



УДК 661.715.3+661.185.42

## ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ПРОДУКТОВ ДИМЕРИЗАЦИИ ПЕНТЕНОВ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ГИДРОФОБНЫХ КОМПОНЕНТОВ НЕИОНОГЕННЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

## POTENTIAL APPLICATION OF THE PENTENES DIMERIZATION PRODUCTS FOR THE PREPARATION OF HYDROPHOBIC COMPONENTS OF NON-IONIC SURFACTANTS

**Самигуллина Зульфия Сабировна**

кандидат химических наук,  
доцент кафедры нефтехимии и химической технологии,  
Уфимский государственный нефтяной  
технический университет  
starwar82@yandex.ru

**Семёнов Денис Владиславович**

магистрант кафедры физической и органической химии,  
Уфимский государственный нефтяной  
технический университет  
denis-702198@yandex.ru

**Киреева Дилара Роландовна**

кандидат химических наук,  
доцент кафедры физической и органической химии,  
Уфимский государственный нефтяной  
технический университет  
latypovad@rambler.ru

**Аннотация.** Данная статья посвящена теоретическому исследованию возможности использования олефинов C5 для синтеза неионогенных поверхностно-активных веществ (НПАВ), применяемых в нефтепромысловой химии в качестве деэмульгаторов нефтяных эмульсий. Предполагается, что продукты димеризации пентенов – децены нормального и изо- строения будут вовлекаться в реакции алкилирования фенола с получением децилфенолов, взаимодействие которых с формальдегидом приведет к образованию децилфенолформальдегидной смолы – гидрофобной составляющей НПАВ. Возможность осуществления реакции синтеза децилфенолов в данной работе моделируется квантово-химическими методами.

**Ключевые слова:** поверхностно-активные вещества, димеризация олефинов, алкилирование, квантово-химическое исследование.

**Samigullina Zulfya Sabirovna**

Ph. D., Associate professor of petrochemistry  
and chemical technology,  
Ufa State Petroleum Technological University  
starwar82@yandex.ru

**Semenov Denis Vladislavovich**

Graduate student of physical  
and organic chemistry,  
Ufa State Petroleum Technological University  
denis-702198@yandex.ru

**Kireeva Dilara Rolandovna**

Ph. D., Associate professor  
of physical and organic chemistry,  
Ufa State Petroleum Technological University  
latypovad@rambler.ru

**Annotation.** The given article is devoted to theoretical investigation of application of olefines C5 for synthesis of non-ionogenic surfactants used in oilfield chemistry as demulsifiers of oil emulsions. It is supposed that dimerization products of pentenes – decenes of normal and iso-structures will be involved in alkylation reactions of phenol with the formation of decylphenols, the interaction of which with formaldehyde can be obtained decylphenol formaldehyde resin – a hydrophobic component of non-ionic surfactants. The possibility of carrying out the above reactions in this work is modeled by quantum-chemical methods.

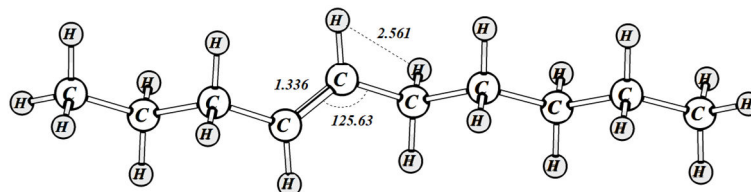
**Keywords:** surfactants, olefin dimerization, alkylation, quantum-chemical study.

Повышенное внимание к вовлечению непредельных углеводородов в реакции органического синтеза вызвано существующим богатым ресурсом фракций легких олефинов, полученных при переработке нефти. Фракции C2-C4 активно используются в производстве соответствующих полимеров и других органических продуктов, тогда как пентены различного строения на сегодняшний день гораздо менее востребованы. Одним из перспективных направлений использования этих соединений является синтез углеводородов большей молекулярной массы – димеризация – для дальнейшего применения димеров в реакциях органического синтеза [1].

Целью настоящей работы является квантово-химическое моделирование последовательности превращений пентена-1 для получения компонентов гидрофобной части НПАВ, а именно децилфенолов различного строения.

Структуру молекул моделировали квантово-химическим методом RHF/6-31G(d,p) с учетом электронной корреляции в рамках теории функционала плотности на уровне B3LYP1 в программном пакете GAMESS [2].

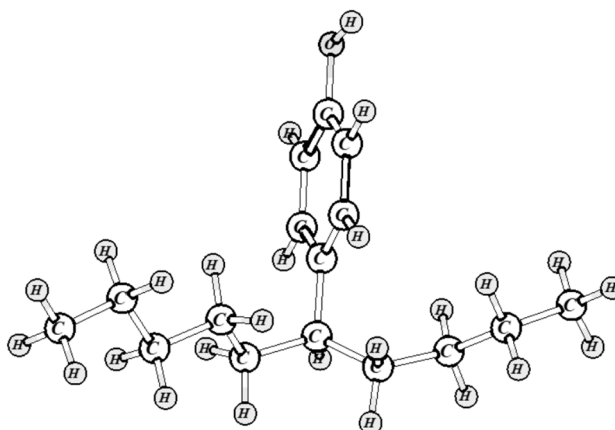
Одним из возможных линейных продуктов димеризации пентена-1, когда взаимодействие между молекулами протекает по принципу «голова к голове» является децен-4 (рис. 1):



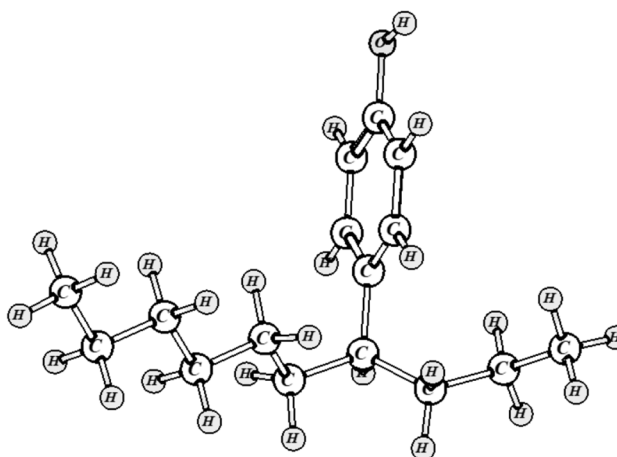
**Рисунок 1** – Структура молекулы децена-4

При температуре 473 К (при данной температуре возможно проведение как олигомеризации олефинов, так и алкилирования ароматических соединений) образование димера термодинамически выгодно. Энтальпия реакции составляет порядка  $-75$  кДж/моль.

Далее моделировали алкилирование фенола деценом-4. В результате данной реакции возможно образование двух изомерных форм, отличающихся положением гидроксиароматического радикала в углеводородной цепочке. Из-за больших размеров алкилирующего агента наиболее вероятно присоединение его в пара-положение относительно гидроксильной группы (рис. 2, 3).



**Рисунок 2** – Структура молекулы 1-гидрокси-4-децил-5-бензола



**Рисунок 3** – Структура молекулы 1-гидрокси-4-децил-4-бензола

При температуре 473 К образование децилфенолов термодинамически выгодно. Рассчитанная энтальпия реакции близка по значению к энтальпии олигомеризации и составляет порядка  $-80$  кДж/моль. Для различных изомеров децилфенолов (рис. 2, 3) эта величина практически не отличается.

Согласно полученным результатам, структурные параметры всех рассчитанных молекул соответствуют стандартным значениям, величины тепловых эффектов моделируемых реакций свидетельствуют о термодинамической выгоде синтеза децилфенолов выбранным в работе способом.

**Список литературы / List of references:**

1. Nicholas C.P. Applications of Light Olefin Oligomerization to the Production of Fuels and Chemicals // Applied Catalysis A: General. – 2017. – Vol. 543. – P. 82–97.
2. Dupuis M., Spangler D., Wendoloski J.J. General Atomic and Molecular Electronic Structure System // Comput. Chem. – 1993. – № 14.