

## Исследование молекулярной и электронной структуры асфальтенов типа «архипелаг»

© Доломатов<sup>1,2\*</sup> Михаил Юрьевич, Шуткова<sup>3+</sup> Светлана Александровна  
и Доломатова<sup>1</sup> Милана Михайловна

<sup>1</sup> Кафедра физической электроники и нанофизики. Физико-технический институт. Башкирский государственный университет. ул. З. Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 229-96-47. E-mail: dolomatov@mail.ru

<sup>2</sup> Кафедра технологии нефти и газа. Технологический факультет. Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 243-15-35. E-mail: dolomatov@mail.ru

<sup>3</sup> Кафедра теплоэнергетики и физики. Энергетический факультет. Башкирский государственный аграрный университет. ул. 50-летия Октября, 34. г. Уфа, 450001. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 228-52-00. E-mail: Svetlana-Shutkova@yandex.ru

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** нефтяные асфальтены типа «архипелаг», электронная спектроскопия, потенциал ионизации, сродство к электрону, донорно-акцепторные свойства, аморфные полупроводники.

### Аннотация

Объектами исследования являются асфальтены западно-сибирской нефти. Для проведения экспериментов по выделению и разделению асфальтенов была использована методика И.Р. Хайрудинова. Электронная структура асфальтенов исследована с применением электронной спектроскопии путем измерения широкого сигнала поглощения в УФ и видимой области диапазона (280-780 нм). Определены значения эффективного потенциала ионизации (5.69 эВ) и эффективного сродства к электрону (1.79 эВ) асфальтенов.

Рентгенофлуоресцентным анализом определен элементный состав нефтяных асфальтенов. Средне-числовая молекулярная масса образца, полученная методом криоскопии в нафталине, составляет 2557 а.е.м. Методом FTIR-спектроскопии исследованы структурно-химические характеристики асфальтенов. На основе данных элементного анализа, ИК и УФ-спектроскопии изучены структурно-химические характеристики молекул асфальтенов и построены модельные фрагменты асфальтенов типа «архипелаг», характерные для нефти и прямогонных нефтяных остатков. Модельные молекулы состоят из 4-5 нафтоароматических конденсированных структур, связанных между собой алифатическими боковыми цепочками с количеством атомов углерода от 4 до 6. В структурах присутствуют пиррольные кольца, карбонильные, тиольные и ОН-группы.

Расчет электронной структуры модельных фрагментов нефтяных асфальтенов выполнен методом 6-31G\*\* с использованием программного пакета GAUSSIAN. Установлено, что молекулярные фрагменты модельных молекул имеют значения потенциала ионизации (ПИ) в диапазоне от 6.14 до 6.77 эВ, свободно-радикальные – от 4.78 до 5.24 эВ. Значения сродства к электрону (СЭ) молекулярных фрагментов находятся в интервале от 0.79 до 1.14 эВ, свободно-радикальных – от 2.10 до 2.30 эВ. Значения дипольных моментов модельных молекул находятся в пределах от 3.97 до 7.05 D. Полученные уточненные величины ПИ и СЭ хорошо согласуются с данными электронной спектроскопии. Для молекулярных фрагментов асфальтенов значения квазиуровня Ферми находятся в диапазоне 5.00-5.98 эВ, свободно-радикальных – 2.68-2.98 эВ. По данным спектроскопии ширина запрещенной зоны образца асфальтенов западно-сибирской нефти составляет 3.9 эВ.

Подтверждается гипотеза о повышенной донорно-акцепторной способности асфальтенов. Наличие низких ПИ и высоких СЭ позволяет предположить, что асфальтены можно использовать в качестве органических материалов, обладающих электропроводящими свойствами.