

1-Дәріс

Тақырып: Кіріспе. Химиялық технология пәні және оның негізгі міндеттері. Органикалық синтез өнеркәсібінің қазіргі жағдайы және даму перспективалары

Жоспар:

1. Химиялық технология пәні және оның негізгі міндеттері.
2. Органикалық синтез
3. Органикалық синтез өнеркәсібінің қазіргі жағдайы және даму перспективалары

Қазіргі деңгейдегі синтездің алдында тұратын мақсаттар өте күрделі және оларды тек дәйектілік химиялық айналымдар қатарының нәтижесінде ғана жүйеге асыруға болады. Осы кездегі синтезді жоспарлау міндеті бастапқы заттарды арнаулы қосылыстарға дейін әкелетін негізгі, аралықты қосылыстар мен реакцияларды табу. Көпзатты синтездің ұстанымды үлгісін келтіру жолын *синтездің стратегиясы* деп айтамыз.

Сонымен қатар әрбір жеке реакция алдын ала жоспарлану қажет. Міндеттерді шешуге арналған көптеген әдістер бар. Солардың ішінен ең жақсы нәтижеге әкелетін қолайлы әдісті таңдай білу керек. Жоспарланудың осы түрін *органикалық синтездің тәсілі* деп атауға болады.

Органикалық синтез – бұл жай органикалық немесе бейорганикалық заттардан құрылымы алдын ала белгілі органикалық заттың алынуы. Соңғы кезде синтез толық деп аталады. *Жай зат* деп көміртегі атомдарының саны аз, жай тізбекті, кернеусіз оралымдары, реакциялық қабілеттілігі төмен топтары бар және т.б. осындай қасиеттеріне ие заттарын айтамыз. Сонымен, синтез жаңа оралымды жүйелерін және функционалды топтарын жоғарлатуымен көміртекті қаңқасын ұзартуында құрылады.

Тиімді синтездің үлгісі табиғаттағы заттардың биосинтезы, мысалы, өсімдіктердегі жай су, ауа және бейорганикалық тұздарынан күн сәулесінің әсерімен пайда болатын күрделі бейорганикалық заттардың синтезі. Тірі ағзада өтетін реакциялар іріктегіштермен және жоғары шығымдарымен пайда болады.

Синтездің тактикасы. Синтездің әдісін таңдау. Бастапқы заттар. Синтетикалық өнімдерін алу үшін лабораторияда және өндірісте бейорганикалық заттарымен қоса бастапқы органикалық қосылыстар да қолданады: көмір, табиғи газ, мұнай-, орман- және ауыл шаруашылықтарының өнімдері. Қазіргі заманда бейорганикалық шикізаттарынан (элементтерден) жай қосылыстарын алу ұстанымды мүмкіншілігіне күмән келмейтіндіктен, сонымен қатар сол жай заттардан күрделі қосылыстарды алу толық синтез болып есептеледі.

Бастапқы заттарға келесі негізгі талаптар қойылады:

- 1) қол жетімділік және мүмкіншілік келгенше төмен бағалылығы (өндірістік синтезіне аса маңызды);

2) дарашылдық және катал түрінде құрылымының анықтылығы (стереохимиясын да қарастырғанда);

3) жеткіліктей жоғары реакциялық қабілеттілігі.

Мұнай мен газдың көмірсутектері осы айтылған талаптарының біріншісіне қанағат етеді. Жеке күйінде гомолог қатарының тек қана алғашқы мүшелерін ($C_5 - C_6$) алу мүмкін. Бірақ олардың реакциялық қабілеттері төмен болғандықтан лабораториялық синтезінде бастапқы зат ретінде пайдаланбайды. Олардың өндірістік синтезінде қолданылуы жылдан жылға өсуде. Мұнай мен көмірдің айдау өнімдері циклді алкандар, арендер және гетероарендер алуында бастапқы заттар болып табылады. Осы қосылыстардың реакциялық қабілеттілігі өте жоғары болғандықтан оларды өндірісте және лабораторияда көп пайдаланады.

Химиялық реакциялардың барлық жиынтығын органикалық химияда әртүрлі өлшемдер қолданып *жіктеуге* болады:

реакцияға қатысатын бөлшектер саны бойынша жіктеу;

реакциялардың нәтижесі бойынша жіктеу;

реакцияға қатысатын бөлшектердің табиғаты бойынша жіктеу.

Химиялық-технологиялық процесс. Химия-технологиялық процесс (ХТП) физикалық, физика-химиялық, химиялық процесс қатарын құрайды және үш негізгі сатыдан тұрады.

Бірінші сатыда тек физикалық процестері өтеді, сондықтан бастапқы реагент *A* химиялық өзгерістерсіз, келесі сатыға ауысады.

Екінші сатыда химиялық реакция өтіп, өнімдер пайда болады. Бірақ реакция соңына жетпей, бастапқы *A* заттың бөлшегі өзгермей қалады.

Үшінші сатыда химиялық айналымдарысыз өнімдердің бөлінуі өтеді: негізгі өнім, қосалқы өнім және процестің басына оралатын бастапқы *A* заттың қалдығы.

Сонымен, ХТП үш негізгі сатыларының бірінші мен үшіншісі-шикізаттың дайындалынуы және мақсатты өнімдерінің алынуы-көбінесе физикалық және физика-химиялық процестеріне, ал екінші сатысы-химиялық процестеріне жатады.

Негізгі технологиялық түсініктер мен анықтамалар. *Өнімділік*-машиналар, аппараттар, цех, зауыттардың жұмыс тиімділігінің көрсеткіші болып табылады және бұл уақыт бірлігінде алынған өнімнің немесе өңделген шикізаттың саны.

$$\theta = V/\tau$$

θ -өнімділік;

V -өнімнің саны;

τ – уақыт.

Өнімділік сағатына килограмм ($\text{кг} \cdot \text{сағ}^{-1}$), сәткесіне тонна ($\text{т} \cdot \text{тәу}^{-1}$) немесе сәткесіне кубты метр ($\text{м}^3 \cdot \text{тәу}^{-1}$) және т.б. мөлшерленеді. Максимальды өнімділік *қуаттылық* деп аталады.

Қарқындылық – бұл өнімділіктің аппараттың көрсеткішімен (көлемі немесе еркін қимасы) қатынасы. Ол келесі теңдеу бойынша келтірілуі мүмкін:

$$K = \Theta/V_r = B/V_r \tau \quad (2.2)$$

V_r – аппарат (реактор) көлемі.

Қарқындылық уақыт бірлігінде ($\text{кг} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{м}^{-3}$) немесе аппараттың еркін қимасының бірлігінен ($\text{т} \cdot \text{тәу}^{-1} \cdot \text{м}^{-2}$) алынған өнім санымен мөлшерленуі мүмкін.

Өнімнің шығымы - бұл алынған мақсатты заттың саны оның теориялық есептері бойынша санына ($\text{м}^3 \cdot \text{тәу}^{-1}$) және т.б. қатынасы.

Шығын коэффициенті – бұл мақсатты өнім бірлігіне қатысқан шикізат, су, энергия және реагенттердің шығыны.

$$B = Q/V \quad (2.3)$$

Q – шикізат, реагент және т.б. шығыны.

Шығын коэффициенттерін тоннасына тонна ($\text{т} \cdot \text{т}^{-1}$), тоннасына кубты метр ($\text{м}^3 \cdot \text{т}^{-1}$), тоннасына киловатт-сағат ($\text{кВт} \cdot \text{сағ} \cdot \text{т}^{-1}$) және т.б. мөлшерленеді.

Реакцияның өту тереңдігінен шикізаттың қолдану дәрежесі және ХТП басқа көрсеткіштері байланысты. Ол айналым дәреже және өнімнің шығымымен, ал күрделі реакциялар үшін селективтікпен сипатталады.

Айналым дәрежесі – бұл реакцияға қатысқан реагент саны және оның бастапқы санымен қатынасы.

Айналым дәрежесін % мөлшерлейді:

$$X_A = (N_{A,0} - N_A) / (N_{A,0}) * 100$$

Қайтымсыз реакциялар $A \rightarrow R$ үшін:

$$\Phi_R = N_R / N_{R, \max}$$

Φ_R – мақсатты өнімнің шығымы;

N_R - R өнімнің процесс сонындағы саны;

$N_{R, \max}$ - R өнімнің максималды бола алатын саны.

Селективтік – бұл мақсатты өнімнің алынатын өнімдердің барлық санына қатынасы. Ол тәжірибеде жиі кездесетін бірнеше өнімнің пайда болуымен өтетін күрделі қосарланған және кезектескен процестерін сипаттайды. Мысалы, егер процесте қосарлаған реакциялар өтетін болса:



және мақсатты өнім R болса, онда селективтік келесі түрде табылады:

$$\varphi_R = N_R / (N_R + N_S)$$

φ_R – селективтік;
 N_R, N_S – R және S өнімдердің саны.

Химиялық-технологиялық процестердің түрлері және жіктелу жолдары.
Химиялық реакцияларды фазалық белгісі бойынша *гомогенді* және *гетерогенді* түрлеріне бөліп, сонымен қатар осындай белгі бойынша химиялық реакторлар мен процестерін қарастырады.

Гомогенді жүйелерде әрекетке қатысатын барлық заттар тек бір фазада орналасады: газды (г), сұйық (с) немесе қатты (қ). Гетерогенді жүйелерде әрекеттесетін заттар әртүрлі фазаларда орналасады: газ-сұйық (г-с), газ-қатты (г-қ), сұйық-қатты (с-қ), екі бір бірінде араласпайтын сұйықтар (с-с) және екі қатты фазалар (қ-қ). Көбінесе өндірістік процестерінде үш немесе төрт фазалар қатысады, мысалы г-с-қ, г-с-с, г-с-қ-қ.

Әдетте қосымша заттардың санын қарастырмай бөлек фаза ретінде тек негізгі компоненттерді есепке алады. Мысалы, с-с және с-қ жүйелерде жиі газды фаза кездеседі, өйткені процестер ауаның немесе басқа газдардың қатысуымен, не болмаса сұйық заттардың булануымен өтеді. Бірақ газды фазаны оның процеске маңызды әсері тиетін болса ғана есепке алады.

Кейбір процестер гомогенді фазада басталып, реакция нәтижесінде жаңа фаза пайда болғандықтан жүйе гетерогенді ортаға ауысады. Мысалы, полистиролды алу барысында сұйық стиролға бензоил асқын тотығын қосып, қыздырғанда стиролдың полимеризациясы өтіп, жаңа фазаның пайда болуы байқалады – қатты полистирол.

Гомогенді жүйелердің жылдамдығы гетерогенді жүйелерге қарағанда көп есе жоғары. Сондықтан тәжірибелік жағдайларда гетерогенді жүйелерді гомогенді жүйелерге ауыстыруға талаптанады (қатты заттардың еріту және балқыту, газдардың абсорбция немесе конденсациясы).

Гомогенді процестер жылдамдығы. Гомогенді процесстер көбінесе кинетикалық аумағында өтеді.

Гетерогенді процестер жылдамдығы. Гетерогенді жүйелердің тепе-теңдігі температура, қысым, бастапқы заттардың және реакция өнімдерінің шоғырлануымен, ал әртүрлі фазада орналасқан реагенттердің әрекеттесу жылдамдығы химиялық реакцияның жылдамдығынан және басқа да әсерлеріне байланысты. Сондықтан гетерогенді процестерің жылдамдығы келесі теңдеумен табылады:

$$r = K \cdot F \cdot \Delta C$$

r – гетерогенді процестің жылдамғы;
 K – процесс жылдамдығының коэффициенті;
 F – фазалардың әрекеттесу үсті;
 ΔC – процестің қозғаушы күші.

Химиялық процесс көбінесе бірнеше сатыдан тұрады, ал оның жалпы жылдамдығы ең баяу өтетін сатының жылдамдығымен байланысты. Сондықтан процестің қарқындалу жолында ең баяу өтетін сатыларды анықтау және оны жылдамдату қажет. Процеске тежеуіш болатын сатылар бұл:

- 1) химиялық реакция;
- 2) диффузия;
- 3) химиялық реакция және диффузия.

Бірінші оқиғада диффузия жылдамдығы химиялық реакцияның жылдамдығына қарағанда өте жоғары, онда процесс кинетикалық аумағында өтеді деп айтады. Екінші оқиғада химиялық реакцияның жылдамдығы жоғары болып, процесс диффузионды аумақта өтеді. Үшінші оқиғада бөлек сатылардың жылдамдықтары салыстырмалы, онда процесс өтпелі (аралас) аумақта өтеді.

Процестің ең баяу сатысын анықтаған соң оның жылдамдығын көтеретін жолдарын іздестіреді. Егер, процесс кинетикалық аумақта жүретін болса, химиялық реакцияны жылдамдататын шарттарын келтіреді.

Газдардың диффузия жылдамдығы температураға байланысты және олардың қатынасы келесі теңдеумен есептелінеді:

$$D = a \cdot T^2$$

D – диффузия коэффициенті;
 a – тұрақты коэффициент.

Осы теңдеу бойынша, температураның әр 10°C жоғарлатуы диффузия жылдамдығын тек 3-5%-ға көтереді.

Фазалардың әрекеттесу беті. Фазалардың әрекеттесу беті процесс аппараттарының өзгертуімен жоғарлануы мүмкін.

Жалпы әрекеттесу үсті келесі формула арқылы анықталады:

$$F = 0,3/\rho \cdot R$$

F – 1 кг сұйықтыққа келетін бет;
 ρ – сұйықтықтың тығыздығы, г/см^3 ;
 R – тамшылардың радиусы, см.

Фазалардың қатынасу үсті г-қ жүйелер үшін қатты фазаның майдалануымен жоғарланады. Газды затты ұсақталған бастапқы затпен қатынасқа бірнеше әдістермен әкеледі, мысалы, заттың қатты бөлшектерін реактордың сөрелерінде орналастырады, ал газ ағыны сөрелердің үстімен өтеді. Басқа жағдайларда ұсақталған қатты газ ағынында тозаңдатып шашыратады.

Процестің қозғаушы күші. Процестің қозғаушы күші теңдеумен есептелінеді:

$$\Delta C = C_{ж.ф.} - C_{р.а.}$$

$C_{ж.ф.}$ - жеткізу фазадағы бастапқы заттың шоғырлануы;
 $C_{р.а.}$ – реакция аумандағы сол фазадағы бастапқы заттың шоғырлануы.

Теңдеуде ΔC жоғарлату екі жолы бар екендігі байқалады $C_{ж.ф.}$ көтеруімен және $C_{р.а.}$ азайтуымен.

Процестің қозғаушы күші $C_{ж.ф.}$ бастапқы заттардың шрғырлануын немесе қысымның жоғарлатуымен және әрекет аумағынан реакция өнімдерін шығарылуымен көтеріледі.

Каталитикалық процестер. Катализ – бұл катализатордың қатысуымен өтетін химиялық реакциялардың жылдамдығының өзгеруі. Катализаторлар дегеніміз химиялық реакцияның жылдамдығын арттыратын, өздері реакцияға қатысып, процесті тиімді жолмен жүргізіп соңында бастапқы қалпын сақтап қалатын агенттер.

Катализаторлардың қолдауымен көптеген химиялық реакциялардың жүзеге асуы жеңілдетілген.

Каталитикалық процестеріне жоғарытоннажды өндірістер сутегі, аммиак, күкірт, азот қышқылдары және көптеген басқа да химиялық өнімдерінің алынуы жатады.

Қатты катализаторлар ретінде металдар және олардың оксидтері болып табылады. Мысалы, Fe аммиак синтезінде, аммиактың тотығуында, V_2O_5 SO_2 – нің тотығуында, Al_2O_3 мұнай өнімдерінің крекингінде және т.б. пайдаланады.

Сұйық катализаторлар – қышқылдар және негіздер, мысалы, хош иісті көмірсутектердің алкилдеу реакцияларында қолданылатын H_2SO_4 және H_3PO_4 .

Газды катализатор үлгі ретінде кейбір көмірсутектердің полимеризациясында қолданылатын BF_3 келтіруге болады.