

E.B.ZEYNALOV, D.B.TAĞIYEV, S.B.ZEYNALOV,
Ya.M.NAĞIYEV, E.R.HÜSEYNOV, F.B.NƏZƏROV,
A.B.HÜSEYNOV, M.Ya.MƏHƏRRƏMOVA,
N.A.MUSTAFAYEVA, N.M.ŞAHNƏZƏROVA,
A.F.NƏBİZADƏ

DİZEL YANACAĞININ KOMPONENT TƏRKİBİ
DIESEL FUEL COMPONENT COMPOSITION
КОМПОНЕНТНЫЙ СОСТАВ ДИЗЕЛЬНОГО
ТОПЛИВА



Preprint
2022

**AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR
AKADEMİYASI**

**AKADEMİK M.F.NAĞİYEV adına KATALİZ
VƏ QEYRİ-ÜZVİ KİMYA İNSTİTUTU**



**AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ
PREZİDENTİ YANINDA
ELMİN İNKİŞAFI FONDU**



AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA
ELMİN İNKİŞAFI FONDU

*Elm - inkişaf, rifah
və gələcək naminə!*



Eldar Zeynalov, Dilqəm Tağıyev, Sərdar Zeynalov, Yaqub Nağıyev, Elçin Hüseynov, Fətulla Nəzərov, Əsgər Hüseynov, Mətanət Məhərrəmovə, Nərmin Mustafayeva, Nərminə Şahnəzərova, Arzu Nəbizadə. Dizel yanacağıının komponent tərkibi. – Preprint. – Bakı: “Füyuzat” nəşriyyatı, 2022. – 92 s.

Təqdim olunan ilkin nəşr, ARDNŞ-in istehsalı olan avtomobil dizel yanacağıının komponentlərinin xromkütlə spektrometrik analizinin nəticələrini təsvir edir.

Alınan nəticələrə əsasən müəyyən edilmişdir ki, satışda olan dizel yanacağıının tərkibində 55.74% alifatik, 5.04% olefin, 12.79% naften, 8.32% aromatik və 9.52% naften-aromatik karbohidrogenləri vardır. Həmçinin, yanacağın tərkibində az miqdarda heteroatomlu komponentlər, metal komplekslər, steroid və komponentlərin qismən oksidləşmə məhsullarının da olduğu aşkar edilmişdir.

Əldə edilmiş məlumatlar mövsümi yanacağın optimal tərkibinin seçilməsi, bu sahənin mütəxəssisləri, eləcə də qiymətli üzvi məhsulların alınması, dizel yanacağını xammal kimi istifadə edən neft kimyaçıları üçün faydalı məlumatdır.

ISBN: 978-9952-37-740 8

**AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASI
AKADEMİK M.F.NAĞİYEV adına KATALİZ VƏ
QEYRİ-ÜZVİ KİMYA İNSTİTUTU**

**E.B.ZEYNALOV, D.B.TAĞIYEV, S.B.ZEYNALOV,
Ya.M.NAĞIYEV, E.R.HÜSEYNOV,
F.B.NƏZƏROV,
A.B.HÜSEYNOV, M.Ya.MƏHƏRRƏMOVA,
N.A.MUSTAFAYEVA, N.M.ŞAHNƏZƏROVA,
A.F.NƏBİZADƏ**

**DİZEL YANACAĞININ
KOMPONENT TƏRKİBİ**

“Füyuzat” nəşriyyatı

BAKİ - 2022

ARDNŞ-nin istehsal etdiyi dizel yanacağıının komponent tərkibi

Zeynalov E.B.¹, Tağıyev D.B.¹, Zeynalov S.B.¹,
Nağıyev Ya.M.¹, Hüseynov E.R.¹, Nəzərov F.B.², Hüseynov
A.B.¹, Məhərrəmov M.Ya.¹, Mustafayeva N.A.¹,
Şahnəzərova N.M.³, Nəbizadə A.F.¹

¹Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Kataliz və Qeyri-
üzvi Kimya İnstitutu

²"Karvan-L" MMC şirkəti

³Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti

Açar sözlər: *dizel yanacağıının komponentləri, qaz xromatoqrafiyası-kütlə spektrometrik analiz, neft karbohidrogenləri, dizel yanacağıının heteroatomlu komponentləri, neft-kimya xammalı kimi dizel yanacağı.*

Annotasiya

Təqdim olunan ilkin nəşr, ARDNŞ-in istehsalı olan avtomobil dizel yanacağıının komponentlərinin xromkütlə spektrometrik analizinin nəticələrini təsvir edir.

Alınan nəticələrə əsasən müəyyən edilmişdir ki, satışda olan dizel yanacağıının tərkibində 55.74% alifatik, 5.04% olefin, 12.79% naften, 8.32% aromatik və 9.52% naften-aromatik karbohidrogenləri vardır. Həmçinin, yanacağıın tərkibində az miqdarda heteroatomlu komponentlər, metal komplekslər, steroid və komponentlərin qismən oksidləşmə məhsullarının da olduğu aşkar edilmişdir.

Əldə edilmiş məlumatlar mövsümi yanacağıın optimal tərkibinin seçilməsi, bu sahənin mütəxəssisləri, eləcə də qiymətli üzvi məhsulların alınması, dizel yanacağıını xammal kimi istifadə edən neft kimyaçıları üçün faydalı məlumatdır.

I. GİRİŞ

Ədəbiyyat materiallarının analizi göstərir ki, dizel yanacağının tərkibində müxtəlif növ karbohidrogenlərin təhlilinə dair məlumatlar verən silsilə əsərlər mövcuddur.

Beləliklə, iş [1]-də dizel yanacağının karbohidrogen tərkibi sonuncunun istismar xüsusiyyətlərinə təsir aspektində nəzərdən keçirilir. Setan sayı, dizel indeksi, tökülmə nöqtəsi və s. kimi göstəricilər yanacağın keyfiyyət meyarları kimi qəbul edilmişdir. Məqalədə əldə edilən məlumatların yanacağın xüsusiyyətlərinin tam və hərtərəfli təsviri üçün kifayət etmədiyi qənaətinə gəlinir. Mono- və bitsiklik arenlərin, aşağı, yüksək molekullu alkanların, izoparafintlərin nisbəti, yəni yanacaqda olan fərdi karbohidrogenlərin kəmiyyət tərkibi haqqında əlavə məlumatlar lazımdır.

Başqa bir məqalədə, aşağı temperatur xüsusiyyətlərinə təsiri baxımından "LUKOYLNijeqorodnefteorqsintez" OOO tərəfindən birbaşa qovulma üsulu ilə istehsal olunan və sudan təmizlənmiş (yay və qış) dizel yanacaqlarının karbohidrogen tərkibi nəzərdən keçirilir [2].

Müəyyən edilmişdir ki, birbaşa qovulma üsulu ilə alınan dizel yanacağının tökülmə nöqtəsi onun tərkibinin təxminən 20%-ni təşkil edən yüngül fraksiyaların və ağır yüksək molekullu tsikloalkanların nisbətindən asılıdır. Yay və qış üslubunda sudan təmizlənmiş yanacaq üçün tələb olunan tökülmə nöqtəsini təyin edən amillər müvafiq

olaraq, onun tərkibinin təxminən 40 və 50%-ni təşkil edən fraksiyalardır.

Eyni müəlliflərin işində, “LUKOILNijeqorodnefteorq-sintez” OOO tərəfindən istehsal olunan ekoloji cəhətdən təmiz yanacaq üçün oxşar sxem tətbiq edilmiş və eyni nəticələr əldə edilmişdir [3]. Yüngül fraksiyaların məqbul axma nöqtəsi ilə yanaşı, həm də yüksək istilik sabitliyinə malik olduğu qeyd olunur. Təxminən 80% təşkil edən, sudan təmizlənmiş yanacağın ağır fraksiyaları onun əsas əməliyyat xüsusiyyətlərini təyin edən yüksək tökülmə nöqtəsinə malik və yuxarı temperaturda əriyən tsikloalkanlardır.

Xarici mütəxəssislər də bu tədqiqatlardan kənarda qalmayaraq, məsələnin ekoloji tərəfini və metodoloji yanaşmanı xüsusilə qeyd etmişlər. İş [4]-də, nəqliyyat yanacağının karbohidrogen tərkibinin müəyyən edilməsinin və onun miqdarının optimallaşdırılması prosesinin, həmçinin, işlənmiş qazların kənara atılması prosesi mühərrikin dizaynının vacib hissəsi olduğu göstərilir. Müəlliflər dizel yanacağında karbohidrogenlərin növlərinin ətraflı təyini üçün çox vacib olan ionlaşma kütlə spektrometriyası və qaz xromatoqrafiyasının (GC-IMC) birləşdirilmiş metodunu təqdim edirlər. Müəlliflər məlum standart üsullardan istifadə etməklə əldə edilən yanacaqların karbohidrogen tərkibinin profillərini müqayisə edərək, təklif olunan GC-IMC metodunun səmərəliliyini və həllini göstərmişlər. GC-IMS metodunun üstünlüyü göstərilir ki, bu da digərlərindən fərqli olaraq, n-parafinləri onların

izo-analoqlarından və tsikloparafintlərdən ayırmağa imkan verir [4].

Eyni müəlliflər, lakin başqa bir məqalədə dizel yanacağının səmərəli və etibarlı ekspress təhlili üçün GC-IC metodunu yenidən təqdim və tövsiyə edirlər. Metodun yeni üstünlükləri təsvir edilmiş, doymuş, doymamış karbohidrogenlərin, izo- və tsikloalkanların nisbəti məlum olan xüsusi hazırlanmış nəzarət nümunələrinin təhlilinin nəticələri verilmişdir. Müxtəlif üsullarla əldə edilən bütün nəticələr bir-birini tamamlayır, beləliklə, aparılan tədqiqatlar mürəkkəb neft sistemlərinin karbohidrogen tərkibinin təhlili üçün GC-IC metodundan istifadənin düzgünlüyünü və aktuallığını nümayiş etdirir [5].

Son 50 ildə kütlə-spektrometriya üsulu neft və digər yanacaqların analizi üçün geniş istifadə olunsada, bu metoddan istifadə etməklə böyük miqyaslı qaynama diapazonunda neftin ümumi tərkibinin hərtərəfli xarakteristikası aktual problem olaraq, qalır. Buna görə də kütlə-spektrometrlərinin getdikcə daha təkmilləşdirilmiş modelləri meydana çıxır ki, bu da birləşmələrin ətraflı identifikasiyası imkanlarını əhəmiyyətli dərəcədə genişləndirir.

İş [6]-da C_6 - C_{44} tərkibli neft məhsullarının ətraflı analizi üçün yüksək həssaslığa malik kütlə-spektrometriya xromatografi (GC-IE-HRMS) təklif olunur. Budan istifadə edərək, GC karbohidrogen molekullarını qaynama nöqtələri ilə ayırır, elektrik sahəsində ionlaşma (IE) həm aromatik, həm də doymuş yağ molekulları üçün bütöv molekulyar ionlar yaradır. Buna görə də, bu molekulyar

ionların elementar tərkibi 7000-ə qədər kütlə ayırdetmə qabiliyyətinə və ± 3 millidaltan kütlə ölçmə dəqiqliyinə malik, yüksək həssaslıqlı kütlə spektrometri (HRMS) ilə müəyyən edilir ki, bu da öz növbəsində neft karbohidrogen molekulları üçün ətraflı kimyəvi məlumatlar verir (heteroatomlu olması, atom tərkibi, halqaların sayı üstə gəl ikiqat rabitələr və karbon atomlarının sayı) [6].

Elektrik sahəsində (IE-VP-MSVR) qaz fazasında yaranan ionların uçuş vaxtı impuls analizatoru ilə təchiz edilmiş yüksək həssaslığa malik kütlə spektrometri mü-rəkkəb qarışıqların üç mərhələli ayrılmasını təmin edir. Nəticə etibarlı ilə tədqiqatçılar neft məhsullarının karbohidrogen tərkibi haqqında ən müfəssəl və ətraflı məlumat əldə etmək imkanına malik olurlar [7].

İş [8]-də orta neft distillatlarının sürətli kəmiyyət təhlili üçün ultrakritik maye xromatoqrafiyasının (SCLC) imkanlarını ultrabənövşəyi (UVD) və alov ionlaşmasının aşkarlanması (FID) ilə paralel olaraq, IE-VP-HRMS sahə ionlaşmasının uçuş vaxtı kütlə spektrometriyası ilə birləşdirən metodun istifadəsi haqqında məlumat verilir. SCLC xromatoqrafı neftin orta distillatlarını doymuş karbohidrogenlərə və 1-3 aromatik halqa ilə karbohidrogenlərə ayırır, IE SCLC-dən çıxarılan karbohidrogenlər üçün molekulyar ionlar yaradır. VP-HRMS kütlə spektrometriyasından istifadə edilməsi, yüksək dəqiqliklə (dəqiq kütlə ölçmələri nəticəsində) neft məhsulu molekullarının elementar tərkibini təyin etməyə imkan verir. Doymuş birləşmələrin miqdarı və aromatik halqaların növləri FID və UVD

detektorlarından paralel olaraq, istifadə etməklə ölçülür. Bu yanaşma və karbon sayının düzgün kalibrənməsi ilə orta neft distillatının tərkibi daha ətraflı, tez müəyyən edilir [8].

İonlaşma kütlə spektrometriyası (IMS) oxşar H / C nisbətlərinə malik olan, lakin 290°C (R-290) distillə temperaturunda son fraksiyada əhəmiyyətli dərəcədə fərqlənən iki yanacağın təhlili üçün istifadə edilmişdir [9]. Müəlliflər bu yanacaqların müxtəlif miqdarda işlənmiş qaz və hissəciklərin ayrılmasının səbəbini öyrənmək istəyiblər. IMS-nin nəticələri göstərdi ki, aşağı R-290 yanacağı yüngül alifatik karbohidrogenlərdən və yüksək karbonlu aromatik karbohidrogenlərdən ibarətdir, buna görə də aşağı alovlanma qabiliyyətinə malikdir. Beləliklə, yüksək R-290 olan yanacaqlara nisbətən karbohidrogenlərin və hissəciklərin ayrılmasının artması müşahidə edilmişdir [9].

Digər, ən müasir kütlə spektrometrik üsul iş [10]-da təqdim olunur. Metod elektrik sahəsində desorbsiya ionlaşmasını və fraksiyalaşdırılmış xam neft və emal prosesində aromatik birləşmələrin təfərrüatlı təyini üçün bir üsul kimi, Furiye transformasiyası (DI-MS-ICR-F) ilə ion-siklotron rezonans kütlə analizatorunu əhatə edir. Qeyri-qütblü molekulların DI-nin yüksək effektivliyi MS-ICR-F-dən istifadə edərək, görünməmiş kütlə həlli və dəqiqliklə birlikdə kondensasiya edilmiş fazada ~700-1400 növ karbohidrogen üçün elementar tərkibini birmənalı şəkildə təyin etməyə imkan verdi. Tədqiqatın müəllifləri elemen-

tar kompozisiya tapşırıqlarına əsasən, yüksək və aşağı kükürlü vakuumlu qazoylu, katalitik krekinin dib qalığı və koklaşan vakuum daxil olmaqla, neft emalı prosesi axınlarından zənginləşdirilmiş aromatik fraksiyalar üçün sinif və tipin tam tərifini verirlər. Belə proses axınları müxtəlif yağ formulalarında DI-MS-ICR-F imkanlarını nümayiş etdirmək üçün seçilmişdir. Bu üsuldən istifadə etməklə əldə edilən məlumatlar neft emalı zavodunun proses axınlarının proqnozlaşdırılan xüsusiyyətləri ilə yaxşı uyğunlaşır.

Beləliklə, neft fraksiyalarının karbohidrogen tərkibinin müəyyən edilməsi sahəsində tədqiqatların qısa icmalısı əsasında aşağıdakı nəticələrə gəlmək olar:

1. Ən informativ və istifadədə olanlar analizin kütlə spektrometrik üsullarıdır. Eyni zamanda, ionlaşma üsullarını və kütlə detektorlarının növlərini, eləcə də ayrı-ayrı xromatoqrafik əlavələri müxtəlifləşdirməklə tədqiqatçılar bir sıra neft sistemlərində karbohidrogenlərin demək olar ki, tam təhlilinə nail olurlar.

2. Dizel yanacağıının karbohidrogen tərkibinin müəyyən edilməsi, əsasən, yanacağın işlənmiş qazların və hissəciklərin emissiyası üzrə mövcud standartlara uyğunlaşdırılması, eləcə də müxtəlif yanacaqların mövsümi şəraitdə istifadəyə yararlılıq baxımından keyfiyyətinin tənzimlənməsinə yönəldilmişdir.

Beləliklə, ətraflı neft-yağ kompozisiyalarından istifadə təcrübəsinə əsaslanaraq, tədqiqatçılar, ekspertlər, mütəxəssislər və ümumiyyətlə, maraqlı şəxslər aromatiksizləşdiril-

miş və parafinsizləşdirilmiş dizel yanacağı fraksiyalarının komponenti, xüsusən də karbohidrogen tərkibi haqqında məlumatları öyrənməklə, lazımı nəzəri biliklərə malik olar, müvafiq proqnozlar və düzəlişlər edə bilirlər.

II. Metodoloji aspektlər, istifadə olunan obyektlərin və avadanlıqların xüsusiyyətləri

Tədqiqatın obyektı kimi, Azərbaycan Respublikası Dövlət Neft Şirkətinin avtomobillər üçün istehsal etdiyi dizel yanacağı götürülmüşdür.

Yanacağın və fraksiyaların karbohidrogen tərkibinin təhlili m/z kütlə = 30-550 diapazonunda komponentlərin müəyyən edilməsi ilə GC-MS aləti, Agilent texnologiyaları 7890B (GC)-5977B (MSD) üzərində xrom-kütlə spektrometrik analizlərin nəticələrinə əsasən aparılmışdır.

III. Kütlə-spektrometrik analiznin nəticələri

Cədvəl. Dizel yanacağı - Dizel 1

Nö	Alifatik karbohidrogenlər	miqdarı, %
	n-parafinlər	
1.	n-Heptane \$\$ $\text{n-C}_7\text{H}_{16}$	0,025
2.	n-Nonane \$\$ $\text{n-C}_9\text{H}_{20}$	0,321
3.	n-Decane \$\$ $\text{n-C}_{10}\text{H}_{22}$	0.659
4.	n-Undecane \$\$ $\text{n-C}_{11}\text{H}_{24}$	0,994
5.	n-Dodecane	1,533
6.	n-Tridecane	1.951
7.	n-Tetradecane	2.514
8.	n-Pentadecane \$\$ $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{13}\text{CH}_3$	3.613
9.	n-Hexadecane \$\$ Cetane	2,451
10.	n-Heptadecane	2.177
11.	n-Heptadecane	4.325
12.	Nonadecane (CAS) \$\$ n-Nonadecane	2.046
13.	n-Eicosane \$\$ Icosane	1.735
14.	n-Docosane \$\$ $\text{C}_{22}\text{H}_{46}$ Standard \$\$ N-docosane	1.179

15.	Tricosane (CAS) \$\$ n-Tricosane	0.747
16.	Tetracosane	0.329
17.	Pentacosane	0.072
18.	Hexacosane (CAS) \$\$ n-hexacosane \$\$ cerane	0.034
19.	Heneicosane \$\$ n-Heneicosane	1.658
Σ	Cəmi	26.186
	Mono-alkillə əvəzlənmiş alifatik karbohidrogenlər	
1.	3-Methylhexane	0.007
2.	2-Methylheptane \$\$ (CH ₃) ₂ CH(CH ₂) ₄ CH ₃	0.041
3.	3-Methyloctane \$\$ Isononane	0.223
5.	2-Methylnonane	0.136
6.	3-Methylnonane	0.104
7.	5-Methyldecane	0.166
8.	4-Methyldecane	0.085
9.	2-Methyldecane \$\$ n-C ₈ H ₁₇ CH(CH ₃) ₂	0.209
10.	3-Methyldecane \$\$ 2-Ethylnonane	0.126
11.	4-Methylundecane	0.291
12.	5-Methylundecane	1.061
13.	2-Methylundecane	0.471

14.	3-Methyldodecane	1.026
15.	2-Methyldodecane	1.595
16.	4-Methyltridecane	0.882
17.	3-Methyltetradecane	1.100
18.	2-Methylpentadecane	0.738
19.	2-Methylhexadecane	1.166
20.	3-Methylhexadecane	1.096
21.	2-Methylheptadecane	0.684
22.	3-Methylheptadecane	1.150
23.	3-Methyloctadecane	0.984
24.	9-Methylnonadecane	0.300
25.	10-Methylnonadecane	0.366
Σ	Cəmi	14.007
	Di-alkillə əvəzlənmiş alifatik karbohidrogenlər	
1.	2,4-Dimethylheptane	0.130
2.	2,3-Dimethylheptane	0.031
3.	2,6-Dimethyloctane \$\$ Octane, 2,6-dimethyl-	0.219
4.	2,3-Dimethyloctane	0.086

5.	3,7-Dimethylnonane	0.184
6.	2,6-Dimethylundecane	0.614
7.	4,8-Dimethylundecane	0.572
8.	2,5-Dimethyldodecane	0.453
9.	4,8-Dimethyltridecane	0.567
Σ	Cəmi	2.856
	Tri-alkillə əvəzlənmiş alifatik karbohidrogenlər	
1.	Dodecane, 2,6,10-trimethyl- \$\$ Farnesane	1.411
2.	2,6,10-Trimethylpentadecane	2.405
Σ	Cəmi	3.816
	Tetra-alkillə əvəzlənmiş alifatik karbohidrogenlər	
1.	Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) \$\$ Pristane (Field ion)	4.561
2.	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- \$\$ Phytane	4.313
Σ	Cəmi	8.874
Σ	Bütün alifatik karbohidrogenlərin ümumi tərkibi	55.739

	Naften karbohidrogenləri	
	Əvəz olunmamış naften karbohidrogenləri	
1.	Cyclodecane	0.041
2.	Cyclotetradecane	0.522
3.	Cyclopentadecane	0.423
4.	Naphthalene, decahydro-, cis- \$\$ cis-Decalin \$\$ cis-Perhydronaphthalene	0.054
5.	Naphthalene, decahydro-, trans- \$\$ trans-Bicyclo[4.4.0]Decane \$\$ trans- Decalin	0.165
6.	1H-Indene, octahydro-, cis- (CAS) \$\$ cis-Hexahydroindan \$\$ cis-Hydrindan	0.08
7.	Pentalene, octahydro-, cis- \$\$ cis-Bicyclo[3.3.0]octane	0.016
Σ	Cəmi	1.301
	Mono-alkillə əvəzlənmiş naften karbohidrogenləri	
1.	Ethylcyclopentane	0,015
2.	n-Decylcyclopentane \$\$ Decane, cyclopentyl-	1,787
3.	Methylcyclohexane \$\$ Sextone B	0,056
4.	Ethylcyclohexane	0,106
5.	n-Propylcyclohexane	0,141

6.	3-Methyl-1-cyclohexene	0.100
7.	n-Butylcyclohexane \$\$ Butane, 1-cyclohexyl-	0,181
8.	1-Cyclohexylheptane \$\$ n-Heptylcyclohexane	0,637
9.	Cyclohexane, pentyl- \$\$ Pentane, 1-cyclohexyl-	0,223
10.	Methylcyclododecane	0,335
11.	Naphthalene, decahydro-2-methyl- \$\$ 2-methyldecalin	0.219
12.	Decahydro-2-methylnaphthalene	0.376
13.	2-Methyloctahydropentalene	0.090
14.	Cyclohexane	0.536
Σ	Cəmi	4.802
	Di-alkillə əvəzlənmiş naften karbohidrogenləri	
1.	cis-1,3-Dimethylcyclopentane	0.006
2.	cis-1,2-Dimethylcyclopentane	0.008
3.	1-Ethyl-3-methylcyclopentane	0.020
4.	1-Ethyl-2-methylcyclopentane	0.040
5.	Cyclopentane, (1-methylethyl)- \$\$ Cyclopentane, isopropyl-	0.007
6.	trans-1-Methyl-2-propylcyclopentane	0.060

7.	Ethylpropylcyclopentane	0.046
8.	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0.057
9.	Cyclohexane, 1,1-dimethyl- \$\$ Gem-Dimethylcyclohexane	0.006
10.	Cyclohexane, 1,4-dimethyl- (CAS) \$\$ Hexahydroxylene	0.026
11.	trans-1-Ethyl-4-methylcyclohexane	0.068
12.	cis-1-Ethyl-4-Methylcyclohexane	0.029
13.	cis-1-Ethyl-3-methylcyclohexane	0.061
14.	cis-1,4-Dimethylcyclohexane	0.145
15.	1,6-Dimethylcyclohexene	0.066
16.	1-Methyl-2-propylcyclohexane	0.416
17.	(4-Methylpentyl)cyclohexane	0.356
18.	1-methyl-2-phenylcyclopropane \$\$ Benzene, (2-methylcyclopropyl)-	0.324
19.	2-Cyclohexyloctane \$\$ (1- Methylheptyl)cyclohexane	0.707
20.	Naphthalene, decahydro-1,6-dimethyl- (CAS) \$\$ 1,6-dimethyldecalin	0.178
21.	Decahydro-2,6-dimethylnaphthalene	0.147
22.	cis-1,3-Bis(acetamidomethyl)-1,3- dideuteriocyclohexane	0.511
Σ	C_{ami}	3.284

	Tri-alkillə əvəzlənmiş naften karbohidrogenləri	
1.	Cyclopentane, 1,2,4-trimethyl-, (1.alpha.,2.beta.,4.alpha.)-	0.009
2.	Cyclopentane, 1,2,3-trimethyl- (1.alpha. 2.alpha.,3.beta)	0.010
3.	1,1,3-Trimethylcyclohexane	0.075
4.	Cyclohexane, 1,2,3-trimethyl-, (1.alpha.,2.alpha.,3.beta.)-	0.019
5.	1,1,2-Trimethylcyclohexane	0.020
6.	1,2,3-Trimethylcyclohexane	0.025
7.	1-Ethyl-2,3-dimethylcyclohexane	0.015
8.	1-Ethyl-2,3-dimethylcyclohexane	0.026
9.	Bicyclo[3.1.1]heptane, 2,6,6-trimethyl-, [1S (1.alpha., 2.beta., 5.alpha.)]-	0.316
10.	Cyclotetradecane, 1,7,11-trimethyl-4-(1-methylethyl)- \$\$ Cembrane	0.393
Σ	Cəmi	0.908
	Tetra-alkillə əvəzlənmiş naften karbohidrogenləri	
1.	1,1,4,4-Tetramethylcyclohexane	0.014
2.	1-ethyl-2,2,6-trimethylcyclohexane \$\$ 2-ethyl-1,1,3-trimethylcyclohexane	0.048
3.	1,2,4,5-Tetraethylcyclohexane	0.378

4.	Cyclohexane, 1,2,3,5-tetraisopropyl-	0.670
Σ	Cəmi	1.11
	Penta-alkillə əvəzlənmiş naften karbohidrogenləri	
1.	Decahydro-4,4,8,9,10-pentamethylnaphthalene	0.656
Σ	Cəmi	0.656
	Heksa-alkillə əvəzlənmiş naften karbohidrogenləri	
1.	1,1,4,4,7,7-Hexamethylcyclononane	0.724
Σ	Cəmi	0.724
Σ	Bütün naften karbohidrogenlərinin ümumi tərkibi	12.785
	Olefin karbohidrogenləri	
	Əvəz edilməmiş olefin karbohidrogenləri	
1.	4-Decene \$\$ (4E)-4-Decene	0.134
2.	1-Nonene \$\$ n-Non-1-ene \$\$ 1-C ₉ H ₁₈ \$\$ Nonene-(1) \$\$ Nonylene	0.026
3.	7-Hexadecene,(Z)-\$\$ (7Z)-7-Hexadecene	0.617
4.	1-Heptadecene \$\$ Hexahydroaplotaxene	1.353
Σ	Cəmi	2.130

	Mono-alkillə əvəz edilmiş olefin karbohidrogen	
1.	4-Methyl-1-decene	0.705
2.	2-Methyl-Z-4-tetradecene	2.205
Σ	Cəmi	2.910
Σ	Bütün olefin karbohidrogenlərinin ümumi tərkibi	5.040
	Aromatik karbohidrogenlər	
	Əvəz olunmamış aromatik karbohidrogenlər	
1.	Benzene \$\$ [6]Annulene \$\$ Benzole \$\$ Coal naphtha \$\$ Cyclohexatriene	0.009
Σ	Cəmi	0.009
	Mono-alkillə əvəzlənmiş aromatik karbohidrogenlər	
1.	Toluene \$\$ Methacide \$\$ Methylbenzene \$\$ Methylbenzol	0.026
2.	Benzene, (1-methylethyl) \$\$ Isopropylbenzene \$\$ Cumene \$\$ Cumol	0.045
3.	Benzene, (1-methylpropyl)- (CAS) \$\$ sec-Butylbenzene \$\$ 2-Phenylbutane	0.053
4.	Benzene, (2-methyl-1-propenyl)- (CAS) \$\$ (2-Methylpropenyl)benzene	0.092

5.	Benzene, (1-methyl-1-butenyl)- \$\$ 2-Phenyl-2-pentene	0.343
6.	Benzene, (1-ethyl-1-propenyl) \$\$ 3-Phenyl-2-pentene\$\$3-Phenyl-3- pentene	0.230
7.	1-Methylnaphthalene	0.812
8.	alpha.,beta.,.beta.-Trimethylstyrene \$\$ 2-Butene, 2-methyl-3-phenyl-	0.181
Σ	Cəmi	1.782
	Di- alkilla əvəzlənmiş aromatik karbohidrogenlər	
1.	Benzene, 1-ethyl-3-methyl- \$\$ Toluene, m-ethyl- \$\$ m-Ethylmethylbenzene	0.212
2.	p –Xylene Benzene,1,4- dimethyl-1	0.109
3.	Benzene, 1-ethyl-2-methyl- \$\$ Toluene, o-ethyl- \$\$ o-Ethylmethylbenzene	0.070
4.	Benzene, 1-methyl-3-propyl- \$\$ Tolu- ene, m-propyl- \$\$ m-Propyltoluene	0.166
5.	Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)- \$\$ o-Cymene \$\$ o-Cymol	0.072
6.	Benzene, 1-methyl-2-propyl \$\$ 2- Propyltoluene \$\$ o-Propyltoluene	0.079
7.	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl) \$\$ 1-Sec-butyl-4-methylbenzene	0.058

8.	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl) \$\$ 1-Sec-butyl-4-methylbenzene	0.215
9.	1,6-Dimethylnaphthalene	0.999
Σ	Cəmi	1.980
	Tri-alkillə əvəzlənmiş aromatik karbohidrogenlər	
1.	1,2,4-Trimethylbenzene \$\$ Cumene	0.075
2.	1,2,3-Trimethylbenzene \$\$ Hemimellitene	0.286
3.	2-ethyl-1,4-dimethylbenzene	0.094
4.	Benzene,1-ethyl-2,4-dimethyl \$\$ 4-Ethyl-m-xylene	0.118
5.	2-ethyl-1,4-dimethyl-benzene	0.078
6.	Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl \$\$ o-Xylene, 4-ethyl- \$\$ 2-Methyl-pethyl- toluene	0.470
7.	Naphthalene, 1,6,7-trimethyl- (CAS) \$\$ 2,3,5-Trimethylnaphthalene	0.767
8.	4,6,8-Trimethylazulene	1.204
Σ	Cəmi	3.092
	Tetra-alkillə əvəzlənmiş aromatik karbohidrogenlər	
1.	1,2,4,5-Tetramethylbenzene \$\$ Durol	0.223

2.	1,2,3,4-Tetramethylbenzene \$\$ Prehnitol	0.145
3.	AR-ethyl-1,2,4-trimethylbenzene	0.137
4.	Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-4- (1-methylethenyl)	0.469
5.	(Z)-2-(1'- propenyl)Mesitylene \$\$ Me- sitylene, 2-propenyl-, (Z)-	0.486
Σ	Cəmi	1.460
Σ	Bütün aromatik karbohidrogenlərin ümumi tərkibi	8.323
	Naften-aromatik karbohidrogenlər	
	Əvəz edilməmiş naften-aromatik kar- bohidrogenlər	
1.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro- (CAS) \$\$ Tetranap \$\$ Tetralin	0.774
2.	Indane \$\$ 1H-Indene,2,3-dihydro- \$\$ Benzocyclopentane \$\$ Hydrindene	0.249
3.	Octahydrophenanthrene	0.952
4.	1,2,3,3a,8,8a hexahydrocyclopent[a]- indene	0.315
5.	Benzocycloheptatriene \$\$ 5H-Benzo[a]- cycloheptene	0.462
Σ	Cəmi	2.752

	Mono-alkillə əvəzlənmiş naften-aromatik karbohidrogenlər	
1.	1- methyl-2-phenylcyclopropane	0.402
2.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2-methyl- (CAS) \$\$ 2-Methyltetralin	0.268
3.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-6-methyl- (CAS) \$\$ 6-Methyltetralin	0.697
4.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-5-methyl- (CAS) \$\$ 5-Methyltetralin	0.815
5.	Naphthalene, 6-ethyl-1,2,3,4-tetrahydro- (CAS) \$\$ 6-Ethyltetraline	0.310
Σ	Cəmi	2.743
	Di-alkillə əvəzlənmiş naften-aromatik karbohidrogenlər	
1.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2,7-dimethyl \$\$ 2,7-Dimethyltetralin	0.881
2.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1,1-dimethyl- \$\$ 1,1-Dimethyltetralin	0.629
3.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1,4-yl- \$\$ 1,4-Dimethyltetralin	0.352
4.	1H-Indene, 2,3-dihydro-4,7-dimethyl- \$\$ Indan, 4,7-dimethyl-	0.371
Σ	Cəmi	2.233

	Tri-alkillə əvəzlənmiş naften-aromatik karbohidrogenlər	
1.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2,5,8-trimethyl- \$\$ 2,5,8-Trimethyltetralin	0.656
2.	1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,3-trimethyl- \$\$ Indan, 1,1,3-trimethyl-	0.171
3.	1H-Indene, 2,3-dihydro-4,5,7-trimethyl- (CAS) \$\$ 4,5,7-trimethylindane	0.165
Σ	Cəmi	1.792
Σ	Bütün naften-aromatik karbohidrogenlərin ümumi tərkibi	9.520
	Steroidlər	
1.	14-Beta-H-PregnaA \$\$ 14B-Pregnane	3.190
Σ	Cəmi	3.190
Σ	Ümumi steroid tərkibi	3.190
	Heteroatomlu birləşmələr	
	Azot tərkibli	
1.	2,4-Dymethyl-1,5-diazabicyclo[3.1.0] hexane (cis)	0.123
2.	4-Phenyl-1,2,3,6-tetrahydropyridine	0.296
3.	N,N'-Dibutylidene-hydrazine	0.053
Σ	Cəmi	0.472

	Oksigenləşdirilmiş	
1.	2-ethyl-4-methyl-5,6-dihydro-2H-pyran	0.026
2.	2-heptylfuran \$ 2-n-Heptylfuran	0.192
3.	tret-Butyl-8-Methyl-10-azabicyclo-[4.3.1]deca-3,7-diene-10-carboxylate	0.521
Σ	Cəmi	0.739
Σ	Bütün heteroatomik birləşmələrin ümumi tərkibi	1.211
	Kompleks birləşmələr	
1.	Iron, tricarbonylchloro(eta.3-2-propenyl)-	0.595
Σ	Cəmi	0.595
Σ	Kompleks birləşmələrin ümumi tərkibi	0.595
	Digər birləşmələr	
	Oksidləşmiş komponentlər (ketonlar, spirtlər, turşular, efirlər)	
1.	bicyclo[2.2.1]hept-2'-en-7'-ylidene)acetic acid	0.062
2.	Methyl 4,6-decadienyl ether	0.496
3.	2-Butyl-1-octanol	0.156
4.	1-Methyl-bicyclo[4.1.1]octan-7-one	0.026
5.	Benzyl (dideuterated)methyl ether	0.180

6.	trans-4-Methyl-5-isopropylcyclopent-2-en-1-one	0.038
7.	2-Cyclopenten-1-one, 2-(2-butenyl)-4-hydroxy-3-methyl,(Z) \$\$ Cinerolon	0.339
8.	trans-2-Ethyl-3-methylcyclohexanone	0.059
9.	Salvialane (terpenoid)	0.29
10.	Pyridine-3-carboxamide, oxime, N-(2-trifluoromethylphenyl)-	0.525
Σ	Oksidləşmiş birləşmələrin ümumi tərkibi	2.171

Әдәбият

1. Иванова Л.В., Кошелев В.Н., Буров Е.А. Влияние группового углеводородного состава дизельных топлив на их эксплуатационные свойства. //Нефтехимия. Москва. 2014, Т.54, № 6, с.478.
2. Зинина Н.Д., Шеянова А.В., Фаерман В.И., Гришин Д.Ф. Исследование влияния углеводородного состава дизельных топлив на их низкотемпературные свойства. // Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт. ЦНИИТЭНЕФТЕХИМ, Москва. 2015, №10, с.14-19.
3. Шеянова А.В., Зинина Н.Д., Гришин Д.Ф. Влияние углеводородного состава дизельных топлив на их низкотемпературные свойства. //Материалы Международной научно-практической конференции. НЕФТЕ-ГАЗОПЕРЕРАБОТКА – 2015. Уфа, 2015 г., с.69-70.
4. Y.Briker, Z.Ring, A.Iacchelli, N.McLean, P.M. Rahimi, C.Fairbridge, R.Malhotra, M.A. Coggiola and S.E.Young. Diesel fuel analysis by GC– FIMS: Aromatics, n-paraffins, and isoparaffins. //Energy & fuels. 2001. V.15, № 1, pp.23-37.
5. Y.Briker, Z.Ring, A.Iacchelli, N.McLean, C.Fairbridge, R.Malhotra, M.A. Coggiola and S.E.Young. Diesel fuel analysis by GC– FIMS: normal paraffins, isoparaffins, and cycloparaffins. //Energy & fuels. 2001. V.15, № 4, pp.996-1002.
6. Qian Kuangnan, and Gary J.Deichert. Recent advances in petroleum characterization by GC field ionization time-of-flight high-resolution mass spectrometry. //Analytical chemistry. 2002. V.74, №16, pp.3977-3983.

7. Qian Kuangnan, Gary J.Dechert and Kathleen E.Edwards. Deducing molecular compositions of petroleum products using GC-field ionization high resolution time of flight mass spectrometry. // *International Journal of Mass Spectrometry*. 2007. V.265, № 2-3, pp.230-236.
8. Qian Kuangnan, John W.Diehl, Gary J.Dechert and Frank P.Di Sanzo. The coupling of supercritical fluid chromatography and field ionization time-of-flight high-resolution mass spectrometry for rapid and quantitative analysis of petroleum middle distillates. // *European Journal of Mass Spectrometry*. 2004. V.10, № 2, pp.187-196.
9. Ogawa Tadao. Analytical conditions for field ionization mass spectrometry of diesel fuel. // *Fuel*. 2005. V.84, № 16, pp.2015-2025.
10. Schaub Tanner M., Ryan P.Rodgers, Alan G.Marshall, Kuangnan Qian, Larry A.Green and William N.Olmstead. Speciation of aromatic compounds in petroleum refinery streams by continuous flow field desorption ionization FT-ICR mass spectrometry. // *Energy & fuels*. 2005. V.19, № 4, pp.1566-1573.

Bu iş Azərbaycan Respublikası Prezidenti yanında
Elmin İkkişafı Fondunun maliyyə yardımını ilə yerinə
yetirilmişdir –

Qrant № EIF-MQM-ETS-2020-1(35)-08/05/4-M-05

MÜNDƏRİCAT

	Səh.
Annotasiya	4
I. Giriş	5
II. Metodoloji aspektlər, istifadə olunan obyektlərin və avadanlıqların xüsusiyyətləri	11
III. Kütlə-spektrometrik analizin nəticələri	12
Ədəbiyyat	29

**AZERBAIJAN NATIONAL ACADEMY
OF SCIENCE
INSTITUTE OF CATALYSIS AND INORGANIC
CHEMISTRY
named after ACADEMIC MF NAGIYEV**

**E.B.ZEYNALOV, D.B.TAGIEV, S.B.ZEYNALOV,
Ya.M.NAGIEV, E.R.HUSEYNOV, F.B.NAZAROV,
A.B.HUSEYNOV, M.Ya.MAGERRAMOVA,
N.A.MUSTAFAEVA, N.M.SHAKHNAZAROVA,
A.F.NABIZADEH**

**DIESEL FUEL
COMPONENT COMPOSITION**

**“Fuyuzat” Publishing House
BAKU - 2022**

Eldar Zeynalov, Dilqam Tagiev, Sardar Zeynalov, Yaqub Nagiev, Elchin Huseynov, Fatulla Nazarov, Asker Huseynov, Matanat Magerramova, Narmin Mustafaeva, Narmina Shakhnazarova, Arzu Nabizadeh. Diesel fuel component composition. – Preprint. – Baku: “Fuyuzat” Publishing House, 2022. – 92p.

This preprint presents gas chromatography-mass spectrometric analysis of components of the motor-car diesel fuel Socar-DF.

55.74% aliphatic, 5.04% olefinic, 12.79% naphthenic, 8.32% aromatic and 9.52% naphthenic-aromatic hydrocarbons have been detected in the diesel fuel. Besides, small amounts of heteroatomic components, other unsaturated compounds, metallic complexes, steroid and partially oxidized constituents have been also fixed as well.

These data are of interest in selecting optimal composition of a seasonal fuel and also are to be included in the database on components of a variety of diesel fuels.

ISBN: 978-9952-37-740 8

Subkinds and content of components in the diesel fuel Socar-DF

E.B.Zeynalov¹, D.B.Tagiyev¹, S.B.Zeynalov¹,
Ya.M.Nagiyev¹, E.R.Huseynov¹, F.B.Nazarov¹,
A.B.Huseynov¹, M.Ya.Magerramova¹, N.A.Mustafaeva¹,
N.M.Shakhnazarova³, A.F.Nabizadeh¹

¹Nagiyev Institute of Catalysis & Inorganic Chemistry,
Azerbaijan

National Academy of Sciences

² LLC “Karvan-L”

³Azerbaijan State Oil and Industrial University

Keywords: *diesel fuel constituents, chromatography-mass spectrometric analysis, petroleum hydrocarbons, heteroatomic components of a diesel fuel*

Annotation

This preprint presents gas chromatography-mass spectrometric analysis of components of the motor-car diesel fuel Socar-DF.

55.74% aliphatic, 5.04% olefinic, 12.79% naphthenic, 8.32% aromatic and 9.52% naphthenic-aromatic hydrocarbons have been detected in the diesel fuel. Besides, small amounts of heteroatomic components, other unsaturated compounds, metallic complexes, steroid and partially oxidized constituents have been also fixed as well.

These data are of interest in selecting optimal composition of a seasonal fuel and also are to be included in the database on components of a variety of diesel fuels.

I. INTRODUCTION

Analytical viewing on the pertinent investigations provide distinct and valuable information on different types of hydrocarbons placed in a diesel fuel.

So, the variety hydrocarbon type content in the diesel fuel is considered in terms of its impact on the fuel performance characteristics, such as cetane number, diesel index, solidification temperature point, etc. [1]. It is inferred and postulated in the article that the data obtained are not sufficient to form full and complete description of the fuel. Thus, the additional information on the ratio of mono- and bicyclic arenes, low-molecular-weight alkanes, iso-paraffins, i.e. the quantitative data on individual hydrocarbons in the fuel composition are needed [1].

The hydrocarbon content of the once-run and hydro-fined diesel fuels (summer and winter patterns) produced by direct disposal by “Lukoil Nizhny-Novgorodpetroleumsynthesis” LLC is considered in terms of its effect on low temperature properties [2]. It was found that the straight-run diesel fuel chilling temperature depends on the ratio between light fractions which make up to 20% of the total fuel content and heavy high molecular weight cycloalkanes. Factors that determine the required pour point for the hydrofined diesel fuels of the summer and winter seasonal modes are constituent fractions making up 40 and 50%, respectively.

In the work of the same authors, a similar scheme was applied to environmentally friendly fuels produced by the “Lukoil Nizhny-Novgorodorganicsynthesis” LLC and the same results were deduced [3]. It is underlined there that light fractions, besides acceptable pour point, have also high thermal stability. Heavy fractions of the the hydro-fined diesel making up up about 80% of the total fuel content, are high-meltable cycloalkanes of the high solidification temperature index, which ultimately define the main operational characteristics of a fuel [3].

Overseas experts did not also stay out of these studies, however being emphasized to the ecological and methodological sides of these issues. Indeed, the [Ref. 4] indicates the trivial importance of a transport diesel fuel hydrocarbon content determination being as an integrated part of the process of optimization of a fuel composition, as well as for designing of an internal combustion engine with regulating exhausted gas emission.

The authors present a combined method of ionization mass spectrometry and gas chromatography (GC-IMC), recommended for the detailed determination of the hydrocarbon types in a diesel fuel. The efficiency and resolving power of the proposed GC-IMC method authors have proved by comparing the profiles of the hydrocarbon content obtained by routine methods.

Thus, advantage of the GC-IMS method is, unlike other ones, to separate n-paraffins from their isomorphs and cycloparaffins [4].

The article [Ref. 5] re-introduces and recommends again the GC-IC as utterly efficient and reliable express means for exhausting analysis of a diesel fuel. Additional new advantages are thoroughly described, results of specially prepared and developed control samples with known ratios of saturated and unsaturated hydrocarbons, iso- and cycloalkanes are given [5].

All results obtained by different methods complement with each other, thus, this research demonstrates the accuracy and relevance of the use of GC-IC method for the analysis of hydrocarbon content of complex oil systems [5].

Although the MS methods have been widely used for analysis of different oils and fuels for the last 50 years, the comprehensive characterization of oil compositions within the wide- terms boiling range still remains actual. More and more advanced models of mass spectrometers are being appeared to expand significantly the possibilities of detailed identification of compounds.

High resolution mass spectrometry (GC-IE-HRMS) is proposed for detailed analysis of oil products with a range of carbon numbers C₆-C₄₄ [6]. Using this method, GC separates hydrocarbon molecules by boiling points, the ionization in an electric field (IE) generates intact molecular ions for both aromatic and saturated oil molecules eluted from the GC.

The elemental composition of these molecular ions is identified by a high-resolution mass spectrometer

(HRMS) with a mass resolution of up to 7000 and a mass measurement accuracy of ± 3 millidaltons, which, in turn, provides detailed chemical information for petroleum hydrocarbon molecules (heteroatomic composition, number of rings, plus double bond and carbon number) as well [6].

A high-resolution mass spectrometer equipped with a time-of-flight pulse ion analyzer generated in the gas phase in an electric field (IE-VPIA-MSVR) provides a three-stage separation of complex mixtures. As a result, researchers have the opportunity to obtain the most detailed information about the hydrocarbon composition of petroleum products [7].

It is reported about the use of a method that combines the capabilities of supercritical liquid chromatography (SCLC) with field ionization time-of-flight mass spectrometry IE-VP-HRMS, in parallel with ultraviolet (UVD) and flame ionization detection (FID) for rapid quantitative analysis of middle oil distillates [8].

SCLC separates middle distillates of oil into saturated hydrocarbons and hydrocarbons with 1-3 aromatic rings. IE generates molecular ions for hydrocarbons eluted from SCLC. High resolution and accurate mass measurements using VP-HRMS mass spectrometry make it possible to determine the elemental composition of petroleum product molecules. The amounts of saturated compounds and types of aromatic

rings are quantified using the parallel use of FID and UVD detectors. With this approach and the correct cali-

bration of the carbon number, the detailed composition of the middle petroleum distillate is quickly determined [8].

Ionization mass spectrometry (IMS) was used to analyze two fuels that had similar H / C ratios but differed significantly in the final fraction at a distillation temperature of 290°C (R-290) [9]. The authors wanted to find out the reasons why these fuels gave different amounts of exhaust and particulate matter emissions. The results of the IMS showed that the fuel with low R-290 consisted of aliphatic hydrocarbons with low and aromatic hydrocarbons with a high number of carbon atoms and therefore had a low flammability. Hence, the observed increased emissions of hydrocarbons and particulate matter than in the case of fuels with a high R-290 [9].

Another one of, the most modern mass spectrometric method is presented in work [10]. The method includes desorption ionization in an electric field and a Fourier transform ion-cyclotron resonance mass analyzer (DI-MS-ICR-F) as a method for the detailed determination of aromatic compounds in fractionated crude oil and refinery process streams. The high efficiency of DI of nonpolar molecules in combination with unprecedented mass resolution and accuracy using MS-ICR-F made it possible to unambiguously determine the elemental composition for ~ 700-1400 types of hydrocarbons in the condensed phase. Based on the elemental composition

assignments, the authors of the study provide a complete definition of the class and type for enriched aro-

matic fractions from oil refining process streams, including vacuum gas oil with high and low sulfur content, catalytic cracking bottoms and vacuum coking gas oils. These process streams were selected to demonstrate the capabilities of DI-MS-ICR-F for various oil formulations.

The data obtained with using this method are in good agreement with the predicted characteristics of the process streams of the refinery. Analysis of DI-MS-ICR-F is able to cover all oil components, from metal porphyrins, nitrogen-containing compounds to naphthenic acids, aromatic hydrocarbons and thiophenoaromatic compounds [10].

Thus, based on a brief review of studies to determine the hydrocarbon composition of petroleum fractions, the following conclusions can be drawn:

1. The most informative and under development are mass spectrometric methods of analysis. At the same time, by varying the methods of ionization and types of mass detectors, as well as various chromatographic attachments, researchers manage to achieve an almost complete analysis of hydrocarbons in a wide variety of oil systems.

2. Determination of the hydrocarbon composition of diesel fuel is mainly aimed at adjusting the quality of the latter, in order to bring the fuel in line with existing standards for emissions of exhaust gases and particulate matter, as well as for its suitability for use in various seasonal conditions.

Thus, having data on the component composition, and, in particular, on the hydrocarbon content of a diesel

fuel and based on the existing theoretical background, researchers, experts, specialists and, in general, interested persons can make appropriate predictions and adjustments for purposeful applications of these wonderful oil compositions.

II. Methodological aspects, characteristics of objects and equipment used in

The object of this research was diesel fuel produced by the State Oil Company of the Azerbaijan Republic for refueling motor vehicles.

The analysis of the diesel fuel hydrocarbon / content was carried out by chromatography-mass spectrometry on a GC-MS instrument, Agilent Technologies 7890B (GC) - 5977B (MSD), with the identification of components in the mass range $m / z = 30 - 550$.

III. Results of mass spectrometric analysis

Table. Diesel Fuel – Diesel 1

№	Aliphatic hydrocarbons	content, %
	n-paraffins	
1.	n-Heptane \$\$ Skellysolve \$\$ Heptyl hydride \$\$ n-C ₇ H ₁₆	0,025
2.	n-Nonane \$\$ Shellsol 140 \$\$ n-C ₉ H ₂₀	0,321
3.	n-Decane \$\$ Isodecane \$\$ n-C ₁₀ H ₂₂ \$\$ Desyl Hydride	0.659
4.	n-Undecane \$\$ Hendecane \$\$ \$ n-C ₁₁ H ₂₄ \$\$ Undecan	0,994
5.	n-Dodecane \$\$ Adakane 12 \$\$ Isododecane	1,533
6.	n-Tridecane \$\$ n-tri-decanene	1.951
7.	n-Tetradecane	2.514
8.	n-Pentadecane \$\$ CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃	3.613
9.	n-Hexadecane \$\$ Cetane	2,451
10.	n-Heptadecane \$\$ Normal-heptadecane	2.177
11.	n-Heptadecane	2.148
12.	Nonadecane (CAS) \$\$ n-Nonadecane	2.046
13.	n-Eicosane \$\$ Icosane	1.735

14.	n-Docosane \$\$ C ₂₂ H ₄₆ Standard \$\$ N-docosane	1.179
15.	Tricosane (CAS) \$\$ n-Tricosane	0.747
16.	Tetracosane	0.329
17.	Pentacosane	0.072
18.	Hexacosane (CAS) \$\$ n-hexacosane \$\$ cerane	0.034
19.	Heneicosane \$\$ n-Heneicosane	1.658
Σ	Sum	26.186
	Mono-alkyl-substituted aliphatic hydrocarbons	
1.	3-Methylhexane	0.007
2.	2-Methylheptane \$\$ (CH ₃) ₂ CH(CH ₂) ₄ CH ₃	0.041
3.	3-Methyloctane \$\$ Isononane	0.195
4.	Octane, 3-methyl- (CAS) \$\$ 3- Methyloctane \$\$ Isononane	0.028
5.	2-Methylnonane	0.136
6.	3-Methylnonane	0.104
7.	5-Methyldecane	0.166
8.	4-Methyldecane	0.085
9.	2-Methyldecane \$\$ n-C ₈ H ₁₇ CH(CH ₃) ₂	0.209
10.	3-Methyldecane \$\$ 2-Ethylnonane	0.126

11.	4-Methylundecane	0.291
12.	5-Methylundecane	1.061
13.	2-Methylundecane	0.471
14.	3-Methyldodecane	1.026
15.	2-Methyldodecane	1.595
16.	4-Methyltridecane	0.882
17.	3-Methyltetradecane	1.100
18.	2-Methylpentadecane	0.738
19.	2-Methylhexadecane	1.166
20.	3-Methylhexadecane	1.096
21.	2-Methylheptadecane	0.684
22.	3-Methylheptadecane	1.150
23.	3-Methyloctadecane	0.984
24.	9-Methylnonadecane	0.300
25.	10-Methylnonadecane	0.366
Σ	Sum	14.007
	Di-alkyl-substituted aliphatic hydrocarbons	
1.	2,4-Dimethylheptane	0.130
2.	2,3-Dimethylheptane	0.031

3.	2,6-Dimethyloctane \$\$ Octane, 2,6-dimethyl- (9CI)	0.219
4.	2,3-Dimethyloctane	0.086
5.	3,7-Dimethylnonane	0.184
6.	2,6-Dimethylundecane	0.614
7.	4,8-Dimethylundecane	0.572
8.	2,5-Dimethyldodecane	0.453
9.	4,8-Dimethyltridecane	0.567
Σ	Sum	2.856
	Tri-alkyl-substituted aliphatic hydrocarbons	
1.	Dodecane, 2,6,10-trimethyl- \$\$ Farnesane	1.411
2.	2,6,10-Trimethylpentadecane	2.405
Σ	Sum	3.816
	Tetra-alkyl-substituted aliphatic hydrocarbons	
1.	Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) \$\$ Pristane (FIELD ION)	4.561
2.	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- \$\$ Phytane	4.313
Σ	Sum	8.874
Σ	The total content of all aliphatic hydrocarbons	55.739

	Naphthenic hydrocarbons	
	Unsubstituted naphthenic hydrocarbons	
1.	Cyclodecane	0.041
2.	Cyclotetradecane	0.522
3.	Cyclopentadecane	0.423
4.	Naphthalene, decahydro-, cis- \$\$ cis-Decalin \$\$ cis-Perhydronaphthalene	0.054
5.	Naphthalene, decahydro-, trans- \$\$ trans- Bicyclo[4.4.0]Decane \$\$ trans- Decalin	0.165
6.	1H-Indene, octahydro-, cis- (CAS) \$\$ cis-Hexahydroindan \$\$ cis-Hydrindan	0.08
7.	Pentalene, octahydro-, cis- \$\$ cis-Bicyclo[3.3.0]octane	0.016
Σ	Sum	1.301
	Mono-alkyl-substituted naphthenic hydrocarbons	
1.	Ethylcyclopentane	0,015
2.	n-Decylcyclopentane \$\$ Decane,- cyclopentyl	1,787
3.	Methylcyclohexane \$\$ Sextone B	0,056
4.	Ethylcyclohexane	0,106
5.	n-Propylcyclohexane	0,141
6.	3-Methyl-1-cyclohexene	0.100

7.	n-Butylcyclohexane \$\$ Butane, 1-cyclohexyl-	0,181
8.	1-Cyclohexylheptane \$\$ n-Heptyl- cyclohexane	0,637
9.	Cyclohexane, pentyl- \$\$ Pentane, 1-cyclohexyl-	0,223
10.	Methylcyclododecane	0,335
11.	Naphthalene, decahydro-2-methyl- \$\$ 2-methyldecalin	0.219
12.	Decahydro-2-methylnaphthalene	0.376
13.	2-Methyloctahydropentalene	0.090
14.	Cyclohexane, 1,1' -(1,4-butanediyl)bis- (CAS) \$\$ 1,4-Dicyclohexylbutane	0.536
Σ	Sum	4.802
	Di-alkyl-substituted naphthenic hydrocarbons	
1.	cis-1,3-Dimethylcyclopentane	0.006
2.	cis-1,2-Dimethylcyclopentane	0.008
3.	1-Ethyl-3-methylcyclopentane	0.020
4.	1-Ethyl-2-methylcyclopentane	0.040
5.	Cyclopentane, (1-methylethyl)- \$\$ Cyclopentane, isopropyl-	0.007
6.	trans-1-Methyl-2-propylcyclopentane	0.060

7.	Ethylpropylcyclopentane	0.046
8.	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0.057
9.	Cyclohexane, 1,1-dimethyl- \$\$ Gem-Dimethylcyclohexane	0.006
10.	Cyclohexane, 1,4-dimethyl- (CAS) \$\$ Hexahydroxylene	0.026
11.	trans-1-Ethyl-4-methylcyclohexane	0.068
12.	cis-1-Ethyl-4-Methylcyclohexane	0.029
13.	cis-1-Ethyl-3-methylcyclohexane	0.061
14.	cis-1,4-Dimethylcyclohexane	0.145
15.	1,6-Dimethylcyclohexene	0.066
16.	1-Methyl-2-propylcyclohexane	0.416
17.	(4-Methylpentyl)cyclohexane	0.356
18.	1-methyl-2-phenylcyclopropane \$\$ Benzene, (2-methylcyclopropyl)-	0.324
19.	2-Cyclohexyloctane \$\$ (1-Methylheptyl)- cyclohexane	0.707
20.	Naphthalene, decahydro-1,6-dimethyl (CAS) \$\$ 1,6-dimethyldecalin	0.178
21.	Decahydro-2,6-dimethylnaphthalene	0.147
22.	cis-1,3-Bis(acetamidomethyl)-1,3- dideuteriocyclohexane	0.511
Σ	Sum	3.284

	Tri-alkyl-substituted naphthenic hydrocarbons	
1.	Cyclopentane, 1,2,4-trimethyl-, (1.alpha., 2.beta., 4.alpha.)-	0.009
2.	Cyclopentane, 1,2,3-trimethyl- (1.ALPHA., 2.ALPHA., 3.BETA)	0.010
3.	1,1,3-Trimethylcyclohexane	0.075
4.	Cyclohexane, 1,2,3-trimethyl-, (1.alpha., 2.alpha., 3.beta.)-	0.019
5.	1,1,2-Trimethylcyclohexane	0.020
6.	1,2,3-Trimethylcyclohexane	0.025
7.	1-Ethyl-2,3-dimethylcyclohexane	0.015
8.	1-Ethyl-2,3-dimethylcyclohexane	0.026
9.	Bicyclo[3.1.1]heptane, 2,6,6-trimethyl-, [1S(1.alpha.,2.beta.,5.alpha.)]-	0.316
10.	Cyclotetradecane, 1,7,11-trimethyl-4-(1-methylethyl)- \$\$ Cembrane	0.393
Σ	Sum	0.908
	Tetra-alkyl-substituted naphthenic hydrocarbons	
1.	1,1,4,4-Tetramethylcyclohexane	0.014
2.	1-ethyl-2,2,6-trimethylcyclohexane \$\$ 2-ethyl-1,1,3-trimethylcyclohexane	0.048
3.	1,2,4,5-Tetraethylcyclohexane	0.378

4.	Cyclohexane, 1,2,3,5-tetraisopropyl-	0.670
Σ	Sum	1.11
	Penta-alkyl-substituted naphthenic hydrocarbons	
1.	Decahydro-4,4,8,9,10-pentamethylnaphthalene	0.656
Σ	Sum	0.656
	Heksa-alkyl-substituted naphthenic hydrocarbons	
1.	1,1,4,4,7,7-Hexamethylcyclononane	0.724
Σ	Sum	0.724
Σ	The total content of all naphthenic hydrocarbons	12.785
	Olefinic hydrocarbons	
	Unsubstituted olefinic hydrocarbons	
1.	4-Decene \$\$ (4E)-4-Decene	0.134
2.	1-Nonene \$\$ n-Non-1-ene \$\$ 1-C ₉ H ₁₈ \$\$ Nonene-(1) \$\$ Nonylene	0.026
3.	7-Hexadecene, (Z)- \$\$ (7Z)-7-Hexadecene	0.617
4.	1-Heptadecene \$\$ Hexahydroaplotaxene	1.353
Σ	Sum	2.130

	Mono-alkyl substituted olefinic hydrocarbons	
1.	4-Methyl-1-decene	0.705
2.	2-Methyl-Z-4-tetradecene	2.205
Σ	Sum	2.910
Σ	Total content of all olefinic hydrocarbons	5.040
	Aromatic hydrocarbons	
	Unsubstituted aromatic hydrocarbons	
1.	Benzene \$\$ [6]Annulene \$\$ Benzole \$\$ Coal naphtha \$\$ Cyclohexatriene	0.009
Σ	Sum	0.009
	Mono-alkyl-substituted aromatic hydrocarbons	
1.	Toluene \$\$ Methacide \$\$ Methylbenzene \$\$ Methylbenzol	0.026
2.	Benzene, (1-methylethyl) \$\$ Isopropyl- benzene \$\$ Cumene \$\$ Cumol	0.045
3.	Benzene, (1-methylpropyl)- (CAS) \$\$ sec-Butylbenzene \$\$ 2-Phenylbutane	0.053
4.	Benzene, (2-methyl-1-propenyl)-(CAS) \$\$ (2-Methylpropenyl)benzene	0.092
5.	Benzene, (1-methyl-1-butenyl)- \$\$ 2-Phenyl-2-pentene	0.343

6.	Benzene, (1-ethyl-1-propenyl) \$\$ 3-Phenyl-2-pentene \$\$ 3-Phenyl-3-pentene	0.230
7.	1-Methylnaphthalene	0.812
8.	alpha.,.beta.,.beta.-Trimethylstyrene \$\$ 2-Butene, 2-methyl-3-phenyl-	0.181
Σ	Sum	1.782
	Di-alkyl-substituted aromatic hydrocarbons	
1.	Benzene, 1-ethyl-3-methyl- \$\$ Toluene, m-ethyl- \$\$ m-Ethylmethylbenzene	0.212
2.	p -Xylene Benzene,1,4- dimethyl-1	0.109
3.	Benzene, 1-ethyl-2-methyl- \$\$ Toluene, o-ethyl- \$\$ o-Ethylmethylbenzene	0.070
4.	Benzene, 1-methyl-3-propyl- \$\$ Toluene, m-propyl- \$\$ m-Propyltoluene	0.166
5.	Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)- \$\$ o-Cymene \$\$ o-Cymol	0.072
6.	Benzene, 1-methyl-2-propyl \$\$ 2-Propyltoluene \$\$ o-Propyltoluene	0.079
7.	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl) \$\$ 1-Sec-butyl-4-methylbenzene	0.058
8.	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl) \$\$ 1-Sec-butyl-4-methylbenzene	0.215
9.	1,6-Dimethylnaphthalene	0.999
Σ	Sum	1.980

	Tri-alkyl-substituted aromatic hydrocarbons	
1.	1,2,4- Trimethylbenzene \$\$ CUMENE	0.075
2.	1,2,3-Trimethylbenzene \$\$ Hemimellitene	0.286
3.	2-ethyl-1,4-dimethylbenzene	0.094
4.	Benzene,1-ethyl-2,4-dimethyl \$\$ 4-Ethyl-m-xylene	0.118
5.	2-ethyl-1,4-dimethyl-benzene	0.078
6.	Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl \$\$ o-Xylene, 4-ethyl- \$\$ 2-Methyl-pethyltoluene	0.470
7.	Naphthalene, 1,6,7-trimethyl- (CAS) \$\$ 2,3,5-Trimethylnaphthalene	0.767
8.	4,6,8-Trimethylazulene	1.204
Σ	Sum	3.092
	Tetra-alkyl-substituted aromatic hydrocarbons	
1.	1,2,4,5-Tetramethylbenzene \$\$ Durol	0.223
2.	1,2,3,4-Tetramethylbenzene \$\$ Prehnitol	0.145
3.	AR-ethyl-1,2,4-trimethylbenzene	0.137
4.	Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-4-(1-methylethenyl)	0.469

5.	(Z)-2-(1'- propenyl)Mesitylene \$\$ Mesitylene, 2-propenyl-, (Z)-	0.486
Σ	Sum	1.460
Σ	The total content of aromatic hydrocarbons	8.323
	Naphthene-aromatic hydrocarbons	
	Unsubstituted naphthenic-aromatic hydrocarbons	
1.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro- (CAS) \$\$ Tetranap \$\$ Tetralin	0.774
2.	Indane \$\$ 1H-Indene,2,3-dihydro- \$\$ Benzocyclopentane \$\$ Hydrindene	0.249
3.	Octahydrophenanthrene	0.952
4.	1,2,3,3a,8,8a-hexahydrocyclopent[a]indene	0.315
5.	Benzocycloheptatriene \$\$ 5H-Benzo[a]-cycloheptene	0.462
Σ	Sum	2.752
	Mono-alkyl-substituted naphthene-aromatic hydrocarbons	
1.	1- methyl-2-phenylcyclopropane	0.402
2.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2-methyl- (CAS) \$\$ 2-Methyltetralin	0.268

3.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-6-methyl- (CAS) \$\$ 6-Methyltetralin	0.697
4.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-5-methyl- (CAS) \$\$ 5-Methyltetralin	0.815
5.	Naphthalene, 6-ethyl-1,2,3,4-tetrahydro- (CAS) \$\$ 6-Ethyltetraline	0.310
Σ	Sum	2.743
	Di-alkyl-substituted naphthene-aromatic hydrocarbons	
1.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2,7- dimethyl \$\$ 2,7-Dimethyltetralin	0.881
2.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1,1- dimethyl- \$\$ 1,1-Dimethyltetralin	0.629
3.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1,4- dimethyl- \$\$ 1,4-Dimethyltetralin	0.352
4.	1H-Indene, 2,3-dihydro-4,7-dimethyl- \$\$ Indan, 4,7-dimethyl-	0.371
Σ	Sum	2.233
	Tri-alkyl-substituted naphthene-aromatic hydrocarbons	
1.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2,5,8-tri- methyl- \$\$ 2,5,8-Trimethyltetralin	0.656
2.	1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,3-trimethyl- \$\$ Indan, 1,1,3-trimethyl-	0.171

3.	1H-Indene, 2,3-dihydro-4,5,7-trimethyl-(CAS) \$\$ 4,5,7-Trimethylindane	0.165
Σ	Sum	1.792
Σ	The total content of naphthenic-aromatic hydrocarbons	9.520
	Steroids	
1.	14-Beta-H-PREGNA \$\$ 14B-PREGNANE	3.190
Σ	Sum	3.190
Σ	Total steroid content	3.190
	Heteroatomic compounds	
	Nitrogen-containing	
1.	2,4-Dymethyl-1,5-diazabicyclo[3.1.0]-hexane (cis)	0.123
2.	4-Phenyl-1,2,3,6-tetrahydropyridine	0.296
3.	N,N'-Dibutylidene-hydrazine	0.053
Σ	Sum	0.472
	Oxygenated	
1.	2-ethyl-4-methyl-5,6-dihydro-2H-pyran	0.026
2.	2-heptylfuran \$\$ 2-n-Heptylfuran	0.192
3.	tret-Butyl-8-Methyl-10-azabicyclo[4.3.1]-deca-3,7-diene-10-carboxylate	0.521
Σ	Sum	0.739
Σ	The total content of all heteroatomic compounds	1.211

	Complex compounds	
1.	Iron, tricarbonylchloro(eta.3-2-propenyl)-	0.595
Σ	Sum	0.595
Σ	The total content of complex compounds	0.595
	Other compounds	
	Oxidized components (ketones, alcohols, acids, ethers)	
1.	bicyclo[2.2.1]hept-2'-en-7'-ylidene)acetic acid	0.062
2.	Methyl 4,6-decadienyl ether	0.496
3.	2-Butyl-1-octanol \$\$ Michel XO-150-12	0.156
4.	1-Methyl-bicyclo[4.1.1]octan-7-one	0.026
5.	Benzyl (dideuterated)methyl ether	0.180
6.	trans-4-Methyl-5-isopropylcyclopent-2-en-1-one	0.038
7.	2-Cyclopenten-1-one, 2-(2-butenyl)-4-hydroxy-3-methyl,(Z) \$\$ Cinerolon	0.339
8.	trans-2-Ethyl-3-methylcyclohexanone	0.059
9.	salvialane (terpenoid)	0.29
10.	Pyridine-3-carboxamide, oxime, N-(2-trifluoromethylphenyl)-	0.525
Σ	Total content of oxidized components	2.171

Literature

1. Иванова Л.В., Кошелев В.Н., Буров Е.А. Влияние группового углеводородного состава дизельных топлив на их эксплуатационные свойства. //Нефтехимия. Москва. 2014, Т.54, № 6, с.478.
2. Зинина Н.Д., Шеянова А.В., Фаерман В.И., Гришин Д.Ф. Исследование влияния углеводородного состава дизельных топлив на их низкотемпературные свойства. //Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт. ЦНИИТЭНЕФТЕХИМ, Москва. 2015, №10, с.14-19.
3. Шеянова А.В., Зинина Н.Д., Гришин Д.Ф. Влияние углеводородного состава дизельных топлив на их низкотемпературные свойства. //Материалы Международной научно-практической конференции. НЕФТЕ-ГАЗОПЕРЕРАБОТКА–2015. Уфа, 2015г., с.69-70.
4. Y.Briker, Z.Ring, A.Iacchelli, N.McLean, P.M.Rahimi, C.Fairbridge, R.Malhotra, M.A.Coggiola & S.E.Young. Diesel fuel analysis by GC-FIMS: Aromatics, n-paraffins, and isoparaffins. // *Energy & fuels*. 2001. V.15, № 1, pp. 23-37.
5. Y.Briker, Z.Ring, A.Iacchelli, N.McLean, C.Fairbridge, R.Malhotra, M.A. Coggiola and S.E.Young. Diesel fuel analysis by GC-FIMS: normal paraffins, isoparaffins, and cycloparaffins. //*Energy & fuels*. 2001. V.15, № 4, pp.996-1002.
6. Qian Kuangnan, and Gary J.Deichert. Recent advances in petroleum characterization by GC field ionization time-of-flight high-resolution mass spectrometry. //*Analytical chemistry*. 2002. V.74, №16, pp.3977-3983.

7. Qian Kuangnan, Gary J.Dechert & Kathleen E.Edwards. Deducing molecular compositions of petroleum products using GC-field ionization high resolution time of flight mass spectrometry. // *International Journal of Mass Spectrometry*. 2007. V.265, № 2-3, pp.230-236.
8. Qian Kuangnan, John W.Diehl, Gary J.Dechert and Frank P.Di Sanzo. The coupling of supercritical fluid chromatography and field ionization time-of-flight high-resolution mass spectrometry for rapid and quantitative analysis of petroleum middle distillates. // *European Journal of Mass Spectrometry*. 2004. V.10, № 2, pp.187-196.
9. Ogawa Tadao. Analytical conditions for field ionization mass spectrometry of diesel fuel. // *Fuel*. 2005. V.84, № 16, pp.2015-2025.
10. Schaub Tanner M., Ryan P.Rodgers, Alan G.Marshall, Kuangnan Qian, Larry A.Green and William N.Olmstead. Speciation of aromatic compounds in petroleum refinery streams by continuous flow field desorption ionization FT-ICR mass spectrometry. // *Energy & fuels*. 2005. V.19, № 4, pp.1566-1573.

The work was supported by the Science
Development Foundation under the President
of the Republic of Azerbaijan –
Grant № EIF-MQM-ETS-2020-1(35)-08/05/4-M-05

CONTENT

	Pages
Annotation	34
I. Introduction	35
II. Methodological aspects, characteristics of objects and equipment used in.....	41
III. Results of mass spectrometric analysis	42
Literature	58

**НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
АЗЕРБАЙДЖАНА
ИНСТИТУТ КАТАЛИЗА И
НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ
имени АКАДЕМИКА М.Ф.НАГИЕВА**

**Э.Б.ЗЕЙНАЛОВ, Д.Б.ТАГИЕВ, С.Б.ЗЕЙНАЛОВ,
Я.М.НАГИЕВ, Э.Р.ГУСЕЙНОВ, Ф.Б.НАЗАРОВ,
А.Б.ГУСЕЙНОВ, М.Я.МАГЕРРАМОВА,
Н.А.МУСТАФАЕВА, Н.М.ШАХНАЗАРОВА,
А.Ф.НАБИЗАДЕ**

**КОМПОНЕНТНЫЙ СОСТАВ
ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА**

Изд-во: “Füyuzat”

БАКУ - 2022

Эльдар Зейналов, Дильгам Тагиев, Сардар Зейналов, Ягуб Нагиев, Эльчин Гусейнов, Фатулла Назаров, Аскер Гусейнов, Метанет Магеррамова, Нармин Мустафаева, Нармина Шахназарова, Арзу Набизаде. Компонентный состав дизельного топлива. – Препринт. – Баку: Издательство “Füyuzat”, 2022. – 92с.

Данный препринт описывает результаты хромато-масс-спектрометрического анализа компонентов автомобильного дизельного топлива ГНКАР-ДТ.

Было установлено, что в состав топлива входит 55.74% алифатических, 5.04% олефиновых, 12.79% нафтеновых, 8.32% ароматических и 9.52% нафтеново-ароматических углеводородов. В состав топлива входят также в незначительном количестве другие непредельные соединения, гетероатомные компоненты, металлокомплексные соединения, стероид и продукты частичного окисления компонентов.

Полученные данные может представлять интерес для выбора оптимального состава сезонного топлива, а также для вхождения в банк данных по компонентному составу дизельных топлив.

ISBN: 978-9952-37-740 8

Компонентный состав дизельного топлива ГНКАР-ДТ

Э.Б.Зейналов¹, Д.Б.Тагиев¹, С.Б.Зейналов¹,
Я.М.Нагиев¹, Э.Р.Гусейнов¹, Ф.Б.Назаров²,
А.Б.Гусейнов¹, М.Я.Магеррамова¹, Н.А.Мустафаева¹,
Н.М.Шахназарова³, А.Ф.Наби-заде¹

¹ Институт Катализа и Неорганической Химии Национальной Академии Наук Азербайджана

² Компания ООО «Карван-Л»

³ Азербайджанский Государственный Университет Нефти и Промышленности

Ключевые слова: компоненты дизельного топлива, хромато-масс-спектрометрический анализ, нефтяные углеводороды, гетероатомные компоненты дизтоплива

Аннотация

Данный препринт описывает результаты хромато-масс-спектрометрического анализа компонентов автомобильного дизельного топлива ГНКАР-ДТ.

Было установлено, что в состав топлива входит 55.74% алифатических, 5.04% олефиновых, 12.79% нафтеновых, 8.32% ароматических и 9.52% нафтеново-ароматических углеводородов. В состав топлива входят также в незначительном количестве другие непредельные соединения, гетероатомные компоненты, металлокомплексные соединения, стероид и продукты частичного окисления компонентов.

Полученные данные может представлять интерес для выбора оптимального состава сезонного топлива, а также для вхождения в банк данных по компонентному составу дизельных топлив.

I. ВВЕДЕНИЕ

Анализ литературного материала показывает, что имеется серия работ, где приводятся данные по анализу различных типов углеводородов в составе дизельного топлива.

Так, в работе [1] рассмотрен групповой углеводородный состав дизельного топлива в аспекте влияния на эксплуатационные свойства последнего. В качестве критериев качества топлива были рассмотрены такие показатели как цетановое число, дизельный индекс, температура застывания и другие. В статье сформулирован вывод, что полученные данные недостаточны для полного и исчерпывающего описания свойств топлива и что необходима дополнительная информация о соотношении моно- и бициклических аренов, низко- и высокомолекулярных алканов и изопарафинов, то есть требуются данные по количественному содержанию индивидуальных углеводородов в составе топлива.

В другой статье рассмотрен углеводородный состав прямогонного и гидроочищенного (летнего и зимнего) дизельных топлив, производимых в ООО «ЛУКОЙЛНижегороднефтеоргсинтез», в аспекте их влияния на низкотемпературные свойства дизельных топлив [2]. Установлено, что температура застывания в прямогонном дизельном топливе зависит от соотношения лёгких фракций, составляющих около 20% со-

става и тяжёлых высокомолекулярных циклоалканов. Для гидроочищенного топлива летнего и зимнего фазона фактором, определяющим нужную температуру застывания, являются фракции, составляющие приблизительно около 40 и 50% его состава, соответственно.

В работе тех же авторов применена аналогичная схема для экологически чистого топлива, производимого в ООО «ЛУКОЙЛНижегороднефтеоргсинтез», и сформулированы аналогичные выводы [3]. Подчёркнуто, что лёгкие фракции, помимо, приемлемой температуры застывания, обладают ещё и высокой термостабильностью. Тяжёлые же фракции гидроочищенного топлива, составляющие около 80%, представляют собой высокоплавкие циклоалканы, обладающие высокой температурой застывания, что и определяет основные эксплуатационные свойства дизельного топлива.

Зарубежные исследователи также не остались в стороне от этих исследований, сделав, однако, акцент на экологическую сторону вопроса и методические подходы. В работе [4], указывается, что определение углеводородного состава транспортного топлива является важной составной частью процесса оптимизации состава топлива, а также конструкции двигателя для регулируемого выброса выхлопных газов. Авторы представляют скомбинированный метод ионизационной масс-спектрометрии и газовой хроматографии

(ГХ-ИМС) как очень эффективный для детального определения типов углеводородов в составе дизельного топлива. Эффективность и разрешающую способность предложенного метода ГХ-ИМС авторы показали путём сравнения профилей углеводородного состава топлив, полученных с помощью известных стандартных методик. Показано преимущество метода ГХ-ИМС, который, в отличие от других, позволяет разделять *n*-парафины от их изо-аналогов и циклопарафинов [4].

Те же авторы, но уже в другой статье опять представляют и рекомендуют метод ГХ-ИМС для эффективного и надёжного экспресс-анализа дизельного топлива. Описываются новые достоинства метода и приводятся результаты анализа специально приготовленных контрольных образцов с известным соотношением насыщенных и ненасыщенных углеводородов, изо- и циклоалканов [5]. Все результаты, полученные различными методами, оказались взаимодополняемыми, демонстрируя тем самым, корректность и релевантность использования метода ГХ-ИМС для анализа углеводородного состава сложных нефтяных систем [5].

Хотя масс-спектрометрия в последние 50 лет широко используется для анализа нефти и других ископаемых видов топлива, всесторонняя характеристика общего состава нефти в широком диапазоне кипения с помощью этого метода остаётся по-преж-

нему актуальной. Появляются всё новые и новые совершенные модели масс-спектрометров, которые значительно расширяют возможности детальной идентификации соединений.

В работе [6] предлагается масс-спектрометрия высокого разрешения (ГХ-ИЭ-МСВР) для детального анализа нефтепродуктов с диапазоном углеродных чисел C_6 - C_{44} . С помощью этого метода ГХ разделяет молекулы углеводородов по температурам кипения, ионизация в электрическом поле (ИЭ) генерирует неповрежденные молекулярные ионы, как для ароматических, так и для насыщенных молекул нефти элюируемых из ГХ. Элементный состав этих молекулярных ионов идентифицируется масс-спектрометром высокого разрешения (МСВР) с разрешающей способностью по массе до 7000 и точностью измерения массы ± 3 миллидальтон, что, в свою очередь, даёт детальную химическую информацию для молекул нефтяных углеводородов (гетероатомный состав, количество колец плюс двойная связь и углеродное число) [6].

Масс-спектрометр высокого разрешения, снабжённый времяпролетным импульсным анализатором ионов, генерируемым в газовой фазе в электрическом поле (ИЭ-ВПИА-МСВР), обеспечивает трёхэтапное разделение сложных смесей. В результате исследователи имеют возможность получить самую подробную

информацию об углеводородном составе нефтепродуктов [7].

Сообщается об использовании метода, где сочетаются возможности сверхкритической жидкостной хроматографии (СКЖХ) с полевой ионизационной времяпролетной масс-спектрометрией высокого разрешения ИЭ-ВП-МСВР, параллельно с ультрафиолетовым (УФД) и пламенно-ионизационным детектированием (ПИД) для быстрого количественного анализа средних дистиллятов нефти [8]. СКЖХ разделяет средние дистилляты нефти на насыщенные углеводороды и углеводороды с 1-3 ароматическими кольцами. ИЭ генерирует молекулярные ионы для углеводородов, элюированных из СКЖХ. Высокое разрешение и точные измерения массы с помощью масс-спектрометрии ВП-МСВР позволяют определить элементный состав молекул нефтепродукта. Количества насыщенных соединений и типов ароматических колец определяются количественно с параллельным использованием детекторов ПИД и УФД. При таком подходе и правильной калибровке углеродного числа быстро определяется подробный состав среднего нефтяного дистиллята [8].

Ионизационная масс-спектрометрия (ИМС) была использована для анализа двух топлив, которые имели схожие отношения H / C , но значительно различались по количеству конечной фракции при температуре дистилляции 290°C (R-290) [9]. Авторы хотели вы-

яснить причины, по которым эти топлива давали различные количества выбросов выхлопных газов и твердых частиц. Результаты ИМС показали, что топливо с низким R-290 состояло из алифатических углеводородов с малым и ароматических углеводородов с высоким числом атомов углерода и поэтому обладало низкой воспламеняемостью. Отсюда и наблюдаемый повышенный выброс углеводородов и твердых частиц, чем в случае топлива с высоким R-290 [9].

Ещё один, самый современный масс-спектрометрический метод представлен в работе [10]. Метод включает в себя десорбционную ионизацию в электрическом поле и масс-анализатор ионно-циклотронного резонанса с преобразованием Фурье (ДИ-МС-ИЦР-Ф) как метод детального определения ароматических соединений во фракционированной сырой нефти и технологических потоках нефтепереработки. Высокая эффективность ДИ неполярных молекул в сочетании с беспрецедентной разрешающей способностью по массе и точностью с помощью МС-ИЦР-Ф позволяло однозначно определять элементный состав для ~700-1400 видов углеводородов в конденсированной фазе. На основе заданий элементного состава авторы исследования приводят полное определение класса и типа для обогащённых ароматических фракций из технологических потоков нефтепереработки, включая вакуумный газойль с высоким и низким содержанием серы, кубовый остаток каталитического

крекинга и вакуумный газойль коксования. Эти технологические потоки были выбраны для демонстрации возможностей ДИ-МС-ИЦР-Ф для различных нефтяных композиций. Данные, полученные с помощью указанного метода, хорошо согласуются с прогнозируемыми характеристиками технологических потоков нефтеперерабатывающего завода. Анализ ДИ-МС-ИЦР-Ф в состоянии охватывать все компоненты нефти, начиная от металлпорфиринов, азотсодержащих соединений до нафтеновых кислот, ароматических углеводородов и тиофеноароматических соединений [10].

Таким образом, по краткому обзору исследований по определению углеводородного состава нефтяных фракций можно сделать следующие выводы :

1) Самым информативным и находящимся в развитии являются масс-спектрометрические методы анализа. При этом, варьируя способы ионизации и типы масс-детекторов, а также различные хроматографические приставки исследователям удаётся добиться практически полного анализа углеводородов в самых различных нефтяных системах.

2) Определение углеводородного состава дизельного топлива направлено, в основном, на корректировку качества последнего, для приведения топлива в соответствие с существующими стандартами по эмиссии выхлопных газов и твёрдых частиц, а также для

пригодности его использования в различных сезонных условиях.

Имея данные по компонентному и, в частности, по углеводородному составу дизтоплива, а также, владея необходимыми теоретическими знаниями, исследователи, эксперты, специалисты и, вообще, заинтересованные лица могут делать соответствующие прогнозы и коррективы по практике использования этих замечательных нефтяных композиций.

II. Методические аспекты, характеристика объектов и использованной аппаратуры

В качестве объекта исследований было выбрано дизельное топливо, производимое Государственной Нефтяной Компанией Азербайджанской Республики для заправки автомобильного транспорта.

Анализ углеводородного состава топлива и фракций проводили хром-масс-спектрометрией на приборе GC-MS, Agilent technologies 7890B(GC) - 5977B (MSD), с идентификацией компонентов в диапазоне масс $m/z = 30-550$.

III. Результаты масс-спектрометрического анализа

Таблица . Дизельное топливо – Дизель 1

№	Алифатические углеводороды	Содержание, %
	н-парафины	
1.	n-Heptane \$\$ $\text{n-C}_7\text{H}_{16}$	0,025
2.	n-Nonane \$\$ $\text{n-C}_9\text{H}_{20}$	0,321
3.	n-Decane \$\$ $\text{n-C}_{10}\text{H}_{22}$	0.659
4.	n-Undecane \$\$ $\text{n-C}_{11}\text{H}_{24}$	0,994
5.	n-Dodecane	1,533
6.	n-Tridecane	1.951
7.	n-Tetradecane	2.514
8.	n-Pentadecane \$\$ $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{13}\text{CH}_3$	3.613
9.	n-Hexadecane \$\$ Cetane	2,451
10.	n-Heptadecane	2.177
11.	n-Heptadecane	4.325
12.	Nonadecane (CAS) \$\$ n-Nonadecane	2.046
13.	n-Eicosane \$\$ Icosane	1.735
14.	n-Docosane \$\$ $\text{C}_{22}\text{H}_{46}$ Standard \$\$ N-docosane	1.179

15.	Tricosane (CAS) \$\$ n-Tricosane	0.747
16.	Tetracosane	0.329
17.	Pentacosane	0.072
18.	Hexacosane (CAS) \$\$ n-hexacosane \$\$ cerane	0.034
19.	Heneicosane \$\$ n-Heneicosane	1.658
Σ	Сумма	26.186
	Моно-алкилзамещённые алифатические углеводороды	
1.	3-Methylhexane	0.007
2.	2-Methylheptane \$\$ $(\text{CH}_3)_2\text{CH}(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	0.041
3.	3-Methyloctane \$\$ Isononane	0.223
5.	2-Methylnonane	0.136
6.	3-Methylnonane	0.104
7.	5-Methyldecane	0.166
8.	4-Methyldecane	0.085
9.	2-Methyldecane \$\$ $\text{n-C}_8\text{H}_{17}\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	0.209
10.	3-Methyldecane \$\$ 2-Ethylnonane	0.126
11.	4-Methylundecane	0.291
12.	5-Methylundecane	1.061
13.	2-Methylundecane	0.471

14.	3-Methyldodecane	1.026
15.	2-Methyldodecane	1.595
16.	4-Methyltridecane	0.882
17.	3-Methyltetradecane	1.100
18.	2-Methylpentadecane	0.738
19.	2-Methylhexadecane	1.166
20.	3-Methylhexadecane	1.096
21.	2-Methylheptadecane	0.684
22.	3-Methylheptadecane	1.150
23.	3-Methyloctadecane	0.984
24.	9-Methylnonadecane	0.300
25.	10-Methylnonadecane	0.366
Σ	Сумма	14.007
	Ди-алкилзамещённые алифатические углеводороды	
1.	2,4-Dimethylheptane	0.130
2.	2,3-Dimethylheptane	0.031
3.	2,6-Dimethyloctane \$\$ Octane, 2,6- dimethyl	0.219
4.	2,3-Dimethyloctane	0.086
5.	3,7-Dimethylnonane	0.184

6.	2,6-Dimethylundecane	0.614
7.	4,8-Dimethylundecane	0.572
8.	2,5-Dimethyldodecane	0.453
9.	4,8-Dimethyltridecane	0.567
Σ	Сумма	2.856
	Три-алкилзамещённые алифатические углеводороды	
1.	Dodecane, 2,6,10-trimethyl- \$\$ Farnesane	1.411
2.	2,6,10-Trimethylpentadecane	2.405
Σ	Сумма	3.816
	Тетра-алкилзамещённые алифатические углеводороды	
1.	Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) \$\$ Pristane (Field ion)	4.561
2.	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- \$\$ Phytane	4.313
Σ	Сумма	8.874
Σ	Суммарное содержание всех алифатических углеводородов	55.739
	Нафтеновые углеводороды	
	Незамещённые нафтеновые углеводороды	
1.	Cyclodecane	0.041
2.	Cyclotetradecane	0.522

3.	Cyclopentadecane	0.423
4.	Naphthalene, decahydro-, cis- \$\$ cis-Decalin \$\$ cis-Perhydronaphthalene	0.054
5.	Naphthalene, decahydro-, trans- \$\$ trans- Bicyclo[4.4.0]Decane \$\$ trans- Decalin	0.165
6.	1H-Indene, octahydro-, cis- (CAS) \$\$ cis-Hexahydroindan \$\$ cis-Hydrindan	0.08
7.	Pentalene, octahydro-, cis- \$\$ cis-Bicyclo[3.3.0]octane	0.016
Σ	Сумма	1.301
	Моно-алкилзамещённые нафтеновые углеводороды	
1.	Ethylcyclopentane	0,015
2.	n-Decylcyclopentane \$\$ Decane, cyclopentyl-	1,787
3.	Methylcyclohexane \$\$ Sextone B	0,056
4.	Ethylcyclohexane	0,106
5.	n-Propylcyclohexane	0,141
6.	3-Methyl-1-cyclohexene	0.100
7.	n-Butylcyclohexane \$\$ Butane, 1-cyclohexyl-	0,181
8.	1-Cyclohexylheptane \$\$ n- Heptylcyclohexane	0,637
9.	Cyclohexane, pentyl- \$\$ Pentane, 1-cyclohexyl-	0,223

10.	Methylcyclododecane	0,335
11.	Naphthalene, decahydro-2-methyl- \$\$ 2-methyldecalin	0.219
12.	Decahydro-2-methylnaphthalene	0.376
13.	2-Methyloctahydropentalene	0.090
14.	Cyclohexane	0.536
Σ	Сумма	4.802
	Ди-алкилзамещённые нафтеновые углеводороды	
1.	cis-1,3-Dimethylcyclopentane	0.006
2.	cis-1,2-Dimethylcyclopentane	0.008
3.	1-Ethyl-3-methylcyclopentane	0.020
4.	1-Ethyl-2-methylcyclopentane	0.040
5.	Cyclopentane, (1-methylethyl)- \$\$ Cyclopentane, isopropyl-	0.007
6.	trans-1-Methyl-2-propylcyclopentane	0.060
7.	Ethylpropylcyclopentane	0.046
8.	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0.057
9.	Cyclohexane, 1,1-dimethyl- \$\$ Gem- Dimethylcyclohexane	0.006
10.	Cyclohexane, 1,4-dimethyl- (CAS) \$\$ Hexahydroxylene	0.026
11.	trans-1-Ethyl-4-methylcyclohexane	0.068

12.	cis-1-Ethyl-4-Methylcyclohexane	0.029
13.	cis-1-Ethyl-3-methylcyclohexane	0.061
14.	cis-1,4-Dimethylcyclohexane	0.145
15.	1,6-Dimethylcyclohexene	0.066
16.	1-Methyl-2-propylcyclohexane	0.416
17.	(4-Methylpentyl)cyclohexane	0.356
18.	1-methyl-2-phenylcyclopropane \$\$ Benzene, (2-methylcyclopropyl)-	0.324
19.	2-Cyclohexyloctane \$\$ (1-Methylheptyl)- cyclohexane	0.707
20.	Naphthalene, decahydro-1,6-dimethyl- (CAS) \$\$ 1,6-dimethyldecalin	0.178
21.	Decahydro-2,6-dimethylnaphthalene	0.147
22.	cis-1,3-Bis(acetamidomethyl)-1,3- dideuteriocyclohexane	0.511
Σ	Сумма	3.284
	Три-алкилзамещённые нафтеновые углеводороды	
1.	Cyclopentane, 1,2,4-trimethyl-, (1.alpha., 2.beta., 4.alpha.)-	0.009
2.	Cyclopentane, 1,2,3-trimethyl- (1.alpha 2.alpha., 3.beta)	0.010
3.	1,1,3-Trimethylcyclohexane	0.075
4.	Cyclohexane, 1,2,3-trimethyl-, (1.alpha., 2.alpha., 3.beta.)-	0.019

5.	1,1,2-Trimethylcyclohexane	0.020
6.	1,2,3-Trimethylcyclohexane	0.025
7.	1-Ethyl-2,3-dimethylcyclohexane	0.015
8.	1-Ethyl-2,3-dimethylcyclohexane	0.026
9.	Bicyclo[3.1.1]heptane, 2,6,6-trimethyl-, [1S(1.alpha., 2.beta., 5.alpha.)]-	0.316
10.	Cyclotetradecane, 1,7,11-trimethyl-4- (1-methylethyl)- \$\$ Cembrane	0.393
Σ	Сумма	0.908
	Тетра-алкилзамещённые нафтоновые углеводороды	
1.	1,1,4,4-Tetramethylcyclohexane	0.014
2.	1-ethyl-2,2,6-trimethylcyclohexane \$\$ 2-ethyl-1,1,3-trimethylcyclohexane	0.048
3.	1,2,4,5-Tetraethylcyclohexane	0.378
4.	Cyclohexane, 1,2,3,5-tetraisopropyl-	0.670
Σ	Сумма	1.11
	Пента-алкилзамещённые нафтоновые углеводороды	
1.	Decahydro-4,4,8,9,10-pentamethyl- naphthalene	0.656
Σ	Сумма	0.656

	Гекса-алкилзамещённые нафтеновые углеводороды	
1.	1,1,4,4,7,7-Hexamethylcyclononane	0.724
Σ	Сумма	0.724
Σ	Суммарное содержание всех нафтеновых углеводородов	12.785
	Олефиновые углеводороды	
	Незамещённые олефиновые углеводороды	
1.	4-Decene \$\$ (4E)-4-Decene	0.134
2.	1-Nonene \$\$ n-Non-1-ene \$\$ 1-C ₉ H ₁₈ \$\$ Nonene-(1) \$\$ Nonylene	0.026
3.	7-Hexadecene, (Z)- \$\$ (7Z)-7-Hexadecene	0.617
4.	1-Heptadecene \$\$ Hexahydroaplotaxene	1.353
Σ	Сумма	2.130
	Моно-алкизамещённые олефиновые углеводороды	
1.	4-Methyl-1-decene	0.705
2.	2-Methyl-Z-4-tetradecene	2.205
Σ	Сумма	2.910
Σ	Суммарное содержание всех олефиновых углеводородов	5.040

	Ароматические углеводороды	
	Незамещённые ароматические углеводороды	
1.	Benzene \$\$ [6]Annulene \$\$ Benzole \$\$ Coal naphtha \$\$ Cyclohexatriene	0.009
Σ	Сумма	0.009
	Моно-алкилзамещённые ароматические углеводороды	
1.	Toluene \$\$ Methacide \$\$ Methylbenzene \$\$ Methylbenzol	0.026
2.	Benzene, (1-methylethyl) \$\$ Isopropyl- benzene \$\$ Cumene \$\$ Cumol	0.045
3.	Benzene, (1-methylpropyl)- (CAS) \$\$ sec-Butylbenzene \$\$ 2-Phenylbutane	0.053
4.	Benzene, (2-methyl-1-propenyl)-(CAS) \$\$ (2-Methylpropenyl)benzene	0.092
5.	Benzene, (1-methyl-1-butenyl)- \$\$ 2-Phenyl-2-pentene	0.343
6.	Benzene, (1-ethyl-1-propenyl)\$\$3-Phenyl- 2-pentene \$\$ 3-Phenyl-3-pentene	0.230
7.	1-Methylnaphthalene	0.812
8.	alpha.,beta.,beta.-Trimethylstyrene \$\$ 2-Butene, 2-methyl-3-phenyl-	0.181
Σ	Сумма	1.782

	Ди-алкилзамещённые ароматические углеводороды	
1.	Benzene, 1-ethyl-3-methyl- \$\$ Toluene, m-ethyl- \$\$ m-Ethylmethylbenzene	0.212
2.	p –Xylene Benzene,1,4- dimethyl-1	0.109
3.	Benzene, 1-ethyl-2-methyl- \$\$ Toluene, o-ethyl- \$\$ o-Ethylmethylbenzene	0.070
4.	Benzene, 1-methyl-3-propyl- \$\$ Toluene, m-propyl- \$\$ m-Propyltoluene	0.166
5.	Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)- \$\$ o-Cymene \$\$ o-Cymol	0.072
6.	Benzene, 1-methyl-2-propyl \$\$ 2- Propyltoluene \$\$ o-Propyltoluene	0.079
7.	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl) \$\$ 1-Sec-butyl-4-methylbenzene	0.058
8.	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl) \$\$ 1-Sec-butyl-4-methylbenzene	0.215
9.	1,6-Dimethylnaphthalene	0.999
Σ	Сумма	1.980
	Три-алкилзамещённые ароматические углеводороды	
1.	1,2,4- Trimethylbenzene \$\$ Cumene	0.075
2.	1,2,3-Trimethylbenzene \$\$ Hemimellitene	0.286
3.	2-ethyl-1,4-dimethylbenzene	0.094

4.	Benzene,1-ethyl-2,4-dimethyl \$\$ 4-Ethyl-m-xylene	0.118
5.	2-ethyl-1,4-dimethyl-benzene	0.078
6.	Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl \$\$ o-Xylene, 4-ethyl- \$\$ 2-Methyl-pethyl-toluene	0.470
7.	Naphthalene, 1,6,7-trimethyl- (CAS) \$\$ 2,3,5-Trimethylnaphthalene	0.767
8.	4,6,8-Trimethylazulene	1.204
Σ	Сумма	3.092
	Тетра-алкилзамещённые ароматические углеводороды	
1.	1,2,4,5-Tetramethylbenzene \$\$ Durol	0.223
2.	1,2,3,4-Tetramethylbenzene \$\$ Prehntol	0.145
3.	AR-ethyl-1,2,4-trimethylbenzene	0.137
4.	Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-4-(1-methylethenyl)	0.469
5.	(Z)-2-(1'- propenyl)Mesitylene \$\$ Mesitylene, 2-propenyl-, (Z)-	0.486
Σ	Сумма	1.460
Σ	Суммарное содержание всех ароматических углеводородов	8.323

	Нафтено-ароматические углеводороды	
	Незамещённые нафтеново-ароматические углеводороды	
1.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro- (CAS) \$\$ Tetranap \$\$ Tetralin	0.774
2.	Indane \$\$ 1H-Indene,2,3-dihydro- \$\$ Benzocyclopentane \$\$ Hydrindene	0.249
3.	Octahydrophenanthrene	0.952
4.	1,2,3,3a,8,8a-hexahydrocyclopent[a]- indene	0.315
5.	Benzocycloheptatriene \$\$ 5H-Benzo[a]- cycloheptene	0.462
Σ	Сумма	2.752
	Моно-алкилзамещённые нафтено-ароматические углеводороды	
1.	1- methyl-2-phenylcyclopropane	0.402
2.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2-methyl- (CAS) \$\$ 2-Methyltetralin	0.268
3.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-6-methyl- (CAS) \$\$ 6-Methyltetralin	0.697
4.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-5-methyl- (CAS) \$\$ 5-Methyltetralin	0.815

5.	Naphthalene, 6-ethyl-1,2,3,4-tetrahydro- (CAS) \$\$ 6-Ethyltetraline	0.310
Σ	Сумма	2.743
	Ди-алкилзамещённые нафтеново- ароматические углеводороды	
1.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2,7- dimethyl \$\$ 2,7-Dimethyltetralin	0.881
2.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1,1- dimethyl- \$\$ 1,1-Dimethyltetralin	0.629
3.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1,4- dimethyl- \$\$ 1,4-Dimethyltetralin	0.352
4.	1H-Indene, 2,3-dihydro-4,7-dimethyl- \$\$ Indan, 4,7-dimethyl-	0.371
Σ	Сумма	2.233
	Три-алкилзамещённые нафтеново- ароматические углеводороды	
1.	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2,5,8- trimethyl- \$\$ 2,5,8-Trimethyltetralin	0.656
2.	1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,3-trimethyl- \$\$ Indan, 1,1,3-trimethyl-	0.171
3.	1H-Indene, 2,3-dihydro-4,5,7-trimethyl- (CAS) \$\$ 4,5,7-trimethylindane	0.165
Σ	Сумма	1.792
Σ	Суммарное содержание всех нафте- ново-ароматических углеводородов	9.520

	Стероиды	
1.	14-Beta-H-PregnaA \$\$ 14B-Pregnane	3.190
Σ	Сумма	3.190
Σ	Суммарное содержание стероидов	3.190
	Гетероатомные соединения	
	Азотсодержащие	
1.	2,4-Dymethyl-1,5-diazabicyclo[3.1.0] hexane (cis)	0.123
2.	4-Phenyl-1,2,3,6-tetrahydropyridine	0.296
3.	N,N'-Dibutylidene-hydrazine	0.053
Σ	Сумма	0.472
	Кислородсодержащие	
1.	2-ethyl-4-methyl-5,6-dihydro-2H-pyran	0.026
2.	2-heptylfuran \$\$ 2-n-Heptylfuran	0.192
3.	tret-Butyl-8-Methyl-10-azabicyclo[4.3.1]- deca-3,7-diene-10-carboxylate	0.521
Σ	Сумма	0.739
Σ	Суммарное содержание всех гетероатомных соединений	1.211

	Комплексные соединения	
1.	Iron, tricarbonylchloro(eta.3-2-propenyl)-	0.595
Σ	Сумма	0.595
Σ	Суммарное содержание комплексных соединений	0.595
	Прочие соединения	
	Окисленные компоненты (кетоны, спирты, кислоты, эфиры)	
1.	bicyclo[2.2.1]hept-2'-en-7'-ylidene)acetic acid	0.062
2.	Methyl 4,6-decadienyl ether	0.496
3.	2-Butyl-1-octanol	0.156
4.	1-Methyl-bicyclo[4.1.1]octan-7-one	0.026
5.	Benzyl (dideuterated)methyl ether	0.180
6.	trans-4-Methyl-5-isopropylcyclopent-2-en-1-one	0.038
7.	2-Cyclopenten-1-one, 2-(2-butenyl)-4-hydroxy-3-methyl,(Z) \$\$ Cinerolon	0.339
8.	trans-2-Ethyl-3-methylcyclohexanone	0.059
9.	Salvialane (terpenoid)	0.29
10.	Pyridine-3-carboxamide, oxime, N-(2-trifluoromethylphenyl)-	0.525
Σ	Суммарное содержание окисленных соединений	2.171

Литература

1. Иванова Л.В., Кошелев В.Н., Буров Е.А. Влияние группового углеводородного состава дизельных топлив на их эксплуатационные свойства. //Нефтехимия. Москва. 2014, Т.54, № 6, с.478.
2. Зинина Н.Д., Шеянова А.В., Фаерман В.И., Гришин Д.Ф. Исследование влияния углеводородного состава дизельных топлив на их низкотемпературные свойства. //Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт. ЦНИИТЭНЕФТЕХИМ, Москва. 2015, №10, с.14-19.
3. Шеянова А.В., Зинина Н.Д., Гришин Д.Ф. Влияние углеводородного состава дизельных топлив на их низкотемпературные свойства. //Материалы Международной научно-практической конференции. НЕФТЕГАЗОПЕРЕРАБОТКА – 2015. Уфа, 2015 г., с.69-70.
4. Y.Briker, Z.Ring, A.Iacchelli, N.McLean, P.M. Rahimi, C.Fairbridge, R.Malhotra, M.A. Coggiola and S.E.Young. Diesel fuel analysis by GC– FIMS: Aromatics, n-paraffins, and isoparaffins. //Energy & fuels. 2001. V.15, № 1, pp. 23-37.
5. Y.Briker, Z.Ring, A.Iacchelli, N.McLean, C.Fairbridge, R.Malhotra, M.A. Coggiola and S.E.Young. Diesel fuel analysis by GC– FIMS: normal paraffins, isoparaffins, and cycloparaffins. //Energy & fuels. 2001. V.15, № 4, pp.996-1002.
6. Qian Kuangnan, and Gary J.Deichert. Recent advances in petroleum characterization by GC field ionization time-of-flight high-resolution mass spectrometry. //Analytical chemistry. 2002. V.74, №16, pp.3977-3983.

7. Qian Kuangnan, Gary J.Dechert and Kathleen E.Edwards. Deducing molecular compositions of petroleum products using GC-field ionization high resolution time of flight mass spectrometry. // *International Journal of Mass Spectrometry*. 2007. V.265, № 2-3, pp.230-236.
8. Qian Kuangnan, John W.Diehl, Gary J.Dechert and Frank P.Di Sanzo. The coupling of supercritical fluid chromatography and field ionization time-of-flight high-resolution mass spectrometry for rapid and quantitative analysis of petroleum middle distillates. // *European Journal of Mass Spectrometry*. 2004. V.10, № 2, pp.187-196.
9. Ogawa Tadao. Analytical conditions for field ionization mass spectrometry of diesel fuel. // *Fuel*. 2005. V.84, № 16, pp.2015-2025.
10. Schaub Tanner M., Ryan P.Rodgers, Alan G.Marshall, Kuangnan Qian, Larry A.Green and William N.Olmstead. Speciation of aromatic compounds in petroleum refinery streams by continuous flow field desorption ionization FT-ICR mass spectrometry. // *Energy & fuels*. 2005. V.19, № 4, pp.1566-1573.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Развития Науки при Президенте Азербайджанской Республики –
Грант № EIF-MQM-ETS-2020-1(35)-08/05/4-M-05

ОГЛАВЛЕНИЕ

	Стр.
Аннотация.....	63
I. Введение	64
II. Методические аспекты, характеристика объектов и использованной аппаратуры	71
III. Результаты масс-спектрометрического анализа	72
Литература	88

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASI

**AKADEMİK M.F.NAĞIYEV adına KATALİZ VƏ
QEYRİ-ÜZVİ KİMYA İNSTİTUTU**

**E.B. Zeynalov, D.B. Tağıyev, S.B. Zeynalov,
Ya.M. Nağıyev, E.R. Hüseynov, F.B. Nəzərov,
A.B. Hüseynov, M.Ya. Məhərrəmov,ə,
N.A. Mustafayeva, N.M. Şahnəzərova,
A.F. Nəbizadə.**

DİZEL YANACAĞININ KOMPONENT TƏRKİBİ

Naşir: Elnarə Abbasova
Texniki redaktor: Asim Səfərov
Dizayner: İradə Əhmədova

Yığılmağa verilmişdir: 10.01.2022
Çapa imzalanmışdır: 25.01.2022
Tiraj 100, ş.ç.v 5,75
“Füyuzat” nəşriyyatında çap edilmişdir.
Ünvan: Bakı şəh., Z.Xəlilov küç., 26
Tel.: 055 850-98-69
fuyuzat2020@gmail.com



ISBN: 978-9952-37-740 8



9 789952 377408