

Kokkuvõte

Võrreldes teiste põlevkiviõlidega, sisaldab kukersiitne põlevkiviõli palju fenoolseid. Selleks, et õigesti kirjeldada õli omadusi, on vaja teada fenoolsete ühendite kontsentratsiooni õlis, kuna fenoolsetel ühenditel on suur mõju õli termodünaamilistele ja transpordiomadustele. Lisaks, toetaks fenoolsete ühendite jaotuse teadmine põlevkivi vedelkütuste tootmist ja kasutamist.

Käesoleva magistritöö raames töötati välja meetodika, mis kasutab Fourier teisendusega infrapuna spektrometriat, et mõõta hüdroksüülrühmade sisaldust kukersiitsetes põlevkiviõlides ja tema fraktsioonides, kus enamuse hüdroksüülrühmi on fenoolsetes ühendites. Seejärel kasutati seda meetodikat, et uurida fenoolsete ühendite jaotust selles õlis.

Meetodika väljatöötamiseks mõõdeti 52 kitsa keemispriiriga põlevkiviõli fraktsiooni hüdroksüülrühmade sisaldus traditsiooniliselt kasutatava tiitrimisemeetodiga. Samuti mõõdeti ka proovide infrapunaspektrid kasutades Interspec 301-X spektrometrit. Osavähimruutude regressioonimeetodiga leiti seos infrapunaspektri ja proovi hüdroksüülrühmade sisalduse vahel. Välja töötatud regressioonimudeli ruutkeskmise viga hüdroksüülrühmade määramisel oli 0,37 mass% (keskmiselt 8% erinevus mõõdetud ja regressioonimudeliga leitud tulemuste vahel). Uue, infrapunaspektril põhineva hüdroksüülrühmade määramise meetodika eeliseks traditsiooniliselt kasutatava tiitrimisemeetodi ees on väga kiire analüüsiaeg - spektri mõõtmiseks kulub umbes viis minutit.

Hüdroksüülrühmade sisalduse määramine erinevates õlifraktsioonides näitas, et fraktsioonide hüdroksüülrühmade sisaldus varieerub 0 ja 9 mass% vahel. Sõltuvalt põlevkiviõli tootmise tehnoloogiast, oli üldkeskõli fraktsioonis hüdroksüülrühmade sisaldus keskmiselt umbes 5,4 mass% (Enefit 140 õli) või 4,0 mass% (Enefit 280 õli). Kitsa keemispriiriga fraktsioonide hüdroksüülrühmade sisaldus kasvab kuni fraktsiooni keemispunktini umbes 350 °C ja hakkab seejärel vähenema.

Kuna spektrometri kalibrimine kvantitatiivseks mõõtmiseks nõuab palju aega, siis uuriti ka seda, kas ühe spektrometri spektrite põhjal välja töötatud mudelit on võimalik kasutada teise spektrometriga mõõdetud spektrite analüüsiks. Erinevatest meetoditest andis parimaid tulemusi tükiti otsese standardiseerimise (piecewise direct standardization) meetod, mis võimaldas rahuldava täpsusega leida Nicolet IR100 spektrometriga mõõdetud spektrite põhjal hüdroksüülrühmade sisaldust õliproovides.