**کاتالیزورهای ناهمگن**

ترم اول – 98-1397 مقطع: دکتری

استاد درس: علی اکبر میرزائی

mirzaei@hamoon.usb.ac.ir

زمان درس: یکشنبه 9:30 - 7:30

 سه شنبه 9:30 - 7:30

امتحان پایان ترم: 80%

فعالیت های کلاس و تکالیف مربوطه: 20%

منابع مورد استفاده:

1. Heterogeneous catalysis in practice , Mcg Raw-Hill, New York , Satterfield , C.N
2. Dynamic Heterogeneous Catalysis, Academic press, London , Tamaru, K.
3. Kinetics of heterogeneous reactions, Princeton university press, Princeton, N.J, Boudart, M.
4. The new research papers in fields of kinetics, dynamic and thermodynamic in heterogeneous catalysis

فهرست مطالب تدریسی:

**الف) اصول واکنش های کاتالیزورهای ناهمگن**

1. کاتالیزورهای ناهمگن، تعریف و اهمیت آن و خواص و مشخصات کاتالیست
2. مکانیزم کاتالیزور تماسی
3. نفوذ واکنشگرها و محصولات
4. جذب سطحی واکنشگرها
5. تبدیل مواد جذب شده
6. دفع سطحی محصولات
7. ملاحظات کمی درمورد واکنش های کاتالیزور
8. کاتالیزورها و فرایندهای کاتالیزوری
9. تغییرات کاتالیستی
10. دسته بندی کاتالیست ها
11. اجزا موجود در کاتالیست ها (فاز فعال، ساپورت و پروموتورها)
12. جذب سطحی فیزیکی
13. جذب سطحی شیمیایی
14. پدیده دیفیوژن (پخش)
15. محدودیت ها گزینش پذیری در سنتز FT به عنوان نمونه ای از واکنش های هتروژنی در سطح کاتالیست ها
16. محدودیت های سینتیکی و ترمودینامیکی
17. محدودیت های مربوط به توزیع محصولات
18. محدودیت های ایجاد شده توسط متان دارشدن و رسوب کردن
19. غیر فعال شدن کاتالیست های ناهمگن
20. پیشگیری از کاهش فعالیت
21. تاثیر شرایط عملیاتی برروی فعالیت و گزینش پذیری کاتالیزور های ناهمگن(دما، فشار، ترکیب خوراک واکنشگرها، سرعت فضایی، زمان جریان و احیا کاتالیست ها)

**ب) مروری بر مکانیسم و سینتیک واکنش ها بر روی کاتالیزورهای ناهمگن**

1. سینتیک و مکانیسم های متداول در سنتز FT بعنوان نمونه ایی از واکنش های ناهمگن
2. مدل های سینتیکی واکنش های ناهمگن
3. مدل توانی
4. مدل سینتیکی لانگمیر- هنیشل وود- هوگن- واتسون(LHHW)
5. مدل سینتیکی الی- ریدل
6. پدیده نفوذ
7. تاثیر محدودیت های نفوذ بر عملکرد کاتالیست های فلزات واسطه در راکتورها
8. محدودیت نفوذ محصولات بر بیرون کاتالیست
9. محدودیت نفوذ واکنشگرها به درون کاتالیست

**ج) روش های تهیه کاتالیست های ناهمگن**

1. ساخت کاتالیست به روش همرسوبی
2. ساخت کاتالیست به روش فیوژن
3. ساخت کاتالیست به روش تلقیح( روش خشک و مرطوب)
4. ساخت کاتالیست به روش سل –ژل
5. ساخت کاتالیست به روش های هیدروترمال و سلووترمال
6. ساخت کاتالیست به روش میکرو امولسیون
7. عملیات لازم برای تهیه کاتالیست های ناهمگن (شستشو، خشک نمودن، شکل دادن، کلسینه کردن و فعال نمودن کاتالیست)
8. نحوه ساخت کاتالیست های تک فلزی، دو فلزی و سه فلزی
9. روش های بررسی خصوصیات فیزیکوشیمیایی کاتالیست های سنتز شده( XRD,SEM,EDX,XPS,BET,TGA,DSC,TPR,TEM )
10. واحد های آزمایشگاهی تست کاتالیزورهای ناهمگن

**د) بررسی تاثیر اجزای کاتالیست های ناهمگن بر روی عملکرد کاتالیست ها**

1. اثر ساپورت های مختلف و مقدار آنها بر روی عملکرد کاتالیست
2. اثر پروموترهای مختلف و مقدار آنها بر روی عملکرد کاتالیست
3. اثرات زمان و دمای خشک کردن پیش ساز های کاتالیزورهای ناهمگن بر روی فعالیت عملکرد آنها
4. اثرات زمان و دمای جو و کلسینه کردن پیش ساز های کاتالیزورهای ناهمگن بر روی فعالیت عملکرد آنها
5. اثرات زمان و دما و نوع عامل احیا کننده ی کاتالیزورهای ناهمگن بر روی فعالیت کاتالیتیکی آنها
6. اثرات دبی واکنشگرها و نسبت خوراک ورودی بر روی فعالیت کاتالیتیکی کاتالیست ناهمگن
7. اثر سرعت فضایی روی فعالیت کاتالیتیکی کاتالیست
8. اثر دما روی فعالیت کاتالیتیکی کاتالیست
9. اثر فشار روی فعالیت کاتالیتیکی کاتالیست
10. اثر روش تهیه روی فعالیت کاتالیست ها
11. اثر شکل دهی روی فعالیت کاتالیتیکی کاتالیست
12. بررسی پایداری و طول عمر کاتالیست

**ه) رو ش تعیین مکانیسم و مدل سینتیکی واکنش FT روی کاتالیست سه فلزی Fe-Mn-Co تهیه شده به روش همرسوبی بعنوان الگویی از یک واکنش کاتالیستی نا همگن**

1. معرفی مزاحمت ها و محدودیت ها موحود در بررسی های سینتیکی
2. اثرات همزمان سینتیک شیمیایی و سینتیک فلزی
3. پدیده های انتقال در سطح دانه ( انتقال جرم- انتقال حرارت)
4. محدودیت های نفوذ درون دانه ایی
5. محدودیت های نفوذ برون دانه ایی
6. انتقال های داخلی و خارجی
7. تشخیص مزحله محدود کننده ی عمل کاتالیزوری
8. تست های لازم جهت حذف مزاحمت های نفوذ حفره ایی
9. تست های لازم جهت حذف مزاحمت های نفوذ فیلم گاز
10. آزمایشات مربوط به کاهش درصد تبدیل واکنشگر به محصول
11. آزمایشات سینتیکی
12. پیشنهاد مکانیسم های مختلف و بدست آوردن مدل های مربوطه
13. نحوه تحلیل معادلات سینتیکی
14. ضوابط، معیارها و شاخص های به کار گرفته شده برای تعیین بهترین مدل سینتیکی
15. تعیین مجهول های معادلات سینتیکی از روی داده های آزمایشگاهی و انتخاب بهترین مدل و ارائه معادله ی سینتیکی