

УДК 542.8 + 662.75

А. П. Карпинец, канд. хим. наук, М. В. Барбашова, канд. техн. наук

Автомобильно-дорожный институт

ГОУВПО «Донецкий национальный технический университет», г. Горловка

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ И ФИЗИЧЕСКИЕ
МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА
ВЫСОКООКТАНОВЫХ БЕНЗИНОВ ИЗ ПРОМЫШЛЕННЫХ
ОТХОДОВ СИНТЕЗА ПАВ**

С применением спектра современных физических и физико-химических методов исследования сформулированы теоретические основы, разработаны принципиальные схемы, аппаратное оформление процессов, а также выявлены оптимальные условия технологии производства бензинов Премиум Евро-95 и Супер Евро-98 (виды III) из промышленных отходов синтеза поверхностно-активного вещества сульфонола НП-3. Топлива производят на стадии алкилирования бензола α -алкенами C_{10} - C_{14} в присутствии $AlCl_3$, а отделяют от детергентной фракции в колоннах блока ректификации. Эксплуатационные, физико-химические и экологические свойства бензинов установлены с помощью квалификационных методов испытаний.

Ключевые слова: физико-химические методы исследования, алкилирование, нефть, технология производства высокооктановых бензинов, эксплуатационные свойства бензинов, физико-химические свойства бензинов, физические принципы создания электромобилей

Введение

В современных условиях в связи с динамичным развитием автомобильного транспорта (АТР) и его обширной инфраструктуры во всех странах мира, заметным уменьшением ресурсов сырой нефти и природного газа крупнейших разведанных месторождений, усилением техногенного воздействия на окружающую среду особую актуальность приобретают следующие проблемы: экономия нефтепродуктов, совершенствование схем нефтепереработки и нефтеорганического синтеза, производство моторных топлив и масел из нетрадиционных источников сырья, экологизация АТР, разработка и внедрение гибридных и полностью электрических транспортных средств [1]. В процессе разработки физико-химических основ инновационных ресурсосберегающих и экологически чистых технологий [2], а также физических принципов создания, конструирования и эксплуатации новой прогрессивной автомобильной техники [3] основной акцент делают на сочетании их определяющих характеристик: экологичность, экономичность и эффективность.

На установление оптимальных показателей нацелены современная стратегия развития высоких технологий [4], в том числе нанотехнологий [5], моделирование и синтез новых функциональных материалов с заранее заданным спектром физико-химических свойств [6], а также приоритеты инвестирования фундаментальных и прикладных исследований.

Известно [2], что более 90 % добываемой из недр Земли сырой нефти применяется для производства автомобильных топлив и масел, топлив для авиации, морских и речных судов, дорожно-строительных, подъемно-транспортных, сельскохозяйственных машин и других транспортно-технологических средств, а также комплексов на их основе. Кроме того, углеводороды нефти и природного газа являются хорошим сырьем для синтеза широко используемых на АТР и других видах транспорта полимеров, пластмасс, композитов, синтетических каучуков, резин, волокон, лакокрасочных материалов [1]. В итоге динамика потребления нефти, как наиболее востребованного природного энергетического ресурса, неуклонно растет. Отсюда неизменный интерес к проблемам происхождения нефти и газа, и в особенности возможной возобновляемости их запасов, которые определяют потенциальные ресурсы углеводородов на ближайшую и более отдаленную перспективу.

Анализ последних исследований и публикаций

Ключевые научные концепции происхождения нефти и природного газа

Характерно, что оценка потенциальных ресурсов основных природных ископаемых, нефти и газа, в значительной мере детерминируется научным подходом к проблеме нефтегазообразования. Длительное время теоретическое обоснование происхождения нефти и газа имело две противоположные и конкурирующие концепции: органическую (биогенную) и неорганическую (минеральную) [7]. В соответствии с доминирующей в современных условиях органической концепцией нефть и газ синтезировались в результате разложения растений и животных на дне водоемов в течение длительного геологического времени (10–60 млн лет). Жидкие углеводороды заполнили собой пустоты, под воздействием высоких температур, давлений и концентрации органических веществ (ОВ) сформировали месторождения. Нефть рассматривалась как невозобновляемый ресурс [8].

Неорганическая концепция утверждает, что нефть значительно моложе, что создавалась она в недрах подлитосферного пространства (мантии) Земли из существующего там набора неорганических соединений (карбонатов, CO_2 , карбидов металлов, других углеродсодержащих веществ) при температурах выше 1000°C и давлении в десятки килобар [7]. Нефть по трещинам глубинных разъемов поднималась, вероятно, дискретно на поверхность и скапливалась в ловушках пористых и трещиноватых пластов Земли, которые были загерметизированы с различных сторон (в основном сверху) непроницаемыми слоями глин [8]. Таким образом формировались залежи нефтяных месторождений – уникальных хранилищ энергии, образованной и накопленной природой в течение длительного периода времени.

Следует отметить, что обе концепции имели довольно авторитетный список создателей и сторонников, и с переменным успехом в течение XIX–XX столетий каждая из них претендовала на роль единственной, общепризнанной и бесспорной теории. Создатели органической (биогенной) концепции: М. В. Ломоносов, Н. Д. Зелинский, В. И. Вернадский, И. М. Губкин, Г. Гефер, К. Энглер, П. Смит и ряд других ученых. Неорганическую концепцию создали Д. И. Менделеев, А. Гумбольд, М. Бертло и другие исследователи [7].

В настоящее время обе концепции переживают кризис, обусловленный их неспособностью интерпретировать появившиеся в последние годы факты и явления, которые подтверждают возобновляемость запасов нефти и природного газа. Причем восполнение ресурсов ранее добытых полезных ископаемых происходит в процессе разработки месторождений за промежутки времени, сопоставимый с продолжительностью жизни человека. Отсюда следует однозначный вывод: в масштабах как отдельных стран, так и всего Земного шара при разумном хозяйствовании истощение углеводородного сырья человечеству не угрожает [8].

Физико-химические закономерности современной теории нефтегазообразования

Существенно подчеркнуть, что проблемы механизма и топографии происхождения нефти и газа, природы и источника их восполняемости, непрерывности процессов генезиса углеводородов и сокращение времени их генерации, несомненно, многогранные, очень сложные и актуальные не только для нефтегазовой геологии, но и для всей фундаментальной науки, инновационных технологий, перспектив развития общества, техносферной безопасности. Изучение термодинамических, кинетических закономерностей отдельных стадий и реакций процессов, а также физических и геологических явлений при нефтегазообразовании происходит с использованием новейших достижений теоретической и экспериментальной физики, химической, геологической науки, механохимии, целого комплекса современных физических и физико-химических методов исследования, включая моделирование, квантово-химические расчеты, анализ и обобщение информации, полученной на искусственных спутниках Земли. Кстати, одна из гипотез, а именно о космическом происхождении на нашей планете метановых морей, не подтвердилась [8].

Значительный вклад в теоретическое и практическое обоснование топографии нефтегазообразования, возобновляемости стратегических ресурсов нефти и природного газа внесли советские и российские ученые: академик Н. В. Черский, В. П. Царев, Б. А. Соколов, А. Н. Гусева, В. Н. Ларин, П. П. Тимофеев, А. В. Щербаков, В. А. Ильин, Э. М. Галимов, А. И. Агафонов, Р. А. Исмаилов, Р. Х. Муслимов и другие.

Самыми весомыми и, к сожалению, загадочно оставшимися малозамеченными являются открытия, сделанные коллективом советских ученых Якутского филиала СО АН СССР под руководством академика Н. В. Черского [9, 10]. В недрах Земли ими открыто существование необычного вида углеводородного ископаемого – гидратов твердого газа, по своему внешнему виду и физико-химическим свойствам напоминающим лед [9]. Элементарная ячейка гидрата представляет собой кристаллик, каркас которого образован шестью молекулами H_2O , а внутри этого каркаса находится одна молекула CH_4 в сильно сжатом состоянии. При этом 1 м^3 гидрата содержит в себе до 200 м^3 газа. Исследованиями установлено, что эти нетрадиционные источники нефти и газа находятся как в форме морских газогидратов практически под уровнем Мирового океана (90 % его территории), так и на суше, где газогидраты чаще всего располагаются в зонах вечной мерзлоты. На глубине 200–500 м от поверхности Земли находятся участки мощностью до 1000–1200 м. Термодинамические условия их формирования: температура до 295 К и давление до 250 атмосфер [9].

Итог другого открытия ученых во главе с академиком Н. В. Черским еще более значителен и актуален [9]. Теоретически и экспериментально обосновано образование нефти и газа как из органических, так и неорганических соединений при активном участии в синтезе углеводородов не только тепловой энергии в глубинных слоях Земли, но и что самое существенное – упругих волн сейсмических и тектонических процессов [10]. В результате удалось раскрыть одну из основных тайн глобального природного подземного реактора синтеза нефти и газа.

Теоретически обоснованную возможность образования свободных радикалов углеводородов из рассеянного ОВ на активной поверхности зерен горных пород подтвердили экспериментальными исследованиями и моделированием механизма активации [10]. В Институте горного дела Севера (Якутия) были поставлены близкие к природным эксперименты, в результате которых осадочные породы как минерального, так и органического происхождения подвергались воздействию упругих волн, аналогичных таковым сейсмотектонических процессов.

При облучении осадочных пород упругими волнами наблюдалось деформирование, смещение зерен породы относительно друг друга, упругое и пластичное изменение; в итоге деформация и трение зерен между собой вызывало эмиссию электронов [9]. Роль доноров электронов и ионов выполняли атомы и молекулы, активированные на поверхности зерен осадочных пород. Таким образом на поверхности зерен формировались активные центры с избыточной свободной энергией, которая вскоре использовалась в высокоэнергетических химических реакциях даже при температурах ниже 100°C . При этих температурах, в отсутствие облучения, реакции образования нефти происходить не могут, поскольку они термодинамически невозможны [8]. С увеличением температуры скорость нефтегазообразования значительно возрастала. В соответствии с закономерностями механохимии в ходе этих процессов механическая энергия преобразуется в химическую практически без потерь на тепло. В целом полагают [8], что вклад сейсмотектонической активности в глобальном энергобалансе Земли составляет примерно 50 %, т. е. столько же, сколько приходится на все внутренние тепловые процессы нашей планеты.

В результате сделанного открытия решается фундаментальная и глобальная проблема происхождения нефти и газа, изменяются научные представления о физико-химической природе исходных веществ и интермедиатов на их основе, специфике механизма и кинетики нефтегазообразования. Наряду с этим итог открытия ученых во главе с академиком

Н. В. Черским полностью подтверждает концепцию возобновляемости ресурсов нефти и природного газа, и позволяет прогнозировать запасы этих горючих ископаемых в тех глубинных слоях земной коры (5–8 км и более), которые ранее считались бесперспективными [8]. Самым убедительным подтверждением восполняемости ресурсов сырой нефти является более чем 120-летний опыт эксплуатации нефтяных скважин под Баку, пробуренных еще А. Нобелем.

В современных условиях весьма актуальна проблема изучения кристаллического фундамента (КФ) Земли, который помогает подпитывать из глубин месторождения осадочного чехла по скрытым трещинам и разрывам [11]. По мнению ведущих экспертов (Тако Кеннинг, Канада), миру еще предстоит открыть значительные запасы нефти и газа КФ, в особенности в Юго-Восточной Азии и Африке. Ранее залежи нефти и газа в КФ были открыты в основном случайно. Предполагалось, что плотный фундамент требует больших затрат на их исследования и освоение. Сегодня в мире есть несколько компаний, активно разрабатывающих КФ. Среди них SOCO International во Вьетнаме и Йемене, Hurricane Exploration в Великобритании [11] и другие.

Физические и электрохимические принципы создания гибридных автомобилей и электромобилей

Несмотря на научно-обоснованные и оптимистичные прогнозы ученых о том, что Земля сама обеспечивает нас нефтью (этим бесценным даром природы) и будет делать это и дальше [8, 11], актуальными и востребованными для АТР и общества по-прежнему остаются проблемы экономии углеводородов, поиска и использования нетрадиционных источников сырья, снижения эмиссии токсикантов с отработавшими газами (ОГ) ДВС, разработки физических основ конструирования и внедрения новых транспортно-технологических устройств и механизмов, в том числе с элементами альтернативной энергетики.

В 1994 г. А. Г. Северинский запатентовал в США устройство гибридного электрического двигателя, который при работе экономит до 50 % бензина [12]. В моторе с технологией «Hyperdrive» этого автора работает система из двух двигателей: электрического (электроэнергия генерируется аккумулятором и сразу же превращается в кинетическую, двигая автомобиль) и бензинового, которые включаются одновременно или по отдельности. Электромотор также может эксплуатироваться в качестве генератора, превращающего кинетическую энергию в электричество и подзаряжающего аккумулятор.

Данную систему, усовершенствованную и дополненную еще четырьмя разработками автора [12] применили в своих автомобилях компании Toyota (автомобиль Toyota Prius) и Ford. Специалисты немецких автомобилестроительных компаний Volkswagen и Porsche вскоре разработали и внедрили аналогичную [12] систему для выпускаемых автомобилей с гибридными двигателями. Сходный вариант реализовали южнокорейский концерн Hyundai в автомобилях Sonata и компания Kia в авто Optima.

В дальнейшем при модернизации и конструировании гибридных автомобилей и электромобилей были разработаны и внедрены следующие научно-технические и инновационные решения. В первую очередь, для повышения энергоемкости аккумуляторных батарей свинцовые источники постоянного электрического тока (ХИЭТ) были заменены перспективными литий-ионными, которые по своим физическим параметрам и комплексу электрохимических характеристик имеют существенные преимущества перед традиционными кислотными [13]. Более того, электромоторы превосходят ДВС практически по всем техническим показателям: имеют мало подвижных частей, хороший контроль скорости, быстрый разгон, автопуск, высокий момент пуска, у них нет проблем с балансировкой, и к тому же они гораздо дешевле и надежнее. Основной недостаток ДВС – он выдает достаточный крутящий момент только в узком диапазоне скоростей [3].

Вскоре были сконструированы и внедрены электромобили (компании Tesla, Nissan, BMW и др.), которые работают исключительно на электрической энергии и в отличие от гибридных транспортных средств существенно не загрязняют окружающую среду.

Оригинальное решение предложено и реализовано одним из лидеров в производстве электромобилей компанией Tesla [14]. Блок тяговой аккумуляторной батареи располагается в днище электромобиля, в результате чего Tesla Model S отличается очень низким центром тяжести и превосходной управляемостью. Одного заряда литий-ионной батареи Tesla с номинальным напряжением 400 В DC, емкостью 85 кВт·ч достаточно для преодоления расстояния 426 км (по американскому измерительному циклу FTP 75). При этом оснащенный батареей автомобиль разгоняется от 0 до 100 км/ч всего за 4,4 секунды. Каждый батарейный модуль состоит из 444 элементов – литий-ионных цилиндрических аккумуляторов 18650, производства компании Panasonic. Стоимость энергии, генерируемой ХИЭТ, составляет 150 долларов США за 1 кВт·ч энергоемкости, и поставлена задача довести ее до уровня 100 долл/кВт·ч.

Рекордный результат – батарея, эксплуатация которой обеспечивает пробег электромобиля 1 миллион миль без ее замены – вот основная идея недавно опубликованного патента Tesla [3]. Успех достигнут благодаря сотрудничеству инженеров компании с учеными, которые использовали новейшие достижения физики, теоретической и экспериментальной электрохимии при моделировании и оптимизации электрохимических систем: выбор материалов электродов, природы растворителей, состава электролитов, добавок специальных компонентов, которые значительно улучшают производительность и долговечность ХИЭТ. Команда канадского ученого Джеффа Дана (университет Далхаузи) активно сотрудничает с Илоном Маском и финансируется Tesla. Свою инновационную идею – новый тип батареи, состоящей как из долговечных литий-ионных, так и из энергетически плотных литий-металлических элементов, они недавно запатентовали и внедрились [15]. На практике это означает, что если обычный литий-ионный аккумулятор предлагает запас хода на 300 км, то гибридный увеличит его примерно до 400 км.

Перспективы применения водородно-кислородных топливных элементов в электромобилях

Инновационный подход к изучению и созданию экологически чистых транспортных средств предложили специалисты научно-исследовательских центров крупнейших автогигантов (Daimler AG, Volkswagen, BMW AG, Mazda Motor Corporation, Hyundai Motor Company, Toyota Motor Corporation и др.), которые разработали и внедрились в опытных образцах двигателя, работающие на водороде [5]. Концепт-кары с альтернативным топливом были неоднократно представлены на многих международных салонах и получили высокие оценки ведущих экспертов. Однако даже руководство этих концернов признает, что автомобили с (H₂-O₂)-топливными элементами будут очень дорогими, и нет уверенности в их коммерческом успехе. Проблема в том, что обязательным элементом нынешних батарей является платина, а многолетние эксперименты по использованию других металлов и сплавов не приносили желаемых результатов.

В 2013 г. небольшая британская инжиниринговая компания химического машиностроения ACAL Energy Ltd. заявила об изобретении, которое без преувеличения может произвести революцию в мировой автомобилестроительной промышленности [16]. В разработанной ею технологии FlowCath[®] обычный Pt-катализатор для топливных элементов (инициирует реакцию H₂ с O₂ с образованием H₂O) был заменен жидким, который к тому же служит охлаждающей жидкостью. Этот инновационный подход значительно снижает стоимость системы, ее вес и повышает долговечность ХИЭТ. По утверждению компании, ее двигатель был протестирован на 10 000 часов работы, что эквивалентно примерно 300 000 миль езды с минимальным ухудшением качества.

Впоследствии компания ACAL Energy внедрила свой фирменный дизайн, дополнительно снизила вес и стоимость ХИЭТ, обеспечила конкурентоспособную трансмиссию с выходной мощностью 100 кВт, что эквивалентно 2-литровому дизельному двигателю. На одной водородной заправке автомобиль сможет проехать более 500 миль (804,5 км), а сама заправка занимает не более 5 минут. Уникальная комбинация жидкого катализатора (раствор солей металлов) и дизайна впервые обеспечивает конкурентоспособность топливного элемента в качестве экологически чистого источника энергии.

Многие крупнейшие мировые автопроизводители, включая Hyundai, Toyota, Honda, которые участвовали в тестировании ХИЭТ, объявили о приобретении лицензии ACAL Energy и планах производства электромобилей в ближайшее годы [16].

Другое инновационное решение, имеющее исключительное значение для теории и практики автомобилестроения (создание двигателей с рабочим процессом, позволяющим применять топлива ненефтяного происхождения), химмотологии и экологии, и потенциальные возможности которого уже раскрыты и реализованы в автомобилях на биотопливе, состоит в разработке и внедрении процесса Duothermic [17]. В нем ДВС работает на растительном масле, полученном из рапса – возобновляемого природного сырья.

Основанная Л. Элсбетом одноименная компания Elsbett AG в течение многих лет использует нерафинированные растительные масла в качестве биодизеля [17]. Их преимущества следующие: полная замена углеводородов нефти, растительное масло служит не только топливом, но и антифризом, в ОГ двигателя нет SO_2 , а каждый новый стандарт Евро снижает концентрацию этого токсиканта на целый порядок.

Специалисты компании Elsbett AG постоянно модернизируют свою технологию; в одной из последних оригинальных разработок, дуотермической системе сгорания, воплощены следующие инженерные решения: расположение сферической камеры сгорания в самом поршне двигателя, защита от потерь полезной энергии вне камеры сгорания, исключение нежелательных отложений на стенках камеры, существенное снижение уровня шума ДВС [17].

Постановка проблемы

В современных условиях структура автомобильного парка и спектр моделей и конструкций транспортно-технологических средств и механизмов неоднороден и многообразен как по типу применяемых ДВС, так и по природе используемых топлив.

В ФРГ и других странах Евросоюза предпочтение отдают биотопливу, полученному из рапсового масла, с показателями качества, которые отвечают стандартам DIN 51606 и EN 1424 [18].

Свыше 70 % автомобилей Бразилии эксплуатируется на этиловом спирте, синтезированном из сахарного тростника. Экологические преимущества этанола: это возобновляющийся альтернативный энергоноситель, он легче, чем бензин подвергается биодegradации, растворению до безопасных концентраций.

В США на протяжении 25 лет применяется топливо E10 («gasohol»), содержащее 10 % этанола и 90 % бензина [18]. Такая же бинарная смесь широко используется в Дании, Таиланде и других странах. Появление топлива E85 (85 % этанола + 15 % бензина) привело к созданию (компания Chrysler, а затем и другие фирмы) нового типа автомобилей – «Автомобили на гибком топливе» (Flexible Fuel Vehicle, FFV), которые могут работать на смесевом горючем любого состава. На двигателе FFV установлен сенсор, определяющий количество спирта в бензобаке. Эта информация поступает в бортовой компьютер, который регулирует режим работы ДВС.

Наряду с этанолом в автомобильные бензины вводят небольшие добавки метилового спирта, а также метилтретбутилового эфира – как с целью экономии углеводородного топлива, так и для повышения октанового числа (ОЧ) горючих смесей и снижения концентрации вредных ингредиентов в ОГ ДВС [18].

В [18, 19] сформулированы основные требования к составу, строению, качеству физико-химических и эксплуатационных свойств нетрадиционных видов топлив. Большинству из них соответствуют промышленные отходы предприятий нефтеорганического синтеза, нефтехимической и химической отрасли. Высокой устойчивостью к детонации и другими ценными качествами обладают: отходы производства метанола, которые ежегодно накапливаются в количестве 2 % от выпуска спирта, отходы синтеза гидролизного спирта, легкая эфирная фракция, кубовый остаток в производстве *n*-бутанола и его изомеров (2-метил-1-пропанола и 2-метил-2-пропанола), эфиро-альдегидный концентрат, изобутиловое масло, метилалькарбинольная фракция, отходы адсорбентов при получении мономеров синтетического каучука. Указанные отходы крупнотоннажных производств, как правило, не требуют технологической переработки. Эти соединения вводят в виде добавок в автомобильные бензины для увеличения их ОЧ; в отдельных случаях при достижении комплекса необходимых показателей получают топлива более высокого качества и соответствующей марки [18]. В итоге концепция рационального применения уже имеющихся производственных ресурсов представляется актуальной, инновационной и эффективной, поскольку не требует привлечения больших инвестиций в разработку и внедрение экологически чистых и ресурсосберегающих технологий.

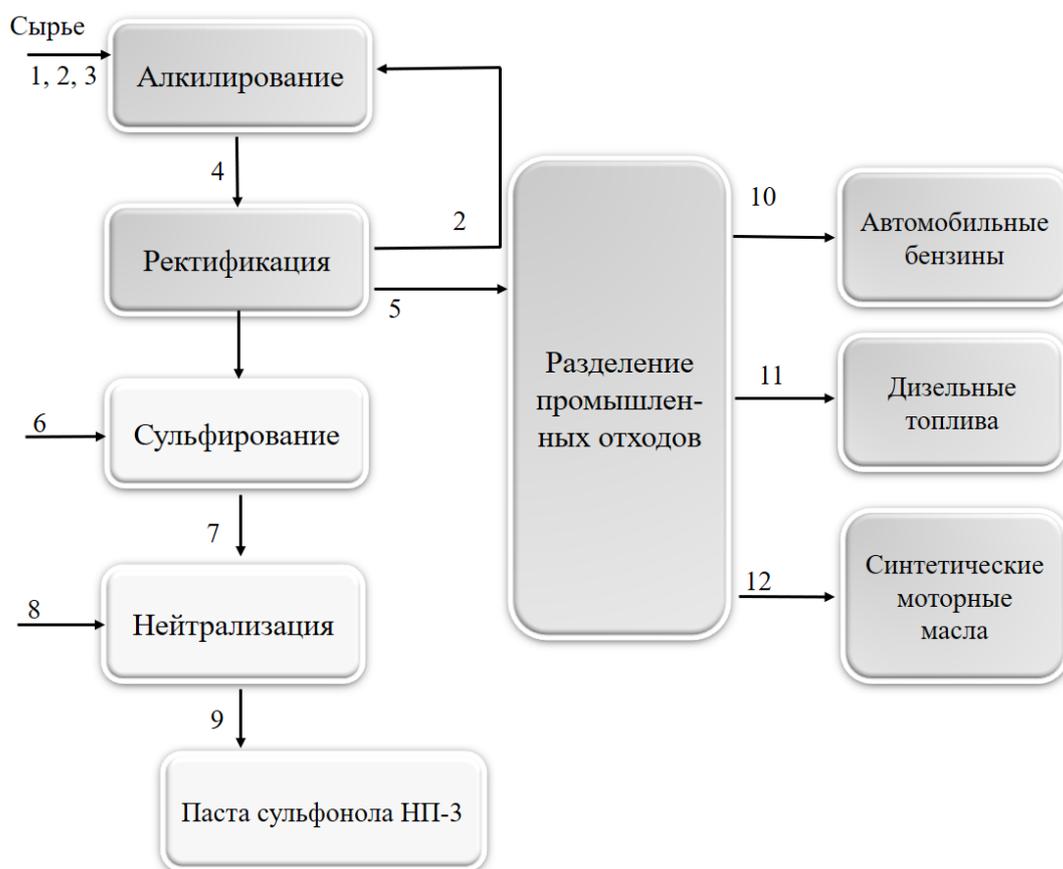
Одним из таких потенциальных и до сих пор маловостребованных ресурсов являются промышленные отходы многотоннажных производств ПАВ, среди которых наиболее эффективен по своим детергентным свойствам, термической стабильности, способности к биоразлагаемости сульфонол НП-3 [20]. Вместе с тем процесс его производства, как и других ПАВ [21], осложняется образованием большого количества углеводородов различного химического состава, физико-химических свойств, строения, реакционности, которые до настоящего времени не находили квалифицированного использования.

Это обусловлено, во-первых, сложностью всего технологического процесса синтеза ПАВ, в частности ключевой стадии алкилирования бензола α -алкенами C_{10} - C_{14} (катализатор $AlCl_3$), при которой наряду с целевой реакцией осуществляется несколько побочных [21], и, во-вторых, недостаточной изученностью строения, реакционной способности и в особенности физико-химических, эксплуатационных и экологических свойств образующихся органических веществ.

Цель данного исследования – установление физико-химических закономерностей, разработка принципиальных схем, аппаратного оформления процессов ресурсосберегающей технологии производства высокооктановых бензинов из отходов синтеза ПАВ сульфонола НП-3, а также изучение эксплуатационных и экологических свойств полученных топлив с применением комплекса современных физических, физико-химических методов исследования и квалификационных испытаний.

Аппаратура физико-химических методов исследования, техника экспериментов и экомониторинга

Химико-технологический процесс синтеза поверхностно-активного вещества (ПАВ) сульфонола НП-3 и рационального использования его промышленных отходов, реализованный на производственных мощностях Горловского химического завода (ГХЗ), включает последовательные физико-химические стадии алкилирования, ректификации, сульфирования, нейтрализации, а также разделения отходов (рисунки 1).



1 – α -алкены C_{10} - C_{14} ; 2 – C_6H_6 ; 3 – комплекс $AlCl_3$; 4 – алкиларены;
 5 – промышленные отходы синтеза ПАВ; 6 – SO_3 ; 7 – алкилбензолсульфоокислоты; 8 – $NaOH$;
 9 – алкилбензолсульфонаты натрия (сульфонол НП-3); 10 – бензины;
 11 – дизельные топлива; 12 – моторные масла

Рисунок 1 – Принципиальные схемы физико-химических процессов производства сульфонола НП-3, автомобильных топлив и масел

При выявлении оптимальных условий проведения отдельных стадий применяли термодинамические расчеты, моделирование кинетических уравнений протекающих реакций, квантово-химическую оценку реакционности исходных веществ и интермедиатов на их основе, информацию о строении и физико-химических свойствах целевых и побочных продуктов.

В итоге алкилирование осуществляют в течение 50 мин при температуре $50\text{ }^\circ\text{C}$, атмосферном давлении и мольном соотношении бензол- α -алкены C_{10} - C_{14} 7:1. Избыток концентрации бензола обусловлен тремя функциями, которые выполняет в процессе этот арен: как субстрат реакции алкилирования, компонент хлоридалюминиевого каталитического комплекса, растворитель системы. Установленный на масс-спектрометре МАТ (об. %) углеводородный состав α -олефинов: C_{10} – 16,4; C_{11} – 28,0; C_{12} – 30,0; C_{13} – 19,8; C_{14} – 5,8. В отделении ректификации целевой продукт для производства ПАВ сульфонола НП-3 – детергентную фракцию алкилата с $t_{\text{кип}} = 280\text{--}340\text{ }^\circ\text{C}$ отделяют от бензола и побочных веществ, а затем направляют в сульфуратор. Сульфорирующим реагентом служит триоксид серы (SO_3). Полученные алкилбензолсульфоокислоты нейтрализуют раствором гидроксида натрия, а сульфонол НП-3 выделяют в виде водной пасты 45 %-ной концентрации.

Легкую фракцию углеводородов ($t_{\text{кип}} = 65\text{--}190\text{ }^\circ\text{C}$), образовавшуюся на стадии алкилирования в результате побочных реакций, выделяют из широкой фракции углеводородов ($t_{\text{кип}} = 65\text{--}340\text{ }^\circ\text{C}$) в ректификационной колонне (РК), имеющей 20 РК тарелок и четыре теплообменных. Режим работы РК: остаточное давление 3,60 кПа (верх) и 10,13 кПа (низ), температура

жидкости на глухой тарелке и низа колонны соответственно 126 °С и 230 °С. Другую часть легкокипящей фракции углеводородов ($t_{\text{кип}} = 80\text{--}190$ °С) получают при разложении отработанного хлоридалюминиевого комплекса. Процесс ведут в колонне периодического действия, которая состоит из двух частей: нижняя (куб) и верхняя, которая снабжена тремя слоями насадок из колец Рашига. Указанные компоненты легких фракций смешивают в соотношениях 7:1 (для достижения ОЧ = 95), и 6,9:1,1 (ОЧ = 98).

Изучение физико-химических, эксплуатационных и экологических свойств легкой компаундированной фракции алкилата ($t_{\text{кип}} = 65\text{--}190$ °С) проводили, применяя квалификационные методы испытаний автомобильных бензинов [22] и комплекс современных физических методов исследования [23]. Октановое число этой фракции по исследовательскому методу оценивали на установке УИТ-65, а по моторному методу – на УИТ-85. Устойчивость топлива к окислению устанавливали по величине индукционного периода. Фракционный состав и давление насыщенных паров определяли по стандартным методикам [18]. Концентрацию смол, промытых растворителем, оценивали на приборе ПОС-77. Идентификацию и количественное определение бензола в испытуемой фракции осуществляли регистрацией его спектра в ИК-области (прибор Specord 75-IR), а также газохроматографически (CHROM-4). Аналитические сигналы аренов и олефинов сканировали на приборах Specord UV-Vis и СФ-46; оценку концентрации этих типов углеводородов в топливе проводили с использованием флуоресцентных индикаторов.

Отметим, что прецизионность результатов измерений контролируемых параметров установлена стандартами на соответствующие анализы и методы испытаний. Эти результаты затем использовались при метрологической и статистической обработке теоретических и экспериментальных данных с применением алгоритмов и программ, приведенных в [24].

Экомониторинг эмиссии токсичных ингредиентов с ОГ бензиновых двигателей проводили по описанной ранее методике [19]. В частности, концентрацию оксида углерода (СО), оксидов азота (NO_x) и углеводородов C_nH_m определяли на газоанализаторе Bosch ЕТТ согласно европейскому испытательному циклу. Содержание SO_2 устанавливали на газоанализаторе УГ-2, а сажи – сажемером AVL 409. Концентрацию формальдегида оценивали методом вольтамперометрии на потенциостате П-5827 М. Содержание 3,4-бенз(а)пирена в конденсате выхлопных газов ДВС определяли методом спектрально-флуоресцентного анализа при длинах волн с максимумами при 403 нм и 408,5 нм.

Результаты исследований и их обсуждение

В нашей предыдущей работе [19] с применением комплекса современных физических: ЯМР (^1H и ^{13}C), ЭПР-, масс-спектрометрия, спектральных (ИК-, УФ-спектрофотометрия, флуоресценция); электрохимических: вольтамперометрия (ВА) на стационарном, вращающемся дисковом электроде с кольцом, циклическая ВА, полярография и других физико-химических методов исследования (квантово-химические расчеты, хроматография) изучены топография и основные кинетические закономерности реакции алкилирования бензола α -алкенами $\text{C}_{10}\text{--}\text{C}_{14}$ в присутствии AlCl_3 . При этом установлен сложный многомаршрутный механизм процесса, который включает несколько реакций: непосредственно алкилирование, диспропорционирование, изомеризацию, переалкилирование, полимеризацию. Кинетика как целевых, так и побочных реакций определяется сочетанием многих факторов: электронное строение субстрата и инициатора, природа растворителя, активность реагентов, их концентрация, условия осуществления процесса. Именно этими обстоятельствами обусловлено образование наряду с целевой детергентной ($t_{\text{кип}} = 280\text{--}340$ °С) фракцией алкилата синтеза сулфонола НП-3 побочных фракций: средней, легкой и тяжелой (рисунок 1). При этом средняя фракция ($t_{\text{кип}} = 170\text{--}280$ °С) по своим физико-химическим и эксплуатационным показателям качества полностью отвечает таковым для дизельного топлива марки ДТ-3-минус 35 К 2 [19].

В таблице 1 приведены установленные с помощью квалификационных испытаний и физико-химических методов исследования, основные показатели качества легкой фракции $t_{\text{кип}} = 65\text{--}190\text{ }^{\circ}\text{C}$ алкилата производства ПАВ.

Из представленных в таблице 1 результатов следует, что искомая легкая фракция алкилата по комплексу физико-химических и эксплуатационных характеристик полностью отвечает требованиям ГОСТ Р 51866-2002 [22] (что соответствует европейской нормали EN 228-2004) и рекомендуется к использованию в качестве автомобильного бензина марки Премиум Евро-95 класса А (летний вид).

Таблица 1 – Физико-химические и эксплуатационные показатели качества автомобильного бензина, полученного из промышленных отходов синтеза ПАВ сульфонола НП-3

Показатель	Значение	Величина для бензина Премиум Евро-95 [22]
1. Октановое число, не менее:		
– по исследовательскому методу	96,0	95,0
– по моторному методу	86,0	85,0
2. Давление насыщенных паров, кПа, для бензина класса А	48,0	45,0-60,0
3. Фракционный состав: объемная доля испарившегося бензина %, при температуре:		
– 70 °С (И70)	38,0	20,0-48,0
– 100 °С (И100)	58,0	46,0-71,0
– 150 °С (И150), не менее	78,0	75,0
– конец кипения °С, не выше	190,0	210
– остаток в колбе, % (по объему), не более	0,4	2,0
4. Концентрация свинца, мг/дм ³ , не более	0	5
5. Плотность при 15 °С, кг/м ³	745	720-775
6. Концентрация серы, мг/кг, не более (вид III)	3	5
7. Устойчивость к окислению, мин, не менее	2900	1200
8. Концентрация смол, промытых растворителем, мг на 100 см ³ бензина, не более	0,5	5
9. Коррозия медной пластинки (3 ч при 50 °С), единицы по шкале	класс 1	класс 1
10. Внешний вид	прозрачный и чистый	прозрачный и чистый
11. Объемная доля углеводородов, %, не более:		
– олефинов	2,5	18,0
– ароматических (вид III)	32,2	35,0
12. Объемная доля бензола, %, не более	0,5	1,0

Углеводородный и фракционный составы топлива обеспечивают нормальное и полное сгорание рабочей смеси без возникновения детонации, хорошую приемистость ДВС, высокие энергетические свойства бензина: удельная низшая теплота сгорания равна 45145 кДж/кг. Очень высокий индукционный период топлива, незначительная концентрация неактивных соединений серы (стандартом она интерпретируется как их отсутствие) и небольшое содержание олефинов позволяют реализовать, наряду с эксплуатацией в ДВС с высокой степенью сжатия, также длительное (до 5 лет) хранение бензина. Именно по этой причине согласно технологическому регламенту в топливо не вводились, а следовательно, и не анализировались добавки оксигенатных соединений: метанола, этанола, изопропилового и изобутилового спиртов, третбутилового спирта, этилтретбутилового эфира и других кислородсодержащих веществ.

При введении небольших количеств легкокипящих веществ и газов (газовый бензин, изопентан, метилформиат, н-бутан) в полученный бензин класса А можно производить топливо класса В (летнее), а также зимних классов С и D.

Автомобильный бензин марки Супер Евро-98 выделяют из отработанной фракции алкилата синтеза сульфонола НП-3 и продукта разложения каталитического комплекса с ОЧ 98,0 (исследовательский метод) и ОЧ 88,0 (моторный метод) и основными показателями качества, указанными в таблице 1. В отличие от топлива с ОЧ 96,0 в искомом бензине концентрация аренов составляет 32,8 %, а бензола 0,6 %.

В таблице 2 представлены результаты экомониторинга эмиссии токсикантов с ОГ ДВС с применением синтезированных бензинов.

Таблица 2 – Концентрация (об. %) токсичных ингредиентов в ОГ ДВС, работающих на полученных автомобильных бензинах

Вещество	Значение для топлив марок:	
	Премиум Евро-95	Супер Евро-98
Оксид углерода, CO	0,70	0,71
Углеводороды, C _n H _m	0,040	0,042
Оксиды азота, NO _x	0,22	0,27
Диоксид серы, SO ₂	0,0026	0,0025
Сажа, г/м ³	0,010	0,015
Альдегиды R-CH = O, мг/л	0,003	0,004
3,4-бенз(α)пирен, мкг/м ³	0,82	0,91

При сравнении данных, приведенных в таблицах 1 и 2, прослеживается определенная корреляция углеводородного состава и физико-химических свойств полученных бензинов с экологической агрессивностью загрязнителей атмосферы в ОГ ДВС. Увеличение концентрации аренов в бензине с ОЧ 98,0 приводит к возрастанию содержания в ОГ оксидов азота, сажи, альдегидов и 3,4-бенз(α)пирена. Незначительная концентрация неактивных соединений серы обуславливает при сгорании бензинов обоих марок образование SO₂ в количестве 0,0025–0,0026 об. %. В целом экологическая эффективность применения полученных топлив соответствует таковой при использовании нефтяных автомобильных бензинов с улучшенными показателями качества [18].

В заключение важно отметить следующие аспекты физико-химических основ разработанной и внедренной на ГХЗ технологии. Выделение высокооктановых бензинов из отработанной фракции алкилата синтеза ПАВ осуществляется без нарушения режима основного технологического процесса, без снижения выхода и качества сульфонола НП-3. Этот фактор в сочетании с несложным аппаратным оформлением процессов ректификации и разложения отработанного комплекса инициатора, а также небольшими производственными затра-

тами (дополнительные инвестиции не привлекались) весьма существенны при разработке и внедрении физико-химических закономерностей ресурсосберегающих, экологически чистых технологий, решении проблем химмотологии и ноксологии.

Выводы и перспективы дальнейших исследований

1. Актуализирована и всесторонне обсуждена приоритетная для развития фундаментальной науки, прикладных исследований, мировой экономики и общества проблема происхождения нефти как основного энергетического сырья для производства автомобильных топлив и масел. Проведен сравнительный анализ ключевых научных концепций (органической и неорганической) нефтегазообразования.

2. Проанализированы новые научные представления (теории, концепции, подходы, гипотезы, версии) и сделан акцент на современной интерпретации (по Н. В. Черскому) физико-химических закономерностей механизма и кинетики нефтегазообразования, которая учитывает участие в синтезе углеводородов из свободных радикалов как тепловой энергии глубинных слоев Земли, так и упругих волн сейсмических и тектонических процессов.

3. Систематизированы и обсуждены физические принципы создания, физико-химические процессы и инновационные решения при конструировании и эксплуатации новой прогрессивной автомобильной техники: гибридных транспортных средств, электромобилей на основе литий-ионных аккумуляторов и других ХИЭТ, водородно-кислородных топливных элементов.

4. Обобщены современные тенденции развития, проблемы и перспективы применения нетрадиционных топлив на АТР. Установлено, что крупнотоннажные отходы производства различных ПАВ, в том числе сульфонола НП-3 до сих пор не находили квалифицированного использования вследствие неизученности их электронного строения, структуры, реакционной способности, физико-химических свойств.

5. С применением комплекса современных физических и физико-химических методов исследования разработаны теоретические основы, принципиальные схемы, аппаратное оформление процессов, а также выявлены оптимальные условия ресурсосберегающей технологии производства высокооктановых бензинов из отработанной фракции алкилата синтеза сульфонола НП-3. Кроме замены нефтяного сырья отходами производства ПАВ, в роли инициатора реакции алкилирования использован дешевый $AlCl_3$. В нефтепереработке производство топлив с высокой устойчивостью к детонации (каталитический риформинг) осуществляется с участием Pt инициатора.

6. Установленные с помощью квалификационных испытаний, а также всего спектра физико-химических методов анализа и экомониторинга эксплуатационно-технические и экологические показатели качества полученных топлив полностью соответствуют требованиям ГОСТ Р 51866-2002 (ЕН 228-2004) для бензинов марок Премиум Евро-95 и Супер Евро-98 (виды III).

В качестве перспектив дальнейших исследований по данной проблематике интересными представляются следующие:

– детальное изучение физико-химических и эксплуатационных свойств тяжелой фракции алкилата ($t_{кип} = 340-500$ °С), которую выделяют из кубового остатка синтеза сульфонола НП-3. Предварительными исследованиями установлено, что по своему углеводородному составу и строению, вязкостно-температурным параметрам, трибологическим и детергентно-диспергирующим свойствам эта фракция идентична синтетическим моторным маслам различного уровня вязкости (рисунок 1);

– для расширения сырьевых ресурсов производства высокооктановых бензинов целесообразно изучение промышленных отходов синтеза поверхностно-активных веществ на основе других эффективных алкилирующих реагентов бензола α -олефинов $C_{12}-C_{18}$ и алкенов с внутренней двойной связью. Кроме того, планируются изменение и оптимизация парамет-

ров стадии алкилирования для получения соединений с заранее заданным спектром физико-химических и функциональных свойств;

– для развития экомониторинга токсичных веществ в ОГ ДВС актуальными представляются разработки методик применения химически модифицированных электродов (сенсоры для идентификации и оценки концентраций CO, SO₂, NO, NO₂, H₂S, HCN и органических соединений), использование информативных электрохимических методов для решения сложных аналитических задач обнаружения различных альдегидов в их смесях с другими загрязнителями атмосферы, раздельное определение NO и NO₂ методами спектрофотометрии и флуоресценции.

Список литературы

1. Kent, J. A. Handbook of Industrial Chemistry and Biotechnology / J. A. Kent, S. D. Barnicki, T. V. Bommaraju. – Cham: Springer, 2017. – 2199 p. – ISBN 978-3-319-52285-2.
2. Леффлер, У. Л. Нефтехимия / У. Л. Леффлер, Д. Л. Бардик. – Москва : Олимп-Бизнес, 2017. – 227 с. – ISBN 978-5-9693-0310-2.
3. Миллион миль на одной батарее. Новый патент Tesla. – Текст : электронный // Наука и техника : [сайт]. – URL: <https://naukatehnika.com/million-mil-na-odnoj-bataree-novuj-patent-tesla.html> (дата обращения: 18.11.2020).
4. Batygin, Y. Electromagnetic Metal Forming for Advanced Processing Technologies / Y. Batygin, M. Barbashova, O. Sabokar. – Cham : Springer, 2018. – 93 p. – ISBN 978-3-319-74570-1.
5. Карпинец, А. П. Перспективы применения наноматериалов и нанотехнологий на автомобильном транспорте и в его инфраструктуре / А. П. Карпинец // Вести Автомобильно-дорожного института = Bulletin of the Automobile and Highway Institute». – 2017. – № 2(21). – С. 11–24.
6. Карпинец, А. П. Моделирование состава, микроструктуры и диэлектрических свойств сополимеров стирола и метилметакрилата в процессе их катодного синтеза / А. П. Карпинец // Новые функциональные материалы и высокие технологии : материалы VI Международной научной конференции : 17–21 сентября 2018 г., Тиват, Черногория. – Иваново : Институт химии растворов им. Г. А. Крестова РАН, 2018. – С. 132–134. – ISBN 978-5-905-364-14-3.
7. Рукин, М. Д. Гипотезы происхождения нефти / М. Д. Рукин, Н. А. Жарвин. – Текст : электронный // Академия тринитаризма. – 2015. – Т.1, № 77-65657. – С. 1–17. – URL: <https://istina.msu.ru/publications/article/10270090/>.
8. Агафонов, А. И. Теоретическое и практическое обоснование возобновляемости запасов нефти и природного газа. Анализ современного состояния проблем происхождения нефти и газа / А. И. Агафонов. – Текст : электронный // Бурение и нефть. – 2019. – № 1 – С. 22–29. – URL: <https://burneft.ru/archive/issues/2019-01/22>.
9. Черский, Н. В. К тайнам глобального реактора / Н. В. Черский // Наука и человечество: человек, Земля, микромир, вселенная, технический прогресс. – 1989. – С. 332–343.
10. Черский, Н. В. Влияние тектоно-сейсмических процессов на образование и накопление углеводородов / Н. В. Черский, В. П. Царев, Т. И. Сороко. – Новосибирск : Наука, 1985. – 224 с.
11. Земля сама обеспечивает нас нефтью. – Текст : электронный // ИА Девоп : [сайт]. – URL: https://iadevon.ru/news/recomendations/%C2%ABzemlya_sama_obespechivaet_nas_neftyu%C2%BB-9696/ (дата обращения: 18.11.2020).
12. Patent US5343970, United States. Hybrid electric vehicle : US07 / 947 691: appl. 21.09.1992 : publ. 06.09.1994 / Severinsky A. J. – 28 p.
13. Ярославцев, А. Б. Электродные наноматериалы для литий-ионных аккумуляторов / А. Б. Ярославцев, Т. А. Козлова, А. М. Скундин // Успехи химии. – 2015. – Т. 84, № 8. – С. 826–852.
14. Тяговые литий-ионные батареи Tesla, что внутри? – Текст : электронный // Триумф инжиниринг : [сайт]. – URL: <http://triumph.engineering/info/articles/tyagovye-litii-ionnye-batarei-tesla-chto-vnutri/> (дата обращения: 18.11.2020).
15. Tesla закупила оборудование для производства собственных аккумуляторов. – Текст : электронный // Хайтек + : [сайт]. – URL: <https://hightech.plus/2020/05/05/tesla-zakupila-oborudovanie-dlya-proizvodstva-sobstvennih-akkumulyatorov> (дата обращения: 18.11.2020).
16. Acal Energy Says its New Hydrogen Fuel Cell is Good for 300 000 Miles. – Текст : электронный // Autoblog : [сайт]. – URL: <https://www.autoblog.com/2013/07/02/acal-energy-says-new-hydrogen-fuel-cell-good-for-300000-miles/> (дата обращения: 02.10.2020).
17. ELSBETT Diesel Technology – Duothermic Combustion System. – Текст : электронный // Elsbett : [сайт]. – URL: <http://www.elsbett.com/gb/elsbett-diesel-technology/duothermic-combustion-system.html> (дата обращения: 02.10.2020).
18. Васильева, Л. С. Эксплуатационные материалы для подвижного состава автомобильного транспорта / Л. С. Васильева. – Москва : Наука, 2014. – 423 с.
19. Карпинец, А. П. Теоретические основы ресурсосберегающей технологии производства зимнего дизельного топлива из промышленных отходов синтеза поверхностно-активных веществ / А. П. Карпинец // Вести Автомобильно-дорожного института = Bulletin of the Automobile and Highway Institute». – 2018. – № 3(26). – С. 68–75.

20. Ланге, К. Р. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение / К. Р. Ланге ; под редакцией Л. П. Зайченко. – Санкт-Петербург : Профессия, 2007. – 240 с. – ISBN 5-93913-068-2.
21. Rase, H. F. Handbook of Commercial Catalysts. Heterogeneous Catalysts / H. F. Rase. – Boca Raton: CRS press Taylor & Francis Group, 2016. – 520 p. – ISBN 13:978-1-4822-7536-0.
22. ГОСТ Р 51866-2002 (ЕН 228-2004). Топлива моторные. Бензин неэтилированный. Технические условия (с изменениями № 1, 2, 3, 4) : государственный стандарт Российской Федерации : издание официальное : принят и введен в действие Постановлением Госстандарта России от 31 января 2002. № 42-ст : введен впервые : дата введения 2002-07-01 / разработан Техническим комитетом по стандартизации ТК 31 «Нефтяные топлива и смазочные материалы», ОАО «Лукойл». – Москва : Стандартинформ, 2009. – 29 с.
23. Otto, M. Analytische Chemie / M. Otto. – Weinheim: Wiley-VCH Verlag & Co. KgaA, 2011. – 694 p. – ISBN 978-3-527-32881-9.
24. Härdle, W. K. Applied Multivariate Statistical Analysis. 4th Edition / W. K. Härdle, L. Simer. – Cham: Springer, 2015 – 581 p. – ISBN 978-3-662-45171-7.

А. П. Карпицец, М. В. Барбашова
Автомобильно-дорожный институт

ГОУВПО «Донецкий национальный технический университет», г. Горловка
Физико-химические закономерности и физические методы исследования технологии
производства высокооктановых бензинов из промышленных отходов синтеза ПАВ

Обсуждены ключевые научные концепции (органическая и неорганическая) происхождения нефти и сделан акцент на современной теории (по Н. В. Черскому) физико-химических закономерностей механизма и кинетики нефтегазообразования, которая учитывает участие в синтезе углеводородов из свободных радикалов как тепловой энергии глубинных слоев Земли, так и упругих волн сейсмических и тектонических процессов.

Раскрыты современные тенденции, проблемы и перспективы экономики нефти и природного газа, поиска нетрадиционных источников энергии и сырья, в том числе промышленных отходов химических производств.

Обобщены физические принципы создания, физико-химические процессы и инновационные решения при конструировании и эксплуатации новой прогрессивной автомобильной техники: гибридных транспортных средств, электромобилей на основе литий-ионных аккумуляторов и других ХИЭТ, водородно-кислородных топливных элементов.

С применением комплекса современных физических ЯМР: (¹H, ¹³C), ЭПР-, масс-спектрометрия; спектральных: ИК-, УФ-спектрофотометрия, флуоресценция; электрохимических: вольтамперометрия (ВА) на стационарном, вращающемся дисковом электроде с кольцом, циклическая ВА, полярография; других физико-химических методов исследования (квантово-химические расчеты, хроматография) сформулированы теоретические основы, разработаны принципиальные схемы, аппаратное оформление процессов, а также выявлены оптимальные условия технологии производства высокооктановых бензинов из промышленных отходов синтеза ПАВ сульфанола НП-3. Топлива производят на стадии алкилирования бензола α -алкенами C₁₀-C₁₄ в присутствии AlCl₃, а отделяют от детергентной фракции в колоннах блока ректификации.

Установленные с помощью квалификационных испытаний, а также всего спектра физико-химических методов анализа и экомониторинга эксплуатационно-технические и экологические показатели качества полученных по ресурсосберегающей технологии топлив полностью соответствуют требованиям ГОСТ Р 51866-2002 (ЕН 228-2004) для бензинов марок Премиум Евро-95 и Супер Евро-98 (виды III).

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ, АЛКИЛИРОВАНИЕ, НЕФТЬ, ТЕХНОЛОГИЯ ПРОИЗВОДСТВА ВЫСОКООКТАНОВЫХ БЕНЗИНОВ, ЭКСПЛУАТАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА БЕНЗИНОВ, ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БЕНЗИНОВ, ФИЗИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ СОЗДАНИЯ ЭЛЕКТРОМОБИЛЕЙ

A. P. Karpinets, M. V. Barbashova
Automobile and Road Institute of Donetsk National Technical University, Gorlovka
Physicochemical Laws and Physical Methods of the Technology Research for the High-octane
Gasoline Production from the Industrial Wastes of the Surfactant Synthesis

The key scientific concepts (organic and inorganic) of the oil origin are discussed. The emphasis is placed on the modern theory (according to N.V. Cherskiy) of the physicochemical laws of the mechanism and kinetics of the oil and gas formation, which takes into account the participation of the hydrocarbons from the free radicals of as the thermal energy of the deep layers of the Earth, and the elastic waves of seismic and tectonic processes in the synthesis.

The article reveals modern trends, problems and prospects for saving oil and natural gas, searching for unconventional sources of energy and raw materials, including the industrial wastes from chemical industries.

The physical principles of creation, the physicochemical processes and innovative solutions for the design and operation of new progressive automotive equipment such as hybrid vehicles, electric vehicles based on the lithium-ion batteries, hydrogen-oxygen fuel cells are generalized.

Using a complex of modern physical NMR: (^1H , ^{13}C), EPR-, mass spectrometry; spectral: IR-, UV-spectrophotometry, fluorescence; electrochemical: voltammetry (VA) on the stationary rotating disk electrode with a ring, cyclic VA, polarography; other physicochemical research methods (quantum-chemical calculations, chromatography) theoretical foundations are formulated, the schematic diagrams, the instrumentation of the processes are developed, and the optimal conditions for the technology for the high-octane gasoline production from the industrial wastes of the synthesis of the surfactant sulphonol NP-3 are identified. Fuels are produced at the stage of the benzene alkylation with the $\text{C}_{10}\text{-C}_{14}$ α -alkenes in the presence of AlCl_3 , and separated from the detergent fraction in the columns of the rectification unit.

The operational, technical and environmental indicators of the quality of fuels obtained using the resource-saving technology, determined using qualification tests, as well as the entire spectrum of the analysis physicochemical methods and environmental monitoring, fully comply with the requirements of the State Standard R 51866-2002 (EN 228-2004) for gasolines of the Premium Euro-95 and Super Euro 98 (types III).

RESEARCH PHYSICAL AND CHEMICAL METHODS, ALKYLATION, OIL, HIGH-OCTANE GASOLINE PRODUCTION TECHNOLOGY, GASOLINE SERVICE PROPERTIES, GASOLINE PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES, PHYSICAL PRINCIPLES OF ELECTRIC CARS CREATION

Сведения об авторах:

А. П. Карпинец

SPIN-код: 7644-1653
 ORCID ID: 0000-0003-0424-7791
 ResearcherID: E-7790-2016
 Scopus Author ID: 6602274578
 Телефон: +38 (050) 535-76-40
 Эл. почта: antoninakarpinets@gmail.com

М. В. Барбашова

SPIN-код: 9308-1040
 ORCID ID: 0000-0002-5393-4304
 ResearcherID: G-9757-2019
 Телефон: +38 (071) 333-31-00
 Эл. почта: barbashova1987@gmail.com

Статья поступила 19.02.2021

© А. П. Карпинец, М. В. Барбашова, 2021

Рецензент: В. В. Быков, канд. техн. наук, доц., АДИ ГОУВПО «ДОННТУ»