

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ И ОЦЕНКА РАВНОВЕСНОГО СОСТАВА ЦЕЛЕВЫХ РЕАКЦИЙ ПРОЦЕССА ИЗОМЕРИЗАЦИИ В ОАО «АНПЗ ВНК»

<sup>1</sup>А.Е. Прошкин <sup>2</sup>Ф.А. Бурюкин, <sup>2</sup>Н.В. Гавголенко

<sup>1</sup>ОАО «АНПЗ ВНК», 662110, Красноярский край, Большеулуйский район, промзона

<sup>2</sup>ФГАОУ ВПО «Сибирский федеральный университет», 660041 г. Красноярск, пр.

Свободный, 79

gavgolenko@mail.ru

Для разработки рекомендаций по повышению эффективности применяемой технологии процесса изомеризации в ОАО «АНПЗ ВНК» проведен термодинамический расчет равновесного состава изомеров при различных технологических условиях, предшествующий анализу возможных вариантов оптимизации параметров процесса для увеличения глубины реакций изомеризации и повышения выхода изомеризата.

В секции автомобильных бензинов лаборатории «Нефти и нефтепродуктов» Института нефти и газа СФУ проведен анализ компонентного углеводородного состава сырья и продукции установки изомеризации, который позволил формализовать механизм превращения реагентов и учитывать те реакции, которые оказывают наибольшее влияние на выход продукта (брутто-реакции).

Реакции изомеризации парафиновых углеводородов протекают практически без изменения объема, поэтому термодинамическое равновесие зависит только от температуры. Температурный интервал, взятый для расчета термодинамических параметров равновесного состава изомеров, принят исходя из условий работы процесса изомеризации в ОАО «АНПЗ ВНК» на стационарном слое катализатора I-82 (I-8 Плюс) и составляет 128-203 °С (401-476 К).

Из полученных значений энергии Гиббса следует, что при данных термобарических условиях проведения промышленного процесса изомеризации в ОАО «АНПЗ ВНК» все рассмотренные целевые реакции с термодинамической точки зрения осуществимы, а образованию целевых изопарафиновых углеводородов благоприятствуют более низкие температуры.

Константы равновесия реакции гидрирования бензола при всех температурах очень велики, что свидетельствует о том, что в условиях низкотемпературной изомеризации бензол полностью гидрируется до циклогексана, и эта реакция протекает мгновенно и необратимо.

Реакции циклизации нормального пентана и гексана, а также их изомеров в нафтены не протекают, так как изменения энергии Гиббса  $\Delta G^0$  положительны и, следовательно, константы равновесия таких реакций очень малы. При изомеризации нормального гексана в условиях работы установки изомеризации более благоприятно образуются 2-метилпентан и 2,2-диметилбутан, чем 2,3-диметилбутан и 3-метилпентан.

На основании анализа работы установки изомеризации ОАО «АНПЗ ВНК» и проделанных термодинамических расчетов также можно сделать вывод, что, прежде всего, реакции изомеризации углеводородов – равновесные, и с понижением температуры процесса равновесный выход изопарафинов повышается, но приблизиться к его значениям можно только при бесконечном времени пребывания сырья в зоне реакции или при очень низкой объемной скорости подачи сырья. Тепловой эффект реакции изомеризации - от 2 до 20 кДж/моль – и мало меняется с изменением температуры.

Результат проведенных исследований внедрены на установке изомеризации цеха № 1 ОАО «АНПЗ ВНК» и использованы в производстве следующей продукции: изомеризат, фракция С7 и выше.