

1.1 Тізбекті парафиндердің изомеризациясы

Изомеризация процесін жүргізу барысында бензиннің октан санының жоғарылауы тізбекті изомерлерге қарағанда тармақталған көмірсутектерге бұл параметрлердің аса жоғары мағыналы қызметтері тән екеніне негізделген. Бұл жайында C₅-C₆ көмірсутектерін зерттеу әдісі арқылы октан сандарының мәндері мысал1-кестеде дәлелденген.

Кесте 1.— C₅-C₆ октан санының құрамының мағанасы. [1]

Көмірсутек	ИОС
<u>Пентандар</u>	
н-пентан	62
Метилбутан	93
2,2-диметилпропан	100
<u>Гександар</u>	
н-гексан	29
2-метилпентан	78
3-метилпентан	76
2,2-диметилбутан	92
2,3-диметил бутан	104

Изомеризациялық параметрлердің термодинамикалық анализінің дәлелі (жылу реакциясы, энтрпияның өзгеруі және тепе-теңдік константасы) бойынша, ол экзотермиялық қайтымды реакциялардың бірі болып табылады. [2] келтірілген мәлімет бойынша, тізбекті парафиннің изомеризациясы, аз мөлшерде жылу бере жүреді (2-ден 20кДж/моль-ға дейін), яғни изомеризация жылуы температураға аса қатысты емес. Басқа жағдайда, н-парафинді изомеризацияның жылуы бүйір тізбекке кіретін сандық орынбасарлармен емес, керісінше олардың келісімді орналасуымен анықталады. Мысалы: 2-метил орынбасқан изомерінің түзілу барысында реакция жылуы 3-шілік метил изомерге қарағанда 2 есе аз. Тепе—теңдік константасы «н-парафин → изопарафин» реакциясы үшін олардың температурасының өсуімен төмендеу қасиеті тән, сол себепті тізбекті парафинді изомеризацияға төменгі температура қолайлы.

Н-гексан изомеризациясының тепе-теңдік құрамды өнімдерін әртүрлі температурада [3] салыстырғанда, температураның өсуімен 2-метилпентанның, (2-МП), 3-метилпентанның (3 МП) және н-гексанның бөлігі өседі және 2,3-диметилбутан құрылысының аса өзгеруімен 2,2-диметилбутан құрылысы бірдей төмендеуін көрсетеді.