

УДК 662.66.622.331-66.016

<https://doi.org/10.34185/tpm.2.2019.05>

Сорокін Є.Л.

## Визначення структурних груп спікливого вугілля в окремих фракціях методом ІЧ-спектроскопії. Повідомлення 1. Якісний аналіз ІЧ-спектрів окремих фракцій спікливого вугілля

Sorokin E.L

### Definition of Structural Groups of Spiky Coal in Separate Fractions by IR Spectroscopy. Message 1. Qualitative analysis of the IR spectra of individual fractions of coal

**Мета.** В даній роботі розглянуті зміни хімічної структури усередненої макромолекули вугілля різних стадій метаморфізму. **Методика.** Для ідентифікації функціональних груп було прийнято рішення про розбивку отриманих ІЧ-спектрів на три області, що дозволило більш чітко визначити речовини, які входять до складу густинних фракцій вугілля різних стадій метаморфізму, а також сформулювати уявлення про зміну їх будови. **Результати.** Досліджено, як саме змінюється структура і склад вугілля при різній густині проб. Вивчені функціональні групи макромолекул густинних фракцій вугілля різних стадій метаморфізму. Проведений якісний та кількісний аналіз ІЧ спектрів фракцій вугілля різної густини. Для ідентифікації функціональних груп ІЧ спектри було розбито на три області, в яких досліджувалось вугілля різних марок та ступеню зрілості. Області ІЧ спектрів густинних фракцій представлено на рисунках для вугілля марок ДГ, Г, Ж, К, ПС, де показано смуги поглинання густинних фракцій та їхні максимуми частот. **Наукова новизна.** Було виявлено присутність валентних коливань органічних сполук в макромолекулі вугілля. **Практична значущість.** Після проведення якісного аналізу зроблені висновки, щодо вмісту речовин, які характеризують макромолекулу вугілля і дають можливість змінити властивості самого вугілля та його густинних фракцій.

**Ключові слова:** вугілля, фракція, густина, структура макромолекули, стадії метаморфізму, ІЧ спектри, функціональні групи.

**Objective.** In this paper, changes in the chemical structure of the averaged coal macromolecule of different stages of metamorphism are considered. **Method.** To identify the functional groups, it was decided to break down the obtained IR spectra into three regions, which allowed to more clearly identify the substances that are part of the dense fractions of coal of different stages of metamorphism, as well as to form an idea of changing their structure. **Results.** It is investigated how exactly the structure and composition of coal change at different sample densities. The functional groups of macromolecules of dense coal fractions of different stages of metamorphism have been studied. Qualitative and quantitative analysis of IR spectra of coal fractions of different density was performed. To identify functional groups, the IR spectra were divided into three regions, in which coals of different grades and degrees of maturity were studied. The regions of the IR spectra of the density fractions are presented in the figures for coal grades DG, G, F, K, PS, which show the absorption bands of the density fractions and their maximum frequencies. **Scientific novelty.** The presence of valence vibrations of organic compounds in the coal macromolecule was detected. **Practical significance.** After conducting a qualitative analysis, conclusions were made on the content of substances that characterize the coal macromolecule and make it possible to change the properties of coal itself and its density fractions.

**Keywords:** coal, fraction, density, macromolecule structure, stages of metamorphism, IR spectra, functional groups

При вивченні електронної структури і структурних параметрів вугілля було визначено зміну хімічної структури усередненої макромолекули вугілля різної стадії метаморфізму [1], а також встановлено характер змін структури і складу при різній густині проб вугілля. Беручи до уваги те, що органічні речовини можуть мати різну організацію атомів в молекулах можна зробити висновок, що хімічна будова не дає повної картини про вплив змін як на густину зразків вугілля, так і на ступінь його зрілості [2-4].

Таким чином, подальші дослідження були спрямовані на вивчення функціональних груп макромолекул густинних фракцій вугілля різної стадії метаморфізму. Для цього був проведений якісний аналіз ІЧ - спектрів густинних фракцій вугілля різної стадії метаморфізму [5-7].

Попередні дослідження неодноразово вказували на той факт, що будова, навіть усередненої макромолекули вугілля має складний характер [1-5]. Велика різноманітність органічних, мінеральних та

органічних сполук, а також функціональних груп не дає можливості досить чітко їх визначити. Є також необхідність враховувати той факт, що піки різних з'єднань схожих за своєю будовою можуть накладатися один на одного що буде ускладнювати ідентифікацію [5]. Отже, для ідентифікації функціональних груп було прийнято рішення про розбивку отриманих ІЧ-спектрів на три області, що дозволило більш чітко визначити речовини, які входять до складу густинних фракцій вугілля різних стадій метаморфізму, а також сформулювати уявлення про зміну їх будови.

У якості першої області була виділена частина спектра з довжиною хвилі від 4000 до 2500  $\text{cm}^{-1}$ , припускаючи, що дана ділянка ІЧ-спектра відображає область валентних коливань простих зв'язків.

Перша область ІЧ-спектрів густинних фракцій вугілля марки ДГ представлена на рисунку 1.

З представлених результатів (рис. 1) можна спостерігати кілька ліній поглинання в області від 3700 до 3620  $\text{cm}^{-1}$ . Зазначена область спектра від-

повідляє за валентні коливання груп ОН. Однак, зміна частоти, при якій з'являються лінії поглинання вказує на характер зв'язку. Так лінія поглинання при частоті  $3700\text{ см}^{-1}$  свідчить про наявність вільних груп ОН, тобто, вода знаходиться на поверхні частинок. Лінія поглинання при частоті  $3648\text{ см}^{-1}$  відповідає за валентні коливання груп ОН пов'язаних міжмолекулярним зв'язком, що свідчить про наявність адсорбованих за допомогою сил поверхневого натягу молекул води. Поглинання в області  $3620\text{ см}^{-1}$  вказує на присутність груп ОН пов'язаних слабким водневим зв'язком, які знаходяться на поверхні за допомогою сил електростатичної взаємодії.

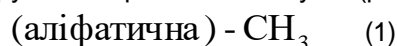
Аналізуючи отримані лінії поглинання густинних фракцій вугілля марки ДГ можна побачити, що зазначені піки присутні не в усіх зразках. Так, чіткі лінії поглинання, що вказують на наявність наведених функціональних груп, присутніх зразків мають густину  $<1,25\text{ г/см}^3$  (рис.1, спектр - а), а також наявність цих груп присутня зразкам з густиною  $>1,3\text{ г/см}^3$  (рис.1, спектр - е). Зазначені спектри також показують, що збільшення густини зразків вугілля до  $1,26-1,27\text{ г/см}^3$  (рис. 1, спектр - в) призводить до зникнення лінії поглинання з частотою  $3648\text{ см}^{-1}$ . Зразок з густиною  $1,28-1,3\text{ г/см}^3$  (рис. 1, спектр - д) практично не має зазначених ліній поглинання. Даний факт може свідчити про зміну властивостей, а також активності поверхні зразків вугілля різної густини.

Подальший аналіз розглянутої області спектра (рис. 1) дозволяє визначити у досліджуваного вугілля лінії з частотою поглинання  $3500$  і  $3430\text{ см}^{-1}$ . Зазначені максимуми ліній поглинання, як і попередні піки, можна віднести до валентних коливань груп ОН. Однак, максимум частоти поглинання з частотою при  $3500\text{ см}^{-1}$  відноситься до коливань водневого зв'язку груп ОН з  $\pi$ -системою, а максимум при частоті поглинання  $3430\text{ см}^{-1}$  відноситься до коливань водневих зв'язків в самоасоційованих  $n$ -заходах при  $n>3$ . В першій області ІЧ-спектрів густинних фракцій вугілля марки ДГ максимум ліній з частотою поглинання  $3500\text{ см}^{-1}$  можна спостерігати не у всіх проб. Досить яскраво виражений вказаний пік присутній у проб, які мають густину  $>1,26\text{ г/см}^3$  (рис. 1 в - е). При цьому, максимум при  $3430\text{ см}^{-1}$  присутній у всіх густинних фракціях досліджуваного вугілля.

В дослідженій області густинних фракцій вугілля марки ДГ можна виділити смугу поглинання при частоті  $3040\text{ см}^{-1}$ . Зазначена смуга поглинання відповідає за коливання ненасичених С-Н зв'язків переважно ароматичних сполук. Дана частота поглинання присутня у всіх досліджуваних густинних фракцій вугілля марки ДГ (рис. 1). Однак, слід зазначити, що інтенсивність коливань зазначеної групи дещо відрізняється для фракцій які мають різну густину.

На спектрах проб які досліджувалися за густиною фракцій в даній області можна визначити плече при частоті лінії поглинання  $2950\text{ см}^{-1}$ . Дана ча-

стота відповідає за валентні коливання метильної групи в аліфатичних сполуках (рівняння 1).



Зазначене плече лінії поглинання можна спостерігати у всіх густинних фракціях вугілля марки ДГ (рис. 1), що говорить про досить розгалужену структуру макромолекул, які утворюють загальну масу розглянутого вугілля.

Дуплет на представлених ІЧ - спектрах (рис. 1) з частотами поглинання  $2920$  і  $2840\text{ см}^{-1}$  характеризує валентні коливання груп С-Н. При цьому лінія поглинання з максимумом при частоті  $2920\text{ см}^{-1}$  вказує на наявність нафтоєвих і аліфатичних груп С-Н<sub>x</sub>, а при частоті  $2840\text{ см}^{-1}$  поверхневих аліфатичних С-Н зв'язків. Наведені частоти поглинання присутні у проб усіх густинних фракцій вугілля марки ДГ.

Далі проаналізуємо наявність або відсутність зазначених смуг поглинання в області, що вивчається ( $4000 - 2500\text{ см}^{-1}$ ) для густинних фракцій вугілля у ряді метаморфізму, від марки Г до марки ПС (рис. 2).

Зі спектрів густинних фракцій вугілля марки Г (рис. 2) видно, що в пробах, які мають густину від  $<1,25\text{ г/см}^3$  (рис. 2 а) до густини фракції  $1,26-1,27\text{ г/см}^3$  (рис. 2 в) відсутні валентні коливання як вільних груп -ОН (максимум  $3700\text{ см}^{-1}$ ) так і груп -ОН, пов'язаних міжмолекулярним зв'язком (максимум  $3648\text{ см}^{-1}$ ). Також необхідно відзначити, що густина фракції газового вугілля, крім фракції з густиною  $>1,3\text{ г/см}^3$  (рис. 2 е), також не містить максимумів при частоті поглинання  $3500\text{ см}^{-1}$ , тобто водневі зв'язки груп ОН з  $\pi$ -системою відсутні. Однак, як видно з отриманих частот поглинання інтенсивність валентних коливань водневих зв'язків в самоасоційованих  $n$ -заходах (частота поглинання  $3430\text{ см}^{-1}$ ) помітно більше у фракцій, які мають меншу густину.

Густинні фракції вугілля марки Г як і попереднього містять максимум з частотою поглинання  $3040\text{ см}^{-1}$ , який характеризується валентними коливаннями ненасичених С-Н зв'язків ароматичних сполук.

Також, як і у попереднього вугілля, у густинних фракціях вугілля марки Г містяться максимуми ліній поглинання, що відповідають за валентні коливання метильних і СН груп аліфатичних з'єднань.

Лінії поглинання густинних фракцій вугілля марки Ж (рис. 3) практично не відрізняються від попереднього вугілля. Однак проби вугілля марки Ж практично не мають ліній поглинання при частотах  $3700\text{ см}^{-1}$  і  $3620\text{ см}^{-1}$ . Винятком є тільки густинна фракція  $>1,3\text{ г/см}^3$  (рис. 3 е).

Максимум при частоті поглинання  $3500\text{ см}^{-1}$  у густинних фракцій даного вугілля відсутній у всіх пробах.

Подальші максимуми ліній поглинання густинних фракцій вугілля марки Ж (рис. 3) в даній області присутні, при цьому слід зазначити, що їх інтенсивність помітно змінюється.

ІЧ-спектри густинних фракцій вугілля марки К в області від 4000 до 2500  $\text{см}^{-1}$  (рис. 4) практично не відрізняються від вугілля марки Ж наявністю максимумів смуг поглинання. Однак, частота погли-

нання 3040  $\text{см}^{-1}$  у густинних фракцій вугілля марки К помітно збільшується, що говорить про збільшення вмісту ароматичних вуглеводнів.

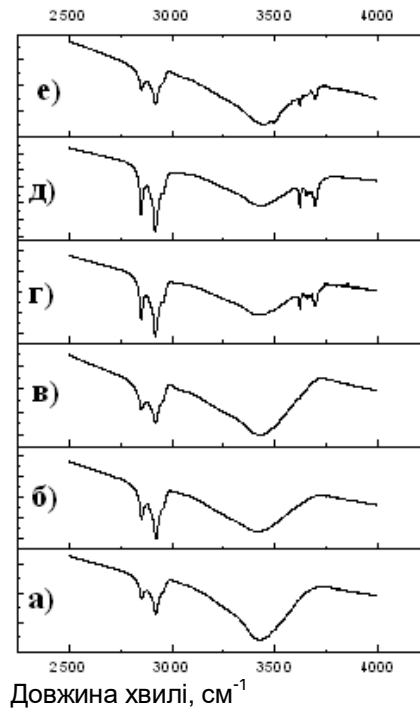
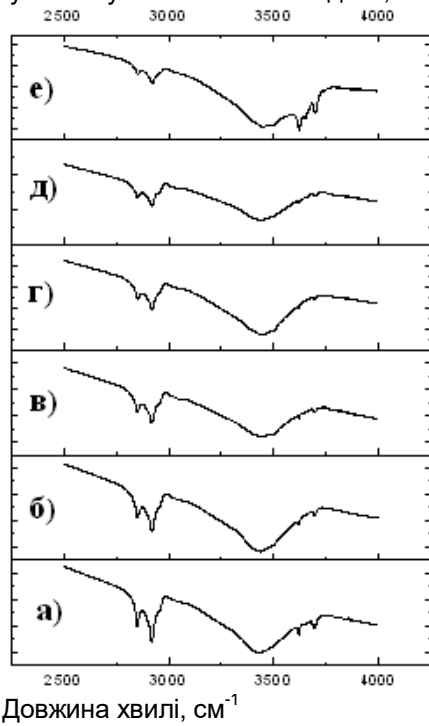


Рисунок 1. Перша область (4000 - 2500  $\text{см}^{-1}$ ) ІЧ-спектрів густинних фракцій вугілля марки ДГ. а - густина фракції  $<1,25 \text{ г/см}^3$ ; б - густина фракції  $1,25-1,26 \text{ г/см}^3$ ; в - густина фракції  $1,26-1,27 \text{ г/см}^3$ ; г - густина фракції  $1,27-1,28 \text{ г/см}^3$ ; д - густина фракції  $1,28-1,3 \text{ г/см}^3$ ; е - густина фракції  $>1,3 \text{ г/см}^3$ .

Рисунок 2. Перша область (4000 - 2500  $\text{см}^{-1}$ ) ІЧ-спектрів густинних фракцій вугілля марки Г. а - густина фракції  $<1,25 \text{ г/см}^3$ ; б - густина фракції  $1,25-1,26 \text{ г/см}^3$ ; в - густина фракції  $1,26-1,27 \text{ г/см}^3$ ; г - густина фракції  $1,27-1,28 \text{ г/см}^3$ ; д - густина фракції  $1,28-1,3 \text{ г/см}^3$ ; е - густина фракції  $>1,3 \text{ г/см}^3$ .

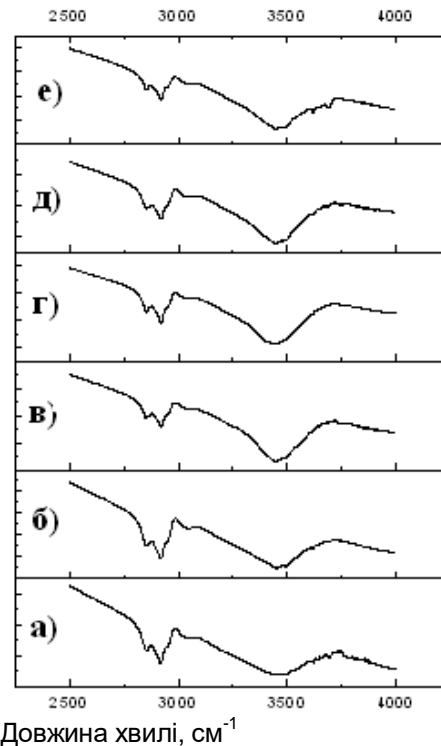
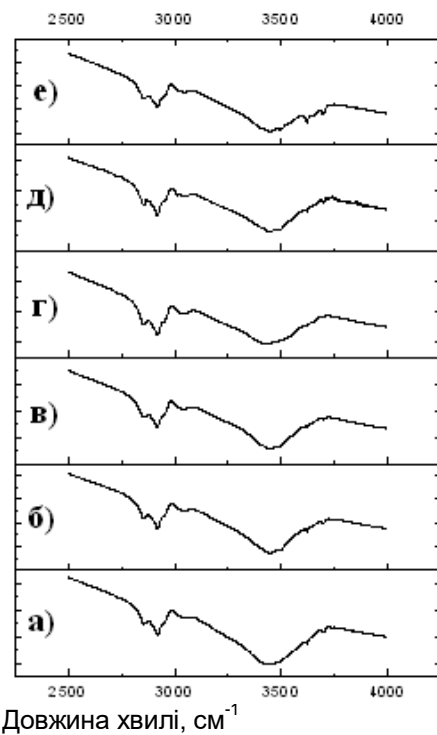


Рисунок 3. Перша область (4000 - 2500  $\text{см}^{-1}$ ) ІЧ-спектрів густинних фракцій вугілля марки Ж

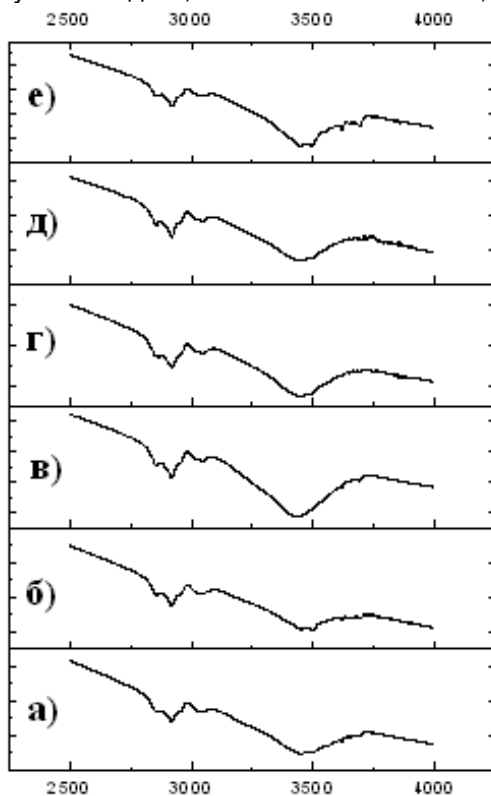
Рисунок 4. Перша область (4000 - 2500  $\text{см}^{-1}$ ) ІЧ-спектрів густинних фракцій вугілля марки К

а - густина фракції <1,25 г/см<sup>3</sup>; б - густина фракції 1,25-1,26 г/см<sup>3</sup>; в - густина фракції 1,26-1,27 г/см<sup>3</sup>; г - густина фракції 1,27-1,28 г/см<sup>3</sup>; д - густина фракції 1,28-1,3 г/см<sup>3</sup>; е - густина фракції >1,3 г/см<sup>3</sup>.

Область ІЧ - спектрів від 4000 до 2500 см<sup>-1</sup> густинних фракцій вугілля марки ПС (рис. 5) також не відрізняється за наявністю максимумів смуг поглинання від попередніх густинних фракцій. При цьому, за отриманими спектрами можна відзначити, що інтенсивність максимумів частот поглинання відповідає за валентні коливання СН зв'язків аліфатичних сполук (максимуми в області 2950 - 2840 см<sup>-1</sup>) у густинних фракцій даного вугілля помітно знижується. Однак, також можна побачити, що ма-

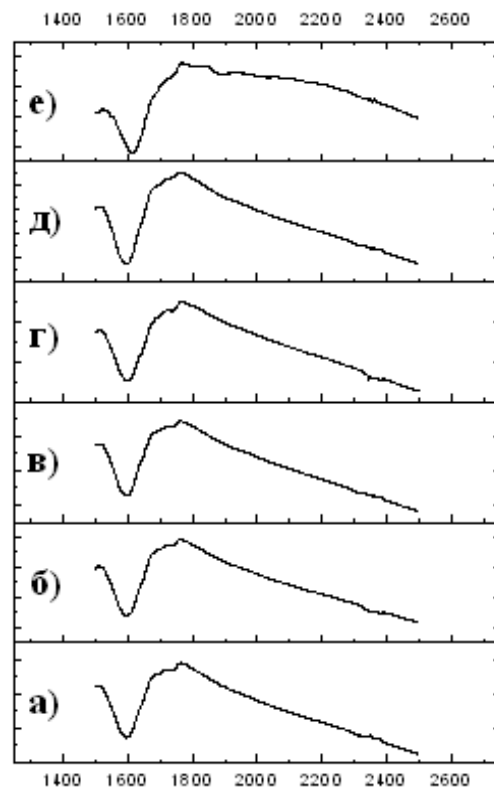
ксимум при частоті поглинання 3040 см<sup>-1</sup> стає більш явним.

Таким чином, аналіз спектрів густинних фракцій вугілля в першій області (4000 - 2500 см<sup>-1</sup>) показує, що смуги поглинання густинних фракцій вугілля різних марок містять практично ідентичні максимуми частот поглинання, але мають різну інтенсивність. Відмінністю є лише наявність частот, що відповідають за валентні коливання груп -ОН.



Довжина хвилі, см-1

Рисунок 5. Перша область (4000 - 2500 см<sup>-1</sup>) ІЧ - спектрів густинних фракцій вугілля марки ПС



Довжина хвилі, см-1

Рисунок 6. Друга область (2500 – 1500 см<sup>-1</sup>) ІЧ - спектрів густинних фракцій вугілля марки ДГ

а - густина фракції <1,25 г/см<sup>3</sup>; б - густина фракції 1,25-1,26 г/см<sup>3</sup>; в - густина фракції 1,26-1,27 г/см<sup>3</sup>; г - густина фракції 1,27-1,28 г/см<sup>3</sup>; д - густина фракції 1,28-1,3 г/см<sup>3</sup>; е - густина фракції >1,3 г/см<sup>3</sup>.

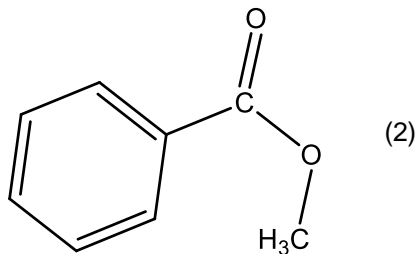
Друга область, при якій проводився аналіз отриманих ІЧ - спектрів відповідає за валентні коливання кратних зв'язків і лежить в межах частот поглинання від 2500 до 1500 см<sup>-1</sup>.

Друга область ІЧ-спектрів густинних фракцій вугілля марки ДГ представлена на рисунку 6.

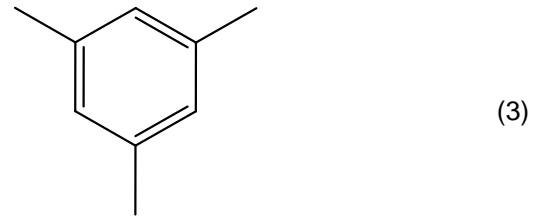
Як видно з отриманих спектрів густинних фракцій (рис. 6) в даній області можна виділити три максимуми лінії поглинання. Зазначені максимуми лінії поглинання в даній області можна побачити також і у густинних фракціях вугілля марки Г (рис. 7), вугілля марки Ж (рис. 8), вугілля марки К (рис. 9), а також вугілля марки ПС (рис. 10). Однак, інтенсив-

ність зазначених смуг поглинання у густинних фракцій спікливого вугілля відрізняється.

У другій зоні ІЧ - спектрів густинних фракцій спікливого вугілля присутня лінія з частотою поглинання 1730 см<sup>-1</sup>. Даний максимум частоти поглинання відповідає валентним коливанням карбоніла в складі органічних сполук (рівняння 2).



Максимум в області частоти поглинання  $1650 \text{ cm}^{-1}$  свідчить про наявність у густинних фракцій проб вугілля - похідних бензолу 1, 3, 5 тризаміщених (рівняння 3).



Третій максимум лінії поглинання в другій області має частоту  $1600 \text{ cm}^{-1}$ . Дана частота вказує про наявність у проб густинних фракцій спікливого вугілля вуглець вуглецевих зв'язків в системах полісопряження, а також карбо- і фенолвміщуючих вуглеводнів. Зазначена частота також відповідає за валентні коливання  $\text{C}=\text{C}$  зв'язків, що говорить про наявність ароматичних вуглеводнів в усередненій молекулі густинних фракцій спікливого вугілля.

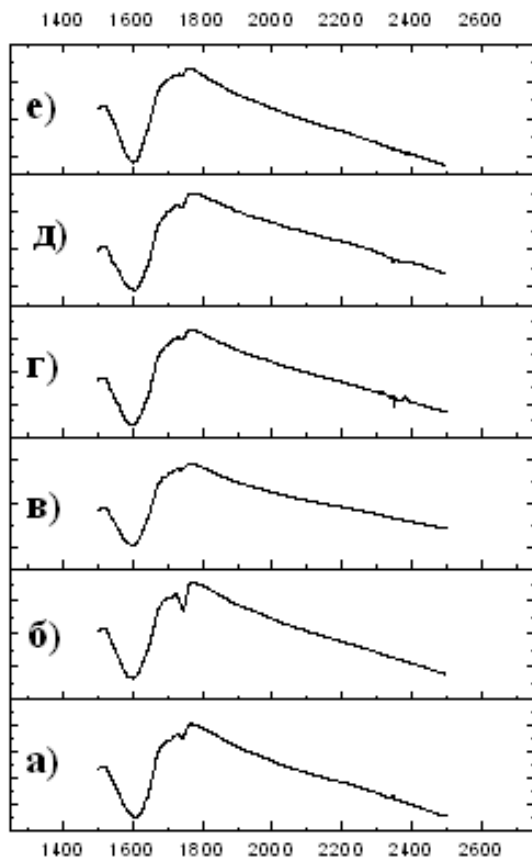


Рисунок 7. Друга область ( $2500 - 1500 \text{ cm}^{-1}$ ) ІЧ - спектрів густинних фракцій вугілля марки Г

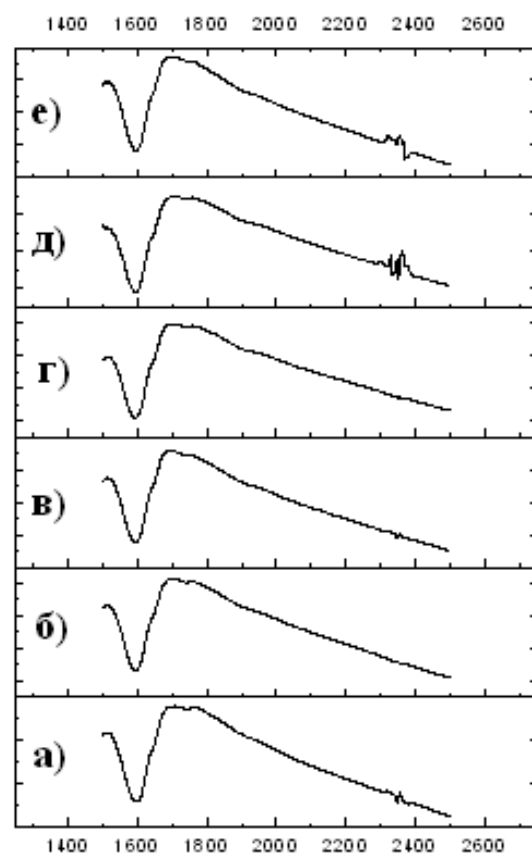


Рисунок 8. Друга область ( $2500 - 1500 \text{ cm}^{-1}$ ) ІЧ - спектрів густинних фракцій вугілля марки Ж

Рисунок 7. Друга область ( $2500 - 1500 \text{ cm}^{-1}$ ) ІЧ - спектрів густинних фракцій вугілля марки Г

Рисунок 8. Друга область ( $2500 - 1500 \text{ cm}^{-1}$ ) ІЧ - спектрів густинних фракцій вугілля марки Ж

а - густина фракції  $< 1,25 \text{ g/cm}^3$ ; б - густина фракції  $1,25-1,26 \text{ g/cm}^3$ ; в - густина фракції  $1,26-1,27 \text{ g/cm}^3$ ; г - густина фракції  $1,27-1,28 \text{ g/cm}^3$ ; д - густина фракції  $1,28-1,3 \text{ g/cm}^3$ ; е - густина фракції  $> 1,3 \text{ g/cm}^3$ .

Третя область ( $1500 - 400 \text{ cm}^{-1}$ ) аналізованих ІЧ - спектрів густинних фракцій спікливого вугілля - «область відбитків пальців» [3] характеризується індивідуальними смугами поглинання, а також їх становищем та інтенсивністю для кожної певної

органічної сполуки. В даній області присутні максимуми лінії поглинання, які відповідають як за валентні, так і за деформаційні, а також віялові коливання різних груп органічних сполук.

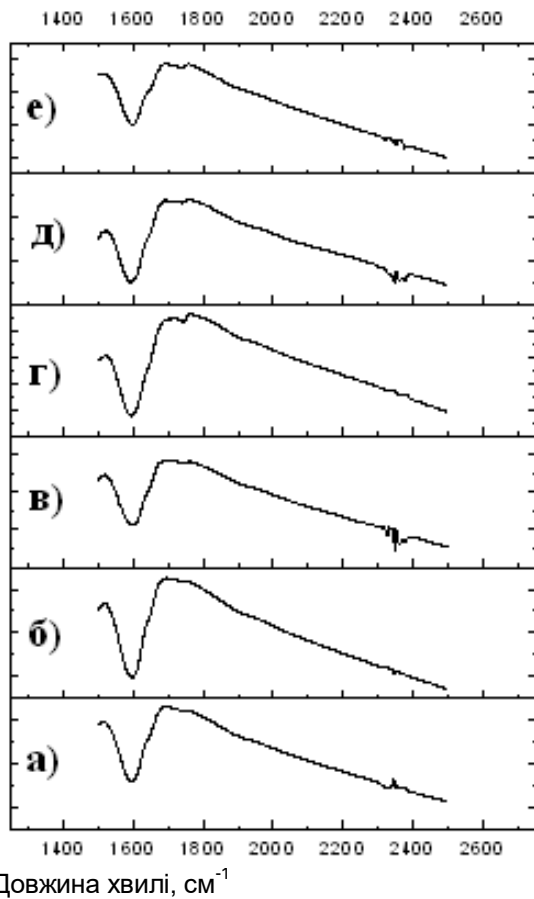


Рисунок 9. Друга область (2500 - 1500  $\text{cm}^{-1}$ ) ІЧ - спектрів густих фракцій вугілля марки К

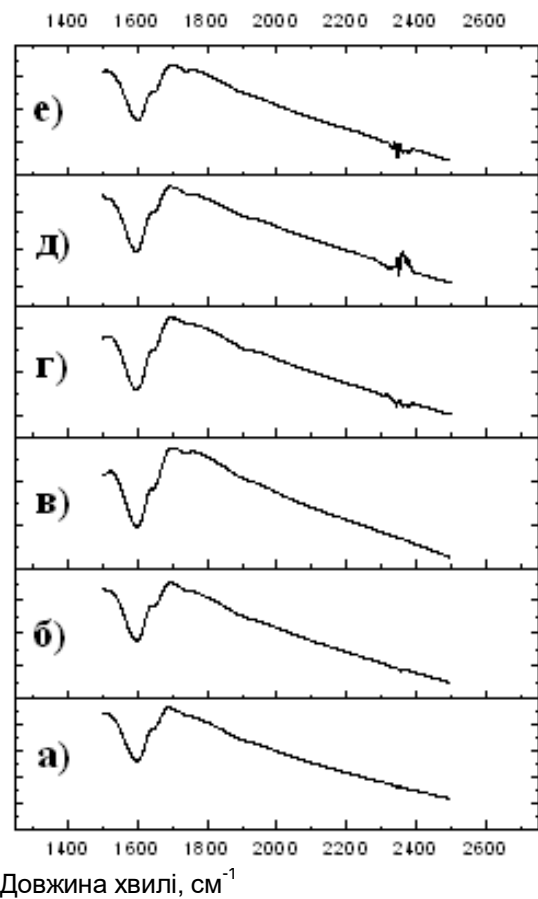
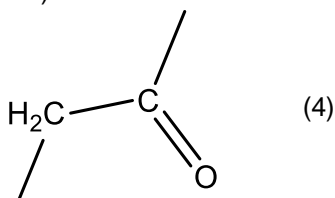


Рисунок 10. Друга область (2500 - 1500  $\text{cm}^{-1}$ ) ІЧ - спектрів густих фракцій вугілля марки ПС

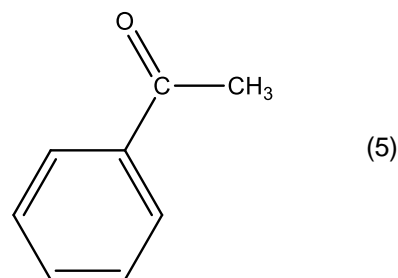
а - густина фракції  $< 1,25 \text{ г/см}^3$ ; б - густина фракції  $1,25-1,26 \text{ г/см}^3$ ; в - густина фракції  $1,26-1,27 \text{ г/см}^3$ ; г - густина фракції  $1,27-1,28 \text{ г/см}^3$ ; д - густина фракції  $1,28-1,3 \text{ г/см}^3$ ; е - густина фракції  $> 1,3 \text{ г/см}^3$ .

Частина спектрів, які відносяться до третьої групи густих фракцій вугілля марки ДГ представлена на рисунку 11.

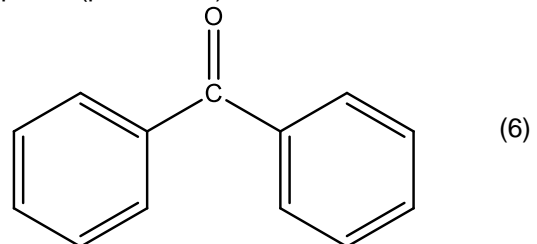
У даній області ІЧ - спектра яскраво виражені максимуми лінії частоти поглинання при довжині хвилі  $1435 \text{ см}^{-1}$ , яка відповідає за валентні коливання алільної групи в ациклічних сполуках (рівняння 4).



Максимум в області частоти поглинання  $1375 \text{ см}^{-1}$  відповідає валентним коливанням метильної групи в поєднанні з ароматичними вуглеводнями (рівняння 5).



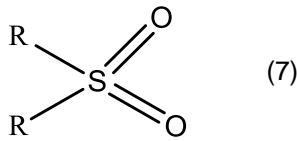
Зазначена частота поглинання ( $1375 \text{ см}^{-1}$ ) також може характеризуватися валентними коливаннями карбоксильної групи, наприклад у бензофенон (рівняння 6).



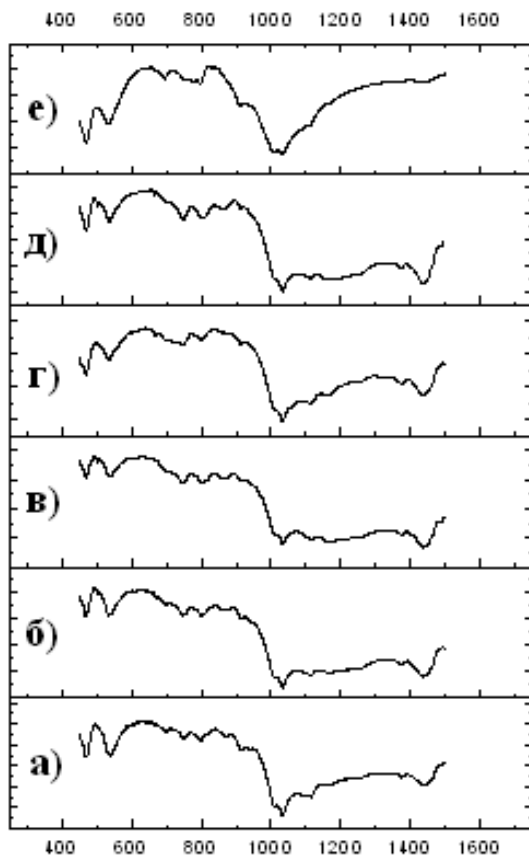
На представлених спектрах (рис. 12) зазначені піки присутні в усіх густих фракцій, проте інтенсивність поглинання в цих областях спектру змен-

шується з ростом густини вугільних фракцій. Така ж тенденція спостерігається і у густинних фракцій іншого вугілля (рис. 12 - 15).

Поглинання в області частоти  $1120\text{ см}^{-1}$  відповідає симетричним коливанням вуглеводнів які містять групи сульфонів (рівняння 7).

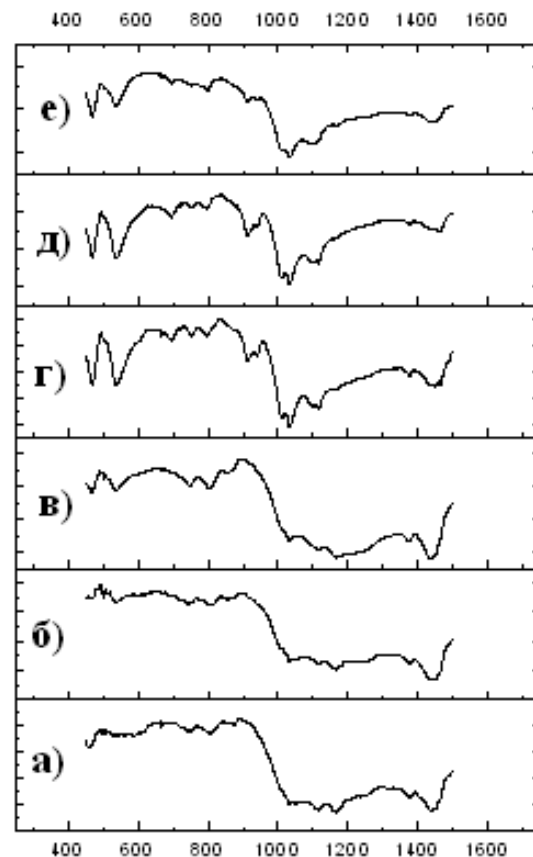


Аналіз області, яка досліджувалась ( $1500 - 400\text{ см}^{-1}$ ) показує наявність у проб густинних фракцій (рис. 12-15) дуплет частот поглинання при довжині хвилі  $1030$  і  $1010\text{ см}^{-1}$ . Зазначені частоти свідчать про наявність в будові органічної маси густинних фракцій вугілля різної стадії метаморфізму ароматичних C-CH груп в одинарних або конденсованих системах.



Довжина хвилі,  $\text{см}^{-1}$

Рисунок 11. Третя область ( $1500 - 400\text{ см}^{-1}$ ) ІЧ - спектрів густинних фракцій вугілля марки ДГ



Довжина хвилі,  $\text{см}^{-1}$

Рисунок 12. Третя область ( $1500 - 400\text{ см}^{-1}$ ) ІЧ - спектрів густинних фракцій вугілля марки Г

а - густина фракції  $<1,25\text{ г/см}^3$ ; б - густина фракції  $1,25-1,26\text{ г/см}^3$ ; в - густина фракції  $1,26-1,27\text{ г/см}^3$ ; г - густина фракції  $1,27-1,28\text{ г/см}^3$ ; д - густина фракції  $1,28-1,3\text{ г/см}^3$ ; е - густина фракції  $>1,3\text{ г/см}^3$ .

В дослідженій області ІЧ - спектрів густинних фракцій проб вугілля присутній максимум при частоті поглинання  $1165\text{ см}^{-1}$ . Зазначена частота відображає наявність в органічній масі густинних фракцій

проб вугілля кратних зв'язків і характеризується валентними коливаннями другого обертоу в структурі  $\text{HC}=\text{CH}$ .

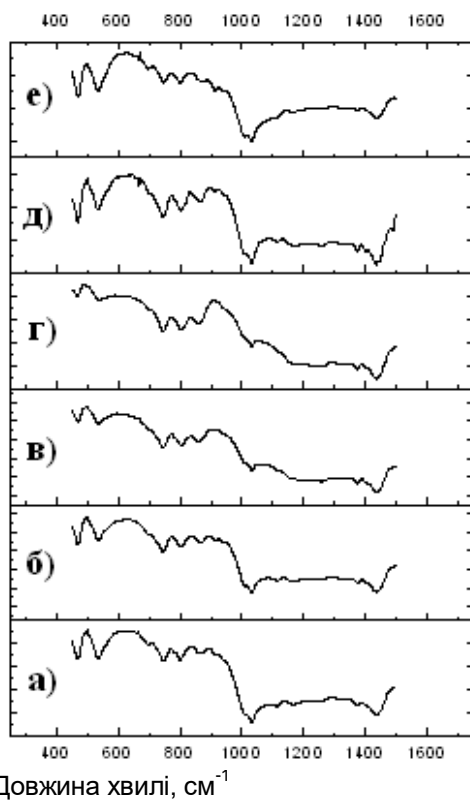


Рисунок 13. Третя область (1500 - 400  $\text{см}^{-1}$ ) ІЧ - спектрив густинних фракцій вугілля марки Ж а - густина фракції  $<1,25 \text{ г/см}^3$ ; б - густина фракції  $1,25-1,26 \text{ г/см}^3$ ; в - густина фракції  $1,26-1,27 \text{ г/см}^3$ ; г - густина фракції  $1,27-1,28 \text{ г/см}^3$ ; д - густина фракції  $1,28-1,3 \text{ г/см}^3$ ; е - густина фракції  $>1,3 \text{ г/см}^3$ .

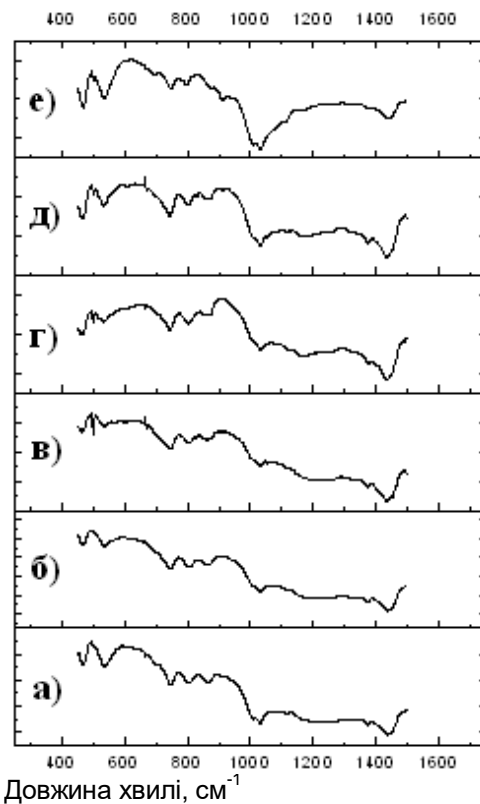


Рисунок 14. Третя область (1500 - 400  $\text{см}^{-1}$ ) ІЧ - спектрив густинних фракцій вугілля марки К а - густина фракції  $<1,25 \text{ г/см}^3$ ; б - густина фракції  $1,25-1,26 \text{ г/см}^3$ ; в - густина фракції  $1,26-1,27 \text{ г/см}^3$ ; г - густина фракції  $1,27-1,28 \text{ г/см}^3$ ; д - густина фракції  $1,28-1,3 \text{ г/см}^3$ ; е - густина фракції  $>1,3 \text{ г/см}^3$ .

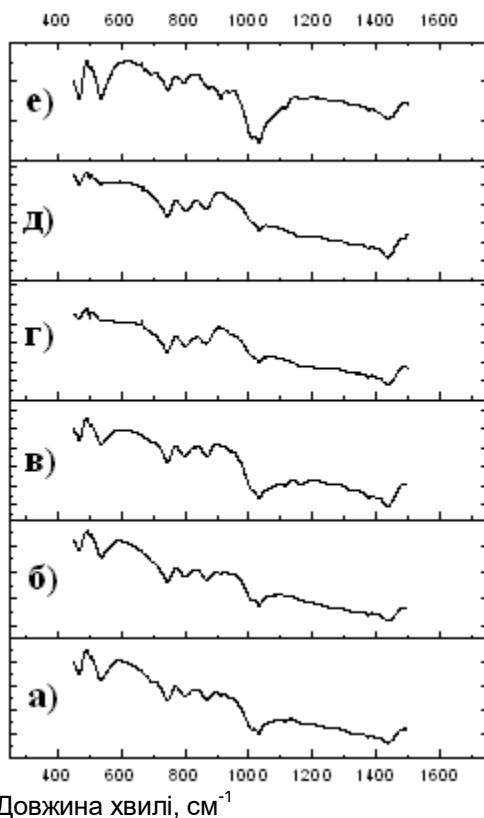
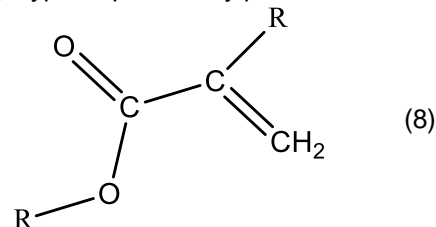


Рисунок 15. Третя область (1500 - 400  $\text{см}^{-1}$ ) ІЧ - спектрив густинних фракцій вугілля марки ПС

а - густина фракції  $<1,25 \text{ г/см}^3$ ; б - густина фракції  $1,25-1,26 \text{ г/см}^3$ ; в - густина фракції  $1,26-1,27 \text{ г/см}^3$ ; г - густина фракції  $1,27-1,28 \text{ г/см}^3$ ; д - густина фракції  $1,28-1,3 \text{ г/см}^3$ ; е - густина фракції  $>1,3 \text{ г/см}^3$ .

Частота поглинання  $940 \text{ см}^{-1}$  відображає віялове коливання метиленової групи яке знаходиться в структурі зображення у рівнянні 8.



Поглинання в області  $920$  і  $865 \text{ см}^{-1}$  говорить про позаплощинні деформаційні коливання метиленової групи в алкени (рівняння 9), а також в алінові структури (рівняння 10).

