



Рис. 2. Влияние расхода рециркулирующего стабильного бензина на содержание  $H_2S$  в стабильном бензине

ции получится создать сильный паровой поток, а именно повысить расход острого орошения, осуществить возврат части стабильного бензина с блока ректификации в низ колонны стабилизации [2]. Содержание сероводорода в стабильном

бензине снижается и таким образом, возрастает коррозионная безопасность продукта, повышается эффективность установки каталитической депарафинизации дизельных фракций.

### Список литературы

1. Медведева М.Л. Коррозия и защита оборудования при переработке нефти и газа. – М.: ФГУП Изд-во Нефть и газ РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, 2005. – 312с.
2. Belinskaya N.S., Ivanchina E.D., Ivashkina E.N., Chuzlov V.A., Faleev S.A. Mathematical

modeling of the process of catalytic hydrodewaxing of atmospheric gasoil considering the interconnection of the technological scheme devices // Procedia Engineering, 2015. – Vol.113. – P.68–72.

## РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ РЕАКТОРА ТРАНСАЛКИЛИРОВАНИЯ БЕНЗОЛА ЭТИЛЕНОМ НА ЦЕОЛИТСОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Л.С. Игнатова, С.А. Кошкин

Научный руководитель – д.т.н., профессор Е.Н. Ивашкина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, ignatovalyibov@gmail.com

Этилбензол (ЭБ) является основным сырьем для производства стирола, который в дальнейшем перерабатывается в полистирол. Полистирол нашел широкое применение во многих отраслях, например, в радиотехнике, строительной промышленности, автомобилестроении и т.д.

Для производства ЭБ существуют различные технологии. В настоящее время наблюдается тенденция перевода существующих установок алкилирования на современные твердые цеолитсодержащие катализаторы. Именно поэ-

тому перед нефтеперерабатывающими заводами стоит задача повышения эффективности действующих установок производства алкилата [1].

Для повышения эффективности процесса применяется метод математического моделирования.

Целью данной работы является разработка формализованной схемы превращений углеводородов процесса трансалкилирования, необходимой для создания математической модели промышленной технологии этилбензола на цеолитсодержащих катализаторах на основе анали-

**Таблица 1.** Термодинамическая характеристика реакций процесса (T=473 К, P=33,56 атм.)

№	Реакция	$\Delta H$ , кДж/моль	$\Delta S$ , кДж/(моль·К)	$\Delta G$ , кДж/моль
1	$C_6H_4(C_2H_5)_2 + C_6H_6 \rightarrow 2C_6H_5CH_2CH_3$	-11,65	0,013	-18,01
2	$C_6H_5CH_2CH_3 + C_2H_4 \rightarrow C_6H_4(C_2H_5)_2$	-93,75	0,141	-27,20
3	$2C_6H_4(C_2H_5)_2 \rightarrow$ $\rightarrow C_6H_3(C_2H_5)_3 + C_6H_5CH_2CH_3$	-22,55	0,028	-36,01
4	$C_2H_4(C_6H_5)_2 \rightarrow C_6H_5CH_2CH_3 + C_6H_6$	-54,01	0,041	-73,58
5	$C_2H_4 + C_6H_6 \rightarrow C_6H_5CH_2CH_3$	-105,40	0,127	-45,21
6	$C_6H_4(C_2H_5)_2 + C_6H_5CH_2CH_3 \rightarrow$ $\rightarrow C_6H_3(C_2H_5)_3 + C_6H_6$	-10,90	0,015	-18,00
7	$C_6H_5C_4H_9 \rightarrow C_6H_6 + C_4H_8$	-91,80	163,56	-12,80
8	$C_6H_5C_4H_9 \rightarrow C_6H_5CH_2CH_3 + C_2H_4$	70,15	161,91	-8,05
9	$C_4H_8 + H_2 \rightarrow C_4H_{10}$	-136,87	0,106	-86,72

за работы промышленного реактора в сочетании с методом квантово-химического моделирования.

В результате проведения исследований были выделены следующие псевдокомпоненты для разработки формализованной схемы превращений:

1) фракция парафинов (этана, этилена, пропана, бутана, пентана).

2) фракции парафинов  $C_6$ ,  $C_7$ , представлена метилциклопентаном и циклогексаном.

3) индивидуальные углеводороды этилбензол (ЭБ), бензол, диэтилбензол (ДЭБ), триэтилбензол (ТЭБ), бутилбензол (ББ);

4) тяжелые фракции углеводородов.

Для численного исследования каталитического процесса использован метод DFT, основанный на теории функционала плотности (DFT–Density Functional Theory), который учитывает эффект электронной корреляции [2]. Метод реализован в прикладной программе Gaussian.

В таблице 1 приведен список реакций, протекающих в реакторе трансалкилирования. Тер-

модинамическая характеристика реакций процесса, определенные с привлечением методов квантовой химии, представлены в таблице 1.

Расчитанные значения изменения энергии Гиббса показали, что все реакции при условиях проведения процесса в промышленности, являются термодинамически возможными, и большинство из них обратимы. Результаты расчетов легли в основу разработки математической модели промышленной установки этилбензола на цеолитсодержащих катализаторах.

Кинетические параметры модели согласно предложенной схеме превращений углеводородов определены решением обратной кинетической задачи с использованием данных промышленной эксплуатации цеолитсодержащего катализатора трансалкилирования.

Погрешность расчетов по модели основных показателей работы реактора трансалкилирования (концентрации целевых и побочных компонентов в продуктовой смеси, селективность, конверсия) не превысила 10%, что соизмеримо с экспериментальными методами их определения.

### Список литературы

1. Данхэм Д. Усовершенствование процесса алкилирования для нефтеперерабатывающей промышленности. // Нефтегазовые технологии, 2006. – №6. – С.81–84.
2. Полещук О.Х., Кижнер Д.М. Химические исследования методами расчета электронной структуры молекул. – Томск: Изд-во ТПУ, 2006. – 145с.