

新型催化剂在化工合成中的性能评估与应用市场前景

孙庆兵¹ 陈 晖² 何敬华¹

(1. 济宁祥泰和新材料科技有限公司, 山东 济宁 272400)

(2. 山东世纪阳光科技有限公司, 山东 济宁 272400)

摘要: 随着化工行业的迅速发展, 新型催化剂的研发与应用对提升化工合成效率、降低成本、减少环境污染具有重要意义。本文围绕新型催化剂在化工合成中的性能评估与机理展开深入探讨。首先阐述新型催化剂在化工合成领域的重要地位, 接着详细介绍其性能评估指标与方法, 通过实例分析新型催化剂在不同化工合成反应中的性能表现。同时, 深入探讨新型催化剂的作用机理, 包括活性位点、反应路径等。最后, 对新型催化剂在化工合成中的市场应用前景进行展望。

关键词: 新型催化剂; 化工合成; 性能评估; 作用机理

在化工合成过程中, 催化剂能够改变化学反应速率, 而自身在反应前后质量和化学性质不发生改变。新型催化剂的出现, 为化工合成带来了新的契机。例如, 在石油化工领域, 新型催化剂可提高原油的转化率, 生产出更多高附加值的化工产品; 在精细化工中, 新型催化剂能精准控制反应路径, 提高目标产物的选择性。研究新型催化剂在化工合成中的性能评估与机理, 有助于优化催化剂的设计与应用, 推动化工行业向绿色、高效方向发展。

1 新型催化剂的类型与制备方法

1.1 新型催化剂的分类

1.1.1 按活性组分分类

根据活性组分的不同, 新型催化剂可分为金属基催化剂、非金属基催化剂以及复合催化剂等。金属基催化剂以金属或金属合金作为活性中心, 凭借其独特的电子结构和良好的导电性, 在众多催化反应中展现出卓越的性能。例如, 钯 (Pd) 催化剂在有机合成反应中具有极高的活性与选择性, 尤其是在加氢、脱氢以及偶联反应等领域应用广泛。云南大学方文浩课题组研发的用于香兰素绿色合成的钯碳 (Pd/C) 和锡钯碳 (Sn-Pd/C) 新型催化剂, 可在无碱、温和条件下高效氧化香草醇制香兰素。通过精准控制催化剂制备条件, 制备出一系列 Pd 纳米尺度在 1.8nm 至 6.7nm 范围内的高分散态 Pd/C 催化剂。研究表明, 分布于金属态截顶八面体 Pd 纳米粒子的台阶与顶角位点上的具有低配位数的 Pd 原子主要负责香草醇分子的吸附与活化; 而在催化剂中添加 0.1% 的 Sn⁴⁺ 离子能够在 Sn-Pd 合金相的表界面上诱导产生具有高电子密度的金属态 Pd

原子, 有利于显著降低反应的活化能并抑制香兰素的深度氧化。在 120℃、常压氧气、6h 的温和反应条件下, Sn-Pd/C 催化剂上香兰素收率可达 100%, 唯一副产物为水, 催化剂的转化频率达 458h⁻¹, 为目前文献报道的最高值。

1.1.2 按催化反应类型分类

从催化反应类型角度, 新型催化剂可分为氧化还原催化剂、酸碱催化剂、配位催化剂等, 它们分别适用于不同类型的化学反应, 满足多样化的工业需求。氧化还原催化剂主要参与氧化还原反应, 通过自身的氧化态变化来促进反应物之间的电子转移, 从而加速反应进程。在选择性氧化反应中, 如以氧气或过氧化氢为氧化剂, 将醇类选择性氧化为醛或酮类化合物, 许多过渡金属氧化物催化剂 (如二氧化锰、氧化铜等) 表现出良好的活性与选择性。这些催化剂能够活化氧化剂分子, 使其更容易与醇类反应物发生反应, 同时控制氧化程度, 避免过度氧化生成羧酸等副产物, 在精细化工领域有着广泛应用, 为香料、医药中间体等的合成提供了关键技术支撑。酸碱催化剂在酸碱催化反应中发挥核心作用, 通过提供酸性或碱性环境来促进反应物的质子转移或亲核 / 亲电反应。在酯化反应中, 传统的浓硫酸催化剂虽然活性较高, 但存在腐蚀性强、副反应多、后处理复杂等问题。

1.2 新型催化剂的制备技术

1.2.1 化学合成法

化学合成法是制备新型催化剂的常用手段之一, 涵盖沉淀法、溶胶 - 凝胶法等多种具体方法, 通过精确控制化学反应条件, 实现对催化剂组成、结构与性

能的精细调控。沉淀法基于溶液中的化学反应，使金属离子与沉淀剂发生反应，生成难溶性沉淀物，经洗涤、干燥、煅烧等后续处理，得到具有特定活性的催化剂。以制备铁基催化剂为例，选用硝酸铁作为金属盐前驱体，加入适量氢氧化钠作为沉淀剂，在特定温度与 pH 值条件下，铁离子与氢氧根离子结合形成氢氧化铁沉淀。控制沉淀过程中的搅拌速率、加料顺序以及老化时间等因素，可精确调控沉淀物的粒径、形貌与结晶度。再将沉淀物经过多次洗涤去除杂质离子，在一定温度下干燥，最后于高温煅烧，促使氢氧化铁分解转化为氧化铁，制得铁基催化剂。该催化剂在费托合成反应中表现出良好的活性与选择性，能够将合成气（一氧化碳与氢气的混合气）高效转化为液态烃类燃料，为煤炭、天然气等非石油资源的清洁转化提供了有效途径。溶胶-凝胶法利用金属醇盐或无机盐在有机溶剂或水溶液中的水解与缩聚反应，形成具有三维网络结构的凝胶，再经干燥、煅烧得到目标催化剂。

1.2.2 物理制备法

物理制备法主要借助物理手段改变原料的形态与结构，实现催化剂的制备，具有操作相对简单、易于控制等优点，常见的有物理气相沉积、机械球磨法等。物理气相沉积法是在高温或高能量条件下，使气态前驱体物质在基底表面沉积，形成具有特定结构与性能的催化剂薄膜或涂层。例如，采用物理气相沉积技术制备贵金属薄膜催化剂，以铂、钯等贵金属为蒸发源，在高真空环境下，通过加热使其蒸发为气态原子或分子，这些气态物质在基底（如陶瓷、金属氧化物等）表面吸附、凝聚并沉积，形成均匀且厚度可控的贵金属薄膜。通过精确调控蒸发温度、沉积速率、基底温度以及反应气氛等参数，能够改变薄膜的晶体结构、晶粒尺寸与表面形貌，进而优化催化剂的催化活性与稳定性。这种贵金属薄膜催化剂在燃料电池、传感器等领域具有重要应用，可有效降低电极反应的活化能，提高能源转化效率与检测灵敏度。

1.2.3 生物合成法

生物合成法利用微生物或生物酶的生物转化功能，制备具有特殊性能的生物催化剂，具有环境友好、条件温和、选择性高等突出特点，为新型催化剂的开发开辟了全新途径。微生物发酵法通过特定微生物的代谢活动，将底物转化为含有催化活性物质的产物，进而制备生物催化剂。例如，某些细菌在特定培养基中生长繁殖时，能够合成并分泌具有氧化还原活性的酶类物质，将这些酶进行提取、分离与纯化，可得到

用于生物燃料电池、生物传感器等领域的生物催化剂。在微生物发酵过程中，严格控制培养基组成、温度、pH 值、溶解氧等培养条件，对微生物的生长速率、酶的合成与分泌量以及酶的活性具有关键影响。此外，基因工程技术的应用可对微生物进行改造，使其定向合成具有更高活性、更优选择性的酶类，进一步拓展了微生物发酵法制备生物催化剂的应用前景。

2 新型催化剂性能评估

2.1 活性评估

催化剂活性是衡量其性能的关键指标，它反映了催化剂加速化学反应的能力。通常用单位时间内反应物的转化率或产物的生成速率来表示。例如，在合成氨反应中，以单位时间内氮气和氢气转化为氨气的量来衡量催化剂活性。活性高的新型催化剂能在较低温度和压力下，使反应快速进行，降低反应能耗。评估催化剂活性的方法多样，常用的有间歇反应器法，将一定量的反应物和催化剂加入间歇反应器中，在特定条件下反应，通过监测反应物或产物浓度随时间的变化计算活性。还有连续流动反应器法，反应物以稳定流速通过装有催化剂的反应器，通过分析进出口物料组分来确定催化剂活性。

2.2 选择性评估

选择性是指催化剂促使反应物转化为目标产物的能力。在复杂的化工合成反应中，往往会发生多个副反应，高选择性的催化剂能减少副产物生成，提高目标产物的纯度和收率。例如，在乙烯氧化制环氧乙烷反应中，理想的催化剂应尽可能使乙烯转化为环氧乙烷，而减少二氧化碳和水等副产物的生成。选择性的计算通常是目标产物的生成量与反应物转化为所有产物的总量之比。实验测定时，需借助色谱、质谱等分析仪器，准确测定反应产物中各组分的含量，进而计算出催化剂的选择性。

2.3 稳定性评估

催化剂的稳定性关乎其在工业生产中的使用寿命和成本效益。稳定性包括热稳定性、机械稳定性和化学稳定性。热稳定性指催化剂在高温反应条件下，晶体结构、活性组分等不发生明显变化，维持催化活性的能力。机械稳定性涉及催化剂在反应过程中抵抗磨损、冲击等机械作用的能力。化学稳定性则体现为催化剂在与反应物、产物及反应环境中的其他物质接触时，不易发生化学反应而导致活性降低。评估稳定性的实验方法一般是在模拟工业生产的条件下，让催化剂长时间运行，定期检测其活性、选择性等性能指标，

通过分析性能随时间的变化情况判断。

除上述主要性能指标外，催化剂的比表面积、孔径分布、活性组分负载量等也对其性能产生影响，作用包括提高反应效率，降低催化剂性能等方面。

3 新型催化剂作用机理探讨

3.1 活性位点的作用

新型催化剂的活性位点是催化反应发生的关键部位。活性位点的性质和数量决定了催化剂的活性和选择性。例如，在多相催化反应中，反应物分子首先在活性位点上发生吸附。活性位点的电子结构、几何形状与反应物分子的匹配程度，影响着吸附的强弱和反应的选择性。对于某些金属催化剂，其表面的原子台阶、拐角等部位往往是活性较高的位点，这些位点能提供独特的电子环境，促进反应物分子的化学键断裂与重组。

3.2 反应路径的改变

新型催化剂能够改变化学反应的路径，使反应沿着活化能更低的途径进行。以合成气制甲醇反应为例，传统反应路径需要较高的活化能来克服一氧化碳加氢的能量垒。而新型催化剂通过与反应物分子形成特定的中间物种，改变了反应历程，降低了反应的活化能。具体来说，催化剂表面的活性位点先吸附一氧化碳和氢气分子，然后通过一系列的表面反应，生成甲醇的前驱体，最终转化为甲醇。这种新的反应路径大大提高了反应速率，在较低温度和压力下就能实现高效合成甲醇。

3.3 电子效应与空间效应

电子效应和空间效应在新型催化剂的作用机理中也起着重要作用。电子效应指催化剂活性位点与反应物分子之间的电子转移和电子云分布变化。例如，在酸碱催化反应中，催化剂的酸性或碱性位点通过提供或接受电子，促进反应物分子的质子转移或亲核、亲电反应。空间效应则涉及催化剂活性位点周围的空间结构对反应物分子接近和反应的影响。具有特定孔径和孔道结构的催化剂，如分子筛催化剂，能够根据反应物和产物分子的大小和形状，选择性地允许某些分子进入孔道内进行反应，从而实现择形催化，提高反应的选择性。

4 新型催化剂在化工合成中的应用市场前景

4.1 绿色化学与可持续发展

面对全球气候变化和资源枯竭的挑战，绿色化学成为化工行业的未来趋势。新型催化剂，尤其是那些能够显著提高反应选择性、减少副产物生成、以及利用可再生资源作为原料的催化剂，在促进可持续发展方面扮演

着至关重要的角色。例如，用于二氧化碳还原反应的催化剂，不仅能够将温室气体转化为有价值的化学品，还能实现碳循环利用，其市场前景被普遍看好。

4.2 能源转换与储存

在能源转型的大背景下，新型催化剂在燃料电池、太阳能电池以及氢能技术中的应用日益广泛。例如，质子交换膜燃料电池（PEMFC）中使用的催化剂需具备高活性、高耐久性和低铂负载等特点，以降低成本并提高能效。此外，电解水制氢技术中的高效催化剂能降低能耗，提高氢气生产效率，这些都是未来能源领域极具潜力的增长点。

4.3 制药与生物制造应用前景

在制药行业，新型催化剂尤其是生物催化剂（如酶）的应用，使得药物合成过程更加高效、环保。它们能够加速复杂分子的合成，减少有害溶剂的使用，提高收率和选择性。随着生物制造技术的不断进步，这一领域的应用市场将持续扩大，特别是在个性化医疗和精准医疗领域。

4.4 塑料循环与高分子科学前景

塑料污染问题是全球面临的重大挑战之一，而新型催化剂在塑料循环利用和高性能材料开发方面展现出巨大潜力。通过催化裂解技术，可将废弃塑料转化为单体或基础化学品，实现资源循环利用。同时，设计高性能聚合物的新型催化剂，能够提升材料的机械性能、耐热性和耐腐蚀性，满足高端制造业的需求。

5 结论

新型催化剂在化工合成中具有重要地位，其性能评估涵盖活性、选择性、稳定性等多个方面，通过多种实验方法和技术手段可实现准确评估。实例表明，新型催化剂在不同化工合成反应中展现出优异性能，显著提升了反应效率和产物质量。探究新型催化剂的作用机理，包括活性位点、反应路径改变及电子效应和空间效应等，有助于指导新型催化剂的设计与开发。展望未来，新型催化剂在绿色化工和新兴产业中具有广阔的应用前景，将为化工行业的可持续发展和科技创新提供强大动力，推动化工行业迈向新的高度。

参考文献：

- [1] 刘冠辰. 浅析绿色化学工程与工艺对化学工业节能减排的促进作用 [J]. 自然科学(全文版), 2021(34):107-108.
- [2] 向彦娟, 郑爱国, 王春明, 等. Pt-Sn 工业重整催化剂失活过程金属分散性的原子尺度表征 [J]. 石油学报(石油加工), 2023, 39(1):127-133, .