



دانشگاه سیستان و بلوچستان
تحصیلات تکمیلی

پایان نامه کارشناسی ارشد در مهندسی شیمی - سینتیک و ترمودینامیک

عنوان:

مدلسازی سینتیکی واکنش فیشر-تروپش روی

کاتالیست آهن-پلاتین/آلومینا

تهیه شده به روش تلقیح

استاد راهنما:

دکتر حسین آتشی

استاد مشاور:

دکتر علی اکبر میرزایی

تحقیق و نگارش:

ستار پروین

(این پایان نامه از حمایت مالی معاونت پژوهشی دانشگاه سیستان و بلوچستان بهره‌مند شده است)

دی ماه ۱۳۹۰

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

بسمه تعالی

این پایان نامه با عنوان مدل‌سازی واکنش فیشر- تروپش روی کاتالیست آهن-پلاتین/آلومینا تهیه شده به روش تلقیح قسمتی از برنامه آموزشی دوره کارشناسی ارشد مهندسی شیمی توسط دانشجو ستار پروین تحت راهنمایی استاد پایان نامه دکتر حسین آتشی تهیه شده است. استفاده از مطالب آن به منظور اهداف آموزشی با ذکر مرجع و اطلاع کتبی به حوزه تحصیلات تکمیلی دانشگاه سیستان و بلوچستان مجاز می‌باشد.

ستار پروین

این پایان نامه ۶ واحد درسی شناخته می‌شود و در تاریخ ... توسط هیئت داوران بررسی و درجه ... به آن تعلق گرفت.

نام و نام خانوادگی	امضاء	تاریخ
استاد راهنما:	دکتر حسین آتشی	
داور ۱:	دکتر محمد خرم	
داور ۲:	دکتر مرتضی زیودار	

نماینده تحصیلات تکمیلی:

تعهدنامه اصالت اثر

اینجانب ستار پروین تعهد می‌کنم که مطالب مندرج در این پایان نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است و به دستاوردهای پژوهشی دیگران که در این نوشته از آن استفاده شده است مطابق مقررات ارجاع گردیده است. این پایان نامه پیش از این برای احراز هیچ مدرک هم سطح یا بالاتر ارائه نشده است. کلیه حقوق مادی و معنوی این اثر متعلق به دانشگاه سیستان و بلوچستان می‌باشد.

نام و نام خانوادگی دانشجو: ستار پروین

امضاء

تقدیم بہ فداکار ترین حقیقت زندگی

مادر م

از استاد محترم جناب دکتر حسین آتشی تشکر می‌کنم.

چکیده

سنتز فیشر تروپش یک فرآیند کاتالیستی است که در آن گاز سنتز (مخلوط CO, H_2) در مجاورت کاتالیست به هیدروکربن‌های مختلف تبدیل می‌شود. بررسی جنبه‌های سینتیکی واکنش این فرآیند به منظور دستیابی به اطلاعاتی در مورد مکانیسم واکنش و یافتن عبارت سینتیکی معتبر در شرایط واکنش، از اهمیت بالایی برخوردار است. در این پژوهش مکانیسم و سینتیک حاکم بر سنتز فیشر - تروپش روی کاتالیست $20 \text{ wt\% Fe, 1 wt\% Pt/Alumina}$ تهیه شده به روش تلقیح مورد بررسی قرار گرفته است و بهترین معادله سرعت ذاتی و در نتیجه برترین مکانیسم برای واکنش هیدروژناسیون مونوکسید کربن بدست آمده است. معادله‌های سرعت مصرف شدن مونوکسید کربن با مکانیسم‌های مختلفی از کاربرد و انول بررسی شد. برای به دست آوردن معادلات سینتیکی از هر سه مدل توانی، لانگمویر-هینشلوود - هوگن-واتسون و الی-ریدل استفاده شد. با در نظر گرفتن هر یک از مراحل این مکانیسم‌ها به عنوان کنترل کننده سرعت، ۱۱۰ مدل سینتیکی ارائه شده است. با استفاده از آنالیز رگرسیون غیرخطی با الگوریتم لوبنبرگ - مارکوات مدل $-R_{CO} = \frac{K_0 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) P_{CO}^{0.5} P_{H_2}}{(1+a_0 \exp\left(\frac{-\Delta H_a}{RT}\right) P_{CO}^{0.5} + b_0 \exp\left(\frac{-\Delta H_b}{RT}\right) P_{H_2}^{0.5} + c_0 \exp\left(\frac{-\Delta H_c}{RT}\right) P_{CO}^{0.5} P_{H_2}^{0.5})^2}$ به عنوان بهترین مدل انتخاب شد. این مدل براساس تئوری لانگمویر-هینشلوود-هوغن-واتسن و با استفاده از مکانیسم کاربرد به دست آمده است. انرژی فعال‌سازی به دست آمده با این مدل $78/41$ کیلو ژول بر مول می‌باشد که نسبت به مقدار گزارش شده در مرجع $1/83\%$ خطای نسبی دارد. گرمای جذب هیدروژن و مونوکسید کربن به دست آمده با مدل ذکر شده به ترتیب $3/54-$ و $15/15-$ کیلو ژول بر مول می‌باشد.

کلمات کلیدی: فیشر- تروپش، مدل سازی سینتیکی، کاتالیست Fe-Pt/Alumina، رآکتور Berty CSTR

فهرست مطالب

۱	فصل اول: مقدمه و تاریخچه
۲	۱-۱- مقدمه
۴	۲-۱- تاریخچه
۷	۳-۱- اهداف و نوآوری
۷	۴-۱- ترتیب نگارش پایان نامه
۸	فصل دوم: کلیات سنتز فیشر-تروپش
۹	۱-۲- مقدمه
۹	۲-۲- تعریف فیشر تروپش
۱۱	۳-۲- دلایل اهمیت سنتز فیشر تروپش
۱۳	۴-۲- گاز سنتز
۱۴	۲-۴-۱- تبدیل به وسیله بخار آب (MSR methane steam reforming)
۱۵	۲-۴-۲- تبدیل به وسیله دی اکسید کربن (CO ₂ reforming)
۱۵	۲-۴-۳- تولید گاز سنتز به روش اکسیداسیون جزئی غیر کاتالیستی
۱۶	۲-۴-۴- تولید گاز سنتز به روش اکسیداسیون جزئی کاتالیستی
۱۷	۲-۴-۵- تولید گاز سنتز به روش اتوترمال
۱۸	۲-۵-۵- محصول‌های سنتز فیشر تروپش
۲۰	۲-۶-۶- ترمودینامیک
۲۱	۲-۷-۷- کاتالیزور
۲۲	۲-۷-۱- انواع کاتالیزور
۲۵	۲-۷-۲- اجزاء کاتالیست
۳۲	۲-۷-۳- ویژگی‌های عمومی کاتالیزور
۳۷	۲-۷-۴- افت فعالیت کاتالیست
۳۹	۲-۷-۵- روش‌های تهیه کاتالیزور
۴۰	۲-۸-۸- مراحل موجود در یک واکنش کاتالیستی
۴۲	۲-۸-۱- جذب سطحی
۴۶	۲-۸-۲- دفع سطحی (Desorption)
۴۷	۲-۸-۳- نفوذ (Diffusion)
۴۷	۲-۹-۹- گزینش پذیری سنتز فیشر تروپش
۴۹	۲-۹-۱- تأثیر شرایط عملیاتی روی گزینش پذیری
۵۲	۲-۹-۲- محدودیت‌های گزینش پذیری در سنتز فیشر-تروپش
۵۸	۲-۱۰-۱۰- جمع بندی
۵۹	فصل سوم: ساز و کار واکنش فیشر-تروپش و راکتورهای مورد استفاده
۶۰	۳-۱-۱- مقدمه

۶۰	۲-۳- مکانیسم سنتز فیشر- تروپش
۶۵	۳-۳- مکانیسمهای برتر سنتز فیشر- تروپش
۶۶	۳-۳-۱- مکانیسم آلکیل یا کاربید
۶۸	۳-۳-۲- مکانیسم آلکنیل
۶۹	۳-۳-۳- مکانیسم انول
۷۰	۳-۳-۴- مکانیسم کاربید- انول
۷۰	۳-۳-۵- مکانیسم موازی
۷۲	۴-۳- تشکیل هیدروکربنهای شاخه دار
۷۳	۵-۳- مکانیسم واکنش جابجایی گاز- آب (WGS)
۷۵	۳-۶- راکتورهای سنتز فیشر- تروپش
۷۵	۳-۶-۱- راکتور بستر ثابت
۷۷	۳-۶-۲- راکتور بستر متحرک یا بستر در گردش
۷۹	۳-۶-۳- راکتور بستر سیال
۷۹	۳-۶-۴- راکتورهای دوغابی یا سه فازی
۸۱	۳-۶-۵- راکتورهای کوچک (میکرو راکتورها)
۸۲	۳-۷- مقایسه راکتورهای آزمایشی با یکدیگر
۸۴	۳-۸- جمع بندی
۸۵	فصل چهارم: سینتیک واکنشهای فیشر- تروپش
۸۶	۴-۱- مقدمه
۸۷	۴-۲- تبدیل کلی گاز سنتز
۸۹	۴-۳- کاتالیستهای بر اساس کبالت
۹۲	۴-۴- کاتالیستهایی بر اساس آهن
۹۷	۴-۵- واکنش جابجایی گاز- آب
۱۰۰	۴-۶- مدل‌های سینتیکی برای واکنش شیفت گاز آب
۱۰۵	۴-۷- سرعت تولید هیدروکربن
۱۰۸	۴-۸- جمع بندی
۱۰۹	فصل پنجم: روش‌های تجربی تعیین سرعت واکنش‌های کاتالیستی
۱۱۰	۵-۱- مقدمه
۱۱۰	۵-۲- راکتور دیفرانسیلی
۱۱۱	۵-۳- راکتور انتگرال
۱۱۲	۵-۴- راکتور مخلوط کننده
۱۱۳	۵-۵- راکتور مخلوط کننده دوره‌ای
۱۱۴	۵-۶- راکتور ناپیوسته
۱۱۵	۵-۷- جمع بندی
۱۱۶	فصل ششم: تعیین سینتیک‌های ذاتی واکنش
۱۱۷	۶-۱- مقدمه
۱۱۷	۶-۲- مدل‌های سینتیکی واکنش‌های گاز- جامد

۱۱۷.....	۱-۲-۶- مدل توانی (Power law)
۱۱۸.....	۲-۲-۶- مدل سینتیکی LHHW
۱۱۸.....	۳-۲-۶- مدل سینتیکی Elay-Rideal
۱۱۹.....	۳-۶- فواید و مضرات استفاده از مدل های سینتیکی ساده تجربی
۱۲۰.....	۴-۶- جمع بندی
۱۲۱.....	فصل هفتم: تحلیل داده های آزمایشگاهی و تعیین مدل های سینتیکی سرعت
۱۲۲.....	۱-۷- مقدمه
۱۲۲.....	۲-۷- ساخت کاتالیست
۱۲۲.....	۱-۲-۷- اضافه کردن لاتتانیوم به ساپورت
۱۲۳.....	۲-۲-۷- تهیه مونولیت
۱۲۳.....	۳-۲-۷- تعیین ترکیب محلول دوغابی
۱۲۴.....	۴-۲-۷- اضافه کردن ماده چسبنده
۱۲۵.....	۵-۲-۷- پوشش دهی مونولیت
۱۲۶.....	۶-۲-۷- تلقیح کاتالیست
۱۲۶.....	۷-۲-۷- تعیین حجم خلل و فرج
۱۲۷.....	۳-۷- واحد آزمایشگاهی
۱۳۲.....	۴-۷- سیستم جذب شیمیایی هیدروژن
۱۳۲.....	۵-۷- آنالیز کننده مساحت سطح BET
۱۳۲.....	۶-۷- دمای برنامه ریزی شده احیاء (TPR)
۱۳۶.....	۷-۷- دیدگاه های مکانیسمی
۱۳۸.....	۸-۷- معادلات سینتیکی
۱۴۱.....	۹-۷- ضوابط و معیارهای آماری به کار گرفته شده برای رگرسیون غیرخطی با نرم افزار پلی مٹ
۱۴۱.....	۱-۹-۷- شاخص ها
۱۴۲.....	۲-۹-۷- نمودارها
۱۴۲.....	۱۰-۷- تحلیل داده های جدول و تعیین بهترین مدل ها با استفاده از نرم افزار پلی مٹ
۱۴۳.....	۱۱-۷- ارائه مدل به صورت سینتیک مدل توانی
۱۵۳.....	۱۲-۷- انتخاب بهترین مدل
۱۵۶.....	۱۳-۷- جمع بندی
۱۵۷.....	فصل هشتم: نتیجه گیری و پیشنهادات
۱۵۸.....	۱-۸- نتیجه گیری
۱۵۹.....	۲-۸- پیشنهاداتی برای آینده
۱۶۰.....	مراجع
۱۶۹.....	پیوست ها
۱۷۰.....	پیوست (الف): جدول معادلات سینتیکی
۱۸۰.....	پیوست (ب): جدول مقادیر پارامترهای به دست آمده با نرم افزار پلی مٹ
۱۸۷.....	پیوست (ج): جدول 95% confidence ضرایب
۱۹۴.....	پیوست (د): آشنائی با نرم افزار پلی مٹ (Poly Math)

پیوست (ه) : اثبات ۱۰ نمونه از مدل‌های پیشنهادی ۱۹۵

پیوست (و) : شکل‌های پنج مدل برگزیده از مدل‌های بررسی شده ۲۰۷

فهرست جدول‌ها

- جدول ۱-۱. روند تکامل و سنتز فیشر تروپش ۶
- جدول ۲-۱. ترکیب کاتالیست های کبالت چند شرکت نفتی ۲۴
- جدول ۲-۲. عملکرد پنج زوج مختلف کاتالیست کبالت ۲۴
- جدول ۲-۳. قیمت نسبی فلزات برای سنتز فیشر تروپش در سال ۲۰۰۴ ۲۵
- جدول ۲-۴. ساپورت های اکسیدی با نقطه ذوب بالا ۲۹
- جدول ۲-۵. مثال هایی از پروموتورها در فرآیندهای مهم ۳۱
- جدول ۲-۶. دسته بندی فلزات بر حسب قابلیت جذب شیمیایی آنها برای گازهای مختلف ۳۴
- جدول ۲-۷. اثر شرایط عملیاتی روی توزیع محصولات سنتز فیشر- تروپش ۵۷
- جدول ۳-۱. واکنش های اساسی برای تشکیل هیدروکربن های خطی ۶۱
- جدول ۴-۱. مطالعات سینتیکی برای کاتالیست های کبالت و آهن فیشر- تروپش ۸۸
- جدول ۴-۲. عبارت های سینتیکی برای کاتالیست های کبالت، خلاصه شده به وسیله Zenaro و همکاران. . ۹۲
- جدول ۴-۳. عبارت های سینتیکی خلاصه شده واکنش مصرف گاز سنتز روی کاتالیست آهن. ۹۳
- جدول ۴-۴. عبارت های سینتیکی برای کاتالیست آهن ۹۴
- جدول ۴-۵. عبارت های سینتیکی خلاصه شده واکنش شیفت آب-گاز توسط محققین ۱۰۴
- جدول ۴-۶. خلاصه ای از مطالعات سینتیکی انجام شده روی واکنش WGS ۱۰۴
- جدول ۷-۱. ترکیب ماده دوغابی تکرار شده در سه بار ۱۲۴
- جدول ۷-۲. نتایج مونولیت پوشش دهی شده ۱۲۵
- جدول ۷-۳. نتایج تلفیح کاتالیست ۱۲۷
- جدول ۷-۴. پروفایل احیاء بر اساس TPR برای کاتالیست استفاده شده در داده های تجربی ۱۳۴
- جدول ۷-۵. داده های آزمایشگاهی با کاتالیست 20 wt% Fe, 1 wt% Pt/Alumina ۱۳۵

- جدول ۷-۶. مکانیسم‌های پیشنهادی ۱۳۷
- جدول ۷-۷. مقادیر 95% confidence پارامترهای مدل توانی ۱۴۴
- جدول ۷-۸. پارامترهای آماری مدل‌ها به دست آمده از نرم افزار پلی مٹ ۱۴۷
- جدول ۷-۹. دلایل رد کردن مدل‌ها ۱۵۰
- جدول ۷-۱۰. مقایسه شش مدل برتر ۱۵۳

فهرست شکل‌ها

- شکل ۱-۱. نمای کلی از فرآیند GTL..... ۳
- شکل ۱-۲. نمایی از کاربرد فرآیند فیشر تروپش ۱۰
- شکل ۲-۲. تغییرات قیمت نفت خام در بازه زمانی ۲۰۰۹-۱۹۷۳ میلادی ۱۱
- شکل ۲-۳. تغییرات قیمت نفت بر حسب دلار بر هر بشکه برای تگزاس غربی ۱۱
- شکل ۲-۴. ذخایر نفت و گاز طبیعی بر حسب 10^9 تن ۱۲
- شکل ۲-۵. توزیع جغرافیایی منابع گاز طبیعی در مقابل مصرف گاز طبیعی در سال ۱۹۹۹ ۱۲
- شکل ۲-۶. کاربرد گاز سنتز در فرآیندهای مختلف کاتالیستی ۱۳
- شکل ۲-۷. راکتور تبدیل متان به گاز سنتز ۱۵
- شکل ۲-۸. راکتور اکسایش جزئی متان ۱۶
- شکل ۲-۹. راکتور اتو ترمال ۱۷
- شکل ۲-۱۰. توزیع محصولات با کاتالیست آهن ۱۹
- شکل ۲-۱۱. توزیع محصولات با کاتالیست کبالت ۱۹
- شکل ۲-۱۲. مثالی از توزیع محصولات فیشر-تروپش در واحد صنعتی اتریش ۲۰
- شکل ۲-۱۳. انرژی آزاد گیبس تابعی از دمای واکنش برای محصولات مختلف FT ۲۱
- شکل ۲-۱۴. مکانیسم‌های غیر فعال شدن کاتالیست ۳۸
- شکل ۲-۱۵. جذب سطحی فیزیکی ، جذب سطحی شیمیایی ۴۳
- شکل ۲-۱۶. گرمای جذب هیدروژن و کربن مونوکسید بر روی برخی فلزات ۴۴
- شکل ۲-۱۷. گزینش پذیری کلی روی CO/TiO_2 ۴۸
- شکل ۲-۱۸. نسبت اولفین به پارافین روی کاتالیست CO/TiO_2 ، Ru/SiO_2 و $Fe/cu/k$ ۴۹
- شکل ۲-۱۹. اثر زمان اقامت در گزینش پذیری تعدادی از هیدروکربن‌ها ۵۱
- شکل ۲-۲۰. شرایط بهینه عملیاتی هیدروژناسیون منو کسید کربن به وسیله انواع کاتالیست ها ۵۲
- شکل ۲-۲۱. رشد تدریجی فرآیند FT ۵۵

- شکل ۲-۲۲. گزینش پذیری هیدروکربن به عنوان تابعی از فاکتور احتمال رشد زنجیر (α) ۵۵
- شکل ۲-۲۳. توزیع محصولات تئوری به صورت تابعی از احتمال رشد زنجیر (α) بر طبق مدل ASF ۵۶
- شکل ۲-۲۴. توزیع محصولات با ASF ۵۶
- شکل ۲-۲۵. توزیع محصولات تجربی کاتالیست CO/TiO_2 ۵۷
-
- شکل ۳-۱. مکانیسم پیشنهادی برای سنتز فیشر- تروپش توسط یک حد واسط هیدرو کسی متیلن ۶۲
- شکل ۳-۲. مکانیسم فیشر- تروپش شامل وارد شدن CO ۶۲
- شکل ۳-۳. واکنش قطعات CH_2 روی سطح فلز ۶۳
- شکل ۳-۴. مکانیسم پلیمریزاسیون CH_2 جذب شده ۶۴
- شکل ۳-۵. مرحله انتهایی پلیمریزاسیون روی سطح فلز ۶۴
- شکل ۳-۶. مکانیسم سنتز آلکن ۶۵
- شکل ۳-۷. مکانیسم آلکیل مربوط به شروع و رشد زنجیر هیدروکربنی ۶۷
- شکل ۳-۸. مکانیسم آلکیل مربوط به پایان زنجیر هیدروکربنی ۶۷
- شکل ۳-۹. مکانیسم آلکنیل ۶۸
- شکل ۳-۱۰. مکانیسم انول ۶۹
- شکل ۳-۱۱. مکانیسم کاربید-انول (الحاق CO) ۷۰
- شکل ۳-۱۲. واکنش‌های محتمل جذب مجدد اولفین‌ها ۷۲
- شکل ۳-۱۳. تشکیل هیدروکربن‌های شاخه دار ۷۲
- شکل ۳-۱۴. مکانیسم واکنش جابجایی گاز- آب بر اساس حد واسط فرمات ۷۴
- شکل ۳-۱۵. مکانیسم واکنش جابجایی گاز- آب بر اساس اکسیداسیون مستقیم ۷۵
- شکل ۳-۱۶. راکتور بستر ثابت چند لوله‌ای ۷۶
- شکل ۳-۱۷. راکتور بستر متحرک ۷۸
- شکل ۳-۱۸. راکتور بستر سیال ۷۹
- شکل ۳-۱۹. راکتور دوغابی ۸۰
- شکل ۳-۲۰. میکرو راکتور بستر ثابت ۸۲

- شکل ۳-۲۱. میکرو راکتور دوغابی ۸۲
- شکل ۳-۲۲. میکرو راکتور سبد چرخشی ۸۴
- شکل ۴-۱. فرایند کاتالیستی واکنش شیفیت گاز-آب ۹۸
- شکل ۴-۲. واکنش شیفیت گاز آب از طریق اجزاء فرمئات ۱۰۱
- شکل ۴-۳. واکنش شیفیت گاز آب از طریق اکسیداسیون مستقیم ۱۰۲
- شکل ۴-۴. مدل رشد زنجیر روی کاتالیست Co بدست آمده از کومایا و بل ۱۰۸
- شکل ۵-۱. مشخصات راکتور مخلوط کننده سبدي شکل آزمایشی ۱۱۳
- شکل ۵-۲. الف: راکتور برتی ب: راکتور دوره‌ای جریان برگشتی بیرونی ۱۱۴
- شکل ۵-۳. راکتور ناپیوسته (توده‌ای از کاتالیزور و توده‌ای از سیال) ۱۱۴
- شکل ۷-۱. راکتور Berty ۱۳۰
- شکل ۷-۲. برش جانبی از راکتور ۱۳۱
- شکل ۷-۳. Trap محصولات ۱۳۱
- شکل ۷-۴. طیف دمایی برنامه ریزی شده احیاء برای کاتالیست 15 wt% Fe, 1 wt% Pt/Alumina ۱۳۳
- شکل ۷-۵. نمودار میزان تطابق داده‌های تجربی و محاسباتی مدل توانی ۱۴۴
- شکل ۷-۶. نمودار میزان انحراف داده‌های تجربی از داده‌های محاسباتی مدل توانی ۱۴۵
- شکل ۷-۷. پراکندگی (محاسباتی - R تجربی) حول نقطه‌ی صفر برای مدل توانی (نمودار Residual plot). ۱۴۵
- شکل ۷-۸. نمودار میزان تطابق داده‌های تجربی و محاسباتی برای مدل FT-1-12 ۱۵۴
- شکل ۷-۹. نمودار میزان انحراف داده‌های تجربی از داده‌های محاسباتی مدل FT-1-12 ۱۵۵
- شکل ۷-۱۰. پراکندگی (محاسباتی - R تجربی) حول نقطه‌ی صفر FT-1-12 (نمودار Residual plot). ۱۵۵

فهرست علائم انگلیسی

نشانه	علامت
فلز کبالت	Co
انرژی فعالسازی واکنش	$E_a(j/mol.k)$
آهن	Fe
سنتز دما بالا	HTFT
ثابت سرعت واکنش	k
ثابت رابطه آرنیوس	k_o
ثابت تعادلی واکنش مرحله i	K_i
سنتز دما پایین	LTFT
تعداد متوسط اتم‌های هیدروژن	m
فلز منگنز	Mn
تعداد متوسط اتم‌های کربن	n
تعداد آزمایشات	n
فلز نیکل	Ni
تعداد مول جزء	N_i
فشار کل وارد بر سیستم	P(atm)
i فشار جزئی	P_i
ثابت عمومی گازها	R(j/mol.k)
سرعت مصرف گاز مونوکسیدکربن	$-R_{CO}(mol/gr.min)$
سرعت واکنش بر حسب جزء i	R_i
فلز روتنیوم	Ru
مربع ضریب همبستگی رگرسیون	R^2

مربع ضریب همبستگی مطلق رگرسیون	R^2_{adj}
میانگین ریشه مربعات خطا	Rmsd
سرعت واکنش جزء i بر حسب حجم سیال	r_i
سرعت واکنش جزء i بر حسب وزن کاتالیست	r_{wi}
سطح فعال کاتالیست	S
پراکندگی	S^2
دما	$T(K)$
وزن کاتالیست	$w(gr)$
درجه‌ی تبدیل گاز مونوکسیدکربن	X_{CO}
مقدار محاسبه شده از مدل سینتیکی برای جزء	Y_{ical}
مقدار آزمایش تجربی اندازه‌گیری شده	Y_{iobs}
مقدار متوسط آزمایشات	\bar{Y}

فهرست علائم یونانی

نشانه	علامت
شامل گونه‌های هیدروژن، کربن و ... جذب شده بر سطح کاتالیست	θ_s, θ
کسر مکان‌های خالی	θ_s
کسرهای سطحی اشغال شده با گونه‌های جذب شده مانند کربن ...	θ_{is}
آنتالپی جذب	$\Delta H(j/mol.k)$

فصل اول

مقدمه و تاریخچه