



Distribuição de compostos polares em rochas geradoras avaliadas por FT-ICR MS e sua aplicação como indicadores de maturação térmica

Lucas Ignácio Hespanhol, Laercio Lopes Martins, Georgiana Feitosa da Cruz

Nos últimos anos o campo da petroleômica tem ajudado na caracterização do petróleo, usando a espectrometria de massa de alta resolução em uma gama de estudos geoquímicos. Com relação à maturação térmica, alguns estudos demonstraram que as abundâncias relativas das classes de heteroátomos diminuem, enquanto os hidrocarbonetos aromáticos e os compostos NSO se tornam mais aromáticos e desalquilados com níveis crescentes de maturação do óleo (Hughey *et al.*, 2004, Oldenburg *et al.*, 2014). Esse tipo de estudo ainda não foi utilizado para avaliar a matéria orgânica solúvel extraída de rochas geradoras brasileiras. Assim, propõe-se neste trabalho avaliar o nível de maturação térmica e a distribuição de compostos polares em extratos orgânicos das rochas geradoras de bacias brasileiras por espectrometria de massas de ressonância ciclôtrica de íons com transformada de Fourier (FT-ICR MS). O conjunto de amostras utilizado neste estudo é composto por seis afloramentos da bacia do Paraná, sendo quatro da Formação Irati (AM01, AM02, AM03 e AM04) e duas da formação Ponta Grossa (AM05 e AM06). As amostras de rochas foram previamente analisadas por *Source Rock Analyzer* (SRA) e os extratos foram analisados por cromatografia gasosa com detector por ionização em chama (GC-FID) e por FT-ICR MS utilizando ionização por *electrospray* (ESI) em modo de íons negativo e positivo. Com base na análise de hidrocarbonetos e utilizando-se os parâmetros Pristano/ nC_{17} e Fitano/ nC_{18} obtidos por GC-FID e o $T_{máx}$ obtido por pirólise utilizando SRA, as amostras foram classificadas em dois grupos, de acordo com a maturação térmica: AM01, AM02, AM03 e AM04 como imaturos ($T_{máx} < 440$, e P/nC_{17} e $F/nC_{18} > 7,0$); AM05 e AM06 como maduras ($T_{máx} > 440$ e P/nC_{17} e $F/nC_{18} < 1,0$). Esta classificação está de acordo com trabalhos publicados relatados na literatura. A análise de amostras de rochas por ESI(-) FT-ICR MS mostrou que as classes de heteroátomos O_2 , O_3 , O_4 , NO_2 e NO_3 são, em geral, as classes mais abundantes para amostras da Formação Irati. No entanto, as amostras AM05 e AM06 da Formação Ponta Grossa não possuem classes contendo N e possuem mais de 90% das classes O (O_2 , O_3 , O_4). Amostras da Formação Irati e Ponta Grossa apresentaram composição polar muito distinta, nas quais as amostras com matéria orgânica lenhosa (AM05 e AM06) apresentam maior teor de oxigênio (O_2 , O_3 e O_4). A avaliação da maturação térmica por compostos básicos de N_1 foi possível apenas para amostras da Formação Irati, nas quais a amostra AM02 é provavelmente a menos madura.

Palavras-chave: Maturação térmica, FT-ICR MS, Petróleo.
Instituições de fomento: PIBIC/UENF, PRH20-ANP, LENEP/UENF