

Выход продукта на пропущенное сырье

(памятка аспирантам, студентам и инженерам)

Если с понятием «конверсия сырья» все очевидно, то к определению выхода продукта на пропущенное сырье надо отнестись внимательнее. Прежде всего, нужно помнить, что сумма выходов ключевых продуктов итоговых балансовых стехиометрических уравнений на пропущенное сырье численно равно конверсии. Отсюда следует понимание, что речь идет не количестве образующихся продуктов, а о количествах превращаемого в них сырья. Поэтому в расчетах ВП надо определять количество в долях или процентах сырья, превращаемого в данный продукт.

Несколько обособленно выглядит определение – выход на разложенное сырье. Здесь имеется в виду отношение количества образующегося продукта к количеству разложенного сырья. Это понятие не следует путать с селективностью, для которой характерно свойство

$$\sum Si = 100\%$$

По сути селективность – это отношение выхода на разложенное сырье, отнесенное к теоретическому выходу по массе. Например, если выход дивинила на разложенный этанол равен 50%, то селективность процесса по дивинилу, представляющая собой отношение выхода на разложенный этанол к теоретическому выходу на разложенный этанол, равна

$$50/0,587 = 85\%.$$

Таким образом, главное, что нужно помнить при расчете ВП, это то, что речь идет **о количестве превращенного в данный продукт сырья**. Отсюда следует, что наблюдаемые молярные проценты по хроматографии по веществу надо пересчитывать с учетом соотношения молекулярных масс и стехиометрии к количеству превращаемого сырья (в молях или в граммах). Из этого следует **безразмерность** конверсии и ВП.

Когда расчет ведется по углероду, то следует принимать во внимание, что теоретический выход углерода в продукте всегда равен 100%, в отличие от теоретического выхода продукта, рассчитанного по веществу с учетом всех элементов в нем (С, Н, О и т.д.).

Если мы имеем дело с окислением вещества кислородом или взаимодействием с нитратом (нитрование), то естественно получать теоретически большее количество вещества по отношению ко взятому только окисляемому или нитратируемому сырью. Поэтому все изложенные выше определения приобретают строгий смысл. Иначе необходимо за «сырье» принять не только окисляемое вещество, но все количество веществ в левой части химического уравнения. Но это не принято в практике. Отсюда и возникают разного рода казусы при вычислении «селективностей».

Р.М. Талышинский