

## Список литературы

1. Wang B., Albarracín-Suazo S., Pagán-Torres Y., Nikolla E. // *Catalysis Today*, 2017.– V.185.– P.147–158.
2. Vinichenko N.V., Golinskii D.V., Zatolokina E.V., Paukshtis E.A., Gulyaeva T.I., Pavlyuchenko P.E., Krol' O.V., Belyi A.S. // *Kinetics and Catalysis*, 2018.– V.59.– P.378–385.

## ВЛИЯНИЕ ПОЛОЖЕНИЯ МЕТИЛЬНОГО РАДИКАЛА В МОЛЕКУЛЕ ИНДОЛА НА ЕГО ГИДРИРОВАНИЕ В ПРОЦЕССЕ ГИДРОЧИСТКИ

Е.Р. Кислицкая

Научный руководитель – к.т.н., доцент Н.И. Кривцова

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

Наличие азотистых соединений в дизельных фракциях является причиной низкой стабильности цвета и при хранении способствуют образованию нерастворимых осадков [1].

Цель работы изучение влияния положения радикала в молекуле индола на его гидрирование в процессе гидроочистки дизельного топлива с помощью квантово-химических методов расчета.

Расчет термодинамических параметров для реакций с индолом проводился при  $T=360^\circ\text{C}$  и  $P=3,5$  МПа с различным положением метильного радикала. Данный класс был выбран для анализа, так как он является типичным представителем азотсодержащих соединений, присутствующих в дизельном топливе.

Отрицательное значение энтальпии свидетельствует о том, что все реакции гидрирования азотсодержащих соединений, в процессе гидроочистки дизельного топлива, экзотермические.

Все выше представленные превращения азотсодержащих веществ осуществляются при

$\Delta G < 0$ , следовательно, процесс является необратимым и самопроизвольным.

Изменение  $\Delta S$  системы в результате реакций уменьшалось (энтропия реакции отрицательная), то есть в ходе реакции объем системы будет уменьшаться.

На основании полученных данных, была построена гистограмма зависимости значения энергии Гиббса от положения метильного радикала в молекуле (рис. 1).

Результаты расчета термодинамических параметров превращения метилиндола показали, что, чем ближе находится метильный радикал к гетероатому в молекуле, тем труднее происходит гидрогенолиз и тем устойчивее является соединение.

Полученные результаты расчетов превращения серо- и азотсодержащих соединений лягут в основу математической модели гидроочистки дизельного топлива.

**Таблица 1.** Расчет термодинамических параметров для индола при  $T=360^\circ\text{C}$  и  $P=3,5$  МПа

Название соединения	$\Delta H$ , кДж/моль	$\Delta G$ , кДж/моль	$\Delta S$ , Дж/(моль • К)
Индол	-158,44	-68,10	-142,86
2-Метилиндол	-140,52	-44,23	-152,27
3-Метилиндол	-150,82	-56,42	-151,22
4-Метилиндол	-150,05	-55,58	-149,39
5-Метилиндол	-160,16	-77,03	-131,46
6-Метилиндол	-159,10	-74,48	-133,82
7-Метилиндол	-156,76	-77,16	-125,87



**Рис. 1.** Изменение значения энергии Гиббса реакции от положения метильного радикала в молекуле

## Список литературы

1. Ахметов С.А. *Технология глубокой переработки нефти и газа* / С.А. Ахметов.– Уфа: Изд-во Гилем, 2002.– 672 с.
2. Солодова Н.Л. *Получение низкозастывающих малосернистых дизельных топлив* / Н.Л. Солодова, Е.Е. Хамзин, Е.А.Емельянычева.– Казань: Изд-во КНИТУ, 2014.– С.214–217.

## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ И ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ СВОЙСТВ ДИЗЕЛЬНЫХ ФРАКЦИЙ

С.А. Коробер, В.В. Машнич, А.А. Павлова  
 Научный руководитель – к.т.н., н.с. Е.В. Францина

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

Исследование и анализ физико-химических и эксплуатационных свойств фракций дизельного топлива имеют большое значение, как в научном плане, так и в промышленном. Для обеспечения более долговечной и экономичной работы двигателей, дизельное топливо должно соответствовать требованиям, которые прописаны в нормативных документах. Анализируя свойства дизельных фракций, мы можем наиболее точно подобрать условия их использования, а также улучшить эти свойства с помощью различных присадок.

Целью данной работы является сравнение физико-химических свойств различных образцов дизельных фракций и доведение показателей свойств образцов до показателей, прописанных в нормативных документах [2, 3].

Данная работа была направлена на исследование низкотемпературных свойств дизельных фракций различного состава – температуры помутнения ( $T_p$  – данный параметр показывает при какой температуре топливо начинает терять прозрачность), температуры застывания ( $T_z$  –

данный параметр показывает при какой температуре топливо начинает терять свою подвижность, чрезвычайно важный параметр, так как при транспортировке топлива условия не всегда остаются постоянными), температуры фильтруемости ( $T_f$  – параметр показывает при какой температуре топливо начинает кристаллизоваться, испытание проводят пропуская его через фильтр-сито) соответственно. В ходе лабораторных испытаний с помощью методов, описанных в стандартах [2, 3], дизельных фракций разного состава были получены следующие результаты (табл. 1).

В соответствии ГОСТ 32511-2013 Топливо дизельное евро и ГОСТ Р 25368-2005 Топливо дизельное евро, низкотемпературные свойства должны иметь значения: температура помутнения не выше  $-10^\circ\text{C}$ , температура фильтруемости не выше  $-20^\circ\text{C}$ , температура застывания не выше  $-15^\circ\text{C}$ .

Данным стандартам не соответствуют образцы: №1, №2, №3, №5, №6. Так как значение свойств превышают стандартные значения, обо-

**Таблица 1.** Результаты лабораторных испытаний

	Образец №1	Образец №2	Образец №3	Образец №4	Образец №5	Образец №6	Образец №7
$T_p$ °C	-6,8	11,2	-9,9	-23,0	6,1	12,3	10,0
$T_z$ °C	-18,3	8,3	-17,8	-28,1	-4,4	7,4	10,3
$T_f$ °C	-14,2	9,5	-11,7	-24,3	4,1	10,2	7,1

**Таблица 2.** Результаты исследования низкотемпературных свойств с использованием присадки

	Образец №1	Образец №2	Образец №3	Образец №4	Образец №5	Образец №6	Образец №7
Присадка	1,0%	0,6%	1,0%	0,1%	0,2%	0,5%	0,6%
$T_p$ °C	-8,7	13	-11,1	-30,8	-7,7	-21,7	-12,7
$T_z$ °C	-36,9	-32,4	-50,5	-46,5	-54,5	-54,5	-34,5
$T_f$ °C	-39,6	-10	-32,6	-22,5	-34,9	-37,4	-32,8