

УДК 665.245:547.279.3

**ИДЕНТИФИКАЦИЯ КОМПОНЕНТОВ ДИСУЛЬФИДНОГО МАСЛА
УГЛЕВОДОРОДНОГО СЫРЬЯ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

**DETERMINATION OF COMPONENTS IN DISULFIDE OIL
OBTAINED FROM THE CARBOHYDRATE-BASED CRUDE
MATERIAL**

**Кулбатыров Д. К., Шамбилова Г. К., Каримов О. Х.,
Тлеккабылова А. А.**

**Атырауский институт нефти и газа,
Атырауский государственный университет им. Х. Досмухамедова,
г. Атырау, Республика Казахстан
Уфимский государственный нефтяной технический университет,
филиал, г. Стерлитамак, Российская Федерация**

D. K. Kylbaturov, G. K. Shambilova, O. Kh. Karimov, A. A. Tlekkabulova

**Atyrau Institute of Oil and Gas,
Atyrau State University named after Kh. Dosmukhamedov,
Atyrau, Kazakhstan
Ufa State Petroleum Technological University,
Branch in Sterlitamak, Russian Federation
e-mail: dkkd@mail.ru**

Аннотация. Представлены результаты изучения компонентов дисульфидного масла (ДСМ) Тенгизского ГПЗ методами масс-спектрометрии и квантовой химии. В составе дисульфидного масла идентифицированы диалкилдисульфиды с числом углеродных атомов C_2-C_4 , которые представляют собой смесь диметил-, метилэтил- и диэтилдисульфидов.

Вопросы изучения и рационального использования компонентов ДСМ упираются в проблему надежной идентификации дисульфидов, которую невозможно решить без применения современных методов физико-химического и квантово-химического исследования.

Приведены выходы и физико-химические характеристики компонентов дисульфидного масла Тенгизского ГПЗ, рассчитаны параметры молекул компонентов ДСМ: диалкилдисульфиды следующего строения $Alk'-S'-S''-Alk''$ (I)-(III). Расчеты геометрического и электронного строения дисульфидов $Alk-S-S-Alk'$ (I)-(III) выполнены методом теории возмущения Меллера-Плессе второго порядка MP2. Оптимизация геометрического строения молекул и радикалов проводилась при использовании атомных базисов 6-31G*. Расчеты отдельных точек дисульфидов были выполнены при использовании коррелированных базисов Даннинга. Изучены наиболее характерные частоты колебаний связей S-S, S-H и S-C в рассмотренных нами дисульфидах (I)-(III). Для каждого значения частоты колебаний связи в скобках даны интенсивности этих переходов.

Проведены детальные расчеты геометрического и электронного строения компонентов ДСМ. Полученные результаты являются исходным базисом для теоретического исследования химических превращений этих важных сераорганических соединений.

Таким образом, методами масс-спектрометрии и квантовой химии в составе ДСМ нами однозначно идентифицированы диалкилдисульфиды с числом углеродных атомов $C_2 - C_4$.

Abstract. This article reports the results of the study aimed to investigate the components of the crude Disulfide Oil (DSO) received from Tengiz Gas Processing Plant (Tengiz GPP). Based on the results of Mass Spectrometry and additional methods of quantum chemical analysis, DSO was determined to be a mixture of dialkylsulfides. Specifically, we were able to identify the presence of dimethyl-, methylethyl-, and diethylsulfides, with characteristic C_2-C_4 carbohydrate chain. Rational use of DSO components is essential for

successful identification of disulfides. Identification of disulfides, in turn, is impossible without application of modern techniques of physicochemical and quantum chemical analysis.

This article reports the exit order and additional physicochemical characteristics of investigated DSO components. Specifically, molecular parameters of investigated components were identified and were shown to have a following structure: $Alk-S-S-Alk$ (I)-(III). Second Order Moller Plesset Perturbation Theory (MP2) was used to determine the geometry and electronic structure of $Alk-S-S-Alk$ (I)-(III) disulfides. Molecular and radical geometry optimization was carried out using the 6-31G* basis set. Additionally, determination of individual disulfide points was completed using the correlation-consistent Dunning's basis set. Vibrational frequencies characteristic to S-S, S-H, and S-C bonds were also analyzed in investigated (I)-(III) disulfides, where each frequency was given an intensity value in the brackets.

Geometry and electron structure of investigated components in Disulfide Oil were calculated and results were used as a basis for theoretical investigation of chemical metamorphisms of these sulfide-containing organic compounds.

Therefore, by applying methods of Mass Spectrometry and quantum chemical analysis, we were able to successfully identify dialkylsulfides in disulfide crude oil, with characteristic C_2-C_4 carbohydrate chains.

Ключевые слова: дисульфидное масло, диметилсульфиды, метилэтилсульфиды, диэтилдисульфиды, идентификация, физико-химические методы, квантово-химические исследования.

Key words: disulfide oil, dimethylsulfides, methylethylsulfides, diethylsulfides, identification, physicochemical methods of analysis, quantum chemical analysis.

Извлечение меркаптанов из газового конденсата и нефтей - промышленный процесс. При этом, как правило, меркаптаны превращаются в дисульфиды. Смесь нефтяных дисульфидов получило название дисульфидное масло (ДСМ), которая представляет собой смесь диметил-, метилэтил- и диэтилдисульфидов [1-4]. В таблице 1 приведены выходы и физико-химические характеристики компонентов ДСМ Тенгизского ГПЗ.

Таблица 1. Выходы и физико-химические характеристики компонентов дисульфидного масла Тенгизского ГПЗ

№	Дисульфид	Выход, масс. %	T _{кип} , °C	d, г/см ³	n _d ²⁰
1	CH ₃ S - SCH ₃ (I)	50	108-109	1,0630	1,5250
2	CH ₃ S - SC ₂ H ₅ (II)	29	138-139	1,0521	1,4280
3	C ₂ H ₅ S - SC ₂ H ₅ (III)	21	153-154	0,9930	1,5060

Вопросы изучения и рационального использования компонентов ДСМ упираются в проблему надежной идентификации дисульфидов, которую невозможно решить без применения современных методов физико-химического и квантово-химического исследования.

Нами в работе [5] изучены масс-спектры компонентов ДСМ. По характеру фрагментации дисульфид (I) сильно отличается от других двух дисульфидов (II) и (III) [6]. Устойчивость к электронной ионизации соединения (I) самая максимальная среди соединений (I)-(III). Максимальный пик в масс-спектре отвечает молекулярному иону (МИ) соединения (I) с m/z 94.

Первым актом фрагментации в данном случае является отщепление метильного радикала, приводящее к образованию иона CH₃-S⁺ = S (Φ₁) с m/z 79, пик которого второй по интенсивности в масс-спектре. Дальнейший распад иона Φ₁, приводит к образованию ионов: [S₂]⁺; [C₂H₅S]⁺, [CH₃S]⁺, [CH₂ = S]⁺, [HC = S]⁺ с m/z 64, 61, 48, 47, 46, 45. Следует отметить также, что в масс-спектре наблюдается незначительные пики ионов с m/z 66 и 32 ([HSSH]⁺ ◦, S⁺ ◦◦◦).

В масс-спектре метилэтилдисульфида (II) имеется очень интенсивный пик МИ, максимальный пик катион-радикала метилгидродисульфида $[\text{CH}_3\text{-S-SH}]^{+\circ}$ (Φ_1) с m/z 80 отвечающий потере молекулы этена. Наряду с фрагментом Φ_1 в масс-спектре соединения (II) имеются несколько интенсивные пики ионов $[\text{CH}_3\text{-S-S}]^+$ (m/z 79), $[\text{S} = \text{S}]^{+\circ}$ (m/z 64), $[\text{CH}_3\text{S}]^+$ (m/z 47), $[\text{CH}_2 = \text{S}]^{+\cdot}$, (m/z 46) и $[\text{HCS}]^+$ (m/z 45), образующийся в результате элиминирования группы атомов (C_2H_5 , CH_3 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{S}$, HSC_2H_5 , $\text{H}_2\text{S-C}_2\text{H}_5$) из МИ. В отличие от соединения (I) в масс-спектре имеется интенсивные пики углеводородных ионов $[\text{C}_2\text{H}_5]^+$ (m/z 29) и $[\text{C}_2\text{H}_3]^+$ (m/z 27). Необходимо подчеркнуть, что соединение (I) и (II) значительное сходство в масс-спектрах. По-видимому, их фрагментные ионы ($[\text{M-CH}_3]^+$, $[\text{CH}_3\text{-S-S}]^+$, $[\text{S} = \text{S}]^{+\cdot}$, $[\text{HCS}]^+$) образуются из одинаковых предшественников [5].

В отличие от соединения (I) основной распад МИ диэтилдисульфида (II) обусловлен легким последовательным выбросом этенов с переносом водорода из метильных радикалов через четырехчленное переходное состояние с образованием ионов: этилгидродисульфида ($[\text{C}_2\text{H}_5\text{-S-SH}]^{+\circ}$, m/z 94) и дигидродисульфида ($[\text{HS-SH}]^{+\circ\circ}$, m/z 66) и имеют высокую интенсивность. Аналогично соединению (I) в масс-спектре соединения (II) наиболее интенсивным является пик молекулярного иона с m/z 122 и его устойчивость к электронной ионизации равна 20,4%.

Высокая интенсивность МИ в масс-спектрах дисульфидов (I) - (III) имеет особо важное значение потому, что дает возможность обнаруживать присутствие серы без элементарного анализа по наличию пика с величиной m/z на две массовых единицы выше, чем у МИ (природное содержание изотопа S^{34} составляет 4,4 %).

Последнее десятилетие характеризуется бурным развитием производства различных органических соединений серы. На мировом рынке химических товаров появились в больших количествах такие соединения серы, как диметилсульфид, сульфолан, широкий ассортимент

меркаптанов, сульфидов, тиофенов и других веществ, используемых в качестве экстрагентов, растворителей, флотореагентов и исходных соединений для синтеза различных биологически активных веществ, в частности, пестицидов, лекарственных соединений, специфических пластификаторов и других вспомогательных веществ [7].

Широкое использование таких соединений для нужд экономики и здравоохранения в значительной степени определяется разработкой промышленных способов их получения и успехами в области извлечения и использования сераорганических соединений, содержащихся в углеводородном сырье различных месторождений Казахстана.

Многие реакции дисульфидов нефтяного происхождения протекают при активации и расщепления S-S связи, поэтому изучение геометрического и электронного строения дисульфидов и природы S-S связи представляется важным при прогнозировании реакционной способности этих соединений [8, 9].

В настоящей работе проведены *ab initio* расчеты следующих дисульфидов $\text{Alk}'\text{-S}'\text{-S}''\text{-Alk}''$: $\text{CH}_3\text{-S-S-CH}_3$ (I), $\text{CH}_3\text{-S-S-C}_2\text{H}_5$ (II), $\text{C}_2\text{H}_5\text{-S-S-C}_2\text{H}_5$ (III) – компонентов ДСМ.

Расчеты выполнены с полной оптимизацией геометрии. Проанализированы геометрические и электронные параметры изученных молекул. Наряду с этим выполнены расчеты колебательных спектров, которые сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными.

Выполнены *ab initio* расчеты радикалов, которые образуются при разрыве связи S-S, и определены энергии разрыва этих связей для изученных молекул. Величины рассчитанных энергий диссоциации связей сопоставлены с имеющимися термодинамическими данными.

Методика квантово-химических расчетов

Расчеты геометрического и электронного строения дисульфидов $\text{Alk-S-S-Alk}'$ (I)-(III) выполнены методом теории возмущения Меллера-

Плессе второго порядка **MP2** [10]. Оптимизация геометрического строения молекул и радикалов проводилась при использовании атомных базисов **6-31G***. Расчеты отдельных точек дисульфидов были выполнены при использовании коррелированных базисов Даннинга [11]. Расчет частот нормальных колебаний проводился методом **MP2**. Оптимизация геометрии радикалов проводилась в рамках теории **UMP2/6-31G***, а расчет отдельных точек – методом **ROMP2/aug-cc-pVDZ**. Расчеты выполнены при использовании программы **GAUSSIAN-98** д.х.н., профессором Ю. А. Борисовым на двухпроцессорном мини-суперкомпьютере **SC7 60-D** (Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва).

Обсуждение полученных результатов

В таблице 2 приведены рассчитанные параметры молекул компонентов ДСМ: а именно диалкилдисульфиды следующего строения $\text{Alk}'\text{-S}'\text{-S}''\text{-Alk}''$ (I)-(III). Здесь даны межатомные расстояния $R(\text{Alk}'\text{-S}')$, $R(\text{S}'\text{-S}'')$ и $R(\text{S}''\text{-Alk}'')$, валентные углы $\alpha(\text{Alk}'\text{-S}'\text{-S}'')$, $\alpha(\text{S}'\text{-S}''\text{-Alk}'')$ и двухгранный угол $\beta(\text{Alk}'\text{-S}'\text{-S}''\text{-Alk}'')$. В таблице 2 приведены также дипольные моменты (μ) в дебаях, энергии граничных орбиталей (E (ВЗМО), E (НВМО)) в атомных единицах энергии, величины эффективных зарядов на атомах серы (Q) в единицах заряда электрона, полные энергии в двух базисах ($-E_0$, $-E_1$) в атомных единицах энергии, энергии нулевых колебаний (**ZPC**) в атомных единицах энергии и значения энтропий (S , кал/моль·град К). Полные энергии $-E_0$ получены в рамках теории **MP2/6-31G***, а энергии $-E_1$ в рамках теории **MP2/aug-cc-pVDZ**.

Таблица 2. Вычисленные геометрические, электронные и энергетические характеристики компонентов дисульфидного масла Тенгизского ГПЗ

Параметр	CH ₃ S' - S''CH ₃ (I)	CH ₃ S' - S''C ₂ H ₅ (II)	C ₂ H ₅ S' - S''C ₂ H ₅ (III)
R(CH ₃ -S')	1,814	1,814	1,823
R(S'-S'')	2,055	2,056	2,057
R(S''-C ₂ H ₅)	1,815	1,823	1,823
α (CH ₃ -S'-S'')	102,1	101,8	102,3
α (S'-S''-C ₂ H ₅)	102,1	102,5	102,3
β	85,0	86,0	87,2
μ D	2,297	2,310	2,303
E (ВЗМО), а.е.	-0,349	-0,347	-0,345
E (НВМО), а.е.	0,035	0,035	0,035
Q (S')	0,075	0,063	0,109
Q (S'')	0,075	0,126	0,109
-E ₀ , а.е.	874,753	913,922	953,090
ZPC, а.е.	0,080	0,110	0,139
-E ₁ , а.е.	874,891	914,083	953,274
S, кал/моль·град К	78,998	85,498	92,017

Как видно из таблицы 2, вычисленные длины связей S-H, S-C и S-S в органических дисульфидах (I)-(III) меняются незначительно. Среднее расстояние S-S в ряду дисульфидов (I)-(III) составляет 2,056 А. Для примера экспериментальное значение межатомного расстояния S-S в (I) равно 2,04 А [12]. Среднее расстояние S-C по соединениям (I)-(III) составляет 1,818 А. Для рассмотренных органических дисульфидов (I)-(III) валентные углы α (Alk'-S'-S''), α (S'-S''-Alk'') изменяются в интервале от 101,8 до 102,5 градуса. Двухгранные углы β (Alk'-S'-S''-Alk'') принимают значения от 85,0 до 87,2 градуса, так что органические дисульфиды имеют зигзагообразное строение.

В таблице 2 также приведены вычисленные значения дипольных моментов. Дипольные моменты изменяются в интервале от 2,297 Дебая для (I) до максимального значения 2,310 Дебая для молекулы (II). В таблице 2 приведены величины зарядов на атомах серы в приближении

Малликена. Заряды на атомах могут принимать как положительные, так и отрицательные значения.

В таблице 3 приведены наиболее характерные частоты колебаний связей S-S, S-H и S-C в рассмотренных нами дисульфидах (I)-(III). Для каждого значения частоты колебаний связи в скобках даны интенсивности этих переходов.

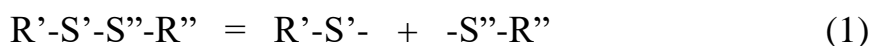
Вычисленные значения частот нормальных колебаний связи S-S в рассмотренных дисульфидах лежат в интервале $526 - 531 \text{ см}^{-1}$. Согласно экспериментальным данным интервал этих значений находится в области $470 - 503 \text{ см}^{-1}$ [13].

Вычисленные значения частот колебаний S-S связи лежат примерно на $28-55 \text{ см}^{-1}$ выше экспериментальных значений. Это может быть объяснено тем, что эксперимент проводился для жидких образцов дисульфидов, а расчет для газофазных молекул.

Таблица 3. Рассчитанные частоты и интенсивности (в скобках) нормальных колебаний молекул компонентов дисульфидного масла Тенгизского ГПЗ (I)-(III)

Тип колебания	CH ₃ -SS-CH ₃	CH ₃ -SS- C ₂ H ₅	C ₂ H ₅ -SS- C ₂ H ₅
	(I)	(II)	(III)
S-S	531 (0,20)	529 (0,22)	526 (0,23)
S-H sym.			
S-H anti			692 (0,06)
S-C (CH ₃) sym	750 (0,11)	747 (0,71)	688 (1,70)
S-C (CH ₃) anti	745 (1,49)		
S-C (C ₂ H ₅)		691 (1,00)	

В таблице 4 приведены данные об энергиях разрыва связи S-S в дисульфидах (I)-(III), полученных на основе наших расчетов. Здесь ΔH соответствует разнице полных энергий двух образующихся радикалов и полной энергии молекулы дисульфида из уравнения реакции (1):



где ΔG – это свободная энтальпия, определенная при 300 К из соотношения (2):

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S \quad (2)$$

где ΔS – изменение энтропии при разрыве связи S-S в дисульфидах.

Таблица 4. Вычисленные термодинамические характеристики процесса диссоциации молекул компонентов «дисульфидного масла» Тенгизского ГПЗ с образованием двух радикалов R'-S'- и -S''-R''

Параметр	CH ₃ S'-S''CH ₃ (I)	CH ₃ S'-S''C ₂ H ₅ (II)	C ₂ H ₅ S'-S''C ₂ H ₅ (III)
ΔH , ккал/моль	57,30	62,31	67,36
ΔS , кал/моль·град К	40,280	39,823	39,347
ΔG , ккал/моль	45,22	50,36	55,56
ΔH эксп. ккал/моль	74±2 65,8±6,0	72±2	70±2 68,9

При расчете энергий разрыва S-S-связи в дисульфидах учитывалась разница в энергиях нулевых колебаний молекулы и образующихся свободных радикалов. Значения вычисленных таким образом энергий разрыва связей лежит в интервале от 57 до 67 ккал/моль.

Выводы

Итак, проведены детальные расчеты геометрического и электронного строения компонентов ДСМ. Полученные результаты являются исходным базисом для теоретического исследования химических превращений этих важных сераорганических соединений.

Таким образом, методами масс-спектрометрии и квантовой химии в составе ДСМ нами однозначно идентифицированы диалкилдисульфиды с числом углеродных атомов C₂ – C₄.

Список используемых источников

- 1 Состав «дисульфидного масла» широкой фракции легких углеводородов нефти Тенгизского ГПЗ / К.И. Дюсенгалиев, Д.С. Ермеков, С.М. Муханалиева, С.С.Даралиева, С.М. Измагамбетова, А.Г. Соколова // Изв. Национальной академии наук Республики Казахстан. Сер. хим. 1995. №6. С. 27-31.
- 2 Использование «дисульфидного масла» в высокотемпературном синтезе гетероциклических соединений / Э.Н. Дерягина, Н.А. Корчевин, Э.Н. Сухомазова, Н.В. Руссавская, Е.П. Леванова // Нефтехимия. 1995. Т.35. №.5. С.472-476.
- 3 Dyusengaliev K.I., Bisenov A.Z., Serikov T.P. Methyl Ethyl Disulfide: isolation, identification, and photochemical reactions with α -olefins // Petroleum Chem., 2005. V. 45. No. 3. P. 216-217.
- 4 Дюсенгалиев К.И., Бисенов А.З., Сериков Т.П. Перспективы применения дисульфидного масла и его компонентов // Нефть и газ. 2005. №5. С.61-71.
- 5 Сравнительное масс-спектрометрическое изучение некоторых симметричных и несимметричных диалкилдисульфидов состава C₂-C₁₆ / С.Ж. Жумагалиев, К.И. Дюсенгалиев, Б.И. Куанышев, Д.К. Кулбатыров, Т.П. Сериков // Изв. Национальной академии наук Республики Казахстан. Сер. хим. и техн. 2011. №5 (389). С. 13-20.
- 6 Вульфсон Н.С., Заикин В.Г., Микая А.И. Масс-спектрометрия органических соединений. М.: Химия, 1986. 312 с.
- 7 Технология органических соединений серы / А.Х. Шарипов, В.Р. Нигматуллин, И.Р. Нигматуллин, А.С. Моджибовский. М.: Техинформ «МАИ». 2001. 76 с.

8 Ab initio исследование строения и свойств органических дисульфидов нефтяного происхождения с алкильными заместителями / Ю.А. Борисов, К.И. Дюсенгалиев, Т.П. Сериков, А.З. Бисенов // Математическое моделирование научно-технологических и экологических проблем в нефтегазодобывающей промышленности: материалы V казахстанско-рос. межд. науч.-практ. конф., Атырау, Атырауский институт нефти и газа, 2005. Ч. I. С.39-43.

9 Квантово-химическое изучение фотохимической реакции присоединения диалкилдисульфидов к олефинам / Ю.А. Борисов, А.К. Дюсенгалиев, Г.А. Оразова, Т.П. Сериков // Нефтехимия. 2009. Т. 49. № 3. С. 258-262.

10 Head-Gordon M., Head-Gordon T. Analytic MP2 frequencies without fifth order storage: theory and applicatio // Chem. Phys. Lett. 1994. V. 220. P.122.

11 Woon D.E., Dunning T.H. Jr. Correlation consistent basis sets with redundant functions // J. Phys. Chem. 1993. V.98. P.1358.

12 Оаз С. Химия органических соединений серы / Под ред. Прилежаевой Е.Н. М.: Химия, 1975. 512 с.

13 Коваль И.В. Химия дисульфидов // Успехи химии. 1994. Т.63. №9. С.776-792.

References

1 Sostav «disulfidnogo masla» shirokoj frakcii legkih ulevodorodov nefti Tengizskogo GPZ / K.I. Dyusengaliev, D.S. Ermekov, S.M. Muhanalieva, S.S. Daralieva, S.M. Izmagambetova, A.G. Sokolova // Izv. Nacionalnoj akademii nauk Respubliki Kazahstan. Ser. Him. Almaty, 1995, №6. S. 27-31. [in Russian].

2 Ispolzovanie disulfidnogo masla v vysokotemperaturnom sinteze geterociklicheskih soedinenij / E.N. Derjagina, N.A. Korchevin, E.N. Suhomazova, N.V. Russavskaja, E.P. Levanova // Neftehimija, 1995, T.35, № 5. S. 472-476. [in Russian].

3 Dyusengaliev K.I., Bisenov A.Z., Serikov T.P. Methyl Ethyl Disulfide: isolation, identification, and photochemical reactions with α -olefins // Petroleum Chem., 2005. V. 45. No. 3. P. 216-217.

4 Djusengaliev K.I., Bisenov A.Z., Serikov T.P. Perspektivy primeneniya «disulfidnogo masla» i ego komponentov // Neft i gaz, 2005, №5. S. 61-71. [in Russian].

5 Sravnitelnoe mass-spektrometricheskoe izuchenie nekotoryh simmetrichnyh i nesimmetrichnyh dialkildisulfidov sostava S₂-S₁₆ / S.Zh. Zhumagaliev, K.I. Djusengaliev, B.I. Kuanyshev, D.K. Kulbatyrov, T.P. Serikov // Izv. Nacionalnoj akademii nauk Respubliki Kazahstan. Ser. him. i tehn., 2011, №5 (389). S. 13-20. [in Russian].

6 Vulfson N.S., Zaikin V.G., Mikaja A.I. Mass-spektrometrija organicheskikh soedinenij. Moscow: Himija, 1986. 312 s. [in Russian].

7 Tehnologija organicheskikh soedinenij sery / A.H. Sharipov, V.R. Nigmatullin, I.R. Nigmatullin, A.S. Modzhibovskij. Moscow: Tehinform «MAI», 2001. 76 s. [in Russian].

8 Ab initio issledovanie stroeniya i svojstv organicheskikh disulfidov neftjanogo proishozhdeniya s alkilnymi zamestiteljami / Y.A. Borisov, K.I. Djusengaliev, T.P. Serikov, A.Z. Bisenov // Matematicheskoe modelirovanie nauchno-tehnologicheskikh i jekologicheskikh problem v neftegazodobyvajushhej promyshlennosti: materialy V kazahstansko-rossijskoj mezhd. nauch.-prakt. konf., chast I. Atyrau, Atyrauskij institut nefti i gaza, 2005. S. 39-43. [in Russian].

9 Kvantovo-himicheskoe izuchenie fotohimicheskoy reakcii prisoedineniya dialkildisulfidov k olefinam / Y.A. Borisov, A.K. Djusengaliev, G.A. Orazova, T.P. Serikov // Neftehimija, 2009, T. 49, № 3. S. 258-262. [in Russian].

10 Head-Gordon M., Head-Gordon T. Analytic MP2 frequencies without fifth order storage: theory and applicatio // Chem. Phys. Lett. 1994. V. 220. P.122.

11 Woon D.E., Dunning T.H. Jr. Correlation consistent basis sets with redundant functions // J. Phys. Chem. 1993. V.98. P.1358.

12 Oaje S. Himija organicheskikh soedinenij sery / Pod red. Prilezhaevoj E.N. Moscow: Himija, 1975. 512 s. [in Russian].

13 Koval I.V. Himija disulfidov // Uspehi himii, 1994, T.63, №9. S. 776-792. [in Russian].

Сведения об авторах

About the authors

Кулбатыров Д. К., ведущий научный сотрудник Каспийского исследовательского института, РГП на ПХВ «Атырауский институт нефти и газа», г. Атырау, Республика Казахстан.

D. K. Kylbaturov, leading scientists of the Caspian Research Institute, Atyrau Institute of Oil and Gas, Atyrau, Kazakhstan.

e-mail: dkkd@mail.ru

Шамбилова Г.К., д-р хим. наук, профессор кафедры «Химия и экология», РГП на ПХВ Атырауский государственный университет университет им. Х. Досмухамедова, г. Атырау, Республика Казахстан.

Shambilova G. K., Doctor of Chemistry, Professor of “Chemistry and ecology”, Atyrau State University named after Kh. Dosmukhamedov, Atyrau, Kazakhstan.

e-mail: shambilova_gulba@mail.ru

Каримов О. Х., канд. техн. наук, доценты кафедры «Общая химическая технология», филиал ФГБОУ ВО УГНТУ, г. Стерлитамак, Российская Федерация.

O. K. Karimov, Candidate of Engineering Sciences, Assistant Professor in the of Chair «Chemical Engineering», Ufa State Petroleum Technological University, Branch Sterlitamak, Russian Federation.

e-mail: karimov.oleg@gmail.com

Тлеккабылова А. А., магистрант, ФГБОУ ВО УГНТУ, филиал г. Стерлитамак, Российская Федерация.

A. A. Tlekkabylova, Masters of Sciences, Ufa State Petroleum Technological University, Sterlitamak, Russian Federation.

e-mail: taigerim93@mail.ru