

ным увеличением их интенсивности. В средней УФ-области поглощают и арены. Таким образом, УФ-спектроскопию можно использовать для анализа полиеновых и ароматических структур, остальные углеводороды «прозрачны» в средней ультрафиолетовой области.

При анализе продуктов термической переработки нефтяных фракций, в которых возможно присутствие полиенов, их необходимо предварительно отделить от ароматических углеводородов. УФ-спектры аренов, как следует из рис.6.6, существенно различаются в зависимости от числа циклов и линейного (типа антрацена) или нелинейного (типа фенантрена) характера их конденсации. Максимум поглощения моноциклических аренов находится в области 255-275 нм, для бициклических аренов характерна более интенсивная полоса с максимумом 275-290 нм и два рядом расположенных пика в области 310-330 нм.

На основе усреднённых спектральных данных по ароматическим ядрам разного типа получены уравнения для расчета массового содержания бензольных C_6 , нафталиновых C_n , фенантреновых C_ϕ углеводородов, %:

$$C_6 = 0,184K_{198} - 0,025K_{230} - 0,045K_{255} - 0,002K_{270} - 0,111K_{338} + 0,854K_{375} - 0,320K_{435}$$

$$C_n = -0,011K_{198} + 0,159K_{230} - 0,025K_{255} - 0,020K_{270} - 0,101K_{338} - 0,255K_{375} - 0,320K_{435}$$

$$C_\phi = 0,001K_{198} - 0,001K_{230} + 0,391K_{255} - 0,121K_{270} + 0,023K_{338} - 6,312K_{375} + 0,710K_{435},$$

где K_{198} , K_{230} , K_{255} , K_{270} , K_{338} , K_{375} , K_{435} — удельные коэффициенты поглощения, л/(г·см), исследуемой фракции на аналитических длинах волн 198, 230 нм и т. д., соответственно.

Предложены аналогичные уравнения и для расчёта содержания в нефтяных фракциях антраценовых, пиреновых, хризеновых (совместно с бензфлуореновыми) углеводородов, а также перилена. Приведенные выше уравнения позволяют рассчитывать содержание бензольных и полициклических углеводородов при их совместном присутствии.

вии.

В качестве растворителя при анализе аренов чаще всего применяют изооктан, очищенный на силикагеле.

Благодаря высокой чувствительности УФ-спектроскопия находит применение для определения следов аренов в неароматических продуктах. Наличие во фракции гетероатомных соединений сильно увеличивает поглощение в УФ-спектре и может привести к значительным погрешностям анализа.

В инфракрасной области, в отличие от средней ультрафиолетовой, поглощают все органические соединения. Эта область электромагнитного спектра связана с колебаниями атомов в молекулах. Каждая структурная группа характеризуется своим набором полос поглощения, число, положение и интенсивность которых в большей или меньшей степени зависят от состава остальной части молекулы. Для определения группового состава сложных смесей используют обычно характеристические, т. е. интенсивные полосы, при $\epsilon > 10$ моль/(л·см) практически сохраняющие интенсивность и общий вид независимо от строения остальной части молекулы; положение характеристических полос меняется в небольших пределах — до полуширины полосы.

ИК-спектры можно использовать для определения типа нефтей. Мерой содержания аренов служит площадь (S_1) полосы $\nu = 1610 \text{ см}^{-1}$, обусловленной колебаниями связей -C=C- ароматического кольца, а мерой содержания алканов — площадь (S_2) полосы $\nu = 725 \text{ см}^{-1}$, характеризующей колебание связей -C-C- в длинных цепях. Отношение $A = S_1/S_2$ принято за показатель ароматизированности нефтей. Нафтеновые структуры по ИК-спектрам не выявляются. Для метановых нефтей $A < 0,35$, метано-нафтеновых $0,3 \leq A \leq 0,5$, нафтеновых $0,6 < A < 1,2$, нафтено-ароматических $1,2 \leq A \leq 3,5$.

Применение ИК-спектроскопии для структурно-группового анализа высококипящих (выше 200 °С) алкано-цик-