

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			

**Таблица 3.** Углеводородный состав дизельных фракций

Группа углеводородов	ДФ №1	ДФ №2	ДФ №3	ДФ №4	ДФ №5
w парафинов, %	49,74	62,58	58,72	63,46	62,60
w ароматики, %	24,85	16,90	26,55	17,03	22,38
w(ароматики)/w(нафтенов)	1,16	0,79	1,96	0,95	2,95

более приемисто к ДД присадке. Наибольшая энтальпия взаимодействия наблюдается для парафиновых УВ, что говорит о том, что ДТ, содержащее наибольшее количество парафиновых УВ, будет отрицательно влиять на приемистость ДТ к ДД присадке.

Ранее, был определен углеводородный состав ДФ (табл. 3) [1].

Наибольшее содержание ароматических УВ, наблюдается для ДФ №3 (26,55%), поэтому при добавлении присадки 0,01% наблюдается наибольшее снижение  $T_3$  (21 °С). Для ДФ №1 наблюдается аналогичная ситуация (снижение 19,8 °С). Наибольшее количество парафинов наблюдается для ДФ №4 (63,46%) и ДФ №5 (62,60%), поэтому, при добавлении присадки

0,01%, наблюдается наименьшее снижение  $T_3$ , 7,2 °С для ДФ №4 и 12,9 °С для ДФ №5.

Для ДФ №2 наблюдается также большое содержание парафинов (62,58%), и, низкое содержание ароматики (16,90%), что должно указывать на плохую приемистость ДТ к ДД присадке. Однако, наблюдается большое снижение  $T_3$ . Это связано с тем, что, в отличие от ДФ №1, 3, 5, в ДФ №2 – соотношение ароматики к нафтенам < 0,8 (0,79). Таким образом, наибольшее влияние на приемистость ДТ к ДД присадке оказывает содержание ароматики более 20% и соотношение ароматики к нафтенам < 0,8. Содержание парафинов в составе дизельного топлива > 60% ухудшает приемистость ДТ к ДД присадке.

### Список литературы

1. E.V. Frantsina, A.A. Grinko, N.I. Krivtsova [et al.] // *Petroleum Science and Technology*, 2020. – Vol. 38. – Iss. 4. – P. 338–344.

## ЗАКОНОМЕРНОСТИ ВЛИЯНИЯ ФРАКЦИОННОГО СОСТАВА, СОДЕРЖАНИЯ ПАРАФИНОВЫХ И АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В СОСТАВЕ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ДЕЙСТВИЯ ДЕПРЕССОРОВ

И.А. Богданов

Научный руководитель – д.х.н., профессор ОХИ ИШПР ТПУ Е.И. Короткова

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

Одним из важнейших показателей качества дизельного топлива (ДТ), в том числе оказывающим значительное влияние на эффективность действия присадок является его состав.

В случае с депрессорными присадками наиболее сильное влияние на эффективность их действия оказывает фракционный состав, содержание ароматических и парафиновых углеводородов, что обусловлено механизмом действия данных присадок [1]. Именно влиянием состава топлива на эффективность действия присадок обусловлены ситуации, при которых добавление депрессора в ДТ не оказывает нужного эффекта

на низкотемпературные свойства либо оказываемый эффект является незначительным.

### Влияние фракционного состава

Для исследования влияния фракционного состава ДТ на эффективность действия депрессорных присадок была проведена серия исследований, суть которых заключалась в изменении содержания узких дизельных фракций (фракции с температурами выкипания 180–240 °С, 240–300 °С, 300–360 °С) в составе ДТ, последующем добавлении депрессора и определении низкотемпературных свойств смесей. По резуль-