

科研进展

您当前的位置: 首页 > 科研进展

广州地化所揭示干酪根对饱和烃吸附能力随热成熟度的演化特征

发布时间: 2023-04-03 来源: 广州地球化学研究所

【大】 【中】 【小】 分享到:

干酪根在地质温压条件下发生裂解生成烃类化合物, 并通过排烃及之后的运聚形成油气藏。在排烃过程中, 干酪根与烃类化合物分子间有着较强的相互作用, 导致部分化合物在烃源岩中富集, 直接影响排烃效率及油气性质。同时, 随着热演化程度的增加, 干酪根对烃类分子的束缚能力也会出现变化。开展不同成熟度条件下干酪根与烃类间相互作用研究对烃源岩排烃、油气资源评价意义重大。

已有研究多采用溶胀法评估干酪根对不同烃类化合物的吸附能力, 该方法对具体化合物滞留能力的研究效果较好, 但其实验的复杂性是开展系列化合物研究的难度和成本均较大, 且易受化合物特殊性质及实验误差影响, 也难以准确揭示不同烃类与干酪根相互作用的内在机理。为此, 中国科学院广州地球化学研究所博士后梁天在邹艳荣研究员和彭平安院士的指导下, 首次通过分子模拟及分子对接技术研究了干酪根对饱和烃吸附能力随热成熟度的演化特征, 并探究了其内在作用机理。

研究团队选用生油能力最强的芦草沟组 I 型干酪根为研究对象, 通过黄金管热模拟技术开展生烃实验, 制备出不同成熟度的干酪根样品。再通过元素分析及固体核磁共振检测, 建立三维分子模型 (图1) 并计算出不同成熟度干酪根分子与链烷烃分子间的吉布斯自由能分布, 以此为基础评估分子间作用力。

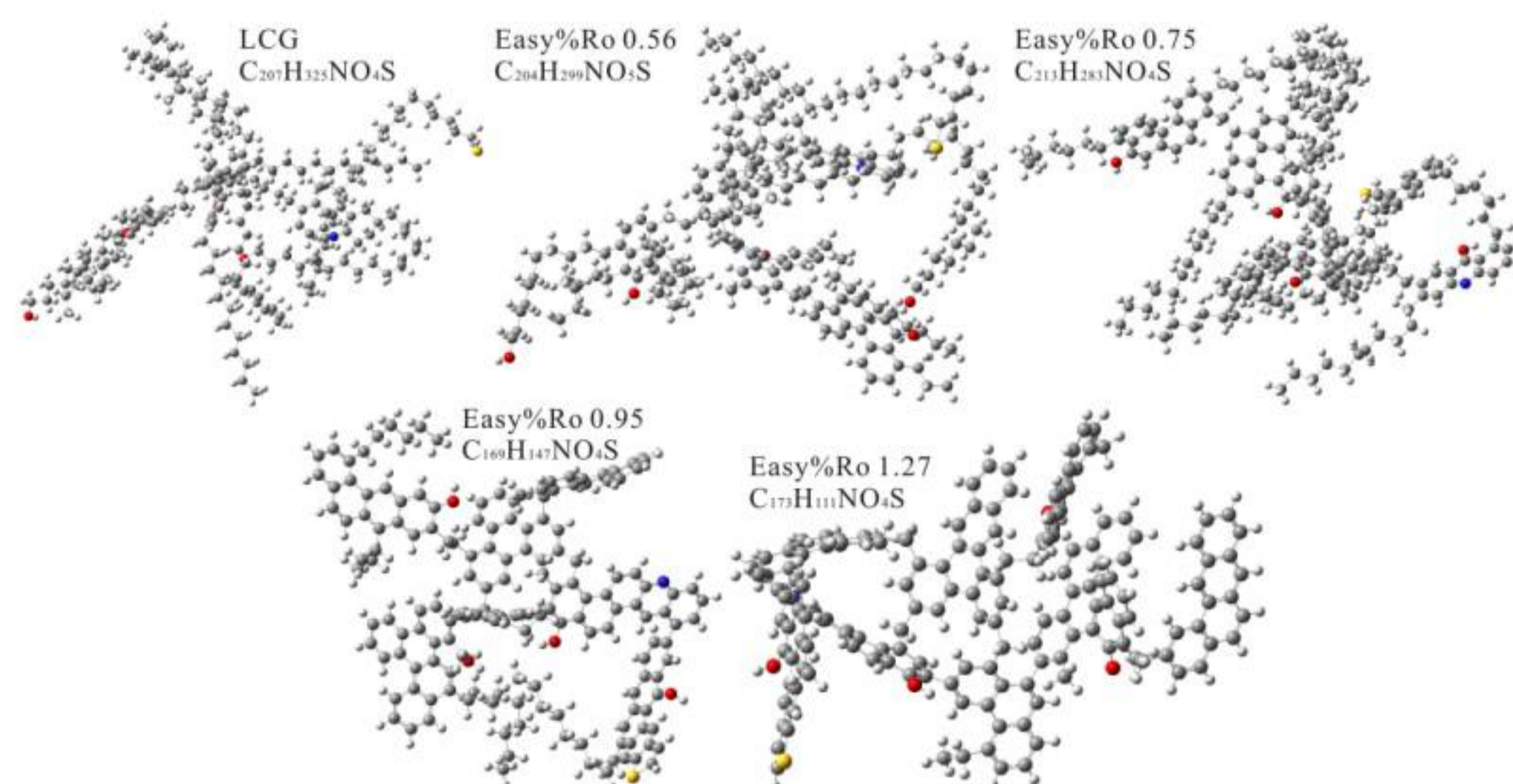


图1 下马岭干酪根三维分子模型

研究发现, 正构烷烃化合物随着分子量的增加与干酪根分子间相互作用力分为三个阶段: C2-C13阶段内随着分子量的增加, 正构烷烃与干酪根分子结合力逐渐增加; C14-C20阶段内分子间相互结合最为紧密; C21-C30阶段内, 随着正构烷烃分子量的增加, 结合能力在波动逐渐减弱。这说明, 正构烷烃中C14-C20化合物更倾向于在干酪根中发生富集, 难以发生排烃作用 (图2)。

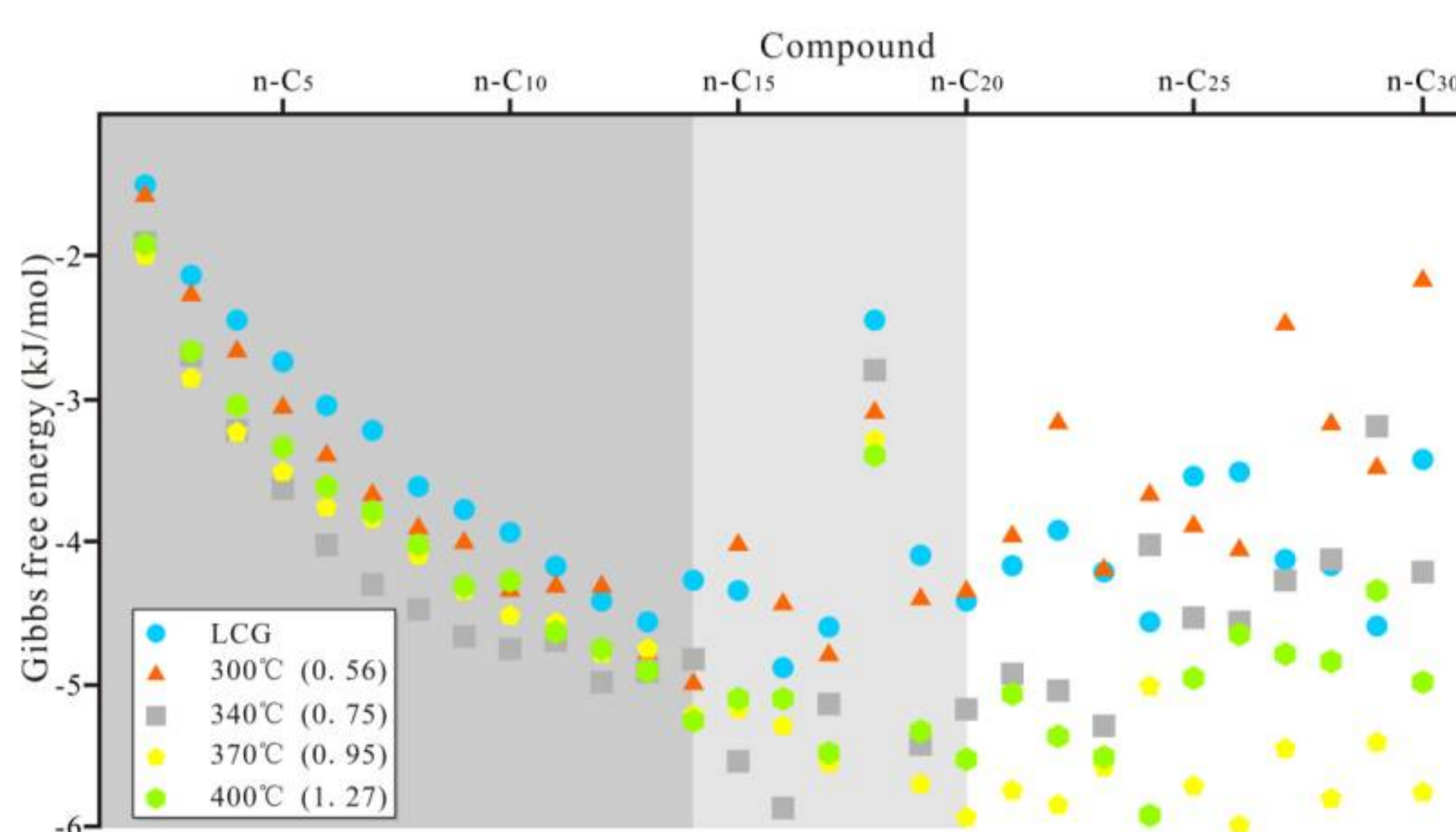


图2 不同成熟度干酪根与正构烷烃分子对接结果

除分子量外, 甲基的相对含量也是影响分子间作用力的关键因素。图1显示出成熟度0.75 (Easy%Ro) 的干酪根残渣与正构烷烃分子间吉布斯自由能最低, 图3所示的甲基相对含量分布也印证了这一观点。

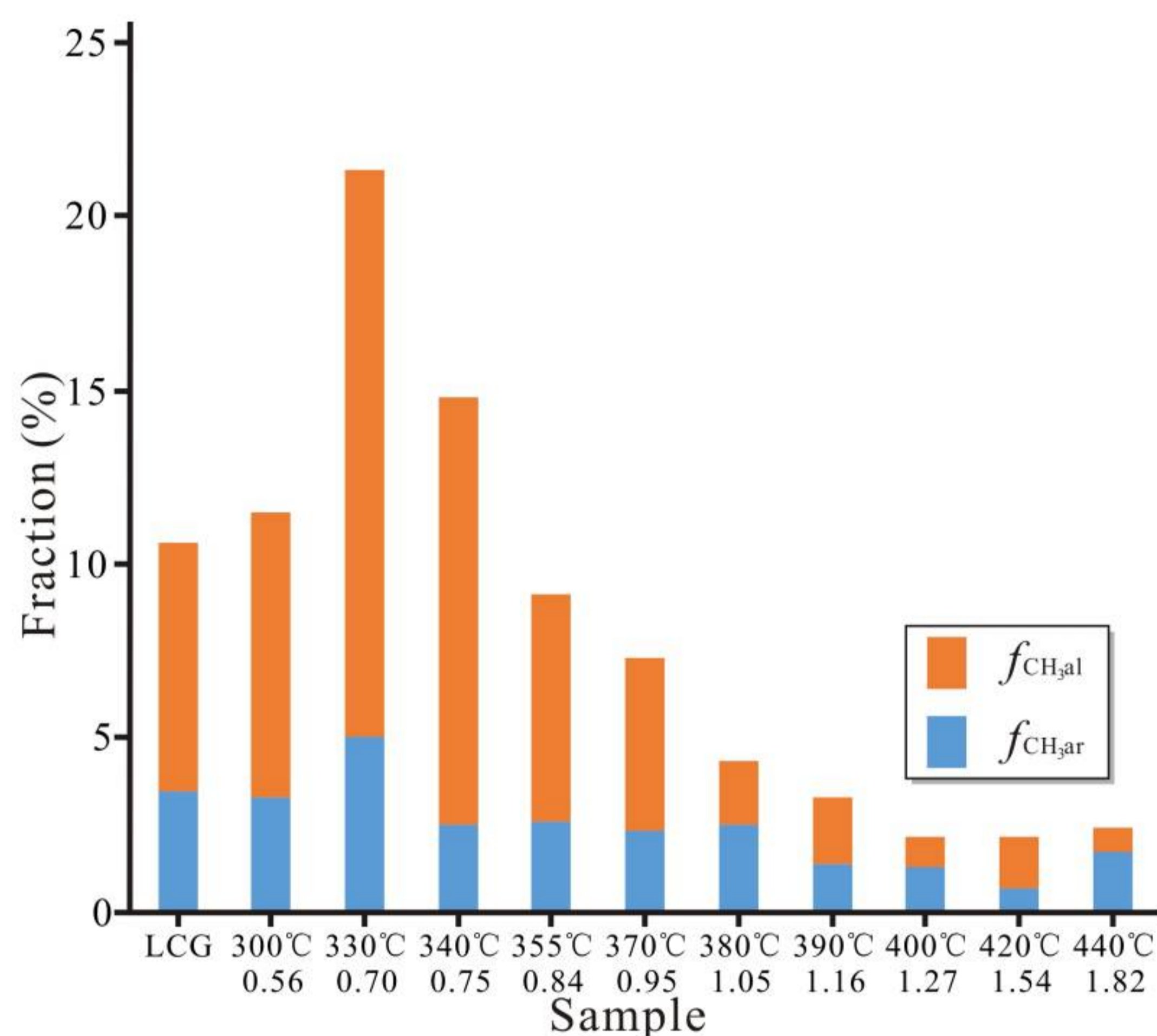


图3 干酪根甲基相对含量随成熟度变化情况

为进一步确定甲基相对含量对分子间相互作用力的影响, 选择了6个C16异构体作为配体开展分子对接研究, 结果表明干酪根与烷烃分子间作用力与烷烃分子甲基数量呈正比 (图4)。

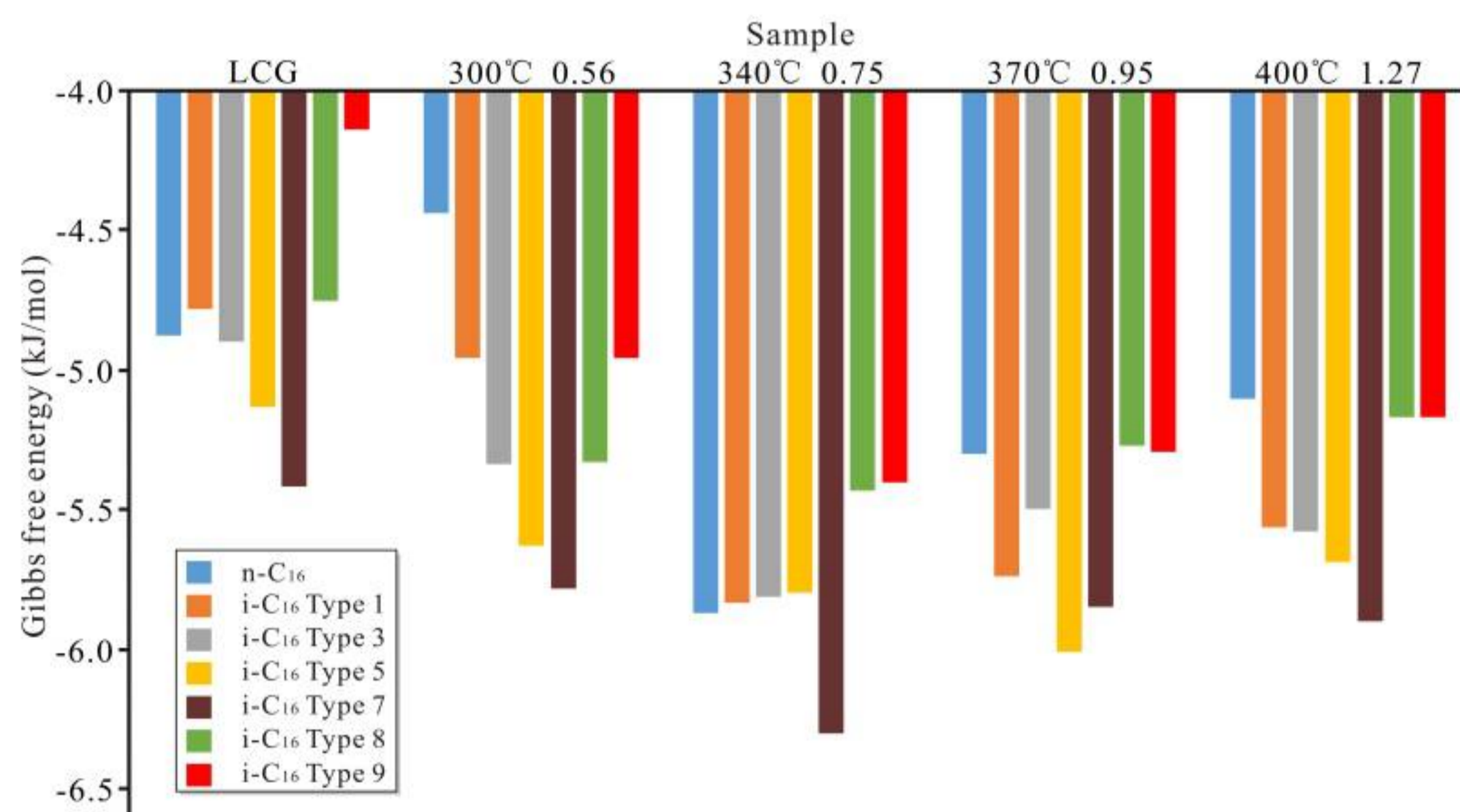


图4 干酪根与异构C16分子对接结果

(图中Type1, 3, 5, 7异构体分子甲基数量分别为3, 5, 7, 9; Type8, 9甲基含量均为4)

上述结果表明, 干酪根与链烷烃发生相互作用的过程中, 分子量及甲基的相对含量是影响分子间作用力的重要因素, 这导致在排烃过程中异构C14-C20化合物倾向于在干酪根中发生富集作用, 而其他的链烷烃则更容易从烃源岩中排出形成油气藏。

研究成果近期发表在期刊《Chemical Geology》。本研究得到了中国科学院战略性先导科技专项A类 (XDA14010102) 的资助。

论文信息:

Tian Liang(梁天), Zhao-Wen Zhan(詹兆文), Yan-Rong Zou(邹艳荣), Xiao-Hui Lin(林晓慧), Yun Shan(单云), Ping'an Peng(彭平安). 2023. Research on type I kerogen molecular simulation and docking between kerogen and saturated hydrocarbon molecule during oil generation. Chemical Geology 617 121263. DOI: 10.1016/j.chemgeo.2022.121263

论文链接

上一篇: 广州地化所: 云南点苍山-哀牢山新元古代花岗岩成因对扬子西南缘元古代地壳熔融机制的指示

下一篇: 广州地化所揭示上寒武统排碧阶SPICE事件的地球化学成因