

高等院校精品教材

C U I H U A J I S H E J I

催化剂设计

■ 唐新硕 编著



ZHEJIANG UNIVERSITY PRESS

浙江大学出版社

催 化 剂 设 计

唐新硕 编著



ZHEJIANG UNIVERSITY PRESS
浙江大学出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

催化剂设计 / 唐新硕编著. —杭州: 浙江大学出版社, 2010. 1

ISBN 978-7-308-07352-3

I. ①催… II. ①唐… III. ①催化剂—设计— IV. ①TQ426

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 015124 号

内容提要

“催化剂设计”是 20 世纪 60 年代末提出的,是一个新的研究领域,使催化理论、催化剂制备技术和表征方法一体化,把催化剂的研制开发提高到一个新阶段,更科学化,是催化科学前沿。因此,催化专业研究工作者和物化专业大学生、研究生应该对这一领域有一个全面完整了解,从而掌握催化科学发展动向与趋势。本书将全面系统介绍 20 世纪这一领域所取得的主要成果。

催 化 剂 设 计

唐新硕 编著

责任编辑 杜希武

封面设计 刘依群

出版发行 浙江大学出版社

(杭州市天目山路 148 号 邮政编码 310007)

(网址: <http://www.zjupress.com>)

排 版 杭州求是图文制作有限公司

印 刷 富阳市育才印刷有限公司

开 本 710mm×1000mm 1/16

印 张 14.5

字 数 268 千

版 印 次 2010 年 1 月第 1 版 2010 年 1 月第 1 次印刷

书 号 ISBN 978-7-308-07352-3

定 价 29.00 元

版权所有 翻印必究 印装差错 负责调换

浙江大学出版社发行部邮购电话 (0571)88925591

序

催化剂的研制,开发和应用,日趋重要,但以往这方面的探索全凭经验和频繁的试验及筛选,很费人力和时间。由于要求科学地和高效率地制备所需催化剂,缩小筛选范围的这个目的,就促进了《催化剂设计》新学科的产生。

唐新硕教授在催化和结构化学方面造诣很深,多次为研究生讲授《催化剂设计》一课,不只效果极佳,且其内容亦常为其他高校催化专业所借鉴。现在他把其多年讲授的心得和体会写成专著出版,亦是对催化界的一大贡献。实际上,唐教授在这方面的学术思想有些也写在《有机催化》(上海科技出版社出版)一书内。他是《有机催化》专著的主要编著成员之一。在某种意义上说,《催化剂设计》一书亦可说是《有机催化》的姐妹篇,二者相互参照,相互补充,读者必有较大的启迪和收益。

本书出版,令我高兴,特此介绍推荐。

浙江大学教授

金松寿

2003年2月25日

前 言

发酵制酒和发酵制醋在我国商朝就有记载,在西方亦可追溯到公元前。但“催化”作为一门科学的历史并不长,对催化反应进行研究仅在 19 世纪才开始,直到 1806 年法国的克莱门特(F. Clemet)和德索美(J. D. DeSormes)对铅室法制硫酸的理论探讨中提出:“ NO_x 依靠本身氧化态的改变,使空气中的氧移进 SO_2 中。因此,在铅室内连续输送空气可减少硝酸的使用量。”但在催化科学发展史上具有重要意义的是 1817 年载维(H. Davy)在伦敦皇家研究院公开表演的催化燃烧实验。虽然载维不是催化现象的最初发现者,所做实验,很多人也知道,但他把这些催化反应集中起来,且把催化反应的特点加速反应和催化剂能重复使用特性突出出来。他的这一表演在当时引起了轰动。载维的表演很快越过海洋,在法国,巴黎大学的泰纳尔(L. J. Thenard)也获得了同样的成功。特别是德国的多伯临讷(Döberiner),作了进一步试验,发明了以他名字命名的燃烧器,在实际中被广泛使用。

1936 年瑞典人柏尔莱留斯(J. J. Berzelius)首先提出把催化作用称之为“Catalysis”(英文)、“Katalyce”(德文),这是柏尔莱留斯根据希腊语中表示拆散、松开一词“καταλλω”转译成英文和德文的。目前“催化”就是根据这两个词翻译过来。

1901 年奥斯特瓦尔德(Wi. Ostwald)提出了催化剂的古典定义:“催化剂是不进入反应产物,而能改变反应速度的物质。”并提出了衡量催化作用大小的尺度是以促使反应速度变化程度大小这样一个概念,从动力学结果来判断催化剂及其作用大小,从而进入定量的研究阶段。

米德杀(A. Mittasch)用了约一年半时间,对 2500 种催化剂进行了 6500 次试验终于在 1910 年找到了高活性的合成氨催化剂 $\text{Fe-K}_2\text{O-Al}_2\text{O}_3$,并提出了助催化剂概念。

20 世纪 50 年代即石油化工时代,则在其他学科进展配合下,使催化科学有了很大发展,进入到宏观催化剂设计阶段,在不断总结得到的宏观规律基础上,来开发催化剂,较之寻找催化剂时期有了明显进步,方向更明确,研制开发了很多高活性,高选择性优良催化剂,不仅使催化反应成为合成化学工业主角,而且在其他领域如环保、能源等领域也广泛使用催化剂,利用催化反应,来达到环保、

节能或开发新能源目的。

如果说 19 世纪是发现催化反应时代,那末 20 世纪从较为盲目寻找催化剂时代进入到有目的研制催化剂,开发新催化反应,直到进入宏观催化剂设计阶段,使催化在更多领域中使用。

20 世纪后期对原子、分子水平上的催化剂设计进行了探索,有了新的设计理论,尝试开发了多种新的制备方法,但在制备技术和测试表征方面还需有新的突破,新世纪将进入微观催化剂设计时代。

本书尝试对 20 世纪“催化剂设计”取得的成果进行系统总结、分析,并对 21 世纪的催化学科进行展望,希望对重视催化工作同志有所借鉴。虽然尽力以客观科学态度企求较合理评述,但限于作者见识与水平,难免有不妥或错误,恳切希望专家和读者,加以指正。

唐新硕

2009 年 1 月 16 日

目 录

第一章 “催化剂设计”综述

§ 1-1 概论	(1)
§ 1-2 催化剂设计现状	(3)
§ 1-3 控制论的思想方法与催化剂集团结构适应理论	(8)
一、控制论的思想方法	(8)
二、催化剂集团结构适应理论要点	(9)
三、催化剂设计程序	(11)
四、催化剂设计示例	(11)
§ 1-4 催化剂设计与催化反应工艺开发	(15)
一、催化反应及工艺的确定	(15)
二、反应方式与催化剂	(18)

第二章 催化剂宏观设计基础

§ 2-1 已有规律	(23)
一、线性自由能关系和堀内—Polanyi 规则	(23)
二、Bronsted 规则与 Hammett 规则	(24)
三、酸强度与 Hammett 的 σ 值	(25)
四、火山型催化剂序列与金属盐的生成热	(26)
五、催化剂活性排列顺序与光谱化学系列	(30)
六、Woodward—Hoffmann 规则与催化作用	(42)
七、类似性规律与周期表利用	(43)
§ 2-2 主要类型催化剂性能及其改性方法	(43)
一、金属和合金催化剂	(43)
二、金属氧化物催化剂	(51)
三、固体酸碱催化剂	(56)

四、提高催化性能的途径	(64)
五、固相化络合物催化剂	(67)

第三章 催化剂宏观设计阶段典型成果示例

§ 3-1 典型氧化物系 SOHIO 系催化剂	(90)
一、丙烯氨氧化制丙烯腈催化剂开发	(90)
二、异丁烯催化制甲基丙烯酸催化剂及工艺开发	(95)
§ 3-2 新合成氨催化剂开发	(106)
一、问题提出	(106)
二、已取得研究结果	(107)
三、新的开发	(107)
§ 3-3 分子筛催化剂的研制与设计	(116)
一、特殊结构与新概念提出	(116)
二、设计实验的进一步论证	(117)
三、设想与开发	(121)
四、催化剂新材料的基本性能	(124)
§ 3-4 净化汽车废气催化剂	(127)
一、控制汽车废气污染与催化净化法	(127)
二、催化净化法的发展过程	(129)
三、净化汽车废气催化剂的反应环境	(131)
四、“三元”系催化剂研制开发过程	(132)

第四章 原子、分子水平催化剂设计

§ 4-1 设计思想与程序	(146)
§ 4-2 检测或表征手段	(148)
一、检测或表征手段类型与原理	(148)
二、检测与表征实例	(152)
§ 4-3 催化剂制备技术新发展	(171)
一、固定化制备技术	(172)
二、担待金属催化剂的新制备技术	(179)
三、薄膜的制备及其利用	(186)
四、担体效应及其有效利用	(191)

§ 4-4 原子、分子水平研究催化作用机理	(195)
一、结晶面上催化作用机理研究	(195)
二、银催化剂上乙烯环氧化机理研究	(197)
三、氧化钼催化剂上乙醇氧化机理研究	(199)
四、气相分子对催化过程的作用	(200)

附录:选择力学

一、引言	(210)
二、选择力学的基础及奠定	(210)
三、选择力学内涵和方法	(212)
四、来自选择力学的二点推论	(220)

第一章 “催化剂设计”综述

§ 1-1 概论

20 世纪初,利用空气中氮,通过催化剂取得合成氨以来,催化剂就成为化学工业所不可缺。特别是石油化工厂的发展完全依赖于催化剂的开发。以往使用催化剂时,遇到的一个大问题是催化剂因中毒而失去活性。对此,采用精制原料的方法将其克服了。在防止公害中也广泛使用催化剂。发电厂虽非化工厂,但也大规模地使用催化剂,以除去废气中的含氮氧化物。此时,再采用“精制”的方法避免催化剂中毒显然是行不通了。又如,净化汽车废气用催化剂,反应条件是过去催化反应中从未遇到过的。要求催化剂在十分苛刻的条件下具有高活性、高选择性和长的寿命。这样的催化剂完全不同于过去一般催化剂,亦不能用过去设想的方法来开发研制。为了节能、节省资源进行的贮能、能量转换或原材料转换新工艺的开发也期待着优异催化剂的研制。如利用太阳光能进行催化反应,使水分解成氢和氧; C_1 化学的发展亦主要决定于新型催化剂的开发研制。与医药、精细有机合成及粮食有关的问题,也期待着开发新的催化剂。总之,催化剂的使用范围越来越广,面临的条件越来越复杂,已进入到一个广泛使用催化剂的新时代。

面临这种新形势,如何才能高速、有效、不断地开发出不同要求的优良催化剂?对这个问题的回答应该是在科学基础上,有目的地,按逻辑开发研制,亦即所谓“催化剂设计”。

“催化剂设计”是针对以往催化剂的开发方法而言,从发现催化剂阶段过渡到有目的地寻找催化剂阶段。前一阶段催化剂开发是偶然的巧遇,等待天赐,而后一阶段需通过大量试验才能找到催化剂,有人称之为地毯式轰炸形式试验,盲目性很大,任务十分艰巨,合成氨催化剂开发便是十分典型例子。

到 20 世纪 60 年代后期,工业生产有了很大发展,且对催化剂提出了新的任务与要求。当时,表面测试技术与量子化学随计算机发展有了相当进展,化学领域中的其他分支科学也有了很大发展。催化化学,特别是均相络合催化反应随着络合物化学和金属有机化学的发展有了突破性进展。在以往积累的大量催化实验资料基础上,整理出一系列经验规律。对催化反应本质,催化剂作用等的认识大大地深入了一步,发展到以分子水平来理解催化剂的作用,“分子催化”的专门名词也在这

时提出来了。大量事实证明多相催化中,吸附态分子沿反应轴发生的复杂变化过程应近似地或准确地服从一般化学反应过程中所证实过的规律。

此时,针对前期催化剂研制时的盲目性,英国 D. A. Dowden 在 1967 年首先写了题为“多相催化设计”文章,后来催化剂设计便成为专门名词,^[1]亦就是说在科学基础上按逻辑地研制催化剂,减少盲目性试验。这里的核心是在充分根据的基础上有效和快速。1968 年在莫斯科召开的第四次国际催化会议上亦有类似的报告。^[2]催化剂设计这个名称不仅包含通常的设计含意,还包括制造催化剂的内容,它引起催化界的广泛兴趣。日本催化工作者根据 Dowden 的设想与原理提出了更具体的内容,从 1977 年开始日本每年一月份在东京工业大学举行催化剂设计讨论会,每次发表六篇以上题材广泛的论文,参加人数不下八十余人,讨论十分热烈。^[3]从“催化剂设计”这一专门名词提出至今,这一领域有不少进展,特别需要指出的是 1980 年 D. L. Tnimm 在荷兰出版了“工业催化剂设计”一书,^[4]其中收集了 100 多篇有关催化活性和催化剂物性、结构关系的报告。1981 年日本化学学会编著出版了“催化剂设计”一书,^[5]1982 年日本化学学会编著了同一书名的化学综述。^[6]这三本著作总结了这段时期在该领域的发展及其取得的主要成就。

国内催化工作者也密切注意到这一领域的发展,一方面及时翻译介绍国外进展,另一方面提出自己独创见解,以金松寿教授及其同事们为代表,开创了引用控制论的思想来研究开发催化剂的方法。20 世纪 70 年代前期提出了“催化剂集团结构适应理论”,改变了传统研究方法,把反应机理研究与催化剂的研制紧密地结合起来,指明了催化剂设计的理论依据。虽然从理论上阐明了从原子、分子水平进行催化设计的基础,但是由于原子、分子水平上进行的催化剂制备技术和表面表征方法还无法跟上,所以又提出了适合目前科学技术水平的具体催化剂设计方法。^[7]在 1980 年以前催化剂主要是根据宏观信息进行的催化剂设计。就当前实际情况看,这仍是研究开发催化剂的主要手段,且总结了不少经验与规律,对指导实践颇有用处,可称之为宏观催化剂设计阶段。

20 世纪 80 年代初,以表面科学方法为基础研究催化已成为大的趋势,其代表为美国的 Somorjai 教授,他提出了“催化化学合成途径”,即在原子水平上研究催化作用,作为催化剂设计基础,成为有代表性的方法。到了 80 年代中期络合物催化剂固相化研究有了很大发展,使原子、分子水平的催化剂制备技术有了突破,且不断取得新成果,使催化剂设计进入原子、分子水平的新时期。

§ 1-2 催化剂设计现状

——宏观阶段催化剂设计

提起设计会使人联想到建筑物、桥梁和新产品的的设计。这些传统设计是根据提出要求,在已有成熟理论的指导下,设法制造出符合需要的东西,可说是一种按要有目的地设计制造,绝大多数按要求完成。有时在使用某些新材料或采用新施工方式时,也要进行试验,但 90% 以上是成熟的。设计有完整的理论基础,施工有成熟的技术,建成的建筑物、制造的产品是否符合要求可按图纸进行检测,从设计、制造到成品检验都十分有把握,完全科学化。但是宏观阶段的催化剂设计尚未如此成熟与完善,还有一定盲目性、包含较多未知因数。

宏观阶段的催化剂设计程序随提出任务的不同而不同,有新反应的催化剂研制、代用催化剂的开发和已有催化剂的改进等。催化剂设计思想与方法目前还没有统一,日本 1981 年度催化学会会长米田幸夫教授也认为不会有统一的思想与方法。各研究者将开辟不同独创方法,下面将介绍几个比较典型的催化剂设计思想和程序。

村上雄一的催化剂设计思想及催化剂设计程序是有代表性的,反映了该阶段达到的水平。^[8]村上认为:“在设计完全新反应的催化剂时,首先须讨论这个目的反应在热力学上是否可能。这对于新的反应来说是完全必要的,不然的话,拼命寻找不可能反应的催化剂,就好像炼金术那样十分盲目与冒险。”从同一个反应原料出发除了主反应外,还有哪些副反应可能发生。这些将成为选择催化剂的根据。其次提出工作假设,根据工作假设来选择催化剂,进行催化剂的试制与活性、选择性试验。若所得结构不是所设想的,那么须弄清原因,修正原来的工作假设,这样不断反馈直至得到所需催化剂。参看图 1-1。

村上认为:“这种工作假设无需证明,当然不可避免会带有一定的主观性,但作为选择催化剂的思考基础还是有价值的。一旦建立了好的工作假设则可很快找到好的催化剂。一般一、二次工作假设还不能找到所需催化剂,所以要求设计者具有提出很多工作假设的能力。一个设计者水平的高低也往往表现在提出工作假设的准确性与能力上。”

助催化剂和担体若仅指稍许改质和使主组分高度分散时,那么,像图 1-1 那样,首先选定主催化剂组分,其次选择助催化剂和担体。对于实用催化剂来说,往往多组分催化剂显示较好性能,且各成分混合后的作用较各个单组分作用加和来得好,即显示出特殊的复合作用。对于这种情况就必须同时选择几种组分,试制混合成分的催化剂,并进行活性和选择性试验。

村上在文章中写道:“催化剂设计程序中最重要的是制定工作假设,设计的第一步像图 1-2 那样,首先把要解决的问题定下来,即决定目标值,尔后考虑制备什

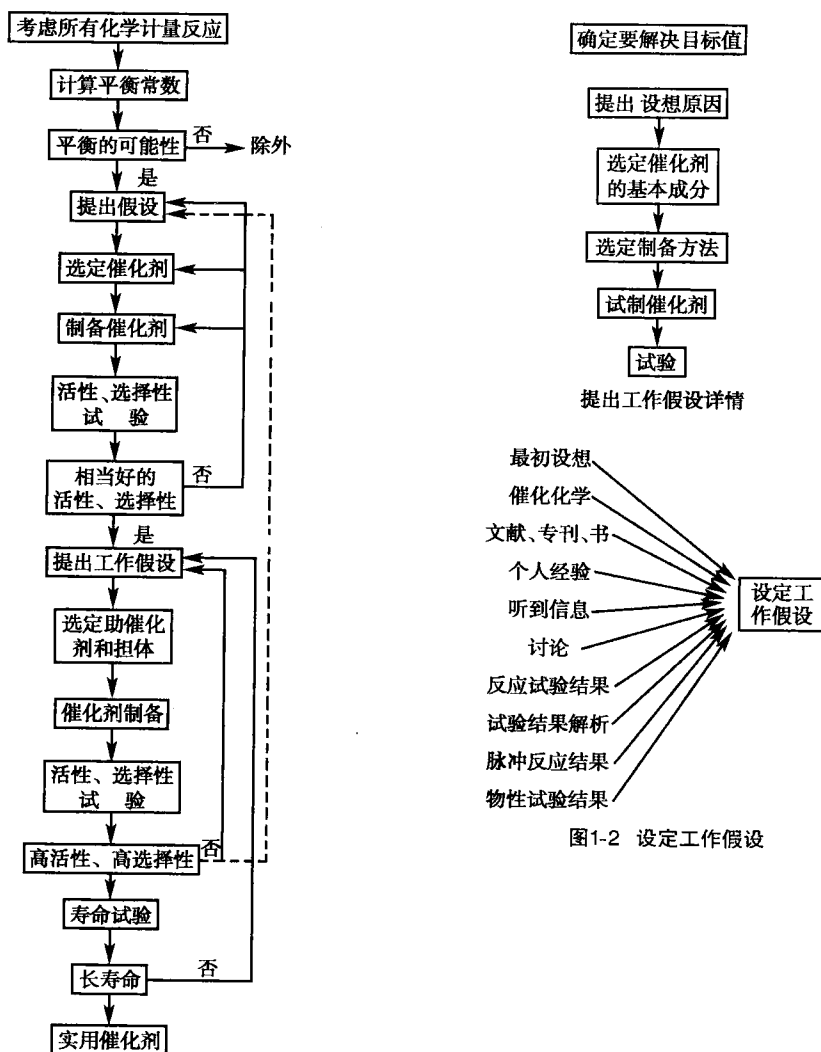


图1-1 催化剂设计程序

图1-2 设定工作假设

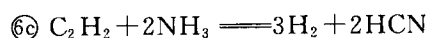
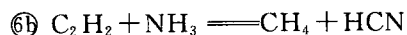
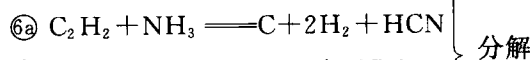
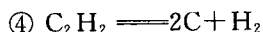
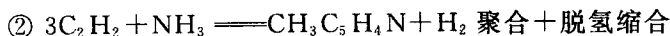
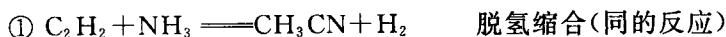
么样的催化剂最合理。”有的研究以经济角度为主，必须决定最低限度的催化剂性能(如活性、选择性与寿命等)，其次考虑活性、选择性和寿命中哪一个更为重要。亦有预先规定反应条件的情况(如反应温度、压力、原料组成、空气速度等)，亦有从平衡与节能、反应装置材料等不同角度提出要求的。有时从环境与资源立场出发禁止使用某种元素(如 Hg、Cd、Cr)或者规定可用作催化剂组分的元素。总之，必须首先确定要解决的问题及条件。

如果规定了要解决的问题，那么接下来应该考虑怎样才能把问题解决好？村上认为：“可采用倒过来的方法，把这个要解决的问题作为结果来考虑，设想产生这

个结果的原因,显然原因与结果之间应有因果关系。抓住这个结果的一系列现象,当然产生这些现象的原因未必是一个,催化作用是复杂的,所以这种现象通常是由多种作用复合而产生的。”在这样复杂情况下,如何确定什么是主要原因?目前还不可能立即推测。从复杂因素中找出主要原因,这便是催化剂设计者的水平。另外还必须指出的是,设计也不是唯一的,对于同一目的来说可能有几个设计方案。

村上为了进行具体说明举了乙炔和氨一步合成乙腈这个催化反应作为设计示例,即

(1)考虑所有可能的化学反应



分解

(2)计算这些反应的平衡常数,作出 $\ln K_p - T$ 的关系图。从平衡角度看,在 500°C 以上高温除反应⑧外,其他反应都是可能发生的。要选择性地进行反应①,显然,必须利用催化剂的选择作用。

(3)由于这个反应是一个新的催化反应,完全没有情报资料可查。为此先对反应进行分类:反应①为脱氢反应;反应②为聚合+脱氢;反应③为聚合反应;反应④~⑦为分解反应。如果选择没有聚合和分解活性的脱氢催化剂,那么,只对反应①有选择性,能使反应①顺利进行。

根据以往对催化剂的性能分析,已知金属催化剂能促进分解反应,因此是不合适的,所以考虑从金属氧化物中来选择。

再从反应条件对反应的影响来考虑,低温有利于聚合反应而高温则不利于聚合,因此选择活性低的脱氧催化剂,可在稍高温度下使用。为此选 ZnO 作为催化剂。试验结果表明在 400°C 活性颇好,可是在生成乙腈的同时,还生成甲基吡啶($\text{CH}_3\text{C}_5\text{H}_4\text{N}$),也就是说选择性不太理想。为避免发生聚合反应,可在更高的温度下进行,这就需要选择更低活性的脱氢催化剂。 Al_2O_3 通常不作为脱氢催化剂使用,但在高温下具有脱氢活性,所以选择 Al_2O_3 作为催化剂,试验结果良好。在 550°C , $\text{SV} \geq 40\text{h}^{-1}$, $\frac{\text{NH}_3}{\text{C}_2\text{H}_2} = 1.19$ (克分子比)时, C_2H_2 的转化率为 99.2%,乙腈的选择性为 64.2%。主催化剂用 Al_2O_3 就不需要担体,为了进一步抑制聚合反应,

可考虑选择合适的助催化剂。经过分析 Al_2O_3 上的路易斯酸中心具有聚合活性。为使聚合活性中心中毒,添加 Na_2CO_3 来中和酸中心。按照这样的分析,在原催化剂组分中添加 3.3% 的 Na_2CO_3 再进行试验,结果乙腈的选择性上升至 80.3%。另一方面再从反应条件考虑,如果催化剂表面活化 NH_3 的浓度提高,而使活化了乙炔浓度降低,亦就不利于聚合反应的发生。为此,调整原料比,使 $\text{NH}_3/\text{C}_2\text{H}_2 = 2.0$,得到乙腈的选择性为 99.0%。从催化活性组分选择到反应条件最佳化,最终实现了理想化催化反应。

米田幸夫和御园生诚认为:“标准的催化剂设计程序如图 1-3 所示。首先给出目的反应,明确需要条件,其次最大限度地把所有可能的反应一一列出,即包括副反应在内的所有可能反应,并称之为虚拟的反应机理(这是 D. A. Dowden 首先提出来的)随之预测目的反应的最佳催化剂成分,将这些成分组合起来就可以综合出一个催化剂制备的工艺过程。”他们认为:“对各部分反应来说,特别是主要部分反应,如何能高效率地预测最佳催化剂便是问题的关键。最好能知道如图 1-4 所示的(Ⅰ)催化剂特性和(Ⅱ)催化剂物性及(Ⅲ)催化剂结构,组成之间关系。在知道了具有优秀特性的催化剂结构和组成之后,则(Ⅳ)催化剂制备将起着重要作用。”

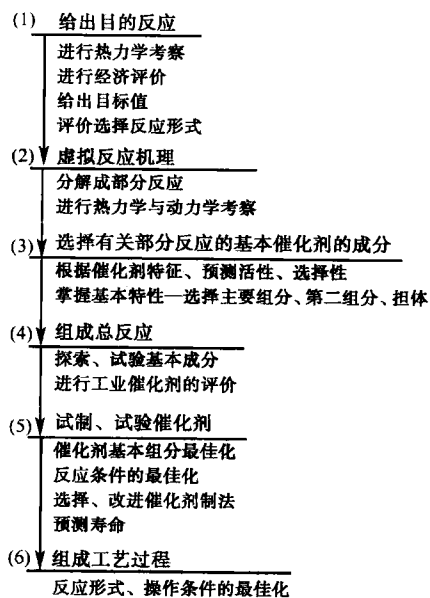


图1-3 米田、御园生提出的
催化剂设计程序
(略去反馈过程)

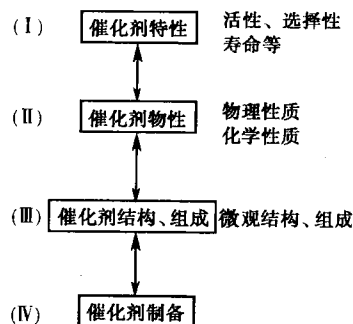


图1-4 催化剂特性、物性及制法

富永博夫和藤元董俩提出了如图 1-5 所示的金属催化剂设计体系^[8],他们指出:“催化剂性能由微观和宏观的结构规定,其结构又随催化剂的制备方法及其制备条件而变。”他们还谈到催化作用的本质是分子的吸附与活化,为促进某种特定化学反应,构成活性点的原子和原子簇应具有一定的电子性质与几何结构(平面或立体)。

山口光男提出了如图 1-6 所示的催化剂开发模式^[9]。这一模式简明扼要突出

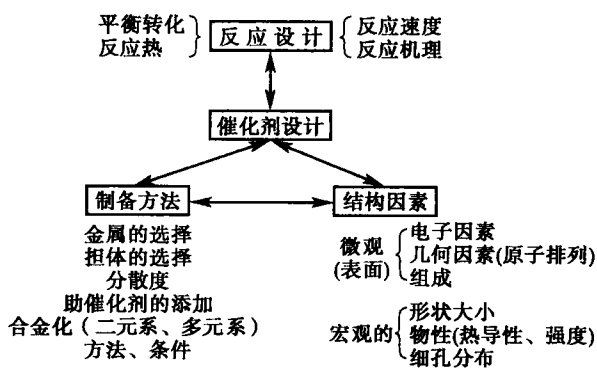


图 1-5 金属催化剂的设计体系

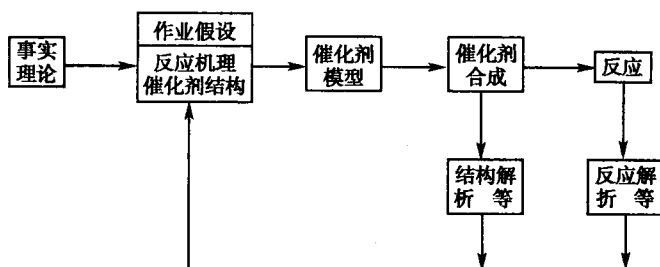


图 1-6 山口光男提出的研制催化剂的模式

本质,但没有详细与具体的说明。

上述介绍的这些典型催化剂设计思想、设计程序或设计模式的论文中都没有讨论这些思想和程序或模式的理论依据。我们认为,必须总结归纳出催化反应的共性,确立反应机理与催化特性之间关系,明确催化剂特性与催化剂组成结构及物性之间的因果关系,这已成为催化剂设计能否成功的关键。只有明确了这些关系才能把催化剂设计提高到分子原子水平,亦只有这样能进一步推动催化剂设计向更高水平发展。

要在原子、分子水平上进行催化剂设计目前存在问题可归纳为如下三个方面:

1) 对以往催化理论缺少正确评价,从原来全盘肯定到几乎完全否定(个别极端的把过去催化看作是艺术而不是科学)。没有充分利用已有化学知识和催化实践积累的资料和经验。没有将其与当前表面科学结合起来,使当前有关催化的表面科学成果成为积累的资料加以利用。

2) 缺乏原子、分子水平制备技术,不能按设计要求制备一定表面结构的催化剂,有时制备出来催化剂又难以重复。

3) 缺少表征手段,特别是催化剂表面一层原子结构与性能,目前还无法测定。即催化剂表面结构是否符合原子、分子水平设计要求,还无可奉告。

如何解决面临问题? 在当前情况下引用控制论思想方法可以得到部分解决。

目前有关催化表面科学研究方法是制备和采用已知表面结构和性质的简单体系的催化剂来研究反应物分子发生催化反应过程与特性。另一种方法针对当前实际情况,从已知反应分子结构、性质和可能催化反应机理来推测催化剂表面原子应有结构和性质。尔后,通过各种可能途径制备出所设想催化剂并进行催化剂性能测定与采用各种表面测试技术进行表征。通过若干次反馈达到目的。显然,这是另一条有效途径。

§ 1-3 控制论思想方法与催化剂 集团结构适应理论^[10]

一、控制论思想方法

几十年来,催化剂科学工作者为减少催化剂筛选工作的盲目性,一直都在探求各类催化反应的本质,研究反应动力学及反应机理,不断应用近代物理测试技术来研究催化剂结构,企图找出反应性能与催化剂结构之间的关系,从而建立催化理论来指导筛选及制备催化剂的实践,但由于多相催化本身的极端复杂性及上述各种研究本身的困难和局限性,致使理论的关连遇到巨大困难。面对这一现实就迫使人们重新考虑研究方法的本身。目前采用的研究方法,大致可分为以下两类:

一类是尽量减少体系的可变量,使问题简化,然后向复杂体系过渡。这方面的研究已获得较大发展,如从简单的络合催化研究开始,获得较确定的信息及成效后再过渡到多相催化。

另一类研究方法,仍以多相催化为对象来加以直接研究,不过方法上加以完全革新。这类研究方法有联系目前生产实际和继承及利用前人多相催化经验之优点。但要克服多相催化复杂性带来的巨大困难而获得成效,亦必须引用控制论的研究方法。在金松寿教授带领下,我们首先将控制论方法用于多相催化的研究,尔后在开发研制出一批催化剂同时,通过分析总结提出了催化剂集团结构适应理论。^[10]

控制论研究方法是归纳中的演绎,演绎中的归纳,是分析中的综合,综合中的分析,因而有别于传统的单纯分析、归纳和综合。这种方法对复杂体系的研究特别有效,其特点是非常注意事物发展的各种可能性而不局限于简单因果关系,亦即充分注意各种因素的动态联系,而不是去探索事物的终极原因,或者等这些因素都层层搞清后再去看待联系。控制论既注意事物内部之间的有机联系,又十分重视事物的整体,常从整体上掌握规律性,非常注意信息、信息的传递及信息的加工。它不赞成那种只相信直接看见的明显事实才算可靠的观念,亦不赞成那种兴趣只局限于直接击中目标的办法。