

ÍNDEX

RESUM DE LA TESI	1
DESCRIPCIÓ DE LES CONQUES	
1.- Conca de Ribesalbes	5
2.- Conca de Mequinensa	11
3.- Conca d'Organyà	17
4.- La Formació de Calaf	27
5.- Conca d'Utrilles	33
Referències bibliogràfiques	40
CAPÍTOL I.- ESTUDI DEL SOFRE	
1.- Estudi del sofre mitjançant el mètode ASTM	
1.1.- Metodologia experimental i resultats obtinguts	47
2.- Estudi de les funcions de sofre mitjançant els mètodes SEM-EDX, XRD i XPS.	
2.1.- Metodologia experimental	50
2.2.- Resultats obtinguts	52
3.- Discussió de resultats	54
4.- Tècnica XANES	
4.1.- Introducció	62
4.2.- Descripció de la tècnica i metodologia emprades	71
4.3.- Mostres estudiades	75
4.4.- Resultats obtinguts	76
4.5.- Discussió de resultats	84
5.- Influència del sofre en la paleoproduktivitat	94
6.- Comparació de resultats: tècniques XPS, ASTM i XANES	98

7.- Tècnica Py-Gc-Ms	
7.1.- Introducció	107
7.2.- Metodologia experimental	109
7.3.- Mostres estudiades	109
7.4.- Resultats obtinguts	110
7.5.- Estimació del sofre orgànic	121
Referències bibliogràfiques	124

CAPÍTOL II .- ESTUDI DE LA FRACCIÓ HÚMICA DE LA LEONARDITA PER PY-GC-MS I PY-TMAH.

1.- Introducció	137
2.- Mecanisme de la piròlisi-metilació	139
2.1.- Aplicació de la piròlisi metilació a substàncies húmiques	141
3.- Metodologia experimental	143
4.- Caracterització dels àcids húmics	144
5.- Estudi de les propietats de les fraccions húmiques per complexar metalls pesants	151
6.- Conclusions	153
Referències bibliogràfiques	154

CAPÍTOL III.- ESTUDI CINÈTIC.

1.- Introducció	160
1.1.- Reaccions heterogènies	161
2.- Estudi cinètic	163
3.- Mètodes cinètics	
3.1.- Paràmetres obtinguts a partir d'una corba	
Mètodes diferencials	173
Mètodes integrals	175
3.2.- Paràmetres cinètics a partir de diferents corbes	
Mètodes diferencials	178
Mètodes integrals	183
4.- Part experimental	
4.1.- Descripció de l'equip termogravimètric	189
4.2.- Mostres estudiades i condicions experimentals	189
5.- Simulació experimental de l'evolució del querogen	191
6.- Resultats obtinguts	
6.1.- Paràmetres obtinguts a partir d'un experiment.	
Mètodes diferencials	199
6.1.1.- Estudi de l'efecte compensació	207
Mètodes integrals	211
6.2.- Càlcul dels paràmetres cinètics a partir de diferents corbes a diferents velocitats d'escalfament	
Mètodes diferencials	214
Mètodes de Kissinger i Friedman	224
Mètodes integrals	226
6.2.1.- Estudi de l'esquema cinètic	233
6.3.- Càlcul de l'energia d'activació com a interval	236
7.- Discussió dels resultats	239
8.- Simulació de les corbes experimentals	
8.1.- Introducció	245
8.2.- Aplicació del programa	245
8.3.- Resultats obtinguts	251
8.4.- Discussió de resultats	259

9.- Model matemàtic NLS	
9.1.- Aplicació del programa	260
9.2.- Resultats obtinguts	262
9.3.- Conclusions	282
10.- Comparació de constants cinètiques	
10.1.- Introducció	283
10.2.- Part experimental	285
10.3.- Resultats obtinguts i conclusions	286
11.- Influència del sofre en la generació d'hidrocarburs.	
11.1.-Introducció	289
11.2.- Resultats	292
11.3.- Conclusions	293
Referències bibliogràfiques	294
CAPÍTOL IV.- ESTUDI DE LA REACTIVITAT.	
1.- Introducció	304
1.1.- Gasificació	305
2.- Part experimental	
2.1.- Mostres	316
2.2.- Mètode experimental	316
3.- Resultats	321
4.- Conclusions	321
Referències bibliogràfiques	322
Conclusions finals	324

*Al meu marit, als meus pares, al
meu avi i germans.*

Lost time is never found again

Benjamin Franklin

AGRAÏMENTS

Voldria expressar el meu agraïment a totes aquelles persones que amb el seu suport m'han ajudat a realitzar aquesta tesi.

En primer lloc, vull expressar el meu agraïment al Dr. Xavier de las Heras i Cisa, director d'aquesta tesi, per la confiança dipositada en mi, per la revisió de la tesi i pels seus consells tant científics com humans que sempre he rebut d'ell.

També vull agrair al Jordi i la Xesca per la seva dedicació en tots aquells moments que els he necessitat. També vull mostrar el meu reconeixement al Hermógenes per ser un excel·lent company de treball i per la seva ajuda i paciència sobretot en l'última fase de la tesi. També vull agrair al Tom i Joanjo per l'ajuda que sempre he rebut d'ells.

La meva gratitud també al Dr. J.C. del Río per la seva valuosa ajuda quan vaig realitzar l'estada a Sevilla i per la revisió de la tesi. També al Dr. Rafael Font per les correccions fetes en el treball de tesi.

També vull mostrar el meu reconeixement a la Llúcia Rexach en la tramitació de la documentació en les diferents fases de la tesi.

També vull expressar el meu agraïment a Manel, Cecili, Ramon i Josep M., companys del departament de Cicles Formatius de Torelló pels seus constants ànims i per facilitar-me l'estada a Nova York.

També en Joan Manyà, per la seva eficiència en les proves termogravimètriques i orientacions rebudes.

Aquesta tesi no s'hauria pogut acabar sense els ànims del meu marit, el Joan i els meus pares. Els hi vull agrair el seu recolzament moral que he rebut d'ells en tot moment.

A totes aquestes persones i altres que en algun moment o altre han contribuït, gràcies.

Memòria presentada per Àngels Olivella Costa per tal d'accedir al grau de Doctor Enginyer per la UPC.

Desembre-2000

CONCLUSIONS FINALS