

# **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



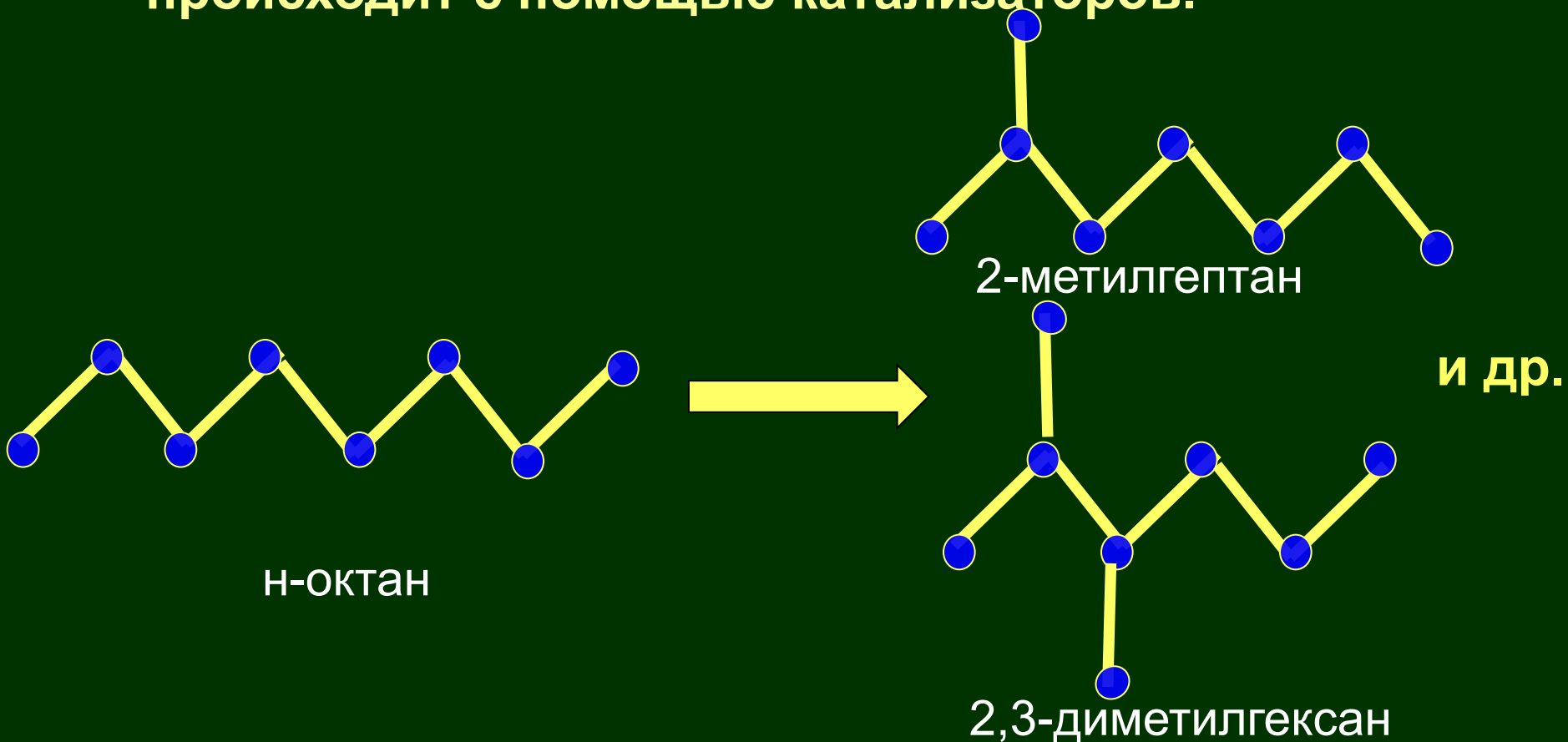
**ввести в топливо некоторое  
количество специальных  
добавок**



**переработать само  
низкооктановое топливо**

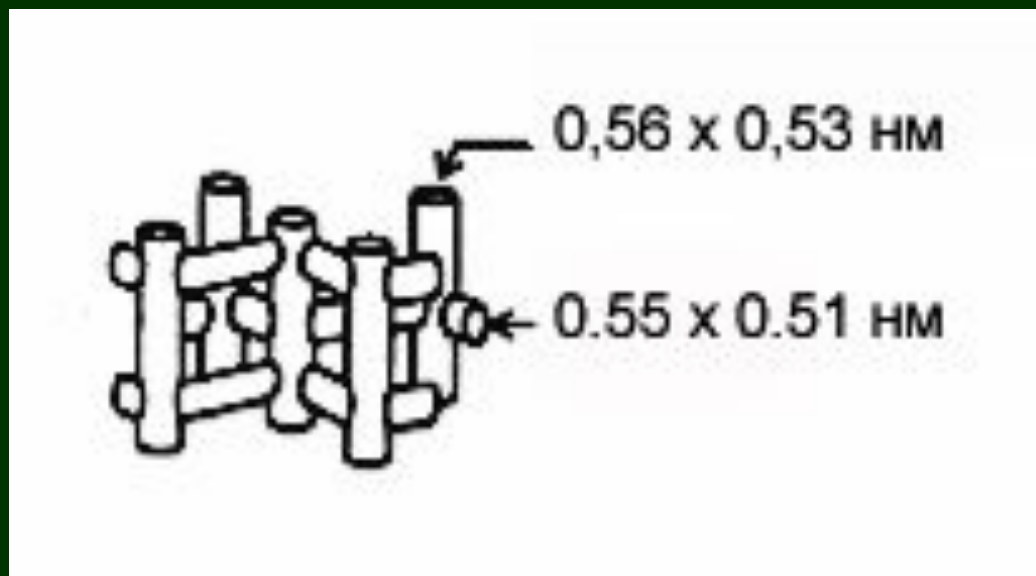
# Изомеризация

- 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.



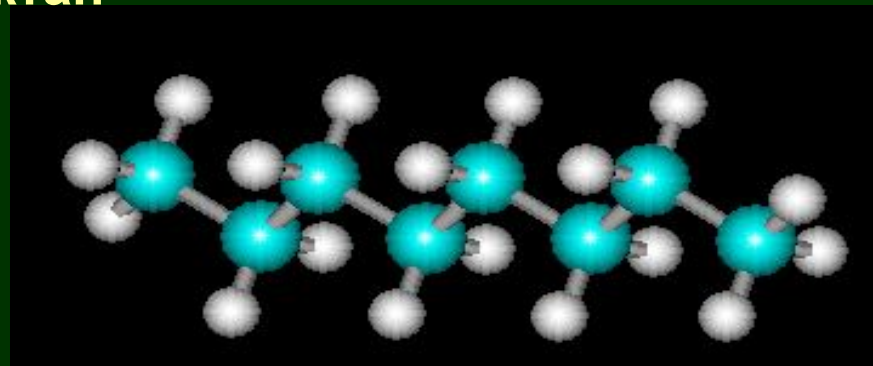
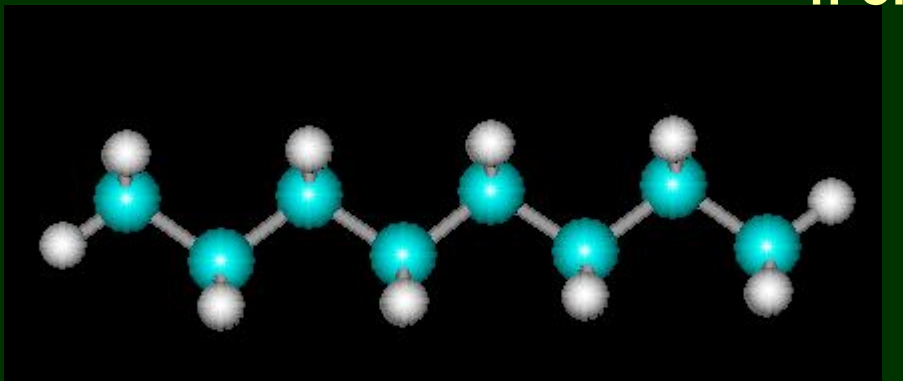
Система пор цеолита типа ZSM-5

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

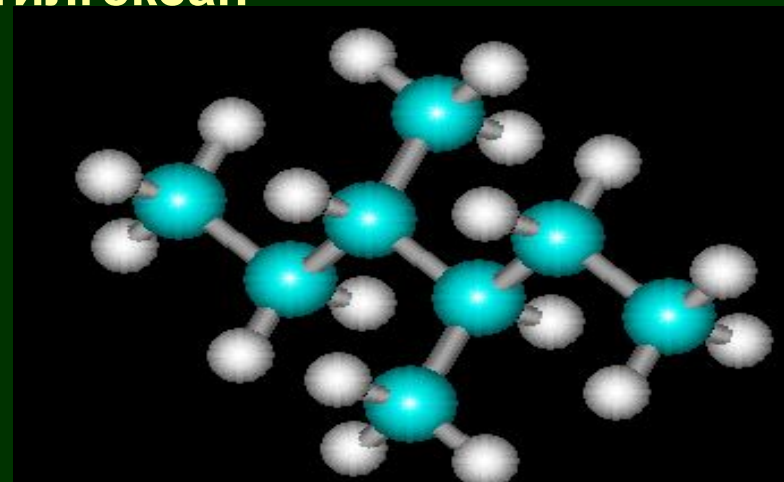
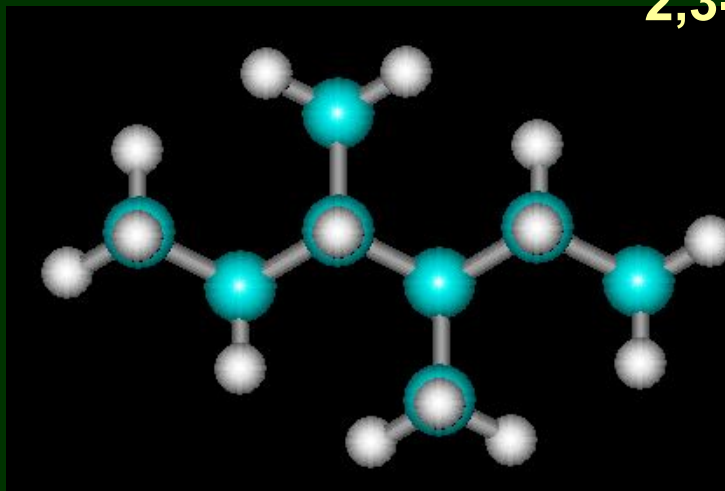
# Изомеры октана

- 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  $\alpha$ ) 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:

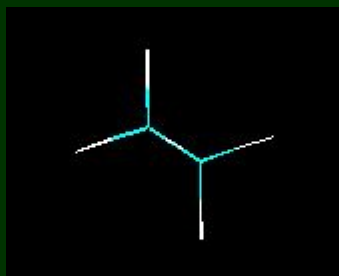
Для расчета геометрических размеров молекул в нашей работе мы использовали следующие формулы:

- 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  $\alpha$ -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.

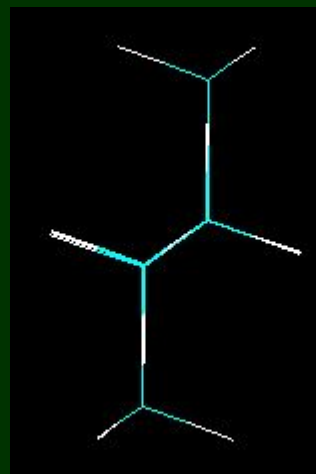
# Проекции всех молекул октана



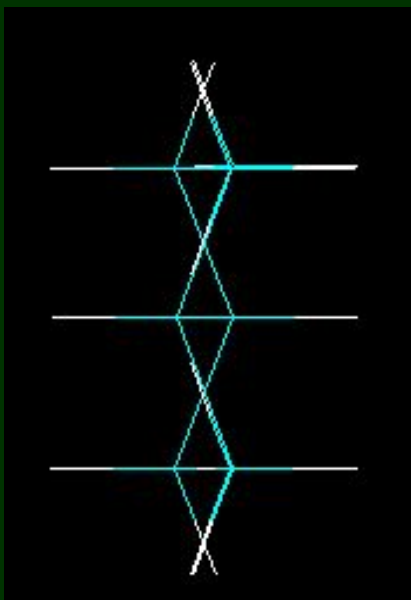
н-ОКТАН



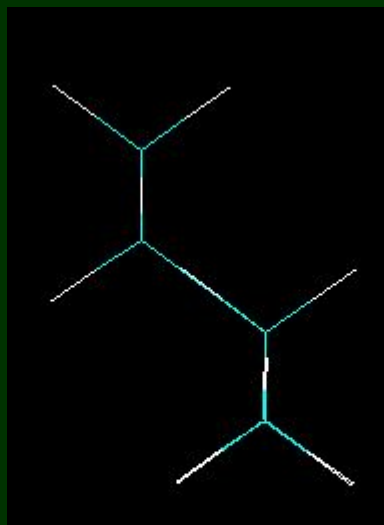
2-метилгептан



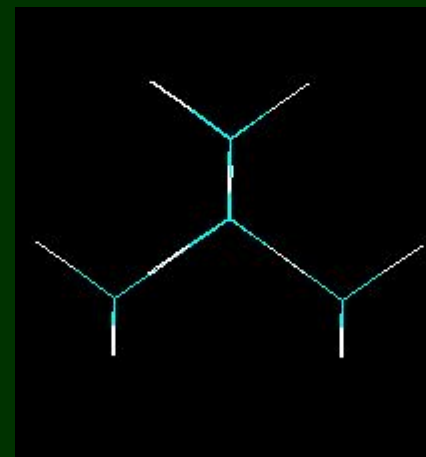
2,3-диметилгексан



2-метил-3-этилпентан

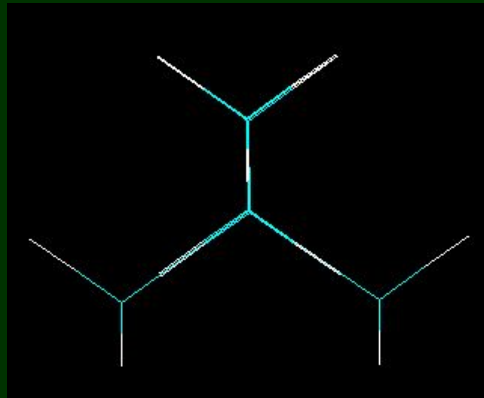
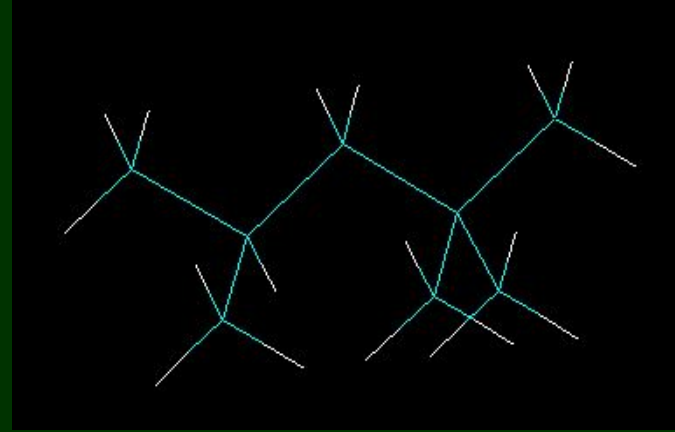
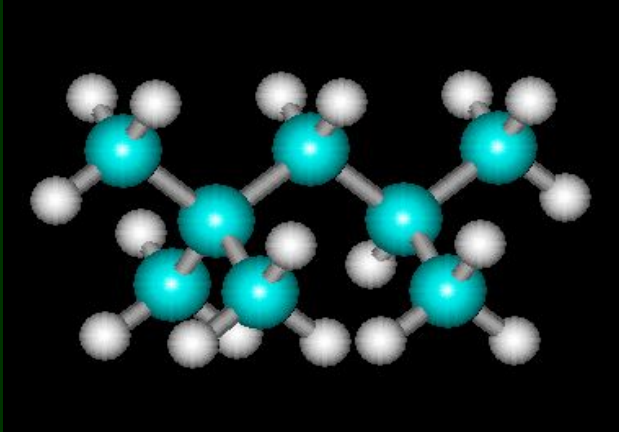


2-этилгексан



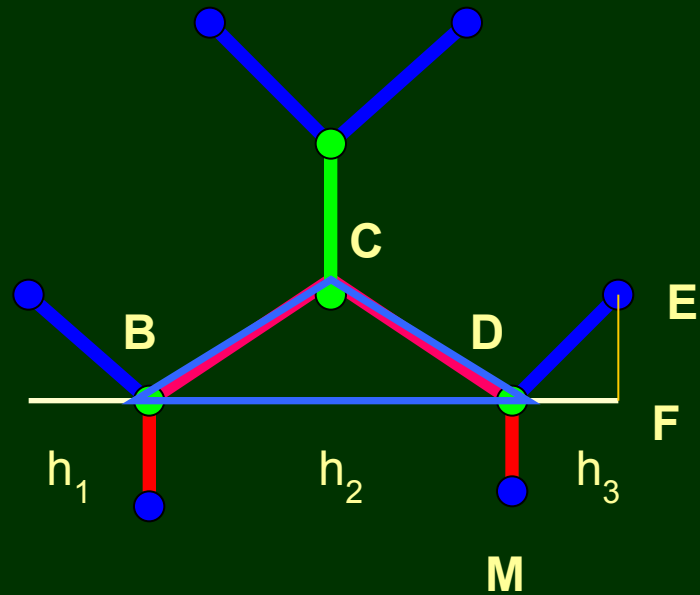
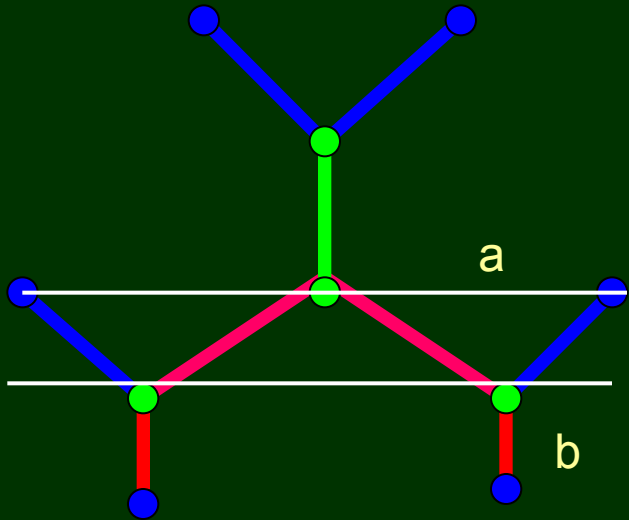
2,2-диметилгексан

# Пример 1. 2,2,4-триметилпентан



Модель молекулы 2,2,4-триметилпентана

# 2,2,4-триметилпентан

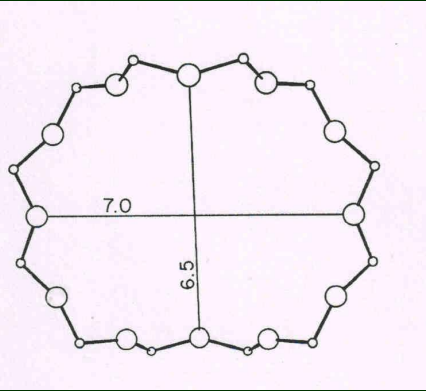


$$b=a=5,03\text{\AA}$$

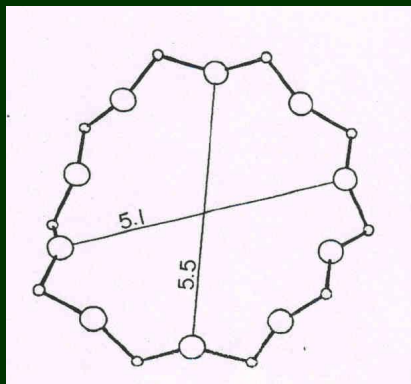
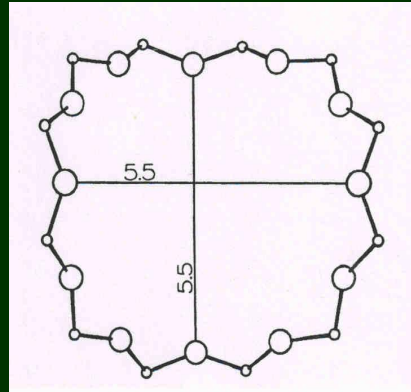
# Минимальный размер поперечного сечения молекул изомеров октана

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

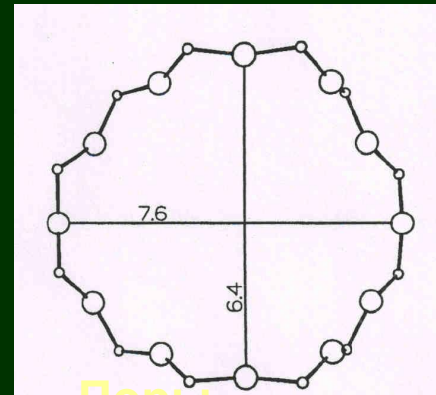
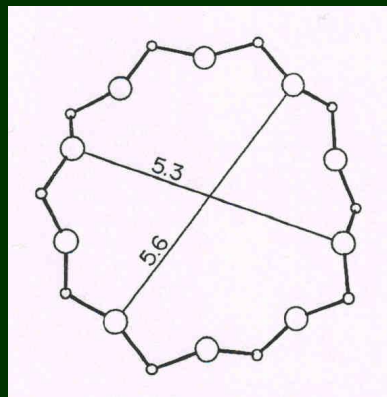
# Катализаторы



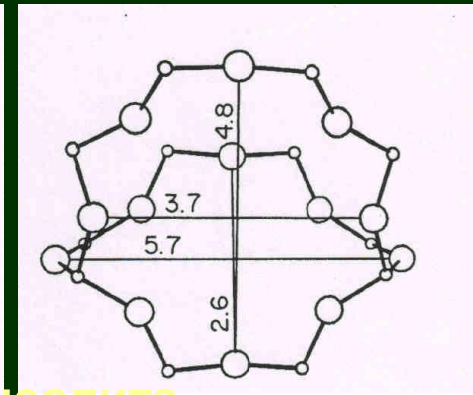
Поры цеолита  
Beta.



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.