

# 应用红外光谱法 划分生油岩有机质类型

蒙 琪 孙启邦

(地质矿产部第三石油普查探勘大队)

生油岩有机质类型或性质对其生油潜力有重大的影响。笔者选用了松辽盆地白垩系青山口组一段和鄂尔多斯盆地北部上古生界中石炭系羊虎沟组、上石炭系太原组及下二叠系山西组等生油岩共计60个样品,应用红外光谱法探讨有机质类型,并提出烷芳基团结构比( $\Sigma R_{cm}^{-1}/\Sigma A_{rcm}^{-1}$ )作为有机质类型的判别指标。

## 一、沥青A的特征吸收分类及其有关计算

生油岩沥青A在红外光谱图中出现众多的吸收峰。笔者对鄂尔多斯盆地北部30个样品的20个变量(其中有14个主要吸收峰),采用对应分析等多元统计分析方法进行了电算处理。

所谓对应分析就是把R型因子分析(研究变量间的相互关系)和Q型因子分析(研究样品间的相互关系)在某种标准化的意义上统一考虑而形成的一种特征组合方法。

结果表明(表1、图1),14个特征吸收峰(变量)可以明显分为三大基团结合类型,即饱和烃结构、芳香烃结构及杂原子结构类型。这三大基团结合类型的划分及其化学解释参见表2。

依据兰柏-比耳定律,采用分段切线法计算所需吸收峰的吸光度。为了消除红外分析中取样量不等的影晌,笔者对计算出的吸光度值进行了变量总和和标准化处理。

基团结合类型的吸光度总和计算方法如下:

(1) 饱和烃结构类型吸收峰吸光度总和

$$\Sigma R_{cm}^{-1} = D_{2920cm}^{-1} + D_{2860cm}^{-1} + D_{1460cm}^{-1} + D_{1380cm}^{-1} + D_{720cm}^{-1}$$

(2) 芳香烃结构类型吸收峰吸光度总和

$$\Sigma A_{rcm}^{-1} = D_{3030cm}^{-1} + D_{1600cm}^{-1} + D_{860cm}^{-1} \\ + D_{810cm}^{-1} + D_{740cm}^{-1}$$

对应分析R型因子载荷系数表

表 1

变量序号	变量 cm <sup>-1</sup>	F <sub>1</sub>	F <sub>2</sub>	F <sub>3</sub>	F <sub>4</sub>
1(x <sub>1</sub> )	3030	-0.5315	-0.3868	1.3517	-0.1411
2(x <sub>2</sub> )	2920	1.7528	-0.6656	0.9251	-0.3001
3(x <sub>3</sub> )	2860	1.7438	-0.2449	1.2434	-0.0721
4(x <sub>4</sub> )	1700	-0.0979	-1.8612	-0.8884	2.5123
5(x <sub>5</sub> )	1600	-1.1253	0.2750	-0.0489	0.0946
6(x <sub>6</sub> )	1460	0.4092	2.1508	0.7247	1.4546
7(x <sub>7</sub> )	1380	0.2224	1.7739	1.4996	1.4558
8(x <sub>8</sub> )	1280	-0.0508	-1.1483	-0.7062	0.4033
9(x <sub>9</sub> )	1180	-0.3353	2.1108	-1.0433	1.2237
10(x <sub>10</sub> )	1030	-0.8090	0.8078	-0.8761	-0.0200
11(x <sub>11</sub> )	860	-0.7439	-0.0431	-0.1569	-0.4943
12(x <sub>12</sub> )	810	-1.0516	0.2596	-0.0618	0.2891
13(x <sub>13</sub> )	740	-0.9306	-0.2993	1.1780	0.2120
14(x <sub>14</sub> )	720	0.2412	-1.2276	0.7478	-0.5935
15(x <sub>15</sub> )	1460/1600	2.2558	0.3272	0.3875	0.3806
16(x <sub>16</sub> )	1380/740	2.1627	0.4511	-1.2415	-0.1727
17(x <sub>17</sub> )	810/740	0.5724	0.5029	-1.7770	-0.3853
18(x <sub>18</sub> )	1600/1460	-1.0201	-0.8263	-0.1790	-0.7074
19(x <sub>19</sub> )	1600/1700	-0.2855	1.4265	0.7572	-3.1395
20(x <sub>20</sub> )	860/740	0.7634	-0.0988	-1.9532	-1.1810
特征值	/	0.1371	0.0468	0.0379	0.0333
累计贡献率(%)	/	43.1069	57.8196	69.7430	80.2254

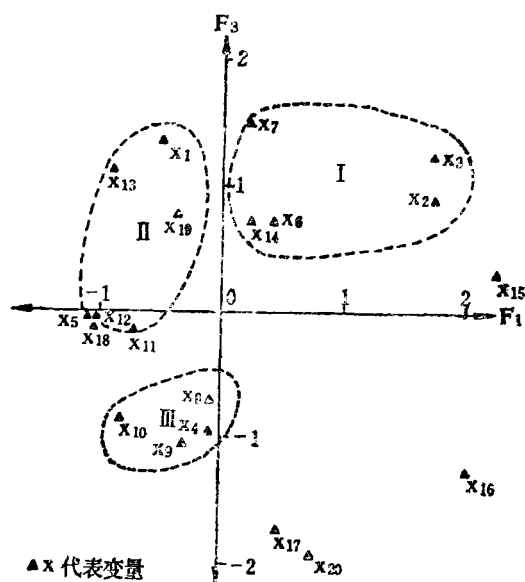


图1 对应分析F<sub>1</sub>—F<sub>3</sub>因子载荷投影图

沥青光谱中吸收峰的归属表

表 2

基团组合	吸收峰 ( $\text{cm}^{-1}$ )	归 属
饱和烃结构 (R)	2920	甲基( $\text{CH}_3$ )、次甲基( $\text{CH}_2$ )的伸展振动吸收
	2860	
	1460	甲基( $\text{CH}_3$ )、次甲基( $\text{CH}_2$ )的弯曲振动吸收
	1380	
720	$\text{CH}_2$ 平面摇摆振动吸收, 弱, $n_4 \geq 2$ 时, $n \geq 30$ 时为双峰	
芳香烃结构 (Ar)	3030	芳核上C-H伸展振动吸收
	1600	芳核的共轭双键伸展振动吸收
	860	稠环芳烃中有2个相邻初级氢原子吸收
	810	" 2-3 "
	740	" 4 "
杂原子结构 (O)	1700-1720	醇、酮、醛、羧基基团中C=O基团的伸展振动吸收
	1280	各种含O、N、S的基团, 包含许多C-O、C-N、C-S基团变形振动吸收
	1180	
	1030	

## 二、生油岩类型与红外光谱特征

### 1. 松辽盆地白垩系青山口组一段

该段属较深湖-深湖相沉积, 生油岩抽提沥青红外光谱呈现如下特征(图2)。

(1) 与烷基结构有关的吸收峰强度较大。2920、2860、1460 $\text{cm}^{-1}$ 为强吸收, 1380、720 $\text{cm}^{-1}$ 为中等强度吸收, 反映富含长链烷烃;

(2) 芳烃结构基团虽然也出现1600、860、810、740 $\text{cm}^{-1}$ 等吸收峰, 但强度很弱, 说明芳烃含量较低;

(3)  $\Sigma R\text{cm}^{-1}/\Sigma A\text{rcm}^{-1}$ 比值在8.0—18.5之间;

(4) 3100—3400 $\text{cm}^{-1}$ 谱区出现羟基(-OH)伸缩振动的弱吸收; 1700—1740 $\text{cm}^{-1}$ 之间有一较宽的羰基(C=O)吸收迭加峰, 最大吸收值在1700 $\text{cm}^{-1}$ 处; 另外在1180 $\text{cm}^{-1}$ 处出现C-O链的吸收。这种出现1740 $\text{cm}^{-1}$ 吸收峰(较1700 $\text{cm}^{-1}$ 弱), 同时随之出现1180 $\text{cm}^{-1}$ (C-O)吸收峰, 属饱和脂肪醚结构。

鉴此, 可认为该段生油岩属腐泥型。

### 2. 鄂尔多斯盆地北部上石炭系太原组及下二叠系山西组

上石炭系为一套滨海潮坪相含煤地层; 下二叠系是以三角洲—河流相为主的一套含煤碎屑沉积。这两套地层陆源有机质来源十分丰富, 生油岩(暗色泥岩)抽提沥青的红外光谱特征(图3), 属腐殖型。

(1) 烷基吸收峰相当明显, 720 $\text{cm}^{-1}$ 的碳骨架振动多呈肩峰出现(少数样品无此吸收), 说明长链烷烃含量较低;

(2) 芳香结构吸收峰明显增强。芳核上的CH振动吸收峰(3030、860、810、740 $\text{cm}^{-1}$ )明显, 1600 $\text{cm}^{-1}$ 的芳核共轭双键振动吸收强度大, 吸光度值为0.07—0.08( $\text{cm}^{-1}/\Sigma\text{cm}^{-1}$ )。860、810、740 $\text{cm}^{-1}$ 的吸光度依次递增;

(3)  $\Sigma R\text{cm}^{-1}/\Sigma A\text{rcm}^{-1}$ 为1.2—3.2;

(4) 3100—3400 $\text{cm}^{-1}$ 谱区有一凹陷形吸收, 其强度比青山口组一段生油岩大; 1700—1740 $\text{cm}^{-1}$ 谱区吸收峰最大值往往移至1690 $\text{cm}^{-1}$ 处(共轭引起吸收频率降低), 属芳香脂类、酮、醛的C=O基吸收; 在1650 $\text{cm}^{-1}$ 处有新的极大值出现, 属醌的C=O基伸展

振动吸收峰，这一吸收往往仅次于  $1600\text{cm}^{-1}$ ，从而形成了  $D_{1700}-1740\text{cm}^{-1} < D_{1650}\text{cm}^{-1} < D_{1600}\text{cm}^{-1}$  的梯状吸收特征； $1250\text{cm}^{-1}$  酚羟基的 C—O 键吸收峰的出现及  $1200\text{cm}^{-1}$  酚基团吸收峰的存在，说明具有木质素衍生物的特征； $1900\text{cm}^{-1}$  的酚类化合物 C=O 基伸展振动吸收峰普遍存在。

这些特征与气煤、肥煤沥青谱图十分相似，说明这两套地层的生油岩属腐殖型。

### 3. 鄂尔多斯盆地中石炭系羊虎沟组

属生物碎屑灰岩。抽提沥青的红外光谱图，既有腐泥型的吸收特征，又有腐殖型的部分吸收特征（图4）。 $1600\text{cm}^{-1}$  的吸光度为  $0.04 (\text{cm}^{-1}/\Sigma\text{cm}^{-1})$ ， $\Sigma R\text{cm}^{-1}/\Sigma A\tau \text{cm}^{-1}$  为 5.63，界于上述两种类型之间，应为混合型。

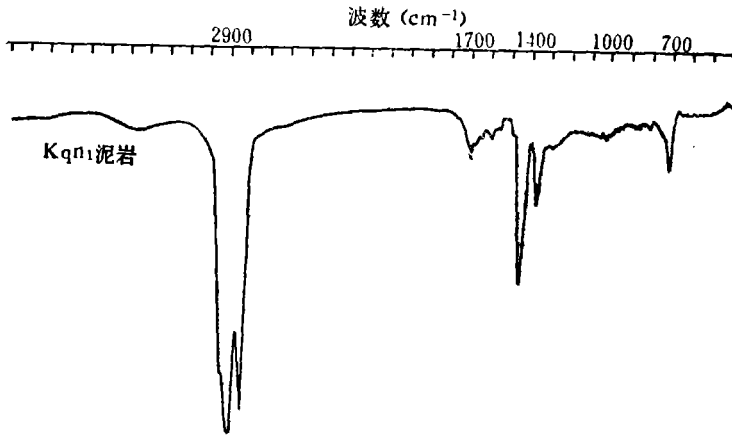


图2 腐泥型沥青红外光谱图

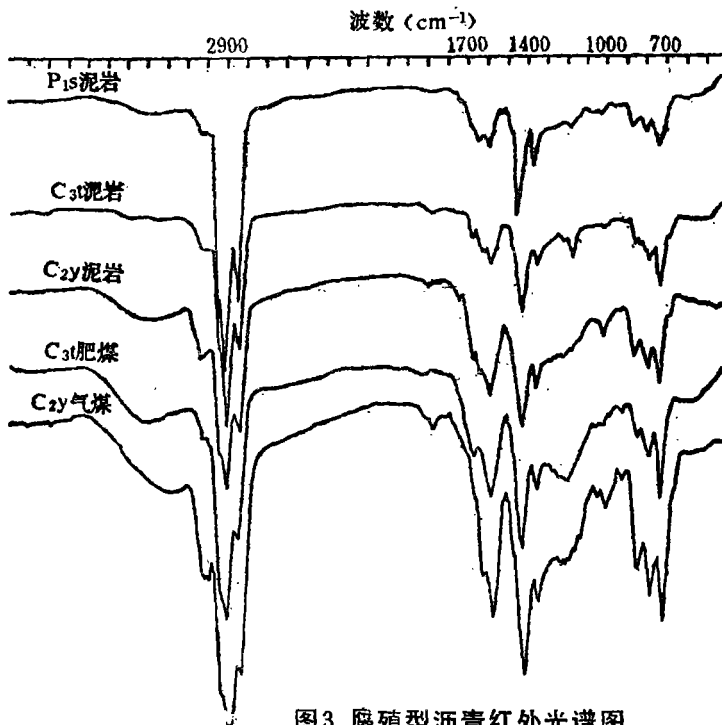


图3 腐殖型沥青红外光谱图

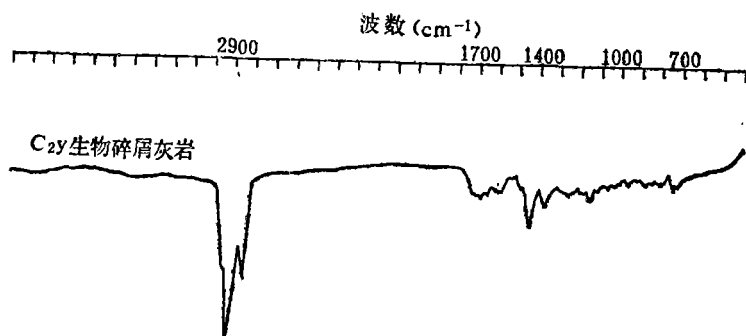


图4 混合型沥青红外光谱图

### 三、烷芳基团结构比与有机质类型的划分

有机质沉积埋藏后，并在成岩作用下经历了一系列的演变过程，其演变产物的结构、组成以及相对含量均直接受有机质类型和沉积环境等因素的影响和控制。因此，红外光谱所揭示的基团结构、组成及其相对含量等将为判别有机质类型提供可靠信息。

#### 1. 烷芳基团结构比

表3揭示各类型有机质可溶沥青的红外光谱特征和化学结构基团的组成关系。鉴于这种特征吸收和基团组成的差异及有规律的变化，我们提出了烷芳基团结构比( $\Sigma Rcm^{-1}/\Sigma Ar cm^{-1}$ )作为有机质类型的判别指标。

从表3可以看出，腐泥型有机质红外光谱显示饱和烃结构有关的特征吸收，烷芳基团结构比( $\Sigma Rcm^{-1}/\Sigma Ar cm^{-1}$ )大于7；腐殖型有机质显示与芳香结构有关的特征吸收，烷芳基团结构比( $\Sigma Rcm^{-1}/\Sigma Ar cm^{-1}$ )为1.0—4.0；混合型有机质兼有两种特征吸收，烷芳基团结构比( $\Sigma Rcm^{-1}/\Sigma Ar cm^{-1}$ )在4.0—7.0之间。

有机质类型划分指标及特征吸收表

表 3

有机质类型	$\Sigma Rcm^{-1}/\Sigma Ar cm^{-1}$	吸收特征
腐泥型	7.0以上	1460 $cm^{-1}$ (强) 1380 $cm^{-1}$ (中) 720 $cm^{-1}$ (中) 1740 $cm^{-1}$ 及1180 $cm^{-1}$ 同时出现 D1600 $cm^{-1}/\Sigma cm^{-1}$ 为0.3以下
混合型	4.0—7.0	兼有腐泥型及腐殖型的特征 D1600 $cm^{-1}/\Sigma cm^{-1}$ 为0.5左右
腐殖型	1.0—4.0	860 $cm^{-1}$ <810 $cm^{-1}$ <740 $cm^{-1}$ 1690 $cm^{-1}$ <1650 $cm^{-1}$ <1600 $cm^{-1}$ (呈梯状吸收) 1250 $cm^{-1}$ 及1200 $cm^{-1}$ 出现 1900 $cm^{-1}$ 出现 D1600 $cm^{-1}/\Sigma cm^{-1}$ 为0.7以上

## 2. 与其它指标对比

表4列出各种有机质类型及有机组份特征。从表4可以看出,腐泥型有机质含有较多的脂肪族链状化合物,饱和烃/芳香烃比值较大(在4以上),转化效率高,干酪根H/C原子比在1.5以上;腐殖型有机质含有较多的芳香族化合物,饱和烃/芳香烃比值较小(一般在1以下,少数在1—2之间),转化效率低,干酪根H/C原子比小于0.65;混合型有机质各有机组份特征皆介于两者之间。

有机质类型及有机组份特征表

表 4

地 区	时 代	沉 积 相 岩 相	有机质 类 型	红外光谱 $\Sigma R_{cm}^{-1}/\Sigma A_{cm}^{-1}$	干酪根		有机物质(ppm)			转化效率(%)			饱和烃 芳香烃
					H/C	O/C	有机 碳	沥青 A	烃 含量	A/C	烃/A	烃 C	
松辽盆地	Kq	深湖相 泥质岩	腐泥型	8.04~18.51	1.64	0.10	38850	3536	2407	9.95	63.07	6.22	6.14
鄂尔多斯盆地	C <sub>2</sub> y	滨海潮坪相 生物碎屑灰岩	混合型	5.63	—	—	1560	70	20	4.49	28.96	1.28	2.64
”	C <sub>2</sub> y	滨海潮坪相 暗色泥岩	腐殖型	1.22~3.19	0.61	0.09	31700	730	231	2.30	36.15	0.73	0.79
”	C <sub>3</sub> t	”	”	1.30~2.88	0.56	0.04	27650	635	249	2.29	39.65	0.90	0.63
”	P <sub>1</sub> s	三角洲—河流 相暗色泥岩	”	1.24~3.31	0.59	0.04	12365	255	78	1.79	40.25	0.59	0.54

通过上述对比,应用烷芳基团结构比和其它指标划分有机质类型,其结论一致。说明烷芳基团结构比作为生油岩有机质类型的判别指标是可行。

(收稿日期:1985年2月7日)

## 参 考 文 献

- [1] 董庆年, 红外光谱法, 石油化学工业出版社, 1977年。
- [2] 刘高魁等, 石油有机地球化学中的红外光谱法, 地质地球化学, 第7、8、9期, 1976年。
- [3] F.M.斯温(美), 钱吉盛、胡伯良译, 陆相有机地球化学, 科学出版社, 1979年。
- [4] 西北大学地质系石油地质教研室, 石油地质学, 地质出版社, 1979年。
- [5] 蒙琪、孙启邦, 应用红外光谱资料探讨鄂尔多斯盆地北部上古生界的生油条件, 鄂尔多斯盆地西缘地区石油地质论文集, 内蒙古人民出版社, 1983年。

AN APPLICATION OF INFRARED SPECTROMETRY  
IN CLASSIFYING THE ORGANIC MATTER  
TYPES OF SOURCE ROCKS

Men Qi      Sun Qibang

(The 3rd Brigade for Petroleum Prospecting and  
Exploration, Ministry of Geology and Mineral Resources)

**Abstract**

In this paper, infrared spectrometry is used in probing the organic matter type of source rocks from the 1st member of Qingshankou Formation, Cretaceous in Songliao Basin and Yanghugou Formation, Middle Carboniferous in Upper Paleozoic, Taiyuan Formation of Upper Carboniferous and Shanxi Formation, Lower Permian in Ordos Basin. Meanwhile, it presents the structure ratio of alkyl/aryl ( $ER\text{ cm}^{-1}/EAr\text{ cm}^{-1}$ ) which can be taken as an indicator for identifying organic matter type.