

## Calculation of the thermodynamic functions of the light fraction primary coal tar

<sup>1</sup>Ahmetkarimova Zh.S., <sup>1</sup>Muldahmetov Z.M., <sup>1</sup>Meiramov M.G.,  
<sup>1</sup>Ordabaeva A.T., <sup>1</sup>Muldahmetov Zh.H., <sup>2</sup>Baykenov M.I.

<sup>1</sup>Institute of Organic Synthesis and Chemistry of Kazakhstan, Karaganda, Kazakhstan

<sup>2</sup>Academician E.A. Buketov Karaganda State University, Karaganda, Kazakhstan

E-mail: [zhanarnf@mail.ru](mailto:zhanarnf@mail.ru), [iosu\\_8990@mail.ru](mailto:iosu_8990@mail.ru), [majit\\_m@mail.ru](mailto:majit_m@mail.ru), [aigul\\_serik\\_kz@mail.ru](mailto:aigul_serik_kz@mail.ru),  
[murzabek\\_b@mail.ru](mailto:murzabek_b@mail.ru)

**Key words:** heat capacity, enthalpy, entropy, Gibbs energy, fraction of primary coal tar

**Abstract:** Due to the steady rise in oil prices practical importance receipt of the products of the fuel and chemical appointment of coal and heavy oils, which can be considered as one of the most promising directions in the energy and petrochemical industry near future. Production of liquid fuel from solid fuels to reduce the destruction of the feedstock molecules, the relative increase in the hydrogen content, the removal of oxygen, nitrogen, sulfur and mineral ash. In this paper carried out the hydrogenation of the light fraction of primary coal tar LLP "Sary-Arka special coke" in the presence of nanocatalysts  $\beta$ -FeOOH,  $Fe_2O_3$  and  $Fe_3O_4$  in a temperature interval from 298K to 1000K. In order to remove phenols from light fraction of primary coal tar were extracted with an aqueous alcohol solution. Thermodynamic functions, such as the heat capacity of the process, entropy, an enthalpy and Gibbs's energy of the fraction primary coal tar and the fraction primary coal tar without phenols are calculated. Found that the general fraction without phenol derived from hydrogenation of primary coal tar fraction without phenols with end boiling 175°C is an effective hydrogen donor and a carrier, is capable of inhibiting polymerization processes, stabilizing the radicals formed as a result of hydrogenation processes.

УДК 665.5

## Расчет термодинамических функций легкой фракции первичной каменноугольной смолы

<sup>1</sup>Ахметкаримова Ж.С., <sup>1</sup>Мулдахметов З.М., <sup>1</sup>Мейрамов М.Г.,  
<sup>1</sup>Ордабаева А.Т., <sup>1</sup>Мулдахметов Ж.Х., <sup>2</sup>Байкенов М.И.

<sup>1</sup>Институт органического синтеза и углехимии РК, Караганды, Казахстан

<sup>2</sup>Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова, Караганды, Казахстан

**Ключевые слова:** теплоемкость, энтальпия, энтропия, энергия Гиббса, фракция первичной каменноугольной смолы

**Аннотация:** В связи с неуклонным ростом цен на нефть практическое значение приобретает получение продуктов топливного и химического назначения из угля и тяжелых нефтей, что может рассматриваться как одно из перспективных направлений в энергетике и нефтехимической промышленности ближайшего будущего. Получение жидких топлив из твердых горючих ископаемых сводится к разрушению молекул исходного сырья, увеличению относительного содержания водорода, удалению кислорода, азота, серы и зольных минеральных веществ. В данной статье проведена гидрогенизация легкой фракции первичной

каменноугольной смолы ТОО «Сары-Арка спецкокс» в присутствии нанокатализаторов  $\beta$ -FeOOH, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> в температурном интервале от 298К до 1000К. С целью удаления фенолов из фракции первичной каменноугольной смолы проведена экстракция водно-спиртовым раствором. Рассчитаны термодинамические функции, такие как теплоемкость процесса, энтропия, энтальпия и энергия Гиббса фракции первичной каменноугольной смолы и обесфеноленной фракции первичной каменноугольной смолы. Установлено, что обесфеноленная широкая фракция, полученная из гидрогенизата обесфеноленной фракции первичной каменноугольной смолы с к.к.175<sup>0</sup>С, является эффективным донором и переносчиком водорода, способна ингибировать процессы полимеризации, стабилизируя радикалы, которые образуются в результате гидрогенизационных процессов.

Установленными фактами в науке, является то, что химические реакции связаны с разнообразными физическими процессами: теплопередачей, поглощением или выделением теплоты, поглощением или излучением света, электрическими явлениями, изменением объема, и др. В химических реакциях тесно связаны физические и химические явления, изучение этой взаимосвязи – основная задача физической химии.

Несомненно, что основное внимание в этой области науки уделяется, установлению и исследованию законов протекания химических процессов, выявлению состояния химического равновесия, изучению строения и свойств молекул [1]. Это, очевидно, позволяет решить основную задачу – предсказание хода химического процесса и конечного результата и дает возможность управлять химическим процессом. Т.е. обеспечить наиболее быстрое и полное проведение при наибольшей его селективности.

Поиск ответов на вопрос о методах расчета кинетических и термодинамических параметров позволил нам убедиться в том, что основной задачей при изучении химических процессов является определение величин термодинамических и кинетических параметров: константы равновесия, константы скорости, энергия активации реакции, энергия Гиббса, и др. В настоящее время с целью их более точного и быстрого определения, для решения химических процессов, ведутся работы по созданию сравнительно простых физико-химических методов, основанных на теоретических и полуэмпирических расчетах [1].

В процессе гидрогенизации тяжелого углеводородного сырья для нас самая основная задача – это увеличение выхода жидких продуктов, путем частичной передачи водорода в реакционную смесь [2]. Такие соединения называются донорами водорода. В качестве донора водорода могут выступать различные растворители, фракции каменноугольной смолы, нефтепродукты, высоковязкая нефть и ее фракции. Термодинамические расчеты позволяют установить оптимальную степень насыщенности водородом молекул доноров [3].

Авторами в работе [4] показано, что содержание водорода в составе донора сильно влияет на значения его термодинамических функций и ими сделан вывод о том, что эффективность Н-донора определяется не количеством водорода в его составе, а значениями термодинамических функций.

Для термодинамических исследований углехимических процессов, в частности, гидрогенизационной переработки угля, первичной каменноугольной смолы (ПКС) и ее фракций в широком температурном диапазоне, необходимо иметь данные по значению термодинамических функций, таких как теплоемкость, энтальпия, энтропия, свободная энергия Гиббса. В настоящее время соответствующие экспериментальные данные по термодинамическим функциям углеводородного состава первичной каменноугольной смолы и ее фракций отсутствуют, поэтому в литературе исследователи больше внимания уделяют разработке теоретических и практических методов их расчета [5-7].

Следует отметить, что в основе метода расчета термодинамических функций углеводородного состава лежит аддитивная схема для исследования реакционной способности модельных соединений. Аддитивный метод расчета термодинамических функций модельных соединений, входящих в фрагментарный состав органической массы углеводородов или ПКС и ее фракций, который был разработан профессором А.М. Гюльмалиевым [8]. Предложенный метод базируется на аддитивной схеме, где для расчета температурной зависимости термодинамической функции в интервале температур от 298 до 1000 К углеводородов произвольной структуры определяется набор параметров от гибридных состояний углеродных атомов и числа атомов водорода, связанных с ними химической связью. Согласно аддитивной схеме термодинамическая функция

равна:

$$\Phi_M = \sum_{\mu} f_{\mu} \quad (1)$$

где  $f_{\mu}$  – величина свойства  $\Phi$ , приходящаяся на  $\mu$ -й тип структурной группы.

Перечень атомных групп, примененных для расчета термодинамических функций углеводов и других органических молекул, приведен в работе [9]. Для каждой группы атомов значения величин  $C_p(T)$ ,  $\Delta H_{298}$  и  $\Delta S_{298}$ , определялись из соответствующих данных для известных моделей. Расчет температурной зависимости  $C_p$  фрагментов проводился по квадратичной функции:

$$C_{p.}(C_i^j) = a + bT + cT^2 \quad (2)$$

где  $a, b, c$  – коэффициенты.

Изменения энтальпии и энтропии молекулы в зависимости от температуры вычислялись по следующим формулам:

$$\Delta H_M(T) = \Delta H_{298} + \int_{298}^T \Delta C_{p.M}(T) dT \quad (3)$$

$$\Delta S_M(T) = \Delta S_{298} + \Delta T_{298} + \int_{298}^T \Delta C_{p.M}(T) d(\ln T) \quad (4)$$

С учетом (2) из формулы (4) имеем:

$$\Delta H(T) = \Delta H_{298} + \alpha(T - 298) + \frac{\beta}{2}[T^2 - 298^2] + \frac{\gamma}{3}[T^3 - 298^3] \quad (5)$$

$$\Delta S(T) = \Delta S_{298} + \alpha \ln \frac{T}{298} + \beta(T - 298) + \frac{\gamma}{2}[T^2 - 298^2] \quad (6)$$

$$\text{где } \alpha = \sum_{\mu} a_{\mu}; \quad \beta = \sum_{\mu} b_{\mu}; \quad \gamma = \sum_{\mu} c_{\mu}.$$

Свободная энергия Гиббса  $\Delta G$  вычислялась по формуле:

$$\Delta G(T) = \Delta H(T) - T\Delta S(T) \quad (7)$$

Для расчета термодинамических функций углеводородного состава фракции первичной каменноугольной смолы к.к.175<sup>0</sup>С были использованы количественные данные элементного состава фракции ПКС и результаты количественного определения карбоксильных и гидроксильных групп (COOH, OH) во фракции ПКС установлены с помощью ацетатного метода и нейтрализации щелочами [10]. Значения термодинамических функций углеводородного состава исходной фракции ПКС с к.к.175<sup>0</sup>С приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Термодинамические функции углеводородного состава органической массы исходной фракции первичной каменноугольной смолы с к.к. 175<sup>0</sup>С

$T, K$	$C_p, Дж \cdot моль^{-1} \cdot K^{-1}$	$\Delta H, кДж / моль \cdot K$	$S, Дж \cdot моль^{-1} \cdot K^{-1}$	$\Delta G, Дж \cdot моль^{-1} \cdot K^{-1}$	$\Delta \Phi'', Дж \cdot моль^{-1} \cdot K^{-1}$
298	386,390	-437,579	453,635	-421,181	453,635
300	388,709	-437,279	456,228	-421,074	453,644

400	496,698	-419,793	583,214	-418,202	470,276
500	589,116	-397,916	704,266	-420,127	505,075
600	665,962	-372,369	818,703	-426,674	547,905
700	727,237	-343,878	926,163	-437,619	594,350
800	772,940	-313,163	1026,429	-452,707	642,169
900	803,072	-280,950	1119,361	-471,667	690,096
1000	817,633	-247,961	1204,863	-494,218	737,360

$$C(p) = -3,55139E+01*(T-298) + 7,28480E-01*(T^2-298^2)/2 - 3,61606E-04*(T^3-298^3)/3$$

Для расчета термодинамических характеристик широкой фракции 270<sup>0</sup>С, полученной из гидрогенизата фракции ПКС с к.к.175<sup>0</sup>С в присутствии нанокатализаторов, были использованы количественные данные элементного состава фракции ПКС с к.к.175<sup>0</sup>С и результаты количественного определения карбоксильных и гидроксильных групп.

Значения термодинамических функций (теплоемкость процесса, энтальпия, энтропия, энергия Гиббса) углеводородного состава фракции ПКС до 270<sup>0</sup>С, полученной из гидрогенизата фракции ПКС с к.к. 175<sup>0</sup>С в присутствии нанокатализаторов  $\beta$ -FeOOH, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> в температурном интервале от 298К до 1000К, приведены в таблицах 2-4.

Таблица 2 – Термодинамические функции углеводородного состава органической массы фракции до 270<sup>0</sup>С ПКС при добавлении нанокатализатора  $\beta$ -FeOOH

<i>T, К</i>	<i>C<sub>p</sub>, Дж·моль<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup></i>	<i>ΔH, кДж/ моль·К</i>	<i>S, Дж·моль<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup></i>	<i>ΔG, Дж·моль<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup></i>	<i>ΔF<sup>0</sup>, Дж·моль<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup></i>
1	2	3	4	5	6
298	351,083	-1049,861	761,207	-1125,120	761,207
300	352,735	-1049,633	763,561	-1125,628	761,215
400	429,355	-1037,344	875,812	-1152,792	776,045
500	494,186	-1023,612	978,803	-1183,092	806,439
600	547,227	-1008,780	1073,771	-1216,126	843,186
700	588,481	-993,195	1161,376	-1251,585	882,469
800	617,945	-977,200	1242,011	-1289,209	922,443
900	635,620	-961,140	1315,930	-1328,770	962,119
1000	641,507	-945,362	1383,308	-1370,063	1000,923

Таблица 3 – Термодинамические функции углеводородного состава органической массы фракции до 270<sup>0</sup>С ПКС при добавлении нанокатализатора Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

<i>T, К</i>	<i>C<sub>p</sub>, Дж·моль<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup></i>	<i>ΔH, кДж/ моль·К</i>	<i>S, Дж·моль<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup></i>	<i>ΔG, Дж·моль<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup></i>	<i>ΔF<sup>0</sup>, Дж·моль<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup></i>
298	348,229	-1142,471	797,127	-1228,434	797,127
300	349,868	-1142,248	799,462	-1229,014	797,135
400	425,754	-1130,283	910,790	-1259,721	811,844
500	489,750	-1116,951	1012,890	-1293,474	841,984
600	541,857	-1102,609	1106,968	-1329,873	878,415
700	582,074	-1087,611	1193,668	-1368,606	917,343
800	610,402	-1072,313	1273,375	-1409,413	956,937
900	626,840	-1057,069	1346,336	-1452,064	996,211

1000	631,389	-1042,234	1412,720	-1496,348	1034,597
------	---------	-----------	----------	-----------	----------

Таблица 4 – Термодинамические функции углеводородного состава органической массы фракции до 270<sup>0</sup>С ПКС при добавлении нанокатализатора Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>

<i>T, K</i>	<i>C<sub>p</sub>, Дж·моль<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup></i>	<i>ΔH, кДж/ моль·K</i>	<i>S, Дж· моль<sup>-1</sup>· K<sup>-1</sup></i>	<i>ΔG, Дж· моль<sup>-1</sup>· K<sup>-1</sup></i>	<i>ΔΦ<sup>0</sup>, Дж· моль<sup>-1</sup>·</i>
298	362,176	-784,806	648,989	-826,624	648,989
300	364,041	-784,555	651,418	-826,908	648,997
400	450,746	-770,624	768,326	-843,077	664,396
500	524,691	-754,289	877,087	-862,910	696,187
600	585,876	-735,991	978,352	-886,085	734,877
700	634,300	-716,174	1072,465	-912,327	776,465
800	669,963	-695,279	1159,634	-941,387	818,985
900	692,866	-673,749	1239,992	-973,034	861,361
1000	703,008	-652,024	1313,629	-1007,047	902,962

Анализ результатов расчета термодинамических функций, приведенный в таблицах 2-4 показал, что при добавлении в процесс гидрогенизации фракции ПКС с к.к. 175<sup>0</sup>С нанокатализатора β-FeOОН наблюдается увеличение величины теплоемкости от 351 до 641,5 Дж/моль<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>. При использовании нанокатализатора Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, величины теплоемкости повышаются с 348,2 до 631,3 Дж/моль<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>, в процессе с участием Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> ситуация аналогична. Значение величины теплоемкости составляют от 362 до 703 Дж/моль<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>, а величины энтропии и приведенный химический потенциал увеличиваются, а величина отрицательно значения энергии Гиббса увеличивается. В температурном интервале от 298 до 1000 К теплоемкость, энтропия и энергия Гиббса возрастают по абсолютной величине, а энтальпия в выбранном температурном интервале увеличивается в положительную сторону. Увеличение энтропии и увеличение отрицательного значения энтальпии в сторону положительного значения в изучаемом температурном интервале позволяет нам сделать заключение о положительном влиянии нанокатализаторов на углеводородный состав широкой фракции 270<sup>0</sup>С в сторону увеличения выхода низкомолекулярных веществ.

Значения термодинамических функций углеводородного состава обесфеноленной исходной фракции до 175<sup>0</sup>С ПКС и обесфеноленной дистилятной фракции до 270<sup>0</sup>С, полученной из гидрогенизата обесфеноленной фракции ПКС с к.к.175<sup>0</sup>С в присутствии нанокатализаторов, приведены в таблицах 5-8.

Таблица 5 – Термодинамические функции углеводородного состава обесфеноленной органической массы фракции ПКС с к.к. 175<sup>0</sup>С

<i>T, K</i>	<i>C<sub>p</sub>, Дж· моль<sup>-1</sup></i>	<i>ΔH, кДж/ мол</i>	<i>S, Дж· моль<sup>-1</sup>· K<sup>-1</sup></i>	<i>ΔG, Дж· моль<sup>-1</sup></i>	<i>ΔΦ<sup>0</sup>, Дж· моль<sup>-1</sup>·</i>
298	386,390	-437,579	453,635	-421,181	453,635
300	388,709	-437,279	456,228	-421,074	453,644
400	496,698	-419,793	583,214	-418,202	470,276
500	589,116	-397,916	704,266	-420,127	505,075
600	665,962	-372,369	818,703	-426,674	547,905
700	727,237	-343,878	926,163	-437,619	594,350

8 00	772,940	-313,163	1026,429	-452,707	642,169
9 00	803,072	-280,950	1119,361	-471,667	690,096
1 000	817,633	-247,961	1204,863	-494,218	737,360

Таблица 6 – Термодинамические функции углеводородного состава органической массы обесфеноленой фракции до 270<sup>0</sup>С ПКС при добавлении нанокатализатора β-FeOOH

$T, K$	$C_p, Дж \cdot моль^{-1} \cdot K$	$\Delta H, кДж/моль$	$S, Дж \cdot моль^{-1} \cdot K$	$\Delta G, Дж \cdot моль$	$\Delta F'', Дж \cdot м$
1	2	3	4	5	6
298	361,377	-285,803	258,580	-211,279	258,580
300	363,430	-285,553	261,004	-210,782	258,588
400	458,966	-271,232	378,973	-187,944	274,072
500	540,608	-253,681	490,416	-168,967	306,307
600	608,356	-233,454	595,180	-153,645	345,816
700	662,211	-211,108	693,181	-141,762	388,520
800	702,172	-187,197	784,371	-133,094	432,373
900	728,239	-162,278	868,716	-127,415	476,233
1000	740,413	-136,906	946,195	-124,495	519,413

Таблица 7 – Термодинамические функции углеводородного состава органической массы обесфеноленой фракции до 270<sup>0</sup>С ПКС при добавлении нанокатализатора Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

$T, K$	$C_p, Дж \cdot моль^{-1} \cdot K$	$\Delta H, кДж/моль$	$S, Дж \cdot моль^{-1} \cdot K$	$\Delta G, Дж \cdot моль$	$\Delta F'', Дж \cdot м$
298	356,919	-357,815	300,241	-295,707	300,241
300	358,966	-357,575	302,636	-295,292	300,249
400	454,237	-343,713	419,285	-276,550	315,554
500	535,546	-326,650	529,639	-261,548	347,443
600	602,895	-306,949	633,446	-250,099	386,552
700	656,284	-285,172	730,571	-241,998	428,840
800	695,711	-261,880	820,934	-237,028	472,275
900	721,179	-237,636	904,485	-234,965	515,720
1000	732,685	-213,003	981,187	-235,583	558,489

Таблица 8 – Термодинамические функции углеводородного состава органической массы обесфеноленой фракции до 270<sup>0</sup>С ПКС при добавлении нанокатализатора Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>

$T, K$	$C_p, Дж \cdot моль^{-1} \cdot K$	$\Delta H, кДж/моль$	$S, Дж \cdot моль^{-1} \cdot K$	$\Delta G, Дж \cdot моль$	$\Delta F'', Дж \cdot м$
298	362,231	-290,791	69,202	-159,832	69,202
300	364,388	-290,540	71,632	-158,956	69,210
400	464,575	-275,881	190,538	-117,219	84,790
500	549,803	-257,581	303,639	-79,478	117,353
600	620,071	-236,300	410,318	-45,573	157,382
700	675,381	-212,700	510,248	-15,301	200,735
800	715,731	-187,444	603,233	11,569	245,309

900	741,122	-161,194	689,146	35,281	289,917
1000	751,554	-134,612	767,903	56,092	333,838

В работе [2, 11] автором показано, что увеличение отрицательности энергии Гиббса и энтальпии ведет к увеличению донорной способности пастообразователя. Анализ результатов, представленных в таблицах 6-8 показывает, что рассчитанные термодинамические функции, свободная энергия Гиббса и энтальпия выбранной фракции в качестве донора водорода, хорошо согласуются с рассчитанными термодинамическими функциями для индивидуальных веществ, таких, как тетралин, декалин. Однако по значениям величин энтальпии и энергии Гиббса представленные в таблицах (6-8) не согласуются, так как для индивидуальных веществ этот показатель уменьшается, а в случае с обесфеноленной фракции ПКС с к.к.270<sup>0</sup>С увеличивается (от отрицательного стремиться к положительному значению) в выбранном температурном интервале. В индивидуальном химическом составе обесфеноленной фракции до 175<sup>0</sup>С ПКС присутствуют различные типы органических соединений, таких, как циклоалканы, ароматические и полиароматические углеводороды. Наличие алкильных заместителей в циклоалкане увеличивает донорную способность, а ароматические и полиароматические углеводороды без алкильных заместителей будут выполнять роль переносчика водорода лучше, чем алкилзамещенные. Кроме того, рассчитанные значения энергии Гиббса, приведенные в таблицах (6-8), показывают, что термодинамически эффективно осуществляется передача водорода от донора водорода к угольным радикалам и ПКС, когда  $\Delta G < 0$ , то есть, донор должен хорошо отдавать и плохо принимать водород.

Таким образом, рассчитаны термодинамические функции модельных органических соединений входящих в состав фракции ПКС с к.к. 270<sup>0</sup>С, полученной из гидрогенизата фракции ПКС с к.к.175<sup>0</sup>С до и после обесфеноливания, в присутствии нанокатализаторов  $\beta$ -FeOОН, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. Согласно представленным результатам термодинамических расчетов, обесфеноленная широкая фракция, полученная из гидрогенизата обесфеноленной фракции ПКС с к.к.175<sup>0</sup>С, является эффективным донором и переносчиком водорода, т.е. способна ингибировать процессы полимеризации, стабилизируя радикалы, которые образуются в результате гидрогенизационных процессов.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Мальшев В.П., Каримова Л.М., Жумапшев К.Ж. Разработка равновесно-кинетической модели для гетерогенных реакций второго порядка // КИМС. - 2011. - №1(274). – С.61-70.
- [2] Гюльмалиев А.М., Головин Г.С., Гладун Т.Г. Теоретические основы химии угля. – М.: МГУ, 2003. – 550 с.
- [3] Малолетнев А.С., Кричко А.А., Гаркуша А.А. Получение синтетического жидкого топлива гидрогенизацией углей. – М.: Недра, 1992. – 128 с.
- [4] Самминт Хан, Абхиджит Саркар, Саркар А., Рой С.Ц. Каталитическая гидрогенизация угля с получением химических продуктов // Химия твердого топлива. – 2011. – №3. – С. 30-35.
- [5] Ахметкаримова Ж.С., Байкенов М.И., МаФэнЮнь. Гидрогенизация модельных объектов и фракции первичной каменноугольной смолы // Вестник Карагандинского университета. – Серия «Химия». – 2013. – №1(69). – С.44-48.
- [6] Ахметкаримова Ж.С., Байкенов М.И., Мулдахметова З.М. Изомеризация фенолов каменноугольной смолы // Доклады НАН РК. – 2014. – №1. – С.70-77.
- [7] Ахметкаримова Ж.С., Байкенов М.И., Мейрамов М.Г., МаФэнЮнь. Изомеризация фенолов фракции каменноугольной смолы // Химия твердого топлива. – 2014. – №3. – С.65-70.
- [8] Гюльмалиев А. М. Термодинамика передачи водорода в полиядерных системах // Химия твердого топлива. – 1982. – №5. – С. 47.
- [9] Жубанов К.А. Глубокая переработка углеводородного сырья перспектива развития нефтехимической отрасли // Промышленность Казахстана. - 2001. -№4. - С. 60 – 63.
- [10] Ботова В.И., Иорданиди Г.К., Сагиндыков А.А. Парамагнитные свойства нефтенасыщенной породы месторождение Каражанбас и их изменение при термоллизе // Нефтехимия. – 1989. – Т.29, № 4. – С. 458-464.
- [11] Гюльмалиев А.М. Электронная структура и реакционная способность углеводородов в реакциях деструктивной гидрогенизации: дисс. ... док.хим. наук. – М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева, 1991. – 311 с.

## REFERENCES

- [1] Malyshev V.P., Karimov L.M., Zhumashev K.J. Integrated use of mineral resources, **2011**. 1 (274). 61-70.
- [2] Gyulmaliev A.M., Golovin G.S., Gladun T.G. Theoretical Foundations of Chemistry of coal. M., Moscow State Mining University, **2003**. 550.
- [3] Maloletnev A.S., Krichko A.A., Garkusha A.A. Preparation of synthetic liquid fuels by hydrogenation of coal. M., Nedra, **1992**. 128.
- [4] Sammint Khan, Abhijit Sarkar, Sarkar A., Roy S.Ts. Solid fuel chemistry, **2011**. 3. 30-35.
- [5] Akhmetkarimova Zh.S., Baykenov M.I., Feng-yung Ma. Bulletin of the Karaganda University, Chemistry, **2013**. 1(69). 44-48.
- [6] Akhmetkarimova Z.S., Baykenov M.I., Muldahmetov Z.M. Reports of NAS RK, **2014**. 1. 70-77.
- [7] Akhmetkarimova Zh.S., Baykenov M.I., Meiramov M.G., Feng-yung Ma. Solid fuel chemistry, **2014**. 3. 65-70.
- [8] Gyulmaliev A.M. Solid fuel chemistry, **1982**. 5. 47.
- [9] Zhubanov K.A. Industry of Kazakhstan, **2001**. 4. 60 - 63.
- [10] Botova V.I., Iordanidi G.K., Sagindykov A.A. Petrochemicals, **1989**. 29(4). 458-464.
- [11] Gyulmaliev A.M. Electronic structure and reactivity of hydrocarbons in destructive hydrogenation reactions: diss. ... Doc. chem. Sciences. M., MChT Mendeleev D.I., **1991**. 311.

## Біріншілік тас көмір шайырының жеңіл фракциясының термодинамикалық функцияларының есептелуі

<sup>1</sup>Ахметкәрімова Ж.С., <sup>1</sup>Молдахметов З.М., <sup>1</sup>Мейрамов М.Г.,  
<sup>1</sup>Ордабаева А.Т., <sup>1</sup>Молдахметов Ж.Х., <sup>2</sup>Байкенов М.И.

<sup>1</sup>ҚР органикалық синтез және көмір химиясы институты, Қарағанды, Қазақстан  
<sup>2</sup>Е.А.Бөкетов атындағы Қарағанды мемлекеттік университеті, Қарағанды, Қазақстан

**Кілт сөздер:** жылу сыйымдылығы, энтальпия, энтропия, Гиббс энергиясы, біріншілік тас көмір шайырының фракциясы

**Түйіндеме:** Мұнай бағаларының үздіксіз жоғарлауы көмір мен ауыр мұнайдан отын және химиялық белгілеуіндегі өнімдерді алу тәжірибелі маңызды болады, бұл жақын болашақтағы энергетика мен мұнай химия өнеркәсіптеріндегі келешегі бар бағыттың бірі ретінде қарастырылады. Қатты жанатын қазбалардан сұйық отындарды алу бастапқы өнімнің молекулалардың бөлінуіне, сутегі көлемінің біршама жоғарлауына, оттегіні, азотты, күкіртті және күлді минералды заттарды кетіруге әсер етеді. Бұл мақалада  $\beta$ -FeOOH, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> және Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> нанокатализаторлар қатысында 298K нен 1000K-ге дейінгі температура аралығында ЖШС «Сары-Арқа спецкокс» біріншілік тас көмір шайырының жеңіл фракциясының гидрогенизациясы жүргізілген. Фенолдары тас көмір шайырының құрамынан бөліп алу мақсатында спирттің сулы ертіндісімен экстракция жүргізді. Біріншілік тас көмір шайыр фракциясы мен фенолсыздандырылған біріншілік тас көмір шайырының фракциясының энтропия, энтальпия, үрдістің жылу сыйымдылығы және Гиббс энергия сияқты термодинамикалық функциялар есептелінді. Фенолсыздандырылған біріншілік тас көмір фракция гидрогенизатынан қайнау температурасының соны 175<sup>0</sup>С алынған кең фенолсыз фракция сутегінің эффективті беруші және тасымалдаушы екендігі анықталды. Гидрогенизация үрдістері нәтижесінде түзілетін радикалдарды тұрақтандырып, полимеризация үрдістерін баяулата алады.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ СТАТЬИ «Расчет термодинамических функций легкой фракции первичной каменноугольной смолы»

ФИО	Должность	Ученая степень, звание	Организация
Ахметкаримова Жанар Саматовна	СНС	Доктор PhD	Институт органического синтеза и углехимии РК, <a href="mailto:zhanarnf@mail.ru">zhanarnf@mail.ru</a>
Мулдахметов Зейнулла Мулдахметович	Директор института	Академик НАН РК	Институт органического синтеза и углехимии РК, <a href="mailto:iosu8990@mail.ru">iosu8990@mail.ru</a>
Мейрамов Мажит Габдулович	Заведующий лабораторией	к.х.н.	Институт органического синтеза и углехимии РК, <a href="mailto:majit_m@mail.ru">majit_m@mail.ru</a>
Ордабаева Айгуль Танирбергеновна	ВНС	к.х.н.	Институт органического синтеза и углехимии РК, <a href="mailto:aigul_serik_kz@mail.ru">aigul_serik_kz@mail.ru</a>
Мулдахметов Жаслан Халелович	МНС	-	Институт органического синтеза и углехимии РК, <a href="mailto:zhaslan_m@mail.ru">zhaslan_m@mail.ru</a>
Байкенов Мурзабек Исполович	Заведующий кафедрой	д.х.н., профессор	Қарағандынский государственный университет им.Е.А.Букетова <a href="mailto:murzabek_b@mail.ru">murzabek_b@mail.ru</a>