

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ  
МЕХАНИЗМА ТОПОХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ  
ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗДЕЛЕНИЯ КОМПОНЕНТОВ НЕФТИ  
НА ПОВЕРХНОСТИ НАНОЧАСТИЦ НИКЕЛЯ**

**Н. Н. Балобаева, К. В. Брянкин, А. В. Рухов, А. А. Дегтярев**

*Кафедра «Химия и химические технологии», Nina\_balobaeva@mail.ru,  
ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия*

**Ключевые слова:** адсорбция; математическое моделирование; молекулярная динамика; наночастицы никеля; нефтепродукты; электроотрицательные атомы.

**Аннотация:** С использованием методов вычислительной квантовой химии и молекулярной динамики раскрыт один из возможных механизмов топохимической реакции термического разделения компонентов нефти на поверхности наночастиц никеля. Показано, что на поверхности окисленной ультрадисперсной частицы никеля наблюдается специфическое взаимодействие с компонентами нефти. Соединения, содержащие электроотрицательные атомы (кислород, азот, сера), в результате действия дисперсионных сил концентрируются на поверхности, тем самым изменяется равновесное содержание компонентов в жидкой фазе, что соответственно приводит к увеличению неполярных соединений (алканы, арены) в паровой фазе при их термическом разделении. Теоретически обоснован механизм наблюдаемого экспериментально факта увеличения содержания светлой фракции нефти при ее перегонке в присутствии ультрадисперсных частиц никеля.

---

В настоящее время одной из интенсивно развивающихся отраслей является нефтеперерабатывающая промышленность, реализующая множество процессов первичной и вторичной переработок нефти и нефтепродуктов. Постоянно совершенствуются процессы переработки, направленные на увеличение степени выделения из нефти светлых фракций, используемые в качестве горючего для автомобильного транспорта. Подавляющее большинство применяемых технологических приемов (преимущественно во вторичной переработке – каталитический крекинг, реформинг, изомеризация и т.д.) предполагают использование широкого ассортимента специализированных катализаторов. В то же время первичная переработка представлена, как правило, только физическими процессами ректификации, что значительно снижает ее потенциал. Повышение эффективности данной стадии возможно за счет применения комбинированной первичной переработки, протекающей в присутствии каталитических систем.

Данный подход успешно применяется как для переработки нефти [1, 2], так и биотоплива [3], что подтверждает перспективность направления. Проведенные ранее экспериментальные исследования процесса перегонки тяжелых фракций нефти (мазут и судовое топливо) показали, что при введении в перегонный куб наночастиц никеля увеличивается выход светлых фракций на 10 % [4]. Соответственно понимание механизмов протекающих процессов является важным аспектом и позволит определить рациональные условия и управляющие факторы.

На данный момент современные методы вычислительной химии и средств цифровой техники позволяют провести теоретические исследования молекулярных систем на совершенно новом уровне. Наиболее совершенными в настоящее время методами компьютерного моделирования молекулярных систем являются подходы, основанные на квантово-химических взаимодействиях [5]. Но, в связи с высоким запросами к вычислительной технике, применение данных методов значительно ограничено и эффективно при рассмотрении молекул, включающих более 60...100 атомов. В связи с этим в рамках данной работы с использованием методов квантовой химии рассчитана начальная конфигурация молекул с использованием программного продукта GAMESS и базисами Попла 3-21+g\* с учетом поляризационных и диффузионных функций. Для рассмотрения же эволюции молекулярной системы в процессе термического разделения компонентов нефти в присутствии ультрадисперсных частиц никеля целесообразно применение методов молекулярной динамики, основанных на приемах молекулярной динамики, где атомы и группы атомов рассматриваются как частицы, которые взаимодействуют между собой посредством потенциальных полей. Профили полей взаимодействия описываются на основе эмпирических законов классической физики, а их движение подчиняется второму закону Ньютона. Потенциальная энергия взаимодействия частиц зависит от углов и длин связей, торсионных углов и нековалентных взаимодействий (в том числе водородных связей, электростатических взаимодействий, ориентационных, дисперсионных сил и сил индукционного притяжения). В свою очередь применение метода молекулярной динамики также накладывает ограничения [6]. В частности, длина волны Де Бройля атома должна быть меньше, чем межатомное расстояние, что заведомо выполняется для частиц с массой больше 10 а.е.м. и температуре рассматриваемой системы более 10 К. Данные условия выполняются для обозначенного выше процесса, что позволяет его применить для исследования эволюции термического разделения фракций нефти в присутствии наночастиц никеля.

В общем случае силовые поля потенциальной энергии взаимодействия молекулярной системы задаются в виде суммы парных атом-атомных взаимодействий, зависящих только от расстояния между данными атомами [7, 8]. В молекулярной динамике состояние системы из  $N_a$  атомов в момент времени  $\tau$  однозначно определяется заданием набора векторов координат и скоростей всех частиц. Обозначим их векторами  $\vec{r}_{n,m}(\tau) = \{x_n, y_n, z_n\}$  и  $\vec{V}_{n,m}(\tau)$ , где  $n = 1, \dots, N_a$ ;  $m = 1, 2, 3$  (индексы координат пространства). Основная задача механики состоит в том, чтобы найти состояние системы в произвольный момент времени  $\tau$ , если известно состояние системы в начальный момент времени (при  $\tau = 0$ ). В классической механике эта задача решается путем вычисления траектории движения  $\vec{r}_{n,m}(\tau)$ . Траектория определяется при решении уравнений движения Ньютона, соответственно запишем:

$$m_n \frac{d^2 x_n(\tau)}{d\tau^2} = - \frac{\partial U(x)}{\partial x_n}; \quad (1)$$

$$m_n \frac{d^2 y_n(\tau)}{d\tau^2} = - \frac{\partial U(y)}{\partial y_n}; \quad (2)$$

$$m_n \frac{d^2 z_n(\tau)}{d\tau^2} = - \frac{\partial U(z)}{\partial z_n}, \quad (3)$$

Начальные условия:

$$x_n = x_{0n}; \quad y_n = y_{0n}; \quad z_n = z_{0n}; \quad (4)$$

$$\frac{d y_n(\tau)}{d \tau} = V_{0y}; \quad \frac{d z_n(\tau)}{d \tau} = V_{0z}, \quad (5)$$

где  $n = 1 \dots N_a$ ;  $m_n$  – масса атома;  $x, y, z$  – координаты пространства;  $U(r)$  – потенциальная энергия, зависящая от взаимного расположения всех атомов.

Потенциальная энергия попарного взаимодействий атомов рассматривается в виде следующей суммы

$$U = U_b + U_v + U_\phi + U_f + U_q + U_{LJ} + U_{hb}, \quad (6)$$

где каждое слагаемое отвечает за следующие виды взаимодействия:  $U_b$  – химические связи;  $U_v, U_\phi$  – валентные и торсионные углы;  $U_f$  – плоские группы и псевдоторсионные углы;  $U_{LJ}$  – Ван-дер-ваальсовы контакты;  $U_q$  – электростатические взаимодействия;  $U_{hb}$  – водородные связи.

В уравнении (6) слагаемые имеют различный функциональный вид. Энергия колебаний валентных углов и энергия валентных взаимодействий описывается параболическими потенциалами. Потенциальная энергия для торсионных и псевдоторсионных углов задается рядом Фурье [9, 10]. Таким же образом определяется потенциальная энергия плоских групп. Взаимодействие между атомами, не связанными валентной связью (Ван-дер-ваальсовое взаимодействие и образование водородных связей), описывается при помощи потенциала Леннарда-Джонса [11], а потенциальная энергия взаимодействия заряженных атомов – электростатическим потенциалом.

Постановка задачи расчета координат атомов молекулярной системы, включающей элемент поверхности частицы никеля и алканы и асфальтены, имеет следующий вид:

$$\{\bar{r}_{n,m}\}; \quad n=1 \dots N_a; \quad m = 1, \dots 3; \quad (7)$$

$$\vec{l} = f_l(\{\bar{r}_{n,m}\}); \quad \vec{\alpha} = f_\alpha(\{\bar{r}_{n,m}\}); \quad \vec{\phi} = f_\phi(\{\bar{r}_{n,m}\}); \quad \vec{l} \in \Omega_l; \quad \vec{\alpha} \in \Omega_\alpha; \quad \vec{\phi} \in \Omega_\phi, \quad (8)$$

где  $\bar{r}$  – матрица координат  $N_a$  атомов в трехмерном пространстве;  $\vec{l}, \vec{\alpha}, \vec{\phi}$  – векторы длин  $T$ , значений углов  $H$  и торсионных углов  $G$  химических связей;  $\Omega_l, \Omega_\alpha, \Omega_\phi$  – области допустимых значений.

Соответственно потенциальную энергию атома в соответствии с (6) и (8) можно переписать:

$$U = U_b(\vec{l}) + U_v(\vec{\alpha}) + U_\phi(\vec{\phi}) + U_f(\vec{\phi}) + U_q(\vec{r}) + U_{LJ}(\vec{r}) + U_{hb}(\vec{r}); \quad (9)$$

$$U_b(\vec{l}) = \frac{1}{2} \sum_{t=1}^T K_{b_t} (l_t - l_{0_t})^2, \quad (10)$$

где  $K_{b_t}$  – эффективная жесткость валентной связи;  $l_{0_t}$  – равновесная длина химической связи;

$$U_v(\vec{\alpha}) = \frac{1}{2} \sum_{h=1}^H K_{v_h} (\alpha_h - \alpha_{0_h})^2, \quad (11)$$

где  $K_{v_h}$  – эффективная упругость валентного угла;  $\alpha_{0_h}$  – равновесное значение угла химической связи;

$$U_{\varphi}(\vec{\varphi}) = \frac{1}{2} \sum_{g=1}^G \sum_{s=1}^S K_{\varphi g, s} [V_{g, s} \cos(s \varphi_g - \delta) + 1]; \quad (12)$$

$$U_f(\vec{\varphi}) = \frac{1}{2} \sum_{g=1}^G \sum_{s=1}^S K_{f g, s} [V_{g, s} \cos(s_{g, s} \varphi_g - \delta) + 1], \quad (13)$$

где  $K_{\varphi g, s}$ ,  $K_{f g, s}$  – константы, определяющие высоты потенциальных барьеров двугранных углов;  $V_{g, s}$  – вклад гармоник в потенциал торсионного угла ( $-1 < V_{g, s} < 1$ );  $s_{g, s}$  – кратность торсионного барьера;  $\delta$  – сдвиг фазы;  $s$  – номер гармоники;  $S$  – число гармоник;

$$U_q(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N_a-1} \sum_{j=i+1}^{N_a} \left[ \frac{q_i q_j}{\epsilon W_{i, j}} \right], \quad (14)$$

где  $q_i, q_j$  – парциальные заряды на атомах;  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость среды (в нашем случае вода);  $W_{i, j}$  – расстояние между  $i$  и  $j$  атомом,  $W_{i, j} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ ;

$$U_{LJ}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N_a-1} \sum_{j=i+1}^{N_a} \left[ \frac{A_{i, j}}{W_{i, j}^{12}} - \frac{B_{i, j}}{W_{i, j}^6} \right]; \quad (15)$$

$$U_{hb}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N_a-1} \sum_{j=i+1}^{N_a} \left[ \frac{A'_{i, j}}{W_{i, j}^{12}} - \frac{B'_{i, j}}{W_{i, j}^{10}} \right], \quad (16)$$

где  $A_{i, j}$ ,  $B_{i, j}$ ,  $A'_{i, j}$ ,  $B'_{i, j}$  – константы, определяющие глубину потенциальных ям и расположение их минимума, зависят от типов  $i$ - и  $j$ -атомов, участвующих во взаимодействии.

Решение задачи (1) – (16) получено с использованием программного пакета NAMD. В качестве потенциальной функции выбран метод MM2, разработанный для органических молекул. Он учитывает потенциальные поля, формируемые всеми атомами рассчитываемой системы, и позволяет гибко модифицировать параметры расчета в зависимости от конкретной задачи. Исходная постановка задачи для расчета представлена на рис. 1.

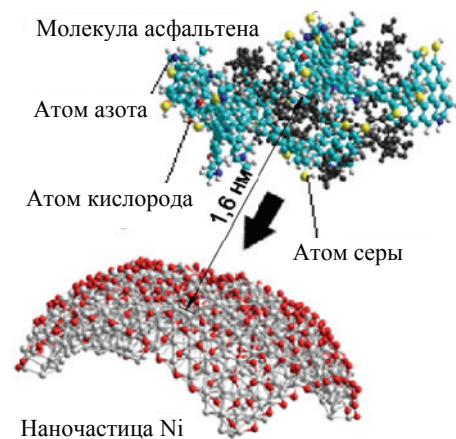


Рис. 1. Исходная молекулярная система

Перед расчетом геометрия системы оптимизировалась методами квантовой химии до значения градиента 0,1 ккал/(Å·моль). Для сокращения времени расчета, рассмотрен только фрагмент поверхности частицы никеля размером 3,83×3,83 нм. Расположения молекул определялось случайным образом при условии нахождения компонентов нефти со стороны окисленной поверхности. Величина начальных скоростей определялась распределением Стефана–Больцмана при температуре 693 К. На рисунке 1 затенением указаны молекулы алканов.

Очевидно, что компоненты нефти находятся в состоянии равновесия, обусловленного слабым нековалентным взаимодействием (преимущественно силы Лондона) между ее молекулами.

Цель расчета – изучение эволюцию пространственного строения твердофазного соединения (ультрадисперсные частицы Ni) в присутствии компонентов нефти и темных нефтепродуктов. Время экспозиции системы определено в размере 100 пс.

Результаты расчета представлены на рис. 2. Очевидно, молекулярная система изменила пространственное состояние.

Произошло сближение молекул асфальтенов и поверхности ультрадисперсных частицы Ni. Минимальное расстояние между поверхностью Ni и молекулами компонентов нефти уменьшилось с 1,6 нм до 0,27 нм, то есть молекулы сконцентрировались на поверхности частицы никеля. При этом требуется отметить, что наблюдаемая адсорбция избирательная, содержание молекул алканов в адсорбированном состоянии уменьшилось. Это обусловлено специфическим взаимодействием окисленной поверхности никеля с электро не нейтральными атомами асфальтенов (O, S, N), выражающимся в дисперсионном притяжении. В то же время для алканов не характерно образование мгновенных диполей, что и объясняет их слабую адсорбцию и изменение их равновесной концентрации в нефти.

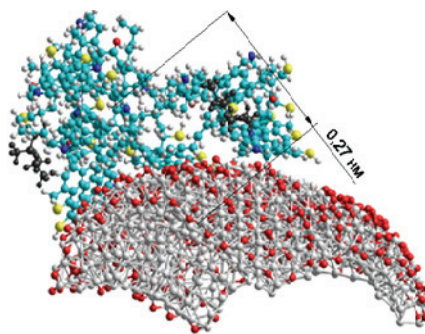
В результате анализа данных расчета сформулирована гипотеза о механизме повышения выхода бензиновой фракции в процессе переработки нефти и темных нефтепродуктов в присутствии наночастиц металлов. Исходная нефть или темные нефтепродукты – непрерывная система органических молекул, находящаяся в динамическом равновесии. Введение в нее наночастиц металлов в результате специфической адсорбции на их поверхности высокомолекулярных соединений, содержащих электроотрицательные атомы, приводит к изменению условий равновесия системы. А так как энергия связи между асфальтенами и поверхностью Ni больше, чем между асфальтенами и алканами, соответственно приводит к увеличению концентрации алканов, доступных для отгонки. Проявление размерного фактора обусловлено увеличением удельной поверхности, доступной для адсорбции асфальтенов, при переходе от микро- к ультрадисперсным частицам.

Таким образом, методами молекулярной динамики проведен расчет эволюции молекулярной системы, состоящей из молекул гетероатомных углеводородов и наночастиц металлов Ni. На основании полученных расчетным путем данных предложен механизма увеличения выхода бензиновой фракции в процессе термического разделения нефти.

#### *Список литературы*

1. Nanoparticles Selection for Heavy Oil Recovery, Study Case on the Ecuador East / L. Segarra Tomalá [et al.] // ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences. – 2018. – Vol. 13, No. 20. – P. 8212 – 8220.

2. Effect of Delayed Coking Pressure on the Yield and Quality of Middle and Heavy Distillates Used as Components of Environmentally Friendly Marine Fuels / N. K. Kondrasheva [et al.] // Energy and Fuels. – 2019. – Vol. 33, No. 1. – P. 636 – 644. doi: 10.1021/acs.energyfuels.8b03756



**Рис. 2. Результаты расчета эволюции молекулярной системы.**  
(Время экспозиции 100 пс)

3. Biobased Cadaverine as a Green Template in the Synthesis of NiO/ZSM-5 Nanocomposites for Removal of Petroleum Asphaltene: Financial Analysis, Isotherms, and Kinetics Study / M. Sedighi [et al.] // *Energy and Fuels*. – 2018. – Vol. 32, No. 7. – P. 7412 – 7422.
4. Балобаева, Н. Н. Термическая деструкция нефти с использованием металлов в наноструктурированной форме в целях повышения выхода бензиновой фракции и улучшения ее качественных характеристик / Н. Н. Балобаева, А. В. Выжонов, А. И. Бельков // *Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний*. – 2016. – № 9. – С. 13 – 17.
5. Li, X.-Z. Computer Simulations of Molecules and Condensed Matter: From Electronic Structures to Molecular Dynamics / X.-Z. Li, E.-G. Wang. – World Scientific, 2018. – 263 p.
6. Szymański, S. Classical and Quantum Molecular Dynamics in NMR Spectra / S. Szymański, P. Bernatowicz. – Springer, 2018. – 402 p.
7. McCammon, J. A. Protein Dynamics / J. A. McCammon // *Rep. Progr. Phys.* – 1984. – Vol. 47. – P. 1 – 46.
8. Kalinichev, A. G. Molecular Dynamics Modeling of Chloride Binding to the Surface of Calcium Hydroxide, Hydrated Calcium Aluminate, and Calcium Silicate Phases / A. G. Kalinichev, R. J. Kirkpatrick // *Chem. Matter.* – 2002. – Vol. 14. – P. 3539 – 3549.
9. Полтораки, О. М. Термодинамика в физической химии / О. М. Полтораки. – М. : Высшая школа, 1991. – 319 с.
10. Дашевский, В. Г. Конформации органических молекул / В. Г. Дашевский. – М. : Химия, 1974. – 432 с.
11. Mohebifar, M. Evaluating Force-Field London Dispersion Coefficients Using the Exchange-Hole Dipole Moment Model / M. Mohebifar, E. R. Johnson, C. N. Rowley // *Journal of Chemical Theory and Computation*. – 2017. – Vol. 13, No. 12. – P. 6146 – 6157. doi:10.1021/acs.jctc.7b00522

---

## Quantum-Chemical Description of the Mechanism of the Topochemical Reaction of Thermal Separation of Oil Components on Nickel Nanoparticle Surface

N. N. Balobaeva, K. V. Bryankin, A. V. Rukhov, A. A. Degtyarev

*Department of Chemistry and Chemical Technology,  
Nina\_balobaeva@mail.ru, TSTU, Tambov, Russia*

**Keywords:** adsorption; math modeling; molecular dynamics; nickel nanoparticles; petroleum products; electronegative atoms.

**Abstract:** Using methods of computational quantum chemistry and molecular dynamics, one of the possible mechanisms of the topochemical reaction of thermal separation of oil components on the surface of nickel nanoparticles is disclosed. It was shown that a specific interaction with oil components is observed on the surface of the oxidized ultrafine nickel particle. Compounds containing electronegative atoms (oxygen, nitrogen, sulfur), as a result of dispersion forces, concentrate on the surface, thereby changing the equilibrium content of the components in the liquid phase, which accordingly, leads to an increase in nonpolar compounds (alkanes, arenas) in the vapor phase during their thermal separation. The theoretically substantiated mechanism of the experimentally observed fact is that the content of the light oil fraction increases when it is distilled in the presence of ultrafine nickel particles.

## References

1. Segarra Tomalá L., Cedeño Macías D., Tumbaco Aguayo L., Yagual Bacilio J., Bernabé Tomalá M., Fuentes Cuasquer J. Nanoparticles Selection for Heavy Oil Recovery, Study Case on the Ecuador East, *ARPJ Journal of Engineering and Applied Sciences*, 2018, vol. 13, no. 20, pp. 8212-8220.
2. Kondrasheva N.K., Rudko V.A., Kondrashev D.O., Gabdulkhakov R.R., Derkunsii I.O., Konoplin R.R. Effect of Delayed Coking Pressure on the Yield and Quality of Middle and Heavy Distillates Used as Components of Environmentally Friendly Marine Fuels, *Energy and Fuels*, 2019, vol. 33, no. 1, pp. 636-644, doi: 10.1021/acs.energyfuels.8b03756
3. Sedighi M., Mohammadi M., Sedighi M., Ghasemi M. Biobased Cadaverine as a Green Template in the Synthesis of NiO/ZSM-5 Nanocomposites for Removal of Petroleum Asphaltene: Financial Analysis, Isotherms, and Kinetics Study, *Energy and Fuels*, 2018, vol. 32, no. 7, pp. 7412-7422.
4. Balobayeva N.N., Vyzhanov A.V., Bel'kov A.I. [Thermal destruction of oil using metals in nanostructured form in order to increase the yield of gasoline fraction and improve its quality characteristics], *Mir nefteproduktov. Vestnik neftyanykh kompaniy* [World of petroleum products. Bulletin of oil companies], 2016, no. 9, pp. 13-17. (In Russ.)
5. Li X.-Z., Wang E.-G. Computer Simulations of Molecules and Condensed Matter: From Electronic Structures to Molecular Dynamics, *World Scientific*, 2018, 263 p.
6. Szymański S., Bernatowicz P. Classical and Quantum Molecular Dynamics in NMR Spectra, *Springer*, 2018, 402 p.
7. McCammon J.A. Protein Dynamics, *Rep. Progr. Phys.*, 1984, vol. 47, pp. 1-46.
8. Kalinichev A.G., Kirkpatrick R.J. Molecular Dynamics Modeling of Chloride Binding to the Surface of Calcium Hydroxide, Hydrated Calcium Aluminate, and Calcium Silicate Phases, *Chem. Matter.*, 2002, vol. 14, pp. 3539-3549.
9. Poltorak O.M. *Termodinamika v fizicheskoy khimii* [Thermodynamics in physical chemistry], Moscow: Vysshaya shkola, 1991, 319 p. (In Russ.)
10. Dashevskiy V.G. *Konformatsii organicheskikh molekul* [Conformation of organic molecules], Moscow: Khimiya, 1974, 432 p. (In Russ.)
11. Mohebifar M., Johnson E.R., Rowley C.N. Evaluating Force-Field London Dispersion Coefficients Using the Exchange-Hole Dipole Moment Model, *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2017, vol. 13, no. 12, pp. 6146-6157, doi:10.1021/acs.jctc.7b00522

---

### **Quantenchemische Beschreibung des Mechanismus der topochemischen Reaktion der thermischen Trennung von Ölbestandteilen der Nickel-Nanopartikel-Oberflächen**

**Zusammenfassung:** Mit Verwendung der Methoden der Rechenquantenchemie und Molekulardynamik ist einer der möglichen Mechanismen der topochemischen Reaktion der thermischen Trennung von Ölkomponenten auf der Oberfläche von Nickel-Nanopartikeln entdeckt. Es wurde gezeigt, dass eine spezifische Wechselwirkung mit Ölkomponenten auf der Oberfläche des oxidierten ultrafeinen Nickelpartikels beobachtet wird. Verbindungen mit elektronegativen Atomen (Sauerstoff, Stickstoff, Schwefel), konzentrieren sich infolge der Einwirkung der Dispersionskräfte auf der Oberfläche, wodurch sich der Gleichgewichtsgehalt der

Komponenten in der flüssigen Phase ändert, was dementsprechend zu einer Zunahme nichtpolarer Verbindungen (Alkane, Arenen) in der Dampfphase während ihrer thermischen Trennung führt. Theoretisch begründet ist der Mechanismus der experimentell beobachteten Tatsache der Erhöhung des Gehalts der leichten Ölfraction während ihrer Destillation in Gegenwart von ultrafeinen Nickelpartikeln.

---

### **Description chimique quantique du mécanisme de la réaction topochemique de séparation thermique des composants pétroliers à la surface des nanoparticules de nickel**

**Résumé:** Avec l'utilisation des techniques de calcul de chimie quantique et la dynamique moléculaire est révélé l'un des mécanismes possibles de la réaction topochemique de la séparation thermique des composants pétroliers à la surface des nanoparticules de nickel. Il est démontré qu'il existe une interaction spécifique avec les composants du pétrole à la surface d'une particule de nickel ultrafine oxydée. Les composés contenant des atomes électronégatifs (oxygène, azote, soufre), sous l'action des forces de dispersion sont concentrés sur la surface ce qui modifie la teneur en équilibre des composants dans la phase liquide, de sorte qu'en conséquence cela conduit à une augmentation des composés non polaires (alcane, arènes) en phase vapeur lors de leur séparation thermique. Théoriquement, est justifié le mécanisme du fait d'une augmentation de la teneur en fraction légère du pétrole observé expérimentalement lors de sa distillation en présence des particules ultrafines de nickel.

---

**Авторы:** *Балобаева Нина Николаевна* – аспирант кафедры «Химия и химические технологии»; *Брянкин Константин Вячеславович* – доктор технических наук, доцент, профессор кафедры «Химия и химические технологии»; *Рухов Артём Викторович* – доктор технических наук, доцент, заведующий кафедрой «Химия и химические технологии»; *Дегтярев Андрей Александрович* – кандидат технических наук, доцент кафедры «Химия и химические технологии», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия.

**Рецензент:** *Промтов Максим Александрович* – доктор технических наук, профессор кафедры «Технологические процессы, аппараты и техносферная безопасность», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия.