

Исследование молекулярной и надмолекулярной структуры асфальтенов типа «архипелаг»

© Доломатов^{1,2*} Михаил Юрьевич, Шуткова³⁺ Светлана Александровна

¹ Кафедра физической электроники и нанофизики. Физико-технический институт. Башкирский государственный университет. ул. 3. Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: +7 (347) 229-96-47. E-mail: dolomatov@gmail.com

² Кафедра технологии нефти и газа. Технологический факультет. Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: +7 (347) 243-15-35.

³ Кафедра теплоэнергетики и физики. Энергетический факультет. Башкирский государственный аграрный университет. ул. 50-летия Октября, 34. г. Уфа, 450001. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: +7 (347) 228-52-00. E-mail: Svetlana-Shutkova@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: асфальто-смолистые вещества, нефтяные асфальтены, структура типа «архипелаг», метод молекулярной механики, непланарная структура.

Аннотация

Объектами исследования являются асфальтены западносибирской нефти. Для проведения экспериментов по выделению и разделению асфальтенов была использована методика И.Р. Хайрудинова. Рентгенофлуоресцентным анализом определен элементный состав нефтяных асфальтенов. Среднечисловая 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 ЯМР ¹H, ¹³C 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. Молекулярные массы структур находятся в интервале от 2564 до 2576 а.е.м., отношение (С/Н) масс – от 10.52 до 10.69.

Исследование молекулярной и надмолекулярной структуры асфальтенов типа «архипелаг» западносибирской нефти выполнено в программном пакете GAUSSIAN, используя метод молекулярной механики MM+ с полной оптимизацией геометрии. Значения двугранного угла α между виртуальными плоскостями ароматических и нафтеновых фрагментов для модельных молекул находятся в интервале от 105.60 до 161.20. Плоскости нафтоароматических фрагментов модельных молекул не параллельны между собой. Двугранный угол β между виртуальными нафтоароматическими фрагментами в молекулах находится в пределах от 96.10 до 177.20. Алкильные группы, замещающие водород в ароматических кольцах по периферии, существенно непланарны плоскости ароматических колец. Двугранный угол γ между виртуальными плоскостями алкильных заместителей и плоскости конденсированного полициклического фрагмента молекул находится в пределах от 109.40 до 112.70. Определены геометрические размеры модельных молекул. Высота H модельных молекул составляет 0.73-3.45 нм, диаметр D: 4.87-6.56 нм, длина L: 5.26-6.28 нм. Расстояние h между соседними плоскостями структур находится в интервале 0.21-0.31 нм.

Результаты исследования геометрической структуры нефтяных асфальтенов подтвердили данные о непланарной структуре асфальтенов, которые не способствуют образованию упорядоченных структур типа мезофазы нефтяного кокса.

Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Доломатов М.Ю., Шуткова С.А. Исследование молекулярной и надмолекулярной структуры асфальтенов типа «архипелаг». *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.69. №3. С.32-39. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-3-32.

или

Mikhail Y. Dolomatov, Svetlana A. Shutkova. Investigation of the molecular and supramolecular structure of asphaltenes of «archipelago» type. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.69. No.3. P.32-39. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-3-32. (Russian)