

число суррогатных топлив, разработано правило смешения, позволяющие выполнить точный прогноз детонационной стойкости. Выполнена проверка полученных закономерностей для образцов реального топлива на примере прямогонных бензиновых фракций и бензиновых фрак-

ций вторичных процессов. Предложен подход к расчету октановых чисел моторных топлив с добавками, что дает возможность вести поиск новых компонентов, получать оптимальные рецептуры на ограниченном наборе экспериментальных данных.

### Список литературы

1. Knopa V., Loosb M., Pera C., Jeuland N. A linear-by-mole blending rule for octane numbers of *n*-heptane/iso-octane/toluene mixtures. *Fuel*, 2014. – 115: 666–673.

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕАКЦИЙ ПРОЦЕССА ГИДРООЧИСТКИ ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ

Е.Р. Самойлов<sup>1</sup>, А.Д. Афанасьева<sup>1</sup>, Т.А. Калиев<sup>1,2</sup>

Научный руководитель – д.т.н., профессор Е.Н. Ивашкина<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30

<sup>2</sup>ТОО «Павлодарский нефтехимический завод»  
Казахстан, г. Павлодар, vafand@mail.ru

Каталитический крекинг – важнейший процесс нефтепереработки, в ходе которого получают различные продукты, например, топливные фракции. Но для того, чтобы получаемая продукция соответствовала стандартам качества, необходима очистка сырья каталитического крекинга. Эту задачу решает процесс гидроочистки, в ходе которого уменьшается содержание в сырье гетеросоединений, а также металлорганических соединений.

Одной из важных задач химико-технологического производства является оптимальная эксплуатация процессов и катализаторов. И решением являются математические модели, для создания которых, в первую очередь, проводятся исследования, направленные на установление кинетических и термодинамических закономерностей протекающих химических реакций.

Целью данной работы является установление термодинамических закономерностей процесса гидроочистки вакуумного газойля на основе расчета основных параметров реакций с участием углеводородов ряда  $C_{28}$  и  $C_{40}$ , содержащих гетероатомы.

Для достижения поставленной цели необходимо проанализировать химизм процесса гидропереработки и установить физико-химические закономерности химических реакций гидроочистки.

В результате анализа литературных данных выяснилось, что основную массу серо- и азотсодержащих соединений вакуумного газойля представляют бензотиофен, дибензотиофен, пиридин, хинолин и акридин. Именно для этих соединений был проведен расчет термодинамических параметров, с помощью которых можно судить о возможности протекания химических реакций в условиях проведения промышленного процесса гидроочистки.

Расчет термодинамических параметров проводился в программе Gaussian, которая реализует метод DFT – Density Functional Theory [2]. Результаты расчета приведены ниже.

Энергии Гиббса реакции гидрирования пиридина до соответствующего алкана состава  $C_{28}$  составляет  $-131,77$  кДж/моль, а для  $C_{40}$  –  $-132,75$  кДж/моль. Гидрирование хинолина происходит с получением этилбензола с энергией Гиббса у  $C_{28}$  составляет  $-73,07$  кДж/моль, у  $C_{40}$  –  $-76,52$  кДж/моль. Восстановление акридина водородом до дифенила состава  $C_{28}$  с энергией Гиббса  $-53,32$  кДж/моль, а состава  $C_{40}$  с энергией Гиббса  $-63,65$  кДж/моль.

Энергии Гиббса реакции гидрирования бензотиофенов до соответствующих R-бензолов для состава  $C_{28}$  составляет  $-109,34$  кДж/моль и для  $C_{40}$  –  $-112,56$  кДж/моль. Гидрирование дибензотиофенов происходит до соответству-

ющих дифенилов с энергией Гиббса для состава  $C_{28}$  – 46,25 кДж/моль, а для состава  $C_{40}$  – 43,15 кДж/моль.

По полученным данным изменения энергии Гиббса можно сделать вывод о снижении реакционной способности углеводородов с более сложной структурой. Полученная тенденция полностью коррелируется с литературным дан-

ными в отношении процесса гидроочистки вакуумного газойля [1, 3].

Таким образом, в рамках данной работы были определены группы гетеросоединений в высококипящих фракциях вакуумного газойля, которые были заложены в схему превращений процесса гидроочистки. Также была проведена оценка их реакционной способности с использованием квантово-химических методов.

### Список литературы

1. Анчита Х. Переработка тяжелых нефтей и нефтяных остатков. Гидрогенизационные процессы / Х. Анчита, Дж. Спейт. Под редакцией О.Ф. Глаголевой. – СПб.: ЦОП «Профессия», 2012. – 384 с.
2. Афанасьева Д.А. Термодинамический анализ реакций серосодержащих соединений в процессе гидроочистки вакуумного газойля / Д.А. Афанасьева, Н.И. Кривцова, Т.А. Калиев // Сборник материалов конференции Химия и химическая технология в XXI веке, 2020. – С. 343–344.
3. Новый справочник химика и технолога. Сырье и продукты промышленности органических и неорганических веществ. Ч.1. – СПб.: Изд во НПО «Профессионал», 2002. – 988 с.

## ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ НА СОСТАВ И СВОЙСТВО ШИРОКОЙ ФРАКЦИИ ПЕРВИЧНОЙ КАМЕННОУГОЛЬНОЙ СМОЛЫ

Р.С. Сейтжан, А. Түсіпхан, Н.Ж. Балпанова  
Научный руководитель – д.х.н., профессор М.И. Байкенов

Казахстанский университет имени Е.А. Букетова  
100028, Республика Казахстан, г. Караганда, raikhan.seitzhan@mail.ru

В настоящее время наблюдается тенденция по уменьшению запасов легкой нефти и все более востребованным становится месторождение тяжелых нефтей, первичной каменноугольной и каменноугольной смолы [1, 2]. Проблема заключается в том, что переработка тяжелых нефтей и каменноугольных смол связано с тем, что они характеризуются высоким содержанием асфальтосмолистых веществ, общими фенолами и высокими значениями вязкости, плотности и температуры застывания. Следует отметить, что возрос интерес к возможности использования кавитации, ультразвука для интенсификации процессов переработки, транспортировки тяжелых нефтей и каменноугольной смолы. Из литературных источников известно, что ультразвуковое поле реакции (сонохимические реакции) могут осуществляться только в водных растворах. Последние работы показали, что для неводных систем характерно увеличение скорости и повышение селективности сонохимических реакции [3].

Цель данной работы – исследование влияния ультразвуковой кавитационной обработки средней фракции 200–350 °С первичной каменноугольной смолы на изменение индивидуального химического состава.

В качестве объекта исследования была взята фракция 200–350 °С полученная с помощью фракционирования первичной каменноугольной смолы АО «Шубарколь комир».

Эксперименты по ультразвуковой кавитационной обработке фракции из первичной каменноугольной смолы (ПКС) проводили в ультразвуковом диспергаторе МЭФ-92, который позволяет проводить высокоинтенсивную обработку небольших объемов жидкостей в лабораторных условиях.

Ультразвуковую обработку фракции 200–350 °С проводили в течении 10 мин в присутствии каталитических добавок (микросфера, магнитная микросфера, немагнитная микросфера, CoO/микросфера, NiO/микросфера, хризотил с 5% NiO).

На рисунке 1 представлена диаграмма группового состава фракции с температурой кипения