Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Утверждённая научная специальность ВАК: 1.4.4. Физическая химия; 1.4.12. Нефтехимия
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/24-77-1-20
Цифровой идентификатор объекта – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-1-20
УДК 541.1; 665.7. Поступила в редакцию 20 декабря 2023 г.

Исследование электронной, молекулярной и надмолекулярной структуры нанокристаллитов нефтяных асфальтенов

© Шуткова[1+] Светлана Александровна, Доломатов[2,3]* Михаил Юрьевич, Бахтизин[2] Рауф Загидович, Доломатова[2,3] Милана Михайловна

[1] *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*

[2] *Кафедра физической электроники и нанофизики. Физико-технический институт. Уфимский университет науки и технологий. ул. З. Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: +7 (347) 229-96-47. E-mail: mdolomatov@bk.ru*

[3] *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.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нефтяные асфальтены, нанокристаллиты, потенциал ионизации, сродство к электрону, энергия активации электропроводности.

Аннотация

Проведено исследование электронной и химической и надмолекулярной структуры нанокристаллитов, построенных из молекулярных и свободно-радикальных фрагментов нефтяных асфальтенов. Объектами исследования являются асфальтены, выделенные из асфальта пропановой деасфальтизации гудрона западносибирской нефти (ЗСН). Выделение и разделение асфальтенов выполнено поэтапно с использованием изооктана и спиртобензольной смеси. Получены электронные абсорбционные спектры растворов асфальтенов западносибирской нефти в видимой и УФ-области (280-780 нм). Выполнена обработка спектров на ЭВМ и расчет эффективных потенциалов ионизации и сродства к электрону изучаемых объектов. Рассчитаны значения эффективного потенциала ионизации (5.59 эВ) и сродства к электрону (1.85 эВ). Определены физико-химические свойства нефтяных асфальтенов: значения плотности (1044 кг/м^3), среднечисловой молекулярной массы (879 а.е.м.), концентрации углеродных парамагнитных центров (от 145.6 до $273.4 \cdot 10^{18}$ спин/см^3). Исследована электронная структура наночастиц нефтяных асфальтенов методом DFT/B3LYP с базисным набором 6-31G*. Согласно расчетным данным адиабатические первый потенциал ионизации (ПИ) молекулярных фрагментов равен 7.09 эВ, сродство к электрону (СЭ) – 1.10 эВ; ПИ свободно-радикальных фрагментов равен 5.46 эВ, СЭ – 1.32 эВ. Данные расчета подтверждают гипотезу о повышенной донорно-акцепторной способности асфальто-смолистых веществ.

Результаты исследований структурных характеристик наночастиц нефтяных асфальтенов, проведенных с использованием метода молекулярной механики, обнаружили непланарность нафтеноароматических фрагментов. Двугранный угол между виртуальными плоскостями нафтеновых и ароматических колец имеет значения в интервале от 161° до 168°. Среднее расстояние между пластинами модельных фрагментов равно 3.6 Å. Установлена возможность образования устойчивых наноструктур, состоящих из нафтено-ароматических пластин. Рассчитанные значения энергий взаимодействия молекулярных (от 26.78 до 113.96 кДж/моль) и свободно-радикальных фрагментов (от 42.01 до 110.16 кДж/моль) подтверждаются данными эксперимента по определению энергия активации электропроводности образца асфальтенов остатков ЗСН (129.58 кДж/моль). Исследования показали, что при увеличении количества фрагментов от 2 до 8 значения энергии активации электропроводности нанокристаллитов, состоящих из молекулярных и свободно-радикальных фрагментов, уменьшаются от 3.55 до 2.83 эВ и от – 1.70 до 0.98 эВ, соответственно. Результаты расчета соответствуют данным эксперимента по определению энергия активации электропроводности различных по природе образцов асфальтенов (0.92-2.95 эВ), что подтверждает их полупроводниковую природу и прыжковый механизм переноса заряда.

Выходные данные для цитирования русскоязычной <u>печатной</u> версии статьи:
Шуткова С.А., Доломатов М.Ю., Бахтизин Р.З., Доломатова М.М. Исследование электронной, молекулярной и надмолекулярной структуры нанокристаллитов нефтяных асфальтенов. *Бутлеровские сообщения.* **2024**. Т.77. №1. С.20-27. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-1-20

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:
Шуткова С.А., Доломатов М.Ю., Бахтизин Р.З., Доломатова М.М. Исследование электронной, молекулярной и надмолекулярной структуры нанокристаллитов нефтяных асфальтенов. *Бутлеровские сообщения А.* **2024**. Т.7. №1. Id.3. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-1-20/ROI-jbc-RA/24-7-1-3

The output for citing the English version of the article:
Svetlana A. Shutkova, Mikhail Y. Dolomatov, Rauf Z. Bakhtizin, Milana M. Dolmatova. Study of electronic, molecular and supramolecular structure of nanocrystallites of petroleum asphaltenes. *Butlerov Communications A.* **2024**. Vol.7. No.1. Id.3. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-1-20/ROI-jbc-A/24-7-1-3