I.2. Nguồn gốc hữu cơ của dầu mỏ

Theo giả thiết này thì dầu mỏ được hình thành từ các hợp chất có nguồn gốc hữu cơ, cụ thể là từ xác chết của động thực vật và trải qua một quá trình biến đổi phức tạp trong một thời gian dài (hàng chục đến hàng trăm triệu măn) dưới tác động của nhiều yếu tố khác nhau như vi khuẩn, nhiệt độ, áp suất và xúc tác có sản trong lòng đất và đôi khi còn có sự tác động của các bức xạ do sự phóng xạ ở trong lòng đất.

Thực tế thì quá trình hình thành dầu khí là một quá trình lâu dài và liên tục, nhưng để thuận tiện cho quá trình nghiên cứu sự biến đổi từ các xác chết của động thực vật đến dầu khí ngày nay thì người ta chia quá trình này thành bốn giai đoạn khác nhau như sau:

I.2.1. Tích đọng các vật liệu hữu cơ ban đầu

Những vật liệu hữu cơ ban đầu (hay còn gọi là những chất mẹ đẻ ra dầu khí) của dầu khí hiện nay chủ yếu là những sinh vật sống ở biển: phù du, thực vật, động vật dưới biển. Tuy nhiên, vì biển là nơi hội tụ các dòng sông trên đất liền nên tất nhiên sẽ có cả các động thực vật (xác chết của chúng) có nguồn gốc từ trên cạn. Tất cả những vật liệu hữu cơ trên đây đều có thể là chất mẹ tạo thành dầu khí. Như vậy, có thể vì sự phức tạp trong các vật liệu ban đầu đó đã dẫn đến sự tạo thành các loại dầu mỏ có thành phần thay đổi rất khác nhau.

Trong những loại vật liệu kể trên thì những loại sinh vật ở biển vẫn là những loại chủ yếu để tạo thành dầu khí. Trong đó thì không phải những sinh vật lớn như các loại rong, tảo (thực vật), cá, tôm (động vật) là nguồn vật liệu ban đầu chủ yếu, mà chính là các loại sinh vật bé như các loại phù du. Phù du được gọi chung cho các loại sinh vật nhỏ, hoạt động với bán kính hẹp, thường ở tại chỗ (hoặc nếu có di cư đây đó là do dòng chảy của nước). Chúng rất bé, kích thước khoảng vài milimet thường làm thức ăn của các loại động vật ở biển. Chính vì vậy, số lượng của chúng rất nhiều, đặc biệt là các loại phù du thực vật.

Những vật liệu hữu cơ ban đầu, dù là loại động vật ở đất liền do nước mang ra biển hay các loại động vật sinh trưởng ở biển, nói chung là sau khi chết, đều bị lắng đọng xuống đáy biển. Ở trong nước biển lại có rất nhiều vi khuẩn, tùy theo môi trường mà có thể có vi khuẩn hiếu khí hay yếm khí. Các vi khuẩn hiểu khí hay yếm khí nói chung có nhiều, ngay ở chiều sâu của đáy bể đến 2000m số lượng vi khuẩn hiếu cũng có từ khoảng 16-49 triệu con còn các vi khuẩn yếm khí có khoảng 1,3 đến 5,2 triệu con trong một gam vật liệu trầm tích. Nhưng càng xuống sâu vào lớp trầm tích, số lượng vi khuẩn sẽ càng giảm mạnh hơn. Chẳng hạn, xuống sâu 45-55cm trong lớp trầm tích vi khuẩn hiếu khí sẽ còn 500- 8700, trong khi đó các vi khuẩn yếm khí có thể còn đến 6000-14000 tính cho một gam trầm tích.

Sau khi các động thực vật bị chết, lập tức bị các vi khuẩn tác dụng, những thành phần nào dễ bị phá hủy nhất, thì vi khuẩn sẽ phá hủy tạo thành các sản phẩm

khí và các sản phẩm hòa tan trong nước rồi tản mác khắp mọi nơi, còn thành phần nào bền vững chưa bị phá hủy hoặc chưa kịp bị phá hủy, sẽ dần lắng đọng lớp này chồng chất lên lớp kia tạo thành lớp trầm tích ở đáy biển. Sự lắng đọng này trong thiên nhiên xảy ra vô cùng chậm chạp (1-2mm đến vài cm /1000 năm).

Một cách tổng quá thì thành phần của các xác động thực vật được chia thành ba phần chính:

- Các hợp chất hữu cơ như hydrat cacbon;
- Các chất albumin;
- Các chất lipit (bao gồm các axit béo, sáp, nhựa, dầu, các hydrocacbon cao phân tử vv…)

Các hydrat cacbon, đặc biệt là những loại phân tử lượng thấp là các hợp chất không bền vững, dưới tác dụng của vi khuẩn chúng bị phân hủy tạo thành khí và các chất tan trong nước vì vậy chúng không phải là chất mẹ tao nên dầu khí.

Các chất albumin nói chung cũng rất dễ bị các vi khuẩn phân hủy, do đó không thể góp phần tạo nên dầu và khí được. Tuy nhiên, một số albumin có chứa nitơ, lưu huỳnh hoặc oxy thì chúng tương đối bền vững nên ít bị phân huỷ do đó chúng sẽ nằm lại trong thành phần của dầu mỏ sau này.

Phần còn lại là các hợp chất lipid không bị phá hủy bởi vi khuẩn có thể tham gia vào quá trình biến đổi để tạo thành dầu khí. Nói chung, mức độ phân hủy các hydrat cacbon và albumin thành khí và các hợp chất tan trong nước phụ thuộc rất lớn vào hoàn cảnh xung quanh khi lắng đọng. Các chất khí tạo thành do tác dụng phân hủy của các vi khuẩn lên albumin và hydrat cacbon phổ biến là CO_2, NH_3, H_2S, N_2, CH_4. Tuyệt nhiên trong sản phẩm khí này không tìm thấy hydrocacbon khí nặng hơn CH_4. Thực ra cũng phát hiện được một số hydrocacbon C_2, C_3, C_4 nhưng vô cùng bé, tỷ số giữa lượng CH_4 trên tổng số các hydrocacbon nặng hơn đạt đến 21.000. Cho nên, nếu so sánh với thành phần khí thiên nhiên, thì sẽ không thấy

giống nhau chút nào cả vì trong thành phần khí thiên nhiên hàm lượng hydrocacbon C_2, C_3, C_4, C_5 đều có với một hàm lượng đáng kể.

Như vậy, trong thành phần hữu cơ của xác động thực vật thì các chất lipit là bền vững nhất, không bị vi khuẩn phá hủy do đó nó được bảo vệ tương đối nguyên vẹn khi lắng đọng nên nó là chất mẹ để biến đổi về sau tạo thành dầu khí.

I.2.2. Biến đổi các chất hữu cơ ban đầu thành dầu khí

Những chất hữu cơ bên vững không bị các vi khuẩn phá hủy ở giai đoạn một chính là các hợp chất lipit. Lipid là tên gọi chung của một nhóm các chất mà đặc trưng của chúng trong phân tử có các hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch vòng, như các axit béo, các este của các axit béo (Triglyxêrit), các rượu cao, các aminoaxit, các chất sáp, nhựa, các terpen, các chất mang màu (pigmen), licgin, các chất axit humic... tuỳ theo các động thực vật là loại hạ đẳng rong, tảo, phù du) hay thượng đẳng (cây cối trên cạn, động vật lớn ở biển) mà trong thành phần của các chất lipid sẽ thay đổi khác nhau.

Những axit béo của động thực vật trên cạn thường loại C_{18} là phổ biến trong khi đó, các axit béo của động thực vật ở dưới biển (thượng đẳng hoặc hạ đẳng) phần đông đều từ C_{20}- C_{24}. Loại axit béo của động thực vật trên cạn thường là axit béo no, còn loại dưới biển thường là axit không no. Còn mở và các axit béo của những loại phù du thường là loại không no, từ C_{14} trở lên, và đặc biệt là loại có số nguyên tử cacbon trong mạch là số chẵn thường chiếm phần lớn (hydrocacbon C_{14}, C_{16}, C_{18} C_{20} và cao hơn). Nhìn chung, các axit béo của động thực vật trong các trầm tích ở biển, đều thấy loại cấu trúc có số nguyên tử cacbon trong mạch là số chẵn chiếm phần chủ yếu.

Trong những điều kiện nhiệt độ, áp suất, xúc tác, thời gian kéo dài đã nêu ở trên các thành phần hữu cơ bền vững với vi khuẩn đều bị biến đổi do các phản ứng hoá học tạo nên dầu khí.

Tóm lại, trong giai đoạn tạo thành dầu mỏ, các chất hữu cơ có trong lớp trầm tích chịu nhiều biến đổi hoá học dưới ảnh hưởng của nhiệt độ, áp suất, xúc tác và thời gian dài. Những hợp chất ban đầu của dầu mỏ có cấu trúc phức tạp, mạch phân tử dài, số lượng nguyên tử cacbon lớn, những hydrocacbon vòng có nhiều nhánh phụ xung quanh biến đổi thành các hợp chất có phân tử nhỏ hơn, cấu trúc đơn giản hơn. Thời gian càng dài, mức độ lún chìm càng sâu, càng có xu hướng tạo nến các phân tử bé hơn, những nhánh bị đứt gãy tạo nên các parafin mạch ngắn, cho đến khí. Thực chất của quá trình biến đổi này là quá trình cắt mạch, mức độ của quá trình cắt mạch này được gọi là độ biến chất. Những hệ vòng ngưng tụ lớn cũng có thể bị đứt gãy tạo thành các vòng có số lượng vòng ít hơn. Chiều hướng biến đổi ở nhiệt độ cao của các hydrocacbon thơm là có thể chuyển sang naphten, và sau đó từ naphten sang parafin. Chính vì vậy, thời gian càng dài, độ lún chìm càng sâu dầu được tạo thành chứa càng nhiều parafin với trọng lượng phân tử ngày càng nhỏ tức có nhiều phần nhẹ. Càng lún sâu hơn nữa, chúng có khả năng chuyển hoàn toàn thành khí hydrocacbon. Trong các hydrocacbon thì mêtan là bền vững nhất nên cuối cùng hàm lượng mêtan trong khí rất cao. Theo tính toán khi độ lún chìm đạt được độ sâu khoảng 5 đến 7 km thì quá trình tạo dầu xem như kết thúc và chuyển sang quá trình tạo khí.

Như vậy, càng lún chìm xuống sâu thành phần hoá học của dầu sẽ thay đổi theo chiều hướng tăng dần các hợp chất parafin với trọng lượng phân tử bé và ít cấu trúc nhánh nên dầu sẽ nhẹ dần.

Khi mức độ biến đổi càng lớn (hay còn gọi là độ biến chất) càng lớn thì dầu thu được càng nhẹ thì hàm lượng parafin càng nhiều, tỷ trọng dầu càng nhỏ. Do đó độ biến chất ở đây không có nghĩa xấu mà ngược lại mà đó chính là quá trình cắt mạch các hydrocacbon từ các chất có cấu trúc phức tạp sang các hợp chất có cấu trúc đơn giản hơn.

Ngược lại các quá trình trên, từ các hợp chất đơn giản cũng có thể biến đổi để tạo thành các hợp chất đa vòng có trong lượng phân tử lớn hơn. Theo tác giả Petrov,

các axit béo của thực vật thường là các axit không no, sẽ biến đổi tạo ra γ-lacton, sau đó chúng biến đổi tạo thành naphten hoặc aromat:

Các xeton này có thể ngưng tụ tạo thành các hydrocacbon có cấu trúc hỗn hợp, hoạc tạo thành alkyl thơm:

Dựa vào logic của các quá trình biến đổi trên thì sự biến đổi của các hydrocacbon thơm nhiều vòng, hydrocacbon naphtenic nhiều vòng tạo thành parafinic nhẹ phải đòi hỏi có hydro. Để giải thích sự có mặt của hydro, có nhiều ý kiến cho rằng, có thể có sự tham gia của vi khuẩn ở đây. Qua nghiên cứu, Nhà hoá học Zo Bell (Mỹ) đã tìm thấy các vi khuẩn sống không chỉ trong các lớp trầm tích trẻ, mà ngay cả trong cá tầng chứa dầu, và đã xác định ngay ở nhiệt độ 85^{o}C hoặc cao hơn, trong môi trường muối cũng không giết chết được vi khuẩn. Zo Bell cũng đã tìm thấy được 30 dạng vi khuẩn có khả năng lên men các hợp chất hữu cơ tạo ra hydro, những vi khuẩn này thường gặp trong ao hồ, trong các đất đá trầm tích, trong nước. Nhưng bên cạnh những loại vi khuẩn tạo ra hydro, Ông cũng đã phát hiện được những loại vi khuẩn cần hydro để có thể thực hiện được các phản ứng khử O_2, S, N, P có trong các xác động thực vật. Bên cạnh đó, một số ý kiến như Lind lại cho rằng cũng có thể vì các lớp trầm tích nằm ở dưới sâu gần những vùng có các loại khoáng phóng xạ, cho nên dưới tác dụng bức xạ của các tia, từ các hydrocacbon có thể tách thành hydro và các sản phẩm hydrocacbon không no khác. Trong thành phần của khí thiên nhiên, nhiều khi gặp rất nhiều He. Ở những loại khí như vậy không bao giờ bắt gặp hydro. Điều đó cũng có thể chính do tác dụng của các hạt đã tạo ra Heli. Tuy nhiên, loại ý kiến về vai trò của phóng xạ trong quá trình tạo thành dầu khí vẫn không được nhiều người ủng hộ vì rất ít bằng chứng.

I.2.3. Sự di cư của dầu - khí đến các bồn chứa thiên nhiên

Dầu và khí được tạo thành thường nằm phân bố rải rác trong lớp trầm tích chứa dầu và được gọi là đá "mẹ". Dưới tác dụng của áp suất trong các lớp trầm tích rất cao và vì những sự biến động địa chất, những dầu và khí được tạo ra trong đá "mẹ" bị đẩy ra ngoài, và buộc chúng phải di cư đến nơi mới. Quá trình di cư đó thường xảy ra trong các lớp sa thạch đá vôi hoặc các loại nham thạch có độ rổng, xốp, còn được gọi là đá "chứa" đồng thời nó sẽ ở lại trên đó nếu cấu trúc địa chất có khả năng giử được nó và bảo vệ nó, nghĩa là tạo được những bồn chứa thiên nhiên. Những bồn chứa thiên nhiên này là những "bẩy" (vào mà không ra được nữa) với cấu trúc bao giờ cũng có một tầng đá chắn ở phía trên, thường là lớp đá, bùn mịn hoặc nút muối có tác dụng giử dầu khí ở lại.

Trong quá trình di cư, tính chất và thành phần của dầu khí có biến đổi. Khi đi qua những lớp vật liệu xốp thì những hiện tượng vật lý như lọc, hấp thụ phân chia sắc ký hoặc hòa tan đều có khả năng xảy ra với các mức độ khác nhau. Kết quả của nó thường làm cho dầu nhẹ hơn, những hợp chất có cực bị hấp phụ mạnh được giử lại trên đường di cư và do đó, nhựa asphalten sẽ giảm, còn khí sẽ càng giàu mêtan hơn.

I.2.4. Biến đổi tiếp tục trong bồn chứa tự nhiên.

Ở giai đoạn này tính chất của dầu khí biến đổi rất ít, không đáng kể. Tuy nhiên, dưới ảnh hưởng của nhiệt độ, xúc tác, vi khuẩn, của phóng xạ thường vẫn trức tiếp tác động, các hợp chất hữu cơ của dầu và khí vẫn có thể tiếp tục bị biến đổi thêm, theo chiều hướng làm tăng độ biến chất. Ngoài ra, nếu các "bẩy" chứa dầu nằm không sâu lắm, tầng đá chắn không đủ khả năng bảo vệ tốt, một bộ phần dầu khí có thể bay hơi, thậm chí có thể nước xâm nhập vào làm tăng quá trình oxy hoá kết quả dầu lại nặng thêm, giảm mất phần nhẹ, dầu trở nên nhiều nhựa- asphalten.

Tóm lại dầu và khí hydrocacbon trong thiên nhiên đều có cùng một nguồn gốc. Chính vì vậy, nơi nào có dầu cũng sẽ có khí và ngược lại. Tuy nhiên do quá trình di cư có thể khác nhau, nên mặc dù chúng được sinh ra ở một nơi chúng vẫn có thể cư trú ở những nơi khác xa nhau. Vì vậy có thể gặp những "bẩy" chứa khí nằm xa " bẩy" chứa dầu.