



ной композиции. Добавление пеногасителя также позволяет увеличить скорость подачи кислоты в реакционную смесь в несколько раз, тем самым значительно сокращая время синтеза продукта. При этом увеличиваются как выход продукта, так и загрузка реактора, которая достигает 90–95%. Обеспечивается более высокая гомогенизация продукта по сравнению с прототипом и повышается его качество за счет улучшения физико-химических свойств.

#### Список литературы

1. Кравцов В. В., Черкасов Н. М., Гладких И. Ф., Шингаркина О. В. Неметаллические материалы и покрытия

в противокоррозионной технике. СПб. : Недра, 2008. С. 5–6.

2. Ржевская С. В. Материаловедение : учебник для вузов. М. : Логос, 2004. С. 131.
3. Черкасов Н. М., Гладких И. Ф., Гумеров К. М., Субаев И. У. Асмот и новые изоляционные материалы для подземных трубопроводов. М. : Недра, 2005. С. 155.
4. Гун Р. Б. Нефтяные битумы : учеб. пособие для рабочего образования. М. : Химия, 1989. С. 152.
5. Семенова И. В., Флорианович Г. М., Хорошилов А. В. Коррозия и защита от коррозии / под ред. И. В. Семановой. М. : Физматлит, 2002. С. 237.
6. ГОСТ Р 51164-98. Трубопроводы стальные магистральные. Общие требования к защите от коррозии. М., 1999.

УДК 543.4

## РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНЫЙ АНАЛИЗ СИСТЕМ СЕРЕБРО–КАДМИЙ И НИКЕЛЬ–КОБАЛЬТ ХЕМОМЕТРИЧЕСКИМИ АЛГОРИТМАМИ МЕТОДА НЕЗАВИСИМЫХ КОМПОНЕНТ

А. М. Цикин, Ю. Б. Монахова,  
М. М. Бурашникова, С. П. Муштакова

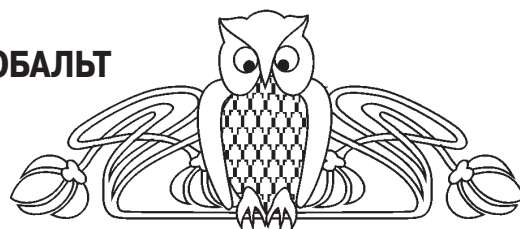
Саратовский государственный университет  
E-mail: yul-monakhova@mail.ru

Качественный и количественный анализ химических веществ и их смесей является основной задачей химика-аналитика, при этом одним из методов, пригодным для решения поставленных задач, является спектроскопия в различных областях. Благодаря своим преимуществам (экспрессность, доступность методик анализа и приборов, их относительно невысокая стоимость) спектроскопический анализ находит широкое применение. Однако при любом его виде (спектроскопия в инфракрасной, ультрафиолетовой и видимой областях спектра, спектроскопия ядерного магнитного резонанса, рентгенофлуоресцентная спектроскопия) проблема анализа смесей соединений, характеризующихся высокой степенью взаимного перекрытия спектров, существует, и ее решение актуально. В частности, при рентгенофлуоресцентном анализе систем, в состав которых входят попарно соединения серебра и кадмия, кобальта и никеля, возникает проблема определения указанных компонентов ввиду высокой степени взаимного перекрытия их спектров. Для решения этой задачи были апробированы различные хемометрические алгоритмы декомпозиции спектральных смесей сложного состава, базирующиеся на методе независимых компонент. **Ключевые слова:** хемометрика, рентгенофлуоресцентный анализ, метод независимых компонент.

### X-Ray Fluorescence Analysis of Silver–Cadmium and Nickel–Cobalt Systems by Chemometric Algorithms of Independent Component Method

А. М. Tsikin, Yu. B. Monakhova,  
M. M. Burashnikova, S. P. Mushtakova

Qualitative and quantitative analysis of chemical substances and mixtures is the main objective for analytical chemist, and one of the



main methods suitable for the task is spectroscopy in different areas. Due to its advantages (speed, the accessibility of analysis techniques and instruments and their relatively low cost) spectroscopic analysis is widely used. However, regardless of its form (spectroscopy in the infrared, ultraviolet and visible regions of the spectrum, nuclear magnetic resonance spectroscopy, x-ray fluorescence spectroscopy) the problem of complex mixtures analysis, which characteristic is a high degree of individual components spectra overlap, exists, and its solution is important. In particular, during X-ray fluorescence analysis of systems which contain pairwise silver compound and cadmium, cobalt and nickel, the problem of determining these components exists due to the high degree of reciprocal overlapping of spectra. To solve this problem we tested the variety of complex mixtures spectral decomposition chemometric algorithms, based on the independent component method.

**Key words:** chemometrics, X-ray fluorescence analysis, independent component method.

#### Введение

Метод независимых компонент (МНК) в его линейном варианте базируется на представлении модели анализируемой смеси в виде следующего произведения.

$$X = A \cdot S,$$

где  $X$  –  $M \times N$  – матрица из  $M$  измеренных спектров смесей,  $S$  –  $K \times N$  – матрица из  $K$  неизвестных спектров «чистых» компонент,  $A$  –  $M \times K$  – матрица смешивания (неизвестных концентраций),  $N$  – число отсчетов в спектрах по длине волны.



Основная идея метода независимых компонент может быть проиллюстрирована следующим образом. Спектры «чистых» компонент  $S$  слабо зависимы. Во всех физических случаях смешивания суперпозиции спектров (измерения для смесей  $X$ ) более зависимы, чем спектры «чистых» компонент. МНК ищет преобразование, которое компенсирует зависимости, обусловленные смешиванием. Иными словами, ищется матрица разделения  $W$  (результатирующая оценка метода для  $A^{-1}$ ) такая, что она минимизирует меру зависимости  $Y = WX$  (результатирующих оценок метода для  $S$ ).

В качестве количественной меры статистической зависимости в МНК используется взаимная информация  $I(Y)$ . Сигналы (строки  $Y$ ) статистически независимы и имеют нулевую взаимную информацию, когда их плотность совместного распределения равна произведению плотностей индивидуальных распределений. Взаимная информация зависимых сигналов положительна.

Алгоритм **MILCA** (MutualInformation Least-Dependent Component Analysis) использует точные численные аппроксимации значений взаимной информации поиском ближайших соседей разного уровня, декомпозицию искомой матрицы вращения в двумерных подпространствах, что обеспечивает высокую эффективность и производительность [1].

**SNICA** (Stochastic Non-Negative Independent Component Analysis) разработан специально для анализа смесей неотрицательных компонент, имеющих максимум функции распределения интенсивностей близи нуля (случай, типичный в спектроскопии). Использование условия неотрицательности в тандеме с гипотезой наименьшей зависимости «чистых» компонент позволило исключить необходимость МГК декорреляции и находить решения в случае зависимых компонент. SNICA использует Монте-Карло минимизацию, подстройку параметров оптимизации по алгоритму имитации отжига, что позволяет избегать локальных минимумов целевой функции (взаимной информации), соответствующей ложным решениям [2].

**SIMPLISMA** (Simple-To-Use Interactive Self-Modeling Mixture Analysis) относится к семейству так называемых методов разрешения кривых. Эти методы применяются к серии спектральных наблюдений смеси, в которой концентрации компонент изменяются и направлены на извлечение чистых спектров компонент. Поскольку эта задача решается для определенного количества компонент, количество компонент смеси обязательно определяется во время разрешения кривых.

Основная идея алгоритма довольно проста. SIMPLISMA предполагает, что существуют такие переменные в наборе данных (например, спектральные длины волн или волновые числа), вклад в которые вносит только один из компонентов смеси. Такие переменные называются чистыми. Спектральная интенсивность чистых переменных представляет собой профиль концентрации. Если каждый компонент смеси содержит хотя бы одну чистую переменную в наборе данных, то соответствующие спектры компонент могут быть получены с помощью регрессии.

Основная проблема заключается в том, как найти чистые переменные. SIMPLISMA использует функцию чистоты, которая рассчитывается по определенной формуле. Обнаружено, что отношение стандартного отклонения к среднему для той же переменной коррелирует с чистотой переменной. Первая чистая переменная берется как максимум первого чистого спектра. Она должна соответствовать одному из компонентов смеси.

SIMPLISMA раскладывает компоненты один за другим. Для нахождения следующей чистой переменной эффект от выбранного компонента математически исключается из чистого спектра. Одновременно он также исключается из спектра стандартного отклонения, и, таким образом, получается так называемый спектр стандартного отклонения, откорректированный по чистоте. Эта кривая является отражением остаточной дисперсии данных, которая не моделируется с помощью ранее выбранных компонент [3].

**JADE** (Joint Approximate Diagonalization of Eigenmatrices) – это алгоритм, основанный на совместной диагонализации кумулянтных матриц для офлайн МНК. Хорошая статистическая производительность достигается путем вовлечения всех кумулянтов 2-го и 4-го порядка, а быстрая оптимизация – за счет применения метода совместной диагонализации.

Наиболее сильной стороной алгоритма JADE для применения в качестве МНК является то, что он работает на основании стандартных параметров и имеющихся данных, без настройки (off-the-shelf). Самым слабым местом в текущей реализации является то, что набор источников (но несенсоров) на практике ограничен (объемом доступной памяти) на уровне 40–50 в зависимости от компьютера.

Алгоритм JADE был первоначально разработан для использования в цифровой связи для обработки сложных сигналов. Теперь доступны и другие реализации, настроенные на более эффективную обработку других вещественных сигналов [4].



**RADICAL** (The Robust Accurate, Direct ICA algorithm) представляет собой относительно новый алгоритм для анализа независимых компонент. Он точный, быстрый, надежный к выбросам, имеет простое теоретическое обоснование получаемой информации. Алгоритм имеет очень простую реализацию и ее относительно легко понять.

После отбеливания алгоритм минимизирует сумму энтропий маргиналов смеси относительно вращений. Данный процесс является сравнительно быстрым, так как алгоритм **RADICAL** принадлежит к группе непараметрических методов. По мнению авторов, он превосходит многие из алгоритмов параметрических методов, таких как **FastICA**, **JADE** и другие [5].

Алгоритм **FastICA** (FastIndependent Component Analysis) является высокоэффективным компьютеризированным способом выполнения оценок методом независимых компонент. Он использует схему итерации фиксированной точки, которая, по данным независимых экспериментов, является в 10–100 раз более быстрой, чем обычные методы градиентного снижения. Еще одно преимущество алгоритма **FastICA** состоит в том, что он также может быть использован для выполнения поиска предсказанного значения, таким образом представляя собой метод анализа данных общего назначения, который может быть использован как для исследовательского моделирования, так и для оценки независимых компонент (или источников) [6].

**MCR-ALS** (Multivariate Curve Resolution – Alternating Least Squares) был использован в данной статье для сравнения качества результатов алгоритмов МНК с результатами, которые могут быть получены с использованием альтернативных подходов. **MCR-ALS** представляет собой алгоритм, который разрешает базовую билинейную модель многомерного разрешения кривых с использованием ограниченного алгоритма чередующихся наименьших квадратов. Ограничения используются для улучшения интерпретируемости концентрационных и спектральных профилей, которые могут отвечать за химические свойства (например, неотрицательность, унимодальность и т.д.) или иметь математическую природу (например, локальный ранг и селективные окна, трилинейная структура и т.д.).

Гибкость применения ограничений и возможность для обработки самых разнообразных структур мультинаборов – основные преимущества этого алгоритма. Качественное использование **MCR-ALS** возможно при правильном выборе и применении ограничений [7].

Вышеназванные алгоритмы были использованы для обработки данных рентгенофлуоресцентной спектроскопии. В целом рентгенофлуоресцентный анализ характеризуется высокой избирательностью, однако существуют смеси, в которых происходит наложение спектров индивидуальных компонент, что приводит к затруднениям в количественном и качественном анализе. Примером таких систем являются двухкомпонентные смеси серебра и кадмия, кобальта и никеля, однако вместе с тем мы не исключаем, что такая ситуация может наблюдаться при анализе и других аналитов, поэтому апробация хемометрических методов разделения спектров индивидуальных компонент в смесях представляется актуальной задачей, которая находится в русле современных тенденций аналитической химии.

Методология настоящего исследования сведена к анализу смоделированных смесей соединений, определению методов, показавших лучшие результаты, и их применению для анализа реальных растворов соединений серебра и кадмия, кобальта и никеля. Для увеличения соотношения сигнал–шум была применена предварительная математическая обработка исходных спектров растворов с использованием встроенных в программу **Matlab** опций предварительной обработки спектров [8], в том числе сплайн-интерполяции (*spline*), метода скользящей средней (*moving*), метода локально взвешенного рассеяния с использованием полиномов первого (*lowess*) и второго (*loess*) порядков, сглаживания Савицкого–Голая (*sgolay*), а также методов *lowess* и *loess*, резистентных к выбросам (*rloess* и *rloess*).

#### Материалы и методы

Спектры индивидуальных металлов, которые были использованы для моделирования смесей, и растворов их соединений, которые использовались как реальные смеси, были получены на рентгенофлуоресцентном спектрометре **Shimadzu Raynu EDX-700**. Сканирование осуществлялось в пределах 0.00–40.96 килоэлектронвольт (кэВ) с шагом сканирования 0.02 кэВ. Моделирование смесей проводили сложением спектров индивидуальных металлов по закону аддитивности.

Программы, реализующие алгоритмы **MILCA** и **SNICA**, использовались в модификации с **MATLAB** (The MathWorks, Natick, MA, USA) интерфейсами. Другие доступные ICA алгоритмы: **SIMPLISMA**, **JADE**, **RADICAL**, **FastICA**, **MCR-ALS** – также применялись в виде **MATLAB** кода.



Оценка идентичности теоретических и экспериментальных спектров проведена с использованием коэффициента корреляции ( $R$ ). Метод его расчета реализован в виде алго-

ритма в программе MATLAB, позволяющего проводить расчет этого параметра автоматически и идентифицировать выделенные сигналы.

$$R = \frac{\sum_c \sum_r (A(c, r) - A_m) \cdot (B(c, r) - B_m)}{\sqrt{(\sum_c \sum_r (A(c, r) - A_m)^2) \cdot (\sum_c \sum_r (B(c, r) - B_m)^2)}}$$

где  $A_m = \text{mean2}(A)$ ,  $B_m = \text{mean2}(B)$ .

Для расчета сходства экспериментальной и расчетной матриц концентраций использовали Амари индекс (Amari) [9].

$$Amari = \frac{1}{2d} \sum_{i,j=1}^d \left( \frac{|p_{ij}|}{\max_k |p_{ik}|} + \frac{|p_{ij}|}{\max_k |p_{kj}|} \right) - 1,$$

где  $p_{ij} = (\hat{A}^{-1}A)_{ij}$ .

Для реальных растворов матрица концентраций, получающаяся в результате разложения исходной матрицы спектров, была преобразована в массовые концентрации (с, г/мл).

Стоит отметить, что допустимыми считаются значения коэффициента корреляции выше 0.95 (это означает, что компонент идентифицирован с

вероятностью более 99% [10]) и индекса Амари менее 0.2 [11].

### Результаты и их обсуждение

#### 1. Система никель-кобальт.

Для определения алгоритмов, наиболее подходящих для анализа рассматриваемых смесей, была проанализирована работа всех вышеназванных хемометрических алгоритмов на примере смоделированных систем, а полученные результаты были сведены в табл. 1. При анализе представленных в табл. 1 результатов видно, что в лучшую сторону существенно отличаются результаты, которые были получены с помощью алгоритмов MILCA, SIMPLISMA и JADE. Именно эти алгоритмы и были апробированы в дальнейшем для анализа растворов, содержащих соединения кобальта и никеля.

Таблица 1

Результаты анализа смоделированных смесей никеля и кобальта различными хемометрическими алгоритмами

| Показатель     | MILCA | SNICA | SIMPLISMA | JADE | RADICAL | Fast-ICA | MCR-ALS |
|----------------|-------|-------|-----------|------|---------|----------|---------|
| $R(\text{Co})$ | 1.00  | 0.41  | 1.00      | 1.00 | 1.00    | 1.00     | 0.98    |
| $R(\text{Ni})$ | 1.00  | 0.98  | 1.00      | 1.00 | 1.00    | 1.00     | 1.00    |
| $Amari$        | 0.06  | 0.75  | 0.01      | 0.02 | 0.73    | 0.73     | 0.24    |

В табл. 2 представлены результаты анализа растворов вышеназванными алгоритмами. Исходя из этих данных, можно сделать вывод о

хорошем качестве декомпозиции, незначительно отличающемся от качества разложения смоделированных систем.

Таблица 2

Результаты анализа реальных растворов кобальта с никелем с применением методов MILCA, SIMPLISMA и JADE

| Система  | Показатель                            | MILCA           | SIMPLISMA       | JADE            |
|--|---------------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| I<br>( $10^{-2}$ г/мл $\text{CoCl}_2$ , $10^{-2}$ г/мл $\text{NiSO}_4$ )                       | $R(\text{Co})$                        | 0.99            | 1.00            | 1.00            |
|  | $R(\text{Ni})$                        | 1.00            | 1.00            | 1.00            |
|  | c ( $\text{CoCl}_2$ ), $10^{-2}$ г/мл | $1.06 \pm 0.12$ | $1.02 \pm 0.08$ | $1.05 \pm 0.09$ |
|  | c ( $\text{NiSO}_4$ ), $10^{-2}$ г/мл | $0.95 \pm 0.10$ | $0.99 \pm 0.05$ | $0.97 \pm 0.07$ |
| II<br>( $6.7 \cdot 10^{-3}$ г/мл $\text{CoCl}_2$ , $1.33 \cdot 10^{-2}$ г/мл $\text{NiSO}_4$ ) | $R(\text{Co})$                        | 1.00            | 1.00            | 1.00            |
|  | $R(\text{Ni})$                        | 1.00            | 1.00            | 1.00            |
|  | c ( $\text{CoCl}_2$ ), $10^{-2}$ г/мл | $0.64 \pm 0.08$ | $0.67 \pm 0.03$ | $0.66 \pm 0.05$ |
|  | c ( $\text{NiSO}_4$ ), $10^{-2}$ г/мл | $1.36 \pm 0.05$ | $1.34 \pm 0.03$ | $1.35 \pm 0.06$ |



Также на рис. 1 приведены спектры кобальта и никеля, выделенные из растворов, содержащих соединения этих металлов, в сравнении со спектрами чистых металлов, полученных рентгеноф-

луоресцентной спектроскопией. Очевидно, что декомпозиция проведена успешно, и выделенные сигналы практически в точности повторяют спектры чистых металлов.

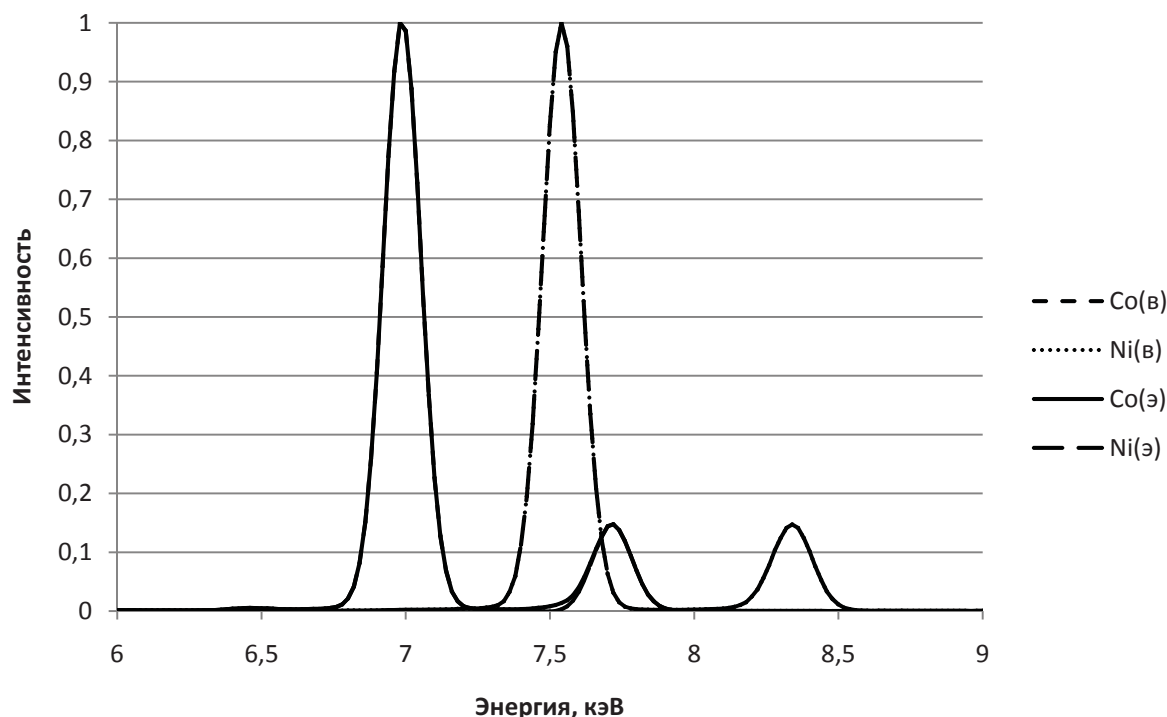


Рис. 1. Экспериментальные спектры чистых и спектры выделенных из растворов Co и Ni с помощью алгоритма SIMPLISMA

Полученные данные однозначно свидетельствуют о возможности применения хемометрических алгоритмов MILCA, SIMPLISMA и JADE для решения задач качественного и количественного анализа кобальт-никелевых систем.

## 2. Система серебро–кадмий.

Аналогично системе никель–кобальт в данном случае сначала была исследована работа различных хемометрических методов для выявления наиболее подходящих для анализа данных смесей. Результаты анализа приведены в табл. 4.

Таблица 3

Результаты анализа смоделированных смесей серебра и кадмия различными хемометрическими алгоритмами

| Показатель     | MILCA | SNICA | SIMPLISMA | JADE | RADICAL | Fast-ICA | MCR-ALS |
|----------------|-------|-------|-----------|------|---------|----------|---------|
| $R(\text{Cd})$ | 0.94  | 0.91  | 1.00      | 1.00 | 0.97    | 0.99     | 1.00    |
| $R(\text{Ag})$ | 0.89  | 0.91  | 1.00      | 0.88 | 0.96    | 0.91     | 1.00    |
| $Amari$        | 0.58  | 0.73  | 0.06      | 0.26 | 0.83    | 0.86     | 0.17    |

Полученные результаты свидетельствуют о том, что для анализа подобных смесей подходит только алгоритм SIMPLISMA. В связи с этим именно этот алгоритм был использован для анализа приготовленных растворов соединений никеля и кобальта. Полученные результаты были сведены в табл. 4, из которой видно, что

алгоритм SIMPLISMA может быть успешно применен для анализа подобных систем. Это подтверждается и сравнением выделенных из растворов спектров серебра и кадмия и спектров серебра и кадмия, полученных рентгенофлуоресцентным анализом чистых металлов (рис. 2).



Таблица 4

**Анализ реальных растворов кадмия и серебра с применением методов MILCA и SIMPLISMA**

| Система   | Показатель                                     | SIMPLISMA       |
|---|--|-----------------|
| I<br>( $10^{-2}$ г/мл $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2$ , $10^{-2}$ г/мл $\text{AgCl}_2$ )                       | $R(\text{Cd})$                                 | 1.00            |
|   | $R(\text{Ag})$                                 | 1.00            |
|   | $c(\text{Cd}(\text{NO}_3)_2)$ , $10^{-2}$ г/мл | $1.05 \pm 0.08$ |
|   | $c(\text{AgCl}_2)$ , $10^{-2}$ г/мл            | $0.98 \pm 0.04$ |
| II<br>( $6.7 \cdot 10^{-3}$ г/мл $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2$ , $1.33 \cdot 10^{-2}$ г/мл $\text{AgCl}_2$ ) | $R(\text{Cd})$                                 | 1.00            |
|   | $R(\text{Ag})$                                 | 1.00            |
|   | $c(\text{Cd}(\text{NO}_3)_2)$ , $10^{-2}$ г/мл | $0.65 \pm 0.05$ |
|   | $c(\text{AgCl}_2)$ , $10^{-2}$ г/мл            | $1.37 \pm 0.06$ |

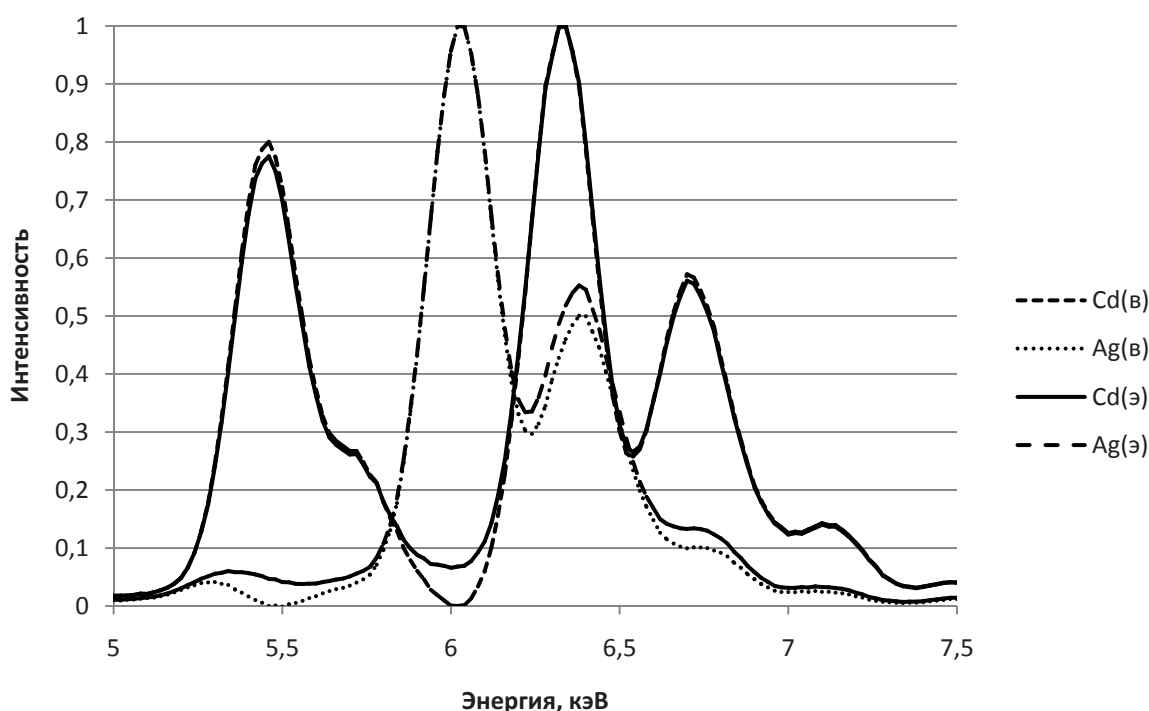


Рис. 2. Экспериментальные спектры чистых и спектры выделенных из растворов Cd и Ag с помощью алгоритма SIMPLISMA

**Выводы**

В настоящей работе были апробированы различные хемометрические алгоритмы, позволяющие производить декомпозицию смесей компонентов. Проанализированы системы кобальта и никеля, серебра и кадмия с различным содержанием данных веществ. Для предварительной выборки методов, лучшим образом подходящих для решения поставленных задач, сначала было проведено разделение смоделированных смесей металлов.

Отобранные в результате анализа смоделированных систем алгоритмы были использованы

для разложения спектров компонентов реальных систем: растворов, содержащих соединения кобальта и никеля, серебра и кадмия. Обобщая полученные результаты, мы рекомендуем алгоритм SIMPLISMA для анализа данных рентгенофлуоресцентной спектроскопии, который показал стабильно хорошие результаты.

Малое время как самого анализа ( $\approx 5$  мин), так и последующей математической обработки ( $\approx 10$  мин), высокое качество получаемых результатов (все компоненты были идентифицированы с вероятностью более 90%, погрешность количественного анализа не превысила 5%) позволяют



рекомендовать метод рентгенофлуоресцентного анализа в сочетании с хемометрическими методами обработки данных для анализа смесей металлов даже в случае перекрытия спектров индивидуальных компонентов.

#### Список литературы

1. Stogbauer H., Kraskov A., Astakhov S. A., Grassberger P. Least-dependent component analysis based on mutual information // Phys. Rev. E. 2004. Vol. 70. P. 066123–066140.
2. Astakhov S. A., Stogbauer H., Kraskov A., Grassberger P. Monte Carlo Algorithm for Least Dependent Non-Negative Mixture Decomposition // Anal. Chem. 2006. Vol. 78. P. 1620–1627.
3. Winding W., Guilment J. Interactive Self-Modeling Mixture Analysis // Anal. Chem. 1991. Vol. 63. P. 1425–1432.
4. Cardoso J.-F. High-Order Contrasts for Independent Component Analysis // Neural Computation. 1999. Vol. 11. P. 157–192.
5. Learned-Miller E. G., Fisher J. W. Using Spacing Estimates of Entropy // J. Machine Learning Research. 2003. Vol. 4. P. 1271–1295.
6. Hyvarinen A., Oja E. A Fast Fixed-Point Algorithm for Independent Component Analysis // Neural Computation. 1997. Vol. 9. P. 1483–1492.
7. Tauler R. Multivariate curve resolution applied to second order data // Chemometr. Intell. Lab. Syst. 1995. Vol. 30. P. 133–146.
8. Orfanidis S. J. Introduction to Signal Processing. N.Y. : Prentice-Hall, 1996. 63 p.
9. Malinowski E. R. Obtaining the key set of typical vectors by factor analysis and subsequent isolation of component spectra // Anal. Chim. Acta. 1982. Vol. 134. P. 129–137.
10. Milman B. Identification of chemical compounds // Trends in Analytical Chemistry. 2005. Vol. 24. P. 493–508.
11. Monakhova Yu. B., Astakhov A. S., Kraskov A. V., Mush-takova S. P. Independent components in spectroscopic analysis of complex mixtures // Chemometr. Intell. Lab. Syst. 2010. Vol. 103. P. 108–115.

УДК 665.63-404

## ПРЕВРАЩЕНИЯ Н-ГЕКСАНА И СТАБИЛЬНОГО ГИДРОГЕНИЗАТА НА ПОВЕРХНОСТИ ВЫСОКОМОДУЛЬНЫХ ЦЕОЛИТНЫХ СИСТЕМ

Р. И. Кузьмина, С. В. Игнатьев

Саратовский государственный университет  
E-mail: ignatiev-s-v@yandex.ru

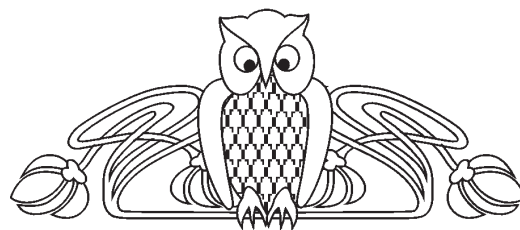
Исследованы превращения н-гексана и стабильного гидрогенизата (температура кипения 85–180 °С) в интервале температур 250–500 °С. Установлено, что процесс превращения н-гексана включает в себя реакции крекинга, изомеризации и ароматизации. Направление химических превращений зависит от параметров активации и условий протекания процесса. Конверсия стабильного гидрогенизата позволяет получать высокооктановые компоненты топлива.

**Ключевые слова:** н-гексан, стабильный гидрогенизат, цеолит, ZSM-5, крекинг, изомеризация, ароматизация, топлива.

### Transformation of n-hexane and Stable Section of Hydrogenated Feed on the Surface of High-zeolite Systems

R. I. Kuzmia, S. V. Ignatyev

Transformation of n-hexane and stable section of hydrogenated feed (boiling temperature) in the temperature range of 250 to 500 °C are investigated. It is established, that the process of n-hexane transformation includes reactions of cracking, isomerisation and aromatization. Direction of chemical transformations depends on



the activation parameters and conditions of the process. Conversion of stable section of hydrogenated feed allows to receive high-octane components of the fuel.

**Key words:** n-hexane, stable section of hydrogenated feed, zeolite, ZSM-5, cracking, isomerisation, aromatization, fuels.

Особенностью современного этапа нефтепереработки является повышение требований к эксплуатационным и экологическим характеристикам моторных топлив. Наряду с этим сокращаются мировые запасы углеводородного сырья и возникает необходимость в увеличении глубины переработки нефти.

Актуальными являются исследования, направленные на создание эффективных многокомпонентных каталитических систем и выявление физико-химических особенностей гетерогенных реакций углеводородов, протекающих на их поверхности, с образованием *изо*-парафинов, ароматических углеводородов и алкилциклопарафинов с высоким октановым числом.