新研究揭示干酪根对饱和烃吸附能力的演化特征

作者：writer 来源：科学网

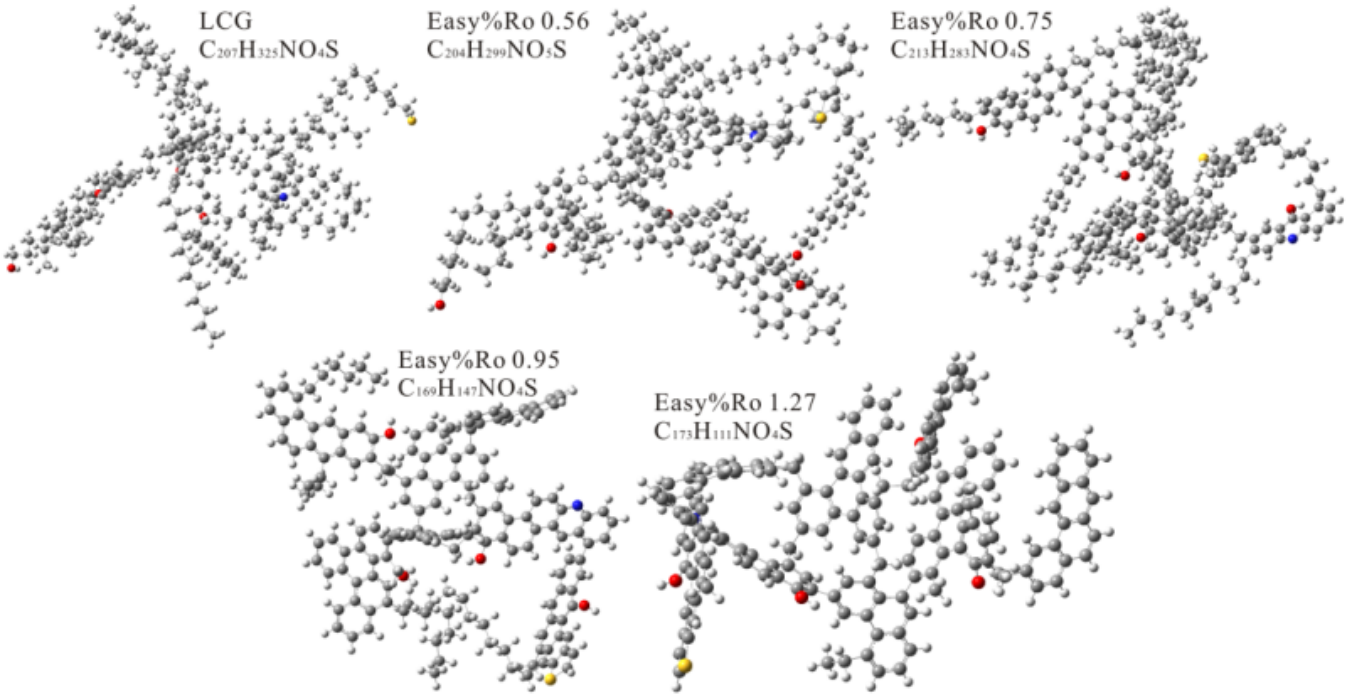
本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/22654.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

新研究揭示干酪根对饱和烃吸附能力的演化特征。

在中国科学院战略性先导科技专项A类的资助下，中国科学院广州地球化学研究所博士后梁天在研究员邹艳荣和中国科学院院士彭平安的指导下，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。相关研究近日发表于Chemical Geology。

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。



下马岭干酪根三维分子模型。梁天 供图

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的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。

研究人员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。

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主要阶段：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。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。

为进一步确定甲基相对含量对分子间相互作用力的影响，研究人员选择了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。

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。(来源：中国科学报 朱汉斌)

相关论文信息：https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2022.121263

作者：梁天等 来源：《化学地质学》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发