

вания влияния технологических параметров на процесс каплеобразования при разрушении водонефтяных эмульсий.

На рисунке приведена зависимость влияния концентрации химического реагента на поверхностное натяжение.

Таким образом, учет в математической мо-

дели влияния концентрации деэмульгатора на поверхностное натяжение позволит нам спрогнозировать влияние реагента на эффективность процесса каплеобразования при промышленной подготовке нефти и определить наиболее эффективные режимы процесса разрушения водонефтяной эмульсии.

Список литературы

1. Тронов В.П. Системы нефтегазосбора и гидродинамика основных технологических процессов. – Казань: Фэн, 2002. – 512с.
2. Глаголева О.Ф., Капустина В.М. Технология переработки нефти. Часть первая. Первичная переработка нефти. – М.: Химия, 2007. – 275–287.
3. Пузин Ю.И. Практикум по химии нефти и газа. – Уфа: Изд-во УГНТУ, 2004. – 142с.

ТЕРМОДИНАМИКА ПРОЦЕССА ЭПОКСИДИРОВАНИЯ БИОДИЗЕЛЯ

С.А. Юдаев, И.О. Долганова

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, udgin92@mail.ru

Эпоксидные соединения – химические вещества, в состав которых входят эпоксидные кольца (одно или несколько) [1]. Эпоксидные соединения нашли широкое применение как в производстве растворителей, пластификаторов, клеев и синтетических смол. Они часто используются в различных отраслях промышленности: производство ПВХ, эпоксидных смол и лакокрасочных продуктов, а также получение конструкционных материалов с требуемыми свойствами.

Все эксперименты проводили в аппарате барботажного типа. Реакторный узел представляет собой обогреваемую воронку Шота объемом 200 мл, снизу которой подавался сжатый и осушенный воздух с расходом 2–5 мл/с. Подачу воздуха регулировали вентилем. Вверху реактора обратный холодильник конденсатор, охлаждаемый проточной водой. Снизу приемник колба на 100 мл. Температуру в реакторе 100–120 °С регулировали температурой масла, подаваемого в рубашку реактора.

На основании анализа реакционной массы оксидата, полученного в результате проведения реакции эпоксидирования, были выделены ключевые компоненты для разработки схемы превращений: метиловый эфир олеиновой кислоты (С18/1), метиловый эфир линолевой кислоты (С18/2), гидропероксид метилового эфира линолевой кислоты ГПС18/1, гидропероксид

метилового эфира линолевой кислоты ГПС18/2, альдегиды (А), надкислоты (Н), кислоты (К), эпоксиды (ЭП) и побочные продукты (ПП).

Для подтверждения термодинамической возможности протекания реакций в процессе эпоксидирования использовались квантово-химические расчеты [2]. Расчеты были проведены в программном пакете Gaussian с использованием метода теории функционала плотности (DFT) на уровне В3LYP при температуре (110 °С) и давлении (100 кПа) процесса. Этот метод был выбран в силу достаточно высокой точности по сравнению с эмпирическими методами. Уровень В3LYP является наивысшим среди уровней DFT, используемый программой Gaussian, а базисный набор выбран таким образом, чтобы сохранить управляемость расчетов, но при этом не снизить точность описания физической ситуации. Для оценки ΔG и ΔH брались характерные реакции по типу.

Величина ΔG , в первую очередь, указывает в какую сторону смещено равновесие реакции. Основываясь на литературных данных, было принято допущение, что реакция является обратимой при условии $\Delta G \leq \pm 70$ кДж/моль. Так как фактически брутто реакции окисления и эпоксидирования являются необратимыми, считаем, что для реакций 6–9 величина ΔG обуславливает вероятность протекания. Для реакций 13–17

Таблица 1. Значения энергии Гиббса и энтальпии реакций

№ пп	Реакция	ΔG , кДж/моль	ΔH , кДж/моль
1	C18/1=ГП18/1	-100,56	-22,93
2	C18/2=ГП18/2	-160,90	-105,73
3	ГП18/1=A+A	-435,40	-472,35
4	ГП18/2=A+A	-375,83	-364,10
5	A=H	-207,57	-159,22
6	ГП18/1+C18/1=ЭП+ЭП	-40,45	-114,61
7	ГП18/2+C18/1=ЭП+ЭП	-30,19	-49,42
8	ГП18/1+C18/2=ЭП+ЭП	-90,53	-132,23
9	ГП18/2+C18/2=ЭП+ЭП	-80,26	-67,04
10	H+C18/1=ЭП+К	-132,09	-153,82
11	H+C18/2=ЭП+К	-182,17	-171,44
12	ЭП=A+К	-365,87	-371,98
13	C18/1+К=ПП	-	-
14	C18/2+К=ПП	-	-
15	A=ПП	-	-
16	H=К	-	-
17	К=ПП	-	-

образования побочных продуктов расчет не проводился по причине сложности определения структуры конечных соединений.

Величина ΔH указывает на тепловой эффект каждой реакции. Все реакции окисления явля-

ются экзотермическими, что подтверждает правильность проведенных расчетов. Наибольший вклад в тепловой эффект вносят реакции окисления с деструкцией исходного вещества.

Список литературы

1. G.P. Moss. *Glossary of class names of organic compounds and reactive intermediates based on structure // International union of pure and applied chemistry, 1995.*– 67.– P.1307–1375.
2. Цышевский Р.В., Гарифзянова Г.Г., Храповский Г.М. *Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций // Казань: КНИТУ, 2012.*– С.86.