

Связь макрокинетических параметров процесса термоллиза с топологическими характеристиками молекул углеводородов

© Долوماتов^{1,2*} Михаил Юрьевич, Кутуева^{2,3+} Алина Варисовна,

Ковалева² Элла Александровна и Журавлева³ Надежда Александровна

¹Кафедра физической электроники и нанофизики Физико-технического института БашГУ.
ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450076. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (917) 429-44-63.

E-mail: dolomatov@gmail.com

²Кафедра технологии нефти и газа, кафедра математики. Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (917) 429-44-63. E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru

³Кафедра информатики. Уфимский государственный авиационный технический университет.
ул. Карла Маркса, 12. г. Уфа, 450008. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (927) 306-77-70. E-mail: alinavarisovna@gmail.com

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: термоллиз, константа скорости, эффективная энергия активации, эффективная константа скорости, кинетический компенсационный эффект, топологические характеристики молекулярного графа, индекс Винера, собственные значения топологической матрицы.

Аннотация

Знание кинетических параметров процесса термического превращения молекул с образованием газообразных продуктов и углерода имеет важное значение для нефтехимии и технологии переработки нефти. Это особенно актуально для технологии процессов термоллиза – термического крекинга и пиролиза углеводородов. Изучение кинетических параметров термоллиза позволяет подобрать оптимальные режимы ведения этих термических процессов. В работе применен феноменологический подход, основанный на исследовании эффективных кинетических параметров процесса термоллиза – константы скорости превращения исходных молекул в конечный продукт без детального описания элементарного механизма и промежуточных стадий процесса. В качестве объектов исследования изучены углеводороды различных гомологических рядов, содержащие пи-электроны. В работе использована методология QSPR «структура-свойство». Впервые рассмотрена взаимосвязь эффективных кинетических параметров термоллиза углеводородов в широком интервале температур 370-600 °С с топологическими индексами молекулярного графа. В качестве топологических индексов использованы индекс Винера и индекс представляющий собой сумму квадратов собственных значений топологической матрицы молекулярного графа, который отражает Хюккелевский спектр энергетических состояний молекул.

Методом наименьших квадратов по алгоритмам множественного регрессионного анализа установлена пятифакторная зависимость кинетического параметра эффективной энергии активации термоллиза от топологических индексов. Оценена значимость коэффициентов модели, адекватность расчета эксперименту подтверждается статистической обработкой данных. Для характеристики качества регрессионной модели QSPR был вычислен коэффициент множественной корреляции $R=0.96$, подтверждающий сильную связь топологических характеристик молекул углеводородов с их кинетическими параметрами. Предэкспонента процесса термоллиза может быть оценена через энергию активации на основе кинетического компенсационного эффекта. Установлена взаимосвязь между эффективными кинетическими константами процесса термоллиза и структурно-химическими характеристиками молекул углеводородов. Полученные результаты позволяют прогнозировать процесс термоллиза при температуре 370-600 °С исходя из информации о структуре молекул углеводородов.