

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования**

**КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ ГЕОЛОГИИ И НЕФТЕГАЗОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

Кафедра химии нефти

Е. С. Охотникова, Е. Е. Барская, Ю. М. Ганеева

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ПОСОБИЕ

для практических занятий

магистров направления 05.04.01 «Геология»

**по курсу «Методы геохимических исследований нефти и органического ве-
щества пород»**

(часть 1)

**НЕФТЯНЫЕ УГЛЕВОДОРОДЫ И УСЛОВИЯ ИХ ОБРАЗОВАНИЯ В
ЗЕМНОЙ КОРЕ**

Казань – 2024

**УДК
ББК**

*Печатается по решению учебно-методической комиссии
Института геологии и нефтегазовых технологий
Протокол № 7 от 29.02.2024 г.*

*Заседания кафедры химии нефти
Протокол № 1 от 27.02.2024 г.*

Рецензенты:

кандидат химических наук, доцент кафедры «Химической технологии переработки нефти и газа» ФГБОУ «КНИТУ-КХТИ»

Д.А. Ибрагимова

кандидат технических наук, ведущий научный сотрудник Института геологии и нефтегазовых технологий ФГАОУ ВО «К(П)ФУ» **А.В. Вахин**

Охотникова Е.С., Барская Е.Е., Ганеева Ю.М.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ПОСОБИЕ для практических занятий магистров направления 05.04.01 «Геология» по курсу «Методы геохимических исследований нефти и органического вещества пород» (Часть 1) / Е.С. Охотникова, Е.Е. Барская, Ю.М. Ганеева. – Казань: Казан. ун-т, 2024. – 57 с.: рис. 11.

Учебно-методическое пособие составлено для магистров направления 05.04.01 «Геология». Данное пособие содержит как теоретические данные о номенклатуре и химических свойствах углеводородов, химическом составе нефти и способе его представления, так и оптимальный набор практических заданий по отработке полученного теоретического материала.

© Охотникова Е.С., Барская Е.Е., Ганеева Ю.М. 2024

© Казанский университет, 2024

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
РАЗДЕЛ 1. ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ НЕФТИ И ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА ПОРОД И СПОСОБЫ ЕГО ВЫРАЖЕНИЯ.....	6
1.1. Состав нефти, нефтяных компонентов и органического вещества пород. Классификация.	6
1.1.1. Элементный состав	7
1.1.2. Фракционный состав	7
1.1.3. Компонентный состав	8
1.1.4. Углеводородный состав.....	9
1.2. Способы выражения состава нефти	11
1.2.1. Примеры расчета состава.....	12
1.2.2. Построение тригонограмм	12
1.3. Задания для самостоятельной работы:	13
РАЗДЕЛ 2. НОМЕНКЛАТУРА И ИЗОМЕРИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В СОСТАВЕ НЕФТИ И ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА ПОРОД.....	16
2.1. Номенклатура органических соединений.....	16
2.1.1. Заместительная номенклатура	17
2.1.2. Рациональная номенклатура.....	18
2.1.3. Названия классов органических соединений	20
2.2. Изомерия органических соединений.....	28
2.2.1. Структурная изомерия.....	28
2.2.2. Пространственная изомерия.....	29
2.2.3. Способы определения конфигурации хирального центра	29
2.3 Задания для самостоятельной работы:	32
РАЗДЕЛ 3. ОБРАЗОВАНИЕ И ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ. ТЕОРИЯ ПРОИСХОЖДЕНИЯ НЕФТИ.....	36
3.1 Получение и химические свойства углеводородов	36

3.2. Теории происхождения нефти. Химические реакции образования нефтяных углеводородов.....	40
3.2.1. Неорганическая теория образования нефти.	40
3.2.2. Органическая теория образования нефти.	41
3.2.3. Направление преобразования основных классов углеводородов в процессе термокаталитического превращения (по А.Ф. Добрянскому) .	46
3.3 Задания для самостоятельной работы:	47
ГЛОССАРИЙ.....	51
СПИСОК РЕКОМЕНДОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ	57

Введение

Курс «Методы геохимических исследований нефти и органического вещества пород» изучается магистрами 2-го года обучения направления 05.04.01 «Геология» и осваивается в 3 семестре. Геохимические исследования в настоящее время рассматриваются как составная часть комплекса поисково-разведочных работ на нефть и газ. Данные о молекулярном составе нефтяных углеводородов и ряда неуглеводородных компонентов являются основой геохимических исследований по установлению генетического типа органического вещества, определению очагов нефтеобразования, способов формирования скоплений нефти и по выявлению вторичных процессов, происходящих с углеводородами в залежи. Первая часть курса «Методы геохимических исследований нефти и органического вещества пород» предусматривает освоение студентами базовых положений о химическом составе нефти и органического вещества пород, основных классах органических соединений, содержащихся в нефти, их номенклатуре и химических свойствах. Практикум проводится параллельно с лекционным курсом «Методы геохимических исследований нефти и органического вещества пород». Информация, собранная в рамках данного курса, помогает в выполнении курсовых и дипломных работ. Основные цели занятий – это, во-первых, ознакомление обучающихся с молекулярным составом нефти и способами его выражения, а во-вторых, с процессами трансформации органических соединений, в том числе в пластовых условиях, которые приводят к образованию нефтяных углеводородов. В предлагаемом пособии собраны базовые понятия химии углеводородов, необходимые для формирования у студентов геологических направлений общих представлений о процессах формирования и трансформации нефти.

Предлагаемое учебное пособие направлено на развитие у учащихся компетенции СПК-2.Б Владение знаниями о составе и свойствах горючих ископаемых, осадочно-миграционной теории происхождения нефти и газа, критериях выделения нефтематеринских пород, коллекторов и флюидоупоров и способность использовать их для обоснования перспектив нефтегазности и/или угленосности территорий.

РАЗДЕЛ 1. ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ НЕФТИ И ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА ПОРОД И СПОСОБЫ ЕГО ВЫРАЖЕНИЯ

Геохимия – наука о распределении химических элементов и их соединений в земной коре, или, другими словами, наука о химизме Земли. Одним из направлений этой науки является *геохимия нефти* – раздел нефтяной геологии, решающий вопросы химического изучения тех сторон состава нефти и связанных с ней природных образований, которые представляют интерес для решения задач геологии – поисков и разведки углеводородного сырья. Для поисков любых полезных ископаемых первоочередными являются вопросы об их происхождении, условиях дальнейшего изменения и нахождения в недрах. Для изучения *методов геохимических исследований нефти и органического вещества пород* необходим широкий спектр знаний по смежным направлениям: не только в области геохимии нефти и других горючих полезных ископаемых, но и в области органической геохимии, литологии и даже аналитической химии. *Органическая геохимия* – наука о химическом строении и химической эволюции органических молекул в земной коре. Без знаний о химическом составе органических соединений, составляющих нефтяные флюиды, и методах физико-химического анализа их состава решение поисковых задач в нефтяной геологии может привести к некорректному результату.

1.1. Состав нефти, нефтяных компонентов и органического вещества пород. Классификация.

Основную часть нефтяных флюидов составляют углеводороды, то есть соединения углерода и водорода, которые делятся на следующие классы: парафиновые (алканы), нафтеновые (циклоалканы), ароматические (арены) и этиленовые (алкены) углеводороды. Кроме этого, в нефти присутствуют гетеросодержащие соединения.

При исследовании нефти определяют ее:

- – элементный химический состав;
- – фракционный состав;
- – групповой состав, т.е. содержание в нефтях различных классов и групп соединений;
- – индивидуальный химический состав отдельных соединений.

1.1.1. Элементный состав

Углерод (83-87%) и водород (12-14%) являются основными элементами в составе нефти и органического вещества пород. Наиболее распространенные гетероэлементы нефти – это сера, кислород и азот. Содержание серы в нефти может изменяться в широких пределах до 3 % и выше. Содержание азота колеблется от 0,001 до 0,3 %, а кислорода — от 0,1 до 1 %. Процентное содержание перечисленных пяти элементов в составе образца нефти, нефтяных компонентов или органического вещества пород и есть его элементный состав. Содержание элементов, иногда и их соотношение, полезно знать для расчетов некоторых геохимических процессов, а для нефти элементный состав является основой для ее классификации. Так, например, по ГОСТ Р 51858-2002 в зависимости от массовой доли серы нефть подразделяют на четыре класса:

- малосернистая (< 0,6 % серы);
- сернистая (0,61 % — 1,8 %);
- высокосернистая (1,81 % — 3,5 %);
- особо высокосернистая (> 3,5 % серы).

В нефти и особенно в органическом веществе пород кроме пяти основных химических элементов в очень малых количествах присутствуют и другие элементы, главным образом металлы: ванадий, хром, никель, железо, кобальт, магний, титан, натрий, кальций, германий, а также фосфор и кремний. В отношении нефтяных образцов и образцов органического вещества пород их принято называть *микроэлементами*. При определении элементного состава нефти эти элементы концентрируются в остатке, называемом золой.

1.1.2. Фракционный состав

Фракционный состав обычно определяют для добываемых нефтей. *Фракцией* называется доля нефти, выкипающая в определенном интервале температур. Нефти выкипают в очень широком интервале температур, в основном, от 28 до 520-540°C. Фракционный состав нефти определяется стандартными методами (ГОСТ 2177-99, ГОСТ 11011-85). Полученные данные являются основой для построения *кривой истинной температуры кипения (ИТК)* нефти, установления потенциального содержания в нефти отдельных фракций и получения фракций нефти с целью исследования их группового и индивидуального углеводородного состава.

Строят кривую ИТК нефти (нефтепродукта) на основании зависимости температуры конца кипения отдельной фракции от ее суммарного выхода по объему. При *атмосферной перегонке* получают следующие фракции, выкипающие до 350°C и получившие названия *светлых дистиллятов*:

- до 100°C — петролейная фракция;
- до 180°C — бензиновая фракция;
- 140-180°C — лигроиновая фракция;
- 140-220°C — керосиновая фракция;
- 180-350°C (220-350°C) — дизельная фракция.

Остаток, образовавшийся при первичной переработке, нефти после отбора светлых фракций (дистиллятов) и выкипающий при температуре выше 350°C называется *мазутом*. Разгонка мазута при температурах 350-500°C происходит уже *под вакуумом*, в результате чего получают следующие фракции:

- 350-500 °C — вакуумный газойль (вакуумный дистиллят);
- от 500°C и выше — гудрон (вакуумный остаток).

1.1.3. Компонентный состав

Компоненты – группы веществ, отличающихся друг от друга по химическому составу и свойствам. Основными компонентами растворимой части органического вещества пород (битумоидов) и остатка нефти (без бензиновой фракции) являются: масла (в т. ч. твердые парафины), смолы, асфальтены.

Масла – это жидкие высококипящие углеводородные компоненты нефти, представляющие собой смесь парафиновых, нафтеновых и ароматических углеводородов.

Твердые парафины – это смесь твёрдых углеводородов метанового ряда преимущественно нормального строения с 18-35 атомами углерода в молекуле и температурой плавления 45-65 °C. В парафинах обычно содержится некоторое количество изопарафиновых углеводородов, а также углеводородов с ароматическим или нафтеновым ядром в молекуле. Твердые парафины выделяют из масляной фракции путем вымораживания при температуре -20°C из бензольно-ацетонового раствора (ГОСТ 11851-2018).

По содержанию парафинов нефти подразделяются на:

- малопарафинистые при содержании парафина менее 1,5 % по массе;
- парафинистые - 1,5 – 6,0 % ;

- высокопарафинистые – более 6 %.

В отдельных случаях содержание парафина достигает 25%.

Смолы – это высокомолекулярные гетероатомные компоненты нефти, растворимые в низкокипящих алканах. Твердые или высоковязкие аморфные малолетучие вещества черного или бурого цвета; молекулярная масса, которых составляет 400-700.

Асфальтены – это наиболее высокомолекулярные гетероатомные компоненты нефти, растворимые в бензоле, сероуглероде, хлороформе, но не растворимые в парафиновых углеводородах, спирте, эфире, ацетоне. Молекулярная масса асфальтенов находится в интервале 700-1500.

По суммарному содержанию смолисто-асфальтеновых веществ (САВ) нефти подразделяются на:

- малосмолистые при содержании САВ менее 5,0 % по массе;
- смолистые – 5,0 - 15,0 % ;
- высокосмолистые – более 15,0 %.

Нефть и битумоиды делят на асфальтены и мальтены (деасфальтенизированная часть нефти) путем осаждения асфальтенов низкомолекулярными алканами. Далее для разделения мальтенов на масла и смолы применяют метод колоночной хроматография (ГОСТ 11244-2018).

1.1.4. Углеводородный состав

Углеводороды нефти и битумоидов – это сложные и чрезвычайно разнообразные по своему составу и строению органические молекулы, хранящие информацию о составе и строении соединений, составляющих липидную основу древней живой материи: водорослей, бактерий и высших растений.

На углеводородный состав нефти и битумоидов влияет ряд факторов:

- особенности исходного органического вещества осадков;
- геохимические условия при преобразовании органического вещества в осадках;
- степень катагенетического (термического) превращения исходного органического вещества в зоне повышенных температур;
- вторичные изменения нефти в процессе образования залежей и их существования в течение длительного геологического времени (физическая дифференциация углеводородов в процессе миграции, воздействие повышенной температуры, окислительные процессы в залежах и т. п.).

В составе нефтяных флюидов идентифицировано >500 индивидуальных углеводородов, из которых наиболее важными для геохимических исследований являются углеводороды-биомаркеры. Они относятся к разным классам углеводородов и содержатся в нефти в относительно небольшом количестве, что предопределяет сложность их идентификации и выделения. Поэтому для биомаркерного анализа сначала определяют групповой углеводородный состав нефти или битумоида. Для этого предварительно из масел выделяют группы насыщенных и ароматических углеводородов, после чего изучают индивидуальный состав выделенных групп соединений.

Групповой углеводородный состав масляной фракции, с выделением парафино-нафтеновой (ПНУ), моноциклоароматической (МЦА), бициклоароматической (БЦА) и полициклоароматической (ПЦА) фракций определяют с применением метода жидкостной адсорбционной хроматографии (ГОСТ 11244-2018). Разделение углеводородных компонентов на классы проводят по показателю преломления. К парафино-нафтеновым относят компоненты с показателем преломления до 1,4900. Ароматические углеводороды условно разбивают на три группы: 1) моноциклоароматические $1,4900 < n < 1,5300$; 2) бицикло- $1,5500 < n < 1,5900$; 3) полициклоароматические.

Для определения точных концентраций компонентов в смеси по показателю преломления используют графический способ, основанный на правиле аддитивности показателей преломления. Он заключается в построении графика, описывающего зависимость показателя преломления от содержания определяемого компонента в смеси (рис.1). По построенному графику определяют содержание каждого компонента.

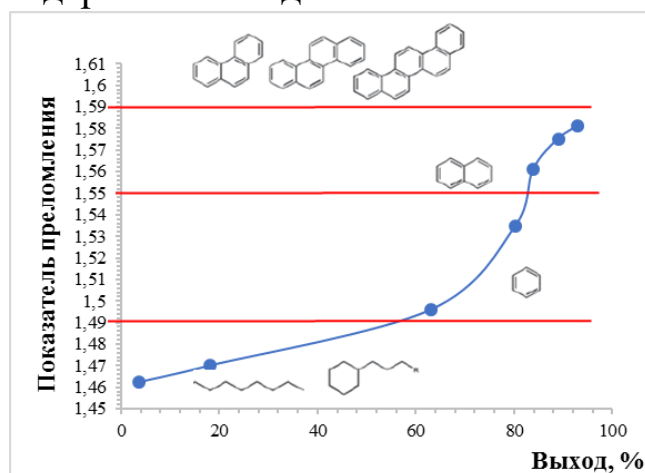


Рис.1. График зависимости показателя преломления от содержания определяемого компонента в смеси

1.2. Способы выражения состава нефти

Нефть и нефтепродукты можно рассматривать как смесь, состоящую из n компонентов. Их число и свойства определяют физико-химическую характеристику смеси в целом. В практических расчетах состав многокомпонентной смеси выражается в долях или процентах. Соотношение между долями и процентами 1:100. Для характеристики состава смеси принято использовать массовые, мольные и объемные доли¹.

Массовая доля (ω_i) i -го компонента представляет собой отношение его массы m_i к массе смеси m :

$$\omega_i = m_i/m \quad (1).$$

Очевидно, $\sum m_i = m$ и $\sum \omega_i = 1$.

Мольная доля (χ_i) i компонента выражается отношением числа молей ν_i этого компонента к общему числу молей ν смеси:

$$\chi_i = \nu_i/\nu \quad (2).$$

Аналогично массовой доле $\sum \chi_i = 1$.

Объемная доля (φ_i) i компонента есть отношение его объема V_i к объему всей смеси V :

$$\varphi_i = V_i/V \quad (3).$$

Аналогично массовой и мольной долям $\sum \varphi_i = 1$.

Пересчет *массового состава* в молярный и молярного состава в массовый осуществляется по формулам (4) и (5), соответственно:

$$\chi_i = \frac{\omega_i/M_i}{\sum(\omega_i/M_i)} \quad (4),$$

$$\omega_i = \frac{\chi_i M_i}{\sum \chi_i M_i} \quad (5),$$

где M_i – молярная масса компонента смеси.

Для пересчета *объемного состава* в массовый по формуле (6) и обратно по формуле (7) необходимо знать плотность ρ_i каждого компонента:

$$\varphi_i = \frac{\omega_i/\rho_i}{\sum \omega_i/\rho_i} \quad (6),$$

$$\omega_i = \frac{\varphi_i \rho_i}{\sum \varphi_i \rho_i} \quad (7).$$

Для жидкой смеси прямой пересчет объемных долей в молярные довольно сложен, поэтому лучше его проводить с помощью массовых долей.

¹ Хорошко С.И., Хорошко А.И. Сборник задач по химии и технологии нефти и газа. Учеб. пособие для сред. спец. учебн. заведений. – Мн.: Выш. Шк., 1989. - 119 с.

Для газовой смеси состав, выраженный объемными и молярными долями, одинаков.

1.2.1. Примеры расчета состава

Задача: Из 87 м³ пропана и 17 м³ этана была получена газовая смесь. Выразить состав газовой смеси в объемных и массовых долях.

Решение:

Найдем общий объем смеси: $V = V_1 + V_2 = 87 + 17 = 104 \text{ м}^3$. Объемная доля пропана $\varphi_1 = 87/104=0,8365$ или 83,65 % об.; этана $\varphi_2 = 17/104=0,1635$ или 16,35 % об.

Согласно справочным данным плотности пропана и этана при нормальных условиях равны 2,019 кг/м³ и 1,342 кг/м³, соответственно.

Массовые доли компонентов будут равны, соответственно:

$$\omega_1=0,8365 \cdot 2,019 / (0,8365 \cdot 2,019 + 0,1635 \cdot 1,342) = 0,885 \text{ (88,50 \% масс.)}$$

$$\omega_2=0,1635 \cdot 1,342 / (0,8365 \cdot 2,019 + 0,1635 \cdot 1,342) = 0,115 \text{ (11,50 \% масс.)}$$

1.2.2. Построение тригонограмм

Один из способов графического изображения аналитических данных, описывающих состав нефти, являются тригонограммы. В основном они используются для отображения состава трехкомпонентных систем и широко применяются в различных отраслях геологии, органической химии и др.

Кратко принципы построения тригонограмм заключаются в следующем. График имеет форму равностороннего треугольника. Каждая его сторона представляет собой шкалу концентраций одного компонента от 0 до 100%. Положение любой точки на графике задано тремя координатами, сумма которых постоянна и равна 100%.

А, В, С — это условные наименования компонентов, фракций т.п.

В точке вершины А содержание компонента А равно 100%, а вдоль противоположной стороны (СВ) треугольника расположены точки с нулевым его содержанием. Все линии равных концентраций компонента А (10%, 20%, 30% и т.д.) будут параллельны линии нулевой концентрации или линии нулевых координат СВ (рис. 2). Аналогично проводятся координатные линии второго и третьего компонентов.

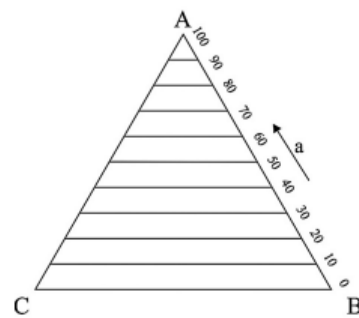


Рис. 2. Линии одинаковых концентраций для координаты А

Общий вид тригонограммы показан на рисунке 3. Для примера показано нахождение точки с координатами А = 50%, В = 20%, С = 30% (рис. 4).



Рис. 3. Общий вид тригонограммы

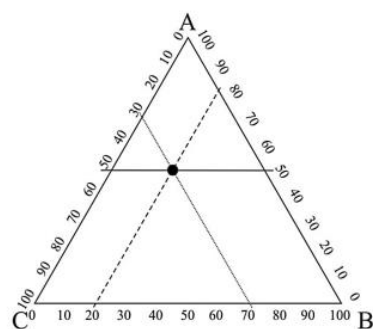


Рис. 4. Пример нахождения пробы на тригонограмме

В практике геохимических исследований приходится иметь дело не только с единичными определениями, но и с группами анализов. Они изображаются на диаграмме в форме поля, ограниченного координатными линиями так, что все анализы этой группы попадают в данное поле. Например, тригонограммы можно использовать для определения направленности изменения состава, как на рис. 5.

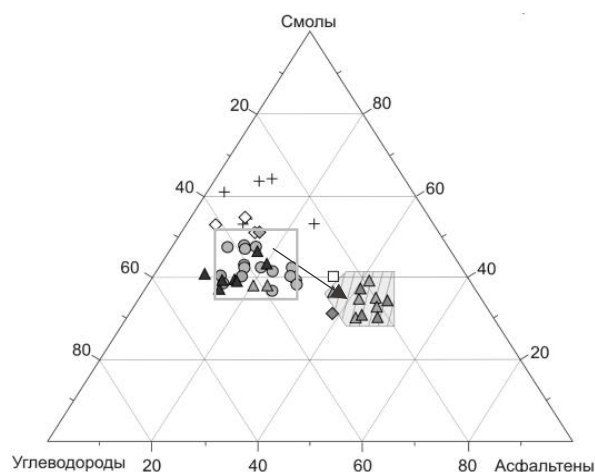


Рис. 5. Визуализация процесса увеличения концентрации асфальтенов в битумоидах с помощью тригонограммы, по данным работы ²

1.3. Задания для самостоятельной работы:

1. Ароматический концентрат представляет собой смесь, состоящую из 120 кг бензола, 75 кг толуола и 25 кг этилбензола. Найти массовый и мольный состав смеси.
2. Дана смесь двух нефтяных фракций. Объем первой фракции $V_1=36$ м³, ее плотность $\rho_1=802$ кг/м³, соответственно для второй фракции $V_2=76,5$ м³, $\rho_2=863$ кг/м³. Найти массовую долю каждой фракции.
3. Природный газ Северного месторождения состоит из следующих компонентов (в объемных процентах): CH_4 – 96,8; C_2H_6 – 0,9; C_3H_8 – 0,4; C_4H_{10} – 0,3; N_2 – 1,0; O_2 – 0,6. Найти массовый состав газа.

² Родченко А.П. Органическая геохимия, нефтегазогенерационный потенциал верхней юры северо-востока Западно-Сибирского осадочного бассейна: дис. канд. геолого-мин. наук / А.П. Родченко. - Новосибирск, 2018. - 284 с.

4. При каталитическом крекинге масляной фракции получены продукты:

	Массовое содержание, %	Молярная масса, кг/кмоль
Газ	11,2	32
Бензин	32,7	105
Легкий газойль	36,9	218
Тяжелый газойль	19,2	370

Определить молярные доли компонентов.

5. По данным таблиц составить треугольные диаграммы:

а) по составу УВ (парафины, нафтены и арены)

Вариант	Вещество	Углеводородный состав, % масс.		
		Парафины	Нафтены	Арены
1	Метан	100	0	0
2	Бензин	35	20	45
3	Бензин	40	25	35
4	Керосин	70	20	10
5	Нефть	54	26	20

б) по содержанию высокомолекулярных компонентов (асфальтенов, смол и твердых парафинов)

Вариант	Групповой состав, % масс.				
	газ+бензин	масла		смолы	асфальтены
		депарафинизированные	твердые парафины		
1	4,9	81,5	1,4	10,0	2,2
2	29,8	58	3,6	7,0	1,6
3	25,3	67,8	6,2	0,7	0
4	9,7	76,1	4,5	8,1	1,6
5	20,5	66,6	4,8	5,5	2,6

в) по содержанию светлых фракций.

Вариант	Плотность, г/см ³	Температура начала кипения, °С	Выход фракций W, кипящих до ... °С			
			100	200	300	>300
1	0,871	137	0	12	47	53
2	0,888	81	2	16	37	63
3	0,835	75	2	23	47	53
4	0,735	35	25	60	95	5
5	0,749	44	21	65	84	16

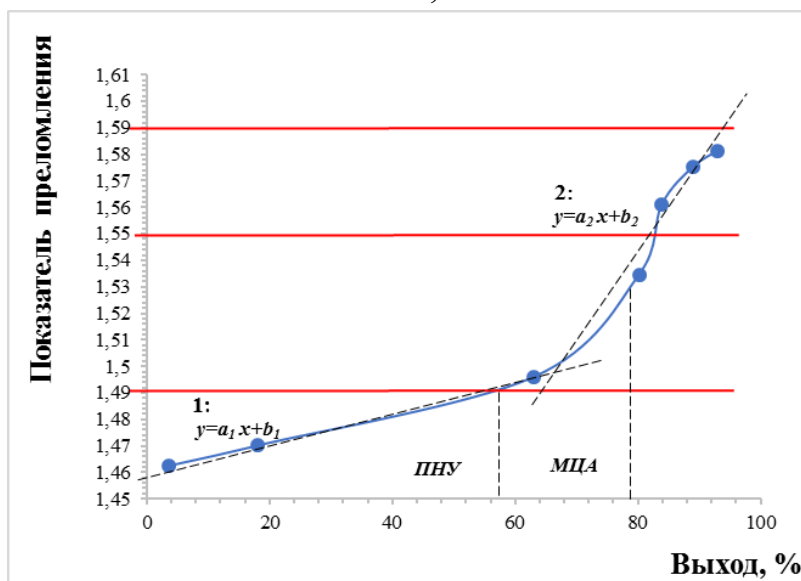
6. В таблице приведены результаты хроматографического разделения углеводородов, выделенных из ОВ.

	$m_{\text{продукта, Г}}$	n_D	$\omega_{\text{продукта, \% масс.}}$	Выход продукта, %
1	3,67	1,4626		
2	14,35	1,4702		
3	45,08	1,4961		
4	17,1	1,5345		
5	3,74	1,561		
6	5,06	1,5751		

Требуется:

а) Рассчитать массовые доли веществ. Пересчитать на выход продукта по формуле: $W_i = \varphi_{i-1} + \varphi_i$

б) Построить график зависимости показателя преломления от выхода продукта. Определить четкие границы содержания парафино-нафтеновых и моноароматических углеводородов графо-аналитическим способом по уравнениям прямых 1 и 2, подставив в уравнение значения показателя преломления 1.4900 и 1.5300, соответственно:



Массовая доля, %	
ПНУ	
МЦА	
БЦА	
ПЦА	

РАЗДЕЛ 2. НОМЕНКЛАТУРА И ИЗОМЕРИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В СОСТАВЕ НЕФТИ И ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА ПОРОД

Как было отмечено в предыдущем разделе, нефтяные флюиды содержат в своем составе огромное количество индивидуальных углеводородных и гетероатомных соединений различного состава и строения. В течение геологического времени эти соединения в зависимости от условий формирования залежи могут преобразовываться. Степень преобразования будет зависеть в первую очередь от их термодинамической устойчивости. По изменению содержания в составе нефти или органического вещества пород преобразованных и не преобразованных химических соединений можно определить источники ее образования, возраст, тип исходного органического вещества, фациальную обстановку в диагенезе, степень термической зрелости, степень биодеградации, миграции и др. При этом нужно понимать, о каких соединениях идет речь. В нефтегазопроисковой геохимии в качестве маркеров могут быть использованы не только легкие углеводороды метанового ряда (метан, этан, пропан и т.д.), но высокомолекулярные углеводороды сложного строения (изопренаны, сесквитерпаны, стераны, терпаны, фенантрены, адамантаноиды и т.д.) и даже некоторые гетероатомные молекулы.

Во втором разделе пособия изложены общепринятые правила, которых нужно придерживаться при построении названия органических соединений (принципы *номенклатуры* органических соединений), и рассмотрены вопросы *изомерии* и термодинамической устойчивости изомеров.

2.1. Номенклатура органических соединений

Правила, по которым образованы названия соединений в органической химии, называются *номенклатурой органических соединений*. Для того, чтобы различать все химические соединения, каждой химической структуре должно соответствовать единственное название, и наоборот, одному названию должна отвечать единственная структура – это и есть самый главный принцип номенклатуры – *однозначность*.

В первоначальный период развития органической химии соединениям давали тривиальные названия. *Тривиальная номенклатура* - система

исторически сложившихся названий, широко применяемых до настоящего времени. Например, уксусная кислота, ацетон, и т. д. В геохимии тоже используются тривиальные названия, о них речь пойдет позже.

В настоящее время общепринятой является международная, или *систематическая номенклатура IUPAC* (IUPAC — International Union of Pure and Applied Chemistry). Номенклатура основана на теории строения органических веществ. Наиболее широко в правилах систематической номенклатуры IUPAC представлены *заместительная* и *рационально-функциональная* номенклатуры.

2.1.1. Заместительная номенклатура

Построение названия в заместительной номенклатуре строится на принципе замещения в структуре, служащей основой названия, атомов водорода различными заместителями. При этом название состоит из следующих блоков (рис. 6):



Рис. 6. Схема построения названия органического соединения по заместительной номенклатуре

Ключевым моментом в составлении названия является выбор основной цепи.

Алгоритм выбора основной цепи (правило с меньшим номером имеет приоритет над правилом с большим номером):

1. В основную цепь должна входить старшая характеристическая группа.
2. В нее должны максимально быть включены кратные связи.
3. Основная цепь должна быть максимально длинной.
4. Выбирают самую разветвленную цепь.

После выбора основной цепи переходят к составлению названия соединения.

Алгоритм составления названий.

1. Основную цепь нумеруют так, чтобы углеводородные заместители (боковые цепи) получили наименьшие номера.
2. Перечисляют заместители с их номерами в алфавитном порядке.
3. Если в молекуле несколько одинаковых боковых цепей, то используют приставку, обозначающую их число (ди-, три-, тетра-, пента-, гекса- и т.д.). Числа в названиях отделяют дефисами, между числами ставятся запятые.
4. Корнем составляемого названия берут углеводород, соответствующий главной цепи.
5. Соединение причисляют к классу, которому соответствует функциональная группа (*старшая группа*), присутствующая в его молекуле. Она определяет суффикс названия.

2.1.2. Рациональная номенклатура

По правилам рациональной номенклатуры за основу названия органического соединения принимают название наиболее простого (чаще первого) члена данного гомологического ряда. Все остальные соединения рассматривают как его производные, образованные замещением в нём атомов водорода углеводородными радикалами или функциональными группами.

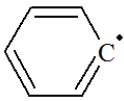
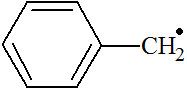
Алгоритм составления названий радикалов.

1. Название углеводородного радикала образуется от корня названия углеводорода путём прибавления к нему суффикса «-ил». Суффиксы «-ен» и «-ин» сохраняются. В более сложных углеводородных радикалах, например, полициклических, суффикс «-ан» сохраняется (табл. 1).
2. Перед суффиксом «-ил» указывается порядковый номер того атома углерода от начала цепи углеродных атомов радикала, у которого есть свободная валентность — кроме случая, если свободной валентностью обладает первый атом в цепи (табл. 2).
3. Нумерация цепи идёт от конца, ближайшего к свободной валентности. В случае, если в углеродной цепи с одной стороны атома со свободной(-ыми) валентностью(-ями) все атомы водорода замещены, то атом со свободными валентностями считается первым в цепи.

Таблица 1. Наименования числовых приставок, корней и суффиксов, используемых в номенклатуре ИЮПАК

Количество атомов углерода в цепи	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Корень	мет-	эт-	проп-	бут-	пент-	гекс-	гепт-	окт-	нон-	дек-
Степень насыщенности	одинарная связь (C—C)			двойная связь (C=C)			тройная связь (C≡C)			
Суффикс	-ан			-ен			-ин			

Таблица 2. Название основных радикалов

Формула (структура) радикала	Название радикала
CH_3^\bullet	метил
$\text{CH}_3\text{-CH}_2^\bullet$	этил
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2^\bullet$	пропил
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}^\bullet \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	изопропил
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2^\bullet$	<i>n</i> -бутил
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{HC}-\text{CH}_2^\bullet \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	изобутил
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}^\bullet-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	вторичный бутил, вторбутил
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}^\bullet \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	третичный бутил, третбутил
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2^\bullet$	<i>n</i> -пентил
$\text{CH}_2=\text{CH}^\bullet$	винил
	фенил
	бензил

2.1.3. Названия классов органических соединений

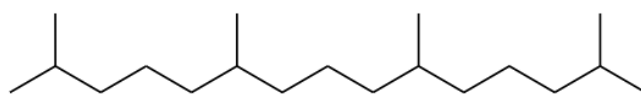
Рассмотрим, как образуются названия наиболее часто используемых в геохимии нефти классов органических соединений.

Алканы (парафиновые углеводороды) – это ациклические насыщенные углеводороды линейного (нормальные алканы) или разветвленного (изоалканы) строения с общей формулой C_nH_{2n+2} . Для первых четырех алканов используют тривиальные названия, для последующих гомологов – названия образованы от греческих числительных (табл. 3).

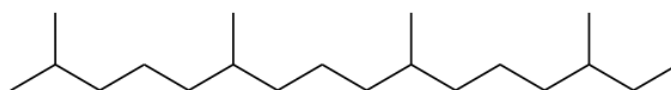
Таблица 3. Формулы и названия нормальных алканов

CH_4	метан	$C_{11}H_{24}$	ундекан	$C_{30}H_{62}$	триаконтан
C_2H_6	этан	$C_{12}H_{26}$	додекан	$C_{40}H_{82}$	тетраконтан
C_3H_8	пропан	$C_{13}H_{28}$	тридекан	$C_{50}H_{102}$	пентаконтан
C_4H_{10}	бутан	$C_{14}H_{30}$	тетрадекан	$C_{60}H_{122}$	гексаконтан
C_5H_{12}	пентан	$C_{15}H_{32}$	пентадекан	$C_{70}H_{142}$	гептаконтан
C_6H_{14}	гексан	$C_{16}H_{34}$	гексадекан	$C_{80}H_{162}$	октаконтан
C_7H_{16}	гептан	$C_{17}H_{36}$	гептадекан	$C_{90}H_{182}$	нонаконтан
C_8H_{18}	октан	$C_{18}H_{38}$	октадекан	$C_{100}H_{202}$	гектан
C_9H_{20}	нонан	$C_{19}H_{40}$	нонадекан		
$C_{10}H_{22}$	декан	$C_{20}H_{42}$	эйкозан		

Изопреноидные углеводороды (изопренаны) – это алифатические углеводороды, обладающие полиизопреновым скелетом, с характерным чередованием метильных заместителей в цепи через три метиленовые группы, которые можно рассматривать как продукты полимеризации изопрена. Например,



пристан, 2,6,10,14-тетраметилпентадекан




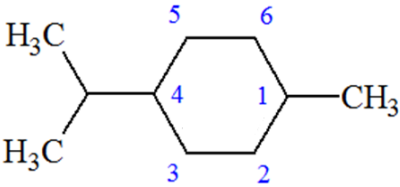
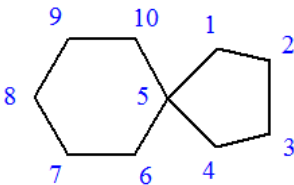
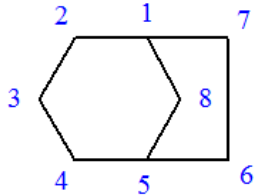
фитан, 2,6,10,14-тетраметилгексадекан

Алкены (этиленовые углеводороды) — ациклические непредельные углеводороды, содержащие одну двойную связь между атомами углерода, образующие гомологический ряд с общей формулой C_nH_{2n} . Согласно

таблице 4 названия алкенов образуют заменой окончания соответствующего алкана с *-ан* на *-ен*.

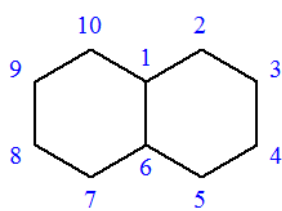
Циклоалканы (нафтены) – это циклические насыщенные углеводороды с общей формулой C_nH_{2n} . Названия циклоалканов состоит из названия алкана с соответствующим числом атомов углерода и приставки *цикло-*. Атомы в цикле нумеруют таким образом, чтобы заместители получили наименьшие номера. При составлении названий циклоалканов нужно придерживаться правил, приведенных в таблице 4.

Таблица 4. Правила номенклатуры циклоалканов

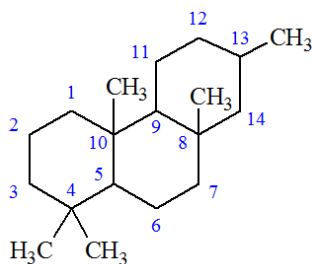
Структура	Название
<p>Моноциклические</p> 	<p>Цикло + алкан (при нумерации наименьший номер получает младший заместитель)</p> <p>циклопентан</p>
<p>Алкилзамещенные</p> 	<p>Алкил+циклоалкан</p> <p>1-метил-4-изопропилциклогексан</p>
<p>Спираны</p> 	<p>Спиро + [число атомов углерода в каждом из циклов, исключая общий, в порядке возрастания] + алкан</p> <p>(нумерацию атомов С начинают с меньшего цикла, с атома С, расположенного рядом с общим)</p> <p>спиро[4,5]декан</p>
<p>Бициклические</p> 	<p>Бицикло + [число атомов углерода в каждом из трех цепей, соединенных с общим атомом С, в порядке убывания] + алкан</p> <p>(сначала нумеруют самую длинную цепь)</p> <p>бицикло[3,2,1]октан</p>

По рациональной номенклатуре циклоалканы рассматриваются как замкнутые цепочки, состоящие из метиленовых групп CH_2 (триметилен, тетраметилен, пентаметилен, гексаметилен и т.д.).

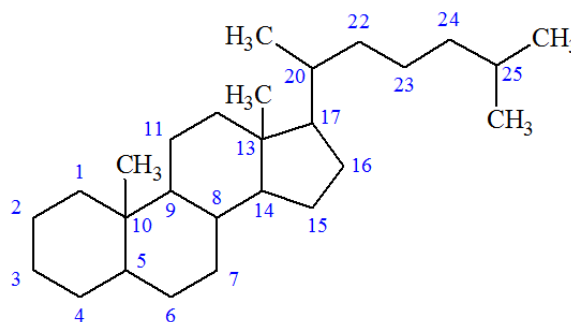
Для полициклических циклоалканов, особенно часто встречающихся соединений этого класса, используют тривиальные названия. Примеры некоторых полициклических нафтенов и их тривиальные названия приведены ниже.



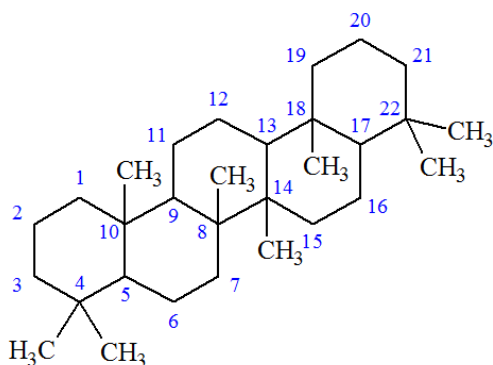
декалин



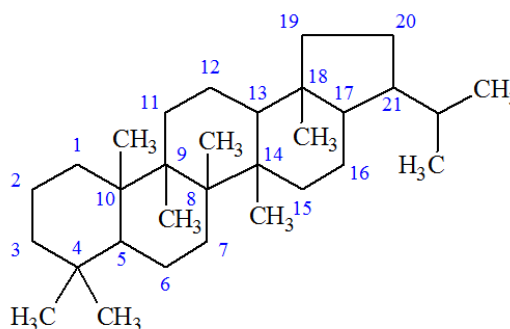
хейлантан



холестан



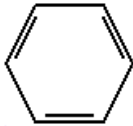
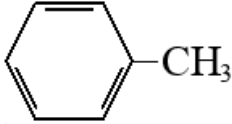
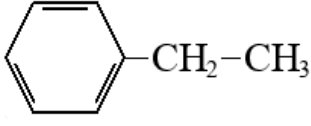
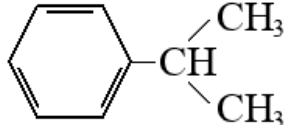
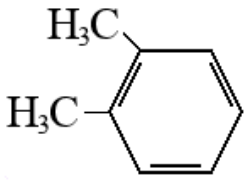
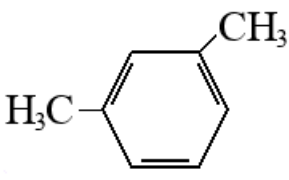
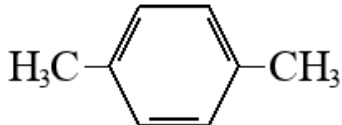
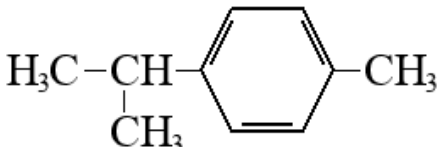
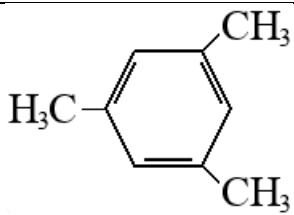
гаммацеран



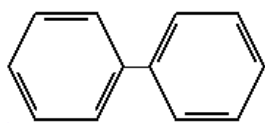
гопан

Арены (ароматические углеводороды) – это непредельные углеводороды, молекулы которых содержат устойчивые циклические группы атомов (бензольные ядра) с замкнутой системой сопряженных связей. Общая формула $\text{C}_n\text{H}_{2n-6}$. Многие арены имеют тривиальные названия (бензол, толуол, ксилол, кумол и т.д.). Согласно номенклатуре ИЮПАК, арены с одним бензольным кольцом рассматривают как производные первого представителя ряда аренов - бензола. В качестве главной цепи выбирают бензольное кольцо. Нумеруют главную цепь так, чтобы сумма номеров заместителей была минимальна (табл. 5).

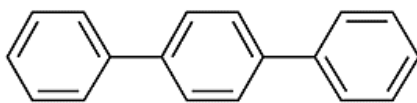
Таблица 5. Примеры ароматических соединений и правила их номенклатуры

Структура и тривиальное название	Название по ИЮПАК
 бензол	бензол
 толуол  этилбензол  кумол	<u>алкил + бензол</u> метилбензол этилбензол изопропилбензол
 <i>орто</i> -ксилол  <i>мета</i> -ксилол  <i>пара</i> -ксилол  цимол	<u>диалкил+бензол</u> 1,2-диметилбензол 1,3-диметилбензол 1,4-диметилбензол 1-Метил-4-изопропилбензол
 мезитилен	<u>триалкил+бензол</u> 1,3,5-Триметилбензол

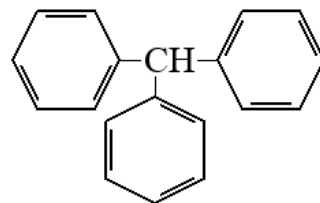
Ниже приведены тривиальные названия некоторых полиароматических аренов. Из приведенных в практике геохимических исследований более часто встречаются производные нафталина и фенантрена.



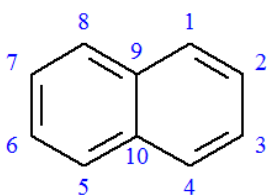
дифенил



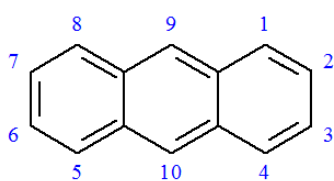
п-терфенил



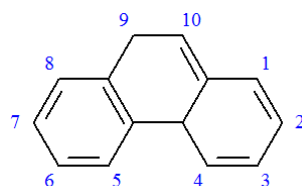
трифенилметан



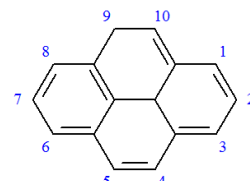
нафталин



антроцен



фенантрен



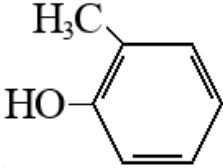
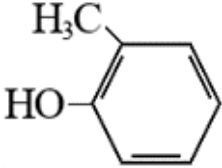
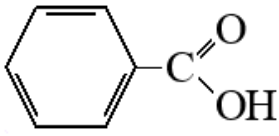
пирен

Гетероатомные компоненты нефти – это кислород- (кислоты, фенолы, кетоны и эфиры), сера- (меркаптаны и сульфиды) и азотсодержащие (гомологи пиридина, производные пиррола и амиды) соединения (табл. 6). Подавляющая часть гетероэлементов присутствует в смолах и асфальтенах.

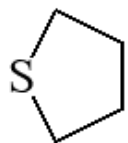
Названия ароматических гетероциклов, как правило, тривиальные (табл. 6), и они приняты номенклатурой ИЮПАК. В многофункциональных соединениях старшая группа обозначается в виде суффикса, а младшая – в виде приставки. В моноциклических соединениях нумерация атомов всегда начинается от гетероатома. В гетероциклах с несколькими одинаковыми гетероатомами эти атомы получают наименьшие номера. Если имеются два атома азота с различным электронным строением ($-N=$ и $-NH-$), то нумерацию ведут от фрагмента $-NH-$, как показано на примерах пиррола и имидазола. В гетероциклах с разными гетероатомами старшинство атомов уменьшается в ряду: $O \rightarrow S \rightarrow N$ (табл. 7).

В конденсированных гетероциклах нумерацию ведут от одной из вершин циклической структуры так, чтобы гетероатом получил наименьший номер. Производные гетероциклов называют по общим правилам заместительной номенклатуры, где в качестве названий родоначальных структур приняты тривиальные названия гетероциклов.

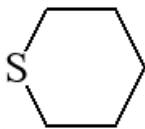
Таблица 6. Правила номенклатуры гетероатомных соединений нефти

Класс соединений	Заместительная номенклатура	Рациональная номенклатура
Меркаптаны	<u>алкан + тиол</u> C ₄ H ₉ SH – бутантиол	<u>алкил + меркаптан</u> C ₄ H ₉ SH – бутилмеркаптан
Сульфиды	<u>тиа + алкан (S включается в цепь атомов)</u> C ₄ H ₉ SC ₂ H ₅ – 3-тиагептан	<u>алкилалкил + сульфид</u> C ₄ H ₉ SC ₂ H ₅ – бутилэтил-сульфид
Дисульфиды	<u>дитиа + алкан (S включается в цепь атомов)</u> CH ₃ SSCH ₃ – 2,3-дитиабутан	<u>алкилалкил + дисульфид</u> CH ₃ SSCH ₃ – диметилди-сульфид
Амины	<u>амино + алкан</u> CH ₃ NH ₂ – аминометан (CH ₃ CH ₂) ₂ NH – N-этиламиноэтан	<u>алкил + амин</u> CH ₃ NH ₂ – метиламин (CH ₃ CH ₂) ₂ NH – диэти- ламин
Фенолы	<u>гидрокси + бензол</u>  1-гидрокси-2-метилбензол	<u>алкил + фенол</u>  2-метилфенол
Простые эфиры	<u>алк + окси+ алкан</u> C ₄ H ₉ OC ₂ H ₅ – 1-этоксипутан	<u>алкилалкил + овый эфир</u> C ₄ H ₉ OC ₂ H ₅ – бутилэтило- вый эфир
Кетоны	<u>алкан + он</u> CH ₃ CH ₂ (CO)CH ₂ CH ₃ – пен- танон-3	<u>алкилалкил + кетон</u> CH ₃ CH ₂ (CO)CH ₂ CH ₃ – ди- этилкетон
Карбоновые кислоты	<u>алкан + овая кислота</u> CH ₃ -COOH - этановая кислота (уксусная кислота) <u>ароматический УВ + карбоновая кислота</u>  бензолкарбоновая кислота (бензойная кислота)	

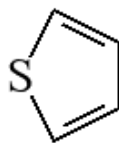
Примеры некоторых гетероатомных соединений и их тривиальные названия:



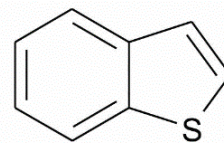
тетрагидро-
тиофен



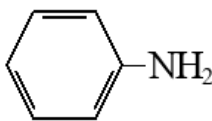
тетрагидротио-
пиран



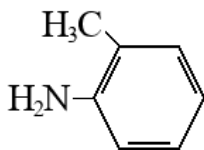
тиофен
тиофуран



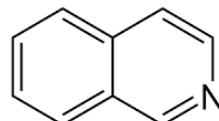
бензтиофен



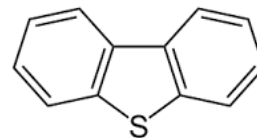
анилин



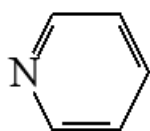
орто-толуидин



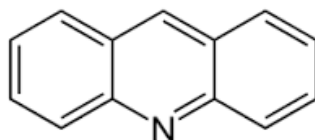
ИЗОХИНОЛИН



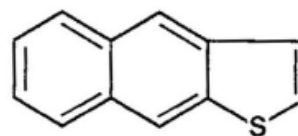
дибентиофен



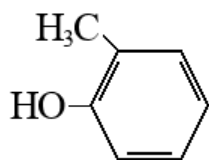
пиридин



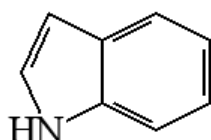
акридин



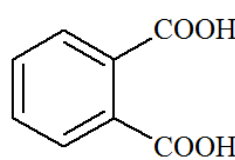
нафтотиофен



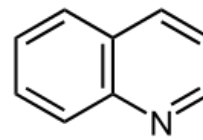
орто-крезол



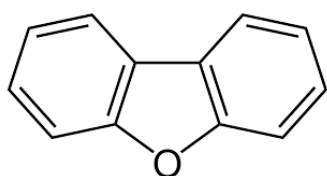
индол



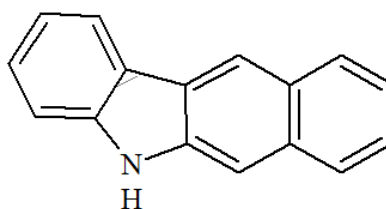
фталевая кислота



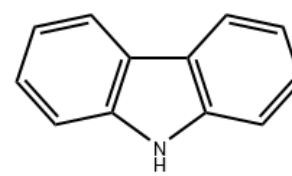
хинолин



дибензофуран



бензкарбазол



карбазол

Таблица 7. Порядок перечисления функциональных групп, приставок и окончаний, применяемых в названии многофункциональных соединений.

Тип соединения	Формула	Приставка	Суффикс
Карбоновые кислоты	-COOH -(C)OON	Карбокси- -	-карбоновая кислота -овая кислота
Сульфокислоты	-SO₃H	Сульфо-	-сульфоновая кислота -сульфокислота
Соли	-COOMe -(C)OOMe	- -	-карбоксилат металла -оат металла
Сложные эфиры	-COOR	-	-R-оат
Галогенангидриды	-COHal	Галогеноформил-	-карбонилгалогенид галогенид -овой кислоты
Амиды	-CONH₂ -(C)ONH₂	Карбамоил- -	-карбоксамид -амид
Нитрилы	-C≡N -(C)≡N	Циано- -	-карбонитрил -нитрил
Альдегиды	-CHO -(C)HO	Формил- Оксо-	-карбальдегид -аль
Кетоны	-(C)=O	Оксо-	-он
Спирты, фенолы	-OH	Гидрокси-	-ол
Тиолы (меркаптаны)	-SH	Меркапто-	-тиол
Простые эфиры	-OR	R-окси-	-
Сульфиды (тиоэфиры)	-SR	R-тио-	-
Гидропероксиды	-O-OH	Гидроперокси-	гидропероксид
Амины	-NH₂	Амино-	-амин
Имины	=NH	Имино-	-имин
!!Атомы углерода, заключенные в скобки, включены в название основы соединения!!			

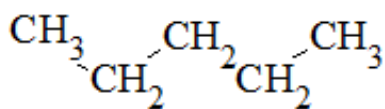
2.2. Изомерия органических соединений

Изомеры – это вещества, которые имеют одинаковую молекулярную формулу, но различное химическое строение (различные структурные формулы), а, следовательно, обладают различными свойствами.

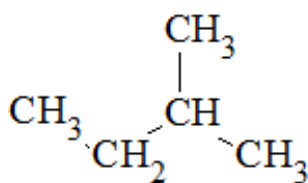
2.2.1. Структурная изомерия

Структурные изомеры – изомеры, отвечающие различным структурным формулам органических соединений (с разным порядком соединения атомов в молекуле). Различают следующие виды структурной изомерии:

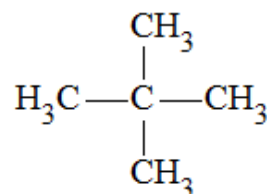
- *Изомерия углеродного скелета* зависит от порядка соединения между собой атомов углерода в цепи.



н-пентан



2-метилбутан



2,2-диметилпропан

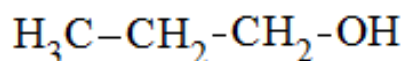
- *Изомерия положения* определяется разным положением кратных связей или функциональных групп.



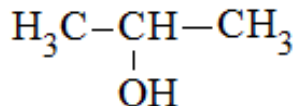
пентадиен-1,4



пентадиен-1,3



пропанол-1

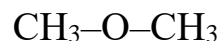


пропанол-2

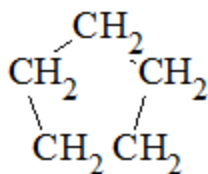
- *Межклассовая изомерия* – изомеры относятся к разным классам.



этиловый спирт



диметиловый эфир



циклопентан

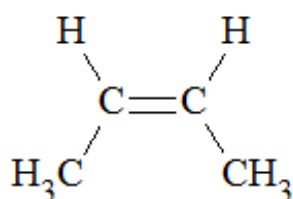


пентен-1

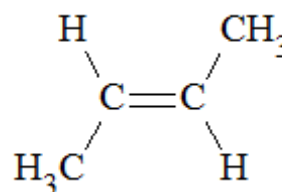
2.2.2. Пространственная изомерия

Пространственными изомерами (*стереоизомерами*) называют соединения, имеющие одинаковый состав и одинаковый порядок соединения атомов в молекуле, но отличающиеся расположением атомов в пространстве.

- *Геометрическая изомерия.* Характерна для соединений, содержащих двойную связь или цикл. В таких молекулах часто возможно провести условную плоскость таким образом, что заместители у различных атомов углерода могут оказаться по одну сторону (*цис-*) или по разные стороны (*транс-*) от этой плоскости.



цис-бутен-2



транс-бутен-2

- *Оптическая изомерия* возникает тогда, когда предмет – органическая молекула – несовместим со своим изображением в зеркале (рис. 7). Такое свойство обозначается термином *хиральность*, а пространственные изомеры называются зеркальными, оптическими антиподами, или энантиомерами. В роли хирального центра в органических молекулах выступает асимметрический атом углерода, соединённый с четырьмя разными группами (заместителями), находящийся в конфигурации тетраэдра.

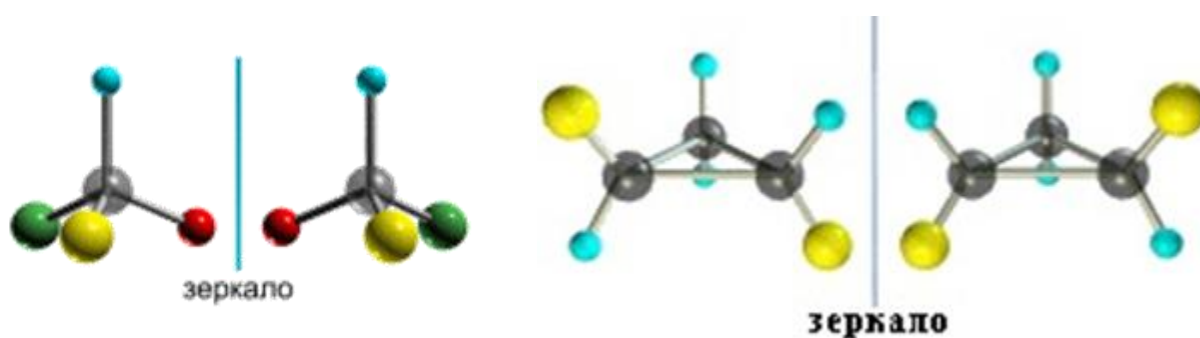


Рис. 7. Схематическое изображение оптических изомеров

2.2.3. Способы определения конфигурации хирального центра

Оптические изомеры могут иметь один или несколько хиральных центров (*асимметричных* или *стереоцентров*), у каждого из которых разная конфигурация. Для обозначения конфигурации хиральных центров

используют *R* -, *S*-номенклатуру. Для описания конфигурации соединения в соответствии с *R,S*-номенклатурой поступают следующим образом:

1. Определяют все заместители у асимметричного (хирального) атома углерода.
2. Определяют старшинство заместителей, согласно правилу Кана-Ингольда-Прелога – т.е. сравнивают атомные массы атомов у заместителей.
3. Ориентируют в пространстве заместители так, чтобы младший заместитель (обычно водород) находился в наиболее отдаленном от наблюдателя углу.
4. Определяют конфигурацию по расположению остальных заместителей. Если движение от старшего к среднему и далее к младшему заместителю (т.е. в порядке уменьшения старшинства) осуществляется по часовой стрелке, то это *R* конфигурация, против часовой стрелки — *S*-конфигурация (рис. 8).

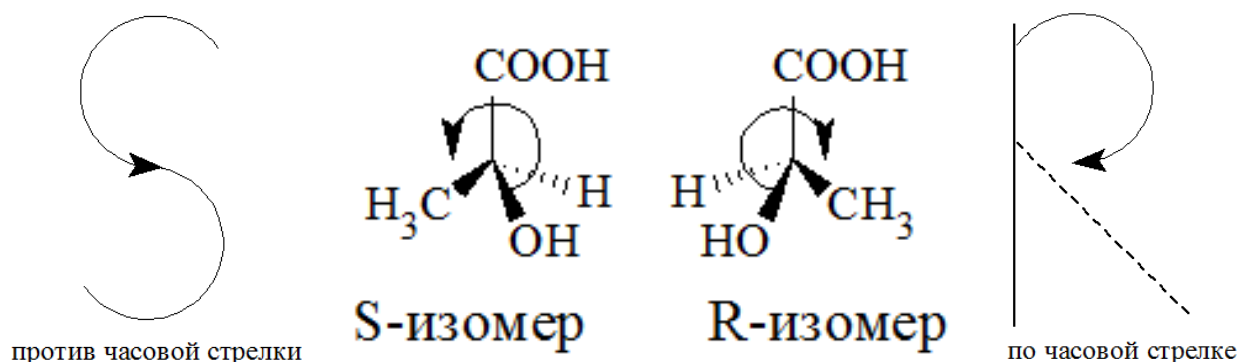


Рис. 8. Определение *R,S*- конфигурации

В некоторых случаях для определения конфигурации хирального атома удобнее воспользоваться проекционными формулами Фишера. При построении проекций Фишера поступают следующим образом:

1. Тетраэдрическую модель одного из изомеров располагают в пространстве, как показано на рисунке 9.
2. Модель проецируют на плоскость. Символ асимметрического атома при этом опускается, под ним понимают точку пересечения вертикальной и горизонтальной линий (рис. 9).

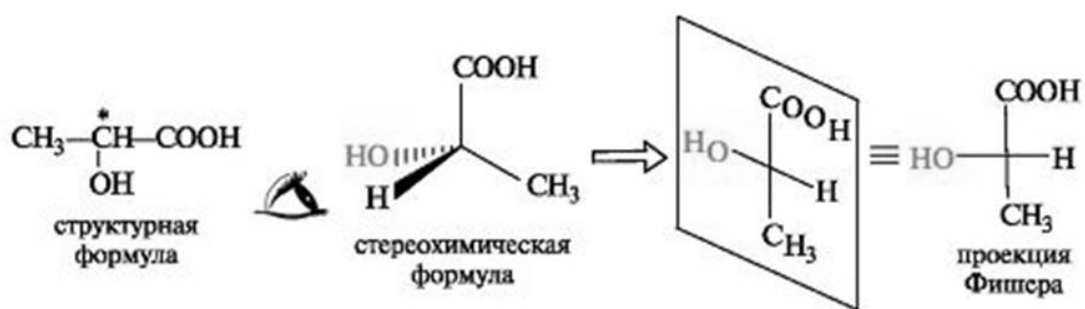


Рис. 9. Схема построения проекционных формул Фишера

При пользовании проекциями Фишера важно помнить, что вертикальная линия в них изображает связи, удаляющиеся от нас, а горизонтальная линия - связи, направленные к нам. Отсюда вытекают правила пользования проекциями Фишера:

- 1) *Нельзя* выводить проекцию из плоскости чертежа (например, просматривать ее "на просвет", то есть с другой стороны листа).
- 2) *Нельзя* поворачивать проекцию в плоскости чертежа на 90° и 270° .
- 3) *Нельзя* менять местами два любых заместителя при асимметрическом атоме.
- 4) *Можно* поворачивать проекцию в плоскости чертежа на 180° . При таком повороте вертикальные линии остаются вертикальными, а горизонтальные - горизонтальными.
- 5) *Можно* производить четное число парных перестановок заместителей при асимметрическом атоме.

Для обозначения конфигурации молекулы по **RS**-системе проекцию преобразуют так, чтобы младший заместитель разместился на одной из вертикальных связей, что соответствует его положению за плоскостью чертежа. Если после преобразования проекции старшинство остальных трех заместителей убывает по часовой стрелке, то асимметрический атом имеет R-конфигурацию, и наоборот (рис. 10).

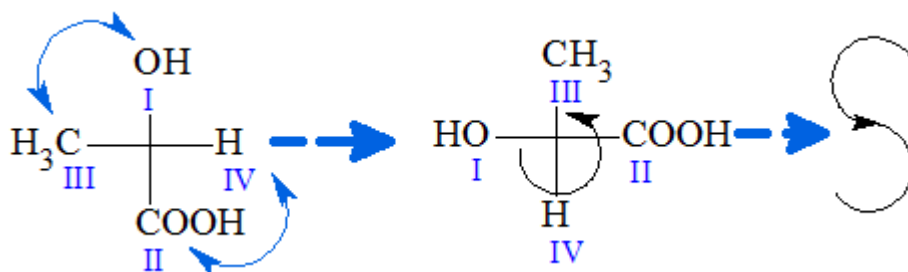
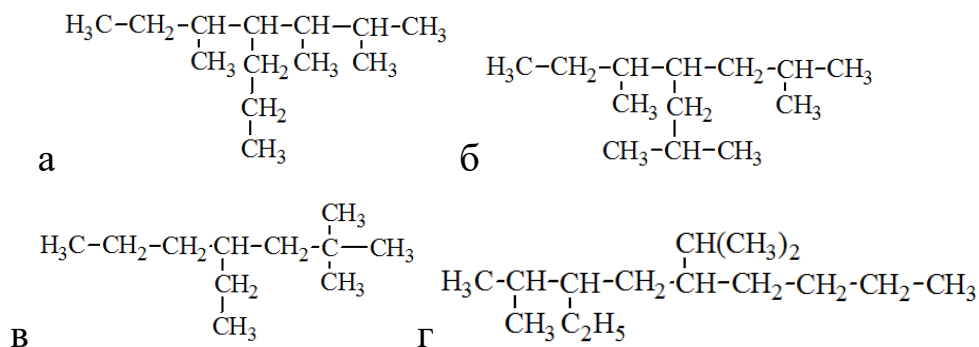


Рис. 10. Схема определения R,S- конфигурации по проекционным формулам Фишера

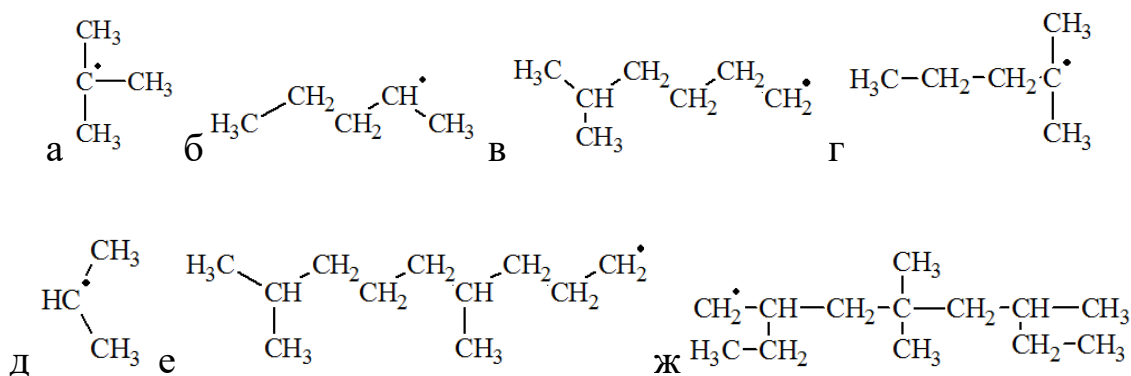
2.3 Задания для самостоятельной работы:

1. Назовите по номенклатуре IUPAC следующие углеводороды:

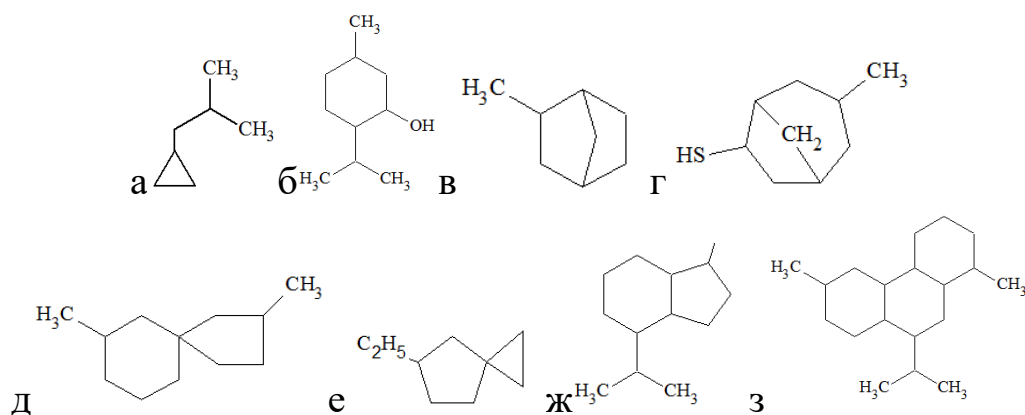


2. Укажите, правильно ли названы следующие соединения: 2-этилгептан; 2,2,4-триметилпентан; 2,5,6,6-тетраметил-5-этилоктан; 2-этилгексан; 2,2,5-триметилгептан; 3-этилгептан; 2-метил-3-изопропилпентан; 1-метил-3-этилнонан. Если нет, дайте правильные названия.

3. Дайте названия приведенным ниже радикалам по номенклатуре IUPAC:

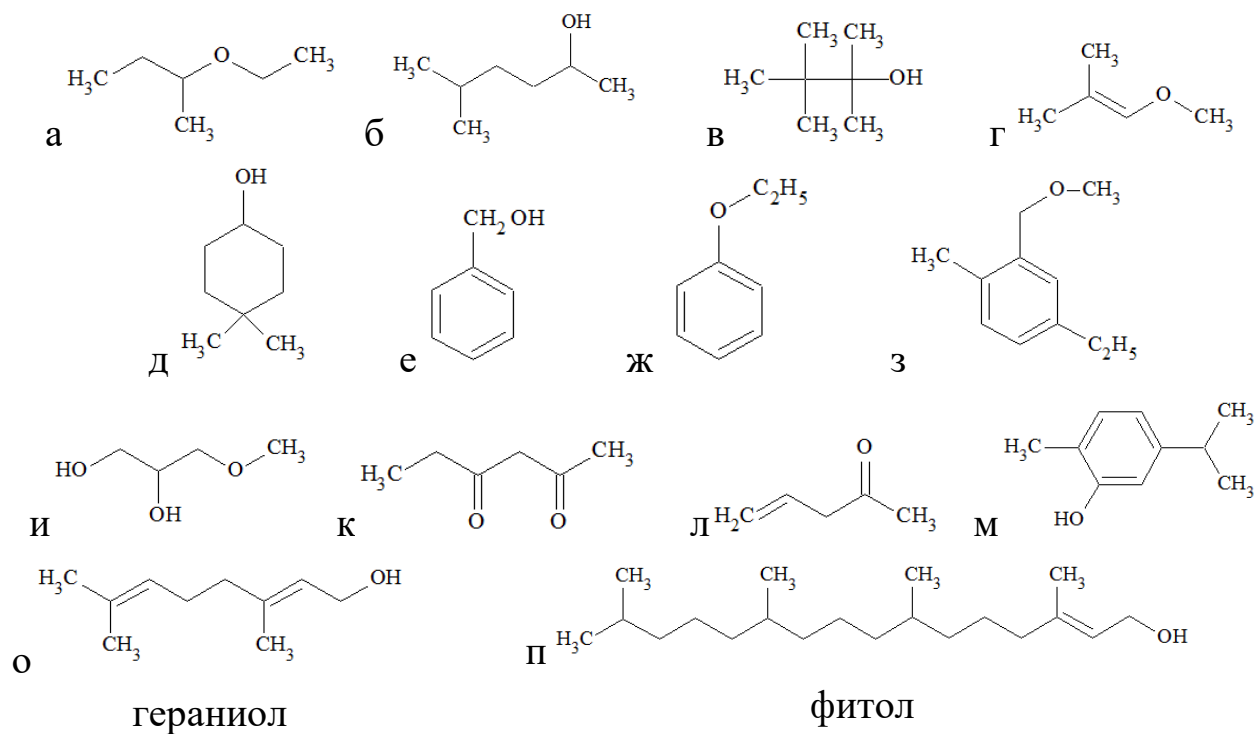


4. Назовите следующие соединения.

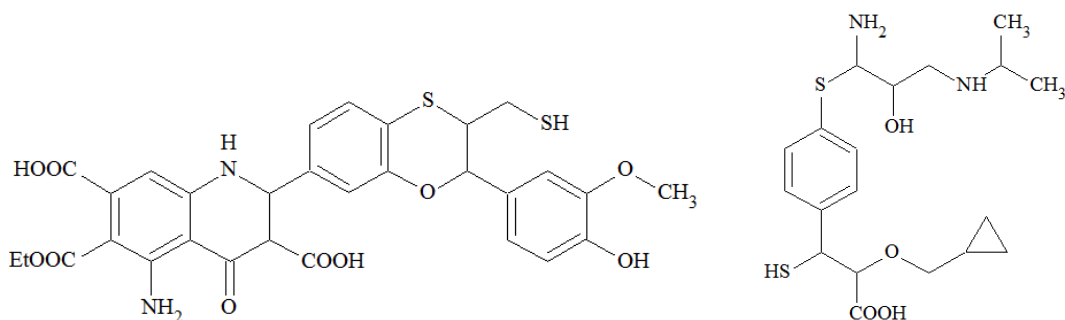


5. Нарисуйте структурные формулы соединений: 2,6,6-триметилбицикло-[3.1.1]-гептан, 3,7,7-триметилбицикло-[4.1.0]-гептан, 1-циклопропилциклопентан.

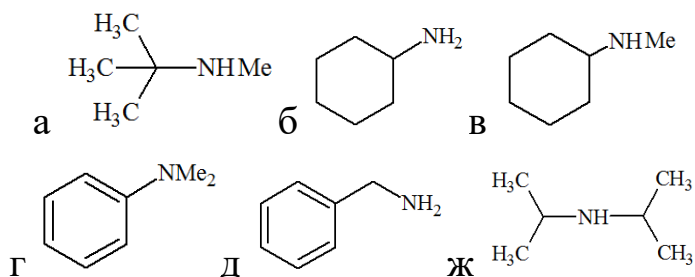
6. Назовите соединения:



7. Укажите функциональные группы.

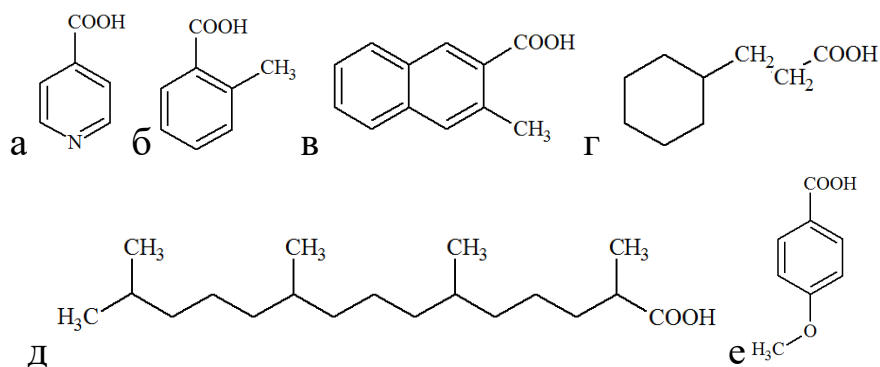


8. Из приведенных ниже соединений выберите первичные, вторичные и третичные амины. Назовите их.

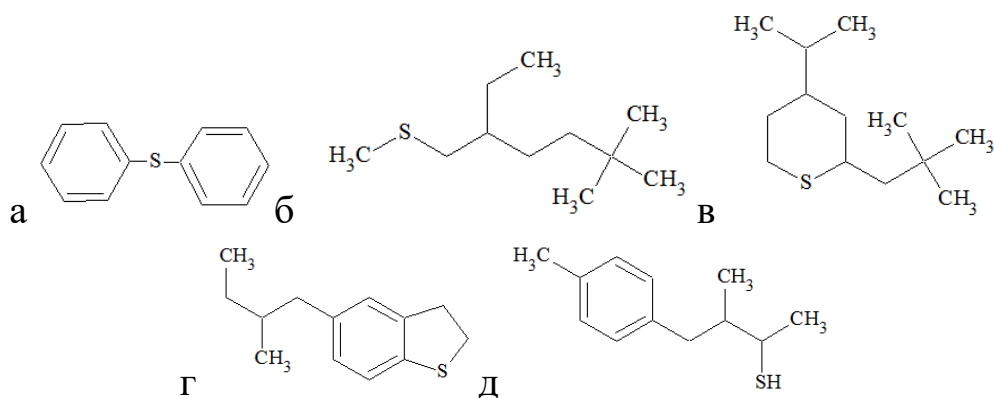


9. Напишите структурные формулы соединений: этилметилкетон; 2,4-диметилфенол; метилфенилсульфид; м-крезол; акридин; бензокарбазол; изо-пропилмеркаптан; этантиол.

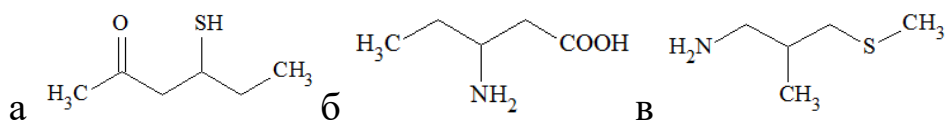
10. Назовите соединения:



11. Назовите соединения:



12. В каждом из соединений отметьте главную группу и назовите соединения по систематической номенклатуре.



13. Изобразите структурные формулы всех изомеров состава C_7H_{16} и назовите их по номенклатуре IUPAC.

14. Сколько можно изобразить структурных формул изомеров для углеводорода состава C_9H_{20} , содержащих не менее пяти метильных групп? Назовите их по номенклатуре IUPAC.

15. Сколько всего может существовать изомерных тетраметилгексанов? Назовите их по номенклатуре IUPAC.

16. Изобразите структурные формулы следующих соединений: 2-хлорбутан; 1,2-дихлорпропан; 3-бромпентен-1. Отметьте хиральные центры.

17. Изобразите структурные формулы самых простых хиральных соединений ряда: алканов, алкенов, спиртов, алифатических кетонов, карбоновых кислот, аминов.

18. Напишите структурные формулы всех циклических изомеров C_5H_{10} . Назовите их.

19. Изобразите структурные формулы всех изомеров спиртов состава $C_5H_{12}O$ и назовите их по рациональной и заместительной номенклатуре.

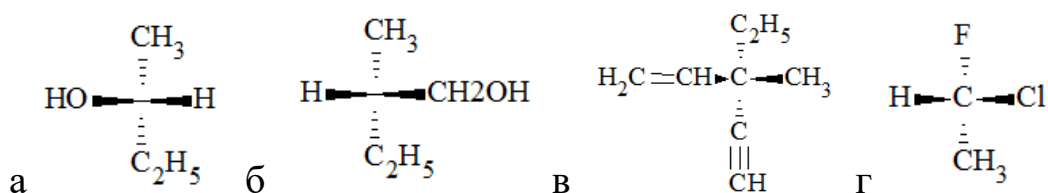
20. Сколько изомерных спиртов состава $C_6H_{14}O$ содержат асимметрический атом углерода?

21. Напишите графические формулы пяти изомерных аминов, содержащих бензольное ядро, состава C_7H_9N . Назовите их.

22. Какие из этих соединений могут существовать в виде энантиомеров: 1-хлорпентан, 2-хлорпентан, 3-хлорпентан, 2-метил-1-хлорпентан, 2-метил-2-хлорпентан, 2-метил-3-хлорпентан, 2-метил-4-хлорпентан, 2-бром-1-хлорбутан? Изобразите их структурные формулы.

23. Изобразите в виде перспективных формул и формул Фишера следующие соединения: (R)-2-хлорбутан, (S)-гексанол-3, (S)-1,2-дибромпропан, (R)-2,3-диметилпентан, (S)-2-бром-2-хлорбутан, (1R, 2R)-2-амино-1-фенилпропанол-1.

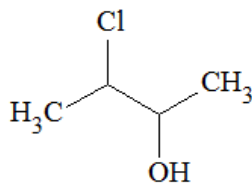
24. Определите абсолютную конфигурацию стереоцентров следующих соединений:



25. Изобразите проекционную формулу Фишера (S)-2-бутанола. Как изменится конфигурация стереоцентра изображенного соединения при:

- перемене мест двух групп относительно вертикальной линии связей;
- перемене мест двух групп относительно горизонтальной линии связей;
- последовательном действии а) и б);
- перемене мест «вертикального» и «горизонтального» заместителей;
- повороте в плоскости бумаги на 90° ;
- повороте на 180° в плоскости, перпендикулярной плоскости бумаги?

26. Изобразите проекционную формулу Фишера для R/S-конфигурации 2 и 3 атома углерода следующего соединения.



РАЗДЕЛ 3. ОБРАЗОВАНИЕ И ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ. ТЕОРИЯ ПРОИСХОЖДЕНИЯ НЕФТИ

Углеводороды – являются основой любой нефти. Их содержание в разных образцах может варьироваться от 30 до 100 %, но, все же все нефти мира содержат в среднем 70 % углеводородов, при этом качественный состав их не сильно отличается. Различно соотношение индивидуальных углеводородов, что делает каждый нефтяной объект уникальным по составу. Уникальность определяется разными условиями образования углеводородов нефтяной залежи, разным типом исходного для синтеза вещества и разными условиями их преобразования.

Возможность синтеза углеводородов определенного химического состава была доказана еще в XIX веке, и с тех пор успехи органической химии достигли огромных высот. Однако до настоящего времени не утихают споры о возможных путях образования углеводородов в природных условиях. Разобраться в этом сложном вопросе геохимикам, наряду с теоретическими знаниями о геологических условиях формирования месторождений углеводородов, помогают знания в области органического и неорганического синтеза. В третьем разделе описаны основные пути синтеза углеводородов и обозначены причины образования углеводородов определённого состава.

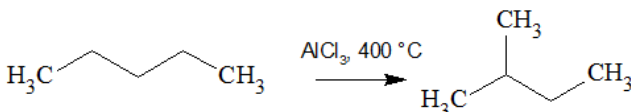
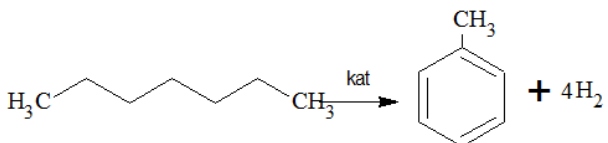
3.1 Получение и химические свойства углеводородов

Реакции, с помощью которых в результате органического синтеза можно получить углеводороды, условно делятся на следующие типы:


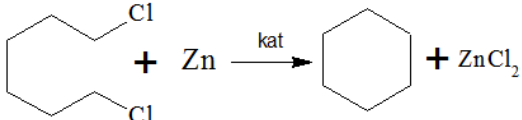
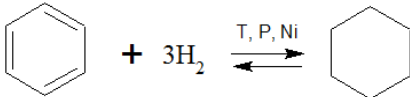
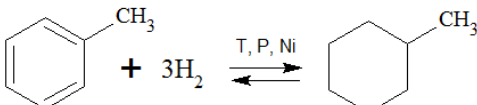
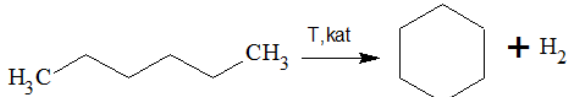
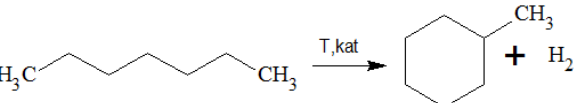
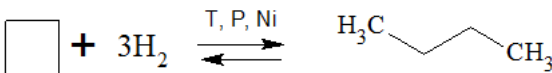
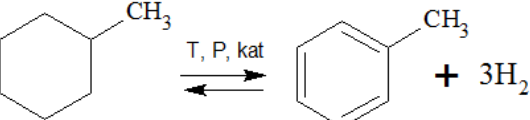
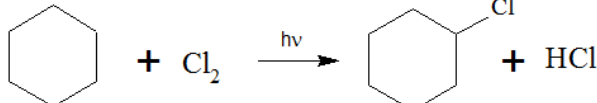
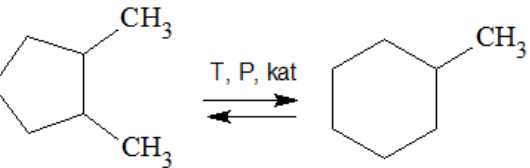
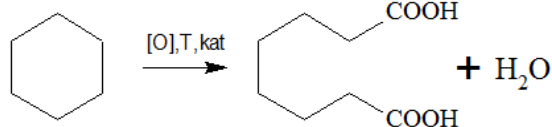
- Реакции *удлинения углеродной цепи* (алкилирование, полимеризация, конденсация, поликонденсация).
- Реакции *укорочения углеродной цепи* (реакции расщепления, крекинг).
- Реакции *удаления функциональных групп*.
- Реакции *образования кратных связей*.
- Реакции *циклизации и ароматизации*.

В таблице 8. представлены основные химические реакции, в результате которых могут быть получены углеводороды, а также по которым возможно их дальнейшее преобразование

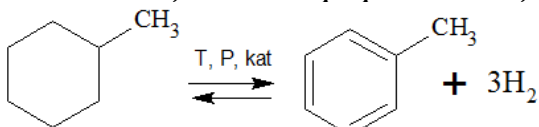
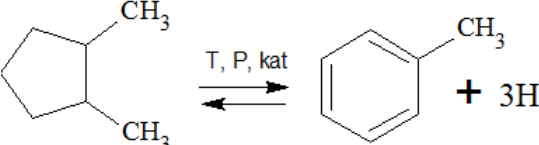
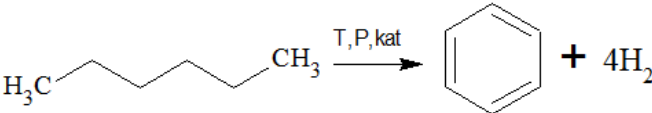
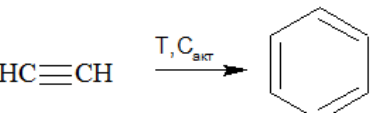
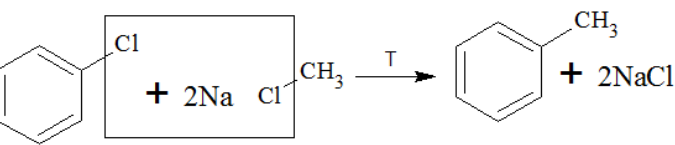
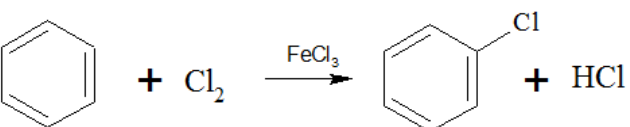
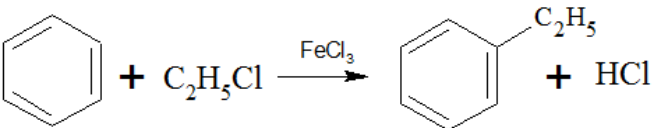
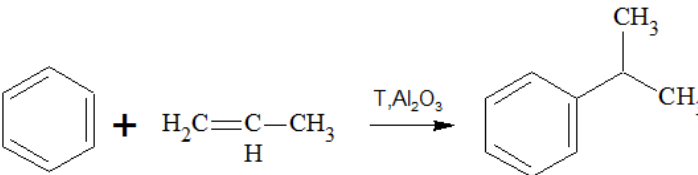
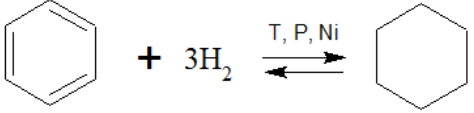
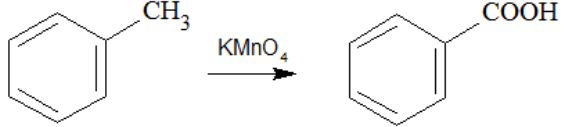
Таблица 8. Получение и химические свойства углеводородов

Получение	Химические свойства
Алканы	
<p>1. Крекинг нефти $\text{C}_8\text{H}_{18} \xrightarrow{T} \text{C}_4\text{H}_8 + \text{C}_4\text{H}_{10}$ $\text{C}_{12}\text{H}_{26} \xrightarrow{T} \text{C}_6\text{H}_{12} + \text{C}_6\text{H}_{14}$</p> <p>2. Гидрирование угля (торфа, сланца) $\text{C} + \text{H}_2 \xrightarrow{T,P} \text{CH}_4$</p> <p>3. Гидрированием оксида углерода II $\text{CO} + \text{H}_2 \xrightarrow{T,P,kat} \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$</p> <p>4. Синтез Дюма (декарбосилирование) $\text{R-COONa} + \text{NaOH} \xrightarrow{T} \text{R-H} + \text{Na}_2\text{CO}_3$</p> <p>5. Реакция Вюрца $2\text{R-Cl} + 2\text{Na} \rightarrow \text{R-R} + \text{NaCl}$</p> <p>6. Синтез Кольбе $\text{R-COOK} + \text{H}_2\text{O} \xrightarrow{\zeta} \text{R-R} + \text{CO}_2 + \text{KOH} + \text{H}_2$</p> <p>7. Разложение карбидов $\text{Al}_4\text{C}_3 + 12\text{H}_2\text{O} \rightarrow 3\text{CH}_4 + 4\text{Al(OH)}_3$</p> <p>8. Гидрированием ненасыщенных углеводородов $\text{CH}_3\text{-CH=CH}_2 + \text{H}_2 \xrightarrow{T,P,Ni} \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ $\text{CH}_2=\text{CH}_2 + \text{H}_2 \xrightarrow{T,P,Ni} \text{CH}_3\text{-CH}_3$</p>	<p>1. Реакции замещения. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 + \text{Br}_2 \xrightarrow{T,h\nu} \text{CH}_3\text{CHBrCH}_3 + \text{HBr}$</p> <p>2. Реакция дегидрирования. $\text{CH}_3\text{-CH}_3 \rightarrow \text{CH}_2=\text{CH}_2 + \text{H}_2\uparrow$</p> <p>3. Реакции горения $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$</p> <p>4. Термическое расщепление углеводородов $\text{C}_7\text{H}_{16} \xrightarrow{T} \text{C}_4\text{H}_{10} + \text{C}_3\text{H}_6$</p> <p>5. Пиролиз $\text{CH}_4 \xrightarrow{1000^\circ\text{C}} \text{C} + 2\text{H}_2\uparrow; 2\text{CH}_4 \xrightarrow{1500^\circ\text{C}} \text{CH}\equiv\text{CH} + 3\text{H}_2\uparrow$</p> <p>6. Изомеризация </p> <p>7. Ароматизация </p> <p>8. Взаимодействие с алкенами $(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{CH}_2 + \text{H-C(CH}_3)_3 \xrightarrow{\text{H}^+, 0-10^\circ\text{C}} (\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{C(CH}_3)_3$</p>

Продолжение таблицы 8.

Получение	Химические свойства
Циклоалканы	
<p>1. Реакция дегалогенирования: (реакция Вюрца)</p> $\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C}-\text{CH}_2-\text{Br} \\ \\ \text{H}_2\text{C}-\text{CH}_2-\text{Br} \end{array} + 2\text{Na} \longrightarrow \begin{array}{c} \text{H}_2\text{C}-\text{CH}_2 \\ \quad \\ \text{H}_2\text{C}-\text{CH}_2 \end{array} + 2\text{NaBr}$   <p>2. Гидрирование ароматических углеводородов:</p>   <p>3. Циклизация алканов:</p>  	<p>1. Малые циклы вступают в реакции гидрирования и присоединения с разрывом цикла</p>  <p>2. Реакция дегидрирования:</p>  <p>3. Реакция галогенирования:</p>  <p>4. Изомеризация цикла:</p>  <p>5. Окисление:</p>  <p>6. Горение:</p> $\text{C}_n\text{H}_{2n} + 3n/2\text{O}_2 \rightarrow n\text{CO}_2 + n\text{H}_2\text{O}$

Продолжение таблицы 8.

Получение	Химические свойства
Ароматические углеводороды	
<p>1. Реакция дегидрирования циклогексана</p>  <p>2. Дегидроизомеризация гомологов циклопентана, например:</p>  <p>3. Дегидроциклизация алканов</p>  <p>4. Тримеризация алкинов:</p>  <p>5. Алкилирование галогенбензола</p> 	<p>1. Галогенирование:</p>  <p>2. Алкилирование по Фриделю-Крафтсу</p>  <p>3. Алкилирование алкенами</p>  <p>4. Гидрирование</p>  <p>5. Окисление</p>  <p>6. Горение</p> $2C_6H_6 + 15O_2 \rightarrow 12CO_2 + 6H_2O$

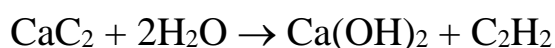
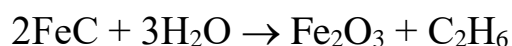
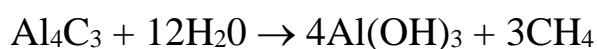
3.2. Теории происхождения нефти. Химические реакции образования нефтяных углеводородов

По сей день существует две диаметрально противоположные гипотезы происхождения нефти и газа: биогенная (*органическая*) и абиогенную (*неорганическая*). Можно перечислить довольно большое число известных исторических личностей и современных ученых и исследователей, которые являются приверженцами этих теорий. Среди создателей биогенной теории необходимо отметить такие имена наших соотечественников, как М.В. Ломоносов, Н.Д. Зелинский, В.И. Вернадский, И.М. Губкин, Н.Б. Вассоевич. Из зарубежных ученых отметим немецких исследователей Г. Гефера, К.Энглера, американского учёного П. Смита и ряд других. Органическая теория утверждает, что нефть образовалась *из останков растений и животных*. Неорганическая – *из набора неорганических веществ*, существующих в недрах подлитосферного пространства (астеносферы) Земли. Развитие абиогенной теории произошло благодаря таким ученым, как А. Гумбольд, М. Бергто, Д.И. Менделеев, В.Д. Соколов, В.Б. Порфирьев, В.П. Мельников, В.А. Краюшкин, и другие.

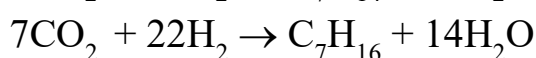
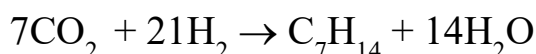
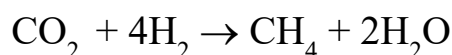
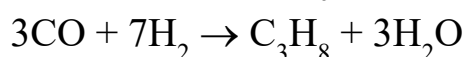
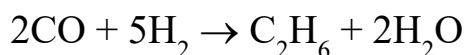
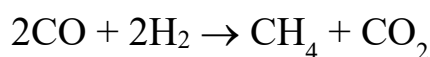
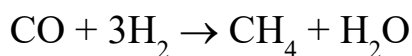
3.2.1. Неорганическая теория образования нефти.

Эта концепция базируется на представлениях об образовании нефти и газа в очагах астеносферы вследствие неорганического синтеза. Существует ряд высказанных и доказанных теорий: вулканическая (А. Гумбольд), карбидная (Д.И. Менделеев, В.П. Мельников), космическая (В.Д. Соколов, В.Б. Порфирьев), мантийная (Н.А. Кудрявцев, В.А. Краюшкин), геокатализа и др. Ниже приведем несколько теорий, демонстрирующих возможность осуществления такого синтеза в природных условиях.

1. *Карбидная гипотеза происхождения нефти* предполагает образование углеводородов при взаимодействии карбидов металлов с водой. Основоположником этой теории считается Д.И. Менделеев. В результате этих реакций образуются простейшие представители углеводородов, такие как метан (CH₄), этан (C₂H₆), этен (C₂H₄), ацетилен (C₂H₂):

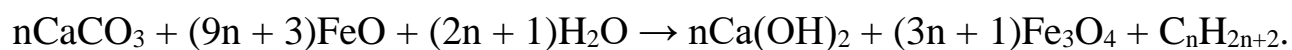


2. *Синтез углеводородов на основе геокатализа.* Синтез углеводородов из смесей CO, CO₂ и H₂ на бифункциональных каталитических системах, включающих помимо металлического компонента, катализаторы кислотно-основного действия – глины и цеолиты.



3. *Синтез углеводородов из неорганических веществ в мантийных условиях.* В этих условиях образование углеводородов может происходить в результате следующих превращений:

- из FeO, CaCO₃ и воды (давление 3–5 ГПа, температура 1200–1500 К) (В.Г. Кучеров, 1999–2002 гг.):



- при образовании альбита (NaAlSi₃O₈) из жадеита (NaAlSi₂O₆) и метасиликата (Na₂SiO₃)



- в результате флюидной сульфуризация Fe₂SiO₄ (вовлечение в этот процесс оксидов углерода (CO₂, CO) порождает углеводороды):



- при 2–5 ГПа и 900–1500 К возможно протекание реакции (Scott H.P, 2004):

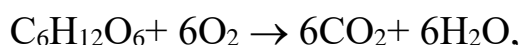


3.2.2. Органическая теория образования нефти.

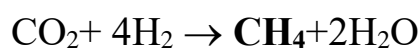
Согласно органической теории, или правильнее ее назвать осадочно-миграционной теорией (Н.Б. Вассоевич), нефть образуется в результате термокатализа из биогенного органического вещества, состоящего из белков, жиров и углеводов и захороненного в процессе осадконакопления. Основными стадиями химического преобразования биогенного органического вещества в нефть и газ являются стадии диагенеза и катагенеза.

Диагенетическое преобразование органического вещества приводит к разрушению органических молекул, при этом по мере погружения осадка эти преобразования будут происходить в аэробной или в анаэробной обстановках. На стадии диагенеза при участии бактерий и других микроорганизмов в первую очередь происходит биохимическое окисление молекул биогенного органического вещества, приводящее к разложению макромолекул на их составные части: белков – до *аминокислот*, углеводов – до *моносахаров*, липидов (жиров) – до *карбоновых кислот*. Далее протекают реакции, в результате которых происходит отщепление функциональных групп (амино-, карбокси-, сульфо- и т.п.), содержащих гетероатомы. Ниже приведены возможные реакции преобразования биоорганических молекул до углеводородов.

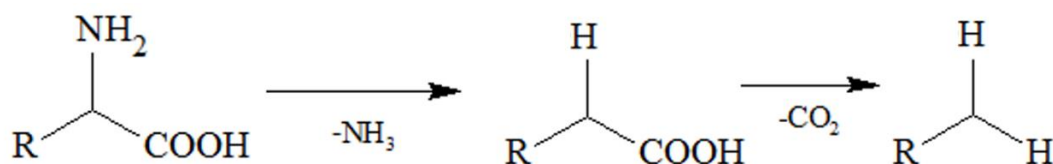
Моносахариды в *аэробной обстановке* в результате биохимических реакций превращаются в углекислый газ и воду:



в *анаэробной обстановке* – образуется водород, который способствует протеканию реакций гидрирования с возможным образованием метана (CH₄):

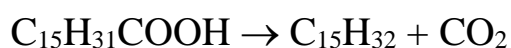
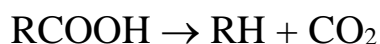


Аминокислоты в результате протекания реакций гидролиза, дезаминирования и декарбоксилирования теряют амино- и карбоксильные группы:

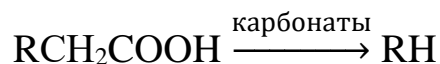


Жирные кислоты преобразуются до углеводородов, поэтому липиды считаются *основным источником нефти и органического вещества* пород. В зависимости от условий: окислительных (в среде O₂) или восстановительных (при наличии H₂) протекают реакции декарбоксилирования и уменьшения длины углеродной цепи или, соответственно, гидрирования и сохранения числа атомов углерода в цепи:

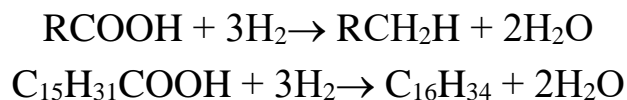
1. Декарбоксилирование жирных кислот в *окислительной обстановке*:



в присутствии карбонатов:

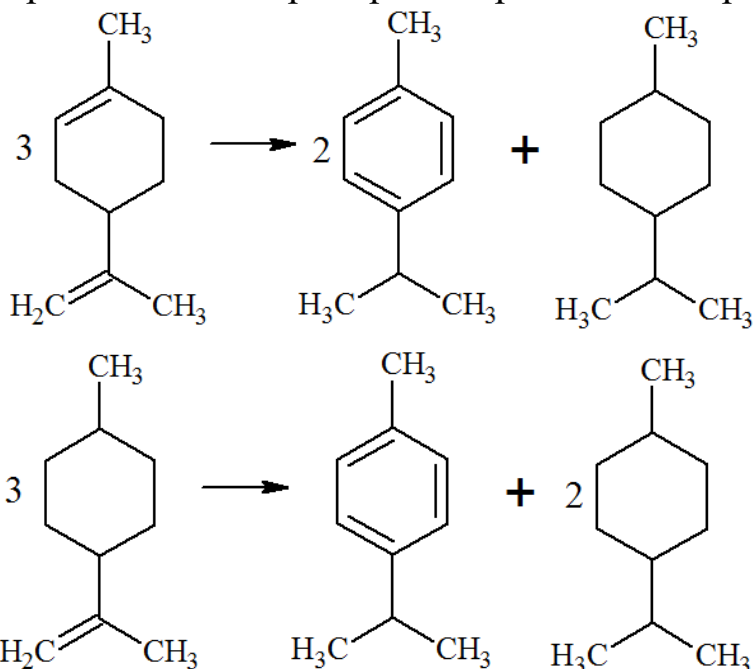


2. Гидрирование жирных кислот в восстановительной обстановке:

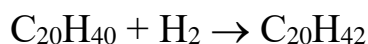


Углеводороды непредельного ряда, образовавшиеся в результате деградации углеводов и белков, подвергаются дальнейшему преобразованию:

1. Изомеризации и диспропорционирования водорода

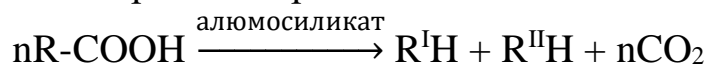


2. Реакций гидрирования (за счёт бактериального водорода).

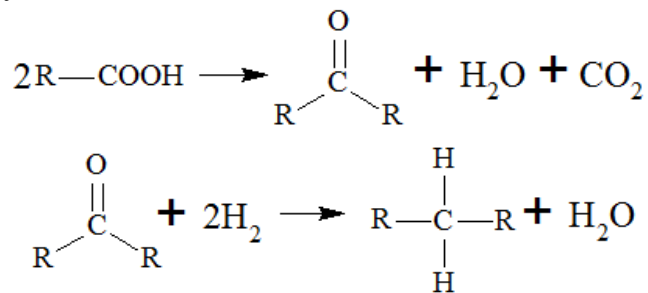


Образование УВ флюидов в зоне катагенеза (главная фаза нефтеобразования) происходит в результате повышения температур и давления до величин, способствующих протеканию термокаталитических реакций:

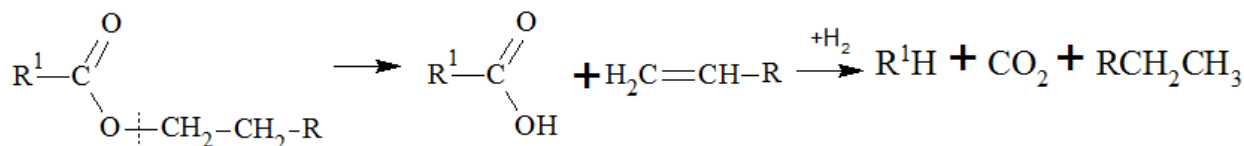
1. Реакций декарбоксилирования



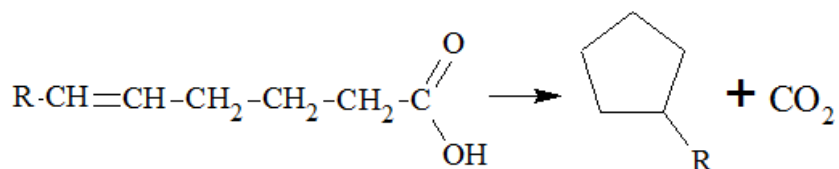
2. Кетонное удлинение



3. Термолиз сложных эфиров.

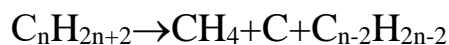


4. Циклизация алифатических непредельных кислот

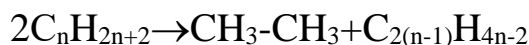


5. Распад алканов

а) отщеплением метана и углерода с образованием алкана, имеющего на два углеродных атома меньше



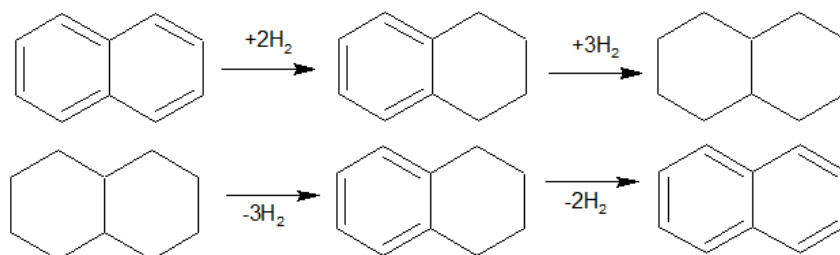
б) отщеплением от двух молекул исходных углеводородов одной молекулы этана и образованием алкана увеличенного молекулярного веса.



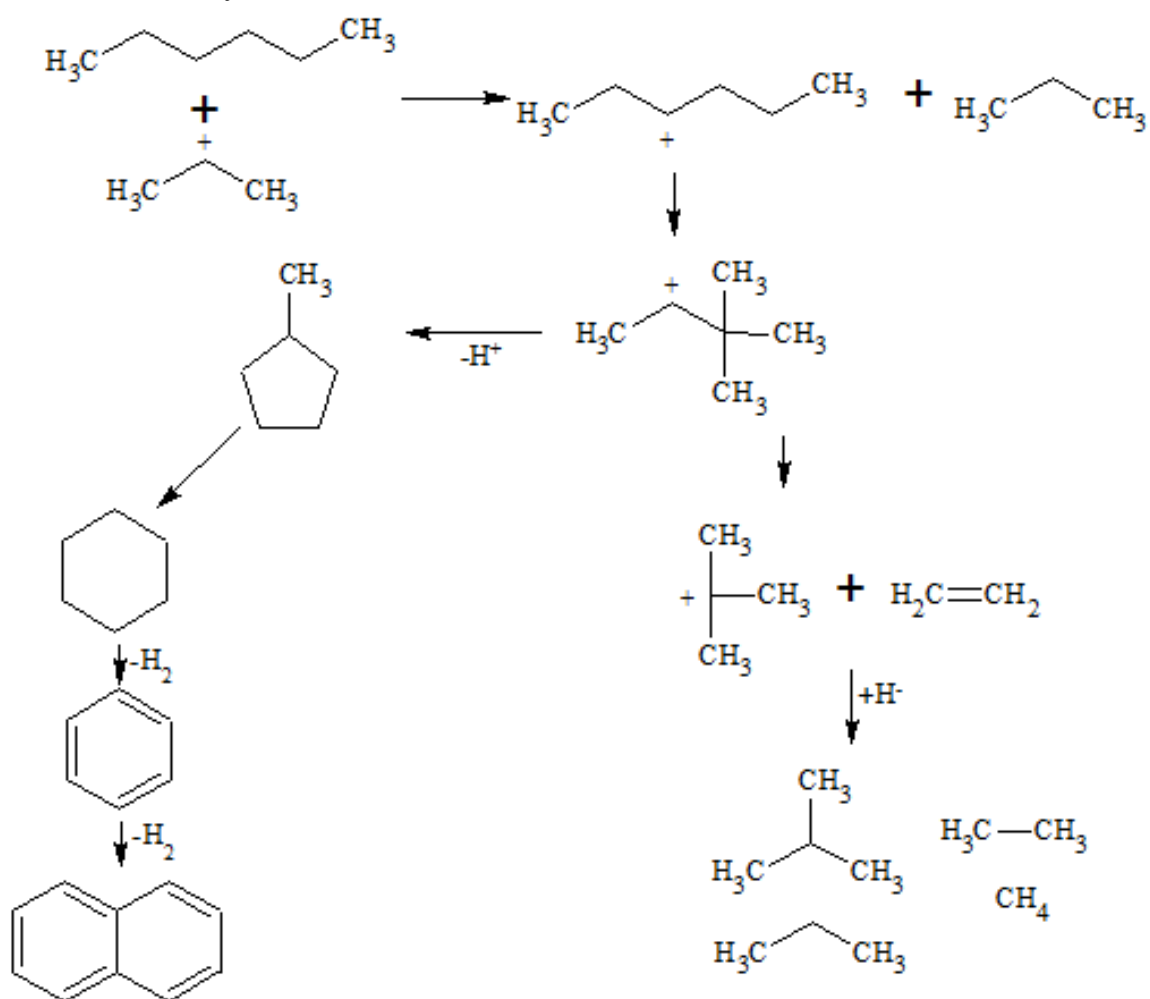
6. Реакции алкилирования алканов алкенами на начальных и средних этапах превращения



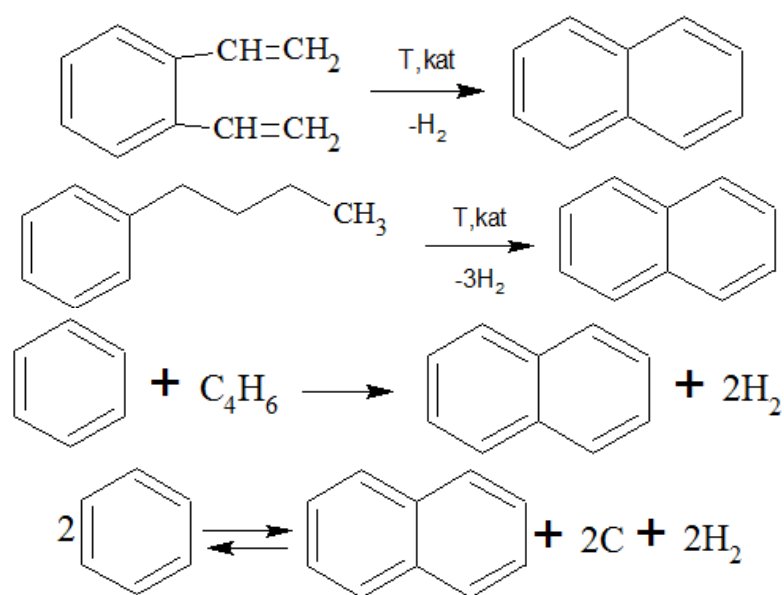
7. Процессы диспропорционирования, гидрогенизации, дегидрирования.



8. Реакции преобразования углеводородов по карбоний-ионному механизму

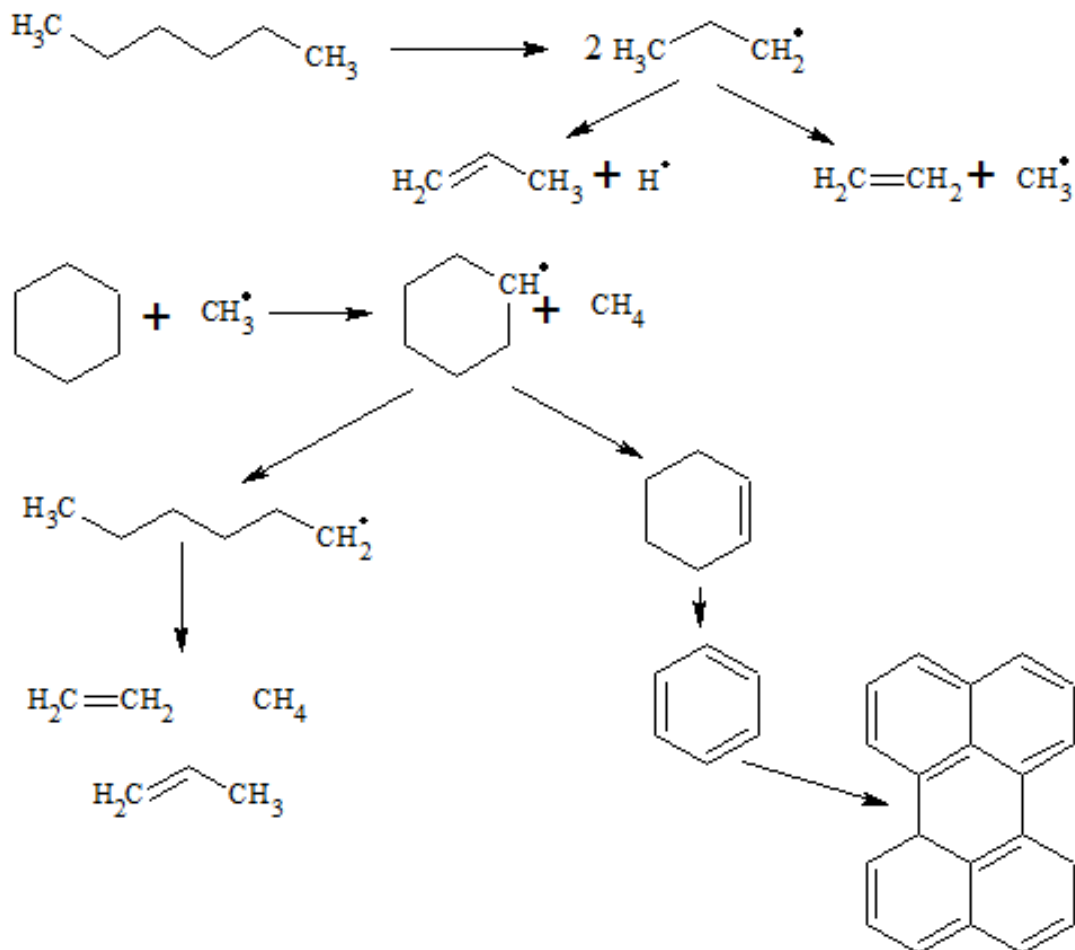


7. Реакции уплотнения



Образование УВ флюидов в зоне метазенеза (главная фаза газообразования)

Реакции преобразования углеводородов по радикально-цепному механизму:



3.2.3. Направление преобразования основных классов углеводородов в процессе термокаталитического превращения (по А.Ф. Добрянскому)

Процесс превращения исходного вещества нефти направлен на преобразование термодинамически неустойчивых насыщенных молекул веществ, близких к живому веществу, в новые формы вещества, термодинамически более устойчивого. Общее направление изменений состоит в потере воды, углекислоты, азота, т. е. к потере гетероатомов, что приближает систему к состоянию обуглероженных соединений. В результате получаются вещества, уже совершенно не сохраняющие элементов исходных структур. Весь цикл превращения необратим и ведет в конце концов к преобразованию нефти до газовых молекулы и углерода в виде графита и других высокоуглеродистых минералов (рис. 11).

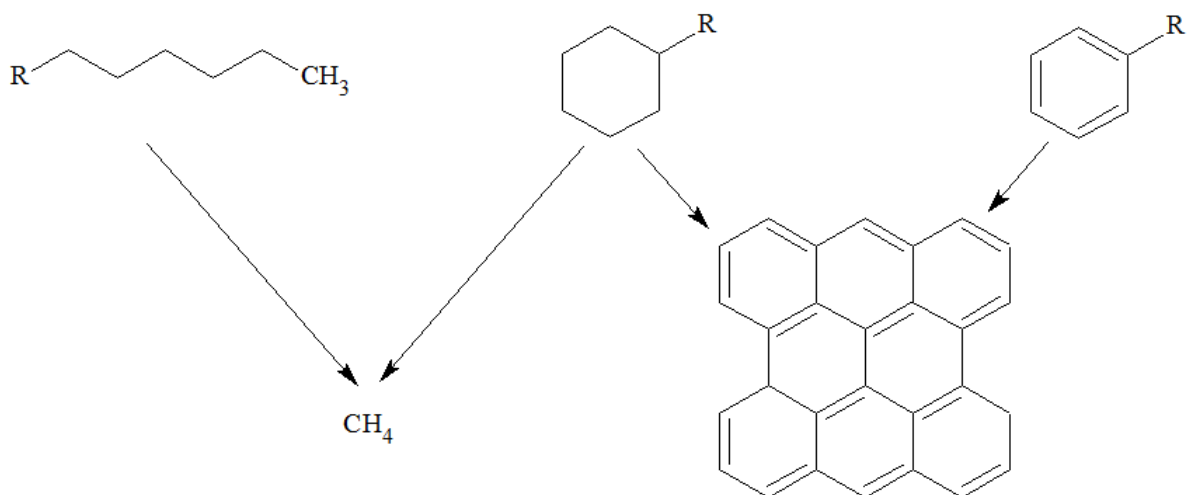


Рис. 11. Схема преобразования основных классов углеводородов в процессе термокаталитического превращения (по А.Ф. Добрянскому)

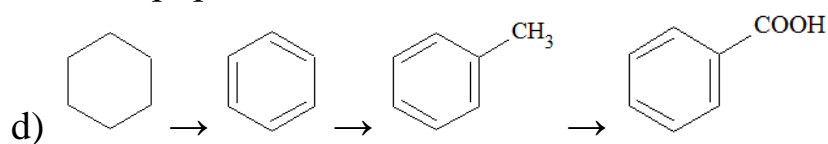
3.3 Задания для самостоятельной работы:

1. Продолжите уравнения химических реакций:

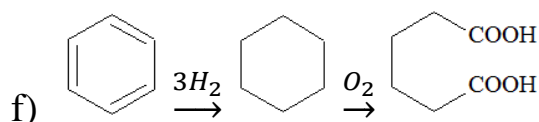
- 2-метилпропан + 3-метилбутен-1 \rightarrow
- бензол + 1-бромпропан \rightarrow
- циклопропан + HCl \rightarrow
- метилциклобутан + H₂ \rightarrow
- 2,7-дибромнонан + Zn \rightarrow
- пара-хлортолуол + метилхлорид + Na \rightarrow
- ацетат натрия + H₂O \xrightarrow{z}
- этилбензол + H₂ \rightarrow
- бензол + 2-метилбутен-1 \rightarrow

2. Напишите уравнения реакций, которые нужно провести для осуществления следующих превращений:

- C \rightarrow CH₄ \rightarrow CH₃Br \rightarrow C₂H₆ \rightarrow CO₂
- бутан \rightarrow этан \rightarrow хлорэтан \rightarrow бутан \rightarrow изобутан
- 1-хлорпропан \rightarrow гексан \rightarrow циклогексан \rightarrow хлорциклогексан



- метан \rightarrow ацетилен \rightarrow бензол \rightarrow хлорбензол \rightarrow толуол

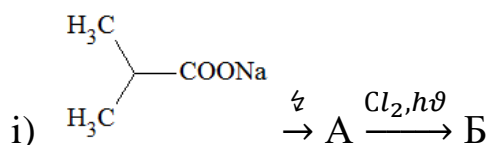
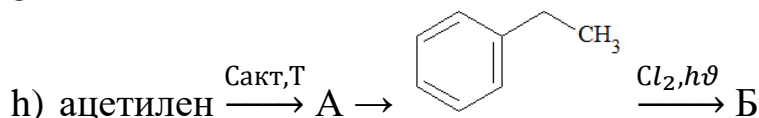
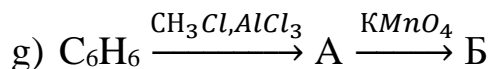
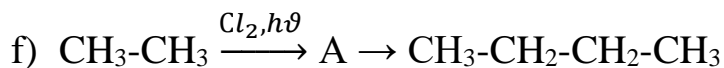
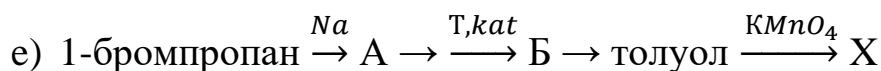
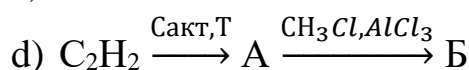
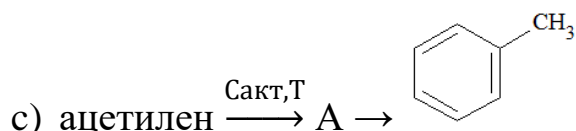
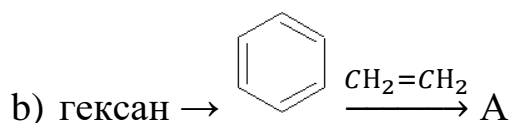
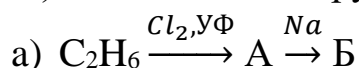


g) 1,3-дибромпропан → циклопропан → хлорпропан → гексан → гексен

h) пропан → 2-бромпропан → 2,3-диметилбутан

i) циклопропан → пропан → 1-хлорпропан → гексан → гексен-1 → 2-бромгексан

3. Расшифруйте следующие схемы, назовите пропущенные вещества (А, Б, Х...) напишите их структурные формулы и соответствующие реакции:



4. Согласно органической и неорганической теориям происхождения нефти получить о-метилбензол. При получении данного соединения согласно органической теории в качестве исходного вещества использовать 4-метилоктановую кислоту.

5. Согласно органической и неорганической теориям происхождения нефти получить изопропилциклогексан. При получении данного соединения

согласно органической теории в качестве исходного вещества использовать 7-метилоктен-3-овую кислоту.

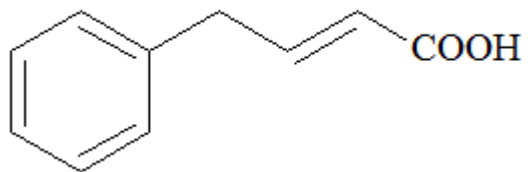
6. Напишите реакции преобразования фитола в окислительных и восстановительных условиях.

7. Напишите реакции гидрирования и дегидрирования нефтяных углеводородов (на примере бициклических соединений, содержащих 10 атомов углерода). Подпишите названия исходных и полученных соединений.

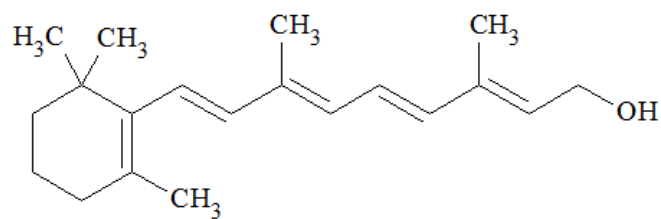
8. Напишите реакции преобразования природного соединения в окислительных или восстановительных условиях. Необходимо получить следующие углеводороды:

- низкомолекулярный алкан (до C10)
- высокомолекулярный алкан (выше C13)
- алкан с четным и нечетным числом атомов углерода
- алкан с нечетным числом атомов углерода
- моноциклический циклоалкан
- бициклический циклоалкан
- алкилциклоалкан
- моноароматический углеводород
- биароматический углеводород
- алкилароматический углеводород
- полиароматический углеводород.

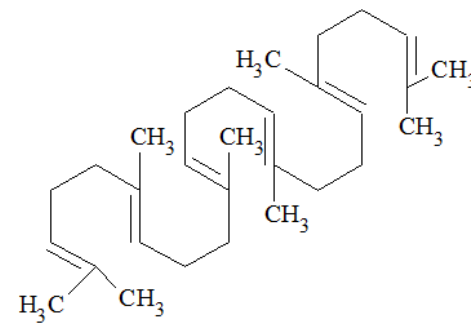
При написании реакций в качестве исходных веществ можно использовать только природное соединение (схемы 1-9), продукты его преобразования, O₂, H₂. Напишите, на какой стадии (диагенез, катагенез) протекает реакция и оцените возможность её протекания. При написании реакций необходимо учитывать направление преобразования отдельных классов органических соединений в пласте.



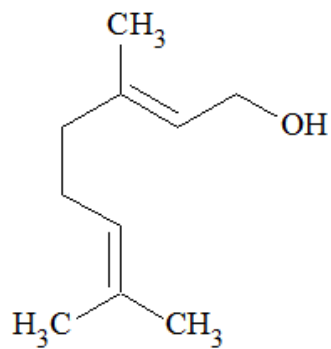
1. 4-фенилкротоновая кислота



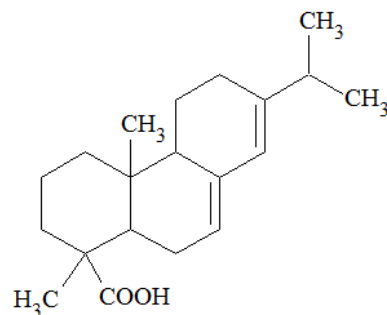
2. ретинол



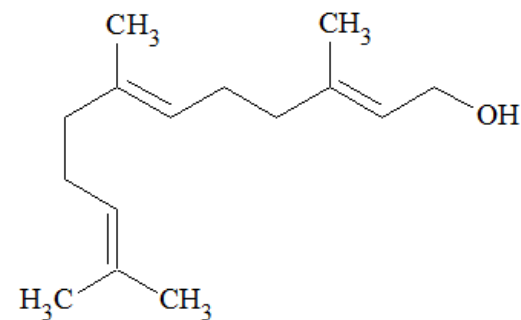
3. сквален



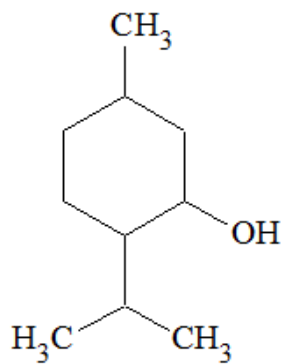
4. гераниол



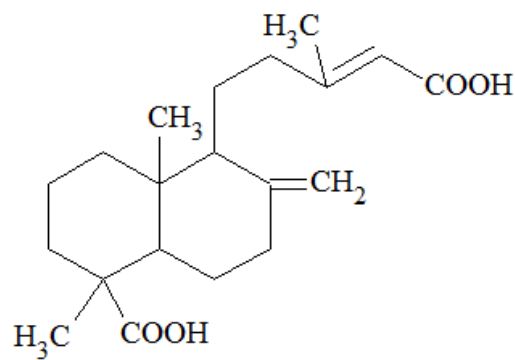
5. абиетиновая кислота



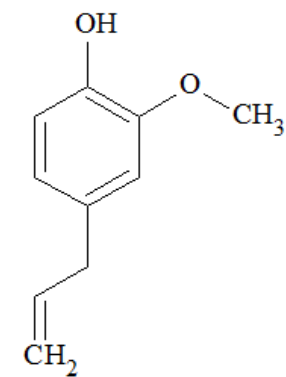
6. фарнезол



7. ментол



8. агатовая кислота



9. эвгенол

ГЛОССАРИЙ

А

Алканы – это ациклические насыщенные углеводороды линейного (нормальные алканы) или разветвленного (изоалканы) строения с общей формулой C_nH_{2n+2} .

Алкены (этиленовые углеводороды) – это ациклические непредельные углеводороды, содержащие одну двойную связь между атомами углерода, образующие гомологический ряд с общей формулой C_nH_{2n} .

Алкилирование – это введение алкильного заместителя в молекулу органического соединения.

Анаэробная обстановка – это условия, при которых все процессы идут без доступа кислорода.

Анион – это отрицательно заряженный ион.

Арены (ароматические углеводороды) – это непредельные циклические углеводороды, молекулы которых содержат устойчивые циклические группы атомов (бензольные ядра) с замкнутой системой сопряженных связей. Общая формула C_nH_{2n-6} .

Ароматизация – это образование ароматических соединений из соединений циклических и других типов.

Астеносфера (слой Гутенберга) – это верхний слой верхней части мантии планеты.

Асфальтены – это наиболее высокомолекулярные гетероатомные компоненты нефти, растворимые в бензоле, сероуглероде, хлороформе, но не растворимые в парафиновых углеводородах, спирте, эфире, ацетоне.

Аэробная обстановка – это условия, при которых все процессы идут при свободном доступе кислорода.

Б

Белки – это природные высокомолекулярные вещества (полимеры), состоящие из остатков аминокислот.

В

Восстановление органического вещества – это химическая реакция введения в его состав водорода и отщепление кислорода.

Г

Галогенирование (галоидирование) – это процесс введения галогена в молекулу органического соединения, осуществляемый за счёт реакции замещения или присоединения.

Галогены – это химические элементы 17-й группы периодической таблицы химических элементов Д. И. Менделеева (по устаревшей классификации — элементы главной подгруппы VII группы). К галогенам относятся фтор F, хлор Cl, бром Br, иод I, астат At, а также (формально) искусственный элемент теннессин Ts.

Гетероатомные компоненты нефти – это кислород- (кислоты, фенолы, кетоны и эфиры), сера- (меркаптаны и сульфиды) и азотсодержащие (гомологи пиридина, производные пиррола и амиды) соединения.

Гидратация – это присоединение молекул воды к молекулам или ионам.

Гидрирование – это химическая реакция, включающая присоединение водорода к органическому соединению.

Гидролиз – это процесс взаимодействия сложного химического вещества с водой, итогом которого становится разложение молекул этого вещества.

Гомологи – это соединения, имеющие одинаковое строение, но отличаются на одну или несколько CH_2 -групп, относящиеся к одному классу веществ.

Горение – это быстропротекающая химическая реакция соединения горючих компонентов с кислородом, сопровождающаяся интенсивным выделением теплоты и резким повышением температуры продуктов сгорания.

Гудрон – это вакуумный остаток, выкипающий при температурах более 500°C .

Д

Дегалогенирование – это отщепление галогена из молекулы органического соединения или замещение его на атом H.

Дегидратации – это реакция с отщеплением молекул воды.

Дегидрирование – это реакция отщепления водорода от молекулы органического соединения.

Дезаминирование – это процесс удаления аминогрупп от молекулы.

Декарбоксилирование – это реакция отщепления молекулы диоксида углерода из карбоксильной группы ($-\text{COOH}$) или карбоксилатной ($-\text{COOMe}$) группы органических соединений.

Диagenез – это совокупность процессов преобразования рыхлых осадков в осадочные горные породы в условиях верхней зоны земной коры.

Диспропорционирование (в орг. химии) – это перераспределение атомов или их группировок между двумя одинаковыми молекулами или свободными радикалами.

Ж

Жиры (липиды) – это органические соединения, состоящие из глицерина и жирных кислот.

И

Изомеризация – это превращение химического соединения в изомер, перегруппировка атомов в молекуле вещества без изменения её качественного и количественного состава.

Изомеры – это вещества, которые имеют одинаковую молекулярную формулу, но различное химическое строение (различные структурные формулы), а, следовательно, обладают различными свойствами.

Изопрен – это 2-метилбутадиен-1,3, ненасыщенный углеводород, принадлежащий к диеновому ряду, остаток его молекулы входит во множество других природных соединений — изопреноидов, терпеноидов и т. д.

Изопреноидные углеводороды – это алифатические углеводороды, обладающие полиизопреновым скелетом, с характерным чередованием метильных заместителей в цепи через три метиленовые группы, которые можно рассматривать как продукты полимеризации изопрена.

К

Карбиды – это соединения металлов и неметаллов с углеродом.

Катагенез – это стадия глубинного преобразования осадочных пород под влиянием повышенных температур и давлений, подземных вод, следующая в процессе литогенеза за диагенезом и предшествующая метаморфизму.

Катализатор – это вещество, ускоряющие химическую реакцию.

Катион – это положительно заряженный ион.

Крекинг – это процесс расщепления соединений нефти с разрывом связи С—С в молекулах углеводородов, в результате которого образуются углеводороды с меньшим числом атомов углерода в молекуле.

Л

Легкие (бензиновые) фракции – это фракции, которые выкипают до 200°C.

М

Мазут – это остаток, образовавшийся при первичной переработке нефти после отбора светлых фракций (дистиллятов) и выкипающий при температуре выше 350°C.

Мальтены – это часть нефти, из которой удалены бензиновые фракции и асфальтены.

Масла – это жидкие высококипящие углеводородные компоненты нефти, представляющие собой смесь парафиновых, нафтеновых и ароматических углеводородов.

Массовая доля – это отношение его массы компонента к массе смеси.

Метагенез – это стадия глубинного преобразования осадочных горных пород под влиянием повышенных температур, давлений, подземных вод; в процессе литогенеза сменяет катагенез. Заключается в избирательной метаморфизации осадочных пород.

Мольная доля – это отношение числа молей компонента к общему числу молей смеси.

Н

Нефть – это взаимосвязанная система углеводородных, гетероатомных и металлоорганических (в следовых количествах) соединений, закономерно образующаяся из продуктов бактериального, а затем термokatалитического превращения органического вещества, и некоторого количества его реликтовых компонентов.

Номенклатура (в химии) – это совокупность химических терминов и названий индивидуальных химических веществ, их групп и классов, а также правила составления этих названий.

О

Объемная доля – это отношение объема компонента к объему всей смеси.

Окисление органического вещества – это химическая реакция введения в его состав кислорода и (или) отщепление водорода.

Оптические изомеры – это стереоизомеры, представляющие собой зеркальные отражения друг друга, не совмещаемые в пространстве.

Органическое вещество (в геологии) – это природные органические соединения, присутствующие в почвах, поверхностных и подземных водах, большинстве горных пород и осадков, а также в атмосфере.

П

Перегонка (ректификация) — это процесс разделения нефти на отдельные компоненты (фракции).

Пиролиз – это необратимый термический процесс разложения веществ под действием высокой температуры.

Показатель преломления – это безразмерная физическая величина, характеризующая различие фазовых скоростей света в двух средах.

Пространственные изомеры (стереоизомеры) – это соединения, имеющий одинаковый состав и одинаковый порядок соединения атомов, но отличающиеся расположением атомов в пространстве.

С

Светлые (дистиллятные) фракции – это фракции, выкипающие до 300°C.

Свободный радикал – это атом или группа связанных между собой атомов, характеризующиеся наличием неспаренных электронов.

Смолы – это высокомолекулярные гетероатомные компоненты нефти, растворимые в низкокипящих алканах.

Средние (керосиновые) фракции – это фракции, выкипающие в интервале температур от 200 до 300°C.

Структурные изомеры – это изомеры, отвечающие различным структурным формулам органических соединений (с разным порядком соединений атомов).

Т

Твердые парафины – это смесь твёрдых углеводородов метанового ряда преимущественно нормального строения.

Тригонограмма – это один из способов графического изображения аналитических данных, например для отображения состава трехкомпонентных систем.

Тримеризация – это образование одной молекулы из трёх.

Тяжелые (масляные) фракции – это фракции, выкипающие при температурах выше 300°C.

У

Углеводы (глициды) – это органические вещества, содержащие карбонильную группу и несколько гидроксильных групп.

Ф

Фракционный состав по истинным температурам кипения – это зависимость объемной доли выкипающего продукта от повышения температуры кипения, представленная в виде таблицы или кривой.

Фракция – это доля нефти, выкипающая в определенном интервале температур.

Х

Хиральный центр – это асимметрический атом углерода, соединённый с четырьмя разными группами (заместителями), не имеющий двойных связей и находящийся в конфигурации тетраэдра.

Хроматография – это метод разделения и анализа смесей веществ, основанный на распределении веществ между двумя фазами — неподвижной и подвижной.

Ц

Цеолит – это гидратированный алюмосиликат щелочного металла, представляющий собой микропористый кристалл.

Циклоалканы (нафтены) – это циклические насыщенные углеводороды с общей формулой C_nH_{2n} .

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Артеменко А.И. Органическая химия для нехимических направлений подготовки. Учебное пособие. СПб.: «Лань». 2019. 608 с.
2. Юровская М.А. Основы органической химии. Учебное пособие: 2-е изд. /М.А. Юровская, А.В. Куркин М.: «Бином. Лаборатория знаний». 2018. – 236 с.
3. Петров А.А. Органическая химия. Учебник для вузов. 5 издание, переработанное и дополненное / А.А. Петров, Х.В. Бальян, А.Т. Трощенко. Под ред. М.Д. Стадничука СПб.: «Иван Федоров», 2019. 624 с.
4. Номенклатура органических соединений: учебное пособие / А.А. Вшивков, В.С. Мошкин, Д.Л. Обыденнов, А.В. Пестов; под общ. ред. В.Я. Сосновских. – Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2019. –236 с. Химия нефти и газа: учебное пособие. — М.: ИД «ФОРУМ», 2009. — 336 с.
5. Химия нефти и газа: учебное пособие / Т.Н. Некозырева, О.В. Шаламберидзе. — Тюмень: ТюмГНГУ, 2013. — 76 с.
6. Гордадзе Г.Н., Гируц М.В., Кошелев В.Н. Органическая геохимия углеводородов: Учеб. пособие для вузов: В 2 кн. –М.: Российский государственный университет нефти и газа имени И.М. Губкина, 2012. - Кн. 1. – 392 с.
7. Петров А.А. Углеводороды нефти. – М.: Наука, 1984. – 264с.
8. Баженова О.К., Бурлин Ю.К., Соколов Б.А., Хаин В.Е. Геология и геохимия нефти и газа: Учебник. – 3-е изд, перераб. и доп. –М.: Издательство Московского университета, 2012. – 432 с.
9. Геология и геохимия горючих ископаемых / под. ред. Соколова Б.А. – М: ГЕОС. – 2003. – 196 с.
10. Хант Дж. Геохимия и геология нефти и газа. Пер. с англ. / Под ред. Н.Б. Вассоевича и А.Я. Архипова. –М.: Мир, 1982. – 703с.
11. Тиссо Б., Вельте Д. Образование и распространение нефти. / Под ред. Н.Б. Вассоевича, Р.Б. Сейфуль-Мулюкова (Пер. с англ.). –М.: Мир, 1981. – 501с.
12. Современные методы исследования нефтей / под ред. А.И. Богомолова, М.Б. Темянко, Л.И. Хотынцевой и др. –Л.: Недра, 1984. – 431с.