

## ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ И АРОМАТИЧЕСКИЕ УГЛЕВОДОРОДЫ В ЭКСТРАКТАХ СПЕКАЮЩИХСЯ УГЛЕЙ

*Бутузова Л.Ф., Vechtel A., Шакир Ш.М., Бутузов Г.Н., Кипря А.В.*

Донецкий национальный технический университет, Украина  
Институт физико-органической химии и углехимии НАН Украины

*Методами жидкостной хроматографии и газо-хромато-масс-спектрометрии показано различие в составе экстрактов, полученных из жирных углей восстановленного и слабовосстановленного типов.*

Для повышения экологической безопасности процессов переработки твердых горючих ископаемых (ТГИ) и минимального образования вредных гетероатомных веществ, прежде всего, азот-, кислород- и серосодержащих гетероциклических соединений, ароматических углеводородов различной степени полимеризации в целевых продуктах и выбросах производства, необходима разработка научных основ этих процессов.

Экстракция является одним из самых прогрессивных методов исследования состава и молекулярной структуры ТГИ, так как позволяет выделить и исследовать растворимые в различных растворителях вещества и продукты, полученные в результате их переработки.

Цель данной работы – установление различий в составе экстрактов, полученных из спекающихся углей разных типов по восстановленности.

В настоящей работе выполнено сравнительное изучение двух пар изометаморфных углей марки Ж различных генетических типов (*a* и *b*) методами экстракции, хроматографии и газо-хромато-масс-спектрометрии. Экстракты углей в дихлорметане были получены в Dionex ASE 200 экстракторе при 75<sup>0</sup>С и давлении 50 бар. Затем предварительно высушенные экстракты экстрагировали смесью н-гексана и дихлорметана (80:1) с целью осаждения асфальтенов. Для выделения полярных гетеросоединений, ароматических и насыщенных углеводородов растворимые в н-гексане продукты разделяли методом жидкостной хроматографии на силикагеле. В свою очередь фракции ароматических и насыщенных углеводородов анализировали методом газо-хромато-масс-спектрометрии на спектрометре Finnigan MAT GCO. Температура процесса изменялась от 70 до 300 °С при скорости нагрева – 4 °С в минуту с изотермической выдержкой в течение 15 минут.

Полученные данные по составу алифатических и ароматических фракций исследуемых экстрактов отражены в таблице 1. Как видно из таблицы, выход дихлорметанового экстракта из углей типа *b* выше, чем из углей типа *a*. Количество асфальтенов, являющихся очень реакционноспособной частью экстрактов, выше для углей слабовосстановленного типа. Относительное содержание ароматических

углеводородов выше для образцов типа **в**, что соответствует их способности формировать более спекшиеся полукокс и коксы.

Анализируя данные ГХ-МС (табл. 2), можно заключить, что экстракты из углей восстановленного типа отличаются более высоким содержанием стеранов, гопанов (биомаркеров, т. е. соединений, соотнесенных с определенными структурными группами исходного биологического материала), дибензотиофена, дибензофурана в сравнении с экстрактами из слабовосстановленных углей. Эти данные показывают количественную разницу между выходом продуктов из разных углей, которая особенно видна для кислород-, серосодержащих компонентов и ароматических углеводородов (табл.1). Наибольшую опасность представляют полициклические ароматические углеводороды (ПАУ).

Таблица 1. Характеристика экстрактов, полученных из углей разных генетических типов

№	Тип	$C_{орг}$ , вес. %	Выход экстракта ( $CH_2Cl_2$ ), мг/г $C_{орг}$	Относительное содержание асфальтенов, %	Относительное содержание ароматических углеводородов, %	Относительное содержание алифатических углеводородов, %	(N+S+O), %
1	<b>a</b>	87,8	1,88	59	19	13	9
2	<b>a</b>	87,4	2,08	68	12	6	14
1'	<b>в</b>	87,3	2,43	53	24	11	12
2'	<b>в</b>	83,6	2,94	64	15	6	14

Установлено наличие корреляционной связи между содержанием органической серы и относительным содержанием биомаркеров - хопанов и стеранов (Рис.1), что свидетельствует об исключительно важной роли серы в структуре и реакционной способности углей.

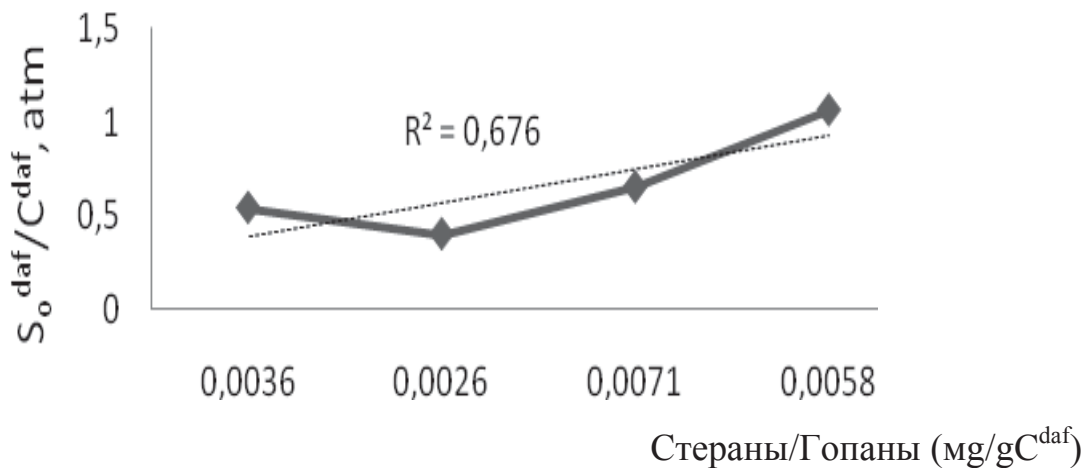


Рисунок 1. Геохимическая корреляция между  $S_o^{daf}/C^{daf}$  и отношением Стераны/Гопапы

Таблица 2. Результаты ГХ-МС ,  $\mu\text{г/г } C_{\text{орг}}$ 

№ пика	Идентифицированные компоненты	Образцы углей			
		1	2	1'	2'
1	Сумма n-Алканы (n-Alkanes)	8,95	4,60	8,58	8,89
2	Пристаны / n-C <sub>17</sub>	1,24	1,15	1,20	1,28
3	Фитаны / n-C <sub>18</sub>	0,40	0,78	0,57	0,82
4	Пристаны / Фитаны (Pri / Phy)*	2,73	2,12	1,78	1,46
5	C <sub>27</sub> Стераны	0,10	0,09	0,75	0,41
6	C <sub>28</sub> Стераны	0,09	0,05	0,35	0,11
7	C <sub>29</sub> Стераны	0,23	0,21	1,20	0,76
8	$\alpha\beta$ Гопаны	0,57	0,47	1,85	1,24
9	$\beta\alpha$ Гопаны	0,22	0,09	0,70	0,56
10	Стераны / Гопаны	0,54	0,40	0,65	1,06
11	Дитерпеноиды (Насыщ.)	0,53	0,23	0,42	0,17
12	Дитерпеноиды (Аром.)	2,12	1,41	1,61	2,77
13	Дитерпеноиды (Насыщ.+Аром)	2,64	1,63	2,03	2,95
14	Дибензофуран (DBF)	1,83	1,92	2,23	3,89
15	Дибензотиофен (DBT)	0,83	1,01	0,94	4,95