

Таблица 1. Реакции гидрирования ароматических соединений и основные термодинамические характеристики

№	Реакция	ΔH , кДж/моль	ΔS , Дж/моль·К	ΔG , кДж/моль
1	Бензол + 3·H ₂ = Циклогексан	-248,03	-291,18	-63,71
2	Толуол + 3·H ₂ = Метилциклогексан	-246,63	-296,62	-58,87
3	Этилбензол + 3·H ₂ = Этилциклогексан	-242,24	-282,98	-63,11
4	О-ксилол + 3·H ₂ = 1,2-диметилциклогексан	-240,14	-288,08	-57,79
5	М-ксилол + 3·H ₂ = 1,3-диметилциклогексан	-244,47	-310,99	-47,61
6	П-ксилол + 3·H ₂ = 1,4-диметилциклогексан	-245,25	-319,24	-43,17

ного газойля было выявлено, что все реакции протекают при данных условиях промышленного процесса (T=633 К и P=158 атм) и являются

обратимыми, так как изменение энергии Гиббса в ходе реакции меньше нуля.

Список литературы

1. В.И. Топильников, М.Х. Сосна. Моделирование процесса гидрокрекинга парафиновых углеводородов // *Химия и технология топлив и масел*, 2012.– №2.– С.34–38.
2. Белинская Н.С., Францина Е.В. Кинетическая модель процесса производства дизельных топлив // *Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе*, 2013.– №2(6).– С.145–149.
3. Белинская Н.С. Применение метода математического моделирования для поиска оптимальных технологических параметров процессов алкилирования бензола // *Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе*, 2013.– №1(5).– С.125–130.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЦЕТАНОПОВЫШАЮЩЕЙ ПРИСАДКИ НА КАЧЕСТВО ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА

А.А. Бердникова, М.В. Майлин

Научные руководители – к.т.н., доцент Н.С. Белинская; к.т.н., научный сотрудник Е.В. Францина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, aab77@tpu.ru

Дизельное топливо является одним из наиболее востребованных топлив для автомобильного транспорта [1]. Каждый клиент, в зависимости от региона, выбирает самые различные присадки к топливам, а они, в свою очередь, регламентированы по точности дозирования и по количеству ввода в топливо. В связи с этим, изготавливаются установки непосредственно под потребности и нужды заказчика, чтобы качественно реализовать компаундирование топлива.

При производстве дизельных топлив необходимо добавлять определенные присадки для улучшения его характеристик и достижения требуемого качества. Существуют следующие виды присадок: депрессорные, цетаноповышающие, противоизносные, депрессорно-диспергирующие, смазывающие, антистатические, антиокис-

лительные.

Цетаноповышающие присадки предназначены для улучшения воспламеняемости дизельных топлив в камере сгорания. В топливном балансе страны велика доля прямогонных дизельных фракций с высоким цетановым числом (ЦЧ). Плохой воспламеняемостью отличаются высокоароматизированные среднестиллятные фракции различного происхождения. Присадки добавляются в дизельные топлива из нефтей нафтеносного основания, а также в топлива из газовых конденсатов, распространённые в местах нефтедобычи [2].

Таблица 1. Условия проведения процесса

Температура, К	Давление, атм	Расстояние между молекулами, Å
298	1	4

Таблица 2. Энергия взаимодействия присадки с изопарафинами

Компонент дизельного топлива	E, ккал/моль	E, кДж/моль • К'
Изопропилнитрат	73,74	308,54
3-этилдекан	238,83	999,29
изопропилнитрат + 3-этилдекан	328,20	1373,20
Δ	15,61	65,34
2,2,4,4,6-пентаметилгептан	237,40	993,30
изопропилнитрат + 2,2,4,4,6-пентаметилгептан	327,24	1369,18
Δ	16,09	67,32
2,5-диметилундекан	257,28	1076,45
изопропилнитрат + 2,5-диметилундекан	347,09	1452,22
Δ	16,06	67,22
5-бутилнонан	257,67	1078,12
изопропилнитрат + 5-бутилнонан	347,32	1453,20
Δ	15,90	66,52
4,5-диэтилоктан	238,11	996,27
изопропилнитрат + 4,5-диэтилоктан	328,06	1372,60
Δ	16,20	67,78

В данной работе с применением квантово-химических методов рассмотрено взаимодействие углеводородов дизельного топлива и цетаноповышающей присадки через такие параметры, как энергия Гиббса, энтальпия, энтропия, теплоемкость, общая энергия.

Расчеты по влиянию присадки на параметры дизельного топлива проведены с помощью программного продукта Gaussian. В качестве присадки в численных исследованиях использовался изопропилнитрат. Условия проведения процесса приведены в таблице 1. Результаты расчетов в таблице 2.

Поскольку значение энергии взаимодействия изопропилнитрата с исследуемыми изо-

парафинами при стандартных условиях получилось положительным, то это свидетельствует о наличии энергетического барьера для образования межмолекулярных связей между данными молекулами соединений величиной 65–67 кДж. Что свидетельствует, с одной стороны, о возможном другом механизме (радикальном) взаимодействия изопропилнитрата с изопарафинами, а с другой – о возможной необходимости изменения термобарических условий (температуры, давления) для увеличения приемистости изопропилнитрата к изопарафинам в дизельных топливах, что станет предметом дальнейших исследований.

Список литературы

1. Францина Е.А., Белинская Н.С., Луценко А.В., Майлин М.В., Афанасьева Д.А. Влияние технологических параметров процесса каталитической депарафинизации среднедистиллятных фракций на его эффективность // *Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний*, 2017.– №11.– С.25–31.
2. Данилов А.М. Применение присадок в топливах: Справочник.– СПб.: ХИМИЗДАТ, 2010.– 368с.