

## Теория систем с хаосом химического состава и её применение к исследованию высококипящих углеводородных фракций

© Гильманшина<sup>1+</sup> Карина Айдаровна, Паймурзина<sup>2\*</sup> Наталья Халитовна, Ковалева<sup>3</sup> Элла Александровна

<sup>1</sup> Кафедра «Технология нефти и газа». Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450064. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: +7 (347) 243-15-35. E-mail: karina\_gilmanshina@mail.ru

<sup>2</sup> Кафедра «Прикладные и естественнонаучные дисциплины». Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Менделеева, 195. г. Уфа, 450080. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: +7 (347) 228-25-11.

<sup>3</sup> Кафедра «Автоматизация, телекоммуникация и метрология». Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450064. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: +7 (347) 242-09-13.

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** хаос химического состава, высококипящие углеводородные фракции, высокомолекулярные соединения нефти, кинетика, компенсационный эффект, реакционная способность, спектроскопия, термодинамика.

### Аннотация

Изложены основные положения теории многокомпонентных систем с хаосом химического состава (МСХС), разработанной Доломатовым М.Ю., и её приложения к исследованию нефтяных систем. Согласно теории, все простые и сложные вещества обладают химическим хаосом. Индивидуальные вещества характеризуются малым хаосом состава за счет небольшого количества примесей, а нефти и нефтеподобные системы, а также керогены, гуминовые вещества почвы и др., относятся к органическим МСХС с сильным хаосом химического состава. Автором предполагается, что источником возникновения и эволюции МСХС является рост так называемой энтропии разнообразия компонентов, которая увеличивается в квазиизолированных системах. В этих системах существует размытость функции распределения состава по термодинамическим потенциалам, в частности энергиям Гиббса и Гельмгольца. Отсюда следуют метастабильность, самовоспроизводимость и пересечение различных фазовых переходов в пространстве и во времени таких систем в широком диапазоне температур, что подтверждается экспериментами и имитационным моделированием процессов пиролиза, термического разложения веществ и др. Так, в процессах крекинга и пиролиза углеводородных систем наблюдается самовоспроизводимость гомологических рядов органических соединений, а в концентратах смол и асфальтенов наблюдаются сопряженные фазовые переходы «диэлектрик – полупроводник» и «диамагнетик – парамагнетик». Установлено, что кинетика процессов с участием МСХС подчиняется законам типа Авраами для нестационарных марковских случайных процессов и не подчиняется классическому закону действующих масс вследствие невыполнимости закона постоянства состава. Возможны также стационарные варианты, макрокинетическая модель которых подчиняется уравнению псевдо-первого порядка. Следствием изменения химической природы системы во времени является кинетический компенсационный эффект, который заключается в линейной зависимости усредненных по составу эффективных энергий активации и энтропий процесса. Практическое приложение рассматриваемой теории заключается в возможности прогнозирования различных физико-химических процессов участием МСХС, а также высокотемпературных процессов нефтепереработки и нефтехимии.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Гильманшина К.А., Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А. Теория систем с хаосом химического состава и её применение к исследованию высококипящих углеводородных фракций. *Бутлеровские сообщения*. 2025. Т.83. №7. С.1-10. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-83-7-1

### Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Гильманшина К.А., Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А. Теория систем с хаосом химического состава и её применение к исследованию высококипящих углеводородных фракций. *Бутлеровские сообщения А*. 2025. Т.11. №3. Id.1. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-83-7-1/ROI-jbc-RA/25-11-3-1

### The output for citing the English online version of the article:

Karina A. Gilmanshina, Natalya Kh. Paimurzina, Ella A. Kovaleva. The theory of systems with chaos of chemical composition and its application to the study of high-boiling hydrocarbon fractions. *Butlerov Communications A*. 2025. Vol.11. No.3. Id.1. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-83-7-1/ROI-jbc-A/25-11-3-1