

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ СОНОКАТАЛИТИЧЕСКОГО ОБЕССЕРИВАНИЯ ТЯЖЕЛОГО СЫРЬЯ

© Ж. К. Мылтыкбаева¹, Ж. К. Каирбеков¹, Кансейтова Д.К.¹,

Казахский национальный университет им. аль-Фараби
050012 г. Алматы, ул. Карасай батыра, 95а. Республика Казахстан

А. М. Гюльмалиев²

ФБГУ Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева РАН
119991 г. Москва, Ленинский просп., 29. Россия

1 Жаннур Каденовна Мылтыкбаева, ассоцир.проф, к.х.н, e-mail: jannur81@mail.ru

2 Жаксынтай Каирбекович Каирбеков, проф., докт. хим. наук, e-mail:
zh_kairbekov@mail.ru

3. Дария Курманалиевна Кансейтова, PhD докторант Зкурса КазНУ им аль-Фараби,
e-mail.d.kanseitova@gmail.com

4 Гюльмалиев Агаджан Мирза-оглы, докт. хим. наук, гл. науч. сотр., e-mail:
Gyulmaliev@ips.ac.ru

Методами химической термодинамики и квантовой химии исследована относительная термическая устойчивость серосодержащих соединений, моделирующих структурные фрагменты тяжелого сырья. Установлено, что тиофеновые структуры являются наиболее термостойкими. На примере молекулы дибензтиофена установлено, что удаление серы энергетически выгодно, после гидрирования одного бензольного кольца. Квантово химическим методом $ub3lyp/6-31g(d)$ исследована адсорбция тиофена на кластере Ni_2Al_3 никель -скелетного катализатора и показано, что молекула адсорбируется на атоме Ni. Энергия Гиббса реакции адсорбции составляет $\Delta G_p = -15.3$ ккал/моль. При этом геометрия кольца тиофена сильно меняется, что и может способствовать удалению серы.

Ключевые слова: Тяжелое сырье, удаление серы, химическая термодинамика, квантово-химические расчеты.

Вопросы удаления серы из продуктов переработки тяжелого сырья - угольного или нефтяного происхождения, является одним из важнейших, которые стоят перед исследователями. В составе угля сера находится в виде различных сернистых соединений: пиритной, сульфатной и органической. Как правило, превалирует пиритная сера [1]. В нефти общее содержание серы может достигать до 5-6 %мас. в виде свободной серы, сероводорода, а также в составе сернистых соединений и смолистых веществ. [2].

Содержание серы часто определяет пригодность сырья для практического использования. Сернистые соединения, вызывают коррозию оборудования, а также отрицательно воздействуют на экологию окружающей среды. Сера, содержащаяся в коксе, ухудшает его качество как металлургического топлива, поскольку в домене она переходит в чугун, придавая ему, хрупкость и понижая качество получаемой из него стали.

КОКС ХИМИЯ

99