

内 容 提 要

本书比较系统地介绍了催化剂载体的作用原理、物理化学性质及制备方法。具体内容包括：载体的物理性质、晶体结构、吸附原理、固体酸碱等基础理论知识和氧化铝、分子筛、活性炭、硅胶、硅藻土等几种重要载体的结构和制备方法等。

本书可供科研、生产部门的技术人员、工人以及高等学 校、中等专业学校有关师生阅读。

3107166

催化 剂 载 体

朱洪法 编

*

化学工业出版社出版

(北京和平里七区十六号楼)

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

*

开本787×1092¹/₃₂印张16字数366千字印数1—5,950

1980年4月北京第1版 1980年4月北京第1次印刷

书号15063·3147定价1.65元

前　　言

在近代，几乎有一半以上的化工产品的生产过程采用了催化加工工艺。应用催化剂可以大大加快化学反应速度，所以可以这样认为，化学工业的高速发展是与催化技术的进展分不开的。石油化学工业之所以能在短短二、三十年的时间内获得如此巨大的进展，其中一个重要因素，就是催化剂的广泛应用。随着环境保护科学的出现，使用催化技术防止污染的方法，包括废气及废水处理，特别是燃料油和烟道气的脱硫、汽车排气处理等等，催化处理的方法也认为是大有希望的。因此，各国对于催化剂的研制和生产都予以很大的重视。

我国催化剂的研制，在解放前还是一个空白，解放以后，随着化学和石油化学工业的发展，催化剂的研制及生产都取得了很大成绩。

载体是催化剂的重要组成部分，对于很多工业催化剂来说，活性组分决定以后，载体的种类及性质往往会对催化剂性能产生很大影响。而选择和制备一个好的载体往往需要多方面的知识。国外关于催化剂载体的制备理论、方法大都散见于有关催化剂制备的文献中，专门介绍它的书籍却很少。为了适应催化技术的发展，本书从实用角度出发，系统介绍了有关催化剂载体的作用原理、物理化学性质及制备方法。在基础理论知识介绍的基础上，分别介绍氧化铝、分子筛、活性炭、硅胶及硅藻土等几种重要催化剂载体的结构及制备方法，供科研、生产及教育部门从事催化剂研制和生产工作的同志参考。由于编者知识水平所限，缺点和错误之处定然不少，望读者批评指正。

目 录

前言

第一章 载体的作用及种类	1
1-1 概述	1
1-2 载体的作用	4
1-3 载体的种类	13
1-4 杂质含量对载体作用的影响	22
1-5 载体性质与催化剂活性的关联	24
第二章 载体的物理性质	26
2-1 概述	26
2-2 粒径及粒度分布	28
2-2-1 单个颗粒的粒径	28
2-2-2 粒度分布及平均直径	30
2-3 固体颗粒的自然堆角和内摩擦角	36
2-4 密度	38
2-4-1 松(装)密度	38
2-4-2 堆密度、颗粒密度和骨架密度	39
2-5 空隙率	41
2-6 多孔颗粒的孔结构	43
2-6-1 孔隙率与孔体积	43
2-6-2 平均孔半径	46
2-6-3 孔(隙)分布	47
2-7 比表面积	53
2-8 载体的物理性质对催化活性的影响	59
第三章 固体的晶体结构	65

3-1 概述	65
3-2 晶系和晶面	67
3-3 晶体中的原子堆积	70
3-4 晶体的键型	74
3-5 晶体的分类	76
3-5-1 金属	76
3-5-2 离子晶体	78
3-5-3 共价晶体	79
3-5-4 分子晶体	80
3-6 晶体的不完整性	82
3-7 晶体结构的测定	87
第四章 固体表面化学	91
4-1 概述	91
4-2 固体表面的真实结构	92
4-3 固体表面和吸附作用	95
4-3-1 比表面自由能	96
4-3-2 物理吸附与化学吸附	97
4-3-3 物理吸附理论	98
4-3-4 吸附位能图	108
4-3-5 吸附热	110
4-3-6 吸附速度	112
4-3-7 吸附引起的肿胀	112
4-3-8 表面性质与吸附能力的关系	116
4-4 固体表面吸附状态观察方法	119
4-4-1 升温脱附气体质谱法	119
4-4-2 光电子能谱法	121
4-4-3 低能电子衍射法	125
4-4-4 红外光谱法	126
4-4-5 电子探针X-射线显微分析	127

4-4-6 扫描式电子显微镜	129
第五章 固体酸碱	132
5-1 固体酸碱的产生及定义	132
5-2 酸中心类型的测定方法	138
5-3 酸强度和碱强度	140
5-4 酸浓度和碱浓度	143
5-5 固体酸碱结构	145
第六章 凝胶及其制备	159
6-1 分散体系的概念	159
6-2 溶胶	161
6-3 胶体粒子的电荷	163
6-4 胶体粒子的结构	167
6-5 亲液胶体与疏液胶体	169
6-6 胶凝作用与胶溶作用	170
6-6-1 胶凝作用	170
6-6-2 胶溶作用	173
6-6-3 稳定剂	174
6-7 凝胶的形成	175
6-8 凝胶的老化	177
6-9 凝胶的洗涤	180
6-10 凝胶的干燥	181
第七章 载体附载活性组分的方法	185
7-1 浸渍法	185
7-1-1 概述	185
7-1-2 浸渍法的基本原理	186
7-1-3 粒状载体的浸渍方法	189
7-2 共沉淀法	192
7-3 离子交换法	195
7-4 均相催化剂的载体化	197

第八章 载体的成型	208
8-1 载体颗粒的形状与大小	208
8-2 固体粉料的混和	210
8-3 粉末颗粒的聚集因素	213
8-4 成型过程中粘结剂和润滑剂的选择	217
8-5 载体的各种成型方法	219
8-5-1 压缩成型法	220
8-5-2 挤出成型法	225
8-5-3 转动造粒法	227
8-5-4 喷雾成型法	230
8-5-5 油中成型法	234
8-6 载体的机械强度	240
第九章 载体的热处理	243
9-1 概述	243
9-2 干燥	244
9-3 烟烧	247
9-3-1 热分解	248
9-3-2 再结晶	248
9-3-3 烧结	254
第十章 氧化铝	259
10-1 概述	259
10-2 氢氧化铝	267
10-2-1 氢氧化铝的分类	267
10-2-2 氢氧化铝的晶体结构	268
10-2-3 氢氧化铝的热转化	277
10-2-4 氢氧化铝的制备方法	283
10-2-5 制备过程对氢氧化铝性质的影响	287
10-3 氧化铝的分类和晶体结构	298
10-3-1 氧化铝的分类	298

10-3-2 氧化铝的晶体结构	299
10-4 氧化铝的孔结构	305
10-4-1 氧化铝孔的产生及类型	305
10-4-2 制备过程对氧化铝物性的影响	308
10-5 氧化铝的表面性质	315
10-6 氧化铝在催化过程中的应用	319
第十一章 分子筛	348
11-1 概述	348
11-2 分子筛的命名	359
11-3 分子筛的结构	360
11-3-1 分子筛的化学组成	361
11-3-2 分子筛的结构单元——四面体	362
11-3-3 晶穴、晶孔和孔道	364
11-3-4 A型分子筛的晶体结构	366
11-3-5 X型及Y型分子筛的晶体结构	368
11-3-6 丝光沸石的晶体结构	371
11-4 分子筛的合成	373
11-4-1 碱性硅铝凝胶的形成及转化机理	374
11-4-2 X型及Y型分子筛的合成	377
11-4-3 高硅Y型分子筛的合成	383
11-5 分子筛的吸附性能	386
11-5-1 分子筛的选择吸附性	387
11-5-2 分子筛的特殊吸附性	389
11-6 分子筛的离子交换性能	391
11-7 分子筛的催化活性中心	396
11-8 分子筛用作催化剂载体的应用	401
第十二章 活性炭	410
12-1 概述	410
12-2 活性炭的种类	414

12-3 活性炭的制备方法及制炭理论	417
12-3-1 活性炭的制备方法	417
12-3-2 制炭理论与非碳组分对活性炭的影响	423
12-4 活性炭的微晶结构	426
12-5 活性炭的细孔结构	429
12-6 活性炭的表面化学结构	433
12-7 活性炭的吸附性质及吸附机理	437
12-8 活性炭作催化剂载体的应用	441
12-9 活性炭的再生	448
第十三章 硅胶	453
13-1 概述	453
13-2 硅胶的制备方法	458
13-2-1 硅胶制备过程中的物理和化学变化	459
13-2-2 制备条件对硅胶结构的影响	462
13-2-3 特殊性能硅胶的制法	465
13-2-4 多孔硅胶的扩孔处理	468
13-3 硅胶的表面性质和催化性能的关系	473
第十四章 硅藻土	480
14-1 概述	480
14-2 硅藻土的种类	484
14-3 硅藻土的化学组成	485
14-4 硅藻土的孔结构	486
14-5 硅藻土的相组成	487
14-6 硅藻土的热稳定性	490
14-7 以硅藻土作载体的催化剂制备方法	492
主要参考文献	495

第一章 载体的作用及种类

1-1 概 述

多相催化反应使用的固体催化剂大多数是由活性组分、助催化剂及载体三部分组成。活性组分对催化剂的活性起着决定性作用。助催化剂与载体的作用有时不太好区分，实验中发现，在活性组分中加入少量其它物质（助催化剂）后，催化剂在化学组成、离子价态、酸碱性质、晶体结构、表面积大小、机械强度及孔结构上都可能产生变化，从而大大增加催化剂的活性及选择性，而载体有时候也能起到这种作用。所以一般将催化剂中含量较少（通常低于总量的百分之十）而又是关键性的第二组分称作助催化剂，如果第二组分的含量较大，而且它所起的作用主要是改进所制备催化剂的物理性能时，就称为载体。表1-1示出了在一些催化反应中所用固体催化剂的活性组分、助催化剂及载体。

载体用于催化剂的制备上，原先的目的是为了节约贵重材料（例如铂、钯等）的消耗，即把贵重材料分散支载在体积松大的物体上，以代替整块材料使用。另一个目的是使用强度较大的载体，可以将催化剂制成能经受机械冲击，使用时不致因逐渐粉碎而增加对反应器中流体的阻力。所以，开始选择载体时往往主要从物理、机械性质、来源容易及价格低廉等方面加以考虑。象碎砖、木炭、浮石等都可用作催化剂载体。而到后来，由于使用不同载体而使催化剂活性产生差异，才了解到载

体还有其它多方面的作用。

作为催化剂的载体可以是天然物质（如浮石、硅藻土、白土等），也可以是人工合成物质（如硅胶、活性氧化铝等）。天然物质的载体常因来源不同而其性质有较大的差异，例如，不

表 1-1 一些催化反应中所用催化剂的活性组分、助催化剂及载体⁽¹⁾

反 应	活 性 组 分	助 催 化 剂	载 体
加 氢	Pt, Pd, Ru, Rh Ni, Co	MoO ₃ 等 Cr ₂ O ₃ 等	C, Al ₂ O ₃ , BaSO ₄ , SiO ₂ , C, 硅藻土
加 氢 分 解 脱 硫 其 他	Co, Mo, Ni Pt, Pd, Ru, Rh		Al ₂ O ₃ C, Al ₂ O ₃ , BaSO ₄
气 相 氧 化 苯 醇(苯)	V ₂ O ₅	TiO ₂ , P ₂ O ₅ , K ₂ SO ₄ , SnO ₂ , Ag ₂ O	浮石, 刚铝石, SiO ₂ 刚玉, SiC
苯 醇(邻二甲苯)	V ₂ O ₅	TiO ₂ , TeO ₂ , MoO ₃	石英, SiC, TiO ₂ α -Al ₂ O ₃
葱 醛(葱)	V ₂ O ₅	Ag ₂ O, K ₂ SO ₄ , SnO ₂ , Fe ₂ O ₃ , Na ₂ O	浮石, 刚铝石
马来酸酐(苯)	V ₂ O ₅	MoO ₃ , P ₂ O ₅ , WO ₃ , CoO, CuO	浮石, 硅藻土, SiO ₂ , SiC, TiO ₂
马来酸酐(丁烯)	V ₂ O ₅	MoO ₃ , P ₂ O ₅ , WO ₃ , CoO, CuO	浮石, 硅藻土, SiO ₂ , α -Al ₂ O ₃ , TiO ₂
芳 族 脂	V ₂ O ₅	MoO ₃ , P ₂ O ₅ , Cr ₂ O ₃ , Sb ₂ O ₃ , CoO	Al ₂ O ₃ , α -Al ₂ O ₃ , 硅藻土, TiO ₂
丙 烯 脂	MoO ₃	Bi, P, Sb, V, Ce, Mn, W	SiO ₂
	Sb ₂ O ₃	Fe, V, Sn	SiO ₂
	Bi ₂ O ₃	Ce, V, Fe, P, W,	SiO ₂
环 氧 乙 烷	Ag ₂ O	Ba, Ca	浮石, α -Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , 刚铝石, SiC

续表

反 应	活 性 组 分	助 催 化 剂	载 体
脱 氢 烷 烃 烯 烃 醇	Cr ₂ O ₃ , MoO ₃	MoO ₃ , V ₂ O ₅ , WO ₃	Al ₂ O ₃
	Cr ₂ O ₃		Al ₂ O ₃
	Fe ₂ O ₃ -Cr ₂ O ₃ -K ₂ O		(MgO)
	MgO-Fe ₂ O ₃ -CuO-K ₂ O		硅藻土, SiO ₂
异 构 化 重 整 烷 烃 烯 烃	Cu ₂ O-Cr ₂ O ₃	SbCl ₃	
	Pt, Pd, Ni		Al ₂ O ₃
	Cr ₂ O ₃ , MoO ₃ , V ₂ O ₅		Al ₂ O ₃
	AlCl ₃		石英, 铁矾土
	Pt		SiO ₃ -Al ₂ O ₃
	ZnCl ₂ , SiO ₂ -Al ₂ O ₃ , P ₂ O ₅		—
	Al ₂ O ₃ , SiO ₂ -MgO		—

同来源的白土，其成分的差别就很大。而且，由于天然物质的比表面积及细孔结构是有限的，所以，目前工业上所用载体大都采用人工合成的物质，或在人工合成物质中混入一定量的天然物质后制得。

虽然，工业上使用的载体种类不一，并随活性组分及反应种类而异。一般来讲，一个理想的催化剂载体应该具备下列条件：

- i) 具有能适合反应过程的一定形状；
- ii) 有足够的机械强度，以经受反应过程中的机械或热的冲击；有足够的抗拉强度，以抵抗催化剂使用过程中逐渐沉积

在细孔里的污浊物的破裂作用；

iii) 有足够的比表面积及细孔结构，以便在其表面能均匀地支载活性组分；

iv) 有足够的稳定性，以抵抗活性组分、反应物及反应产物的化学侵蚀，并能经受催化剂的再生处理；

v) 导热系数、比热、比重适宜；

vi) 不含有任何可以使催化剂中毒的物质；

vii) 原料易得，制备方便，制备成催化剂后不至于造成环境污染。

1-2 载体的作用

载体的机械功用是作为活性组分的骨架，它可以分散活性组分并增加催化剂的强度。而大量实验结果表明，载体除掉这种纯粹的机械功用以外，还影响催化剂活性和选择性。例如，在乙烯氧化制醋酸乙烯的反应中，由于载体的组成不同和用不同的煅烧温度处理，会对催化剂活性产生影响。从表 1-2 中可以看出，当载体组成相同，而煅烧温度不同(900℃及1200℃)，产物生成速度相差三倍。反之，不同组成的载体在同一温度(900℃)下煅烧，产物的生成速度也相差三倍。由此可见，载体对催化活性的影响是重要的。对于同一反应，使用不同种类的载体，催化活性也会发生很大变化，表 1-3 即为不同载体对肉桂醛加氢反应速度的影响^[1]。又如用羰基铑化合物 [Rh₄(CO)₁₂] 进行 CO-H₂ 反应发现，使用不同种类的支载体，会对反应的选择性产生重大影响^[2]，如表 1-4 所示。

一般情况下，载体的作用在于改进催化剂颗粒的物理性质，例如，增加活性组分的表面积是明显的例子，但在很多情况下，活性组分附载在载体上后，载体与活性组分之间会发生

表 1-2 氯化铝载体的活性比较

载体组成, %	煅烧温度, °C	醋酸乙烯生成速度 克分子/克·小时 × 10 ³	
		Al ₂ O ₃ 99, SiO ₂ 1	Al ₂ O ₃ 90, SiO ₂ 10
Al ₂ O ₃ 99, SiO ₂ 1	900	1.77	
Al ₂ O ₃ 90, SiO ₂ 10	900	0.61	
Al ₂ O ₃ 90, SiO ₂ 10	1200		1.74

表 1-3 不同载体对肉桂醛加氢反应速度的影响①

载 体	甲 醇		乙 醇		乙 酸	
	% HC ^② 进料速度, 毫升 H ₂ /分					
C	55	18	50	21	73	29
BaSO ₄	96	17	91	6	60	5
BaCO ₃	54	12	—③	—③	—③	—③
CaCO ₃	72	16	95	4	54	11
Al ₂ O ₃	94	17	100	6	77	24
硅藻土	93	14	—③	—③	99	7
MgCO ₃	56	12	84	6	35	15

① 200毫克 5% 的钯载在载体上, 2.0毫升肉桂醛, 50毫升溶剂; 室温常压;

② 反应终止后, 产物中氢化肉桂醛的百分含量;

③ 中毒情况未测定。

某种形式的作用, 以致活性表面的本质产生改变, 这从上面所举几个例子也能得到启示。根据不同情况, 载体在催化剂中可以起到以下几方面的作用^[2]:

(1) 增加有效表面和提供合适的孔结构

制得催化剂的有效表面及孔结构是影响催化活性和选择性

表 1-4 不同载体对 $\text{Rh}_4(\text{CO})_{12}$ 催化剂进行
 $\text{CO}-\text{H}_2$ 反应选择性的影响⁽⁵⁾

金属氧化物载体 M-M _x O _y	反 应 温 度 ℃	CO转化率 ⁽²⁾ (5小时) %	生 成 物 的 碳 效 率 ⁽¹⁾ , %				烃 类 ⁽⁴⁾			
			CH ₃ OH	C ₂ H ₅ OH	CH ₃ CHO	CH ₃ COOCH ₃				
I _a ZnO (20克)	220	9.7	95.4	0	0	0	4.6 0 0 0			
I _a MgO (20克) CaO (20克)	220 232	25.7 8.0	90.5 98.3	1.6 0.3	0 0	0 0	7.8 0 + 0 + + 0			
La ₂ O ₃ (20克) Nd ₂ O ₃ (20克) CeO ₂ (20克)	224 220 238	36.4 27.8 19.5	20.2 25.2 10.4	61.1 54.3 38.8	+ ⁽³⁾ + 2.2	+ + +	11.9 13.7 27.1	0.8 1.7 6.8	4.4 3.8 10.2	1.3 1.0 4.4
TiO ₂ (20克) ZrO ₂ (20克) ThO ₂ (20克)	210 215 175	45.6 23.3 39.5	3.9 14.8 12.7	22.8 47.0 39.1	+ 0.6 +	+ - +	42.2 34.3 21.9	9.6 0.8 2.7	14.8 1.2 13.2	6.8 0.7 10.0
SiO ₂ (5克) γ -Al ₂ O ₃ (20克) WO ₃ (20克)	235 250 200	13.5 43.0 38.3	3.0 + 0	3.0 + 0	- -	- -	66.7 67.0 84.2	9.0 12.0 6.9	13.3 6.0 4.8	4.7 6.0 3.9

① 碳效率 = $i\text{Ci} / \sum_{i=0}^n i\text{Ci} \times 100$, i=生成物分子中的碳数目; ② CO:H₂=20:45厘米汞柱,

③ “+”表示0.1%以下;

④ C₂=C₂H₄+C₂H₆; C₃=C₃H₆+C₃H₈; C₄=C₄H₈+C₄H₁₀;

⑤ 活性组分为 $\text{Rh}_4(\text{CO})_{12}$ 为0.10~0.12克, 附载在上述各种金属氧化物上制成催化剂。

的重要因素。采用合适的载体和制备方法，可使附载的催化剂得到较大的有效表面及适宜的孔结构。一些活性组分，如粉状的金属镍、金属银等，它们对某些反应虽有活性，但只有当附载于某种载体上并经成型后才能付于实用。又如氧化钼及氧化铬是结晶发达容易分散的细粒，如果用适当的方法附载在氧化铝上就可以显著提高催化活性。在这种情况下，加入载体的结果使活性组分有较大的暴露表面，促使微粒分散强化，增加了比表面积，从而提高本身表面积小的活性组分的催化活性。使用少量的活性组分就能获得同样的表面积和活性，这对于象铂、钯之类的贵金属来说更具有特殊意义。

一般来讲，选作催化剂用的载体希望具有适合于该反应的反应物分子进入的细孔结构。例如，选择分子筛作催化剂载体时，它不但具有筛分分子的作用，而且本身也具备催化作用，可以做到只使特定大小的反应物分子发生选择催化作用。举例来说，石油催化裂化经常采用以稀土金属离子进行阳离子交换制得的X型或Y型分子筛以及 $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ 作催化剂。由于反应时产生的炭会附着在催化剂上而使催化剂活性逐渐下降，进行催化剂再生时就会产生大量的一氧化碳而污染环境。这时，为了使产生的一氧化碳完全氧化，可以添加由Pt附载在NaA型分子筛上制得的催化剂，这种 Pt/分子筛催化剂的细孔结构对石油分子的分解活性并不发生影响，但它却能使一氧化碳完全氧化。这个例子明显地说明了载体在这里提供了合适的细孔结构。

（2）提高催化剂的机械强度

固体催化剂粒子抵抗摩擦、冲击、受压和由于温度变化、相变等各种原因引起的各种应力的能力，可统称为机械强度或机械稳定性。有些催化剂往往需要将活性组分附载于载体后，才能

使催化剂获得足够的机械强度。机械强度较高的催化剂，可以经受颗粒与颗粒、流体与颗粒、颗粒与反应器之间的摩擦，运输、装填过程的冲击，由于相变、压力降、热循环等引起的内应力及外应力，而不显著磨损或破碎。

无论是固定床或流化床用催化剂，都要求催化剂具有一定机械强度。而固定床催化剂机械强度的要求随反应器类型和使用条件而异，主要应考虑催化剂装填、取出时的磨损，由于压力变化引起的破坏，因炭析出引起的粉碎，以及由于急冷、受热引起破坏等。固定床催化剂有时用了载体，强度仍嫌不够，还需用添加粘合剂等方法来强化催化剂。例如，人造刚玉、碳化硅等都具有很高的机械强度及导热性，常用作一些氧化反应所用的催化剂载体。

流化床催化剂则要求具有很高的耐磨强度。例如萘催化氧化反应，用 V_2O_5 作催化剂，反应是在流化床上进行的强放热反应，反应物质在爆炸范围内操作，有发生深度氧化的可能，因此要求催化剂载体具有高度热稳定性及耐磨强度。这时可以选择比表面比较小，或孔隙率比较大的 SiO_2 作载体，能满足对萘氧化催化剂性能的要求。又如丙烯氨氧化反应催化剂 $Bi_2O_3 \cdot MoO_3 \cdot SiO_2$ ，其中起着载体作用的 SiO_2 ，就是为了提高催化剂的耐磨性能。

(3) 提高催化剂的热稳定性

大家知道，氧化反应和加氢反应都是放热量比较大的反应，尤其在高空速及高反应物浓度下操作时必须很好地除去反应热，以防止反应热蓄积而引起催化剂烧结。

不使用载体的催化剂，活性组分颗粒紧密接触，由于相互作用，会使活性组分颗粒聚集增大，减少表面积，容易引起烧结，导致活性下降。将活性组分附载在载体上，就能使颗粒分

散开，防止颗粒聚集，提高分散度，增加散热面积和导热系数，有利于热量的除去，从而增加催化剂的活性。例如将铜和钯单独用作加氢、脱氢反应的催化剂，在200℃时，很快就因发生半熔和烧结而会失去活性。如果将这些催化剂附载在 Al_2O_3 或 $\text{SiO}_2\text{-}\text{Al}_2\text{O}_3$ 上，由于提高了分散度，即使在300~500℃下仍能长期使用而不烧结^[2]。由此可见，载体明显地提高了催化剂的热稳定性，延长了催化剂的寿命。从这个例子也可看出，选择的载体本身也应具备一定的热稳定性，不然的话，在反应时，会由于高温下载体自身晶相变化，以及不均匀膨胀而产生热碎裂。所以，实际使用的载体，有很多是导热性能好的耐火材料。

（4）提供活性中心

活性中心是催化剂表面上具有催化活性的最活泼区域。活性中心不是杂乱无章地散布在催化剂表面上，而是具有一定的几何规律。通常认为，多相催化剂不会是以全部物质参加反应，催化作用只是由一小部分特别活动的表面部分所引导而进行。例如，以合成氨的铁催化剂为例，表面原子只占全部催化剂的 $1/200$ ，而活性中心部分还要比它小10倍，只有 $1/2000$ 。发生催化反应时，一个反应物分子中的不同原子可能同时被几个邻近的活性中心所吸附，由于活性中心力场的作用，使分子变形而生成活化络合物。然后活化络合物分子中的键进行改组而形成新的化合物。一般认为，催化剂活性中心的形成与载体的性质无关，但有些载体，尤其是具有固体酸碱结构的载体也可以提供某种功能的活性中心。以铂重整反应为例，铂重整反应类型很多，例如，正己烷重整反应，包括异构化和加氢、脱氢两种反应。正构烷烃和异构化反应可用下列模式来表示：