

金属催化剂在化学化工领域的应用与发展

缪祥麟

中国石油大学（北京）化学工程与环境学院能化 22-1 班 北京

【摘要】金属催化剂是化学化工领域的“心脏”，可以为提升反应效率、推动绿色化工发展以及优化产品选择等方面提供重要动力。本文通过系统化阐述金属催化剂的基本概念、分类及其特性，从贵金属资源稀缺、催化机理认知不足等方面探讨金属催化剂应用中面临的问题，进而重点阐述其在石油化工、精细化工、环境保护及能源转化等关键领域的广泛应用，对其未来发展趋势进行展望，提出向高活性、高稳定性、高选择性及智能化设计发展的核心目标，以此为新型高效金属催化剂的开发与应用提供理论参考和实践指引。

【关键词】金属催化剂；多相催化；催化机理；无机固体酸；绿色化工；能源转化

【收稿日期】2025 年 10 月 15 日 **【出刊日期】**2025 年 11 月 15 日 **【DOI】**10.12208/j.sdr.20250269

Application and development of metal catalysts in chemical engineering

Xianglin Miao

Class 22-1, Energy Chemical Engineering, College of China University of Petroleum-Beijing College of Chemical Engineering and Environment Beijing

【Abstract】 Metal catalysts are regarded as the "heart" of the chemical and chemical engineering fields, providing essential driving force for enhancing reaction efficiency, promoting green chemical engineering development, and optimizing product selectivity. This article systematically elaborates on the fundamental concepts, classification, and characteristics of metal catalysts. It addresses challenges in their application, such as the scarcity of precious metal resources and insufficient understanding of catalytic mechanisms. Furthermore, it highlights their extensive applications in key areas including petrochemicals, fine chemicals, environmental protection, and energy conversion. The future development trends are also discussed, with a focus on the core objectives of advancing toward high activity, high stability, high selectivity, and intelligent design. This work aims to provide theoretical reference and practical guidance for the development and application of novel, efficient metal catalysts.

【Keywords】 Metal catalysts; Heterogeneous catalysis; Catalytic mechanisms; Inorganic solid acids; Green chemical industry; Energy conversion

引言：化学工业是我国国民经济的支柱产业之一，而催化技术则是驱动该产业发展的核心动力。金属催化剂由于具备独特的电子结构与可调控的表面性质，因而展现出优异的催化活性，成为催化剂领域中的关键要素。但是受到资源、环境与能源等问题影响，开发高效、稳定、环境友好的新型金属催化剂成为行业内的焦点话题，本文即围绕金属催化剂的基础、应用与未来，系统化梳理其发展脉络与应用实践。

1 金属催化剂概述

1.1 金属催化剂的定义与分类

从电子态角度来看，金属催化剂是指能依托自身活性改变化学反应速率，且保证自身反应前后数量和化学性质不变的金属物质，包括金属单质、合金、金属化合物等。

标准不同，金属催化剂的分类方式也各有差异。按活性金属种类分类，可以分为贵金属催化剂、过渡金属催化剂和碱/碱土金属催化剂。按存在形态与

催化相分类,可以分为多相催化剂、均相催化剂和纳米簇/单原子催化剂。按结构组成分类,可以分为负载型催化剂、非负载型催化剂和结构化催化剂。

1.2 金属催化剂的核心特性与作用机理

金属催化剂的核心特性主要体现在三个层面,一是电子效应,基于 d 带中心理论可知,金属催化剂的核心功能主要受其费米能级附近电子态密度的影响,其电子密度差异会引起对反应物分子的吸附与活化能力的差异,由此产生催化效应。二是几何效应,即晶面、台阶、扭结位点等不同的活性位点的原子排布方式,对反应物的吸附构型和反应路径会带来不同的择形催化作用。三是载体效应,如 Al_2O_3 、 SiO_2 、 TiO_2 等载体,不仅可以提供高比表面积从而达到分散金属颗粒的效果,而且还可以借助“金属——载体”之间的强相互作用,实现调变金属电子性质的目的。

金属催化剂的作用机理主要体现在三个方面,一是吸附——活化,即反应物分子在金属表面发生化学吸附,旧化学键被削弱或断裂。二是表面反应,即活化后的中间体在表面进行重组或与另一反应物作用。三是脱附——扩散,即产物分子从活性位点脱附,扩散至体相,完成催化循环。

2 金属催化剂在化学化工领域的应用

2.1 石油炼制与大宗化学品合成:工业的“基石”与“放大器”

在大规模、连续性的工业生产中,金属催化剂可以作为核心工具,从而将原料转化为基础化学品和燃料,实现从低价值资源向高价值产品的过渡。在石油炼制与大宗化学品合成领域,常见的金属催化剂应用方式有以下三种:

(1) 加氢处理——清洁燃油的“净化器”

该方式主要以 $\text{Ni-Mo}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Co-Mo}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 等负载型催化剂为依托,利用高温高压氢气环境,实现原油蒸馏目标,得到的馏分通常包括柴油、蜡油等。具体表现为三步:

第一,加氢脱硫,在该催化剂系统中, Mo-S 相是活性中心, Ni 或 Co 作为助剂,因而可以在 C-S 键的氢解断裂环节产生极大促进作用,从而将噻吩、苯并噻吩等有机硫化物转化为 H_2S 和烃类,从而实现油品硫含量达到 10ppm 以下,满足国 VI 标准。

第二,加氢脱氮,仍以氢解反应为基础,从而将吡啶、喹啉等氮化物转化为 NH_3 和烃类,可以避免后

续催化剂中毒问题,并达到改善油品稳定性的目的。

第三,加氢脱氧与烯烃饱和。主要通过生物柴油提质和催化裂化汽油处理等环节,即可达到移除含氧化合物并饱和烯烃的目的,进一步提升氧化安定性。

(2) 催化重整——汽油辛烷值的“提升器”

该方式主要以 $\text{Pt-Re}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Pt-Sn}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 等双(多)金属催化剂为基础,以固定床反应器为环境,从而完成对石脑油馏分的处理。催化表现分为以下几个方面:

第一,甲基环己烷等六元环烷烃更容易受到 Pt 活性中心的高效催化作用,从而脱氢生成高辛烷值的芳烃,可以提高汽油辛烷值。

第二,烷烃异构化与脱氢环化。催化剂酸性位点与金属位点可以产生协同作用,从而促使正构烷烃异构化为支链烷烃,甚至可以直接脱氢环化生成芳烃。

第三,副产氢气。脱氢反应属于强吸热反应,同时会释放大量的氢气,恰恰可以作为其他加氢装置的氢源,从而实现氢平衡。

(3) 合成气转化——能源与化学品的“转换枢纽”

该方式主要采用费托合成和甲醇合成方法,可以将煤、天然气或生物质提取的合成气转化为液体燃料和化学品。具体表现包括两个方面:

第一,费托合成,即 F-T Synthesis 。针对低 H_2/CO 比的煤基合成气,通常 Fe 基催化剂具有更高的适用性,其催化反应产物中烯烃含量高,且兼具水汽变换活性。针对高 H_2/CO 比的天然气基合成气, Co 基催化剂的适用性更突出,可以提高柴油、蜡等长链烷烃合成过程的选择性和稳定性。此外还可以通过调控反应条件与催化剂结构,精准控制合成产物,根据需求选择汽油、柴油或者高附加值蜡。

第二,甲醇合成。该合成方法下 $\text{Cu-ZnO-Al}_2\text{O}_3$ 催化剂是工业生产的标准催化剂,其中 Cu 是 CO 和 CO_2 加氢的活性中心, ZnO 既可以发挥稳定和分散 Cu 颗粒的作用,又可以提供部分活性位点。此外,甲醇作为化学化工领域重要的溶剂和化工原料,同样可以作为制备烯烃、汽油的关键平台分子。

2.2 精细化工与药物合成:分子精准构筑的“手术刀”

在高附加值、高选择性的化学品合成中,金属催化剂可以发挥分子水平的精准剪裁与构建作用。

(1) 选择性加氢/脱氢——官能团的“精准操控”

该方式可以使用 Pd/C、Raney Ni、PtO₂ 等多相催化剂，也可以选择 Ru、Ir 的配合物均相催化剂。

第一，化学选择性加氢。针对含有多种不饱和官能团的分子，可以选择性还原一种。例如在炔烃半加氢生成顺式烯烃的反应中，可以使用 Lindlar 催化剂，以此避免过度还原生成烷烃。

第二，立体选择性加氢/脱氢。通过手性修饰的金属催化剂，或者具有特定结构的纳米催化剂，可以在反应中控制加氢产物的立体构型。

(2) 交叉偶联反应——碳骨架的“连接大师”

该方式主要以 Pd(0)/Pd(II) 催化循环为中心，同时借助膦配体支持，可以连接两个不同有机分子片段之间的 C-C 键。

第一，Suzuki 反应。通过 Pd 催化，可以促使芳基硼酸与芳基卤化物偶联，通常在联芳类液晶材料、药物分子构建等领域应用广泛。其优势在于官能团耐受性好，且硼酸副产物无毒。

第二，Heck 反应。通过芳基/烯基卤化物与烯烃的偶联，可以为构建延伸共轭体系与药物中间体提供重要工具。

第三，Sonogashira 反应。芳基/烯基卤化物与端基炔的偶联可以合成天然产物与电子材料中炔基结构单元。

2.3 环境保护与能源转化：可持续发展的“守护者”与“引擎”

在解决环境问题和新能源技术开发中，金属催化剂同样发挥着不可替代的功能和作用。

(1) 机动车尾气净化——移动源的“空气净化器”

尾气净化主要采用三效催化剂，其中堇青石蜂窝陶瓷为载体，并在载体上涂覆 γ -Al₂O₃ 高比表面积涂层，同时还应负载 Pt、Pd、Rh 贵金属纳米颗粒，甚至还需要负载 CeO₂-ZrO₂ 储氧材料。其主要表现为：

第一，同时净化。在理论空燃比条件下，可以同时净化汽车尾气中的 CO 与 HC，并将其净化为 CO₂ 和 H₂O，还可以将 NO_x 还原为 N₂。

第二，协同作用。在氧化反应环节主要采用 Pt、Pd 等催化剂；针对具有独特的高活性和选择性的 NO_x，则可以采用 Rh 催化剂；此外 CeO₂-ZrO₂ 催化剂还可以借助 Ce⁴⁺/Ce³⁺ 的可逆变换，实现在富氧时储存氧，在缺氧时释放氧的效果，从而拓宽高效净

化窗口。

(2) 能源转化装置——未来能源的“心脏”

第一，燃料电池。在质子交换膜燃料电池商业化发展过程中，Pt/C 催化剂是其电池阴极氧还原反应的唯一选择，但其缺点在于成本较高。

第二，水分解制氢。析氢反应中 Pt 是其基准催化剂；而在析氧反应，IrO₂/RuO₂ 是基准催化剂。但在酸性介质环境下，其由于兼具高活性和稳定性，因而面临着资源困境。

第三，金属—空气电池。ORR 催化剂可以为锌空、锂空电池的空气电极提供高效催化作用。前沿领域正在开发基于 Co、Fe、Mn 的氧化物、氮化物或碳复合材料，以此替代或减少 Pt 的使用。

2.4 金属/无机固体酸双功能催化体系构建：过程强化的“协同战士”

金属与无机固体酸的协同工作可以实现传统单一催化剂难以完成的复杂反应。

(1) 生物质平台分子定向转化——可再生碳资源的“精炼厂”

该方式需要构建 Pt/HZSM-5、Ru/ γ -Al₂O₃ 等金属/固体酸双功能催化剂。

例如山梨醇/葡萄糖加氢脱氧制烷烃。第一步，反应物分子在金属位点被加氢生成中间体；第二步，该中间体迁移到相邻的固体酸位点发生脱水、异构化反应，生成的烯烃中间体再回到金属位点加氢饱和；第三步，生成直链或支链烷烃（生物汽油/柴油）。该模式呈现出“加氢—脱水—再加氢”的串联过程，并且可以在单一反应器中一步完成，极大地提高了效率。

(2) 长链烷烃加氢异构化——生产清洁油品的“关键工艺”

该方式主要采用具有规整孔道和择形功能的催化剂，比如 Pt/丝光沸石、Pd/SAPO-11 等。

第一，“接力”催化机制。第一步，长链正构烷烃在 Pt/Pd 金属中心上脱氢生成正构烯烃；第二步，正构烯烃迅速扩散到沸石分子筛的酸性位点上，通过碳正离子机制发生骨架异构化，生成单支链或多支链烯烃。第三步，异构烯烃再扩散回金属中心完成加氢，生成异构烷烃。

第二，择形选择性。以 SAPO-11 为例，其一维十元环孔道能优先允许单甲基支链的异构体形成和扩散，而抑制在孔道内难以形成和扩散的多支链大分子，从而高选择性地生成低凝点、高辛烷值的异

构产物。

(3) 酸助金属催化——提升加氢/氧化效率的“助推器”

该方式主要通过金属催化剂中引入固体超强酸作为载体或助剂,比如 WO_3/ZrO_2 , $\text{SO}_4^{2-}/\text{ZrO}_2$ 等。

第一,增强 H_2 活化。强 Lewis 酸位点具备极化 H-H 键的能力,从而促进 H_2 在金属与载体的界面处发生异裂,从而形成高活性的 M-H^+ 和 H^+ 质子。

第二,活化反应物。固体酸的强酸位点可以直接质子化 CO 等反应物分子,使其更易于在金属位点上发生后续反应,从而在低温下实现高催化效率。

3 金属催化剂的未来发展

3.1 面临的挑战与关键科学问题

第一,资源瓶颈。金属催化剂涵盖 Pt、Pd、Rh 等贵金属,面临着成本高、风险大的问题。

第二,机理认知深度不足。在化学化工领域,目前针对复杂反应环境下金属催化剂的活性中心动态演变、反应中间体的精准识别等存在盲区问题。

第三,稳定性与失活。在烧结、积碳、中毒、浸出等失活机制影响下,金属催化剂的使用寿命难以延长。

第四,精准制备与放大难题。在实验室环境下,或者以纳米/单原子为基础的催化剂制备方法,往往无法在工业规模中实现。

3.2 未来发展趋势与研究方向

第一,高性能催化剂的设计与开发。一方面,未来将着重开发非贵金属催化剂,即基于 Fe、Co、Ni、Cu 等金属寻找具备高活性、高稳定性替代材料,如金属氮碳材料、高熵合金等。另一方面,原子级分散催化剂也是重要的科研方向。通过单原子催化剂或双原子催化剂,可以更好地利用独特的电子结构,并实现 100% 的原子利用率。此外还可以研发仿生催化剂,比如可以模拟酶活性中心的结构与微环境,设计“类酶”金属催化剂。

第二,绿色、智能化的催化过程。一要关注光/电催化,利用可再生电能或光能驱动反应,如电催化 CO_2 还原制化学品,实现过程的低碳化。二要关注智能响应催化剂,开发能够根据温度、pH、磁场等反应环境进行自我调节活性与选择性的“智能”催化剂。三要开发生物——化学杂化系统,比如可以将金属催化剂与生物酶或全细胞结合,实现自然界不存在的全新化学反应。

第三,研究范式的革新。一要构建“机器学习+高通量计算/实验”融合模式,通过人工智能和大数据技术,加速新催化剂材料的发现与优化过程。二要研发原位/工况表征技术,着重发展先进的同步辐射、球差电镜、谱学技术,在原子/分子尺度实时观测催化过程。

4 结语

综上所述,在过去一个世纪中,金属催化剂极大地推动了化工化学技术的进步与相关产业发展,并且成为影响现代社会生活的重要因素。在新时代背景下,通过探索金属催化剂新的应用空间以及与传统无机固体酸等材料的巧妙结合,可以不断促进金属催化剂的功能延展与应用前景扩张,从而更好地面对资源、能源与环境的全球性挑战,为构建绿色、高效的未来化学工业体系奠定坚实基础。

参考文献

- [1] 陈璐,黄翌,袁旖璠,池海涛,魏晓晓,张梅.化学原料药中金属催化剂的应用与检测[J].实验与分析,2025,3(03):67-70.
- [2] 中国石油自主茂金属催化剂实现规模化工业应用[J].石化技术与应用,2025,43(03):216.
- [3] 屈婧怡,朱哲霄,孙灿,张翔,郑辉.光催化固氮金属催化剂的分类及研究进展[J].当代化工,2025,54(02):400-405.
- [4] 时骏,张成喜,陈强.分子筛负载单原子金属催化剂的研究进展[J].石油学报(石油加工),2025,41(02):532-541.
- [5] 邹洁.有机稀土金属催化剂的制备及应用研究[J].化工设计通讯,2024,50(08):20-22+28.
- [6] 王诗怡.新型碳载金属催化剂的设计及其应用研究[D].浙江师范大学,2022.
- [7] 张夏庆,高助威,王迎迎,等.金属基催化剂在苯胺氮甲基化多相催化中的创新应用与未来展望[C]//海南省机械工程学会.2024 年海南机械科技学术论坛论文集.海南大学化学化工学院;海南大学食品科学与工程学院,2024:212-226.
- [8] 刘思凡,徐娟,黄易旋,等.甲酸液相分解制氢用负载型金属催化剂的研究进展[J].低碳化学与化工,2023,48(01):170-177.

版权声明: ©2025 作者与开放获取期刊研究中心(OAJRC)所有。本文章按照知识共享署名许可条款发表。

<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



OPEN ACCESS