

Таблица 3. ТДХ некоторых реакций с образованием о-ксилола

№	Реакция	ΔH , кДж/моль	ΔS , кДж/моль • К	ΔG , кДж/моль
1	пентен + 2 пропен = о-ксилол + 3 метан	–230,62	22,00	–244,88
2	пентен + 3 этен = о-ксилол + 3 метан	–352,12	–75,60	–303,13
3	пентен + пропен + бутен = о-ксилол + этан + 2 метан	–224,56	28,68	–243,14
4	пентен + 2 этен + пропен = о-ксилол + этан + 2 метан	–332,35	–82,38	–278,97
5	2 пентен + пропен = о-ксилол + 2 этан + метан	–217,31	36,49	–240,95
6	пентен + 4 этен = о-ксилол + пропан + 2 метан	–441,21	–185,80	–320,89
7	пентен + 3 пропен = о-ксилол + 3 этан	–292,8	–95,93	–230,64
8	пентен + 3 этен + пропен = о-ксилол + бутан + 2 метан	–428,54	–199,79	–299,08
9	пентен + 2 пропен + бутен = о-ксилол + пропан + 2 этан	–293,94	–88,29	–236,73
10	пентен + 5 этен = о-ксилол + пентан + 2 метан	–536,83	–307,05	–337,86
11	2 пентен + 2 пропен = о-ксилол + бутан + 2 этан	–293,73	–87,69	–236,90
12	пентен + 4 этен + пропен = о-ксилол + бутан + пропан + метан	–517,70	–309,98	–316,83

температуре 375 °С (648 К) и давлении 25 атм. (2,5 МПа).

Список некоторых реакций и полученные ТДХ представлены в таблицах 1–3.

Полученные результаты показывают, что протекание всех представленных реакций термодинамически возможно ($\Delta G < 0$).

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации №МК-351.2020.3.

Список литературы

1. Ахмедова Х.В., Дадашева С.С., Мамедов С.Э. и др. Превращение прямогонной бензиновой фракции на высококремнеземном цеолите // *Химия и технология топлив и масел*, 2016. – №3(595). – С.28–31.
2. Ochterski J.W. *Thermochemistry in Gaussian*. Gaussian, Inc., 2000. – 19 с.

ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ВЕРОЯТНОСТИ ПРОТЕКАНИЯ РЕАКЦИЙ КРЕКИНГА n-ПАРАФИНОВ В УСЛОВИЯХ ПРОВЕДЕНИЯ ЦЕОФОРМИНГА СТАБИЛЬНОГО ГАЗОВОГО КОНДЕНСАТА

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, kapaumar8@mail.ru

При подготовке нефти и газа образуется побочный продукт – стабильный газовый конденсат (СГК). На сегодняшний день его используют нерационально – смешивают с товарной нефтью для улучшения её реологических свойств, хотя требуются значительные материальные и временные затраты на извлечение СГК, кроме того СГК является ценным и качественным углеводородным сырьем.

Возможность переработки СГК в товарные топлива, в том числе бензин, с использованием цеолитных катализаторов является перспективным направлением развития нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности.

На цеолитных катализаторах в первую очередь протекают реакции крекинга, поэтому целью данной работы является оценка термодинамической вероятности протекания реакций

Таблица 1. Термодинамические характеристики некоторых реакций крекинга н-пентана

№	Температура, °C	Реакция	ΔH , кДж/моль	ΔS , кДж/моль • К	ΔG , кДж/моль
1	325	н-пентан = метан + бут-1-ен	77,24	126,68	1,48
2		н-пентан = метан + бут-2-ен	65,06	123,00	-8,49
3		н-пентан = этан + пропилен	83,39	133,49	3,56
4		н-пентан = пропан + этилен	95,96	127,69	19,60
5	375	н-пентан = метан + бут-1-ен	76,91	120,38	-1,10
6		н-пентан = метан + бут-2-ен	64,80	116,07	-10,41
7		н-пентан = этан + пропилен	82,99	126,99	0,70
8		н-пентан = пропан + этилен	95,53	126,97	13,26
9	425	н-пентан = метан + бут-1-ен	76,51	125,57	-11,13
10		н-пентан = метан + бут-2-ен	64,33	121,87	-20,74
11		н-пентан = этан + пропилен	82,51	132,14	-9,73
12		н-пентан = пропан + этилен	95,08	126,33	6,90

Таблица 2. Термодинамические характеристики некоторых реакций крекинга н-гексана

№	Температура, °C	Реакция	ΔH , кДж/моль	ΔS , кДж/моль • К	ΔG , кДж/моль
1	325	н-гексан = метан + пент-1-ен	77,00	125,31	2,07
2		н-гексан = метан + пент-2-ен	65,93	128,31	-10,80
3		н-гексан = этан + бут-1-ен	84,34	133,25	4,65
4		н-гексан = этан + бут-2-ен	72,16	129,57	-5,32
5		н-гексан = пропан + пропилен	83,20	140,90	-1,05
6		н-гексан = бутан + этилен	95,93	126,90	20,05
7	375	н-гексан = метан + пент-1-ен	76,67	124,77	-4,18
8		н-гексан = метан + пент-2-ен	76,67	124,77	-4,18
9		н-гексан = этан + бут-1-ен	83,92	132,58	-1,99
10		н-гексан = этан + бут-2-ен	71,77	134,52	-15,40
11		н-гексан = пропан + пропилен	82,78	140,22	-8,09
12		н-гексан = бутан + этилен	95,52	126,23	13,72
13	425	н-гексан = метан + пент-1-ен	76,27	124,21	-10,43
14		н-гексан = метан + пент-2-ен	65,18	127,16	-23,57
15		н-гексан = этан + бут-1-ен	83,45	131,88	-8,60
16		н-гексан = этан + бут-2-ен	71,26	128,18	-18,21
17		н-гексан = пропан + пропилен	82,30	139,51	-15,07
18		н-гексан = бутан + этилен	95,05	125,54	7,43

крекинга н-парафинов, входящих в состав СГК при различных температурах.

В качестве объекта исследования в работе выбран образец СГК, отобранный с одного из месторождений Западной Сибири. По данным хроматографического анализа в его составе преобладают н-пентан – 16,54 % мас., н-гексан – 11,97 % мас. и н-гептан – 5,17 % мас.

С использованием программного пакета Gaussian (GaussianView 3.0) [1], методом квантово-химических расчетов были рассчитаны

термодинамические характеристики веществ и реакций их образования.

Список некоторых реакций и полученные термодинамические характеристики представлены в таблицах 1, 2.

Проанализировав полученные результаты, можно констатировать, что вероятность протекания реакций крекинга парафиновых углеводородов, приводящих к образованию газообразных продуктов C_2 – C_4 , невелика. Это связано с тем, что при сравнительно низкой температуре

325 °С н-пентан и н-гексан в основном подвергаются изомеризации.

Повышение температуры реакции приводит к увеличению скорости протекания реакций крекинга, в результате чего происходит снижения содержания изомеров н-пентана и н-гексана в бензиновой фракции.

Результаты, представленные в таблицах 1, 2 показывают, что при низкотемпературном кре-

кинге нормальных парафинов этилен не образуется. Это объясняется тем, что при относительно низких температурах радикалы с неспаренным электроном при первичном атоме углерода ($R-CH_2$) в меньшей степени подвержены β -распаду [2].

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации №МК-351.2020.3.

Список литературы

1. Ochterski J.W. *Thermochemistry in Gaussian*. Gaussian, Inc., 2000.– 19 с.
2. Ахметов С.А. *Технология глубокой переработки нефти и газа: Учебное пособие для вузов.*– Уфа: Гилем, 2002.– 672 с.

ОБЛАГОРАЖИВАНИЕ НА ЦЕОЛИТЕ – ЭФФЕКТИВНЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ НИЗКОЗАСТЫВАЮЩИХ ДИЗЕЛЬНЫХ ТОПЛИВ

Е.И. Мартянова, И.А. Богданов
Научный руководитель – аспирант И.А. Богданов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, martyanova.1999@yandex.ru

Не смотря на увеличение объемов производства дизельного топлива в 2018 году до 77,5 млн. тонн (прирост на 0,6 млн. тонн по сравнению с 2017 годом), доля арктической марки дизельного топлива в структуре производства не превышает 5 % [1].

На сегодняшний день самым распространенным методом улучшения низкотемпературных свойств топлива является использование депрессорных присадок, но данный способ не является универсальным, так как эффективность действия присадки зависит от состава топлива. Альтернативным методом является процесс каталитической депарафинизации. Однако необходимость использования в данном процессе катализатора, содержащего благородные металлы и водородосодержащего газа, ограничивает внедрение процесса на малотоннажных нефтеперерабатывающих предприятиях. Поэтому перспективным видится разработка процессов облагораживания дизельных фракций на цеолитных катализаторах, без использования водородосодержащего газа.

Авторами работы на лабораторной каталитической установке с использованием цеолитного катализатора марки КН-30 проведен процесс облагораживания прямогонной дизельной фракции. Процесс проводился при следующих

технологических параметрах: температура процесса – 375 °С, давление – 0,35 МПа, расход сырья – 0,5 мл/мин.

Целью работы является исследование группового углеводородного состава, низкотемпературных и физико-химических свойств исходной прямогонной дизельной фракции и продукта, полученного в ходе облагораживания на цеолитном катализаторе.

Для определения группового состава был использован анилиновый метод. Результаты определения характеристик прямогонной дизельной фракции и продукта представлены в Таблице. Характеристики полученного продукта сравнили с требованиями стандарта [2].

Из полученных результатов очевидно благоприятное влияние реализованного облагораживания на цеолитном катализаторе на низкотемпературные свойства исходной дизельной фракции. Изменение предельной температуры фильтруемости (ПТФ) составило 46 °С. Это связано с тем, что содержание парафиновых углеводородов в образце уменьшилось примерно в два раза.

Помимо существенно улучшенных низкотемпературных свойств, значения которых после облагораживания позволяют отнести полученный продукт к арктической марке дизельного