

天然气中甲烷和 CO₂ 的二元同位素特征

唐 茂, 赵 辉, 刘 耘

中国科学院 地球化学研究所 矿床地球化学国家重点实验室, 贵阳 550002

关键词: 二元同位素方法; 天然气; 同位素计算; 量子化学计算

天然气的同位素成分可以用来指导天然气的开采和评估。

近两年稳定同位素地球化学的一个新的突破是二元同位素方法的建立。美国加州理工大学 John Eiler 研究组的一系列开创性工作, 标志着同位素地球化学的二元同位素时代的开始。

天然气以甲烷为主, 又含有少量包括 CO₂ 在内的其他气体。本文利用理论计算方法, 给出了甲烷和 CO₂ 这两种气体的二元同位素特征, 探索新的成因分析方法。同时对甲烷和 CO₂ 的计算, 使得对温度的判定上有两种结果的限制, 达到双重校定的效果, 可以更准确地确定天然气的温度及来源

信息。

参考文献:

- [1] Affek H P, Eiler J M. Abundance of mass 47 CO₂ in urban air, car exhaust, and human breath [J]. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 2006, 70: 1 - 12.
- [2] Schauble E A, Ghosh P, Eiler J M. Preferential formation of C-13-O-18 bonds in carbonate minerals, estimated using first - principles lattice dynamics [J]. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 2006, 70: 2510 - 2529.
- [3] Wang Z G, Schauble E A, Eiler J M. Equilibrium thermodynamics of multiply substituted isotopologues of molecular gases [J]. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 2004, 68: 4779 - 4797.