

Рис.2. Реакции насыщения [2]

Для структурно-группового анализа нефтяных фракций с температурой кипения выше 220 °С используется метод n – d – М. Число колец и содержание углерода в различных структурных группах, входящих в состав «средней молекулы», вычисляются с применением формул и номограмм на основе значений удельной рефракции, плотности и молекулярной массы. Используя данные таблицы 1, был рассчитан структурно-групповой анализ вакуумного газойля. Полученные результаты приведены в таблице 2.

Таблица 2

Структурно-групповой состав вакуумного газойля с установки гидроочистки

Показатели	Сырье		Продукт	
	№1	№2	№1	№2
Содержание углерода в ароматических структурах, %	23,022	22,448	15,813	17,322
Содержание углерода в нафтеновых структурах, %	17,569	18,247	22,877	20,907
Содержание углерода в алкильных заместителях, %	59,409	59,305	61,310	61,771
Среднее число ареновых колец в молекуле	0,937	0,912	0,748	0,790
Среднее число нафтеновых колец в молекуле	0,983	1,008	1,540	1,372

По данным таблицы 2 можно сделать выводы, что в процессе гидрооблагораживания вакуумного газойля снижается среднее число ареновых колец, при этом увеличивается число нафтеновых колец в молекуле. Содержание углерода в алкильных заместителях становится несколько выше за счет реакций гидрогенолиза. В результате раскрытия циклов произошло перераспределение содержания углерода в ароматических и нафтеновых структурах.

Полученные данные будут использованы при разработке математической модели, которая позволит выбрать оптимальные параметры процесса и повысить степень гидрооблагораживания вакуумного газойля.

#### Литература

1. Башкирцева, Н. Ю. Высоковязкие нефти и природные нефти / Н. Ю. Башкирцева // Вестник Казанского технологического университета. – 2014. – Т. 17. – № 19 – С. 29 –299.
2. Солодова Н. Л. Гидроочистка топлив: учебно-методическое пособие Казанский государственный технологический университет (КГТУ) //Казань: Изд-во КГТУ. – 2008.
3. Технический регламент «О требованиях к автомобильному и авиационному бензину, дизельному и судовому топливу, топливу для реактивных двигателей и топочному мазуту» [Электронный ресурс]: Таможенный союз от 18.10.20011 № 826 (ред. От 19.12.2019). – Доступ из справ. правовой системы «Кодекс».

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И СВОЙСТВА NI-MO-СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Жиров Н.<sup>1</sup>, Журавков С.П.<sup>2</sup>

Научный руководитель кандидат химических наук А.С. Акимов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт химии нефти Сибирское отделение Российской академии наук, г. Томск, Россия

<sup>2</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Добываемое в настоящий момент нефтяное сырьё в последние годы требует к себе всё большего внимания. Наряду с повышением требований к качеству и чистоте продуктов нефтехимического комплекса также постепенно снижаются исходные свойства сырья ввиду его утяжеления. В связи с этим остро встает вопрос о модернизации старых или разработке новых катализаторов, направленных главным образом на снижение содержания гетероатомных соединений в различных видах топлива, особенно бензинового и дизельного [1].

Целью данной работы был синтез каталитических систем на основе соединений никеля и молибдена, а также исследование влияния температуры на конечный фазовый состав и свойства получившихся систем.

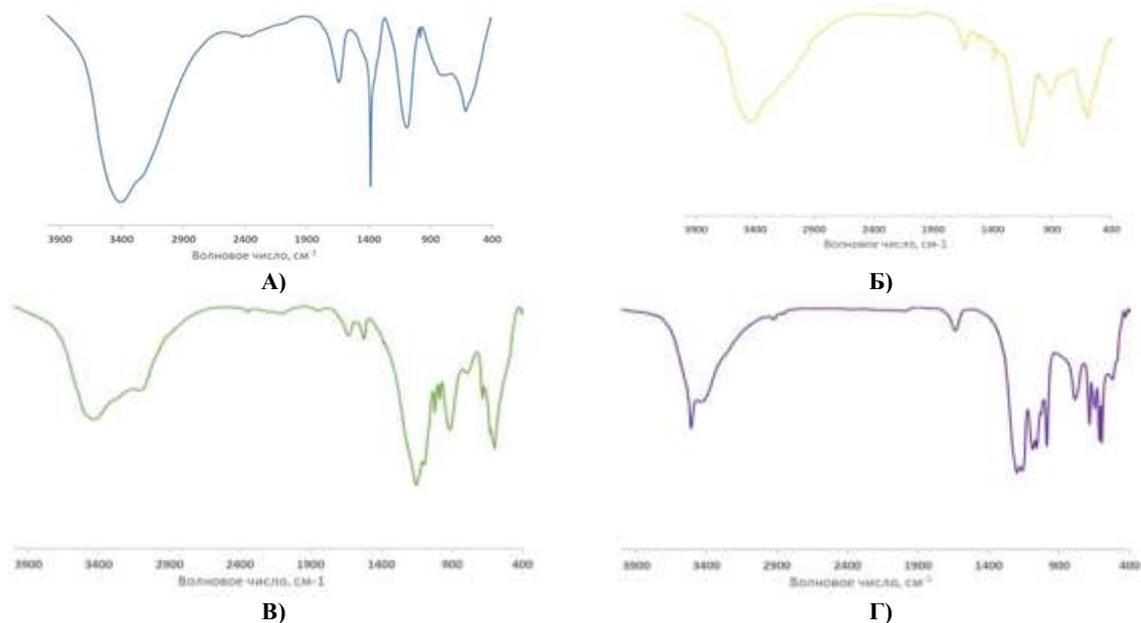
Синтез проводился методом пропитки исходного носителя –  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, с последующей сушкой и прокаливанием при различных температурах. Активность этих катализаторов определяется морфологией активной фазы носителя, которая зависит от метода его приготовления.  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> является типичным носителем для гидропроцессов ввиду своей невысокой стоимости, доступности, при этом обладая приемлемо высокими показателями по текстурным свойствам, что также оказывает воздействие на активность катализаторов на его основе [2].

Синтезированные системы были исследованы современными физико-химическими методами (в частности это ИК-спектроскопия и рентгенофазовый анализ (РФА)). ИК спектры катализаторов записывались на инфракрасном Фурье спектрометре фирмы WOMEM MB-102 (Канада), частотный диапазон записи – 2500 – 25000 нм. Для подготовки образцов к съемке использовалась стандартная методика таблетирования (формирование таблетки из смеси образец: KBr = 1,5:500). Фазовый состав катализаторов исследовали на исследовательском комплексе Bruker D8 Advance с

## СЕКЦИЯ 11. ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОДГОТОВКИ И ПЕРЕРАБОТКИ УГЛЕВОДОРОДНЫХ РЕСУРСОВ

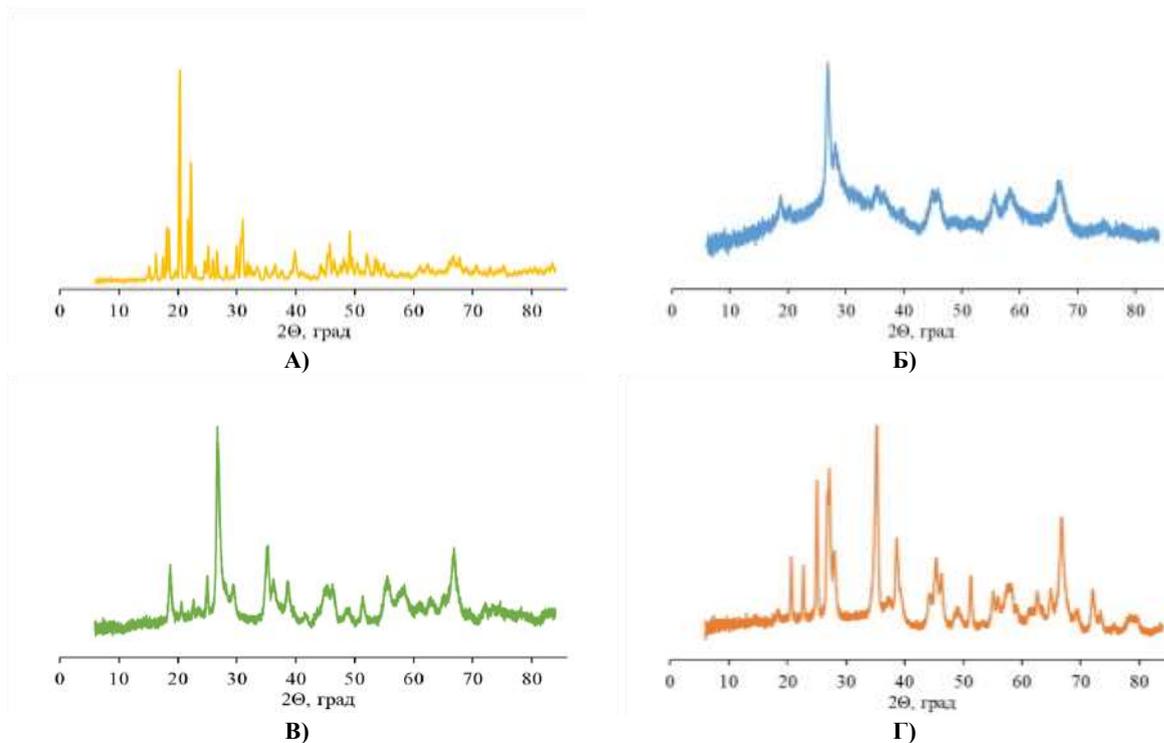
использованием монохроматического  $\text{CuK}\alpha$ -излучения ( $\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$ ). Съемка проводилась в угловом диапазоне 0-85°, шаг по  $2\theta = 0,05^\circ$ .

Как видно из полученных спектров с повышением температуры исчезает полоса поглощения в области  $1390 \text{ см}^{-1}$ , которая соответствует группе  $(\text{NO}_3)$ ; также при повышении температуры появляются некоторые полосы поглощения, относящиеся к оксидным структурам никеля и молибдена.



**Рис.1. ИК-спектры для образцов NiMo катализатора, подвергнутых термообработке при разных температурах: А) 25 °С; Б) 200 °С; В) 300 °С; Г) 400 °С**

Как видно из дифрактограмм, повышение температуры термической обработки также влияет на фазовый состав каталитических систем. В частности, исчезает ряд рефлексов в области  $2\theta = 0-20^\circ$ , которые относились фазам соли никеля ( $(\text{Ni}(\text{NO}_3)_2, \text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}, \text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O})$ ).



**Рис.2. Рентгеновские дифрактограммы каталитических систем (NiMo) и его прокаленных производных: А) 25 °С; Б) 200 °С; В) 300 °С; Г) 400 °С**

По результатам выполненной работы были сделаны следующие выводы: были приготовлены Ni-Mo-содержащие каталитические системы; повышение температуры обработки каталитических систем ведёт к значительному изменению фазового состава, что влечет за собой изменение свойств этих систем.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХН СО РАН (проект FWRN-2021-0004), финансируемого Министерством науки и высшего образования Российской Федерации.

#### Литература

1. Klimov O. V. et al. Bimetallic Co–Mo complexes: A starting material for high active hydrodesulfurization catalysts //Catalysis Today. – 2010. – Т. 150. – №. 3-4. – С. 196-206.
2. Leonova K. A. et al. Textural characteristics of sulphided hydrotreatment catalysts prepared using Co–Mo complex compounds //Adsorption. – 2013. – Т. 19. – №. 2. – С. 723-731.

## ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОЦЕССА ЖИДКОФАЗНОГО АЛКИЛИРОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Копычева У.Н.

Научный руководитель доцент В.А. Чузлов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

На сегодняшний день наиболее распространенным методом получения алкилбензина является жидкофазное алкилирование, с использованием серной кислоты в качестве катализатора. Жидкофазное алкилирование не является самым эффективным и экологичным способом производства бензина, но замена катализатора в действующих установках экономически нецелесообразна. Поэтому оптимизация действующих установок, является ключевым фактором повышения эффективности производства высокооктанового компонента бензина [1].

Объектом исследования является процесс сернокислотного алкилирования, который позволяет получать высокооктановое топливо, не содержащие углеводороды ароматического и нафтенового строения. Основным компонентом алкилата является высокоразветвлённый изомер  $C_8$  – 2,2,4-триметилпентан.

Для проведения исследований процесса сернокислотного алкилирования изобутана низшими олефинами необходимо применить метод математического моделирования, который позволит рассчитать состав и октановое число алкилата при различных технологических условиях процесса и переменном составе олефиновой и изобутановой фракций. Математическая модель процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами позволит повысить эффективность управления процессом, снизить риски производства и увеличить экономические показатели [2].

Процесс алкилирования изобутана олефинами протекает с выделением тепла (85-90 кДж/моль), исходя из законов термодинамики для производства алкилбензина предпочтительны низкие температуры. Также при повышении температуры более 15°C происходит увеличение скорости побочных реакций, в результате которых образуются нежелательные углеводороды  $C_5$ - $C_7$  и высокомолекулярные соединения. На рисунке 1 приведена зависимость октанового числа по исследовательскому методу от температуры в реакторе алкилирования.

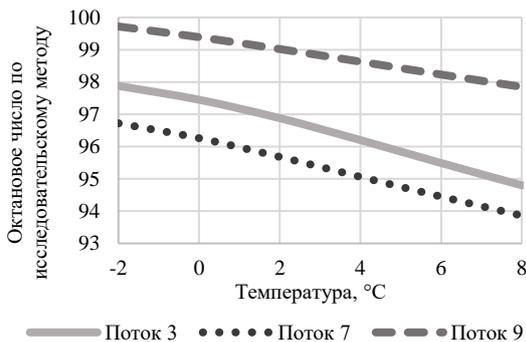


Рис. 1. Влияние температуры на октановое число алкилата

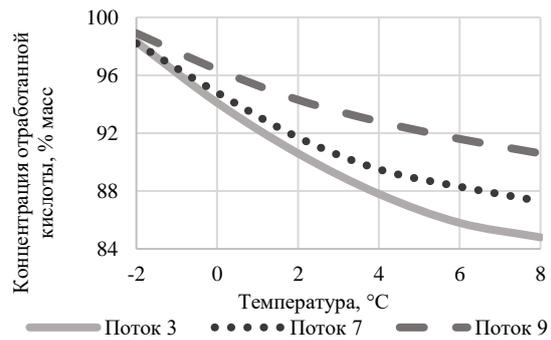


Рис. 2. Влияние температуры на концентрацию обработанной кислоты

Вследствие повышения температуры в реакторе происходит снижение вклада целевых реакций из-за повышения скорости побочных реакций, что ведет к уменьшению доли триметилпентанов в алкилате. Из-за снижения концентрации целевых компонентов в алкилбензине происходит падение октанового числа по исследовательскому методу.

Таким образом, повышение температуры негативно сказывается на скорости образования разветвлённых парафинов  $C_8$  и снижает концентрацию катализатора, что также отрицательно влияет на качество получаемого продукта. При этом следует отметить, что при повышенной температуре вязкость и плотность кислоты снижается, увеличивается качество диспергирования углеводородов в дисперсионной среде.

С использованием предложенной математической модели были проведены исследования влияния расхода бутан-бутиленовой фракции при различных ее составах на качество алкилата, получаемого в процессе