

# 煤岩构造变形与动力变质作用

琚宜文, 林红, 李小诗, 范俊佳

中国科学院 研究生院 地球科学学院, 北京 100049

Ju Yiwen, Lin Hong, Li Xiaoshi, Fan Junjia

College of Earth Science, Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

**Ju Yiwen, Lin Hong, Li Xiaoshi, et al. Tectonic deformation and dynamic metamorphism of coal. *Earth Science Frontiers*, 2009, 16(1): 158-166**

**Abstract:** Coal is an organic rock which is sensitive to geological environmental factors such as temperature and pressure. Various tectonothermal events of the geological evolution must have caused a series of changes in physical, chemical structures of coal and thus formed different tectonically deformed coals. The effect of tectonic stress would induce the brittle and ductile deformation of coal, as well as its dynamic metamorphism at different degrees. Therefore the research about tectonic deformation and dynamic metamorphism of coal is not only of important scientific significance but also very important for the evaluation in resources of coalbed methane and the prediction of dangerous coal and gas outbursts. Based on the existing research results, different tectonic deformation and dynamic metamorphism in coal have been intensively studied through the  $R_{o,\max}$ , XRD and NMR(CP/MAS+TOSS). Also the mechanism of dynamic metamorphism about coal under tectonic stress has been discussed. The results show that, under the influence of tectonic stress to the brittle deformation of coal, the rapid mechanical friction on the plane of fracture in the brittle deformation of coal can be translated into heat energy causing the changes of its chemical structure and composition of coal; while as to the ductile deformation coal, the accumulation of local regional strain energy can result in the failure of its chemical structure. Thus the dynamic metamorphism of different deformational mechanisms would have taken place.

**Key words:** coal; tectonic deformation; tectonically deformed coal; dynamic metamorphism; mechanism

**摘要:**煤岩是一种对温度、压力等地质环境因素十分敏感的有机岩, 地质演化过程中的各种构造-热事件必然导致煤岩发生一系列物理与化学结构的变化, 并形成不同类型的构造煤。在构造应力作用下, 煤岩不仅发生脆性和韧性变形, 而且还产生不同程度的动力变质作用。因而, 关于煤岩构造变形与动力变质作用的研究不仅具有重要的科学意义, 而且在煤层气资源评价以及煤与瓦斯突出危险性预测方面也具有重要的实际意义。文中在已有研究成果基础上, 通过对构造煤系列  $R_{o,\max}$ 、XRD 和 NMR(CP/MAS+TOSS)等测试和实验方法的对比研究, 深入分析了煤岩不同构造变形和动力变质特征, 进一步探讨了构造应力下煤岩动力变质作用的机理。研究成果表明, 在构造应力作用下, 煤岩脆性变形主要是通过破裂面上快速机械摩擦转化为热能而引起煤岩化学结构与其成分的改变; 而韧性变形煤主要是通过局部区域应变能的积累而引起煤岩化学结构的破坏, 从而发生不同机制的动力变质作用。

**关键词:**煤岩;构造变形;构造煤;动力变质;机理

中图分类号:P618.11;P588.33

文献标志码:A 文章编号:1005-2321(2009)01-0158-09



有机质对温度、压力等地质环境因素十分敏感,实例研究表明,有机质构成的煤岩与一般长英质和碳酸盐类岩石之间存在很大的变形和变质差异。在浅、表构造圈层煤化作用进程中“变质作用”的起始温度仅 50~60 ℃<sup>[1-2]</sup>,大大低于无机岩类变质作用的起点温度。较小的构造应力也足以使煤岩发生明显变形,在地表典型的脆性变形域,煤岩也可呈现强烈流变与糜棱化等韧性变形现象<sup>[3-4]</sup>。多期构造活动中频繁、强烈的构造-热事件必将在煤岩组成和结构中留下明显的标志。在煤岩结构演化作用方面,前人已做了较多工作,一般认为温度对有机质演化起着主导作用,围压延缓有机质的化学反应速率<sup>[5-6]</sup>,而构造应力对有机质演化具有促进作用<sup>[7-15]</sup>;并且认为,高压力尤其是剪切应力是石墨化作用的必要条件,在煤的基本结构单元有序度增强和秩理化过程中,定向压力起关键作用<sup>[2,12,15]</sup>。最近研究成果显示<sup>[3,6-7,15]</sup>,在构造应力作用下,煤岩不仅发生变形作用,而且还影响到煤的大分子结构和化学成分,即产生不同程度的动力变质作用。有些学者<sup>[10,12-13,16-18]</sup>采用傅立叶红外光谱分析(FTIR)、热解成烃实验(Rock-Eval) 和 X 射线衍射(XRD)等技术,对构造变形煤系列和原生结构煤系列进行测试分析对比研究,认为:(1)煤有机分子结构对构造应力十分敏感,在煤化程度相同的条件下,构造煤中脂族结构比原生结构煤脱落快;而稳定程度较高、活化能较大的芳香结构(C=C)则相对富集。(2)在构造应力作用下,煤的大分子结构产生变化,煤中氢发生化学环境转移,使脂肪烃含量相对减少、稳定的芳香烃含量相对增加,促进煤大分子结构的降解。(3)相同煤级的构造煤的热解产烃量和有效碳含量低于原生结构煤,随着变形程度的增加,这一减小趋势愈显著。构造煤的产烃潜力低于原生结构煤这一事实,表明在构造变形期间曾有比同煤级原生结构煤更多的烃类生成,这正是煤动力成烃作用<sup>[18-19]</sup>的有力佐证。

由于煤岩所处的变形变质环境<sup>[10]</sup>与变形机制不同,因而不同的变形机制对煤岩结构的变化有何影响,煤岩动力变质方式与机理有何区别?这是需要深入探讨的问题。本文在已有研究成果的基础上,通过对构造煤系列  $R_{o,max}$ 、XRD 和 NMR(CP/MAS+TOSS)等测试和实验方法的对比研究,深入

分析了煤岩不同构造变形和动力变质特征,进一步探讨了构造应力下煤岩动力变质作用的机理。因而,关于煤岩构造变形与动力变质作用的研究不仅具有重要的科学意义,而且在煤层气资源评价以及煤与瓦斯突出危险性预测方面也具有重要的实际意义。

## 1 煤岩构造变形类型及其变形特征

由于应力作用的性质、方式和强度以及变形变质环境的不同,因而煤岩会发生不同机制和不同程度的变形,并形成不同类型的构造煤。构造煤是在一期或多期构造应力作用下,煤体原生结构、构造发生不同程度的脆裂、破碎或韧性变形或叠加破坏甚至达到内部化学成分和结构变化的一类煤<sup>[20]</sup>。由此可知,构造煤的变形有脆性和韧性之分,而且不同的变形有强有弱。脆性变形是煤体原生结构、构造在构造应力作用下产生大量张裂隙或剪裂隙或破碎,造成煤体切割破坏而形成的碎裂煤,其化学成分和结构也可发生较小变化;韧性变形是在较高构造应力或长期温压作用下煤体发生强烈韧性剪切或流变,可以改变其化学成分和结构,而形成的糜棱煤等。琚宜文等<sup>[20]</sup>以构造煤手标本或钻井煤心为尺度,按煤岩构造变形机制及其结构变化分为 3 个变形序列和 10 类构造煤(表 1)。脆性变形序列包括碎裂煤和片状煤两大类;韧性变形序列包括揉皱煤、糜棱煤和非均质结构煤;脆韧性过渡型为鳞片煤。由于构造应力的作用,脆性变形和韧性变形都不同程度地改变着煤的大分子结构和纳米级孔隙结构,变形程度越强,可能对超微结构的改变就越强烈<sup>[12-13]</sup>。大量研究表明,镜质组反射率  $R_{o,max}$  是煤岩内部分子结构变化的反映,它是反映煤变质程度的重要指标,那么对于不同类型构造煤  $R_{o,max}$  是如何反映变形程度的呢?

表 2 是原生结构煤样和不同类型构造煤样镜质组最大反射率  $R_{o,max}$  测定和 XRD 分析成果<sup>[21]</sup>。从表中可知,  $R_{o,max}$  在原生结构煤和不同类型构造煤中表现出不同的特征。在低煤级变质变形环境中,微观测试结果表明,原生结构煤和不同类型构造煤构造变形弱的区域(正常带)  $R_{o,max}$  相近,处于同一煤级。构造变形对煤岩光片的影响总是由局部区域向

表 1 构造煤结构成因类型  
Table 1 The types of structural-genetic classification of tectonically deformed coals

变形系列	构造煤类型	结构构造	构造裂隙揉皱	破碎程度	微观特征	变形机制和变形环境
脆性变形系列	碎裂煤	条带状结构可见,层状构造保存完好	多向裂隙切割,无明显位移	较坚硬,不易捏碎		
	碎斑煤	原生结构隐约可见,具透镜状构造	多向裂隙,碎斑有相对位移	可捏成1~5 cm的碎块,棱角状	张裂隙、剪裂隙、张剪裂隙、压剪裂隙	挤压或多向的张裂,且张裂作用占主导地位
	碎粒煤	原生结构消失,层理无次序	多向交叉裂隙,颗粒发生旋转	可捏成<1 cm碎块		
	碎粉煤	原生结构消失,呈粉末状	颗粒无明显方向性	可捏成粉末状		强烈挤压破碎带,也可能是鳞片煤后期改造结果
片状煤类	片状煤	条带结构可见,原生构造较好	单向裂隙,面无或较少滑移	可捏成1~5 cm的扁平碎块		挤压或单向的张裂或剪切应变环境
	薄片煤	原生结构难见,层状构造不明显	单向裂隙,面有滑移	可捏成<1 cm碎块		
脆韧过渡型	鳞片煤	原生结构消失,鳞片构造	多向交叉裂隙,颗粒剪切揉皱,可发生旋转	可捏成0.5~1 cm颗粒或小薄片	剪裂隙、劈理	强烈剪切或劈理化应变环境
韧性变形系列	揉皱煤	原生结构消失,具揉皱构造	煤体揉皱	可捏成0.5~1 cm颗粒或小薄片		
	糜棱煤	原生结构消失,具糜棱构造	颗粒定向排列,具流动构造	捏成粉末状	揉皱、S-C构造、眼球状构造、波状消光等	强烈剪切作用或长时间低应力环境变形
	韧性结构煤	原生结构消失,团块状,透镜状	物理变形不明显	较难捏成碎块		在构造作用下,由于蠕变或较高地温背景引起韧性流动

整个区域扩展,在最强烈的构造煤光片上也能观测到正常带<sup>[21]</sup>。正常带的发现表明构造变形较强的煤样在光学显微镜或扫描电子显微镜下也能出现变形弱的微区,这是浅层次脆性变形域中所反映出的特点<sup>[22-25]</sup>。构造应变带是构造变形强的区域。因而在构造煤光片上总能分出正常带和构造应变带,它们的差值能反映构造变形的程度。对于原生结构煤,应当不出现构造应变带,实际上,在煤层中只是构造变形微弱。构造应变带与正常带差值很小, $R_{o,max}$ 仅为0.02%~0.05%。在低煤级变质变形环境中,对于脆性变形煤,由于构造变形达到一定程度,可见构造变形带, $R_{o,max}$ 两带之差为0.11%~0.22%,这表明在构造应力作用下与原生结构煤相比, $R_{o,max}$ 明显增加;韧脆性变形煤构造应变带与正常带 $R_{o,max}$ 差值迅速增加,为0.32%~0.43%;韧性变形煤发生了较强烈的韧性变形,构造应变带与正常带 $R_{o,max}$ 差值急剧增加,达到0.30%~0.68%。由此可见,在低煤级变质变形环境中,低煤级煤由于受到构造应力的作用,脆性变形煤和韧性变形煤光片构造应变带 $R_{o,max}$ 可达到中煤级阶段,也就是说,从脆性变形煤至韧性变形煤, $R_{o,max}$ 急剧增加,它反映了构造变形的强弱程度。在中煤级变质变形

环境中,主要增加了岩浆热力变质作用,提高了煤级,也就是说,由于温度的影响,导致了构造煤正常带 $R_{o,max}$ 的增加,提高了煤的变质程度,因而 $R_{o,max}$ 是反映煤级的重要指标。为了更好的比较构造应力对煤级的影响,在中煤级阶段,不同类型构造煤 $R_{o,max}$ 相近的正常带,由于变形程度的不同,两带 $R_{o,max}$ 差值的变化与低煤级变质变形环境同类型构造煤相一致。高煤级变质变形环境不同类型构造煤构造应变带与正常带 $R_{o,max}$ 差值的变化也反映出这一趋势。从以上分析可知, $R_{o,max}$ 不仅是反映煤变质程度的主要指标,而且,它也可以反映构造煤变程度的变化。

## 2 煤岩动力变质特征

为了有效地区分不同煤级变质变形环境中岩浆活动和构造作用对煤结构参数的影响,对这些不同类型构造煤样进行了XRD分析,并与原生结构煤样进行对比,以获得煤岩变形与结构参数的关系。煤虽然不是典型的结晶物质,但存在着类似晶体的结构,称之为煤的基本结构单元(BSU),是由芳香环层片叠合而成,芳香环层片则主要由芳香核和烃

表 2 原生结构煤与构造煤  $R_{o,\max}$  测定和 XRD 分析结果

Table 2 Results of vitrinite reflectance measurement and X-ray diffraction testing of primary structure coals and tectonically deformed coals

原生结构煤与 构造煤类型	样品号	煤岩 显微成分	正常带 $R_{o,\max}/\%$	构造应变带 $R_{o,\max}/\%$	两带 $R_{o,\max}$ 之差/%	$L_c/\text{nm}$	$L_a/\text{nm}$	$L_a/L_c$
原生结构煤	TY15	镜质组	0.74	0.76	0.02	0.855 1	1.410 9	1.65
	ZXZ11	镜质组	0.76	0.81	0.05	0.890 5	1.451 5	1.63
	BJ10	镜质组	0.80	0.83	0.03	1.016 4	1.616 1	1.59
脆性变形煤	TY10	镜质组	0.74	0.85	0.11	1.255 3	1.833 6	1.46
	QN12	镜质组	0.75	0.87	0.12	1.268 5	1.839 1	1.45
	ZJ01-1	镜质组	0.73	0.95	0.22	0.901 1	1.725 4	1.91
	BJ14	镜质组	0.84	1.03	0.19	1.170 8	1.779 6	1.52
	LL11	镜质组	1.01	1.21	0.20	1.297 6	1.842 6	1.42
脆韧性变形煤	XJ15	镜质组	1.00	1.35	0.35	1.359 8	1.781 3	1.31
	LL01	镜质组	0.97	1.40	0.43	1.364 5	1.899 7	1.39
	BJ11	镜质组	1.11	1.43	0.32	1.368 7	1.820 4	1.33
韧性变形煤	BJ05	镜质组	0.78	1.08	0.30	1.082 7	1.768 4	1.63
	ZXZ04	镜质组	1.14	1.82	0.68	1.473 3	1.975 4	1.27
	LL10	镜质组	1.16	1.75	0.59	1.460 5	1.854 8	1.27
	QN13	镜质组	1.24	1.69	0.45	1.457 8	1.880 6	1.29
脆性变形煤	LH05	镜质组	1.55	1.75	0.20	1.569 4	2.089 5	1.33
	TT10	镜质组	1.69	1.82	0.13	1.573 6	2.092 9	1.31
	TT12	镜质组	1.64	1.87	0.23	1.588 7	2.065 3	1.30
韧性变形煤	LH10	镜质组	1.56	1.95	0.39	1.782 5	2.192 5	1.23
	LH11	镜质组	1.59	2.11	0.52	1.803 1	2.145 7	1.19
脆性变形煤	HZ01	镜质组	2.72	2.97	0.25	2.029 1	2.410 7	1.19
	HZ12	镜质组	2.64	2.81	0.17	2.013 8	2.477 0	1.23
	BS05	镜质组	2.87	3.08	0.21	2.140 5	2.483 0	1.16
韧性变形煤	HZ07	镜质组	2.81	3.59	0.78	2.517 2	2.448 9	0.97
	HZ13	镜质组	2.79	3.35	0.56	2.453 9	2.625 7	1.07
	HZ15	镜质组	2.85	3.46	0.61	2.286 3	2.511 2	1.01

注:表中粗横线的区分表示不同变质变形环境形成的构造煤,细横线的区分表示不同变形系列构造煤,以下同。

的支链及各种官能团组成。低、中煤级阶段含氧官能团、侧链、桥键、氢键较多,结构比较松散,BSU 中叠合的芳香层片较少,芳香层片定向性较差。煤化作用是富碳、去氢、脱氧的过程,一方面侧链和官能团依据键能大小相继裂解析出,形成各种烃类和其他小分子;另一方面,通过芳构化和缩聚作用实现分子重排、密集、有序度增强以及 BSU 增大,最终演变为具三维晶体结构的石墨<sup>[1,26]</sup>。由于煤的大分子结构具有由非晶质向晶质过渡演化性质,主要用于研究固体结晶物质的 XRD 方法也是进行煤的 BSU 分析的有效手段。芳香层片的直径  $L_a(=L_b)$ ,又称单元延展度和 BSU 的层片平均堆砌厚度  $L_c$ ,又称单元堆砌度是描述煤 BSU 的基本参数。

由表 2 可以看出,  $L_a$  从低煤级变质变形环境至高煤级变质变形环境增长缓慢,不同变形机制下形成的构造煤又有差异。总体而言,对于同类型的构造煤,随着温度的增加,  $L_a$  是增加的,但从中煤级变质变形环境以后增加相对较大,这种变化主要反

映了煤化作用中温度因素的变化,应力作用对其影响不大;  $L_c$  从低煤级变质变形环境至高煤级变质变形环境增长较大,这主要反映了构造煤结构不同应力效应的差异。尽管温度因素对结构参数  $L_c$  的增加起重要作用,但应力作用也是明显的。总体趋势是,从低煤级变质变形环境至高煤级变质变形环境  $L_c$  增加较快,而且不同变形程度的构造煤差别较大。在低煤级变质变形环境中,由较弱变形的脆性变形的碎裂煤、片状煤和韧性变形的揉皱煤至较强变形的鳞片煤和糜棱煤,  $L_c$  变化明显,而且,韧性变形构造煤比脆性变形构造煤  $L_c$  变化更大一些。高煤级变质变形环境中,碎裂煤和糜棱煤处于同一变质变形环境,温压条件相差不大,  $L_a$  变化不大,但变形机制和变形程度不同,  $L_c$  变化较大,这正是构造应力作用下的结果。从  $L_a/L_c$  中也可看出,从低煤级变质变形环境至高煤级变质变形环境,由于变质变形环境的不同,即温度的增加和应力的增强,总体上其比值迅速减少。与不同变质变形环境

同一类型构造煤相比,温度的变化对其比值虽有一定影响,但应力强弱的变化对其比值也是有较大影响的。应力增强,  $L_a/L_c$  相对减少。因此煤基本结构单元延展度  $L_c$  以及  $L_a/L_c$  参数的变化可以区分温度和应力对变质和变形环境的影响, 总体上反映了构造变形强弱的变化。

通过样品的<sup>13</sup>C NMR (CP/MAS+TOSS) 的分峰模拟和数据处理, 获得不同变质变形环境不同类型构造煤中各种碳结构及官能团的相对含量如表 3<sup>[21]</sup>。在同一变质变形环境中, 从脆性变形煤至韧性变形煤芳碳与脂碳峰半高宽之比  $H_{f_a}/H_{f_{al}}$  明显增高, 但在高煤级变质变形环境,  $H_{f_a}/H_{f_{al}}$  增加的幅度更高些; 在不同煤级变质变形环境中, 芳碳与脂碳峰半高宽之比  $H_{f_a}/H_{f_{al}}$  也随温度的增高而增高。由此可见,  $H_{f_a}/H_{f_{al}}$  是反映温度和应力效应的指标。对于芳族率和脂碳率的变化作如下分析和讨论:

(1) 芳碳率的应力效应。芳族碳的结构中, 脆性变形煤芳碳率  $f_a$  为 0.780~0.791, 脆韧性变形煤  $f_a$  为 0.791~0.795, 由脆性变形煤至脆韧性变形煤,  $f_a$  增加; 韧性变形煤  $f_a$  为 0.778 和 0.809, BJ05 样  $f_a$  偏低, 是因为该煤样变形较弱, 在宏观尺度上出现强烈揉皱, 而在显微镜下韧性变形不明显所致。由此可见, 随着构造变形的增强, 由脆性变形至韧性变形, 芳碳率越来越大, 说明在构造应力的作用下, 煤结构的芳构化进程不断加快, 有序化程度也在不断提高。揉皱煤尽管发生了韧性变形, 但对其内部化学结构影响较小, 主要是改变了煤体的物理结构。芳氢率  $f_a^H$  在  $R_{o,max} = 0.76\% \sim 4.00\%$  区间内是逐渐增加的, 即氢原子与碳相连的比例是递增的, 这是由于氧、氮和硫等杂原子几乎均存在于杂环结构和桥键之中, 而氢则主要以芳氢的形式存在, 从而导致了氢接芳碳  $f_a^H$  的增大。桥接芳碳  $f_a^B$  随着煤级的提高也不断增大<sup>[8]</sup>。氢接芳碳和桥接芳碳  $f_a^{H,B}$  的增加, 反映了芳构化程度的增高和芳香稠环的增大, 即原先较小的芳香稠环通过新的桥接芳碳连接起来形成延展度更大的缩合芳香稠环单元。在不同类型构造变形煤中, 脆性变形煤  $f_a^{H,B}$  为 0.572~0.598, 至韧性变形煤  $f_a^{H,B}$  增至 0.610~0.625, 韧性煤明显分为两种情况, 揉皱变形煤  $f_a^{H,B}$  为 0.563, 数值较小与  $f_a$  的演化一致, 而韧性变形较强烈的糜棱煤  $f_a^{H,B}$  明显增加, 这表明强烈韧性剪切对构造煤的结构成分改变较大而形成的, 因此从脆性变形到韧性变形, 除揉皱煤外,

总体上  $f_a^{H,B}$  也是增加的。

(2) 脂碳率的应力效应。脆性变形煤中脂碳率  $f_{al}$  为 0.185~0.206, 脂碳率较高, 随着构造变形的增强, 脂碳率有减少的趋势。但韧性变形较弱的揉皱煤有着较高的脂碳率, 这与较高芳碳率演化情况相反。

芳甲基碳 ( $f_{al}^3$ ) 与脂甲基碳 ( $f_{al}^a$ ) 的演化极富规律性。在不同类型构造煤中, 仅见脆性变形煤的脂甲基碳  $f_{al}^a$  为 0.033, 其他构造煤几乎都消失。这说明由于构造应力作用, 脂甲基碳最不稳定, 容易从脂族结构中脱落下来。脆性变形煤中  $f_{al}^3$  为 0.140~0.172, 随着构造变形的增强, 脆韧性变形煤  $f_{al}^3$  为 0.171, 与脆性变形煤相比有所增加。韧性变形较弱的揉皱煤  $f_{al}^3$  也较高, 为 0.180, 韧性变形较强的构造煤有所降低, 这说明构造应力的作用对  $f_{al}^3$  的影响较小, 且甲基碳较稳定, 在脂族结构中甲基的脱落比脂甲基、亚甲基和次甲基要缓慢得多。

亚甲基碳、次甲基碳和季碳的应力效应很明显。从脆性变形至韧性变形, 亚甲基碳  $f_{al}^2$  逐渐减少, 韧性变形煤中已消失。这是由于在构造变形增强时, 亚甲基碳逐步从脂碳结构侧链中脱落下来。次甲基碳和季碳已经消失或含量很低, 图谱中反映不明显。

由表 3 可知, 在中高变质变形环境中, 脂碳率和芳碳率的变化更明显。

由于 XRD 能反映煤中基本结构单元(BSU) 的变化, 因而可以用来分析构造应力作用下 BSU 各种参数的变化特征。当应力影响到有机大分子结构层次时,  $L_c$  的增加以及  $L_a/L_c$  的减少更可能促进 BSU 的整体定向性增长, 加速缩聚过程, 而在热力作用下, BSU 的增大却是随机的<sup>[10]</sup>。在一定程度上, BSU 参数  $L_a/L_c$  的变化反映了应力作用下的缩聚程度。同时, NMR 研究表明, 在 BSU 缩聚过程中, 应力作用影响到煤的分子结构, 造成芳香结构上的官能团、侧链等结合能较低的化学键断裂, 从而引起煤化学结构成分的变化。煤的变形机制不同, 煤化学结构成分变化程度也存在不同, 因而煤岩发生了不同程度的动力变质作用。

煤中有机大分子结构中不同化学键的分解能存在较大差异<sup>[18]</sup>, 芳烃苯环共轭双键(C=C) 的分解能是 C—H 键和烷烃 C—C 键的分解能的 5~8 倍<sup>[6]</sup>。这就为构造应力(尤其是剪切应力)破坏相对薄弱的化学键, 以烷基侧链脱落、大分子链烃断裂等形式实现应力降解, 提供了可能性。构造煤侧链

表3 原生结构煤与构造煤中各种碳官能团的相对含量

Table 3 The relative contents of different carbon structures and functional groups of primary structure coals and tectonically deformed coals

原生结构煤与 构造煤类型	样品号	煤岩显 微成分	正常带 $R_{o,max}/\%$	构造应变带 $R_{o,max}/\%$	两带 $R_{o,max}$ 之差/%	$H_f_a/H_{f_{al}}$	$f_a$	$f_a^{H,B}$	$f_a^{COOH}$	$f_a^{C=O}$	$f_{al}$	$f_{al}^2$	$f_{al}^3$	$f_{al}^a$
原生结构煤	TY15	镜质组	0.74	0.76	0.02	2.435	0.765	0.498	0.004	0.025	0.223	0.018	0.154	0.034
	BJ10	镜质组	0.80	0.83	0.03	2.427	0.769	0.511	0.005	0.022	0.227	0.019	0.155	0.036
脆性变形煤	TY10	镜质组	0.74	0.85	0.11	2.593	0.780	0.572	0.003	0.011	0.206	0.017	0.140	0.033
	ZJ01-1	镜质组	0.73	0.95	0.22	3.109	0.791	0.598	0.003	0.021	0.185	—	0.172	—
	ZJ01-2	镜质组	0.73	0.95	0.22	2.830	0.785	0.577	0.003	0.016	0.196	0.016	0.165	—
	LL11	镜质组	1.01	1.21	0.20	2.903	0.789	0.585	0.004	0.013	0.194	0.006	0.172	—
脆韧性变形煤	XJ15	镜质组	1.00	1.35	0.35	3.157	0.791	0.610	0.004	0.010	0.192	0.010	0.165	—
	LL01	镜质组	0.97	1.40	0.43	3.419	0.795	0.625	0.006	0.008	0.191	0.012	0.171	—
韧性变形煤	BJ05	镜质组	0.78	1.08	0.30	2.609	0.778	0.563	0.003	0.014	0.205	0.010	0.180	—
	ZXZ04	镜质组	1.14	1.82	0.68	3.214	0.809	0.627	0.003	—	0.188	—	0.168	—
脆性变形煤	LH05	镜质组	1.55	1.75	0.20	3.191	0.802	0.678	0.002	0.010	0.186	—	0.167	—
	TT10	镜质组	1.69	1.82	0.13	3.187	0.799	0.652	0.003	0.009	0.190	—	0.169	—
韧性变形煤	LH10	镜质组	1.56	1.95	0.39	3.784	0.836	0.697	0.002	0.006	0.152	—	0.136	—
	LH11	镜质组	1.59	2.11	0.52	3.851	0.841	0.725	0.002	0.004	0.159	—	0.142	—
脆性变形煤	HZ01	镜质组	2.72	2.97	0.25	6.200	0.873	0.680	—	—	0.127	—	0.087	—
	BS05	镜质组	2.87	3.08	0.21	5.755	0.839	0.673	0.003	—	0.130	—	0.111	—
韧性变形煤	HZ07	镜质组	2.81	3.59	0.78	13.800	0.925	0.855	0.002	—	0.073	0.012	0.048	—
	HZ15	镜质组	2.85	3.46	0.61	11.687	0.909	0.828	0.002	—	0.085	—	0.068	—

和官能团的红外吸收峰弱而芳核吸收峰强<sup>[13,17]</sup>、自由基浓度增大(EPR)<sup>[10]</sup>、脂碳率低和芳碳率高(<sup>13</sup>C NMR)<sup>[21]</sup>、热解生烃潜力相对较低、氯仿抽物产率高<sup>[7]</sup>，这些特征表明，构造煤相对于原生结构煤而言，具有超前演化性质，侧链和官能团加速脱落，伴随着变形过程，生成并排出了一定量的烃类。核磁共振波谱也表明构造煤的CH<sub>3</sub>—和—CH<sub>2</sub>—含量比原生结核煤的低，并且更快地消失，这进一步证实动力变质中脱CH<sub>3</sub>—和—CH<sub>2</sub>—的主导作用。对于中高变质程度构造煤，在韧性变形煤中，芳碳率增加较快，而脂碳率降低较快。由此可见，构造应力的作用对煤的化学结构影响较大，而且影响程度超过脆性变形煤，其芳构化和环缩合程度明显增高，这也表明韧性变形煤的动力变质作用要强于脆性变形煤。

### 3 煤岩动力变质作用机理

煤的动力变质作用程度及变形机制是长期争论的问题。早在1925年，怀特就用动力变质来解释美国东部煤的变质问题，早期一些苏联学者也强调煤的动力变质。随着煤田地质研究的深入，一些传

统“典型的”动力变质实例几乎被否定<sup>[27]</sup>。目前，比较公认的观点是，煤的动力变质作用是加在煤变形时原有煤级之上并分布在有限的强烈变形范围内。除了个别实例，如落基山脉逆冲断层内<sup>[28]</sup>和瑞士阿尔卑斯山局部地区的煤或碳质碎屑反射率<sup>[29]</sup>有明显升高外，一般动力变质作用很难引起煤级的大幅度和大面积的升高，其影响范围、影响程度都很有限。

综合国内外现有研究成果，可以将构造应力(构造作用)影响有机质动力演化的方式与机理概括为摩擦热观点、应变能观点和力化学观点等3种。

摩擦热观点认为，构造应力作用于煤体使之发生机械位移，产生摩擦热，提供了促进煤化作用的热能。M. Teichmüller 和 R. Teichmüller<sup>[27]</sup>在解释Luhrt 和 Sutan 逆断层带内煤级局部升高的原因时指出，这是断层运动过程中所产生的磨擦热所导致的。同时，因为断层运动速度一般不快，所产生的磨擦热不容易大量积累，因此，这种变质作用的影响范围很小，引起的煤级变化幅度不大。Bustin<sup>[28]</sup>和 Suchy 等<sup>[29]</sup>在解释落基山脉山脉逆断面上的无烟煤化作用和阿尔卑斯山局部地区煤因构造剪切引起光学

石墨化作用时,认为磨擦生热是产生上述结果的原因。Bustin<sup>[28]</sup>认为,由于粘滑断层作用产生瞬间升温作用,最大温度可达到350~650℃。我国学者提出的动力变质作用也以煤层受力碎裂、流动,机械能转变为热能作为促进煤变质的原因<sup>[30]</sup>。摩擦热观点实质上依然是温度因素,只是热能来自构造应力驱动煤岩位移摩擦生成。

应变能观点认为,构造应力的应变能或动能提供了有机质演化所需的能量,机械能促进物质活化直接导致有机质发生化学反应,其间没有热能的参与。Ross等<sup>[14]</sup>和Bustin等<sup>[26]</sup>提出了干酪根石墨化作用的应变能转化机理。在剪切应力作用下,煤层剪切蠕变产生的应变能使石墨化作用所需的热活化能降低近两个数量级,实验表明,在简单剪切条件下,高挥发份烟煤在800℃即可发生石墨化作用。而在共轴试验和静水压试验时,石墨化作用需要全面提高温度和应变量。因此简单剪切是石墨化作用的最佳应力条件,所需热活化能最低。在简单剪切条件下,应变能引起了煤中孔壁的崩落和基本结构单元(BSUs)的转向和定向排列,以形成石墨。此外,Suchy等<sup>[29]</sup>报道的光学石墨实际上是一种典型的应变石墨。曹运兴等<sup>[7]</sup>分析认为构造煤的动力变质作用的能源主要是应变能。应变能特别是简单剪切条件下的应变能在800℃时可以使高挥发份烟煤发生石墨化作用,应变能也完全可能在正常地温场中使烟煤发生所谓脱烷基侧链和芳核增升等动力变质作用。

力化学观点由前苏联 Барамбай 和 Амрский 等提出。他们以有机高分子聚合物在机械作用下的化学转化为依据,认为微观剪切作用集中在个别链段,超过临界应力使化学键断裂,有机大分子发生裂解产生小分子烃类<sup>[31]</sup>。刘文汇等<sup>[31]</sup>开展的低温剪切应力成烃模拟,发现腐殖型有机质发生了大分子烃类向小分子烃类的转化。张玉贵等<sup>[32-33]</sup>应用力化学理论和煤结构分析方法探讨煤的力化学作用机制,认为地质构造水平挤压应力是煤力化学作用的重要能源,其挤压剪切作用,不仅使煤发生变形和破坏,而且使煤结构发生一系列的化学效应,煤结构发生聚合、异构、重排、芳构,形成更大分子网络结构,在短时间内分子断裂、分解形成液态烃(低分子化合物)和气态烃(瓦斯)。这种构造煤是力化学作用的产物。煤力化学作用发生不仅加速煤的变质过程,而且加速烃的转化,有利于低分子化合物和瓦

斯的富集,这也是煤岩动力变质成烃作用的主要原因。

综合本文的各种实验结果以及构造应力(构造作用)影响有机质动力演化的程度、方式与机理,在煤岩构造变形过程中脆性变形的脱侧链可能按以下方式进行的:煤岩受到应力作用时,发生快速脆性破裂或破碎。在破裂穿过的地方,煤岩发生机械摩擦并受热,煤芳核发生转向或位移,刚性芳核的整体旋转再定位必然引起核-链间键位的剪切或拉伸应变,以至于最后脱落成烃,同时形成稳定的芳烃自由基。脱链后的芳核与其他芳环层叠合,使  $L_c$  升高。因为在脆性变形阶段,在没有大量脱侧链之前,芳核在  $L_c$  方向上的有效拼接和定向是不容易发生的,因此,这一阶段的动力变质主要以生烃和  $L_c$  增加以及  $L_a/L_c$  的相对减少为主,  $R_{o,max}$  和  $L_c$  和  $L_a/L_c$  没有发生明显变化,  $f_{al}$  相对较高,  $f_a$  较低,因而,其化学结构和成分在一定程度上发生变化,但变化不大。在煤岩韧性变形阶段,一部分侧链已经脱落,构造煤的动力变质作用以芳烃的脱氢和缩合反应为主。应力作用导致煤结构中应变能的逐步积聚,并由应变区域的局部向整体扩展<sup>[10,12]</sup>,因此,这一阶段的动力变质主要以煤芳核聚合和  $L_c$  增加以及  $L_a/L_c$  的减少为主,  $R_{o,max}$  和  $L_c$  以及  $L_a/L_c$  发生明显变化,而且  $f_{al}$  相对较低,  $f_a$  较高。因此,其化学结构和成分发生了较大变化。

## 4 结论

本文在煤岩构造变形与动力变质作用方面已有研究成果的基础上,通过  $R_{o,max}$ 、XRD 和 NMR (CP/MAS+TOSS) 等测试方法对不同变形机制构造变形煤系列进行了对比研究,获得如下主要认识:

(1) 在构造应力作用下,构造煤的变形有脆性和韧性之分,并且可形成不同变形机制、不同类型构造煤。煤岩不仅发生各种变形作用,而且还产生不同程度的动力变质作用。镜质组反射率  $R_{o,max}$  是反映煤变质程度的主要指标,同时,它也可以反映构造煤变形程度的变化。

(2) 随着构造变形的增强,煤岩侧链和官能团加速脱落,生成并排出了一定数量的烃类;其芳碳率增高,脂碳率减少。在韧性变形煤中,构造应力的作用对煤的化学结构影响较大,影响程度超过脆性变

形煤,其芳构化和环缩合程度明显增高,也即韧性变形煤的动力变压作用强于脆性变形煤。

(3)在脆性变形过程中,煤岩受到应力作用发生快速破裂或破碎,破裂面发生机械摩擦并受热,煤芳核发生转向或位移, $R_{o,\max}$ 和单元堆砌度 $L_c$ 以及单元延展度与单元堆砌度之比 $L_a/L_c$ 没有发生明显变化,脂碳率 $f_{al}$ 相对较高,芳碳率 $f_a$ 较低,这类煤的化学结构在一定程度上变化,但变化不大;在韧性变形阶段,应力作用导致煤结构中应变能的逐步积聚,并由应变区域的局部向整体扩展,其动力变质主要以煤岩芳核聚合和 $L_c$ 增加为主, $R_{o,\max}$ 和单元堆砌度 $L_c$ 以及单元延展度与单元堆砌度之比 $L_a/L_c$ 发生明显变化,而且脂碳率 $f_{al}$ 相对较低,芳碳率 $f_a$ 较高,这类煤的化学结构和成分发生较大变化。

## References:

- [ 1 ] Yang Q. Coal Metamorphism of China[M]. Beijing: China Coal Industry Press, 1996(in Chinese).
- [ 2 ] Stach E, Mackowsky M T H, Teichmüller M, et al. Stach's Textbook of Coal Petrology[M]. Berlin: Gebruder Borntraeger, 1982.
- [ 3 ] Ju Y W, Wang G L, Jiang B, et al. Microcosmic analysis of ductile shearing zones of coal seams of brittle deformation domain in superficial lithosphere[J]. Science in China: Series D, 2004, 47(5): 393-404.
- [ 4 ] Cao D Y, Zhang S R. Deformation-metamorphic types of high-rank coal in northern slope of the Dabie mountains, central China[J]. Chinese Journal of Geology, 2003, 38(4): 470-477(in Chinese).
- [ 5 ] Hower J C. Observations on the role of the Bernice coal field (Sullivan County, Pennsylvania) anthracites in the development of coalification theories in the Appalachians[J]. Int J of Coal Geol, 1997, 33(2): 95-102.
- [ 6 ] Cao D Y, Li X M, Zhang S R. The influence of structural deformation on coalification-mechanism of stress chemistry degradation and stress condensation[J]. Science in China: Series D, 2006, 36(1): 59-68.
- [ 7 ] Cao Y X, Mitchell G D, Davis A, et al. Deformation metamorphism of bituminous and anthracite coals from China[J]. Int J Coal Geol, 2000, 43: 227-242.
- [ 8 ] Jiang B, Qin Y. Evolution Mechanism of Structure of Deformed Coals and Its Geological Significance[M]. Xuzhou: China University of Mining and Technology Press, 1998(in Chinese).
- [ 9 ] Cao Y X, Davis A, Liu R X, et al. The influence of tectonic deformation on some geochemical properties of coals—A possible indication of outburst potential[J]. Int J Coal Geol, 2003, 53: 69-79.
- [10] Ju Y W, Jiang B, Wang G L, et al. Structure and Reservoir Property of Structural Coal[M]. Xuzhou: China University of Mining and Technology Press, 2005(in Chinese).
- [11] Ju Y W, Jiang B, Hou Q L, et al. Structural evolution of nano-scale pores of tectonic coals in southern north China and its mechanism[J]. Acta Geologica Sinica, 2005, 79(2): 269-285(in Chinese).
- [12] Ju Y W, Jiang B, Hou Q L, et al. Nano-scale deformation of coal structure and the relation with the metamorphic and deformed environment[J]. Chinese Science Bulletin, 2005, 50(16): 1784-1795.
- [13] Ju Y W, Jiang B, Hou Q L, et al. FTIR spectroscopic study on the stress effects of compositions of macromolecular structure in tectonically deformed coals[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2005, 25(8): 1216-1220(in Chinese).
- [14] Ross J V, Bustin R M. The role of strain energy in creep graphitization of anthracite[J]. Nature, 1990, 343: 58-60.
- [15] Wilks K R, Mastalerz M, Bustin R M, et al. The role of shear strain in the graphitization of a high-volatile bituminous and anthracite coal[J]. Int J Coal Geol, 1993, 22: 247-277.
- [16] Cao D Y, Li X M, Wei Y C, et al. Study on pyrogenation hydrocarbon generation character of deformed coal and undeformed coal[J]. Coal Geology and Exploration, 2005, 33(4): 39-41(in Chinese).
- [17] Li X M, Cao D Y, Zhang S R, et al. Contrast study on the micro-FTIR characters between deformed and undeformed coals[J]. Coal Geology of China, 2005, 17(3): 9-11(in Chinese).
- [18] Cao Y X. Tectonically Deformed Coal: Its Dynamic Metamorphism and Mining Hazards[D]. Beijing: Peking University, 1999(in Chinese).
- [19] Zhao Z G, Chen Z P, Yang L W. Preliminary study on hydrocarbon gas generation of tectonic coal dynamometamorphism[J]. Journal of Jiaozuo Institute of Technology, 1998, 17(1): 26-29(in Chinese).
- [20] Ju Y W, Jiang B, Hou Q L, et al. The new structure-genetic classification system in tectonically deformed coals and its geological significance[J]. Journal of China Coal Society, 2004, 29(5): 513-517(in Chinese).
- [21] Ju Y W, Jiang B, Hou Q L, et al.  $^{13}\text{C}$  NMR spectra of tectonic coals and the effects of stress on structural components [J]. Science in China: Series D, 2005, 48(9): 1418-1437.
- [22] Sun Y, Suzuki T. The rock rheology in the fault zone of the shallow layers[J]. Journal of Nanjing University, 1991, 27(2): 332-343(in Chinese).

- [23] Aller J S, Baoitida F. Anatomy of the Mondongo Nappe based shear zone[J]. *J Struct Geol*, 1993, 15(1): 1405-1419.
- [24] Sun Y, Shen X Z, Suzuki T. Study on ductile deformation domain of the simple shear in rocks—Taking brittle faults of the covering strata in the southern Jiangsu area as an example [J]. *Science in China: Series B*, 1992, 35(12): 1512-1520.
- [25] Liu J L, Yu B X, Weber K. Coexisting brittle-ductile fracturing mechanisms in fault zones of the upper crust level[J]. *Chinese Science Bulletin*, 1999, 44(22): 2107-2112.
- [26] Bustin R M, Ross J V, Rouzaud J N. Mechanisms of graphite formation from kerogen: Experimental evidence[J]. *Int J Coal Geol*, 1995, 28: 136-151.
- [27] Teichmüller M, Teichmüller R. Geological causes of coalification[J]. *Coal Sci Adv Chem Ser*, 1966, 55: 133-155.
- [28] Bustin R M. Heating during thrust faulting in the Rocky Mountain: friction or fiction[J]? *Tectonophysics*, 1966, 95: 309-328.
- [29] Suchy V, Frey M, Wolf M. Vitrinite reflectance and shear-induced graphitization in orogenic belts: A case study from the Kandersteg area, Helvetic Alps, Switzerland[J]. *Int J Coal Geol*, 1997, 34: 1-20.
- [30] Han D X, Ren D Y, Wang Y B, et al. *Coal Petrology of China*[M]. Xuzhou: China University of Mining and Technology Press, 1996(in Chinese)
- [31] Liu W H, Xu Y C, Zhang S C, et al. A new kind of mechanism for hydrocarbon generated: Mechanochemical function and experimental prove [J]. *Acta Sedimentologica Sinica*, 2000, 18(2): 314-318(in Chinese).
- [32] Zhang Y G, Zhang Z M, Xie K C. Coal mechanochemistry action in coal evolution process and tectonic coal structure [J]. *Journal of Henan Polytechnic University*, 2005, 24(2): 95-99(in Chinese).
- [33] Zhang Y G, Zhang Z M, Zhang X B. Mechanochemical action mechanism of tectonically deformed coal evolvement[J]. *Coal Geology of China*, 2008, 20(10): 11-21(in Chinese).

## 参考文献:

- [ 1 ] 杨起. 中国煤变质作用[M]. 北京: 煤炭工业出版社, 1996.
- [ 4 ] 曹代勇, 张守仁. 大别山北麓高煤级煤的变形-变质类型[J]. *地质科学*, 2003, 38(4): 470-477.
- [ 8 ] 姜波, 秦勇. 变形煤的结构演化机理及其地质意义[M]. 徐州: 中国矿业大学出版社, 1998.
- [10] 琚宜文, 姜波, 王桂梁, 等. 构造煤结构及储层物性[M]. 徐州: 中国矿业大学出版社, 2005.
- [11] 琚宜文, 姜波, 侯泉林, 等. 华北南部构造煤纳米级结构演化特征及作用机理[J]. *地质学报*, 2005, 79(2): 269-285.
- [13] 琚宜文, 姜波, 侯泉林, 等. 构造煤结构成分应力效应的傅立叶变换红外光谱研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2005, 25(8): 1216-1220.
- [16] 曹代勇, 李小明, 魏迎春, 等. 构造煤与原生结构煤的热解成烃特征研究[J]. *煤田地质与勘探*, 2005, 33(4): 39-41.
- [17] 李小明, 曹代勇, 张守仁, 等. 构造煤与原生结构煤的显微傅立叶红外光谱特征对比研究[J]. *中国煤田地质*, 2005, 17(3): 9-11.
- [18] 曹运兴. 构造煤的动力变质作用及其灾害性[D]. 北京: 北京大学, 1999.
- [19] 赵志根, 陈资平, 杨陆武. 浅析构造煤动力变质作用的生烃问题[J]. *焦作工学院学报*, 1998, 17(1): 26-29.
- [20] 琚宜文, 姜波, 侯泉林, 等. 构造煤结构-成因新分类及其地质意义[J]. *煤炭学报*, 2004, 29(5): 513-517.
- [22] 孙岩, Suzuki T. 浅层位断裂带中岩石流变[J]. *南京大学学报*, 1991, 27(2): 332-343.
- [30] 韩德馨, 任德贻, 王延斌, 等. *中国煤岩学*[M]. 徐州: 中国矿业大学出版社, 1996.
- [31] 刘文汇, 徐永昌, 张守春, 等. 一种新的成烃机制——力化学作用及其实验证据[J]. *沉积学报*, 2000, 18(2): 314-318.
- [32] 张玉贵, 张子敏, 谢克昌. 煤演化过程中力化学作用与构造煤结构[J]. *河南理工大学学报*, 2005, 24(2): 95-99.
- [33] 张玉贵, 张子敏, 张小兵, 等. 构造煤演化的力化学作用机制[J]. *中国煤炭地质*, 2008, 20(10): 11-21.