

Химия и технология топлив и масел

5₍₆₃₉₎'2023

DOI: 10.32935/0023-1169-2023-638-5

Научно-технический журнал
Издаётся с 1956 года
Выходит один раз в два месяца

Свидетельство о регистрации
ПИ № ФС77-82547.
Выдано 18 января 2022 г.
Федеральной службой по надзору
в сфере связи, информационных
технологий и массовых коммуникаций

Издатель —
Международный центр науки и технологий
«ТУМА ГРУПП»

Издаётся в США фирмой
«Springer Science + Business Media, Inc.»

Английская версия включена в ведущие
мировые реферативные базы данных

Главный редактор
Б. П. Туманян – д.т.н., проф.

Редакционная коллегия
И. А. Арутюнов – д.т.н., проф.
С. Н. Волгин – д.т.н., проф.
И. Б. Грудников – д.т.н., проф.
В. Л. Лашхи – д.т.н., проф.
А. Лукса – д.т.н., проф. (Польша)
А. М. Мазгаров – д.т.н., проф.
К. Б. Рудяк – д.т.н., проф.
Е. П. Серегин – д.т.н., проф.

Включен в перечень изданий
Высшей аттестационной комиссии
Министерства образования
и науки РФ

Содержание

Выпуск посвящен 75-летию
Уфимского государственного нефтяного технического университета

<i>М. Ю. Доломатов, А. И. Быстров, Р. И. Хайрудинов, Н. А. Журавлева, И. Р. Хайрудинов, К. В. Садыкова.</i> Математическое моделирование макрокинетики термоллиза сложных углеводородных систем	3
<i>М. Ю. Доломатов.</i> Закономерности кинетики термоллиза в сложных углеводородных системах	8
<i>М. Ю. Доломатов, В. П. Запорин, Д. З. Бурангулов, М. М. Доломатова, Г. М. Хамадалиева, И. В. Казаев.</i> Кинетические особенности термоллиза газойлей каталитического крекинга	14
<i>В. П. Запорин, Д. Ф. Осипенко, С. В. Сухов.</i> О влиянии гидродинамических условий при коксовании на структуру получаемого кокса	19
<i>В. П. Запорин, С. В. Сухов, И. А. Шадрин, Д. Ф. Осипенко.</i> О выборе технологии замедленного коксования на стадии предпроектной разработки исходных данных	25
<i>В. П. Запорин, А. Ш. Фазылов, С. В. Сухов.</i> Углеродные добавки нефтяного происхождения в угольные шихты и перспективы их промышленного производства	29
<i>Р. Р. Ялаев, А. Ф. Ахметов, В. П. Лосев, И. Р. Фасхутдинов, Р. С. Назаров, Т. С. Огнева.</i> Разработка полимерно-битумной композиции и асфальтобетонной смеси на ее основе с применением нестандартных модификаторов	34
<i>Н. Г. Евдокимова, Н. А. Лихачева, А. Р. Махмутова, Р. Р. Богданова.</i> Полиэфирные смолы как модификаторы свойств битума	39
<i>А. Р. Махмутова, Н. Г. Евдокимова, Д. Д. Караськина, Г. В. Кополшко.</i> К вопросу о термоокислительном старении нефтяных битумов и гудронов	43
<i>А. А. Мухамедзянова, А. А. Хайбуллин, А. Ф. Ахметов, И. А. Ихсанов.</i> Оценка возможности получения мезофазы при термообработке различных видов углеводородного сырья	47
<i>А. Ф. Саттарова, Ю. Н. Биглова, И. А. Мустафин, А. Г. Мустафин.</i> Квантово-химическое исследование электрохимических свойств ряда метанофуллеренов	54

Chemistry and Technology of Fuels and Oils

5₍₆₃₉₎'2023

Head Editor

B. P. Tumanyan – Dr. Eng. Sci., prof.

Editorial Board

I. A. Arutyunov – Dr. Eng. Sci., prof.

S. N. Volgin – Dr. Eng. Sci., prof.

I. B. Grudnikov – Dr. Eng. Sci., prof.

V. L. Lashkhi – Dr. Eng. Sci., prof.

A. Luksa – Dr. Eng. Sci., prof. (Poland)

A. M. Mazgarov – Dr. Eng. Sci., prof.

K. B. Rudyak – Dr. Eng. Sci., prof.

E. P. Seregin – Dr. Eng. Sci., prof.

Publisher— ICST «TUMA Group» LLC

Редактор

В. С. Дмитриева

Ответственный секретарь

О. В. Любименко

Графика и верстка

В. В. Земсков

Подготовка материалов

С. О. Бороздин,

А. Д. Остудин,

В. Ю. Попова

Адрес редакции:

105318, г. Москва,

Измайловское шоссе, д. 20-1Н

e-mail: htm@list.ru

Материалы авторов не возвращаются.

Редакция не несет ответственности
за достоверность информации
в материалах, в том числе
рекламных, предоставленных
авторами для публикации.

Формат 60 × 84 1/8.

Печать офсетная.

Усл. печ. л. 7.

Тираж 1000 экз.

Отпечатано в ООО ИПФ «СТРИНГ»
424006, Республика Марий Эл,
г. Йошкар-Ола, ул. Строителей, 95

Contents

<i>M. Yu. Dolomatov, A. I. Bystrov, R. I. Khairudinov, N. A. Zhuravleva, I. R. Khairudinov, K. V. Sadykova.</i> Mathematical Simulation of Macrokinetics of Thermolysis of Complex Hydrocarbon Systems	3
<i>M. Yu. Dolomatov.</i> Regularities of Thermolysis Kinetics in Complex Hydrocarbon Systems	8
<i>M. Yu. Dolomatov, V. P. Zaporin, D. Z. Burangulov, M. M. Dolomatova, G. M. Khamadaliyeva, I. Z. Kazaev.</i> Kinetic Features of Thermolysis of Catalytic Cracking Gas Oil	14
<i>V. P. Zaporin, D. F. Osipenko, S. V. Sukhov.</i> On the Influence of Hydrodynamic Conditions during Coking on the Structure of the Resulting Coke	19
<i>V. P. Zaporin, S. V. Sukhov, I. A. Shadrin, D. F. Osipenko.</i> On the Choice of Belayed Coking Technology at the Stage of Pre-Project Development of Initial Data	25
<i>V. P. Zaporin, A. Sh. Fazylov, S. V. Sukhov.</i> Carbon Additives of Petroleum Origin in Coal Mines and Prospects for Their Industrial Production	29
<i>R. R. Yapaev, A. F. Akhmetov, V. P. Losev, I. R. Faskhutdinov, R. S. Nazarov, T. S. Ogneva.</i> Development of Polymer-Bitumen Composition and Asphalt-Concrete Mixture Based on it Using Non-Standard Modifiers	34
<i>N. G. Evdokimova, N. A. Likhacheva, A. R. Makhmutova, R. R. Bogdanova.</i> Polyester Resins as Modifiers of Bitumen Properties	39
<i>N. G. Evdokimova, A. R. Makhmutova, D. D. Karaskina, G. V. Koshko.</i> On the Question of Thermo-Oxidative Aging Oil Bitumen and Tar	43
<i>A. A. Mukhamedzianova, A. A. Khaybullin, A. F. Akhmetov, I. A. Ikhsanov.</i> Evaluation of the Possibility of Obtaining Mesophase during Heat Treatment of Various Types of Hydrocarbon Raw Materials	47
<i>A. F. Sattarova, Yu. N. Biglova, I. A. Mustafin, A. G. Mustafin.</i> Quantum Chemical Research of Electrochemical Properties of Methanefullerene Series	54

М. Ю. Доломатов, А. И. Быстров, Р. И. Хайрудинов, Н. А. Журавлева,

И. Р. Хайрудинов, К. В. Садыкова

Уфимский государственный нефтяной технический университет

mdolomatov@bk.ru

Математическое моделирование макрокинетики термоллиза сложных углеводородных систем

Рассмотрены стохастические математические модели кинетики термоллиза сложных нефтеподобных углеводородных систем с использованием математической статистики и теории случайных процессов.

Математическое моделирование показало, что процесс термоллиза является коллективным, неэргодическим и нестационарным. Установлены критерии при которых углеводородные системы подчиняются кинетическим законам первого порядка и Авраами. На примере термоллиза высоковязкой Альшачинской нефти показано, что кинетика выхода газообразных продуктов термоллиза лучше описываются моделями стационарной кинетики, а модели выхода остатков и дистиллятов моделями нестационарной кинетики.

Установленные закономерности могут быть использованы при моделировании термических и термокаталитических процессов нефтехимии и нефтепереработки.

Ключевые слова: термоллиз, закон действующих масс, многокомпонентные системы, случайные процессы, высоковязкие нефти, нестационарная кинетика.

10.32935/0023-1169-2023-638-5-3-7

M. Yu. Dolomatov, A. I. Bystrov, R. I. Khairudinov, N. A. Zhuravleva, I. R. Khairudinov, K. V. Sadykova

Ufa State Petroleum Technological University

Mathematical Simulation of Macrokinetics of Thermolysis

of Complex Hydrocarbon Systems

Stochastic mathematical models of thermolysis kinetics of complex oil-like hydrocarbon systems using mathematical statistics and the theory of random processes are considered. Mathematical modeling shows that the thermolysis process is collective, non-ergodic and non-stationary. The criteria for which hydrocarbon systems obey the kinetic laws of the first order and Abraham are established. Using the example of thermolysis of high-viscosity Alshacha oil, it is shown that the kinetics of the release of gaseous products of thermolysis are better described by models of stationary kinetics, and the models of the release of residues and distillates by models of non-stationary kinetics. The established regularities can be used in modeling thermal and thermocatalytic processes of petrochemistry and oil refining.

Key words: *thermolysis, law of acting masses, multicomponent systems, random processes, high-viscosity oils, unsteady kinetics.*

М. Ю. Доломатов

Уфимский государственный нефтяной технический университет

mdolomatov@bk.ru

Закономерности кинетики термоллиза в сложных углеводородных системах

Обобщены закономерности процессов термоллиза и карбонизации в сложных углеводородных системах — продуктах переработки нефти и их фракциях. Показано, что в углеводородных системах вследствие

бернуллевского и гауссовского распределения состава по термодинамическим функциям и энергиям активации, протекают процессы самовоспроизводимости гомологов углеводородов. Показано, что процессы термоллиза и карбонизации определяются коллективным взаимодействием молекул статистической и термодинамической природы. Эти взаимодействия способствуют отклонениям от закона действующих масс, обуславливают кинетический компенсационный эффект термоллиза, а также зависимость выхода углерода от энергии активации вязкого течения и средних электродонорных характеристик компонентов среды. Обнаруженные закономерности подтверждены экспериментами и могут быть использованы в расчетах для оптимизации процессов нефтехимии и нефтепереработки.

Ключевые слова: термоллиз, нефтяные остатки, углеводородные системы с хаосом химического состава, компенсационный эффект, межмолекулярные взаимодействия.

DOI: 10.32935/0023-1169-2023-638-5-8-13

M. Yu. Dolomatov

Ufa State Petroleum Technological University

Regularities of Thermolysis Kinetics in Complex Hydrocarbon Systems

The regularities of thermolysis and carbonation processes in complex hydrocarbon systems – oil refining products and their fractions are generalized. It is shown that in hydrocarbon systems, due to the Bernoulli and Gaussian distribution of composition by thermodynamic functions and activation energies, processes of self-reproducibility of hydrocarbon homologues take place. It is shown that the processes of thermolysis and carbonation are determined by the collective interaction of molecules of statistical and thermodynamic nature. These interactions contribute to deviations from the law of acting masses, cause the kinetic compensation effect of thermolysis, as well as the dependence of carbon yield on the activation energy of the viscous flow and the average electrodonor characteristics of the medium components. The discovered patterns have been confirmed by experiments and can be used in calculations and optimization of the processes of petrochemicals.

Key words: *thermolysis, oil residues, hydrocarbon systems with chaos of chemical composition, compensation effect, intermolecular interactions.*

М. Ю. Доломатов, В. П. Запорин, Д. З. Бурангулов, М. М. Доломатова, Г. М. Хамадалиева, И. В. Казаев

Уфимский государственный нефтяной технический университет

mdolomatov@bk.ru

Кинетические особенности термоллиза газойлей каталитического крекинга

Изучена высокотемпературная макрокинетика процесса термоллиза малосернистого газойля каталитического крекинга с формированием игольчатого кокса. Эксперименты проводили на лабораторной установке с кварцевым микрореактором при температуре 450–500°C и продолжительности процесса до 300 мин. Установлено, что процесс является двухстадийным и подчиняется уравнению типа Аврами — Ерофеева, константа скорости процесса на обеих стадиях имеет диффузионный характер. Показано, что первая стадия процесса связана с испарением легких фракций и деструкции слабых химических связей в компонентах. Вторая стадия включает термоконденсацию полициклических углеводородов с образованием

мезофазы и игольчатого кокса. Результаты исследования подтверждаются данными электронного парамагнитного резонанса и электронной феноменологической спектроскопии.

Ключевые слова: термолиз, макрокинетика, константа скорости, энергия активации,

молекулярная масса, парамагнитные центры

DOI: 10.32935/0023-1169-2023-638-5-14-18

M. Yu. Dolomatov, V. P. Zaporin, D. Z. Burangulov, M. M. Dolomatova, G. M. Khamadalieva, I. Z. Kazaev

Ufa State Petroleum Technological University

Kinetic Features of Thermolysis of Catalytic Cracking Gas Oil

The high-temperature macrokinetics of the process of thermolysis of low-sulphur catalytic cracking gas oil with the formation of needle coke was studied. The experiments were carried out on a laboratory setup with a quartz microreactor at temperatures of 450-500 °C and a process duration of up to 300 min. It was established that the process is two-stage and its kinetics obeys the Avrami-Erofeev equation, the rate constant of the process at both stages has a diffusion character. The second stage includes thermal condensation of polycyclic hydrocarbons with the formation of mesophase and needle coke. The results of the study are confirmed by optical microscopy in polarized light, data of electron paramagnetic resonance and electron spectroscopy.

Key words: *thermolysis, microkinetics, rate constant, activation energy, molecular weight, paramagnetic centers.*

В. П. Запорин, Д. Ф. Осипенко, С. В. Сухов

Уфимский государственный нефтяной технический университет

inftek@yandex.ru

О влиянии гидродинамических условий при коксовании на структуру получаемого кокса

Получение высокоанизотропной структуры игольчатых коксов зависит не только от качества исходного сырья, но и от гидродинамической обстановки в коксовой камере, формирующейся в результате сдвиговых напряжений мезофазной матрицы потоками выделяющихся парогазовых продуктов дистиллята коксования и непрерывной подачи сырья. В работе представлены результаты исследований по изучению качества игольчатых коксов, получаемых при коксовании в статических и динамических условиях.

Показано, что микроструктурная организация коксов может достаточно сильно отличаться в зависимости от технологии коксования.

Ключевые слова: игольчатый кокс, коксовая камера, мезофазная матрица,

сдвиговые напряжения, микроструктурная организация коксов.

DOI: 10.32935/0023-1169-2023-638-5-19-24

V. P. Zaporin, D. F. Osipenko, S. V. Sukhov

Ufa State Petroleum Technological University

On the Influence of Hydrodynamic Conditions during Coking on the Structure of the Resulting Coke

The production of a highly anisotropic structure of needle coke depends not only on the quality of the raw material, but also on the hydrodynamic situation in the coke chamber formed as a result of shear stresses of the mesophase

matrix by the flows of released steam-gas products of coking distillate and continuous supply of raw materials. The paper presents the results of studies on the quality of needle coke obtained during coking in static and dynamic conditions. It is shown that the microstructural organization of coke can differ quite a lot depending on the coking technology.

Key words: *needle coke, coke chamber, mesophase matrix, shear stresses, microstructural organization of coke.*

V. P. Zaporin¹, S. V. Sukhov¹, I. A. Shadrin², D. F. Osipenko¹

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет,

² ООО «Башгипронефтехим»

inftek@yandex.ru

О выборе технологии замедленного коксования на стадии предпроектной разработки исходных данных

Проведено сопоставление технологических схем установок замедленного коксования, эксплуатируемых в настоящее время на НПЗ. Показано, что российская технология нового поколения по сравнению с лицензионными технологиями зарубежных фирм имеет преимущества по эксплуатационной надежности, производительности и возможности производства различных видов кокса

Ключевые слова: *технология замедленного коксования, коэффициент рециркуляции, производительность, стадия прогрева коксовых камер, топливный кокс, коксующая добавка.*

DOI: 10.32935/0023-1169-2023-638-5-25-28

V. P. Zaporin, S. V. Sukhov, I. A. Shadrin, D. F. Osipenko

¹ Ufa State Petroleum Technological University,

² Bashgiproneftekhim LLC

On the Choice of Belayed Coking Technology at the Stage of Pre-Project Development of Initial Data

A comparison of technological schemes of delayed coking units currently operated at the refinery has been carried out. It is shown that the Russian technology of a new generation in comparison with the licensed technologies of foreign firms has advantages in operational reliability, productivity and the possibility of producing various types of coke.

Key words: *delayed coking technology, recirculation coefficient, productivity, coke chambers heating stage, fuel coke, coking additive.*

V. P. Zaporin, A. Sh. Fazyllov, S. V. Sukhov

Уфимский государственный нефтяной технический университет

inftek@yandex.ru

Углеродные добавки нефтяного происхождения в угольные шихты и перспективы их промышленного производства

Рассмотрена возможность квалифицированного использования тяжелых нефтяных остатков и отходов нефтепереработки в качестве углеродных добавок в угольные шихты при производстве металлургического

кокса. Вовлечение нефтекоксовой мелочи и коксующей добавки в угольные шихты позволяет существенно улучшить эксплуатационные свойства доменного кокса. Рассмотрены и сопоставлены имеющиеся и перспективные технологии получения спекающих добавок с использованием тяжелых нефтяных остатков.

Ключевые слова: угольная шихта, нефтекоксовая мелочь, коксующая добавка, нефтяная спекающая добавка, замедленное коксование, висбрекинг.

DOI: 10.32935/0023-1169-2023-638-5-29-33

V. P. Zaporin, A. Sh. Fazylov, S. V. Sukhov

Ufa State Petroleum Technological University

Carbon Additives of Petroleum Origin in Coal Mines and Prospects for Their Industrial Production

The possibility of qualified use of heavy oil residues and oil refining waste as carbon additives in coal charges in the production of metallurgical coke is considered. The involvement of petroleum coke fines and coking additives in coal charges can significantly improve the operational properties of blast furnace coke. The available and promising technologies for obtaining sintering additives using heavy oil residues are considered and compared.

Key words: coal charge, petroleum coke fines, coking additive, oil sintering additive, delayed coking, visbreaking.

Р. Р. Янаев, А. Ф. Ахметов, В. П. Лосев, И. Р. Фасхутдинов, Р. С. Назаров, Т. С. Огнева

Уфимский государственный нефтяной технический университет

seriyjah@gmail.com

Разработка полимерно-битумной композиции и асфальтобетонной смеси на ее основе с применением нестандартных модификаторов

В работе рассмотрена возможность модификации некондиционного товарного битума с целью улучшения его реологических свойств на примере использования побочного продукта селективной очистки масляных дистиллятов (экстракта) в качестве пластифицирующей добавки и полимерного промышленного отхода — пылевидного полиэтилентерефталата. В ходе лабораторных исследований выявлены основные показатели исходного битума, битума с добавлением чистого экстракта и с добавлением полимерно-экстрактного раствора. Установлена возможность утилизации полимерных отходов с улучшением свойств дорожного битума, а также получения на его основе высококачественной холодной асфальтобетонной смеси.

Ключевые слова: нефтяной дорожный битум, пылевидный полиэтилентерефталат, экстракт селективной очистки масляных фракций, полимерно-битумная композиция, асфальтобетонная смесь, холодный асфальт.

DOI: 10.32935/0023-1169-2023-638-5-34-38

Р. Р. Янаев, А. Ф. Ахметов, В. П. Лосев, И. Р. Фасхутдинов, Р. С. Назаров, Т. С. Огнева

Ufa State Petroleum Technological University

Development of Polymer-Bitumen Composition and Asphalt-Concrete Mixture Based on it Using Non-Standard Modifiers

The paper considers the possibility of modifying substandard commercial bitumen in order to improve its rheological properties by the example of using a by-product of selective purification of oil distillates – extract as a plasticizing

additive and polymer industrial waste – pulverized polyethylene terephthalate. In the course of laboratory studies, the authors identified the main indicators of the initial bitumen, bitumen with the addition of pure extract and with the addition of polymer-extract solution. The paper reveals the possibility of recycling polymer waste with improving the properties of road bitumen, as well as obtaining a cold asphalt concrete mixture based on it.

Key words: *petroleum road bitumen, pulverized polyethylene terephthalate, extract of selective purification of oil fractions, polymer-bitumen composition, asphalt concrete mixture, cold asphalt.*

N. G. Evdokimova, N. A. Likhacheva, A. R. Makhmutova, R. R. Bogdanova

Институт нефтепереработки и нефтехимии Уфимского государственного

нефтяного технического университета в г. Салавате

ruskih1.r@yandex.ru

Полиэфирные смолы как модификаторы свойств битума

В работе показана возможность синтеза и применения для модифицирования свойств битумов полиэфирных смол. Полиэфирные смолы получали реакцией поликонденсации кубового остатка ректификации фталевого ангидрида с глицерином и диэтиленгликолем. При модифицировании битумов полученными добавками улучшаются значения растяжимости, глубины проникания иглы при 25 и 0°C, низкотемпературные свойства. Получены битумы с высокой устойчивостью к термоокислительным процессам старения. Установлено, что при использовании модифицированного гудрона полученными добавками по технологии производства битумов окисление–компаундирование можно получить битумы дорожных марок.

Ключевые слова: битум, гудрон, модифицирование, синтез добавок, полиэфирные смолы, кубовый остаток фталевого ангидрида.

DOI: 10.32935/0023-1169-2023-638-5-39-42

N. G. Evdokimova, N. A. Likhacheva, A. R. Makhmutova, R. R. Bogdanova

Ufa State Petroleum Technological University, Institute of Oil Refining and Petrochemistry of the University in the City of Salavat

Polyester Resins as Modifiers of Bitumen Properties

The paper shows the possibility of synthesis and application of polyester resins for modifying the properties of bitumen. Polyester resins were obtained by the reaction of polycondensation of the cubic residue of the rectification of phthalic anhydride with glycerin and diethylene glycol. When modifying bitumen with the additives obtained, the values of extensibility, the penetration depth of the needle at 25 and at 0 oC, and low-temperature properties are improved. Bitumen with high resistance to thermo-oxidative aging processes has been obtained. It is established that when using modified tar with additives obtained according to the bitumen production technology "oxidation-compounding", it is possible to obtain bitumen of road.

Key words: *bitumen, tar, modification, synthesis of additives, polyester resins, cubic residue of phthalic anhydride.*

A. P. Makhmutova, N. G. Evdokimova, D. D. Karaskina, G. V. Kopoшко

Институт нефтепереработки и нефтехимии Уфимского государственного
нефтяного технического университета в г. Салавате
ruskih1.r@yandex.ru

К вопросу о термоокислительном старении нефтяных битумов и гудронов

В работе исследованы зависимость адгезионных свойств и pH битумов различной глубины окисления и гудрона, сырья битумного производства от времени старения. Показано, что в битуме с увеличением глубины окисления при термоокислительном старении происходит изменение типа образующихся оксосоединений и как следствие адгезионных свойств. В высокоплавких битумах при старении идет интенсивное образование асфальтенов, смол и асфальтогенных кислот, которые позволяют улучшить адгезионные свойства вяжущего. Для низкоплавких битумов характерно интенсивное образование карбоксильных и гидрокарбоксильных групп соединений, которые снижают адгезию к щелочным минеральным материалам. Установлено, что скорость старения гудрона увеличивается, а для окисленных битумов она носит экстремальный характер, где максимальные значения наблюдаются в первые часы старения. Предложено использовать показатель адгезии и кислотность в комбинировании со стандартным показателем качества — температурой размягчения после старения для подбора компонентного состава битума, получаемого по технологии окисление–компаундирование, а также для разработки способов, позволяющих снизить скорость старения битумов в начальный период эксплуатации асфальтобетонных покрытий и обеспечить повышение их качества и долговечности.

Ключевые слова: битум, гудрон, старение, термоокислительная стабильность, адгезия, кислотность

DOI: 10.32935/0023-1169-2023-638-5-43-46

N. G. Evdokimova, A. R. Makhmutova, D. D. Karaskina, G. V. Kopoшко

Ufa State Petroleum Technological University, Institute of Oil Refining and Petrochemistry of the University
in the City of Salavat

On the Question of Thermo-Oxidative Aging Oil Bitumen and Tar

The dependences of the adhesive properties and pH of bitumen of various oxidation depths and tar, raw materials of bitumen production, depending on the aging time are investigated. It is shown that in bitumen, with an increase in the depth of oxidation during CBT, a change in the type of oxo compounds formed and, as a consequence, adhesive properties occurs. In high-melting bitumen, during aging, there is an intensive formation of asphaltenes, resins and asphaltogenic acids, which allow to improve the adhesive properties of the binder. Low-melting bitumen is characterized by intensive formation of carboxyl and hydroxyl groups of compounds that reduce adhesion to alkaline mineral materials. It is established that the rate of tar aging increases, and for oxidized bitumen it is extreme, where the maximum values are observed in the first hours of aging. It is proposed to use the adhesion index and acidity in combination with the standard quality indicator – the softening temperature after aging to select the component composition of bitumen obtained using the "oxidation-compounding" technology, as well as to develop methods to reduce the aging rate of bitumen in the initial period of operation of asphalt concrete coatings and to improve their quality and durability.

Key words: bitumen, tar, aging, thermal-oxidative stability, adhesion, acidity.

A. A. Mukhamedzianova¹, A. A. Khaybullin², A. F. Akhmetov², I. A. Ikhsanov³

¹ Уфимский университет науки и технологий,

² Уфимский государственный нефтяной технический университет,

³ Фонд перспективных исследований, г. Москва

alf6058@yandex.ru

Оценка возможности получения мезофазы при термообработке различных видов углеводородного сырья

Показана возможность получения анизотропных пеков путем термообработки различных видов нефтяного сырья — изотропных пеков из тяжелой смолы пиролиза и тяжелого газойля каталитического крекинга.

Установлены зависимости изменения группового состава остатков термообработки от продолжительности изотермической выдержки, корреляционная связь между компонентами, нерастворимыми в толуоле и хинолине. Выявлены особенности оптической текстуры остатков термообработки изотропных нефтяных пеков различного происхождения.

Ключевые слова: термообработка, тяжелая смола пиролиза, тяжелый газойль каталитического крекинга, стирол-инденевая смола, гидравлическая смола, изотропный пек, мезофаза.

DOI: 10.32935/0023-1169-2023-638-5-47-53

A. A. Mukhamedzianova, A. A. Khaybullin, A. F. Akhmetov, I. A. Ikhsanov

¹ Ufa University of Science and Technology,

² Ufa State Petroleum Technological University,

³ Foundation for Advanced Study, Moscow

Evaluation of the Possibility of Obtaining Mesophase during Heat Treatment of Various Types of Hydrocarbon Raw Materials

The possibility of obtaining anisotropic pitches by heat treatment of various types of petroleum feedstock is shown – isotropic pitches from heavy pyrolysis tar and heavy catalytic cracking gas oil. The dependences of the change in the group composition of the heat treatment residues on the duration of isothermal exposure, the correlation between the components insoluble in toluene and quinoline, have been established. Features of the optical texture of the heat treatment residues of isotropic petroleum pitches of various origins are revealed.

Key words: heat treatment, heavy pyrolysis tar, catalytic cracking heavy gas oil, styrolindene resin, hydraulic resin, isotropic pitch, mesophase.

A. F. Samtarova^{1,2}, Yu. N. Biglova¹, I. A. Mustaфин³, A. G. Mustaфин²

¹ Уфимский университет науки и технологий,

² Институт органической химии, Уфимский научный центр РАН,

³ Уфимский государственный нефтяной технический университет,

brux1995@mail.ru

Квантово-химическое исследование электрохимических свойств ряда метанофуллеренов

В работе методами квантовой химии найдены энергии высшей занятой и низшей вакантной молекулярных орбиталей (HOMO и LUMO). Вычислена ширина запрещенной зоны и сродство к электрону для ряда соединений, предложенных для разработки в качестве акцепторного элемента в органических солнечных батареях.

Ключевые слова: фуллерен, [60]PCBM, функциональные производные фуллерена, сродство к электрону, DFT, HOMO-LUMO.

DOI: 10.32935/0023-1169-2023-638-5-54-56

A. F. Sattarova^{1,2}, Yu. N. Biglova¹, I. A. Mustafin³, A. G. Mustafin²

¹ Ufa University of Science and Technology,

² Institute of Organic Chemistry, Ufa Scientific Center RAS,

³ Ufa State Petroleum Technological University

Quantum Chemical Research of Electrochemical Properties of Methanefullerene Series

In the presented study, using quantum chemistry methods, the energies of the highest occupied and lowest unoccupied molecular orbitals (HOMO and LUMO) were found, the band gap and electron affinity were calculated for a number of compounds proposed for development as an acceptor element in organic solar cells.

Key words: fullerene, [60]PCBM, fullerene functional derivatives, electron affinity, DFT, HOMO-LUMO.