

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 C₈ до C₁₆. 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 (Т_п), предельная температура фильтруемости (ПТФ), температура застывания (Т_з) 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	ΔE_{cp} реакции, Дж/моль • К	ΔH_{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		
	Тп, °С	ПТФ, °С	Тз, °С	Тп, °С	ПТФ, °С	Тз, °С	Тп, °С	ПТФ, °С	Тз, °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					
	Тп, °С	ПТФ, °С	Тз, °С	Тп, °С	ПТФ, °С	Тз, °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-