

ным спектрального анализа можно утверждать, что данный спектр соответствует асфальтенам типа континент.

В ИК-спектре асфальтенов, выделенных из мазута (рисунок 2б), наблюдаются полосы поглощения, соответствующие полиядерным конденсированным системам 1459 см^{-1} . Полоса 1376 см^{-1} соответствует валентным колебаниям

C–S. Полосы, соответствующие валентным колебаниям N–O в нитрогруппах C–N: 1340 см^{-1} , 970 см^{-1} , 937 см^{-1} . Широкая полоса около 720 см^{-1} соответствует алифатическим ($-\text{CH}_2-$) и сернистым (C–S) колебаниям. По данным спектрального анализа можно утверждать, что данный спектр соответствует асфальтенам типа архипелага.

Список литературы

1. Punase A., Hascakir B. *Influence of resins and asphaltenes on the structural and rheological properties of petroleum disperse systems // Energy and Fuels, 2017. – Vol.31. – №1. – P.65–72.*

ОЦЕНКА СТАБИЛЬНОСТИ РАДИКАЛОВ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ ПРИ СГОРАНИИ УГЛЕВОДОРОДОВ РАЗЛИЧНОГО СТРОЕНИЯ, В УСЛОВИЯХ ДИЗЕЛЬНОГО ДВИГАТЕЛЯ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.А. Сычева, М.В. Майлин, Е.В. Францина

Научный руководитель – к.т.н., научный сотрудник Е.В. Францина

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

Целью данной работы является оценка стабильности радикалов, образующихся при сгорании углеводородов различного строения, в условиях дизельного двигателя ($t=2000\text{ °C}$, $p=50\text{ атм.}$) методом молекулярного моделирования DFT (базис B3LYP 3-21G). Стабильность радикалов оценивалась через степень локализации заряда путём расчёта его значения на атомах углерода, образующихся из углеводородов различного состава и строения, входящих в состав дизельной фракции.

Объектом исследования стали радикалы, образующиеся при сгорании из молекул нормальных парафинов, нафтенов и аренов с длиной цепи от C_{10} до C_{20} , содержащихся в дизельных фракциях. Расчёты проводили квантово-химическим методом DFT (базис B3LYP 3-21G) на программе Gaussian в условиях дизельного двигателя при $t=2000\text{ °C}$, $p=50\text{ атм.}$ На основе проведенных расчётов была оценена степень локализации заряда в парафиновых, нафтеновых и ароматических радикалах по значению максимального заряда на атоме углерода. Результаты расчётов представлены в таблицах 1–3 для парафиновых, нафтеновых и ароматических радикалов соответственно.

Сравнивая значения абсолютной величины заряда в молекуле радикала для каждой гомологической группы углеводородов, можно сделать вывод о том, что степень локализации заряда максимально концентрируется:

1. У радикалов, образующихся из парафинов линейного строения C_{10} – C_{20} заряд максимально локализуется на втором и предпоследнем атоме углерода. Величина максимального заряда составляет $0,01\text{ эВ}$ при средней величине зарядов на остальных атомах в радикале $0,0001\text{ эВ}$.

2. У радикалов, образующихся из нафтенов (циклогексаны) с алкильным заместителем от C_{10} до C_{20} заряд максимально локализуется в кольце на втором атоме углерода от атома с алкильным заместителем. А также на первом атоме углерода в алкильной цепи. Величина максимального заряда в кольце составляет $0,09\text{ эВ}$, в алкильной цепи $0,06\text{ эВ}$ при средней величине зарядов на остальных атомах в кольце $0,009\text{ эВ}$, в алкильной цепи $0,005\text{ эВ}$.

3. У радикалов, образующихся из аренов с длиной алкильного заместителя от C_{10} до C_{20} заряд максимально локализуется в бензольном кольце на втором атоме углерода от атома с алкильным заместителем. А также на первом атоме углерода в алкильной цепи. Величина макси-

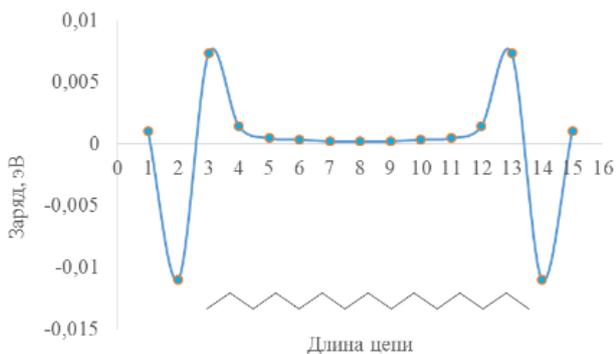


Рис. 1. Зависимость степени локализации заряда нормального парафина C_{15} от длины цепи

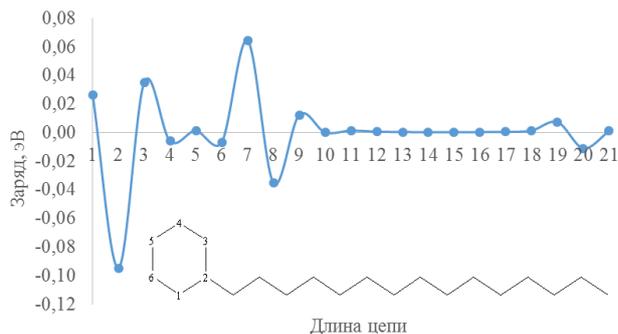


Рис. 2. Зависимость степени локализации заряда нафтенов C_{15} от длины цепи алкильного заместителя

мального заряда в кольце составляет 0,04 эВ, в алкильной цепи 0,03 эВ при средней величине зарядов на остальных атомах в кольце 0,03 эВ, в алкильной цепи 0,009 эВ.

4. Степень локализации заряда и его величина в радикалах зависят от состава и строения углеводородов, входящих в состав дизельной фракции. Так максимальное значение заряда в радикалах убывает в ряду нафтены (0,09 эВ), арены (0,04 эВ), парафины (0,01 эВ), что позволяет сделать вывод о наименьшей стабильности нафтенов и, соответственно, их наибольшей реакционной способности в реакциях горения, что позволяет оценить способность дизельного топлива к детонации в зависимости от углеводородного состава.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что наиболее реакционноспособными в реакциях горения в дизельном двигателе являются нафтены, по сравнению с парафинами и аренами.

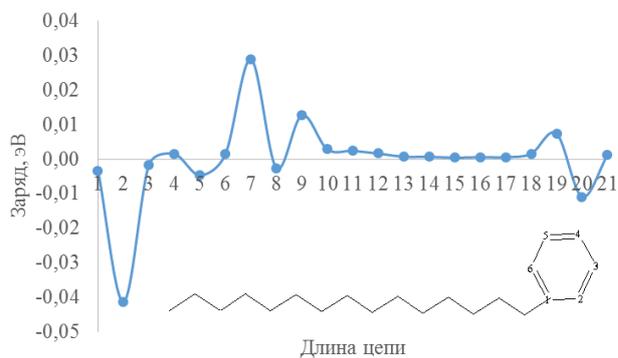


Рис. 3. Зависимость степени локализации заряда бензола с алкильным заместителем C_{15} от длины цепи

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Проект № 18-79-00095) в Национальном исследовательском Томском политехническом университете в рамках Программы повышения конкурентоспособности Национального исследовательского Томского политехнического университета.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ РЕЖИМА РАБОТЫ СИСТЕМЫ ПОДГОТОВКИ НЕФТИ НА ШЕЛЬФОВОМ МЕСТОРОЖДЕНИИ

О.С. Тарасова

Научный руководитель – к.т.н., доцент Е.В. Попок

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, olga1998.1998@mail.ru

Освоение шельфовых месторождений на сегодняшний день является перспективной задачей. Предполагается, что именно здесь заложено около 70% от всего объема углеводородного сырья, что напрямую способствует развитию нефтегазовой области и экономики в целом [1].

Разработка шельфовых месторождений, а также добыча самого природного ископаемого является наиболее сложным и затратным процессом, по сравнению с добычей этого же сырья на суше. Именно поэтому необходимо уметь оптимизировать процессы по добыче нефти с целью достижения максимальной эффективно-