



Рис. 1. Установка гидрогенизации тяжелого нефтяного сырья

процессов гидрогенизации ТНС. Установка отличается простотой и универсальностью (рисунок 1).

Основным аппаратом является реактор периодического действия (P1), в который загружается предварительно подготовленная смесь исходного сырья и катализатора. Реакционную массу выдерживают при температуре 400–450 °С в течение 15–60 минут, после чего полученный

продукты разделяют в сепараторе (СВД1). Продукты реакции анализируют на газовом хроматографе «Хроматек-Кристалл 5000.2»

Установка апробирована на следующих видах сырья – мазут, газойль. Дальнейшей задачей является сравнение различных технологических режимов процесса и подбор оптимальных условий.

### Список литературы

1. Государственная программа Российской Федерации «Энергоэффективность и развитие энергетики» в редакции от 30.03.2018.
2. Аналитический центр при правительстве РФ. Метаморфозы на рынках нефтепродук-

тов. [Электронный ресурс] / Энергетический бюллетень, 2016.– №33.– Режим доступа: <http://ac.gov.ru/files/publication/a/7908.pdf>.

## ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК УГЛЕВОДОРОДОВ, ВХОДЯЩИХ В СОСТАВ ДИЗЕЛЬНЫХ ФРАКЦИЙ, ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ТЕМПЕРАТУРЫ

А.А. Павлова, А.С. Мамец

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, aap129@tpu.ru

С помощью термодинамических расчётов можно определить вероятность и условия наиболее эффективного осуществления различных производственных процессов, оценить влияние и устойчивость вещества при изменении всевозможных технологических параметров, рассчитать выход продуктов реакции [1].

Целью данной работы является расчет термодинамических характеристик углеводородов дизельных фракций различного строения, таких как энтропия ( $\Delta_r S_r^\circ$ ), энтальпия ( $\Delta_r H_r^\circ$ ), энергия Гиббса ( $\Delta_r G_r^\circ$ ), при изменении температуры и постоянном давлении; анализ полученных данных.

**Таблица 1.** Сравнение изменения энтальпии молекул углеводородов дизельных фракций при изменении температуры

Углеводород	$\Delta_r H_r^\circ$ , кДж/моль		
	T=248 К, p=1 атм	T=273 К, p=1 атм	T=298 К, p=1 атм
бутан	221,02	223,10	225,35
бутилбензол	340,91	316,49	291,01
бутилциклогексан	513,27	517,43	522,01

Расчет термодинамических характеристик был произведен при помощи программного пакета Gaussian, предназначенного для расчета структуры и свойств молекулярных систем [2]. Принцип расчета основан на широком спектре реализованных квантово-химических методик для моделирования молекулярных систем. Данные, рассчитанные в программе, представлены в таблицах 1, 2 и 3.

Из таблицы 1 можно заметить закономерность изменения энтальпии образования углеводородов при повышении температуры: значение энтальпии молекул возрастает равномерно, что связано с эндотермическими эффектами – при образовании молекул происходит поглощение теплоты. С ростом температуры изменение энтальпии образования углеводородов происходит линейно.

В таблице 2 представлена зависимость изменения энтропии образования углеводородов от температуры: значение энтропии также возрастает равномерно. При увеличении температуры возрастает колебательная и вращательная энергия атомов и молекул, что приводит к увеличению энтропии.

### Список литературы

1. Духанин Г.П. *Термодинамические расчеты химических реакций: учеб. пособие* / Г.П. Духанин, В.А. Козловцев/ Волг-ГТУ.– Волгоград, 2010.– 96 с.

**Таблица 2.** Сравнение изменения энтропии молекул углеводородов дизельных фракций при изменении температуры

Углеводород	$\Delta_r S_r^\circ$ , кДж/(моль • К)		
	T=248 К, p=1 атм	T=273 К, p=1 атм	T=298 К, p=1 атм
бутан	0,294	0,302	0,309
бутилбензол	0,406	0,421	0,435
бутилциклогексан	0,408	0,424	0,439

**Таблица 3.** Сравнение изменения энергии Гиббса углеводородов дизельных фракций при изменении температуры

Углеводород	$\Delta_r G_r^\circ$ , кДж/моль		
	T=248 К, p=1 атм	T=273 К, p=1 атм	T=298 К, p=1 атм
бутан	148,14	140,69	133,05
бутилбензол	441,73	431,38	420,68
бутилциклогексан	412,10	401,70	390,90

С повышением температуры величина изменения энергии Гиббса уменьшается линейно (таблица 3), что свидетельствует об увеличении вероятности образования молекул.

Таким образом, в ходе данной работы были рассмотрены закономерности влияния температуры на изменение термодинамических характеристик углеводородов дизельных фракций с использованием квантово-химических расчетов на базе программного пакета Gaussian.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Проект №18-79-00095) в Национальном исследовательском Томском политехническом университете.

2. Серба П.В., Блинов Ю.Ф., Мирошниченко С.П. *Квантово-химические расчеты в программе Gaussian.*– Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2012.– 100 с.