Определение геометрических размеров молекул изомеров октана

Выполнила:
ученица 8 класса «А»
ГОУ Лицей №1524
Смирнова Анастасия

Научные руководители:
учитель химии ГОУ Лицей №1524
Котикова Ирина Валерьевна

Введение

Введение

- Октановое число — показатель, характеризующий детонационную стойкость топлива для двигателей внутреннего сгорания.

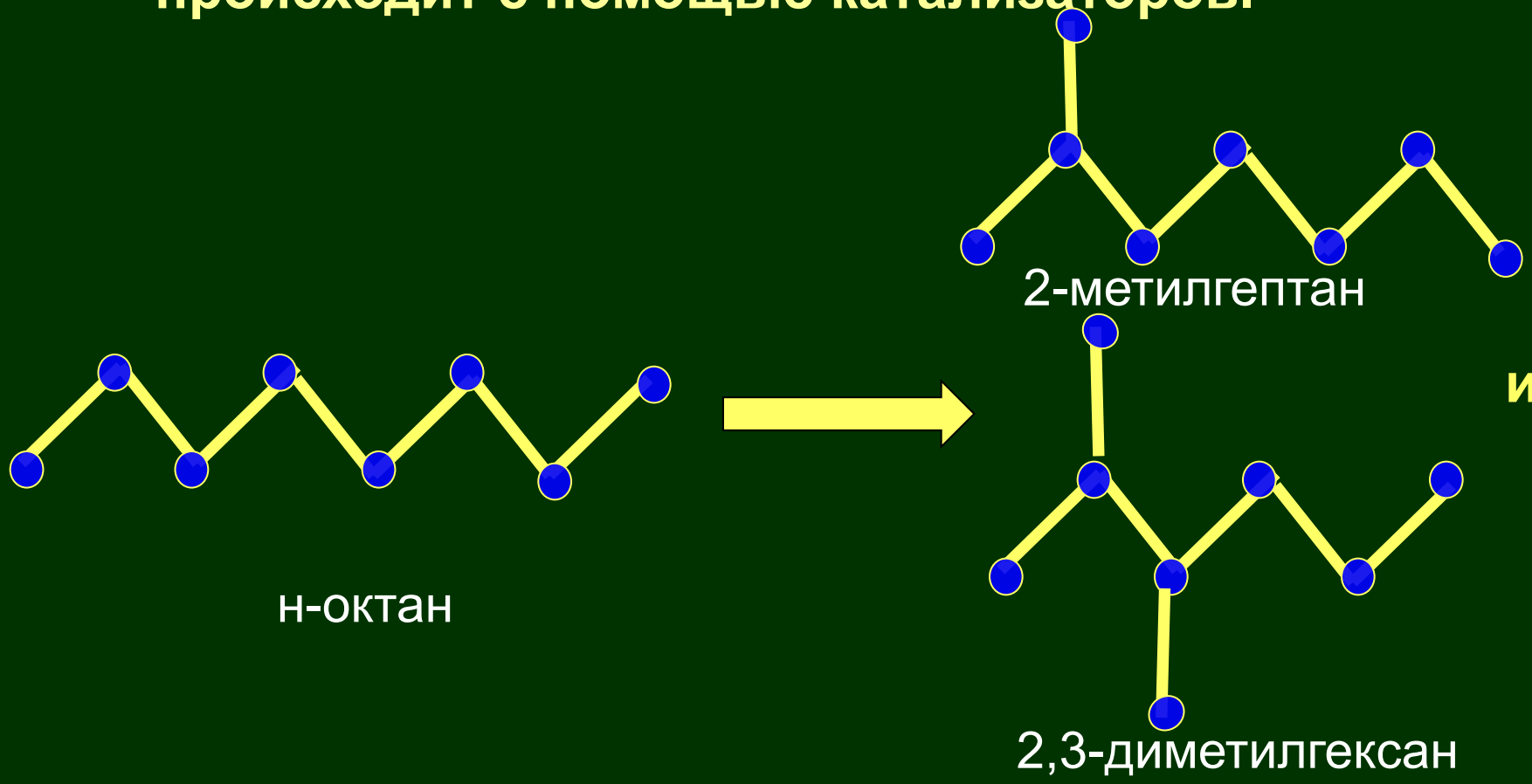
Пути повышения октанового числа

ввести в топливо некоторое количество специальных добавок

переработать само низкооктановое топливо

Изомеризация

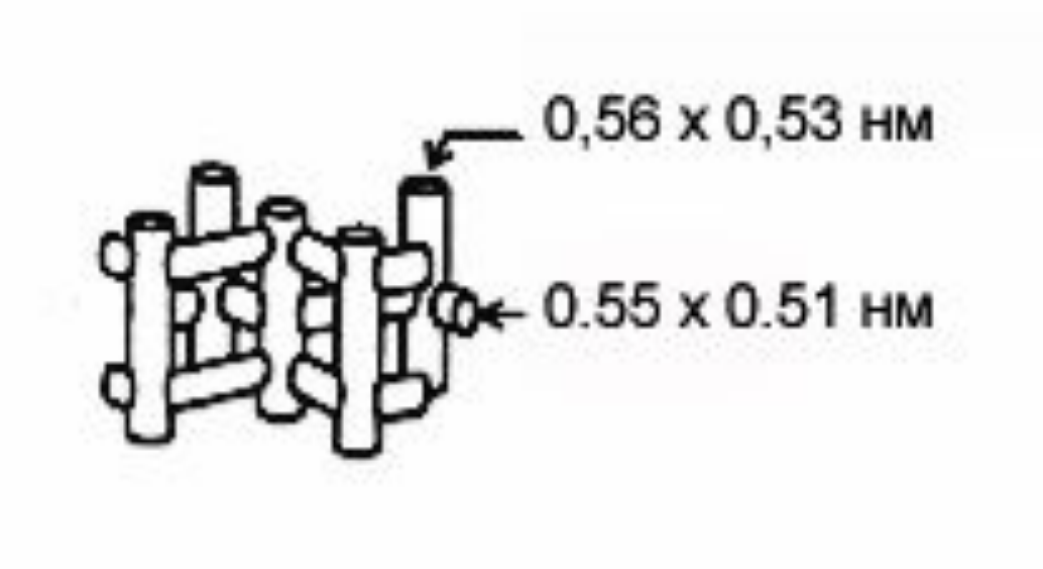
- **Скелетная изомеризация – процесс изменения строения молекулы без изменения ее состава, происходит с помощью катализаторов.**



и др.

Катализаторы

- **Катализатор – химическое вещество, ускоряющее реакцию, но не входящее в состав продуктов реакции.**



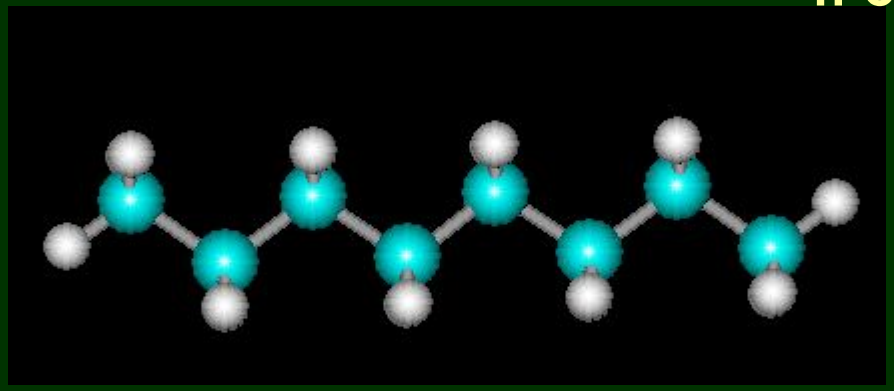
Система пор цеолита типа ZSM-5

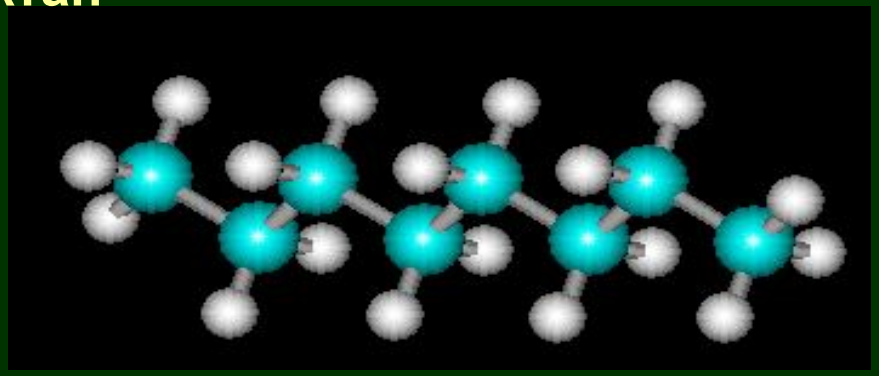
Цель работы - расчет размера молекул изомеров октана и сопоставление этой величины с диаметром пор наиболее распространенных типов цеолитных катализаторов

Изомеры октана

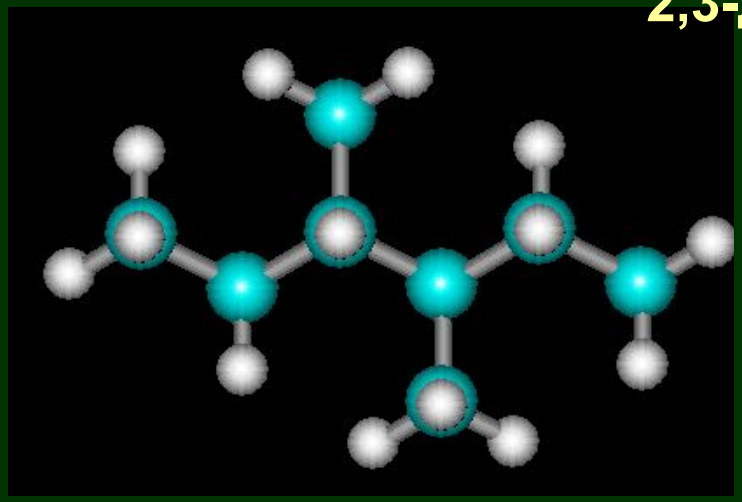
- Октаны - углеводороды состава C_8H_{18} (18 изомеров)

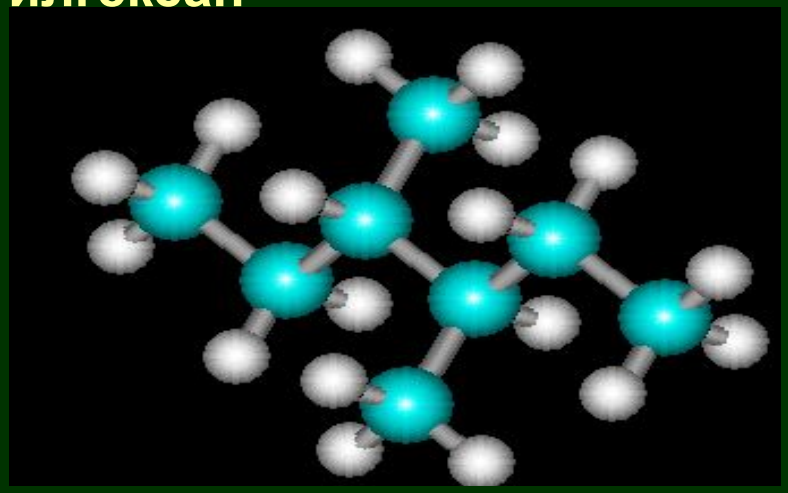
н-октан





2,3-диметилгексан





Приближения и допущения:

- Углы между любыми связями C-C и C-H одинаковы (угол a) и равны 109,45°.
- Длина связи углерод-водород равна 1,09 Å (связи синего цвета).
- Длина связи углерод-углерод равна 1,54 Å (связи розового цвета).
- Радиус атома водорода равен rH = 0,37 Å.
- При расчетах все числа сокращались до сотых.

Используемые формулы и соотношения:

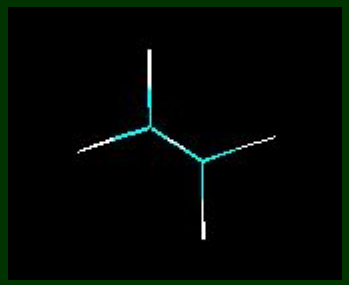
Для расчета геометрических размеров молекул в нашей работе мы использовали следующие формулы:

- Теорема Пифагора: $c^2=a^2+b^2$, где c-гипотенуза прямоугольного треугольника, a и b-катеты (1).
- Теорема косинусов: $a^2 = b^2 + c^2 - 2\cdot b\cdot c\cdot \cos\angle\alpha$, где ά-угол, противолежащий стороне a (2).
- Радиус вписанной окружности правильного треугольника, выраженный через его сторону t равен $r=\sqrt{3}/6*t$.
- Диагональ прямоугольника, вписанного в окружность, равна диаметру этой окружности.

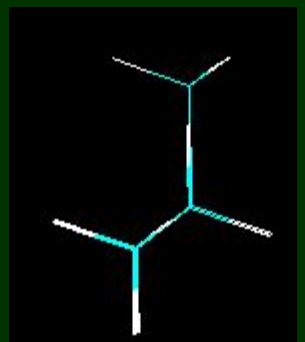
Ход работы

- Для каждой из молекул строилась ее проекция на плоскость, для расчетов выбиралась проекция, имеющая наименьшие геометрические размеры. В выбранной проекции рассчитывалось расстояние между наиболее удаленными точками.
- Вычисления проводились исходя из данных о длинах связей, определенных как расстояния между центрами атомов, затем учитывался размер концевых атомов водорода.
- На последнем этапе работы сравнивались размеры молекул с размерами пор цеолитных катализаторов.

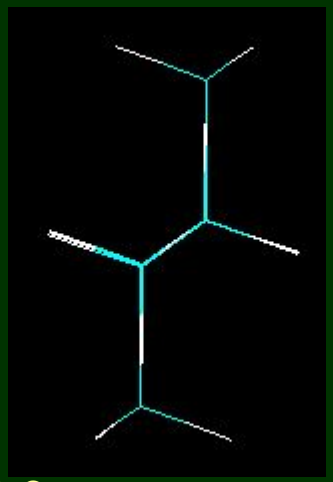
Проекции всех молекул октана



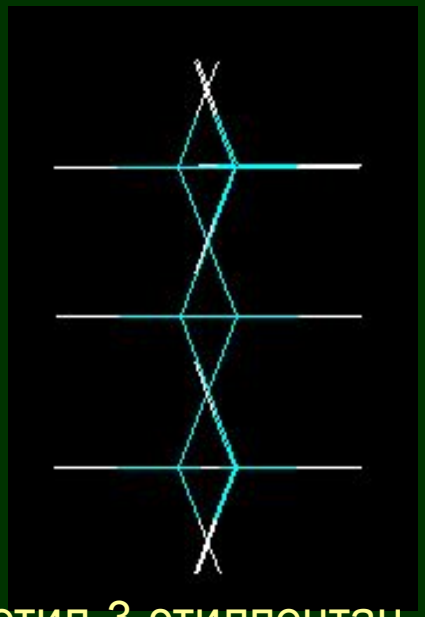
н-октан



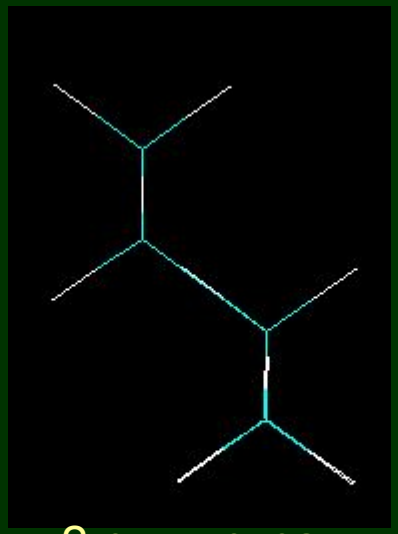
2-метилгептан



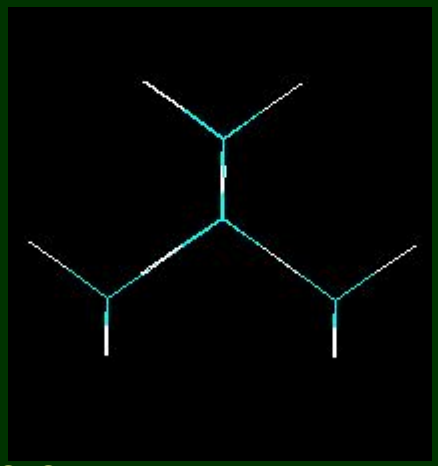
2,3-диметилгексан



2-метил-3-этилпентан

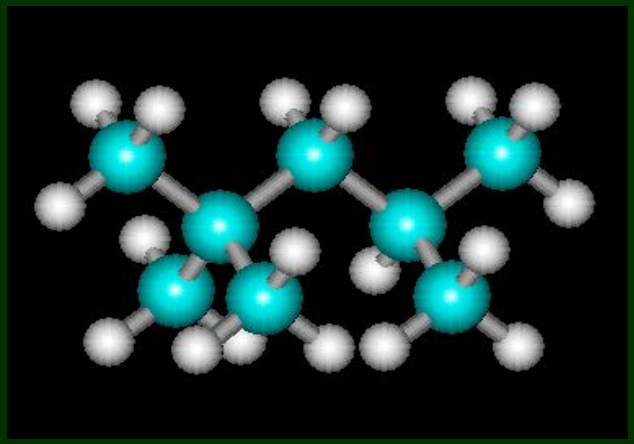


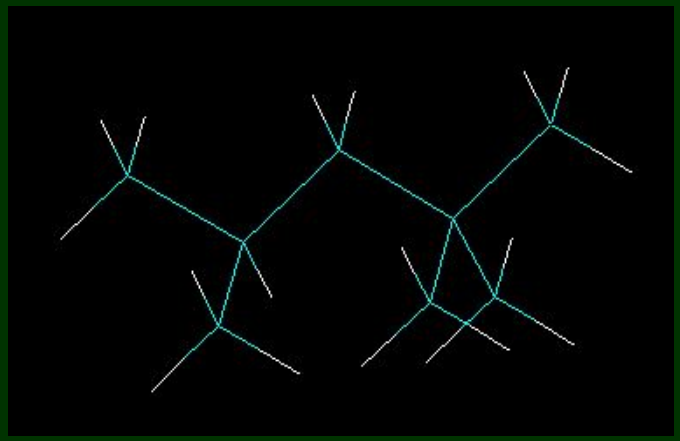
2-этилгексан

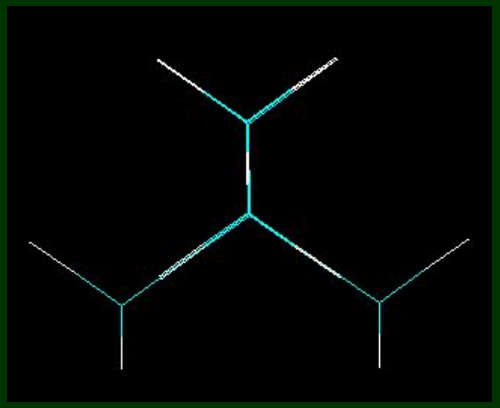


2,2-диметилгексан

Пример 1. 2,2,4-триметилпентан

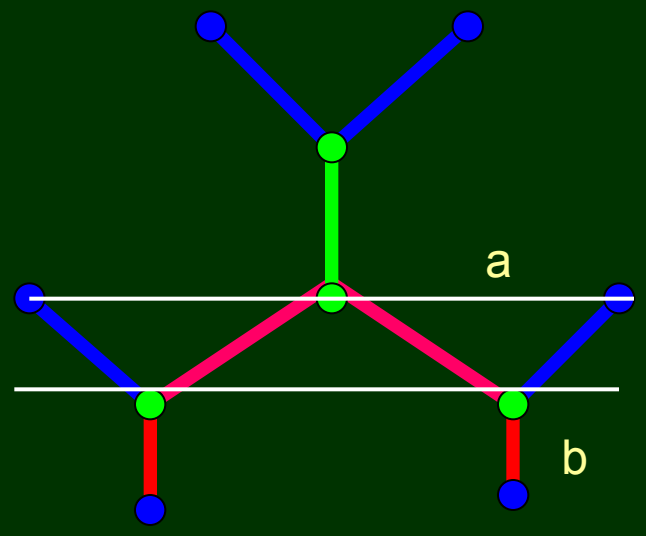


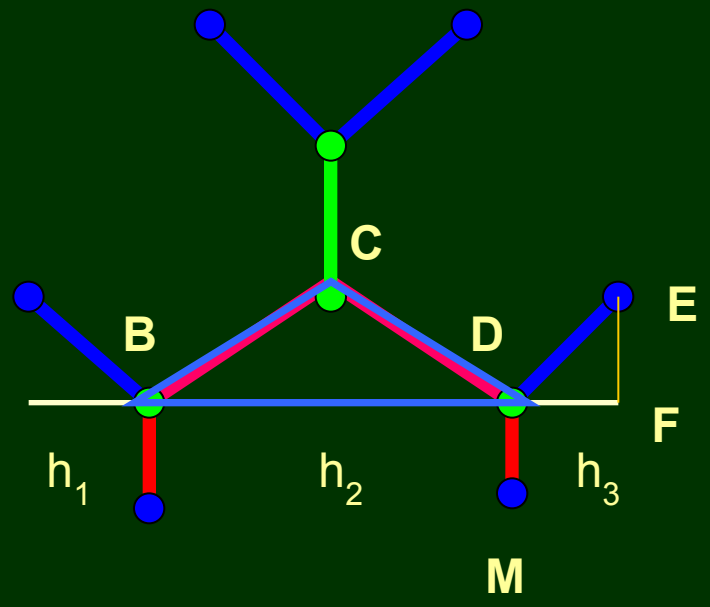




Модель молекулы 2,2,4-триметилпентана

2,2,4-триметилпентан



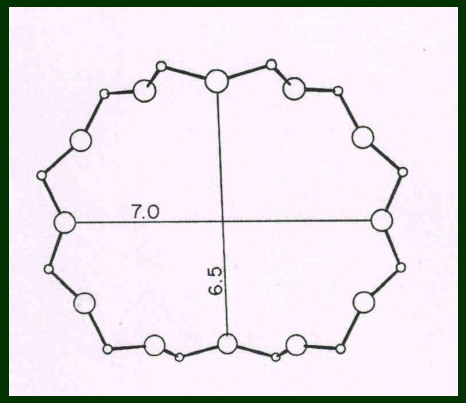


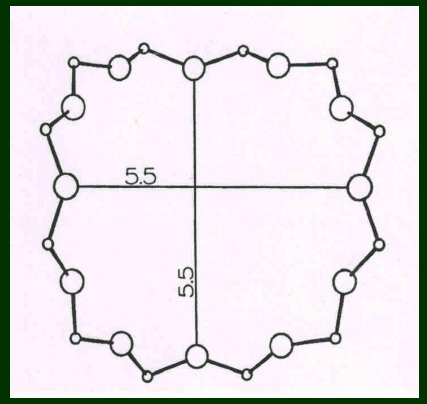
b=a=5,03Å

Минимальный размер поперечного сечения молекул изомеров октана

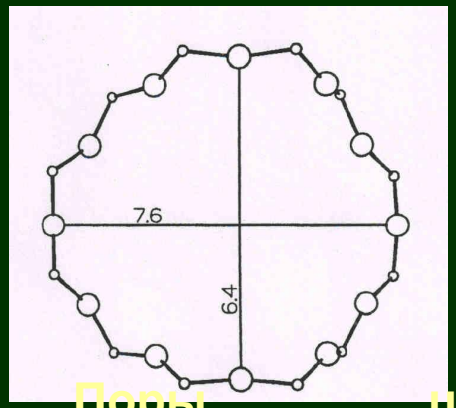
Молекула	Размер поперечного сечения, Å
н-октан	3,74
2-метилгептан	4,83
2,4-диметилгексан	4,83
2,3-диметилгексан	5,64
2,2-диметилгексан	5,03
2,2,4-триметилпентан	5,03
3-этилгексан	5,92
2-метил 3-этилпентан	6,43

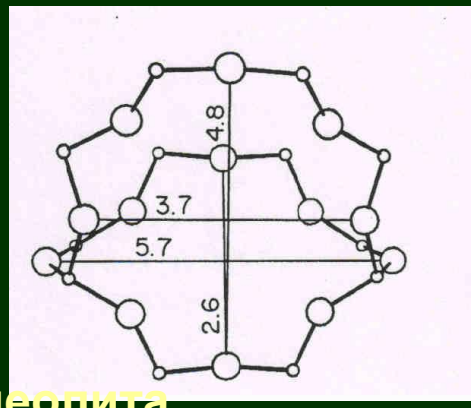
Катализаторы



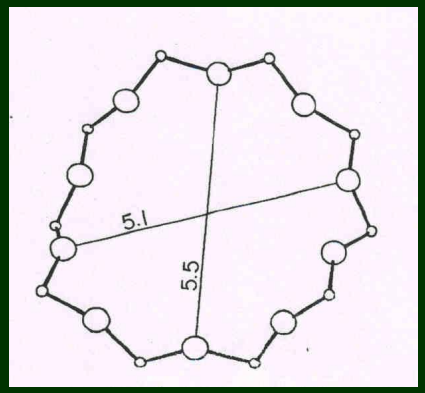


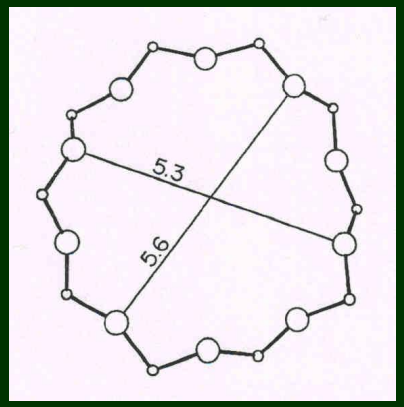
Поры цеолита Beta.





Поры цеолита морденит.





Поры цеолита ZSM-5.

Сопоставление результатов

Молекула/Катализатор	Beta (6,5Å)	Морденит (6,4Å)	ZSM-5 (5,3Å)
н-октан (3,74Å)	✓	✓	✓
2,4-диметилгексан (4,83Å)	✓	✓	✓
2-метилгептан (4,83Å)	✓	✓	✓
2,3-диметилгексан (5,64Å)	✓	✓	✗
2,2-диметилгексан (5,03Å)	✓	✓	✓
2-этилгексан (5,92Å)	✓	✓	✗
2-метил 3-этилпентан (6,43Å)	✓	✗	✗

Результаты работы

- На основе данных об углах и длинах связей рассчитаны размеры поперечного сечения основных молекул изомеров октана.
- Сопоставлены размеры поперечного сечения молекул октанов и пор трех цеолитных катализаторов.
- Цеолиты типа Beta могут быть использованы в процессе изомеризации н-октана, в то время как для цеолитов типа морденит и ZSM-5 размер пор недостаточен для образования наиболее разветвленных молекул октанов.