

研究论文

石油胶质结构性质的量子化学研究

王大喜 赵玉玲 潘月秋 刘然冰 高金森

(1. 中国石油大学(北京)重质油国家重点实验室, 北京 102249; 2. 中国石化咨询公司, 北京 100029)

摘要 采用量子化学AM1方法对石油胶质进行了优化计算, 得到石油胶质单层结构SG、双层结构DG和三层结构TG的优化构型和分子间作用能。结果表明, 石油胶质的稠环芳烃和脂环部分大体为平面结构, 支链部分也伸展在平面上。分子中稠环、脂环和侧链中的C—C键长均分别比单独苯环、脂肪环和烷烃的C—C键短。侧链中的C—C键比芳环和脂环的C—C键弱, 在催化剂的作用下将优先裂解。重叠形成DG和TG后, 键长、键角和电荷略有变化。胶质分子的极性基团间存在氢键作用, DG和TG分子间的作用能分别为 -22.8416kJ/mol 和 -43.8455kJ/mol 。双层胶质DG和三层胶质TG结构的体积较大, 难以扩散到分子筛催化剂的孔道内。

关键词 [石油胶质](#); [结构性质](#); [量子化学](#)

收稿日期 2006-4-11 修回日期 2006-7-3

通讯作者 高金森 jsgao@cup.edu.cn

DOI 分类号 TQ424.1+9

