

Определение геометрических размеров молекул изомеров октана

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

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

Введение



Введение

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

Пути повышения октанового числа



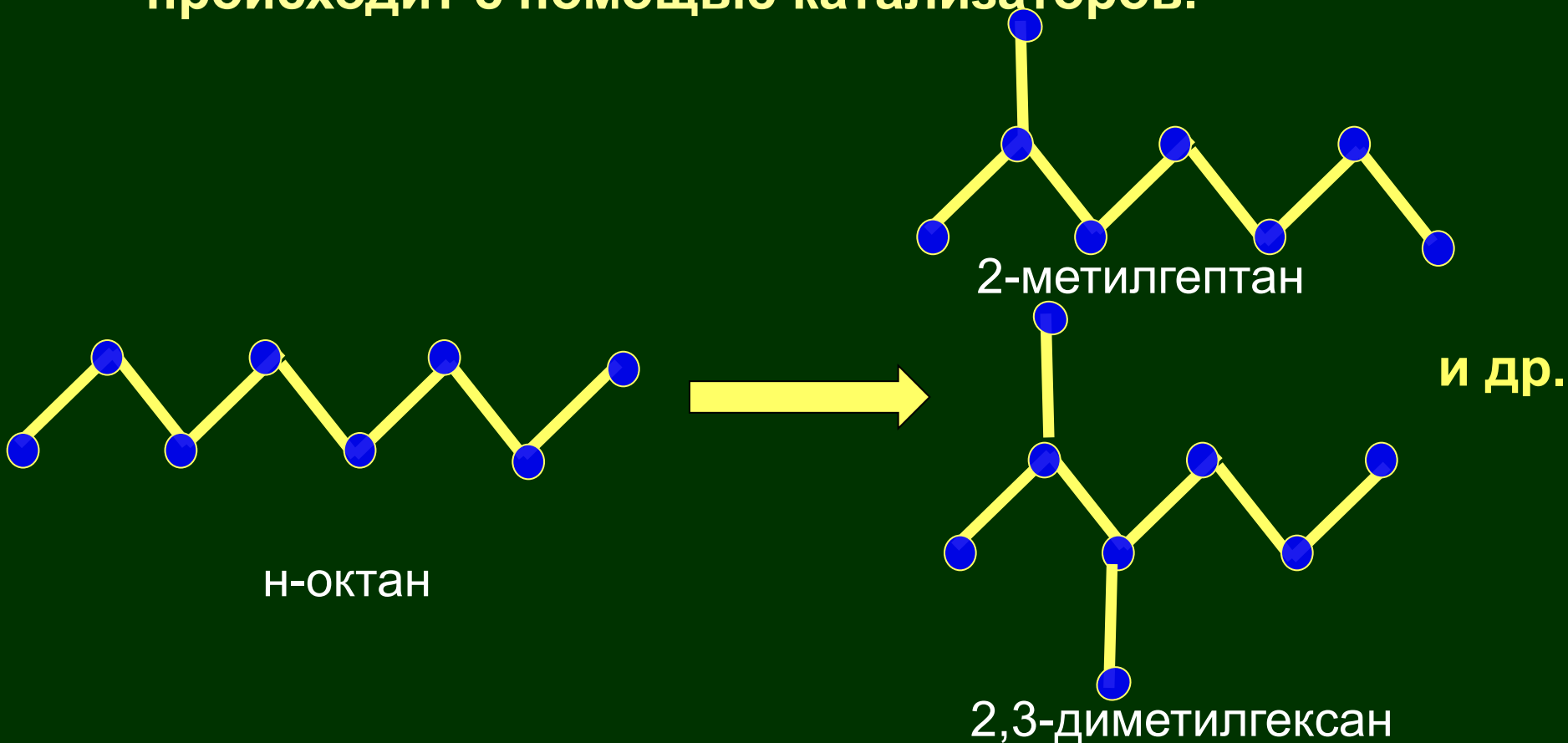
**ввести в топливо некоторое
количество специальных
добавок**



**переработать само
низкооктановое топливо**

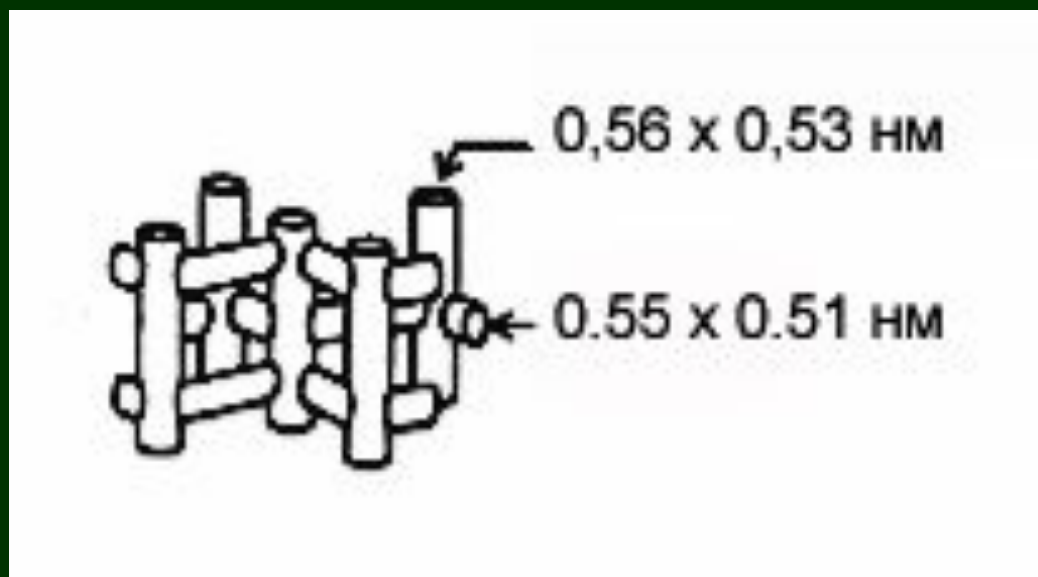
Изомеризация

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



Катализаторы

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



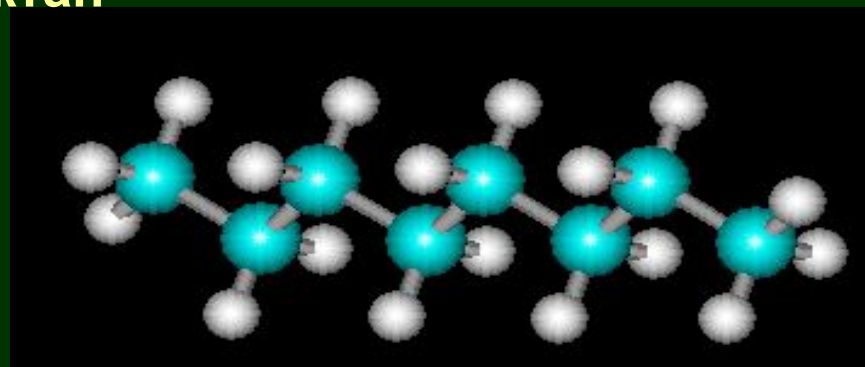
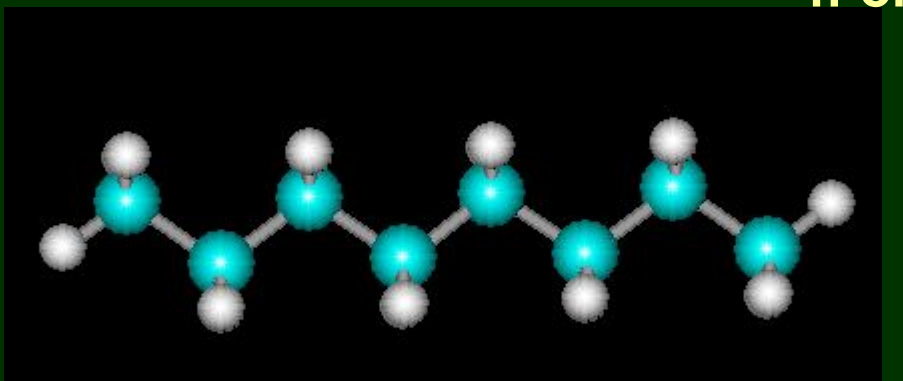
Система пор цеолита типа ZSM-5

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

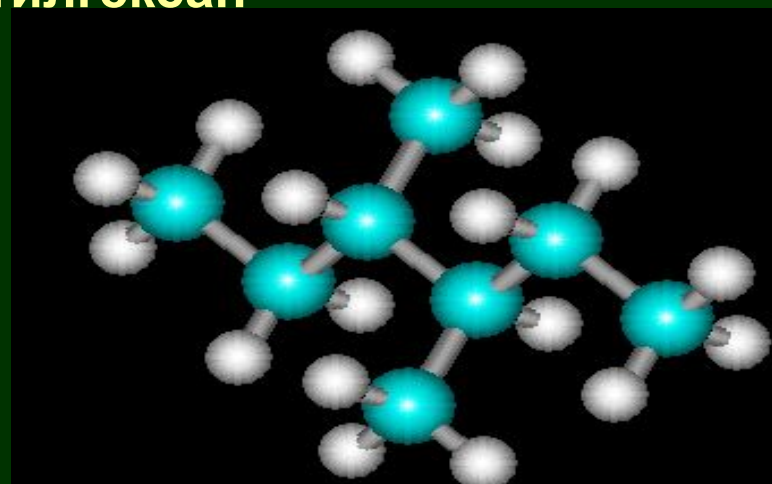
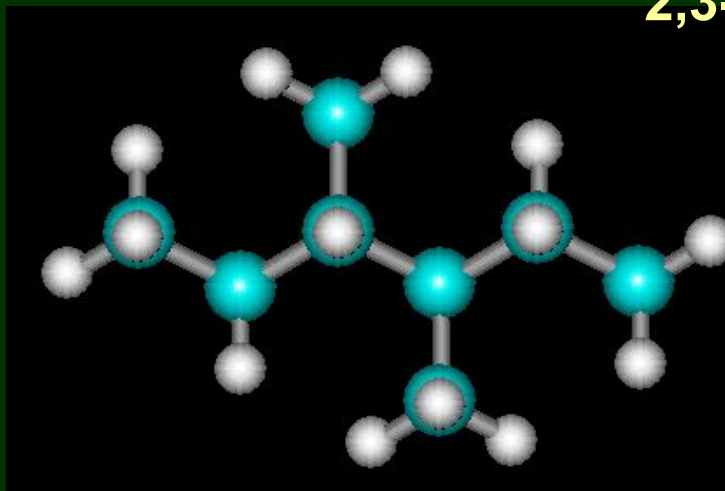
Изомеры октана

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

н-ОКТАН



2,3-диметилгексан



Приближения и допущения:

- Углы между любыми связями С-С и С-Н одинаковы (угол α) и равны $109,45^\circ$.
- Длина связи углерод-водород равна $1,09 \text{ \AA}$ (связи синего цвета).
- Длина связи углерод-углерод равна $1,54 \text{ \AA}$ (связи розового цвета).
- Радиус атома водорода равен $r_{\text{H}} = 0,37 \text{ \AA}$.
- При расчетах все числа сокращались до сотых.

Используемые формулы и соотношения:

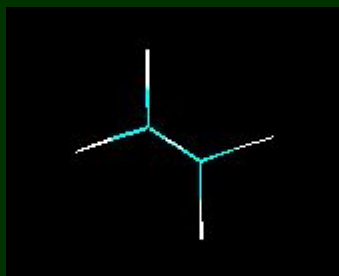
Для расчета геометрических размеров молекул в нашей работе мы использовали следующие формулы:

- 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 α -угол, противолежащий стороне a (2).
- Радиус вписанной окружности правильного треугольника, выраженный через его сторону t равен $r = \sqrt{3}/6 \cdot t$.
- 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.

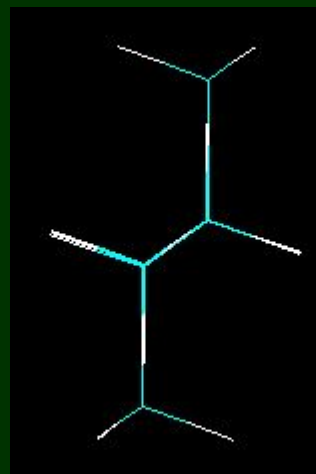
Проекции всех молекул октана



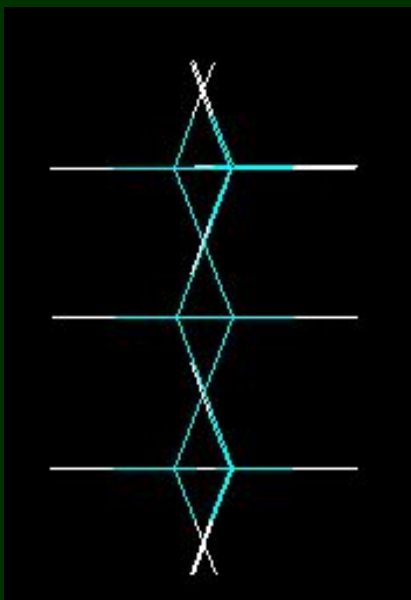
н-ОКТАН



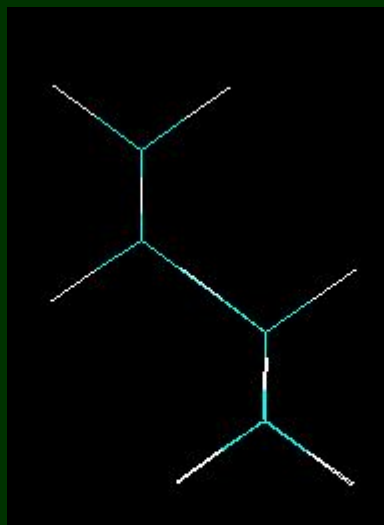
2-метилгептан



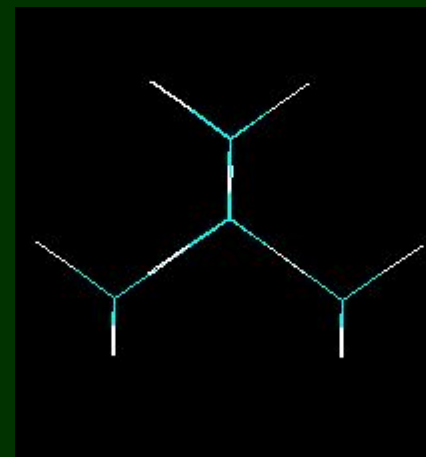
2,3-диметилгексан



2-метил-3-этилпентан

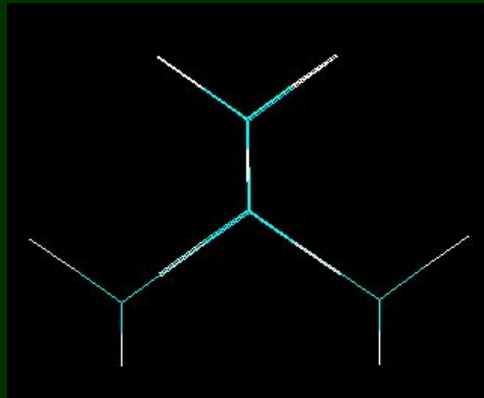
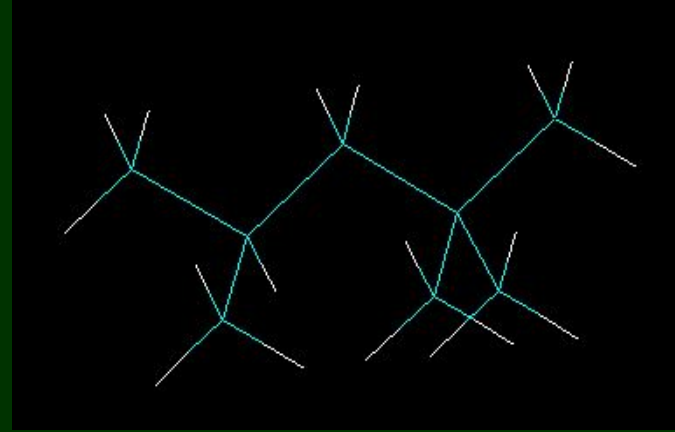
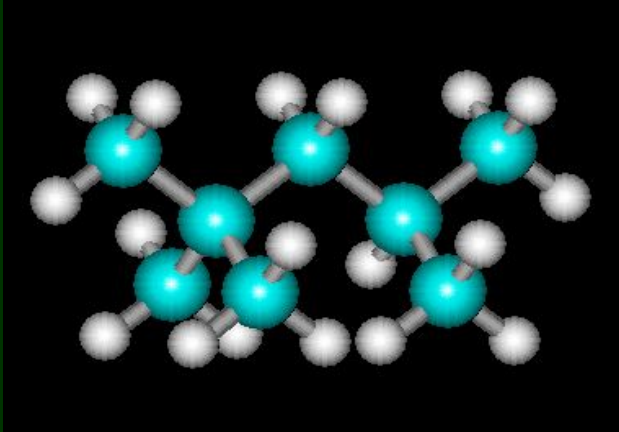


2-этилгексан



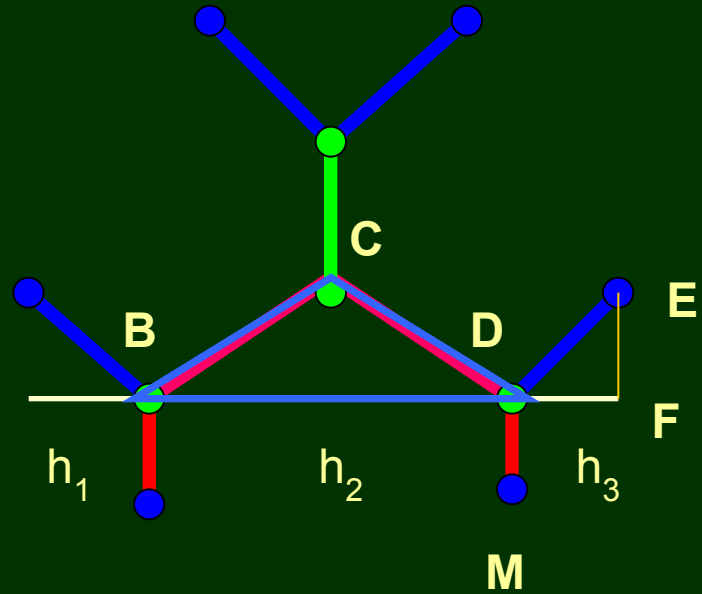
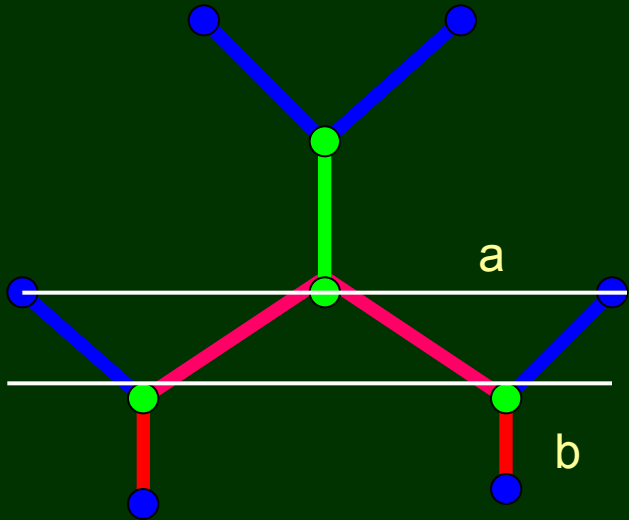
2,2-диметилгексан

Пример 1. 2,2,4-триметилпентан



Модель молекулы 2,2,4-триметилпентана

2,2,4-триметилпентан

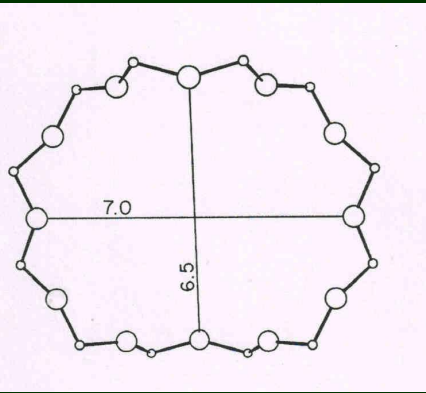


$$b=a=5,03\text{\AA}$$

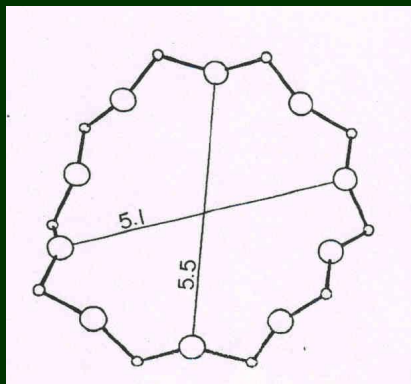
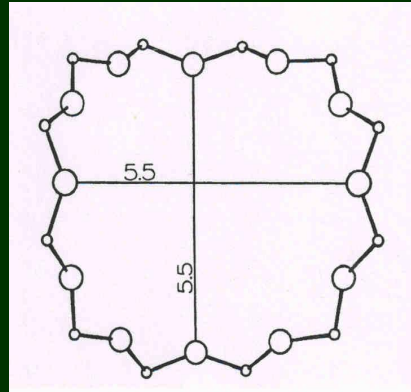
Минимальный размер поперечного сечения молекул изомеров октана

| 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 |

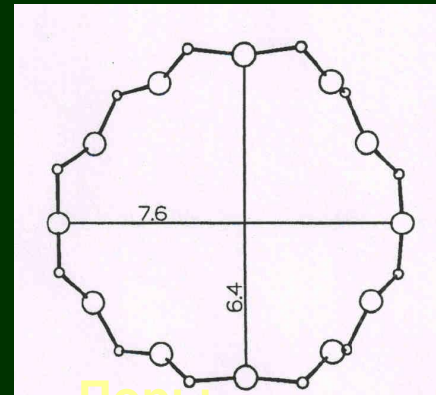
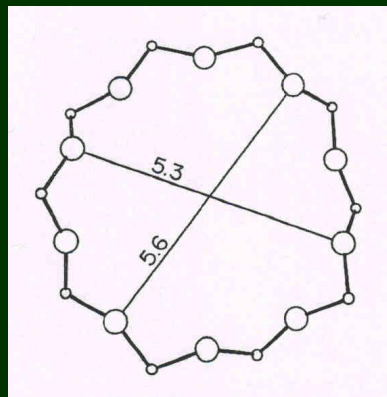
Катализаторы



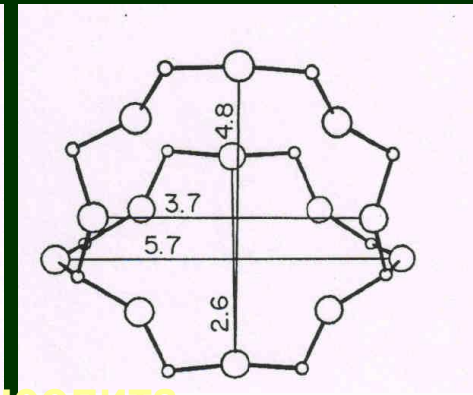
Поры цеолита
Beta.



Поры цеолита
ZSM-5.



Поры
морденит.



цеолита

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 n-октана, в то время как для цеолитов типа морденит и ZSM-5 размер пор недостаточен для образования наиболее разветвленных молекул октанов.