

مطالعه ژئوشیمیایی و طبقه بندی ژنتیکی نفت های مخزن فهلیان با استفاده از طیف سنجی مادون قرمز در میادین دارخوین و یادآوران

محمد علی شاهمرادی^۱، محمد حسین صابری^{۲*}، بهمن زارع نژاد^۳، علی چهارزی^۴

^۱ دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی نفت، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران

^۲ * استادیار گروه مهندسی نفت، دانشکده مهندسی نفت، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران

^۳ دانشیار گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران

^۴ شرکت نفت ایران

*mh.saberi@semnan.ac.ir

دریافت اردیبهشت ۱۳۹۹، پذیرش تیر ۱۴۰۰

چکیده

برای انجام تطابق های ژئوشیمیایی گام اول شناسایی ساختار مولکولی و ترکیبی نفت است. یکی از روش های تطابق استفاده از طیف سنجی مادون قرمز برای تشخیص و مقایسه ساختار نمونه های نفت است. روش طیف سنجی مادون قرمز، روشی کاربردی با تفسیر آسان، کم هزینه و نتایج قابل اعتماد برای تعیین ساختار ترکیبات آلی است. همچنین با توجه به رشد چشمگیر تمایل به توسعه روش های تجزیه ای سریع، دقیق و قابل اعتماد برای کاربردهای صنعتی و همینطور کشف منابع جدید هیدروکربوری در حوضه رسوبی دشت آبادان مانند میادین نفتی دارخوین و یادآوران در چند سال اخیر، بیانگر ضرورت انجام مطالعات جامع تر در این حوضه رسوبی است. بر این اساس ۱۵ نمونه نفت خام از مخزن فهلیان در مهمترین میادین نفتی این حوضه یعنی دارخوین (۹ نمونه) و یادآوران (۶ نمونه) واقع در جنوب غربی ایران انتخاب و مورد بررسی قرار گرفت. با تقسیم بندی نمونه ها از طریق ارزیابی نفت خام، اهداف مورد نظر در این مطالعه تحقق یافت. با استفاده از طیف سنجی مادون قرمز گروه های عاملی موجود در نمونه ها تعیین و سپس میزان گروه های عاملی موجود در نمونه های مختلف با یکدیگر مقایسه گردید. نتایج حاصله از طیف سنج مادون قرمز و بررسی نمونه های نفت میادین نفتی مورد مطالعه نشان داد که این نفت ها مربوط به سه خانواده مستقل هستند. اولین خانواده نفتی شامل نمونه های DN6, DN9, YAD2, YAD4, YAD6، دومین خانواده نفتی شامل نمونه های DN1, DN2, DN3, DN4, DN5, DN8 و YAD1، و سومین خانواده شامل نمونه DN7 می باشند. به کار گیری روش های HCA و PCA نیز تاییدی بر گروه بندی نمونه ها بر اساس نمودار شاخص آروماتیک در مقابل مجموع شاخص های کربونیل و سولفوکسید بود. در این پژوهش نشان داده شد که طیف سنج مادون قرمز یک گزینه تجزیه ای سریع، قابل اعتماد و غیر مخرب و مکمل روش کروماتوگرافی و آنالیز بایومارکر ها، جهت انجام اهداف مختلف علمی و صنعتی در صنعت نفت از جمله سنجش کیفیت، کمیت و ارزیابی ژئوشیمیایی نفت می باشد.

کلمات کلیدی: نفت خام، طیف سنجی مادون قرمز، مطالعه ژئوشیمیایی، تطابق نفت - نفت، مخزن فهلیان

۱- مقدمه

نفت خام یک منبع انرژی مهم است که دارای ترکیبات شیمیایی متفاوتی است. ترکیبات شیمیایی نفت وابسته به عوامل مختلفی از جمله، موقعیت جغرافیای، زمان تشکیل، زمان استخراج و وقوع فرآیند های گوناگون می باشد. افزایش مصرف و تقاضای جهانی برای محصولات هیدروکربنی باعث شده که علاقه زیادی به بهره برداری و استفاده از منابع غیر متعارف مانند نفت و گاز در سراسر جهان به وجود آید. ژئوشیمی نفت برای ارتقا کیفیت اکتشاف و تولید بکار میرود. در حقیقت ژئوشیمی مخزن با مطالعاتی که بر روی نفت انجام می دهد به عنوان یک روش اثبات شده در این صنعت محسوب می شود. از ژئوشیمی به عنوان یک ابزار قدرتمند و تئوری کاربردی جهت شناخت منشأ نفت، مهاجرت و تجمعات نفتی نیز استفاده های کاربردی می شود [۲۳ و ۳۰]. روش های متفاوتی برای بررسی خصوصیت سنجی نفت و ارزیابی کیفی آن وجود دارد، برای این منظور طیف سنج مادون قرمز^۱ به طور گسترده برای تشخیص تغییرات و ارزیابی کیفی سیال و سنگ مخزن و همچنین ارزیابی تقسیم بندی مخزن به کار گرفته شده است [۲۶ و ۲۷]. این روش مورد استفاده قرار گرفته تا شناخت بهتری برای ترکیبات شیمیایی و اجزای ساختاری نفت خام ارائه شود. طبق مطالعات قبلی درحقیقت طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز، یک تکنیک غیر مخرب است که برای بدست آوردن اطلاعات کمی از نفت به کار می رود. تکنیک طیف سنجی اطلاعات زیادی در مورد نمونه را در سطح مولکولی، در مدت زمان کوتاه و با مقدار کمی از نمونه فراهم می کند که با استفاده از این تکنیک نیز می توان ویژگی های فیزیکوشیمیایی نفت خام را مشخص کرد [۳۶ و ۳۷]. همچنین طبق مطالعات قبلی این روش می تواند همراه با روش های چند متغیره برای طبقه بندی نفت ها مورد استفاده قرار گیرد [۳۹]. در سال های اخیر با استفاده از روش طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز، ارزیابی های ژئوشیمیایی متعددی بر روی نفت خام میدان های نفتی در سراسر جهان انجام شده است. چریستای و همکاران (۱۹۸۹) که مطالعات طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز خاصی را برای ساختارهای شیمیایی در کروژن انجام دادند و پارامترهایی نظیر: تعیین میزان بلوغ، نوع کروژن و پتانسیل تولید نفت و گاز را مشخص کردند [۱۳]. پرمنیر و همکاران (۲۰۰۲) در میدان نفتی سلام در صحرای غربی مصر با استفاده از طیف سنج مادون قرمز تفاوت ها در ترکیب نفت را مشخص کردند و ارتباط سیالات را از طریق گسل ها بین مخازن در عمق های مختلف فرض کردند. پس از این رویکرد این روش را بر روی مجموعه ای از نفت های مدیترانه ای از حوضه تاراگونا در دلتای ابرو که در شمال شرقی اسپانیا واقع شده بود انجام دادند و در نهایت در یک آزمایش سوم این روش را برای مجموعه ای از نفت های تولیدی از میدان ال فوریال حوضه شرقی ونزوئلا به منظور ارزیابی امکان بخش بندی اعمال کردند [۲۸ و ۲۹]. هوانگ و همکاران (۱۹۹۴) با انجام طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز بر روی نمونه های نفت بیان کردند که تفاوت های کوچک در ترکیب ساختاری نفت خام که ممکن است در مخازن رخ دهد جهت بخش بندی مخزن مورد استفاده قرار میگیرد [۱۷ و ۱۸]. پرمنیر و همکاران (۲۰۰۷) نمونه های نفت خام میدان های رودبالو، بوکرون، کازابلانکا در حوضه تاراگونا در شمال شرقی اسپانیا را مورد آزمایش قرار دادند که در این آزمایش از طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز استفاده

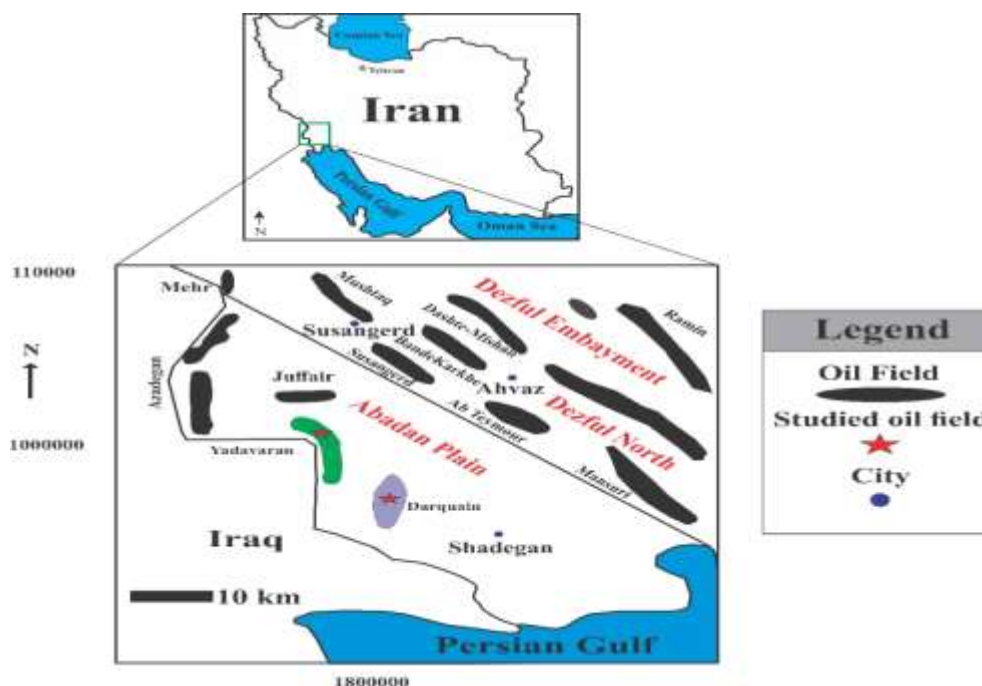
¹ FTIR

کردند و با مقایسه نتایج حاصله با نتایج کروماتوگرافی گازی بیان کردند که ویژگی های نفت خام و همچنین سیر تحولی و تغییرات در ویژگی های نفت در مخزن را می توان با دو روش کروماتوگرافی گاز و طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز توصیف کرد [۱۱]. آنها بر اساس نتایج بدست آمده، روش طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز را به عنوان ابزاری با ارزش و جدید در حوزه ژئوشیمی تایید کردند و به این نتیجه رسیدند که روش طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز می تواند به عنوان یک جایگزین خوب یا مکمل روش کروماتوگرافی در ارزیابی مخزن در نظر گرفته شود. اکتشاف منابع هیدروکربوری جدید در حوضه رسوبی دشت آبادان مانند میادین نفتی دارخوین و یادآوران باعث انجام مطالعات جامع تر در این حوضه رسوبی شده است. در این مطالعه ۱۵ نمونه نفت خام از مخزن فهلیان در میادین نفتی دارخوین (۹ نمونه) و یادآوران (۶ نمونه) واقع در جنوب غربی ایران مورد بررسی قرار گرفت. هدف در این مطالعه بررسی ژئوشیمیایی نفت خام با بکارگیری از روش طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز به منظور تعیین ویژگی های ساختاری نمونه های نفت و سپس مقایسه نمونه های مختلف با یکدیگر است تا از این طریق تطابق نفت - نفت انجام شود و نفت های با ژنتیک یکسان مشخص گردد.

۲- زمین شناسی منطقه

دشت آبادان در قسمت انتهایی جنوب غربی ایران (جنوب غربی زاگرس) قرار دارد و محدوده آن از سمت شمال و شمال شرقی، چین های زاگرس، از سمت جنوب، کشور عربستان و خلیج فارس و از سمت غرب، کشور عراق می باشد [۹ و ۱۰]. می توان منطقه را از لحاظ وضعیت تکنونیک به این صورت شرح داد که، در ابتدا ساختارهای عربی شکل گرفته که روند این ساختارها به صورت شمالی-جنوبی و شمال شرقی- جنوب غربی بوده و در نتیجه فعالیت زون گسلی پدید آمده است، پس از آن همگرایی آغاز شده و ساختارهایی با روند شمال غربی- جنوب شرقی به وجود آمده اند و در ادامه، تغییر شکل زاگرس باعث پدید آمدن تاقدیس های مرتبط با گسل تغییر شکل یافته شده است. چین خوردگی زاگرس در دشت آبادان می تواند دلایل مختلفی داشته باشد. از جمله این دلایل می توان به تغییر رخساره جانبی اشاره کرد، این تغییر همچنین می تواند باعث به وجود آمدن ویژگی های فیزیکی متفاوت چین خوردگی ها و ساختمان های مختلف در دشت آبادان و فروافتادگی دزفول شود. از دلایل دیگر، می توان به اختلاف فاصله دشت آبادان از سیستم تراستی زاگرس اشاره کرد. علاوه بر این کاهش فشار منفذی و مقاومت اصطکاکی بالا در رسوبات دشت آبادان می تواند از دلایل دیگر چین خوردگی زاگرس در دشت آبادان باشد [۳۲]. دشت آبادان در میان پلاتفرم عربستان و فروافتادگی دزفول قرار دارد. این دشت دارای خواص ساختمانی متفاوتی با زاگرس و فروافتادگی دزفول می باشد. از جمله این تفاوت ها این است که دشت آبادان لرزه خیز نیست و تاقدیس های این منطقه اثر سطحی و بیرون زدگی ندارند. تاقدیس های دشت آبادان در امتداد شمال- جنوب و در تضاد با امتداد محوری زاگرس می باشند این داده ها نشان می دهند که در زیر رسوبات پوششی، نهشته های دوران های اول و دوم، به طور ملایم و در روندی شمالی-جنوبی (روند عربی) چین خورده اند و به ظاهر گذر از رخساره های تخریبی و کم ضخامت دشت آبادان به رخساره های دریایی و ستبر زاگرس چین خورده تدریجی است، به همین دلیل نواحی دشت گونه ی خوزستان را بخشی از زاگرس چین خورده می دانند [۱ و ۶]. از نظر چینه شناسی، بر اساس اطلاعات چاه ها، رسوبات سازند فهلیان

در میدان دارخوین مربوط به دوران ژوراسیک و جوانتر می باشد. مهمترین مخازن نفتی در این ناحیه رسوبات کربناته تخریبی کرتاسه می باشد [۲]. در میدان یادآوران، بر پایه مطالعه پتروگرافی، سازند فهلیان بیست و دو ریزرخساره کربناته و دو لیتوفیشس آواری در قالب چهار کمر بند رخساره های دریای باز، حاشیه شلف / سد، لاگون و پهنه کشندی، در این سازند شناسایی و تفکیک شده است. سیمانی شدن، انحلال، دولومیتی شدن، نوریختی، میکرایتی شدن، زیست آشفستگی، انحلال فشاری و تراکم رایجترین فرآیندهای دیاژنزی مؤثر بر سازند فهلیان در میدان یادآوران می باشند [۳ و ۴ و ۵]. موقعیت جغرافیایی میداین مورد مطالعه در شکل ۱ نشان داده شده است.



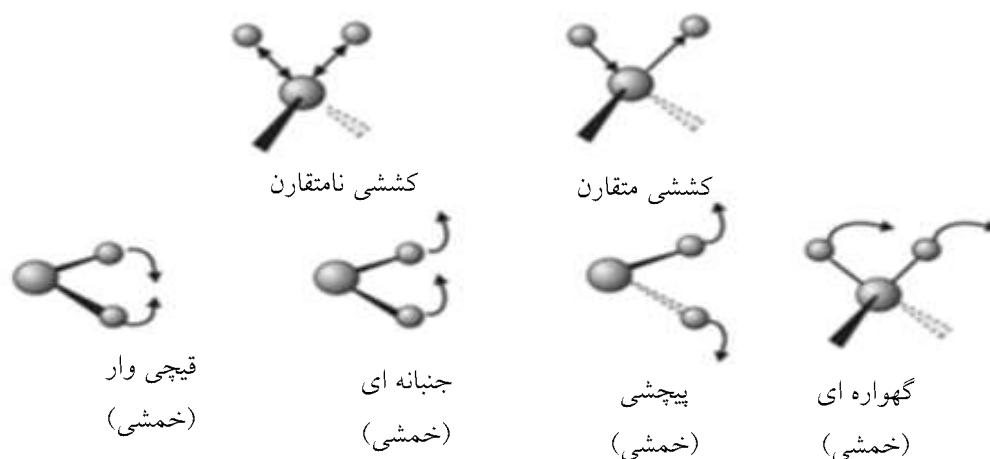
شکل ۱- موقعیت جغرافیایی میداین نفتی دارخوین و یادآوران در جنوب غربی ایران.

۳- مواد و روش

۳-۱- شرح روش و ابزار

طیف سنجی مادون قرمز تبدیل فوریه یک تکنیک آنالیزی است که با منطقه مادون قرمز از طیف الکترو مغناطیسی سرو کار دارد و برای بدست آوردن طیف مادون قرمز از نمونه های جامد، مایع یا گاز در حالت جذب و یا عبور استفاده می شود. گسترده ترین کاربردهای طیف مادون قرمز به ناحیه طیفی $4000-400 \text{ cm}^{-1}$ مربوط است، که در گستره مادون قرمز میانه قرار دارد و در این مطالعه از این گستره استفاده گردید. در ناحیه مادون قرمز میانه، بسیاری از انتقال های مولکولی چرخشی- ارتعاشی قوی وجود دارد، که این ناحیه از طیف قابل استفاده برای شناسایی ساختار احتمالی نمونه های استخراج شده می باشد. در دنیای پیرامون ما همه چیز به طور پیوسته در حال ارتعاش است که نتیجه مستقیم ارتعاش مولکول های سازنده آنها می باشند. ارتعاشات مولکولی نیز به نوبه خود از نوسان پیوندهای سازنده مولکول ناشی می شود. در ناحیه طیفی مادون قرمز

میانه، جذب نور به وسیله یک ماده، ناشی از ارتعاشات پیوندی میان ارتعاشات نمونه و تابش ناشی از منبع نور است [۱۴]. به عبارت دیگر، اگر اتم هایی که در دو طرف یک پیوند شیمیایی قرار دارند متفاوت باشند، یک دو قطبی الکتریکی ایجاد می نمایند که در یک فرکانس مشخص، نوسان می کند. اگر چنین پیوند نامتقارنی به وسیله یک منبع تکفام که فرکانسی برابر فرکانس دو قطبی مربوط به پیوند دارد تحت تاثیر تابش قرار گیرد، برهم کنشی میان پیوند و تابش ناشی از منبع رخ می دهد. در نتیجه این برهم کنش، مولفه الکتریکی تابش قادر خواهد بود تا انرژی خود را به پیوند منتقل کند که این انتقال انرژی باعث ایجاد یک تغییر در ارتعاش پیوند خواهد شد. در اثر جذب اشعه مادون قرمز، که از انرژی کمی برخوردار است، امکان بروز انتقال های ارتعاشی، چرخشی یا چرخشی- ارتعاشی در مولکول وجود خواهد داشت. در طیف های مادون قرمز، انتقال های ارتعاشی نقش اصلی را ایفا می کنند. ارتعاش های مولکولی را می توان به دو دسته ارتعاش های کششی و خمشی تقسیم بندی نمود (شکل ۲). انواع مختلف این انتقالات در شکل نشان داده شده است. ارتعاش کششی، یک حرکت هماهنگ در امتداد محور پیوند است. ارتعاش خمشی نیز شامل تغییر در زاویه بین پیوندها با یک اتم مشترک یا حرکت یک گروه اتم نسبت به باقیمانده مولکول می باشد. ارتعاشات کششی در فرکانس های بالاتری نسبت به ارتعاشات خمشی روی می دهند [۳۱ و ۳۳ و ۳۴].

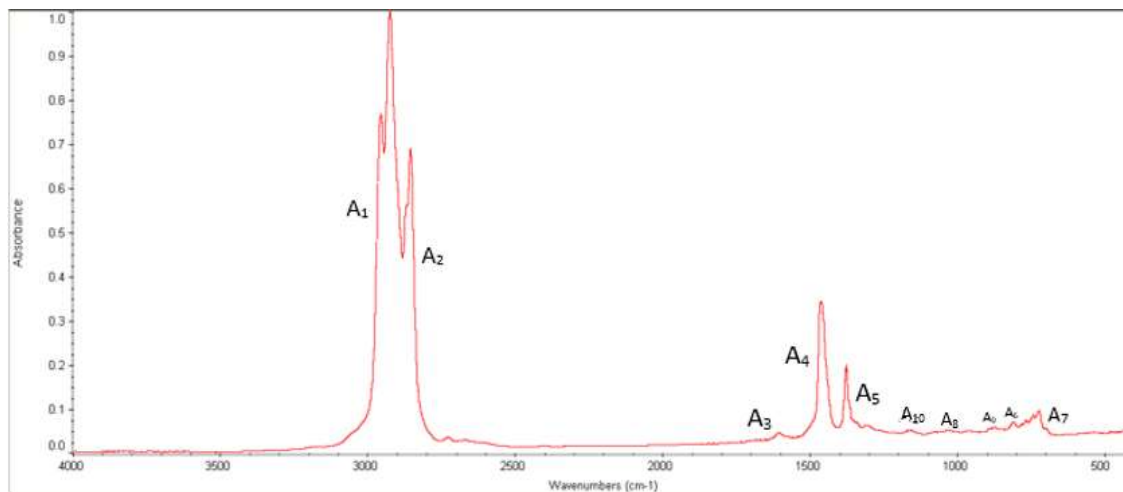


شکل ۲- ارتعاشات عمده مولکولی برای یک مولکول غیر خطی [۲۹].

در این مطالعه از دستگاه طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز مدل AVATAR استفاده شد. این دستگاه ساخت کمپانی Termo کشور آمریکا می باشد. برای بدست آوردن طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز نمونه های نفت از ۱/۵ cc نفت خام از هر نمونه جهت انجام تست مورد استفاده قرار گرفت که این مقدار نمونه بین دو قرص KBR قرار داده شد [۱۲ و ۱۵].

۲-۳- طیف و شاخص

نوارهای اصلی با استفاده از شاخص هایی که در مطالعات قبلی توصیف شده بودند، تعیین شدند. این شاخص ها برای تعیین و مقایسه ترکیب شیمیایی هر نمونه مورد استفاده قرار گرفتند. همچنین از تکنولوژی همپوشانی برای افزایش تفکیک طیفی نوارهای مادون قرمز نیز مورد استفاده قرار گرفت [۱۶ و ۲۵]. تخصیص اصلی نوارهای طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز مورد استفاده در این مطالعه در شکل ۳ شرح داده شده است.



شکل ۳- طیف مادون قرمز.

شاخص هایی که بیانگر ساختار و ویژگی مولکولی نمونه های نفت هستند، براساس مساحت زیر پیک ها قابل محاسبه می باشند که مساحت پیک ها نیز بر اساس فاصله دو دره محاسبه می شود. این شاخص ها با توجه به نسبت مساحت های زیر پیک ها محاسبه گردید [۱۱]. شاخص های مورد استفاده در این مطالعه در جدول ۱ نشان داده شده است:

جدول ۱- شاخص های حاصل از طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز.

$$\text{Aliphatic index: } \frac{A4+A5}{\sum A}$$

$$\text{Aromaticity index: } \frac{A3}{\sum A_{aro}}$$

$$\text{Long chains index: } \frac{A7}{A4+A5}$$

$$\text{Substitution1 index: } \frac{A8}{A6+A8+A9}$$

$$\text{Substitution2 index: } \frac{A9}{A6+A8+A9}$$

$$\text{Carbonyl index: } \frac{A8}{\sum A}$$

$$\text{Sulfoxide index: } \frac{A10}{\sum A}$$

$$\text{Branched index: } \frac{A5}{A5+A4}$$

$$\sum A = A_1 + \dots + A_{10}$$

$$\sum A_{aro} = A_6 + A_7$$

هر یک از اندیس های معرفی شده نشان دهنده مقادیر نسبی ترکیبات موجود در نفت هستند.

۳-۳- تعبیر و تفسیر نتایج

در طیف مادون قرمز هر پیک نشان دهنده میزان جذب در عدد موج متناظر با آن است و توسط یک پیوند شیمیایی مشخص ایجاد می شود. در نتیجه عدد موج هر پیک نشان دهنده حضور یک گروه عاملی خاص در نمونه خواهد بود. در ادامه با تفسیر پیک ها و تعیین گروه های عاملی، ساختار نمونه های نفت میادین دارخوین و یادآوران شناسایی و با هم مقایسه میشوند [۳۵]. برای سهولت در تفسیر پیک ها، طیف مادون قرمز نمونه های نفت بر اساس شباهت مولکولی پیوندهای مشاهده شده در طیف ها به ۶ ناحیه مختلف تقسیم بندی شدند:

ناحیه $900-690 \text{ cm}^{-1}$

پیک های مشاهده شده در این محدوده در تمام نمونه های نفت مشترک می باشد. پیک های مشاهده شده در $723, 830, 880 \text{ cm}^{-1}$ ناشی از خمش خارج از صفحه پیوند C-H در ساختارهای آروماتیکی می باشند. همچنین پیک مشاهده شده در 723 cm^{-1} ناشی از خمش پیوند C-H موجود در مولکول CH_2 است. البته در صورتی که یک زنجیره آلیفاتیک با ۴ و یا بیشتر اتم کربن در نمونه وجود داشته باشد در این محدوده نیز پیک ایجاد میکند و این پیک به طور معمول به عنوان پیک زنجیره بلند شناخته می شود [۱۹]. وجود این پیک در طیف تمامی نمونه ها نشان دهنده وجود ساختار آلیفاتیک با زنجیره مستقیم بیش از ۴ اتم کربن در ساختار آنها می باشد.

ناحیه $1100-900 \text{ cm}^{-1}$

در این محدوده کشش ناشی از پیوند S=O در محدوده حدود $1100-1000 \text{ cm}^{-1}$ به صورت یک پیک ضعیف مشاهده می شود که در طیف پیک موجود در 1030 cm^{-1} نشان دهنده گروه عاملی سولفوکسید در ساختار تمام نمونه های نفت می باشد [۲۴].

ناحیه $1600-1100 \text{ cm}^{-1}$

خمش متقارن ناشی از پیوند C-H در گروه متیلن در محدوده $1400-1320 \text{ cm}^{-1}$ که دارای پیک متوسط و خمش از نوع واگینگ^۲ می باشد. کشش نامتقارن ناشی از پیوند C-H در گروه متیل در محدوده $1500-1410 \text{ cm}^{-1}$ دارای پیک متوسط و خمش از نوع تویستینگ^۳ می باشد.

همچنین کشش غیر متقارن ناشی از پیوند C=C در حلقه های آروماتیکی در محدوده $1660-1550 \text{ cm}^{-1}$ پیک می دهد. کشش ناشی از پیوند C-O در محدوده $1200-1100 \text{ cm}^{-1}$ پیک می دهد. از طرفی خمش درون صفحه ناشی از پیوند C-H موجود در ساختار های آروماتیکی در محدوده $1275-100 \text{ cm}^{-1}$ پیک می دهد [۷ و ۲۱]. لازم به ذکر است که این پیک ها در طیف تمام نمونه های نفت مشاهده می گردد.

ناحیه $2700-1700 \text{ cm}^{-1}$

در این ناحیه هیچگونه پیکی مشاهده نمی شود که بدین معنا می باشد که هیچگونه گروه عاملی در این محدوده وجود ندارد.

² wagging

³ twisting

ناحیه $3100-2700 \text{ cm}^{-1}$

پیک $2750-2700 \text{ cm}^{-1}$ که در همه طیف ها دیده می شود ناشی از کشش پیوند C-H در گروه عاملی آلدئید (-CHO) است. البته مقدار این پیک بسیار کوچک و جزئی است که نشان از مقدار بسیار کم این گروه عاملی در ساختار نمونه ها می باشد. پیک مشاهده شده در محدوده $2900-2800 \text{ cm}^{-1}$ ناشی از کشش متقارن پیوند C-H در مولکول های متیل و متیلن می باشد که در طیف تمام نمونه ها وجود دارد.

ظهور پیک 2924 cm^{-1} در اثر کشش غیر متقارن ناشی از پیوند C-H موجود در مولکول متیلن است که در طیف تمام نمونه ها دیده می شود. پیک 2956 cm^{-1} در تمامی طیف ها ناشی از پیوند C-H موجود در مولکول متیل است. البته بخشی از این پیک نیز ناشی از پیوند C-H موجود در آلکان ها نیز می باشد.

ناحیه $400-3200 \text{ cm}^{-1}$

این محدوده مربوط به پیوند های O-H، N-H می باشد. پیوند N-H مربوط به گروه عاملی آمین ثانویه و پیوند O-H در این محدوده معمولاً در اثر جذب رطوبت محیط توسط نمونه ها می باشد، زیرا پودر KBr استفاده شده در آنالیز به شدت جاذب رطوبت می باشد. که هیچکدام از پیک های پیوند های ذکر شده در طیف نمونه های مورد مطالعه مشاهده نشد که بدین معناس که هیچگونه گروه عاملی در این محدوده وجود ندارد [8].

۴-تعبیر و تفسیر

بر اساس نتایج آنالیز، ساختارهای مدنظر موجود در نمونه های نفت عبارتند از: ساختارهای آروماتیکی، آلیفاتیک و گروه های عاملی کربونیل، سولفوکسید و آلدئید. برای هر یک از نمونه های نفت میداین مورد مطالعه اندیس های معرفی شده محاسبه شد. مقادیر شاخص های طیف سنجی مادون قرمز محاسبه شده برای نمونه های نفت در جدول ۲ نشان داده شده است:

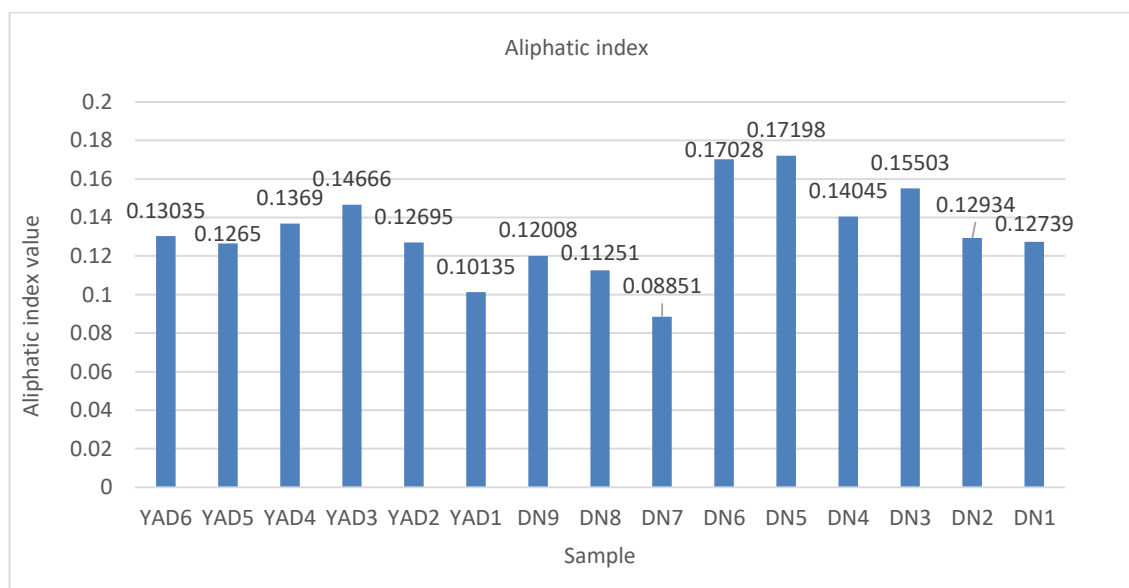
جدول ۲- مقدار عددی شاخص های مختلف بر اساس طیف مادون قرمز نمونه های مورد مطالعه.

| | | | | | | | | |
|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|------|
| 0/00273 | 0/00328 | 0/2258 | 0/32727 | 0/21818 | 0/21505 | 0/24 | 0/12739 | DN1 |
| 0/00278 | 0/00389 | 0/2258 | 0/32 | 0/28 | 0/19354 | 0/45454 | 0/12934 | DN2 |
| 0/002 | 0/0035 | 0/2258 | 0/41379 | 0/24137 | 0/15483 | 0/43103 | 0/15503 | DN3 |
| 0/0025 | 0/00526 | 0/28571 | 0/34782 | 0/30494 | 0/19285 | 0/4529 | 0/14045 | DN4 |
| 0/00362 | 0/00724 | 0/21052 | 0/34951 | 0/31067 | 0/16578 | 0/43478 | 0/17198 | DN5 |
| 0/00537 | 0/00896 | 0/21052 | 0/29629 | 0/37037 | 0/17763 | 0/70175 | 0/17028 | DN6 |
| 0/00267 | 0/00334 | 0/16981 | 0/26315 | 0/42105 | 0/13207 | 1/76470 | 0/08851 | DN7 |
| 0/00384 | 0/00548 | 0/19512 | 0/20289 | 0/28985 | 0/17073 | 0/47619 | 0/11251 | DN8 |
| 0/00436 | 0/00873 | 0/18181 | 0/22222 | 0/59259 | 0/23863 | 0/91304 | 0/12008 | DN9 |
| 0/00117 | 0/00223 | 0/20289 | 0/29411 | 0/23529 | 0/10144 | 0/34883 | 0/10135 | YAD1 |

| | | | | | | | | |
|------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| YAD2 | 0/12695 | 0/58828 | 0/12444 | 0/41558 | 0/27272 | 0/26666 | 0/00394 | 0/00169 |
| YAD3 | 0/14666 | 0/45454 | 0/12 | 0/35897 | 0/23076 | 0/26666 | 0/00342 | 0/00195 |
| YAD4 | 0/13690 | 0/83333 | 0/12857 | 0/48275 | 0/24137 | 0/28571 | 0/00512 | 0/00244 |
| YAD5 | 0/12650 | 0/375 | 0/07 | 0/15789 | 0/21052 | 0/175 | 0/00094 | 0/00063 |
| YAD6 | 0/13035 | 0/78947 | 0/09795 | 0/41666 | 0/33333 | 0/32653 | 0/00399 | 0/00212 |

به منظور انجام مطالعات تکمیلی با استفاده از داده های حاصل از طیف های مادون قرمز، اندیس های مختلف مورد استفاده قرار گرفتند. این اندیس ها نشان دهنده ویژگی های ساختاری و گروه های عاملی موجود در نمونه های نفت هستند. تشریح و تفسیر نمونه ها از لحاظ اندیس ها و معیار های مختلف در ادامه بررسی شده است.

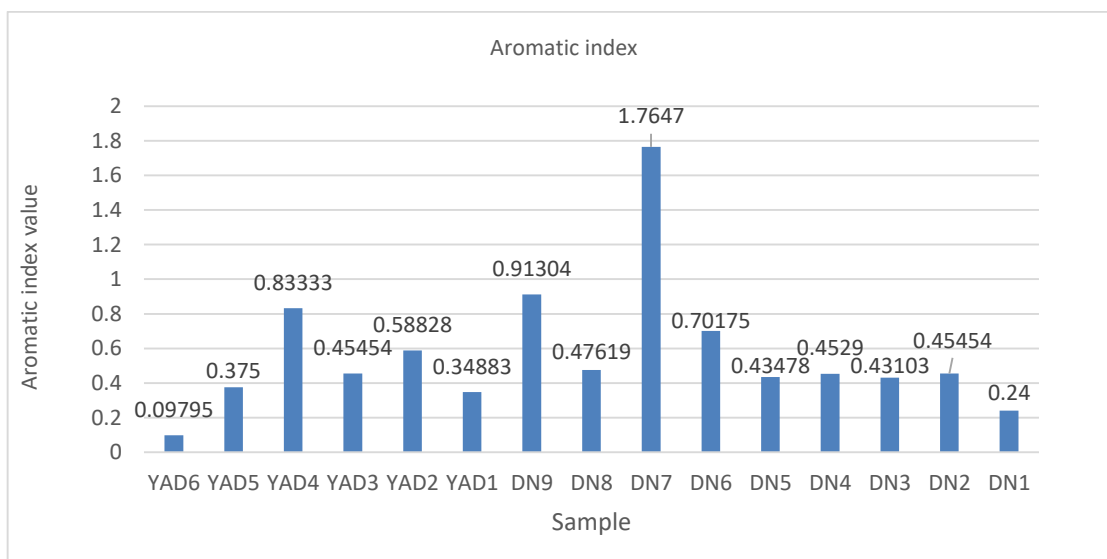
شکل ۴ اندیس آلیفاتیک را برای نمونه های نفت میدان دارخوین و یادآوران نشان می دهد که با توجه به شکل، اندیس آلیفاتیک در نمونه DN5 نسبت به سایر نمونه ها بیشتر می باشد. همچنین مقدار این اندیس در نمونه DN7 کمتر از سایر نمونه ها می باشد. به طور کلی با توجه به بیشینه و کمینه میزان اندیس آلیفاتیک در بین نمونه های دو میدان، تقریباً میزان متوسط اندیس آلیفاتیک نمونه های میدان دارخوین و میدان یادآوران در یک سطح می باشد.



شکل ۴- نمودار ستونی اندیس آلیفاتیک نمونه های مورد مطالعه.

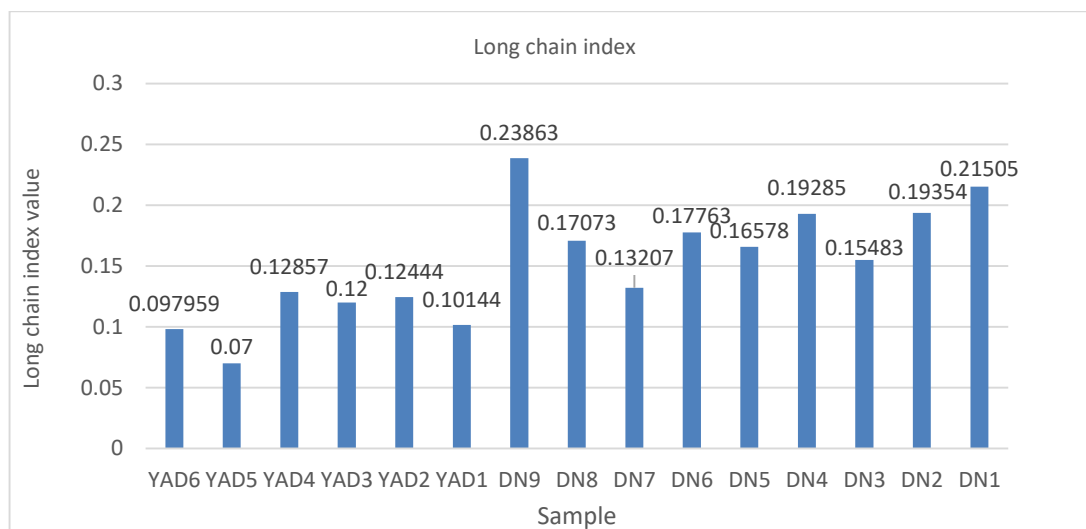
شکل ۵ اندیس آروماتیک را برای نمونه های میدان دارخوین و میدان یادآوران نشان می دهد. با توجه به شکل، اندیس آروماتیک در نمونه DN7 نسبت به سایر نمونه ها بیشتر می باشد. مقدار اندیس نمونه های DN2 و YAD3 نیز با هم برابر است. همچنین مقدار این اندیس در نمونه DN1 کمتر از سایر نمونه ها می باشد. به طور کلی با توجه به بیشینه و کمینه میزان اندیس آروماتیک در بین نمونه های دو میدان، میزان متوسط اندیس آروماتیک نمونه های میدان دارخوین بیشتر

از نمونه های میدان یادآوران می باشد. بنابراین ساختار های آروماتیکی در نمونه های میدان دارخوین دارای فراوانی بیشتری می باشند.



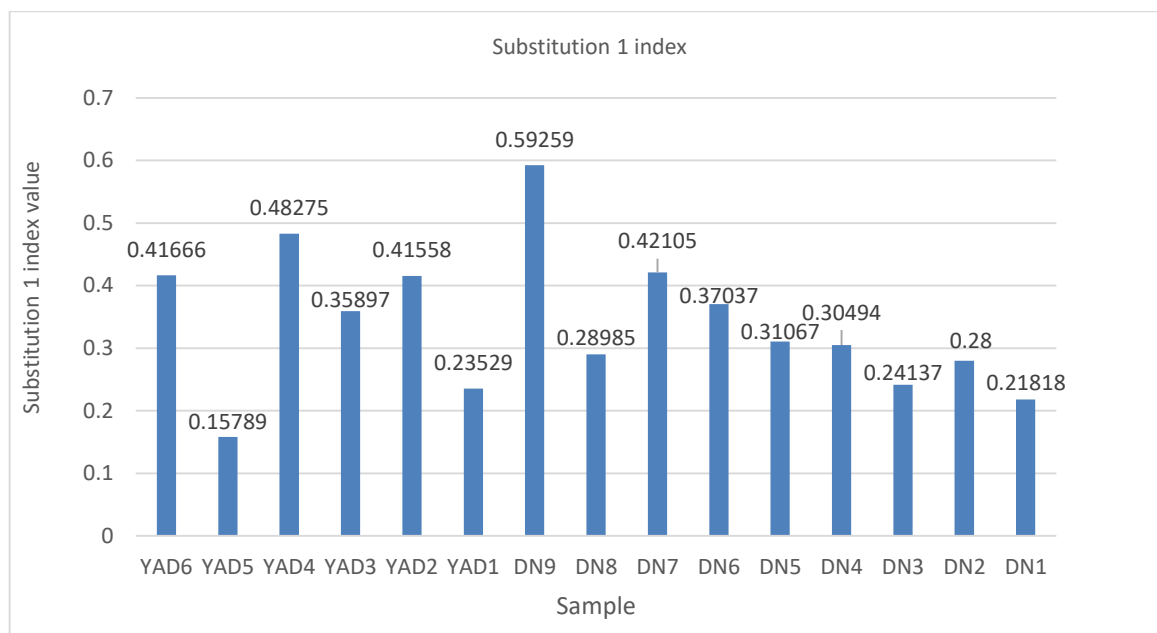
شکل ۵- نمودار ستونی اندیس آروماتیکی نمونه های مورد مطالعه.

شکل ۶ اندیس زنجیره بلند را برای نمونه های میدان دارخوین و میدان یادآوران نشان می دهد. با توجه به شکل، اندیس زنجیره بلند در نمونه DN9 نسبت به سایر نمونه ها بیشتر می باشد. همچنین مقدار این اندیس در نمونه YAD5 کمتر از سایر نمونه ها می باشد. به طور کلی با توجه به بیشینه و کمینه میزان اندیس زنجیره بلند در بین نمونه های دو میدان، میزان متوسط اندیس زنجیره بلند نمونه های میدان دارخوین بیشتر از نمونه های میدان یادآوران می باشد. بنابراین فراوانی آلکان های با زنجیره مستقیم دارای ۴ اتم کربن، در نمونه های میدان دارخوین بیشتر می باشند [۲۱].



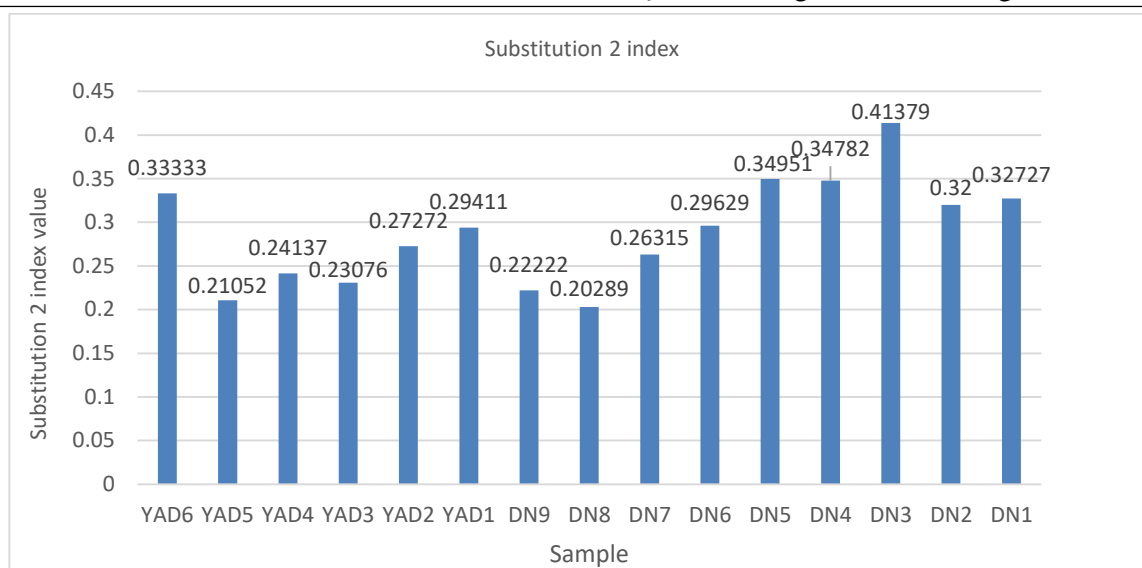
شکل ۶- نمودار ستونی اندیس زنجیره بلند نمونه های مورد مطالعه.

شکل ۷ اندیس شاخص جانشینی ۱ را برای نمونه های میدان دارخوین و میدان یادآوران نشان می دهد. با توجه به شکل ، اندیس شاخص جانشینی ۱ در نمونه DN9 نسبت به سایر نمونه ها بیشتر می باشد. همچنین مقدار این اندیس در نمونه YAD5 کمتر از سایر نمونه ها می باشد. به طور کلی با توجه به بیشینه و کمینه میزان این اندیس در بین نمونه های دو میدان، میزان متوسط اندیس شاخص جانشینی ۱ نمونه های میدان یادآوران بیشتر از نمونه های میدان دارخوین می باشد. بنابراین ساختار های بنزنی (ساختارهای حلقه بنزنی که در آنها استخلاف هایی مانند متیل- اتیل و یا شاخه های آلکیلی دیگری به آن وصل شده است) در نمونه های میدان یادآوران دارای فراوانی بیشتری می باشند.



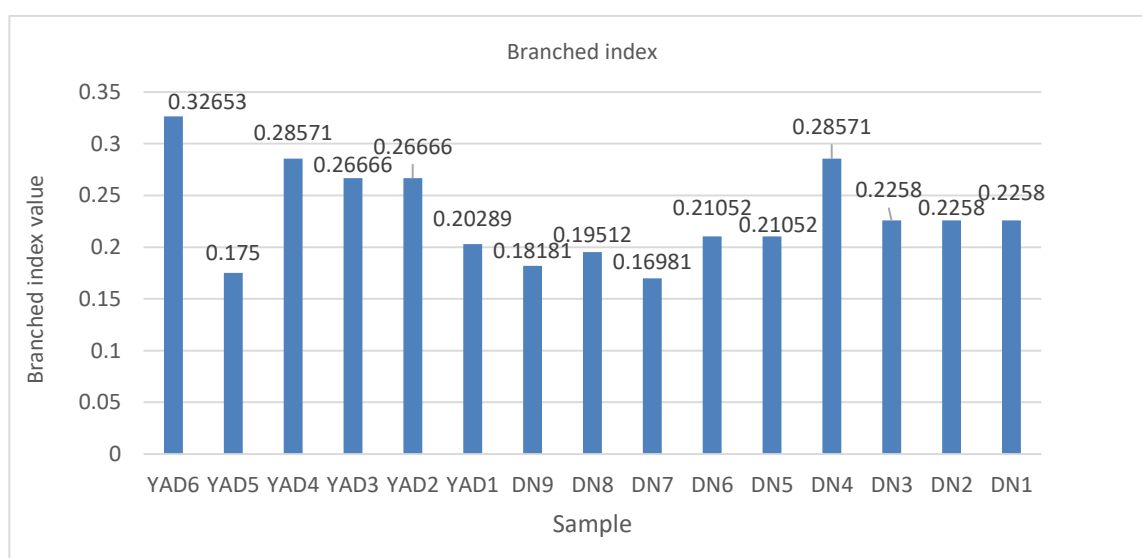
شکل ۷- نمودار ستونی اندیس جانشینی ۱ نمونه های مورد مطالعه.

شکل ۸ اندیس شاخص جانشینی ۲ را برای نمونه های میدان دارخوین و میدان یادآوران نشان می دهد. با توجه به شکل ، اندیس شاخص جانشینی ۲ در نمونه DN3 نسبت به سایر نمونه ها بیشتر می باشد. همچنین مقدار این اندیس در نمونه DN8 کمتر از سایر نمونه ها می باشد. به طور کلی با توجه به بیشینه و کمینه میزان این اندیس در بین نمونه های دو میدان، میزان متوسط این شاخص جانشینی ۲ نمونه های میدان دارخوین تقریباً بیشتر از نمونه های میدان یادآوران می باشد. بنابراین ساختار های بنزنی (حلقه های بنزنی با سه استخلاف آلکیلی) در نمونه های میدان دارخوین دارای فراوانی بیشتری می باشد [۲۱ و ۲۴].



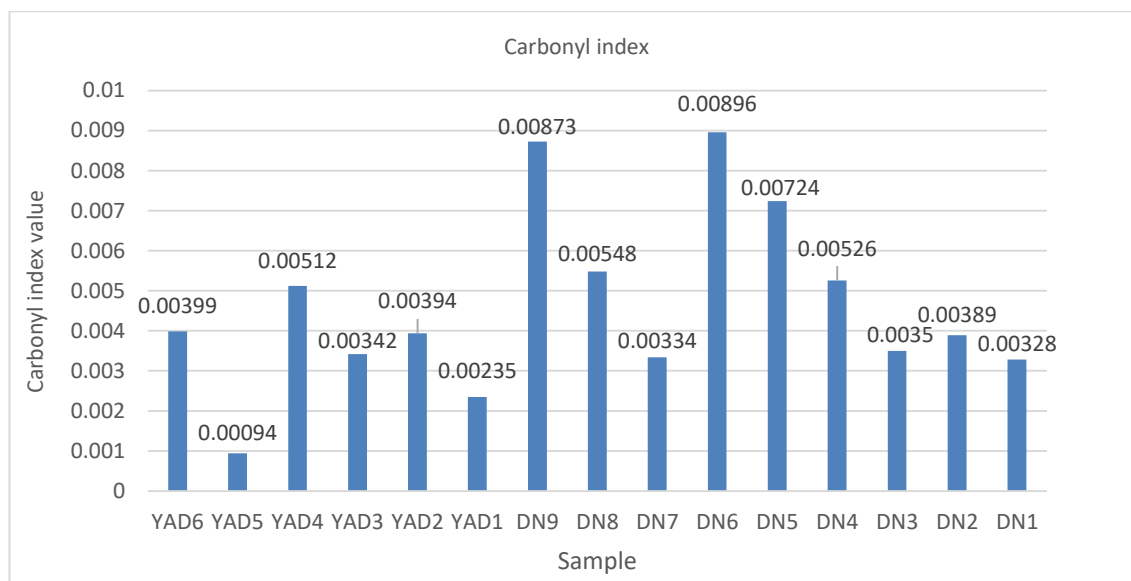
شکل ۸- نمودار ستونی اندیس جانشینی ۲ نمونه های مورد مطالعه.

شکل ۹ اندیس شاخه های جانبی را برای نمونه های میدان دارخوین و میدان یادآوران نشان می دهد. با توجه به شکل، اندیس شاخه های جانبی در نمونه YAD6 نسبت به سایر نمونه ها بیشتر می باشد. نکته قابل توجه این است که مقدار اندیس نمونه های DN4 و YAD4 با هم برابر است. همچنین مقدار این اندیس در نمونه DN7 کمتر از سایر نمونه ها می باشد. به طور کلی با توجه به بیشینه و کمینه میزان این اندیس در بین نمونه های دو میدان، میزان متوسط اندیس شاخه های جانبی نمونه های میدان یادآوران بیشتر از نمونه های میدان دارخوین می باشد [۲۱ و ۲۴]. بنابراین فراوانی شاخه های جانبی در ساختارهای آلیفاتیکی نمونه های میدان یادآوران بیشتر می باشد.



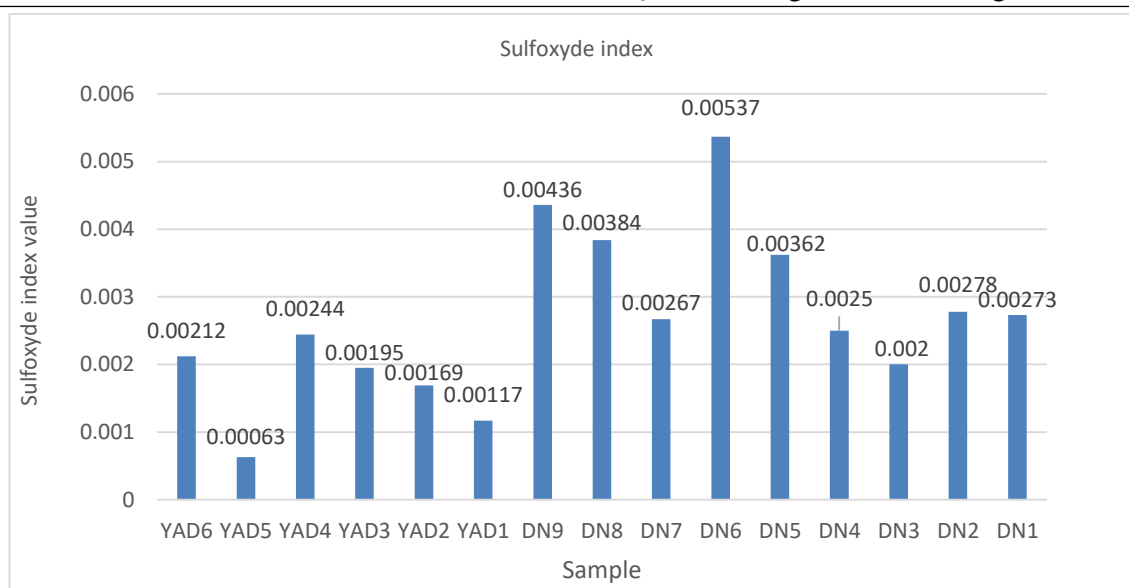
شکل ۹- نمودار ستونی اندیس شاخه های جانبی نمونه های مورد مطالعه.

شکل ۱۰ اندیس کربونیل را برای نمونه های میدان دارخوین و میدان یادآوران نشان می دهد. با توجه به شکل، اندیس کربونیل در نمونه DN6 نسبت به سایر نمونه ها بیشتر می باشد. همچنین مقدار این اندیس در نمونه YAD5 کمتر از سایر نمونه ها می باشد. به طور کلی با توجه به بیشینه و کمینه میزان این اندیس در بین نمونه های دو میدان، میزان متوسط اندیس کربونیل نمونه های میدان دارخوین بیشتر از نمونه های میدان یادآوران می باشد. بنابراین فراوانی پیوندهای C=O در نمونه های میدان دارخوین بیشتر می باشد [۲۱ و ۲۴].



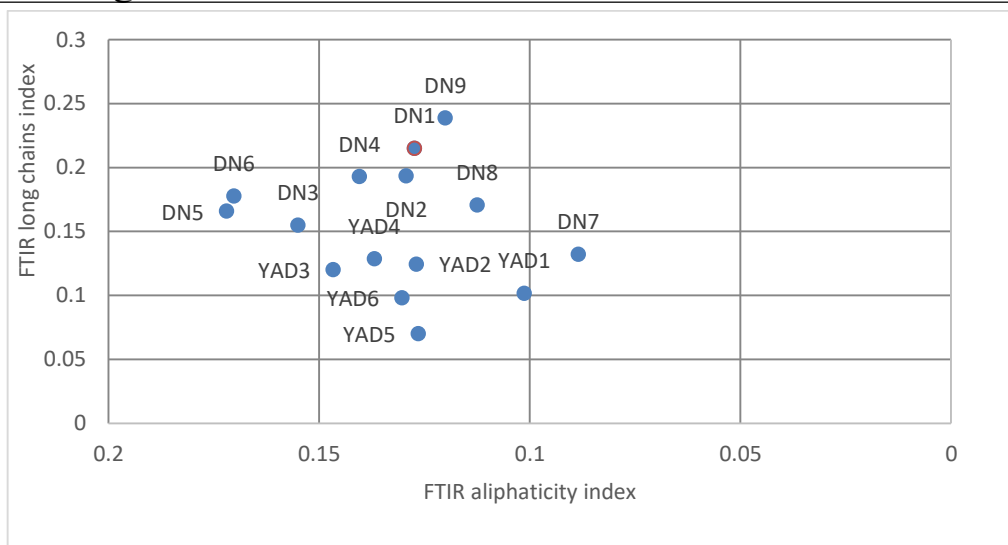
شکل ۱۰- نمودار ستونی اندیس کربونیل نمونه های مورد مطالعه.

شکل ۱۱ اندیس سولفوکسید را برای نمونه های میدان دارخوین و میدان یادآوران نشان می دهد. با توجه به شکل، اندیس سولفوکسید در نمونه DN6 نسبت به سایر نمونه ها بیشتر می باشد. همچنین مقدار این اندیس در نمونه YAD5 کمتر از سایر نمونه ها می باشد. به طور کلی با توجه به بیشینه و کمینه میزان این اندیس در بین نمونه های دو میدان، میزان متوسط اندیس سولفوکسید نمونه های میدان دارخوین بیشتر از نمونه های میدان یادآوران می باشد. بنابراین فراوانی پیوندهای S=O در نمونه های میدان دارخوین بیشتر می باشد [۲۱ و ۲۴].



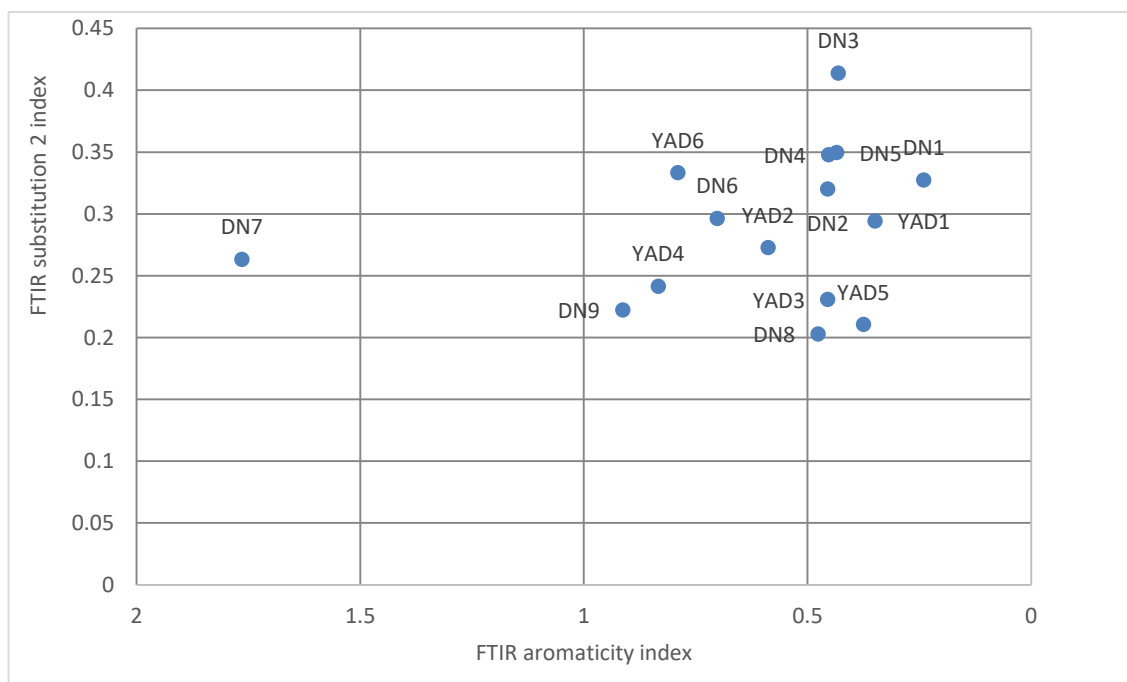
شکل ۱۱- نمودار ستونی اندیس سولفوکسید نمونه های مورد مطالعه.

با آنالیز نفت می توان از ویژگی های ساختاری برای انجام تطابق نفت - نفت بین نمونه های مختلف استفاده کرد. در تطابق نفت - نفت، نمونه ها از لحاظ ساختاری با یکدیگر مقایسه می شوند، نمونه های با ساختار مشابه دارای ژنتیک یکسان بوده و مربوط به یک خانواده نفتی خواهند بود. مقایسه ساختاری نفت ها باید براساس ترکیباتی انجام شود که بیشترین فراوانی را در ساختار نفت دارند. ترکیبات آلیفاتیک و آروماتیک از ترکیبات فراوان در ساختار نفت می باشند. لذا از آنجا که ترکیبات آروماتیک و آلیفاتیک ساختارهای مهم و اساسی در نفت خام هستند، مقایسه نفت ها با یکدیگر باید بر اساس این ترکیبات انجام شود [۲۰ و ۲۱]. شکل ۱۲ نمودار آلیفاتیکی در مقابل اندیس زنجیره بلند را نشان می دهد. این نمودار ساختارهای آلیفاتیکی نفت ها را با یکدیگر مقایسه می کند. با مقایسه ترکیبات آلیفاتیکی نمونه ها می توان نتیجه گرفت که به طور کلی تقریباً همه نمونه ها از لحاظ نسبت شاخص آلیفاتیکی به شاخص زنجیره بلند در یک سطح قرار دارند، بجز نمونه DN5 که دارای بیشترین میزان شاخص آلیفاتیکی و نمونه DN9 نیز دارای بیشترین میزان شاخص زنجیره بلند میباشد. نمونه DN7 کمترین میزان شاخص آلیفاتیکی و نمونه DN5 نیز کمترین میزان شاخص زنجیره بلند را در بین نمونه ها دارند. با توجه به شکل همه نمونه ها دارای ساختار مشابه می باشند. از شکل نمی توان یک تفسیر جامعی از تمایز بین نمونه ها بدست آورد و نمونه ها را گروه بندی کرد چرا که نمونه ها از لحاظ شاخص آلیفاتیک به شاخص زنجیره جانبی تقریباً مشابه بوده و تفاوت ها به وضوح مشاهده نمی گردد لذا نمونه ها باید از لحاظ ترکیبات آروماتیکی نیز با یکدیگر مقایسه شوند.



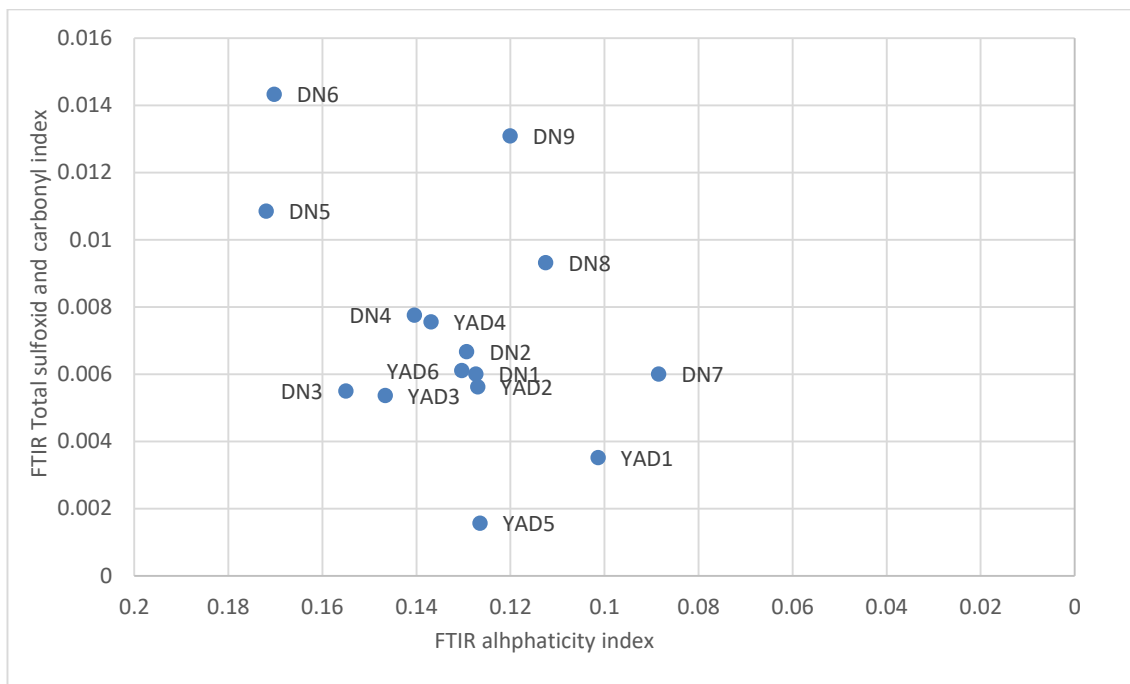
شکل ۱۲- نمودار شاخص آلیفاتیک در مقابل شاخص زنجیره بلند.

شکل ۱۳ مقایسه نمونه های نفت بر اساس ترکیبات آروماتیکی در مقابل شاخص جانشینی ۲ را نشان می دهد. با مقایسه ترکیبات آروماتیکی نمونه ها می توان نتیجه گرفت که به طور کلی تقریباً همه نمونه ها از لحاظ نسبت شاخص آروماتیکی در برابر شاخص جانشینی ۲ در یک سطح قرار دارند، بجز نمونه DN3 و DN7. نمونه DN7 دارای بیشترین میزان شاخص آروماتیکی و نمونه DN3 نیز دارای بیشترین میزان شاخص جانشینی ۲ میباشد. نمونه DN1 کمترین میزان شاخص آروماتیکی و نمونه DN8 نیز کمترین میزان شاخص جانشینی ۲ را در بین نمونه ها دارند. با توجه به شکل همه نمونه ها دارای ساختار مشابه و نمونه های DN3 و DN7 دارای ساختار متفاوت می باشند.

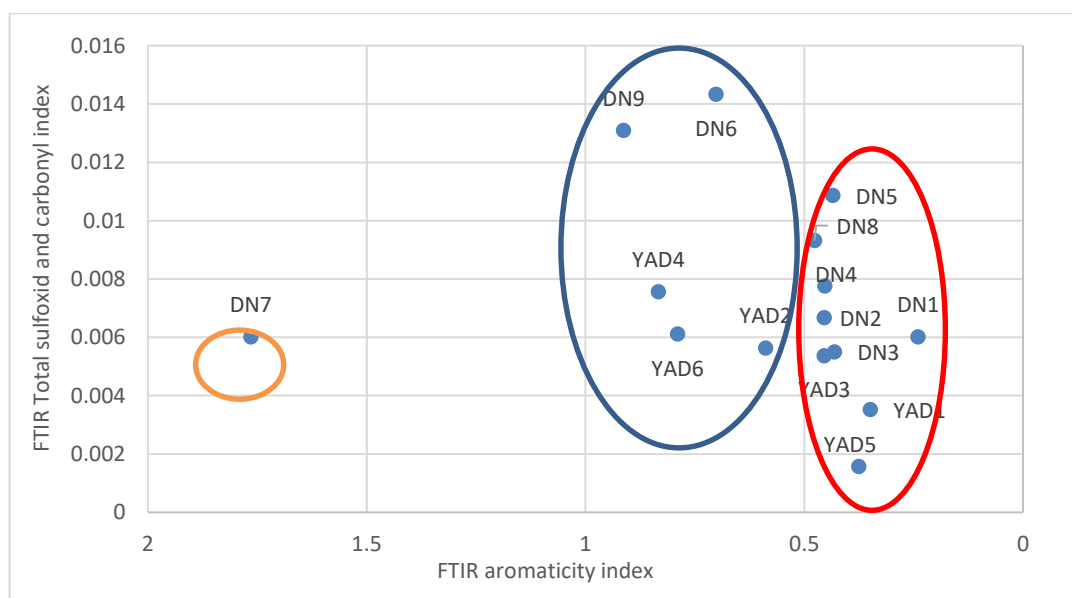


شکل ۱۳- نمودار شاخص آروماتیکی در مقابل شاخص جانشینی ۲.

از آنجایی که ممکن است نمونه ها از لحاظ شاخص های جانمایی و زنجیره بلند مشابه هم باشند و به منظور فراهم آوردن مقایسه بهتر نمونه های نفت با یکدیگر، نمونه ها بر اساس نسبت میزان شاخص آلیفاتیک و شاخص آروماتیک به مجموع شاخص های سولفوکسید و کربونیل نیز با هم مقایسه شدند تا از طریق میزان شاخص های سولفوکسید و کربونیل دسته بندی شوند. که نتیجه در قالب شکل ۱۴ و ۱۵ آورده شده است:



شکل ۱۴- نمودار شاخص آلیفاتیک در مقابل مجموع شاخص های سولفوکسید و کربونیل.



شکل ۱۵- نمودار شاخص آروماتیک در مقابل مجموع شاخص های کربونیل و سولفوکسید.

شکل ۱۴ مجموع شاخص های کربونیل و سولفوکسید را در مقابل شاخص آلیفاتیک و شکل ۱۵ مجموع شاخص های کربونیل و سولفوکسید را در مقابل شاخص آروماتیک نشان می دهد. همانطور که از شکل ۱۴ مشاهده می شود، به دلیل تشابه شاخص آلیفاتیکی بسیاری از نمونه ها، نمیتوان آنها را بر اساس شاخص های کربونیل و سولفوکسید در مقابل آلیفاتیک تقسیم و دسته بندی کرد. همچنین مطابق شکل ۱۵ بر اساس مجموع شاخص های کربونیل و سولفوکسید در مقابل شاخص آروماتیک، نمونه های نفت میدان دارخوین و یادآوران سه خانواده کاملا مجزا را تشکیل می دهند. خانواده اول شامل نمونه های DN5, DN8, DN4, DN6, DN9, YAD2, YAD4, YAD6 خانواده دوم که شامل نمونه های DN2, DN3, YAD3, DN1, YAD5, YAD1 و خانواده سوم شامل نمونه DN7 می باشد [۷].

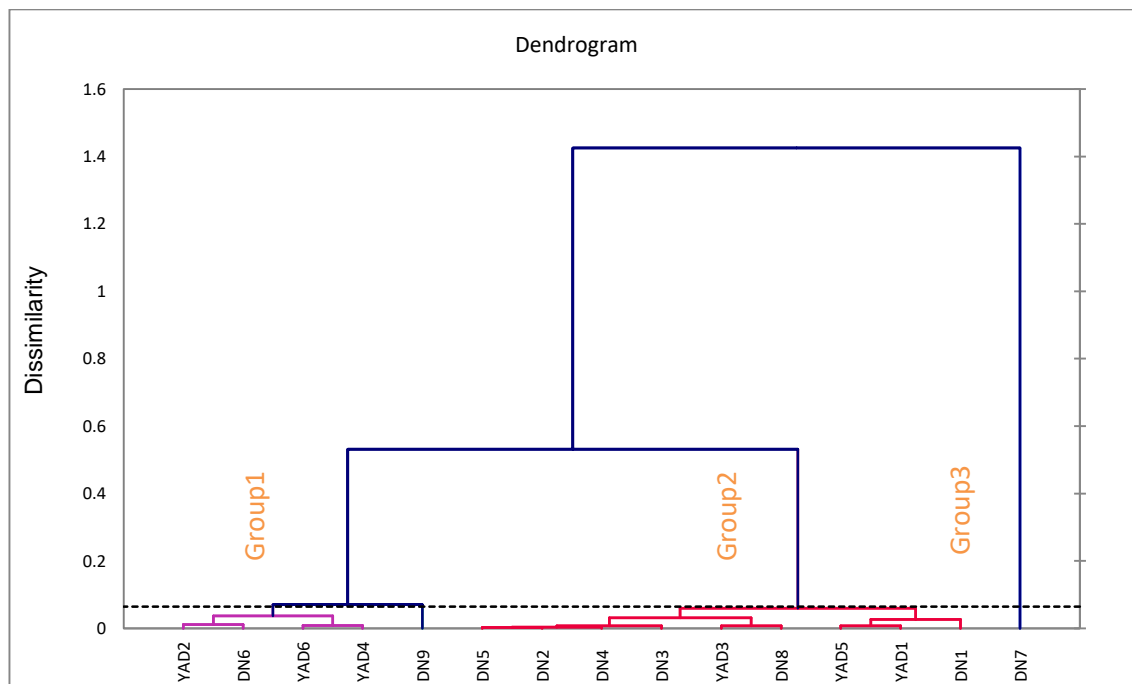
۱-۴- تعیین خانواده های نفتی با استفاده از روش های تحلیل آماری

علم آمار با پردازش داده ها و تبدیل آنها به اطلاعات مورد نیاز، زمینه اخذ تصمیم را فراهم می آورد. امروزه به ندرت می توان بدون استفاده از روشهای آماری اقدام به تفسیر، تبیین و تحلیل نتایج به دست آمده از تحقیق ها و پژوهش های علمی کرد. روش های تحلیل آماری ابزاری قدرتمند برای ارزیابی خصوصیات و برآورد پتانسیل فنی و اقتصادی نفت می باشند. در این مطالعه از دو روش تحلیل داده های ژئوشیمیایی جهت گروه بندی نمونه های نفت مورد مطالعه استفاده شد. این روش ها شامل تحلیل مولفه های اصلی (PCA) و تحلیل خوشه ای سلسله مراتبی (HCA) می باشد. همچنین با به کارگیری میزان ۸ شاخص حاصل از آنالیز طیف سنجی (شاخص آلیفاتیکی، آروماتیکی، زنجیره بلند، جانشینی او ۲، شاخه های جانبی، کربونیل و سولفوکسید) هر نمونه، روش های PCA و HCA جهت گروه بندی بهتر نمونه ها و همچنین تایید تفاسیر بخش های قبل مورد استفاده قرار گرفت [۳۸].

۱-۴-الف- تحلیل خوشه ای سلسله مراتبی^۴

تحلیل خوشه ای برای تعیین شباهت نسبی بکار می رود که این شباهت، همگنی در ویژگی های اندازه گیری شده پارامترها را نشان می دهد. این روش آماری، کاربرد زیادی در بررسی داده های چند متغیره از جمله بررسی ارتباط بین متغیرها، سامان دهی نمونه ها در قالب ساختارهای معنی دار و نمایش ترکیب کل نفت یک منطقه به تعداد محدودی از خوشه ها دارد. تحلیل خوشه ای مجموعه ای از متغیرها را در داخل خوشه های همگن جای می دهد. خوشه های حاصل از این تحلیل، از همگنی درونی (درون خوشه ای) و بیرونی (بین خوشه ها) برخوردار هستند [۲۵]. خوشه بندی متراکم سلسله مراتبی، رایج ترین روش تحلیل خوشه ای می باشد که ارتباطات همسان ذاتی را بین هر کدام از نمونه ها و نیز بین همه داده ها فراهم می کند و معمولا با یک نمودار درختی نشان داده می شود [۳۱]. شکل ۱۶ دیاگرام تحلیل خوشه ای سلسله مراتبی (HCA) نمونه های مورد مطالعه را نشان می دهد. با توجه به شکل، خط برش نمودار در فاصله تقریبی ۰/۱ به صورت اتوماتیک توسط نرم افزار XLSTAT ترسیم شده است. در شکل ۱۶ دو دسته متمایز دیده می شود که دسته اول را می توان در دو گروه او ۲ و دسته دوم را در گروه ۳ قرار داد. گروه اول به دو زیر گروه، گروه دوم نیز به دو زیر گروه و گروه سوم به یک زیر گروه

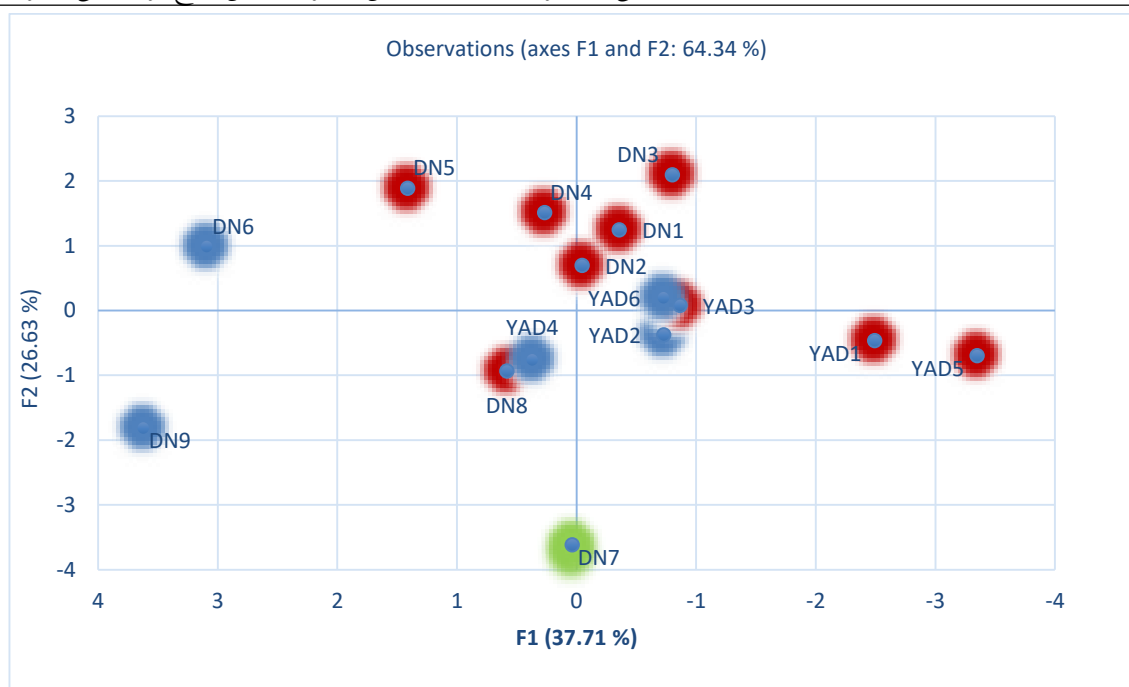
تقسیم می شوند. اکثر نمونه ها در دسته اول قرار دارند. براساس این نمودار نمونه های مورد مطالعه سه گروه مجزا را تشکیل می دهند که گروه اول شامل نمونه های DN6, DN9, YAD2, YAD4, YAD6 ، گروه دوم شامل نمونه های DN2, DN3, YAD3, DN1, YAD5, YAD1, DN5, DN8, DN4 و گروه سوم شامل نمونه DN7 می باشد که این خود تاییدی بر گروه بندی بر اساس شاخص آروماتیک در مقابل شاخص های کربونیل و سولفوکسید می باشد.



شکل ۱۶- تحلیل خوشه ای سلسله مراتبی نمونه های مورد مطالعه.

۱-۴-ب- تحلیل مولفه های اصلی^۵

تحلیل مولفه های اصلی یکی از روش های تبدیل داده است که برای ایجاد یک ساختار اساسی در یک مجموعه چند متغیره بکار میرود. در تحلیل مولفه های اصلی، بر مبنای معیار کایزر، مولفه هایی مورد استفاده قرار می گیرند که مقدار بردار ویژه آنها بزرگتر یا مساوی ۱ باشد. در نتیجه همه عواملی که حاوی یک واریانس بیشتر از متغیرهای اصلی استاندارد شده باشند، پذیرفته می شوند. عامل ها به ترتیب ارزش، درجه بندی می شوند. عامل اول یا مولفه هایی که دارای بالاترین مقدار بردار ویژه هستند، دارای بیشترین اهمیت در منشا تغییرات در داده ها می باشند و آخرین عامل به عنوان حداقل فرآیند ایجاد کننده ی تغییرات شیمیایی است [۳۱ و ۳۲]. شکل ۱۷ نمودار اسکتر پلات مجموع مولفه PC1 بر روی PC2 را نشان میدهد. شکل ۱۷ شامل نمونه های مجزا از گروه های ۲، ۱ و ۳ در محیط PCA می باشد که به طور کامل با گروه بندی های ایجاد شده از HCA سازگار هستند.



شکل ۱۷- تحلیل مولفه های اصلی نمونه های مورد مطالعه.

۵- نتیجه گیری

در این مقاله ۱۵ نمونه نفت مورد آنالیز قرار گرفت که ۹ نمونه از میدان دارخورين و ۶ نمونه از میدان نفتی یادآوران برای به دست آوردن اطلاعات قابل قبول و قابل اعتماد از ویژگی های ساختاری نفت، استفاده گردید. بر اساس نتایج حاصل، مهمترین ساختارهای موجود در نمونه های نفت، ساختارهای آلیفاتیک، آروماتیک، کربونیل و سولفوکسید می باشند. به طور کلی براساس نمودارهای مقایسه ای شاخص های مختلف نیز می توان گفت که نمونه های دو میدان از لحاظ میزان فراوانی ساختارهای آلیفاتیک به طور متوسط در یک سطح قرار دارند و میزان فراوانی ساختارهای آروماتیک، آلکان های با زنجیره مستقیم، ساختارهای بنزنی (شاخص جانشینی ۲)، فراوانی پیوندهای C=O و پیوندهای S=O نمونه های میدان دارخورين بیشتر از نمونه های میدان یادآوران می باشند. همچنین میزان فراوانی ساختارهای بنزنی (شاخص جانشینی ۱) و فراوانی شاخه های جانبی در ساختارهای آلیفاتیک نمونه های میدان یادآوران نسبت به نمونه های میدان دارخورين بیشتر است در نتیجه می توان گفت که نمونه های میدان دارخورين، میزان اکسیژن، گوگرد و سولفور بیشتری نسبت به نمونه های میدان یادآوران دارند. در این مطالعه از ویژگی های ساختاری نفت ها به عنوان پارامتر تطابق استفاده شد. بررسی نمونه های نفت میدانی نفتی مورد مطالعه نشان داد که این نفت ها مربوط به سه خانواده مستقل هستند. اولین خانواده نفتی شامل نمونه های DN6, DN9, YAD2, YAD4, YAD6 ، دومین خانواده نفتی شامل نمونه های YAD1, YAD3, YAD5, و DN1, DN2, DN3, DN4, DN5, DN8 و سومین خانواده شامل نمونه DN7 می باشد. میزان آروماتیک، کربونیل و سولفوکسید متعلق به نمونه های دو میدان دارخورين و یادآوران به سه جزو تقسیم و بصورت ۳گروه مجزا در آنالیز طیفسنجی مادون قرمز در نظر گرفته شد و از آنجایی که نمونه های این سه جزو ویژگی های یکسانی

دارند، طبقه بندی صحیح باید شامل این سه جزو در سه گروه (خانواده) باشد. به کار گیری روش های HCA و PCA نیز تاییدی بر گروه بندی نمونه ها بر اساس نمودار شاخص آروماتیک در مقابل مجموع شاخص های کربونیل و سولفوکسید بود. برخی از نمونه های میدان دارخوین و میدان یادآوران دارای ویژگی های ساختاری مشابه (میزان آروماتیک، کربونیل، سولفوکسید) می باشند در نتیجه می توان گفت برخی از نمونه های میدان دارخوین با نمونه های یادآوران از یک منشا مشترک تولید شده اند. این نتایج روش طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز را به عنوان ابزاری با ارزش و جدید در حوزه ژئوشیمی مخزن تأیید می کنند. دستاورد نهایی این پژوهش، عبارتست از نقش طیف سنجی مادون قرمز به عنوان یک تکنیک تجزیه ای سریع، قابل اعتماد و غیرمخرب که مکمل روش های کروماتوگرافی و آنالیز بایومارکر ها می باشد.

سپاس و قدردانی

از آقای دکتر محمد حسین صابری و پژوهشگاه صنعت نفت بخاطر همکاری صمیمانه سپاسگزاری می گردد. همچنین از داوران مقاله آقایان دکتر محمود معماریانی و دکتر بهمن سلیمانی تشکر و قدردانی می گردد.

منابع

- [۱] افتخارنژاد، ج.، ۱۳۵۸، تکنیک بخشهای مختلف ایران از نظر وضع ساختمانی در ارتباط با حوضه - های رسوبی، نشریه انجمن نفت شماره ۸۲، صفحه ۱۹-۲۸.
- [۲] اسدی مهماندوستی، ا.، معلمی، س. ع.، مهناز، ا. و حبیبی، ع.، ۱۳۹۵، ارزیابی ژئوشیمیایی نفت های خام مخازن سروک و فهلپان با استفاده از داده های بیومارکری در یکی از میداین نفتی در دشت آبادان، نشریه علمی-پژوهشی زمین شناسی نفت ایران، سال پنجم، شماره ۱۰، زمستان ۱۳۹۴، صفحه ۶۶-۴۶.
- [۳] علیزاده، ب.، و آزادبخت، ن.، و حسینی، س.، و ترهنده، ا.، ۱۳۹۱. مطالعه ژئوشیمیایی و تاثیر کانی ماتریکس بر پتانسیل سنگ های منشا احتمالی میدان نفتی دارخوین واقع در دشت آبادان. زمین شناسی نفت ایران، ۳(۳)، ۱۱۷-۱۳۵.
- [۴] علیزاده، ب.، تمیشه، ح.، زراسوندی، ع. و رشیدی، م.، ۱۳۹۵، مطالعه ایزوتوپی نفت مخازن گروه بنگستان در برخی از میداین دشت آبادان، جنوب غرب ایران. مجله زمین شناسی کاربردی پیشرفته، ۲، تابستان ۹۵.
- [۵] محسنی، ح.، اسفندیاری، م. و کاووسی، م.، ۱۳۹۴، فرآیندهای دیاژنزی و چینشنگاری سکانسی سازند فهلپان در میدان نفتی یادآوران (کوشک و حسینیه) در فروافتادگی دزفول شمالی، نشریه علمی-پژوهشی رخساره های رسوبی، پاییز و زمستان ۱۳۹۴، شماره ۸، صفحه ۲۳۶-۲۵۵.
- [۶] حقی پور ۱۳۵۸، شرح نقشه زمین شناسی زاگرس، مقیاس ۱/۱۰۰۰۰۰، گزارش شماره A3، صفحه ۵۸.
- [۷] طاهری نژاد، م.، آسمانی، م. و ربانی، ا. ر.، ۱۳۹۵، طبقه بندی ژنتیکی نفت های میداین شرق خلیج فارس با استفاده از طیف سنجی مادون قرمز نمونه های آسفالتین. نشریه علمی-پژوهشی زمین شناسی نفت ایران. سال ششم، شماره ۱۲، پاییز و زمستان ۱۳۹۵، صفحه ۷۹-۶۰.
- [۸] باسره، ف.، طاهری نژاد، م.، ربانی، ا. ر. و آسمانی، م.، ۱۳۹۵، مطالعه طیف سنجی مادون قرمز نمونه های آسفالتین استخراج شده از نفت خام میداین خلیج فارس. سومین کنفرانس بین المللی نوآوری های اخیر در شیمی و مهندسی شیمی. ۱۸ شهریورماه ۹۵ تهران.
- [۹] مطیعی، ه.، ۱۳۷۲، زمین شناسی ایران-زمین شناسی نفت زاگرس: سازمان زمین شناسی و اکتشاف معدنی کشور، صفحه ۵۷۲.
- [۱۰] مطیعی، ه.، ۱۳۷۴، زمین شناسی نفت زاگرس، سازمان زمین شناسی کشور، چاپ نخست، صفحه ۵۸۹.
- [11] AERMANYER, P., REBUFA, C., KISTER, J., 2007, Reservoir compartmentalization assessment by using FTIR spectroscopy: *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **58**. 464-471.

- [12] BELLINY, M., CATAACCHINI, E., NATALE, D.P., DI LONARDO G., FUSINA L. and INGUSCIO M., 1995, Coherent FTIR spectroscopy of molecules of atmospheric interest: *Infrared Physics & Technology*, **36**, 37-44.
- [13] CHRISTY, A.A., HOPLAND, A.L., BARTH, T., KVALHEIM, O.M., 1989, Quantitative determination of thermal maturity in sedimentary organic matter by diffuse reflectance infrared spectroscopy of asphaltenes: *Organic Geochemistry*, **14**, 77– 81.
- [14] DAVIS, J. C., 1986, Statistics and data analysis in geology: *John wiley & sons Inc New York*, 646p
- [15] DOUMENQ, P., GUILIANO, M., MILLE, G., KISTER, J., 1991, Approche méthodologique directe et continue du processus d'oxydation des bitumes par spectroscopie infrarouge à Transformée de Fourier: *Analytica Chimica Acta*, **242**, 137–141.
- [16] GUILIANO, M., MILLE, G., KISTER, J., MULLER, J.F., 1988, Etude des spectres IRTF de charbon français déminéralisés ET de leurs macéraux: *Journal de Chimie Physique*, **85**, 963–970.
- [17] HWANG, R. J., AHMED, A. S., MOLDOWAN, J. M., 1994, Oil composition variation and reservoir continuity: Unity field, Sudan: *Organic Geochemistry*, **21**: 171–88.
- [18] Hwang, R. J., Baskin, D. K., 1994, Characterizing the Greater Burgan Field: Use of Geochemistry and Oil Fingerprinting: *Pet Geosci Geo*, 94(2), 529–41.
- [19] MAYO, D.W., MILLER, F. A., and HANNAH, R. W., 2004, Course notes on the interpretation of infrared and Raman spectra: *Wily Online Library*.
- [20] M KHANMOHAMMADI, M. R., BAGHERI GARMARUDI, A., 2012, Characterization of petroleum-based products by infrared spectroscopy and chemometrics: *Trends in Analytical Chemistry*, **35**.
- [21] MOSCHOPEDIS, S.E., PARKASH, S., and SPEIGHT, J., 1979, Thermal decomposition of asphaltens: *Fuel*, **57**, 431-434.
- [22] NOSRATI, K., DERFISHI, K. H., GHAREHCHAHI, S., RAHIMI, K. H., 2011, Surface water quality assessment of the Haraz-Ghareh souz basin using multivariate statistical techniques: *Knowledge of Earth science*, **2(5)**, 41-55.
- [23] PAVIA, D.L., LAMPAMAN, G. M., KRIZ, G. S., and VYVYAN, J. A., 2008, Introduction to spectroscopy: *Cengage Learning*.
- [24] PELET, R., BEHAR, F., and MONIN, J. C., 1986, Resins and asphaltens in the generation and migration of petroleum: *Organic Geochemistry*, **10(1)**, 481-498.
- [25] PIERI, N., PLANCHE, J.P., KISTER, J., 1996, Caractérisation structurale des bitumes routiers par IRTF et Fluorescence UV en mode excitation émission synchrones: *Analysis*, **24**, 113–122.
- [26] PERMANYER, A., DOUIFI, DUPUY, N., LAHCINI, A., KISTER, J., 2005, FTIR and SUVF spectroscopy as an alternative method in reservoir studies. Application to Western Mediterranean oils: *Fuel*, **84**, 159–168.
- [27] PERMANYER, D. A., AZEVEDO, C., RÉBUFA, J., KISTER, Y F.T.T., 2005, Characterization of Brazilian oils by FTIR and SUVF spectroscopy. A comparison with GC/MS results: *Geogaceta*, **38**, 139-141.
- [28] PERMANYER, A., DOUIFI, L., LAHCINI, A., LAMONTAGNE, J., KISTER, K., 2002a, FTIR and SUVF spectroscopy applied to reservoir compartmentalization: a comparative study with gas chromatography fingerprints results: *Fuel*, **81 (7)**, 861–866 .
- [29] PERMANYER, A., DOUIFI, L., ALBERDI, M., REBUFFA, C., KISTER, J., 2002b, Reservoir compartmentalization and oil maturity determined by FTIR: *Proceedings of 8th Latin-American Congress on Organic Geochemistry*, 111–114.
- [30] PETERS, K. E., and FOWLER, M. G., 2002, Applications of petroleum geochemistry to exploration and reservoir management: *Organic Geochemistry*, **33(1)**, 5-36.
- [31] ROUESSAC, F. and ROUESSAC, A., 2013, Chemical analysis: modern instrumentation methods and techniques: *John Wiley & Sons*.

- [32] SAADATINEJAD, M. R. and SARKARINEJAD, K., 2011, Application of the spectral decomposition technique for characterizing reservoir extensional system in the Abadan Plain, southwestern Iran: *Marine and Petroleum Geology*, **28(6)**, 1205-1217.
- [33] SHRESTHA, S. and KAZAMA F., 2007, Assessment of surface water quality using multivariate statical techniques: A case study of the Fuji river basin, Japan: *Jurnal of Environmental Modeling & Software*, **22(4)**, 464-475.
- [34] STAT SOFT INC, 2004, STATISTICA (Data Analysis Software System), Version 6.
- [35] USUNOFF, E. J., GUZMA, N., GHUZMA, N. A., 1989, Multivariate analysis in hydrochemistry: an example of the use of factor and correspondence analyses: *Ground Water*, **27(1)**, 27-34.
- [36] BETINA, P.O., LOVATTI, A., SAMANTHA R., NATALIA, D. E., PORTELA, A., CRISTINA M.S., 2019, Identification of petroleum profiles by infrared spectroscopy and chemometrics: *Fule*, **254**, 123-134.
- [37] Mariana, K., Francine D., Gabriely S., 2021, a review of chemometrics models to predict crude oil properties from nuclear magnetic resonancs and infrared spectroscopy: *Fule*, **303**. 98-112.
- [38] PINHEIRO, D., GARCIA, J., CARASCHI, C., VENTORIM, G., 2019, Assessment of plant biomass for pellet production using multivariate statistics (PCA and HCA): *Renewable Energy*, **139**,796-805.
- [39] VICTOR, H. DOS SANTOS, J.M., Z. PESTANA, V., FREITAS, J., F. RODRIGUES, L., 2018, A preliminary study on traceability of biodiesel mixtures based on the raw materials profiles from Brazilian regions and fourier transform infrared spectroscopy (FTIR): *Vibrational spectroscopy*, **99**, 113-123.

Geochemical study and genetic classification of Fahlian reservoir oil using infrared spectroscopy in Darkhovin and Yadavaran fields

Mohammad Ali Shahmoradi¹, Mohammad Hossein Saberi^{2*}, Bahman Zarenejad³, Ali Chehrazi⁴

1-Master student, Department of Engineering Petroleum, Semnan University, Semnan, Iran

2-Assistant Professor, Department of Engineering Petroleum, Semnan University, Semnan, Iran

3- Associate Professor Faculty of Chemical Engineering, Department of Chemical Engineering, Semnan University, Semnan, Iran

4- Iran Petroleum Company

*Mh.saberi@semnan.ac.ir

Received: April 2020, Accepted: July 2021

Abstract

To perform geochemical adaptations, the first step is to identify the molecular and compositional structure of the oil. One matching method is to use infrared spectroscopy to detect and compare the structure of oil samples. Infrared spectroscopy is a practical method with easy interpretation, low cost and reliable results for determining the structure of organic compounds. Also, due to the significant growth of the tendency to develop fast, accurate and reliable decomposition methods for industrial applications and the discovery of new hydrocarbon resources in the sedimentary basin of Abadan plain such as Darkhovin and Yadavaran oil fields in recent years, indicates the need for more comprehensive studies. There is sediment in this basin. Based on this, 15 samples of crude oil from Fahlian reservoir in the most important oil fields of this basin, namely Darkhovin (9 samples) and Yadavaran (6 samples) located in southwestern Iran were selected and examined. By classifying the samples through crude oil evaluation, the objectives of this study were achieved. Using infrared spectroscopy, the functional groups in the samples were determined and then the amount of functional groups in different samples were compared with each other. The results of infrared spectrometer and examination of oil samples of the studied oil fields showed that these oils belong to three independent families. The first oil family includes samples DN6, DN9, YAD2, YAD4, YAD6, the second oil family includes samples DN1, DN2, DN3, DN4, DN5, DN8 and YAD1, YAD3, YAD5, and the third family includes samples DN7. The use of HCA and PCA methods also confirmed the grouping of samples based on the aromatic index diagram versus the sum of carbonyl and sulfoxide indices. In this study, it was shown that infrared spectrometer is a fast, reliable and non-destructive decomposition option and complementary to chromatography and biomarker analysis methods to perform various scientific and industrial goals in the oil industry, including measuring the quality, quantity and geochemical evaluation of oil. is.

Keywords: Crude oil, Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy, Oil-oil correlation, Fahlian reservoir