

Таблица 2. Влияние конструкции реактора на продолжительность работы

Цикл	1 (17.10–03.11)		2 (18.11–09.12)	
	Количество трубок	120	40	120
Продолжительность, сутки	18	27	22	32
Концентрация высоковязкого компонента приходящая на последний день, % масс.	0,021	0,021	0,024	0,024

ботана программа, которая решает такие задачи, как: проведение типовых расчетов состава выходных потоков, определение сроков межпромывочных циклов реактора сульфирования или других выходных параметров при указанных составах сырья и технологических параметрах [2].

В данной программе был произведен расчет для подбора оптимального количества трубок и времени пребывания сырья в реакторе, для определения оптимальной конструкции многотрубного пленочного реактора сульфирования, с целью увеличения межпромывочных циклов. На современных производствах алкилбензолсульфокислоту получают в многотрубных реакторах со 120 трубками, но в данной программе был произведен расчет при котором оптимальным количеством трубок является 40.

По выполненной работе сделаны следующие выводы:

Как видно из таблицы 2, в реакторе с 40 трубками высоковязкий компонент накапливается медленнее и соответственно период работы увеличивается: в первом цикле произошло увеличение на 9 суток, а во втором на 10 суток. При этом с увеличением диаметра трубок площадь поверхности контакта уменьшается, и, как следствие, объемный расход жидкости, приходящийся на одну трубку реактора, возрастает, что ведет к увеличению толщины пленки и линейной массовой плотности орошения, вследствие чего увеличивается средняя скорость течения пленки жидкости, критерий Рейнольдса увеличивается. При увеличении критерия Рейнольдса происходит рост диффузии, что способствует снижению накопления высоковязкого компонента.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №19-73-00029.

### Список литературы

1. Шнидорова Н.О., Долганова И.О., Долганов И.М., Кочегурова Е.А. Создание компьютерной моделирующей системы процесса алкилирования со схемой превращения различного уровня детализации // Известия ТПУ, 2010.– №5.– 57–61 с.
2. Dolganova I.O., Dolganov I.M., Ivanchina E.D., Ivashkina E.N. Alkylaromatics in Detergents Manufacture: Modeling and Optimizing Linear Alkylbenzene Sulfonation. *Journal of Surfactants and Detergents*, 2018.– 21(1).– 175–184.

## ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ВЕРОЯТНОСТИ ПРОТЕКАНИЯ РЕАКЦИЙ ОБРАЗОВАНИЯ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В УСЛОВИЯХ ПРОВЕДЕНИЯ ЦЕОФОРМИНГА n-ГЕКСАНА

К.Э. Марданов, И.А. Богданов

Научный руководитель – к.т.н., доцент М.В. Киргина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, kapantmar8@mail.ru

Для производства компонентов моторного топлива высоких экологических классов необходимо уменьшение содержания в них ароматических углеводородов и увеличение содержания углеводородов изостроения, также повышающих октановое число топлива.

Данный эффект может быть достигнут путем применения цеолитных катализаторов, содержащих кислотные активные центры, ускоряющие реакции изомеризации и способные в нестандартных условиях проведения процесса препятствовать протеканию реакций аромати-

**Таблица 1.** ТДХ некоторых реакций с образованием бензола

№	Реакция	$\Delta H$ , кДж/моль	$\Delta S$ , кДж/моль • К	$\Delta G$ , кДж/моль
1	2 пентен = бензол + этан + 2 метан	-126,73	165,66	-234,08
2	пентен + этен + пропен = бензол + этан + 2 метан	-222,00	40,01	-247,93
3	пентен + 2 пропен = бензол + 2 этан + метан	-202,23	33,24	-223,76
4	пентен + 3 этен = бензол + пропан + 2 метан	-330,93	-63,41	-289,85
5	пентен + пропен + бутен = бензол + 3 этан	-196,16	39,92	-222,03
6	пентен + 2 этен + пропен = бензол + бутан + 2 метан	-318,19	-77,39	-268,04
7	2 пентен + пропен = бензол + 2 этан + пропен	-196,12	48,69	-227,67
8	пентен + 4 этен = бензол + 2 пропан + метан	-420,10	-173,60	-307,60
9	пентен + 3 пропен = бензол + бутан + 2 этан	-278,64	-90,94	-219,71
10	пентен + 3 этен + пропен = бензол + бутан + пропан + метан	-407,35	-187,59	-285,79
11	пентен + 2 пропен + бутен = бензол + гексан + этан + метан	-286,14	-99,34	-221,77
12	пентен + 5 этен = бензол + 3 пропан	-509,26	-283,80	-325,35
13	2 пентен + 2 пропен = бензол + гексан + 2 этан	-278,89	-91,53	-219,58
14	пентен + 4 этен + пропен = бензол + бутан + 2 пропан	-496,51	-297,79	-303,55

**Таблица 2.** ТДХ некоторых реакций с образованием толуола

№	Реакция	$\Delta H$ , кДж/моль	$\Delta S$ , кДж/моль • К	$\Delta G$ , кДж/моль
1	2 пентен = толуол + 3 метан	-141,08	175,4	-254,74
2	пентен + пропен + этен = толуол + 3 метан	-236,35	49,76	-268,59
3	пентен + 2пропен = толуол + этан + 2 метан	-216,58	42,98	-244,43
4	пентен + 3 этен = толуол + этан + 2 метан	-338,08	-54,63	-302,68
5	пентен + бутен + пропен = толуол + 2 этан + метан	-210,51	49,66	-242,69
6	пентен + пропен + 2 бутен = толуол + пропан + 2 метан	-325,51	-60,44	-286,34
7	2 пентен + пропен = толуол + 3 этан	-203,26	57,47	-240,50
8	пентен + 4 этен = толуол + бутан + 2 метан	-434,27	-172,03	-322,79
9	пентен + 3 пропен = толуол + бутан + этан + этан	-292,99	-81,20	-240,38
10	пентен + пропен + 3 этен = толуол + 2 пропан + этан	-414,67	-170,64	-304,10
11	пентен + бутен + 2 пропен = толуол + бутан + 2 этан	-286,93	-74,52	-238,64
12	пентен + 5 этен = толуол + бутан + пропан + этан	-523,43	-282,23	-340,55
13	2 пентен + 2 пропен = толуол + гексан + этан + метан	-293,24	-81,79	-240,24
14	пентен + пропен + 4 этен = толуол + 3 пропан	-503,83	-280,83	-381,85

зации [1]. Для производства высокооктановых компонентов бензинов с низким содержанием ароматических углеводородов используется процесс цеоформинг.

Основную долю ароматических углеводородов входящих в состав продуктов процесса цеоформинг составляют бензол, толуол и ксилол.

Поэтому целью данной работы является оценка термодинамической вероятности протекания реакций образования именно этих ароматических углеводородов в условиях проведения цеоформинга n-гексана.

Для процесса цеоформинг свойственно протекание реакций перераспределения водорода в олефинах, образовавшихся в ходе крекинга, с получением ароматических углеводородов.

С использованием программного пакета Gaussian (GaussianView 3.0) [2] были рассчитаны термодинамические характеристики (ТДХ) веществ и реакций их образования.

Расчет был осуществлен для реакций образования бензола, толуола и ксилола, путем перераспределения водорода в олефинах при условиях реализации процесса цеоформинг –

**Таблица 3.** ТДХ некоторых реакций с образованием о-ксилола

№	Реакция	$\Delta H$ , кДж/моль	$\Delta S$ , кДж/моль • К	$\Delta G$ , кДж/моль
1	пентен + 2 пропен = о-ксилол + 3 метан	-230,62	22,00	-244,88
2	пентен + 3 этен = о-ксилол + 3 метан	-352,12	-75,60	-303,13
3	пентен + пропен + бутен = о-ксилол + этан + 2 метан	-224,56	28,68	-243,14
4	пентен + 2 этен + пропен = о-ксилол + этан + 2 метан	-332,35	-82,38	-278,97
5	2 пентен + пропен = о-ксилол + 2 этан + метан	-217,31	36,49	-240,95
6	пентен + 4 этен = о-ксилол + пропан + 2 метан	-441,21	-185,80	-320,89
7	пентен + 3 пропен = о-ксилол + 3 этан	-292,8	-95,93	-230,64
8	пентен + 3 этен + пропен = о-ксилол + бутан + 2 метан	-428,54	-199,79	-299,08
9	пентен + 2 пропен + бутен = о-ксилол + пропан + 2 этан	-293,94	-88,29	-236,73
10	пентен + 5 этен = о-ксилол + пентан + 2 метан	-536,83	-307,05	-337,86
11	2 пентен + 2 пропен = о-ксилол + бутан + 2 этан	-293,73	-87,69	-236,90
12	пентен + 4 этен + пропен = о-ксилол + бутан + пропан + метан	-517,70	-309,98	-316,83

температуре 375 °С (648 К) и давлении 25 атм. (2,5 МПа).

Список некоторых реакций и полученные ТДХ представлены в таблицах 1–3.

Полученные результаты показывают, что протекание всех представленных реакций термодинамически возможно ( $\Delta G < 0$ ).

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации №МК-351.2020.3.

### Список литературы

1. Ахмедова Х.В., Дадашева С.С., Мамедов С.Э. и др. Превращение прямогонной бензиновой фракции на высококремнеземном цеолите // *Химия и технология топлив и масел*, 2016.– №3(595).– С.28–31.
2. Ochterski J.W. *Thermochemistry in Gaussian*. Gaussian, Inc., 2000.– 19 с.

## ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ВЕРОЯТНОСТИ ПРОТЕКАНИЯ РЕАКЦИЙ КРЕКИНГА n-ПАРАФИНОВ В УСЛОВИЯХ ПРОВЕДЕНИЯ ЦЕОФОРМИНГА СТАБИЛЬНОГО ГАЗОВОГО КОНДЕНСАТА

К.Э. Марданов, И.А. Богданов

Научный руководитель – к.т.н., доцент М.В. Киргина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, kapanmar8@mail.ru

При подготовке нефти и газа образуется побочный продукт – стабильный газовый конденсат (СГК). На сегодняшний день его используют нерационально – смешивают с товарной нефтью для улучшения её реологических свойств, хотя требуются значительные материальные и временные затраты на извлечение СГК, кроме того СГК является ценным и качественным углеводородным сырьем.

Возможность переработки СГК в товарные топлива, в том числе бензин, с использованием цеолитных катализаторов является перспективным направлением развития нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности.

На цеолитных катализаторах в первую очередь протекают реакции крекинга, поэтому целью данной работы является оценка термодинамической вероятности протекания реакций