**Унгер, Феликс Гергардович.**

## Масс- и радиоспектральное исследование группового состава и надмолекулярной структуры нефтей и нефтепродуктов : диссертация ... доктора химических наук : 02.00.13. - Уфа, 1984. - 415 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор химических наук Унгер, Феликс Гергардович

В В Е Д Е Н И Е.

Глава I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1. Основные особенности высокомолекулярных соединений (ВМС) нефти.

1.2. Наиболее представительные группы соединений в нефтях и методы их разделения и выделения

1.2.1. Насыщенные углеводороды.

1.2.2. Ненасыщенные углеводороды

1.2.3. Сернистые соединения.

1.2.4. Азотистые соединения.

1.2.5. Кислородные соединения.

1.2.6. Соединения с микроэлементами.

1.3. Методы анализа группового химического состава нефтей и нефтепродуктов

1.3.1. Методы анализа бензиновых фракций.

1.3.2. Методы анализа средних и тяжелых дистиллятных фракций.

1.3.3. Методы исследования тяжелых и остаточных нефтяных фракций.

1.3.4. Применение ЭВМ в аналитических разработках. Применение расчетных методов для устранения ошибок определения.

1.4. Исследования тяжелых остатков, связанные с выявлением природы асфальтенов

1.4.I. Поведение асфальтенов в технологических процессах.

1.4.2. Изучение коллоидной структуры нефтяных остатков.

1.4.3. Представление о структуре остатков и асфальтенов.

1.4.4. Парамагнетизм нефтей и нефтепродуктов и энергия взаимодействия их молекул.

1.5. Критический анализ опубликованной литературы и выводы из литературного обзора.

Глава 2. МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ФОРМАЛИЗОВАННОГО ПОДХОДА К ПРОБЛЕМЕ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ГРУППОВОГО СОСТАВА НЕФТЕПРОДУКТОВ СПЕКТРАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ

2.1. Цель формализации процедуры разработки методик количественного определения группового состава нефтепродуктов и способы ее реализации.

2.2. Банк данных масс- и ЯМР-спектров во внешней памяти ЭВМ

2.2.1. Банк масс-спектральной информации.

2.2.2. Банк ЯМР-спектров.

2.3. Математические принципы построения расчетной системы количественного анализа нефтепродуктов.

2.3.1. Нормировка спектров.

2.3.2. Свертка спектров.

2.3.3. Объединение спектров в группы по аналитическим признакам.

2.3.4. Объединение информации, полученной различными спектральными методами и в процессе химического разделения.

2.3.5. Расчет обусловленности полученных матриц.

2.3.6. Решение полученной системы уравнений.

Глава 3. САСМА - СИСТЕМА АВТОМАТИЗАЦИИ СОЗДАНИЯ МЕТОДИК АНАЛИЗА

3.1. Краткое описание системы автоматизации создания методик анализа (САСМА).

3.2. Примеры применения САСМА для создания методик анализа нефтепродуктов.

3.2.1. Усиление аналитических признаков в массспектрах.

3.2.2. Методика анализа бензиновых фракций вторичного происхождения, содержащих большое количество олефиновых углеводородов.

3.2.3. Методика количественного анализа группового состава фракций сернистых и высокосернистых нефтей.

Глава 4. ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПАРАМАГНИТНЫХ МОЛЕКУЛ НЕФТЕЙ И НЕФТЕПРОДУКТОВ. ПРИМЕНЕНИЕ СИСТЕМНОГО ПОДХОДА К ИССЛЕДОВАНИЮ АСФАЛЬТЕНОВ.

4.1. Некоторые вопросы теории физической химии парамагнитных молекул нефтей и нефтепродуктов

4.1.1. Процессы диссоциации молекул в жидкости.

4.1.2. Разработка некоторых вопросов физической химии парамагнитных молекул нефтей и нефтепродуктов.

4.2. Причины возникновения асфальтенов.

4.2.1. Место парамагнитных молекул во фракциях нефтей и нефтепродуктов.

4.2.2. О сверхтонкой структуре (СТС) спектра ЭПР стабильных свободных радикалов нефтей.

4.2.3. Изменение парамагнетизма нефтей и остатков при добавлении к ним солей металлов переходных групп.

4.3. Физическая химия парамагнитных молекул нефтяных дисперсных систем.

Глава 5. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДИК САСМА И ЭЛЕМЕНТОВ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ ПАРАМАГНИТНЫХ МОЛЕКУЛ НЕФТЯНЫХ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ.

5.1. Исследование продуктов уплотнения процесса каталитического реформинга методом масс-спектрометрии.

5.2. Исследование углеводородного состава сырья и дистиллятов в процессах каталитического реформирования и гидрогенизации.

5.3. Исследование дистиллятов коксования гудронов различных нефтей.

5.4. Исследование углеводородного состава остатков и нефтей методом масс-спектрометрии.

5.5. Контроль за разработкой нефтяных месторождений с помощью метода ЭПР.

5.6. Некоторые геохимические аспекты парамагнетизма нефтей, его связь с возрастом и с биологической эволюцией органического вещества.24

5.7. Влияние стабильных парамагнитных молекул сырья и гомолиза его диамагнитных молекул на процессы переработки нефти.

5.7.1. Процесс ректификации.

5.7.2. Коксование остатков и термодеструкция.

5.7.3. О некоторых свойствах битумов.

ВЫВОД Ы.

ЛИТЕРАТУР А.

ПРИЛОЗКЕНИ Е.