EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. KEEMIA
ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ХИМИЯ
PROCEEDINGS OF THE ACADEMY OF SCIENCES OF THE ESTONIAN SSR. CHEMISTRY

1986, 35, 1

https://doi.org/10.3176/chem.1986.1.04

УДК 662.67 : 66.060

В. ПЛАТОНОВ, О. КЛЯВИНА, Нина ТАБОЛЕНКО, Л. ИВЛЕВА

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НЕЙТРАЛЬНЫХ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ ПЕРВИЧНЫХ СМОЛ БУРОГО УГЛЯ КАНСКО-АЧИНСКОГО БАССЕЙНА. 1

(Представил И. Клесмент)

Цель работы — исследование структуры нейтральных кислородсодержащих соединений (НКС), выделенных из смол термодеструкции бурого угля Березовского месторождения Канско-Ачинского бассейна в условиях, исключающих высокотемпературный пиролиз парогазовых продуктов.

Первичная смола получена на установке [1] и подвергнута групповому анализу [2]. Выход НКС — 15,5% (мас. от безводной смолы).

Характеристика молекулярной структуры исходных НКС составлена на основании обобщения данных ИК-, УФ- и ^{1}Н-ЯМР-спектроскопии, хромато-масс-спектрометрии, подтвержденных результатами элементного и функционального анализов, величиной молекулярной массы.

Установлено, что первичные буроугольные НКС представляют собой сложную многокомпонентную смесь соединений различных классов, углеродный скелет которых построен из ароматических, в меньшей степени нафтеновых циклов, с большим вкладом длинных алифатических цепей, в том числе содержащих непредельные связи. Из функциональных групп преобладают кетонные (алифатические и алкилароматические), сложноэфирные, лактонные, хиноидные, алкоксильные и гидроксильные группы, кислород и азот в составе гетероциклов.

Принимая во внимание сложность состава и полифункциональный характер НКС, было принято решение разделить их сначала методом колоночной жидкостной хроматографии на более однородные как по размеру молекул, так и по функциональному составу и типу углеродного скелета элюаты, а затем к последним применить тонкослойную хроматографию (ТСХ). Оба метода являются мягкими, не вызывающими искажений в структуре исходных соединений.

Исходные НКС подвергали вакуумной ректификации с отделением фракции с $T_{кип}$ ниже 150 °С, которую анализировали методом капиллярной газожидкостной хроматографии на приборе «Hewlett-Packard 5840A». Колонка капиллярная, кварцевая (длиной 50 м и диаметром 0,25 мм) с OV-101, газ-носитель — аргон.

Применение стандартных соединений и индексов Ковача позволило идентифицировать:

1. Кетоны (75,13% мас.): ацетон, метилэтилкетон, диэтилкетон, пентанон-2, гексанон-2, изогексанон-2, октанон-2, изооктанон-2, нонанон-2, изононанон-2, деканон-2, изодеканон-2, додеканон-2, изододеканон-2, циклопентанон, 2-метилциклопентанон, циклогексанон, флуоренон, ацетофенон, 2-метилацетофенон, 3-метилацетофенон, 4-метилацетофенон, 2,3-, 2,4-, 2,5-диметилацетофенон, пропиофенон, 2-метилпропиофенон,

4-метилпропиофенон, 2,3-, 2,4-, 3,4- и 3,5-диметилпропиофенон, бутирофенон, бензофенон.

2. Спирты (12,22% мас.): циклогексанол, 4-метилциклогексанол, гептанол-1, октанол-1, изооктанол-1, нонанол-1, изононанол-1, деканол-1, ундеканол-1, додеканол-1, тридеканол-1, бензиловый спирт.

3. Эфиры (0,74% мас.): анизол, фенетол, бензилацетат, 2- и 4-толилацетат, дифенилоксид.

4. Лактоны (0,45% мас.): бутиролактон, валеролактон.

5. Производные бензофурана (3,76% мас.): бензофуран, 1-метилбензофуран, 3-метилбензофуран, дибензофуран, 1-метилдибензофуран, 2-метилдибензофуран, 3-метилдибензофуран, 1,2- и 2,3-бензодифениленоксид.

6. Углеводороды (0,65% мас.): азулен, инден, дурол.

7. Неидентифицированные (7,05% мас.).

НКС с $T_{кип}$ выше 150° путем элюирования *н*-гексаном распределялись на четырехсекционной хроматографической колонке со следующей последовательностью сорбентов: целлюлоза, силикагель DF-5, оксид алюминия(III) нейтральный, целит-545. Элюирование колонки гексаном продолжали до тех пор, пока коэффициент преломления элюата не становился равным коэффициенту преломления растворителя. Затем колонку разъединяли на секции, и НКС, удерживаемые каждым из сорбентов, элюировали растворителями в соответствии со схемой анализа (рис. 1). Получили 15 элюатов, характеристику которых составляли по результатам ИК-, УФ- и ^{1}H-ЯМР-спектроскопии, элементного и функционального анализов, криоскопии.

При этом выявлено следующее:

1. Соединения элюата 1 представлены поликонденсированной ароматикой очень высокой степени непредельности. Установлено присутствие терпенов. Из кислородсодержащих функциональных групп, присущих данному элюату, доминирующими являются кетонные и фенольные. Азот, в основном, в составе гетероциклов.

2. Элюат 2.1 представлен длинноцепочечной ароматикой (возможно, и изопреноидами и терпенами). Из кислородных групп обнаружены кетонные и хиноидные. В элюате 2.2 присутствуют сложноэфирные и лактонные группы. Азот в составе элюатов 2.1 и 2.2 практически отсутствует.

3. Элюат 3 по типу углеродного скелета построен из ароматических колец, алкильные заместители, как правило, короткие. Заметную долю элюата составляют терпеновые структуры. Высоким является содержание циклических кетонов. Идентифицирован гетероциклический азот.

4. Соединения элюата 4 весьма близки по типу углеродного скелета к элюату 3. Различия отмечены только в количественном содержании функциональных групп.

5. Элюат 5 содержит в себе высококонденсированные, высокоароматизированные структуры исключительно высокой степени непредельности. Наибольшую интенсивность имеют полосы поглощения фенольных гидроксилов, сложных эфиров и лактонных циклов. Весьма существенен вклад азота, преимущественно в гетероциклической форме с преобладанием пиррольных циклов, возможно присутствие амидных и других форм.

6. Для соединений элюата 6 характерно высокое содержание терпеновых и иных непредельных структур. Выделяются полосы поглощения гидроароматических компонентов и хиноидных групп, а также гетероциклического кислорода и лактонных циклов.

7. Элюат 7 представлен, в основном, ароматическими циклами с заместителями, имеющими кратные связи. Особенностью элюата является высокая концентрация гетероциклического кислорода.

8. Соединения элюата 8 близки по составу к элюату 7, но имеют пониженную степень непредельности, повышенные ароматичность и степень конденсации, концентрация кетонных и фенольных групп значительно выше, чем в элюате 7. Из форм азота отмечается гетероциклическая и, возможно, лактамная.

9. Элюаты 9 и 10 весьма близки по составу. Это высокоароматизированные структуры исключительно высокой степени непредельности. Наибольшую интенсивность имеют полосы поглощения фенольных гидроксилов, сложноэфирных групп и лактонных циклов. Азот преимущественно в гетероциклах с преобладанием пирролов, возможно присутствие амидов.

10. Элюат 11.1 резко отличается от других отсутствием ароматики и наличием длинноцепочечных алифатических кетонов, преимущественно нормального строения, кетонов жирного ряда с олефиновыми связями и сложноэфирными группами.

11. У элюата 11.2 высокое содержание ароматики и намного выше степень непредельности, чем у элюата 11.1. Характерным для данного элюата является присутствие дикетонов, значительна роль лактонов. Азот в элюатах 11.1 и 11.2 отсутствует.

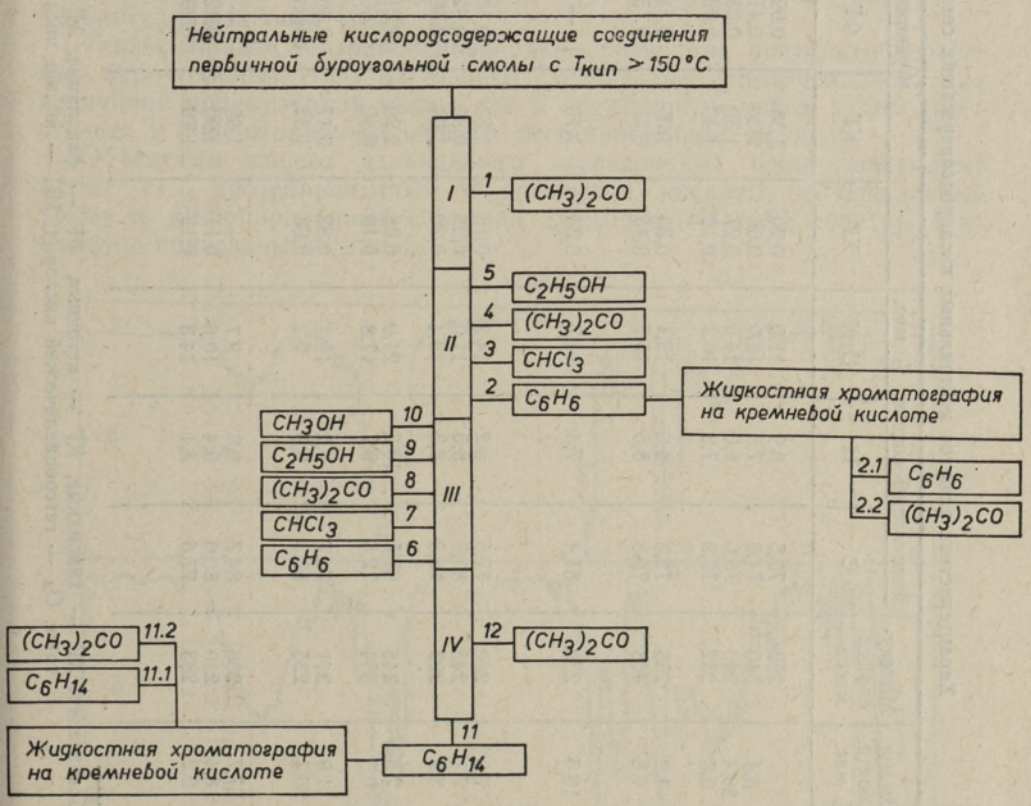


Рис. 1. Схема разделения нейтральных кислородсодержащих соединений первичной каменноугольной смолы.
I — целлюлоза, II — силикагель DF-5, III — оксид алюминия(III) нейтральный, IV — целит-545.

Таблица 1

Характеристика элюатов нейтральных кислородсодержащих соединений первичной буроугольной смолы

Номер элюата	Выход элюата, % мас.	Молекулярная масса	Элементный состав, % мас.			Функциональный состав, г-экв/моль							Степень ароматичности	Тип конденсации
			C	H	O, N	ХГ	КГ	ФГ	АГ	СЭГ, ЛК	$O_ц$	ИЧ		
Исходные		252	79,5	8,9	11,6	0,20	1,38	0,09	0,06	0,12	0,10	1,33	0,35	
1	8,4	340	74,5	7,5	18,0	0,06	2,30	0,41	0,04	0,22	0,10	2,69	0,89	линеарный
2	26,4	240	78,0	8,0	14,0	0,27	1,30	0,03	0,07	0,05	0,15	1,80	0,40	„
3	6,5	232	75,9	7,9	16,2	0,10	1,40	0,09	0,10	0,12	0,14	0,63	0,65	ангулярный
4	1,9	258	72,3	8,6	19,1	0,30	1,25	0,11	0,11	0,03	0,02	1,80	0,66	„
5	0,3	468	75,8	8,5	15,7	0,45	0,20	0,75	0,30	0,40	0,10	4,30	0,72	пери- и ангулярный
2.1	18,5	230	81,4	7,4	11,2	0,34	1,10	—	0,05	—	0,21	1,75	0,38	моно- и бициклические структуры
2.2	7,9	260	77,5	8,2	14,3	0,10	1,83	0,10	0,08	0,16	—	1,90	0,46	линеарный
6	7,1	243	80,5	8,5	11,0	0,95	0,90	0,02	0,05	0,21	0,25	3,17	0,32	„
7	3,2	229	78,3	8,3	13,4	0,20	1,04	0,10	0,13	0,14	0,30	1,84	0,38	ангулярный
8	7,5	248	67,5	10,6	21,9	0,08	2,20	0,21	0,10	0,03	0,08	0,35	0,45	„
9	0,5	354	72,5	9,7	17,8	0,10	0,40	0,60	0,12	0,21	0,18	3,13	0,60	пери- и линеарный
10	1,9	311	74,7	6,2	19,1	0,32	0,17	0,80	0,15	0,28	0,25	4,60	0,69	линеарный
11	36,1	235	83,3	9,5	7,2	0,03	1,32	следы	0,02	0,14	—	0,32	0,08	нециклические структуры
11.1	27,7	238	84,7	9,6	5,7	—	1,09	—	—	0,13	—	0,29	0,01	„
11.2	8,4	210	80,0	9,4	10,6	0,11	1,90	0,02	0,09	0,18	—	0,40	0,30	линеарный
12	0,2	283	77,6	8,1	14,3	0,12	1,76	0,10	0,30	0,10	0,05	2,20	0,68	линеарный (малоконденсированные)

Условные обозначения: ХГ — хиноидные, КГ — кетонные, ФГ — фенольные, АГ — алкоксильные, СЭГ — сложноэфирные группы; ЛК — лактоны, $O_ц$ — гетероциклический кислород, ИЧ — иодное число.

12. Соединения элюата 12 характеризуются высокой степенью непредельности. Ароматике, входящей в его состав, свойственна высокая замещенность. Повышенной интенсивностью отличаются полосы поглощения алкоксильных групп.

Молекулярная масса элюатов изменяется от 210 до 468. Основу функциональных групп составляют кетонные, содержащиеся в количестве более одной карбонильной группы на среднестатистическую молекулу (табл. 1).

Фенольные группы концентрируются в этанольных и метанольных элюатах (рис. 1, табл. 1), где их содержание находится в пределах 0,60—0,80 г-экв/моль; в большинстве же элюатов не превышает 0,41 г-экв/моль.

В равной степени малохарактерными для буроугольных НКС являются гетероциклический кислород, алкоксильные и сложноэфирные группы, лактоны. Хиноидные группы для большинства элюатов определены лишь в количестве от 0,03 до 0,45 г-экв/моль, повышенной их концентрацией выделяется только элюат 6 — 0,95 г-экв/моль. Величина иодного числа изменяется от 0,29 до 4,60 г-экв/моль, что намного выше аналогичного показателя для каменноугольных НКС [3].

Исходя из относительной интенсивности полос поглощения ароматики и гидрированных колец была определена средняя степень ароматичности элюатов: наименее ароматичным является элюат 11.1 (0,01), наиболее — элюат 1 (0,89).

ИК- и УФ-спектроскопия показали доминирование линеарного типа конденсации колец в элюатах НКС, хотя имеются и ангулярный, и периангулярный типы (табл. 1).

Таким образом, разработанная схема позволила разделить первичные буроугольные НКС на элюаты, значительно различающиеся как величиной молекулярной массы, так и структурным типом углеродного скелета и содержанием различных функциональных групп.

Объектами нашего дальнейшего исследования были гексановый элюат 11.1, десорбированный с кремневой кислоты, и бензольный элюат 6, десорбированный с оксида алюминия(III). ИК-спектры этих элюатов приведены на рис. 2.

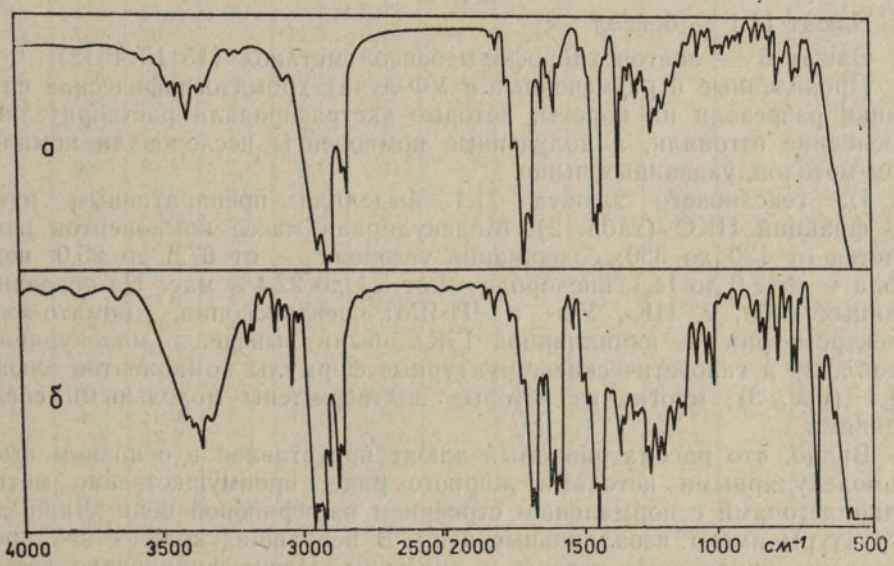


Рис. 2. ИК-спектры элюатов нейтральных кислородсодержащих соединений: *а* — гексановый 11.1, *б* — бензольный 6.

Таблица 2

Характеристика соединений элюата 11.1

Номер фракции	Молекулярная масса	Элементный состав, % мас.			Функциональный состав, г-экв/моль			Молекулярная формула
		С	Н	О	КГ	СЭГ	ИЧ	
1	150	78,9	10,5	10,6	0,30	—	—	$C_{9,9}H_{15,8}O_{1,0}$
2	161	79,5	10,8	9,7	0,78	—	—	$C_{10,7}H_{17,4}O_{1,0}$
3	166	79,2	10,7	10,1	0,74	—	—	$C_{11,0}H_{17,8}O_{1,1}$
4	130	81,8	7,6	10,6	0,92	—	—	$C_{8,9}H_{9,9}O_{0,9}$
5	154	76,9	12,8	10,3	0,90	—	—	$C_{9,9}H_{19,7}O_{1,0}$
6	159	77,9	11,7	10,4	0,88	—	0,91	$C_{10,3}H_{18,6}O_{1,0}$
7	173	77,6	12,9	9,5	0,87	—	—	$C_{10,2}H_{22,3}O_{1,0}$
8	165	78,6	11,9	9,5	0,89	—	0,99	$C_{10,8}H_{19,6}O_{1,0}$
9	190	78,3	13,0	8,7	0,90	—	—	$C_{12,4}H_{24,7}O_{1,0}$
10	242	85,0	8,3	6,7	0,97	—	—	$C_{17,1}H_{20,1}O_{1,0}$
11	231	68,5	10,1	21,4	0,71	0,92	—	$C_{12,6}H_{23,3}O_{3,1}$
12	248	81,6	12,0	6,4	0,82	—	1,95	$C_{16,9}H_{29,8}O_{1,0}$
13	250	80,3	13,4	6,3	0,82	—	—	$C_{16,7}H_{33,5}O_{1,0}$
14	200	79,6	12,2	8,2	0,70	—	—	$C_{12,6}H_{24,4}O_{1,0}$
15	267	80,6	13,4	6,0	0,84	—	—	$C_{17,9}H_{35,8}O_{1,0}$
16	210	67,3	10,3	22,4	0,83	0,90	—	$C_{11,8}H_{21,6}O_{2,9}$
17	206	82,3	9,8	7,9	0,91	—	—	$C_{14,1}H_{20,1}O_{1,0}$
18	249	79,7	14,1	6,2	0,77	—	—	$C_{16,5}H_{35,1}O_{1,0}$
19	232	68,5	10,5	21,0	0,79	0,89	—	$C_{12,7}H_{23,4}O_{3,0}$
20	230	68,0	10,3	21,7	0,75	0,85	—	$C_{12,5}H_{23,7}O_{3,1}$
21	238	80,0	13,3	6,7	0,90	—	—	$C_{15,9}H_{31,7}O_{1,0}$
22	250	80,3	13,4	6,3	0,93	—	—	$C_{16,7}H_{33,5}O_{1,0}$
23	260	80,6	13,4	6,0	0,93	—	—	$C_{17,5}H_{34,8}O_{1,0}$
24	272	80,9	13,5	5,6	0,91	—	—	$C_{18,3}H_{36,7}O_{1,0}$
25	290	81,1	13,5	5,4	0,88	—	—	$C_{19,6}H_{39,2}O_{1,0}$
26	302	81,3	13,6	5,1	0,79	—	—	$C_{20,5}H_{41,1}O_{1,0}$
27	322	84,1	10,8	5,1	0,99	—	0,94	$C_{22,6}H_{34,8}O_{1,0}$
28	350	78,2	12,7	9,1	1,74	—	—	$C_{22,8}H_{44,5}O_{2,0}$

Примечание: условные обозначения см. в табл. 1.

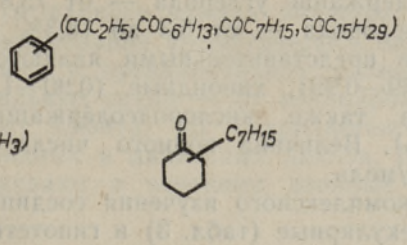
Оптимальное препаративное ТСХ-разделение компонентов элюатов достигнуто на пластинках «Силуфол» (ЧССР) в следующих системах:

1. Элюат 11.1 — бензол.
2. Элюат 6 — ацетон:хлороформ:бензол:метанол (15:15:45:2).

Проявленные и размеченные в УФ-лучах хроматографические пластинки разрезали на полосы, которые экстрагировали растворителями, последние отгоняли, а полученные компоненты исследовали комплексом методов, указанных выше.

Из гексанового элюата 11.1 выделили препаративным путем 28 фракций НКС (табл. 2). Молекулярная масса компонентов изменяется от 130 до 350; содержание углерода — от 67,3 до 85,0, водорода — от 7,6 до 14,1, кислорода — от 5,1 до 22,4% мас. На основании данных табл. 2, ИК-, УФ- и ^{1}Н-ЯМР-спектроскопии, хромато-масс-спектрометрии и капиллярной ГЖХ были выведены молекулярные (табл. 2) и гипотетические структурные формулы компонентов элюата 11.1 (рис. 3), многие из которых подтверждены модельными соединениями.

Видно, что рассматриваемый элюат представлен в основном высокомолекулярными кетонами жирного ряда, преимущественно метилалкилкетонами с нормальным строением парафиновой цепи. Лишь две структуры имеют изоалкильные цепи. В небольших количествах представлены циклановые кетоны и дикетоны. Идентифицировано четыре структуры кетонов жирноароматического ряда с бензольным и нафтеновыми кольцами.



$CH_3—CO—C_8H_{17}$
$C_5H_{11}—CO—C_5H_{11}$
$CH_3—CO—C_{10}H_{21}$*
$C_2H_5OOC—CH_2—CO—C_8H_{17}$
$C_8H_{17}—CO—C_9H_{19}$
изо-$C_8H_{17}—CO—C_8H_{17}$
изо-$C_9H_{19}—CO—CH_2—COOCH_3$
$CH_3—CO—C_{15}H_{31}$*
$CH_3—CO—C_{17}H_{35}$*
$CH_3—CO—C_{19}H_{39}$*

$CH_3—CO—C_8H_{15}$*
$CH_3—CO—C_9H_{17}$*
$C_8H_{15}—CO—C_8H_{15}$
$C_8H_{17}—CO—C_8H_{17}$
$CH_3OOC—CH_2—CO—C_8H_{17}$
$C_9H_{19}—CO—CH_2—COOCH_3$
$CH_3—CO—C_{14}H_{29}$*
$CH_3—CO—C_{16}H_{33}$*
$CH_3—CO—C_{18}H_{37}$*
$C_8H_{17}—CO—C_5H_{11}—CO—C_8H_{17}$

* Подтверждено на стандартах методом ГЖХ.

Рис. 3. Гипотетические структурные формулы первичных нейтральных кислородсодержащих соединений буроугольной смолы (гексановый элюат 11.1, десорбированный с кремневой кислоты).

Из бензольного элюата 6 выделили препаративным путем 24 фракции НКС (табл. 3). Молекулярная масса соединений изменяется от

Таблица 3

Характеристика соединений элюата 6

Номер фракции	Молекулярная масса	Элементный состав, % мас.			Функциональный состав, г-экв/моль						Молекулярная формула
		С	Н	О	КГ	ЛК	ИЧ	ХГ	ПрЭ*	$O_ц$	
1	170	81,8	9,1	9,1	0,92	—	—	—	—	—	$C_{11,6}H_{15,5}O_{1,0}$
2	140	80,6	7,5	11,9	0,97	—	—	—	—	—	$C_{9,4}H_{10,5}O_{1,0}$
3	148	81,1	8,1	10,8	0,95	—	—	—	—	—	$C_{10,0}H_{12,0}O_{1,0}$
4	176	81,8	9,1	9,1	0,90	—	—	—	—	—	$C_{12,0}H_{16,0}O_{1,0}$
5	184	84,8	6,5	8,7	0,91	—	—	—	—	—	$C_{13,0}H_{11,9}O_{1,0}$
6	205	75,8	7,4	16,8	—	0,99	—	—	—	—	$C_{13,0}H_{15,2}O_{2,2}$
7	225	85,7	7,1	7,2	0,88	—	0,50	—	—	—	$C_{16,1}H_{16,0}O_{1,0}$
8	208	84,8	7,1	8,1	0,91	—	—	—	—	—	$C_{14,7}H_{14,8}O_{1,1}$
9	194	78,0	6,0	16,0	—	—	—	1,95	—	—	$C_{12,6}H_{11,6}O_{1,9}$
10	226	78,5	6,5	15,0	—	—	—	1,92	0,33	—	$C_{14,8}H_{14,7}O_{2,1}$
11	174	84,7	5,8	9,5	0,97	—	—	—	—	—	$C_{12,3}H_{10,3}O_{1,0}$
12	176	82,3	8,6	9,1	0,96	—	0,51	—	—	—	$C_{12,1}H_{15,1}O_{1,0}$
13	187	76,6	6,4	17,0	—	—	0,30	0,90	—	0,76	$C_{11,9}H_{12,0}O_{2,0}$
14	270	77,9	3,8	18,3	0,90	—	—	—	—	1,51	$C_{17,5}H_{10,3}O_{3,1}$
15	284	78,3	4,3	17,4	0,92	—	—	—	—	1,60	$C_{18,5}H_{12,2}O_{3,1}$
16	235	81,4	5,1	13,5	0,99	—	—	—	—	0,82	$C_{15,9}H_{12,0}O_{2,0}$
17	199	83,9	7,5	8,6	1,01	—	0,60	—	0,70	—	$C_{13,9}H_{14,9}O_{1,1}$
18	231	83,1	10,0	6,9	0,89	—	0,55	—	—	—	$C_{16,0}H_{23,1}O_{1,0}$
19	243	80,0	6,7	13,3	0,85	—	0,58	—	0,77	—	$C_{16,2}H_{16,3}O_{2,0}$
20	258	78,7	7,1	14,2	0,80	—	0,53	—	0,74	—	$C_{16,9}H_{18,3}O_{2,3}$
21	219	85,7	6,7	7,6	0,84	—	—	—	0,12	—	$C_{15,6}H_{14,7}O_{1,0}$
22	230	84,2	10,5	5,3	0,79	—	—	—	—	—	$C_{16,1}H_{24,2}O_{0,8}$
23	206	76,5	7,8	15,7	—	0,89	—	—	—	—	$C_{13,1}H_{16,1}O_{2,0}$
24	300	81,1	8,1	10,8	1,89	—	—	—	—	—	$C_{20,3}H_{24,3}O_{2,0}$

* ПрЭ — простые эфиры (в том числе циклические), остальные обозначения см. в табл. 1.

140 до 300; содержание углерода — от 75,8 до 85,7, водорода — от 3,8 до 10,5, кислорода — от 5,3 до 18,3% мас. Из функциональных групп наиболее представительными являются кетонные (0,79—1,89), лактонные (0,89—0,99), хиноидные (0,90—1,95) и простые эфирные (0,12—0,77), а также кислородсодержащие гетероциклы (0,76—1,60 г-экв/моль). Величина иодного числа изменяется в пределах 0,30—0,60 г-экв/моль.

На основе комплексного изучения соединений элюата 6 были выведены их молекулярные (табл. 3) и гипотетические структурные формулы (рис. 4).

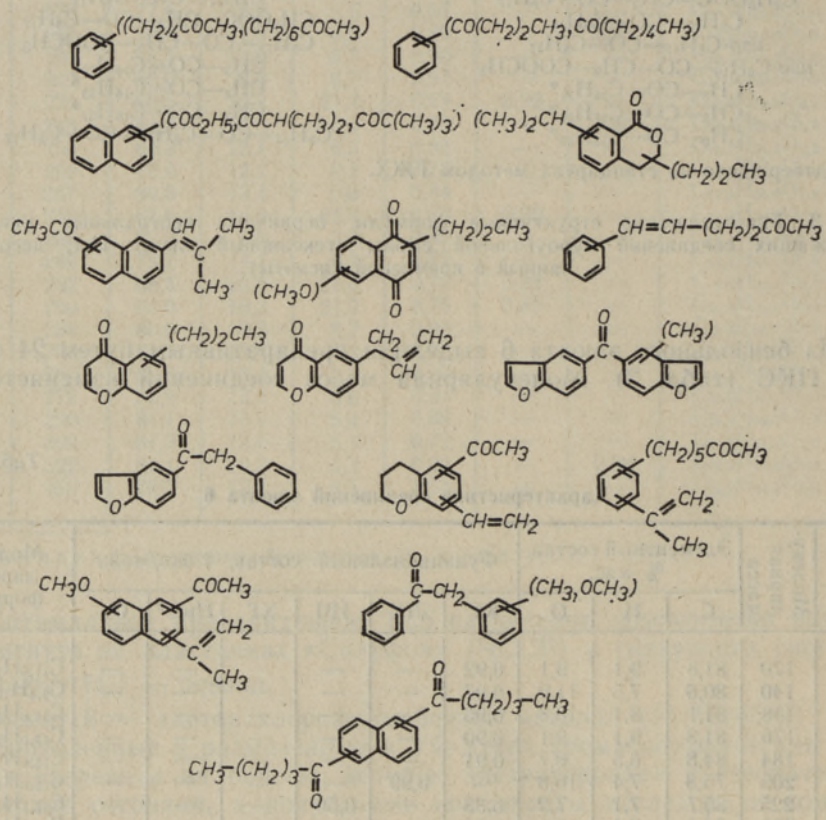


Рис. 4. Гипотетические структурные формулы первичных нейтральных кислородсодержащих соединений буроугольной смолы (бензольный элюат 6, десорбированный с оксида алюминия(III)).

Основную долю элюата 6 составляют моно- и бициклические ароматические структуры с относительно длинными алкильными заместителями (C_3—C_7) как нормального, так и изостроения. Около трети структур имеет двойные связи в боковой цепи. Для большинства соединений характерна карбонильная группа, либо сопряженная с ароматическим кольцом, либо расположенная в конце цепочки. Помимо кетонных групп, идентифицированы шестичленные лактонные циклы, хиноидные группы, γ-пироновый цикл. Подчиненная роль в данном элюате принадлежит пятичленным кислородным циклам и метоксильным группам. Одна из структур имеет шестичленный эфирный цикл.

Особенностью структур данного элюата является отсутствие нафтеновых циклов при доминировании ароматических, замещенных длинными алкильными цепями, и превалирование разнообразных форм карбонильных функциональных групп — от алкилароматических кетонов, составляющих основу элюата, до диарилкетонов при наличии арилбензилкетонов, хиноидных и лактонных циклов. Высокую степень непредельности обусловливают в основном двойные связи, расположенные в боковых цепях.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Платонов В. В.* Исследование термохимических превращений углей Кузнецкого бассейна. Канд. дис. М., 1972.
2. *Камнева А. И., Королев Ю. Г.* Лабораторный практикум по химии топлива. М., 1975.
3. *Платонов В., Клявина О., Ивлева Л.* Исследование структуры нейтральных кислородсодержащих соединений первичной каменноугольной смолы. — Изв. АН ЭССР. Хим., 1984, 33, № 1, 15—20.

Тульский государственный педагогический институт

Поступила в редакцию 22/XI 1984

V. PLATONOV, O. KLJAVINA, Niina TABOLENKO, L. IVLEVA

KANSKI—ATŠINSKI BASSEINI PRUUNSÕE PRIMAARSEST UTTETÕRVAST SAADUD NEUTRAALSETE HAPNIKUÜHENDITE STRUKTUURI UURIMINE. 1

Pruunsõe primaarse uttetõrva neutraalseid hapnikuühendeid uuriti infrapunase, ultraviolett- ja tuuma magnetresonantsspektroskoopia, samuti elemendi- ja funktsionaalanalüüsi, krüoskoopia, kapillaargaasikromatograafia ja kromatomassispektromeetria abil. Mõned puhtad neutraalsed hapnikuühendid isoleeriti vedelikkolonn- ja preparatiivse õhukese kihi kromatograafia abil. Saadud ühendeid uuriti keemiliste ja füüsikaliste meetoditega. On esitatud kahe eluaadi ühendite molekulaar- ja struktuurivalemid.

V. PLATONOV, O. KLYAVINA, Nina TABOLENKO, L. IVLEVA

INVESTIGATION OF THE STRUCTURE OF NEUTRAL OXYGEN-CONTAINING COMPOUNDS FROM PRIMARY BROWN COAL TARS OF THE KANSK—ACHINSK BASIN. 1

Neutral oxygen-containing compounds from primary brown coal tars were investigated by IR-, UV-, NMR-spectroscopy, routine and functional analysis, cryoscopy, capillary gas chromatography and chromato-mass-spectrometry. Some pure neutral oxygen-containing compounds were isolated by liquid column and preparative thin-layer chromatography.

The compounds obtained were investigated by chemical and physical methods. Molecular and structural formulas for the compounds of two eluates are proposed.