

300 м²/г).

Изменение кислотности поверхности модифицированных индием носителей по сравнению с «чистым» Al₂O₃ исследовали с помощью температурно-программируемой десорбции аммиака (ТПД NH₃). Введение индия снижает общую кислотность носителя, что подтверждает литературные данные [2].

Результаты проведенного ТПВ H₂ позволяют сказать о том, что оксид индия легко восстанавливается до металлического состояния в присутствии платины.

Для катализаторов провели оценку дисперсности Pt, а так же определили количество платиновых центров в заряженном и металлическом состоянии.

По результатам каталитических испытаний образцов рассчитана активность (удельная производительность по ароматическим углеводородам), селективность по изомерам, а также селек-

тивность по ароматическим углеводородам.

Для образца, полученного введением 0,3 % мас. In из нитрата индия совместной пропиткой с H₂PtCl₆, средняя активность (удельная производительность по ароматическим углеводородам) катализатора составила 2,45 гАр/(гКат•ч), селективность по ароматическим углеводородам 0,6, что превышает значения активности и селективности для образца на монометаллическом Pt/Al₂O₃-Cl и биметаллическом Pt-Re/Al₂O₃-Cl промышленном катализаторах.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что введение индия воздействует на кислотную и металлическую функции платиносодержащего катализатора.

Изучение физико-химических характеристик объектов исследования проведено с использованием приборной базы Омского регионального ЦКП СО РАН (ОмЦКП СО РАН).

Список литературы

1. Jahel A., Avenier P., Lacombe S., Olivier-Fourcade J., Jumas J. // *J. Catal.*, 2010.– №272.– P.275–286.
2. Liu X., Lang W., Long L., Hu C., Chu L., Guo Y. // *Chemical Engineering Journal*, 2014.– №286.– P.183–192.

РАЗРАБОТКА КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИРУЮЩЕЙ СИСТЕМЫ ПРОЦЕССА СЕРНОКИСЛОТНОГО АЛКИЛИРОВАНИЯ ИЗОБУТАНА ОЛЕФИНАМИ С УЧЕТОМ ДЕЗАКТИВАЦИИ КАТАЛИЗАТОРА

А.С. Ушаков, И.О. Долганова, И.М. Долганов
Научный руководитель – д.т.н., профессор Е.Н. Ивашкина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, tpu@tpu.ru

В промышленных масштабах катализаторами процесса алкилирования изобутана олефинами являются жидкие кислоты: серная и фтороводородная.

Кроме ускорения основных процессов, данные катализаторы ускоряют и побочные реакции, такие как самоалкилирование изобутана, полимеризация олефинов, деструктивное алкилирование [1]. Данные процессы приводят к образованию веществ, существенно снижающих концентрацию требуемых основных компонентов алкилата, триметилпентанов, а также октановое число. Необходимо увеличивать расход кислоты для поддержания данного показателя.

Целью работы стала разработка компьютер-

ной моделирующей системы процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами с учетом дезактивации катализатора.

Главным параметром, влияющим на активность кислоты, является концентрация свежей кислоты. В работе установки сернокислотного алкилирования используется кислота с концентрацией 90–98 %. Зависимость октанового числа от концентрации кислоты можно увидеть ниже.

Процессы деструктивного алкилирования, самоалкилирования и полимеризации приводят к образованию высокомолекулярных органических соединений (АСО). Причем чем дольше катализатор находится в реакторе, тем выше их концентрация. Точный механизм образования

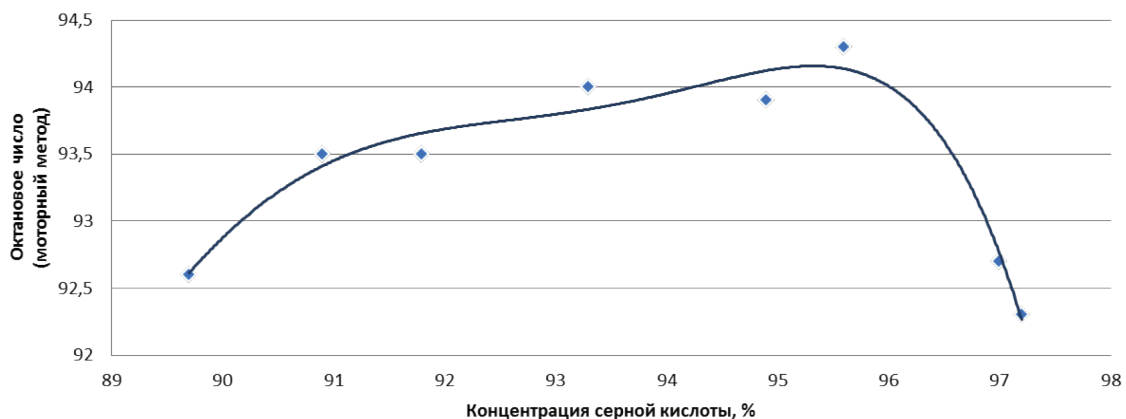


Рис. 1. Зависимость октанового числа от концентрации кислоты

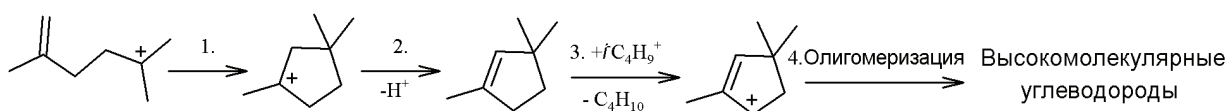


Схема 1.

высокомолекулярных соединений пока неизвестен, но установлено, что молекула ASO имеет молекулярный вес около 280 г/моль и пятичленный цикл, а также двойные связи [2]. По оценке кинетических параметров с помощью программы Gaussian, содержащего процедуру B3LYP 3-21 метода DFT, был предложен возможный механизм протекания одного из побочных процессов:

Также, для учёта активности кислоты была введена поправка:

$$w_{1в/у} = w_{в/у} + 15,5 \cdot (H_{w(H_2SO_4)} - H_{98}) - 3,$$

где $w_{1в/у}$ – концентрация высокомолекулярных углеводородов после поправки, $w_{в/у}$ – концен-

трация высокомолекулярных углеводородов до поправки. Введение данной функции учета падения активности кислоты позволило получать результаты, сходимость которых с экспериментальными была очень велика.

Таким образом, в ходе данного исследования было определено, что основным параметром, определяющим снижение концентрации серной кислоты в процессе алкилирования изобутана олефинами, является концентрация свежей кислоты. При уменьшении времени контакта концентрация высокомолекулярных соединений уменьшается. Также был установлен возможный механизм образования этих углеводородов исходя из термодинамических параметров процесса.

Список литературы

1. Дорогочинский А.З., Лютер А.В., Вольпова Е.Г. Сернокислотное алкилирование изопарафинов олефинами. Изд. «Химия», 1970.– 216с.
2. Berenblyum A.S., Ovsyannikova L.V., Katsman E.A., Zavilla J., Hommeltoft S.I., and Karasev Yu.Z., *Appl. Catal., A*, 2002.– Vol.232.– P.51.