

**К.А. Безручко, Л.І. Пимоненко, О.В. Бурчак, Д.А. Суворов**

## **ОСОБЛИВОСТІ АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНОЇ СТРУКТУРИ КАМ'ЯНОГО ВУГІЛЛЯ В РІЗНИХ НАПРУЖЕНО-ДЕФОРМОВАНИХ СТАНАХ ВУГЛЕПОРОДНОГО МАСИВУ**

Досліджено вплив тектонічного чинника на атомно-молекулярну структуру кам'яного вугілля. Структурні характеристики органічної речовини визначалися методом електронного парамагнітного резонансу (ЕПР) на пробах вугілля, відібраних у різних за генезисом порушеннях і ділянках, що відрізняються напружено-деформованим станом. Визначено, що в подібних за складом, ступенем метаморфізму та загальними тектонічними умовами вугільних пластах атомно-молекулярна структура вугілля була істотно змінена: в умовах стиснення значення показників сорбційної здатності, концентрації парамагнітних центрів (ПМЦ) та коефіцієнта ароматизації вугільної речовини є вищими, ніж в умовах розтягування. Установлено, що тектонічні процеси призводять до активації структурних трансформацій у вугіллі, наслідком чого є зниження накопиченої енергії у вигляді виділення флюїдів, зокрема метану, та структуризація твердого залишку з підвищеним умістом вуглецю.

*Ключові слова:* атомно-молекулярна структура, вугілля, порушення, стиснення, розтягування, структурні трансформації, електронний парамагнітний резонанс.

**Постановка проблеми.** На роль тектоніки в процесах перетворення викопної органічної речовини (ОР) до теперішнього часу немає узгодженого погляду. Умовно тиск можна розділити на геостатичний, що зростає із зануренням осадових відкладів, і тектонічний, який може бути пов'язаний з процесами складкоутворення або переміщеннями окремих блоків гірських порід. У реальних геологічних умовах збільшення з глибиною геостатичного тиску зумовлює зростання температури, що впливає на ступінь метаморфізму вугілля; пришвидшуються або сповільнюються хімічні процеси, що протікають у викопній ОР. Спільний вплив геостатичного тиску й температури найбільш наочно характеризується ступенем метаморфізму вугільної речовини. Зміну метаморфізму з глибиною і за площею в Донецькому басейні детально окреслено в праці М.Л. Левенштейна [2].

Вплив тектонічних сил, на думку Ю.А. Жемчужникова [4] і А.Б. Травіна [10], які досліджували цей чинник через порівняння різних басейнів і окремих родовищ, пов'язаний з виділенням великої кількості тепла, завдяки якому відбувається метаморфічне перетворення вугілля. Тобто на думку авторів, зміна структури вугілля спричинена головним чином не тиском, а температурою. Водночас Н.Г. Рейтан [12] показав, що приріст теплової енергії в разі пружних деформацій порід або переміщення блоків становить лише десяті й соті частки Джоуля на грам, до того ж зростання температури не перевищує одиниць градуса Цельсія.

Б.Д. Мефферт і В.С. Крим [7], вивчаючи вугілля Донбасу, дійшли висновку про зв'язок хімічного складу вугілля з тектонічною активністю Донбасу, що ґрунтується на відповідності ізолоей, які вони побудували, елементам тектоніки. Однак наявні нині повніші дані не такою мірою однозначні. Зокрема, у праці М.В. Черського та ін. [1] обґрунтовано, що основним чинником, який впливає на перетворення вугілля, є механічна енергія, вивільнювана під час тектоносейсмічних процесів. Саме ця енергія призводить до інтенсивного зростання хімічної активності органічного й мінерального складників вугілля, унаслідок чого відбувається ослаблення валентних зв'язків та їхній розрив з утворенням вільних радикалів.

Оскільки структура вугілля формується послідовно: від пластичних дислокацій до крихких, від мікродефектів до розривних порушень, то у зв'язку із цим особливий інтерес становлять роботи, які проводили для моделювання перебігу природних тектонічних

---

© К.А. Безручко, Л.І. Пимоненко, О.В. Бурчак, Д.А. Суворов, 2018

процесів в органічній речовині. У праці [11] встановлено, що процес механічного оброблення призводить до руйнування молекулярної та надмолекулярної структури вугілля. Але треба зазначити, що всі експерименти з механічним впливом в лабораторних умовах за своїми параметрами далекі від природних умов, тому питання про вплив тектонічних сил на атомно-молекулярну структуру вугілля є відкритим.

**Мета роботи:** дослідження впливу тектонічних сил на атомно-молекулярну структуру вугілля на різних етапах формування вугільних родовищ.

**Результати досліджень та їхнє обговорення.** Формування структури вугілля та його властивостей триває постійно під час утворення вугільного родовища. Виділяють два основні етапи розвитку родовища [2], які відрізняються термодинамічними умовами: доінверсійний, що характеризується поступовим збільшенням температури та геостатичного тиску, під час якого відбулися основні вуглефікаційні перетворення органіки; післяінверсійний – зі зменшенням температури та геостатичного тиску, але суттєвим збільшенням тектонічного стиснення (вертикального, пов'язаного з неоднорідним підійманням блоків фундаменту, та горизонтального, зумовленого впливом зовнішніх сил) з утворенням складчастих і розривних порушень. У післяінверсійний етап у природних умовах масив перебуває в полі нерівнокомпонентних напруг, де ділянки розтягування й стиснення формуються внаслідок виникнення критичних флуктуацій у локальних різноактивованих зонах. Такий підхід дає змогу пояснити виникнення різних типів порушень в одному полі деформацій, яке утворюється різними силами й процесами, і розглядати механізм руйнування як зміну взаємного розміщення частинок матеріального середовища, що в підсумку призводить до утворення дефектів та дислокацій.

Об'єктами дослідження обрані малоамплітудні порушення різних генетичних типів: скиди, насиви, кінкбанд (зсув без розриву суцільності з крученням), для характеристики яких борозенні проби вугілля відбиралися безпосередньо із зон зміщувачів і з непорушеного масиву на відстані приблизно 10 м від зміщувачів, та пласти шахт, які перебувають у різному напружено-деформованому стані (розтягання, стиснення), які випробували як зі свердловин, так і гірничих виробок.

Визначення структурних особливостей органічної речовини кам'яного вугілля проводилося методом ЕПР. Зокрема, визначалася концентрація парамагнітних центрів (ПМЦ) –  $N^a$ , тобто дефектів електронної структури, які виникають під впливом зовнішніх (термічних або механічних) чинників: неспарені електрони (вільні радикали) та дефекти систем спряження.

Коефіцієнт ароматизації (показник  $f_a^{EPR}$ ) характеризує кількість і стан систем спряження в молекулярній структурі вугільної речовини, що дає змогу оцінити активність і глибину проходження структурних трансформацій (ступінь структурованості) викопної органіки на молекулярному рівні (табл. 1).

Таблиця 1.

Структурні показники вугілля у зоні зміщувачів різних типів дислокацій

Тип дислокацій	Назва шахти (марка вугілля)	Концентрація парамагнітних центрів, $N^a \cdot 10^{19}$	Коефіцієнт ароматизації $f_a^{EPR}$ , %
Скид	ім. Ілліча (Ж)	1,0	69,0
Поза порушенням		2,5	69,0
Насув	Калинівська-Східна (К)	4,7	78,0
Поза порушенням		4,4	75,0
Насув	ім. М.І. Калініна (Ж)	4,7	63,0
Поза порушенням		3,9	55,03
Кінкбанд	ім. О.Ф. Засядька (Ж)	3,6	46,8
Поза порушенням		3,1	43,7

Пояснення отриманих даних ґрунтується на сучасних уявленнях про молекулярну структуру вугілля [3] та вільно-радикальний механізм структурних перетворень у викопній

ОР. Порівняння структурних показників у зонах зміщувачів та на непорушених ділянках засвідчило, що концентрація парамагнітних центрів у зміщувачах насувів і кінкбандах більша, ніж у непорушеному масиві; у зміщувачі скиду – навпаки. У зміщувачі скиду й непорушеному масиві коефіцієнти ароматизації однакові. Беззмінність коефіцієнта ароматизації свідчить про те, що у вугіллі під впливом розтяжних зусиль насамперед руйнуються міжмолекулярні зв'язки, відповідно внутрішньомолекулярних перетворень не зафіксовано.

Збільшення концентрації парамагнітних центрів поза зміщувачем скиду, вірогідно, пов'язане з тим, що вільні радикали, які виникають на поверхні розриву в розущільненому об'ємі, мігрували та перерозподілилися. Водночас у зміщувачі скиду внаслідок руйнування прилеглих до дефектів молекул і рекомбінації вільних радикалів їхня кількість зменшилася. За умови надходження додаткової енергії чи каталітичного впливу можливі також і хімічні перетворення.

У зміщувачах насувів і в зоні кінкбанда значення структурних показників вищі, ніж у непорушеному пласті. Руйнування під час стискання пов'язане з окремими локальними ділянками розтягування, в яких відбувається складна комбінація руху частинок одна відносно одної: повороти, зміщення з тертям, розрив зв'язків. На відміну від розтягування, стискання призводить до зміни характеру структурних трансформацій, глибини та обсягів перетворень. Окремі вуглеводневі ланцюги (чи їхні ділянки) руйнуються або відокремлюються, отримуючи можливість приймати вигідніші конформації. У макромолекулі вугілля відбувається розрив валентних зв'язків, водночас зменшується вміст і довжина аліфатичних ланцюжків, а конденсовані ароматичні структури перебудовуються. Механохімічні перетворення вугільної речовини позначаються на структурних показниках. Під час стиснення, на відміну від деформацій розтягування, у мікроструктурі вугільної речовини збільшується кількість дефектів, з утворенням яких накопичується або реалізується надлишкова вільна енергія, що витрачається на перебудову внутрішньомолекулярних зв'язків і міграцію вільних валентностей. Отримані за методом інфрачервоної спектроскопії (ІЧС) дані підтверджують [9] зміну молекулярної будови й властивостей вугільної речовини в зоні насуву.

Значення структурних показників вугілля в кінкбандах є меншим, ніж у насувів, але більшим, ніж у скидах, що зумовлено впливом розтяжних зусиль із зсувним складником. У кінкбандах руйнування спричинені розтягуванням, пластичними деформаціями й тертям під час кручення, що призводить до підвищення в перем'ятому вугіллі концентрації ПМЦ [5].

Отже, дані, отримані внаслідок дослідження вугільної речовини у зміщувачах малоамплітудних дислокацій різних типів методом ЕПР, свідчать про вплив тектонічних сил на молекулярну структуру вугілля.

Дослідження структурних характеристик вугілля в тектонічних блоках Центрального геолого-промислового району (ЦР), що відрізняються умовами деформацій (стиснення – розтягнення) проведено на зразках вугілля, відібраних на шахтах ім. Ю.О. Гагаріна й «Північна» (колишня ім. К.Є. Ворошилова).

Шахта «Північна» закладена в західній частині північного крила Горлівської антикліналі, розробляє пласти світ  $C_2^5$ ,  $C_2^6$ ,  $C_2^7$ , що вміщують вугілля марки Ж, глибина – 830-940 м. Зона залягання метанових газів починається з 350-400 м; відносна метановість гірничих виробок становить – 2,5-5,5 м<sup>3</sup>/т с.д., метаноносність – 5-10 м<sup>3</sup>/т с.б.м. Тектонічні порушення на шахті представлені переважно субмеридіональними скидами, амплітудою до 20 м. На шахті «Північна» зафіксовано 50 розривних порушень, з яких насувів тільки 8%, решта – скиди, коефіцієнт розривної порушеності становить 0,17.

Раптові викиди вугілля й газу зареєстровані по вугільних пластах  $m_3$ ,  $k_5$ . Максимальна кількість газодинамічних явищ (11) сталася на пласті  $m_3$  на шахті «Північна» в східній частині шахтного поля, перший викид мав місце на глибині 720 м (пласт  $m_3$ ).

Шахта ім. Ю.О. Гагаріна закладена в західній частині південного крила Головної антикліналі, розробляє пласти світ  $C_2^5$ ,  $C_2^6$ ,  $C_2^7$ , що вміщують вугілля марки Ж, глибина

відпрацювання – 830-940 м. Вугільні пласти на шахті дуже порушені, особливо в західній її частині, в якій розміщена система субширотної зони Чегарських насувів і флексури субмеридіонального простягання. На шахті ім. Ю.О. Гагаріна зафіксовано 158 розривних порушень. Переважна їхня кількість, понад 52%, представлені вскидами субширотного простягання з крутим падінням зміщувачів на південний схід, коефіцієнт розривної порушеності становить 13,1. Субмеридіональне простягання скидів дає змогу припустити, що вони виникли внаслідок поперечних напружень розтягування, зумовлених впливом стискувальних сил.

Глибина залягання метанової зони – 200 м; метаноносність пластів 10–20 м<sup>3</sup>/т с.б.м., метановість гірничих виробок 12 – 25 м<sup>3</sup>/т с.д.

На шахті ім. Ю.О. Гагаріна зареєстровано 22 викиди вугілля й газу, глибина першого викиду – 440 м. На цій шахті також стався найпотужніший на Донбасі викид – 1400 т (пласт І<sub>3</sub>).

Петрографічними дослідженнями вугілля (відеооптичний комплекс МБІ - 11, НВ 200, ПК) встановлено, що вугілля зазначених пластів представлене переважно мацералами групи вітриніту (95%); інертиніту (3-4%) у вигляді мікриніту (I<sub>mi</sub>) і фюзиніту (I<sub>f</sub>), який розподіляється по площинах нашарування між геліфікованими прошарками; ліптиніт (1-2%) трапляється зрідка як окремі мікроспори та обривки макроспор, що свідчить про подібність петрографічного складу вугілля.

Отже, шахта «Північна» відрізняється від шахти ім. Ю.О. Гагаріна меншою газоносністю й викидонебезпечністю вугільних пластів, низькою відносною метановістю виробок, більшою глибиною залягання метанової зони. У регіональному тектонічному плані шахта ім. Ю.О. Гагаріна належить до зони стиснення, а «Північна» – розтягування. Раніше встановлено, що умови стиснення й розтягування генетично не пов'язані з утворенням Головної антикліналі Донбасу. Ці скиди і насуви виникли після її утворення під впливом зсувних зусиль, спрямованих уздовж осі складки [6].

У табл. 2 наведено результати оцінки виходу летких і структурних показників за даними ЕПР-спектроскопії вугільних пластів світ C<sub>2</sub><sup>6</sup>–C<sub>2</sub><sup>7</sup>, які відпрацьовуються на шахтах «Північна» та ім. Ю.О. Гагаріна.

Наведені в табл. 2 дані свідчать, що значення цих показників характерні для вугілля марки Ж, але в разі близьких середніх значень показників виходу летких і концентрації парамагнітних центрів середні значення коефіцієнта ароматизації для проб цих двох шахт достовірно відрізняються.

Оскільки умови накопичення відкладів були майже однаковими, то можна зробити висновок, що зазначені відмінності в молекулярній структурі викопної органіки сформувалися під впливом подальших тектонічних процесів. Отже, зміни в молекулярній структурі вугілля пластів шахти ім. Ю.О. Гагаріна в умовах стиснення суттєвіші, ніж у речовині пластів шахти «Північна». Структурні показники відрізняються не тільки між різними пластами, але й у межах одного пласта (табл. 3).

На розкид значень впливає мінливість структури, зумовлена умовами накопичення відкладів і неоднорідністю полів напружень. Середні значення структурних показників по пластах істотно відрізняються: у зоні стиснення (шахта ім. Ю.О. Гагаріна) вони суттєво вищі, ніж у зоні розтягування (шахта «Північна»).

Висновки, зроблені на підставі вивчення структурних параметрів шахт Центрального району, підтверджуються також на шахтах Донецько-Макіївського району (ДМР). Усереднені результати лабораторних визначень зазначених показників для вугільного пласта І<sub>3</sub> у цих двох геолого-промислових районах наведено на рис. 1.

Очевидно, що зміни структурних показників, які характеризують вугільний пласт І<sub>3</sub> у зонах стиснення й розтягування різних районів, подібні. За аналогією із шахтами Центрального району: в області стиснення значення показників сорбційної здатності, розривної порушеності, коефіцієнта ароматизації та концентрації ПМЦ вище, розтягування – нижче.

Порівнюючи із Центральним районом, у Донецько-Макіївському районі концентрація ПМЦ вища, коефіцієнт ароматизації – навпаки. Величини сорбційної здатності вугілля на шахтах, розміщених у зонах розтягування, однакові, стиснення – у ДМР вищі. Установлені відмінності, найімовірніше, пов'язані з різними регіональними умовами деформації масивів на досліджуваних шахтах [6].

Таблиця 2.

Структурні показники та вихід летких вугільних пластів шахт Центрального району Донбасу

Шахта ім. Ю.О. Гагаріна (горизонт 830 м)				Шахта «Північна» (горизонт 1050 м)			
Індекс пласта	Коефіцієнт ароматизації, %	Концентрація ПМЦ, №, %	Вихід летких V <sub>лет</sub> , %	Індекс пласта	Коефіцієнт ароматизації, %	Концентрація ПМЦ, №, %	Вихід летких V <sub>лет</sub> , %
m <sub>6</sub>	46	2,5	36	m <sub>6</sub> <sup>2</sup>	48	2,4	37,7
m <sub>6</sub>	54	2,4	36	m <sub>6</sub>	44	1,8	38,6
m <sub>4</sub>	77	3,2	32,9	l <sub>8</sub>	60	3,2	30,8
m <sub>3</sub>	52	4,2	26,2	l <sub>8</sub>	54	2,3	31
m <sub>3</sub>	64	3,6	28,6	l <sub>7</sub>	54	3,2	28
m <sub>3</sub>	62	3,5	28,6	l <sub>6</sub>	50	2,8	31,4
m <sub>2</sub>	51	1,8	35,7	l <sub>5</sub>	49	1,5	32,6
l <sub>8</sub>	53	2,2	34,6	l <sub>5</sub>	52	3,1	31,9
l <sub>7</sub>	53	1,5	35,5	l <sub>5</sub>	45	2,1	34
l <sub>5</sub>	52	3,2	31,7	l <sub>5</sub>	45	3,4	33,7
l <sub>5</sub>	52	3,1	32,9	l <sub>3</sub>	58	2,4	32
l <sub>4</sub>	56	3,4	30,5	l <sub>3</sub>	56	3,3	31
l <sub>4</sub>	84	2,9	27,1	l <sub>3</sub>	50	3,5	31,7
l <sub>3</sub>	69	3,4	27,7	l <sub>1</sub>	53	2,3	29
l <sub>3</sub>	72	3	28,5	l <sub>1</sub>	45	1,7	39,7
l <sub>3</sub>	43	1,8	32,9	k <sub>8</sub>	62	3	29,7
l <sub>2</sub>	58	1,9	30,1	k <sub>8</sub>	60	3,1	29,7
l <sub>2</sub>	61	3	29,4	k <sub>8</sub>	56	3,4	28,1
k <sub>5</sub>	63	2,4	28,3	k <sub>8</sub>	52	2,8	28,5
k <sub>5</sub>	62	2,2	27,5	–	–	–	–
max	77	4,2	36		62	3,5	39,7
Min	43	1,8	27,5		44	1,7	28,1
середнє	<b>59,2*</b>	2,8	31		<b>52,3*</b>	2,7	32
відхилення	10,3	0,7	3,3		5,5	0,6	3,4

Примітка: Жирним шрифтом та символами виділена пара середніх значень, що достовірно розрізняються ( $p < 0,05$ ).

З огляду на однакову потужність вугільних пластів і ступінь їхнього метаморфізму, з накопиченням відкладів структура вугілля шахт у кожному з районів була подібна, але подальші геодинамічні процеси в цих районах суттєво відрізнялися.

У ЦР зони малоамплітудних порушень генетично не пов'язані з утворенням Головної антикліналі та вторинних складок з ускладненнями на крилах. Вони сформувалися після них унаслідок дії зсувних зусиль, спрямованих уздовж осі складки. Безсумнівно, що формування антиклінальної складки поздовжнього вигину, що проходить уздовж усього Донецького басейну, відбувалося впродовж тривалого часу й під впливом потужніших тектонічних зусиль, ніж утворення локальних зон стиснення і розтягування на крилах

Головної антикліналі. Тому в умовах ЦР процеси руйнування суттєво не вплинули на молекулярну структуру вугілля; вона переважно сформувалася до утворення зон малоамплітудних порушень, що й зумовило зіставність значень показників ПМЦ у зонах стиснення і розтягування. Першопричиною створення ділянок з різними структурними показниками вугілля є зсувні зусилля, що виникли після інверсії, під впливом яких відбувалися пружні, пластичні та крихкі деформації відкладів. Під час стиснення дефекти і дислокації рівномірніше розподілялися по площі пластів, ніж під час розтягування, про що свідчать: більший показник (майже вдесятеро) розривної порушеності на шахті ім. Ю.О. Гагаріна та розподіл структурних показників за площею одного пласта (див. рис. 1).

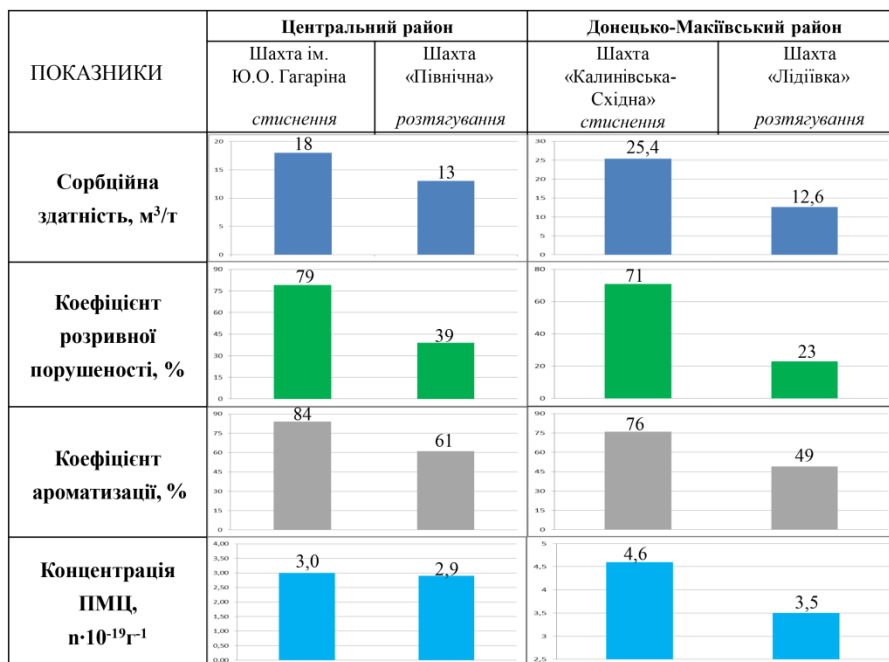


Рис. 1. Зіставлення структурних показників вугільного пласта І<sub>3</sub> на шахтах Центрального та Донецько-Макіївського геолого-промислових районів Донбасу

Інша картина спостерігається в розподілі величин структурних показників вугільної речовини в ДМР. На відміну від Центрального району, потужність пластів вугілля та порід відрізняється, що пояснюється переміщеннями блоків фундаменту на доінверсійному етапі. Напружено-деформований стан масивів шахт відрізняється як між собою, так і порівнюючи із шахтами ЦР. Поле шахти «Калинівська-Східна» розміщене в зоні впливу Калинівської флексури, яка почала формуватися ще в період накопичення відкладів. В інверсійний і післяінверсійні періоди рухи по ній активізувалися, що привело до ускладнення будови вугільних пластів. Тепер поле шахти перебуває в зоні інтенсивних сучасних рухів. Для поля шахти «Лідиївка» характерна невелика інтенсивність інверсійних процесів. Невеликі за амплітудою розривні порушення й пологі складки свідчать про незначні тектонічні зусилля на післяінверсійному етапі.

На відміну від часу утворення малоамплітудних розривних порушень, деформування блоків відбувається переважно повільно й безперервно впродовж тривалого часу. Механізм формування структури вугілля пов'язаний з виникненням у стиснених тілах ущільнених ділянок, насичених дислокаціями, та утворенням поблизу них зон з напруженнями розтягування, в яких підвищується концентрація парамагнітних центрів. Вплив циклічного навантаження приводить до безперервного збільшення щільності дислокацій, кожна з яких накопичує певну кількість енергії. Підвищена реакційна здатність

частинок зумовлює можливість відриву кінцевих груп, що може також зумовлювати синтез вуглеводневих газів.

Таблиця 3.

Розподіл структурних показників по вугільному пласту Із шахт

Шахта ім. Ю.О. Гагаріна		Шахта «Північна»	
Концентрація парамагнітних центрів, $N^a$ , $г^{-1}$	Коефіцієнт ароматизації $f_a^{EIP}$ , %	Концентрація парамагнітних центрів, $N^a$ , $г^{-1}$	Коефіцієнт ароматизації $f_a^{EIP}$ , %
2,65		1,6	58
2,6	72	3,3	51
2,8	67	2,7	56
2,5	64	1,9	54,5
3,6	70	2,4	58
3,65	70	3,3	51
2,7	61	–	–
3,52	67	–	–
3,2	72	–	–
3,5	62	–	–
3,6	64	–	–
<b>3,12</b>	<b>67,27</b>	<b>2,5</b>	<b>54,75</b>

Нині є думка, що зі стисненням утворений газ зберігається в масиві, а з розтягуванням – вугленосна товща дегазується. З огляду на час існування та розвитку газувугільних родовищ, очевидно, що газ і далі утворюється в процесі релаксації структурних напружень, накопичених в органічній речовині під час стиснення. З розтягуванням накопичення енергії відбувається в менших масштабах, відповідно й обсяги утвореного газу – менші. Вплив тектонічних сил на процеси виділення (генерації) вугільного метану підтверджується даними про фактичну метановість виробок на шахтах ім. Ю.О. Гагаріна (зона стиснення) та «Північна» (зона розтягування). Водночас значення концентрації парамагнітних центрів на цих шахтах майже не відрізняються. Оскільки величина цього показника залежить від інтенсивності зовнішніх (тектонічних) впливів на вугільний пласт, то можна зробити висновок, що величини сил, які впливали на вугільну речовину, були приблизно однаковими, але (див. рис.1) через різне їхнє спрямування в масиві виникли поля напружень різного типу і як наслідок – утворилися ділянки різні за типом деформації та структурних трансформацій.

У процесі вуглефікації в макромолекулах відбуваються два, на перший погляд, несумісні процеси – деструкція речовини та її структуризація у вигляді внутрішньомолекулярної циклізації й утворення систем спряження (ароматизації). Тобто паралельно з відщепленням стійких низькомолекулярних з'єднань, в умовах замкненої системи у твердій фазі вугільної речовини, відбуваються процеси структуризації (циклізації, поліконденсації) зі зниженням енергії речовини завдяки утворенню нових ковалентних зв'язків між сусідніми вуглеводневими ланцюжками.

Зменшення концентрації ПМЦ у зонах розтягнення свідчить про проходження процесів рекомбінації вільних радикалів, а також можливе зростання ролі хімічних процесів.

Коефіцієнт ароматизації характеризує структурні перетворення у вугіллі, які відбулися в речовині за допомогою накопиченої під зовнішнім впливом енергії. Факт зростання ароматичного складника в процесі метаморфізму не викликає принципових заперечень. Запропонований у праці [8] «перколяційний» підхід дає можливість пояснити один з можливих механізмів циклізації вугільної речовини, за яким аліфатичні з'єднання «зшиваються» між собою. На площині це має вигляд утворення саме циклічних з'єднань.

«Зшивання» деяких молекул можливе також унаслідок рекомбінації радикалів. У результаті цих процесів підвищується ступінь упорядкованості (ароматизація) вугілля, а енергія системи водночас прагне до мінімуму.

За своєю фізичною сутністю процеси структуризації (виникнення нових ковалентних зв'язків) – це переведення вільної енергії у зв'язаний стан, водночас енергія системи знижується. Потік енергії призводить до зростання нерівноважності системи, унаслідок чого активуються процеси, що зумовлюють перерозподіл і зниження енергії в молекулярній структурі кам'яного вугілля завдяки підвищенню структурованості системи та переходу частини енергії у зв'язаний стан – утворення нових міжмолекулярних і міжатомних зв'язків.

У такий спосіб проведені дослідження засвідчили, що під впливом тектонічних процесів вуглефікаційні перетворення у викопній органіці відбуваються за вільно-радикальним механізмом у двох напрямках: виділення низькомолекулярних з'єднань (унаслідок зменшення впорядкованості системи вугілля-газ) і структуризація твердого залишку, збагаченого вуглецем (унаслідок зростання статистичної ентропії, яка визначається кількістю мікростанів для цього структурного фрагменту [8]).

Тобто, що більшою була інтенсивність тектонічних процесів, то більше енергії надійшло в систему та більше значних змін зазнала молекулярна структура кам'яного вугілля; відповідно в молекулярній структурі вугільної речовини в ЦР (в умовах стиснення) відбулися більш глибокі зміни, ніж у ДМР (в умовах розтягування).

Отже, післяінверсійні процеси в тотожних за складом і ступенем метаморфізму вугільних пластах сусідніх шахт сприяли формуванню локальних тектонічних умов, під впливом яких підведена енергія витрачалася в мікро- і молекулярній структурі вугільної речовини на утворення дефектів, дислокацій, субмікротріщин. Циклічне навантаження сприяло нерівномірному накопиченню, збереженню та витрачання різного за величиною енергетичного потенціалу. В умовах розтягування завдяки локалізації дефектних ділянок в атомно-молекулярній структурі вугілля сформувався менший енергетичний потенціал, ніж в умовах стиснення. Унаслідок нині в структурі вугільної речовини пластів шахти «Північна» акумульовано порівняно менше енергії для проходження структурних трансформацій, наслідком яких є генерація (відщеплення) стійких низькомолекулярних сполук. Водночас важливо зазначити, що зниження виділення метану фіксується в разі підвищеного температурного градієнта, що на практиці підтверджує висновок про механохімічну природу метаногенерації та обмежує роль теплового потоку в постінверсійних умовах лише впливом на швидкість перетворень.

Відмінності в енергетичному стані вугільних пластів, які перебувають в різних умовах деформації, підтверджуються фактичними даними, отриманими в процесі експлуатації шахт: кількістю газодинамічних явищ, газоносністю вугільних пластів та глибиною залягання метанових газів.

В умовах тектонічного стискання, напруження, що виникали в пластах, знімалися з розривом їхньої суцільності, що підтверджується великою кількістю розривних порушень на шахтах ім. Ю.О. Гагаріна та «Калинівська-Східна». Водночас деяка частина енергії тектонічних зусиль витрачалася на руйнування стирання вугілля та деструкцію вугільної речовини на атомно-молекулярному рівні. Можливим наслідком цих процесів є також підвищення концентрації парамагнітних центрів у речовині. Під зовнішнім силовим впливом підсилюється міжмолекулярна взаємодія, що переконаливо простежується за зростанням, в умовах стиснення, сорбційної здатності вугільної речовини. В умовах розтягування активація речовини відбувається набагато меншою мірою.

**Висновки.** Формування атомно-молекулярної структури вугілля відбувалося в два етапи, які відрізняються характером тектонічних процесів і термодинамічними умовами їхнього проходження:

– на доінверсійному етапі умови осадконакопичення та неоднорідність полів напружень вплинули на варіативність середніх значень структурних показників вугілля по районах та пластах;



– на постінверсійному етапі в подібних за складом, ступенем метаморфізму та загальними тектонічними умовами вугільних пластах атомно-молекулярна структура вугілля була істотно змінена: в умовах стиснення значення показників сорбційної здатності, концентрації ПМЦ та коефіцієнта ароматизації вугільної речовини є вищими, ніж в умовах розтягування.

Процеси вуглефікації є релаксаційними, з проходженням яких енергія системи загалом знижується. Релаксація системою енергетичних збурень призводить до активації структурних трансформацій у вугіллі, наслідком чого є зниження накопиченої енергії у вигляді виділення флюїдів, зокрема метану, та структуризації твердого залишку з підвищенням умістом вуглецю.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Влияние тектоносейсмических процессов на образование и накопление углеводородов / Н.В. Черский, В.П. Царев, Т.И. Сороко, О.Л. Кузнецов. Новосибирск: Наука, 1985. 223 с.
2. Геология месторождений угля и горючих сланцев СССР. Угольные бассейны и месторождения юга Европейской части СССР / Под ред. И.А. Кузнецова, В.В. Лапушина, М.Л. Левенштейна и др. М.: Гос. научн.-техн. изд-во лит. по геол. и охране недр, 1963. Т. 1. С. 113-123.
3. *Гюльмалиев А.М., Головин Г.С., Гладун Т.Г.* Теоретические основы химии угля. М.: Изд-во МГГУ, 2003. 556 с.
4. *Жемчужников А.А.* Общая геология ископаемых углей. М.: Углетехиздат, 1948. 491 с.
5. *Лукинов В.В., Пимоненко Л.И., Бурчак А.В., Барановский В.И.* Петрографические и физические характеристики угольного вещества из кинкбандов // Геолог України. 2010. №3 (31). С. 91-98.
6. *Лукинов В.В., Пимоненко Л.И.* Тектоника метанугольных месторождений Донбасса. К.: Наук. думка, 2008. – 352 с.
7. *Мефферт Б.М., Крым В.С.* Ископаемые угли Донецкого бассейна. Угли Алмазного и Марьевского районов. Л.: 1932. Вып. 2. С. 14- 25.
8. Механизмы поглощения энергии угольным веществом на атомно-молекулярном уровне / А.Ф. Булат, Л.И. Пимоненко, А.В. Бурчак, Д.А. Суворов // Розробка родовищ: збірник наукових праць. 2014. Т. 8. С. 329-334.
9. *Пимоненко Л.И., Балалаев А.К., Барановский В.И.* Реконструкция геохимического барьера в период осадконакопления по локализации малоамплитудного надвига пласта I<sub>3</sub> (Донбасс) // Тектоника и стратиграфия. 2014. Вып. 41. С. 28-40.
10. *Травин А.Б.* К вопросу о метаморфизме ископаемых углей // Тр-ды горно-геол. ин-та Зап.-Сиб. филиала АН СССР. 1950. Вып. 10. С. 22-27.
11. *Хренкова Т.М.* Механохимическая активация углей. М.: Недра, 1993. 176 с.
12. *Reitan P.H.* Energi transformations and the recrystallization and temperatures of metamorphism Kristallinikum. 14. 1979. P. 181-193.

## REFERENCES

1. The influence of tectono-seismic processes on the formation and accumulation of hydrocarbons / N.V. Chersky, V.P. Tsarev, T.I. Soroko, O.L. Kuznetsov. 1985. *Science*, Novosibirsk, 223 p. – in Russian
2. Geology of coal deposits and oil shale of the USSR. Coal Basins and Deposits of the South of the European Part of the USSR / Ed. I.A. Kuznetsova, V.V. Lapushina, M.L. Levenshteyna and others. 1963. *State. scientific-tech. publishing house lit. by geol. and protection of mineral resources*, Moskva, vol. 1, p. 113-123. – in Russian
3. *Gulmaliev A.M., Golovin G.S., Gladun T.G.* 2003. Theoretical foundations of coal chemistry. *Publishing House of MGGU*, Moskva, 556 p. – in Russian
4. *Zhemchyzhnikov A.A.* 1948. General geology of fossil coal. *Ugletekhizdat*, Moskva, 491 p. – in Russian
5. *Lukinov V.V., Pymonenko L.I., Burchak A.V., Baranovsky V.I.* 2010. Petrographic and physical characteristics of coal matter from kinkbands. *Geologist of Ukraine*. No. 3 (31). P. 91-98. – in Russian
6. *Lukinov V.V., Pymonenko L.I.* 2008. Tectonics of methane-coal deposits of Donbass. *Naukova dumka*, Kyiv, 352 p. – in Russian
7. *Meffert B.M., Crimea V.S.* 1932. Fossil coals of the Donetsk basin. Coals of the Diamond and Maryevsky regions. Leningrad. Issue 2, p. 14-25. – in Russian

8. Mechanisms of energy absorption by a coal substance at the atomic-molecular level / A.F. Bulat, L.I. Pymonenko, A.V. Burchak, D.A. Suvorov. 2014. Rozrobka rodovyshch: zbirnyk naukovykh prats. Vol. 8, p. 329-334. – in Russian
9. Pymonenko L.I., Balalaev A.K., Baranovsky V.I. 2014. Reconstruction of the geochemical barrier during the period of sedimentation by localizing the low-amplitude thrust of the I<sub>3</sub> formation (Donbass). Tectonics and Stratigraphy. Issue 41, p. 28-40. – in Russian
10. Travin A.B. 1950. On the question of the metamorphism of fossil coals. Tr-dy mining and geol. Inst Zap.- Sib. Branches of the Academy of Sciences of the USSR. Issue 10, p. 22-27. – in Russian
11. Khrenkova T.M. 1993. Mechanochemical activation of coals. *Nedra*, Moskva, 176 p. – in Russian
12. Reitan P.H. 1979. Energi transformations and the recrystallization and temperatures of metamorphism – Kristallinikum. 14. P. 181-193.

**K.A. Bezruchko, L.I. Pymonenko, O.V. Burchak, D.A. Suvorov**  
**ATOMIC-MOLECULAR STRUCTURE FEATURES OF COAL IN THE DIFFERENT STRESSED-  
 DEFORMED STATES OF COAL-ROCK MASSIF**

Influence of tectonic factor on the atomic-molecular structure of coal was studied. Structural characteristics of organic matter were determined by the method of electronic paramagnetic resonance (EPR) on the tests of coal selected in dislocations of different genesis and on the areas of different stressed-deformed state. It was determined that in similar on composition, degrees of metamorphism and by general tectonic conditions coal beds the atomic-molecular structure of coal was substantially changed: in the compression conditions of value of sorption capacity indexes, the concentrations of PMC and coefficient of coal matter aromatization are higher, than in the conditions of tension. It was established that tectonic processes lead to activating of structural transformations in coal, as the result there is decrease of the accumulated energy as emission of fluids, in particular, methane, and structuring of solid residue with increased carbon content.

*Key words:* atomic-molecular structure, coal, dislocation, compression, tension, structural transformations, electronic paramagnetic resonance.

**К.А. Безручко, Л.И. Пимоненко, А.В. Бурчак, Д.А. Суворов**  
**ОСОБЕННОСТИ АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ КАМЕННОГО УГЛЯ В РАЗЛИЧНЫХ  
 НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЯХ УГЛЕПОРОДНОГО МАССИВА**

Исследовано влияние тектонического фактора на атомно-молекулярную структуру каменного угля. Структурные характеристики органического вещества определялись методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) на пробах угля, отобранных в нарушениях различного генезиса и на участках, отличающихся напряженно-деформированным состоянием. Определено, что в подобных по составу, степени метаморфизма и за общими тектоническими условиями угольных пластах атомно-молекулярная структура угля была существенно изменена: в условиях сжатия значения показателей сорбционной способности, концентрации ПМЦ и коэффициента ароматизации угольного вещества выше, чем в условиях растяжения. Установлено, что тектонические процессы приводят к активации структурных трансформаций в угле, следствием чего является снижение накопленной энергии в виде выделения флюидов, в частности метана, и структуризации твердого остатка с повышенным содержанием углерода.

*Ключевые слова:* атомно-молекулярная структура, уголь, нарушение, сжатие, растяжение, структурные трансформации, электронный парамагнитный резонанс.

Інститут геотехнічної механіки ім. М.С. Полякова НАН України, м. Дніпро  
 Безручко Костянтин Андрійович  
 Пимоненко Людмила Іванівна  
 Бурчак Олександр Васильович

Стаття надійшла: 5.04.2018