

Геохимия фенантронов, дибензотиофенов и ароматических стероидов в битумоидах баженовской свиты юго-востока Западной Сибири (Томская область)

И.С. Сотнич*, Е.А. Костырева

Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука Сибирского отделения РАН, Новосибирск, Россия

В работе представлены результаты изучения ароматических соединений (фенантронов, дибензотиофенов, ароматических стероидов) в битумоидах баженовской свиты Томской области (юго-восток Западной Сибири). Среди соединений фенантренового и дибензотиофенового рядов, помимо голаядерных и монометилзамещенных структур, идентифицированы их ди- и триметилзамещенные гомологи. Сравнительный анализ относительных концентраций основных групп ароматических соединений, рассчитанных двумя способами (с учетом и без учета ди- и триметилфенантронов и дибензотиофенов), показал их идентичность. Установлено, что основным фактором, контролирующим содержание и распределение ароматических соединений, является степень зрелости органического вещества. Наиболее информативные молекулярные показатели зрелости для органического вещества баженовской свиты низких и средних градаций катагенеза ($ПК_3$ -МК₁²) – отношения 4-МДБТ/1-МДБТ, ТАСИ, ТАС/МАС, а также ТМТГФ/1,7,8-ТМФ.

Ключевые слова: органическое вещество, битумоиды, ароматические соединения, катагенез, нефтематеринские породы, баженовская свита, верхняя юра, Западная Сибирь

Для цитирования: Сотнич И.С., Костырева Е.А. (2025). Геохимия фенантронов, дибензотиофенов и ароматических стероидов в битумоидах баженовской свиты юго-востока Западной Сибири (Томская область). *Георесурсы*, 27(3), с. 168–178. <https://doi.org/10.18599/grs.2025.3.19>

Введение

В последнее время в практике современных геохимических исследований органического вещества всё большее внимание уделяется изучению состава ароматических фракций битумоидов и нефтей (Каширцев и др., 2018; Бурдельная, Бушнев, 2021; Долженко, Фомин, 2022; и др.). Среди ароматических соединений для характеристики рассеянного органического вещества наибольший интерес представляют трициклические ароматические соединения фенантренового ряда, сероароматические соединения дибензотиофенового ряда и ароматические стероиды, которые хоть и не являются «биомаркерами» в общепринятом смысле слова, однако несут в себе важнейшую информацию об условиях формирования и преобразования органического вещества в геологическом прошлом (Radke et al., 1986; Cassani et al., 1988; Hughes et al., 1995; Szczerba, Rospondek, 2010; Колесников и др., 1991; Чахмахчев, Чахмахчев, 1995; Конторович и др., 2004; Гончаров и др., 2013; и др.).

Настоящая работа посвящена исследованию состава и строения ароматических и сероорганических соединений в органическом веществе баженовской свиты Томской области и является продолжением серии работ, посвященных изучению ароматической фракции битумоидов из открытого и закрытого порового пространства пород баженовской свиты на современном аналитическом уровне (Эдер и др., 2019; Сотнич, Костырева, 2021; Сотнич, Костырева, 2024).

В качестве объекта исследования выбрана баженовская свита из разрезов скважин Пельгинская-2, Среднеюлжавская-10, Арчинская-47, Южно-Майская-413, Западно-Квензерская-4 (рис. 1).

В тектоническом отношении скважины Арчинская, Южно-Майская и Западно-Квензерская расположены на территории Колтогорско-Нюрольского жлоба (отрицательной надпорядковой структуры), а Пельгинская и Среднеюлжавская скважины – на территории Чузиско-Чижапской мезоседловины и Северо-Межовской мегамоноклинали – промежуточных тектонических структурах с юго-восточной стороны Колтогорско-Нюрольского жлоба (Конторович и др., 2001). Баженовская свита на этой территории накапливалась в обстановках мелкого (100–200 м) моря (Конторович и др., 2013) и представлена преимущественно глинистыми и кремнистыми породами – микститами кремнисто-глинистыми, кероген-глинисто-кремнистыми (близкими к силицитам)

* Ответственный автор: Инга Сергеевна Сотнич
e-mail: sotnichis@ipgg.sbras.ru

© 2025 Коллектив авторов

Статья находится в открытом доступе и распространяется в соответствии с лицензией Creative Commons Attribution (CC BY) License (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

и кероген-кремнисто-глинистыми (Эдер и др., 2022). Органическое вещество по пиролитическим и углепетрографическим данным характеризуется как незрелое/слабозрелое (градация катагенеза PK_3 - MK_1^1) в баженовской свите Арчинской, Южно-Майской, Пельгинской, Среднеюлжавской площадей и зрелое (градация MK_1^2) на Западно-Квензерской площади (Сотнич, Костырева, 2024, Фомин, 2011, Конторович и др., 2018).

Материалы и методы

Исследования осуществлялись по методике Института нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН (ИНГГ СО РАН) (Конторович и др., 2018), согласно которой путем последовательной экстракции из породы при комнатной температуре хлороформом извлекаются сначала битумоиды открытых пор («свободная микронепть»), затем битумоиды, находящиеся в закрытом поровом пространстве пород (автохтонные битумоиды) (Конторович и др., 2018; Сотнич, Костырева, 2021; Сотнич и др., 2023). Коллекция включала 340 проб битумоидов, в том числе 67 проб из баженовской свиты Арчинской, 65 проб – Западно-Квензерской, 53 пробы – Пельгинской, 58 проб – Среднеюлжавской, 97 проб – Южно-Майской площадей.

Выделение ароматической (нафтенно-ароматической) фракции битумоидов проводилось стандартным способом – методом элюентной (адсорбционно-жидкостной) хроматографии).

Хромато-масс-спектрометрические исследования ароматической фракции битумоидов проводились на газовом хроматографе Agilent Technologies 6890 с высокоэффективным масс-селективным детектором MSD 5973N и компьютерной системой (ChemStation) регистрации и обработки информации HPG 1034. В результате проведенных исследований были получены хроматограммы по общему ионному току (TIC), а также хромато-масс-фрагментограммы по фрагментным

и молекулярно-массовым ионам m/z 178+192+206+220 (фенантроны), m/z 184+198+212+226 (дибензотиофены), m/z 253+231 (моно- и триароматические стероиды), а также m/z 219 (ретен) и m/z 223 (1,1,7,8-тетраметил-1,2,3,4-тетрагидрофенантрен). Идентификация соединений осуществлялась по времени удерживания и анализу полученных масс-фрагментограмм и масс-спектров изучаемых компонентов путем их сравнения с уже имеющимися спектрами из библиотеки Национального Института Стандартов NIST-05, а также с опубликованными данными.

Результаты

Распределение основных групп ароматических соединений

Содержание основных групп ароматических соединений (Σ фенантронов, Σ дибензотиофенов, Σ ароматических стероидов) рассчитаны двумя способами: 1) согласно методике (Конторович и др., 2004) за 100% принята сумма голаядерного фенантрена, голаядерного дибензотиофена, их метилзамещенных гомологов, моноароматических стероидов состава C_{27} - C_{30} , триароматических стероидов состава C_{20} - C_{21} и C_{26} - C_{28} ; 2) за 100% принята сумма всех идентифицированных соединений, включая ди- и триметилфенантроны, ди- и триметилдибензотиофены, а также соединения 1-метил-7-изопропил-фенантрен (ретен) и 1,1,7,8-тетраметил-1,2,3,4-тетрагидрофенантрен (ТМТГФ). Как показал анализ результатов оценки (табл. 1), значения содержаний ароматических соединений в обоих случаях сопоставимы. В практике геохимических исследований, как правило, применяется 1 способ расчета, поэтому для характеристики распределения основных групп ароматических соединений (Σ фенантронов, Σ дибензотиофенов, Σ ароматических стероидов) значения их относительных содержаний представлены в этом варианте. Для выявления особенностей состава и строения внутри каждой из основных групп



Рис. 1. Обзорная схема территории исследования

Скважина (Кол-во образцов)	R^0_{vt} , % (по Фомину А.Н.)	Градация катагенеза	1 способ расчета (по (Конторович и др., 2004))			2 способ расчета		
			$\Sigma\Phi$	$\Sigma\text{ДБТ}$	MAC+TAC	$\Sigma\Phi$	$\Sigma\text{ДБТ}$	MAC+TAC
Среднеюлжавская-10 (58 обр.)	0,62	ПК ₃ -МК ₁ ¹	(8,7 ÷ 63,7)/ 37,7	(2,0 ÷ 17,1)/ 7,5	(31,9 ÷ 89,3)/ 54,9	(15,7 ÷ 60,5)/ 41,6	(0,0 ÷ 15,4)/ 6,9	(34,7 ÷ 82,2)/ 51,6
Пельгинская-2 (53 обр.)	0,63		(26,4 ÷ 65,3)/ 49,5	(3,6 ÷ 15,6)/ 8,5	(23,8 ÷ 70,0)/ 42,0	(20,0 ÷ 69,0)/ 50,5	(3,1 ÷ 15,2)/ 8,1	(22,5 ÷ 76,5)/ 41,4
Арчинская-47 (67 обр.)	0,61-0,63		(23,3 ÷ 68,6)/ 43,3	(11,7 ÷ 35,0)/ 25,7	(10,8 ÷ 64,3)/ 31,0	(36,8 ÷ 69,0)/ 46,9	(13,8 ÷ 34,5)/ 26,2	(5,9 ÷ 45,9)/ 27,0
Южно-Майская-413 (97 обр.)	0,65		(41,8 ÷ 80,1)/ 57,2	(6,4 ÷ 29,2)/ 18,4	(2,7 ÷ 49,3)/ 24,4	(43,8 ÷ 79,0)/ 58,9	(9,4 ÷ 29,0)/ 18,8	(2,2 ÷ 40,8)/ 22,3
Западно-Квензерская-4 (65 обр.)	0,76-0,78	МК ₁ ²	(50,7 ÷ 85,7)/ 79,9	(12,1 ÷ 25,0)/ 17,0	(1,6 ÷ 5,1)/ 2,8	(51,6 ÷ 85,4)/ 80,0	(12,7 ÷ 24,3)/ 17,5	(1,4 ÷ 3,2)/ 2,1

Табл. 1. Содержание основных групп ароматических соединений в битумоидах баженовской свиты Томской области. Примечание: $\Sigma\Phi$ – сумма фенантронов, $\Sigma\text{ДБТ}$ – сумма дибензотиофенов, MAC – моноароматические стероиды состава C₂₇-C₃₀, TAC – триароматические стероиды состава C₂₀-C₂₁ и C₂₆-C₂₈. Разброс значений: (min ÷ max) / среднее.

количественная оценка проведена по всем идентифицированным соединениям.

Основными компонентами нафтно-ароматических фракций битумоидов баженовской свиты Томской области являются фенантроны и ароматические стероиды (табл. 1, рис. 2), при этом их соотношение существенно меняется в зависимости от степени катагенетической преобразованности органического вещества. Так, в незрелом/слабозрелом органическом веществе баженовской свиты из разреза скважины Среднеюлжавская-10 (R^0_{vt} = 0,62% по данным А.Н. Фомина) в составе ароматических соединений преобладают ароматические стероиды – до 90%, концентрации которых в образцах из скважин Пельгинская-2 и Арчинская-47 (R^0_{vt} до 0,63%) снижаются в пользу фенантронов (табл. 1). В скважине Южно-Майская-413 (R^0_{vt} = 0,65%) преобладание фенантронов становится все более явным (до 80%). В наиболее преобразованном органическом веществе скважины Западно-Квензерская-4 (R^0_{vt} = 0,76–0,78%) доминируют фенантроны – до 86% (в среднем, 79,9%), содержание ароматических стероидов не превышает 5% (в среднем, 2,8%).

Содержание сероароматических соединений дибензотиофенового ряда в органическом веществе баженовской свиты Томской области изменяется, в среднем, от 7,5 до 25,7% от Σ аром. соединений, что обусловлено условиями накопления органического вещества баженовской свиты и вполне согласуется с палеотектоническими реконструкциями. Согласно исследованиям В.А. Конторовича с коллегами, «в региональном плане на протяжении всей мезозойско-кайнозойской истории Западно-Сибирский осадочный бассейн погружался относительно структур складчатого обрамления» (Конторович и др., 2017), соответственно, баженовская свита в разрезе скважин Арчинская, Южно-Майская, Западно-Квензерская накапливалась в более погруженных (глубоководных) условиях по сравнению с баженовской свитой Пельгинской и Среднеюлжавской площадей.

Сравнительный анализ соотношений основных групп ароматических соединений в битумоидах, извлеченных из открытого и закрытого порового пространства пород баженовской свиты, показал их идентичность. Некоторые отличия наблюдались для битумоидов Среднеюлжавской

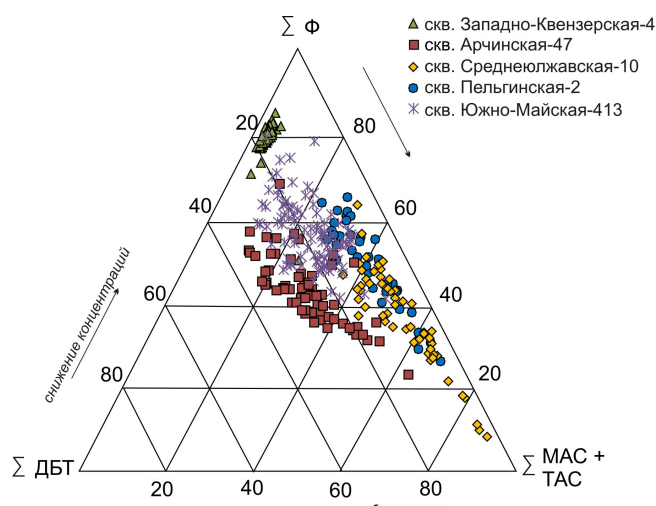


Рис. 2. Тригонограмма распределения основных групп ароматических соединений в битумоидах баженовской свиты Томской области

скважины, извлеченных из образцов грубого дробления (открытая пористость), в составе которых соотношение фенантронов и ароматических стероидов более выравнено. В битумоидах из образцов регулярной формы (открытая пористость), также, как и в образцах мелкого дробления (закрытая пористость), среди ароматических соединений преобладают ароматические стероиды.

Соотношение содержаний фенантронов и дибензотиофенов в геохимической литературе часто используется для определения условий осадконакопления и литологии нефтематеринских пород (Hughes et al., 1995; Конторович и др., 2005; и др.). В работе (Hughes et al., 1995) для этой цели предлагается использовать зависимость отношения голаядерного дибензотиофена к голаядерному фенантрону (ДБТ/Φ) от отношения изопреноидных алканов пристана к фитану (Pr/Ph). В работе (Конторович и др., 2005) вместо отношения ДБТ/Φ применяется отношение $(\text{ДБТ} + \Sigma\text{МДБТ})/(\Phi + \Sigma\text{М}\Phi)$. Для изучаемой коллекции битумоидов баженовской свиты Томской области значения отношения ДБТ/Φ, как и отношения $(\text{ДБТ} + \Sigma\text{МДБТ})/(\Phi + \Sigma\text{М}\Phi)$, всегда < 1, а значения Pr/Ph изменяются в диапазоне от 1 до 3, что соответствует

зоне накопления морских и озерных глинистых пород. Несмотря на то, что в разрезе встречаются и единичные карбонатные прослои ($\text{НО} < 50\%$), по значениям ДБТ/Ф они не выделяются на фоне остальных литотипов.

Распределение ароматических соединений фенантренового ряда

Среди ароматических соединений фенантренового ряда (рис. 3) идентифицированы: голаядерный фенантрен (m/z 178), метилфенантрены (m/z 192), диметилфенантрены (m/z 206) и триметилфенантрены (m/z 220). На рис. 3а показаны пики идентифицированных соединений. Среди триметилфенантренов по фрагментарным ионам $m/z = 223$ и $M + 238$ идентифицировано также соединение 1,1,7,8-тетраметил-1,2,3,4-тетрагидрофенантрен (ТМТГФ), а по $m/z = 219$ и $M + 234$ соединение 1-метил,7-изопропилфенантрен (ретен).

Анализ состава и строения ароматических соединений фенантренового ряда в ароматической фракции битумоидов показал, зависимость распределения голаядерного фенантрена и его моно-, ди- и триметилзамещенных гомологов от степени преобразованности ОВ (рис. 3а, табл. 2).

В незрелом/слабозрелом органическом веществе баженновской свиты из разреза скважин Среднеюлавская-10, Пельгинская-2, Арчинская-47 и Южно-Майская-413 в составе фенантронов доминируют голаядерный фенантрен (25–35% от Σ фенантронов) и метилфенантрены (30–40%).

Содержание диметилфенантронов преимущественно 15–20%, триметилфенантронов – до 15% от Σ фенантронов. Среди триметилфенантронов в этих образцах идентифицированы также частично гидрированный фенантрен – предшественник 1,7,8-триметилфенантрена, промежуточный продукт преобразования трициклических терпанов (Каширцев и др., 2018; Бурдельная, Бушнев, 2021) и ретен (1-метил,7-изопропилфенантрен). Для изучаемой коллекции битумоидов баженновской свиты выполнена количественная оценка относительных концентраций этих трех соединений (рис 3б).

Из рисунка 3б видно, что характер соотношений ТМТГФ, ретена, 1,7,8-триметилфенантрена зависит от фациально-генетических обстановок накопления органического вещества. Так битумоиды Пельгинской и Среднеюлавской скважин характеризуются относительно высоким содержанием 1,7,8-триметилфенантрена – 40–60% и низкой концентрацией ТМТГФ – 20–40%. Образцы Арчинской и Южно-Майской площадей характеризуются низким содержанием 1,7,8-триметилфенантрена (<20%), но высоким содержанием ТМТГФ – 40–80%. Концентрация ретена в обоих случаях, как правило, не превышает 40% (исключение – образцы Южно-Майской скважины, относящиеся к верхней части пачки 4, где согласно (Эдер и др., 2022) часто отмечаются литологические характеристики, отвечающие «окислительным и субокислительным условиям в придонных водах и верхней части осадка»).

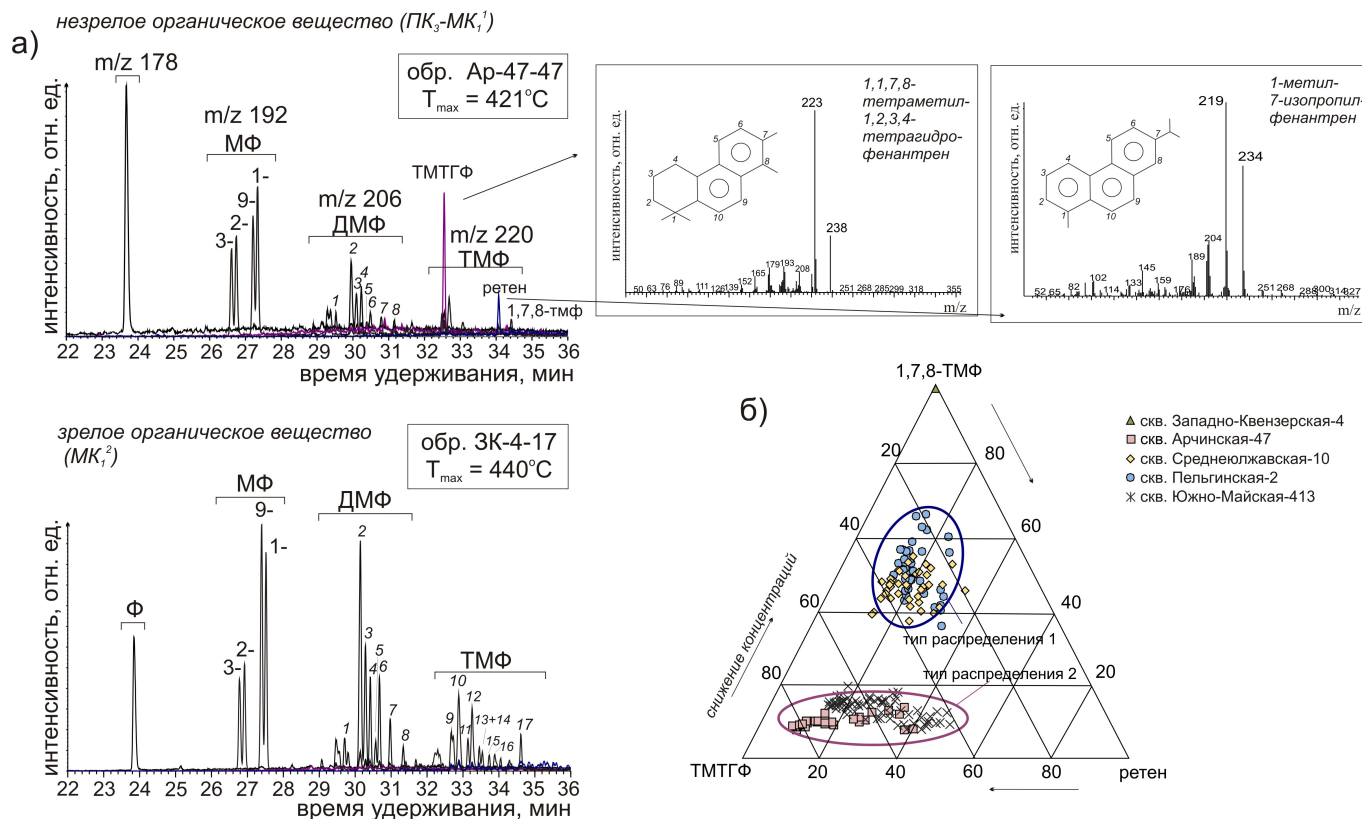


Рис. 3. Типовые хромото-масс-фрагментогаммы фенантронов (а) и тригонограмма распределения относительных концентраций 1,7,8-триметилфенантрена, 1,1,7,8-тетраметил-1,2,3,4-тетрагидрофенантрена и ретена (б) в битумоидах баженновской свиты Томской области. Условные обозначения: Ф – голаядерный фенантрен, МФ – метилфенантрены, ДМФ и ТМФ – ди- и триметилфенантрены: пик 1 – 2,6-, 2,7-ДМФ, пик 2 – 1,3-, 3,9-, 2,10-ДМФ, пик 3 – 1,6-, 2,5-, 2,9-ДМФ, пик 4 – 1,7-ДМФ, пик 5 – 2,3-ДМФ, пик 6 – 1,9-, 4,9-, 4,10-ДМФ, пик 7 – 1,8-ДМФ, пик 8 – 1,2-ДМФ; пик 9 – совместно элюирующие 1,3,6-, 1,3,10- и 2,6,10-ТМФ, пик 10 – 1,3,7-, 2,7,9-, 2,6,9-ТМФ, пик 11 – 1,3,9-, 2,3,6-ТМФ, пик 12 – 1,6,9-, 1,7,9-, 2,3,7-ТМФ, пик 13+14 – 1,3,8-, 2,3,10-ТМФ, пик 15+16 – 1,7,7-ТМФ, пик 17 – 1,7,8-ТМФ (синоним 1,2,8-ТМФ).

Скважина	Концентрация соединений, в % от Σ фенантронов					
	Ф	Σ МФ	Σ ДМФ	Σ ТМФ	ТМТГФ	Ретен
Среднеюлжавская-10	28,6	35,5	18,2	12,4	3,3	2,0
Пельгинская-2	29,3	36,1	18,1	12,2	2,6	1,7
Арчинская-47	29,5	34,4	16,5	6,9	10,1	2,7
Южно-Майская-413	27,5	35,8	18,2	8,0	7,0	3,5
Западно-Квензерская-4	15,7	38,3	33,0	13,1	0	0

Табл. 2. Среднее содержание ароматических соединений фенантронового ряда в битумоидах баженовской свиты Томской области. Примечание: Ф – голаядерный фенантрен, Σ МФ – сумма метилфенантронов, Σ ДМФ – сумма диметилфенантронов, Σ ТМФ – сумма триметилфенантронов (без учета ТМТГФ и ретена), ТМТГФ – 1,1,7,8-тетраметил-1,2,3,4-тетрагидрофенантрен, ретен – 1-метил,7-изопропилфенантрен. Таблица частично (данные по Арчинской, Южно-Майской и Западно-Квензерской скважин) опубликована в работе (Сотнич, Костырева, 2024).

В составе зрелого органического вещества баженовской свиты Западно-Квензерской скважины среди соединений фенантронового ряда преобладают метил- и диметилфенантроны – преимущественно 35–45% и 30–40% от Σ фенантронов соответственно. Концентрация голаядерного фенантрена в этих образцах – 10–20% от Σ фенантронов. Содержание триметилфенантронов, как правило, не превышает 20% от Σ фенантронов, при этом соединения ТМТГФ и ретен в битумоидах отсутствуют.

Среди соединений фенантронового ряда в геохимических исследованиях наиболее интересно с точки зрения нефтяной геохимии распределение метилзамещенных фенантронов, соотношение α - и β -структур которых используется в качестве показателей катагенеза органического вещества. Считается, что с ростом зрелости органического вещества в его составе увеличивается содержание более термодинамически устойчивых β -изомеров (Radke et al., 1982; Radke, 1988; Cassini et al., 1988; и многие другие). В изучаемых битумоидах баженовской свиты Томской области среди метилфенантронов α -изомеры (9- и 1-метилфенантроны) преобладают над β -изомерами (2- и 3-метилфенантроны) в 1,5–2 раза: значения отношения $(9+1\text{-МФ})/(2+3\text{-МФ})$, в среднем, 1,4–1,6 в образцах Среднеюлжавской, Пельгинской, Арчинской и Южно-Майской скважин и 1,9 в образцах Западно-Квензерской скважины. При этом относительные концентрации метилфенантронов возрастают в ряду: $3\text{-МФ} \leq 2\text{-МФ} \ll 9\text{-МФ} \leq 1\text{-МФ}$ (соотношение $2\text{-МФ}/3\text{-МФ}$, в среднем, 0,6–0,7, соотношение $9\text{-МФ}/1\text{-МФ}$, в среднем, 0,8–0,9), за исключением образцов Западно-Квензерской скважины, в которых 9-МФ преобладает ($9\text{-МФ}/1\text{-МФ}$, в среднем, 1,1–1,2).

Значение некоторых молекулярных показателей, основанных на распределении метилфенантронов и широко используемых для определения зрелости органического вещества, показаны в таблице 3. Видно, что для рассматриваемой коллекции битумоидов баженовской свиты показатели не информативны, что было установлено ранее (Гончаров и др., 2004; 2013).

Распределение ароматических соединений дибензотиофенового ряда

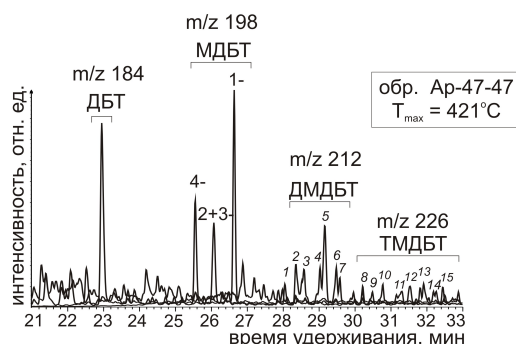
Среди серосодержащих ароматических соединений ряда дибензотиофена идентифицированы голаядерный дибензотиофен (m/z 184), его метил- (m/z 198), диметил- (m/z 212) и триметил- (m/z 226) замещенные гомологи (рис. 4).

Анализ распределения сероароматических соединений дибензотиофенового ряда в битумоидах баженовской свиты Томской области (рис. 4) показал, что среди дибензотиофенов доминируют метилзамещенные структуры – 40–50% от Σ ДБТ (в образцах Западно-Квензерской площади 35–45%). Содержание диметилзамещенных дибензотиофенов в органическом веществе Западно-Квензерской площади изменяется от 30 до 45% от Σ ДБТ (в основном, 35–40%), в остальных образцах – 20–30%. Содержание триметилбензотиофенов во всех битумоидах, как правило, не превышает 15–20% от Σ ДБТ. Концентрации голаядерного дибензотиофена в изучаемой коллекции изменяется в широких пределах: 25–30% от Σ ДБТ в образцах Южно-Майской и Арчинской скважин, 15–25% – в образцах Пельгинской и Среднеюлжавской скважин, 5–15% – в Западно-Квензерской скважине.

Скважина	MPI	MPI-1	MPI-2	PP-1	$(2\text{МФ}+3\text{МФ})/(1\text{МФ}+9\text{МФ})$
Среднеюлжавская-10	0,5	0,5	0,3	0,8	0,6
Пельгинская-2	0,5	0,5	0,3	0,8	0,6
Арчинская-47	0,5	0,5	0,3	0,8	0,7
Южно-Майская-413	0,5	0,6	0,3	0,8	0,7
Западно-Квензерская-4	0,6	0,5	0,3	0,9	0,5

Табл. 3. Средние значения фенантроновых показателей зрелости органического вещества в битумоидах баженовской свиты Томской области. Примечание: Метилфенантроновые индексы (Methylphenanthrene Indices): $\text{MPI} = 1,5 \cdot (2\text{МФ} + 3\text{МФ}) / (0,69 \cdot \text{Ф} + 1\text{МФ} + 9\text{МФ})$ по (Radke et al., 1982); $\text{MPI-1} = 1,89 \cdot (2\text{МФ} + 3\text{МФ}) / (\text{Ф} + 1,26 \cdot (1\text{МФ} + 9\text{МФ}))$ по (Cassini et al., 1988); $\text{MPI-2} = (2\text{МФ} + 3\text{МФ}) / (\text{Ф} + 1\text{МФ} + 9\text{МФ})$ по (Колесников и др., 1991); Фенантроновые параметры (Phenanthrene parameters): $\text{PP-1} = 1\text{МФ} / (2\text{МФ} + 3\text{МФ})$ по (Alexander et al., 1986).

незрелое органическое вещество (ПК₃-МК₁¹)



зрелое органическое вещество (МК₁²)

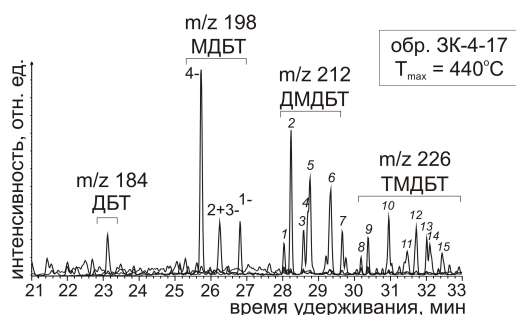


Рис. 4. Типовые хромото-масс-фрагментограммы дибензотиофенов в битумоидах баженовской свиты Томской области. Условные обозначения: ДБТ – голаядерный дибензотиофен, МДБТ – метилдибензотиофены, ДМДБТ и ТМДБТ – ди- и три-метилдибензотиофены: пик 1 – 4,6-ДМДБТ, пик 2 – 2,4-ДМДБТ, пик 3 – 2,6-, 3,6-ДМДБТ, пик 4 – 3,7-ДМДБТ, пик 5 – 1,4-, 1,6-, 1,8-ДМДБТ, пик 6 – 1,2-, 1,3-ДМДБТ, пик 7 – 1,7-, 1,9-, 3,4-ДМДБТ; пики 8-15 – 2,4,6-ТМДБТ, 2,4,8-, 2,4,7-, 1,4,6-, 1,4,8-, 3,4,6-, 2,6,7-, 1,4,7-, 1,3,7-, 3,4,7-ТМДБТ, 1,2,4- и 2,3,7-ТМДБТ (Li et al., 2014).

Среди метилдибензотиофенов (МДБТ) в битумоидах Среднеюлжавской, Пельгинской, Арчинской и Южно-Майской скважин доминирует 1-МДБТ (от 40 до 55% от Σ МДБТ), в Западно-Квензерской скважине концентрации 1-МДБТ не превышают 20% (табл. 4). По мере снижения содержаний 1-МДБТ в составе битумоидов пропорционально увеличивается концентрация 4-МДБТ, содержание 2+3-МДБТ остается на уровне 20% от Σ МДБТ.

Дибензотиофеновое отношение 4-МДБТ/1-МДБТ и дибензотиофеновый индекс ДБТИ хорошо зарекомендовали себя в качестве показателей зрелости органического

вещества (Гончаров и др., 2005; Конторович и др., 2004; Radke, 1988; Schou, Myhr, 1988). Применительно к изучаемой коллекции битумоидов баженовской свиты Томской области эти молекулярные показатели имеют близкие значения для образцов Среднеюлжавской, Пельгинской, Арчинской и Южно-Майской скважин и резко отличаются в пробах Западно-Квензерской скважины, что подтверждает различие в зрелости органического вещества этих двух групп образцов.

Распределение ароматических стероидов

Среди ароматических стероидов в битумоидах баженовской свиты Томской области встречаются структуры с одним (моно-) или тремя (три-) ароматическими кольцами. Среди моноароматических стероидов (m/z 253) идентифицируются соединения состава C₂₇-C₃₀, среди триароматических стероидов (m/z 231) – низкомолекулярные ТАС I состава C₂₀-C₂₁ и высокомолекулярные ТАС II состава C₂₆-C₂₈ (рис. 5).

В образцах Среднеюлжавской и Пельгинской скважин триароматические стероиды (до 50% от Σ аром.соед.) доминируют над моноароматическими (до 20% от Σ аром.соед.), причем это преобладание обеспечивается, главным образом, высокомолекулярными ТАС состава C₂₆-C₂₈ (рис. 5). Отношение ТАС/МАС в этих образцах изменяется от 2 до 5, в среднем, 3. Значения триароматического стеранового индекса (ТАСИ = ТАС I/(ТАС I + ТАС II)) не превышают 0,15.

В образцах Арчинской скважины отмечаются высокие содержания МАС (до 30% от Σ аром.соед.), которые практически в 2 раза доминируют над ТАС (до 15% от Σ аром.соед.). Значения отношения ТАС/МАС в битумоидах Арчинской скважины варьируют от 0,2 до 0,7, в среднем, 0,4. Среди триароматических стероидов преобладают ТАС II: значения ТАСИ, как правило, не превышают 0,2.

В образцах Южно-Майской скважины соотношение МАС и ТАС изменяется по разрезу закономерно: в одних битумоидах (около 2/3 коллекции) отмечается доминирование МАС, в других – преобладание ТАС. Значения отношения ТАС/МАС варьируют от 0,5 до 2,6, в среднем, 0,8. В некоторых образцах (преимущественно в нижней части разреза) концентрации МАС снижаются до уровня ТАС I, в единичных образцах – до фоновых. Значения ТАСИ изменяются от 0,1 до 0,25.

В образцах Западно-Квензерской скважины содержание ароматических стероидов очень низкое – менее 5% от Σ аром.соед., при этом концентрации МАС,

Скважина	Средняя концентрация, в % от Σ МДБТ			4-МДБТ/ 1-МДБТ	ДБТИ
	4-МДБТ	2+3-МДБТ	1-МДБТ		
Среднеюлжавская-10	32,9	18,3	48,8	0,7	0,4
Пельгинская-2	36,9	18,8	44,3	0,8	0,4
Арчинская-47	26,5	22,4	51,1	0,5	0,4
Южно-Майская-413	33,0	20,5	46,5	0,7	0,4
Западно-Квензерская-4	70,3	17,0	12,8	5,7	0,8

Табл. 4. Распределение метилдибензотиофенов в битумоидах баженовской свиты Томской области. Примечание: Молекулярные показатели зрелости органического вещества – метилдибензотиофеновое отношение 4-МДБТ/1-МДБТ согласно (Radke, 1988; Гончаров и др., 2005) и дибензотиофеновый индекс ДБТИ = 2 + 3-МДБТ/ДБТ согласно (Schou, Myhr, 1988; Конторович и др., 2004).

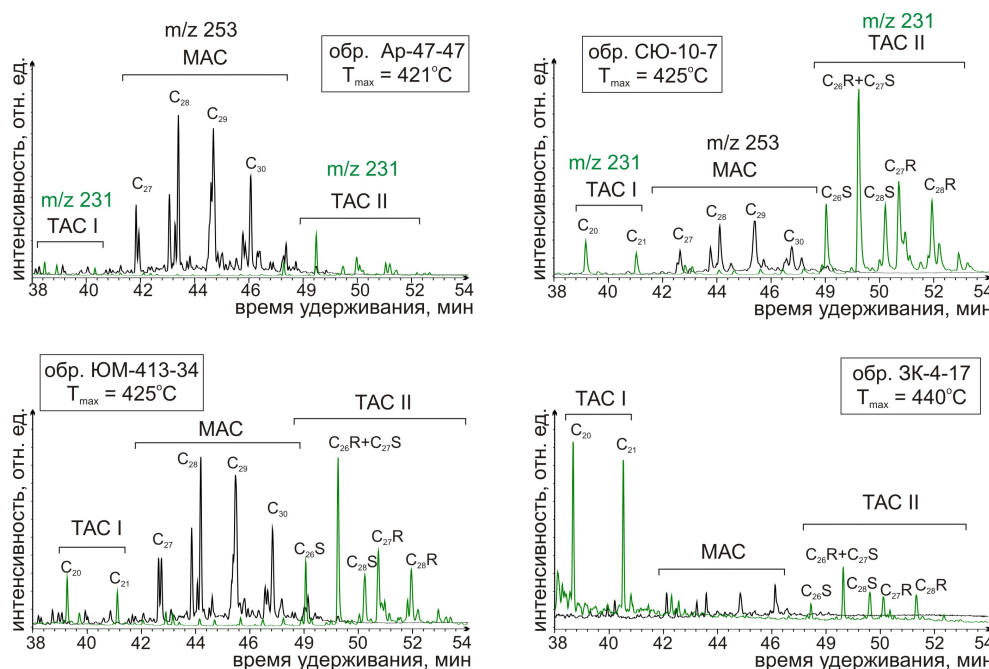


Рис. 5. Типовые хромато-масс-фрагментограммы ароматических стероидов в битумоидах баженовской свиты Томской области. Условные обозначения: MAC – моноароматические стероиды состава C_{27} – C_{30} ; TAC I – триароматические стероиды состава C_{20} – C_{21} , TAC II – триароматические стероиды состава C_{26} – C_{28} .

как правило, $\leq 0,5\%$. Отношение TAC/MAC всегда > 4 (до 20). Среди триароматических стероидов в этих битумоидах преобладает TAC I: значения TAC I изменяются от 0,6 до 0,7.

Обсуждение результатов

Анализ результатов исследований ароматических соединений (фенантронов, дибензотиофенов, ароматических стероидов) в битумоидах баженовской свиты Томской области показал, что на их распределение оказывают влияние как обстановки накопления органического вещества, так и степень его преобразованности.

Органическое вещество баженовской свиты на территории исследования накапливалось в морских обстановках на глубинах 100–200 м (Конторович и др., 2013), что подтверждает и соотношение показателей ДБТ/Ф и Рг/Ph. Тем не менее, более низкое содержание дибензотиофенов, а также другой характер распределения в трехкомпонентной системе ТМТГФ – 1,7,8-ТМФ – ретен в битумоидах Пельгинской и Среднеюлжавской площадей указывают на более мелководные условия. По остальным молекулярным показателям, отличий в фациально-генетических обстановках накопления органического вещества (ОВ) на территории исследования не обнаружено, на них в большей степени влияет степень зрелости ОВ. Согласно результатам проведенных исследований, с увеличением степени зрелости органического вещества с конца протокатагенеза (градация ПК₃) до середины мезокатагенеза (градация МК₁²) в распределении фенантронов, дибензотиофенов и ароматических стероидов происходят направленные изменения:

- В нафтенно-ароматической фракции битумоидов увеличивается относительное содержание фенантронов и дибензотиофенов за счет существенного снижения доли ароматических стероидов. Если в незрелом

органическом веществе концентрации ароматических соединений уменьшаются в ряду MAC + TAC $>$ Ф $>$ ДБТ и/или Ф $>$ MAC + TAC $>$ ДБТ, то в зрелом органическом веществе Ф $>$ ДБТ $>$ MAC + TAC.

- в составе фенантронов и дибензотиофенов возрастает относительное содержание моно-, ди- и триметилзамещенных структур при уменьшении голоядерных соединений. Наиболее заметный рост отмечается в концентрациях диметилзамещенных гомологов: если в незрелом органическом веществе их концентрации на уровне голоядерного фенантрена и голоядерного дибензотиофена, то в зрелом органическом веществе увеличивается более, чем в 2 раза.

- Среди метилфенантронов увеличиваются концентрации α -изомеров (9- и 1-метилфенантроны), считающихся менее термодинамически стабильными по сравнению с β -изомерами (2- и 3-метилфенантроны); это, на первый взгляд, несоответствие можно объяснить тем, что перегруппировка метильных заместителей из α - в β -положение начинает играть ведущую роль лишь после градации МК₂ (Radke, 1988; Cassini et al., 1988; Szczerba, Rospondek, 2010). Это обстоятельство объясняет неинформативность некоторых молекулярных показателей, основанных на распределении метилфенантронов (например, метилфенантеновые индексы MPI, MPI-1, MPI-2), для изученной коллекции образцов баженовской свиты, аквагенное органическое вещество находится на более низкой стадии катагенеза (МК₁¹–МК₁²). Стоит отметить, что преобладание 9- и 1-метилфенантронов над 2- и 3-метилфенантронами наблюдается и в образцах других нефтематеринских отложений, аквагенное органическое вещество которых находится в начале-середине главной фазы нефтеобразования (Каширцев и др., 2018; Конторович и др., 2005; Duda et al., 2020).

• В незрелом/слабозрелом органическом веществе идентифицируется гидрированный предшественник 1,7,8-триметилфенантрена – соединение 1,1,7,8-тетраметил-1,2,3,4-тетрагидрофенантрен (ТМТГФ), который в зрелом органическом веществе отсутствует. Ранее ТМТГФ был идентифицирован и в баженовской свите Северо-Сургутского района в центральной части Западной Сибири (Сотнич, Костырева, 2021, 2024), но в значительно более низких концентрациях, что обусловлено более высокой степенью преобразованности органического вещества на этой территории. Сравнительный анализ распределения ТМТГФ в битумоидах Томского и Северо-Сургутского районов позволил предположить, что это соединение начинает исчезать в конце градации $МК_1^1$ (при T_{max} около 435 °С). К подобному заключению пришли и авторы работы (Бурдельная, Бушнев, 2021), которые идентифицировали ТМТГФ в органическом веществе доманиковых пород и предложили использование отношения ТМТГФ/1,7,8-ТМФ в качестве показателя зрелости. Авторы отмечают, что «поскольку изменение данного соотношения происходит в довольно узком интервале термического созревания ОВ, оно будет уместно при исследовании состава ОВ низких и средних градаций катагенеза...» (Бурдельная, Бушнев, 2021).

• Среди метилдибензотиофенов в незрелом органическом веществе доминирует 1-МДБТ, в зрелом – более термодинамически стабильный 4-МДБТ. Содержание 2+3-МДБТ в изученной коллекции битумоидов всегда ниже относительно остальных метилдибензотиофенов, однако его отношение к голаядерному дибензотиофену (ДБТИ) с ростом катагенеза ОВ растет. Стоит отметить, что оба отношения (4-МДБТ/1-МДБТ и ДБТИ) информативны в качестве показателя зрелости ОВ баженовской свиты, что отмечалось исследователями и ранее (Конторович и др., 2004; Гончаров и др., 2004, 2005 и др.), однако различаются по уровню чувствительности к преобразованности ОВ. Так, отношение 4-МДБТ/1-МДБТ показывает значительно больший разброс значений между зрелым и незрелым ОВ. В отличие от пиролитических и углепетрографических параметров молекулярные показатели более точны, так как «...изомеризационный процесс перехода 1-МДБТ в 4-МДБТ не зависит от происхождения образца и отражает только равновесное состояние, которое обусловлено временем и температурой...» (Гончаров и др., 2004).

• В незрелом органическом веществе баженовской свиты отмечается повышенное содержание моноароматических стероидов (МАС), которое с ростом катагенеза быстро снижается, и на стадии катагенеза $МК_1^2$ концентрации МАС – на уровне фоновых, в некоторых случаях МАС не идентифицируются. Ранее в работе (Конторович и др., 2004) было установлено, что для аквагенного ОВ баженовской свиты, как правило, «наряду с фенантренами значительную роль играют триароматические стероиды» и «...отношение концентраций ТАС/МАС обычно варьирует от 2,0 до 5,0». В той же работе отмечено, что в баженовской свите встречаются «аномальные» образцы, схожие по характеру распределения ароматических соединений с образцами тюменской свиты (высокие концентрации фенантронов, низкие – ароматических

стероидов, преобладание МАС над ТАС), что связывалось с привносом в ОВ отдельных слоев баженовской свиты остатков высшей наземной растительности. Анализ распределения МАС и ТАС в битумоидах баженовской свиты Томской области показал, что относительные содержания ТАС/МАС могут значительно меняться в аквагенном ОВ баженовской свиты и без привноса террагенного ОВ.

• Среди триароматических стероидов в незрелом ОВ отмечается преобладание высокомолекулярных ТАС II состава C_{26} - C_{28} , в зрелом ОВ – ТАС I состава C_{20} - C_{21} . В работе (Конторович и др., 2004) подобная закономерность также была отмечена и на ее основе был предложен «триароматический стерановый индекс зрелости» $ТАСИ = ТАС\ I / (ТАС\ I + ТАС\ II)$ с достаточно сильной корреляционной связью с отражательной способностью витринита. В работах (Конторович и др., 2005; Парфенова, 2015) высказано мнение, что соотношение низкомолекулярных и высокомолекулярных стероидов зависит от окислительно-восстановительных условий накопления и содержания органического вещества в породах, а значит, «ТАСИ следует использовать для оценки степени преобразованности ОВ на этапе катагенеза с большей аккуратностью». Анализ значений показателя ТАСИ в битумоидах баженовской свиты Томской области, а также анализ его зависимости от содержания органического вещества (C_{org}) и Рг/Ph в породе показал, что для данной коллекции использование ТАСИ в качестве показателя зрелости ОВ возможно.

Заключение

Анализ состава и строения ароматических соединений (фенантронов, дибензотиофенов, ароматических стероидов) в органическом веществе баженовской свиты Томской области показал, что основным фактором, контролирующим их распределение, является степень зрелости ОВ. С ростом катагенеза ОВ с градации $ПК_3$ до $МК_1^2$ отмечаются направленные изменения как в соотношении основных групп соединений (увеличение доли фенантронов, уменьшение ароматических стероидов в составе идентифицированных соединений), так и внутри этих групп (уменьшение концентраций голаядерных и увеличение ди- и триметилзамещенных структур, перегруппировка метильных заместителей и т.д.). В практике геохимических исследований для оценки зрелости ОВ широко используется ряд молекулярных показателей (МРІ, МРІ-1, МРІ-2, РР-1, РР-1_{mod}, ДБТИ, 4-МДБТ/1-МДБТ, ТАСИ и др.), однако, как показало проведенное исследование, не все из них одинаково информативны для аквагенного органического вещества баженовской свиты, находящейся на низких и средних стадиях катагенеза. К числу наиболее «чувствительных» к степени зрелости ОВ могут быть отнесены показатели 4-МДБТ/1-МДБТ, ТАСИ, ТАС/МАС, а также ТМТГФ/1,7,8-ТМФ.

Финансирование

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 23-77-01088 (<https://rscf.ru/project/23-77-01088/>).

Литература

- Бурдельная Н.С., Бушнев Д.А. (2021). Новый показатель зрелости в органическом веществе доломитовых отложений. *Геология и геофизика*, 62(2), с. 187–196. DOI: 10.15372/GiG2020110
- Гончаров И.В., Самойленко В.В., Обласов Н.В., Носова С.В. (2004). Молекулярные параметры катагенеза органического вещества пород баженовской свиты Томской области. *Геология нефти и газа*, 5, с. 53–60.
- Гончаров И.В., Самойленко В.В., Носова С.В., Обласов Н.В. (2005). Способ определения зрелых нефтематеринских пород. Патент № 2261438 РФ, МПК7 G 01 N 30/02, G 01 V 9/00. Заявитель и патентообладатель ОАО «ТомскНИПИнефть». № 2004117234/28; заявл. 07.06.2004; опубл. 27.09.05.
- Гончаров И.В., Самойленко В.В., Обласов Н.В., Фадеева С.В. (2013). Катагенез органического вещества пород баженовской свиты юго-востока Западной Сибири (Томская область). *Нефтяное хозяйство*, 10, с. 32–37.
- Долженко К.В., Фомин А.Н. (2022). Информативность фенантроновых показателей зрелости органического вещества в позднем мезокатагенезе и апокатагенезе (на примере сверхглубокой скважины Средневилюйская-27, Восточная Сибирь). *Геохимия*, 67(1), с. 37–46. <https://doi.org/10.31857/S001675252201006X>
- Каширцев В.А., Парфенова Т.М., Головкин А.К., Никитенко Б.Л., Зуева И.Н., Чалая О.Н. (2018). Биомаркеры-фенантроны в органическом веществе докембрийских и фанерозойских отложений и в нефтях Сибирской платформы. *Геология и геофизика*, 59(10), с. 1720–1729. DOI: 10.15372/GiG20181013
- Колесников А.Ю., Найденов О.В., Матвеева И.А. (1991). Реликтовые полициклические ароматические углеводороды как показатели условий генезиса нефтей. *Нефтехимия*, 31(6), с. 723–736.
- Конторович А.Э., Меленевский В.Н., Иванова Е.Н., Фомин А.Н. (2004). Фенантроны, ароматические стераны и дибензотиофены в юрских отложениях Западно-Сибирского нефтегазоносного бассейна и их значение для органической геохимии. *Геология и геофизика*, 45(7), с. 873–883.
- Конторович А.Э., Парфенова Т.М., Иванова Е.Н. (2005). Ароматические углеводороды-биомаркеры и дибензотиофены в битумоидных куонамской свиты (северо-восток Сибирской платформы). *Доклады Академии наук*, 402(6), с. 804–806.
- Конторович А.Э., Конторович В.А., Рыжкова С.В., Шурыгин Б.Н., Вакуленко Л.Г., Гайдебурова Е.А., Данилова В.П., Казанников В.А., Ким Н.С., Костырева Е.А., Москвин В.И., Ян П.А. (2013). Палеогеография Западно-Сибирского осадочного бассейна в юрском периоде. *Геология и геофизика*, 54 (8), с. 972–1012.
- Конторович А.Э., Костырева Е.А., Родякин С.В., Сотнич И.С., Ян П.А. (2018). Геохимия битумоидов баженовской свиты. *Геология нефти и газа*, 2, с. 79–88. DOI: 10.31087/0016-7894-2018-2-79-88
- Конторович В.А., Беляев С.Ю., Конторович А.Э., Красавчиков В.О., Конторович А.А., Супруненко О.И. (2001). Тектоническое строение и история развития Западно-Сибирской геосинеклизы в мезозое и кайнозое. *Геология и геофизика*, 42(11–12), с. 1832–1845.
- Конторович В.А., Аюнова Д.В., Захрямина М.О., Калинина Л.М. (2017). История формирования верхнеюрских залежей углеводородов в юго-восточных районах Западной Сибири (на примере Игильско-Талового месторождения). *Геология и геофизика*, 58(10), с. 1564–1577. DOI: 10.15372/GiG20171009
- Парфенова Т.М. (2015). Геохимия стеранов и триароматических стероидов битумоидов инниканской свиты кембрия (юго-восток Сибирской платформы). *Химия нефти и газа: материалы IX международной конференции*, Томск: изд-во ИОА СО РАН, с. 69–73.
- Сотнич И.С., Костырева Е.А. (2021). Ароматические соединения в битумоидных баженовской свиты севера Хантейской гемиантеклизы. *Георесурсы*, 23(1), с. 42–51. DOI: <https://doi.org/10.18599/grs.2021.1.4>
- Сотнич И.С., Костырева Е.А., Родякин С.В., Рыжкова С.В., Конторович А.Э. (2023). Дифференциация битумоидов баженовской свиты Северо-Сургутского района в ходе генерации и миграции. *Геология и геофизика*, 64(12), с. 1732–1741. DOI: 10.15372/GiG2023145
- Сотнич И.С., Костырева Е.А. (2024). Особенности распределения фенантронов в аквигенном органическом веществе баженовской свиты Западной Сибири. *Нефтегазовая геология. Теория и практика*, 19(2), с. 1–19. https://www.ngtp.ru/rub/2024/9_2024.html
- Фомин А.Н. (2011). Катагенез органического вещества и нефтегазоносность мезозойских и палеозойских отложений Западно-Сибирского мегабассейна. Новосибирск: ИНГ СО РАН, 331 с.
- Чахмахчев А.В., Чахмахчев В.А. (1995). Ароматические сернистые соединения как показатели термической зрелости углеводородных систем. *Геохимия*, 11, с. 1656–1669.
- Эдер В.Г., Костырева Е.А., Юрченко А.Ю., Балущкина Н.С., Сотнич И.С., Козлова Е.В., Замирайлова А.Г., Савченко Н.И. (2019). Новые данные о литологии, органической геохимии и условиях формирования баженовской свиты Западной Сибири. *Георесурсы*, 21(2), с. 129–142. <https://doi.org/10.18599/grs.2019.2.129-142>
- Эдер В.Г., Рыжкова С.В., Дзюба О.С., Замирайлова А.Г. (2022). Литостратиграфия и обстановки седиментации баженовской свиты (Западная Сибирь) в центральном, юго-восточном и северных районах её распространения. *Стратиграфия. Геологическая корреляция*, 30(5), с. 46–74. DOI: 10.31857/S0869592X22050027
- Alexander R., Strachan M.G., Kagi R. I., Van Bronswuk W. (1986). Heating rate effects on aromatic maturity indicators. *Organic Geochemistry*, 10, pp. 997–1003. [https://doi.org/10.1016/S0146-6380\(86\)80038-9](https://doi.org/10.1016/S0146-6380(86)80038-9)
- Cassini F., Gallango O., Talukdar S., Vallejos C., Ehrmann U. (1988). Methylphenanthrene maturity index of marine source rock extracts and crude oils from the Maracaibo Basin. *Organic Geochemistry*, 1–3, pp. 73–89. [https://doi.org/10.1016/0146-6380\(88\)90027-7](https://doi.org/10.1016/0146-6380(88)90027-7)
- Duda J.P., Love G.D., Rogov V.I., Melnik D.S., Blumenberg M., Grazhdankin D.V. (2020). Understanding the geobiology of the terminal Ediacaran Khatyspyt Lagersttte (Arctic Siberia, Russia). *Geobiology*, 18(6), pp. 643–662. DOI: 10.1111/gbi.12412
- Hughes W.B., Holba A.G., Dzou L.I.P. (1995). The ratios of dibenzothiophene to phenanthrene and pristane to phytane as indicators of depositional environment and lithology of petroleum source rocks. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 59(17), pp. 3581–3598. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(95\)00225-0](https://doi.org/10.1016/0016-7037(95)00225-0)
- Li M., Wang T.-G., Shi Sh., Liu K., Ellis G. S. (2014). Benzo[b] naphthothiophenes and alkyl dibenzothiophenes: Molecular tracers for oil migration distances. *Marine and Petroleum Geology*, 57, pp. 403–417. <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2014.06.012>
- Radke M., Willsch H., Leuthaeuser D., Teichmuller M. (1982). Aromatic components of coal: relation of distribution pattern to rank. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 46, pp. 1831–1848. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(82\)90122-3](https://doi.org/10.1016/0016-7037(82)90122-3)
- Radke M. (1988). Application of aromatic compounds as maturity indicators in source rocks and crude oils. *Marine and Petroleum Geology*, 5, pp. 224–236. [https://doi.org/10.1016/0264-8172\(88\)90003-7](https://doi.org/10.1016/0264-8172(88)90003-7)
- Radke M., Welte D.H., Willsch H. (1986). Maturity parameters based on aromatic hydrocarbons: Influence of the organic matter type. *Organic Geochemistry*, 10 (1–3), pp. 51–63. [https://doi.org/10.1016/0146-6380\(86\)90008-2](https://doi.org/10.1016/0146-6380(86)90008-2)
- Schou L., Myhr M.B. (1988). Sulfur aromatic compounds as maturity parameters. *Organic Geochemistry*, 13, pp. 61–66. [https://doi.org/10.1016/0146-6380\(88\)90025-3](https://doi.org/10.1016/0146-6380(88)90025-3)
- Szczerba M., Rospondek M.J. (2010). Controls on distributions of methylphenanthrenes in sedimentary rock extracts: Critical evaluation of existing geochemical data from molecular modelling. *Organic Geochemistry*, 41, pp. 1297–1311. <https://doi.org/10.1016/j.orggeochem.2010.09.009>

Сведения об авторах

Инга Сергеевна Сотнич – кандидат геол.-минерал. наук, старший научный сотрудник, Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука
Россия, 630090, Новосибирск, пр-т акад. Коптюга, д. 3
e-mail: sotnichis@ipgg.sbras.ru

Елена Анатольевна Костырева – кандидат геол.-минерал. наук, старший научный сотрудник, Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука
Россия, 630090, Новосибирск, пр-т акад. Коптюга, д. 3
e-mail: kostyrevaea@ipgg.sbras.ru

Статья поступила в редакцию 12.11.2024;
Принята к публикации 28.02.2025;
Опубликована 20.09.2025

Geochemistry of phenanthrenes, dibenzothiophenes and aromatic steroids in the Bazhenov formation's source rock of the south-east of Western Siberia (Tomsk region)

I.S. Sotnich*, E.A. Kostyрева

Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russian Federation

*Corresponding author: Inga S. Sotnich, e-mail: sotnichis@ipgg.sbras.ru

Abstract. The paper presents the results of studying aromatic compounds (phenanthrenes, dibenzothiophenes, aromatic steroids) in source rock extracts (bitumoids) from the Bazhenov Formation of the Tomsk Region (south-east of Western Siberia, Russia). In addition to holonuclear and monomethyl-substituted structures of the phenanthrene and dibenzothiophene series we also identified their di- and trimethyl-substituted homologues. A comparative analysis of the relative concentrations of the main groups of aromatic compounds calculated by two methods (with and without di- and trimethylphenanthrenes and dibenzothiophenes) showed their identity. The main factor controlling the content and distribution of aromatic compounds has been established as the degree of maturity of organic matter. The most informative molecular maturity indices for the Bazhenov Formation's organic matter whose maturity corresponds to low and medium gradations of catagenesis (PK_3 - MK_1) are the ratios of 4-MDBT/1-MDBT, TASI, TAS/MAS, and TMTGP/1,7,8-TMP.

Keywords: organic matter, bitumoids (rock extracts), aromatic compounds, catagenesis, source rocks, Bazhenov formation, Upper Jurassic, Western Siberia

Acknowledgements

The study was supported by a grant No 23-77-01088 (<https://rscf.ru/project/23-77-01088/>).

Recommended citation: Sotnich I.S., Kostyрева E.A. (2025). Geochemistry of phenanthrenes, dibenzothiophenes and aromatic steroids in the Bazhenov formation's source rock of the south-east of Western Siberia (Tomsk region). *Georesursy = Georesources*, 27(3), pp. 168–178. <https://doi.org/10.18599/grs.2025.3.19>

References

- Alexander R., Strachan M.G., Kagi R. I., Van Bronswik W. (1986). Heating rate effects on aromatic maturity indicators. *Organic Geochemistry*, 10, pp. 997–1003. [https://doi.org/10.1016/S0146-6380\(86\)80038-9](https://doi.org/10.1016/S0146-6380(86)80038-9)
- Burdel'naya N.S., Bushnev D.A. (2021). A new indicator of the maturity of organic matter from domanik deposits. *Russian Geology and Geophysics*, 62(2), pp. 149–156. <https://doi.org/10.2113/RGG20194045>
- Cassini F., Gallango O., Talukdar S., Vallejos C., Ehrmann U. (1988). Methylphenanthrene maturity index of marine source rock extracts and crude oils from the Maracaibo Basin. *Organic Geochemistry*, 1–3, pp. 73–89. [https://doi.org/10.1016/0146-6380\(88\)90027-7](https://doi.org/10.1016/0146-6380(88)90027-7)
- Chakhmakhchev A.V., Chakhmakhchev V.A. (1995). Aromatic sulfur compounds as indicators of the thermal maturity of hydrocarbon systems. *Geochemistry*, 11, pp. 1656–1669. (In Russ.)
- Dolzhenko K.V., Fomin A.N. (2022). Informativeness of the phenanthrene indicators of organic matter maturity at late mesocatagenesis and apocatagenesis: an example of material from superdeep hole

Srednevelyuiskaya 27 in East Siberia. *Geochemistry International*, 60(1), pp. 33–42. DOI: 10.1134/S0016702922010062

Duda J.P., Love G.D., Rogov V.I., Melnik D.S., Blumenberg M., Grazhdankin D.V. (2020). Understanding the geobiology of the terminal Ediacaran Khatyspyt Lagersttte (Arctic Siberia, Russia). *Geobiology*, 18(6), pp. 643–662. DOI: 10.1111/gbi.12412

Eder V.G., Kostyрева E.A., Yurchenko A.Yu., Balushkina N.S., Sotnich I.S., Kozlova E.V., Zamiraylova A.G., Savchenko N.I. (2019). New data on lithology, organic geochemistry and accumulation conditions of the Bazhenov formation in Western Siberia. *Georesursy = Georesources*, 21(2), pp. 129–142. <https://doi.org/10.18599/grs.2019.2.129-142>

Eder V.G., Ryzhkova S.V., Dzyuba O.S., Zamirailova A.G. (2022). Lithostratigraphy and Sedimentation Conditions of the Bazhenov Formation (Western Siberia) in the Central, Southeastern, and Northern Regions of Its Occurrence. *Stratigraphy and Geological Correlation*, 30(5), pp. 334–359. DOI: 10.1134/S0869593822050021

Fomin A.N. (2011). Catagenesis of organic matter and petroleum potential of Mesozoic and Paleozoic deposits of the West Siberian megabasin. Novosibirsk: IPGG SB RAS, 331 p. (In Russ.)

Goncharov I.V., Samoylenko V.V., Nosova S.V., Oblasov N.V. (2005). Patent № 2261438 RF, G 01 N 30/02, G 01 V 9/00. Method for determining mature oil source rocks. Applicant and patentee “TomskNIPIneft”. (In Russ.)

Goncharov I.V., Samoylenko V.V., Oblasov N.V., Fadeeva S.V. (2013). Organic matter catagenesis of the Bazhenov formation rocks in the southeast of Western Siberia (Tomsk region). *Neftyanoe Khozyaystvo*, 10, pp. 32–37. (In Russ.)

Goncharov I.V., Samoylenko V.V., Oblasov N.V., Nosova S.V. (2004). Molecular parameters of organic matter catagenesis in rocks of the Bazhenov Formation, Tomsk Region. *Geologiya nefi i gaza*, 5, pp. 53–60. (In Russ.)

Hughes W.B., Holba A.G., Dzou L.I.P. (1995). The ratios of dibenzothiophene to phenanthrene and pristane to phytane as indicators of depositional environment and lithology of petroleum source rocks. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 59(17), pp. 3581–3598. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(95\)00225-0](https://doi.org/10.1016/0016-7037(95)00225-0)

Kashirtsev V.A., Parfenova T.M., Golovko A.K., Nikitenko B.L., Zueva I.N., Chalaya O.N. (2018). Phenanthrene biomarkers in the organic matter of Precambrian and Phanerozoic deposits and in the oils of the Siberian Platform. *Russian Geology and Geophysics*, 59(10), pp. 1380–1388. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.rgg.2018.09.013>

Kolesnikov A.Yu., Naydenov O.V., Matveeva I.A. (1991). Relict polycyclic aromatic hydrocarbons as indicators of the conditions for the genesis of oils. *Petroleum Chemistry*, 31(6), pp. 723–736. (In Russ.)

Kontorovich A.E., Kontorovich V.A., Ryzhkova S.V., Shurygin B.N., Vakulenko L.G., Gaideburova E.A., Danilova V.P., Kazanenkov V.A., Kim N.S., Kostyрева E.A., Moskvina V.I., Yan P.A. (2013). Jurassic paleogeography of the West Siberian sedimentary basin. *Russian Geology and Geophysics*, 54(8), pp. 747–779. DOI: 10.1016/j.rgg.2013.07.002

Kontorovich A.E., Kostyрева E.A., Rodyakin S.V., Sotnich I.S., Yan P.A. (2018). Geochemistry of Bazhenov Formation bitumoids. *Geologiya nefi i gaza*, 2, pp. 79–88. (In Russ.) DOI: 10.31087/0016-7894-2018-2-79-88

Kontorovich A.E., Melenevskiy V.N., Ivanova E.N., Fomin A.N. (2004). Phenanthrenes, aromatic steranes and dibenzothiophenes in Jurassic deposits of the West Siberian oil and gas basin and their importance for organic geochemistry. *Russian Geology and Geophysics*, 45(7), pp. 873–883.

Kontorovich A.E., Parfenova T.M., Ivanova E.N. (2005). Aromatic biomarker-hydrocarbons and dibenzothiophenes in bitumens of the Kuonamka Formation northeastern Siberian platform. *Doklady earth sciences*, 403(5), pp. 754–756.

Kontorovich V.A., Ayunova D.V., Zakhryamina M.O., Kalinina L.M. (2017). History of Upper Jurassic reservoirs in southeastern West Siberia (case study of Igol'sko-Talovoe oilfield). *Russian Geology and Geophysics*, 58, pp. 1240–1250. <http://dx.doi.org/10.1016/j.rgg.2016.07.008>

Kontorovich V.A., Belyaev S.Yu., Kontorovich A.E., Krasavchikov V.O., Kontorovich A.A., Suprunenko O.I. (2001). Tectonic structure and development history of the West Siberian geosyncline in the Mesozoic and Cenozoic. *Russian Geology and Geophysics*, 42(11–12), pp. 1832–1845. (In Russ.)

Li M., Wang T.-G., Shi Sh., Liu K., Ellis G. S. (2014). Benzo[b] naphthothiophenes and alkyl dibenzothiophenes: Molecular tracers for oil migration distances. *Marine and Petroleum Geology*, 57, pp. 403–417. <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2014.06.012>

Parfenova T.M. (2015). Geochemistry of steranes and triaromatic steroids of bitumoids of the Inican formation of the Cambrian (southeast of the Siberian platform). *Chemistry of Oil and Gas: the IX International Conference*, Russia, Tomsk, pp. 69–73. (In Russ.)

Radke M., Willsch H., Leuthaeuser D., Teichmüller M. (1982). Aromatic components of coal: relation of distribution pattern to rank. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 46, pp. 1831–1848. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(82\)90122-3](https://doi.org/10.1016/0016-7037(82)90122-3)

Radke M. (1988). Application of aromatic compounds as maturity indicators in source rocks and crude oils. *Marine and Petroleum Geology*, 5, pp. 224–236. [https://doi.org/10.1016/0264-8172\(88\)90003-7](https://doi.org/10.1016/0264-8172(88)90003-7)

Radke M., Welte D.H., Willsch H. (1986). Maturity parameters based on aromatic hydrocarbons: Influence of the organic matter type. *Organic Geochemistry*, 10 (1–3), pp. 51–63. [https://doi.org/10.1016/0146-6380\(86\)90008-2](https://doi.org/10.1016/0146-6380(86)90008-2)

Schou L., Myhr M.B. (1988). Sulfur aromatic compounds as maturity parameters. *Organic Geochemistry*, 13, pp. 61–66. [https://doi.org/10.1016/0146-6380\(88\)90025-3](https://doi.org/10.1016/0146-6380(88)90025-3)

Sotnich I.S., Kostyreva E.A. (2021). Aromatic compounds in bitumoids of the Bazhenov Formation in the North of the Khantey hemiantheclise. *Georesursy = Georesources*, 23(1), pp. 42–51. <https://doi.org/10.18599/grs.2021.1.4>

Sotnich I.S., Kostyreva E.A. (2024). Features of phenanthrenes distribution in marine organic matter of the Bazhenov Formation in Western Siberia. *Neftegazovaya Geologiya. Teoriya i Praktika*, 19(2), pp. 1–19. (In Russ.) https://www.ngtp.ru/rub/2024/9_2024.html

Sotnich I.S., Kostyreva E.A., Rodyakin S.V., Ryzhkova S.V., Kontorovich A.E. (2023). Differentiation of the Bazhenov Formation Bitumoids in the North-Surgut Region during Generation and Migration. *Russian Geology and Geophysics*, 64(12), pp. 1443–1450. doi: 10.2113/RGG20234627

Szczerba M., Rospondek M.J. (2010). Controls on distributions of methylphenanthrenes in sedimentary rock extracts: Critical evaluation of existing geochemical data from molecular modelling. *Organic Geochemistry*, 41, pp. 1297–1311. <https://doi.org/10.1016/j.orggeochem.2010.09.009>

About the Authors

Inga S. Sotnich – Cand. Sci. (Geology and Mineralogy), Senior Researcher, Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics of Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences

3, Ak. Koptuyug ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation

e-mail: sotnichis@ipgg.sbras.ru

Elena A. Kostyreva – Cand. Sci. (Geology and Mineralogy), Senior Researcher of the Laboratory of Petroleum Geochemistry, Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics of Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences

3, Ak. Koptuyug ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation

e-mail: kostyrevaea@ipgg.sbras.ru

Manuscript received 12 November 2024;

Accepted 28 February 2025; Published 20 September 2025

© 2025 The Authors. This article is published in open access under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) License (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)