

Estudios quimiométricos de grupos funcionales en materiales orgánicos sedimentarios. Implicancias para la generación de los combustibles fósiles.

*Chemometric studies of functional groups in sedimentary organic materials.
Implications for fossil fuels generation.*

Director: D'ANGELO, José Alejandro
Correo Electrónico: joseadangelo@yahoo.com

Co-Director: ALTAMIRANO, Jorgelina Cecilia

Integrantes: ZODROW, Erwin Lorenz; VOLKHEIMER, Wolfgang; CAMI, Gerardo Enrique; LASSA, María Silvina; BORDONARO, Osvaldo Luis; ALCALDE, Cristian Gonzalo; MAMMANA, Sabrina Belén; RAMIREZ, Daniela Andrea.

Palabras Clave: *Paleobioquímica, diagénesis, compresiones, carbón, Espectrometría de Infrarrojo con Transformada de Fourier, Reflectancia Total Atenuada, Cromatografía Gaseosa acoplada a Espectrometría de Masas, Análisis Multivariado*

Resumen Técnico: *Para comprender mejor ciertos aspectos de la geoquímica orgánica de diferentes materiales orgánicos sedimentarios (ej. carbón, restos fósiles con distintos modos de preservación, hidrocarburos fósiles), se requiere el uso combinado de varias técnicas de análisis químico y morfológico. Como continuación de las actividades de investigación comenzadas en 2009, en este proyecto se propone seguir estudiando diversos tipos de muestras sedimentarias y en particular aquellas en las que se ha preservado materia orgánica. Se propone utilizar modernas técnicas instrumentales tales como: Espectrometría de Infrarrojo con Transformada de Fourier (FTIR), Espectrometría de Infrarrojo con Transformada de Fourier por Reflectancia Difusa (DRIFT), Reflectancia Total Atenuada (ATR), Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear de Carbono 13 e Hidrógeno 1 (13C, 1H RMN, respectivamente), Pirólisis-Cromatografía Gaseosa acoplada a Espectrometría de masas (Py-GC-MS), Espectrometría de Fluorescencia de Rayos X Dispersiva en Energía (EDS), Microscopía Electrónica de Barrido (SEM) y Microscopía Óptica (OM). Los tipos de muestras a estudiar incluyen: compresiones, cutículas maceradas naturalmente y cutículas obtenidas por maceración química (procedimiento de Schulze). Se utilizarán también las soluciones ácidas y alcalinas derivadas del procedimiento de Schulze que normalmente son desechadas. Esto permitirá evaluar los cambios sufridos por las compresiones durante la maceración. Con fines comparativos se estudiarán también muestras de carbón y macerales de carbón asociados a los restos fósiles. Para la mejor comprensión de los fenómenos fisicoquímicos que degradan la materia orgánica, se incluirán también muestras de suelos y sedimentos actuales. Esta información, en su conjunto, contribuirá a la mejor comprensión de ciertos aspectos relacionados con la formación del querógeno (precursor del petróleo) y de la diagénesis de los restos fósiles. Las similitudes o diferencias en la composición química (datos de FTIR, DRIFT, EDS, ATR, 13C, 1H RMN y Py-GC-MS) de las muestras estudiadas se evaluarán por medios de métodos*

quimiométricos. Finalmente, se analizarán también las posibles implicancias de la información obtenida en ciertos aspectos relacionados con la generación de los combustibles fósiles. De igual modo se evaluarán las implicancias paleoambientales y quimiotaxonómicas de los resultados obtenidos.

Keywords: *Paelobiochemistry, diagenesis, compressions, coal, Fourier Transform Infrared Spectrometry, Attenuated Total Reflectance, Gas Chromatography-Mass Spectrometry, Multivariate Analysis*

Summary: *In order to better understand certain aspects of the organic geochemistry of several organic sedimentary materials (e.g., coal, fossil remains with different preservation modes, fossil hydrocarbons) the combined utilization of several techniques of chemical and morphological analyses is required. As part of our on-going research activities started in 2009, it is proposed in this project to continue studying several types of sedimentary samples, particularly those preserving organic matter. Suggested is the use of modern instrumental techniques such as: Fourier Transform Infrared Spectrometry (FTIR), Diffuse Reflectance Fourier Transform Infrared Spectrometry (DRIFT), Attenuated Total Reflectance (ATR), ¹³C and ¹H Nuclear Magnetic Resonance (¹³C and ¹H NMR, respectively), Pyrolysis-Gas Chromatography-Mass Spectrometry (Py-GC-MS), Energy Dispersive X-Ray Fluorescence Spectrometry (EDX), Scanning Electron Microscopy (SEM), and Optical Microscopy (OM). Sample types to be studied will include: compressions, naturally macerated cuticles and cuticles obtained by chemical maceration (Schulze's procedure). Acid and alkaline solutions derived from Schulze's technique (normally discarded in purely taxonomic work) will be used in this study, thus allowing us to evaluate the changes that occurred in the compressions during maceration. Coal and coal maceral samples associated with fossil remains will also be studied for comparative purposes. To gain new insights into the physico-chemical phenomena degrading organic matter, soil and (current) sediment samples will be included as well. This information will contribute to a better understanding of some chemical changes related to kerogen formation (oil precursor), and fossil-remain diagenesis. Similarities or differences in the chemical composition (FTIR, DRIFT, EDX, ATR, ¹³C, ¹H RMN, and Py-GC-MS data) obtained for the studied samples will be evaluated through chemometric methods. Finally, the information obtained will be used to analyze certain aspects related to fossil fuels generation. In the same way, paleoenvironmental, and chemotaxonomic implications will be evaluated.*