

干酪根的沥青降解潜力

杨文宽

(地质矿产部石油地质综合大队)

一、沥青降解潜力的计算方法

本文所说的“沥青降解潜力” P_b ，指的是干酪根生成沥青¹⁾的极限能力。它是一个没有量纲的量，可用百分数或毫克/克表示之。对于干酪根热降解过程的数学模拟来说，沥青降解潜力是一项基本参数。如果人工热解干酪根的实验装置允许沥青从干酪根中释放出来之后立即被收集起来而不会进一步演化，那么，从开始降解到彻底降解这一全过程中干酪根样品陆续释放出来的沥青的总重量同干酪根样品初始重量之比，就是这一样品的沥青降解潜力。

1. 第一种计算方法

如果知道干酪根样品的初始原子比和样品彻底降解后留下来的残余干酪根的原子比，也知道干酪根的 TGA 最终失重率 ρ ，就可以把样品释放出来的各类原子的数目算出来。举例如下。

茂名第三系油页岩的未成熟干酪根，其 H/C (原子比) 为 1.45, O/C (原子比) 为 0.10, 600 °C 失重率为 61.9 %^[1]。设所考虑的未成熟干酪根单元的碳原子数恰为 1000，则其氢原子数为 1450，氧原子数为 100。如果它所含有的氮、硫等原子少到可以忽略不计，那么它的重量应为 15050 原子量单位。彻底降解后，残余干酪根的重量应为 5734 单位。假定残余干酪根的 H/C 为 0.50, O/C 为 0.05 (表 2)，碳原子数为 x ，那么它的氢原子数和氧原子数分别为 $0.5x$ 和 $0.05x$ ，它的总重量为 $13.3x$ 单位。于是， $13.3x$ 等于 5734， x 等于 431。这就是说，残余干酪根中有 431 个碳原子、216 个氢原子和 22 个氧原子，而降解下来的碳、氢、氧原子分别为 569 个、1234 个和 78 个，总共 1881 个。

在算出降解原子数的基础上，引入某些假定——关于降解产物种类的假定，关于 H_2O 同 CO_2 的比率的假定，关于沥青 O/C 值的假定——就可以进一步算出沥青降解潜力。

在粗略估算的水平上，可以假定降解产物只有 CO_2 、 H_2O 和沥青。

根据 Ishiwatari 等人^[3,4]和 Durand-Souron 提供的资料^[3,4]，可知从干酪根中释放出来的 H_2O 所含氧原子同 CO_2 所含氧原子的个数比，大体上介于 2:1 至 1:2 之间，可以假定为 1:1 (当碳原子数恰为 1000 的干酪根单元降解下来的氧原子不超过 100 个时，采用这个比率而可能引起的 P_b 值的绝对误差，一般不超过 $\pm 0.5\%$ 。但这一比率不宜用于沥青原子比的计算)。

1) 本文中“沥青”(bitumen)一词，泛指液态可溶有机质(液态沥青)加气态烃。

至于沥青的 O/C 值,则需根据干酪根类型分别作出假定。Ⅲ型干酪根降解出来的沥青主要是甲烷和其它低分子量烃,沥青的 O/C 值可以假定为零。I、Ⅱ型干酪根直接降解出来的沥青主要是液态沥青,沥青 O/C 值可以参考沉积岩所含液态沥青的 O/C 值作出估计。Tissot 等对 1057 个分散沥青样品的统计资料表明,胶质 (resins) 加沥青质 (asphalt.) 平均占沥青总重量的 51.1%^[2]。Castex 的资料又表明, C₁₆₊ 抽提物中胶质和沥青质的 O/C, I 型干酪根分别为 0.045 和 0.053, Ⅱ型干酪根分别为 0.046 和 0.036^[4]。因此,对 I、Ⅱ型干酪根而言,沥青的 O/C 值可以假定为 0.02 (下文将会说明,这个比值取大一点还是取小一点,对沥青降解潜力的计算结果不会有很大影响)。

根据以上三方面的假定,如果上述茂名第三系油页岩干酪根单元降解出来的 1881 个原子中,有 u 个碳原子含于沥青内,则有 $0.02u$ 个氧原子含于沥青内。剩下的氧原子为 $(78-0.02u)$ 个,它们在 H₂O 和 CO₂ 生成过程中将结合掉 $(78-0.02u)/4$ 个碳原子和 $(78-0.02u)$ 个氢原子。由于

$$u + (78 - 0.02u)/4 = 569,$$

故沥青中的碳、氢、氧原子分别为 552 个、1167 个、11 个,总重量为 7967 单位,占干酪根单元初始重量的 53%。这就是说:茂名第三系油页岩干酪根的沥青降解潜力为 53%;1 克干酪根在最有利的条件下彻底降解,可以生成 530 毫克沥青。

以上计算沥青降解潜力的方法,比较复杂。在粗略估算的水平上,假定干酪根释放出来的氧原子全部含于 H₂O 和 CO₂ 之中,即假定沥青的 O/C 值等于零,也就行了。这样算得的茂名第三系油页岩干酪根单元降解出来的沥青中的碳原子数为 $569 - (78/4) = 550$ 个,氢原子数为 $1234 - 78 = 1156$ 个,沥青降解潜力为 52% (与上文计算结果仅相差 1%)。

把上文提出的计算方法整理一下,可以得到下面两个公式:

$$P_b = \frac{12 + (H/C) - 4(O/C)}{12 + (H/C) + 16(O/C)} - K(1 - \rho), \quad (1)$$

$$K = \frac{12 + (H/C)_r - 4(O/C)_r}{12 + (H/C)_r + 16(O/C)_r}. \quad (2)$$

式 (1) 适用于任何演化水平的干酪根。 K 是一个无量纲常数。 $(H/C)_r$ 和 $(O/C)_r$ 分别是干酪根彻底降解后留下来的残余干酪根的氢碳原子比和氧碳原子比。对 I、Ⅱ型干酪根来说, $(H/C)_r$ 可取 0.5, $(O/C)_r$ 可取 0.05 (表 2), 于是 $K = 0.92$ 。对 Ⅲ型干酪根来

表 1 有机质的沥青降解潜力

有机质	H/C	O/C	演化水平	ρ (%)	文献	P_b (%)
抚顺油页岩干酪根	1.43	0.115	未成熟	69.0	[9]	56
茂名油页岩干酪根	1.45	0.10	"	61.9	[1]	52
茂名油页岩干酪根	1.34	0.135	"	60.8	[9]	47
孢粉	1.56	0.34	"	80	[4]	46
Douala 盆地白垩系干酪根	1.00	0.20	"	34.4	[8]	16

ρ —TGA 最大失重率, P_b —沥青降解潜力

说, 这两项参数大约分别为 0.5 和 0.06 (表2), 故 K 应取值 0.91。

表 1 列出了孢粉和未成熟干酪根按式(1)算得的沥青降解潜力。表列计算结果是否准确, 无疑与初始原子比和 TGA 最大失重率这两项基础数据的准确度有关, 也与初始 O/C 值的大小有关(此值愈小则 P_b 值愈准确)。Ⅲ型干酪根降解下来的氧原子比较多, 采用下文第二种计算方法更为合适。

2. 第二种计算方法

与上文第一种方法相似之处是首先根据原子比和 TGA 最大失重率算出降解原子数, 不同之处是在进一步计算沥青降解潜力时, 不对氧的分配情况作出假定而对生成物的分子式作出假定。这一方法适用于Ⅲ型干酪根, 但不宜用于 I、II 型干酪根。现举表 1 所列 Douala 盆地白垩系干酪根为例介绍计算方法如下。

碳原子数恰为 1000 的该类干酪根单元彻底降解后, 残余干酪根中的碳原子数应为

$$x = \frac{(12 \times 1000 + 1 \times 1000 + 16 \times 200)(1 - 0.344)}{12 + 1 \times 0.5 + 16 \times 0.06} = 790.$$

于是, 从干酪根单元中降解出来的碳原子为 $1000 - x = 210$ 个, 氢原子为 $1000 - 0.5x = 605$ 个, 氧原子为 $200 - 0.06x = 153$ 个。假定生成物只有 y 个 H_2O 分子、 z 个 CO_2 分子和 w 个 CH_4 分子而没有其它物质, 那么:

$$z + w = 210$$

$$2y + 4w = 605$$

$$y + 2z = 153.$$

于是, $y = 18$, $z = 68$, $w = 142$, CH_4 占干酪根单元初始重量 16200 单位的 14% (即沥青降解潜力为 14%, 与表 1 所列计算结果相差 2%)。

3. 第三种计算方法

如果只知道干酪根的初始原子比而不知道它的最大失重率, 那么, 除了对降解产物的种类和氧的分配比率作出假定外, 还必须对沥青的 H/C 值作出假定, 才能估算出沥青降解潜力。由于作出的假定往往不正确, 因此算得的 P_b 值 (特别是 I、II 型干酪根的 P_b 值) 可能很不可靠。下文以Ⅲ型门限干酪根为例, 说明计算方法。

本文把处于成熟状态始点的干酪根称为“门限干酪根”。Ⅲ型门限干酪根的 H/C 值约为 0.80, O/C 值约为 0.18。它彻底降解后, (H/C)_r 值一般约 0.5, (O/C)_r 值一般约 0.06 (表2)^[1]。因此, 如果所考虑的门限干酪根单元含有 1000 个碳原子, 它就含有 800 个氢原子和 180 个氧原子。如果残余干酪根的碳原子为 x 个, 那么它的氢、氧原子分别为 $0.5x$ 个和 $0.06x$ 个。假定降解产物只有 CH_4 、 H_2O 和 CO_2 , 而且 H_2O 的分子数等于 CO_2 的 2 倍 (相应的氧的比率为 1:1), 那么, 若以 z 表示 CO_2 分子数, w 表示 CH_4 分子数, 就可列出下列方程组:

$$1000 - x = z + w$$

$$800 - 0.5x = 4z + 4w$$

$$180 - 0.06x = 4z.$$

这 3 个方程式分别反映碳、氢、氧 3 种原子在数量上的平衡, 等号左端表示从干酪根单元中降解出来的原子个数, 等号右端表示降解产物的原子个数。由这一方程组可知, 残余

干酪根中还剩下 914 个碳原子、457 个氢原子和 55 个氧原子；降解出来的 86 个碳原子、343 个氢原子和 125 个氧原子，形成 63 个 H_2O 分子、31 个 CO_2 分子和 54 个 CH_4 分子。于是，此种门限于酪根的沥青降解潜力（在这个具体问题中，沥青全是甲烷）约为 6%，最大失重率约为 22%。

二、不同类型干酪根沥青降解潜力的比较

选择门限于酪根作为衡量不同类型干酪根沥青降解潜力的标准物，也许比较合适。根据 Tissot 的总结，处于生油带始点的 I、II、III 型干酪根，亦即本文所说的 I、II、III 型门限于酪根，其 H/C 平均值分别为 1.45、1.25 和 0.8，而 O/C 平均值分别为 0.05、0.08 和 0.18（表 2）^[1]。如果它们的最大失重率分别为 65%、50%（以上两个数字是根据未成熟干酪根的最大失重率估算的）和 22%（参见上文），那么它们的沥青降解潜力分别为 61%、43% 和 6%（表 3）。

表 2 干酪根原子比的变化（据 B.P. Tissot）

演 化 程 度	I 型		II 型		III 型	
	H/C	O/C	H/C	O/C	H/C	O/C
生 油 带 始 点	1.45	0.05	1.25	0.08	0.8	0.18
湿 气 带 始 点	0.7	0.05	0.7	0.05	0.6	0.08
干 气 带 始 点	0.5	0.05	0.5	0.05	0.5	0.06

表 3 门限于酪根的甲烷生成率

类 型	H/C	O/C	最大失重率 (%)	沥青降解潜力 (%)	甲烷生成率 (%)
I	1.45	0.05	65	61	35
II	1.25	0.08	50	43	25
III	0.80	0.18	22	6	6

应该指出，所谓 I、II、III 型只是干酪根的“主要类型”（principal types, P. 143）^[2]或“基本类型”（basic types, P. 455）^[2]，“最为常见”的类型（P. 143）^[2]，并没有把所有干酪根都包括在内。许多干酪根样品很难归入哪个“主要类型”之中；如果把它们表示在 Van Krevelen 图上，并不恰好位于 Tissot 用来表示演化途径（evolution paths）的线条上面或线条附近。这一点，Tissot 在法国石油研究所的同事 Durand 等提供的资料（P. 126，原图 4·6）^[4]也可以作为证明。

还要指出的是，Tissot 用来划分干酪根类型的依据，实际上仅仅是原子比 H/C 和 O/C。然而，考虑到干酪根的同分异构现象可能影响它的化学性质，可以认为，具有相似原子比的干酪根是否一定具有相似的最大失重率和相似的沥青降解潜力，还需要研究。

三、沥青降解潜力的实现

人工热解干酪根的实验装置可以归纳为开放系统与封闭系统两类。对开放系统来说，

沥青、 H_2O 和 CO_2 等从干酪根中释放出来之后立即被从加热器中移走从而避免了进一步演化,所以从干酪根开始降解到彻底降解这一全过程中由加热器出口排出的沥青的总重量同干酪根样品初始重量之比,恰好等于沥青降解潜力。这就是说,在开放系统中,沥青降解潜力能够充分实现。

对封闭系统来说,沥青、 H_2O 和 CO_2 等从干酪根中释放出来之后,由于没有被移走,将与尚未彻底降解的干酪根一起,在相同的温度、压力条件下进一步演化。沥青的进一步演化,例如生成甲烷等低分子量烃而脱出(separate out)碳原子,释放出 H_2O 和 CO_2 而减少自身的杂原子,等等,将使得沥青的保存量小于沥青的生成量。而从沥青中脱出来的碳渣,将与干酪根混在一起,形成“干碳混合物”。所以,把I、II型干酪根样品密封于容器中加热,它们的沥青降解潜力并不能充分实现。但是,对III型干酪根来说,由于它生成的烃本来就主要是甲烷,沥青降解潜力大体上能够实现。

现实的生气地质环境,既非典型的封闭系统,也不是典型的开放系统。干酪根的液态、气态产物中的一部分会陆续从源岩中运移出去,但一般说来并非一旦生成就立即进行初次运移。暂时留在源岩中的沥青会进一步演化,它脱出的碳渣将与干酪根混在一起;而已经实现了初次运移的油气,也会进一步演化,只是演化过程的温度、压力条件可能不同于源岩,而且它所脱出的碳渣不会和源岩中的干酪根混在一起。

四、甲烷生成率的估算方法

如果把源岩看成是封闭系统,那就比较易于对干酪根的热降解过程进行数学模拟,算出不同演化阶段的干酪根剩存量、液态沥青量和气态烃量^[9]。除了数学模拟之外,也可以利用原子比和其它实验数据,对干酪根最终生成的甲烷的重量同干酪根初始重量之比,即“甲烷生成率” P_m ,作出估计。

1. 利用热重等实验成果计算甲烷生成率

上文关于茂名油页岩干酪根的计算表明,如果此类未成熟干酪根单元含有1450个氢原子,那么在样品热降解过程中,将有1167个氢原子陆续转移到沥青中。假定沥青在进一步转化为甲烷的过程中不能从介质中获得氢,那么最多只有1167个氢原子转入甲烷中。甲烷的分子数将是292,其重量为4672单位,仅占干酪根单元初始重量15050单位的31%。把本文计算甲烷生成率 P_m 的方法整理一下,可以写出:

$$P_m = \frac{4(H/C - O/C)}{12 + H/C + 16O/C} - 4(1 - \rho) \frac{(H/C)_r - (O/C)_r}{12 + (H/C)_r + 16(O/C)_r} \quad (3)$$

如果I、II、III型门限干酪根的最大失重率分别为65%、50%和22%(参见上文),那么根据表2数据用式(3)算出的甲烷生成率,I型为35%,II型为25%,III型为6%(表3)。

2. 利用密封加热等实验成果计算甲烷生成率

计算方法与上文计算沥青降解潜力的方法相似,现以Tanner盆地干酪根为例说明之。

该盆地海相新沉积物干酪根, H/C 为1.37, O/C 为0.411, N/C 为0.091。密封之后在410°C温度下加热24小时,残余干酪根加碳渣(以下简称“干碳混合物”)的 H/C 为0.58, O/C 为0.085, N/C 为0.075,重量相当样品初始重量的55.3%^[10]。设

所考虑的干酪根单元有 1000 个碳原子，实验结束时干碳混合物中有 x 个碳原子，那么

$$x = \frac{(12 \times 1000 + 1 \times 1370 + 16 \times 411 + 14 \times 91) \times 55.3\%}{12 + 1 \times 0.58 + 16 \times 0.085 + 14 \times 0.075} = 783.$$

于是，干碳混合物中有 454 个氢原子、67 个氧原子和 59 个氮原子，液态和气态产物中有 217 个碳原子、916 个氢原子、344 个氧原子和 32 个氮原子。如果这 344 个氧原子按 1:1 的比率分别含于 172 个 H_2O 分子和 86 个 CO_2 分子之中从而结合掉 86 个碳原子和 344 个氢原子，那么其余的 131 个碳原子、572 个氢原子和 32 个氮原子除了形成 131 个 CH_4 分子外，还可形成少量 N_2 分子和 H_2 分子或 NH_3 分子， CH_4 占干酪根单元初始重量的 10%。

如果假定气态和液态产物中的碳、氢、氧只组成 CH_4 、 H_2O 和 CO_2 而不组成 H_2 、 CO 等其它物质，那就不需要再对 H_2O 中氧原子与 CO_2 中氧原子的比率作出假定，也能算出甲烷生成率。就 Tanner 盆地干酪根单元而言，已知气态和液态产物中的碳、氢、氧原子分别为 217 个、916 个和 344 个，如果这总共 1477 个原子经过复杂的分配过程，最后只组成 y 个 H_2O 分子、 z 个 CO_2 分子和 w 个 CH_4 分子而不组成其它物质，那么：

$$z + w = 217$$

$$2y + 4w = 916$$

$$y + 2z = 344.$$

于是， CH_4 分子数为 137 个， H_2O 分子数为 184 个， CO_2 分子数为 80 个，甲烷生成率为 10%， H_2O 中氧原子同 CO_2 中氧原子之比为 1.15:1。

由于文献[3]提供的 O/C 值并不准确（氧含量是用差减法求得的），同时由于实验结束时干酪根尚未彻底降解，所以 10% 这个数字只是甲烷生成率的近似值。

五、有机碳的几个比值

干酪根中的碳原子，按照它们在热降解过程中的分配情况，可以划分为 3 类：始终不能从干酪根中释放出去的无潜力碳，可能转移到沥青中的有潜力碳，可能转移到 CO_2 和 CO 中的碳氧化合物碳^[13]。有潜力碳在干酪根演化过程的末期将有一部分保留在甲烷分子中，另一部分则成为碳渣。在利用上文第一种方法计算沥青降解潜力的过程中，我们事实上同时算出了各类碳原子的相互比率。表 4 列出了 I、II、III 型门限干酪根（即 H/C 分别为 1.45、1.25 和 0.80 而 O/C 分别为 0.05、0.08 和 0.18 的干酪根）的碳原子组成情况。

表 4 门限干酪根的碳原子组成

干 酪 根 类 型			I	II	III
无 潜 力 碳			375	546	909
可 降 解 碳	碳 氧 化 合 物 碳		8	13	31
	有 潜 力 碳	甲 烷 碳	308	231	55
		碳 渣	309	210	5
		小 计	617	441	60
合 计			1000	1000	1000

在油气资源量预测工作中,人们除了需要知道干酪根的沥青降解潜力外,还需要知道岩石中固态有机物(残余干酪根,或干碳混合物)所含碳的实测丰度(它等于用目前通用的实验方法测得的总有机碳丰度减去有机溶剂抽提物碳丰度)同门限干酪根碳的丰度之间的比率,以及它同保存下来的(包括已进行初次运移的和残留在源岩中的)沥青所含碳的丰度之间的比率。表5列出了根据表4数据估算出来的一些结果,在进行这一估算时,作者假定门限干酪根有潜力碳占“原始干酪根有潜力碳”的94%^[13]。

表5 有机碳的几类比值

比值意义		门限干酪根 固态有机质碳			沥青碳 固态有机质碳			沥青碳 门限干酪根碳		
干酪根类型		I	II	III	I	II	III	I	II	III
生油门限		1.00	1.00	1.00	0.039	0.028	0.004	0.039	0.028	0.004
半降解*		1.46	1.30	1.07	0.508	0.324	0.036	0.348	0.249	0.034
全降解**	封闭系统	1.42	1.30	1.08	0.466	0.318	0.065	0.328	0.245	0.059
	开放系统	2.67	1.83	1.10	0.873	0.449	0.065	0.328	0.245	0.059

* 指有潜力碳已释放50%。假定此时CO₂已全部释放,但已生成的沥青尚未进一步演化。

** 指干酪根已彻底降解,液态沥青也已全部演化为甲烷等产物。

六、易与“沥青降解潜力”相混淆的术语

1. Tissot 的“genetic potential”

Tissot 提出过“genetic potential of kerogen”这么一个术语,并且用符号 x_0 表示它。Tissot 本人说, x_0 指的是干酪根中“不稳定的(可热解的)有机质的总量”(P.503)^[2]。把 Tissot 提供的 x_0 数据(I型干酪根为89.5%,II型为69.5%,III型为31.3%)^[2]同他提供的热重实验资料进行对比之后可知, x_0 实际上就是热重实验测得的未成熟干酪根的最终失重率。因此, x_0 值理应高于本文讨论的沥青降解潜力。

但是,Tissot 也说过: x_0 是干酪根“可能产生的烃的总量”(P.505)^[2];绿河页岩I型干酪根的“ x_0 值为0.8到0.9”,意味着“有机质的80%到90%能够转化为油”(P.508)^[2]。由于 Tissot 本人没有始终坚持他对“genetic potential”这一术语下的正确定义,加上这个术语被不甚贴切地译为“生油潜力”,以致 x_0 值常被人们误解为干酪根所生油气的重量同干酪根本身的初始重量之比。为了避免这一误解继续下去,建议把“genetic potential”改译为“总降解潜力”。

2. 李汶国的“累积生油气量”

从李汶国同志的论文^[6]可以看出,他设想的生油气地质环境是典型的封闭系统,他算出的“累积生油气量”实际上是保存下来的沥青(液态沥青加气态烃)同干酪根初始重量之比。所谓“干气中后期”的“一般有效累积生油气量”(原表5)^[6],其含义与本文谈到的门限干酪根的“甲烷生成率”是一致的。

李汶国同志的计算方法,类似上文介绍的计算沥青降解潜力的第三种方法。他是在不考虑失重率的条件下,对降解产物的化学组成作出假定并对CO₂同H₂O的比率作出假

定, 然后进行计算的¹⁾。他作出的一部分假定很有商榷的余地。例如, 他假定干酪根从“未成熟阶段开始时”到未成熟阶段终点, 只生成 CH_4 、 CO_2 和 H_2O 而不生成液态沥青, 就与实验资料不符, 也与地质资料不符。王涵云等用东营盆地通 23 井沙河街组三段干酪根在 250°C 温度下加热达 100 小时, 仍然没有气态烃生成, 但是有少量液态烃 (占样品重量的 3.1%) 生成²⁾。在实际的地质剖面中, 人们也经常观察到未成熟干酪根和液态分散沥青共存。虽然某些新沉积物可以生成一定数量的甲烷, 甚至可以形成气藏¹⁾, 但是这些甲烷主要是生物化学作用生成的, 与未成熟干酪根的热降解无关。

顺便指出, 李汶国同志把分子量较大的烃在进一步裂解为 CH_4 等低分子量烃的过程中所脱出的碳渣, 也包括在“干酪根”中了。这就是为什么他算得的 I 型干酪根在“成油末期”和“过成熟阶段”的碳原子数反而高于“成油中期”(原表 2) 的原因。

结 束 语

本文重点在于探讨干酪根沥青降解潜力的计算方法, 而不在于提供具体的计算结果。所谓 I、II、III 型干酪根, 只是干酪根的 3 个主要类型, 并没有把所有干酪根都包括在内。因此不同盆地不同层位干酪根的沥青降解潜力, 需要根据具体的基础资料分别进行计算。本文提供的第一、二两种计算方法既考虑了干酪根原子比的变化, 也考虑了热重实验测得的最大失重率, 因而是比较可行的。但是作者所采用的关于氧原子分配情况的假定以及其它假定是否十分合适, 尚待实践检验。

致谢: 作者向关士聪、焦守谏、陈丕济、李执等同志表示感谢, 由于他们的鼓励和指教, 作者才有勇气写出此文。

(收稿日期 1983 年 9 月 19 日)

参 考 文 献

- [1] 李 执等, 1982, 干酪根热降解反应动力学参数测定的研究, 石油实验地质, 第 4 卷, 第 3 期。
- [2] Tissot, B. P., Welte, D. H., 1978, Petroleum formation and occurrence, Springer-Verlag, Berlin.
- [3] Ishiwatari, R. et al., 1978, Hydrocarbon generation by thermal alteration of kerogen from different sediments, AAPG Bull., Vol. 62, No. 4.
- [4] Durand, B. et al., 1980, Kerogen—insoluble organic matter from sedimentary rocks, Graham & Trotman Ltd., London.
- [5] 杨文宽, 1982, 一级反应方程的近似解及其在油气定量预测中的应用, 石油与天然气地质, 第 3 卷, 第 2 期。
- [6] 李汶国, 1981, 各类干酪根不同成熟阶段生油气量的探讨, 石油与天然气地质, 第 2 卷, 第 3 期。
- [7] 张义纲等, 1983, 论生物气的生成和聚集, 石油与天然气地质, 第 4 卷, 第 2 期。
- [8] Vandenbroucke, M. et al., 1976, Geochemical studies on the organic matter from the Douala Basin (Cameroon) — II, Comparison with the Early Toarcian Shales, Paris Basin, France, Geochimica et Cosmochimica Acta, Vol. 40, No. 10.
- [9] 张大江等, 1983, 油页岩干酪根热降解的动力学性质及其地球化学意义, 石油与天然气地质, 第 4 卷, 第 4 期。
- [10] Tissot, B. P. et al., 1978, Geochemical study of the Uinta Basin, Formation of petroleum from the

1) 例如 I 型干酪根, 李汶国同志假定所考虑的干酪根单元在“未成熟阶段开始时”的碳、氢、氧原子数分别为 100 个、137 个和 13 个, 又假定“干气中后期”的降解产物只有 CH_4 、 CO_2 和 H_2O 而且 CO_2 与 H_2O 的比率为 1:2, 于是他算出“干气中后期”干酪根的碳、氢、氧原子分别为 65.27 个、28.07 个和 1.89 个 (原表 2)。这就是说, 从“干酪根”中释放出来的碳、氢、氧原子分别为 34.73 个、138.93 个和 11.11 个, 共组成 31.96 个 CH_4 分子、2.78 个 CO_2 分子和 5.55 个 H_2O 分子, 其中 CH_4 重 511.36 单位, 占“原始干酪根”重量 1575 单位的 32.46% (原表 3)。

2) 王涵云、杨天宇, 1982, 未成熟干酪根热解成气实验报告。

- [11] Dow, W. G., 1977, Kerogen studies and geological interpretation. *J. Geochem. Explor.*, Vol.7, No. 2.
- [12] Saxby, J. D., 1977, Oil-generation potential of organic matter in sediments under natural conditions. *J. Geochem. Explor.*, Vol. 7, No. 3.
- [13] 杨文宽, 1981, 油气定量预测方法的探讨. 石油与天然气地质, 第2卷, 第2期.

BITUMEN GENERATION POTENTIAL OF KEROGEN

Yang Wenkuan

(*Comprehensive Research Institute of Petroleum Geology,
Ministry of Geology and Mineral Resources*)

Abstract

Methods for estimating the bitumen and the methane generation potentials of kerogen are proposed in this paper. The problem of estimating the initial abundance of kerogen according to the abundance value of organic carbon is also discussed. It is worth noting that, in these methods, not only the changes of atomic ratio of kerogen have taken into account, but also the TGA weight loss of kerogen has considered.

The *bitumen generation potential* means the maximum capacity of kerogen to yield liquid bitumen plus gaseous hydrocarbon. As for the types I, II and III of kerogen being at the threshold of petroleum generation, their bitumen generation potentials are about 61%, 43% and 6% respectively.

The *methane generation potential* means the weight ratio of the methane versus the initial kerogen generated after complete degradation of the latter, with respect to the types I, II and III of kerogen being at the threshold of petroleum generation, the methane generation potentials are respectively about 35%, 25% and 6%.

For a close system of petroleum generation, after complete degradation of kerogen, residual solid carbon abundance being multified by factors of 1.42, 1.30 and 1.09 may correspond respectively to the carbon abundance of the kerogen types of I, II and III being at the threshold of petroleum generation. While for a open system, factors to be multified are 2.66, 1.83 and 1.10 respectively.