

SUŠTINA I ZNAČAJ KATALIZE

1.1. DEFINICIJA I BITNE ODLIKE KATALIZE

O katalizi i katalizatorima postoji nekoliko definicija koje se međusobno razlikuju u nijansama (1-4). Čini se da su najjednostavnije i najpotpunije sledeće definicije:

Kataliza je promena brzine hemijske reakcije u prisustvu katalizatora.

Katalizator je supstanca koja menja brzinu hemijske reakcije stupajući u intermedijerno dejstvo sa reaktantima, a na kraju reakcionog ciklusa ostaje nepromenjena.

Gornja definicija katalizatora sadrži nekoliko bitnih podataka:

1. U prisustvu katalizatora brzina hemijske reakcije može se menjati tako da se reakcija ubrza ili uspori. U prvom slučaju reč je o pozitivnoj, a u drugom o negativnoj katalizi. U preporukama Međunarodne unije za čistu i primenjenu hemiju (IUPAC) smanjenje brzine hemijske reakcije u prisustvu katalizatora naziva se inhibicijom, pa se pod terminom kataliza podrazumeva ubrzanje reakcije. Ali negativna kataliza i inhibicija nisu identične pojave, a to se može videti iz daljih podataka sadržanih u definiciji katalizatora.

2. Uslov katalitičkog delovanja je da dode do intermedijerne reakcije između katalizatora i reaktanata. Po tome se katalizator razlikuje od drugih supstanci koje utiču na brzinu hemijske reakcije, kao što su na primer rastvarači koji omogućuju bolji kontakt između molekula u reakciji, ili inertni gasovi koji menjaju pritisak u gasnom stanju.

3. Isto tako značajan uslov katalize je da katalizator na kraju reakcionog ciklusa ostane nepromenjen. Po tome se katalitičko dejstvo razlikuje od indukovanja i inhibiranja hemijskih reakcija, praćenih trajnim promenama pomoćnog agensa.

4. Naglašavanjem činjenice da katalizator na kraju reakcionog ciklusa biva nepromenjen podrazumeva se da tokom odigravanja reakcije on trpi promene. To je logična posledica učešća katalizatora u intermedijernim stupnjevima reakcije. Tom prilikom može se menjati hemijski sastav, površinsko stanje ili elektronska struktura

katalizatora. Do ovih promena dolazi usled razmene kiseonika, hemijske adsorpcije prećene rezonancije elektrona između katalizatora i supstrata i drugih pojava, poznatih u katalizi. Ali to su reverzibilne promene i katalizator se svaki put na kraju reakcionog ciklusa vrati u prvobitno stanje.

Tokom duže upotrebe na katalizatoru se odigravaju i nepovratne promene. Ali one nisu povezane sa katalitičkim dejstvom, nego su posledica sekundarnih procesa povezanih sa starenjem i trovanjem katalizatora.

5. Još jedna bitna karakteristika katalizatora proističe iz same definicije. A to je da se u prisustvu katalizatora ne menjaju termodinamičke mogućnosti odigravanja reakcije. Poznato je da je položaj termodinamičke ravnoteže reakcije utišan promenom Gibsove standardne slobodne energije.

$$\Delta G^{\circ} = -RT \ln K_a \quad (1.1)$$

a da je promena slobodne energije sistema usled odigravanja hemijske reakcije data razlikom slobodnih energija produkata i reaktanata:

$$\Delta G = \sum G_{\text{prod}} - \sum G_{\text{reakt}} \quad (1.2)$$

Kada se reakcija odigrava u prisustvu katalizatora trebalo bi uzeti u obzir i promene njegove slobodne energije. Ali budući da katalizator na kraju reakcionog ciklusa ostaje nepromenjen, ΔG_{kat} biće uvek jednako nuli. Prema tome, u prisustvu katalizatora vrednost konstante ravnoteže ostaje nepromenjena. To znači da katalizator u bifikal ravnoteže pojednako ubrzava i posmatranu i obratnu reakciju.

Osim ovih odlika katalize, koje proističu iz same definicije i imaju opšti teorijski značaj, postoje i druge, koje su od praktičnog značaja:

6. Katalitičko dejstvo ne podrazumeva stehiometrijski odnos između katalizatora i reaktanata. Naprotiv, količine katalizatora su veoma male u odnosu na količine reaktanata prevećtenih u produkte. Na primer, u proizvodnji amonijaka i sumporne kiseline odnosi masenih delova katalizatora i dobijenog proizvoda iznose 10^{-6} odnosno 10^{-4} .

7. Katalitičko dejstvo nije osobina ograničenog broja supstanci. U sastav danas poznatih katalizatora ulaze, u elementarnom obliku ili u formi različitih jedinjenja, skoro svi poznati elementi.

8. Katalitička aktivnost jedne supstance ne predstavlja univerzalnu osobinu katalisanja svih mogućih reakcija. Neki katalizatori mogu da katalizu više grupa hemijskih reakcija (izomerizaciju, hidrolizu, dehidrataciju, aktivovanje) dok drugi katalizu samo reakcije jedne vrste ili čak samo jednu jedinu reakciju. Primer selektivnosti metalnih katalizatora predstavlja oksidacija amonijaka kiselinom, koja se može odigrati na više načina:



U odsustvu katalizatora pri sagorevanju amonijaka obrazuje se uglavnom elementaran azot. U prisustvu ~~selektivne platine ili njenih legura~~ moguće je proces usmeriti skoro kvantitativno u pravcu dobijanja azot monoksida, dok se primenom katalizatora na bazi oksida mangana reakcija usmerava u pravcu dobijanja azot suboksida.

9. Aktivnost i selektivnost katalizatora zavise pre svega od njegovog hemijskog sastava, ali uslovi rada, struktura i brojne izričke osobine katalizatora mogu primetno modifikovati katalitička svojstva.

1.2. CILJEVI KOJI SE POSTIŽU PRIMENOM KATALIZATORA

Osnovni efekat primene katalizatora, kojim se definiše sam pojam katalize, je ~~ubrzavanje hemijske reakcije~~ ubrzavanje hemijske reakcije je od mnogo većeg praktičnog značaja od usporavanja, koje se teži u redim slučajevima, kao što su preterano brze reakcije koje izniknu kontroli, ili neželjene reakcije. Zbog toga se, ako nije drugačije naglašeno, pod katalizom podrazumeva povećanje brzine hemijske reakcije.

Mogućnost povećanja brzine hemijske reakcije u prisustvu katalizatora ima ogroman praktičan značaj. Mnoge hemijske reakcije na kojima počevaju ~~svi~~ životna u prirodi i razvoj tehničke civilizacije termodinamički su moguće ali se odigravaju suviše sporo. Njihovo izvođenje u prihvatljivim životnim i tehničkim uslovima omogućuje biokatalizatori, homogeni i heterogeni katalizatori.

Za reakcije koje se u odsustvu katalizatora odigravaju beskonačno sporo, kao da uopšte ne teku, kaže se da su *pothudene katalizom*.

U nekim sistemima, naročito ako im je hemijski sastav složeniji, postoje termodinamički uslovi za istovremeno ili sukcesivno odigravanje velikog broja reakcija. Primena selektivnih katalizatora omogućuje da se proces usmeri u pravcu dobijanja ~~određenih~~ produkata. Tipični primeri su kreking i termostimulacija u katalitičkom krekingu odigravaju se brojne reakcije kao što su cepanje parafina u olefine, niže parafine, olefina u manje olefine, deaktivovanje aromata ili prenošenje alkil grupe sa jednog aromata na drugi, izomerizacija, kondenzacija, disproporcionacija i druge (5). U svakoj od grupa reakcija može učestvovati više članova homologog niza, što pokazuje nekoliko opštih jednačina:



Svaka od navedenih jednačina obuhvata grupe srodnih jedinjenja koja se kao reaktanti mogu naći u polaznoj smesi, a kao produkti mogu uticati na kvalitet konačnog proizvoda.

Poboljšanje kvaliteta proizvoda je takođe jedan od efekata katalize. To se postiže već samom selektivnošću, što eliminiše nuzproizvoda značajno doprinosi čistoći osnovnog proizvoda. Drugi način da se poboljša kvalitet proizvoda je da se utiče na masu i prostornu građu njegovih molekula. To se u proizvodnji polimera postiže primenom katalizatora sa stereospecifičnim dejstvom.

Primena katalizatora omogućuje i *postizanje važnih ekoloških ciljeva*: štednju energije, korišćenje alternativnih izvora sirovina, uklanjanje polutanata koji zagađuju atmosferu i proizvodnju novih ekološki pogodnijih materijala.

Sniženje energije aktivacije hemijske reakcije u prisustvu katalizatora omogućuje izvođenje procesa pod znatno povoljnijim uslovima. Sva ostala unapređenja industrijskih procesa, zasnovana na usavršavanju uređaja, automatskoj kontroli i regulaciji ograničena su kinetičkim uslovima, koje je moguće značajnije menjati samo putem katalize. Jedan takav primer je proizvodnja sircetne kiseline iz etil alkohola i ugljen monoksida:



Ova reakcija prvobitno je vođena pomoću kobaltnog katalizatora na 230°C i pod pritiskom od 20 do 30 MPa. Primenom kompleksnog rodijumskog katalizatora njeno izvođenje postalo je moguće na temperaturi 150 do 200°C, a pod pritiscima 1 do 4 MPa (2).

Izvođenjem novih katalizatora može se postići i pojednostavljenje tehnologije, eliminisanjem pojedinih procesa u liniji.

U energetici uloga katalize dolazi do izražaja i putem osvajanja novih izvora energije i novih energenata. Primeri za to su usavršavanje gorivih galvanskih spregova koje spada u domen elektro-katalize i razrada foto-katalitičkih postupaka za proizvodnju vodonika, kao jednog od energenata budućnosti (6).

U cilju boljeg iskorišćenja konvencionalnih goriva istražuju se postupci katalitičkog sagorevanja u pokretnom sloju; tako bi se postigle niže temperature sagorevanja i isključilo stvaranje štetnih azotovih oksida (4).

1.5. HETEROGENA, HOMOGENA I ENZIMSKA KATALIZA

Verovatno najdalekosežnija podela katalitičkih reakcija odnosi se na fazni sastav sistema. Po tom kriterijumu razlikuju se dve osnovne kategorije: heterogena i homogena kataliza.

U heterogenoj katalizi reaktanti i produkti reakcije nalaze se najčešće u istoj fazi, a posebnu fazu predstavlja katalizator. Reakcija se odigrava na graničnoj površini koja deli ove dve faze. Najčešći sistemi u heterogenoj katalizi su gas-čvrsto, a manju primenu dobile su reakcije u sistemima tečno-čvrsto i gas-tečno-čvrsto.

Homogene katalitičke reakcije odigravaju se u jednoj fazi, tečnoj ili gasovitoj, u kojoj se istovremeno nalaze svi učesnici: katalizator, reaktanti, intermedijeri i produkti.

U prelaznoj oblasti između homogene i heterogene katalize nalaze se katalitički procesi u koloidnim sistemima, u kojima se supstance koje reaguju nalaze u rastvoru, a katalizatori su makromolekuli ili molekularni agregati. U ovu grupu spada enzimski kataliza.

1.5.1.1. Homogena kataliza

Reakcije homogene katalize su u hemijskoj industriji znatno manje zastupljene od heterogenih. Njihovo učesće u praksi ipak nije zanemarljivo, posebno u procesima organske hemijske industrije, kao što su hidroformilovanje, polimerizacija i organske sinteze.

Homogene katalitičke reakcije mogu se odigravati različitim mehanizmima, zavisno od vrste katalizatora, prirode sistema i uslova rada. Polazeći od prirode katalizatora reakcije homogene katalize mogu se biti razvrstane u tri osnovne grupe. To su: kiselno-bazna kataliza, kataliza pomoću kompleksnih jedinjenja prelaznih metala i enzimaska kataliza.

1.5.1.1.1. Kiselo-bazna kataliza

U kiselno-baznoj katalizi katalizatori su Arenijusove (Arrhenius), Brenstedove (Brønsted) i Luisove (Lewis) kiseline i baze. Prema tipu katalizatora reakcije su razvrstane u grupe prikazane u tablici 1.1

Tablica 1.1 Klasifikacija reakcija kiselno-bazne katalize

Vrsta reakcije	Tip katalizatora
Specifična kiselina	H ₃ O ⁺
Specifična baza	OH ⁻
Opšta kiselina	Donori protona izuzev H ₃ O ⁺
Opšta baza	Akceptori protona izuzev OH ⁻
Elektrofilna	Luisove kiseline
Nukleofilna	Luisove baze

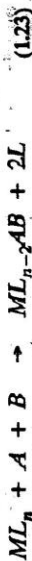
Ako u katalitičkoj reakciji učestvuju istovremeno Brenstedova kiselina i Brenstedova baza, reč je o opštoj kiselno-baznoj katalizi. U slučaju istovremenog dejstva Luisove kiseline i Luisove baze govori se o istovremenoj elektrofilnoj i nukleofilnoj reakciji. Ako se reakcija odigrava putem simultanih trimolekulskih sudara reaktanata, kiseline i baze, takav mehanizam se naziva „push-pull“ (push-pull).

Kiselno-bazna kataliza pokriva i značajno područje heterogene katalize. Tada se kao katalizatori koriste čvrste kiseline i baze. Razvoju ove oblasti heterogene katalize značajno su doprinela iskustva stečena u homogenoj kiselno-baznoj katalizi.

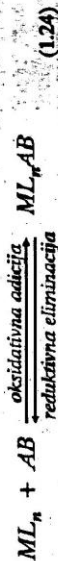
1.5.1.2. Kataliza pomoću kompleksnih jedinjenja prelaznih metala

Spособnost prelaznih metala da grade različita kompleksna jedinjenja našla je široku primenu u katalizi. Sústina katalitičkog delovanja ovih kompleksa je u tome da molekuli reaktanata grade intermedijere ulazeći u koordinacionu sferu metalnog jona. To se može odigrati putem supstitucije liganda kompleksnog jona supstratom:

SUŠTINA I ZNAČAJ KATALIZE



ili oksidativnom adicijom supstrata:



Utiskom molekula reaktanata u koordinacionu sferu kompleksnog jona mogu se postići različiti efekti, bitni za katalizu. Najbolji uslovi za odigravanje reakcije, prethodna polarizacija molekula reaktanata uz odgovarajuću pretraspobnu energiju veza, smanjenje energije aktivacije prenosa elektrona, putem njegovog provođenja kroz metal i dr. Jedan od efekata koji se takođe ispituje je zadovoljavanje principa simetrije orbitala prilikom stvaranja novih veza. To praktično znači da se pri intermedijernom vezivanju molekula reaktanata u kompleks vrši preaspobna elektrona u njegovim orbitalama. Na taj način postaju reakciono sposobne orbitale koje najbolje ispunjavaju uslov simetrije pri stvaranju nove veze.

U razvoju homogene katalize pomoću kompleksnih jona prelaznih metala dragocen ostonac predstavlja su istraživanja u oblasti koordinacione hemije (15). Tako je bolje sagledan uticaj različitih faktora na katalitičku aktivnost, kao što su:

- atomski radijus, oksidaciono stanje i koordinacioni broj metala
- stereochemijski raspored liganda, uključujući efekte izomerije kompleksa i konformacije liganda
- priroda veze između metala i donorskog atoma liganda
- energija veze u kovalentnom jedinjenju; energija provođenja iz kovalentne veze u odgovarajuće valentno stanje, itd.
- Ova saznanja imala su uticaj i na razvoj heterogene katalize, pošto je primenjena analogija između adsorbovane specije i liganda.

U novije vreme homogena kataliza je znatno unapređena istraživanjima u primenom metalnih klastera, kao prekursora katalizatora. Polazeći od definicije klastera kao jedinjenja koja sadrže više od jednog atoma prelaznih metala, baštinu iscrpne analize homogenih katalitičkih reakcija izvedenih pomoću klastera Mo₂Fe, Ru₂, Co, Rh, Ni, Pd, Pt i drugih metala, kao i pomoću mesovinih klastera Fe-Ru, Mn-Fe, Pt-Co, Pt-Mo, Na-Ru, Cs-Ru i drugih (16). Bitne osobine klastera i njihove primene u heterogenoj katalizi detaljnije su prikazani u petom poglavlju.

1.5.2. Enzimaska kataliza

Enzimi su proteini molarne mase 10⁴ do 10⁷, koji se odlikuju posebnom strukturom i sposobni su da katalizu hemijske reakcije. Enzimaska kataliza ima ogromnu ulogu u životu organizma. To je područje biokatalize, po mnogim bitni specifičan i odličan na homogenju i heterogenju katalizu. Međutim, fundamentalni principi katalize važe i za biokatalizu, a primena enzima nije ograničena samo na biokatalizu. Jedan od potencijalno prosperitetnih pravaca hemijske industrije je primena enzima u tradi-

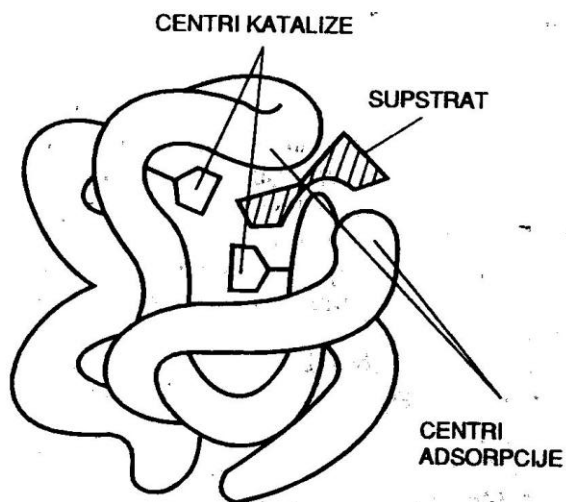
cionalnim i u potpuno novim hemijskim reakcijama. Da bi došlo do takve industrijske primene enzima potrebno je da bude rešeno još nekoliko velikih problema, u vezi sa njihovom ekonomičnom proizvodnjom i stabilizacijom.

Uslov katalitičkog delovanja proteina je posedovanje odgovarajuće primarne, sekundarne, tercijerne i kvaternerne strukture. Primarna struktura enzima sastoji se od sekvenci amino kiselina vezanih linearnim kovalentnim vezama po određenom kodu. Sekundarna struktura enzima nastaje tako što se polipeptidni lanci ili njihovi pojedini delovi namotavaju u spiralu. Tercijarnu strukturu enzima karakteriše način pakovanja u prostoru delimično ili potpuno namotanih lanaca. Ovako dobijene strukturno nezavisne jedinice dalje se kombinuju u pojedinačne globule. Način kombinovanja u globule određuje kvaternernu strukturu.

Katalitičko dejstvo enzima uslovljeno je strogim rasporedom pojedinih sekcija koje predstavljaju aktivne centre katalize. Ono je vrlo specifično u odnosu na supstrat, pošto ne zavisi samo od hemijske strukture aktivnog centra, nego i od njegove konformacije. Promena konformacije izaziva deaktivaciju enzima, dok sasvim male promene konformacije u okolini aktivnog centra mogu da olakšaju stvaranje intermedijernog jedinjenja.

Prema selektivnosti razlikuje se nekoliko kategorija enzima. Specifični u odnosu na određenu grupu reakcija katališu transformacije određenih grupa jedinjenja. Stereohemijski specifični mogu da razlikuju L i D izomere supstrata, delujući samo na jedan izomer. Apsolutno specifični katališu samo reakciju jednog jedinog supstrata. Apsolutnu selektivnost enzima objašnjava njihova struktura. Kao što je prikazano na slici 1.3 u globulama enzima nedaleko od aktivnih centara katalize nalaze se centri adsorpcije; pomoću „proreza“ koji imaju definisane dimenzije, polarne i nepolarne grupe u strogo određenom rasporedu, do aktivnih centara katalize propuštaju se samo molekuli supstrata koji imaju striktno određene hemijske osobine i strukturu, određenu prostornu orijentaciju.

Enzimi se odlikuju ne samo izuzetnom selektivnošću, nego i vrlo visokom aktivnošću. Brzina pojedinih reakcija veća je u prisustvu enzima 10^{10} do 10^{12} puta u odnosu na brzinu u odsustvu katalizatora. Enzimske reakcije teku uz znatno sniženje energije aktivacije. Na primer, u reakciji razlaganja vodonik peroksida E_a u odsustvu katalizatora iznosi 75,6 kJ/mol, u prisustvu konvencionalnog katalizatora je 54,6 kJ/mol a u prisustvu enzima iznosi svega 16,8 kJ/mol.



Slika 1.3 – Globula enzima sa centrima adsorpcije i katalize

1.5.3. Homogenizacija heterogene i heterogenizacija homogene katalize

Homogena i heterogena kataliza imaju svoje prednosti i svoje nedostatke. Osnovna prednost homogene katalize je bolji kontakt između molekula koji učestvuju u reakciji i katalizatora. To omogućuje da se postigne veća aktivnost katalizatora blažim eksperimentalnim uslovima. Glavni nedostaci homogene katalize su osetljivost katalizatora na hemijske promene i teškoće odvajanja produkata reakcije od katalizatora. To s jedne strane utiče na kvalitet proizvoda, a s druge strane povećava potrošnju katalizatora, što je posebno važno u slučaju skupih katalizatora na bazi plemenitih metala.

U heterogenoj katalizi reakcija se odigrava na površini katalizatora, što znači da deo katalitičke supstance nije dovoljno iskorišćen. Ali prednosti heterogene katalize su veća stabilnost katalizatora i mogućnost odvajanja produkata reakcije od katalizatora. U dosadašnjem razvoju hemijske industrije prednosti heterogene katalize su prevagnule, tako da je velika većina katalitičkih procesa, posebno u bazi hemijskoj industriji, zasnovana na heterogenoj katalizi.

Najvažnije osobine katalizatora, koje definišu njegov kvalitet, su: *aktivnost, selektivnost, prinos, stabilnost, život – radni vek, oblik zrna, mehanička čvrstoća, tekstura, utrošak energije, ekološki efekti, mogućnost regeneracije, mogućnost reprodukovanja osobina pri sintezi, rizicnost pri rukovanju i konačno cena* [21]. Tek sinergija svih ovih osobina određuje *kvalitet* katalizatora, čija je kvantitativna mera njegova *efektivnost*, odnosno rentabilnost procesa u kome radi. O pojedinačnim osobinama biće više reči kasnije, u meri u kojoj su one u vezi sa temom poglavlja, a ovde će se dati samo neke generalne odrednice.

Aktivnost i selektivnost su osobine od kojih najdirektnije zavisi *efektivnost* katalizatora koja se konačno može kvantifikovati *prinosom* proizvoda [22]. Katalizator je efikasan u meri u kojoj konvertuje reaktante (aktivnost), a željeni pravac tih promena određen je njegovom selektivnošću. Imperativ za najvećom mogućom aktivnošću katalizatora ograničen je jedino potrebom za kontrolom oslobođene toplote u slučaju veoma egzotermnih reakcija. Reakcioni parametar koji je u najdirektnijoj vezi sa aktivnošću je temperatura, saglasno sa eksponencijalnom zavisnošću brzine reakcije od temperature. Kako je zavisnost selektivnosti od temperature najčešće obrnuto proporcionalna, to su aktivnost i selektivnost u obrnutoj srazmeri. Odgovarajuća kombinacija aktivnosti i selektivnosti katalizatora veoma je važna za proces, jer se različitim kombinovanjem ovih dveju osobina može doći do potpuno istog cilja – željenog *prinosa*, ali uz *troškove proizvodnje* koji se veoma razlikuju.

Stabilnost je osobina katalizatora koja se odnosi na njegovu sposobnost da što duže radi u definisanim radnim uslovima, a pri tome zadržava projektovanu aktivnost i selektivnost. Postepeno smanjenje efektivnosti katalizatora direktna je posledica njegove *deaktivacije*, procesa koji se dešava u većoj ili manjoj meri u zavisnosti od tipa katalizatora i procesa. Deaktivacija katalizatora je složen proces koji ima više uzroka i posledica. To je takođe i neminovan proces koji se dešava na veoma različitoj vremenskoj skali, od nekoliko sekundi do nekoliko godina, definišući na taj način *život*, odnosno *radni vek* katalizatora [23,24]. U principu gubitak aktivnosti katalizatora može se privremeno nadoknaditi odgovarajućim zaoštavanjem reakcionih parametara, najčešće podizanjem radne temperature, ali je ova mera iznuđena i često problematična. S jedne strane viša radna temperatura od optimalne često vodi sniženju selektivnosti, a s druge strane ova kvi zahvati podrazumevaju u startu projektovanje skupljeg postrojenja sa moguć-

nošću korišćenja šireg dijapazona radnih temperatura. Prilagođavanje sniženju aktivnosti katalizatora reduciranjem napojnih tokova sirovine takođe je nepogodno, jer se na taj način remete toplotni bilansi reaktora. Zbog svega toga stabilnost katalizatora, kao mera brzine neminovnog gubitka aktivnosti, a praćena i promenom svih ostalih osobina katalizatora (teksturalnih, mehaničkih, hidrodinamičkih, itd.), predstavlja veoma važnu karakteristiku katalizatora.

Radni vek, ili kako se još naziva - *život katalizatora*, može se definisati vremenskim jedinicama njegovog ukupnog trajanja, odnosno trajanjem između dve regeneracije. Isto tako, život katalizatora može biti dat brojem katalitičkih ciklusa koje obavi, kao i maksimalnim povišenjem temperature koju katalizator može da izdrži u cilju zadržavanja željenog prinosa. Takođe može biti definisan i neophodnom brzinom dodavanja svežeg katalizatora u katalitičku šaržu u cilju nadoknađivanja deaktiviranog dela katalizatora. U procesima viših faza prerade nafte, na primer, gde jedna šarža katalizatora na bazi plemenitih metala staje i više miliona dolara, jasno je da duži radni vek donosi uštede neposredno jer se katalizator nabavlja i menja ređe. Ovo je, ipak, samo manji deo uštede jer je cena katalizatora najčešće ipak zanemarljiva u odnosu na vrednost proizvoda koji daje.

Oblik i veličina zrna katalizatora su važni podaci za njegovu specifikaciju, kao informacija projektantu za određivanje prečnika reaktora i visine katalitičkog punjenja u njemu, a takođe i za izračunavanje pada pritiska kroz katalitički sloj. Sa ovim je u najdirektnijoj vezi i *porozna struktura* katalizatora, a takođe i njegova *mehanička čvrstoća*, tj. *otpornost katalizatora na udar* (važna informacija pri punjenju reaktora katalizatorom) i *otpornost na abraziju* (nastaje trenjem između zrna katalizatora, kao i između zrna i zidova reaktora).

Tekstura katalizatora je zbirni termin pod kojim se podrazumevaju njegova *specifična površina, porozna struktura i nasipna težina* [25,26]. Kao što će se videti kasnije ove osobine su veoma bitne za konačni kvalitet katalizatora, jer od njih zavisi da li će potencijal katalizatora određen aktivnošću aktivne faze biti iskorišćen i u kolikoj meri. Takođe od ove osobine zavise i hidrodinamički uslovi u reaktoru, te time i konačna efikasnost procesa.

Razmatranje *utroška energije* polazi od toplotnog efekta katalitičke reakcije, a u vezi je sa opštim zahtevom za minimalnim utroškom energije u procesu. Izbor odgovarajućeg katalizatora može u monogome da doprinese ostvarenju ovog cilja. U egzotermnim reakcijama, na primer, maksimalna razlika temperatura katalizatora i fluida obrnuto je proporcionalna energiji aktivacije. To znači da će katalizator koji radi na nižoj temperaturi i teorijski (niža energija aktivacije) biti bolji od onog koji je na višoj radnoj temperaturi.

Veoma je važna *mogućnost reprodukovanja osobina katalizatora* pri njegovoj sintezi. Ovo je stoga što katalizator kao i svaki čvrsti materijal pokazuje *efekat memorije*, tj. istorija njegove pripreme odslikava se kroz njegovo ponašanje tokom kasnijeg rada [27]. Stoga je moguće da bilo kakva mala promena parametara sinteze katalizatora rezultira drastičnom promenom neke od njegovih osobina. Ova nesavršenost strukture ili teksture katalizatora može biti privremeno i

Rizičnost pri rukovanju katalizatorom određena je njegovom zapaljivošću, otrovnošću, kao i mogućnošću bezbednog odlaganja konačno istrošenog katalizatora. Ovo poslednje podrazumeva prethodno dovođenje katalizatora u potpuno ekološki i ekološki bezbedan oblik za pražnjenje reaktora i odlaganje.

Uticaj katalizatora na okolinu - ekološki efekti katalizatora, mogu biti neposredni (manja proizvodnja CO₂, na primer, usled bolje selektivnosti) i posredni (veća potreba za odlaganjem istrošenog katalizatora usled njegovog dužeg radnog veka). S obzirom na sve veću pažnju koja se posvećuje zaštiti okoline, rešenja koje nude višestruku regeneraciju i konačno *rekuperaciju* potpuno deaktiviranog katalizatora su sve više imperativ, a sve manje alternativa odlaganju istrošenog katalizatora [28-31].

Cena katalizatora se može izražavati u apsolutnim iznosima, tj. kao cenovna vrednost po masi katalizatora, ili po masi plemenitog metala u njemu³, ali isto tako može biti data i relativno, tj. vezana za količinu proizvoda koja se može dobiti po masi katalizatora. Konačno, cena katalizatora nije odlučujući faktor pri izboru jer je, kao što je već rečeno, višestruko manja od vrednosti ukupno dobijenog proizvoda. Tako je poznato da je vrednost proizvoda koji u toku svog radnog veka proizvede katalizator u procesu sinteze amonijaka, 2.000 puta veća od vrednosti samog katalizatora [32]. To znači da su mnogo veći ekonomski efekti katalizatora sa dobrim performansama, a u vezi sa njegovim radnim vekom, upravo oni koji se dobijaju na račun ređeg zaustavljanja postrojenja, a zahvaljujući dužem radnom ciklusu između dve regeneracije, odnosno između punjenja reaktora svežim i pražnjenja iz njega konačno deaktiviranog katalizatora. Očigledno je da je cena katalizatora složena funkcija svih njegovih osobina, ali ponajviše funkcija njegove stabilnosti i radnog veka, tj. života.