

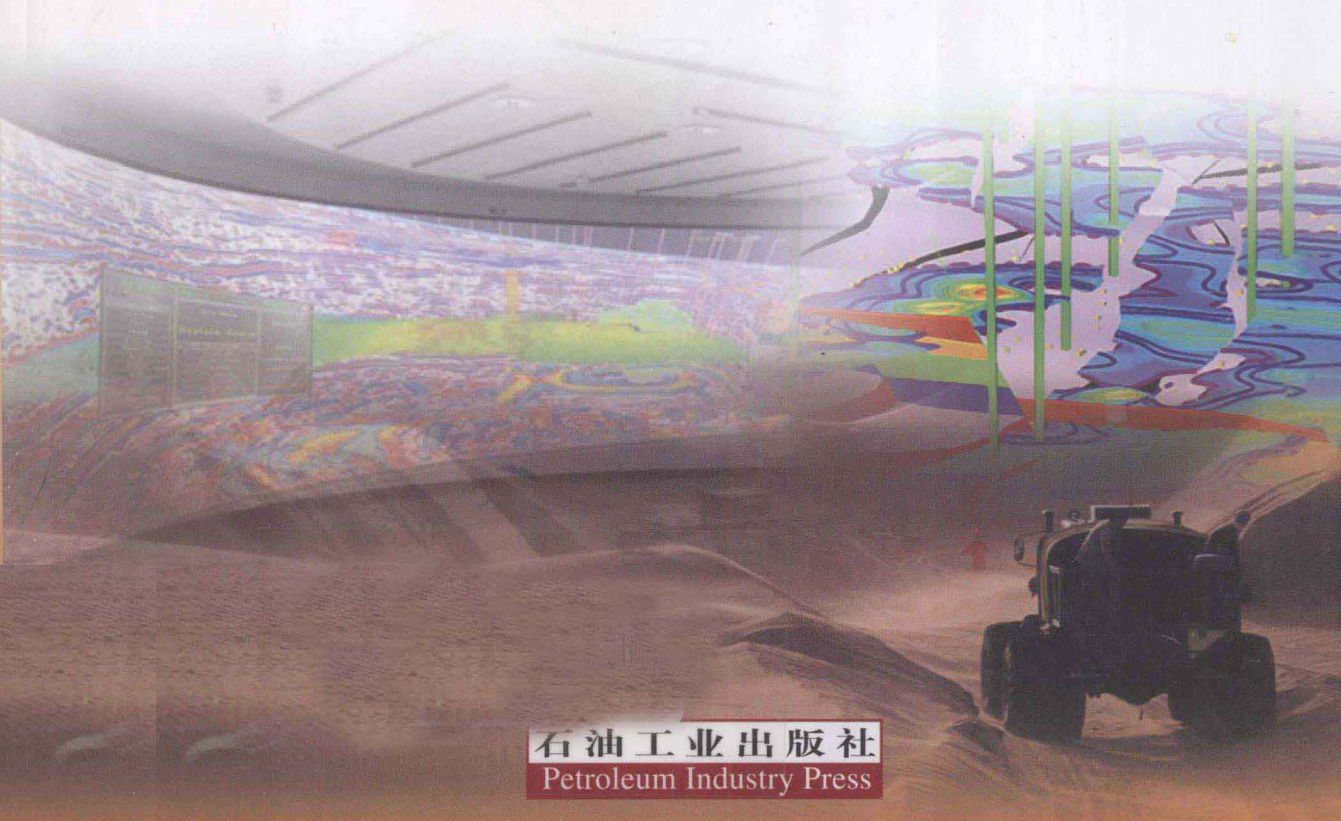


普通高等教育“十一五”国家级规划教材

油气勘探地球化学

(第二版)

戴鸿鸣 王顺玉 陈义才 编



石油工业出版社
Petroleum Industry Press

普通高等教育“十一五”国家级规划教材

油气勘探地球化学

(第二版)

戴鸿鸣 王顺玉 陈义才 编

石油工业出版社

内 容 提 要

本书主要阐述了油气有机地球化学的基本原理及其在油气勘探中的应用。全书共分十三章,包括以基础理论为主的有机化学基础和稳定同位素,沉积有机质的演化,干酪根地球化学,油气生成与演化模式,天然气地球化学,石油的化学组成和生物标志化合物等七章,第八章至第十二章着重介绍烃源岩评价、油气源对比、非常规油气的地球化学、油气藏地球化学以及地球化学勘探方面的原理和方法,第十三章主要讲述地球化学的实验方法。

本书可作为高等院校石油地质、地球化学、油藏工程、地球物理等各专业的教材或教学参考书,也可供相关专业的研究人员和生产人员参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

油气勘探地球化学/戴鸿鸣,王顺玉,陈义才编.—2版.

北京:石油工业出版社,2011.10

普通高等教育“十一五”国家级规划教材

ISBN 978-7-5021-8521-3

I. 油…

II. ①戴… ②王… ③陈…

III. 油气勘探—地球化学—高等学校—教材

IV. P618.13

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 198884 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:www.petropub.com.cn

编辑部:(010) 64523580 发行部:(010) 64523620

经 销:全国新华书店

印 刷:石油工业出版社印刷厂

2011 年 10 月第 2 版 2011 年 10 月第 2 次印刷

787×1092 毫米 开本:1/16 印张:26

字数:660 千字

定价:39.00 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 (Geochemistry) 是应用化学原理研究地质体中石油与天然气的生成、运移、聚集和演化机理, 阐述油气的分布规律, 并用这些知识指导勘探和开发石油、天然气及与其有关的沥青矿的一门应用学科。它是有机地球化学的重要分支学科, 是由地质学、有机化学和生物学相互交叉渗透而形成的新兴边缘学科, 是探讨油气成藏、分布规律和评价油气资源前景依据的重要原理和方法。作为有机地球化学的重要分支, 油气地球化学的研究促进了石油有机成因理论的极大发展, 并在油气勘探和远景评价中获得了很大成功, 与地质学 (Geology) 和地球物理 (Geophysics) 构成了现代油气勘探中的三大基础理论和学科, 国外在油气勘探和油气资源评价中强调三个“G”的紧密结合应用。

正如 Hedberg 教授为 Hunt 博士的巨著《石油地球化学和地质学》所作序中指出的那样, 勘探家们往往开门见山, 只关心到何处找油气的问题, 而油气地球化学家却强调认识油气“怎样形成”、“为什么运移”和“何时聚集”是“何处找油气”的关键。世界上 30 多年来油气勘探的历程为上述分析作了最好的注释。也许人们可能直到找出最后一滴油, 也无法回答石油生成、运移、聚集和保存的所有问题, 但只有更多地知道这些答案, 才能接近找出这最后一滴油。

回顾油气有机地球化学的发展, 可以说油气地球化学是有机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。甚至可以这样说, 油气地球化学体现了现代有机地球化学的进展。正是这种基础理论研究、应用基础研究与地质应用相得益彰, 油气地球化学被誉为现代基础科学与应用科学相结合的典范。

似乎从一开始, 有机地球化学就与油气地球化学有着某种不解之缘。19 世纪末期的定碳比理论是最早的有机地球化学概念, 这一概念在油气聚集与煤的变质作用之间建立起了某种联系 (White, 1915)。20 世纪 30 年代中期, Alfred Triebs 首次鉴定了石油中卟啉化合物以及确定这类化合物结构与天然产物叶绿素的联系, 从而被认为是真正现代意义上的有机地球化学概念的诞生, 同时也是有机地球化学最重要的基础学科——分子地球化学诞生的标志。石油中卟啉化合物与天然植物色素在化学结构上的成因联系得到确认, 使人们向最重要的石油地球化学理论——石油有机成因说的建立迈出了非常重要的一步。

20 世纪 60 年代以来, 气相色谱和气相色谱——质谱等分析技术的出现使人们能够从复杂混合物中分离和鉴别出单个有机化合物, 分子地球化学因此得以迅速发展, 并产生了生物标志化合物的概念。运用生物标志化合物的概念, 油气地球化学在油气的生源研究、油气源对比以及追索油气可能来源等方面取得了巨大的成就。

与此同时, 似乎是对定碳比理论的继承与发展, 借鉴煤岩学的研究成果, 有机地球化学从沉积有机质的成岩和后生作用研究中引出了有机质成熟作用与成烃演化阶段的概念, 并用一级反应和阿仑尼乌斯方程近似描述石油流体物质从固态生油母质中产生的化学反应动力学过程。以油气的有机成因理论为指导思想, 分子地球化学和有机质热演化研究成为驱动油气

地球化学迅速向前发展的主要动力。

从 Forman 和 Hunt (1958) 重新定义干酪根的地球化学含义, 到以 Tissot 为代表的地球化学家在归纳综合前人研究成果的基础上提出“干酪根晚期热降解生烃”理论模式, 在不到 20 年的时间里, 油气有机地球化学已经成长为一门富有生命力的新兴学科。总体上看, 20 世纪 70~80 年代是油气地球化学蓬勃发展的时期, 以至于用已知的地球化学规律去寻找、发现油气或解释已有的油气成因成为了“常规”。

20 世纪 90 年代以来, 随着分析测试技术的进步和研究水平的提高, 油气地球化学家开始将注意力转移到油气充注过程和成藏后的次生变化研究, 尤其是近十多年来, 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”, 它成为油气地球化学新的学科生长点, 突破了传统单一的学科界限, 将油气地球化学与无机地球化学、储层地质学、石油工程学等紧密结合起来。研究的重点由烃源岩及其相关问题转移到油藏及其流体化学性质在空间上的变化规律上, 形成了油、气、水层的地球化学识别、储集层流体流动单元、原油品质评价、多层混合开采中确定单层油气产量及管道漏失评价、注水开发油田圈定残余油区位置及开发动态监测等多门实用技术; 应用化学原理和一切有效的地球化学分析手段, 研究储集层流体(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的机理, 并与油藏工程学、石油工程学相结合, 服务于油气勘探、开发的全过程。

中国的油气地球化学萌芽于 20 世纪 50 年代, 兴于 20 世纪 80 年代。具有中国特色的“陆相生油理论”的形成、发展与完善, 形成了较系统的陆相湖盆生油气的地球化学理论与评价方法, 尤其是各油区烃源层系形成的环境条件及其成烃演化史的查明, 烃源岩成烃演化剖面的建立, 一系列指导油气勘探的主要地球化学指标的确定, 油气运移、聚集成藏史的地球化学研究, 以及生油气量和资源量评价、源控论和复式油气聚集等理论的提出, 都为我国油气资源的勘探和决策提供了重要的科学依据。可以说, 在我国石油工业发展史上, 油气地球化学研究是功不可没的。从 20 世纪 80 年代后期开始, 随着分析实验技术的进步, 我国油气地球化学工作者综合运用分子地球化学、有机岩石学 and 同位素地球化学的理论与方法, 结合地质研究, 开拓了非常规油气地球化学研究的新领域。“常规”与“非常规”乃相对概念, 在我国, 非常规油气尤指除陆相湖盆生油气以外的各种油气资源。未熟—低熟油气、煤成油和碳酸盐岩生烃等新概念的建立, 不仅拓宽了油气勘探的领域, 还为油气资源评价提出了新思路。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研究中发挥着日益重要的作用, 如天然气运聚平衡理论、天然气聚集区带、天然气成藏动力学等在天然气勘探中起着重要的指导作用; 含氮化合物的研究为在地质色层理论上追踪油气运移提供了新的手段和方法, 使以油气运移思路和含油气系统理论指导和提高勘探成功率成为可能。与此同时, 国内一些地球化学家也将研究重点转移到油气藏地球化学研究中, 对油(气)、水、岩反应有了初步认识, 通过对油气充注历史和次生变化的分析, 对油气藏的形成机理有了较深刻的认识, 将油气地球化学研究推广到油气开发应用中。总之, 油气地球化学从技术、理论到应用, 已发展成为一门成熟的学科, 并在油气勘探开发中发挥日益重要的作用。

本教材是在 2000 年石油工业出版社出版的《油气勘探地球化学》和认真研究近 10 年来

国内外油气地球化学的理论与实践进展的基础上修改完成的。在教材的章节和内容上，尽量突出基础知识、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，将基本原理与其在油气勘探开发中的应用有机地结合起来。教材编写分工如下：绪论、第一章、第二章、第三章、第四章、第五章、第六章、第九章、第十章、第十一章、第十二章由戴鸿鸣修改编写，第七章和第十三章由王顺玉修改编写，第八章由陈义才修改编写。在此，也感谢西南石油大学教材建设委员会的大力支持。

由于编者水平有限，书中肯定会有不足甚至错误之处，恳请读者给予批评指正。

编 者

目 录

第一章 有机化学基础和稳定同位素	1
第一节 有机化学基础.....	1
第二节 立体化学.....	9
第三节 有机化学反应	15
第四节 稳定同位素	18
第二章 生物的化学组成及沉积有机质	22
第一节 生物圈的演变	22
第二节 有机碳的地球化学循环	26
第三节 生物有机质的化学组成	29
第四节 沉积有机质的形成	35
第五节 沉积有机质的埋藏与演化	46
第三章 干酪根	54
第一节 干酪根的概念和性质	54
第二节 干酪根的显微组分特征	55
第三节 干酪根的类型	60
第四节 干酪根的结构及研究方法	66
第四章 油气生成与演化模式	83
第一节 油气生成理论发展概述	83
第二节 油气生成的自然演化观察及模拟研究	87
第三节 干酪根性质的变化特征	95
第四节 油气生成的影响因素及生烃模式	99
第五节 未熟油与低熟油成烃模式.....	109
第六节 碳酸盐岩有机质生烃演化模式.....	114
第五章 天然气地球化学	119
第一节 天然气类型.....	119
第二节 天然气组成与非烃类气体的成因.....	126
第三节 天然气成因类型综合判识.....	132
第六章 原油的化学组成及其影响因素	145
第一节 原油的一般性质.....	145
第二节 原油的化学组成.....	147
第三节 原油的地球化学类型.....	157
第四节 影响原油化学组成的主要因素.....	159

第七章 分子地球化学	165
第一节 轻烃.....	165
第二节 中相对分子质量烃.....	175
第三节 生物标志化合物.....	180
第八章 烃源岩评价	209
第一节 烃源岩与有效烃源岩.....	210
第二节 烃源岩有机质丰度.....	211
第三节 有机质的类型.....	220
第四节 有机质的成熟度.....	226
第五节 生烃能力的定量评价方法.....	234
第六节 应用有机相评价烃源岩.....	242
第七节 有机质原始丰度和原始生烃潜力的恢复.....	245
第八节 我国地质史上的烃源岩系发育.....	248
第九章 油气源对比	249
第一节 油气源对比原理.....	249
第二节 油气源对比参数.....	255
第三节 气源研究实例.....	263
第四节 油—油对比实例.....	280
第五节 混源油对比方法.....	295
第十章 非常规油气的地球化学	298
第一节 煤成油的地球化学.....	298
第二节 重质油的地球化学.....	304
第三节 油页岩的地球化学.....	307
第十一章 油气藏地球化学概述	312
第一节 油气藏地球化学研究的理论基础.....	312
第二节 油气藏地球化学描述.....	320
第三节 油气运聚成藏史研究.....	329
第四节 油气藏地球化学动态监测.....	332
第十二章 油气地球化学勘探	338
第一节 地面化探.....	338
第二节 烃类泥浆录井.....	354
第三节 电缆测井.....	357
第四节 有机地球化学录井.....	359
第五节 油气化探存在的问题及发展方向.....	362
第十三章 油气地球化学分析方法	364
第一节 各类样品的井场取样要求.....	364
第二节 岩石中有机碳的测定.....	365
第三节 岩石中可溶有机质的抽提.....	367

第四节	岩石中可溶有机质或原油的族组分分离·····	368
第五节	岩石中干酪根的制备分离方法·····	369
第六节	干酪根显微组分的镜下鉴定·····	371
第七节	镜质体反射率的测定·····	373
第八节	气相色谱·····	376
第九节	岩石热解色谱分析·····	377
第十节	红外光谱·····	379
参考文献	·····	386

第一章 有机化学基础和稳定同位素

有机化学是一门研究有机化合物的学科。有机化合物大量存在于自然界，它与人类生活有着极为密切的关系。最早有机化合物是指从动植物体内取得的物质，它的性质与来源于矿物的无机物质不同，由于动植物体内的物质和生命有着密切的关系，所以科学前辈们认为它们是“有生机之物”，故称为有机化合物，简称有机物。除二氧化碳、碳酸盐岩和金属碳化物外，几乎所有含碳原子的化合物都是有机化合物。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。组成有机化合物的元素除碳元素外，绝大多数都含有氢元素，不少有机化合物还含有氧、氮、硫、磷、卤素等元素。从化学结构上看，有机化合物可以看做是碳氢化合物以及从碳氢化合物中衍生而得到的化合物。

有机化合物的数目庞大，为了系统地进行研究，对有机化合物进行分类是非常必要的。通常采用的分类方法有两种，一种是以它的碳链为基础，另一种是以它所含有的官能团为基础。按碳链不同，有机化合物可以分为三类，即开链化合物、碳环化合物和杂环化合物。杂环化合物是由碳和其他杂原子如 O、N、S 等共同构成环原子的，故称为杂环，含有杂环的有机化合物称为杂环化合物。按碳链进行分类，虽然在一定程度上反映了各类有机物的结构特征，但还不能完全反映这些化合物的性质。例如，开链化合物和脂环化合物的性质是相似的，二者可作为一类，统称脂肪族化合物。

官能团是指分子中比较活泼而且容易发生反应的原子或原子团，它常常决定着化合物的主要性质，含有相同官能团的有机化合物具有相类似的性质，因此把它们归于一类进行研究是比较方便的，如烯烃、炔烃、醛、酮、酚、醚等。

本章的目的是使读者熟悉有机化合物的结构和表示有机化合物结构的不同方法。除对与油气有关的极少数化学反应作简短的讨论外，也包括了对稳定同位素分馏原理基本理论的总结。

第一节 有机化学基础

生物体中主要元素为碳、氢、氧和氮。除氧之外，这些元素在地壳中的含量与硅和轻金属元素相比均比较稀少。碳元素的几个典型特征使它成为生命化学即有机化学演化发展的重要元素。

一、有机化合物的结构

碳的原子结构使它可以形成比其他元素更加多样的化合物。原子轨道理论描述了未结合状态单个碳原子周围电子云的近似方向（图 1-1）。碳原子的外电子层由 4 个电子组成（即碳表现为“四价”）。两个电子占据 2s 球形轨道，另外两个电子各占 1 个不同哑铃形的 2p 轨道，它的轴与另一个 2p 轨道的轴正交。碳原子中其中 1 个 2p 轨道不含电子。4 个电子均可与其他元素共用，该元素可通过共用电子形成共价键，使其电子层保持完整。

碳的一个独特特征是它可以与其他碳原子共用电子，形成以 C—C 键为主的大分子。少数几个其他元素虽然在其外层含有 4 个电子，可以与同一元素的原子形成多个共价键，但它们在地质条件下很不稳定。因此，尽管碳可以与其他硅原子以共价键相连，但 Si—Si 化合物在空气中不稳定，易氧化形成二氧化硅 (SiO₂)。

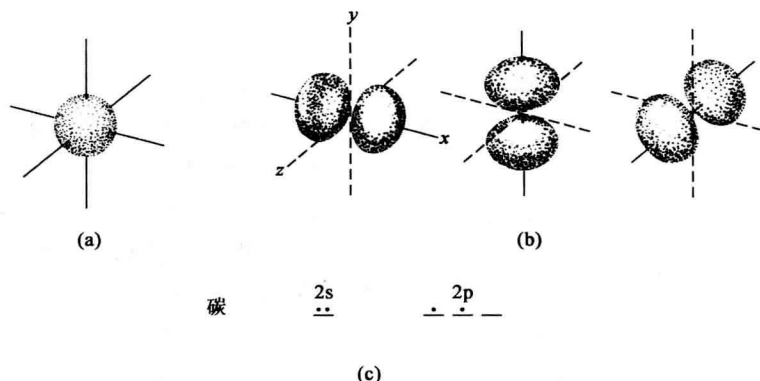


图 1-1 碳原子外层原子轨道示意图 (据 Morrison 和 Boyd, 1966)
(a) 球形 2s 轨道; (b) 三个正交的哑铃形 2p 轨道; (c) 外层轨道电子的分布

1. 烷烃—— σ 键

当碳与其他原子结合时，2s 和 2p 轨道可以杂合成不同的轨道结构。1 个 2s 和 3 个 2p 轨道可以杂化形成 4 个相同的 sp^3 轨道 (图 1-2)。这 4 个 sp^3 电子轨道可以由碳原子化合价层形成，在碳原子中心之外每个轨道相互夹角为 109.5° [图 1-2 (b)]。单个碳原子与 4 个氢原子中的每个氢原子共用 1 个电子，可以满足 8 个电子的化合价要求。因而，4 个氢原子与 1 个碳原子结合形成了很稳定的化合物甲烷，其中氢位于正四面体的四角，而碳居于中心 [图 1-2 (c)]。

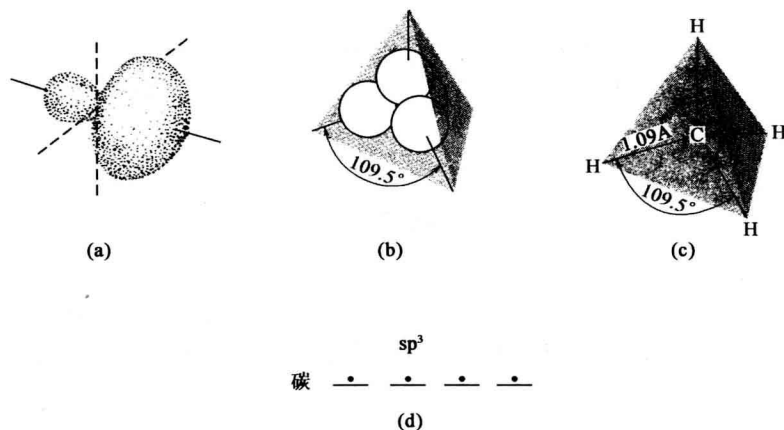


图 1-2 碳原子的杂化 sp^3 轨道 (据 Morrison 和 Boyd, 1966)
(a) 单个轨道的近似形态; (b) 4 个轨道位于四面体四角的轴数;
(c) 甲烷分子 (CH₄) 的形态及维数; (d) 外层轨道电子的分布

在化合物中，例如甲烷，碳原子只以 sp^3 杂化键连接，碳原子称为“饱和的”，所形成的强键称为 σ 键或共价键。当分子中 2 个原子仅以 1 个 σ 键相连，则称为单键，相反为双键。只含有碳和氢单键的稳定分子称为饱和烃或烷烃。

2. 烯烃—— π 键

碳的 $2s$ 和 $2p$ 电子轨道也可以杂化成 p 和 sp^2 轨道。在该种结构中，碳的 4 个价电子被分成 1 个 p 和 3 个 sp^2 轨道。这 2 个 sp^2 轨道各具 1 个电子，位于同一平面上，其远离中心碳原子的轴间夹角互为 120° [图 1-3 (a)]。 p 轨道含有剩余的电子，它垂直于 sp^2 轨道的平面。图 1-3 (b) 中的甲基 p 轨道含有 1 个电子。该烃（烷）基不稳定，但它是有机化合物反应的中介物。

当两个相邻的原子同时出现 p 轨道时（如 $C=C$ 或 $C=O$ ），就可形成“ π ”或双（相对于单键）键，如图 1-3 (c) 和图 1-3 (d) 所示的乙烯。 π 键比 σ 键更容易反应。因此，乙烯中的碳原子以两种键连接：每个碳原子 sp^2 杂化轨道所形成的 σ 键和 p 轨道叠合形成的 π 键。该种键称为一个双键。含有双键的烃类是“不饱和”的，包括烯烃和芳烃。

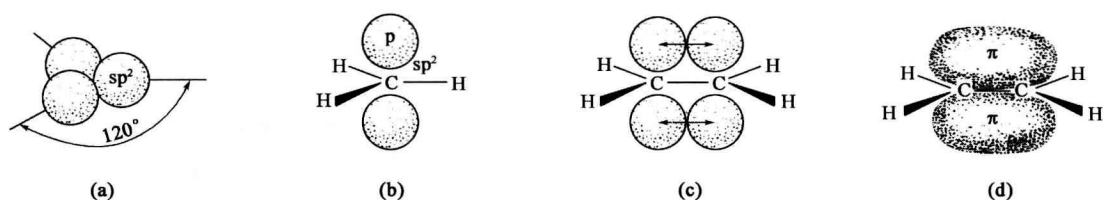


图 1-3 碳原子的杂化 p 轨道和 sp^2 轨道（据 Morrison 和 Boyd, 1966）

(a) 碳原子的 sp^2 杂化轨道，位于等边三角形三个角的轴线上；(b) 甲基含有 1 个 p 轨道，在 σ 键平面上下各由 1 个电子占据；(c) 乙烯分子表示相邻 p 轨道相互作用形成 π 键（电子云）；(d) π 键（电子云）位于 σ 键平面上下

3. 芳香族——苯

烃可以分为两大类，一类是脂肪烃，包括烷烃和烯烃，另一类是芳香烃（芳香烃简称芳烃）。虽然芳香族含有 π 键，但大多数都很稳定。

苯为最简单的芳烃（图 1-4）。苯的 6 个碳原子均杂化成 sp^2 轨道，在平面六角形中以 σ 键相互连接。像乙烯一样，每个碳原子在 p 轨道内有 1 个电子，它可与其相邻碳原子重叠形成 π 键。苯环内每个碳原子的 π 键均相同，这 6 个 p 电子均分共享或在碳原子中移位，在环的上下形成环形 π 电子云。该种双键的排列方式比孤立的双键更稳定。

在大多数石油中均存在各种芳香烃，而烯烃却很少或不存在。烯烃没有芳香族稳定，在沉积深埋条件下它易被加氢反应生成烷烃。总的来说，含有官能团的分子，如孤立双键、羟基（ $-OH$ ）、羧基（ $-COOH$ ）或硫羟基（ $-SH$ ）等取代基尤其更易发生反应，随埋藏深度的增加而不断减少。

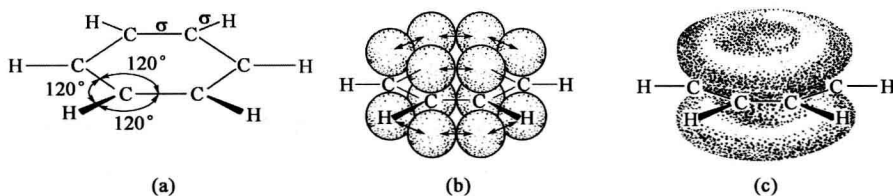


图 1-4 苯分子示意图（最简单的芳香烃）（据 Morrison 和 Boyd, 1966）

(a) 只有 σ 键；(b) p 轨道重叠形成 π 键；(c) σ 键平面上下 π 电子云的位移

二、烃类化合物

人们把只含有碳和氢两种元素的有机化合物称为碳氢化合物，简称烃。烃是有机化合物的母体，其他有机化合物可以看做是烃分子中的氢原子被其他原子或原子团取代后得到的衍生物。

1. 分类

1) 开链烃

开链烃可分为饱和烃和不饱和烃。饱和烃分子中碳原子之间都以单键（C—C）相连，其余的价键均与氢原子连接，饱和烃又称烷烃。“烷”是表示碳的化合价已经完全饱和的意思。不饱和烃包括烯烃（含有一个碳碳双键的开链烃）和炔烃（含碳碳三键官能团的碳氢化合物）。由于长链状化合物最初是在油脂中发现的，所以开链化合物也称脂肪族化合物。开链烃也称脂肪烃，这类化合物中碳原子之间互相结合成链状，两端张开不成环。

2) 脂环烃

碳原子相互连接成环状结构，而性质与开链的脂肪族碳氢化合物相似的一类碳环化合物，称为脂环烃。根据环上是否含有不饱和键，又分为饱和脂环烃和不饱和脂环烃。饱和脂环烃称为环烷烃，而不饱和脂环烃又分为环烯烃和环炔烃。环烷烃的通式为 C_nH_{2n} ，与同碳原子数的烯烃互为同分异构体。环烯烃的通式为 C_nH_{2n-2} ，与同碳原子数的炔烃及二烯烃互为同分异构体。环炔烃是碳环中含有碳碳三键的单环脂环烃，如环辛炔。由于角张力的影响，在室温下能稳定存在的最小的环炔烃是八个碳原子的环辛炔，更小的环炔烃如环庚炔、环己炔只能作为活性中间体瞬间存在而未能分离出来。按构成脂环烃环数目的不同，脂环烃又可分为单环脂环烃、二环脂环烃或多环脂环烃。

3) 芳烃

芳烃是芳香族化合物的母体。大多数芳烃含有苯的六碳环结构。从碳氢原子数比值来看，这类化合物应具有高度不饱和性，但实际上却是比较稳定的。与脂肪烃和脂环烃不同，在化学性质上容易进行取代反应而不易进行加成和氧化反应，这种特性称为芳香性。因此，长期以来把苯及其衍生物称为芳香族化合物。随着有机化学的进一步发展，发现一些不具有苯环结构的环状烃也有特殊的稳定性，化学性质上也与苯及其衍生物有着共同的特性——芳香性，这类环状烃称为非苯芳烃。

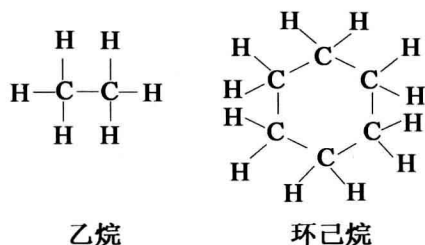
根据芳烃分子中是否含有苯环以及所含苯环的数目和连接方式的不同，芳烃可分为单环芳烃（如苯、甲苯、苯乙烯等）、多环芳烃（分子中含有两个或两个以上苯环，如联苯、萘、蒽等）、非苯芳烃（分子中不含有苯环，但含有结构、性质与苯环相似的芳环，并具有芳香族化合物的共同特性，如环戊二烯负离子、环庚三烯正离子等）。

2. 分子结构表示方法

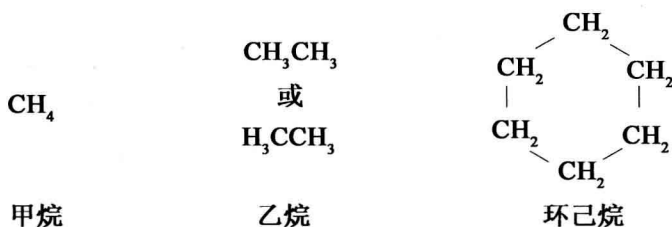
有机化合物数目众多，反应复杂，这是由有机化合物结构特征所决定的。只有掌握有机化合物的结构与性质的关系，才能揭示有机化合物分子中各原子间化学键的本质和有机分子转化的规律，并设计、合成具有特定性质的有机分子。

表示烃类化合物的结构有多种方法，常用的是把每个碳原子用 C 表示，氢原子用 H 表示，线条表示原子之间的化学键。在所有有机化合物（除少数在实验室条件下存在的高度不稳定的有机化合物外）中，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

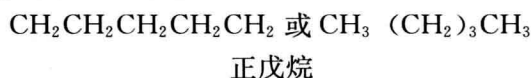
二价键，氮原子具有二价键。碳原子间相互也可形成化学键，并形成链状或环状结构，这种独特的性质形成了成千上万个不同的有机化合物。例如，乙烷、环己烷的结构表示如下：



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，因此需要建立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。例如，甲烷、乙烷、环己烷表示如下：



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。氧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 4 个化学键，而每个氧原子只能形成 1 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。例如，正戊烷和环己烷用线段表示如下：



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氢原子的个数。

最简单的烃类化合物具有线型结构，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 9 个最简单正构烷烃的命名和三种结构表达方式见表 1-1。

碳原子并不总是需要以直线方式排列，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 的许多化合物中的两种异构体表示如下：



在 2-甲基己烷中，基本结构是己烷，一个甲基 (CH₃) 取代了第二个碳原子上的氢原子。在有机地球化学中最重要的支烷烃是类异戊二烯烷烃，规则类异戊二烯烷烃每 4 个直链碳原子上有 1 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 1-1 10 个最简单正构烷烃的命名及结构表达方式

名称	结构表达方式		
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	$\text{C}_{10}\text{H}_{22}$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_8\text{CH}_3$	

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
	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，典型环烷烃的基本结构如图 1-5 所示。

甾烷是由 3 个六元环和 1 个五元环构成的环烷烃，萜烷是含有 5 个或 6 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 1-6 所示。

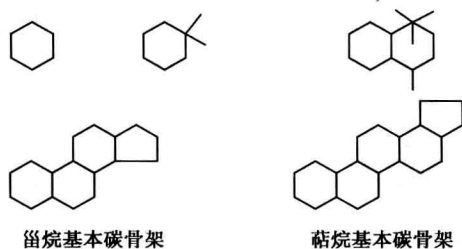


图 1-5 典型环烷烃的基本结构

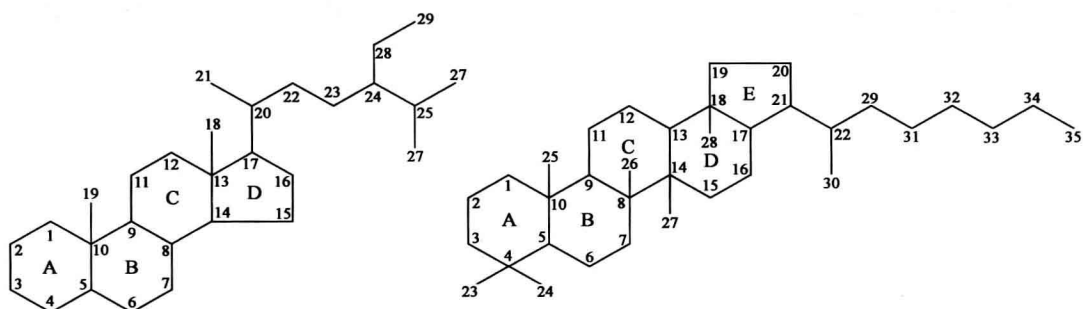
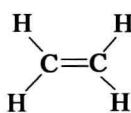


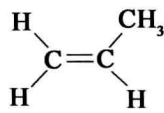
图 1-6 甾类、萜类化合物的碳结构

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，在没有键的断裂时，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相结合。许多不饱和烃存在 C=C 双键，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，它们的结构描绘如下：



乙烯



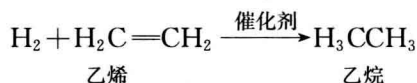
丙烯



环己烯

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、甾烷和萜烷。

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下：

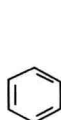


乙烯

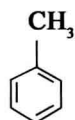
乙烷

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。

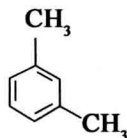
芳烃是不饱和烃中非常重要的一类化合物，它们的化学性质与烯烃有很大差异，并且十分稳定。尽管它们属于不饱和烃，但其加氢反应并不容易，它们的稳定性使其成为原油和沉积物中重要的有机化合物。某些典型和重要的芳烃化合物表示如下：



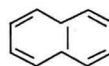
苯



甲苯

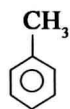


二甲苯

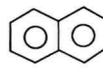


萘

在芳烃化合物的环状结构中，单键、双键交替出现，一种简单的表示方法是用圆圈代表芳环上的双键，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。电子共享使芳烃化合物非常稳定。两个常见轻芳烃的结构表示如下：

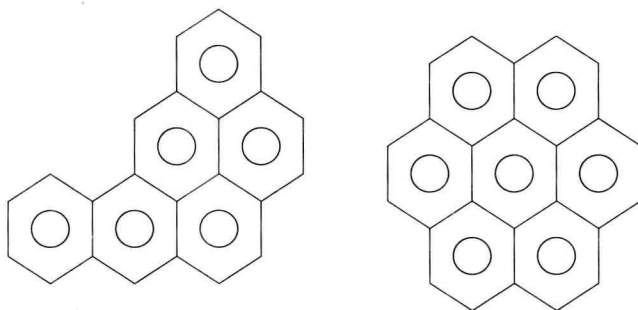


甲苯



萘

某些芳烃化合物分子非常大，常见的多环芳烃具有稠环结构，极端情况是具有无数芳环的石油焦。



多环芳烃化合物

上述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，关于生物分子向烃类转化的化学反应将在后面讨论。

三、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 原子外的其他原子均称为杂原子，含杂原子的化合物称为杂原子化合物。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，而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得以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 1-7）。

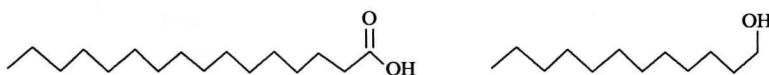


图 1-7 来源于生物体的脂肪酸和醇类化合物示例

卟啉是最重要的杂原子化合物之一，它在结构上与叶绿素有关，并在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，其中两种重要类型表示在图 1-8 中。对卟啉的早期研究结果为油气有机成因提供了重要证据。

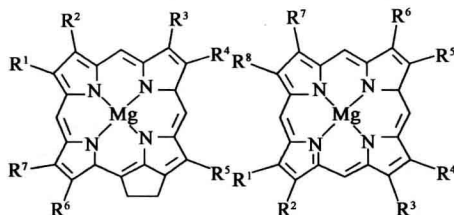


图 1-8 在石油、岩石和沉积物抽提物中发现的典型卟啉化合物

许多常见的杂原子化合物并不是直接来自于生物母质。最重要的杂原子化合物是沥青