

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт природных ресурсов

Направление подготовки 18.03.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии, профиль подготовки «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика»

Кафедра Химической технологии топлива и химической кибернетики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Моделирование кинетики синтеза Фишера-Тропша

УДК 665.652.72-047.58

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К31	Ефремова Елена Викторовна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры ХТТ и ХК	Ушева Наталья Викторовна	Кандидат химических наук		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры МЕН	Рыжакина Т.Г.	к.э.н		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент кафедры ЭБЖ	Немцова О.А.			

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заведующий кафедрой ХТТ и ХК	Юрьев Егор Михайлович	Кандидат технических наук		

Томск – 2017 г.

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт природных ресурсов

Направление подготовки (специальность) 18.03.02 – «Энерго и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии»

Кафедра Химической технологии топлива и химической кибернетики

УТВЕРЖДАЮ:

Зав. кафедрой

Юрьев Е.М.

(Подпись)

(Дата)

(Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

<i>бакалаврской работы</i>
(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
2К31	Ефремова Елена Викторовна

Тема работы:

Моделирование кинетики синтеза Фишера-Тропша	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	от 31.01.2017г. № 420/с
Срок сдачи студентом выполненной работы:	01 июня 2017 г.

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе (наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).	Процесс синтеза органических соединений из оксида углерода и водорода; механизм и кинетика синтеза на железных катализаторах. Методика проведения кинетических исследований на экспериментальной каталитической установке.
---	--

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i>	1. Теоретические основы синтезов из оксида углерода и водорода 2. Методы идентификации кинетических параметров 3. Обработка экспериментальных данных по кинетике синтеза Фишера-Тропша 4. Оценка кинетических параметров, проведение расчетов 5. Обсуждение результатов 6. Заключение (выводы)
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	Кинетическая модель-1 лист; Результаты исследований-3 листа.
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант
<i>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</i>	Рыжакина Татьяна Гавриловна
<i>Социальная ответственность</i>	Немцова Ольга Александровна

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	10. 02. 2017г.
--	-----------------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф. ХТТ и ХК	Ушева Наталья Викторовна	к.х.н., доцент		10.02.2017г.

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К21	Ефремова Елена Викторовна		10.02.2017г.

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2К31	Ефремовой Елене Викторовне

Институт	ИПР	Кафедра	ХТТ и ХК
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Объект исследования – процесс синтеза Фишера-Тропша; Рабочая зона-аудитория, которая оборудована системами отопления, кондиционирования воздуха и естественным и искусственным освещением. Рабочее место – стационарное, оборудованное компьютером. Область применения–нефтехимическая промышленность.
--	--

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Производственная безопасность 1.1. Анализ выявленных вредных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности: – физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты; – (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства). 1.2. Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности: – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства защиты); – электробезопасность (в т.ч.	В производственной среде и при применении вычислительной техники вероятно воздействие следующих вредных факторов: - повышенная яркость света; - шум; - повышенный уровень электромагнитных излучений; - ухудшение микроклимата, - вредные вещества. Вредные вещества. На каталитической установке присутствуют вредные вещества такие, как: - сероводород, - аммиак, - окись углерода, - бензол, - толуол и т.д. Средства защиты: хлопчатобумажные костюмы, защитные очки, ботинки кожаные, перчатки фильтрующие противогазы, каска. К опасным факторам относятся: - Электрический ток; - Пожароопасность. СанПиН 2.2.4.548-96 «Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений». СНиП 23-05-95 «Естественное и искусственное
---	---

статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения).	освещение). СН 2.2.4/2.1.8.562-96 «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки» ГН 2.2.5.1313-03 «Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны». -
2. Экологическая безопасность: – защита селитебной зоны – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы); – разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.	Основными загрязнителями атмосферы на производстве являются: - Сероводород; - Аммиак; - Оксид углерода(II); - Бензол; Повышения экологической безопасности можно достигнуть путем снижения выбросов во время эксплуатации за счет использования улучшенных фильтрационных и очистительных сооружений.
3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях: – перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.	Возникновение ЧС, требующих обеспечения электро- и пожаровзрывобезопасности на рабочем месте. Перечень возможных ЧС : - пожар; - взрыв; - разлив продуктов/компонентов производства; Для обеспечения безопасной эксплуатации установки предусмотрена рациональная технологическая схема с комплексной автоматизацией технологического процесса, позволяющая обеспечить его непрерывность и стабильную работу оборудования. Предусмотрено отключение электрооборудования со щита операторной. ГОСТ Р 22.3.03-94 «Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Защита населения. Основные положения».
4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	К нормативным актам, регулирующим вопросы охраны труда, в первую очередь относится Трудовой кодекс Российской Федерации. Для обеспечения безопасности на рабочем месте необходимо руководствоваться санитарными нормами и правилами. Для снижения вредного воздействия химических факторов работникам производства выдается молоко питьевое в количестве 0,5 литра за смену для выведения из организма токсических веществ.

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

10. 02. 2017г.

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент кафедры ЭБЖ	Немцова Ольга Александровна			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К31	Ефремова Елена Викторовна		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
2К31	Ефремовой Елене Викторовне

Институт	Природных ресурсов	Кафедра	ХТТ и ХК
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Использование информации, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах и изданиях, нормативно-правовых документах.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта.
2. Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение заинтересованных сторон и их ожиданий.
3. Планирование процесса управления НИ: структура и график проведения, бюджет, риски.	Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НИ
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности.	Проведение оценки экономической эффективности исследования.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. График проведения и бюджет НИ
4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ
5. Сравнительная эффективность разработки

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	10. 02. 2017г
---	---------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Рыжакина Татьяна Гавриловна	К.Э.Н		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К31	Ефремова Елена Викторовна		

Планируемые результаты обучения по образовательной программе 18.03.02

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Б3.Б.2.1-2 Государственная итоговая аттестация	
Обозначение	Содержание	МДЭ	ВКР
<i>Профессиональные компетенции</i>			
P1	Применять базовые математические, естественнонаучные, социально-экономические и специальные знания в профессиональной деятельности	+	+
P2	Применять знания в области энерго-и ресурсосберегающих процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии для решения производственных задач	+	+
P3	Ставить и решать задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии.	+	+
P4	Проектировать и использовать энерго-и ресурсосберегающее оборудование химической технологии, нефтехимии и биотехнологии	+	+
P5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области энерго-и ресурсосберегающих процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии	+	+
P6	Осваивать и эксплуатировать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.	+	+
<i>Общекультурные компетенции</i>			
P7	Демонстрировать знания социальных, этических и культурных аспектов профессиональной деятельности.		+
P8	Самостоятельно учиться непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.		+
P9	Владеть иностранным языком на уровне, позволяющем разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.		+
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.		+

Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 81 страницу, 22 рисунка, 22 таблицы, 29 источников и 3 приложения.

Ключевые слова: синтез Фишера–Тропша (СФТ), катализатор, математическое моделирование, кинетика.

Объектом исследования является кинетическая модель процесса синтеза Фишера-Тропша, протекающего на ультрадисперсном железном катализаторе.

Цель работы – моделирование кинетики синтеза Фишера-Тропша с учетом температурной зависимости образования продуктов синтеза.

В процессе работы проводились эксперименты на ультрадисперсном железосодержащем катализаторе синтеза Фишера-Тропша с соотношением исходного синтез-газа CO: H₂=1:2.

В результате экспериментальных исследований получены данные о составе газообразных и жидких продуктов синтеза. Отличительной особенностью протекания синтеза на данном катализаторе является высокий выход изо-алканов, циклоалканов и аренов. С учётом внутригруппового распределения углеводородов по числу атомов углерода в молекуле определены кинетические параметры и проведены исследования по влиянию температуры на выход продуктов синтеза.

В экономической части рассчитали трудоемкость выполненных работ, временные показатели проведения работ, материальные затраты.

Выпускная квалификационная работа выполнена в текстовом редакторе MicrosoftWord.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	12
1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР	13
1.1 Общие сведения о процессе	13
1.2 Основные стадии механизма процесса	14
1.2.1 Адсорбция реагентов на поверхности катализатора	15
1.2.2 Образование активных частиц.	16
1.2.3 Стадия роста цепи	17
1.2.4 Обрыв цепи	20
1.2.5 Десорбция продуктов	21
1.2.6 Вторичные, побочные реакции	21
1.3 Кинетика процесса	25
2 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ	28
3 РАСЧЕТЫ И АНАЛИТИКА	30
3.1 Анализ экспериментальных данных	31
3.2. Оценка кинетических параметров	33
3.3 Исследование кинетики синтеза Фишера-Тропша	35
1.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	39
1.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	39
1.1.2 Анализ конкурентных технических решений	40
1.1.3 SWOT-анализ	41
1.3 Планирование научно-исследовательской работы	43
1.3.1 Структура работ в рамках научного исследования	43
1.3.2 Определение трудоемкости выполнения работ	45
1.3.3 Разработка проведения научного исследования	45
1.4 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	49
1.4.1 Расчет материальных затрат НТИ	49
1.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ .	50
1.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы	50

1.4.4	Дополнительная заработная плата исполнителей темы	52
1.4.5	Расчет затрат на научные и производственные командировки	53
1.4.6	Накладные расходы	53
1.4.7	Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта	55
1.5	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования..	56
5	СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ	59
5.1	Анализ вредных факторов.....	61
5.1.1.	Повышенный уровень электромагнитного излучения.....	61
5.1.2.	Повышенный уровень шума	63
5.1.3.	Недостаточная освещенность рабочего места.....	63
5.1.4.	Микроклимат на рабочем месте	64
5.1.5.	Вредные вещества.....	64
5.2.	Анализ опасных факторов.....	68
5.2.1.	Электробезопасность.....	68
5.3	Охрана окружающей среды	71
5.4	Безопасность в чрезвычайных ситуациях	72
5.5	Правовые вопросы обеспечения безопасности.....	73
	ЗАКЛЮЧЕНИЕ	75
	СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ	77
	СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ	78
	ПРИЛОЖЕНИЕ А Состав продуктов синтеза Фишера-Тропша	82
	ПРИЛОЖЕНИЕ Б Расчетные значения предэкспоненциальных множителей	84
	ПРИЛОЖЕНИЕ В Программа расчета выхода продуктов синтеза Фишера-Тропша на ультрадисперсном железосодержащем катализаторе в среде Pascal	85

ВВЕДЕНИЕ

Технология синтеза Фишера-Тропша (СФТ), позволяющая получать синтетические жидкие углеводороды из углеводородных газов и другого углеродсодержащего сырья, продолжает оставаться актуальной даже при низких ценах на нефть. Это происходит потому, что на основе данной технологии возможно создание одного из немногих эффективных методов утилизации попутного нефтяного газа и, таким образом, вовлечение в производственный процесс потенциального сырья, которое в настоящее время используется не в полной мере.

Несмотря на дороговизну топлив (бензин, керосин, дизельное топливо), получаемых методом СФТ, большим их преимуществом являются чистота, отсутствие серы, тяжелых металлов, азотистых соединений. Поэтому в настоящее время СФТ продолжает оставаться одним из наиболее перспективных процессов GTL (Gas-to-liquids), получения жидких моторных топлив из природного газа. Возрастающий интерес к проблеме СФТ проявляется в расширении исследований по изучению механизма процесса с целью поиска новых катализаторов, усовершенствованию технологии.

СФТ относится к числу гетерогенно-каталитических реакций полимеризации и протекает с участием катализаторов, представляющих собой металлосодержащие каталитические системы, нанесенные на носитель. Получение углеводородов различного состава по методу Фишера-Тропша во многом зависит от эффективности и состава применяемого катализатора.

Варианты синтеза Фишера-Тропша в присутствии Co и Fe катализаторов имеют свои достоинства и недостатки. Железосодержащие контакты обладают рядом преимуществ (доступностью и низкой стоимостью, способностью работать при высоком отношении $\text{CO}:\text{H}_2 = 1:2$ большой технологической гибкостью, то есть возможностью синтеза соединений различных групп), что дает возможность использовать разное сырье для производства широкого ассортимента продукции.

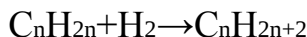
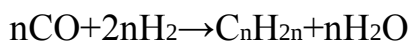
1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1 Общие сведения о процессе

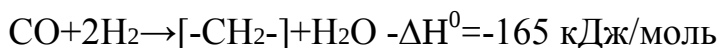
Синтез Фишера - Тропша представляет собой гетерогенную каталитическую реакцию, которая позволяет получать 2 % мирового топлива. Постоянное развитие процесса подтверждает его жизнеспособность и перспективы, которые определяются огромным источником сырья — запасы угля в энергетическом эквиваленте на порядок выше, чем у сырой нефти [1]. В основе реакции лежит образование углеводородов из монооксида углерода и водорода (синтез - газа), что представляет собой сложный каталитический процесс с большим количеством последовательных и параллельных преобразований. Процесс протекает при повышенном или нормальном давлении в присутствии катализаторов на основе переходных металлов (в основном, Fe, Co, Ru). Конечными продуктами являются алканы, алкены и кислородсодержащие соединения, которые зачастую определяются природой катализатора. Например, парафины и олефины формируются на железных катализаторах при давлении 25 - 30 атм. и температуре 230 - 340 ° С. Полиметиленовые углеводороды с молекулярным весом до 100000 синтезируются на рутениевых катализаторах, которые имеют более высокую активность при высоких давлениях (до 100 МПа) и температуре 120 - 130 ° С. Во всем диапазоне температур, в котором синтезируются парафины из CO и H₂ могут протекать вторичные процессы, такие как образование низших алкенов и спиртов, гидрирование алкенов, дегидрирование спиртов и частичный гидрокрекинг первичных алканов. Выгодно образование углеводородов любой молекулярной массы, типа и структуры, кроме ацетилена. Вероятность формирования нормальных алканов уменьшается, а нормальных алкенов возрастает с увеличением длины цепи. Увеличение общего давления в системе способствует формированию продуктов с более высокой молекулярной массой, а увеличение парциального давления водорода в синтез - газе облегчает образование алканов [2].

Основные реакции, протекающие в синтезе ФТ, можно описать следующим образом [3,4]:

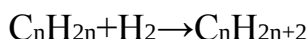
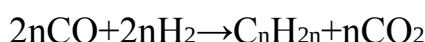
для железных катализаторов:



Суммарную реакцию на железном катализаторе можно представить в виде следующего уравнения:



для кобальтовых катализатора:

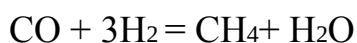


Суммарная реакцию на кобальтовом катализаторе:



Побочными реакциями синтеза являются:

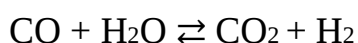
а) гидрирование оксида углерода до метана



б) диспропорционирование СО (реакция Белла-Будуара)



в) равновесие водяного газа



1.2 Основные стадии механизма процесса

Основные стадии химических превращений смеси $\text{CO} + \text{H}_2$ на катализаторе осуществляются по механизму, который сочетает в себе каталитические и полимеризационные стадии. Можно выделить следующие основные стадии[5]:

- адсорбция реагентов на поверхности катализатора,
- образование активных частиц,
- рост углеводородной цепи,
- обрыв цепи,

- десорбция продуктов с поверхности катализатора,
- вторичная адсорбция продуктов на поверхности катализатора,
- вторичные, побочные реакции.

1.2.1 Адсорбция реагентов на поверхности катализатора

Первым шагом в синтезе углеводородов является адсорбция реагентов на поверхности катализатора. Водород может адсорбироваться на металлах VIII группы как в молекулярных, так и в атомных формах. Хемосорбция водорода на металлах Fe, Ni, Co, используемых для синтеза углеводородов, не имеет больших различий. Поскольку катализаторы оказывают различное влияние на реакции, можно предположить, что хемосорбция водорода не играет существенной роли в процессе. Активность катализатора и его селективность определяются характером адсорбции CO, которая на порядок выше, чем адсорбция водорода, адсорбция CO возможна как на металлических, так и на оксидных компонентах катализатора.

На начальном этапе адсорбция CO ассоциативна по своему характеру. Адсорбирование оксида углерода на металле может осуществляться в линейной форме или форме перемычки с участием одного, двух или более поверхностных атомов металла.

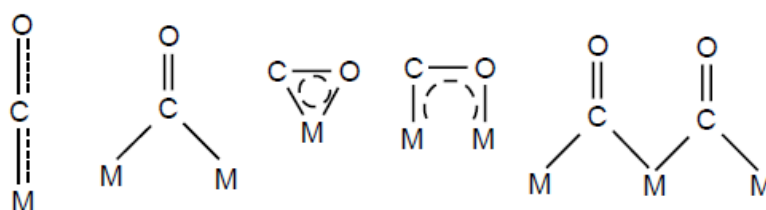


Рисунок 1 – Формы адсорбированного оксида углерода

Общее количество адсорбированного CO зависит от размера частиц металла (который определяется характером носителя и условиями восстановления) и температуры, при которой происходит адсорбция. Было установлено, что диссоциация CO происходит на энергетических богатых участках поверхности катализатора. После их заполнения молекулярная адсорбция CO становится наблюдаемой.

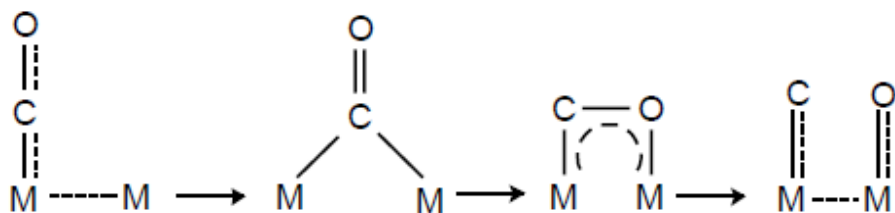


Рисунок 2 – Диссоциация СО на поверхности катализатора

Диссоциация облегчается за счет повышения температуры. Доля молекул адсорбированной окиси углерода зачастую составляет менее 30 % от общего объема адсорбированного газа.

1.2.2 Образование активных частиц

В процессе Фишера - Тропша, реакция оксида углерода с водородом происходит на поверхности катализатора, в котором СО находится в адсорбированном состоянии. В зависимости от катализатора и условия проведения процесса, водород может вступать в реакцию в газовой фазе и, адсорбироваться на поверхности катализатора.

При взаимодействии СО и Н₂ на катализаторе образуются фрагменты, содержащие и не содержащие кислород.

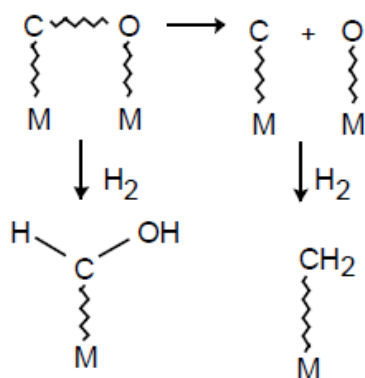


Рисунок 3 – Взаимодействие СО и Н₂

В условиях СФТ на поверхности катализатора находится ряд активных веществ (С, СО, СО₂, Н₂О, О, Н, Н₂ и т.д.), которые одновременно сосуществуют и взаимодействуют друг с другом с образованием продуктов реакции. Поскольку стехиометрию поверхности частиц, участвующих в последующем процессе полимеризации, трудно экспериментально определить, используют СН_х или СН_хО обозначения для насыщенных или

ненасыщенных кислородом молекул. Таким образом, механизм взаимодействий в процессе синтеза Фишера - Тропша является очень сложным и требует дальнейшего изучения для того, чтобы повысить эффективность его промышленного использования.

1.2.3 Стадия роста цепи

В общем виде стадия роста цепи может быть представлена следующим образом[5]:



Выявлено три основных механизма роста цепи процесса синтеза Фишера-Тропша[5]:

1. Диссоциативный механизм. Согласно этому механизму лимитирующей стадией является диссоциативная адсорбция СО. Частичному гидрированию с генерацией карбеновых частиц подвергается углерод, который образуется при адсорбции. Далее карбеновые частицы быстро полимеризуются. Схема процесса имеет вид:

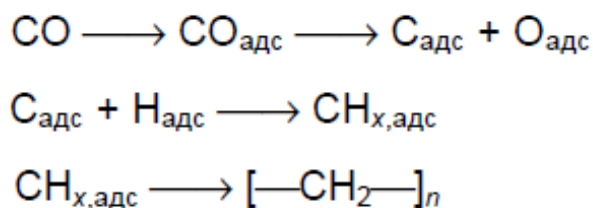


Рисунок 4 – Схема диссоциативного механизма

2. Полимеризационно-конденсационный механизм. Рост цепи происходит за счет поликонденсации интермедиатов:

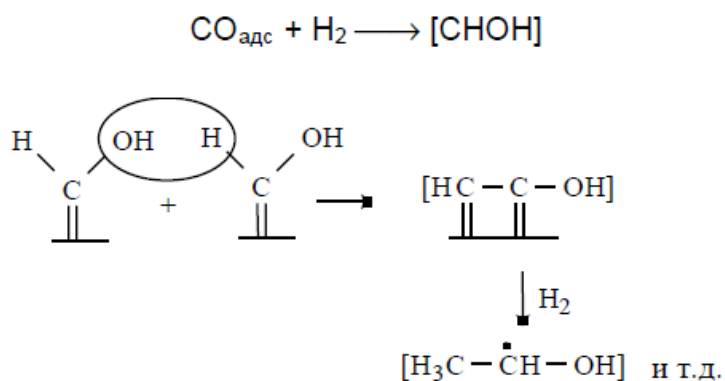


Рисунок 5 – Схема полимеризационно-конденсационный механизма

3. Рост цепи за счет внедрения CO. По этому механизму по связи М-С внедряется адсорбированная молекула CO. Внедрение происходит между поверхностным атомом металла и первым углеродным атомом адсорбированной им углеводородной цепи:

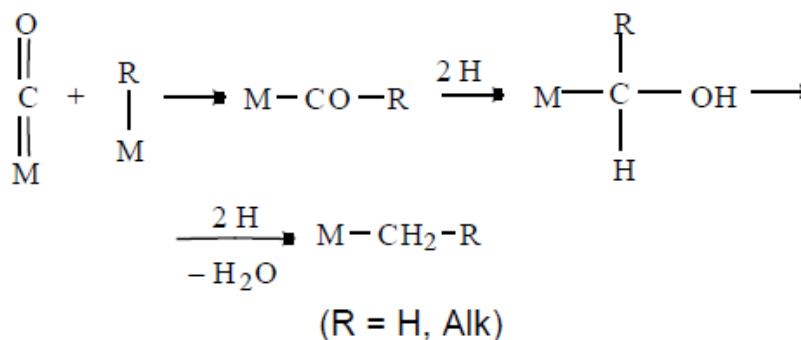
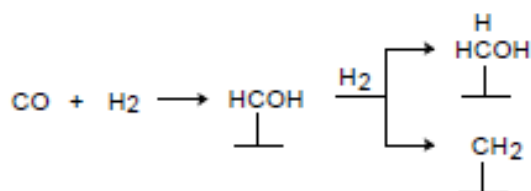


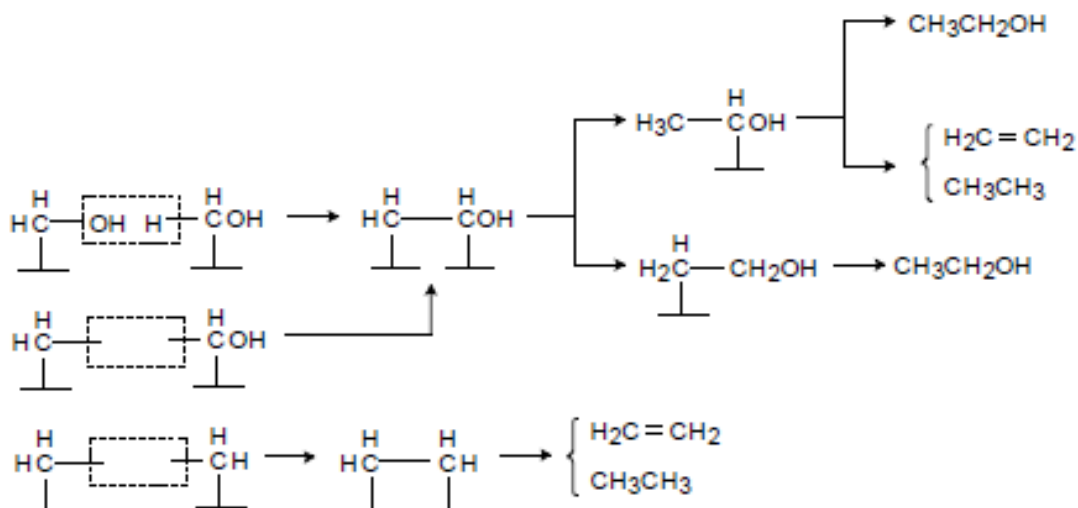
Рисунок 6 - Схема механизма роста цепи за счет внедрения CO

По указанным механизмам продуктами реакций являются алканы, подчиняющиеся законам полимеризации. Однако в образующиеся в ходе синтеза продукты содержат в себе еще олефины, изоалканы, а также кислородсодержащие соединения. В связи с этим были предложены более сложные механизмы, которые представляют комбинацию трех основных моделей. Одним из известных является механизм предложенный А.Н.Башкировым, который применим к катализу на железном катализаторе. Согласно этому механизму, первичным комплексом является HCOH-фрагмент, который гидрируется с образованием фрагментов CH₂OH и CH₂. Далее образованные первичные продукты взаимодействуют между собой, давая вторичный кислородсодержащий комплекс, который в свою очередь присоединяется к первичным кислородсодержащим фрагментам, обеспечивая конденсационный рост цепи. Схему превращения можно записать следующим образом [5]:

Образование C_1 продуктов



Образование C_2 продуктов



Образование углеводородов C_3 и выше

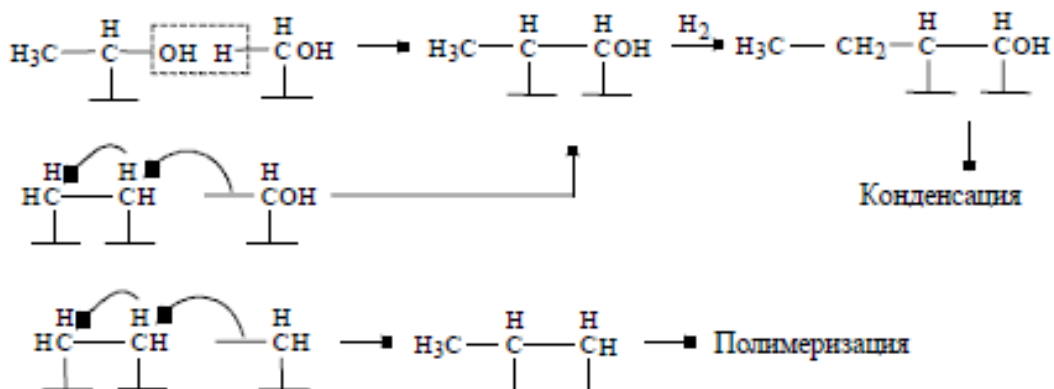


Рисунок 7 – Схема механизма процесса Фишера-Тропша по Башкирову

Драем [5] был предложен механизм для синтеза Фишера-Тропша на железном катализаторе. Суть механизма заключается в образовании преимущественно радикалов, которые не содержат кислород. Рост цепи осуществляется путем полимеризации или включения CO.

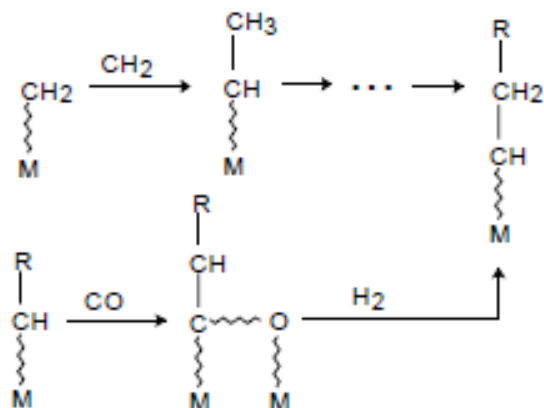


Рисунок 8 – Рост углеводородной цепи по Драю

1.2.4 Обрыв цепи

Посредством β -элиминирования водорода или при взаимодействии с молекулярным водородом или CO_2 , происходит обрыв цепи, которая не содержит кислород

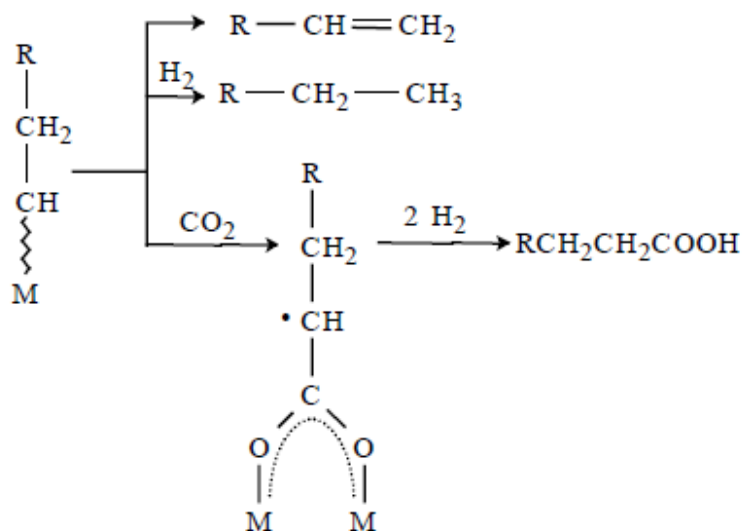


Рисунок 9 – Схема стадии обрыва цепи, не содержащий кислород

Цепь, которая содержит атом кислорода, обрывается при взаимодействии с водородом или водой с образованием кислородсодержащих продуктов:

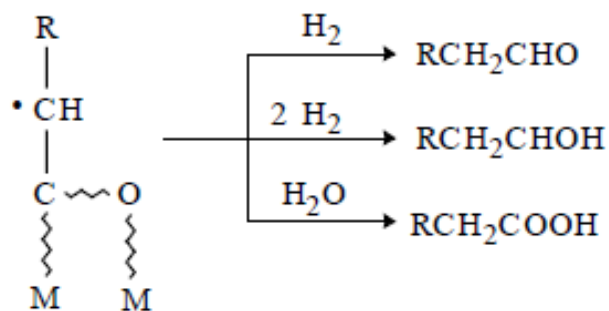


Рисунок 10 – Схема стадии обрыва цепи, содержащий кислород

1.2.5 Десорбция продуктов

Процесс синтеза Фишера-Тропша на металлических катализаторах протекает в системе, которая состоит из газовой фазы, состоящей из реагентов (CO и H_2), углеводородов $\text{C}_2\text{-C}_4$ и CO_2 , и жидкой фазы, которая представлена смесью жидких углеводородов $\text{C}_5\text{-C}_{18}$ и растворенных в них твердых продуктов, катализатор- твердая фаза.

Десорбция в реальной каталитической системе затруднена из-за диффузии через слой ранее образовавшихся жидких продуктов. Из-за того что продукты накапливаются в зернах катализатора, увеличивается время контакта и в большей степени начинают протекать вторичные превращения.

1.2.6 Вторичные, побочные реакции

Механизм образования таких продуктов как изопарафины, ароматические соединения, а так же механизм вторичных превращений олефинов отличаются от превращений рассмотренных выше компонентов, поэтому стоит рассмотреть данные механизмы более подробно.

1.2.6.1 Образование изопарафинов

Изопарафины образуются на стадии роста цепи, в результате взаимодействия растущей цепи и поверхностных фрагментов с образованием α -метилзамещенных алканов, а так же в результате вторичных превращений олефинов, полученных при изомеризации CO и H_2 на кислотных центрах катализатора.

Драем была предложена схема, которая объясняет преимущественное образование монометильных изомеров. Согласно данной схеме, в ходе роста цепи образуются маталлоциклопропановыеинтермедиаты[5]:

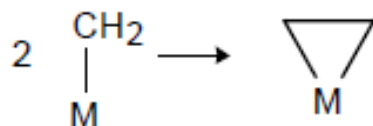


Рисунок 11 – Образование маталлоциклопропановогоинтермедиата

Далее происходит встраивание метиленовых групп по связям маталлоциклопропанового фрагмента, после чего образуется нестабильный четырехчленный поверхностный комплекс и последующая перегруппировка в трехчленный цикл:

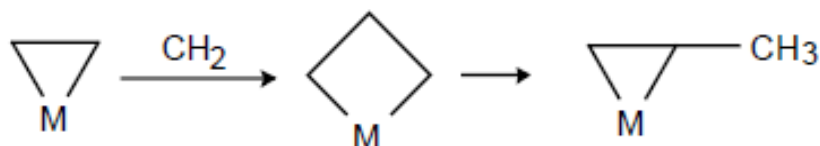
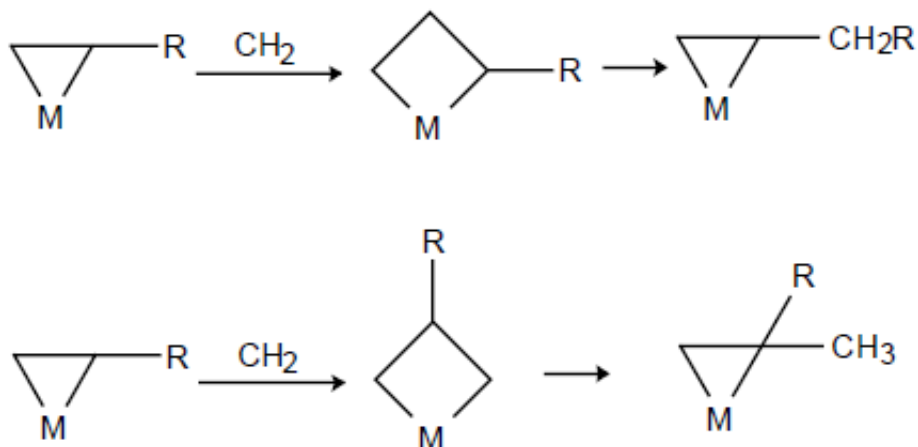


Рисунок 12 – Схема образования трехчленного цикла

Возможны следующие варианты протекания реакции:



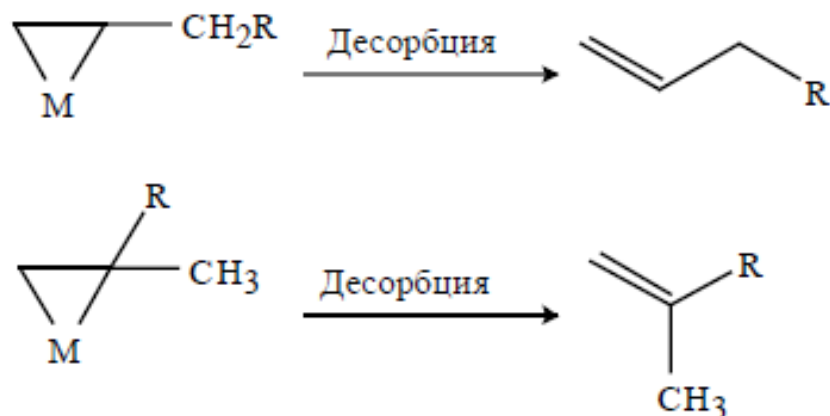


Рисунок 13 – Схема превращения трехчленного цикла

1.2.6.2 Вторичные превращения олефинов

Для вторичного превращения олефин должен хемосорбироваться на некотором вакантном активном центре роста цепи. Наличие вакантных центров редкость, так как поверхность катализатора практически полностью покрыта различными фрагментами. Поэтому шанс на повторную адсорбцию имеют олефины, которые находятся в непосредственной близости к активному центру.

Олефины, которые получают при взаимодействии CO и H_2 , после вторичной адсорбции на кислотных центрах катализатора могут подвергаться цис-транс-изомеризации, сдвигу двойной связи, скелетной изомеризации, циклизации, переносу водорода, полимеризации.

Сдвиг двойной связи и образование олефинов на катализаторе может протекать по схеме приведенной на рисунке 14.

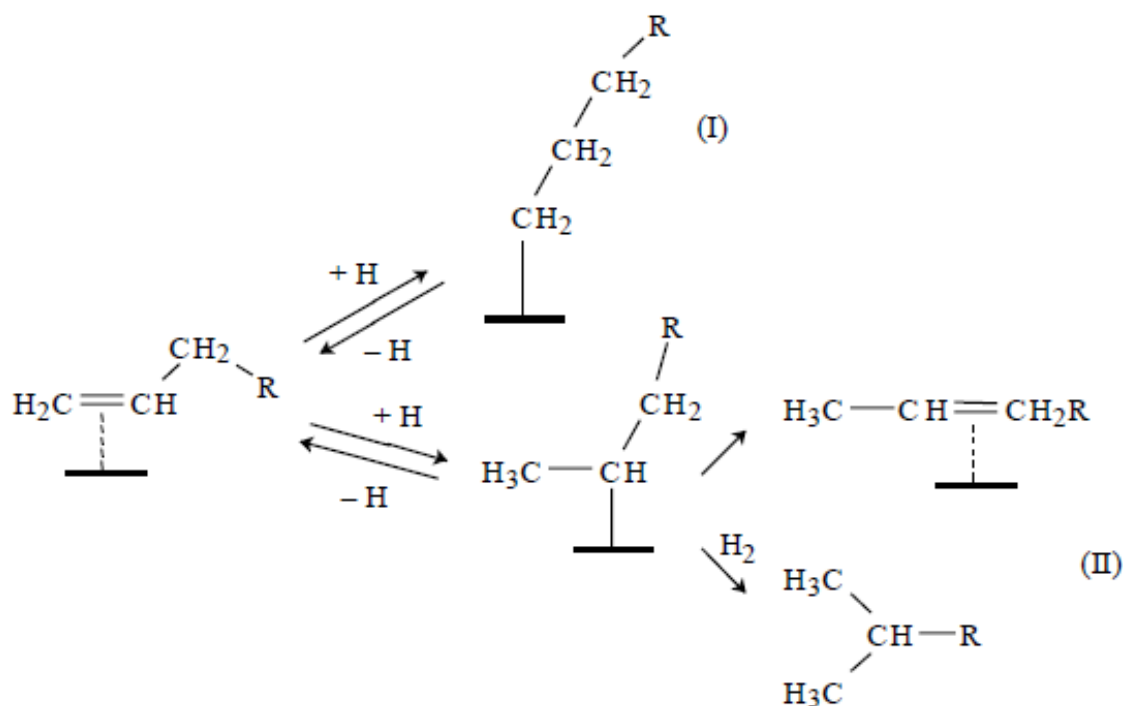


Рисунок 14 – Сдвиг двойной связи и образование олефинов

Согласно данной схеме механизма, изомеризация протекает на тех же центрах, где осуществляется и синтез углеводородов из CO и H_2 . На кислотных центрах катализатора могут протекать два типа превращений: 1) прямая скелетная изомеризация в изоалкены и их последующее гидрирование с переносом водорода; 2) разложение олигомеров, образованных на кислотных центрах.

1.2.6.3 Образование ароматических углеводородов

Появление в продуктах синтеза Фишера-Тропша ароматических соединений нетипичное явление. Такие соединения появляются, если процесс протекает на бифункциональных катализаторах при повышенных температурах. Образование ароматических углеводородов можно описать двумя стадиями:

- получение ненасыщенных промежуточных соединений (диенов, триенов), в результате гидрирования;
- циклизация ненасыщенных соединений.

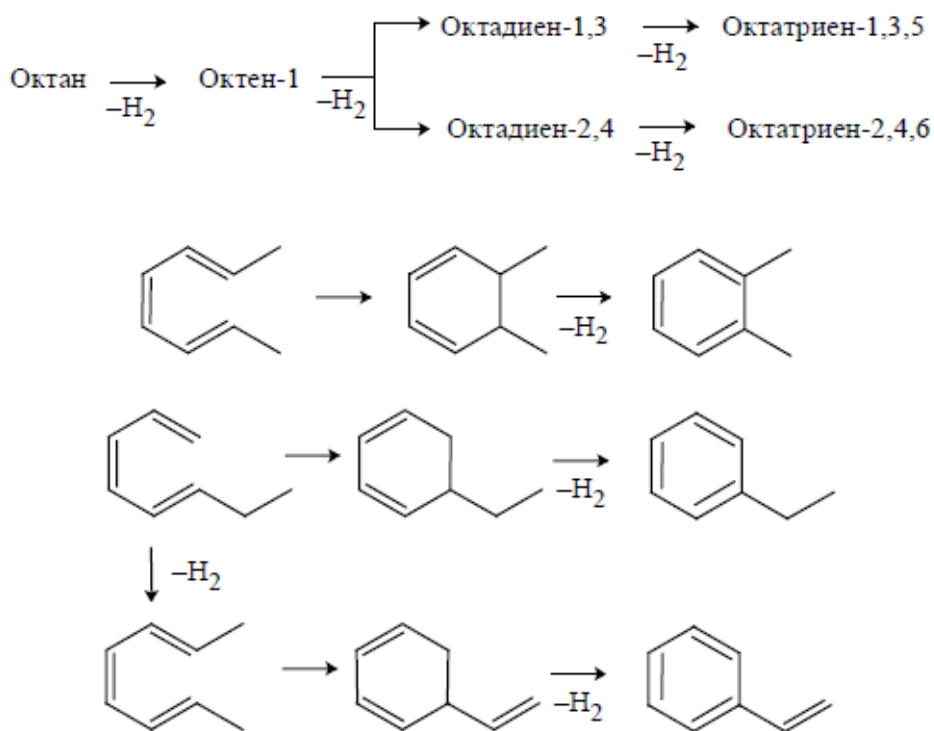


Рисунок 15 – Схема ароматизации октана и 1-октена

1.3 Кинетика процесса

Основной проблемой при описании кинетики процесса синтеза Фишера-Тропша является сложность механизма протекания реакций, а также наличие различных вариантов механизма. Механизм зависит от вида поверхности, от выбранных элементарных стадий реакций, в результате чего получаются различные степенные выражения для кинетики. Однако, уравнения Лэнгмюра–Хиншельвуда и Или–Ридила, описывающие образование углеводородов на поверхности катализатора, способны объяснить более широкий диапазон данных, чем выражения степенного закона.

В большинстве случаев скорость процесса определяется скоростью образования мономера. Расчетные выражения скорости будут различаться в основном от природы мономера и от адсорбции CO , H_2 и продуктов (H_2O и CO_2) на поверхности катализатора. Скорость, как правило, зависит как от парциального давления CO , так и от H_2 . Большинство выражений скорости содержат множитель P_{CO} в знаменателе. В случае степенных законов,

рекомендуются порядок реакции меньше нуля, указывая, что СО адсорбируется сильнее при высоком уровне покрытия и замедляет скорость реакции. Прогнозируемые порядки реакции для СО и Н₂ находятся в диапазоне -1,0-0,5 и 0,5-2 соответственно. Энергии активации охватывают диапазон 80-130 кДж / моль[6].

Типовые уравнения скорости, приведены в таблице 1 [6]. При использовании железного катализатора отношение Н₂ / СО, как правило, ниже, чем на кобальтовом катализаторе, так как такое соотношение способствует реакции конверсии водяного газа (СО+ Н₂О = Н₂ + СО₂), восполняющей недостаток водорода.

Таблица 1 – Типовые уравнения скорости для железного и кобальтового катализаторов

Кобальтовый катализатор	Железный катализатор
$-r_{CO} = kP_{CO}^{-0.2}P_{H_2}^{0.7} \quad (a)$	$-r_{CO} = kP_{H_2} \quad (e)$
$-r_{CO} = \frac{aP_{CO}P_{H_2}}{(1+bP_{CO})^2} \quad (b)$	$-r_{CO} = kP_{CO}^mP_{H_2}^n \quad (f)$
$-r_{CO} = \frac{aP_{CO}^mP_{H_2}^n}{1+bP_{CO}}, \text{ где } m = 0.5 - 0.6, n = 0.6 - 0.9 \quad (c)$	$-r_{CO} = \frac{aP_{CO}P_{H_2}}{1+bP_{CO}+cP_{H_2O}} \quad (g)$
$-r_{CO} = \frac{aP_{CO}^{0.5}P_{H_2}^{0.5}}{(1+bP_{CO}^{0.5})^2} \quad (d)$	$-r_{CO} = \frac{aP_{CO}P_{H_2}}{(1+bP_{CO}+cP_{H_2O})^2} \quad (h)$

Существует множество уравнений скорости синтеза [6,7] широкий диапазон энергий активации как для Со, так и для Fe катализаторов. Это вызывает вопросы о том, какие из этих данных, кинетические параметры и выражения скорости могут быть использованы при разработке кинетических моделей синтеза Фишера-Тропша. В таблице 2 [6] приведены значения энергий активации для различных уравнений скоростей реакций (табл.1).

Таблица 2 – Значения энергии активации для реакций на железном катализаторе.

Температура, °С	Уравнение скорости	Энергия активации, кДж/моль.
220-260	e	103
220-280	f	89
210-270	h	81
220-260	g	105

Почти все кинетические выражения, для катализаторов на основе кобальта, имеют различные формы, в отличие от выражений для катализаторов на основе железа. Как правило, эти кинетические уравнения имеют квадратичный знаменатель.

2 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Объектом исследования является синтез Фишера-Тропша, протекающий на ультрадисперсном железном катализаторе (УДП) и кинетическая модель данного процесса. Преимуществом железных катализаторов является их высокая активность в превращении синтез-газа и более низкая стоимость по сравнению с другими катализаторами (кобальт, никель). Образцы нового УДП железного катализатора были получены в Институте физики высоких технологий Томского политехнического университета, методом электрического взрыва проводников.

Экспериментальные исследования проводились на лабораторной каталитической установке для исследования процессов в условиях повышенных давлений, разработанной институтом катализа им. Г.К. Бореского. Упрощенная схема изображена на рисунке 16.

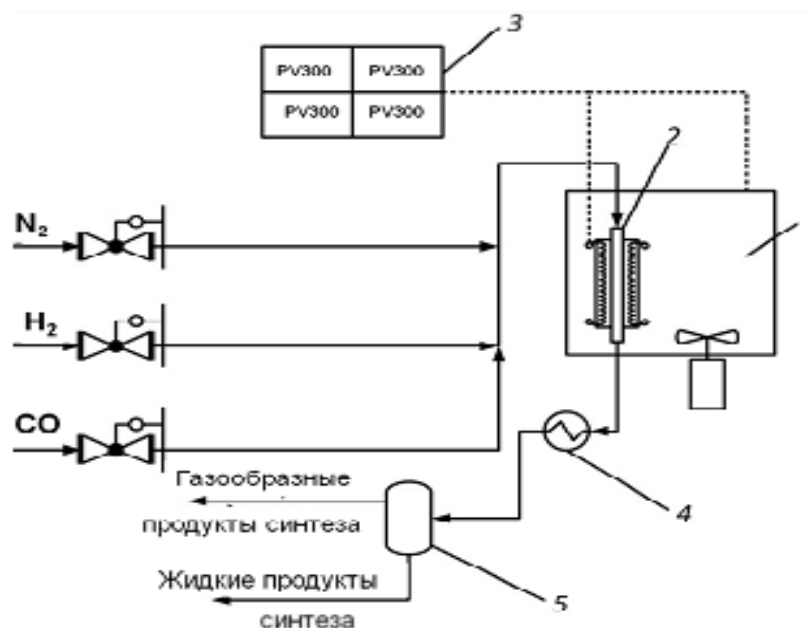


Рисунок 16 – Схема лабораторной каталитической установки:

1 – термошкаф; 2 – реактор; 3 – микропроцессорный регулятор температуры; 4 – продуктовый холодильник; 5 – продуктовый сепаратор

Исходная смесь газов, которая состоит из H_2 , CO , N_2 направляется в реактор 2 трубчатого типа. Реактор расположен в термошкафу, температура в котором, а так же температура его рубашки и слоя катализатора регулируется

и контролируется микропроцессорным регулятором 3. Далее газопродуктовая смесь поступает в холодильник 4, где происходит ее частичная конденсация. Окончательное разделение продуктов реакции осуществляется в сепараторе 5.

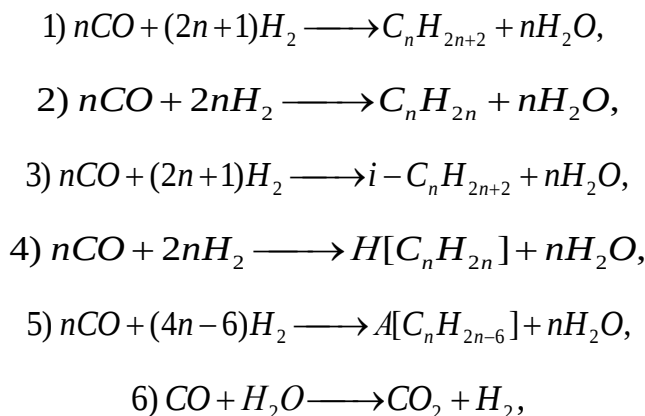
Для продувки системы, проведения теста на герметичность и разбавления реакционной смеси используют азот (аргон). Водород используется в системе как газовый реагент и подается аналогично азоту (аргону) из баллона. Перепад давления между входом в регулятор и выходом из него никогда не должен превышать 10 бар, т.е. набирать давление в систему необходимо постепенно.

Состав продуктов синтеза определялся хроматографическим методом. При этом использовались газовый хроматограф «Хроматэк - Кристалл 5000.1» и хромато-масс-спектрометр «Кристалл 5000» с масс-спектрометрическим детектором хроматэк.

При построении кинетической модели использовали метод математического моделирования, который широко распространен и имеет ряд преимуществ. Математическое моделирование позволяет выделить для исследования наиболее важные свойства объекта, сформулировать новые гипотезы и получить новые знания об объекте, которые при его исследовании были недоступны. При моделировании сложных объектов снижаются затраты, необходимые для их непосредственного исследования.

3 РАСЧЕТЫ И АНАЛИТИКА

На кафедре ХТТ и ХК проводятся исследования синтеза Фишера-Тропша на железных ультрадисперсных катализаторах. Для описания кинетики данного синтеза сформирована совокупность протекающих химических реакций:



где 1,2,3,4,5 – реакции образования соответственно алканов, алкенов, изо-алканов, циклоалканов и аренов, а 6 – реакция конверсии.

Кинетическая модель представлена следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{dC_{CO}}{d\tau} = -\sum_{n=1}^{15} nW_1(n) - \sum_{n=2}^{10} nW_2(n) - \sum_{n=1}^{10} nW_3(n) - \sum_{n=5}^{10} nW_4(n) - \sum_{n=6}^{10} nW_5 - W_6, \quad (1)$$

$$\frac{dC_{H_2}}{d\tau} = -\sum_{n=1}^{15} (2n+1)W_1(n) - \sum_{n=2}^{10} 2nW_2(n) - \sum_{n=1}^{10} (2n+1)W_3(n) - \sum_{n=5}^{10} 2nW_4(n) - \sum_{m=6}^{10} (4m-6)W_5 + W_6, \quad (2)$$

$$\frac{dC_{H_2O}}{d\tau} = \sum_{n=1}^{15} nW_1(n) + \sum_{n=2}^{10} nW_2(n) + \sum_{n=1}^{10} nW_3(n) + \sum_{n=5}^{10} nW_4(n) + \sum_{n=6}^{10} nW_5(n) - W_6, \quad (3)$$

$$\frac{dC_{AL}}{d\tau} = \sum_{n=1}^{15} W_1(n), \quad (4)$$

$$\frac{dC_A}{d\tau} = \sum_{n=2}^{10} W_2(n), \quad (5)$$

$$\frac{dC_{IAL}}{d\tau} = \sum_{n=1}^{10} W_3(n), \quad (6)$$

$$\frac{dC_N}{d\tau} = \sum_{n=5}^{10} W_4(n), \quad (7)$$

$$\frac{dC_{AR}}{d\tau} = \sum_{n=6}^{10} W_5(n), \quad (8)$$

$$\frac{dC_{CO_2}}{d\tau} = W_6, \quad (9)$$

где C_{AL} , C_A , C_{IAL} , C_N , C_{AR} – концентрации групповых компонентов; $W_1(n)$, $W_2(n)$, $W_3(n)$, $W_4(n)$, $W_5(n)$ – скорости образования алканов, алкенов, изо-алканов, циклоалканов и аренов соответственно; W_6 – скорость реакции конверсии; n – число атомов углерода в молекуле; τ – время контакта.

Для данной кинетической модели был оценен исходный набор кинетических параметров. Для получения температурной зависимости скоростей химических реакций были проведены экспериментальные исследования в интервале температур 250-270°C.

3.1 Анализ экспериментальных данных

Были проведены экспериментальные исследования процесса синтеза Фишера-Тропша на лабораторной каталитической установке (рис.16) кафедры ХТТ и ХК. Синтез проводился на ультрадисперсном железном катализаторе. Экспериментальные исследования проводились при следующих условиях: давление 1,1МПа, расход 300мл/мин, объем катализатора 8,3см³, соотношение СО:Н₂=1:2 и варьировании температуры в интервале от 250 до 270°C. Результаты экспериментальных исследований, составы продуктов синтеза представлены в приложении А. Результаты анализа газообразных и жидких продуктов синтеза представлены в таблице 3 и на рисунке 17.

Таблица 3– Состав газообразных продуктов СФТ в зависимости от изменения температуры

Температура, °C	Компонент										
	CH_4	CO_2	CO	H_2	C_2H_6	C_3H_8	$i - C_4H_{10}$	C_4H_{10}	$i - C_5H_{12}$	C_5H_{12}	C_6H_{14}
Содержание, % масс.											
250	10,37	4,63	72,02	10,38	0,39	1,07	0,03	0,55	0,27	0,29	0,02
260	11,74	7,89	66,48	10,11	0,36	1,61	0,05	0,67	0,37	0,49	0,03
270	15,06	14,05	57,22	9,46	0,30	2,22	0,09	0,75	0,38	0,42	0,04

При анализе индивидуального состава продуктов синтеза (прил.А) было определено, что в продуктах содержатся алканы с числом атомов углерода в молекуле до C_{15} , для остальных гомологических групп максимальное число атомов углерода в молекуле соответствует десяти, соединения с большим числом атомов углерода в молекуле могут присутствовать в незначительных количествах.

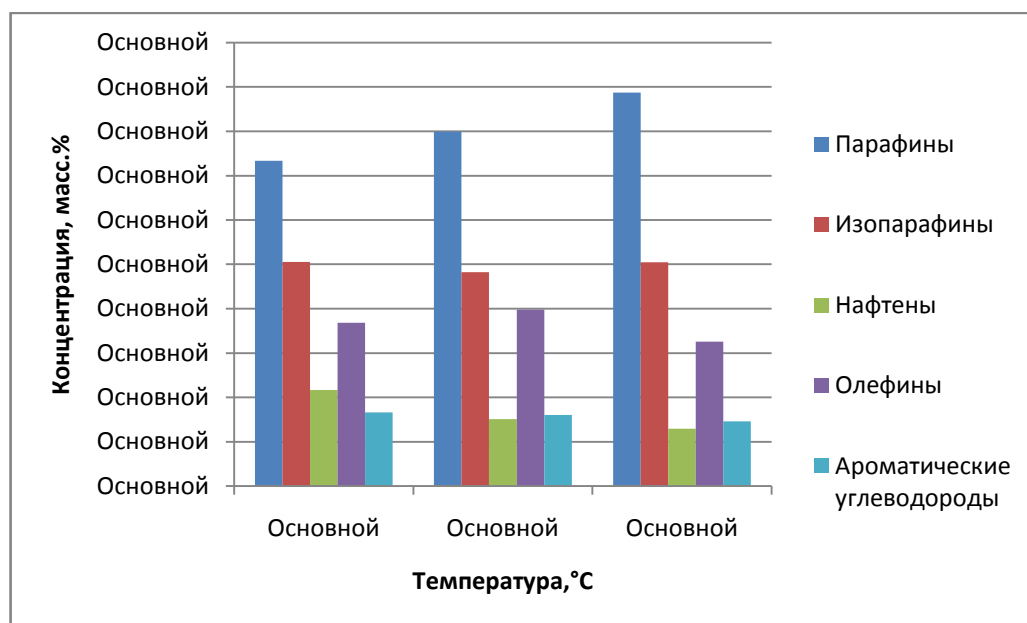


Рисунок 17 – Зависимость концентраций групповых компонентов от температуры

Из полученной зависимости (рис.17) можно сделать вывод о том, что с ростом температуры концентрация парафинов увеличивается, а

концентрации нафтенов уменьшается. Концентрации же ароматических углеводородов и изопарафинов практически не изменяются. Изменения содержания олефинов имеет экстремальный характер.

Степени превращения увеличивается с ростом температуры и в исследуемом интервале температур изменяется от 9,7% и до 25%.

3.2. Оценка кинетических параметров

СФТ является сложным многокомпонентным процессом, в котором образуется значительное количество индивидуальных веществ, и протекают различные типы химических превращений. Поэтому при построении кинетической модели возникают проблемы оценки очень большого количества кинетических параметров.

Ранее на кафедре ХТТ и ХК при разработке кинетической модели был определен набор кинетических констант и определены значения энергий активации для алканов и алкенов. Для исследуемого образца катализатора было установлено, что в продуктах синтеза присутствуют также углеводороды других гомологических групп: изо-алканы, циклоалканы и арены. Поэтому возникла необходимость оценки кинетических параметров для компонентов указанных гомологических групп.

Для того чтобы определить значения энергий активации, нами был применен термодинамический подход, рассчитаны тепловые эффекты реакций образования парафинов, олефинов, нафтенов и ароматических углеводородов в расчете на один моль превращенного оксида углерода. В качестве ключевых компонентов были выбраны соединения, которые содержали 6, 7 и 8 атомов углерода в молекуле для различных гомологических групп. Результаты расчетов приведены в таблице 4.

Таблица 4 – Энтальпии реакций синтеза Фишера-Тропша

Число атомов углерода	Группа углеводородов				
	Парафины	Олефины	Нафтенy	Ароматические углеводороды	Изопарафины
	Энтальпия, кДж/моль				
6	-164,46	-143,40	-157,57	-121,57	-165,93
7	-163,67	-145,32	-154,10	-128,39	-164,66
8	-162,83	-146,72	-152,78	-131,86	-163,71

Далее для установления соотношений между значениями энергий активации применялась широко известная корреляция Поляни-Семенова[10], которая связывает между собой энергию активации и тепловой эффект реакции:

$$E = \alpha + \beta \cdot \Delta H \quad (10)$$

где α и β – коэффициенты.

Значения энергий активации были рассчитаны с использованием полученных соотношений и значений энергии активации реакций образования алканов с числом атомов углерода в молекуле от 1 до 15. Рассчитанные энергии активации для всех групп углеводородов приведены в таблице 5.

С использованием полученных энергий активации и ранее определенных значений кинетических констант образования компонентов различных гомологических групп были рассчитаны начальные приближения значений предэкспоненциальных множителей. Результаты расчетов по кинетической модели сравнивали с экспериментальными данными и методом прямого поиска осуществляли корректировку кинетических констант, чтобы достичь удовлетворительного совпадения расчетных и экспериментальных данных.

Таблица 5 – Значения энергий активации

Число атомов углерода	Группа углеводородов				
	парафины	олефины	нафтены	Ароматические углеводороды	Изо-алканы
	Энергия активации, кДж/моль				
1	101,7	-	-	-	-
2	104,6	91,2	-	-	-
3	108,0	94,2	-	-	-
4	111,8	97,5	-	-	112,8
5	114,7	100,0	119,6	-	115,7
6	116,4	101,5	122,7	139,7	117,4
7	116,8	101,9	124,5	140,2	117,9
8	117,2	102,2	124,9	140,7	118,2
9	117,4	102,4	125,4	140,9	118,5
10	117,6	102,6	125,7	141,2	118,7
11	117,9	-	-	-	-
12	118,1	-	-	-	-
13	118,3	-	-	-	-
14	118,5	-	-	-	-
15	118,8	-	-	-	-

Значения предэкспоненциальных множителей приведены в приложенииБ.

3.3 Исследование кинетики синтеза Фишера-Тропша

На кафедре ХТТ и ХК ранее была разработана программа расчета кинетики синтеза Фишера-Тропша для железного катализатора (прил.В). Программа написана на алгоритмическом языке Pascal, в которой решение системы дифференциальных уравнений проводилось с использованием метода Эйлера. Данная программа была модифицирована для расчета кинетики процесса с учетом индивидуального и группового состава компонентов.

Расчеты проводились с новым набором кинетических параметров. Сравнение экспериментальных и расчётных данных по составу продуктов синтеза при различных температурах приведено в таблице 6,7.

Таблица 6 – Сравнение расчетных и экспериментальных концентраций газообразных компонентов при различных температурах

Наименование компонента	Температура, °C					
	250		260		270	
	Концентрация компонентов, %мольн.					
	Эксперимент	Расчет	Эксперимент	Расчет	Эксперимент	Расчет
CO	30,22	30,83	28,25	29,70	25,19	27,28
H2	60,53	59,67	60,13	58,85	58,31	56,59
CO2	1,23	1,29	2,13	2,16	3,94	3,95
CH4	7,56	7,73	8,73	8,54	11,6	11,23
C2-4	0.47	0.49	0.76	0,75	0.96	0,94

Таблица 7 – Сравнение расчетных и экспериментальных концентраций групповых компонентов при различных температурах

Наименование компонента	Температура, °С						Средняя погрешность, %
	250		260		270		
	Концентрации компонентов, % масс.						
	Эксперимент	Расчет	Эксперимент	Расчет	Эксперимент	Расчет	
Парафины	36,69	38,55	39,96	40,66	44,37	46,00	3,5
Изопарафины	25,27	24,58	24,13	22,82	25,24	23,28	5,3
Олефины	18,42	18,25	19,88	19,47	16,28	16,35	1,1
Нафтены	10,83	10,47	7,53	8,64	6,47	6,93	9,3
Ароматические углеводороды	8,32	8,28	8,02	8,23	7,29	7,30	1,1

Средняя погрешность составила 4 %, что показывает удовлетворительное соответствие расчетных и экспериментальных данных. Полученные результаты (табл.7,8) показали, что при данных значениях кинетических параметров модель верно описывает температурную зависимость скоростей химических реакций.

С помощью разработанной программы были проведены расчеты общего материального баланса и получены кинетические зависимости для синтеза Фишера-Тропша (рис.19-20) .

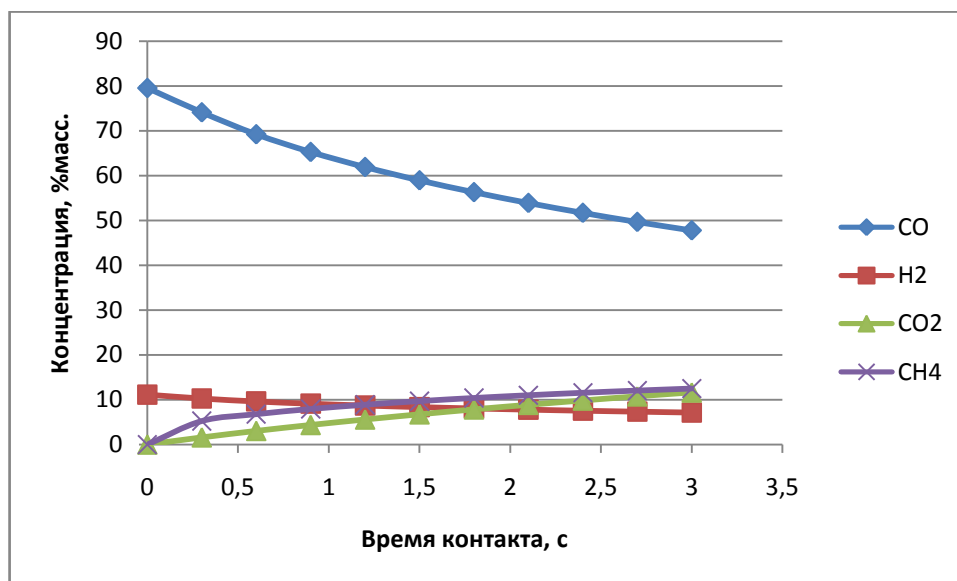


Рисунок 19 – Зависимость концентрации компонентов от времени контакта ($T=260^{\circ}\text{C}$, $P=1.1\text{МПа}$, $\text{CO}:\text{H}_2=1:2$)

Как показано на рисунке 19 наблюдается расходование сырьевых компонентов оксида углерода и водорода, и рост концентрации диоксида углерода. Так же с увеличением времени контакта возрастает выход легких и тяжелых органических соединений (рис.20).

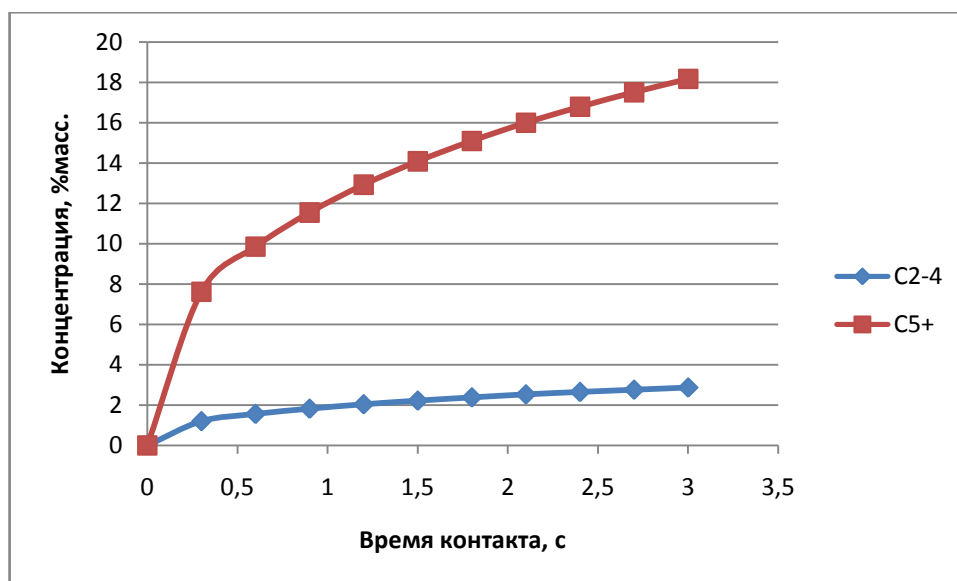


Рисунок 20 – Зависимость концентраций суммарного выхода углеводородов C2-4, C5+ от времени контакта ($T=260-270^{\circ}\text{C}$, $P=1.1\text{МПа}$, $\text{CO}:\text{H}_2=1:2$)

Таким образом, разработанная кинетическая модель позволяет исследовать синтез Фишера-Тропша на ультрадисперсном катализаторе с учетом влияния температуры на состав образующихся продуктов.

4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

1.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

1.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

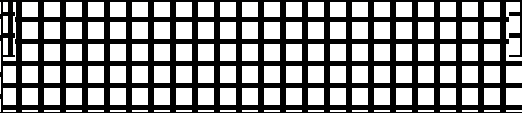
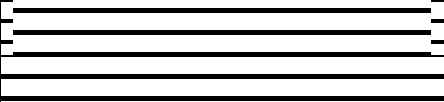
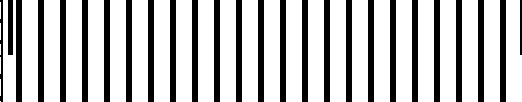
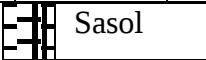
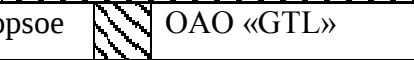
Для анализа потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование.

Целевой рынок – сегменты рынка, на котором будет продаваться в будущем разработка. В свою очередь, сегмент рынка – это особым образом выделенная часть рынка, группы потребителей, обладающих определенными общими признаками.

Сегментирование – это разделение покупателей на однородные группы, для каждой из которых может потребоваться определенный товар (услуга). Можно применять географический, демографический, поведенческий и иные критерии сегментирования рынка потребителей.

Целесообразно выбрать два наиболее значимых критерия: размер компании и отрасль, по которым будет производиться сегментирование рынка [11].

Таблица 8 – Карта сегментирования рынка

		Отрасль	
		Газодобывающие предприятия	Нефтегазодобывающие предприятия
Размер компании	Крупные		
	Средние		
	Мелкие		
		 Sasol	 Chevron
		 HaldorTopsoe	 ОАО «GTL»

Как видно из таблицы 8, наиболее перспективным сегментом в отраслях нефтегазодобычи и нефтегазопереработки для формирования спроса является сегмент крупных и средних нефтедобывающих компаний.

1.1.2 Анализ конкурентных технических решений

Анализ существующих на рынке конкурирующих разработок необходимо проводить систематически, поскольку рынки пребывают в постоянном движении. Такой анализ помогает вносить коррективы в научное исследование, чтобы успешнее противостоять соперникам. Важно адекватно оценить сильные и слабые стороны разработок конкурентов.

В таблице 9 представлен сравнительный анализ модели (ϕ), разработанной в рамках выполнения ВКР и конкурентных моделей (κ_1, κ_2), выполненной в 2014 году,

Таблица 9 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкуренто-способность		
		ф	К ₁	К ₂	К _ф	Кк ₁	Кк ₂
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1.Повышение производительности труда пользователя	0,05	4	3	4	0,2	0,15	0,2
2.Удобство в эксплуатации	0,07	5	4	3	0,35	0,28	0,21
3. Энергоэкономичность	0,1	5	3	4	0,5	0,3	0,4
4. Надежность	0,1	4	3	4	0,4	0,3	0,4
5. Безопасность	0,1	5	4	5	0,5	0,4	0,4
Экономические критерии оценки эффективности							
6.Конкурентоспособность продукта	0,11	5	4	4	0,55	0,44	0,44

Продолжение таблицы 9

7.Уровень проникновения на рынок	0,08	4	3	3	0,32	0,24	0,24
8. Цена	0,05	4	3	4	0,2	0,15	0,2
9. Предполагаемый срок эксплуатации	0,1	5	4	3	0,5	0,4	0,3
10.Послепродажное обслуживание	0,06	5	4	4	0,3	0,24	0,24
11.Финансирование научной разработки	0,05	4	4	4	0,2	0,2	0,2
12. Срок выхода на рынок	0,08	5	3	3	0,4	0,24	0,24
13.Наличие сертификации разработки	0,05	4	4	4	0,2	0,2	0,2
Итого	1				4,62	3,5	3,67

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле[11]:

$$K = \sum B_i * B_i ,$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

Разрабатываемый проект конкурентоспособен на рынке, главным преимуществом которой является чувствительность к составу перерабатываемого сырья, гарантия послепродажного обслуживания. Уязвимость - критерий «Наличие сертификации разработки». Слабость позиции конкурентов обусловлена низкими значениями по следующим критериям: Повышение производительности труда пользователя, цена.

1.1.3 SWOT-анализ

Для комплексной оценки научно-исследовательского проекта применяют SWOT-анализ, результатом которого является описание сильных

и слабых сторон проекта, выявление возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Итоговая матрица SWOT-анализа представлена в таблице 10.

Таблица 10 – Итоговая матрица SWOT-анализа

	Сильные стороны проекта: С1. Энергоэффективность и экономичность технологии. С2. Экологичность технологии. С3. Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями С4. Наличие бюджетного финансирования. С5. Квалифицированный персонал.	Слабые стороны проекта: Сл1. Отсутствие прототипа научной разработки Сл2. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой Сл3. Отсутствие достаточного финансирования проектов Сл4. Отсутствие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца Сл5. Отсутствие учета в модели реакции вторичных преобразований на катализаторе.
Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт В3. Снижение таможенных пошлин на сырье и материалы, используемые при научных исследованиях В4. Повышение стоимости конкурентных разработок	Разработка кинетической модели процесса синтеза Фишера-Тропша с целью получения готового продукта с конкурентными преимуществами с оптимальной себестоимостью, высоким качеством и инжиниринговой услугой	1. Больше задействование ресурсов ТПУ. 2. Повышение квалификации кадров у потенциальных потребителей 3. Усиление требований экологии стимулирует развитие отрасли GTL 4. Приобретения необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца

Угрозы: У1.Отсутствие спроса на новые технологии производства У2.Развитая конкуренция технологий производства У3.Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции У4.Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства	Высокое качество и экологичность получаемой продукции, привлечение к работе высококвалифицированного персонала. Увеличение финансирования с целью углубления исследований.	При задержках в поставке используемых материалов одновременном развитии конкуренции технологий обогащения есть риски потерь занятой ниши рынка. При добавлении к этому несвоевременного финансового обеспечения угроза потерь рынка значительно возрастает
--	---	--

Результаты SWOT-анализа учитываются при разработке структуры работ, выполняемых в рамках научно-исследовательского проекта. Данный анализ показал направление, по которому целесообразно развивать проект, его сильные стороны и возможности роста.

1.3 Планирование научно-исследовательской работы

1.3.1 Структура работ в рамках научного исследования

Для выполнения научных исследований формируется рабочая группа, в состав которой могут входить научные сотрудники и преподаватели, инженеры, техники и лаборанты, численность групп может варьироваться. По каждому виду запланированных работ устанавливается соответствующая должность исполнителей.

В данном разделе необходимо составить перечень этапов и работ (таблица 11) в рамках проведения научного исследования, провести распределение исполнителей по видам работ.

Таблица 11 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб.	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Выбор направления исследований	Руководитель
Выбор направления исследований	2	Составление и утверждение технического задания	Руководитель
	3	Календарное планирование работ по теме	Руководитель
	4	Подбор и изучение материалов по теме	Бакалавр
Теоретические исследования	5	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Руководитель, бакалавр
	6	Проведение компьютерных расчетов	Руководитель, бакалавр
Обобщение и оценка результатов	7	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель, бакалавр
Проведение ОКР			
Испытание образца	8	Лабораторные испытания	Бакалавр, Лаборант
Оформление отчета по НИР	9	Оформление отчета	Бакалавр
Подготовка к защите дипломной работы	10	Составление отчета	Бакалавр
Защита дипломной работы	11	Защита	Бакалавр, Руководитель

1.3.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{ожі}$ используется следующая формула [10]:

$$t_{ожі} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5}$$

где $t_{ожі}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы чел.-дн.;

$t_{\min}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы чел.-дн.;

$t_{\max i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы), чел.-дн.

Ожидаемая трудоемкость для этапов работы, приведенных в таблице 5, рассчитывается по формуле :

$$t_{ожі} = \frac{3 \cdot 6 + 2 \cdot 10}{5} = 7.6 \text{ чел. – дн.}$$

Для этапов 2 – 11 расчет производится аналогично.

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями. Такое вычисление необходимо для обоснованного расчета заработной платы, так как удельный вес зарплаты в общей сметной стоимости научных исследований составляет около 65 %. Продолжительность каждой работы в рабочих днях[11]:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожі}}{Ч_i}$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб.дн.;

$Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

1.3.3 Разработка проведения научного исследования

Для разработки графика научного исследования строится диаграмма Ганта.

Диаграмма Ганта – горизонтальный ленточный график, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней приведем в календарные дни по формуле:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}},$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения i -й работы в календарных днях;

T_{pi} – продолжительность выполнения i -й работы в рабочих днях;

$k_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Продолжительность выполнения каждого этапа работы, приведенных в таблице 6, рассчитывается по формуле:

$$T_{ki} = 7.6 \cdot 1,48$$

Для этапов 2-11 расчет ведется аналогично.

Коэффициент календарности [10]:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}$$

где $T_{\text{кал}}$ – количество календарных дней в году;

$T_{\text{вых}}$ – количество выходных дней в году;

$T_{\text{пр}}$ – количество праздничных дней в году.

$$k_{\text{кал}} = \frac{366}{366 - 119}$$

Исходя из данных приведенных в таблице 12, строится календарный план-график, который приведен в таблице 13.

Таблица 12 – Временные показатели проведения научного исследования

Обозначения: Исп.1 - Р – руководитель; Исп.2 –Б–бакалавр; Исп.3 – Л–лаборант

№	Наименование работ	Длительность работ в рабочих днях, Т _{pi}			Длительность работ в календарных днях, Т _{ki}			Исполнители		
		Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	Составление и утверждение технического задания	7,6			11			Р		
2	Выбор направления исследований	1,4	1,4		2	2		Р	Б	
3	Календарное планирование работ по теме	6,4			9			Р		
4	Подбор и изучение материалов по теме		17			25			Б	
5	Проведение теоретических расчетов и обоснований	12 7	12 7		18 10	18 10		Р Р	Б Б	
6	Проведение компьютерных расчетов	2,9 1,6	2,9 1,6		4 2	4 2		Р Р	Б Б	
7	Оценка эффективности полученных результатов	0,7 1,6	0,7 1,6		1 2	1 2		Р Р	Б Б	
8	Лабораторные испытания		2,3 2,3	2,3 2,3		3 3	3 3		Б Б	Л Л
9	Оформление отчета		4,6			7			Б	
10	Подготовка к защите дипломной работы		9			13			Б	
11	Защита дипломной работы	0,5	0,5		1	1		Р	Б	

Таблица 13– Календарный план-график проведения НИОКР по теме

№ работ	Вид работ	Исполнители	Кален .дни	Продолжительность выполнения работ													
				февр.		март			апрель			май			июнь		
				2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	
1	Составление и утверждение технического задания	Р	11														
2	Выбор направления исследований	Р, Б	2 2														
3	Календарное планирование работ по теме	Р	9														
4	Подбор и изучение материалов по теме	Б	25														
5	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Б Р	10 18														
6	Проведение компьютерных расчетов	Б Р	2 4														
7	Оценка эффективности полученных результатов	Р, Б	1 2														
8	Лабораторные испытания	Б, Л	3 3														
9	Оформление отчета	Б	7														
10	Подготовка к защите дипломной работы	Б	13														
11	Защита дипломной работы	Р, Б	1 1														

1.4 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения.

1.4.1 Расчет материальных затрат НТИ

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$З_{\text{м}} = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m Ц_i \cdot N_{\text{расх}i},$$

где m – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования; $N_{\text{расх}i}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования; $Ц_i$ – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов; k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Материальные затраты, необходимые для данной НТИ, отражены в таблице 14.

Таблица 14 – Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	Количество			Цена за ед., с НДС тыс.руб.			Затраты на материалы, ($З_{\text{м}}$), тыс.руб.		
		Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп.1	Исп.2	Исп.3
УДП порошок железа	кг.	1	1	1	550	550	550	632	632	632
Баллон с N ₂	шт.	1	1	1	3000	5896	5896	3450	6780	6780
Баллон с H ₂	шт.	1	1	1	3500	6250	6250	4025	6875	6875
Баллон с СО	шт.	1	1	1	3500	6431	6431	4025	7396	7396
Поливиниловый спирт	кг.	1	0	0	510	0	0	587	0	0
Поливинилпирролидон	кг.	0	1	0	0	2835	0	0	3260	0
Полиэтилен-оксид	кг.	0	0	1	0	0	400	0	0	460
Итого								12719	24943	22143

1.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных

работ

$$E_{\text{э}} = \sum N_i \cdot T_{\text{э}} \cdot C_{\text{э}}$$

где N_i - мощность электроприборов по паспорту, кВт;

$T_{\text{э}}$ - время использования электрооборудования, час;

$C_{\text{э}}$ - цена одного кВт*ч, руб.

$C_{\text{э}} = 1,5$ руб/ кВт*ч

$$E_{\text{э}} = \sum N_i \cdot T_{\text{э}} \cdot C_{\text{э}} = 0,645 \cdot 1200 \cdot 1,5 = 1161 \text{р.}$$

Расчет затрат на специальное оборудование для научных исследований представлен в таблице 15.

Таблица 15 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования с НДС, тыс. руб.	Мощность электроприбора, кВт	Общая стоимость, тыс. руб.
1.	Каталитическая установка	1	56759	0,295	57059
Итого:					57059

Линейная амортизация определяется по следующей формуле:

$$A = \frac{C}{T_{\text{об}} i}$$

где C – стоимость оборудования, $T_{\text{об}}$ – норма использования оборудования, лет.

$$A = \frac{56759}{10} = 5675,9 \text{ руб/год}$$

1.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}},$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата одного работника;

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.;

$Z_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d},$$

В формуле:

Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб.дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя;

F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн. (табл.16).

Таблица 16– Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Научный руководитель проекта	Специалист по проекту – студент
Календарное число дней	273	273
Количество нерабочих дней	78	78
– выходные дни	14	14
– праздничные дни		
Потери рабочего времени		
– отпуск	-	-
– невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд раб.времени, раб. дни	181	181

Все рассчитанные значения основной заработной платы сведены в таблицу 17.

Таблица 17 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	Оклад, руб	Районный коэффициент	Месячная зарплата, руб./мес.	Общие затраты по заработной плате, руб. (5 месяцев)
Руководитель	23264	1,3	30243,2	151216
Лаборант	13058	1,3	16975	84875
Бакалавр	2500	1,3	3250	16250

1.4.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы

Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы учитывают величину предусмотренных Трудовым кодексом РФ доплат за отклонение от нормальных условий труда, а также выплат, связанных с обеспечением гарантий и компенсаций (при исполнении государственных и общественных обязанностей, при совмещении работы с обучением, при предоставлении ежегодного оплачиваемого отпуска и т.д.).

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}}$$

где $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимается равным 0,12 – 0,15).

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}} = 0,13 \cdot 23264 = 3024,32 \text{руб.} - \text{для руководителя.}$$

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}} = 0,13 \cdot 13058 = 1697,54 \text{руб.} - \text{для лаборанта.}$$

В статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников (табл.18).

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы [11]:

$$З_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}),$$

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

Таблица 18– Социальные отчисления

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.			
	Исп.1	Исп.2	Исп.3	
Руководитель проекта	33267,5	33267,5	33267,5	
Лаборант	18672,5	18672,5	18672,5	
Социальные отчисления				
	ПФР (22%)	ФСС (2,9%)	ФОМС (5,1%)	Страхование по классу опасности (0,5%)
Исполнение 1	11426,8	1506,3	2648,9	259,7
Исполнение 2	11426,8	1506,3	2648,9	259,7
Исполнение 3	11426,8	1506,3	2648,9	259,7

1.4.5 Расчет затрат на научные и производственные командировки

Затраты на научные и производственные командировки исполнителей определяются в соответствии с планом выполнения темы и с учетом действующих норм командировочных расходов различного вида и транспортных тарифов.

В данном исследовании затраты на научные и производственные командировки исполнителей равны нулю.

1.4.6 Накладные расходы

Контрагентные расходы включают затраты, связанные с выполнением каких-либо работ по теме сторонними организациями (контрагентами, субподрядчиками), т.е.:

1) Работы и услуги производственного характера, выполняемые сторонними предприятиями и организациями. К работам и услугам производственного характера относятся:

- выполнение отдельных операций по изготовлению продукции, обработке сырья и материалов;
- проведение испытаний для определения качества сырья и материалов;

- контроль за соблюдением установленных регламентов технологических и производственных процессов;
- ремонт основных производственных средств;
- поверка и аттестация измерительных приборов и оборудования, другие работы (услуги) в области метрологии и прочее;
- транспортные услуги сторонних организаций по перевозкам грузов внутри организации (перемещение сырья, материалов, инструментов, деталей, заготовок, других видов грузов с базисного (центрального) склада в цехи (отделения) и доставка готовой продукции на склады хранения, до станции (порта, пристани) отправления).

2) Работы, выполняемые другими учреждениями, предприятиями и организациями (в т.ч. находящимися на самостоятельном балансе опытными (экспериментальными) предприятиями по контрагентским (со исполнительским) договорам на создание научно-технической продукции, головным (генеральным) исполнителем которых является данная научная организация).

Расчет величины этой группы расходов зависит от планируемого объема работ и определяется из условий договоров с контрагентами или субподрядчиками.

Накладные расходы попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование материалов исследования, оплата услуг связи, электроэнергии, почтовые и телеграфные расходы, размножение материалов и т.д. Их величина определяется по следующей формуле:

$$З_{\text{накл}} = (\text{сумма статей } 1 \div 7) \cdot k_{\text{нр}} ,$$

где $k_{\text{нр}}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы. Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%.

1.4.7 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского

проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы (темы) является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции (таб.19).

Таблица 19 – Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.		
	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Материальные затраты	12719	24943	22143
2. Затраты на электроэнергию	1161	1161	1161
3. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	57059	57059	57059
4. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	55190	55190	55190
5. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	4722	4722	4722
6. Социальные отчисления	15841,7	15841,7	15841,7
7. Затраты на научные и производственные командировки	0	0	0
8. Контрагентные расходы	0	0	0
9. Накладные расходы (16 % от суммы ст. 1-7)	23470,8	25426,7	24978,7
10. Бюджет затрат НТИ	170163,5	184343,4	181095,4

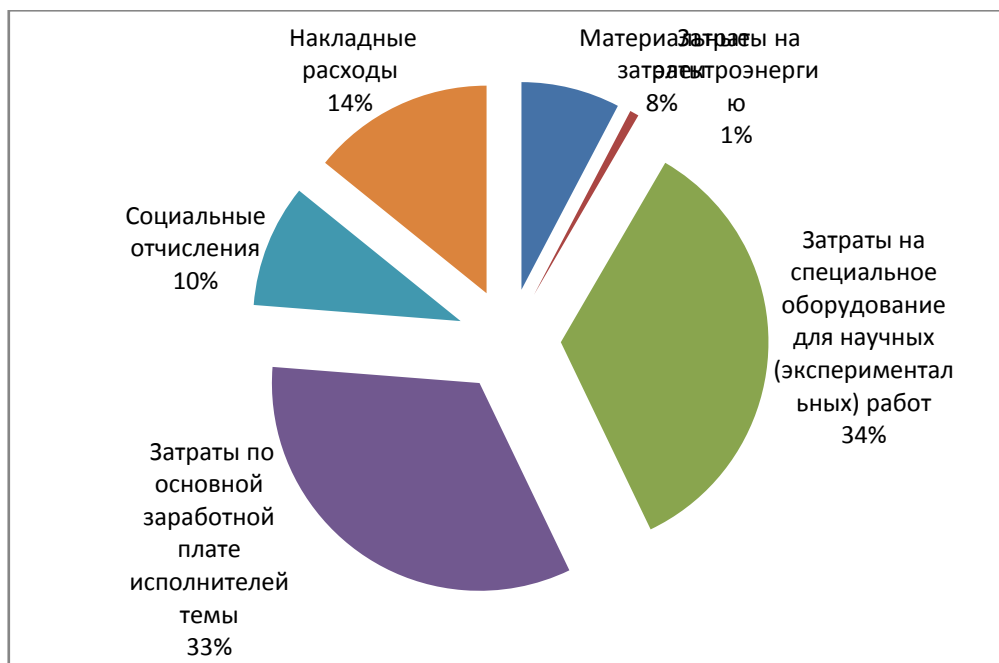


Рисунок 21 – Круговая диаграмма затрат на проведение НТИ

Наиболее затратная часть, как видно из диаграммы, это затраты на специальное оборудование. Большой объем затрат для данной работы обуславливается высокой ценой на каталитическую установку.

1.5 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{\text{pi}}}{\Phi_{\text{max}}},$$

где $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{pi} – стоимость i -го варианта исполнения;

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом [11]:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i$$

где I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки;

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

b_i^a , b_i^p – балльная оценка i -го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Таблица 20 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Способствует росту производительности труда	0,1	5	5	3
2. Удобство в эксплуатации	0,15	4	4	3
3. Энергосбережение	0,15	4	4	4
4. Надежность	0,20	3	5	4
5. Воспроизводимость	0,25	4	4	4
6. Материалоемкость	0,15	5	5	5
ИТОГО	1	4,05	4,45	3,9

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки($I_{исп.i}$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{исп.1} = \frac{I_{р-исп1}}{I_{финр.1}} , \quad I_{исп.2} = \frac{I_{р-исп2}}{I_{финр.2}} \text{ и т.д.}$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта ($\mathcal{E}_{cp}$):

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}}$$

Таблица 21 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	0,98	0,96
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,5	4,2	3,9
3	Интегральный показатель эффективности	4,13	4,45	4,06
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,97	0,91

Вывод: в ходе выполнения данного раздела были определены финансовый показатель разработки, показатель ресурсоэффективности, интегральный показатель эффективности и, на основании сравнительной эффективности вариантов исполнения, оптимальным был выбран вариант исполнения 1.

5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

Обеспечение безопасности жизни и здоровья работников в процессе трудовой деятельности является одним из национальных приоритетов в целях сохранения человеческого капитала [12]. Для этого применяется комплекс мер, содержащий правовые, социально-экономические, организационно-технические, санитарно-гигиенические, лечебно-профилактические, реабилитационные и иные мероприятия [12].

В Статье 37[12] изложены требования безопасности, обеспечивающие охрану здоровья и условий труда на предприятии. На основании Конституции РФ базируется ряд законов и нормативных актов, уточняющих и расширяющих понятие охраны и защиты труда. Трудовой кодекс [12], охватывает вопросы от правового возникновения трудовых отношения, до детального рассмотрения трудового договора, времени отдыха и профессиональной подготовки работника, охраны труда, разрешения трудовых споров и т.д. Для обеспечения соблюдения требований охраны труда на предприятии существует ряд служб, в качестве которых выступают федеральные органы и органы исполнительной власти субъектов РФ [12]. Государственный надзор за исполнением трудового законодательства и иных нормативных правовых актов, осуществляют Генеральный прокурор Российской Федерации и подчиненные ему прокуроры в соответствии с федеральным законом. Согласно [13] непосредственно на предприятии проводится социальная оценка условий труда уполномоченной организацией.

Кроме того возможно создание на предприятии внутренних комиссий или комитетов на базе профсоюзов.

Правовые аспекты взаимоотношений работодателей и работников в области охраны труда (гарантии, права и обязанности работников; обязанности работодателей; полномочия органов государственной власти в области охраны труда и т.д.) изложены в правовом документе [14]. При выполнении бакалаврской работы наиболее важными являются разделы,

посвященные рабочему месту. Работник должен быть проинформирован об условиях и охране труда на рабочем месте, о существующем риске повреждения здоровья, а также о мерах по защите от воздействия вредных или опасных производственных факторов [14]. Согласно Статье 8 [14], рабочее место должно соответствовать требованиям охраны труда и быть защищенным от влияния вредных и (или) опасных производственных факторов и её организация должна соответствовать правовым нормам, а также антропометрическим, социальным, психофизическим данным работника.

Так документ [16] является межгосударственным стандартом, и содержит практические рекомендации, предназначенные для использования всеми, на кого возложена ответственность за управление охраной труда [12].

Для выполнения задачи сохранения жизни и здоровья работника, согласно приказу [17], при поступлении на работу проводится медосмотр, с целью проверки здоровья кандидата на соответствие. Согласно Приложению N1 данного документа, во время работы проводятся плановые медосмотры с участием врачей и проведением лабораторных исследований, для выявления воздействия вредных факторов и вероятности развития профессиональных заболеваний. Для сохранения и поддержания здоровья работников, применяют комплексные меры. Они включают в себя средства индивидуальной защиты, которые обеспечивают механическую, термическую, биологическую, химическую, электрическую и радиационную безопасность, а так же согласно документу [18], для снижения вредного воздействия химических факторов (969 компонентов), биологических (микроорганизмы, препараты с живыми клетками) и физических (ионизирующие излучения) работникам выдается молоко питьевое в количестве 0,5 литра за смену для выведения из организма токсических веществ (возможна замена молока равноценными продуктами, согласно Приложению N1 [18] или же денежная выплата). Согласно [19] выполняется бесплатная выдача смывающих и (или) обезвреживающих средств (жидкое и

твердое мыло, очищающие и восстанавливающие кремы и т.д.), если выполнение обязанностей работника связано с действием опасных производственных факторов, температурных условий и загрязнений.

Экспериментальная часть бакалаврской работы осуществлялась на персональном компьютере (далее ПК) при работе с различными программными обеспечениями на кафедре химической технологии топлива и химической кибернетики. Рабочая зона представляет собой аудиторию, оборудованную системами отопления, кондиционирования воздуха и естественным и искусственным освещением. Также в аудитории находится аптечка первой медицинской помощи, углекислотный огнетушитель для тушения пожара. Рабочее место – стационарное, оборудованное компьютером.

5.1 Анализ вредных факторов

5.1.1. Повышенный уровень электромагнитного излучения

Работа за персональным компьютером регулируется техникой безопасности предприятия и требует соблюдения предписанных норм. При работе с компьютером на человека могут воздействовать следующие опасные производственные факторы:

- поражение электрическим током;
- возникновение пожара;
- возможность механического травмирования;
- ожоги в результате случайного контакта с горячими поверхностями внутри лазерного принтера.

К вредным физическим производственным факторам относятся:

- повышенный уровень электромагнитного излучения;
- повышенные уровни запыленности воздуха рабочей зоны;
- повышенное содержание положительных и отрицательных ионов в воздухе рабочей зоны;

- пониженная или повышенная влажность и подвижность воздуха рабочей зоны;

- повышенный уровень шума;

- нерациональная организация освещения рабочего места.

Одним из наиболее вредных факторов является ЭМП, которое при превышении допустимых уровней оказывает вредное влияние на нервную, иммунную, эндокринную системы человека. Наиболее подвержены влиянию ЭМП кровеносная система, головной мозг, глаза, иммунная и половая системы.

Наибольший вред состоянию здоровья человека наносят блок бесперебойного питания, переходники, незаземлённые розетки, а также мониторы и системные блоки. Основным источником ЭМ излучений от мониторов ПЭВМ является трансформатор высокой частоты строчной развёртки, который размещается в задней или боковой части. Кроме того усилить пагубное воздействие ЭМП может продолжительное время работы, теснота помещения и большое число ПК. Кроме того нарушается работа нервной системы, ослабевает память, повышается утомляемость, нарушается режим сна.

Согласно [20] при напряженности электрического поля в диапазоне в диапазоне частот 5 Гц - 2 кГц и в диапазоне частот 2 кГц - 400 кГц временные допустимые уровни электромагнитного поля составляют 25 В/м и 2,5 В/м соответственно.

Согласно [20] мощность экспозиционной дозы мягкого рентгеновского излучения в любой точке на расстоянии 0,05 м от экрана и корпуса видео дисплейного терминала не должна превышать 1 мкЗв/ч (100 мкР/ч).

Полностью избежать воздействия ЭМП ПЭВМ невозможно. Но можно максимально снизить это воздействие. Меры снижения интенсивности ЭМП состоят в рациональном размещении рабочих мест - соседний ПК должен находиться на расстоянии 1,5 м, особенно его боковые

и задние стенки. Отделка помещения должна быть представлена диффузионно-отражающими материалами с заданными коэффициентами отражения. К тому же уменьшение излучения в источнике достигается за счет применения согласованных нагрузок и поглотителей мощности, преобразующих энергию излучения в тепловую.

5.1.2. Повышенный уровень шума

Шум, как раздражающий фактор, оказывает неблагоприятное воздействие на организм человека. При работе с ПК возможно появление нервного напряжения и снижение работоспособности. Источники шума - процессор компьютера, электролампы, системы вентиляции и отопления.

В соответствии [21] уровень шума на рабочем месте пользователей ПК не должны превышать значений 50 дБА. В помещениях всех типов образовательных учреждений, в которых эксплуатируются ПЭВМ, уровень вибрации не должен превышать допустимых значений в соответствии с [22]. Рабочее место не имеет собственных источников вибрации, но испытывает обще технологические воздействия. Следовательно, согласно классификации [22] по источнику возникновения вибрации, рабочее место относится к Категории 3 и Типу В

5.1.3. Недостаточная освещенность рабочего места

Особая роль отводится контролю по обеспечению должного уровня освещения рабочего места. Поскольку местом проведения работ является помещение, то возникает необходимость максимального приближения освещения к естественному солнечному, чтобы избежать снижения зрения и повышение утомляемости работника.

Согласно [20] в помещениях для эксплуатации ПК организовано естественное освещение через светопроемы, обеспечивающее коэффициенты естественной освещенности (КЕО) не ниже 1.5%. Искусственное освещение представлено комбинированной системой. Поскольку монитор ПК также является источником света, то рекомендуется в целях снижения мерцания

экрана устанавливать частоту кадров 60 Гц для ЖКИ-мониторов.

Согласно пункту 6.15 [20] для обеспечения нормируемых значений освещенности в помещениях для использования ПЭВМ следует проводить чистку стекол оконных рам и светильников не реже двух раз в год и проводить своевременную замену перегоревших ламп.

Рабочий стол рекомендуется устанавливать таким образом, чтобы световой поток был направлен слева от работника.

5.1.4. Микроклимат на рабочем месте

Под термином «микроклимат» понимается совокупность нескольких опасных факторов - температура окружающей среды, влажность воздуха и скорость движения воздуха. Отклонение данных показателей от нормы влияет главным образом на осуществление теплообмена организма с окружающей средой.

На рабочих местах пользователей ПК должны обеспечиваться оптимальные параметры микроклимата в соответствии с [23]. Согласно данному документу, работа с ПК относится к категории тяжести работ 1а (работы с интенсивностью энергозатрат до 120 ккал/ч (до 139 Вт), производимые сидя и сопровождающиеся незначительным физическим напряжением). Исходя из данной классификации, температура воздуха должна быть в холодный период года не более 22-24°C, в теплый период года 23-25°C. Относительная влажность должна составлять 40-60%, скорость движения воздуха — 0,1 м/с для холодного и теплого периода года.

5.1.5. Вредные вещества

Необходимо уделить внимание нормам ПДК вредных химических веществ, так как рабочее место располагается на кафедре, оснащенной оборудованием для проведения работ с химическими реактивами. Согласно [24] рабочая зона представляет собой пространство высотой до двух метров над уровнем пола или площади, на которой находятся места постоянного или временного пребывания работающих. Содержание вредных химических

веществ в воздухе помещений, предназначенных для использования ПЭВМ во всех типах образовательных учреждений, не должно превышать предельно допустимых среднесуточных концентраций для атмосферного воздуха в соответствии с источником [24].

При нахождении работника в закрытом помещении, в результате процесса дыхания, происходит выделение "тяжелых аэроионов" - положительно заряженных частиц. Данные компоненты оказывают неблагоприятное воздействие на организм человека. В связи с этим, аэроионный состав воздуха контролируется при проведении производственного санитарного контроля, при аттестации рабочих мест по условиям труда и др.

В соответствии с [25] нормированию подвергаются концентрации аэроионов положительной и отрицательной полярности $r^+, r^{3/4}$ и коэффициент униполярности U .

Ионный состав воздуха должен содержать следующее количество отрицательных и положительных аэройонов: минимально необходимый уровень 600 и 400 ионов в 1 см^3 воздуха; оптимальный уровень 3 000-5 000 и 1 500-3 000 ионов в 1 см^3 воздуха; максимально допустимый — 50 000 ионов в 1 см^3 воздуха.

Для нормализации аэроионного состава воздуха в рабочей зоне и обеспечения оптимальных показателей микроклимата в течение рабочего дня используют профессиональное климатическое оборудование, предназначенное для офисных помещений такие как комплексные системы с функциями климат-контроля, кондиционирования, увлажнения, ионизации и антимикробной очистки воздуха, необходима ежедневная влажная уборка и проветривание после каждого часа работы на ПЭВМ.

Процесс на каталитической установке протекает при высоких температурах (до 350°C) и следствием этого является то, что получаемые продукты находятся в жидком и газообразном состоянии. Это делает их более активными. Большинство ядовитых веществ попадает в организм

человека через органы дыхания. Это опасно из-за большой всасывающей способности слизистой оболочки носа и дыхательной поверхности легких. В процессе гидрогенизации сырьем является среднее масло, содержащее нафтеновые, парафиновые и ароматические углеводороды. Получаемые бензины содержат до 20% ароматических углеводородов (бензол, толуол и т.д.). Они относятся к ядовитым (токсичным) веществам. Помимо этого в состав выделяющихся газов входят такие газы как сероводород и аммиак.

- Бензол по своему биологическому действию относится по характеру действия к канцерогенам. При непродолжительном вдыхании паров бензола не возникает немедленного отравления, если организм человека подвергается длительному воздействию бензола в малых количествах, последствия также могут быть очень серьезными. В этом случае хроническое отравление бензолом может стать причиной лейкемии (рака крови) и анемии (недостатка гемоглобина в крови).

- Толуол вызывает аналогичные изменения со стороны крови, но несколько слабее, чем бензол.

- Сероводород – высокотоксичный нервный яд, вдыхание которого в концентрации 1000 мг/м³ и выше может привести к смерти. При хроническом отравлении сероводородом у человека наблюдается расстройство нервной, сердечно – сосудистой системы, органов пищеварения и дыхания, ПДК – 10 мг/м куб.

Таким образом действие на организм углеводородных компонентов с сероводородом многообразно. Прежде всего страдает нервная система, сердечно-сосудистая система, возможны поражения печени.

В воздухе кроме токсичных веществ содержится так называемая производственная пыль. В процессе каталитического гидрогенизации выделение пыли происходит при дроблении и транспортировке катализатора. Длительный контакт с производственной пылью в данном случае приводит к хроническому заболеванию легких – силикозу.

Поэтому важно знать какая предельно предельно-допустимая концентрация этих веществ должна быть в воздухе, чтобы они не оказывали сильного влияния на организм человека. По определению ПДК вещества в воздухе рабочей зоны: концентрация которая при ежедневной работе без средств защиты в течении 8 часов или другой продолжительности но не более 40 часов в неделю в течении всего рабочего стажа не могут вызвать заболеваний или отклонений в состоянии здоровья (таблица 22).

Для некоторых веществ класс опасности может быть изменен на более низкий, даже при высокой ПДК. Это объясняется тем, что при высокой разовой концентрации вещества в рабочей зоне влияние на организм человека может многократно усилится. Примером таких веществ используемых на рассматриваемом производстве могут являться сероводород, бензол и его гомологи.

Таблица 22 – Предельно-допустимые концентрации токсичных веществ в воздухе рабочей зоны (ГН 2.2.5.1313-03)

Наименование	ПДК рабочей зоны, мг/м ³	Класс опасности	Примечание
Сероводород	10	2	При большой концентрации — в результате поражения обоняния — не чувствуется тяжелый запах сероводорода. При малых концентрациях вначале наблюдается раздражение конъюнктивы и роговицы глаз, симптомы воспаления в носовой полости, кашель, слабость, слюноотделение, головная боль, понижение артериального давления, учащенный пульс; при более длительном поражении может развиваться отек легких.

Оксид углерода	20	4	Токсическое действие СО проявляется тканевой гипоксией. СО соединяется с гемоглобином, образуя карбоксигемоглобин
Бензол	5	2	Канцероген
Толуол	50	3	Слабый канцероген
Аммиак	20	4	При остром отравлении аммиаком поражаются глаза и дыхательные пути, при высоких концентрациях возможен смертельный исход.

К средствам защиты от попадания на кожу вредных химических веществ служат резиновые перчатки, лабораторные халаты, шапочки, обувь. Для защиты дыхательных путей от действия вредных химических веществ служат специальные ватно-марлевые повязки, респираторы, противогазы. Для защиты слизистой оболочки глаз можно использовать специальные очки. Средством защиты от поражения вредными химическими веществами служит также точное соблюдение техники безопасности и инструкций к используемым веществам.

5.2. Анализ опасных факторов

5.2.1. Электробезопасность

Электрические установки, к которым относятся ЭВМ, представляют для человека большую потенциальную опасность. В процессе эксплуатации или при проведении профилактических работ человек может коснуться частей, находящихся под током.

Согласно классификации помещений по электробезопасности дипломный проект разрабатывался в помещении без повышенной опасности

(класс 01 по ГОСТ 12.1.019 – 85), характеризующимся наличием следующих условий:

- напряжение питающей сети 220В, 50Гц;
- относительная влажность воздуха не более 75%;
- средняя температура не более 35°C;
- наличие деревянного полового покрытия.

При нормальном режиме работы оборудования опасность электропоражения невелика, однако, возможны режимы, называемые аварийными, когда происходит случайное электрическое соединение частей оборудования, находящихся под напряжением с заземленными конструкциями.

Основными техническими способами и средствами защиты от поражения электрическим током являются:

- защитное зануление;
- выравнивание потенциалов;
- защитное заземление;
- электрическое разделение сети;
- изоляция токоведущих частей;
- оградительные устройства и другое.

Такие способы, как защитное заземление и изоляция применяются в помещении отдела разработки печатных плат. Из реально возможных аварийных случаев можно выделить пробой изоляции. В лаборатории отдела разработки печатных плат не имеется не защищенных изоляцией токоведущих частей электроустановок. Для контроля состояния электрической изоляции проводов, производят периодические испытания изоляции. Периодическое измерение сопротивления изоляции позволяет своевременно выявить и устранить повреждения.

5.2.2. Пожарная безопасность

Технологический процесс установки относится к пожаровзрывоопасному производству, вследствие ведения процесса при высоких давлениях и температурах, наличия горючих взрывоопасных продуктов [27].

Все помещения лаборатории должны соответствовать требованиям пожарной безопасности по ГОСТ 12.1.004-91 и иметь средства пожаротушения по ГОСТ 12.4.009-83.

1. Лаборатория должна быть оснащена пожарными кранами (не менее одного на этаж) с пожарными рукавами. В каждом рабочем помещении должны быть в наличии огнетушители и песок, а в помещениях с огнеопасными и легковоспламеняющимися веществами – дополнительные средства пожаротушения

2. В помещении лаборатории на видном месте должен быть вывешен план эвакуации сотрудников в случае возникновения пожара.

3. Распоряжением по лаборатории из числа сотрудников назначается группа (3–5 человек), которая организует все противопожарные мероприятия, получив инструктаж местной пожарной команды.

4. Все сотрудники лаборатории должны быть обучены правилам обращения с огне- и взрывоопасными веществами, газовыми приборами, а также должны уметь обращаться с противогазом, огнетушителем и другими средствами пожаротушения, имеющимися в лаборатории.

5. В помещениях лаборатории и в непосредственной близости от них (в коридорах, под лестницами) запрещается хранить горючие материалы и устанавливать предметы, загромождающие проходы и доступ к средствам пожаротушения.

6. Курить разрешается только в отведенном и оборудованном для этой цели месте.

7. Без разрешения начальника лаборатории и лица, ответственного за противопожарные мероприятия, запрещается установка лабораторных и нагревательных приборов, пуск их в эксплуатацию, переделка электропроводки.

8. Все нагревательные приборы должны быть установлены на термоизолирующих подставках.

9. Запрещается эксплуатация неисправных лабораторных и нагревательных приборов.

10. После окончания работы необходимо отключить электроэнергию, газ и воду во всех помещениях.

11. Каждый сотрудник лаборатории, заметивший пожар, задымление или другие признаки пожара обязан:

- немедленно вызвать пожарную часть по телефону;
- принять меры по ограничению распространения огня и ликвидации пожара;
- поставить в известность начальника лаборатории, который в свою очередь должен известить сотрудников, принять меры к их эвакуации и ликвидации пожара.

Для своевременной ликвидации очагов возможных загораний применяются первичные средства пожаротушения, в соответствии с [28].

Средства пожаротушения и противопожарный инвентарь в исправном состоянии и окрашен в красный цвет.

5.3 Охрана окружающей среды

Вредное воздействие предприятий нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности распространяется, главным образом, на водные бассейны и атмосферу. Эта промышленность относится к наиболее водоемким отраслям народного хозяйства. По объектам водопотребления её опережает лишь энергетика, металлургическая, химическая промышленность и коммунальное хозяйство.

Для борьбы с загрязнением атмосферы на каталитической установке применяют следующие меры:

- воздух, с компрессорных установок проходит очистку в центробежных циклонах, после чего сбрасывается в атмосферу;
- газы, которые не могут быть использованы в дальнейшем для переработки, подаются на факельную установку;
- совершенствование производства и создания новых технологий (например, безотходная технология для совместного получения АИ-93 и А-76, переход на производство неэтилированного бензина, уменьшение ароматических углеводородов в бензине;
- каталитический дожиг выбросов.
- использование котлов утилизаторов для использования тепла отходящих газов с целью снижения теплового загрязнения атмосферы.
- сооружения линий аварийных сбросов давления в факельную линию.

Воздействие на гидросферу отсутствует, так как слив вредных веществ отсутствует. Воздействие на литосферу отсутствует, так как выброс твердых остатков отсутствует.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

При эксплуатации электрооборудования (в данном случае ПК) возможно возникновение чрезвычайных ситуаций, требующих обеспечения электро- и пожарной безопасности на рабочем месте. Источниками возникновения пожара могут быть электрические схемы от ЭВМ, устройства электропитания, кондиционирования воздуха. В данных объектах по некоторым причинам (снижение сопротивления изоляции, ослабление контактов, перегрузка сетей, короткое замыкание) возникает перегрев элементов, что приводит к появлению искр и возгоранию.

Согласно [26] не электротехническому персоналу, выполняющему работы, при которых может возникнуть опасность поражения электрическим

током, присваивается группа I по электробезопасности.

Пожарная безопасность обеспечивается системой предотвращения пожара и системой пожарной защиты. На кафедре размещены таблички с указанием номера телефона вызова пожарной охраны, кроме того размещен схематичный план эвакуации людей при пожаре; дополнительно разработана инструкция, определяющая действия персонала в случае возникновения очага возгорания. Согласно Статье 11 [27] установлен и выполняется запрет на курение в помещении. Определен порядок хранения и уборки отходов химических веществ, так как они используются рядом с рабочим местом. В соответствии с требованиями пожарной безопасности и охраны труда, проводится регулярный инструктаж и проверка знаний по технике безопасности на рабочем месте. Помещение оснащено первичными средствами пожаротушения: огнетушители, лопаты, ящики с песком, асбестовые одеяла.

Горючие компоненты в помещении - строительные материалы для акустической и эстетической отделки помещений, перегородки, двери, полы, перфокарты и перфоленты, изоляция кабелей и др.

В случае возникновения пожара, необходимо предпринять следующие меры: обесточить помещение, вызвать службу пожарной охраны. Если горит электроприбор (ПК) - накрыть его асбестовым одеялом или другим плотным материалом и дожидаться прекращения горения из-за отсутствия доступа кислорода. Затем воспользоваться порошковым огнетушителем. Если масштабы возгорания велики, то необходимо закрыть дверь в горящее помещение, чтобы снизить скорость распространения огня, соблюдать спокойствие и эвакуироваться.

5.5 Правовые вопросы обеспечения безопасности

При выполнении научно-исследовательской работы необходимо следовать требованиям трудового кодекса РФ.

Согласно [24], необходимо проводить обязательные предварительные (при поступлении на работу) и периодические медицинские осмотры (обследования) работников, занятых на тяжелых работах и на работах с вредными и (или) опасными условиями труда.

Проект перечня национальных стандартов, содержащих правила и методы исследований (испытаний) и измерений, в том числе правила отбора образцов, необходимо использовать средства индивидуальной защиты [25].

Во избежание несчастных случаев, следует проводить обучение и проверять знания работников [27].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построение и анализ кинетической модели является одним из важных этапов при разработке математической модели химико-технологического процесса. В связи с разработкой нового ультрадисперсного железного катализатора и проведением экспериментальных исследований возникла необходимость корректировки кинетической модели СФТ.

Были обработаны экспериментальные данные, полученные при проведении исследований СФТ на ультрадисперсном железном катализаторе. При анализе полученных результатов были сделаны следующие выводы:

- Установлено, что на данном катализаторе в составе жидких продуктов присутствуют: изоалканы, циклоалканы и арены, что существенно отличает его от ранее применяемых катализаторов. В преобладающем количестве содержатся алканы и изо-алканы. Однако в значительных количествах присутствуют алкены, циклоалканы и арены.
- Увеличение температуры приводит к повышению содержания в составе продуктов синтеза алканов, содержание же цикло-алканов уменьшается. Концентрации ароматических углеводородов и изо-алканов изменяются незначительно. Изменения содержания олефинов имеет экстремальный характер.
- Степень превращения увеличивается с ростом температуры и в исследуемом интервале температур достигает 25%.
- Проведена корректировка кинетической модели и оценены значения кинетических параметров, модель хорошо описывает температурную зависимость образования групповых компонентов.

Для расчета кинетики СФТ на ультрадисперсном железном катализаторе была разработана программа расчета на языке Pascal. Расчетные и экспериментальные значения показали хорошее совпадение по содержанию групповых компонентов.

Таким образом, разработанная кинетическая модель позволяет исследовать синтез Фишера-Тропша на ультрадисперсном катализаторе с учетом влияния температуры на состав продуктов. В дальнейшем планируется корректировка кинетической модели, уточнение механизма и кинетических параметров при проведении дополнительных экспериментальных исследований.

В ходе выполнения исследований в разделе «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» рассчитали бюджет НИИ для различных вариантов исполнения, на основании чего определили финансовый показатель разработки, показатель ресурсоэффективности, интегральный показатель эффективности.

При выполнении раздела «Социальная ответственность» рассмотрели безопасность на производстве, правовые вопросы обеспечения безопасности, сделали анализ вредных и опасных факторов на рабочем месте, также анализ факторов, которые характеризуют возникновение чрезвычайных ситуаций.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ

1. Ефремова Е.В., Григорьева М.М. Разработка кинетической модели синтеза органических соединений из СО и Н₂ / XVII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке». Материалы XVII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых, Химия (Томск, 17 – 20 мая 2016 г.). – Томск: Издательство Томский политехнический университет, 2016. – Химия – с. 341.

2. Ефремова Е.В., Григорьева М.М. Моделирование кинетики синтеза Фишера-Тропша на ультрадисперсном катализаторе/ XVIII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке». Материалы XVIII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых, Химия (Томск, 29 мая – 1 июня 2017 г.). – Томск: Издательство Томский политехнический университет, 2017. – Химия – с. 301.

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Крылов О.В. Синтез Фишера-Тропша//Катализ в промышленности. – 2008. –№ 1. – С. 9 – 13.
2. Луткова Е.А., Алексенко В.Н., Петренко Д.А., Механизм взаимодействий в процессе синтеза Фишера-Тропша.// Новые информационные технологии в науке: сборник статей Международной научно - практической конференции. – 2016. – С. 25-27.
3. Альтернативные моторные топлива: учебное пособие/ А. Л. Лapidус [и др.]; Российский государственный университет нефти и газа им. И. М. Губкина (РГУ Нефти и Газа): учебное пособие / А. Л. Лapidус [и др.]; Российский государственный университет нефти и газа им. И. М. Губкина (РГУ Нефти и Газа). – Москва: ЦентрЛитНефтеГаз, 2008. – 287 с.: ил. – Высшее нефтегазовое образование. – Библиогр.: с. 269-285..
4. Химическая технология нефти и газа. Конспект лекций: учебное пособие / авторы сост.: Е.Н. Ивашкина, Е.М. Юрьев, А.А. Салищева; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, –2014. – 158 с.
5. Лapidус, А.Л. О механизме образования жидких углеводородов из СО и Н₂ на кобальтовых катализаторах / А.Л.Лapidус, А.Ю.Крылова. // Российский химический журнал. – 2000. – Т. 44. – № 1. – С. 43–56.
6. Xiaojun Lu. Fischer-Tropsch synthesis: towards understanding: ph.d.Thesis.Johannesburg , – 2011.
7. Kinetics, Selectivity and Scale Up of the Fischer-Tropsch Synthesis / G.P. van der Laan. -Groningen:Thesis University of Groningen. - With ref. - With summary in Dutch. – 2003.
8. Химическая кинетика: Учеб.пособие/ А.П.Пурмаль; МФТИ. – М., – 2000. – 80 с.

9. Жоров Ю. М. Термодинамика химических процессов. Нефтехимический синтез, переработка нефти, угля и природного газа. – М.: Химия, 1985. – 464 с.
10. Моин Ф.Б. // Успехи химии. – 1967, – Т. 36. – №7. – С. 1223 – 1242.
11. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие / И.Г. Видяев, Г.Н. Серикова, Н.А. Гаврикова, Н.В. Шаповалова, Л.Р. Тухватулина, З.В. Криницына; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 36 с.
12. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (принят ГД ФС РФ 21.12.2001) (ред. от 30.12.2008)// СПС Консультант.
13. Конституция Российской Федерации (принята на всенародном голосовании 12 декабря 1993 г.).
14. Федеральный закон от 17.07.1999 N 181-ФЗ "Об основах охраны труда в Российской Федерации" (ред. от 09.05.2005, с изм. от 26.12.2005) // СПС Консультант.
15. Федеральный закон Российской Федерации от 28 декабря 2013 г. N 426-ФЗ "О специальной оценке условий труда".
16. Межгосударственный стандарт ГОСТ 12.0.230-2007 «Система стандартов безопасности труда. Система управления охраной труда. Общие требования.ILO-OSH2001».
17. Приказ от 12апреля 2011г. N 302н “Об утверждении перечня вредных и(или)опасных производственных факторов и работ, при выполнении которых проводятся предварительные и периодические медицинские осмотры (обследования),и порядка проведения обязательных предварительных и периодических медицинских осмотров(обследований) работников, занятых на тяжелых работах с вредными и (или) опасными условиями труда”.

18. Приказ Министерства здравоохранения и социального развития РФ от 16 февраля 2009 г. N 45 "Об утверждении норм и условий бесплатной выдачи работникам, занятым на работах с вредными условиями труда, молока или других равноценных пищевых продуктов, Порядка осуществления компенсационной выплаты в размере, эквивалентном стоимости молока или других равноценных пищевых продуктов, и Перечня вредных производственных факторов, при воздействии которых в профилактических целях рекомендуется употребление молока или других равноценных пищевых продуктов"

19. Приказ Министерства здравоохранения и социального развития РФ от 17 декабря 2010 г. N 1122н "Об утверждении типовых норм бесплатной выдачи работникам смывающих и (или) обезвреживающих средств и стандарта безопасности труда "Обеспечение работников смывающими и (или) обезвреживающими средствами"

20. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы: санитарно-эпидемиологические правила и нормативы СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03: утверждены Главным государственным санитарным врачом Российской Федерации 13 июня 2003 г. № 118 г. Москва.

21. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки: санитарные нормы СН 2.2.4/2.1.8.562-96 утверждены Постановлением Госкомсанэпиднадзора России 31 октября 1996 г. № 36. Москва.

22. Производственная вибрация, вибрация в помещениях жилых и общественных зданий: санитарные нормы СН 2.2.4/2.1.8.566-96: утверждены Постановлением Госкомсанэпиднадзора России от 31 октября 1996 г. № 40. Москва.

23. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений: санитарно-эпидемиологические правила и нормативы СанПиН

2.2.4.548-96: утверждены Постановлением Госкомсанэпиднадзора России от 1 октября 1996 г., № 21. Москва.

24. Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны: гигиенические нормативы ГН 2.2.5.1313-03: утверждены главным государственным санитарным врачом РФ 27.04.2003. Москва.

25. Гигиенические требования к аэроионному составу воздуха производственных и общественных помещений: санитарно-эпидемиологические правила и нормативы СанПиН 2.2.4.1294-03: утверждены Главным государственным санитарным врачом Российской Федерации 18 апреля 2003г. Москва.

26. Правила по охране труда при эксплуатации электроустановок; приказ Минтруда России от 24.07.2013 N 328н, зарегистрировано в Минюсте России 12.12.2013 N 30593.

27. Федеральный закон от 23 февраля 2013 г. N 15-ФЗ "Об охране здоровья граждан от воздействия окружающего табачного дыма и последствий потребления табака".

28. Федеральный закон Российской Федерации от 28 декабря 2013 г. N 426-ФЗ «О специальной оценке условий труда».

29. Федеральный закон от 22.07.2008 N 123-ФЗ (ред. от 13.07.2015) "Технический регламент о требованиях пожарной безопасности".

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Состав продуктов СФТ, % масс., при расходе 300 мл/мин

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Расчетные значения предэкспоненциальных множителей

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Программа расчета выхода продуктов синтеза Фишера-Тропша на ультрадисперсном железосодержащем катализаторе в среде Pascal