

## ВЛИЯНИЕ СИНЕРГЕТИЧЕСКИХ И АНТАГОНИСТИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ НА ВОСПЛАМЕНЯЕМОСТЬ ДИЗЕЛЬНЫХ ФРАКЦИЙ ПРИ ВВЕДЕНИИ ЦЕТАНОПОВЫШАЮЩЕЙ ПРИСАДКИ

М.В. Майлин, Е.В. Францина  
Научный руководитель – к.т.н., н.с. Е.В. Францина

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

Цетановое число дизельного топлива является величиной неаддитивной, т.е. цетановое число смеси углеводородов не равно сумме цетановых чисел индивидуальных углеводородов с учетом их массовых долей. Также при вовлечении цетаноповышающей присадки различной концентрации отмечается отсутствие корреляционных зависимостей прироста цетанового числа от концентрации присадки [1]. Причиной отклонения от аддитивности являются межмолекулярные взаимодействия между углеводородами дизельной фракции и вовлекаемыми в процесс компаундирования присадками. Количественной оценкой межмолекулярных взаи-

модействия в данной работе рассматривались термодинамические и энергетические свойства индивидуальных углеводородов и комплексов углеводород-присадка.

Для образцов дизельной фракции было оценено влияние концентрации цетаноповышающей присадки на значение цетанового числа. В табл. 1 приведен групповой состав всех образцов дизельных фракций. В табл. 2 приведены значения цетановых чисел дизельных фракций в зависимости от концентрации цетаноповышающей присадки.

Как видно из табл. 2 наибольшим цетановым числом обладает образец №3, для которого

**Таблица 1.** Групповой состав дизельных фракций

Углеводороды, % мас.	Образец №1	Образец №2	Образец №3	Образец №4	Образец №5	Образец №6	Образец №7
Парафины	<b>59,15</b>	<b>63,22</b>	<b>69,32</b>	<b>53,05</b>	<b>62,76</b>	<b>52,63</b>	<b>51,01</b>
н-Парафины	32,51	37,17	44,92	30,04	39,46	32,09	27,09
изо-Парафины	26,64	26,04	24,40	23,00	23,30	20,54	23,93
Нафтены	<b>14,65</b>	<b>18,25</b>	<b>9,88</b>	<b>22,81</b>	<b>8,59</b>	<b>29,16</b>	<b>35,87</b>
Ароматика	<b>26,21</b>	<b>18,53</b>	<b>20,81</b>	<b>24,15</b>	<b>28,64</b>	<b>18,20</b>	<b>13,10</b>
Всего	100	100	100	100	100	100	100

**Таблица 2.** Значения цетановых чисел дизельных фракций в зависимости от концентрации присадки

Концентрация присадки, % об.	Образец №1	Образец №2	Образец №3	Образец №4	Образец №5	Образец №6	Образец №7
	ЦЧ	ЦЧ	ЦЧ	ЦЧ	ЦЧ	ЦЧ	ЦЧ
0,0	51,0	50,0	54,0	51,9	53,5	48,0	47,9
0,1	51,0	50,0	54,1	52,0	54,0	48,5	48,0
0,2	51,0	51,0	54,3	52,0	54,0	49,0	48,0
0,3	52,0	51,0	54,6	52,3	54,3	49,0	49,0
0,4	52,0	51,1	54,8	53,0	54,6	49,0	49,0
0,5	52,0	52,0	55,0	53,0	54,8	50,0	49,0
0,6	52,4	52,0	55,0	53,0	55,0	50,2	50,0
0,7	53,0	52,0	55,0	53,2	55,0	51,0	50,0
0,8	53,0	53,0	54,4	53,7	55,0	51,0	51,0
0,9	53,0	53,0	55,0	54,0	55,0	52,0	51,0
1,0	53,4	53,0	55,0	54,2	55,0	52,0	51,3
ΔЦЧ	<b>2,4</b>	<b>3,0</b>	<b>1,0</b>	<b>2,3</b>	<b>1,5</b>	<b>4,0</b>	<b>3,4</b>

согласно табл. 1 наблюдается наибольшее содержание парафинов (69,32 % мас.) и н-парафинов (44,92 % мас.). Поскольку энергия взаимодействия «н-парафин---присадка» наибольшая (56,8 кДж/моль по сравнению с отрицательными значениями для остальных групп углеводородов), следовательно, наименьшая концентрация вовлекаемой присадки должна увеличивать цетановое число тех дизельных фракций, в которых содержание н-парафинов наибольшее. Характеристикой, позволяющей описать данную эффект, является приемистость углеводородов дизельного топлива к цетаноповышающей присадке.

При концентрации присадки, равной 0,1–1,0 % об. максимальный прирост цетанового числа наблюдается у образцов №2, 6, 7 (табл. 2). Для образцов №2, 6 и 7 содержание н-парафинов составляет от 32 до 37 % масс. (табл. 1), следо-

вательно, высокое значение энергии взаимодействия «н-парафин-присадка» подтверждает факт хорошей приемистости парафинистого дизельного топлива к цетаноповышающей присадке даже при минимальных концентрациях.

Для образцов №6 и 7 содержание парафинов намного меньше, чем для образца №2 (табл. 1), однако также наблюдается значительный прирост цетанового числа при значениях присадки от 0,1 до 1,0 % об. Данный эффект можно объяснить тем, что общее содержание парафинов (сумма н-парафинов и изо-парафинов) больше, чем сумма ароматических и нафтеновых углеводородов, так как энергия взаимодействия ароматических и нафтеновых углеводородов имеют максимально отрицательные значения, что также подтверждает их плохую приемистость к цетаноповышающей присадке.

### Список литературы

1. Любименко В.А. Молекулярное моделирование и квантово-химические расчеты в изучении процессов нефтепереработки и не-

фтехимии: Дис. на соиск. уч. степ. док. хим. наук. – М.: РГУ им. Губкина, 2015. – 324 с.

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АЛКИЛИРОВАНИЯ И СУЛЬФИРОВАНИЯ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ АЛКИЛБЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТЫ

В.Ю. Малецкий, И.М. Долганов, А.А. Солопова  
Научный руководитель – к.т.н., доцент И.М. Долганов

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

На данный момент спрос на моющие средства синтетического происхождения набирает обороты. Основными компонентами, из которых изготавливают данные средства, являются линейные алкилбензолы (ЛАБ) – они составляют третью часть ингредиентов, из которых изготавливают моющие средства во всем мире. Востребованность линейных алкилбензолов объясняется тем, что они не наносят вред окружающей среде и совершенно безопасны для экологии. Один из самых распространенных компонентов используемых для производства моющих средств получаемых из линейных алкилбензолов является алкилбензолсульфокислота (АБСК). На производстве, АБСК получают в многотрубном пленочном реакторе, в котором линейный алкилбензол сульфидруется ангидридом серной кислоты [1].

Но при получении АБСК возникает ряд различных задач. В отделении химической инженерии Инженерной школы природных ресурсов Томского политехнического университета разра-

**Таблица 1.** Характеристики многотрубных реакторов и режимов протекающих в них

Количество трубок n	120	40
Диаметр трубки d, м	0,025	0,043
Объем трубного пространства V, м	0,353	0,353
Площадь поверхности S, м <sup>2</sup>	56,52	32,63
Время контакта τ, с	27,65	19,31
Толщина пленки δ, мм	0,57	0,69
V ЛАБ, м <sup>3</sup> /сек	9,53 • 10 <sup>-6</sup>	2,86 • 10 <sup>-5</sup>
Re пленки	96,0	166,3
Re газа	1,05 • 10 <sup>5</sup>	1,85 • 10 <sup>5</sup>