

催化剂工业应用最新进展译丛

DESIGN of Heterogeneous Catalysts **非均相催化剂设计**

[美] Umit S. Ozkan 编
中国石化催化剂有限公司 译

中国石化出版社

中国石化出版社

中国石化出版社

中国石化出版社

中国石化出版社

中国石化出版社

[HTTP://WWW.SINOPEC-PRESS.COM](http://www.sinopec-press.com)



014013289

TQ426

31

非均相催化剂设计

Design of Heterogeneous Catalysts

[美] Umit S. Ozkan 编

中国石化催化剂有限公司 译



TQ 426

中国石化出版社

31



北航

C1700532

985810410

著作权合同登记 图字:01-2012-9143 号

All Rights Reserved. Authorised translation from the English language edition published by John Wiley & Sons Limited. Responsibility for the accuracy of the translation rests solely with China Petrochemical Press and is not the responsibility of John Wiley & Sons Limited. No part of this book may be reproduced in any form without the written permission of the original copyright holder, John Wiley & Sons Limited.

中文版权为中国石化出版社所有。版权所有,不得翻印。

图书在版编目(CIP)数据

非均相催化剂设计/(美)奥兹坎(Ozkan, U. S.)编;
中国石化催化剂有限公司译. —北京:中国石化出版社,
2014. 1

ISBN 978-7-5114-2564-5

I. ①非… II. ①奥… ②中… III. ①非均相—催化
剂—设计 IV. ①TQ426

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 328851 号

未经本社书面授权,本书任何部分不得被复制、抄袭,或者以任何形
式或任何方式传播。版权所有,侵权必究。

中国石化出版社出版发行

地址:北京市东城区安定门外大街 58 号

邮编:100011 电话:(010)84271850

读者服务部电话:(010)84289974

<http://www.sinopec-press.com>

E-mail: press@sinopec.com

北京富泰印刷有限责任公司印刷

全国各地新华书店经销

*

787 × 1092 毫米 16 开本 21 印张 362 千字

2014 年 1 月第 1 版 2014 年 1 月第 1 次印刷

定价:66.00 元

编译委员会

主 任:谈文芳

副主任:刘志坚 张 凯 曹光伟

委 员:刘志坚 张 凯 曹光伟 杜宏斌

殷喜平 史建公

译者序

现代石油炼油和石油化工的核心技术是催化技术,而催化技术的核心是催化剂。进入21世纪后,催化技术在应对日益增多的来自经济、能源和环境保护的挑战方面,发挥着比以往更加重要的作用。中国石化催化剂有限公司是全球品种最全、规模最大的催化剂专业公司之一,产品涵盖炼油催化剂、化工催化剂和基本有机原料催化剂三大领域,是催化剂行业内举足轻重的“参与者、维护者和建设者”。为更加深入地了解国外在催化剂合成、表征及催化剂设计方面的最新研发进展,并为有志于此领域的研发人员提供有价值的参考资料,中国石化催化剂有限公司与中国石化出版社合作,选择并引进了一批国外新近出版的催化剂技术专业领域的科技图书,具体由中国石化催化剂有限公司负责翻译、审校工作,由中国石化出版社负责编辑、出版工作。本书——《非均相催化剂设计》便是其中一部值得向读者推荐的佳作。

本书主要内容由12篇不同作者撰写的论文组成,这些作者为国外催化剂研究领域内的知名专家和学者。本书基于非均相催化剂合成、表征和模型化方面的最新研究进展,并结合典型实例,详细阐述了对非均相催化剂结构与功能之间关系的最新理解,以及在分子水平上实现对催化剂表面控制的新方法,涵盖了从仿生方法到理论辅助设计等多个非均相催化剂设计的前沿领域:使用原位拉曼光谱和紫外可见扩散反射光谱技术,可分别测定在不同环境条件下负载 $M_1O_x/M_2O_x/SiO_2$ 催化剂的分子和电子结构;采用时间分辨拉曼光谱研究还原和同位素氧交换,可以更深入地了解这催化活性中心的动

态本质;指出要向大自然学习,催化作用在大自然中起到了重要的作用,拥有非凡活性和选择性的酶对于生命是至关重要的,它们的几何特性和电子特性是设计新型催化复配物创意的源泉;通过高通量测试可以根据活性和选择性快速筛选催化剂配方;总结了目前在催化剂表面手性修饰认知领域所取得的进展;介绍了催化纳米马达的驱动机理和优化设计,以及金属开放骨架材料的合理设计与高通量筛选;同步加速辐射设备(SRFs)的开发极大地扩展了XAS技术的应用,而在XAS技术的众多应用中,催化领域是其中重要的应用之一,特别是应用在催化剂表征和设计方面;以实例研究了双金属催化剂的结构与性能,阐述了用于催化的自组装材料等。本书涉及的内容范围如此广阔,将非常有助于每一位读着更加深刻理解当前催化剂设计领域存在的各种可能性,激励人们进行更深层次的研究。

本书的翻译工作由刘志坚、杜宏斌统筹、组织,具体负责各章翻译的人员有杜宏斌(1、11)、王志平(2、3、4、12及前言)、罗志强(5、6、7、8、9)和黄松柏(10)。最后,全书由杜宏斌统稿、审校。

限于译者的水平,不妥和错误之处在所难免,敬请读者指正。

译者

2013年10月

前 言

我们目前正面临着越来越多的来自经济、能源和环境保护等领域的挑战,而催化技术在为应对这些挑战并提供某些答案方面所发挥的作用,比以往显得越发重要。同时,在催化剂合理设计方面,一些新颖的方法也已经同时涌现。许多这类方法的开发,都是基于合成、表征和模型化方面的最新进展,其主要涵盖了对结构-功能关系的理解以及在分子水平上对催化剂表面的控制。这样就将催化剂的发展,从半经验过程转向了利用合理设计策略为基本原则的过程。

本书介绍了这一催化剂设计领域内新典范的几个实例,涵盖了从仿生方法到理论辅助设计的各个方面。尽管任何著作都不足以综合广泛到覆盖催化剂设计的所有方法,但我相信本书所包含的范围广阔的议题,将为读者提供关于目前催化剂设计领域存在的各种可能性的深刻理解。我也希望本书能够激励此令人激动领域内更深层次的研究。

在此对所有作者表示最诚挚的谢意,他们与我共享了此书写作期间的喜悦,并贡献了独特的实例,以展现在当今催化剂设计领域内各种途径的深度和广度。

Umit S. Ozkan

俄亥俄州立大学

2009年1月

原著编著者名单

Saeed Alerasool

BASF Catalysts LLC

25 Middlesex Essex Tpk, Iselin, NJ 08830, USA

Jeffery P. Bosco

Department of Chemical Engineering, Center for Catalytic Science and Technology (CCST)

University of Delaware, Newark, DE 19716, USA

Moises A. Carreon

Department of Chemical Engineering, University of Louisville

Louisville, KY 40292, USA

Bert D. Chandler

Department of Chemistry, Trinity University

1 Trinity Place, San Antonio, TX 78212, USA

Jingguang G. Chen

Department of Chemical Engineering, Center for Catalytic Science and Technology (CCST), University of Delaware

Newark, DE 19716, USA

Marc - Olivier Coppens

Rensselaer Polytechnic Institute, Howard P. Isermann Department of, Chemical and Biological Engineering,

Troy, NY 12180, USA

Robert J. Farrauto

BASF Catalysts, LLC

25 Middlesex Essex Tpk, Iselin, NJ 08830, USA

David Farrusseng

Institut de Recherche sur la Catalyse et, l'Environnement de Lyon, UMR 5256 CNRS/

Université Lyon 1

2 Avenue Albert Einstein, 69626 Villeurbanne Cedex, France

Christophe Geantet

Institut de Recherche sur la Catalyse et, l'Environnement de Lyon, UMR 5256 CNRS/

Université Lyon 1

2 Avenue Albert Einstein, 69626 Villeurbanne Cedex, France

John Gibbs

Department of Physics and Astronomy, University of Georgia

Athens, GA 30602 – 2451, USA

Vadim V. Guliants

Department of Chemical & Materials Engineering, University of Cincinnati

Cincinnati, OH, 45221, USA

Michael P. Humbert

Department of Chemical Engineering, Center for Catalytic Science and Technology (CCST), University of Delaware

Newark, DE 19716, USA

C. P. Kelkar

BASF Catalysts LLC

25 Middlesex Essex Tpk, Iselin, NJ 08830, USA

Harold H. Kung

Chemical and Biological Engineering Department, Northwestern University

Evanston, IL 60208, USA

Mayfair C. Kung

Chemical and Biological Engineering Department, Northwestern University

Evanston, IL 60208, USA

Edward L. Lee

Operando Molecular Spectroscopy & Catalysis Laboratory, Chemical Engineering Department, Lehigh University

Bethlehem, PA 18015, USA

Jeong – Kyu Lee

Chemical and Biological Engineering Department, Northwestern University
Evanston, IL 60208, USA

Jun Liu

Pacific Northwest National Laboratory
Richland, WA 99252, USA

Zhen Ma

Department of Chemistry, University of California
Riverside, CA 92521, USA

Jean - Marc M. Millet

Institut de Recherche sur la Catalyse et, l'Environnement de Lyon, UMR 5256 CNRS/
Université Lyon 1
2 Avenue Albert Einstein, 69626 Villeurbanne Cedex, France

Claude Mirodatos

Institut de Recherche sur la Catalyse et, l'Environnement de Lyon, UMR 5256 CNRS/
Université Lyon 1
2 Avenue Albert Einstein, 69626 Villeurbanne Cedex, France

Matthew Neurock

Department of Chemical Engineering and Chemistry, University of Virginia
Charlottesville, VA 22904 - 4741, USA

Israel E. Wachs

Operando Molecular Spectroscopy & Catalysis Laboratory, Chemical Engineering Department, Lehigh University
Bethlehem, PA 18015, USA

Donghai Wang

Pacific Northwest National Laboratory
Richland, WA 99252, USA

Gang Wang

Rensselaer Polytechnic Institute, Howard P. Isermann Department of Chemical and Biological Engineering
Troy, NY 12180, USA

Francisco Zaera

Department of Chemistry, University of California
Riverside, CA 92521, USA

Yiping Zhao

Department of Physics and Astronomy, University of Georgia
Athens, GA 30602 - 2451, USA

Kake Zhu

Pacific Northwest National Laboratory
Richland, WA 99252, USA

目 录

1 氧化物配体在催化活性中心设计中的应用	(1)
1.1 引言	(3)
1.2 原位拉曼光谱在负载的金属氧化物催化剂分子 结构测定中的应用	(4)
1.3 AlO_x 、 TiO_x 和 ZrO_x 表面改性的 SiO_2 的表征	(5)
1.4 负载的 $\text{M}_2\text{O}_x/\text{SiO}_2$ 上表面 M_1O_x 物种的锚定位置	(7)
1.5 无水的负载 $\text{V}_2\text{O}_5/\text{SiO}_2$ 和 $\text{V}_2\text{O}_5/\text{M}_2\text{O}_x/\text{SiO}_2$ 催化剂 体系的分子结构	(8)
1.6 无水的负载 $\text{MoO}_3/\text{SiO}_2$ 和 $\text{MoO}_3/\text{M}_2\text{O}_x/\text{SiO}_2$ 催化剂 体系的分子结构	(9)
1.7 无水负载的 $\text{Re}_2\text{O}_7/\text{SiO}_2$ 和 $\text{Re}_2\text{O}_7/\text{M}_2\text{O}_x/\text{SiO}_2$ 催化剂 体系的分子结构	(13)
1.8 无水负载的 MO_x/SiO_2 和 $\text{M}_1\text{O}_x/\text{M}_2\text{O}_x/\text{SiO}_2$ 催化剂 电子结构原位紫外-可见光谱分析	(15)
1.9 表面动力学参数的测定	(17)
1.10 典型的负载 $\text{M}_1\text{O}_x/\text{SiO}_2$ 催化剂的氧化还原表面反应性能	(18)
1.11 负载的 $\text{M}_1\text{O}_x/\text{M}_2\text{O}_x/\text{SiO}_2$ 催化剂的氧化还原表面反应性能	(19)
1.12 结论	(21)
参考文献	(21)
2 分层结构多孔催化剂的优化设计	(27)
2.1 引言	(29)
2.2 优化中孔连通性和形状	(33)
2.3 通过活性的宏观分配优化催化剂	(38)
2.4 路网的优化设计	(39)

2.5 结论	(50)
参考文献	(52)
3 树状分子在催化剂设计上的应用	(63)
3.1 引言	(65)
3.2 改性树状分子催化剂	(65)
3.3 树状分子体系结构的间接效应	(71)
3.4 树状分子包封纳米粒子的催化作用	(76)
3.5 树状分子模板化的纳米笼	(81)
3.6 结论	(82)
参考文献	(83)
4 工业催化剂的合理设计策略	(87)
4.1 引言	(89)
4.2 通向催化剂产业化的第一步	(89)
4.3 从催化剂发现到产业化	(90)
4.4 示例一:汽车污染治理催化剂系统	(94)
4.5 示例二:轻烷烃的脱氢作用	(97)
4.6 示例三:石油炼制——流化催化裂化	(103)
4.7 结论	(113)
参考文献	(113)
5 催化剂表面的手性修饰	(115)
5.1 概述	(117)
5.2 利用金鸡纳生物碱剂及相关化合物的金属表面修饰	(119)
5.3 酒石酸及其类似化学物对金属表面的修饰	(129)
5.4 结论	(136)
参考文献	(138)
6 催化纳米马达	(145)
6.1 概述	(147)

6.2 催化纳米马达的驱动机理	(149)
6.3 催化纳米马达的优化设计	(154)
6.4 应用、挑战和展望	(158)
参考文献	(159)

7 用于气体分离和催化作用的金属开放骨架材料的合理

设计和高通量筛选	(161)
7.1 概述	(163)
7.2 MOF 的基本特征和大概进展	(163)
7.3 用于 PSA 过程二氧化碳捕获的 MOF 组合设计	(169)
7.4 应用于催化用途的 MOF 设计	(181)
7.5 结论	(190)
参考文献	(191)

8 双金属催化剂设计:从模型表面到负载催化剂

8.1 简介	(201)
8.2 实验和理论方法	(202)
8.3 结果与讨论	(205)
8.4 结论	(215)
参考文献	(216)

9 用于催化的自组装材料

9.1 概述	(221)
9.2 介孔尺度设计	(222)
9.3 在纳米颗粒表面设计催化剂	(232)
9.4 展望	(233)
参考文献	(234)

10 理论辅助催化剂设计

10.1 引言	(241)
10.2 催化描述符	(243)

10.3	高通量模拟和设计	(250)
10.4	控制图像成型	(258)
10.5	催化剂的合成与稳定性	(258)
10.6	结论	(259)
	参考文献	(260)

11	原位 XAS 技术在催化剂表征和设计中的应用	(265)
11.1	引言	(267)
11.2	X 射线吸收技术	(268)
11.3	X 射线吸收技术在非均相催化剂设计中的近期应用	(272)
11.4	展望	(290)
11.5	结论	(294)
	参考文献	(295)

12	通过二元模板设计催化剂	(299)
12.1	引言	(301)
12.2	由表面活性剂辅助的介孔金属氧化物的自行组装	(302)
12.3	大孔隙金属氧化物的胶质球模板法	(308)
12.4	金属氧化物的二元模板	(308)
12.5	催化应用	(311)
12.6	结语	(316)
	参考文献	(317)

1

氧化物配体在催化活性中心设计中的应用

Edward L. Lee , Israel E. Wachs*

*现工作单位：陶氏(Dow)化学公司核心研发中心
(1776 Building, Midland, MI 48674, USA)

