

1. INTRODUCCIÓ

1. INTRODUCCIÓ

1.1 INTRODUCCIÓ GENERAL

El carbó és una roca d'origen sedimentari formada per components heterogenis orgànics i inorgànics, els quals tenen diferents propietats físiques i químiques.

Consisteix en agregats de materials variables compostats principalment per constituents orgànics anomenats macerals, tals com vitrinita, exinita, i inertinita (*Stach, 1982*). La matèria mineral, mesclada amb els components orgànics, està formada bàsicament per minerals tal com el quars, la calcita, la dolomita, minerals d'argila i sulfurs de ferro.

L'estudi científic del carbó té com a objectiu la interpretació dels processos que l'han originat i la reconstrucció de les condicions fisico-químiques, geogràfiques i climàtiques dels ambients on s'ha dipositat.

Els dipòsits sedimentaris dels sistemes lacustres són diversos i diferents dels sediments d'origen transicional i marí. Generalment la sedimentació en els sistemes lacustres és més ràpida (*Meyers i Ishiwatari, 1993*).

Quan la matèria orgànica s'acumula (0,1-1%) en un ambient reductor comença a transformar-se per acció de microorganismes anaerobis (transformacions microbiològiques), alhora que es compacta. El material que en resulta, compactat i amb alt contingut d'humitat, rep el nom de torba. En augmentar la pressió i la temperatura de la torba per l'efecte de l'enterrament, es produeix una pèrdua d'aigua i de compostos volàtils donant pas a compostos orgànics més rics en carboni (procés geoquímic). Es diu que hi ha un augment del rang del carbó o el que és el mateix, augmenta la maduresa. Aquests canvis es produeixen en el domini de la diagènesi i la catagènesi.

En aquest procés geoquímic anomenat carbonització, la torba es converteix en lignit, carbó bituminós, hulla i antracita (*Tegelaar et al, 1989; Tissot i Welte, 1984*) variant la composició elemental de manera que el 55% (en pes) de carboni augmenta fins aproximadament un 70% en l'estadi de lignit i un 92% en l'antracita, alhora que disminueix el contingut d'hidrogen i oxigen. El sofre i el nitrogen hi són presents en petits percentatges i el canvi de la seva concentració en el procés de carbonització té menys importància.

El canvi elemental es reflecteix amb la relació H/C ($\cong 1$ pel lignit) que disminueix per sota de 0,5 per l'antracita (*Haenel, 1992*). La proporció d'àtoms de carboni aromàtic (0,5 en el lignit) augmenta fins a 0,95 en l'antracita.

Sovint els compostos derivats de plantes superiors són els principals constituents dels sediments dels llacs i la principal diferència entre aquests i els sediments d'origen marí són els microorganismes que imperen durant la diagènesi. En sediments lacustres és notori el retreballament microbià de la matèria orgànica però els components de les plantes superiors són menys susceptibles de ser transformades per acció microbiana. D'aquesta manera s'obté una fracció insoluble (querogen) i la fracció soluble formada per compostos moleculars (**biomarcadors**) que testimonien la seva contribució. En aquests l'esquelet hidrocarbonat lineal i isoprenoide es preserva mentre que els grups funcionals es transformen en el transcurs de la diagènesi.

El **procés biogeoquímic** de degradació de la matèria orgànica **és selectiu**. Les formes menys reactives de la matèria orgànica esdevenen les predominants i els microorganismes utilitzen com aliment les més reactives (solubles en aigua).

En alguns llacs les condicions extremes (temperatura, i pH elevats, disminució del nivell d'oxigen, lluminositat elevada) que es donen en un sistema evaporític fan que no siguin aptes per a la vida de moltes espècies d'organismes (*Evans i Kirkland, 1988*). Contràriament, aquests ecosistemes hipersalins són altament productius ja que en disminuir la diversitat augmenta el nombre d'individus de l'espècie que sobreviuen

(regla de Thienemann et al, 1984). Mentre en els oceans no supera una producció de 2000 mg C/m²/dia, en el llac Aranguadi (Etiòpia) s'eleva fins a 19000 mg C/m²/dia.

Però a més de l'elevada quantitat de matèria orgànica generada per l'elevada activitat biològica en els sistemes hipersalins, també es donen condicions favorables per la seva acumulació i preservació.

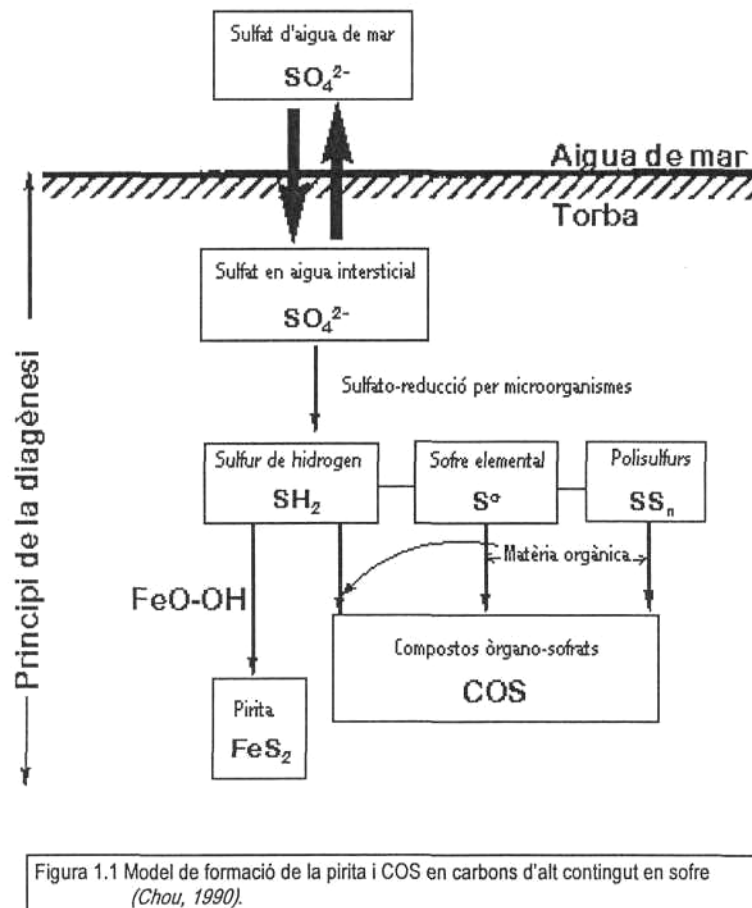
Si bé en la majoria de carbons hi ha un baix contingut de sofre ($\leq 1\%$) que deriva fonamentalment de material de plantes, a quantitats superiors (qualificats com *de mitjà si està comprès entre l'1% i el 3%, i alt contingut en sofre per $>3\%$*) a més de poder procedir de plantes, el sofre pot procedir del sulfat generalment d'aigua de mar, que va inundar la torba pantanosa (Chou, 1990). Els compostos orgànics sofrats (COS) no apareixen en organismes vius i per tant es formen en la geoesfera.

En els carbons amb elevat contingut de sofre en una situació no marina, com els carbons presents a les conques catalanes, l'elevada concentració de sofre pot estar originada per la reducció de sulfat que entra en el sistema per l'existència d'abundants dipòsits de sulfat en l'àrea dels voltants (Querol 1990; Gorchs et al, 1993; Querol et al, 1996).

Hi ha COS que es formen al principi de la diagènesi (etapa d'humificació) durant la qual les plantes es van descomposar per activitat bacteriana, per tant hi ha incorporació de sofre a compostos orgànics a baixa temperatura i en poc temps (Graafet al, 1992). El sofre s'addiciona en forma de polisulfurs i H₂S, la formació dels quals s'atribueix a bacteris anaerobis que utilitzen sulfat (anomenats bacteris sulfato-reductors) que es troba en el medi deposicional pro vinent de les àrees circumdants (figura 1.1).

Els COS originats en el subsòl no són estables formant-se'n de nous durant el procés de soterrament.

L'especiació dels COS està relacionada amb el rang del carbó. Per exemple els tiofens són més abundants en carbons bituminosos i en l'antracita que en carbons de baix rang.



Els factors determinants de la formació dels COS són la temperatura, el sulfat disponible (en solució o en fase sòlida), el pH, així com el tipus i l'abundància de la matèria orgànica.

En resum, **la transformació de la matèria orgànica** al principi de la diagenèsi és una **empremta dels factors individuals dels Hacs**. Essent aquests factors tals com la naturalesa de la biomassa, les condicions climàtiques, paleogeogràfiques i l'ambient deposicional així com la tectònica i els agents que contribueixen en el procés de carbonització.

Les dades així obtingudes combinades amb les dades geològiques i geofísiques són utilitzades per construir detallada i acuradament models de gènesi encara que fins ara s'ha utilitzat sobretot en petroli per tal d'avaluar la potència de les roques mare en

conques i per predir la temporització de la formació del petroli i la quantitat i qualitat dels petrolis en dipòsits en correlacions via petroli-petroli i petroli-roca mare.

El carbó conté una considerable capacitat energètica que pot transformar-se en calor (1 Kg de lignit = 0,11-0,20 Kg de petroli com a generador d'electricitat; *Ugursal et al, (1994)*). De fet s'havia utilitzat sobretot com a font energètica, també com a proveïdor de compostos químics a la indústria química, metal·lúrgica i com a generador de gas. En l'actualitat, el seu ús és més limitat.

L'ús i la producció de carbó ocasiona impacte ambiental, generant diversos contaminants, per això cal replantejar-se la seva utilització (*Wyatt, 1986*) ja que es considera la font energètica convencional més important del món i en conseqüència és atractiu de cara a assegurar petites fluctuacions en el cost de les fonts energètiques (sostenint així les economies de les nacions). De fet en la crisi del 1973 va augmentar la utilització del carbó i es preveu que continuï augmentant fins després del 2000, però paral·lelament cal desenvolupar-ne la tecnologia més respectuosa amb el medi ambient.

El tractament i utilització de carbó ric en sofre és encara menys atractiva donat que es formen òxids de sofre durant la combustió així com l'enverinament dels preuats catalitzadors durant les operacions de refinament. Des de fa decennis els enginyers estan intentant contínuament millorar el refinament.

El coneixement de l'origen, les estructures i els comportaments dels COS en el subsòl, contribuirà substancialment a l'exploració i explotació futura de carbons rics en sofre.

1.2 GLOSSARI

Es pretén establir l'origen, l'ambient deposicional i la maduresa dels carbons compresos en la part nord-oriental de la Península Ibèrica a partir de l'estudi de la fracció soluble apolar. Aquests carbons tenen en comú l'ambient continental, generalment lacustre, però d'evolució diferent.

El carbó s'ha vingut estudiant més des de la vessant físico-química. D'altra banda l'estudi dels components lipídics (geoquímica orgànica) s'ha centrat sobretot a petrolis, pissarres bituminoses, en correlacions petroli-roca mare i en menor extensió en carbons madurs, però no existeixen gaire estudis de l'anàlisi lipídica de carbons immadurs.

Si bé s'ha aplicat l'estudi geoquímica orgànica a través de biomarcadors hidrocarbonats apolars o amb algun grup funcional oxigenat, hi ha més desconeixement dels biomarcadors que contenen sofre (COS), i com s'ha dit, encara menys en l'estudi de carbons immadurs. És per això que *es vol aprofundir en l'estudi dels COS i la seva evolució amb la maduresa de la mostra.*

En el *capítol 2* es descriuen geològicament les conques límniques i paràliques que van donar origen als carbons d'Ogassa, Utrilles, Fígols, Calaf i Camps, i Mequinensa.

En el *capítol 3* es pretén descriure-les amb l'ajuda de l'estudi geoquímica orgànica emprant els hidrocarburs no aromàtics més utilitzats com a biomarcadors. Donat que aquests s'han vingut utilitzant des de fa alguns anys, no es farà la descripció detallada d'aquests biomarcadors.

Es continua l'estudi geoquímica orgànica en el *capítol 4* a partir d'hidrocarburs no aromàtics lineals i cíclics menys estudiats, així com d'altres hidrocarburs monoaromàtics i poliaromàtics monocíclics i policíclics.

A partir del capítol 4 i en els següents, és segueix el següent ordre:

1. *Primer es comença per un recull del coneixement que se'n té, dit "sumari"*
2. *Es procedeix a mostrar els resultats de l'estudi*
3. *S'acaba amb la discussió o informació que se'n pot extreure de l'estudi*

En el **capítol 5** s'estudien els compostos orgànics sofrats (COS), en algun cas aprofundit una mica més en el seu coneixement i se'n proposen alguns no descrits fins l'actualitat. La majoria d'ells es descriuen per primera vegada en un carbó.

En el **capítol 6** s'utilitzen hidrocarburs policíclics poliaromàtics els quals permeten determinar la maduresa dels carbons madurs i que s'aplica als més immadurs per primera vegada.

Finalment es fa les conclusions de l'estudi geoquímic orgànic aplicat a carbons immadurs en el **capítol 7**.