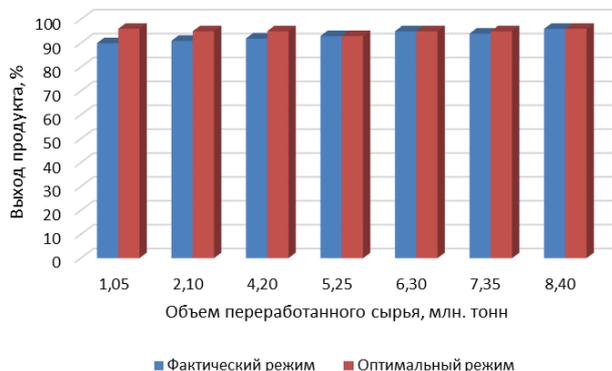


лятов при оптимальных технологических параметрах (рис. 1, 2).

Таким образом, при проведении процесса при оптимальных технологических параметрах с учетом состава сырья и динамики дезактивации катализатора выход продукта выше на

1–6%, а ресурс катализатора повышается на 10% по сравнению с проведением процесса при фактических технологических параметрах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-73-00023).



**Рис. 1.** Выход продукта при фактическом и оптимальном режиме



**Рис. 2.** Относительная активность катализатора при фактическом и оптимальном режиме

### Список литературы

1. Белинская Н.С., Францина Е.В., Луценко А.С., Белозерцева Н.Е., Иванчина Э.Д. // Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний, 2019. – №7. – С. 24–32.

## ПОЛУЧЕНИЕ ТОВАРНОГО ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА ВОВЛЕЧЕНИЕМ БИОДИЗЕЛЯ, СИНТЕЗИРОВАННОГО ИЗ РАЗЛИЧНОГО РАСТИТЕЛЬНОГО МАСЛА

Н.Е. Белозерцева, О.М. Торчакова, М.В. Киргина  
Научный руководитель – к.т.н., доцент ОХИ М.В. Киргина

Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, belozertsevanatasha@mail.ru

Переход на низкоуглеродную экономику и возобновляемые источники энергии становится популярным направлением в развитии энергетической отрасли [1]. Все большее распространение дизельного топлива (ДТ) влечет за собой также и развитие альтернативного направления – производства биодизельного топлива (БиоДТ).

БиоДТ представляет собой смесь моноалкильных сложных эфиров жирных кислот, полученных в результате реакции переэтерификации возобновляемых биологических ресурсов (масел, жиров, отходов, водорослей и др.).

В данной работе исследовано влияние БиоДТ на свойства ДТ, регламентируемые [2]. Исследовались такие свойства как плотность

( $\rho$ ), кинематическая вязкость ( $\nu$ ), предельная температура фильтруемости (ПТФ).

БиоДТ было синтезировано с помощью реакции переэтерификации из различных растительных масел: подсолнечного (ПБиоДТ), льняного (ЛБиоДТ), горчичного (ГБиоДТ) и рапсового (РБиоДТ). Переэтерифицирующим агентом выступил этиловый спирт, катализатором – гидроксид натрия. Соотношение масло:этанол составило 1:6, концентрация катализатора – 1,75% от массы растительного масла. Синтез проводился в течение 1 ч при 45 °С.

Результаты исследования свойств ДТ и полученных БиоДТ представлены в таблице 1.

Чистые БиоДТ не соответствуют требованиям [2] для товарных ДТ, ввиду своей высокой вязкости и плотности, по этой причине БиоДТ применяется в качестве добавки к ДТ в определенной концентрации [3]. В рамках работы были приготовлены смеси с различной концентрацией БиоДТ. Смесям были присвоены следующие обозначения: В5, В10, В15, В20, где цифра обозначает содержание БиоДТ в смеси в % об. Результаты определения характеристик смесей ДТ с БиоДТ представлены в таблице 2.

Как можно видеть из Таблицы 2, добавление БиоДТ к ДТ негативно сказывается на физико-химических свойствах последнего. Стоит отметить, что все полученные смеси соответствуют требованиям [2] по плотности (не более 863,4 кг/м<sup>3</sup>) и вязкости (допустимые пределы 3,0–6,0 мм<sup>2</sup>/с) для марок Л (летнее) и Е (меж-

сезонное). По значениям ПТФ все полученные смеси соответствуют требованиям [2] для марки Л (летнее) (допустимое значение – не выше –5 °С).

Таким образом, можно сделать вывод, что, не смотря на негативный эффект на физико-химические свойства при вовлечении БиоДТ в смеси, наблюдается положительный эффект на ПТФ, что объясняется отличительной структурой молекул БиоДТ, которые при снижении температуры не застывают, а принимают желеобразную форму в смеси, которая в свою очередь прокачивается через фильтр.

С точки зрения производства смесевых ДТ марки Л (летнее), значимо то, что возможно вовлечение БиоДТ, полученного из различных масел, в количестве до 20 % об., что позволит увеличить объемы производства товарного ДТ.

**Таблица 1.** Характеристики ДТ и полученных БиоДТ

Свойство	ДТ	ПБиоДТ	ЛБиоДТ	ГБиоДТ	РБиоДТ
$\rho$ при 15 °С, кг/м <sup>3</sup>	837,3	888,2	897,1	891,1	900,1
$\nu$ при 20 °С, мм <sup>2</sup> /с	3,96	9,62	8,88	11,53	20,18
ПТФ, °С	-5	-6	-11	-14	-14

**Таблица 2.** Характеристики смесей ДТ с БиоДТ

Свойство		$\rho$ при 15 °С, кг/м <sup>3</sup>	$\nu$ при 20 °С, мм <sup>2</sup> /с	ПТФ, °С
ПБиоДТ	В5	839,4	4,13	-7
	В10	841,9	4,33	-7
	В15	844,5	4,53	-7
	В20	846,9	4,74	-11
ЛБиоДТ	В5	839,8	4,31	-10
	В10	843,4	4,28	-10
	В15	846,2	4,44	-10
	В20	849,5	4,62	-12
ГБиоДТ	В5	839,6	4,28	-7
	В10	842,3	4,54	-11
	В15	845,1	4,62	-11
	В20	847,7	4,87	-11
РБиоДТ	В5	840,3	4,29	-11
	В10	843,2	4,62	-11
	В15	846,6	4,98	-12
	В20	849,7	5,41	-12

### Список литературы

1. *Special report: global warming of 1,5 °С* – <https://www.ipcc.ch/sr15/chapter/spm/> (дата обращения: 17.02.2021).
2. *ГОСТ 305-2013 Межгосударственный стандарт. Топливо дизельное. Технические условия.* – М.: Стандартинформ, 2014. – 10 с.

3. Белозерцева Н.Е., Богданов И.А., Бальжанова А.Т. и др. // *Химия в интересах устойчиво-*

*вого развития*, 2020. – Т. 28. – №2. – С. 131–140.

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИ ОЦЕНКЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ ДИЗЕЛЬНЫХ ФРАКЦИЙ С ДЕПРЕССОРНОЙ И ДЕПРЕССОРНО-ДИСПЕРГИРУЮЩЕЙ ПРИСАДКОЙ

А.А. Бердникова, А.С. Мамец, Е.В. Францина  
Научный руководитель – к.т.н. Е.В. Францина

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, aab77@tpu.ru*

В условиях современного Сибирского климата становится актуальным улучшение низкотемпературных характеристик дизельного топлива (ДТ) с помощью добавления депрессорно-диспергирующих (ДД) присадок. Межмолекулярные взаимодействия, возникающие между углеводородами (УВ) ДТ и присадкой, оказывают значительное влияние на количество присадки, необходимой для улучшения свойств ДТ.

В данной работе было проведено квантово-химическое моделирование углеводородов ДТ с ДД присадкой. В качестве депрессорной присадки был выбран – винилацетат, в качестве диспергирующей – н-додецилсукциниамид. Построение групп УВ дизельных фракций (ДФ) и расчёт межмолекулярных взаимодействий проводилось в программном комплексе Gaussian,

при стандартных температуре и давлении. Были выбраны группы УВ, такие как: парафины, ароматические УВ и нафтены, с числом атомов углерода от  $C_8$  до  $C_{16}$ . Рассчитывались такие характеристики, как энергия и энтальпия межмолекулярного взаимодействия. Для сравнительной оценки, значения межмолекулярных взаимодействий групп УВ были усреднены. Низкотемпературные характеристики, такие как температура помутнения ( $T_p$ ), предельная температура фильтруемости (ПТФ), температура застывания ( $T_z$ ) определялись с помощью прибора ИНПН. Результаты приведены в таблицах 1, 2.

Наименьшая энтальпия взаимодействия с присадкой наблюдается для ароматических УВ, что говорит о том, что ДТ, содержащее наибольшее количество ароматических УВ, будет наи-

**Таблица 1.** Энергия и энтальпия межмолекулярных взаимодействий групп углеводородов дизельных фракций с винилацетатом и н-додецилсукциниамидом

Группа углеводородов	$\Delta E_{cp}$ реакции, Дж/моль • К	$\Delta H_{cp}$ реакции, кДж/моль
Парафины	13,49	-18,56
Ароматика	13,40	-24,84
Нафтены	13,37	-23,35

**Таблица 2.** Низкотемпературные свойства ДФ, в зависимости от концентрации (Спр) депрессорно-диспергирующей присадки

Спр, %	ДФ1			ДФ2			ДФ3		
	$T_p$ , °С	ПТФ, °С	$T_z$ , °С	$T_p$ , °С	ПТФ, °С	$T_z$ , °С	$T_p$ , °С	ПТФ, °С	$T_z$ , °С
0	-25,4	-27	-33,9	-25,5	-26,4	-36,7	-25,4	-26,7	-34,8
0,009	-24	-35,2	-53,1	-25,7	-37	-55,5	-22,5	-33	-49,7
0,01	-23,9	-36	-53,7	-24,5	<-25,8	-54,2	-23	<-24,4	-56
Спр, %	ДФ4			ДФ5					
	$T_p$ , °С	ПТФ, °С	$T_z$ , °С	$T_p$ , °С	ПТФ, °С	$T_z$ , °С			
0	-2,5	-6,1	-13,4	-16,2	-21,2	-24,5			
0,009	-4,5	-17,7	-28,2	-17,7	-27,5	-34,2			
0,01	-2,3	-11,4	-20,6	-17,2	-29,1	-37,4			