

سورة الاحقاف



دانشگاه کردستان

دانشکده علوم

گروه شیمی

عنوان:

تخریب فوتوکاتالیزی رنگ‌های آنیونی و کاتیونی با استفاده از نانوذرات TiO_2 و
نانوکامپوزیت TiO_2/CdS

پژوهشگر:

آذین اسفندیاری

استاد راهنما:

دکتر سجاد محبی

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش معدنی

دی ماه ۱۳۹۲

کلیه حقوق مادی و معنوی مترتب بر نتایج مطالعات،

ابتکارات و نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع

این پایان نامه (رساله) متعلق به دانشگاه کردستان است.

*** تعهد نامه ***

اینجانب آذین اسفندیاری دانشجوی کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش معدنی دانشگاه کردستان، دانشکده علوم گروه شیمی تعهد می نمایم که محتوای این پایان نامه نتیجه تلاش و تحقیقات خود بوده و از جایی کپی برداری نشده و به پایان رسانیدن آن نتیجه تلاش و مطالعات مستمر اینجانب و راهنمایی و مشاوره اساتید بوده است.

با تقدیم احترام

آذین اسفندیاری

۱۳ / /



دانشگاه کردستان

دانشکده علوم

گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش معدنی

عنوان:

تخریب فوتوکاتالیزی رنگ‌های آنیونی و کاتیونی با استفاده از نانوذرات TiO_2 و

نانوکامپوزیت TiO_2/CdS

پژوهشگر:

آذین اسفندیاری

در تاریخ / / ۱۳ توسط کمیته تخصصی و هیات داوران زیر مورد بررسی قرار گرفت و با نمره و درجه به تصویب رسید.

<u>امضاء</u>	<u>مرتبۀ علمی</u>	<u>نام و نام خانوادگی</u>	<u>هیات داوران</u>
	دانشیار	دکتر سجاد محبی	۱- استاد راهنما
	استادیار	دکتر مهدی ایرانی	۲- استاد مشاور
	دانشیار	دکتر روشن خوشنوازی	۳- استاد داور داخلی
	دانشیار	دکتر محمد قادرمرزی	۴- استاد داور داخلی

مهر و امضاء معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی دانشکده

مهر و امضاء گروه

تقدیم بہ پدرم بہ استواری کوه، مادرم بہ زلالی چشمہ

کہ تمام ہستی ام را از آمان دارم...

کمال تشکر را از استاد راهنمای کراتقدم جناب آقای دکتر محبی بابت تلاش‌های بی‌دریغشان در به‌ثمر نشستن این پایان‌نامه را دارم. همچنین از خانواده مهربانم که تکیه‌گاه استوارم در تمام مراحل زندگی بوده‌اند و همه دانشجویان آزمایشگاه‌های تحقیقاتی شیمی دانشگاه کردستان که بدون کمکشان طی کردن این مسیر بسی دشوار بود، تشکر می‌کنم.

چکیده

در این پژوهش حذف ترکیبات رنگی کاتیونی و آنیونی ۴-آمینوآزو بنزن، متیل اورانژ و رودامین-ب که از جمله آلودگی‌های محلول در آب به شمار می‌آیند از طریق "تخریب فوتوکاتالیزی" با استفاده از نانوکامپوزیت TiO_2/CdS و نانوذره TiO_2 در حلال آب تحت پرتودهی ماوراء بنفش انجام شد. علاوه بر این ثابت‌های سرعت و تناوب چرخه^۱ (TOF) واکنش‌های تخریب فوتوکاتالیزی مورد مطالعه قرار گرفت.

نانوذره TiO_2 از هیدرولیز TiCl_4 تحت تاثیر سولفوریک اسید و نانوکامپوزیت TiO_2/CdS از نشانند CdS روی سطح نانوذره TiO_2 از روش ترسیب شیمیایی تک منبعی تهیه شدند. اندازه نانوذرات TiO_2 ۶-۹ نانومتر و نانوکامپوزیت TiO_2/CdS ۲۶-۳۰ نانومتر اندازه‌گیری شد. واکنش‌های تخریب فوتوکاتالیزی در محلول آبی نانوذرات (۰/۱۲۵، ۰/۰۹ و ۰/۱۶ گرم بر لیتر) در pH های ۵، ۷ و ۹ تحت پرتودهی ماوراء بنفش انجام شد.

شرایط بهینه آزمایش در pH=۷ در مدت زمان ۶۰ دقیقه پرتودهی برای متیل اورانژ در حضور نانوذرات تیتانیم دی اکسید با بازده تخریب ۷۳ درصد بدست آمد در حالی که در شرایط یکسان در حضور نانوکامپوزیت تیتانیم دی اکسید/کادمیم سولفید بازده تخریب ۸۱ درصد بدست آمد. شرایط تخریب محلول ۴-آمینو آزو بنزن در pH=۵ در مدت زمان واکنش ۴۰ دقیقه در حضور نانو ذرات تیتانیم دی اکسید با بازده تخریب ۷۸ درصد بدست آمد در حالی که در حضور نانوکامپوزیت بازده تخریب ۹۰ درصد بدست آمد. واکنش کاتالیزی یکسان برای رودامین-ب در pH بهینه با بازده تخریب ۹۱ و ۹۷ درصد به ترتیب در حضور نانوذرات تیتانیم دی اکسید و نانوکامپوزیت تیتانیم دی اکسید/کادمیم سولفید انجام شد. نتایج نشانگر کارایی بالاتر نانوکامپوزیت تیتانیم دی اکسید/کادمیم سولفید در تخریب فوتوکاتالیزی نسبت به نانوذرات تیتانیم دی اکسید است.

ترکیب رنگی ۴-آمینو آزو بنزن در حضور نانوکامپوزیت تیتانیم دی اکسید/کادمیم سولفید مقدار TOF $18 \times 10^{-4} \text{ min}^{-1}$ دارد که در حضور نانوذرات تیتانیم دی اکسید خالص مقدار $3/5 \times 10^{-4} \text{ min}^{-1}$ بدست آمد.

کلمات کلیدی: نانوذره، نانوکامپوزیت، تخریب فوتوکاتالیزی، ترکیبات رنگی، ثابت سرعت، تناوب چرخه (TOF)

^۱Turnover Frequency

فهرست مطالب

عنوان صفحه

فصل اول: بررسی منابع	۱
۱-۱ مقدمه	۱
۲-۱ کاتالیزگر و فرایند کاتالیز	۲
۳-۱ عملکرد کاتالیزگر	۳
۱-۳-۱ فعالیت	۴
۲-۳-۱ انتخاب پذیری	۴
۳-۳-۱ پایداری	۵
۴-۱ دسته‌بندی کاتالیزگرها	۶
۱-۴-۱ زیست کاتالیزگرها	۷
۲-۴-۱ کاتالیزگرهای همگن	۸
۳-۴-۱ کاتالیزگرهای ناهمگن	۸
۵-۱ مقدمه‌ای بر نانوکاتالیز	۱۰
۱-۵-۱ سنتز نانوکاتالیزگرهای فعال	۱۲
۲-۵-۱ اثر اندازه	۱۳
۳-۵-۱ اثر شکل	۱۷
۴-۵-۱ اثر ترکیب شدن	۱۸
۶-۱ نانوفوتوکاتالیزگرها	۲۱
۱-۶-۱ مبانی فوتوکاتالیزگری نیمه‌هادی‌ها	۲۱

۲۳.....	۱-۶-۲ تاریخ مواد فوتوکاتالیزی
۲۴.....	۱-۶-۳ مهندسی نوار انرژی
۲۴.....	۱-۶-۳-۱ تنظیم پیوسته نوار ظرفیت و یا نوار هدایت
۲۶.....	۱-۷ فرصت‌ها و چالش‌های اصلی
۲۸.....	۱-۸ اهداف پایان‌نامه
۲۹.....	فصل دوم: عملیات آزمایشگاهی
۲۹.....	۲-۱ مقدمه
۳۰.....	۲-۲ مواد مورد استفاده
۳۰.....	۲-۳ مشخصات دستگاه‌ها و تجهیزات به کار رفته در تولید، شناسایی و کاربرد نانوذرات
۳۰.....	۲-۴ تهیه نانوذرات تیتانیم دی‌اکسید آناز
۳۱.....	۲-۵ تهیه نانوکامپوزیت TiO_2/CdS
۳۲.....	۲-۵-۱ تهیه پیش‌ماده CdS
۳۲.....	۲-۵-۲ جفت کردن CdS با TiO_2
۳۳.....	۲-۶ بررسی اثر pH در تخریب فوتوکاتالیزی متیل اورانژ
۳۴.....	۲-۷ بررسی اثر غلظت فوتوکاتالیزگر در تخریب فوتوکاتالیزی متیل اورانژ
۳۵.....	۲-۸ بررسی اثر نوع فوتوکاتالیزگر در تخریب فوتوکاتالیزی متیل اورانژ
۳۶.....	۲-۹ بررسی اثر pH در تخریب فوتوکاتالیزی ۴-آمینو آزو بنزن
۳۷.....	۲-۱۰ بررسی اثر غلظت فوتوکاتالیزگر در تخریب فوتوکاتالیزی ۴-آمینو آزو بنزن
۳۸.....	۲-۱۱ بررسی اثر نوع فوتوکاتالیزگر در تخریب فوتوکاتالیزی ۴-آمینو آزو بنزن
۳۹.....	۲-۱۲ بررسی اثر pH در تخریب فوتوکاتالیزی رودامین-ب توسط نانوذرات TiO_2

۴۰	۱۳-۲ بررسی اثر غلظت فوتوکاتالیزگر در تخریب فوتوکاتالیزی رودامین-ب
۴۱	۱۴-۲ بررسی اثر نوع فوتوکاتالیزگر در تخریب فوتوکاتالیزی رودامین-ب
۴۳	فصل سوم: نتایج و بحث
۴۳	۱-۳ مقدمه
۴۴	۲-۳ بررسی نتایج به دست آمده از شناسایی نانوذرات تیتانیم دی اکسید آناز
۴۶	۳-۳ بررسی نتایج به دست آمده از شناسایی نانوکامپوزیت TiO_2/CdS
۴۹	۴-۳ مشخصات راکتور و شرایط انجام واکنش فوتوکاتالیزی
۴۹	۵-۳ تحلیل تاثیر pH در بازده تخریب فوتوکاتالیزی توسط نانوذرات تیتانیم دی اکسید
۵۰	۱-۵-۳ بررسی تخریب فوتوکاتالیزی متیل اورانژ
۵۲	۲-۵-۳ بررسی تخریب فوتوکاتالیزی ۴-آمینو آزو بنزن
۵۳	۳-۵-۳ بررسی تخریب فوتوکاتالیزی رودامین-ب
۵۴	۶-۳ تحلیل تاثیر غلظت تیتانیم دی اکسید در بازده تخریب فوتوکاتالیزی
۵۴	۱-۶-۳ بررسی تخریب فوتوکاتالیزی متیل اورانژ
۵۵	۲-۶-۳ بررسی تخریب فوتوکاتالیزی ۴-آمینو آزو بنزن
۵۷	۳-۶-۳ بررسی تخریب فوتوکاتالیزی رودامین-ب
۵۸	۷-۳ تحلیل اثر نوع فوتوکاتالیزگر در بازده تخریب فوتوکاتالیزی
۵۸	۱-۷-۳ بررسی تخریب فوتوکاتالیزی متیل اورانژ
۵۹	۲-۷-۳ بررسی تخریب فوتوکاتالیزی ۴-آمینو آزو بنزن
۶۰	۳-۷-۳ بررسی تخریب فوتوکاتالیزی رودامین-ب
۶۱	۸-۳ محاسبات ثابت سرعت واکنش های تخریب فوتوکاتالیزی

- ۳-۸-۱ اثر pH بر ثابت سرعت تخریب فوتوکاتالیزی ترکیبات رنگی ۶۴
- ۳-۸-۲ اثر غلظت فوتوکاتالیزگر بر تخریب فوتوکاتالیزی ترکیبات رنگی ۶۵
- ۳-۸-۳ اثر نوع فوتوکاتالیزگر بر تخریب فوتوکاتالیزی ترکیبات رنگی ۶۶
- ۳-۹ محاسبات تناوب چرخه (TOF) ۶۶
- ۳-۹-۱ اثر pH بر TOF تخریب فوتوکاتالیزی ترکیبات رنگی ۶۷
- ۳-۹-۲ اثر غلظت فوتوکاتالیزگر بر TOF تخریب فوتوکاتالیزی ترکیبات رنگی ۶۸
- ۳-۹-۳ اثر نوع فوتوکاتالیزگر بر TOF تخریب فوتوکاتالیزی ترکیبات رنگی ۶۸
- ۳-۱۰ نتیجه گیری ۷۰
- فهرست منابع ۷۲

فهرست اشکال

صفحه	عنوان
۲	شکل ۱-۱: نمودار انرژی پتانسیل واکنش کاتالیزی
۳	شکل ۲-۱: چرخه کاتالیزی
۷	شکل ۳-۱: چرخه کاتالیزی زیست کاتالیزگرها
۹	شکل ۴-۱: نمودار انرژی پتانسیل و چرخه واکنش کاتالیزی اکسیداسیون CO
۱۲	شکل ۵-۱: سرعت تشکیل CO ₂ در حضور نانو ساختارهای متفاوت طلا
۱۴	شکل ۶-۱: مدل ارائه شده فعالیت کاتالیزی برای اکسایش CO
۱۴	شکل ۷-۱: تاثیر اندازه کلاستر بر فاصله انرژی
۱۵	شکل ۸-۱: تاثیر اندازه نانوذرات طلا در اکسیداسیون الکتروکاتالیزی CO
۱۶	شکل ۹-۱: تفاوت انرژی اتصال مکان‌های پله و تراس
۱۸	شکل ۱۰-۱: تصاویر TEM و نمودار سرعت واکنش پذیری کریستال‌هایی با شاخص‌های وجوه متفاوت
۲۰	شکل ۱۱-۱: تاثیر موقعیت مرکز نوار d نسبت به سطح فرمی در واکنش‌پذیری کاتالیزگرهای ساندویچی
۲۲	شکل ۱۲-۱: چرخه فوتوکاتالیزی
۲۷	شکل ۱۳-۱: موقعیت‌های لبه-نوار فوتوکاتالیزگرهای نیمه‌هادی
۴۵	شکل ۱-۳: طیف FT-IR نانوذرات تیتانیم دی‌اکسید
۴۵	شکل ۲-۳: طیف DRS نانوذرات تیتانیم دی‌اکسید
۴۶	شکل ۳-۳: تصویر TEM نانوذرات تیتانیم دی‌اکسید
۴۷	شکل ۴-۳: طیف DRS نانوکامپوزیت TiO ₂ /CdS
۴۸	شکل ۵-۳: طیف EDX نانوکامپوزیت TiO ₂ /CdS

- شکل ۳-۶: تصویر SEM نانوکامپوزیت TiO_2/CdS ۴۹
- شکل ۳-۷: ساختار سه ترکیب ۴-آمینو آزو بنزن، متیل اورانژ و رودامین-ب ۵۰
- شکل ۳-۸: نمودار تغییرات بازده تخریب متیل اورانژ در pH های ۵، ۷ و ۹ در حضور نانوذرات TiO_2 ۵۱
- شکل ۳-۹: نمودار تغییرات بازده تخریب ۴-آمینو آزو بنزن در pH های ۵، ۷ و ۹ در حضور نانوذرات TiO_2 ۵۲
- شکل ۳-۱۰: نمودار تغییرات بازده تخریب رودامین-ب در pH های ۵، ۷ و ۹ در حضور نانوذرات TiO_2 ۵۳
- شکل ۳-۱۱: نمودار تغییرات بازده تخریب متیل اورانژ در حضور ۹ و ۱۶ میلی گرم از نانوذرات TiO_2 ۵۵
- شکل ۳-۱۲: نمودار تغییرات بازده تخریب ۴-آمینو آزو بنزن در حضور ۹ و ۱۶ میلی گرم از نانوذرات TiO_2 ۵۶
- شکل ۳-۱۳: نمودار تغییرات بازده تخریب رودامین-ب در حضور ۹ و ۱۶ میلی گرم از نانوذرات TiO_2 ۵۷
- شکل ۳-۱۴: نمودار تغییرات بازده تخریب متیل اورانژ در حضور نانوکامپوزیت TiO_2/CdS ۵۹
- شکل ۳-۱۵: نمودار تغییرات بازده تخریب ۴-آمینو آزو بنزن در حضور نانوکامپوزیت TiO_2/CdS ۶۰
- شکل ۳-۱۶: نمودار تغییرات بازده تخریب رودامین-ب در حضور نانوکامپوزیت TiO_2/CdS ۶۱

فهرست جداول

صفحه

عنوان

- جدول ۱-۲: داده‌های تخریب فوتوکاتالیزی متیل اورانژ در سه pH ۵، ۷ و ۹ و در حضور نانوذرات TiO_2 ۳۴
- جدول ۲-۲: داده‌های تخریب فوتوکاتالیزی متیل اورانژ در حضور ۹ و ۱۶ میلی گرم از نانوذرات TiO_2 ۳۵
- جدول ۳-۲: داده‌های تخریب فوتوکاتالیزی متیل اورانژ در حضور نانوکامپوزیت TiO_2/CdS ۳۶
- جدول ۴-۲: داده‌های تخریب فوتوکاتالیزی ۴-آمینو آزو بنزن در سه pH ۵، ۷ و ۹ و در حضور نانوذرات TiO_2 ۳۷
- جدول ۵-۲: داده‌های تخریب فوتوکاتالیزی ۴-آمینو آزو بنزن در حضور ۹ و ۱۶ میلی گرم از نانوذرات TiO_2 ۳۸
- جدول ۶-۲: داده‌های تخریب فوتوکاتالیزی ۴-آمینو آزو بنزن در حضور نانوکامپوزیت TiO_2/CdS ۳۹
- جدول ۷-۲: داده‌های تخریب فوتوکاتالیزی رودامین-ب در سه pH ۵، ۷ و ۹ و در حضور نانوذرات TiO_2 ۴۰
- جدول ۸-۲: داده‌های تخریب فوتوکاتالیزی رودامین-ب در حضور ۹ و ۱۶ میلی گرم از نانوذرات TiO_2 ۴۱
- جدول ۹-۲: داده‌های تخریب فوتوکاتالیزی رودامین-ب در حضور نانوکامپوزیت TiO_2/CdS ۴۲
- جدول ۱-۳: داده‌های حاصل از اثر pH بر مقادیر ثابت سرعت ۶۴
- جدول ۲-۳: داده‌های حاصل از اثر غلظت فوتوکاتالیزگر بر مقادیر ثابت سرعت ۶۵
- جدول ۳-۳: داده‌های حاصل از اثر نوع فوتوکاتالیزگر بر مقادیر ثابت سرعت ۶۶
- جدول ۴-۳: داده‌های حاصل از اثر pH بر مقادیر TOF ۶۷
- جدول ۵-۳: داده‌های حاصل از اثر غلظت فوتوکاتالیزگر بر مقادیر TOF ۶۸
- جدول ۶-۳: داده‌های حاصل از اثر نوع فوتوکاتالیزگر بر مقادیر TOF ۶۹
- جدول ۷-۳: بازده تخریب، ثابت‌های سرعت و مقادیر TOF تخریب فوتوکاتالیزی سه ترکیب رنگی ۷۱

فصل اول

بررسی منابع

۱-۱ مقدمه

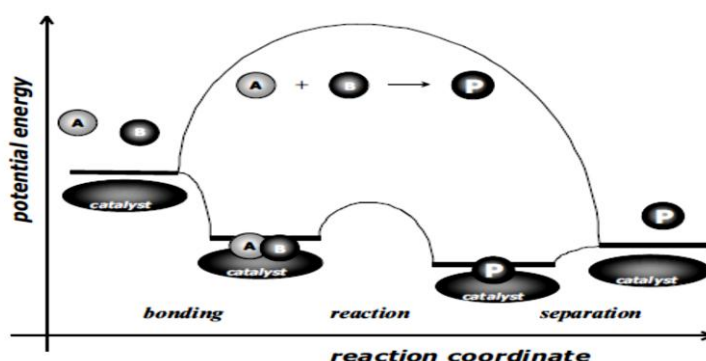
پساب‌های رنگی حاصل از صنایع تولیدی، نساجی و کاغذ به علت آلایندگی زیاد و خواص سمی آنها موجب نگرانی‌های زیست محیطی شده است. بنابراین حذف ترکیبات رنگی از پساب‌ها از اهمیت فوق العاده‌ای برخوردار است زیرا آلودگی آب حتی در مقادیر خیلی جزئی محیط زیست و به مراتب انسان را با مشکلات قابل ملاحظه‌ای رو به رو خواهد کرد [۲۱]. از آنجایی که در این پژوهش هدف تخریب فوتوکاتالیزی سه نوع از این ترکیبات رنگی است بنابراین، به شرحی از فرایند کاتالیز، انواع کاتالیزورها، عوامل موثر بر کارایی آنها و دیگر اطلاعاتی که فهم چگونگی انجام این نوع از تخریب را آسان می‌کند پرداخته شده است.

۲-۱ کاتالیزگر و فرایند کاتالیز

اصطلاح کاتالیز اولین بار توسط برزیلیوس^۲ در سال ۱۸۳۶ برای یک قابلیت ذاتی جدید که توسط یک تماس کاتالیزی باعث پیشرفت یک واکنش شیمیایی می‌شود به کار برده شد به نظر او کاتالیزگر ماده‌ای است که سرعت واکنش را بدون کاسته یا افزوده شدن بالا می‌برد [۳].

واکنش‌های کاتالیزی از زمان باستان کاربرد داشتند اما اساس این واکنش‌ها در آن زمان ناشناخته بود برای نمونه، تخمیر شکر به اتانول و تبدیل اتانول به استیک‌اسید توسط آنزیم‌ها (زیست کاتالیزگر-ها^۳) انجام می‌شود. پیشرفت‌های علمی فرایندهایی که در حضور کاتالیزگر انجام می‌شوند از حدود ۲۰۰ سال قبل آغاز شد و تا کنون روز به روز بر اهمیت آن افزوده شده است. اگرچه استفاده گسترده از کاتالیزگر در صنعت از اوایل قرن بیستم آغاز شد اما در حال حاضر بیش از ۹۵ درصد از مواد شیمیایی حداقل یک مرحله از مراحل تولیدشان شامل مرحله کاتالیزی است [۴].

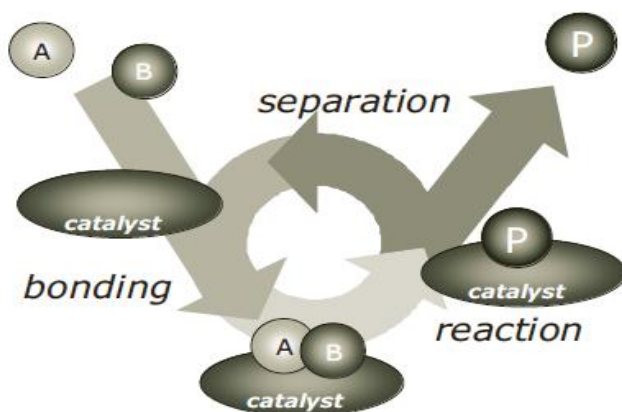
کاتالیزگر قابلیت شتاب دادن به سرعت واکنش یا تغییر انتخاب‌پذیری نسبت به محصولات مختلف در مقایسه با زمانی که واکنش در غیاب کاتالیزگر انجام می‌شود را دارد [۳]. این واقعیت وجود دارد که حضور کاتالیزگر می‌تواند توزیع محصولات را تغییر داده و مسیر جدیدی برای تولید محصول مورد نظر را باعث می‌شود (شکل ۱-۱).



شکل ۱-۱: نمودار انرژی پتانسیل واکنش کاتالیزی

^۲Berzelius
^۳biocatalysts

حضور یک کاتالیزگر جنبه‌های سنیتیکی یک واکنش را با کم کردن انرژی فعال‌سازی بدون تاثیر بر ترمودینامیک واکنش تحت تاثیر قرار می‌دهد. یک تعریف که امروزه نیز معتبر است تعریف اسوالد^۴ (۱۸۹۵) است که می‌گوید: یک کاتالیزگر یک واکنش شیمیایی را بدون اثر گذاشتن بر موقعیت تعادل واکنش سرعت می‌بخشد [۵] در واقع، می‌توان گفت کاتالیز کلید دگرگونی‌های شیمیایی است. بیشتر تولیدهای صنعتی و تقریباً کل واکنش‌های بیولوژیکی نیازمند کاتالیزگر هستند علاوه بر این کاتالیز مهمترین تکنولوژی در جلوگیری در از نشر گازهای سمی به محیط زیست است در این میان می‌توان نصب مبدل برای آگروز اتومبیل‌ها را نمونه آورد. شکل ۱-۲ چرخه کاتالیزی را به وضوح نشان می‌دهد [۵ و ۶].



شکل ۱-۲: چرخه کاتالیزی

۳-۱ عملکرد کاتالیزگر

قابلیت یک کاتالیزگر برای یک فرایند شیمیایی به سه ویژگی مهم زیر بستگی دارد:

۱. فعالیت^۵
۲. انتخاب‌پذیری^۶
۳. پایداری^۷

^۴Ostwald
^۵Activity
^۶Selectivity

تعیین این سه عامل بسیار مشکل است زیرا بسته به نوع کاتالیزگر و فرایند کاتالیز تغییر می‌کنند
[۸ و ۷]

۱-۳-۱ فعالیت

فعالیت تعیین سرعت پیشرفت یک یا چند واکنش در حضور کاتالیزگر است. فعالیت می‌تواند توسط اصطلاحات سنتیکی تعریف شود.

سرعت واکنش r برابر با تغییرات غلظت واکنشگر نسبت به زمان واکنش و مقدار کاتالیزگر است.

(۱-۱)

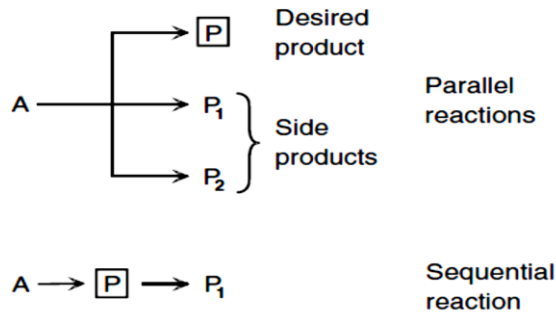
$$r = \frac{\text{converted amount of substance of reactant}}{\text{volume or catalyst mass} \cdot \text{time}} \quad (\text{mol L}^{-1}\text{h}^{-1} \text{ or } \text{mol kg}^{-1}\text{h}^{-1})$$

بنابراین می‌توان گفت فعالیت کاتالیزگر به سه عامل زیر وابسته است:

- سرعت واکنش
- ثابت سرعت
- انرژی فعال‌سازی

۱-۳-۲ انتخاب پذیری

انتخاب‌پذیری S_p یک واکنش کسری از مواد اولیه است که به محصول مطلوب P تبدیل شده است. انتخاب‌پذیری می‌تواند توسط نسبت مقدار محصول مطلوب به مقدار ماده اولیه واکنش داده A بیان کرد که اطلاعاتی در مورد مسیر واکنش می‌دهد. علاوه بر واکنش مطلوب واکنش‌های موازی و پی‌در-پی می‌تواند رخ دهد (طرح واره ۱-۱).



طرح واره ۱-۱: واکنش‌های موازی و متوالی واکنش اصلی

از آنجایی که این کمیت مواد اولیه و محصولات را مقایسه می‌کند ضریب‌های استوکیومتری \square_i واکنش دهنده‌ها باید اعمال شود که معادله زیر را به دست می‌دهد [۷].

(۲-۱)

$$S_p = \frac{n_P/v_P}{(n_{A,0}-n_A)/|v_A|} = \frac{n_P|v_A|}{(n_{A,0}-n_A)v_P} \quad (\text{mol/mol or \%})$$

در مطالعات مقایسه‌ای باید شرایط دمایی ثابت در نظر گرفته شود.

۳-۳-۱ پایداری

پایداری حرارتی، شیمیایی و مکانیکی یک کاتالیزگر نیمه عمرش در محیط واکنش‌های صنعتی را تعیین می‌کند. پایداری کاتالیزگر توسط عامل‌های زیادی مانند تجزیه شدن^۱، سوختن و سمی شدن تحت تاثیر قرار می‌گیرد. غیر فعال شدن کاتالیزگر را می‌توان توسط اندازه‌گیری فعالیت و انتخاب‌پذیری به عنوان تابعی از زمان تشخیص داد. کاتالیزگرهایی که در طول یک فرایند فعالیت خود را از دست می‌دهند اغلب قبل از اینکه مجبور به جایگزینی‌شان شوند آنها را احیا می‌کنند. نیمه عمر کاتالیزگر اهمیت فوق‌العاده‌ای در اقتصاد یک فرایند دارد [۶].

^۱Decomposition