

ется определение значения такой температуры процесса, при которой достигается температура предельной фильтруемости продукта (дизельной фракции) минус 26 °С, как правило, эта температура соответствует и максимальному выходу дизельной фракции, поскольку завышенная температура процесса приводит к увеличению выхода бензиновой и газовой фракций и уменьшению выхода дизельной фракции.

### Список литературы

1. *Frantsina E.V., Belinskaya N.S., Lutsenko A.S., Maylin M.V., Afanasyeva D.A. // Petroleum and coal, 2017.– V.59.– Issue 6.– P.911–917.*

Расчет показывает, что при оптимальной кратности ВСГ и температуре процесса возможно получение большего выхода продукта в среднем на 2,6% в год, процесс допустимо вести при температуре несколько ниже (в среднем ниже на 5–7 °С, рисунок 1) без потери качества продукта, кроме того значительно уменьшается коксонакопление и сохраняется активность катализатора (таблица 1).

## ОЦЕНКА МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ В ДИЗЕЛЬНЫХ ФРАКЦИЯХ

М.В. Майлин, А.А. Бердникова

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

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, maylin\_max@mail.ru*

Сегодня к дизельным топливам помимо низкотемпературных характеристик, предъявляют требования по соответствию цетановому числу. Так как вследствие улучшения низкотемпературных характеристик цетановое число сильно снижается необходимым является введение в дизельное топливо цетаноповышающих присадок, механизм которых до сих пор не полностью изучен.

Предположительно механизм объясняется стабилизацией образующихся свободных радикалов при распаде молекулы алкилнитрита на начальной стадии горения топлива (распадаются связи атома кислорода). Эти свободные радикалы улучшают воспламенение топлива примерно на 2–3 ед. цетанового числа за каждые 0,1%

массовой части добавки в топливе [1].

Целью данной работы была оценка энергий взаимодействия молекул изопропилнитрата (как цетаноповышающей добавки) и н-парафинов в условиях работы дизельного двигателя с применением квантово-химических методов. В качестве условий работы двигателя были взяты наиболее «жесткие» условия – температура 2273 К, давление – 5,0 МПа. Для расчета энергий взаимодействия н-парафинов и изопропилнитрата использовался программно-расчетный продукт Gaussian, с возможностью проведения квантово-химических расчетов химических реакций. Для построения моделей веществ использовалась программа GaussView.

В качестве метода расчета выбран метод тео-

**Таблица 1.** Начальные параметры проведения исследования

| Вещество                       | H, HF    | E, кал/моль | H, кДж/моль | E, Дж/моль • К |
|--------------------------------|----------|-------------|-------------|----------------|
| Изопропилнитрат + н-декан      | -787,76  | 666,03      | -2069221,86 | 57,32          |
| Изопропилнитрат + н-ундекан    | -826,79  | 710,42      | -2171738,6  | 56,90          |
| Изопропилнитрат + н-додекан    | -865,82  | 755,01      | -2274261,41 | 57,21          |
| Изопропилнитрат + н-тридекан   | -904,85  | 799,44      | -2376783,63 | 56,81          |
| Изопропилнитрат + н-тетрадекан | -943,88  | 843,93      | -2479305,18 | 56,78          |
| Изопропилнитрат + н-пентадекан | -982,91  | 888,51      | -2581824,26 | 57,16          |
| Изопропилнитрат + н-гексадекан | -1021,94 | 932,95      | -2684346,65 | 56,89          |
| Изопропилнитрат + н-гептадекан | -1060,97 | 977,46      | -2786868,47 | 56,86          |
| Изопропилнитрат + н-октадекан  | -1100,00 | 1021,93     | -2889390,25 | 56,86          |

рии функционала плотности DFT. Метод теории функционала плотности обладает достаточной точностью для расчета углеводородов дизельной фракции [2]. Теоретическим приближением являлась модель B3LYP (теория функционала плотности Беке (B3), использующая электронную корреляцию Ли Янга и Пара (LYP)) [3, 4].

Для оценки энергий взаимодействия были взяты парафиновый углеводороды одного гомологического ряда начиная с н-декана и заканчивая н-октадеканом. Также для численных вычислений в качестве присадки была использована молекула изопропилнитрата.

В таблице 1 приведены значения энергии взаимодействия н-парафинов и изопропилни-

трата.

Исходя из данных таблицы, можно предположить, что эффект увеличения цетанового числа дизельного топлива (в данном случае н-парафинов) объясняется некоторым взаимодействием веществ друг с другом. Данное взаимодействие может быть охарактеризовано энергией взаимодействия. Как видно из табл. 1 величина энергии положительна и предположительно скорость реакции образования радикалов увеличивается вследствие уменьшения значения энергетического барьера и, чем больше данная энергия, тем на большую величину увеличивается цетановое число.

### Список литературы

1. Данилов А.М. Применение присадок в топливах: Справочник.– СПб.: ХИМИЗДАТ, 2010.– 368с.
2. Кравцов А.В., Иванчина Э.Д., Ивашкина Е.Н., Францина Е.В., Киселева С.В., Романовский Р.В. Термодинамическая устойчивость коксогенных соединений, образующихся на поверхности платиносодержащих катализаторов дегидрирования, при окислении их водой // Нефтехимия, 2013.– Т.53.– №4.– С.302–312.
3. Бурштейн К.Я., Бурый П.П. Квантово-химические расчеты в органической химии и молекулярной спектроскопии.– М.: Наука, 1989.– 104с.
4. Герзелиев И.М., Гюльмалиев А.М., Попов Ю.С., Хаджиев С.Н. Термодинамическое и квантово-химическое исследование реакции окислительного дегидрирования этана в этилен // Нефтехимия, 2015.– Т.55.– №2.– С.154–162.

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ АКТИВНОСТИ ЦЕОЛИТСОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СОДЕРЖАНИЯ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ В СЫРЬЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА

Г.Ю. Назарова, Т.А. Шафран, А.А. Кислинская  
Научный руководитель – д.т.н., профессор Е.Н. Ивашкина

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

Применение цеолитсодержащих катализаторов в технологии каталитического крекинга позволило значительно сократить время контакта сырья и катализатора и обеспечило значительное увеличение выхода целевых продуктов. Вместе с тем, важной проблемой является необратимая дезактивация катализаторов тяжелыми металлами, содержащимися в сырье крекинга, снижающая эффективность технологии и увеличение расхода свежего катализатора в систему.

Целью работы является прогнозирование

активности цеолитсодержащих катализаторов в зависимости от содержания тяжелых металлов в сырье каталитического крекинга с применением математической модели процесса.

В работе предложен количественный учет влияния концентрации ванадия и никеля на активность катализатора крекинга при математическом моделировании процесса в соответствии с [1], поскольку они оказывают наибольшее дезактивирующее действие. Так, в потоке воздуха в процессе регенерации происходит образование оксидов из металлов, адсорбированных на