

## Теоретическое исследование механизма акватермолиза модельного серосодержащего асфальтена с использованием программы Priroda

© Шамов<sup>1\*</sup> Александр Георгиевич, Аристов<sup>2+</sup> Илья Владимирович,  
Гарифзянова<sup>3</sup> Гюзель Габдульбаровна и Храпковский<sup>3</sup> Григорий Михайлович

<sup>1</sup> Отделение информатизации; <sup>2</sup> Научно-исследовательский отдел компьютерной химии;  
<sup>3</sup> Кафедра катализа. Казанский национальный исследовательский технологический университет.

Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: <sup>2)</sup> +7 (843) 231-42-11. E-mail: <sup>2)</sup> [aristov@kstu.ru](mailto:aristov@kstu.ru)

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** квантово-химический расчет, акватермолиз, асфальтен, метод QM\_N3.

### Аннотация

Нефтяные месторождения Республики Татарстан содержат различные органические соединения серы. Их удаление является необходимым условием дальнейшей переработки нефти. Одним из возможных способов удаления серосодержащих примесей является их разрушение в процессе акватермолиза непосредственно в нефтяных скважинах. Определение оптимальных условий проведения акватермолиза (температура, давление, химические добавки) можно определить на основе сведений о механизме процесса. Учитывая, что экспериментальные данные о механизме разрушения серосодержащих примесей в процессе акватермолиза отсутствуют, в рассматриваемой работе для изучения механизма используются квантово-химические методы. Поскольку наиболее сложной проблемой является разрушение асфальтенов, был исследован механизм акватермолиза фенантро[4,5-bcd]тиофена – простейшей модели серосодержащих асфальтенов. Квантово-химическое исследование проводилось с использованием программы *Priroda 15*, в состав которой входит полуэмпирический метод функционала плотности QM\_N3. Для поиска экстремальных точек и построения путей реакции на поверхности потенциальной энергии применялась оболочка *P-AutoExtremum*. Для обработки полученных результатов исследований элементарных актов использовалась программа *P-Analysis*, которая рассчитывает значения активационных параметров и барьеров прямой и обратной реакции, а также термодинамические функции реагентов и продуктов. Из изученных реакций (более 20) в работе рассматриваются только выгодные в энергетическом отношении процессы присоединения воды по связи углерод–углерод. Рассмотрены элементарные стадии процессов разрыва тиофенового кольца по связи сера–углерод с участием одной и трех молекул воды. Получены оценки барьеров указанных выше процессов акватермолиза. В работе приведены основные геометрические параметры переходных состояний и продуктов реакций акватермолиза.