

согласно табл. 1 наблюдается наибольшее содержание парафинов (69,32 % мас.) и н-парафинов (44,92 % мас.). Поскольку энергия взаимодействия «н-парафин---присадка» наибольшая (56,8 кДж/моль по сравнению с отрицательными значениями для остальных групп углеводородов), следовательно, наименьшая концентрация вовлекаемой присадки должна увеличивать цетановое число тех дизельных фракций, в которых содержание н-парафинов наибольшее. Характеристикой, позволяющей описать данную эффект, является приемистость углеводородов дизельного топлива к цетаноповышающей присадке.

При концентрации присадки, равной 0,1–1,0 % об. максимальный прирост цетанового числа наблюдается у образцов №2, 6, 7 (табл. 2). Для образцов №2, 6 и 7 содержание н-парафинов составляет от 32 до 37 % масс. (табл. 1), следо-

вательно, высокое значение энергии взаимодействия «н-парафин-присадка» подтверждает факт хорошей приемистости парафинистого дизельного топлива к цетаноповышающей присадке даже при минимальных концентрациях.

Для образцов №6 и 7 содержание парафинов намного меньше, чем для образца №2 (табл. 1), однако также наблюдается значительный прирост цетанового числа при значениях присадки от 0,1 до 1,0 % об. Данный эффект можно объяснить тем, что общее содержание парафинов (сумма н-парафинов и изо-парафинов) больше, чем сумма ароматических и нафтеновых углеводородов, так как энергия взаимодействия ароматических и нафтеновых углеводородов имеют максимально отрицательные значения, что также подтверждает их плохую приемистость к цетаноповышающей присадке.

### Список литературы

1. Любименко В.А. Молекулярное моделирование и квантово-химические расчеты в изучении процессов нефтепереработки и не-

фтехимии: Дис. на соиск. уч. степ. док. хим. наук.– М.: РГУ им. Губкина, 2015.– 324 с.

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АЛКИЛИРОВАНИЯ И СУЛЬФИРОВАНИЯ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ АЛКИЛБЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТЫ

В.Ю. Малецкий, И.М. Долганов, А.А. Солопова  
Научный руководитель – к.т.н., доцент И.М. Долганов

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

На данный момент спрос на моющие средства синтетического происхождения набирает обороты. Основными компонентами, из которых изготавливают данные средства, являются линейные алкилбензолы (ЛАБ) – они составляют третью часть ингредиентов, из которых изготавливают моющие средства во всем мире. Востребованность линейных алкилбензолов объясняется тем, что они не наносят вред окружающей среде и совершенно безопасны для экологии. Один из самых распространенных компонентов используемых для производства моющих средств получаемых из линейных алкилбензолов является алкилбензолсульфокислота (АБСК). На производстве, АБСК получают в многотрубном пленочном реакторе, в котором линейный алкилбензол сульфидруется ангидридом серной кислоты [1].

Но при получении АБСК возникает ряд различных задач. В отделении химической инженерии Инженерной школы природных ресурсов Томского политехнического университета разра-

**Таблица 1.** Характеристики многотрубных реакторов и режимов протекающих в них

Количество трубок n	120	40
Диаметр трубки d, м	0,025	0,043
Объем трубного пространства V, м	0,353	0,353
Площадь поверхности S, м <sup>2</sup>	56,52	32,63
Время контакта τ, с	27,65	19,31
Толщина пленки δ, мм	0,57	0,69
V ЛАБ, м <sup>3</sup> /сек	9,53 • 10 <sup>-6</sup>	2,86 • 10 <sup>-5</sup>
Re пленки	96,0	166,3
Re газа	1,05 • 10 <sup>5</sup>	1,85 • 10 <sup>5</sup>

**Таблица 2.** Влияние конструкции реактора на продолжительность работы

Цикл	1 (17.10–03.11)		2 (18.11–09.12)	
	Количество трубок	120	40	120
Продолжительность, сутки	18	27	22	32
Концентрация высоковязкого компонента приходящая на последний день, % масс.	0,021	0,021	0,024	0,024

ботана программа, которая решает такие задачи, как: проведение типовых расчетов состава выходных потоков, определение сроков межпромывочных циклов реактора сульфирования или других выходных параметров при указанных составах сырья и технологических параметрах [2].

В данной программе был произведен расчет для подбора оптимального количества трубок и времени пребывания сырья в реакторе, для определения оптимальной конструкции многотрубного пленочного реактора сульфирования, с целью увеличения межпромывочных циклов. На современных производствах алкилбензолсульфокислоту получают в многотрубных реакторах со 120 трубками, но в данной программе был произведен расчет при котором оптимальным количеством трубок является 40.

По выполненной работе сделаны следующие выводы:

Как видно из таблицы 2, в реакторе с 40 трубками высоковязкий компонент накапливается медленнее и соответственно период работы увеличивается: в первом цикле произошло увеличение на 9 суток, а во втором на 10 суток. При этом с увеличением диаметра трубок площадь поверхности контакта уменьшается, и, как следствие, объемный расход жидкости, приходящийся на одну трубку реактора, возрастает, что ведет к увеличению толщины пленки и линейной массовой плотности орошения, вследствие чего увеличивается средняя скорость течения пленки жидкости, критерий Рейнольдса увеличивается. При увеличении критерия Рейнольдса происходит рост диффузии, что способствует снижению накопления высоковязкого компонента.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №19-73-00029.

### Список литературы

1. Шнидорова Н.О., Долганова И.О., Долганов И.М., Кочегурова Е.А. Создание компьютерной моделирующей системы процесса алкилирования со схемой превращения различного уровня детализации // Известия ТПУ, 2010.– №5.– 57–61 с.
2. Dolganova I.O., Dolganov I.M., Ivanchina E.D., Ivashkina E.N. Alkylaromatics in Detergents Manufacture: Modeling and Optimizing Linear Alkylbenzene Sulfonation. *Journal of Surfactants and Detergents*, 2018.– 21(1).– 175–184.

## ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ВЕРОЯТНОСТИ ПРОТЕКАНИЯ РЕАКЦИЙ ОБРАЗОВАНИЯ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В УСЛОВИЯХ ПРОВЕДЕНИЯ ЦЕОФОРМИНГА n-ГЕКСАНА

К.Э. Марданов, И.А. Богданов

Научный руководитель – к.т.н., доцент М.В. Киргина

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, kapantmar8@mail.ru*

Для производства компонентов моторного топлива высоких экологических классов необходимо уменьшение содержания в них ароматических углеводородов и увеличение содержания углеводородов изостроения, также повышающих октановое число топлива.

Данный эффект может быть достигнут путем применения цеолитных катализаторов, содержащих кислотные активные центры, ускоряющие реакции изомеризации и способные в нестандартных условиях проведения процесса препятствовать протеканию реакций аромати-