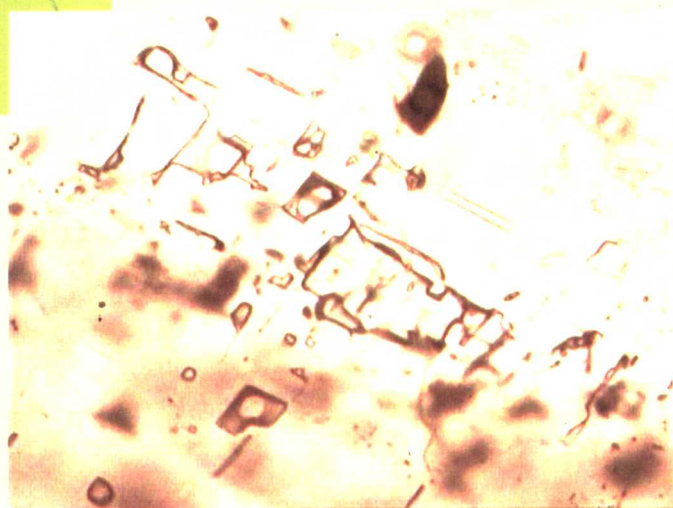


流体包裹体专著系列

烃类包裹体 热动力学

刘 斌 著



科学出版社

www.sciencep.com

流体包裹体专著系列

烃类包裹体热动力学

刘 斌 著

国家自然科学基金项目(40173029)研究成果

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书介绍了烃类体系相态和包裹体特征,描述烃类包裹体常用的状态方程,包裹体中烃-水的溶解性质和低温下气体水合物;特别阐述复杂烃类包裹体能够进行计算的原理和方法;列出烃类包裹体均一化时热力学参数的简化计算图表和经验公式;同时详述烃类复杂包裹体均一化时计算的状态方程逸度系数和混合模型活度系数法。叙述自然界常见的不混溶烃类包裹体组合相态特征、判别和计算方法;列举自然界两种基本组成不混溶烃类包裹体组合的温度、压力、流体密度、流体逸度等热力学参数计算实例。最后介绍包裹体动力学参数,温压梯度、流体势等计算方法和实例。

本书可供从事地球科学各学科研究和应用的学者参考,特别是对油气开发的科学技术工作者有较大的应用价值,对于环境科学、硅酸盐材料科学的工作者也有一定的参考价值。

图书在版编目(CIP)数据

烃类包裹体热动力学/刘斌著. —北京:科学出版社, 2005
(流体包裹体专著系列)
ISBN 7-03-015080-5

I. 烃… II. 刘… III. 气包体-热力学: 动力学 IV. P572

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 031932 号

责任编辑: 鄢德平 田士勇 吴伶伶/责任校对: 李奕莹

责任印制: 钱玉芬/封面设计: 王 浩

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>

源海印刷有限责任公司印刷

科学出版社编务公司排版制作

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2005年7月第 一 版 开本: B5 (720×1000)

2005年7月第一次印刷 印张: 25 1/4

印数: 1—1 500 字数: 469 000

定价: 60.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换〈新欣〉)

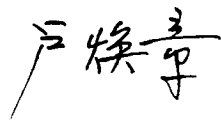
序

在地球科学研究中,以往的工作主要着重于地球的固体部分,对地球中流体的作用则注意得不够,而流体在地球的演化过程中却扮演着极其重要的角色,因为地壳中的矿物岩石均是从流体中形成的。

地壳中的流体,从狭义上来讲,包括岩浆、地下水、变质水、盆地卤水、岩浆水、海水、油气、地层水和现代热泉等。这些流体我们现在大都可以观测到。除此之外,还有一种古流体,即存在于以往地质年代的流体,它是该书研究的对象。古流体存在于矿物、岩石的流体包裹体中,它的成分可以是上述流体的任何一种或其混合物。地壳中流体可以分为均匀体系和非均匀体系两种,对于前者已有很多的研究,但对于非均匀的流体,特别是油气过程中的烃类包裹体(通常称为油气包裹体)及其热动力学,则很少有详细的研究。刘斌先生以其多年的研究实践,并利用现代热动力学原理对油气包裹体进行了详细研究,并引进虚拟组分和局域平衡假设确定了油气包裹体的热动力学计算的理论基础。

该书的重要意义还在于作者把包裹体热动力学与计算机结合起来,自编有关流体包裹体热动力学方面的计算机程序,使过去对流体包裹体的研究以描述为主的情况得以改变,代之以简便正确的计算机程序,使得流体包裹体得出的物理化学参数更加精确。

作者是拥有丰富经验的流体包裹体的研究工作者,而该书也是他多年从事流体包裹体研究的学术总结。相信该书的出版一定会推动地壳中流体和流体包裹体,特别是油气包裹体,这一重要的地球科学领域的研究进展。



于加拿大魁北克大学

2004年5月

前 言

流体在地质过程中的作用越来越被人们所重视,在低温地质环境下特别是在盆地沉积和后期变化过程中,作为特殊成分——烃类,在它们生成、运移、聚集时,常常被矿物捕获为包裹体,这些包裹体基本上完整地记录了整个油气演化过程,并且较好地保存下来,研究这些“信息密码”,从而可以获得它们的形成时的热力学条件,进一步了解烃类生成、运移、分散、聚集的演化历史,为油气勘探和其他矿产开发提供可靠的数据。

利用现代流体热力学原理,研究这种微小包裹体,从而反过来计算和了解它们形成过程时的物理化学条件,这就是一门新兴分支学科——“流体包裹体热力学”的研究内容。地质学家引进不同体系流体实验相图,应用各种流体 p - T - V - x 关系状态方程,为流体包裹体科学从定性描述到定量研究提供了一种新的计算方法。近年来,以 P. E. Brown(1989, 1992)教授为代表所设计的 Flincor 和 McFlinCor 计算机软件及 Bakker(2003)教授开发的计算机程序包 FLUIDS 能高效、精确地计算自然界主要成分体系中流体包裹体热力学参数,将流体包裹体热力学研究和应用提高到一个新的水平。本人在包裹体热力学研究中,将单个体系的流体包裹体扩大到与其相关的其他体系,在统一的热力学场下进行包裹体及其相关体系的综合研究,提出计算形成温度、压力的两种方法,克服原来较麻烦且不精确的均一温度的“压力校正”问题,并且以这两种方法为基础,编制了有关的计算机软件,增加了计算内容,它具有目前国外流行的 McFlinCor 软件所不能计算的包裹体捕获时的热力学参数即形成温度、压力、氧逸度、简单组分含量等,从而扩大了应用范围。

虽然流体包裹体热力学取得明显进展,但是发展很不平衡,在自然界中高温环境下比较简单的组分流体体系(如 H_2O 、 CO_2 、 H_2O - NaCl 、 CO_2 - H_2O 、 CO_2 - H_2O - NaCl 等)的热力学研究程度较高,实用的相图和 p - T - V - x 关系状态方程较多,研究比较成熟。然而,对于低温环境下形成的沉积岩、油气矿床、低温金属矿床、脆性构造等领域中广泛分布的烃类包裹体,热力学性质研究程度相对较低,只做出少数简单的组分(如 CH_4 、 C_2H_4 等)的相图。由于烃类包裹体成分和相态的复杂性,烃类包裹体均一温度数值范围较大又毫无明显规律,几乎很少学者利用烃类包裹体显微测温数值确定它们的体积和密度,也难得应用烃类包裹体均一温度这一重要测定数值来计算它们捕获时的温度、压力和其他热力学参数。正是对低温环境特别是油气矿床中最广泛分布的烃类包裹体信息未能充分发掘和研究,烃类包裹体热力学计算至今未能有所突破。

本人近年来对复杂烃类包裹体进行了理论研究和实际测定。在理论方面,引进“虚拟组分概念”(concept of pseudo-components)和“局域平衡假设”(assumption of local equilibrium),确立了复杂烃类包裹体计算的理论基础。从理论上首先解决了能够和如何进行计算的难题;其次在实际计算上,采用“相平衡常数”和“相态方程”,建立了复杂烃类包裹体具体的数学模型,为研究者提供了又一种可靠而精确的计算方法,推荐了几种用于烃类包裹体精确计算的 p - T - V - x 状态方程和其他热力学关系式;最后在具体操作中,编制出一个崭新、复杂的烃类包裹体热力学参数计算机软件,以便研究者方便使用。这些为烃类包裹体热力学这一薄弱领域的突破性研究充实了丰富的新内容。

总结上述研究成果,本人撰写了这本《烃类包裹体热力学》专著。主要内容为国家自然科学基金项目——“不混溶烃类包裹体热力学参数的计算”(项目编号:40173029)研究成果。全书分为10章。

第1章,烃类包裹体研究的理论基础和烃类体系相态及包裹体特征:介绍引用“虚拟组分”的概念和“局域平衡假设”的理论,建立复杂的多元组分体系包裹体计算原理;烃类及相关组分体系的相态特征;包裹体捕获的相行为和测温原理;烃类包裹体的鉴别特征、化学组成和分类;烃类及其相关组分包裹体典型相图。

第2章,包裹体中烃类组分的物理化学性质:介绍包裹体中烃类及相关组分物性参数和热力学性质。

第3章,包裹体中常用的流体状态方程及逸度和活度的计算:列出包裹体常用的流体状态方程;包裹体热力学计算中常用逸度和逸度系数的概念和计算公式。

第4章,包裹体中烃-水的溶解性质和气体水合物:主要介绍包裹体中烃-水的溶解性质和包裹体中烃类及相关组分的气体水合物;详细列举了气体水合物的结构和相态、气体水合物热力学方程、气体水合物的物理-化学性质、气体水合物生成条件和气体水合物在包裹体测定中的应用。

第5章,烃类包裹体简单体系的均一化参数——均一压力、体积和密度的计算:介绍单组分体系的均一压力;单组分体系的气相体积和密度;单组分体系的液相体积和密度的计算。

第6章,烃类包裹体复杂体系的均一化参数——均一压力、密度和体积的计算:介绍“相态方程”在烃类包裹体“均一化”测定和计算中的应用;建立包裹体均一化参数的简化计算——相平衡常数图表和经验公式法;包裹体均一化参数的复杂计算——状态方程的逸度系数法;介绍包裹体均一化参数的严格计算——混合模型的活度系数法。

第7章,烃类不混溶体系相态平衡和包裹体组合:介绍不混溶烃类体系的平衡原理;不混溶烃类典型相图特征;自然界常见的不混溶烃类组分包裹体组合类型。

第8章,烃类不混溶体系包裹体组合特征、判别和计算方法:介绍不混溶烃

类包裹体组合捕获时的相态和室温下的相态特征；不混溶流体包裹体组合的测定和判别方法；不混溶烃类包裹体组合形成温度和压力的计算。

第9章，自然界几种简单的烃类不混溶体系包裹体组合的测定、判别和计算：列出自然界常见的两种体系不混溶流体包裹体组合：①烃-烃体系；②烃-水体系的成分含量、形成温度和压力等热力学参数计算实例。

第10章，烃类及相关组分包裹体动力学参数的计算和分析方法：介绍古地层埋藏(古地温梯度、古地压梯度、古地层剥蚀厚度等)、古流体运移(气化率、流体势)、古构造演化的包裹体动力学参数(包裹体迹面 FIP 法)，油气包裹体形成和演化两种动力学分析方法(含油盆地包裹体埋藏史、构造演化史分析)，在介绍这些动力学参数计算和分析方法时，列举了相应的应用实例进行解析。

本书的出版为这一领域的深入研究起着抛砖引玉的作用。书中的计算图表、公式及其电脑软件，如能为石油地质学家、从事低温环境下研究的地质专家提供方便的话，作者也就感到十分欣慰了！

本书在出版过程中，加拿大魁北克大学卢焕章教授提供了许多资料并为本书作序，同济大学高级工程师周念清对所有图件进行电脑清绘，特此表示感谢！另外，蒙中山大学教授李兆麟恩师给予许多鼓励，中国石油化工股份有限公司无锡石油地质实验研究所钱一雄高级工程师的有益帮助，山东地质科学实验研究院沈昆教授和中国地质大学张文淮教授的大力支持，在此一并致谢！

烃类包裹体热动力学是一个新的研究领域，涉及的学科多、内容广，书中难免有错误和不妥之处，敬请读者指正，本人十分感谢！

与本书相匹配的“烃类包裹体热动力学参数计算 VB 软件”已经开发，如读者感兴趣可与作者联系。

刘 斌

2004年5月于上海四平路

同济大学地下工程系

主要符号说明

英文大小字母			
A	Helmholtz(亥姆霍兹)自由能, Van Laar(范拉尔)方程参数	N_i	系统中 i 物质总数
A_i	物质 i 的化学式	n	物质的量
A_{ij}	活度系数方程中的二元参数	p	压力
a	活度; 状态方程中的待定常数	p_h	包裹体均一压力
B, B'	第二 Virial(维里)系数	p_i	包裹体捕获压力
b	状态方程中的待定常数	R	摩尔气体常量
b_i	元素 i 的物质的量	r	独立反应数
C, C'	第三 Virial(维里)系数	S	熵
c_B	溶质 B 的体积摩尔浓度(mol/m^3)	SCN	单碳数
D, D'	第四 Virial(维里)系数	T	热力学温度(K)
CL, CLA	气体水合物或笼合物(clathrate)	T_h	包裹体均一温度, 后加括号为 特指, 如 $T_h(\text{CH}_4)$ 、 $T_h(\text{CO}_2)$ 、 $T_h(\text{HYD})$ 、 $T_h(\text{CAR})$ 分别为 CH_4 、 CO_2 、烃类、 CO_2 为主 挥发组分相气-液均一温度
EOS	状态方程(equation of state)	T_m	子矿物、水合物固相熔化(分 解)温度
e	气化率	$T_m(\text{Ice})$	冰点温度
f	逸度; 相律中的自由度	T_i	包裹体捕获温度
G	Gibbs(吉布斯)自由能	t	时间; 摄氏温度[$^{\circ}\text{C}$], 与热力 学温度 K 的关系: $t(^{\circ}\text{C}) =$ $T(K) - 273.15]$
GOR	气、油体积比	U	内能
g	重力加速度	u	速率
H	焓	V	体积; 比体积; 蒸气
$K(T)$	温度 T 时的化学反应标准平衡 常数	VLE	气-液平衡(vapor-liquid equilibrium)
K_i	组分 i 的平衡常数	x	液化量; 液相组成
k_H	Henry(亨利)常量, 有时也用 H 表示	y	气相组成
k_{ij}	混合规则中二元相互作用参数	Z	压缩因子
M	相对摩尔质量; 摩尔性质	z	气液混合物的总组成
M_i	物质 i 的相对摩尔质量		
m	质量		
m_B	溶质 B 的质量摩尔浓度 ($\text{mol}/1000\text{g}$ 溶剂)		
N	组元数		

希腊字母

α	相对挥发度	ρ	密度
γ	活度系数, 压缩系数	τ	NRTL(无序双液)方程参数的 充填度
Λ	Wilson(威尔逊)方程参数	ϕ	逸度系数; 体积分数; 包裹体 中相态充填度
μ	化学位(势)	ω	偏心因子
ν	化学计量数		
π	相律中相数		

上标

(0)	简单球形分子; 对比标准态	E	超额性质
(1)	对简单球形分子偏离的校正项	g	气态
*	纯物质	l	液态
,	剩余性质	s	固态; 饱和态
—	标准态	R	参比态

顶标

—	平均; 偏摩尔量	$\wedge$	混合物中组分 i 的逸度(或逸 度系数)、活度
---	----------	----------	----------------------------

下标

A	溶剂	m	摩尔性质
B	溶质	mix	混合
b	沸点	p	恒压过程
c	临界性质	pc	虚拟临界性质
i, j, k	组元	r	对比性质; 可逆过程; 化学反 应过程
id	理想气体; 理想过程	T	恒温过程
ir	不可逆过程	V	恒容过程
M	混合物		

目 录

序

前言

主要符号说明

第 1 章 烃类包裹体研究的理论基础和烃类体系相态及包裹体特征	1
1.1 烃类包裹体研究的理论基础	1
1.1.1 虚拟组分和虚拟多元系的概念	1
1.1.2 局域平衡假设的理论	2
1.2 烃类及相关组分体系的相态特征	5
1.2.1 单组分体系	7
1.2.2 双组分体系	10
1.2.3 多组分体系	14
1.3 包裹体捕获的相行为和测温原理	16
1.3.1 临界密度包裹体	16
1.3.2 高密度包裹体	18
1.3.3 低密度包裹体	18
1.4 烃类包裹体的鉴别特征、化学组成和分类	19
1.4.1 烃类包裹体的鉴别特征	19
1.4.2 烃类包裹体的化学组成	20
1.4.3 烃类包裹体的分类	24
1.5 烃类及其相关组分包裹体典型相图	26
1.5.1 烃类组分体系包裹体相图	26
1.5.2 烃类-非烃类组分体系相图	28
1.5.3 H ₂ O-多盐类组分体系相图	32
参考文献	36
第 2 章 包裹体中烃类组分的物理化学性质	38
2.1 包裹体中烃类及相关组分的物性参数	38
2.1.1 临界性质	38
2.1.2 临界参数的计算	40
2.1.3 偏心因子	43
2.1.4 势能函数	44
2.1.5 压缩因子	46

2.1.6	真实气体混合物的混合规则	46
2.1.7	烃类重质馏分	48
2.2	包裹体中烃类及相关组分热力学性质	53
2.2.1	偏摩尔性质	53
2.2.2	化学位	56
	参考文献	58
第3章	包裹体中常用的流体状态方程及逸度和活度的计算	59
3.1	包裹体常用的流体状态方程	59
3.1.1	立方型方程	60
3.1.2	对比态方程	64
3.1.3	Virial(维里)方程	65
3.1.4	多参数方程	66
3.1.5	微扰-硬球模型方程	72
3.1.6	Helmholtz(亥姆霍兹)自由能压缩因子状态方程	74
3.1.7	状态方程应用时应注意的问题	79
3.2	逸度和逸度系数	82
3.2.1	纯物质或混合物作为整体的逸度	82
3.2.2	混合物组分的逸度	84
3.2.3	状态方程逸度系数表达式	86
3.3	活度和活度系数	92
3.3.1	活度和活度系数定义	92
3.3.2	标准态的选择法	93
3.3.3	活度系数方程	94
3.3.4	活度系数方程参数的确定	99
	参考文献	101
第4章	包裹体中烃-水的溶解性质和气体水合物	103
4.1	包裹体中烃-水的溶解性质	103
4.1.1	烃类及相关组分在水中的溶解度	103
4.1.2	水在液相烃类中的溶解度	114
4.1.3	水在气相烃类中的溶解度	114
4.2	包裹体中烃类及其他挥发组分的气体水合物	116
4.2.1	气体水合物的结构和相态	116
4.2.2	气体水合物热力学方程	121
4.2.3	气体水合物的物理化学性质	128
4.2.4	气体水合物 p - T 平衡曲线	136
4.2.5	气体水合物的水合常数(K)	139

4.3 包裹体中气体水合物的测定和应用	149
4.3.1 包裹体中气体水合物生成条件和测定意义	150
4.3.2 包裹体中气体水合物的拓扑图和测定过程中相态变化	151
4.3.3 包裹体中气体水合物的温度和压力计算	155
4.3.4 利用气体水合物测定数值计算包裹体水溶液的含盐度	161
4.3.5 利用气体水合物测定数值计算包裹体流体密度	173
4.3.6 $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-NaCl}$ 包裹体经验公式和计算	177
参考文献	181
第5章 烃类包裹体简单体系的均一化参数——均一压力、体积和密度的计算	183
5.1 单组分体系包裹体的均一压力	183
5.1.1 通用计算公式	184
5.1.2 几种非烃组分均一压力计算专用公式	188
5.2 单组分体系气相包裹体的体积和密度	189
5.2.1 通用计算公式	191
5.2.2 几种非烃组分气相包裹体密度和体积计算专用公式	193
5.3 单组分体系液相包裹体的体积和密度	201
5.3.1 通用计算公式	201
5.3.2 几种非烃组分液相包裹体密度和体积计算专用公式	204
参考文献	211
第6章 烃类包裹体复杂体系的均一化参数——均一压力、体积和密度的计算	212
6.1 “相态方程”在烃类包裹体“均一化”测定中的应用	212
6.1.1 烃类包裹体“均一化”测定原理	212
6.1.2 相平衡常数概念和相态方程	213
6.1.3 理想溶液的相态方程	214
6.1.4 实际溶液的相态方程	217
6.2 烃类包裹体均一化参数的简化计算——相平衡常数图表法	218
6.2.1 “收敛压力”的应用	219
6.2.2 常用的相平衡常数图表	220
6.2.3 计算方法	220
6.2.4 计算实例	227
6.3 烃类包裹体均一化参数的复杂计算——状态方程的逸度系数法	232
6.3.1 逸度系数法计算原理	232
6.3.2 计算程序	233
6.3.3 计算实例	234

6.4	烃类包裹体均一化参数严格计算——混合模型的活度系数法	236
6.4.1	气-液均一化混合模型的活度系数法计算原理	236
6.4.2	气-液均一化混合模型简化计算的几种假设	237
6.4.3	气-液均一化混合模型的计算方法和程序	239
6.5	多组分体系的液相包裹体体积和密度的计算	243
6.5.1	Harmens 式	243
6.5.2	Rackett 式	244
6.5.3	修正的 Rackett 式	245
6.5.4	Hankinson-Thomson 公式	246
6.5.5	Rea 公式	247
	参考文献	248
第 7 章	烃类不混溶体系相态平衡和包裹体组合	250
7.1	烃类不混溶体系相平衡原理	250
7.1.1	相律	250
7.1.2	相图	252
7.2	烃类不混溶双组分体系相图	254
7.2.1	第 I 类情况	256
7.2.2	第 II 类情况	258
7.2.3	第 III 类情况	259
7.2.4	第 IV 类情况	260
7.2.5	第 V 类情况	262
7.2.6	第 VI 类情况	263
7.3	烃类不混溶三组分体系相图	264
7.3.1	第 I 类三元系相图	264
7.3.2	第 II 类三元系相图	266
7.3.3	第 III 类三元系相图	267
7.4	烃类不混溶体系包裹体组合	267
7.4.1	烃类不混溶体系包裹体组合定义	267
7.4.2	常见的烃类不混溶体系包裹体组合类型	268
	参考文献	274
第 8 章	烃类不混溶体系包裹体组合特征、判别和计算方法	275
8.1	烃类不混溶体系包裹体组合特征	275
8.1.1	不混溶体系流体相平衡原理	275
8.1.2	烃类不混溶体系包裹体组合捕获时和室温下的相态	276
8.1.3	烃类不混溶体系包裹体组合的主要特征	276
8.2	烃类不混溶体系包裹体组合的判别方法	277

8.2.1	显微镜下判别	278
8.2.2	热力学参数的判别	279
8.3	烃类不混溶体系包裹体组合的形成温度和压力计算	286
8.3.1	形成温度和压力的计算原理	286
8.3.2	形成温度和压力的计算方法	287
	参考文献	289
第9章 自然界几种简单的烃类不混溶体系包裹体组合的测定、判别和计算		
		290
9.1	烃-烃不混溶体系包裹体组合	290
9.1.1	烃-烃不混溶体系包裹体组合的特征	290
9.1.2	烃-烃不混溶体系在室温下包裹体的三种相组合类型	291
9.1.3	烃-烃不混溶体系包裹体组合的测定、判别和计算	292
9.2	烃-水溶液不混溶体系包裹体组合	308
9.2.1	烃-水溶液不混溶体系包裹体组合的特征	309
9.2.2	烃-水溶液不混溶体系在室温下包裹体的三种相组合类型	309
9.2.3	烃-水溶液不混溶体系包裹体组合的测定、判别和计算	311
	参考文献	327
第10章 烃类及相关组分包裹体动力学参数的计算和分析方法		328
10.1	古地层埋藏的包裹体动力学参数	328
10.1.1	古温度梯度	328
10.1.2	古压力梯度	330
10.1.3	古地层埋藏深度	331
10.1.4	古地层剥蚀厚度	333
10.1.5	应用实例——三化剖面和东海盆地	335
10.2	油气运移的包裹体动力学参数	342
10.2.1	气化率	342
10.2.2	流体势	344
10.2.3	应用实例——新疆吐鲁番-哈密盆地侏罗系地层古流体势图	350
10.3	断裂构造演化包裹体动力学分析——流体包裹体迹面(FIP)方法	352
10.3.1	FIP 分析基本原理	352
10.3.2	FIP 类型和特征	353
10.3.3	FIP 的构造应力和方位分析	353
10.3.4	应用实例——东海盆地洋山岛的流体包裹体迹面(FIP)分析	354
10.4	油气形成和演化包裹体动力学分析方法	363
10.4.1	含油盆地埋藏演化史的分析	363
10.4.2	含油盆地构造演化史的分析 ^[11]	364

10.4.3 应用实例——广西十万大山盆地的研究	365
参考文献	374
附录	376
附录 1 纯物质的物理性质	376
附录 2 单碳数组的物理性质	378
附录 3 两种状态方程的二元相互作用参数	379
附录 4 压力方程系数	381
附录 5 单位换算——SI 制	383

第 1 章 烃类包裹体研究的理论基础

和烃类体系相态及包裹体特征

自然界普遍存在的烃类包裹体组成十分复杂，往往不止一种成分，而是由多种烃类成分组成。另外，还常常赋存或多或少的非烃类成分，对待这类复杂烃类混合物，在分析它们复杂性质的时候，更重要的是发现它们的特殊性，这样才能找到能否进行和如何进行解析计算的方法，从而创建热动力学性质解析计算的理论，建立有关计算模型。为了对这些复杂体系烃类包裹体进行有效测定和计算，我们引用“虚拟组分”和“虚拟多元系”概念，建立了烃类包裹体能够进行计算的理论基础，另外又引用“局域平衡假设”的理论，得到描述它们的具体数字方法，为合理计算它们的热力学性质、有效应用流体相平衡分析提供了有效途径。

此外，本章还评述了烃类相态特性，总结一些流体相平衡的知识，并给出一些包裹体中经常使用的相图，这些都是为以后各章中确定流体性质的方法奠定基础，但这些不可能包括各个方面的内容，对于不同组分流体相图更多的应用，还望读者在以后工作实践中去发现和研究。

1.1 烃类包裹体研究的理论基础

1.1.1 虚拟组分和虚拟多元系的概念

自然界普遍存在的烃类包裹体是复杂烃类和非烃类成分体系，对于“能否”进行复杂体系烃类包裹体研究，我们引用“虚拟组分”和“虚拟多元系”的概念——这是这类包裹体能够进行计算的基本条件。

1.1.1.1 虚拟组分

烃类和非烃类成分体系，包括许多复杂的成分，因为目前的分析方法不可能得到复杂体系烃类包裹体中所有“组分”的精确含量值，在研究这类包裹体时，首先要解决的问题就是把不可胜数的组分以某种方式处理成可以数学表达的组成，石油化学家早在 20 世纪初期就提出“窄馏分”和“虚拟组分”的概念^[1~3]。他们指出：作为石油馏分(包括原油)的复杂混合物，其组成通常可以被看作为有限数目的精确切割的“窄馏分”的混合物；每一个“窄馏分”都可以被当作作为一个纯组分处理，被称为“虚拟组分”或“假组分”。这种复杂混合物可以看成由一定数量的“虚拟组分”构成的“虚拟多元混合物”，并应用多元体系热动力学的各种计算方法。几十年来，在石油化工方面的实践中证明了这种理论假设是正确的。烃类包裹体中组成与石油馏分相似，对它们完全可以应用这一理论假设，作

为包裹体中烃类复杂成分，可以分成若干“窄馏分”和“虚拟组分”，每一个“虚拟组分”，可以像纯化合物那样，用一系列确定的数字来描述它的性质，如相对分子质量、沸点、密度、温度、压力等。当然，也可以通过特定的关系计算式求定之。

1.1.1.2 虚拟多元系

组成包裹体的烃类混合物也是一个复杂多元系，由于引用“虚拟组分”概念，这一复杂多元系也可以看作为由“虚拟组分”所组成的“虚拟多元系”。“虚拟多元系”中“窄馏分”的宽度以及所包含的“虚拟组分”的数目，应视具体情况而定。原则上，“馏分”越窄，越接近纯组分，这种“虚拟多元系”也越接近“真多元系”，计算误差也越小。然而，也不能无限增加“虚拟组分”的数目，除了计算工作量成倍增加外，计算时间和效率也是应该考虑的，另外也应该考虑仪器可能分析组分的数量和精度。

自然界烃类包裹体中目前能够分析出的主要为烷、烯、炔、苯类等，其中低碳($C_1 \sim C_6$)组分含量占有大部分，利用石油化学家的方法^[1~3]：“窄馏分”的“切割”利用实沸点蒸馏曲线来作出，每个“窄馏分”的平均沸点通过图解积分求定；“虚拟组分”的宽度不能过大，也不能过小，从许多实际测定经验总结得到，以“虚拟组分”的沸点宽度不超过 30°C 为宜。借助于他们的实践经验，我们可以把包裹体中复杂烃类混合物“切割”成甲~、乙~、丙~、丁~、戊~、己~(包括甲烷、乙烷、丙烷、正丁烷、正戊烷、正己烷和乙烯、丙烯、正丁烯、正戊烯、正己烯和乙炔、丙炔、丁炔和苯、甲苯、乙苯等“虚拟组分”)，其中大于 C_7 的高碳组分(庚~)，根据石油化学家的大量计算结果证明，把这类大于 C_7 的高碳组分作为一种“虚拟组分”看待，计算误差一般相差不大^[4,5]。这样“切割”的“虚拟组分”，加上非烃无机组分： O_2 、 H_2 、 H_2O 、 CO_2 、 CO 、 H_2S 、 SO_2 、 N_2 、 NO_2 、 NH_3 等真实组分共有近百种组分，它们基本上代表自然界复杂烃类包裹体的混合物成分，由于每一个“虚拟组分”或真实组分均可以用一定的数字来描述它的热力学性质，从而可以利用合适的热力学方程来计算它们的热力学数值。书后附录 1 中列出自然界包裹体中常见的烃类及相关组分的纯物质物理性质；附录 2 中列出自然界包裹体中常见的烃类单碳数组的物理性质。

由于引用了“虚拟组分”概念，建立了复杂烃类包裹体能够进行计算的理论基础，在此基础上又引用“虚拟多元系”概念，确定了描述它们的具体数字方法，为合理计算它们的热力学性质、有效应用相平衡分析提供了前提。

1.1.2 局域平衡假设的理论

流体包裹体热动力学研究是建立在经典热力学基础上的，经典热力学方法的主要优点在于它仅仅依靠少量的基本原理或假设可以演绎出有关平衡体系和可逆