

## <<工业催化剂设计与开发>>

### 图书基本信息

书名：<<工业催化剂设计与开发>>

13位ISBN编号：9787122060242

10位ISBN编号：7122060241

出版时间：2009-9

出版时间：化学工业出版社

作者：黄仲涛，彭峰 编

页数：423

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## <<工业催化剂设计与开发>>

### 前言

刚刚过去的20世纪,催化科学与技术为改善人们的生活质量发挥了巨大的作用。随着催化科技的新发展,预计21世纪生物催化、环境催化和纳米催化等在能源、环境、资源优化利用和人类健康等有关领域做出更多贡献。

《工业催化剂设计与开发》是编著者在多年从事工业催化专业研究生教学与研究基础上完成的。本书由黄仲涛教授、彭峰教授主编。

黄仲涛教授编写了第1至3章,第1章论述了催化科学和工业催化发展简史,课程的性质和任务,工业催化剂的基本要求等;第2章论述了催化作用的基本原则和基本模式,诠释了作用原理和步骤,按金属、合金、复合氧化物、固体酸碱、过渡金属配合物等众多不同类型催化剂论述,最后简介了组合催化新技术;第3章论述了工业催化剂设计原理和方法,这是急剧快速发展的新领域,计算机的应用在催化研究中越来越广泛,限于我们的水平此章中主要介绍了一些经验推图和设计思路。

第4章介绍了催化材料学,由彭峰教授编著,他将自己近年来研究的领域和成果——纳米催化以及国内外研究的新进展编入其中。

第5章工业催化的过程工程由余皓副教授编写。

第6章介绍了催化作用和催化过程的计算机模拟,这方面的研究发展较快,已形成独立的分支,专著也很多,此处只作了尝试性的介绍,由李雪辉教授编写。

第7章论述了离子液体及其在环境催化中的应用,由李雪辉教授与王红娟博士共同编写。

催化剂设计与开发的案例分析,由王红娟博士编写,第8、9、10章为能源工程中催化技术案例分析;第11、12、13章为生物催化技术案例分析;第14、15章为环境催化技术案例分析;第16章为催化发展展望,由黄仲涛、王红娟编写。

限于我们的经验和水平有限,书中不妥之处在所难免,敬请专家和读者赐教和纠正。

本书的策划和出版得到了化学工业出版社、华南理工大学研究生院的鼎力帮助,特此致谢!

## <<工业催化剂设计与开发>>

### 内容概要

《工业催化剂设计与开发》较全面地介绍了工业催化剂原理、设计与开发的系统知识与应用技术。

全书分为16章。

第1章论述催化科学和工业催化发展简史；第2章论述催化作用的基本原则和基本模式；第3章论述工业催化剂设计原理和方法；第4章介绍催化材料学；第5章论述工业催化的过程工程；第6章介绍催化作用和催化过程的计算机模拟；第7章论述离子液体及其在环境催化中的应用；第8、9、10章为能源工程中催化技术案例分析；第11、12、13章为生物催化技术案例分析；第14、15章为环境催化技术案例分析；第16章为催化发展展望。

《工业催化剂设计与开发》的特点是将催化作用的基本原理、催化新材料、计算机模拟与工业催化剂设计、开发结合起来，并对新世纪人们关注的能源、环境、生物领域中的工业催化技术进行了案例分析。

《工业催化剂设计与开发》可作为高等院校化学工程、化学工艺、工业催化、应用化学等化学化工类专业以及环境、材料相关专业的研究生教学用书，也可供从事与催化相关的科研、设计和生产人员参考。

## &lt;&lt;工业催化剂设计与开发&gt;&gt;

## 书籍目录

第1章 绪论11.1 催化科学发展简史11.1.1 催化概念的诞生11.1.2 从经验走向科学, 创建催化科学的物理化学基础21.1.3 催化科学发展的第三阶段(1898~1918)31.1.4 工业催化和表面物理化学并行发展的时期31.1.5 表面物理化学与技术对催化科学的冲击41.1.6 经典方法研究多相催化机理发展阶段51.1.7 固态化学与多相催化剂设计发展时期61.1.8 环境催化和手性催化发展的30年71.2 工业催化发展简史81.2.1 基础化工催化工艺开发期81.2.2 催化燃料过程开发时期(1918~1945)91.2.3 催化科学与技术快速发展时期(1946~1970)101.2.4 环境催化发展的20年(1970~1990)121.2.5 新型催化材料的发展121.2.6 手性催化和药物合成工业发展(1990至今)141.3 催化科学与技术的重要性151.3.1 工业催化剂在经济上的重要性151.3.2 新能源开发对催化技术的需求161.3.3 催化对环境科学的重要性161.3.4 催化科学与技术对生命科学的重要性161.4 催化基本概念和工业催化剂的基本要求171.4.1 催化定义与特征171.4.2 对工业催化剂的要求181.5 原料、市场、政策综合对工业催化剂研制生产的影响221.6 课程的性质与任务24参考文献25第2章 催化作用模式及相关基本原则262.1 催化作用基础262.2 催化作用的前奏——化学吸附262.2.1 活性部位262.2.2 表面化学吸附键272.3 多相催化作用模式292.3.1 多相催化体系的剖析292.3.2 金属催化剂活性的理论分析342.3.3 负载型金属催化剂的活性分析372.3.4 合金催化剂382.3.5 金属簇状物催化剂392.3.6 半导体催化剂的电子理论402.3.7 复合氧化物催化剂及其催化作用422.3.8 固体酸碱催化剂及其催化作用462.3.9 分子筛催化剂及其催化作用502.4 过渡金属络合催化剂及其催化作用552.4.1 过渡金属离子的化学键合552.4.2 络合催化中的关键反应步骤572.4.3 络合催化循环592.4.4 配位场的影响632.5 聚合催化剂及其作用642.5.1 茂金属聚合催化剂与新型聚合物材料642.5.2 非茂后过渡金属烯烃聚合催化剂的研究进展682.5.3 组合聚合物催化技术692.5.4 高速组合筛选技术72参考文献73第3章 工业催化剂的设计753.1 催化科学的分子观753.1.1 单晶金属表面结构763.1.2 碳质的沉积783.1.3 表面原子的氧化状态783.2 工业催化剂设计方法793.2.1 引言793.2.2 催化设计的框图程序793.2.3 催化剂的类型设计法853.2.4 催化剂设计的经验程序1023.3 计算机辅助催化剂设计1063.3.1 引言1063.3.2 决定论模型法及案例分析1073.3.3 非决定论模型法及案例分析1083.3.4 CAD催化剂的微动力学分析法1103.4 固体催化剂设计的几种思路1103.4.1 借用酶催化原理于非生物物质固体催化材料合成的设计思路1103.4.2 利用组合技术设计和开发催化剂1123.4.3 固体催化剂构件组装114参考文献116第4章 催化材料学1184.1 引言1184.2 分子筛催化材料1194.2.1 分子筛基本结构1194.2.2 分子筛催化材料的特性1204.2.3 分子筛催化材料制备1214.2.4 两类新的分子筛催化材料1234.3 膜材料与膜催化1274.3.1 概述1274.3.2 无机膜材料与催化1304.4 非晶态合金催化材料与催化1354.4.1 非晶态合金材料的结构特点1354.4.2 非晶态合金催化剂制备与表征1364.4.3 非晶态合金的催化应用1384.5 固体酸催化材料与催化1444.5.1 固体酸催化材料类型1444.5.2 固体超强酸催化材料1454.5.3 杂多酸催化材料1484.6 整体式催化材料1514.6.1 整体式催化剂结构特点1514.6.2 整体式催化剂载体1524.6.3 整体式催化剂应用1534.7 光催化材料与光催化1584.7.1 光催化原理1584.7.2 光催化材料的发展1614.7.3 光催化材料的失活与再生1654.7.4 可见光活性光催化材料的设计1664.8 纳米材料和纳米催化1744.8.1 纳米催化材料的特性1744.8.2 碳纳米管材料与催化1754.8.3 纳米金属催化剂188参考文献195第5章 工业催化的过程工程2035.1 概述2045.1.1 工业催化过程工程的多尺度性2045.1.2 工业催化过程工程的方法和基本概念2055.2 多相催化反应动力学2085.2.1 化学吸附过程2085.2.2 理想表面的催化动力学模型2125.2.3 真实表面的催化反应动力学模型2195.2.4 微观反应动力学方法2245.2.5 复杂反应动力学2335.3 多相催化中的传递过程2385.3.1 流体与催化剂外表面间的传热传质2395.3.2 气体在多孔介质中的扩散2405.3.3 多相催化剂的效率因子2415.3.4 传递现象影响下的催化反应动力学行为2475.4 固体催化剂的失活与再生2515.4.1 失活的类型2515.4.2 失活动力学2575.4.3 工业催化剂寿命的实验室规模考察方法2615.4.4 失活催化剂的再生2625.5 试验研究用反应器2635.5.1 理想反应器的基本类型2645.5.2 微分、积分固定床反应器2665.5.3 无梯度反应器2675.5.4 催化剂开发过程中反应器的选择2685.5.5 催化剂开发的高通量筛选方法2705.5.6 催化动力学模型筛选及参数估算2715.6 工业生产用反应器2735.6.1 釜式反应器2735.6.2 固定床反应器2775.6.3 流化床反应器285主要符号292参考文献293第6章 多相催化过程模拟2976.1 计算机模拟理论与技术2976.1.1 量子力学方法2976.1.2 分子力学方法2986.1.3 组合方法2996.2 多相催化模拟——策略与模型2996.2.1 简介2996.2.2 级间近似方法3006.2.3 周期性计算3016.2.4 簇模型3016.2.5 微动力学模型3036.3 催化材料结构模拟3056.3.1 能量计算3056.3.2 整体最小化法3066.3.3 模拟

## &lt;&lt;工业催化剂设计与开发&gt;&gt;

退火法3066.3.4 遗传运算法则3076.3.5 拓扑枚举法3096.3.6 结构预测3106.4 表面及过程模拟3136.4.1 模拟技术3136.4.2 骨架材料表面结构及性质3146.4.3 吸附3156.4.4 扩散3176.4.5 表面与水的反应3186.4.6 催化部分氧化反应3186.4.7 多相催化剂模型体系321参考文献323第7章 离子液体与催化3257.1 离子液体简介3257.1.1 离子液体发展简史3257.1.2 离子液体的组成与结构3267.1.3 离子液体的特性3267.1.4 离子液体的合成3267.2 离子液体催化剂3277.2.1 酸性离子液体催化剂3287.2.2 碱性功能化离子液体催化剂3347.2.3 离子液体负载化3367.3 离子液体与纳米催化3387.4 离子液体与生物催化3397.5 其他离子液体催化剂3397.5.1 手性离子液体3397.5.2 具有配位功能的离子液体340参考文献341第8章 氢能与制氢技术用催化剂的设计与开发3458.1 化石能源现状3458.2 氢能的优点及应用3458.3 制氢技术概述3478.3.1 化石燃料制氢3478.3.2 再生氢制备3498.4 储氢3528.5 甲醇氧化重整制氢催化剂的设计及性能评价3538.5.1 甲醇氧化重整制氢反应分析3538.5.2 催化剂的开发3548.5.3 工艺操作参数的选择3548.5.4 催化剂应用3558.5.5 技术经济分析3568.5.6 应用前景357参考文献358第9章 二甲醚生产用催化剂的设计与开发3599.1 二甲醚概述3599.1.1 二甲醚的性质及工业应用3599.1.2 二甲醚生产工艺概述3599.1.3 甲醇气相脱水制二甲醚基本原理及热力学3629.2 催化剂的开发3629.3 催化剂的应用3629.3.1 工艺流程3629.3.2 操作条件3639.4 二甲醚的工业生产现状365参考文献366第10章 燃料电池及直接甲醇燃料电池催化剂的设计与开发36710.1 燃料电池简介36710.1.1 燃料电池的工作原理36710.1.2 燃料电池的基本类型36710.1.3 燃料电池的优点36810.2 直接甲醇燃料电池催化剂的设计与开发36910.2.1 直接甲醇燃料电池反应机理及热力学36910.2.2 甲醇电催化氧化机制37010.2.3 DMFC阳极催化剂的设计与开发37110.2.4 DMFC催化剂的应用372参考文献375第11章 生物催化及己酸乙酯非水相生产酶催化剂的设计与开发37611.1 生物催化简介37611.2 酶催化37711.2.1 酶催化特点及分类37711.2.2 酶催化反应的机理37711.2.3 酶催化的应用及发展现状38011.3 脂肪酶非水相催化生产短链脂肪酸酯38311.3.1 短链脂肪酸酯及其特性38311.3.2 短链脂肪酸酯的国内外生产状况38311.3.3 非水相中脂肪酶催化短链脂肪酸酯合成383参考文献386第12章 酶催化合成手性布洛芬的设计与开发38712.1 布洛芬简介38812.1.1 布洛芬的物性及应用38812.1.2 (S) 布洛芬的常用制备方法38812.2 布洛芬酯的酶选择性水解制备(S) 布洛芬38912.2.1 布洛芬酯的酶选择性水解反应拆分布洛芬的机理38912.2.2 选择性水解布洛芬酯的脂肪酶的选择38912.2.3 酶选择性水解拆分布洛芬酯的技术路线39012.2.4 酶选择性水解拆分布洛芬酯的工艺流程390参考文献391第13章 环己烷氧化制环己酮仿生催化剂的设计与开发39213.1 环己酮概述39213.1.1 环己酮的工业应用39213.1.2 环己酮生产的工业现状39213.1.3 环己烷仿生催化氧化制环己酮39313.1.4 金属卟啉催化氧化的反应机理39413.2 催化剂的选择39413.3 催化剂的使用39513.3.1 工艺流程39513.3.2 工艺参数选择39513.3.3 环己烷仿生催化制环己酮优点39613.4 工业化现状396参考文献397第14章 绿色化学与离子液体催化剂的设计与开发39814.1 绿色化学简介39814.2 离子液体的功能化及应用39914.2.1 离子液体的功能化39914.2.2 离子液体的应用40014.3 烷氧基苯膦生产用离子液体的设计与开发40114.3.1 烷氧基苯膦生产的问题分析40114.3.2 烷氧基苯膦生产用催化剂设计40114.3.3 催化剂的应用40214.3.4 离子液体的再生和回收402参考文献402第15章 汽车尾气治理用催化剂的设计与开发40315.1 汽车尾气治理概述40315.2 汽车尾气净化催化剂的开发40415.2.1 催化剂的设计40415.2.2 催化剂的制备40515.3 催化剂的使用40515.4 催化剂的发展变化405参考文献405第16章 21世纪催化科学与技术面临新机遇、新挑战和新发展40616.1 能源和化工原料的变化40616.1.1 能源和化工原料的时代变迁40616.1.2 原材料到化学品和燃料的转化40616.2 可再生生物资源的化工和能源利用40916.3 基于生物质原料生产液体燃料(BTL)的费托合成催化剂41116.3.1 费托催化剂的活性41216.3.2 费托催化剂的失活41616.3.3 费托合成的选择性41816.4 生物质的直接液化41816.5 生物质加工的技术平台41916.6 21世纪催化的现状、挑战与未来42016.6.1 推动者与拉动者:创新的R3原则42116.6.2 21世纪催化所面临的挑战42116.6.3 21世纪催化的未来422参考文献423



## 章节摘录

第2章 催化作用模式及相关基本原则 2.1 催化作用基础 一种具有工业应用价值的化学反应及化工过程，其催化作用的前提是该过程是热力学上在指定条件下可行的，因为催化剂只能加速热力学可行反应的速度，而不能引发热力学上不可能的反应。

催化剂只能加速化学平衡的到达，而不能改变化学平衡点。

这意味着催化剂可以同样加速正、反两方面的速度。

有两种情况需要注意。

其一，进行正反应的操作条件（压力、温度和进料组成等）必然与逆反应不同，平衡对立两边的操作条件互不相同，对催化剂可能有显著的影响。

提高温度可能导致催化剂晶粒变大、活性下降；增大压力可能引发催化剂上吸附物种相对数量的变化，影响到催化活性和选择性的改变。

其二，实际反应常常是复杂的，当反应由平衡的一边而不是另一边趋向平衡时，副反应可能不一样，影响催化剂的活性和选择性。

催化作用之所以能加大反应速度，是因为反应动力学的参数如反应速率常数 $k$ 、活化能 $E$ 和反应级数 $n$ 等对反应路径很敏感。

催化剂的作用是降低反应活化能（一般要下降 $100\text{kJ/mol}$ ），增大反应速率常数，即改变了反应路径，沿着一条更易转化的路径将反应物变成产物。

一般来说，催化剂最重要的作用在于提供了一条路径，沿此路径形成中间表面络合物的活化能大大低于非催化均相反应的活化能。

因为活化能是以指数形式出现在速率方程式中的，略微改变活化能，即对反应速率有显著影响。

2.2 催化作用的前奏——化学吸附 2.2.1 活性部位 在反应条件下，固体催化剂表面上的部位（site）是不均匀的。

即使是纯金属，位于特定位置的原子，例如位于晶格缺陷或晶体棱边和棱角上的原子，与平坦面上的原子不同。

现在有很多的方法测示证明这种不均匀性。

1925年H.S.Taylor假定多相催化反应优先在催化剂表面特定的少数部位处发生，称这些部位为活性部位（active site）。

对于一个反应表现活性的部位，对于另一个反应可能并不表现活性，故通常难以准确地鉴定它们的结构和特性。

在某些情况下活性部位可能是催化剂表面的一组或一簇相邻近的原子集团；有时也可能实际上是吸附在催化剂上的某一物种。

活性中心一词常作为部位或一组部位的同义语用。

<<工业催化剂设计与开发>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介, 请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>