بسم الله الرحمن الرحیم

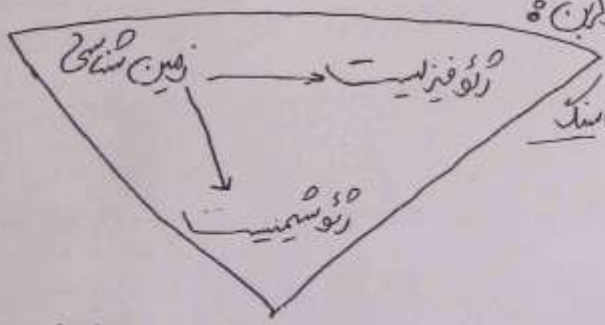
نکته‌های درس ژئوشیمی آبی (نفت)

(جلسه اول: ۹۸/۷/۸)

* ۳ عنصر اصلی ولازم (پیش نیازهای اولیه‌ی) سیستم هیدروکربنی:
  - سنگ منشأ (مادر) ← زایش هیدروکربن
  - سنگ مخزن ← تجمع هیدروکربن
  - پوش سنگ ← عمل محافظت و تله‌ی تقتی

* علاوه بر ۳ مورد فوق به ۳ مورد دیگر (کانه، آب، نفت) هم توجه می‌شود.

* علوم مرتبط با کشف و تولید هیدروکربن:



* تمرکز بیشتر ژئوشیمی روی سنگ مادر است.

* در پنجاه سال گذشته از هر ۵۰ چاه فقط ۱ چاه موفق بوده و به اکتشاف نفت خاتمه داده شد.

* عوامل ناموفق بودن تولید هیدروکربن در ۵۰ سال گذشته:
  - دید سطحی و نسبی (به عنوان مثال هر ناهمواری که مشاهده می‌شد در آن چاه حفر می‌کردند)
  - پیشرفته نشدن علائم و دانش (نبودن اطلاعات و علوم مختلف نظیر ژئوشیمی آلی)

* عوامل تولید هیدروکربن:
  - تجمع مواد آلی صورت بگیرد. ← یا بعداً از زایش بسنگ مخزن انتقال پیدا کند.
    یا به صورت اولیه در سنگ مادر وجود داشته باشد.
  - عمق تدفین ← باید عمق مناسب داشته باشد تا فرایند زمین گرمایی بتواند مواد آلی را به بلوغ برساند.
  - بلوغ
  - مهاجرت
  - سنگ مادر
  - سنگ مخزن
  - تله‌ی تقتی (سنگ پوش)

* دیدهای مختلف در تولید هیدروکربن و فرآیندهای مربوط به آن:
- تجمع مواد آلی و تدفین آنها (دید زمین شناسی)
- فرآیندهای زمین ساختاری (دید سیستماتیک زمین شناسی)
- ماهیت مواد از دید شیمیایی (دید شیمیایی) [مشخص کردن نوع مواد نظیر اشباع بودن و یا اشباع نبودن، آروماتیک و ...]
- فرآیندهای تولید نفت و گاز از لایه کانی، عمق زمین و مواد تشکیل شده در آن عمق)

* نشانه‌های وجود آثار هیدروکربوری در زمین:
- سطح الارضی: چشمه قیری، بیتومن، آسفالت، چشمه‌های نفتی
- تحت الارضی و منابع هیدروکربنی: نفت، گاز و زغال سنگ.

* حدود ۲۵۰ چشمه‌ی نفتی در ایران داریم.
* بیتومن نفت خاصی است که توسط حلال آن را از سنگ مادر بیرون می‌کشند ولی نفت خام به طور
و طی فرآیندهای طبیعی از سنگ مادر خارج می‌شود.

* ۱۵۰ سال پیش اولین فوران چاه نفت در جهان رخ داد.
* ادوین اولین کسی بود که تولید نفت را توسط EOR (غریزه بازیافت از عمق) دوبار کرد.
* فوران نخستین چاه نفت در ایران در حلوان آذری سال پیش در مسجد سلیمان رخ داد و عمق چاه حدود ۱۰۰۰ متر است

* عناصر مهم در تشکیل منابع هیدروکربنی: C, H, O, N, S ← چون

* سازنده‌ی اصلی بدن موجودات زنده C, N, O هستند.

- بیشترین عنصر در کره‌ی آبی اکسیژن است. (۲۴ %)
- بیشترین عنصر در کره‌ی خاکی سیلیسیم است. (۲۴ %)
- بیشترین عنصر در هوا نیتروژن است.
- کربن فقط 0.13 % عناصر کره‌ی زمین را تشکیل می‌دهد.

* نظریه‌ی غیر آلی تشکیل نفت:
- وجود متان در کانی‌های خورجای آتش‌فشان
- وجود کانی‌های محلول در نفت‌ها
- پیدا شدن انواع مواد هیدروکربنی در مجاورت عناصری مانند نیکل و وانادیوم (به عنوان عناصر کاتالیزور)
- از آتشفشان کربورهای فلزی در مجاورت آب بر روی فلزات قلیایی و تولید گازهای هیدروژن و استیلن
- وجود رگه‌ها و گازها از ابتدای خلقت در اعماق زمین و مهاجرت آنها به مخازن کنونی.

* نظریه‌ی آلی شکل نقت:
• وجود معادن زغال سنگ به‌عنوان منابع انرژی بقایای جانوران و گیاهان عهد دقیانوس.
• شباهت ساختاری هیدروکربن‌های جانداران و ترکیبات موجود در نفت خام.
• وجود انواع ویژه‌ترین (ساختار حلقه‌ی بنزن) مانند: تولوئن) در نفت خام.
• فرآیندهای تبدیل مواد آلی (طی میلیون‌ها سال) و تشکیل نفت
• شباهت‌های فیزیک و شیمیایی ترکیبات در طبیعت و نفت خام. آغاز جلسه‌ی دوم (۱۳۹۱/۷/۱۵)

* نظریه‌ی آلی نفت درست‌تر است چون عناصر اصلی حیات $C_3H_3O_3N_3S$ هستند.

* هر نفتی که مرغوب‌تر باشد هیدروژن و کربن بیشتری دارد.

* منشأ هیدروکربن‌ها از ارگانیسم‌ها هستند.

← * اگر ۳ عنصر سنگ مادر، سنگ مخزن و سنگ پوش وجود داشته باشند دلیل بر آن نیست که حتماً نفت داشته باشیم.

* توده‌ی حیاتی: هر نوع جاندار (هم از تک سلولی و سپس سلولی که براثر فعالیت‌های حیاتی خود مقدار مجموعه‌ی وسیعی از مواد آلی و تولیدات ترکیبات شیمیایی را بوجود می‌آورند.

تولید کنندگان توده‌ی حیاتی به چهار دسته (کلاس) زیر تقسیم می‌شوند:

(۱) باکتری‌ها
(۲) فیتو پلانکتون‌ها (تک سلولی گیاهی)
(۳) زوو پلانکتون‌ها (تک سلولی جانوری)
(۴) گیاهان عالی (تکامل یافته)

سؤال طور آزاد

نوع هیدروکربن بسیار متفاوت است.
باکتری بیشترین و بهترین هیدروکربن را تولید می‌کند در حالی که گیاهان عالی نامرغوب‌ترین هیدروکربن را تولید می‌کنند. ← گیاهان عالی بیشتر مولد گاز هستند.

* علت این مسئله این است که نسبت H به C در گیاهان عالی بسیار کمتر از نسبت H به C در باکتری‌ها و فیتو پلانکتون‌ها است.

چرا جانوران عالی در ۴ مورد فوق قرار نگرفته‌اند؟

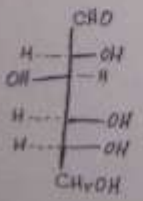
• تعداد، گستردگی و تنوع گیاهان عالی بسیار بیشتر از جانوران عالی است.
• از نظر ساختاری، مقدار بدن جانوران عالی به مواد آلی تبدیل می‌شود چون درصد زیادی از بدن آن‌ها را ترکیبات غیرآلی مثل آب، استخوان و ... تشکیل می‌دهد در حالی که در گیاهان اینگونه نیست. فیتو پلانکتون‌ها تقریباً ۸۵٪ بدن آنها به هیدروکربن تبدیل می‌شود.

← * هر چیز موجود دیرتر باشد راحت‌تر و بیشتر تولید هیدروکربن می‌کند.

← * دیواره‌ی سلولی فیتو پلانکتون‌ها اسید دارد مثل اسید پالمتیک.

← * گیاهان عالی بیشتر کربوهیدرات تولید می‌کنند.

← * گلوکز در گیاهان بفراوانی وجود دارد.



فرمول و ساختار گلوکز

$C_6H_{12}O_6$

* هر ترکیبی که نسبت H به C آن بالا باشد (H بیشتر از C باشد) دارای کیفیت بالایی است.
* ترکیبی که بالاترین نسبت H به C را دارد متان (CH_4) است.
* شاید در نگوکز گیاهان نسبت H به C (حدود ۲) بیشتر از نسبت H به C در فیتوپلانکتون ها (حدود ۱/۷) باشد اما در نگوکز گیاهان اتم های اکسیژن مزاحمت ایجاد می کنند و وجود این اتم های اکسیژن باعث می شود نسبت H به C در نگوکز گیاهان به حدود ۰/۴ برسد.

* هر چه زنجیره ی آلکانی بیشتری وجود داشته باشد تخریب کمتری صورت می گیرد و سیال هم راحت تر تولید می کند.
* ماهیت بدن جانداران نظیر باکتری، فیتوپلانکتون و ... بین گرو بقیه ی تکه های نوع سیال موجود در سنگ مادر می باشد به طوری که مشخص می کند سنگ ها در نهایت تولید کنند، مایعات و گاز یا فقط گاز تولید کند.

* خانواده ی مواد حاصل از ۴ گروه تولید کننده ی توده ی حیاتی:

(۱) کربوهیدرات ها ← فیتوپلانکتون ها، گیاهان عالی
(۲) اسیدهای چرب و چربی ها ← باکتری ها، فیتوپلانکتون ها
(۳) پروتئین ها ← زوپلانکتون ها، گیاهان عالی، فیتوپلانکتون ها
(۴) لیگنین ها ← گیاهان عالی

آغاز جلسه ی سوم (۱۳۹۱/۷/۲۲)

* درصد عناصر تشکیل دهنده ی پوسته ی زمین:

- اکسیژن	٪ 46.6	- پتاسیم	٪ 2.09
- سیلیسیم	٪ 27.7	- سدیم	٪ 2.36
- آلومینیوم	٪ 8.23	- منگنز	٪ 0.033
- آهن	٪ 5.63	- تیتانیوم	٪ 0.565
- کلسیم	٪ 4.15	- کربن	٪ 0.032
- هیدروژن	٪ 0.13		

← با وجود کم بودن درصد عناصر هیدروژن و کربن، درصد (مقدار) زیادی دستگاه هیدروکربنی در این عناصر داریم.

* از ۳ چیز هیدروژن، کربن، اکسیژن عناصر سبک تر هیدروژن، کربن و اکسیژن وارد ساختمان مولکول ها می شوند.

* ۳ مسیر تولید مواد آلی:

(۱) فرآیند فتوسنتز در گیاهان سبز (با جذب گاز CO_2 و سنتز آب و در حضور نور ماوراء بنفش تولید کربوهیدرات و گاز اکسیژن و مقداری آب می کند)

$$6CO_2 + 12H_2O \xrightarrow[647\ kcal]{h\nu} \underbrace{(C_6H_{12}O_6)}_{\text{گلوکز}} + 6O_2\uparrow + 6H_2O$$

(۲) فتوسنتز باکتریایی
(۳) شیمی سنتز باکتریایی

* در فتو سنتز باکتری‌ها، باکتری‌هایی داریم که مواد شبه کلروفیل دارند و عمل فتوسنتز انجام می‌دهند.
* باکتری‌های اولیه که کلروفیل و مواد شبه کلروفیل ندارند از روش شیمی سنتز باکتری‌ها عمل تولید مواد آلی را انجام می‌دهند.

* مواد ذخیره‌ای در گیاهان ← نشاسته، گلیکوژن
* مواد نگهدارنده سلولز در گیاهان ← سلولز، پکتین، قندهای ساده (مثل گلوکز) و مرکب
* قند دوتایی باشد ← دی ساکارید (Di Saccharides)
* قند بین ۲ تا ۱۰ باشد ← الیگوساکارید (oligosaccharides)
* قند بیش از ۱۰ باشد ← پلی ساکارید (polysaccharides)

* شیمی‌سنتز باکتری‌ها؛
باکتری‌ها در محیط‌های اجباری، از سولفور (گوگرد) استفاده می‌کنند تا مواد آلی تولید کنند؛ زیرا قابلیت عمل فتوسنتز را ندارند.

$$CO_2 + O_2 + 4H_2S \longrightarrow [CH_2O] + 4S + 3H_2O$$

کربوهیدرات ← سولفور

* مواد آلی تشکیل شده در محیط‌های عمیق دریایی توسط فرآیند شیمی‌سنتز باکتری‌هایی دارای مقادیر زیادی S هستند و کیفیت خوبی ندارند. (چون اکسیژن در اعماق وجود ندارد) بعضی از آن‌ها نمی‌توانند با اکسیژن حل شوند

* فتوسنتز باکتری‌ها؛ جانداران بی‌هوازی
محیط اجباری بدون اکسیژن، یک نفت دارای مقادیر سولفر است
در چشمه‌های آب گرم H_2S وجود دارد

$$2H_2S + CO_2 \longrightarrow 2S + 2H_2O \qquad \Delta G = -100\,kcal$$

فتوسنتز آنوکسیژنیک

$$CO_2 + 2H_2S \longrightarrow \{CH_2O\} 2S + H_2O$$

* باکتری‌های اکسیژن‌دار عمل فتوسنتز را انجام می‌دهند. (توانایی تولید مواد آلی را به صورت فتوسنتز محدود دارند)
* در آغاز حیات تا اواسط دوره‌ی سیلورین اتمسفر زمین اجباری بود چون کره‌ی زمین تازه تشکیل شده بود و جانداران هوازی نبودند
* باکتری‌ها و جلبک‌های آبزی در اتمسفر اجباری زمین و اواسط دوره‌ی پرکامبرین وجود داشتند و تکامل آن‌ها غیر بیولوژیکی (Ecological) بود.
* از اواسط دوره‌ی سیلورین جلبک‌ها پایدار شدند و عمل فتوسنتز آغاز شد. (در این دوره اکسیژن به حد زمین افزوده شد)
* در اواخر دوره‌ی سیلورین جانوران پایدار شدند.

محیط اجباری: محیطی فاقد اکسیژن یا دارای مقادیر کمی اکسیژن

- توده‌ی حیاتی چه ساختارهایی دارد و چه فرآیندهایی بر آن‌ها اعمال می‌شود تا تولید هیدروکربن کند؟
- نوع مواد آلی موجود در سنگ مادر چیست؟
- منشأ مواد آلی از کجاست؟
- مواد آلی چگونه به هیدروکربن تبدیل می‌شوند؟

جانداران مختلف با ترکیبات متفاوت در تولید هیدروکربن نقش متفاوتی دارند.

* توانایی‌ها در مورد توده‌ی حیاتی (زیست توده زنده)؛

• زیست توده زنده: توده جسم موجودات زنده در واحد سطح

جسم کل موجودات زنده یک زیستگاه یا ناحیه در زمان معین که اغلب به صورت گرم ماده آلی در هر متر مربع بیان می‌شود

• مجموعه‌ای از جانداران (دارای حیات) اعم از تک سلولی، پرسلولی، ماهیت گیاهی و یا جانوری که در یک اکوسیستم با خصوصیات ویژه به حیات خود ادامه می‌دهند.

• فعالیت بیولوژیکی، ادامه‌ی حیات، تولید مثل، سرنوشت نهایی آن‌ها همراه با ویژگی‌های ساختاری (تنوع در شکل، سورفولوژی، گونه) همراه با ساختارهای شیمیایی آن‌ها با توجه به نوع، نوع، معرف محصولات خاصی از توده حیاتی را به نمایش می‌گذارند.

• با توجه به جمعیت و فراوانی گونه‌های مختلف در یک توده‌ی حیاتی خصوصیات هر طبقه از فرم‌های توده‌ی حیاتی خاصیت حیات خاص خود را دارد.

* منابع اصلی تولید توده‌ی حیاتی: کربوهیدرات‌ها، پروتئین‌ها، لیپیدها

(۱) باکتری‌ها (۲) فیتوپلانکتون‌ها (۳) زوپلانکتون‌ها (۴) گیاهان عالی

• جلبک آبی، جلبک‌های تک سلولی، جلبک‌های سبز آبی و فیتوپلانکتون‌ها اگر تولید ماده آلی کنند ماده‌ی آلی حاصله دارای کیفیت خوبی است.

• کربوهیدرات‌ها: ترکیبات پلی هیدروکسی دار با عامل‌های الکلی - آلدئیدی یا کتونی با فرمول (CH_2O) یا کربوهیدرات‌ها. اصلی‌ترین روش تولید آن‌ها عمل فتوسنتز است.

• لیگنین‌ها: ترکیبات پلی آروماتیکی که در گیاهان یافت می‌شوند و دارای عامل الکلی - فنلی و گاهی استری می‌باشند. از اجزای اصلی بافت‌های گیاهی بوده که در گیاهان آوندی هستند.

• لیپیدها (اسیدهای چرب و گلیسیریدها) و ترکیبی مولولی آلکانی (گاهی آلکنی) معمولاً با یک فنل اسیدی در انتهای زنجیره. آب گریز و به عنوان منبع تولید انرژی در گیاهان یافت می‌شوند

• پروتئین‌ها: ترکیبی از ترکیبات زنجیره‌ها و گاهی حلقه‌های اروماتیکی با عامل اسیدی و آمینی که به صورت اسید و باز عمل می‌کنند. بیشتر در جانوران یافت می‌شوند و به عنوان منبع اصلی انرژی استفاده می‌شوند.

جلسه‌ی چهارم (۱۳۹۱/۷/۲۹)

«کربوهیدرات‌ها»

مجموعه‌ی بسیار وسیعی از ترکیبات طبیعی که توسط فتوسنتز توسط گیاهان و باکتری‌های مختلف در طبیعت بیوسنتز می‌گردند.

- فعالیت بیولوژیکی
- ادامه‌ی حیات
- منبع انرژی

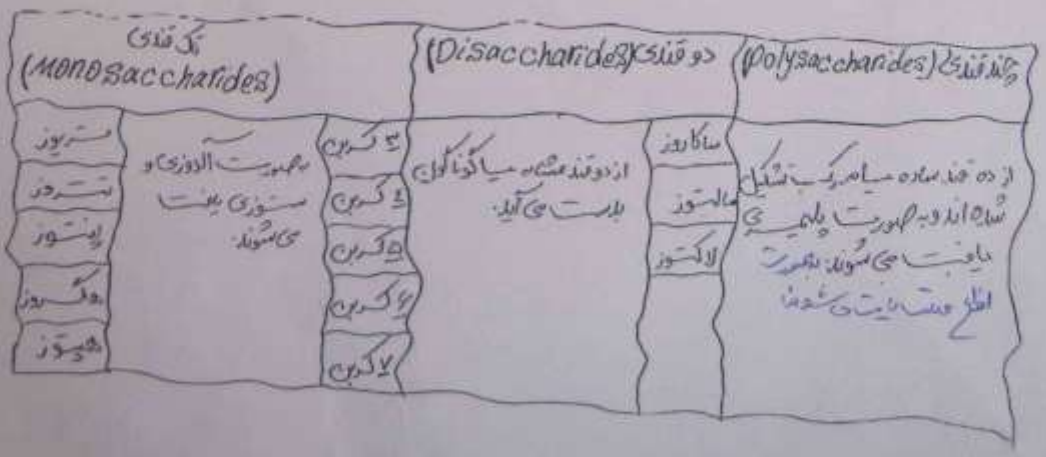
- سوخت
- ساز

کربوهیدرات‌ها دارای دو گروه عاملی کربنیل و الکلی هستند:

گروه عاملی کربنیل:
- کتون (کتوز یا استوز)
- آلدئید (آلدوز)

گروه عاملی الکل:
- الکل نوع اول
- الکل نوع دوم

* الکل نوع اول انتهای زنجیره قرار دارد.
* الکل نوع دوم در وسط زنجیره قرار دارد.
* ساده‌ترین مجموعه‌ی کربوهیدرات‌ها، قندهای ساده (۳ تا ۷ کربن) هستند.
* گروه ستوزها در ابتدا و انتهای زنجیره‌ی خود دارای الکل نوع اول هستند.

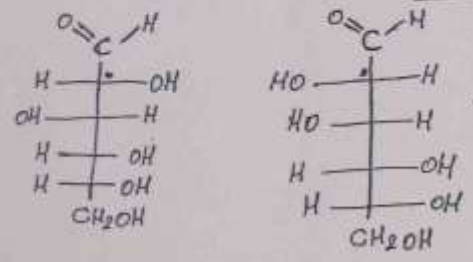


* فقط ۳ قند داریم که مزه‌ی آنها شیرین است:

گلوکز ← قند چغندر
گالاکتوز ← قند شیر
فروکتوز ← قند میوه

لاکتوز ← ۱ عدد گلوکز + ۱ عدد گالاکتوز (مثل قند شیر)
مالتوز ← ۲ عدد گلوکز (مثل قند جو)
ساکاروز ← ۱ عدد گلوکز + ۱ عدد فروکتوز (مثل قند میوه)

* ایمر: تفاوت آرایش استخلاف ها در یک ترکیب بین دو کربن خاص را ایمر گویند.



کربن‌های ستاره‌دار ترکیبات اطراف چپ و راست آنها جابجا است پس دو ترکیب ایمر هم هستند.

* هر ترکیبی که نسبت $\frac{H}{C}$ یک و کمتر از یک باشد (مثل آلدهید و اسید) از نظر بروکس و تولید انرژی خوب نیستند و ترکیب کیفیت خوبی ندارد.

* سر نوشت کربوهیدرات ها در بدن جانوران:
- قسمتی عاملی الکلی نوع اول اکسید شده و تبدیل به اسیدی می‌شوند. (الکل ← اسید)
- قسمتی عاملی اسیدی تحت عنوان دی اکسید دی کربوکسیلاسیون، CO_2 از دست می‌دهند. ($-CO_2$)
- مثل الکل (OH و H) به صورت آب از سیستم خارج می‌شوند.
- با خارج شدن مولکول‌های ناپایدار سیستم حلقه‌ها به صورت شکسته در می‌آیند.

* سرعت تخلیه‌ی اتم‌ها و گروه‌های OH و H به ترتیب از C (در سر جلوی دیگران) می‌کاهد.

* دلیل فوق است $\frac{H}{C}$ در کربوهیدرات‌ها کاهش می‌یابد و در نتیجه کربوهیدرات‌ها نمی‌توانند سازنده‌ی سوخت‌های فسیلی باشند.

(همچنین سایل تنفس کربوهیدرات مستولید نمی‌شود)

$\frac{H}{C} = 0.5$

$\frac{H}{C} = ?$ ← تجدید شد

* مالتوز سوارای از خانواده هیدروکسیل‌ها در حوضه‌های سرخی

1/ Alcohol → Acid
2/ Dicarboxylation → CO_2
3 H_2O → H_2O

* مصرف نسته‌ها از تولید دهنده‌ی انرژی

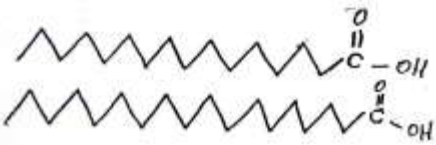
* اگر دهم تولید انرژی کمتر باشد

اسیدهای چرب و چربی‌ها

بخش وسیعی از مواد طبیعی، به ویژه از گیاهان و جانوران را تشکیل می‌دهند. موم، والکس، چربی‌ها، روغن‌ها، چربی‌های مایع و حامل، اسیدهای چرب بلند زنجیره

خصوصیات فیزیکی:

- راست زنجیره
- نوع کربن بصورت
- پیوندهای اشباع آبگیری
- حلال بعضی از ویتامین‌ها (KEDA)
- کاهی پیوندهای دوگانه
- دارای عامل اسیدی
- ترکیب با الکل‌ها تولید چربی
- عمل صابونی شدن
- در آب نامحلول
- وزن خصوصیات کمتر از آب
- آب گریز



۱۶ کربنی ↔ پالمیتیک (PALMITIC)

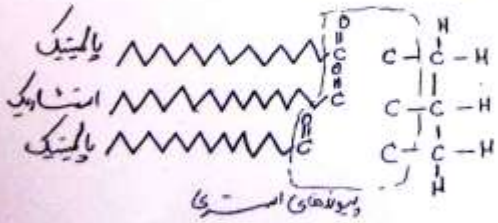
۱۸ کربنی ↔ استاریک (STEARIC)

* مهمترین ترکیب ها برای ساخت صابون‌ها، صابونی چربی‌ها و اسیدهای چرب هستند؛ زیرا با از دست دادن عامل اسیدی خواص زنجیره‌ای از کربن و هیدروژن باقی می‌ماند

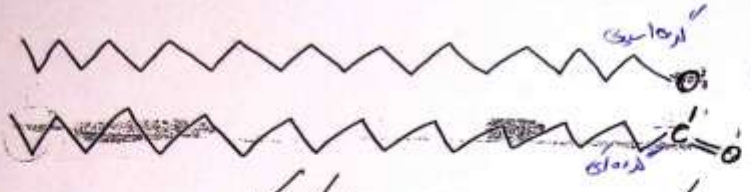
خواص هیدروکربن‌های آلکان را دارد با این تفاوت که این خاصیت

اسیدهای چرب اشباع بار خصلت خوب میدهد

الکل + اسیدهای چرب → چربی

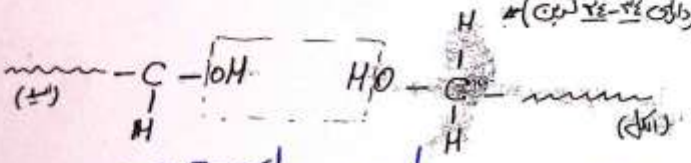


• استرهای اسیدهای چرب + الکل‌های زنجیر بلند ← موم، واکس، چربی



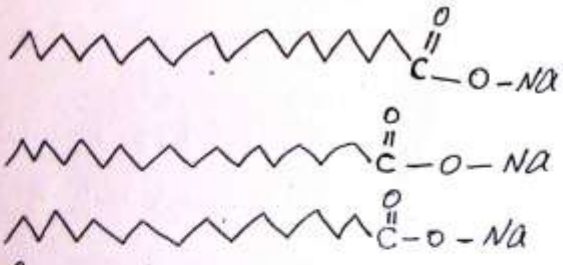
نقت‌ها یا مومها آمده از ترکیبات بالا را نقت‌های پارافینیک می‌گویند. این نقت‌ها نقت‌های خوبی هستند اما به دلیل سرخی و سیرگی‌هایی که دارند (به عنوان مثال سیر شدن هوا (حتی در دمای اتاق)) این نقت‌ها منجمد شده و لوله‌های انتقالی می‌چسبند و مسیر لوله‌ها را مسدود می‌کنند. معروف پاسینج دارند و کمتر از آنها بهره‌برداری می‌کنند.

واکنش تشکیل موم زنبور عسل (دارای ۴۴-۲۴ کربن)*



اسید چرب + الکل → چربی

• استرهای قلیایی (صابون):



در تشکیل صابون‌ها به جای عامل الکلی، نمک‌های قلیایی (مثل Na) باعث به هم پیوستن زنجیرهای می‌شوند.

الکل‌های حامد ساختارهای حلقوی (معمولاً ۶ یا ۵ حلقه) که در داخل آنها عامل الکلی (OH) وجود دارد دوگانه باشد. خانواده‌ی الکل‌های حامد را جزء اسیدهای چرب و چربی‌ها دسته‌بندی می‌کنند.

• در اسیدهای چرب و چربی‌ها ⟷ مقدار C بالا
مقدار H بالا
مقدار O پایین

دیابتون‌ها دارای حلقه هستند

مانت‌های دارای کلسترول هم زنجیری اسیدهای حلقه‌ی هم زنجیری اکی طوری است

* سرنوشت اسیدهای چرب و چربی‌ها؟
• پیوندهای استری هیدرولیز شده و ترکیبات اسیدی و الکلی جدا می‌شوند. ← بخوان
• گروه‌های عاملی اسیدی تحت فرآیند (ی کربوکسیلاسیون) CO_2 از دست می‌دهند.
• در هپاتوسیت‌ها و سلول‌های دوکانه آن‌ها با گرفتن H_2 اشباع می‌شوند.
• سپس خارج شدن مولکول‌های ناپایدار (CH_4، CO_2، H_2O) سیستم به هپاتوسیت فشرده شده و پایدار می‌گردد.
• پستمان‌های این ترکیبات به هپاتوسیت شبیه‌ی سیال در لایه‌ای اسیدهای فلوئیک و هیومیک اسید به هپاتوسیت حمل و زدیده می‌شوند.

(استرچی) صنعتی (تولید نمد) صنعتی

• نسبت H به C در اسیدهای چرب و چربی‌ها تقریباً ثابت است و تغییر نمی‌کند.

(به دلیل این لوله حس می‌کنیم.)

پروتئین‌ها

$$H_2N - \underset{R}{\overset{H}{\underset{|}{\overset{|}{C}}}} - COOH$$

آمین — اسید

* دارای دو عامل متضاد اسید و آمین (بازی) هستند.
* خاصیت آفوتریک در بدن جانوران یافت می‌شوند.
* به عنوان منبع نیتروژن در جانوران به حساب می‌آید.

* در پروتئین‌ها ← مقدار C متوسط
مقدار H متوسط
مقدار O متوسط

* سرنوشت پروتئین‌ها در بدن جانوران؟ ← بخوان
• عامل‌های اسیدی دی کربوکسیله می‌شوند، CO_2 آزاد می‌کردد.
• عامل‌های آمینی (NH_2) به هپاتوسیت گاز آمونیاک از سیستم خارج می‌شود.
• زنجیره‌های کوتاه جانبی به هپاتوسیت کاز مستان تخلیه می‌شوند.
• در هپاتوسیت گروه‌های هیدروکسیل، به هپاتوسیت آب از توده‌ی جانوران جدا می‌شود.
• باقیمانده‌ی ترکیبات به هپاتوسیت حلقه‌ی اوره‌سیک فشرده می‌گردند.

* به علت‌های بالا، نسبت H به C در پروتئین‌ها ثابتی نیست و تولید کننده‌ی سوخت‌های فسیلی خوب نیستند.

جلسه‌ی پنجم (۱۳۹۱/۸/۶)

لیگنین‌ها

ساختارهای شیمیایی جزء آخرین کربن‌هایی که به‌صورت (عنوان) استخراج بیشتر به بلندی آنها یافت می‌شوند. بخش عظیمی از اعضای اصلی بافت گیاهان آوندی خشکی را تشکیل می‌دهند.

* معمولان شیمیایی:
  - ساختارهای پلی آروماتیک
  - عامل‌های الکلی
  - فنلی
  - پیوندهای استری

* لیگنین‌ها تولید کننده‌ی خوبی برای بافت نیستند اما سرعت تولید کار بسیار مناسب‌اند.
* مهم‌ترین لیگنین‌ها عبارتند از: کنیفرین‌ها، سینا پین‌ها، سیرنگول‌ها

سوال: چرا با وجود ترکیب‌پذیری بالا و حلقه‌های کم sporopollenin (دانه‌های گیاهان و هاگ‌های آنها) تقاضای خوبی برای تولید کننده‌ی بیوگاز است؟

- ترکیب‌پذیری آنها آلکانی (دوهل کربنی) است.
- حجم و مقدار آنها نسبت به بلندی گیاهان بسیار ناچیز است.
- بالیل داشتن CH_2OH در والکش‌ها، H_2O، CO_2 و --- از دست می‌دهند.

* ترکیب‌پذیری جانبی کلروفیل یک الکل ۲۰ کربنه است به نام فیتول؛ اگر این الکل در محیط احیایی قرار بگیرد (عامل الکلی آن از بین می‌رود و تعداد کربن‌ها همان ۲۰ عدد باقی می‌ماند که به آن فیتان می‌گوییم)، اگر الکل در محیط اکسیدی قرار بگیرد علاوه بر از دست دادن عامل الکلی، یک کربن هم از دست می‌دهد و تعداد کربن‌ها ۱۹ عدد می‌شود که به آن پریستان می‌گوییم.
* نسبت پریستان (Pri) به فیتان (Phy) بیان کننده‌ی نوع محیط است:

$\frac{Pri}{Phy} > 1$ ↔ محیط اکسیدی

$\frac{Pri}{Phy} < 1$ ↔ محیط احیایی

* در لیگنین‌ها ↔ مقدار C بالا
  مقدار H پایین
  مقدار O بالا

* شیمی لیگنین ها:
- پیوندهای اتری که حلقه شکسته شده و به صورت CH_4 خارج می گردند.
- عامل های الکلی به صورت آب از سیستم جدا می شوند.
- زنجیره های کوتاه جانبی به صورت گاز متان و یا امثال تخلیه می شوند. ← بخوان
- حلقه های باقیمانده به صورت فشرده در می آیند.
- باقیمانده ی ترکیبات با خاصیت هیومیکی تبدیل به هیومین می گردند.

* مقدار و سرانگشتی ۴ گروه ذکر شده در رسوبات:

کربوهیدرات ها ← 40 %
پروتئین ها ← 40 %
لیگنین / هیومیک / اسید فولویک (کوچک) ← 10 %
لیپیدها (اسیدهای چرب و چربی ها) ← 10 %

* اگر سنگ مادری داشته باشیم که دارای 53 متر طول و کروژن نوع III باشد کیفیت و مرغوبیت آن برابر است با سنگ مادری که دارای 1 متر طول و کروژن نوع I است؛ پس نتیجه می گیریم کروژن نوع I بهتر از کروژن نوع III است.
* کروژن نوع III بیشتر تولید گاز می کند.

	C	H	S	N	O
کربوهیدرات ها (Carbohydrates)	44 %	6 %	—	—	50 %
لیگنین (Lignine)	63 %	5 %	0.1 %	0.3 %	31.6 %
لیپیدها (Lipids)	76 %	12 %	1 %	—	12 %
پروتئین ها (Proteins)	53 %	7 %	—	17 %	22 %
پترولیوم (Petroleum)	85 %	13 %	1 %	0.5 %	0.5 %

* لیپیدها کروژن نوع I تولید می کنند.
* دراندهای فرآیندهای زنده شیمیایی هایی تولید می شوند که مسئولیتی بر عهده دارند: اسیدفولویک (حبوبی)، اسیدهیومیک (گیاهی)

Humic

سرنوشت مواد آلی

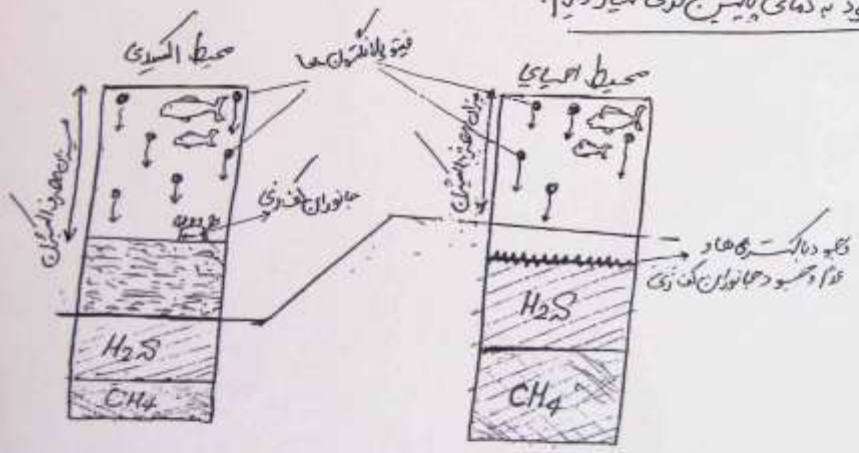
مواد آلی بقیمانده + گاز + بیتومن ⟸ حرارت کم فشار

* عوامل مشخص کننده ی وجود نفت خوب و با کیفیت در سنگ مادر (فاکتورهای مهم سنگ مادر خوب):
- مقدار H_2 در سنگ مادر ← هرچه H_2 بالاتر و بیشتر باشد نفت بهتری تولید خواهد شد.
- نوع محیط (اکسیدی، احیایی، نیمه اکسیدی) در زمان ته نشین شدن رسوبات سنگ مادر.
- وجود جاندارن خوار، نیمه خوار و غیر خوار ← وجود جاندارن غیر خوار باعث میشود تا مواد آلی بقدر بیشتر محفوظ بمانند و نفت خوبی تولید شود.

• محیط باید احیایی باشد ← بدلیل نبودن اکسیژن نفت خوبی تولید می شود.

- کروژن نوع I و II وجود داشته باشد.
- با توجه به عمق رسوبات و فرآیند زمین گرمایی مواد باید به محدوده ی پنجره ی نفتی برسند:

* دمای پنجره ی نفتی بین 60 تا 160 درجه ی سانتی گراد است.
* برای تولید نفت اگر زمان کمی بخواهیم نفت تولید شود به دمای بالاتری نیاز داریم اما اگر بخواهیم نفت در زمان بیشتری تولید شود به دمای پایین تری نیاز داریم.



در محیط اکسیدی؟
- اکسیژن تا سطح رسوبات وجود دارد در نتیجه جانوران کف زی تقریبا همه جنگ سه روی سطح رسوبات زندگی می کنند.
- کف زی ها فیتو پلانکتون ها و زوپلانکتون ها را پس از مرگشان می خورند و فی نگذارند آنها به لایه ای رسوبات دفن شوند.
- جانوران کف زی باعث تونل در رسوبات شده تا اکسیژن به میان رسوبات نفوذ کند.

در محیط احیایی؟
- سطح مشترک اکسیژن و پایین تراز محیط اکسیدی است و در نتیجه جانوران کف زی سه روی رسوبات وجود ندارند.
- باکتری ها روی سطح رسوبات زندگی می کنند و کمک می کنند تا فیتو پلانکتون ها و زوپلانکتون ها به مواد آلی تجزیه شوند.

جلسه‌ی شنبه (۱۳۹۱/۸/۲۰)

* بخش اعظم سنگ مادر مواد معدنی است و بخش کوچکی از آن را مواد آلی (TOC) تشکیل می‌دهد.
* قسمت اعظم مواد آلی را کروژن تشکیل می‌دهد و تنها بخش کوچکی از مواد آلی را بیتومن تشکیل می‌دهد.

سنگ مادر: 98% مواد معدنی، 2% مواد آلی (TOC)

* بیتومن (نفت خام) براساس ترکیبات ساختاری و تعداد کربن شامل ۴ دسته‌ی زیر هستند:

SARA ↔
(I) هیدروکربن‌های اشباع (S) ← می‌تواند حلقوی باشد و هم می‌تواند زنجیری باشد
(II) هیدروکربن‌های آروماتیک (A)
(III) ترکیبات رزین‌ها (R) ← این دو خانواده حاوی عناصر N, O, S هستند
(IV) ترکیبات اسفالتن‌ها (A) ←

* کروژن ماده‌ی آلی به بلوغ رسیده‌ای است که اگر به بلوغ برسد تولید هیدروکربن (نفت خام) می‌کند.
* کروژن فقط در سنگ مادر وجود دارد.

* تقسیم بندی کروژن بر اساس نوع محیط رسوبی:
• نوع (I) ← پلانکتون دریاچه‌ای یا آب‌شور و بقایای باکتری ← کاملاً نفت‌زا است.
• نوع (II) ← پلانکتون‌های دریایی که در محیط احیایی (دریای عمیق) رسوب کرده‌اند ← بخشی نفت‌زا و بخشی گاززا هستند. (جزء نوع I نیستند)
• نوع (III) ← آب‌شور و بقایای گیاهان خشکی که در حوضه‌های رسوبی رسوب کرده‌اند ← تولید گاز می‌کند.

* تقسیم بندی کروژن براساس ساختار و منشأ مواد آلی:
• نوع (I) ← جلبک‌های آب‌های شیرین ← نفت‌زا
• نوع (II) ← جلبک‌های دریایی + بقایای گیاهان خشکی که دارای چربی (لیپیدار) هستند ← تولید نفت و گاز
  - لیپیدین‌های گیاهی
  - ضایعات گیاهی (کوتیکول)
  - (شیره‌ها) رزین‌های گیاهی
• نوع (III) ← بقایای چوب و مواد سلولزی گیاهان خشکی ← گاز تولید می‌کند
• نوع (IV) ← بقایای مجموعه‌های مواد بالا که کاملاً اکسیداسیون شده‌اند یا استفاده شده و وارد چرخه‌ی رسوبی دیگری شده‌اند ← توانایی زایشی هیدروکربن ندارد.

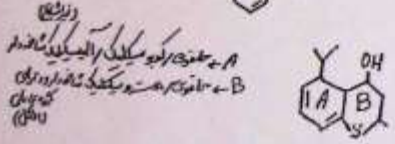
* هرچه ماده‌ی هیدروکربنی تیره‌تر باشد دارای کیفیت بهتری است چون بیشتر بالغ رسیده است.

مناطق:
نابالغ ↔ 0.5% RO
بالغ ↔ 0.5 تا 2.0% RO
فرابالغ ↔ 2.0 – 16.0% RO

* تقسیم بندی ترکیبات آلی؛
- بر اساس اسکلت ساختمانی
- بر مبنای گروههای عاملی
- بر اساس رشته های همولگی

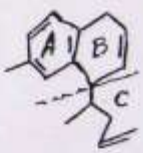
* تقسیم بندی بر اساس اسکلت ساختمانی

- زنجیره باز
  - آلکان‌ها (اشباع)
  - آلکن‌ها (غیراشباع)
  - آلکین‌ها (غیراشباع)
- زنجیره بسته (حلقوی)
  - هتروسیکلیک (حاوی اتم‌هایی غیر از کربن هستند)
  - کربوسیکلیک (همه اتم‌های حلقه کربن هستند)
    - اشباع و غیراشباع (سیکلوآلکان و سیکلوآلکن و آلیسیکلیک)
    - غیراشباع کامل (آروماتیک) (بنزن)

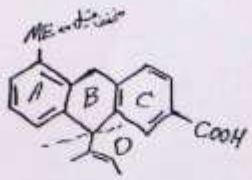


A ← حلقوی / کربوسیکلیک / آروماتیک شش‌ضلعی دارد
B ← حلقوی / هتروسیکلیک / آلیسیکلیک دارد و گوگرد (S) دارد

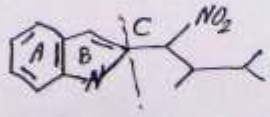
مثال: ساختارهای ترکیبات زیر را در جاهایی که مشخص شده تعیین کنید.



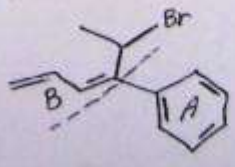
A ← حلقوی / کربوسیکلیک / آروماتیک شش‌ضلعی دار
B ← حلقوی / کربوسیکلیک / آلیسیکلیک
C ← زنجیره باز



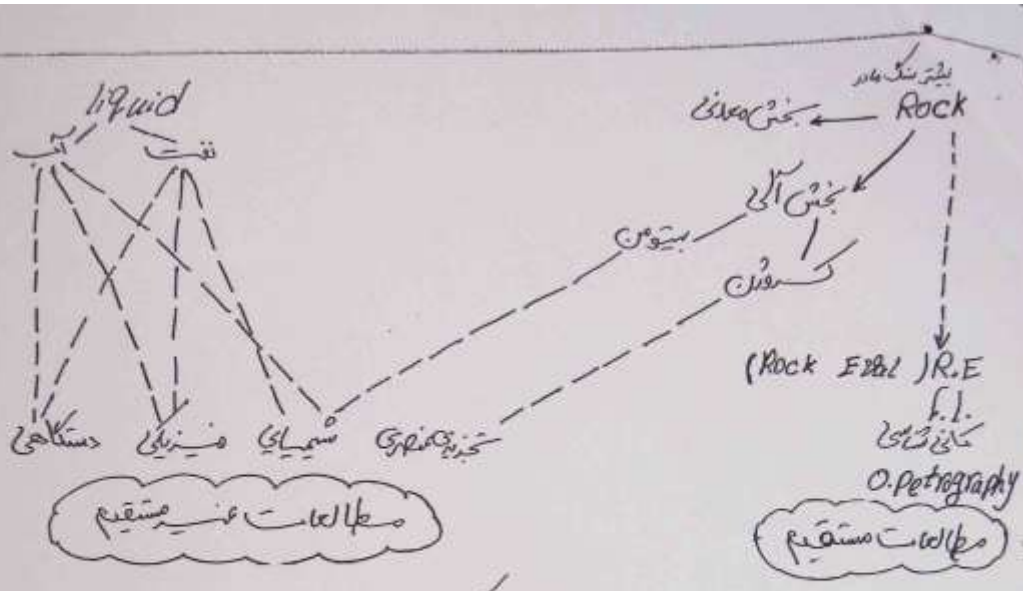
A ← حلقوی / کربوسیکلیک / آروماتیک شش‌ضلعی دار
B ← حلقوی / کربوسیکلیک / آلیسیکلیک (۳ تا)
C ← حلقوی / کربوسیکلیک / آروماتیک دارای گروه عاملی اسیدی
D ← زنجیره باز شش‌تایی



A ← حلقوی / کربوسیکلیک / آروماتیک
B ← حلقوی / هتروسیکلیک
C ← زنجیره باز دارای استخلاف



A ← حلقوی / کربوسیکلیک / آروماتیک شش‌ضلعی دار
B ← زنجیره باز دارای استخلاف



* روش های مختلف جداسازی بیتومن و نفت خام از سنگ مادر :

(۱) استخراج (سنگ مادر)

(۲) روش سوکسله آسفالتن ← چون مقدار کمتری وجود دارد و سنگین تر است زودتر رسوب می کند.

(۳) تفکیک بر مبنای حلال کروماتوگرافی ستونی ←
- حلال هگزان ← برش اشباع
- حلال بنزن ← برش آروماتیک
- حلال الکل ← برش رزین ها

(۴) آنالیزهای تکمیلی ← کروماتوگرافی گازی (G.C) / کروماتوگرافی گازی طیف سنجی جرمی (G.C/M.S)

نفت برای اشباع و آروماتیک کاربرد دارد.

* اگر از نفت خام بخواهیم مراحل جداسازی را انجام دهیم جزء مراحل فوق پرچرب ، فقط مرحله اول حذف می شود.

* استخراج مواد آلی قابل حل بیتومن (EOM) :

• وزن نمونه 40 - 30 گرم

• استخراج : توسط حلال های مناسب مانند کلروفرم ، دی کلرومتان ، بنزن ، متانول

• وسایل : ضامنی های سلولزی انگشتانه ای - سکسوله - حمام آب - هیترهای برقی - دستگاه تبخیر

• زمان : 72 - 48 ساعت .

کروماتوگرافی ستونی گاز - مایع (G.L.C)،
کروماتوگرافی ستونی و تکنیکی برای جداسازی ترکیبات براساس اختلاف در هم کنش بین دو فاز
(الف) فاز ساکن جامد: سیلیکا ژل - آلومینا
(ب) فاز مایع و حلال های مناسب: هگزان ← برش اشباع
بنزن ← برش آروماتیک
الکل ← برش رزین

- نمودار ستونی باشد CPI = 1 است و نشان دهنده ی رسیدن به بلوغ است.
- نمودار صعودی باشد CPI ≠ 1 است.

جلسه ی هشتم (۹۱/۸/۱۱)

- دستگاه ارزیابی سنگ مادر (Rock E-Val):

- پیش نیازهای ارزیابی سنگ مادر:

درصورتی که حداقل یکی از این عوامل یا کافی، نوع و حجم باشد نمی توان سنگ مادر را به درستی ارزیابی نمود.

- مقدار ← میزان کمیت مادی آلی است ← Total organic carbon (TOC) که برحسب درصد بیان می شود.
- نوع ← بیان کننده کیفیت مادی آلی است ← کروژن نوع I، II، III، IV

انواع سنگ مادر:

- سنگ مادر فعال (Active Source Rock): سنگ های رسوبی که در حال حاضر توان تولید نفت دارند و یا در گذشته این توان را داشته اند و یا اینکه در آینده توانایی تولید مواد هیدروکربوری را خواهند داشت.
- سنگ مادر مؤثر (Effective Source Rock): به سنگ مادری اطلاق می شود که در حال تولید هیدروکربور است و یا در گذشته ی دور نفت تولید و رانده شده باشد.
- سنگ مادر بالقوه (Potential Source Rock): به سنگ مادری گفته می شود که دارای مقادیر مناسبی مادی آلی برای تولید نفت وجود داشته باشد. این سنگ مادر وقتی به سنگ مادر مؤثر تبدیل می گردد که در دماهای مناسب به حد بلوغ مناسبی برسد.
اینگونه سنگ مادرها در سنگ هایی هستند که در نقاطی بحرانی در حال تشکیل و راندن نفت است که معمولاً به سبب قدرفتن در داخل پتروفیزیک ها امور ستی گیرد
- سنگ مادر غیرفعال (Unactive Source Rock): سنگ هایی که تشکیل نفت در آن بنا به دلایلی متوقف شده باشد علیرغم اینکه سنگ مادر هنوز دارای توان نفت زایی است.
⇐ این نوع سنگ های مادر در شرایط بالا آمدگی و یا کاهش دما (جهت تشکیل نفت) وجود می آید
- سنگ مادر خاموش (Spent Source Rock): سنگ مادر خاموش مطرح شده است که از نظر نفت زایی آن به اتمام رسیده ولی هنوز اندکی توانایی تولید گازهای تر خشک را دارد
این نوع سنگ مادری است که به مرحله ی بلوغ رسیده و توان نفت زایی آن به اتمام رسیده ولی هنوز اندکی توانایی تولید گازهای تر خشک را دارد
این سنگ مادر حاوی کروژن نوع I و II است.
- سنگ مادر محدود (Limited Source Rock): سنگ مادری است که دارای ضخامت و کیفیت کمی است.
- سنگ مادر خاموش (Quinched Source Rock):
هم نفت و هم گاز آن تولید شده و تمام شده است و توان زایش نفت و گاز را ندارد.

پیرولیز راک اول دستگاه Rock E-Val

پیرولیز: حرارت دادن نمونه سنگ مادر در غیاب اکسیژن

پارامترها (parameters):

C_T = کربن کل = Total Carbon

C_P = کربن هیدروکربنی دیده (پیرولیز شده) = Pyrolysable Carbon

C_R = کربن باقیمانده = Residual Carbon

$C_T = C_P + C_R$

نمونه A

1.2% = 0.3 + 0.9

C_P بیشتر از C_R

یا بلوغ سنگ مادر بالاست و یا کیفیت تولید سنگ مادر پایین است.

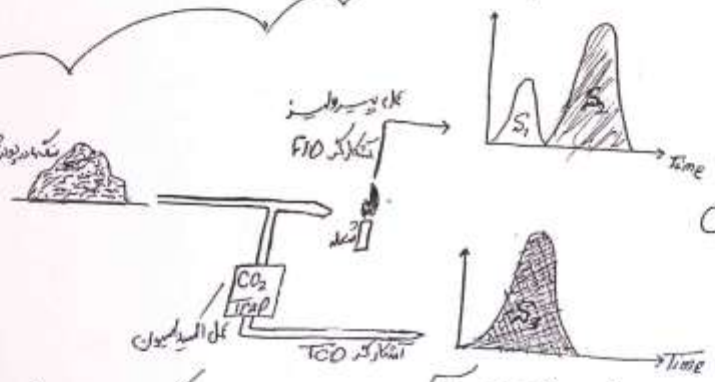
نمونه B

1.2% = 0.9 + 0.3

C_P بیشتر از C_R

یا بلوغ سنگ مادر پایین است و یا کیفیت تولید سنگ مادر بالاست.

شماتیک کارکرد Rock E-Val



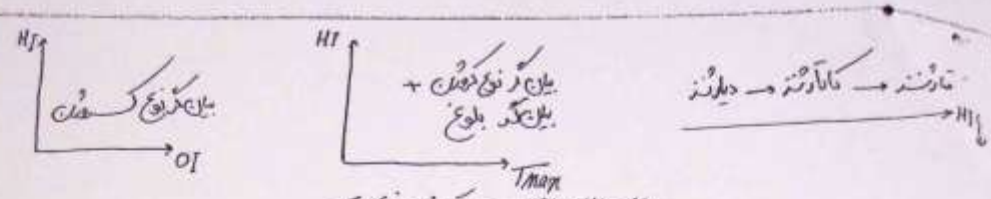
$C_T = C_P + C_R$

$S_1 + S_2$ S_3

- پیک S_1 ← درجه حرارت $90^\circ - 300^\circ$ بوجود می آید.
  مواد اشباع (S) و آروماتیک (A) به شکله می رسند و شکله پیرولیز می شود و پیک S_1 تولید می شود.
- پیک S_0 ← درآزمایشگاه S_0 نداریم؛ زیرا گاز موجود در سنگ مادر در پودر شدن فرصت می کند و دیگر وجود ندارد. (اگر حضاری صرفنظر S_0 دیده می شود.)
- پیک S_2 ← درجه حرارت 90° ایجاد می شود.
  درجه حرارت بین $300^\circ - 600^\circ$ بوجود می آید.
  هیدروکربن هر چیه توان دارد می شکند. ← کروژن هایی که در این دمای 600° سختی از آسفالتین (A) سختی از رزین (R) می شکنند.
  به آن پتانسیل کربن زایی می گویند.
- پیک S_3 ← طی عمل اکسیداسیون بخشی از رزین ها و آسفالتین های باقیمانده اکسید شده و پیک S_3 را تولید می کنند.
  درجه حرارت آن 600° است.
  بیان کربن باقیمانده از مواد آلی است.

بخشی از CO_2 آزاد می شود که در متیم آبی ایجاد نمی شود و این طی عمل اکسیداسیون C_P آزاد شده و اکسیدهای کربن (CuO) و اکسیژن O_2 محلول CO_2 آزاد می شود.

- در طی فرآیند اکسیداسیون علاوه بر پیک S_3، پیک S_4 هم ایجاد می شود.
- پیک S_4 بیان کربن باقیمانده از مواد معدنی است.



* در تقسیم بندی HI (در سنگ منشا دیاژنز)

III نوع کروژن ← $100 < HI < 150$

II نوع کروژن ← $250 < HI < 600$

I نوع کروژن ← $HI > 600$

$PI < 0.1$ ← نابالغ

$0.1 \leq PI \leq 0.4$ ← Oil

$PI > 0.4$ ← Gas

$0 < PI \leq 0.4$ ← بلوغ تا ابتدای پنجره نفتی محاسبه

$0.4 < PI < 0.6$ ← نابالغ (پنجره نفتی) وجود دارد و در حال گذشتن از نابالغ است.

$PI \geq 0.6$ ← وارد مرحله نابالغ می‌شود.

مثال: $20\ mg^{HC}/gr\ Rock$, $80\ mg^{HC}/gr\ Rock$, $PI = ?$

$$PI = \frac{20}{20+80} = 0.2$$

* قبل از پنجره نفتی پیک S_1 نداریم و یا خیلی کم داریم و معمولاً انتهای دیاژنز و ابتدای کاتاژنز S_1 تولید می‌شود.

* در عمق در زمان با افزایش S_1 مقدار S_2 کم می‌شود؛ زیرا پتانسیل تولید کاهش می‌یابد.

* وجود مواد آلی به اندازه‌ی کافی در سنگ مادر می‌تواند مقدماتی برای وضعیت آن از نقطه نظر تولید باشد.

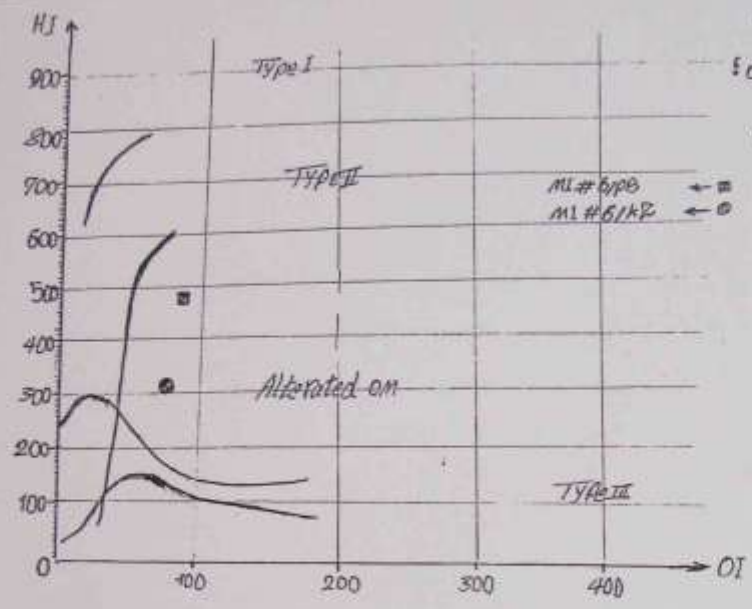
* وجود مقدار در حد نرمال کربن آلی زیاد در سنگ می‌تواند با تولید و پتانسیل هیدروکربور زایی نسبت مستقیم داشته باشد، ولی این فاکتور کافی نیست؛ زیرا عوامل دیگری نیز در این راستا موثر هستند ...

Organic Carbon %	Rating
0 – 0.5	Poor (ضعیف)
* 0 – 0.3 (برای کربنات)	
0.5 – 1.0	Fair (متوسط)
1.0 – 2.0	Good
2.0 – 4.0	Very Good
> 4.0	Excellent

← برای سنگ منشا

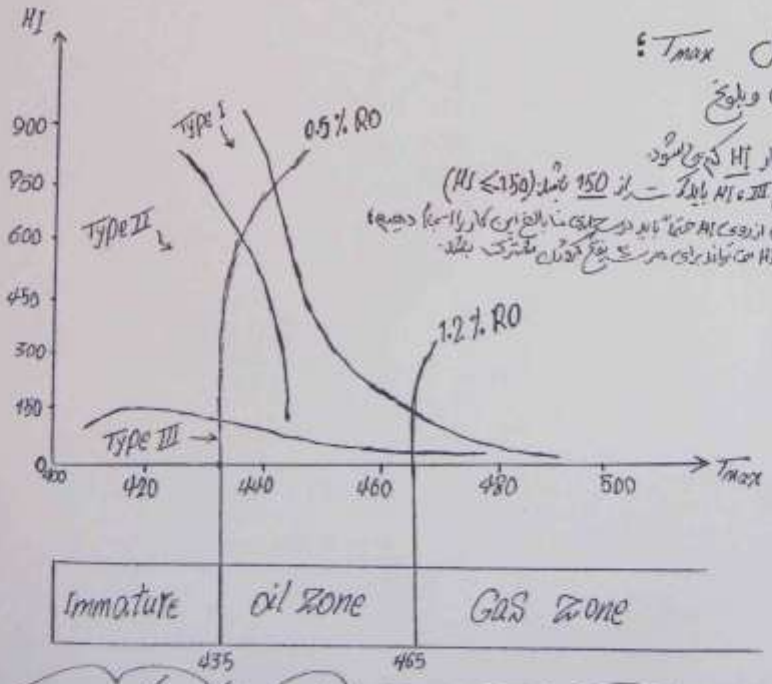
جلسه ششم (۲۹/۸/۹۵)

* نمودار HI در مقابل OI:
* تعیین کننده‌ی نوع کروژن



* نمودار HI در مقابل T_{max}:
* بیان کننده نوع کروژن و بلوغ

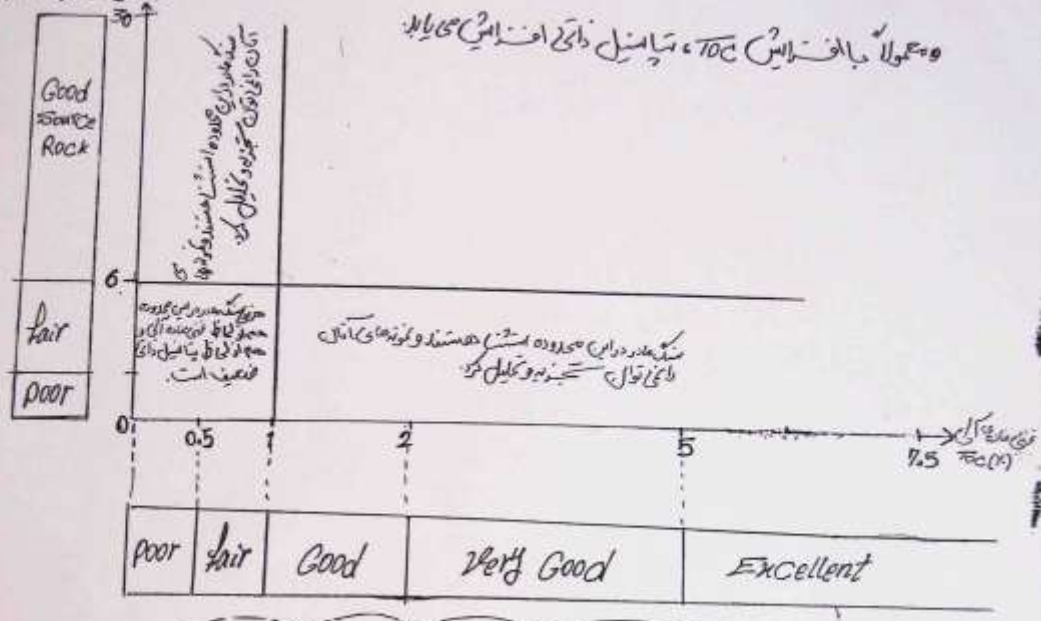
- با افزایش بلوغ از مقدار HI کم می‌شود.
- برای کروژن نوع III و II باید از 150 نشد (HI ≤ 150)
- برای کروژن نوع I و II HI باید در حداقل مراحل بلوغ این کار را انجام دهد
- زیرا در مراحل بعدی HI ها می‌تواند برای هر سه نوع کروژن مشترک باشد.



* آلودگی: حفاری را با گل پایه روغنی (گازوئیل) انجام دهند که منجر به آلودگی می‌شود.
  - محصول تولید شده در سنگ مادر (در مکان تولید) باقی می‌ماند نه بابت آلوده شدن محصول می‌شود.
  - (محصول باقی مانده در محل تولید به کروژن و مواد دیگر آلوده می‌شود)
* آلودگی: T_{max} را کاهش می‌دهد. ← T_{max} کمتر از مقدار واقعی (نابالغ) برآورد می‌کند در نتیجه در این صورت S_1 و S_2 داشته و نتیجه این است که کروژن نابالغ است.

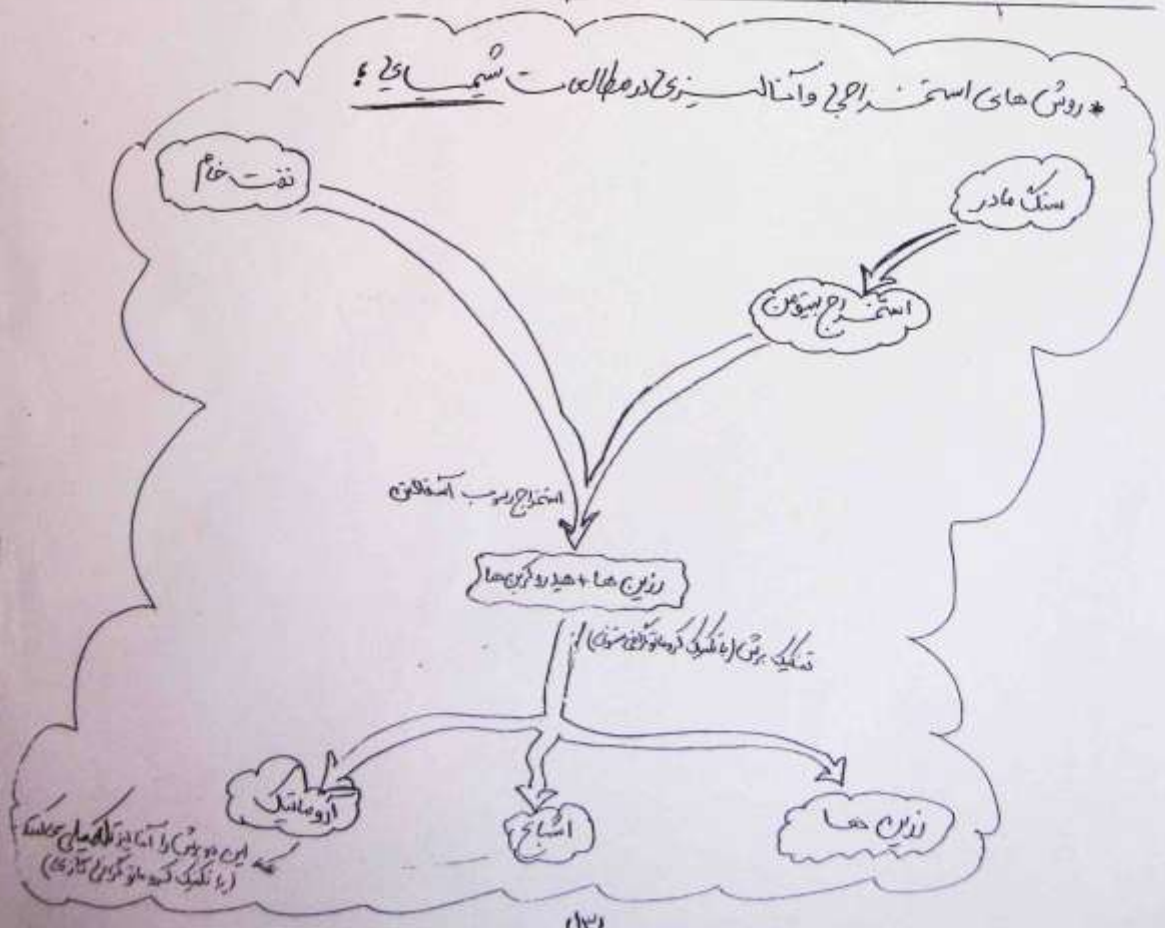
• رتبه بندی سنگ مادر با استفاده از دیاگرام نمودار تولید (PI) در مقابل محتوی کل کربن آلی (TOC)؛

پتانسیل زایی (S_1+S_2)



• معمولاً با افزایش TOC، پتانسیل زایی افزایش می یابد.

• روش های استخراج و آنالیز در مطالعات شیمیایی؛



Bio Markers

* بیو مارکرها، فسیل رئو شیمیایی یا شاخص زیستی: ترکیبات آلی هستند که دارای اسکلت کربنی هیدروکربوری و گاه، حوزه های رسوبی و سنگ های فسیلی یافت می شوند که ساختار آنها شبیه هیدروکربن های زیادی به مولکول های اجدادی حاصل از میکروارگانیسم ها دارند.

* ویژگی بیو مارکرها:
(1) از طریق هیدروکربن های غیر بیولوژیکی به مقدار زیادی قابل سنجش می باشند.
(2) ساختار این ترکیبات به گونه ای است که از لحاظ ترمودینامیکی پایداری زیادی دارند.
(3) وجود این ترکیبات دقیقاً مرتبط است با منشاء های بیوسنتزی در جانداران.
(4) معمولاً حجمی هستند.
(5) به مقدار بسیار کم (در حد ppm) یافت می شوند.
(6) روش شناسایی و تعیین خصوصیات آنها نیاز به دستگاه های مدرن و تجزیه ای گاهی می باشد.
شناسایی و تعیین خصوصیات بیومارکرها به روش تکنیک کروماتوگرافی - طیف سنجی جرمی (GC-MS) می باشد.
(7) هر چه مولکول پیچیده تر باشد، ارزش حاصل از آن با اهمیت خواهد بود.

« جلسه ی یازدهم (۱۰/۹/۱۳۹۱) »

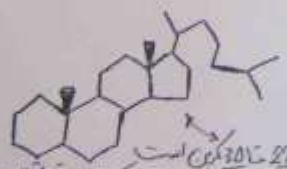
* بیومارکرها بیشتر از خانواده ی لیپیدها بدست می آیند.
* کاربرد بیومارکرها تا واسطه پنجره ی نفت زایی است و بعد آن از بین می روند.

* مهم ترین بیومارکرها:
(1) استرون پرینوئیدها ← مهمترین آنها پریستان و فیتان است.
خصوصیات: ۱- زنجیره های باز یا شاخه های متعدد

(2) استران ها (پیشینیان آنها استرول ها (الکل های حاوی هسته) هستند)

توزیع یافته
طبیعی (بیومارکرهای یافته در بیوسفر)
غیر طبیعی از دور (بیومارکرهای یافته در لیتوسفر)

هگزی ۳ دسته ی کلی بوده شده دارای ۴ حلقه ۱۷ کربنه هستند. ۳ حلقه سیکلوهگزان
۱ حلقه سیکلوپنتان



دارای ۲۷ تا ۳۵ کربن است
که ۱۷ کربن متعلق به حلقه ها و بقیه کربن ها متعلق به شاخه است.

دریایی: ۲۷ کربن
دریاچه ای: ۲۹ کربن
خشکی: ۲۹ کربن
نفت پالئوزوئیکی: ۳۰ کربن

(3) هوپان ها (از ۲۱ تا ۳۵ کربن دارند)
کنامران ↔ در محیط های لب شور وجود دارد.
اولئانان ↔ • برای تعیین سن به کار می روند.
• وجودش در ریوسات نشان می دهد که نفت حتماً سنی بالا دارد یا کروتاسه یا جوانتر از کروتاسه داشته باشد.

* هوپان های توسعه یافته: از ۳۰ کربن به بیشتر بوده و از کربن ۳۱ شروع می شود و تا ۳۵ تمام می شوند. همه ی آنها نفت پیک هستند.

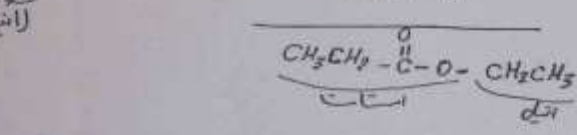
تقسیم بندی بر پایه گروه‌های عاملی:

مثال	فرمول کلی	گروه عاملی	
متان — اتان	C_nH_{2n+2}	ندارد	آلکان‌ها
اتن — پروپن	C_nH_{2n}	$C=C$	آلکن‌ها
اتین — بوتین	C_nH_{2n-2}	$C\equiv C$	آلکین‌ها
متانول — اتانول	$R-OH$	OH	الکل‌ها
فرمیک — استیک	$RCOOH$	$COOH$	اسیدها
فرمالدئید — استالدئید	$RCHO$	CHO	آلدئید
اتانون — دی اتیل کتون	$RR''C=O$	$C=O$	کتون‌ها
اتیل آمین — آنیلین	$R-NH_2$	NH_2	آمین‌ها
اتانوات اتیل — بنزوات اتیل	$RCOOR'$	COO	استرها
دی متیل اتر	$R-O-R'$	O	استرها

CH_3COOH ← اسید استیک

CH_3CH_2OH ← اتانول

آمینوبنزن (آنیلین)



تقسیم بندی بر اساس زنجیره‌های هیدروکربنی:

* در گروه‌های هیدروکربنی هر چه طول زنجیر افزایش یابد خاصیت CH_4 متفاوت است.
* خواص شیمیایی کلی هر گروه عاملی یکسان است.
(واکنش شیمیایی یک گروه عاملی در همه ترکیبات آن گروه مشابه می‌شود)
* با افزایش جرم مولکولی خواص فیزیکی ترکیبات هیدروکربنی تغییر می‌کند.

* حالات فیزیکی آلکان ها:
• زاویه ی پیوندی ← 109.5°
• هیبریداسیون ← sp^3
• چیدمان فضایی منظم
• حلال پیوند ← 1/54 انگستروم
• وزن مخصوص کمتر از آب
• چهار اتم اول کربن اول ← گاز
• از C_5 - C_{16} ← مایع
• از C_{17} به بالا ← جامد
• با افزایش کربن نقطه ی جوش هم زیاد می شود.

زاویه ی پیوندی آلکن ها ← 120°
هیبریداسیون آلکان ها ← sp^3
هیبریداسیون آلکن ها ← sp^2
هیبریداسیون آلکین ها ← sp

جلسه ی هفتم (۱۳۹۱/۸/۲۷)

* روش های (آزمایشگاهی) جداسازی بیتومن و نفت خام:

نفت خام و مواد آلی استخراج شده از سنگ های رسوبی (بیتومن)

هیدروکربن ها
- آلیفاتیک
  - زنجیری (aliphatic) (پارافین ها)
  - حلقوی غیراشباع (نفتن ها)
- آروماتیک
  - حلقوی کاملاً غیراشباع

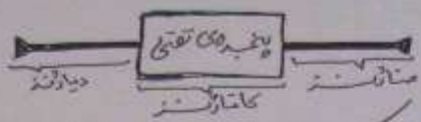
غیرهیدروکربن ها
- رزین
  - ترکیبات ماکرومولکولی
- آسفالتن
  - ترکیبات دارای N.S.O

* آلکان ها
- نرمال آلکان (n-Alkane): زنجیری بدون انشعاب و فقط شاخه ↔
- ایزو آلکان (Iso-Alkane): کربن شماره ی 2 انشعاب دارد ↔
- E-ntiso-Alkane: شاخه از کربن شماره ی 3 شروع می شود ↔

* رزین ها: گروهی از ترکیبات که اغلب دارای زنجیرهای اشباع و غیراشباع به همراه حلقه های متعدد اشباع و یا آروماتیکی می باشند که بوسیله ی اتم های غیرکربنی مانند اکسیژن (O)، سولفور (S)، نیتروژن (N) به هم متصل شده اند.

* مقاومت آسفالتن ها نسبت به رزین:
حلقه های آروماتیکی آسفالتن نسبت به رزین بیشتر و همین باعث مقاومت آن است.

* کسر رزین و هالل های آلی حل می شود؛ ماده ی آلی خارج شده از سنگ مادر و آزمایشگاه، بیتومن است.



بلوغ: حداکثر دمایی که در آن حداکثر تولید S_2 ایجاد می‌شود.

T_{max} ←
- کمتر از پنجره‌ی نفتی (دیاژنز) ← نابالغ
- در برابر پنجره‌ی نفتی (کاتاژنز) ← بالغ
- بیشتر از پنجره‌ی نفتی (متاژنز) ← بالغ را رد کرده و تولید گاز می‌کند.

* دماهای گفته شده (صفحه قبل) برای ایجاد پیک‌های S_1، S_2 و S_3 در آزمایشگاه و مخصوص آزمایشگاه است، اگر بخواهیم دمای تشکیل پیک‌ها در آزمایشگاه را با دمای تشکیل پیک‌ها در زمین تطبیق دهیم دمای بسیار کاهش می‌یابد (دمای تشکیل پیک‌ها در زمین بسیار کمتر از دمای تشکیل آن‌ها در آزمایشگاه است)

* دمای پنجره‌ی نفتی در آزمایشگاه ← $435^\circ - 465^\circ$
* دمای پنجره‌ی نفتی در زمین ← $50^\circ - 160^\circ$

جلسه‌ی نهم (۱۳۹۱/۹/۱۸)

* جزء آلی عامل پترولیز در سازوکار Rock-Eval، آشکارگر FID است.
* جزء آلی عامل اکسیداسیون در سازوکار Rock-Eval، آشکارگر TCD است.
* S_1 قبل از پنجره‌ی نفتی باشد ← دیاژنز ← نابالغ
* S_1 در پنجره‌ی نفتی ← کاتاژنز ← بالغ
* S_2 بعد از پنجره‌ی نفتی ← متاژنز ← فسیل بالغ
* کیفیت کروژن ← خوب ← دارای H بالا
  بد ← دارای O بالا

پارامترهای تشخیص بلوغ و کیفیت

1. Hydrogen Index (HI): $HI = \frac{S_2 \times 100}{TOC}$
   - هر چه بالاتر باشد، کیفیت کروژن بهتر است.
   - S_2 بالا، پتانسیل بالا، کیفیت کروژن بالا
2. Oxygen Index (OI): $OI = \frac{S_3 \times 100}{TOC}$
   - هر چه بالاتر باشد، کیفیت کروژن پایین است.
   - S_3 بالا، کیفیت کروژن پایین
3. نمودار تولید (PI): $PI = \frac{S_1}{S_1 + S_2}$ (مجموع هیدروکربن تولید شده / تقسیم بر هیدروکربن تولید شده + مقدار باقیمانده)
   - برای رتبه‌بندی اسنگ‌ها در بسیار مناسب است.
   - معمولاً در عفاری کاربرد خوبی دارد.
4. Transformation Index (TI): $TI = \frac{S_1}{TOC}$ (ضریب تبدیل)
   - مقدار TOC تبدیل به محصول می‌شود.
5. Potential Yield (PY): $PY = S_1 + S_2$ (ضریب تولید)