

УДК 665:547.279.3:530.145

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СУБСТИТУТОВ
ДИСУЛЬФИДНОГО МАСЛА УГЛЕВОДОРОДНОГО СЫРЬЯ**

**PHYSICOCHEMICAL CHARACTERISTICS OF THE CRUDE
'DISULFIDE OIL' SUBSTITUTES**

Дюсенгалиев К.И., Сагинаев А.Т., Кулбатыров Д.К., Борисов Ю.А.,
Каримов О.Х.

Атырауский институт нефти и газа, г. Атырау, Республика Казахстан
Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова
РАН, г. Москва, Российская Федерация
Уфимский государственный нефтяной технический университета,
филиал, г. Стерлитамак, Российская Федерация

K.I. Dysengaliev, A.T. Saginaev, D.K. Kylbaturov, Y. A. Borisov,
O.Kh. Karimov

Atyrau Institute of Oil and Gas, Atyrau, Kazakhstan
A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds of Russian
Academy of Sciences (INEOS RAS), Moscow, the Russian Federation
Ufa State Petroleum Technological University, Branch, Sterlitamak,
the Russian Federation

e-mail: asaginaev@mail.ru

Аннотация. Современным промышленным методом очистки углеводородного сырья от меркаптанов является их окисление в щелочной среде молекулярным кислородом до диалкилдисульфидов (образующих дисульфидное масло).

На Тенгизском ГПЗ дисульфидное масло вводят в товарную нефть и оно вместе с нефтью поступает на НПЗ, что имеет отрицательные

последствия – приводит к увеличению содержания общей серы в товарной нефти, способствует коррозии оборудования как при транспортировке, так и при последующей переработки нефти в связи с возможными превращениями дисульфидов в меркаптаны под термическим воздействием или других факторов переработки нефти.

В статье представлена информация о субститутах дисульфидного масла Тенгизского ГПЗ. Дисульфидное масло представляет собой смесь следующих компонентов (субститутов): диметилдисульфидов, метилэтилдисульфидов и диэтилдисульфид.

Химические свойства дисульфидов определяются низкой прочностью дисульфидной связи. Многие восстановители, например NaHSO_3 , гидриды металлов, атомарный водород, легко восстанавливают дисульфиды до тиолов. Многие реакции дисульфидов нефтяного происхождения протекают при активации и расщеплении $-S-S-$ связи, поэтому изучение геометрического и электронного строения дисульфидов и природы $-S-S-$ связи представляется важным при прогнозировании реакционной способности этих соединений.

В работе изучены свойства субститутов дисульфидного масла. Определены их физико-химические характеристики. Квантово-химические расчеты выполнены методом функционала плотности в варианте Бекке-Ли-Янг-Парра (B3LYP) с использованием базисов 6-31G* и aug-cc-pVDZ. Установлено строение субститутов ДСМ в основном электронном состоянии, рассчитаны их геометрические, электронные и энергетические характеристики.

Abstract. Modern industrial cleaning method of hydrocarbons from the mercaptan is their oxidation in an alkaline medium with molecular oxygen to dialkyl disulfides (forming a disulfide oil).

In Tengiz GPP disulfide oil is introduced into the commodity oil, and it is with the oil arrives at the refinery, which has negative consequences - results in an increase of total sulfur content in the commodity oil, promotes corrosion of

equipment both at transportation and at the subsequent processing of the oil in relation to possible conversions of disulphides in mercaptans under thermal exposure or other factors at oil refining.

This paper describes physicochemical characteristics of the crude Disulfide Oil (DSO) substitutes obtained from the Tengiz Gas Processing Plant (Tengiz GPP). DSO is characterized as a mixture of following compounds (substitutes): dimethyldisulfides, methylethyldisulfides and diethyldisulfides.

The chemical properties of disulfides determined by low strength disulfide bond. Many reducing agents, such as NaHSO_3 , metal hydrides, atomic hydrogen easily recovered disulfides to thiols. Many reactions disulfide petroleum origin occur during activation and cleavage of -S-S- bonds, therefore the study the geometric and electronic structure of disulfide and the nature of -S-S- bond is important in predicting the reactivity of these compounds.

Throughout the course of the study, we were able to investigate properties of DSO substitutes, where physicochemical characteristics of these compounds were determined and addressed in the paper. Additionally, quantum chemical calculations were carried out based on the Density Functional Theory (B3LYP variation) using the 6-31G* and aug-cc-pVDZ basis sets. Therefore, we were able to successfully determine configuration of the DSO substitutes in their main electron state, identify the geometry of the substitutes, as well as, calculate their electron and energy configurations.

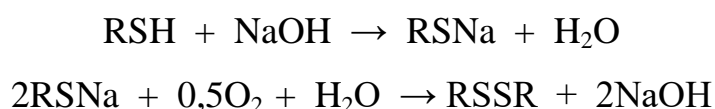
Ключевые слова: дисульфидное масло, диметилдисульфид, метилэтилдисульфид, диэтилдисульфид, сераорганические соединения, органические диалкилдисульфиды, синтез.

Key words: disulfide oil, dimethyldisulfide, methylethylsulfide, diethylsulfide, sulfur-containing compounds, organic dialkylsulfides, synthesis.

Поиск путей квалифицированного использования нефтяных дисульфидов требует целенаправленных исследований реакционной способности органических дисульфидов для разработки простых и удобных методов синтеза более ценных в прикладном отношении новых соединений серы с заданными свойствами. Результаты таких исследований могут быть полезными в подходе к решению проблемы извлечения нефтяных дисульфидов.

Современным промышленным методом очистки углеводородного сырья от меркаптанов является их окисление в щелочной среде молекулярным кислородом до диалкилдисульфидов в присутствии фталоцианиновых катализаторов [1-3].

При очистке сырья от меркаптанов протекают следующие основные реакции:



Как видно из приведенных реакций, побочным продуктом процесса является смесь органических диалкилдисульфидов RSSR – дисульфидное масло (ДСМ), проблема утилизации которого с установок демеркаптанации остается нерешенной до настоящего времени [4].

Укажем, что ДСМ представляет собой смесь следующих компонентов (субститутов): диметилдисульфидов (ДМДС), метилэтилдисульфидов (МЭДС) и диэтилдисульфид (ДЭДС). В работе [5] осуществлен высокотемпературный синтез на основе ДСМ и его отдельных субститутов: ДМДС и ДЭДС при 580–610 °С с получением таких ценных и труднодоступных веществ как тиофен и его производные, детально обсуждены механизмы превращения изученных сераорганических соединений посредством тиильных радикалов, в том числе, генерируемых из дисульфидов.

Авторами работ [4, 6] разработан новый эффективный способ синтеза тиофена с использованием в качестве сырья органических диалкилдисульфидов (побочного продукта демеркаптанализации углеводородного сырья) с использованием модифицированного магний-хром-алюмооксидного катализатора.

Ранее нами изучены выделение одного из субститутов ДСМ Тенгизского ГПЗ - МЭДС и его фотохимические реакции с α -олефинами [7].

Методами конфигурационного взаимодействия (RCIS, CASSCF) нами [8] проведено изучение ДМДС и МЭДС в основном (S_0) и возбужденном (S_1) электронных состояниях. Для обеих молекул при адиабатическом переходе $S_0 \rightarrow S_1$ неплоское зигзагообразное геометрическое строение с диэдрическим углом C-S-S-C 88° превращается в плоское.

Опубликованные сведения о химической природе ДСМ углеводородного сырья и его субститутов весьма скудны, и настоящая работа имеет своей целью в некоторой степени восполнить этот пробел.

Экспериментальная часть

Объектами исследования является ДСМ Тенгизского ГПЗ. Обезвоженные образцы ДСМ перегоняли в атмосфере аргона аналогично [9]. Очистку субститутов проводили с помощью колоночной хроматографии: 600x20, носитель – силохром С-80, в качестве элюента использован абс. бензол. Растворитель отгоняли, очищенный продукт подвергали анализам: определяли физико-химические характеристики (таблицы 1 и 2) и записывали ИК-спектры.

Результаты и их обсуждение

Современным промышленным методом очистки углеводородного сырья от меркаптанов является их окисление в щелочной среде молекулярным кислородом в присутствии катализаторов. Побочным

продуктом процесса является смесь диалкилдисульфидов (C_1-C_3) – дисульфидное масло.

Органические дисульфиды содержат в молекуле два связанных друг с другом атома серы. Длина связи S-S примерно 0,2 нм, барьер вращения вокруг этой связи до 67 кДж/моль. Энергия диссоциации дисульфидной связи – около 293 кДж/моль.

На Тенгизском ГПЗ ДСМ вводят в товарную нефть и оно вместе с нефтью поступает на НПЗ, что имеет отрицательные последствия – приводит к увеличению содержания общей серы в товарной нефти, способствует коррозии оборудования как при транспортировке, так и при последующей переработки нефти в связи с возможными превращениями дисульфидов в меркаптаны под термическим воздействием или других факторов переработки нефти.

Диалкилдисульфиды (дитиаалканы) – высококипящие дурнопахнущие маслянистые жидкости, сильно преломляющие свет. Алифатические дисульфиды не растворяются в воде, хорошо растворяются в органических растворителях (таблица 1).

Таблица 1. Физико-химические свойства некоторых диалкилдисульфидов

Показатель	ДМДС	МЭДС	ДЭДС
Химическая формула	CH_3SSCH_3	$CH_3SSC_2H_5$	$C_2H_5SSC_2H_5$
Внешний вид	прозрачная, светло-жёлтая жидкость	маслянистая жидкость	маслянистая жидкость
Молекулярная масса	94,2	108,23	122,25
Плотность, кг/м ³	1057	1022	993
Температура кипения, °С	109,7	131,6	154,1
Показатель преломления	1,5259	1,5146	1,5060
Содержание серы, % масс.	68,09	59,26	52,46
Растворимость			
вода	не растворим	не растворим	трудно растворим
диэтиловый эфир	растворим	растворим	смешивается
этанол	растворим	растворим	смешивается

Химические свойства дисульфидов определяются низкой прочностью дисульфидной связи. Многие восстановители, например $NaHSO_3$, гидриды металлов, атомарный водород, легко восстанавливают дисульфиды до

тиолов. Восстановительное расщепление связи S—S вызывают также горячая вода под давлением, OH– (особенно легко в присутствии солей тяжелых металлов) и CN–, монотиофосфорная кислота, третичные фосфины, некоторые тиолы, тио- и дитиогликоли.

В кислых средах дисульфиды восстанавливаются на ртутном катоде при потенциале до 2 В. Дисульфиды окисляются пероксидами или пероксокислотами до сульфокислот RSO_3H , сульфиновых кислот RSO_2H , тиосульфидов $RS(O)SR'$, тиосульфатов RSO_2SR' , α -дисульфонов RSO_2SO_2R' . При УФ облучении дисульфиды образуют тиольные радикалы RS^* . Дисульфиды легко взаимодействуют с Cl_2 , Br_2 и сульфурилгалогенидами.

Основным компонентом дисульфидного масла является диметилдисульфид.

Диметилдисульфид (ДМДС) (2,3-дителибутан) – бесцветная жидкость с неприятным запахом. По сравнению с другими гомологами он проявляет повышенную реакционную способность при хлорировании по связям C–H, селективность его реакций с солями органических кислот, фосфинов и др. и с неопределенными соединениями выше.

Диалкилдисульфиды токсичны.

Гигиенические нормативы диметилдисульфида:

- ПДК в воздухе (при однократном воздействии) $0,7 \text{ мг/м}^3$, 4 класс опасности;
- ПДК в воде $0,04 \text{ мг/л}$, 3 класс опасности;
- ПДК в рыбном хозяйстве $0,00001 \text{ мг/л}$, токсичен, 1 класс опасности.

Гигиеническая характеристика диэтилдисульфида – умеренно опасное при однократном внутрижелудочном и малоопасное при однократном ингаляционном поступлении в организм, 3 и 4 класс опасности соответственно. Обладает умеренной способностью к кумуляции. Раздражает кожу и слизистые оболочки глаз. Проникает через неповрежденные кожные покровы. Не обладает сенсibiliзирующим действием [10].

Вещества с дисульфидной связью (-S-S-) применяются в биологических процессах, в химии сераорганических соединений в качестве инициатора полимеризации, активатора катализаторов, присадок к смазочным маслам, антиоксидантов и одорантов природных и сжиженных газов. Проводимые работы, связанные с комплексным использованием ДСМ, с точки зрения прикладной стороны ведутся по двум направлениям: непосредственное использование его в различных областях народного хозяйства и разделение смеси диалкилдисульфидов на составляющие субституты с целью очистки их до коммерческой продукции и реализации. Например, ДМДС по «Каталогу чистых реактивов» [11] имеет стоимость 180 рублей за один килограмм (метилэтилдисульфид - 35200, диэтилдисульфид 39500 рублей за 1 кг).

В таблице 2 приведены физико-химические характеристики субститутов ДСМ и методы испытаний [10].

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

Таблица 2. Физико-химические характеристики субститутов ДСМ и методы испытаний

ДМДС				МЭДС		ДЭДС	
п/п	Наименование показателя	Нормы	Методы испытаний	Нормы	Методы испытаний	Нормы	Методы испытаний
	Внешний вид	Жидкость желтого цвета	Визуально	Жидкость желтого цвета	Визуально	Жидкость желтого цвета	Визуально
1	Пределы кипения, °С	109 ± 0,5	ГОСТ 2177- 82	138 ± 0 ,5	ГОСТ 2177-82	153 ± 0,5	ГОСТ 2177-82
2	Плотность при 20 °С, г/см ³	1,063 ± 0,01	ГОСТ 3900 – 66, раздел III	1,0521 ± 0,01	ГОСТ 3900-66, раздел III	0,992 ± 0,01	ГОСТ 3900-66, раздел III
3	Показатель преломления	1,5250 ± 0,002	Рыбак В.М. «Анализ нефти и нефтепродук-тов» -М., 1962. С.82	1,4280 ± 0,002	Рыбак В.М. «Анализ нефти и нефтепродук-тов» - М., 1962. С. 82	1,5001 ± 0,002	Рыбак В.М. «Анализ нефти и нефтепродук-тов» - М., 1962. С.82
4	Содержание основного продукта, %, не менее	99,0 ± 0,5	Методы анализа органических соединений нефти, их смесей и производных. – М., Ч.1 . Изд. АН СССР, 1960, С.58-84.	99,0 ± 0,5	Методы анализа органических соединений нефти, их смесей и производных. - М. Ч.1. Изд. АН СССР, 1960, С.58-84.	99,0 ± 0,5	Методы анализа органических соединений нефти, их смесей и производных. -М. Ч.1. Изд. АН СССР, 1960.С.58-84.
5	Молекулярная масса	94,154	Криоскопия. Рыбак Б.М. «Анализ нефти и нефтепродук-тов». – М., 1962. С. 60.	108,15	Криоскопия. Рыбак.Б.М. «Анализ нефти и нефтепродук-тов». – М., 1962. С.60.	122,16	Криоскопия. Рыбак.Б.М. «Анализ нефти и нефтепродук-тов». – М., 1962. С.60.

В таблице 3 приведены геометрические, электронные и энергетические характеристики молекул субститутов ДСМ: ДМДС, МЭДС и ДЭДС.

Расчеты были выполнены методом функционала плотности в варианте Бекке-Ли-Янг-Парра (B3LYP) с использованием базисов 6-31G* и aug-cc-pVDZ.

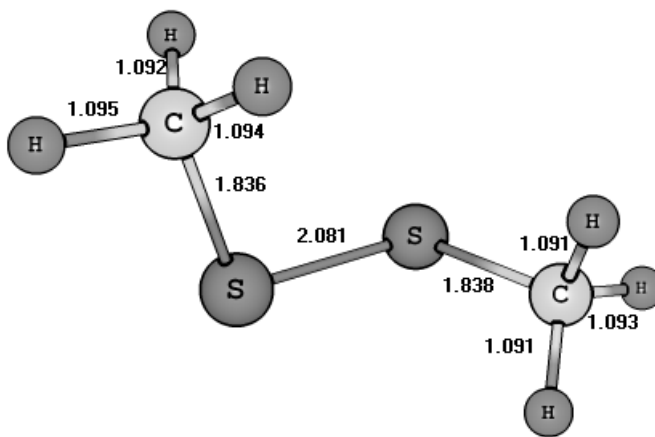
На рисунке 1 приведено строение нейтральных молекул субститута ДСМ - ДМДС (рисунок 1, а), субститута ДСМ - МЭДС (рисунок 1, б) и субститута ДСМ - ДЭДС (рисунок 1, в) (R1S1- S2 R2) в основном электронном состоянии.

Таблица 3. Геометрические, электронные и энергетические характеристики молекул субститутов ДСМ: ДМДС, МЭДС и ДЭДС

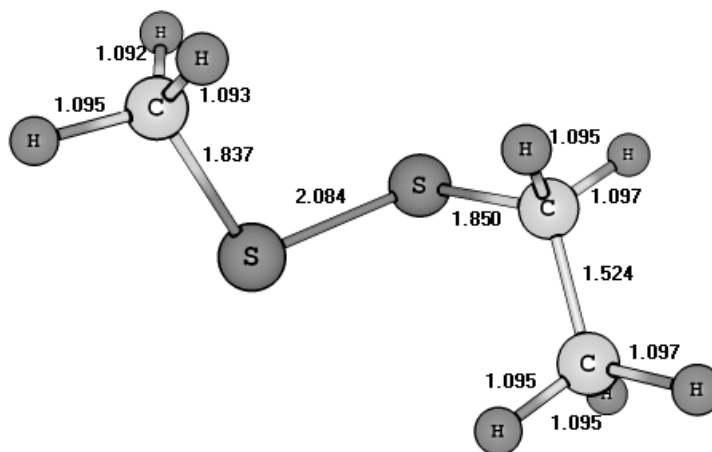
Молекула/свойство	ДМДС	МЭДС	ДЭДС
E, а.е.	-876,2073	-915,5230	-954,8385
R(S-S)	2,0813	2,0836	2,0838
R(C ₁ -S)	1,8359	1,8368	1,8499
K(S-C ₂)	1,8379	1,8495	1,8499
μ(D)	2,27	2,26	2,26
β (C ₁ -S-S)	103,35	103,09	103,83
β (S-S-C ₂)	103,27	103,99	103,83
γ (C ₁ -S-S-C ₂)	85,81	87,81	88,59
HOMO(eV)	-0,2364	-0,2356	-0,2342
LUMO(eV)	-0,0226	-0,0205	-0,0184
ν(S-S)	489 (510)	486 (480)	486 (480)
ν(C ₁ -S)	1374 assym. 1383 symm (1325)	1379 (1325)	1310 assym. 1324 symm
ν(S-C ₂)	1374 assym. 1383 symm (1325)	1315(1325)	1310 assym. 1324 symm
α _{xx}	75,04	86,55	101,04
α _{yy}	47,41	59,63	70,96
α _{zz}	44,44	55,36	64,45
q(C ₁)	-0,822	-0,822	-0,591
q(S ₁)	0,086	0,083	0,075
q(C ₂)	0,086	0,079	0,075
q(S ₂)	-0,822	-0,592	-0,591

Примечание: μ-дипольные моменты, α - компоненты тензора поляризуемости, q – эффективные заряды на атомах по Левдину (с использованием натуральных орбиталей)

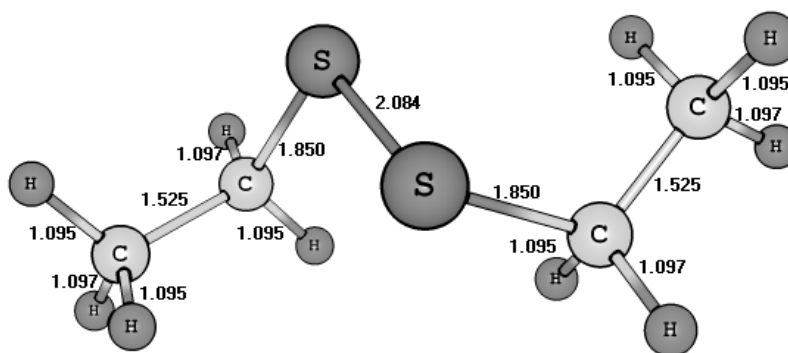
Физико-химическими и квантово-химическими методами исследованы субституты дисульфидного масла Тенгизского ГПЗ. На основании полученных результатов однозначно идентифицированы субституты дисульфидного масла состава C₂-C₄.



a



б



в

Рисунок 1. Структура заместителей ДСМ: ДМДС (*a*), МЭДС (*б*), ДЭДС (*в*)
 в основном электронном состоянии

Список используемых источников

- 1 Улучшение качества бензина каталитического крекинга / Э.М. Ишмаева, Д.Р. Булатов, Г.М. Сидоров // Нефтегазовое дело: электронный научный журнал. 2016. № 1. С. 158-168.
- 2 Пат. США. №3565959. Process oxidizing mercaptans to disulfides / M. Nambu, T. Shioiri, S. Takase, H. Watanabe
- 3 Современные проблемы обессеривания нефтей и нефтепродуктов / С.А. Борисенкова, А.Ф. Вильданов, А.М. Мазгаров // Российский химический журнал. 1995. Т.39. №5. С.87-90
- 4 Каталитический синтез тиофена из диалкилдисульфидов и н-бутана / А.Ю. Копылов, Р.Р. Садыков, К.Г. Садиков, А.М. Мазгаров, А.Ф. Вильданов, З.Р. Исмагилов, С.Р. Хайрулин, С.А. Яшник // Нефтехимия. 2008. Т.48. №2. С.112-117
- 5 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
- 6 Садыков Р.Р. Технология каталитического синтеза тиофена из диалкилдисульфидов и С4-углеводородов. Автореф. дисс. канд. техн. наук. - Казань.: КГУ, 2009. 16 с.
- 7 Метилэтилдисульфид: извлечение, идентификация и фотохимические реакции с б-олефинами / К.И. Дюсенгалиев, А.З. Бисенов, Т.П. Сериков // Нефтехимия. 2005. Т.45. №3. С.239-240
- 8 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

9 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. НАН РК. Сер. хим., 1995. № 5. С.27-31

10 Обзор рынка дисульфидного масла в России: аналит. обзор, август 2012 г. / Исследовательская группа «Инфолайн». М.: Инфолайн, 2012. 107 с.

11 URL: <http://flagma.ru/dimetildisulfid-so234677-1.html>

12 Варианты рационального использования дисульфидного масла Тенгизского и Жанажольского ГПЗ / К.И. Дюсенгалиев, Т.П. Сериков, А.К. Дюсенгалиев, Д.К. Кулбатыров, Н.К. Надиров, Г.Д. Алдиярова // Нефть и газ. 2009. №1. С.41-45

References

1 Uluchshenie kachestva benzina kataliticheskogo krekinga / E.M. Ishmaeva, D.R. Bulatov, G.M. Sidorov // Neftegazovoe delo: jelektronnyj nauchnyj zhurnal. 2016. № 1. S. 158-168. [in Russian].

2 Patent USA №3565959. Process oxidizing mercaptans to disulfides / M. Nambu, T. Shioiri, S. Takase, H. Watanabe

3 Sovremennye problemy obesserivanija neftej i nefteproduktov / S.A. Borisenkova, A.F. Vildanov, A.M. Mazgarov // Rossijskij himicheskij zhurnal, 1995, T.39, №. 5, S.87-90 [in Russian].

4 Kataliticheskij sintez tiofena iz dialkildisulfidov i n-butana / A.Y. Kopylov, R.R. Sadykov, K.G. Sadikov, A.M. Mazgarov, A.F. Vildanov, Z.R. Ismagilov, S.R. Hajrulin, S.A. Jashnik // Neftehimija, 2008, T.48, № 2, S. 112-117 [in Russian].

5 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].

6 Sadykov R.R. Tehnologija kataliticheskogo sinteza tiofena iz dialkildisulfidov i C₄-uglevodorodov. Avtoref. diss. kand. tehn. nauk. Kazan: KGU, 2009. 16 s. [in Russian].

7 Metiljetildisulfid: izvlechenie, identifikacija i fotohimicheskie reakcii s b-olefinami / K.I. Djusengaliev, A.Z. Bisenov, T.P. Serikov // Neftehimija, 2005, T.45, № 3, S. 239-240. [in Russian]

8 Kvantovo-himicheskoe izuchenie fotohimicheskoj reakcii prisoedinenija 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]

9 Sostav disulfidnogo masla shirokoj frakcii legkih uglevodorodov nefti Tengizskogo GPZ / K.I. Djusengaliev, D.S. Ermekov, S.M. Muhanalieva, S.S. Daralieva, S.M. Izmagambetova, A.G. Sokolova // Izv. NAN RK. Ser. him., 1995, T. 5, S. 27-31. [in Russian].

10 Obzor rynka disulfidnogo masla v Rossii: analit. obzor, avgust 2012 g. // Issledovatel'skaja grupa «Infomajn». M.: Infomajn, 2012. 107 s. [in Russian]

11 URL: <http://flagma.ru/dimetildisulfid-so234677-1.html>

12 Varianty racionalnogo ispolzovanija disulfidnogo masla Tengizskogo i Zhanazholskogo GPZ / K.I. Djusengaliev, T.P. Serikov, A.K. Djusengaliev, D.K. Kulbatyrov, N.K. Nadirov, G.D. Aldijarova // Neft i gaz, 2009, №. 1. S.41-45. [in Russian]

Сведения об авторах

About the authors

Дюсенгалиев К.И., д-р хим. наук, профессор, Атырауский институт нефти и газа, г. Атырау, Республика Казахстан

K. I. Dysangaliev, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Atyrau Institute of Oil and Gas, Atyrau, Kazakhstan

Сагинаев А. Т., д-р хим. наук, профессор, заведующий лабораторией инженерного профиля «Нефтехимия», Атырауский институт нефти и газа, г. Атырау, Республика Казахстан

A. T. Saginaev, Doctor of Chemical Sciences, Professor, the head of the chemical and petroleum engineering laboratory, Atyrau Institute of Oil and Gas, Atyrau, Kazakhstan

e-mail: asaginaev@mail.ru

Кулбатыров Д. К., ведущий научный сотрудник Каспийского исследовательского института, 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

Борисов Ю. А., д-р хим. наук, профессор, заведующий лаборатории компьютерной химии, Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, г. Москва, Российская Федерация

Y. A. Borisov, Doctor of Chemical Sciences, Professor, the head of Laboratory of Computational Chemistry, A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds of Russian Academy of Sciences (INEOS RAS), Moscow, the Russian Federation

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

O. Kh. Karimov, Candidate of Engineering Sciences, Assistant Professor of the Chair «Chemical Engineering» FSBEI HE USPTU, Branch, Sterlitamak, the Russian Federation

e-mail: karimov.oleg@gmail.com