

Сравнительный анализ структуры углей различных стадий метаморфизма по данным ЯМР ^{13}C

© Лыршиков*⁺ Сергей Юрьевич и Сотникова Лариса Владимировна
Федеральный исследовательский центр угля и углехимии СО РАН. пр. Советский, 18.
г. Кемерово, 650025. Кемеровская область. Россия. Тел.: (3842) 363739. E-mail: serstud@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: твердотельная ^{13}C ЯМР спектроскопия, угли, стадия метаморфизма.

Аннотация

В работе методом кросс-поляризации с вращением под магическим углом и развязкой от протонов (CPMAS) ЯМР ^{13}C спектроскопии получены количественные данные о распределении углерода по структурным фрагментам и проведен расчет степени ароматичности (f_a) некоторых образцов углей различных сибирских месторождений широкого ряда метаморфизма. Все угли, использованные в работе, охарактеризованы стандартными методами (технический и элементный анализ). Определены оптимальные параметры импульсной программы для регистрации спектров углей. Для получения количественных данных проведено моделирование спектров. Модель спектра включала от 9 до 13 компонент в зависимости от стадии метаморфизма углей. Построены зависимости степени ароматичности и суммы кислородсодержащих функциональных групп от стадии метаморфизма угля. Полученные результаты показывают, что структура углей закономерно изменяется в зависимости от стадии их метаморфизма. Выявленные взаимосвязи структуры и свойств углей в совокупности с параметрами их реакционной способности могут обеспечить безопасное поведение углей в процессах добычи и переработки, а так же при определении возможных путей использования исследованных образцов угля как ценного химического сырья.