、消失。据此,他们推断有机质演化成油的过程中可能发生了热解反应。

4. 模拟地球化学过程的方法

在实验室模拟地质条件进行物理化学实验是了解地球化学作用的物理、化学条件和反应机理的重要途径。实验室模拟包括代表不同地层深度的高温高压和各种专门的实验。测得化合物的化学热力学和物理化学的性质和参数。模拟实验在很多领域得到应用,一般也获得了较好的效果。

四、油气有机地球化学发展及展望

回顾油气地球化学的发展,可以说油气有机地球化学是地球化学理论和技术最重要的应用领域之一。同时,它也是有机地球化学新理论和新技术的生长点之一。

随着新技术的引进,特别是色质联机技术的广泛应用,使有机质分析、鉴定技术水平大大提高,人们能够从分子结构层次去认识有机质的组成及演化。模拟实验和数值模拟迅速发展,使油气有机地球化学由定性、半定量向定量发展。由于油气有机地球化学越来越受重视,油藏地球化学、同位素地球化学、包裹体分析技术、天然气成因综合判识技术等对油气勘探和开发效益的提高将起到重要作用,油气有机地球化学将会向以下方向进一步发展。

(1)油气成因理论的发展更加完善。在今后的研究中,将以成烃机理和成藏为中心继续深化。在低(未)成熟石油的形成环境、油藏地球化学特征、成烃母质、成烃演化机制和成藏条件研究上,仍然值得进一步探讨,煤成油气以及煤成油藏的成藏史及其成藏的基本条件等都值得进一步研究。

(2)生物标志化合物研究的进一步深化。经过最近20年的发展,人们对油、岩中生物标志化合物的研究内容贯穿了从生源、沉积环境、成烃演化到运移成藏和原油生物降解的整个油气形成领域,发现几乎所有的油、岩都含有生物标志化合物,只是各种化合物的相对含量和组成特征不同,而特定的指相化合物和生源化合物不多。从生物标志化合物组合特征所反映的信息中去探讨相关地球化学问题,并有所拓展和深化将继续进行。20世纪90年代以来,生物标志化合物的定量研究,以及含N、S等非烃生物标志化合物噻吩、咔唑等的研究,已成为有机地球化学的重要发展方向,今后也必然会有新的收获。

(3)21世纪将是一个天然气的时代。作为一种优质、清洁的高效能源,天然气和稀有气体同位素地球化学仍将作为一个活跃的研究领域。其中,天然气运移、聚集和散失过程中同位素分馏效应是一个有待深入研究的课题,也是影响天然气气源、成因类型和成熟度判识的一个重要因素。同时,天然气成藏、煤成气、深盆气和天然气水合物资源的研究也将摆在人们面前,尤其是天然气水合物的地球化学特征、形成环境及勘探的地球化学标志、开发与利用的地球化学研究将是油气有机地球化学在21世纪的重大任务。

(4)碳酸盐岩油气地球化学研究在中国海相地层中寻找油气尽管取得了一些重大进展(如塔里木盆地海相油气的发现),但面对我国分布广泛的海相沉积,碳酸盐岩的油气生成研究,尤其是查明有利烃源岩分布区仍将是一项重要的油气有机地球化学研究任务。

(5)油气藏地球化学研究将油气有机地球化学研究的重点由烃源岩扩展到油藏及其流体化学性质在空间的变化规律上。应用化学原理和一切有效的地球化学分析手段,研究储层流体(油、气、水)在地质体中生成、演化、运移和聚集成藏过程中,所发生的地球化学反应的机理、特征及规律,此研究有待进一步探讨、深化及总结。油气藏地球化学研究将会在油田稳

产、挖潜、确定油气运移方向、充注成藏历史和揭示新的勘探方向等方面有所作为。

(6) 地球化学勘探方法寻找油气藏在20世纪50年代前曾风行一时,60年代初因某些化探方法受到质疑,一度受到冷遇。90年代以后,又重新进行研究、应用。研究方法有气体化学法、水化学法、生物化学法、地沥青法和岩石有机质综合研究法(核子谐振和电子谐振)等。通过这些方法取得了一定的成果。加强基础理论研究,提高勘探技术,创建新的更有效的方法,地球化学勘探的前景将是不可估量的。

第一章 生物有机质的化学组成及特征

油气有机地球化学主要研究沉积岩内的有机物质。沉积有机质源于生物及其代谢产物。除水以外,生物主要由五种组分组成,即脂类化合物、蛋白质、碳水化合物、色素和木质素。此外,尚有为数不多,但却具有实际意义的维生素、丹宁、树脂、核酸等。

研究认为,沉积有机质在经历深埋的过程中,由于温度的作用将发生一系列的演化,但在其转化生成油气以前,在一定程度上仍保持着原始有机体的化学组成和结构。所以,仍然可以根据有机体的生化组成对它进行分类和研究。因此,研究有机体各主要组分的化学组成、化学性质、生化特征以及可能演化途径是油气地球化学研究的内容之一,它对于阐明沉积有机质演化成烃的机理,具有重要的意义。

目前,油气有机地球化学的研究已经进入到分子级水平,因此,了解、掌握及熟悉有关有机地球化学和生物化学的一般知识,对于深入认识与研究原始成烃有机质的化学组成及其差异,对于探讨油气生成过程中的地球化学过程和作用,都是十分重要的。为此,本书简要地介绍活的生命有机体的主要化学组成。

第一节 有机化合物

应用油气地球化学知识必须熟悉基本化学术语,在这里介绍的目的是使读者熟悉化合物的一般命名和化合物结构的不同表示方法,并对感兴趣的化学反应作简短的讨论。

除二氧化碳、碳酸盐岩和金属碳化物外,所有含碳原子的化合物都是有机化合物。这一术语的使用是传统习惯,并不意味着这类化合物都必须来源于活的生物体。因此,有机化学是含碳化合物的研究,油气有机地球化学则是对存在于地质环境中的有机化合物进行研究。

一、烃类化合物

在化学术语中,烃类是指只含碳、氢元素的化合物,石油和天然气常被称为“烃类化合物”。但从化学的观点上,这一概念并不严密,因为,石油和天然气中常含有氮、硫、氧、磷和其他微量元素,本书将烃类化合物的概念严格限制在标准的化学定义中。

烃类化合物的实例如乙烷、环己烷等,它们的结构表示如图1-1所示。可以看出,每个碳原子用C表示,氢原子用H表示,线条表示原子之间的化学键。

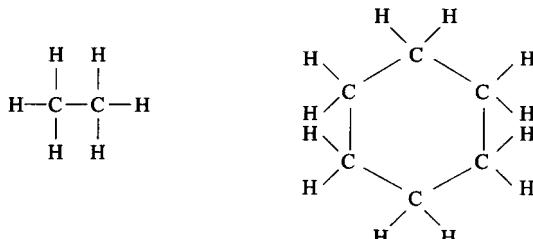


图1-1 乙烷、环己烷结构表示图

在所有有机化合物中(除少数在实验室条件下存在的高度不稳定的有机化合物),每个碳原子都具有四价键,氢原子总是形成一价键,氧原子和硫原子形成二价键,氮原子具有三价键。碳原子间相互也可形成化学键,并形成链状或环状结构,这种独特的性质形成了成千上万种不同的有机化合物。用上述方法描述简单分子的化学结构是可行的,但在描述大分子的化学结构时却遇到了困难。因此,建立了几种不同的化学结构描述方法,最常用的方法是在每个碳原子C后写一个H,然后在H右下角写出该碳原子所结合的氢原子的个数,如甲烷、乙烷、环己烷表示如图1-2所示。

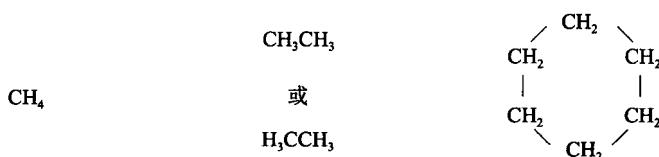
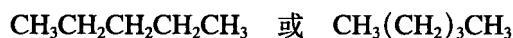


图1-2 甲烷、乙烷、环己烷结构表示图

对长链化合物也可作简单的逻辑表示,如正戊烷可表示如下:



一种更简单的表示方法是不写字母,每个碳原子用点表示,碳—碳键用连接这些点的线段表示出来。氢原子及与氢原子连接的键全都不用表示出来,因为每个碳原子只能形成四个化学键,而每个氢原子只能形成一个化学键,通过简单分析就可确定每个碳原子上必须有多少个氢原子。如正戊烷和环己烷用线段表示如图1-3所示。



图1-3 正戊烷和环己烷表示图

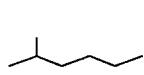
正戊烷的锯齿形结构可清楚地表示出每个碳原子及其所连接的氢原子个数。

最简单的烃类化合物具有线形结构,称为正构烷烃或链烷烃,即在碳链上不存在支链,如正戊烷。其他几个最简单的正构烷烃的命名和三种表示方法如表1-1所示。

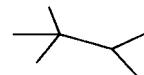
表1-1 10个最简单正构烷烃的命名及结构表达方式

名称	表达方式		
甲烷	CH_4	CH_4	无
乙烷	C_2H_6	CH_3CH_3	无
丙烷	C_3H_8	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$	
丁烷	C_4H_{10}	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	
戊烷	C_5H_{12}	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	
己烷	C_6H_{14}	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	
庚烷	C_7H_{16}	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3$	
辛烷	C_8H_{18}	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3$	
壬烷	C_9H_{20}	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3$	
癸烷	$\text{C}_{10}\text{H}_{22}$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_8\text{CH}_3$	

碳原子并不总是以直线方式排列,也可以形成支链,从而形成许多可能的异构体,如分子式为C₇H₁₆的两种异构体表示如图1-4所示。



2-甲基己烷



2, 2, 3-甲基丁烷

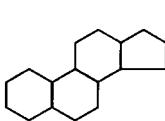
图1-4 C₇H₁₆的表示图

在2-甲基己烷中,基本结构是己烷,但第二个碳原子上的一个氢原子被甲基(CH₃)所取代。在有机地球化学中,最重要的支链烷烃是类异戊二烯烷烃,规则的类异戊二烯烷烃是每四个直链碳原子上存在一个甲基。在石油和岩石中,已发现6~40个碳原子的类异戊二烯烷烃(表1-2)。

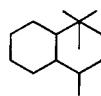
表1-2 石油和沉积岩中部分重要类异戊二烯烷烃的结构

结构	名称	碳原子数
	植烷	20
	姥鲛烷	19
	降姥鲛烷	18
		17
		16
	法尼烷	15
	异三十烷	30
	番茄红素	40
	β—胡萝卜素	40

碳原子也能以环状方式排列,并以环上碳原子的总数命名,环烷烃实例如图1-5所示。



甾烷



萜烷

图1-5 典型环烷烃的基本结构

甾烷是由三个六元环和一个五元环构成的环烷烃,萜烷是含有五个或六个环的环烷烃,并以A、B、C、D、E、F对环编号,用阿拉伯数字对碳原子标号,如图1-5、图1-6所示。

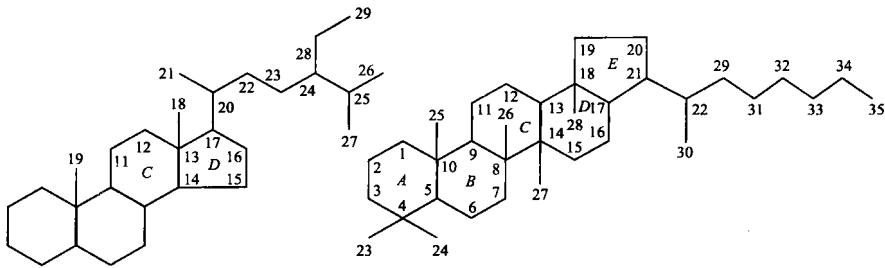


图1-6 留、萜类化合物的基本结构

上述所有化合物都称为饱和烃。由于所有碳原子都被氢原子所饱和，在没有键断裂时，氢原子不可能再结合到分子中去。

另一类重要的烃类化合物是不饱和烃，与饱和烃相反，它们能与其他氢原子结合。许多不饱和烃存在C=C，称为烯烃。烯烃的命名方式与饱和烃相似，如乙烯、丙烯、环己烯等，它们的结构描绘如图1-7所示。

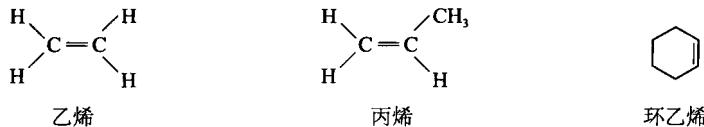


图1-7 乙烯、丙烯、环己烯的表示图

在油气地球化学研究中，最重要的烯烃是异戊二烯，因为以其为结构单元可形成类异戊二烯烷烃、留烷和萜烷。

由于烯烃不稳定，它们不能长期保存在地质环境中。在实验室内存在催化剂的情况下，通过加氢可使链烯烃转化为饱和烃，乙烯的加氢反应表示如图1-8所示。

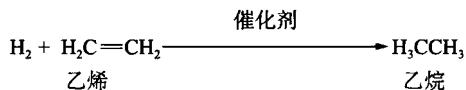


图1-8 乙烯的加氢反应图

在成岩作用阶段，有许多化学反应，包括氢化反应使烯烃转变为链烷烃和环状化合物。

芳香烃是另一种不饱和烃类化合物，但它们的化学性质与烯烃有很大差异，芳香烃十分稳定，不易产生加氢反应，它们的稳定性使其成为原油和沉积物中重要的有机化合物。某些典型的和重要的芳香烃化合物表示如图1-9所示。

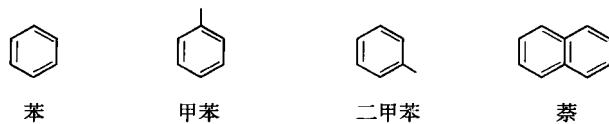
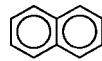


图1-9 芳香烃的表示图

在芳香烃化合物的环状结构中，单、双键交替出现，一种简单方法是用圆圈代表芳环上双键，表示环上碳原子的自由电子是由碳原子共享的，而不是属于某两个特定的碳原子。电子共享使芳香烃化合物非常稳定。两个常见轻芳香烃的结构表示如图1-10所示。



甲苯



萘

图1-10 轻芳香烃的表示图

某些芳香烃化合物分子非常大,常见多环芳香烃具有稠环结构(图1-11),极端情况是具有无数芳环的石油焦。



图1-11 多环芳香烃的表示图

此前所讨论的都是相当简单的有机化合物,尽管它们都是油气中非常重要的组分,但与生物体中所发现的大多数有机化合物存在明显差异。生物体中的有机化合物分子更大、结构更加复杂,多数都含氧、氮、磷、硫以及其他元素。油气中的烃类化合物绝大部分都是生物分子强烈降解的产物。

事实上,在有机质中所发现的一些复杂烃类化合物都直接与生物母质有关。

二、非烃化合物

在组成石油、沥青和干酪根的有机化合物中,除C、H原子之外的其他原子称为杂原子。含杂原子的化合物称为杂原子化合物,也统称为非烃化合物。最常见的杂原子是N、S、O,因此,杂原子化合物又称为NSO化合物。沉积有机质中常含有许多杂原子化合物,其中一些是生物成因的,另一些则是在成岩作用过程中新生成的。生物体中的许多杂原子化合物在成岩作用和深成作用阶段可转变为烃类化合物。

分离和鉴定沉积有机质中的杂原子化合物十分困难,目前仅有少数类型的分子得以被研究并应用于地球化学解释中。来源于天然脂肪、油和石蜡的脂肪酸是最先被研究的杂原子化合物,但现在很少使用。脂肪酸分子中都含有羧基($-COOH$),与其最相近的化合物是醇类(图1-12)。

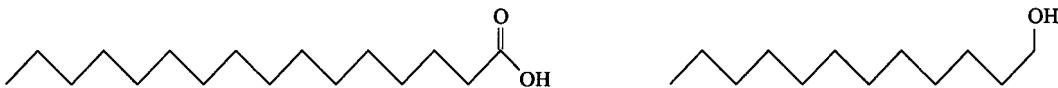


图1-12 醇类表示图

卟啉是重要的杂原子化合物之一,在结构上与叶绿素有关,大多数情况下来源于叶绿素。在石油和沥青中,存在多种不同的卟啉化合物。卟啉的早期研究结果,提供了油气有机成因的重要证据(图1-13)。

许多常见的杂原子化合物并不是直接来自生物母质。最重要的杂原子化合物是沥青烯,它们是结构复杂、芳构化程度高的大分子,并具有与干酪根相似的许多特征,但沥青烯分子比大多数干酪根更小,芳构化程度更高(图1-14)。

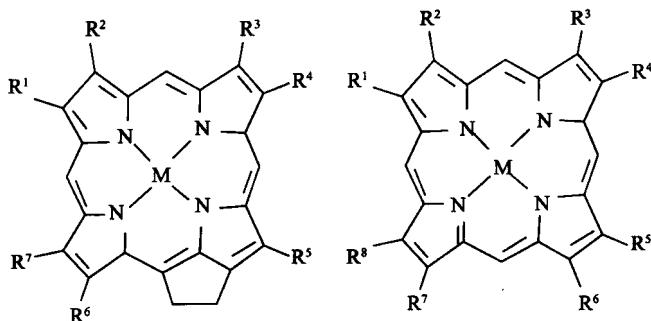


图1-13 吲哚的表示图

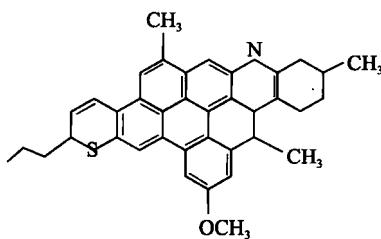


图1-14 沥青烯的表示图

在沉积物中保存了许多生物体中常见的非烃化合物,如木质素、碳水化合物和氨基酸。木质素是木本植物的重要组成部分,构成了大陆植物的支撑结构,由如下三种基本芳环构成的聚合物(图1-15)。

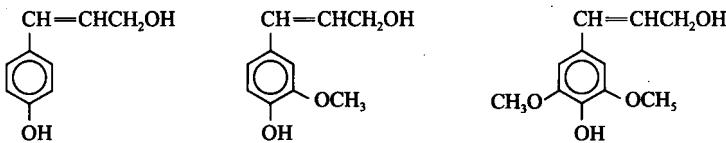


图1-15 木质素的表示图

木质素的基本结构单元相互连接形成相对分子质量可达3000~10000的大分子,通过降解,木质素形成酚类化合物。酚类化合物是强有力的杀菌剂,因此,木质素对生物降解具有很强的抵抗能力,在有机质降解过程中其含量相对增加。

碳水化合物包括淀粉、糖和纤维素。在生物圈中,纤维素是最丰富的有机化合物,与木质素一样,它是陆生植物的重要组成部分。尽管在一定条件下纤维素抵抗降解能力相当强,但大多数碳水化合物容易受微生物降解,木质素和纤维素是腐殖煤的主要成分。

氨基酸是蛋白质的基本结构单元,它们能被生物迅速地新陈代谢,因此,在沉积物中很少保存下来,仅出现在贝壳和骨骼中。

三、氧化还原作用

因为许多有机化合物的化学反应是在实验室中模拟的。相对地说,直接在沉积岩中考察它们的反应是很困难的。

许多有机化合物的化学反应都与氧化—还原作用有关,在化学反应期间,当原子失去电