

детельство о государственной регистрации №2014661067) были рассчитаны значения ЦЧ для стабильной фракции 180–240+240–340 процесса гидродепарафинизации по заводским исходным данным. На рисунке 1 представлена зависимость ЦЧ от содержания n-парафинов. ЦЧ продукта увеличивается с повышением доли n-парафинов, т.к. они склонны к более легкому воспламенению.

На рисунке 2 представлена зависимость ЦЧ от температуры помутнения и предельной температуры фильтруемости. Уменьшение доли n-парафинов приводит к другому нежелательному эффекту – повышению температур помутнения и замерзания. Согласно требованиям к зимнему топливу температура помутнения и температура замерзания дизельного топлива должны быть не более –26 и –35 °С соответственно.

Список литературы

1. Большая энциклопедия нефти и газа.
2. Белинская Н.С. диссертация канд. техн.

наук.– Томск: НИ ТПУ, 2015.– 170с.

ЗАВИСИМОСТЬ ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДИЗЕЛЬНЫХ ТОПЛИВ ОТ СВОЙСТВ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ

Н.Е. Белозерцева, Н.С. Белинская, Е.В. Францина
 Научный руководитель – д.т.н., профессор Э.Д. Иванчина

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

Общеизвестно, что основными характеристиками дизельного топлива являются цетановое число и температура замерзания.

В данной работе выявлена зависимость цетанового числа и температуры застывания от силы взаимодействия между молекулами индивидуальных углеводородов. Силы межмолекулярного взаимодействия определяющим образом зависят от полярности молекул топливной смеси. Мерой полярности молекул выступает такая характеристика как дипольный момент [1]. Стоит отметить, что дипольный момент симметричных относительно инверсионной оси молекул равен нулю, поэтому в ходе исследования использовались только дипольные моменты не симметричных молекул.



Рис. 2. Зависимость температуры помутнения (t_n) и температуры замерзания (t_z) от содержания n-парафинов

Исходя из данных, полученных с помощью математической модели, следует, что для получения дизельного топлива с ЦЧ 47–48, $t_n = -26$ °С, $t_z = -35$ °С (заводские требования), необходимо поддерживать параметры процесса гидродепарафинизации обеспечивающие содержание n-парафинов в продукте в пределах 8,0–9,5%.

Расчеты характеристик молекул дизельного топлива были произведены методом DFT, базис V3LYP с использованием пакета квантово-химических программ «Gaussian» в условиях двигателя (при температуре 1173 К и давлении 24 атм.).

Расчет производился для парафинов C_5 – C_{21} , исключая симметричные молекулы (рис. 1).

Проанализировав (рис. 1) можно сделать вывод, что в области отрицательных температур с ростом температуры дипольный момент увеличивается, после перехода в положительную область, дипольный момент перестает меняться. Достоверность аппроксимации (0,9462) позволяет предположить, что полученное уравнение достаточно точно и с помощью него можно про-

считать данные параметры для других парафинов.

Также взаимодействие между молекулами можно проследить с помощью значений энтропии индивидуальных углеводородов. Используя цетановые числа индивидуальных углеводородов C_5-C_{21} [2], построена зависимость цетанового числа от энтропии молекул (рис. 2).

Исходя из полученных данных, можно сделать вывод, что с увеличением энтропии возрастает значение цетанового числа. Когда значение энтропии достигает 1645 кДж/моль, цетановое число перестает расти и остается постоянным (ЦЧ=100). Также можно видеть, что с дальнейшим ростом цепи энтропия увеличивается линейно. Полученное уравнение имеет высокую достоверность (0,9547), что позволит производить расчеты с достаточной точностью.

Проведенное исследование дает точную оценку зависимости цетанового числа и температуры замерзания от длины цепи и межмолекулярного взаимодействия. Это позволит в дальнейшем оптимизировать процесс каталитической депарафинизации по цетановому числу и температуре замерзания в зависимости от состава сырья.

Список литературы

1. Киргина М.В. Дисс. ... канд. тех. наук.– Томск: Томский политехнический университет, 2014.– 166с.
2. Prasenjeet Ghosh, Stephan B. Jaffe // *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2006.– Vol.45.– P.346–351.

МАТЕРИАЛЬНЫЙ БАЛАНС СИНТЕЗА УГЛЕВОДОРОДОВ ИЗ СО И Н₂ НА ЭЛЕКТРОВЗРЫВНОМ ЖЕЛЕЗНОМ КАТАЛИЗАТОРЕ

Н.П. Бурлуцкий, А.Е. Литвинова
Научный руководитель – к.т.н, доцент Е.В. Попок

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

Ужесточение экологических требований к моторным топливам заставляет обращать внимание учёных во всём мире на нетривиальные

источники углеводородов. Постоянное вовлечение в переработку всё более тяжёлого сырья увеличивает конкурентоспособность технологий

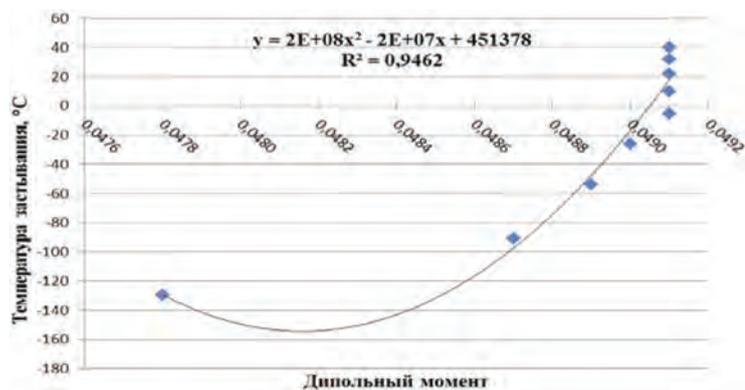


Рис. 1. Зависимость температуры застывания от дипольного момента парафинов C_5-C_{21}

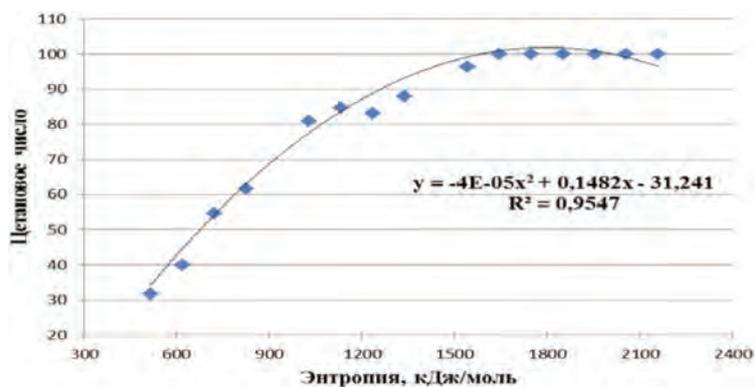


Рис. 2. Зависимость цетанового числа от энтропии индивидуальных углеводородов C_5-C_{21}

Далее планируется провести подобное исследование для других групп углеводородов (и-парафинов, нафтенов, ароматики) и проследить влияние термодинамических параметров на эксплуатационные и физико-химические свойства дизельных топлив.