

化学工程与工艺中催化剂的选择与应用研究

张凯

四机赛瓦石油钻采设备有限公司 湖北荆州 434000

DOI: 10.12238/ems.v8i1.17629

[摘要] 催化剂在化学工程与工艺领域中具有决定性作用,其性能直接影响反应速率、选择性及能耗水平。高效催化剂的设计与合理选择可在降低反应活化能的同时,实现资源利用率和产品转化率的双重提升。研究围绕催化剂的结构构筑、性能调控与应用优化展开,重点分析活性中心、载体结构及反应条件对催化行为的耦合影响。通过多相、均相与生物催化体系的比较,揭示催化剂在不同工艺条件下的适配特征与失活规律,研究旨在为工业反应过程的节能增效与清洁转化提供理论依据与技术参考。

[关键词] 催化剂; 化学工艺; 反应机理; 结构优化; 工艺应用

当前,随着工业化进程的不断加快和科技水平的不断提高,中国的化工技术也在迅速发展,尤其在节能减排与绿色转化要求不断增强的背景下,催化剂的功能边界与性能期待被持续拓展。现代催化科学已从单纯追求反应速率向结构—性能—工艺耦合的多维设计方向转变,催化剂作为工艺系统的核心变量,其微观结构、反应环境与宏观转化效率之间的内在关联正成为研究热点。在构建高效反应路径、优化资源利用与实现过程绿色化方面,催化剂的精细化调控与工程适配能力成为工业界与学术界共同关注的关键议题。

一、化学工程与工艺中催化剂的结构构筑

(一) 活性中心的构成特征与作用机制

催化剂的活性中心是催化反应中最直接参与反应步骤的功能单元,其构成与电子结构对催化效率与反应路径选择具有决定性影响^[1]。在化学工程应用中,常见活性中心包括金属单原子、金属团簇、酸碱位点以及杂原子掺杂结构,不同构型展现出截然不同的反应行为。例如,过渡金属单原子催化剂凭借其最大化的原子利用率和可控的电子环境,在多相反应中表现出优异的催化活性;而双功能位点(如酸/碱共存)则能实现一步反应中的多路径协同,提升选择性与转化率。此外,活性中心的电子云密度、价态分布与配位环境直接影响反应物的吸附/解吸行为,进而调控能垒高度与中间体稳定性。因此,对活性中心的精准构筑与调控,是实现高效、选择性反应的核心前提。

(二) 载体结构类型与界面协同效应

催化剂载体不仅为活性组分提供稳定支撑,更在反应过程中扮演质量传递与界面调节的关键角色。载体结构主要包括表面积大小、孔径分布、表面官能团及其热力学稳定性等

参数,常用材料包括氧化铝、二氧化硅、分子筛及碳基材料等。多孔结构的引入可显著提高比表面积,提升反应物扩散效率与活性位点暴露程度,尤其是在大分子反应或多级反应路径中表现出优势。同时,载体表面的羟基、羧基等官能团可与活性组分发生协同相互作用,调节其分散状态与价态分布,从而增强催化稳定性与选择性。界面区的电荷迁移行为及局域极性环境也会影响电子传递效率和中间体结合强度,进而改变整体反应路径。因此,合理设计载体结构与调控界面相互作用,是提升催化剂整体性能的重要策略。

(三) 多尺度空间结构与催化性能关联

多尺度空间结构是连接催化剂微观构型与宏观性能表现的关键桥梁。催化材料常采用纳米结构、介观层次结构及宏观三维骨架等多层级体系,以实现反应物扩散通畅、活性中心充分暴露与热稳定性提升的多重目标。纳米尺度下,粒径效应显著,量子限域导致表面原子比例升高、活性增强;而介观尺度如有序介孔材料(如SBA-15、MCM-41)则提供良好的孔道网络,有利于控制反应物/产物的传递路径与停留时间;在宏观层级,蜂窝状、核壳式结构或磁性骨架构型,不仅便于催化剂的分离与回收,还可通过壳层调控反应微环境,实现过程控制的精细化。空间结构设计还需考虑反应热管理与机械强度,避免在工业放大中因结构坍塌导致活性衰减。通过多尺度协同构筑,实现结构稳定性、活性暴露度与反应效率的最优平衡,已成为当前高性能催化剂设计的重要方向^[2]。

二、化学工程与工艺中催化剂的性能调控

(一) 反应条件对催化性能的影响机制

催化剂性能的实际发挥往往高度依赖于反应环境,诸如温度、压力、pH值及溶剂类型等因素,均可对其活性、选择

性与稳定性产生显著影响。在高温条件下,某些反应活性得以增强,但也可能加剧催化剂的烧结与结构崩解,从而降低长时间运行的稳定性。相对而言,低温操作有利于控制副反应发生,提高选择性,但可能受限于活化能不足,反应速率降低。在液相反应中,溶剂极性与介电常数对催化路径中的中间态能垒有直接影响,例如极性溶剂可稳定带电中间体,促使路径向特定方向偏移。此外,气压调节亦可重构物质传输路径,影响反应物与催化表面的接触效率。pH值的改变则在酸碱催化与生物催化体系中尤为关键,直接关联到催化中心的质子化状态与反应物结构稳定性。因此,在具体工艺设定中,需将反应条件与催化剂结构耦合优化,实现对性能表达的最大化调控。

(二) 多相、均相与生物催化剂的性能特征比较

多相、均相与生物催化剂在结构特征、反应机理与适配工艺方面存在本质区别,其性能调控逻辑也随之差异化^[3]。多相催化剂以固体形式存在,适用于连续化反应系统,具备良好的热稳定性与可回收性,常用于加氢、裂化、尾气处理等高强度条件下的反应。然而,其表面活性位点暴露程度受限,活性物种易团聚或迁移,需通过结构优化与载体调节提升使用效率。相比之下,均相催化剂以分子或离子态分散于反应介质中,反应活性位点高度可控,反应物接触充分,特别适合精细化学品合成与立体选择性反应;但其面临催化剂回收困难、稳定性差等工程化瓶颈。生物催化剂则在温和条件下展现高专一性与高选择性,常用于医药、食品与环境友好型反应体系,但其热稳定性与耐溶剂性较弱,对反应环境依赖性强。三类催化剂在性能表现与工艺匹配方面各有优势,需结合目标反应类型与操作需求进行合理选型与定制化调控。

(三) 催化剂失活机制与稳定性调控

催化剂的失活是制约其长期稳定运行与工业化放大的核心问题,常见失活机制包括烧结、积碳、中毒与结构重构等。在高温反应中,活性组分因粒径增长或迁移聚集形成烧结,导致比表面积骤降与活性位点流失;积碳则多见于碳源富集或选择性差的体系中,碳沉积覆盖活性表面并阻断反应物进入通道,严重影响催化活性。中毒问题则表现为催化位点与反应中杂质(如S、Cl、P等)形成强吸附络合,导致电子结构永久性改变,活性丧失。结构重构则多见于酸碱催化或水热环境中,表现为晶体结构变性或载体溶蚀,进而影响物理与化学稳定性。为应对失活问题,当前策略包括:采用抗烧

结结构(如包覆/锚定技术)、引入抗毒改性剂、开发可再生催化材料、设计具有在线再生能力的工艺系统。实现催化剂的高稳定性与可循环利用,不仅有助于降低运行成本,更是推动绿色可持续化工生产的重要技术路径。

三、化学工程与工艺中催化剂的应用优化

(一) 优化反应条件以提升转化效率

在催化反应过程中,科学合理地设置反应条件对转化率的提升具有决定性意义^[4]。以固定床反应器中一氧化碳加氢合成甲醇为例,常规操作温度控制在210~270℃,但实际中应结合催化剂的活性温区窗口进行分段升温调控,以防止副反应发生。在入口段设置预热区,通过分布式控温策略,使催化剂在不同段落实现选择性反应过程,如在中段形成CO转化活性中心聚集区。在压力调节方面,适宜提高至5~8MPa可明显增强反应速率,但需结合催化剂的孔道尺寸与表面能判断其传质极限,以避免反应速率受控于扩散过程。此外,气液反应体系中应采用双进料装置,优化气体分布板结构,保证各反应物流与催化剂均匀接触。在微通道反应器与管式反应器的切换中,还应匹配反应热释放速率与催化剂耐热区间,避免因局部过热造成活性中心失效。

进一步优化还需构建反馈调控系统,实现过程参数的实时监控与动态修正。通过配置在线红外分析仪与色谱联动装置,实现反应中关键组分的浓度变化追踪,再结合PID算法构建温度-流速-反应浓度闭环控制模式。部分高阶装置中引入动态响应系统,在转化率出现波动时自动调整催化剂床层进料流量,实现对反应行为的快速纠偏。在液相催化系统中,溶剂极性的微调亦可显著影响反应路径,例如在胺类催化氧化体系中通过加入少量乙腈调节反应极性窗口,可增强中间体稳定性、提升催化选择性。此外,部分催化体系采用多级反应腔结构,在不同反应阶段分设独立温压区并联操作,实现分步最优转化。

(二) 构建多功能协同催化系统

构建多功能协同催化系统的关键在于实现不同活性功能的空间整合与路径互补,使反应在单一装置中完成多个步骤、实现多级转化。常见策略包括双金属共嵌、酸碱杂化、氧化还原位点耦合以及界面功能模块融合。例如,在催化氧化脱硝反应中,常采用V-Ce/TiO₂体系,其中V位提供氧化还原功能,Ce位增强氧化储氧能力,TiO₂为高热稳定性载体。实际合成中可采用共沉淀+负载复合策略:首先将Ce与Ti进行

均匀共沉淀，获得具有结构记忆性的前驱体材料，再在恒温条件下引入钒源进行浸渍，随后进行分段焙烧。焙烧曲线的设定尤为关键，需通过 DSC 分析确定最优晶型形成温度窗口，以防活性物种迁移或晶型崩解。在催化体系组装阶段，为防止位点间电子干扰与团聚现象，常引入介孔硅模板或碳包覆层作为物理间隔结构，以控制位点间距并形成分区功能区，实现反应分布控制。在多功能催化剂的装填上，可采用逐层填充或双区隔离床方式，分别部署氧化位点层与还原位点层，提升空间利用率与路径耦合效率^[5]。

另一种常用构建方式是将多功能嵌入一体化反应装置中，如在选择性加氢与异构化联动反应中，催化剂须同时具备金属加氢活性与酸性异构活性。此类反应中多采用 Pt/SAPO-11 型复合催化剂，利用 Pt 颗粒实现加氢过程，而 SAPO-11 提供中等强度酸性中心引导骨架重构。在实际应用中，通过双模板法引入介孔与微孔双尺度孔道，增强物质传递能力与反应路径灵活性。材料合成后，需通过 TEM 与 XPS 测试确保 Pt 分散度与酸中心的有效暴露程度。为了保障协同反应顺利进行，反应器结构也需优化设计，通常采用分段控温与并联进料策略，实现反应热与物料的动态平衡。在反应控制上，加入质谱在线监测与压力反馈系统，确保协同路径中间体不发生偏移或副反应。同时，为应对多功能体系中可能存在的结构干扰，应设置物理分区或利用催化剂表面修饰（如羧基/氨基官能团引导）实现位点选择性激活。

（三）开发可再生与循环使用催化材料

实现催化剂的高效再生与循环使用，是提升资源利用效率与降低运行成本的重要手段。在实际操作中，常见再生策略包括热处理法、化学洗脱法与结构更新法。以高温气相反应中失活的 Ni 基催化剂为例，通常采用程序升温气氛再生（TPR）方式恢复其活性。具体操作包括：首先以 200° C 的氮气预处理 30 分钟以清除挥发性杂质，随后逐步升温至 600° C，引入 10% H_2/N_2 混合气还原脱附积碳与氧化物覆盖层，最后以惰性气体缓冷，以防催化相变。在液相反应系统中，则需采用化学洗脱法以剥离沉积层。以 Pd/C 催化剂为例，可使用稀硝酸与乙醇混合溶液，在超声辅助下进行浸洗处理，通过络合提取重构表面位点，过程控制在 pH3.5~4.5 内以维持碳载体结构稳定。整个洗脱周期需实时监控金属流失率与催化剂颗粒分布，结合 BET 测试与 TEM 扫描评估再生质量。再生过程中需严格控制残留洗液与金属回收操作，配套建设

封闭型离心分离+膜处理系统以实现无污染排放。

在催化剂循环设计方面，开发具有可回收性的催化材料是当前的核心技术路径之一。以磁性可分离催化剂为例，通过在铁氧体核外包覆 SiO_2 壳层，再负载活性金属组分（如 $Fe_3O_4@SiO_2-Pd$ ），可在反应后通过磁力分离实现快速高效回收。其合成流程包括溶胶-凝胶包覆、静电吸附负载与低温还原处理，最终形成稳定性强、分散性高的功能复合材料。为防止回收过程中的团聚或活性流失，反应器设计中引入内置磁场梯度结构，使催化剂回收区与反应区分离，实现同步转化与分离。此外，在多次循环使用后需评估催化活性的衰减轨迹，利用原位红外、XPS 等技术监控其表面结构变化，结合活性趋势图拟合衰减规律。在工艺系统层面，推荐建立“反应-分离-再生-复用”的闭环运行模块，并设置再生周期提示系统，基于活性临界值自动触发再生流程，提升系统自适应调控能力。

四、结语

催化剂作为化学工艺系统的核心要素，其结构构筑、性能调控与应用优化直接决定了反应效率与工艺稳定性。通过活性中心设计、载体协同构建与空间结构集成，可有效提升催化反应的活性与选择性；结合反应条件精准匹配、多功能位点融合与循环利用机制，催化体系的工程适应性绿色化水平不断增强。研究聚焦于关键耦合因素的深入剖析与实操路径的系统呈现，旨在为构建高效、稳定、可持续的催化工艺体系提供理论支撑与技术依据，推动化学工程领域向更加智能、清洁、高值方向演进。

【参考文献】

- [1] 隋冲. 化学工程与工艺中绿色化工技术的应用分析[J]. 山东化工, 2023, 52(13): 131-132+136.
- [2] 李辉. 化学工程工艺中绿色化工技术的应用[J]. 化工管理, 2023, (06): 151-154.
- [3] 南文文. 绿色化工技术在化学工程与工艺节能中的运用探讨[J]. 中国石油和化工标准与质量, 2023, 43(01): 169-171.
- [4] 姜英磊. 绿色化工技术在化学工程工艺中的应用研究[J]. 山西化工, 2022, 42(09): 126-128.
- [5] 毛海玉. 绿色化工技术在化学工程工艺中的应用研究[J]. 现代盐化工, 2022, 49(02): 54-55.

作者简介：张凯（1988.10—），男，汉族，湖北荆州人。