Себестоимость продукции.

№	Вид затрат	% от себестоимости
1	Сырье и материалы	70
2	Топливо и энергия	10 - 20
3	Амортизационные отчисления средства в виде денег, направляемых на ремонт старых или изготовление новых основных средств производства	3 - 4
4	Заплата основных рабочих	3 - 4
5	Цеховые расходы (зарплата вспомогательных рабочих, администрации цеха, вспомогательных служб, текущий ремонт оборудования)	1
6	Общезаводские расходы (на администрацию завода, охрану, пожарную службу, очистные сооружения)	1
7	Транспортные расходы	1

Вопрос : наиболее эффективные пути снижения себестоимости?

Качество продукции – совокупность свойств продукта, обуславливающих его пригодность удовлетворять определенные потребности в соответствии с его назначением.

Применительно к химическим продуктам, это в первую очередь их чистота, характеризующаяся видом и количеством примесей к основному веществу.

Управление качеством базируется на стандартизации - нормативном способе управления, когда воздействие на объект осуществляется путем установления норм и правил, оформленных в виде нормативных документов, имеющих юридическую силу.

К таким документам относятся:

государственный стандарт ГОСТ

отраслевой стандарт ОСТ

республиканский стандарт РСТ

стандарт предприятия СТП

технические условия ТУ

Международная организация по стандартизации, ИСО (**International Organization for Standardization, ISO**) — международная организация, занимающаяся выпуском стандартов.

American Society for Testing and Materials (ASTM)

Федеральное агентство по техническому регулированию и метрологии
Стандартизация осуществляется в соответствии с принципом
применения международного стандарта как основы разработки национального стандарта, за исключением случаев, если такое применение признано невозможным вследствие несоответствия требований международных стандартов климатическим и географическим особенностям Российской Федерации, техническим и (или) технологическим особенностям или по иным основаниям либо Российская Федерация в соответствии с установленными процедурами выступала против принятия международного стандарта или отдельного его положения;

International Organization for Standardization specification for water for laboratory use ISO 3696: 1995

Parameter	Grade 1	Grade 2	Grade 3
pH value at 25°C inclusive range	N/A *	N/A *	5.0 to 7.5
Electrical conductivity µS/cm 25°C, max.	0.1**	1.0 **	5.0
Oxidizable matter Oxygen (O_2) content mg/L max.	N/A ***	0.08	0.4
Absorbance at 254 nm and 1 cm optical path length, absorbance units, max.	0.001	0.01	Not specified
Residue after evaporation on heating at 110°C mg/kg, max.	N/A ***	1	2
Silica (SiO_2) content mg/L, max.	0.01	0.02	Not specified

American Society for Testing and Materials (ASTM) D1193-2006 Standard specification for Reagent Grade Water

	Type I*	Type II **	Type III***	Type IV
Electrical Conductivity Max. (µS/cm @ 25°C)	0.056	1.0	4.0	5.0
Electrical Resistivity Min. (MΩ-cm @ 25°C)	18.0	1.0	0.25	0.2
pH @ 25°C	-	-	-	5.0 - 8.0
TOC max. (µg/L)	50	50	200	No limit
Sodium max (µg/L)	1	5	10	50
Silica max. (µg/L)	3	3	500	No limit
Chloride max. (µg/L)	1	5	10	50

НАЦИОНАЛЬНЫЙ СТАНДАРТ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ГОСТ Р 52501—2005 (ИСО 3696:1987)

ВОДА ДЛЯ ЛАБОРАТОРНОГО АНАЛИЗА

Таблица 1

Наименование показателя	*Степень чистоты*		*Метод анализа*
	1	*2*	
1 *Удельная электрическая проводимость* при *температуре* 25 °С, мСм/м, *не более*	0,010	0,10	6.1
2 Массовая концентрация веществ, восстанавливающих $KMnO_4$ (O), мг/дм^3, не более	Не определяется	0,08	6.2
3 Оптическая плотность при длине волны 254 нм, в кювете с толщиной поглощающего свет слоя 1 см, единиц оптической плотности, не более	0,001	0,01	6.3
4 *Массовая доля остатка* после выпаривания при *температуре* 110 °С, *млн*$^{-1}$, *не более*	*Не определяется*	1,00	6.4
5 *Массовая концентрация оксида кремния (IV)* (SiO_2), мг/дм^3, *не более*	0,010	0,02	6.5

Примечания

1 Значения *удельной электрической проводимости* применимы для свежеприготовленной воды; во время хранения возможно растворение примесей, таких как атмосферный диоксид углерода и щелочь (*при хранении в стеклянных сосудах*), что приводит к изменению *удельной электрической проводимости*.

Пример показателей качества промышленной воды

Наименование сырья, материалов, реагентов, катализаторов, полуфабрикатов, изготовляемой продукции	Номер государственного или отраслевого стандарта, технических условий, стандарта предприятия	Показатели качества, обязательные для проверки	Норма (по ГОСТу, ОСТу, стандарту предприятия)	Назначение, область применения
Вода оборотная (промышленная вода)	Требования технологической инструкции цеха № XXXX	Водородный показатель (pH)	7,0-7,4	В качестве хладоагента
		Солесодержание, мг/дм^3, не более	2700	
		Жесткость общая	Не нормируется	

И показатели качества питьевой воды (СанПиН 2.1.4.1074-01)

Показатели	Единицы измерения	Нормативы (предельно допустимые концентрации) (ПДК), не более
Водородный показатель	единицы pH	в пределах 6-9
Общая минерализация (сухой остаток)	мг/л	1000
Жесткость общая	мг-экв./л	7,0

Как видно, в промышленности в качестве охлаждающей воды (например в теплообменниках) питьевую воду (ту что течет у нас дома из крана) не используют. Почему? Слишком дорого.

И еще один пример, касающийся газообразного азота, который используется в промышленности в качестве наиболее дешевого инертного газа, в том числе для продувки оборудования и создания азотной «подушки» (азот тяжелее воздуха).

Азот газообразный технический 1 сорт стоит 56,64 рубля за $м^3$

Наименование показателя	Норма
Объёмная доля азота, % не менее	99,6
Объёмная доля кислорода, % не более	0,4
Объёмная доля водяного пара, % не более	0,009

Азот газообразный особой чистоты 1 сорт стоит 89,25 рубля за $м^3$

Наименование показателя	Норма
Объёмная доля азота, % не менее	99,999
Объёмная доля кислорода, % не более	0,0005
Объёмная доля водяного пара, % не более	0,0007

Вопрос: Азот какой марки используют на предприятиях органического синтеза?

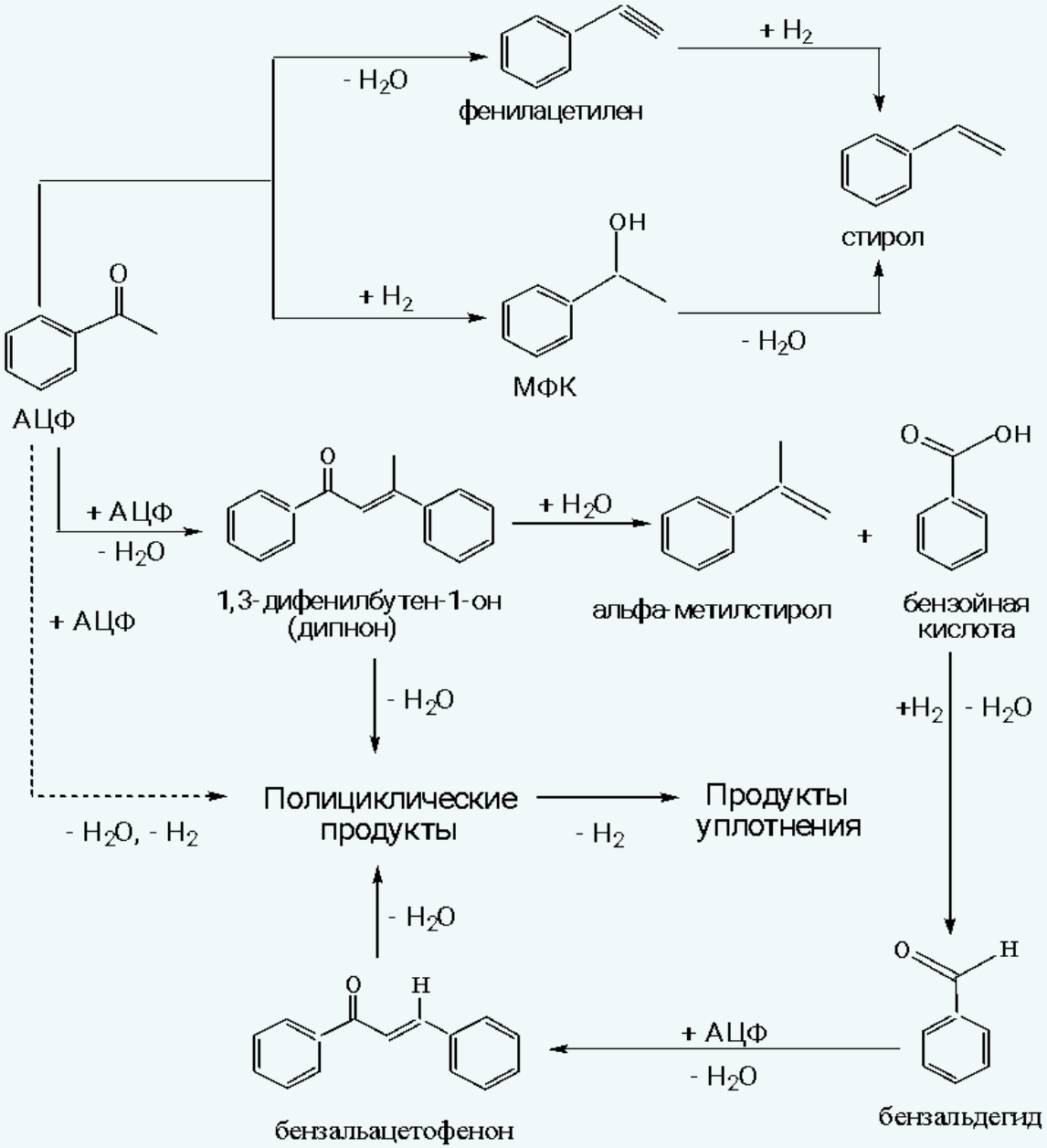
Физико-химические закономерности в химической технологии.

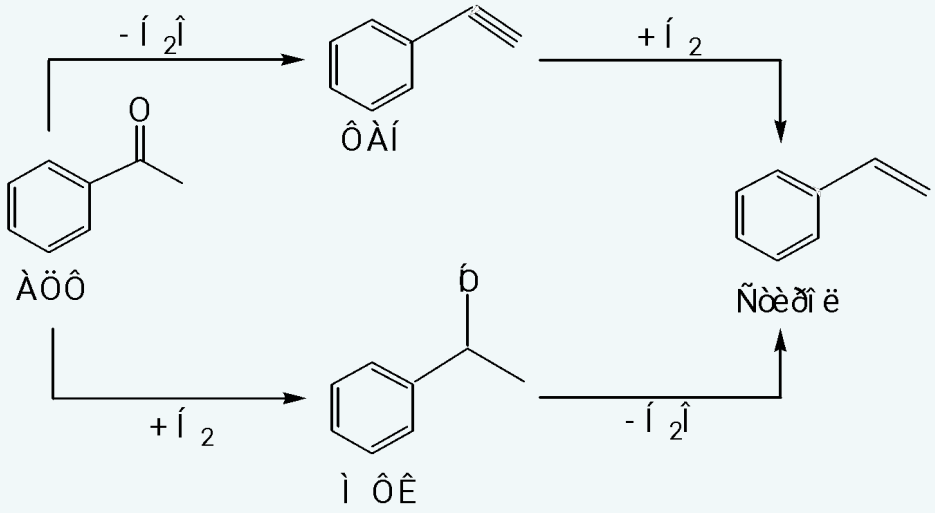
В основе химико-технологического процесса лежит одна или несколько химических реакций. Единой классификации реакций, из-за их огромного разнообразия не существует, используем следующее деление реакций на группы:

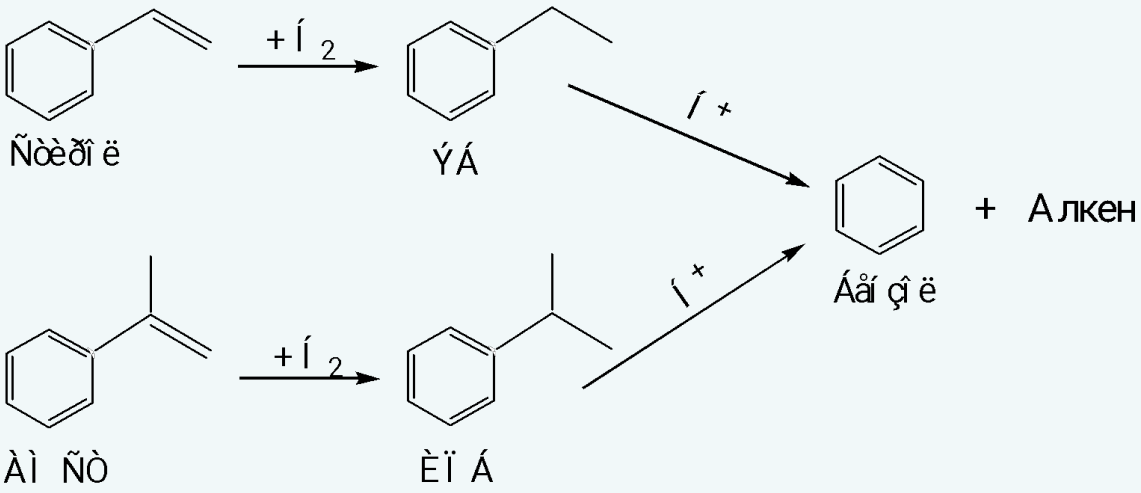
1. По механизму: простые и сложные реакции.

Простая реакция состоит из однотипных элементарных актов взаимодействия реагирующих частиц. В простой реакции реагенты непосредственно превращаются в конечные продукты без образования продуктов промежуточных, то есть она является одностадийной. Соответственно, для простой реакции существует одно переходное состояние (один энергетический барьер). Для описания простой реакции достаточно одного стехиометрического уравнения.

Сложная реакция состоит из нескольких простых реакций – то есть элементарных стадий, связанных друг с другом через реагенты или продукты.


- H2O
фенилацетилен
+ H2
стирол
OH
+ H2
- H2O
МФК
O
АЦФ
+ АЦФ
- H2O
O
1,3-дифенилбутен-1-он
(дипнон)
+ H2O
альфа-метилстирол
+
O
OH
бензойная
кислота
+ АЦФ
- H2O
+H2
- H2O
Полициклические
продукты
- H2
Продукты
уплотнения
- H2O, - H2
- H2O
O
H
бензальдегид
+ АЦФ
- H2O
O
H
бензальацетофенон


- Í 2Î
+ Í 2
O
ÔÀÍ
ÀÖÔ
Ñòèðîë
Ó
+ Í 2
- Í 2Î
Ì ÔÊ


+ Í 2
Ñòèðîë
ÝÁ
Í +
+ Алкен
Áåí çî ë
+ Í 2
ÀÌ ÑÒ
ÈÏ Á
Í +

2. По молекулярности реакции

Молекулярность реакции определяется числом молекул, участвующих в элементарном акте химического взаимодействия.

Мономолекулярная реакция – простая реакция, в которой превращается одна частица (молекула, ион или радикал), пример мономолекулярной реакции – изомеризация молекул, дегидратация этанола до этилена.

В бимолекулярной реакции превращается две частицы, в тримолекулярной соответственно три при их одновременном столкновении.

3. По порядку реакции.

В общем виде кинетическое уравнение, то есть уравнение, связывающее скорость химической реакции с концентрацией реагентов может быть записано в виде:

$$r = k \cdot \Pi C_i^{\nu_i}$$

Скорость химической реакции прямо пропорциональна произведению концентраций реагирующих веществ **(закон действующих масс)**

Где ν_i - показатель степени при концентрации реагента в кинетическом уравнении - **порядок реакции по реагенту**, а сумма частных порядков по реагентам – **суммарный (интегральный) порядок реакции.**

Для простой реакции порядок по реагенту равен числу частиц реагента участвующих в реакции, и соответственно суммарный порядок реакции совпадает с ее молекулярностью, то есть всегда величина целочисленная и положительная.

Для сложной реакции порядок может быть целочисленным, дробным и отрицательным. **Может ли порядок по реагенту быть нулевым?**

Формально может, например для реакции

$$aA + bB \rightarrow cC$$

в условиях значительного избытка одного из реагентов, например, реагента В

$$(C_B >> C_A)$$

изменение концентрации вещества В в ходе реакции несущественно по сравнению с изменением концентрации вещества А

то есть $C_{B,т} \approx C_{B,0} \approx const$

Соответственно, наблюдаемый порядок по В равен О, а кинетическое уравнение преобразуется к виду:

$$r = k \cdot C_A^a \cdot C_B^b = k' \cdot C_A^a$$

Где наблюдаемая константа скорости $k^{/}$ = произведению константы скорости k на начальную концентрацию реагента В ($C_{B,0}$).

Константа скорости - коэффициент пропорциональности между скоростью реакции и произведением концентраций реагирующих веществ.

Формально - величина константы скорости равна скорости химической реакции, когда концентрации всех реагентов равны 1.

Для сложной реакции, скорость которой подчиняется закону действующих масс, коэффициент пропорциональности называют **эффективной константой скорости реакции** или **коэффициентом скорости реакции**.

Константа скорости не зависит от концентраций реагирующих веществ, но зависит от температуры.

Уравнение температурной зависимости константы скорости впервые выведено Аррениусом (на базе экспериментальных данных) и имеет вид:

$$k = A \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{R \cdot T}\right)$$

Вопрос 1: физический смысл энергии активации?

Вопрос 2: размерность всех параметров в правой части уравнения Аррениуса

4. Обратимые и необратимые реакции:

aA (реагент) ⇔ bB (целевой продукт)

5. По фазовому состоянию:

Гомофазные или гомогенные и гетерофазные или гетерогенные.

В первом случае реагирующие вещества находятся в одной фазе, во втором в разных фазах.

6. По тепловому эффекту:

Экзотермические и эндотермические реакции.

Положительное значение теплового эффекта реакции означает, что тепло поглощается, отрицательное значение что тепло выделяется.

Для обратимой реакции тепловые эффекты прямого и обратного направления равны по величине, но обратные по знаку.

7. Каталитические и некаталитические.

В зависимости от фазового состояния реагентов и катализатора различают гомогенный и гетерогенный катализ.

Равновесие химической реакции

Фактически для любой реакции можно подобрать условия, в которых с заметной скоростью будет идти как прямая, так и обратная реакция, поэтому формально необратимой в данных условиях считается реакция, протекающая в одном из направлений с ничтожно малой скоростью.

Представим обратимую в данных условиях реакцию

$$aA + bB \Leftrightarrow cC + dD$$

Пусть в начальный момент в замкнутой системе имеется только некоторое количество исходных реагентов А и В. Реакция в этих условиях идет только в прямом направлении, слева – направо, и согласно закону действующих масс скорость ее пропорциональна концентрациям реагентов А и В:

$$\overset{\rightleftharpoons}{r} = k_1 \cdot C_A^a \cdot C_B^b$$

Очевидно, что скорость этого направления максимальна в начальный момент времени, когда концентрация веществ А и В максимальна. По мере их расходования, концентрация снижается и соответственно снижается скорость прямой реакции. Для реакции обратной, идущей справа - налево, наоборот скорость возрастает по мере накопления веществ С и D:

$$\overset{\rightleftharpoons}{r} = k_2 \cdot C_C^c \cdot C_D^d$$

В определенный момент времени скорости прямой и обратной реакции выравниваются и наступает состояние химического равновесия:

$$\overrightarrow{r} = \overleftarrow{r}$$

:

Из условия равенства скоростей в состоянии равновесия:

$$k_1 \cdot C_{A,e}^{a} \cdot C_{B,e}^{b} = k_2 \cdot C_{C,e}^{c} \cdot C_{D,e}^{d}$$

Индекс «е» при концентрациях от английского «equilibrium» -равновесие.

Отношение констант скоростей прямой и обратной реакции в состоянии равновесия называется **константой равновесия** и обозначается большой буквой «К»:

$$K_c = \frac{k_1}{k_2} = \frac{C_{C,e}^{c} \cdot C_{D,e}^{d}}{C_{A,e}^{a} \cdot C_{B,e}^{b}}$$

Основные характеристики химического равновесия:

1. Сохранение равновесия вследствие равенства скоростей прямой и обратной реакций.
2. Неизменностью равновесного состояния во времени при постоянных внешних условиях.
3. Возможностью подхода к состоянию равновесия с двух сторон.
4. Подвижностью равновесия, например, самопроизвольным восстановлением состояния равновесия, после снятия внешнего воздействия, вызвавшего отклонение системы от положения равновесия.