

Классификация и определение нефтепродуктов методом ИК-спектроскопии
Лукина Т.И., Кузьмин А.П.
научные руководители канд. хим. наук Шубин А.А., канд. хим. наук Калякин С.Н.
Сибирский федеральный университет

Роль нефти в мировой экономике исключительно велика. Нефть и продукты ее переработки используются почти во всех отраслях народного хозяйства: на транспорте и в медицине, в судостроении и сельском хозяйстве, текстильной промышленности и энергетике. Нефть служит в основном дешевыми источниками энергии, но с развитием химической промышленности она все более широко используется в качестве химического сырья. Сейчас из нефти получают самые разнообразные продукты: синтетические волокна, пластмассы, органические кислоты, бензины, спирты, синтетические растворители и многое другое. Однако, в ходе деятельности человека, неизбежно происходит загрязнение окружающей среды нефтью и продуктами ее переработки и возникает проблема эффективного обнаружения и идентификации источника загрязнения. Методы инфракрасной спектроскопии, в силу их методологических возможностей, позволяют обнаруживать возникновение загрязнения и определять тип загрязнителя.

Инфракрасная спектроскопия является одним из основных методов анализа органических соединений, в том числе нефти и нефтепродуктов. Инфракрасная спектроскопия имеет ряд преимуществ перед спектроскопией в видимой и ультрафиолетовой областях, так как позволяет проследить изменение всех основных типов связей и функциональных групп в молекулах исследуемых веществ. Так же метод комбинационного рассеяния в его классическом варианте с возбуждением в видимом диапазоне к исследованию нефти, нефтепродуктов крайне ограничивается сильным флуоресцентным фоном [1]. При использовании инфракрасной спектроскопии для определения качественного и количественного состава природных смесей не происходит разрушение веществ, что позволяет применять их для последующих исследований.

С помощью ИК-спектроскопии быстро и надёжно идентифицируются разнообразные функциональные группы: карбонильная, гидроксильная, карбоксильная, амидная, амина, циано и др.; а также различные непредельные фрагменты: двойные и тройные углерод-углеродные связи, ароматические или гетероароматические системы. Методами ИК-спектроскопии изучают внутри- и межмолекулярные взаимодействия, например, образование водородных связей.

Огромный интерес представляет применение инфракрасной спектроскопии для определения качества различных продуктов переработки нефти, таких как, бензиновые продукты, дизельные продукты, керосин и т.д. Для простоты и надежности классификации данных продуктов необходимо создание атласа нефтепродуктов. Таким образом целью работы является отработка методики идентификации нефтепродуктов методом ИК-спектроскопии с последующей разработкой системы классификационных признаков.

Анализ проводили на приборе ИК-фурье спектрометр Nicolet 380. Регистрация спектров проводилась в диапазоне $400 - 4000 \text{ см}^{-1}$ с разрешением 4 см^{-1} . Для улучшения соотношения сигнал-шум проводилось накопление спектров до 64 сканов. Измерения спектров проводили в стандартной жидкостной кювете со стеклами из КВг диаметром 32мм с прослойкой толщиной 0,025 мм. Для отработки методики и выявления отличительных признаков нефтепродуктов проведены исследования образцов: гидравлическое масло

AW 32 (1), нефть мамонтовского месторождения с содержанием воды до 1% (2), фракция ДТ К-103/2 (3), фракция керосиновая К-103/1 (4).

На рисунке 1 представлен характерный спектр углеводородного соединения на примере образца 1. Данный спектр можно разделить на 3 области - первая область (I) соответствует колебаниям групп $-(CH_2)_n$, вторая область (II) деформационным колебаниям групп $-CH_3$ и $-CH_2$, третья (III) валентным колебаниям групп $-CH_3$ и $-CH_2$. Можно отметить, что области II и III свойственны для всех рассмотренных образцов без каких-либо существенных различий в спектральных профилях

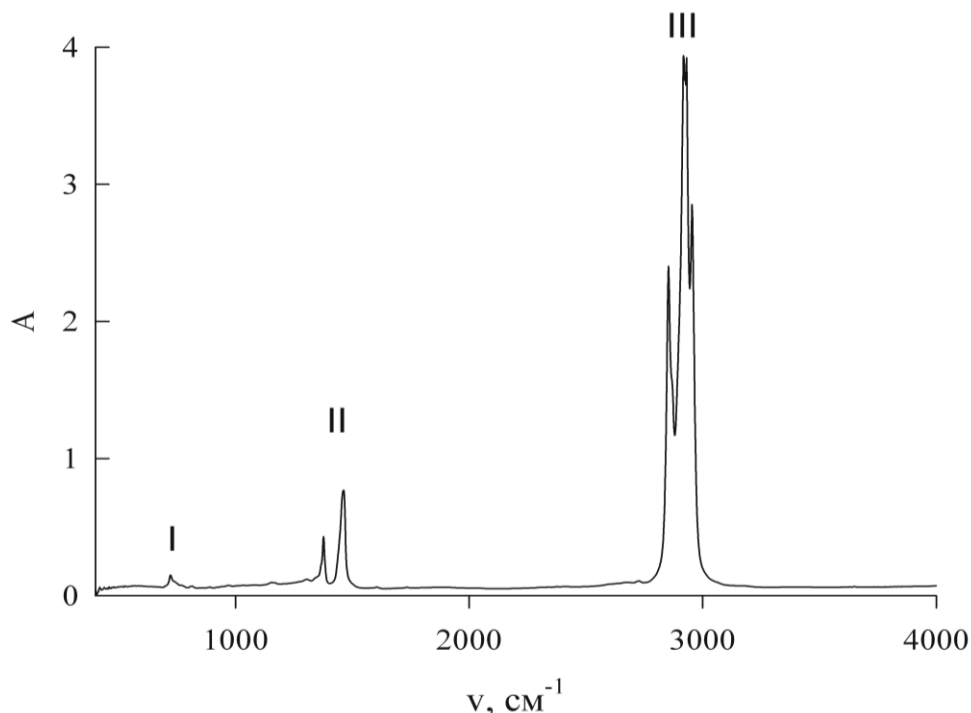


Рисунок 1 – ИК-спектр гидравлическое масло AW 32

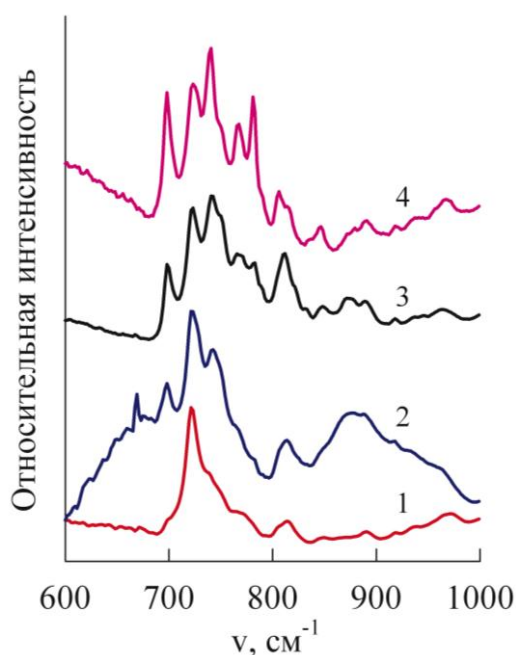


Рисунок 2 – Сопоставление ИК спектров исследуемых образцов (обозначение по тексту)

Сопоставление спектров образцов в спектральной области I позволяет отметить значительное отличие (рисунок 2), которое не может быть связано с «зашумленностью» спектров, а обусловлено спецификой природы рассматриваемых веществ. Поэтому этот спектральный диапазон, с учетом областей II и III, может быть использован для выявления классификационных признаков.

Список используемой литературы

1. Купцов А.Х., Арбузова Т.В. Исследование тяжелых фракций нефти методом Фурье-спектроскопии КР ближнего ИК-диапазона// А.Х. Купцов, Т.В. Арбузова/ Нефтехимия. – 2011. – Т. 51, № 3. – С. 214 – 222.