

**Таблица 1.** Классы исследуемых углей по ГОСТ 25543-2013

№ п/п	Наименование пробы	Марка	V <sup>daf</sup> , %	x/y	R <sub>0,r</sub> , %	Vt, %	ΣOK, %	SIR, %	C <sup>daf</sup> , %	H <sup>daf</sup> , %	Выход сырого бензола на сухую массу, %
Класс 09											
1	Ш. «им. Тихова», пласт 23	Ж	33,2	13/35	0,911	78	–	8½	86,28	5,61	0,92
2	Ш. «им. Тихова», секция № 1	Ж	35,4	10/37	0,931	76	23	9	87,01	5,87	1,04
Класс 10											
1	ш. Бутовская, лава А-3-2	КО	21,9	44/8	1,005	38	58	1	89,10	4,46	0,52
2	ОФ «Проктопьевская»	КО	25,5	25/10	1,013	42	–	½	85,99	5,12	0,78
3	ОФ «Анжерская»	КО	22,2	43/8	1,038	39	–	½	88,92	4,46	0,40
4	ш. Бутовская, лава А-3, секция 130	КО	20,7	40/6	1,056	35	61	1	88,87	4,39	0,44
5	ОФ «Проктопьевская»	К	22,9	39/13	1,066	49	50	1½	87,96	5,10	0,49
6	Нерюнгри (Колмар)	КЖ	32,5	–31/36	1,083	71	29	8	88,98	5,21	0,67

ты «имени Тихова», но разных пластов, выход сырого бензола различен. При приблизительно равных показателях R<sub>0,r</sub> и Vt больший выход смолы имеет уголь Ш. «им. Тихова», секция № 1. Это может быть связано для данного образца со сравнительно большими относительно пробы угля Ш. «им. Тихова», пласт 23 выходом летучих веществ V<sup>daf</sup> и содержанием водорода. Похожие

закономерности выхода каменноугольной смолы наблюдаются и внутри других классов.

Полученные результаты исследований позволяют повысить эффективность применения углей ценных марок, формировать оптимальный состав угольной шихты для коксования с целью повышения выхода кокса и других ценных продуктов коксования.

### Список литературы

1. Федорова Н.И., Заостровский А.Н., Зубакина В.А. // Вестник Кузбасского государственного технического университета, 2015.– №5.– С.121–125.
2. ГОСТ 18635-73. Угли каменные. Метод определения выхода химических продуктов коксования.– М: Изд-во стандартов, 2000.– 11с.
3. ГОСТ 25543-2013. Угли бурые, каменные и антрациты. Классификация по генетическим и технологическим параметрам.– М: Стандартинформ, 2014.– 21с.

## РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА АЛКИЛИРОВАНИЯ БЕНЗОЛА ЭТИЛЕНОМ

К.А. Васючка, И.О. Долганова, И.М. Долганов  
Научный руководитель – д.т.н. И.О. Долганова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30

Алкилирование бензола этиленом – один из основных процессов в химической промышленности. Целевым продуктом процесса является этилбензол, применяемый в качестве сырья для получения полистирола и других полимеров, растворителя, добавки для увеличения октанового числа. Помимо этилбензола в процессе алкилирования образуется еще ряд продуктов,

таких как полиалкилаты, нафтены, алкены и другие соединения.

С учетом экспериментальных данных и литературных источников было предположено, что наибольший вклад в образующиеся в процессе алкилирования бензола этиленом продукты вносят реакции алкилирования, трансалкилирования, конденсации, олигомеризации.

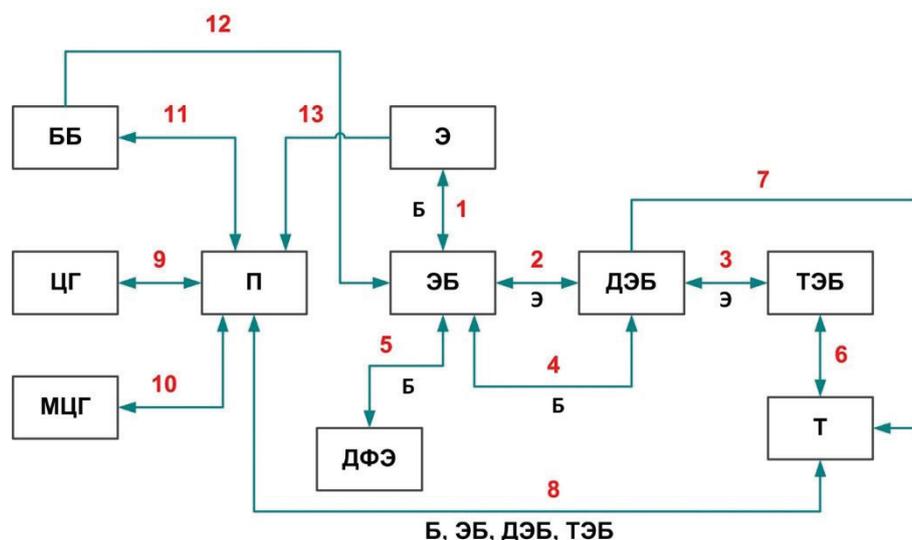


Рис. 1. Формализованная схема превращений углеводородов в процессе алкилирования бензола этиленом

Б – бензол, Э – этилен, ЭБ – этилбензол, ДЭБ – диэтилбензол, ТЭБ – триэтилбензол, ББ – бутилбензол, П – легкие углеводороды, Т – тяжелые углеводороды, ДФЭ – дифенилэтан, ЦГ – циклогексан, МЦГ – метилциклогексан

Таблица 1. Результаты термодинамического анализа реакций в процессе алкилирования бензола этиленом (при T=523 К, P=3,7 МПа)

Группа реакций	Реакция	$\Delta G$ , кДж/моль	$\Delta H$ , кДж/моль
Алкилирование	$C_6H_6 + C_2H_4 = C_8H_{10}$	-33,6981	-115,72
	$C_8H_{10} + C_2H_4 = o-C_{10}H_{14}$	1,8649	-87,3566
	$C_8H_{10} + C_2H_4 = m-C_{10}H_{14}$	-32,7945	-115,631
	$C_8H_{10} + C_2H_4 = p-C_{10}H_{14}$	-42,1325	-112,242
Трансалкилирование	$p-C_{10}H_{14} + C_6H_6 = 2 \cdot C_8H_{10}$	8,418615	-3,4778
	$o-C_{10}H_{14} + C_6H_6 = 2 \cdot C_8H_{10}$	-35,5788	-28,3632
	$m-C_{10}H_{14} + C_6H_6 = 2 \cdot C_8H_{10}$	-0,91935	-0,0893
Конденсация	$C_{10}H_{14} = C_{10}H_{12}$	-46,9472	-47,273
Олигомеризация	$2 \cdot C_2H_4 = C_4H_8$	-59,2508	-133,164
	$C_2H_4 + C_4H_8 = C_6H_{12}$	-38,2318	-95,6518

Для оценки вероятности протекания реакций был проведен термодинамический анализ с использованием методов квантовой химии при T=523 К и p=3,7 МПа (табл. 1).

На основе выполненного термодинамического построена формализованная схема превращений углеводородов (рис. 1).

### Список литературы

1. Алкилирование. Исследования и промышленное оформление процесса / под ред. Л.Ф. Орбайта и А.Р. Голдсби / пер. с англ. Под ред. В.Г. Липовича. – М.: Химия, 1982. – 336с.
2. Сталл Д., Вестрам Э., Зинге Г., Химическая термодинамика органических соединений. – М.: Мир, 1971. – 808с.