

## Оценка октановых чисел бензиновых фракций с применением методов хромато-масс-спектрометрии и «структура-свойство»

© Коледин<sup>1+</sup> Олег Сергеевич, Доломатов<sup>1\*</sup> Михаил Юрьевич,  
Ковалева<sup>2</sup> Элла Александровна, Бадикова<sup>3</sup> Альбина Дарисовна,  
Гарипов<sup>1</sup> Роберт Венерович

<sup>1</sup>Кафедра технологии нефти и газа; <sup>2</sup>Кафедра автоматизация, телекоммуникация и метрология;

<sup>3</sup>Кафедра физическая и органическая химия. Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: +7 (987) 606-47-91. E-mail: o.s.koledin@yandex.ru

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** октановое число, модели QSPR, углеводородный состав, неидеальные смеси, бензиновые фракции.

### Аннотация

С развитием двигателей внутреннего сгорания определение октанового числа топлива стало играть важную роль при контроле качества продукции нефтеперерабатывающих заводов.

Традиционные методы определения октановых чисел на установках УИТ-85 требуют значительных временных затрат, а также большое количество анализируемого образца, что не всегда представляется возможным. Альтернативные методы часто имеют невысокую точность и не применяются в промышленности.

Предложена методика прогнозирования октановых чисел исследовательским методом бензиновых фракций, основанная на идентификации компонентного состава методом хроматографии и хромато-масс-спектрометрии и оценке октановых чисел индивидуальных углеводородов по моделям «структура-свойство» Quantitative structure property relationship (QSPR). Неидеальность смеси учитывается через параметры Ван-дер-Ваальсового взаимодействия. Объектами исследования являются бензины процессов изомеризации и каталитического риформинга.

Поправка, на межмолекулярное взаимодействие с учетом квантово-химических расчетов составляет 15.51 ед. для бензина изомеризации и 5.71 ед. для бензина риформинга. Результаты расчетов согласуются с данными эксперимента определения октанового числа исследовательским методом, что свидетельствует об адекватности моделей, абсолютная ошибка составляет 0.19 ед. и 0.78 ед., относительная 0.20 и 0.84% для бензина каталитического риформинга и изомеризации соответственно.

Предлагаемая методика применима для определения октановых чисел многокомпонентных углеводородных смесей бензинов различных технологических процессов. Кроме того, существует возможность применения для прогноза октановых чисел бензинов на технологических потоках в реальном времени при условии применения поточных анализаторов компонентного состава (хроматографов), что позволяет оперативно вносить корректировки в технологический режим установки и получать продукцию стабильно высокого качества.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Коледин О.С., Доломатов М.Ю., Ковалева Э.А., Бадикова А.Д., Гарипов Р.В. Оценка октановых чисел бензиновых фракций с применением методов хромато-масс спектрометрии и «структура-свойство».

*Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.72. №12. С.51-59. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-72-12-51

или

Oleg S. Koledin, Mikhail Y. Dolomatov, Ella A. Kovaleva, Albina D. Badikova, Robert V. Garipov. Assessment of the octane number of gasoline fractions using the methods of chromat-mass spectrometry and «structure-property». *Butlerov Communications*. 2022. Vol.72. No.12. P.51-59. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-72-12-51. (Russian)