

Modern Chemical Industry, Metallurgy,
Material and Energy

现代化工·冶金·材料·能源

中国工程院化工、冶金与材料工程学部
第九届学术会议论文集 下册

曹湘洪 主编

中国矿业大学出版社

China University of Mining and Technology Press

013029567

TQ-53

01

V2

Modern Chemical Industry, Metallurgy,
Material and Energy

现代化工·冶金·材料·能源

中国工程院化工、冶金与材料工程学部
第九届学术会议论文集
(下册)

曹湘洪 主编



中国矿业大学出版社

China University of Mining and Technology Press



北航

C1635407

TQ 53
01
V2

内 容 提 要

本书为2012年中国工程院化工、冶金与材料工程学部第九届学术会议论文集,属中国工程院化工、冶金与材料工程学部每两年出版的系列专著之一。本书由中国工程院化工、冶金与材料工程学部第九届学术会议论文精选汇编而成,共收入论文173篇,其内容涉及现代化工、冶金、材料与能源各主要分支学科;展示了现代化工、冶金、材料与能源学科理论与工程实践相结合的广阔发展前景;理论、实验与应用并重;宏观和微观相结合;体现了我国现代化工、冶金、材料与能源学科近年来所取得的许多新成果。

本书对于从事化工、冶金、材料和能源学科的科技工作者和大专院校师生具有参考价值,对于想了解我国化工、冶金、材料与能源学科近年来新进展的读者无疑也是一本十分有益的参考用书。

图书在版编目(CIP)数据

现代化工·冶金·材料·能源:中国工程院化工、冶金与材料工程学部第九届学术会议论文集/曹湘洪主编. —徐州:中国矿业大学出版社,2012.9

ISBN 978 - 7 - 5646 - 1622 - 9

I. ①现… II. ①曹… III. ①化学工业—文集②冶金工业—文集③工程材料—文集 IV. ①TQ-53②TF-53

中国版本图书馆CIP数据核字(2012)第212908号

- 书 名 现代化工·冶金·材料·能源
——中国工程院化工、冶金与材料工程学部第九届学术会议论文集
- 主 编 曹湘洪
- 责任编辑 褚建萍 周 红 杨 洋 王美柱
- 出版发行 中国矿业大学出版社有限责任公司
(江苏省徐州市解放南路 邮编 221008)
- 营销热线 (0516)83885307 83884995
- 出版服务 (0516)83885767 83884920
- 网 址 <http://www.cumtp.com> E-mail: cumtpvip@cumtp.com
- 印 刷 江苏淮阴新华印刷厂
- 开 本 787×1092 1/16 总印张 89.00 总字数 2221 千字
- 版次印次 2012年9月第1版 2012年9月第1次印刷
- 总 定 价 298.00元(共两册)

(图书出现印装质量问题,本社负责调换)

目 录

CONTENT

化学工程与技术

海水淡化与水再用和废水零排放	高从堦 3
生物燃料供应链优化研究进展	陈丙珍 8
甜高粱生产燃料乙醇、丁醇及木塑复合材料的生物炼制新工艺	谭天伟, 郑佳, 张涛, 杨霄, 俞建良 13
粘红酵母利用含糖废水发酵生产油脂	谭天伟, 张志平, 张栩 18
阳宗海砷污染原因讨论及治理效果	陈景 25
世界首套甲醇制烯烃(MTO)工业装置及开工技术	吴秀章 34
原位相变移热法制备 PPTA 小试及中试研究	罗国华, 彭文才, 张涛, 王彦昕, 度新林, 徐宁利, 张楠, 魏飞 43
新型高效催化剂与低能耗合成氨工艺	刘化章, 郑启富, 陈志军, 韩文锋, 李 璜 51
工业冷却系统节水及废水近零排放成套技术	郑书忠, 刘小东, 谢陈鑫, 朱安民 58
低碳时代炼油厂设计方案探讨	刘家明 71
手性医药化学品的生物催化合成	郑裕国, 沈寅初 80
连续发酵-吸附分离耦合技术生产生物丁醇的研究	应汉杰, 陈勇, 吴菁岚 85
基于 TiO_2 和 FeOOH 构建微纳结构光化学反应催化剂及其应用	崔官伟, 石锡峰, 李娜, 唐波 100
新型 Schiff 碱配体合成及其在立体定向催化羟醛缩合反应中的研究	陈芬儿, 胡乐萌, 熊方均 108
甲烷化学链转化体系的研究	王华, 祝星, 李孔斋, 魏永刚 119
多相搅拌反应器的模型、数值模拟和应用	杨超, 冯鑫, 程景才, 李向阳, 毛在砂 131
电子束辐照接枝对聚酯抗熔滴性能的影响	张建春, 冯新星, 丁川, 张华 143
噻螨胺的创制与合成研究	柴宝山, 刘长令, 刘少武, 李慧超 151
造纸用淀粉衍生物绿色化研究与应用技术	姚献平, 郑丽萍 160
海水淡化与浓海水工厂化制盐	吴宗生 168
无隔板镁电解槽电热场分析及电流放大探讨	孙泽, 刘程琳, 路贵民, 宋兴福, 于建国 172
催化反应过程强化	宗保宁 178

基于同源建模和定点突变技术研究嗜热型 L-阿拉伯糖异构酶与 D-半乳糖的亲合作用·····	徐铮,李贵祥,李莎,徐虹 186
轻循环油(LCO)制 BTX 芳烃技术研究·····	郑均林,钱斌,李旭光,孔德金 196
适于全煤阶的煤嵌布结构统一模型构建·····	秦志宏,华宗琪,陈德仁,倪中海 201
镁基吸附剂对 CO ₂ 吸附性能的研究·····	商春芳,吴诗勇,魏彬,吴幼青,高晋生 209
浸渍剂沥青用高温煤焦油的净化·····	刘鹏,陈晶澈,张德祥 216
原位改性中孔氧化铝负载镍催化剂的甲烷化性能·····	杜建平,赵瑞花,王贺艳,谢亚娟,李瑞丰 223
金属铈配位液晶聚合物的性能研究·····	丛越华,顾卫敏,田梅,张宝砚 230
溶胀对淮南煤热解行为的影响·····	余振杰,王胜春,伊乐其,张德祥 237
粉煤固体热载体干馏 cubic 算法分析·····	商玉坤,武建军,程相林,周国莉,蔡志丹 244
氧载体对聚谷氨酸发酵的影响·····	张丹,周哲,徐虹 256
煤基聚苯胺/环氧树脂复合材料的力学性能研究·····	张坤,周安宁,熊善新,褚佳 264
轻度热解条件对霍林河褐煤水分复吸性能影响的研究·····	叶普海,周敏,刘恭欣,钱春梅等 270
基于萃余煤的炭膜制备研究·····	陈冬梅,秦志宏,田誉娇,李新艳 278
煤矸石合成 A 型沸石分子筛及氨氮吸附性能研究·····	王茜,蒋荣立 285
MDEA-PZ 捕集燃煤烟气 CO ₂ 性能及动力学模拟·····	张亚萍,刘建周,季芹芹,罗红情 291
制备 Fe ₃ O ₄ 空心微球的 IL/O 微乳体系的稳定性分析·····	周璐,蒋荣立 300
低浓度煤层气甲烷燃烧催化材料的制备及催化性能研究·····	赵璐琪,刘建周,刘宪云,丁明雷 308
熔融法制备高岭石/2-吡啶甲酸插层复合物·····	赵锐先,蒋荣立 314
正丙醇脱除煤中有机硫的研究进展·····	张露,刘旭 321

冶金工程与技术

废弃锡合金真空分离回收金属的应用研究·····	杨斌,徐宝强,刘大春,戴永年 329
粉煤灰生产氧化铝技术进展与展望·····	李旺兴 340
浮选法回收铜冶炼炉渣关键技术研究·····	沈政昌,魏明安 350
气固沸腾层中的贴壁效应·····	吴冲许,陈彬彬,聂洪波,马丽丽 360
浓相高密度流化床干法分选研究新进展·····	赵跃民,骆振福,陈增强,陈清如 368
旋流-静态微泡浮选柱脱除粉煤灰中未燃炭的研究·····	曹亦俊,李国胜,刘炯天,张海军,翟雪 380
炼铜转炉智能化控制技术研发与应用·····	宋修明,黄永峰 389
中国氧化铝工业节能减排的技术路线·····	顾松青 395
我国铝电解低电压节能技术的开发应用进展·····	李劼,刘业翔 440
加压湿法冶金技术在锰冶金上的试验研究·····	王吉坤,彭东,谢红艳 412
我国石煤提钽技术现状及前景·····	张一敏 419
铜渣中铜和铁回收的研究现状·····	王华,李磊,胡建杭,魏永刚 427

高效无缺陷连铸坯在线监控和可视化集成技术	姚曼,王旭东,殷国茂 439
炼铁、焦化节能减排新技术——高效蓄热体覆层技术	周惠敏,曹勇,徐大勇,孙传胜,翟延飞,张绍强,刘逸舟 449
分馏萃取理论在白云鄂博稀土精矿精选中的应用	李梅,高凯,柳召刚,张栋梁 458
一种低品位铬矿石选矿新工艺研究	胡义明,皇甫明柱,徐宏祥 467
江西某石煤氧化焙烧提钒研究	刘涛,张一敏,黄晶,陈铁军 476
超重力技术在工业尾气净化中的应用研究进展	张亮亮,邹海魁,初广文,陈建峰 483
充填浮选柱在硫化铜矿分选中的研究与应用	张敏,刘炯天,翟爱峰 490
钢铁企业煤气联产化工产品的碳减排途径	高文桂,王华,韩冲,覃志强 496
大型干式磁选设备 CT1627 在首钢水厂东排的工业应用	尚红亮,史佩伟,魏红港,王芝伟 504
新型捕收剂 DT-1 在钼矿浮选中的应用研究	张其东,李小黎,刘炯天,袁志涛 509
A.f 菌对黄铁矿的生物氧化特性研究	刘金艳,陶秀祥,何环 515
减压膜蒸馏处理石煤提钒高盐氨氮废水的研究	包申旭,张一敏,黄伟 523
微生物作用对抚顺煤特性的影响	石开仪,陶秀祥,李志,孔德顺,籍永华 529
难选微细粒煤泥分选试验探究	刘博,谢广元,倪超,代立琪,蒋富歌 534
难选煤细磨解离的研究	刘莉君,刘炯天 539
超低灰太西无烟煤在行星球磨机上的超细粉碎研究	吴燕,李振,周安宁 545
国外某磁铁矿型矿石工艺矿物学研究	徐宏祥,孙炳泉,侯更合,陈平,皇甫明柱,章国权 551
絮凝浮选法分离神府煤煤岩显微组分的研究	赵伟,李振,张晓欠,周安宁 558
鄂西鲕状赤铁矿浮选产物粒度特征的研究	郑贵山,熊堃,杨兴科 563
浮选过程因素对硫化铜矿理论可浮性影响的试验研究	翟爱峰,邱显扬 572
内蒙某极贫铁矿选矿试验研究	李琳,吕宪俊,邱俊 578
石煤提钒酸浸液萃取预处理的研究	黄晶,张一敏,刘涛,王一,王非 584
气固磁稳定流化床表观黏度的研究	宋树磊,赵跃民,骆振福,张博 590
离子交换法分离提取某地下卤水中的微量硼	张秀峰,谭秀民,张利珍,李琦 596
150 吨电弧炉泡沫渣冶炼技术	及占林,蒋鹏飞,袁续阳,张连君 601
动力煤分选工艺的综述	王学霞,谢广元,王烨敏 606
高压脉冲技术破碎废弃电路板的实验研究	刁智俊,赵跃民,段晨龙,陈霞 612
粉煤灰的资源化利用	贾凯,王永田,苗真勇 619
煤泥干燥特性的试验研究	石鑫,武建军,苗真勇,周国莉 625
选煤厂设备腐蚀影响因素分析及防护	田江漫,解京选 634

材料科学与工程

“材料基因组计划”——我国材料界的机遇与挑战	陈立泉 643
定向凝固晶体取向与界面各向异性	傅恒志,刘林 644
全光纤活体生物组织 3D 非线性光学内窥观察和光量子治疗系统研究	赵连城 645

微合金非调质钢的研究与应用进展	陈蕴博,李永兵,左玲立	655
高速飞行器耐热材料与红外窗口材料的研究进展	韩杰才,杜善义	664
离子液体在新型二次电池中的应用研究	吴锋,向晋,陈人杰	673
高端铝板带箔织构调控原理与技术	张新明	686
高应变率下钛合金微观组织的绝热剪切变形及失效过程数值模拟研究 ...	王富耻	697
两类烧蚀耐热复合材料烧蚀性能控制机制研究	李仲平	707
水泥生产系统氮氧化物的产生过程和控制措施		
..... 蔡玉良,肖国先,李波,吴建军,丁苏东		721
SiC 纳米线增韧增强抗氧化陶瓷涂层研究	李贺军,褚衍辉,付前刚,张雨雷	734
高性能国产碳纤维及其复合材料发展现状	陈祥宝,张宝艳	740
核电站运行水化学条件对 690 镍基合金腐蚀机制与行为的影响研究		
..... 韩恩厚,王俭秋,吴欣强,柯伟		750
纳米二硫化钨增强超高分子量聚乙烯复合纤维的制备及性能研究		
..... 张建春,张涛,马天,高鹏刚		761
高性能铝合金材料挤压铸造成形技术研究	李元元	768
类球形纳米含能材料 RDX 的制备及性能研究	李凤生,刘杰,姜炜,王毅	777
超细橡胶粒子改性塑料的微观结构及其应用	乔金樑	787
多级流化床反应器及在煤化工、纳米材料领域的应用		
..... 魏飞,罗国华,王垚,蹇伟忠,张强		793
超微高磁性四氧化三铁磁粉的合成和应用	宋宝珍,王威,刘春朝,刘京玲	799
碳纤维增强聚三唑树脂复合材料表界面改性研究		
..... 杜磊,扈艳红,黄发荣,万里强		806
X 射线及伽马射线探测用 CZT 材料的研制与应用	介万奇	815
生态环境材料及其评价技术	聂祚仁	824
混凝土集料功能设计与制备及其应用技术	胡曙光	832
多功能螯合剂多羟多胺在 IC 多层布线平坦化中的特殊作用		
..... 刘玉岭,高宝红,王娟,何彦刚		842
三维七向复合材料弹性性能预测	朱建勋,刘勇,陈照峰	847
水合物中高岭石片层的卷曲形貌和取向研究	牛继南,强颖怀	855
半导体照明用发光材料关键技术研究	肖志国	868
碳纤维增强铝复合材料界面反应控制方法研究		
..... 武高辉,陈国钦,王晨光,王旭,王平平		882
In^{1+} 、 Sn^{2+} 对 ITO 靶材微观组织结构与性能的影响		
..... 王东新,何季麟,马晓波,孙本双,钟景明,赵世乾,李彬		890
非钒系列脱硝催化材料制备及 NH_3 -SCR 催化机理研究		
..... 翁端,司知鑫,冉锐,吴晓东		904
HA 涂层的 Mg-4.0Zn-1.0Ca-0.6Zr (wt%) 合金板材溶血性能与细胞毒性研究		
..... 管仁国,赵占勇,崔彤,赵彤,刘春明		919
16Mn 熔化极氩弧焊接头组织及力学性能分析	张绪平	928
MFI/MOR 共生沸石分子筛的合成与结构研究		
..... 刘志成,王仰东,黄政,高焕新,谢在库		933

高速摄像法研究熔体电纺纤维的下落	刘勇, 刘兆香, 邓亮, 杨卫民	939
新型高性能无卤阻燃长玻纤增强聚丙烯复合材料	刘云, 王玉忠	945
三维七向 $\text{SiO}_2/\text{SiO}_2$ 复合材料力学性能研究	刘勇, 朱建勋, 陈照峰	955
西门子多晶硅还原炉内化学气相沉积过程模拟研究		
..... 倪昊尹, 陈彩霞, 陆时杰, 钟真武, 江宏富		961
射频超腔用大晶粒高纯铌片的研制	顾维平, 陈林, 李明阳, 何季麟, 李彬	967
高活性 MgCl_2 负载 $\text{TiCl}_n\text{L}_{(4-n)}$ 催化剂催化乙烯-降冰片烯共聚合的研究		
..... 张浩, 张贺新, 蔡小平		972
复合添加剂对金属陶瓷惰性阳极性能的影响	委福祥, 于跟喜, 黄勇	978
Co-Ni-P 化学镀层的显微组织和性能研究	张含卓, 许程, 强颖怀	985
$\text{FeF}_3/\text{V}_2\text{O}_5/\text{C}$ 复合材料电极界面特性研究	史月丽, 沈明芳, 庄全超, 强颖怀	998
用于太阳能光热发电的直通管式太阳能真空管热性能研究		
..... 葛众, 王华, 王辉涛		1001
聚丙烯酰胺/凹凸棒土复合凝胶的制备及性能研究		
..... 李培欣, 张桂芳, 赵义平, 陈莉		1009
新型富锂正极材料 $\text{Li}[\text{Ni}_x\text{Li}_{(1/3-2x/3)}\text{Mn}_{(2/3-x/3)}]\text{O}_2$ ($x=1/3, 1/2$) 的制备及电化学性能研究	邱祥云, 应鹏展, 张倩倩, 庄全超	1016
发酵乳杆菌来源 L-阿拉伯糖异构酶(LFAI)的晶体制备与衍射分析		
..... 李贵祥, 徐铮, 李莎, 付凤根, 徐虹		1027
裂纹约束对表面裂纹管韧性断裂的影响	徐杰	1036
单晶硅表面制备 Co-P 化学镀层及其性能研究	刘蕾, 张含卓, 钟耀东	1046
$\text{MoSi}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 复合材料燃烧合成	王建栋, 冯培忠, 郭瑞霞	1052
温敏型分子印迹聚合物的制备及其吸附性能的研究		
..... 王霞, 李金苓, 张未来, 赵义平, 陈莉		1058
D-萘普生分子印迹凝胶的制备及性能研究		
..... 张强, 王霞, 张未来, 赵义平, 陈莉		1065
共掺杂改性纳米 TiO_2 高效光催化剂的制备与表征		
..... 刘倩, 郑经堂, 江波, 吴明铂, 刘萌萌		1072
镁碳复合储氢材料对二硫化碳和噻吩加氢脱硫研究		
..... 张宁宁, 李根壮, 韩瑞, 宋传兵, 张同环, 陈海鹏, 周仕学		1077
非晶态 TiO_2 包覆硅灰石及其对尼龙 PA1010 结构的影响		
..... 纪少南, 欧雪梅, 蒋元博, 张生辉		1083
电刷镀 $\text{n-Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}$ 复合镀层形貌及性能研究	王芹芹, 沈承金, 朱振	1091
高岭石/苯甲酰胺插层复合物的脱嵌反应动力学		
..... 周亚冲, 张生辉, 欧雪梅, 香承杰, 张欣		1098
VEC 对石墨负极的电化学性能影响及其还原机制	徐守冬, 庄全超, 朱亚波	1106
氮合金化马氏体不锈钢硬面堆焊焊剂的研制	杨可, 杨勤, 包晔峰	1113
离心铸造镁合金构件显微组织演变规律研究	隋艳伟, 张跃, 孙智	1118
配分时间对汽车用超高强 Q&P 钢组织与力学性能的影响		
..... 任康康, 康永林, 朱帅		1122

Y ₂ O ₃ 复合材料的研究进展	何曦,杨华明 1127
EISA 法合成介孔 SnO ₂ 及其结构表征	李晓玉,欧阳静,杨华明 1135
超音速火焰喷涂 WC-CoCr 涂层磨粒磨损性能研究	周靖,张宏,马瑞永,沈承金 1141
PbO 对晶体硅太阳能电池正面电极电性能的影响机理研究	王立惠,钟翔,罗文,何季麟 1150
JHMGCl00S 与其他 PE100 级管材料的结构与性能 比较研究	石行波,王菊琳,蔡小平,刘宏吉 1156
非金属矿在建筑保温材料中的应用	彭康,杨华明 1164
Gluconbacter Oxydans NH-10 膜结合 D-阿拉伯糖醇脱氢酶的纯化与性质研究	张金亮,周鹏,李莎,徐虹 1170
热处理炉用抗渗碳隔热材料的热物性学研究及优化	任燕明 1181
我国多晶硅高效节能环保生产技术、装备与产业化	严大洲,汤传斌,肖荣辉,毋克力,宗绍兴,侯晓东,杨永亮,万烨 1186
黏结 NdFeB 磁瓦的研发及量产	秦万忠,何洁,么玲一 1196

能源科学与技术

基础设施建设需适应气候变化	唐明述 1207
百万吨级煤直接液化关键技术及示范	舒歌平 1220
动静载诱发冲击的机理探讨	窦林名,贺虎,李耀谦,刘晶 1233
神华 CCS 示范项目工程实践与探索	陈茂山 1248
含杂萘联苯结构高性能聚芳醚及其应用研发进展	蹇锡高,王锦艳,张守海,刘程 1256
5A 分子筛对冷却剂氦气中微量 CO ₂ 的吸附性能研究	常华,郭士伊,吴宗鑫,姚梅生,黄晓津,银华强,何学东 1268
基于光纤光栅传感技术的煤矿巷道矿压实时在线监测系统	张农,赵一鸣,阚甲广 1278
基于采空区压实理论的采动应力反演	屠世浩,白庆升,袁永,王方田 1288
世界铂钯金属资源的开发现状及展望	邱显扬 1298
煤炭市场准入制度的思考与建议	陶秀祥 1306
当今世界主流石油压裂液配液技术和装备一览	罗彤彤 1311
用程序分析往复压缩机的外力功耗及其节能降耗	虞岩贵 1318
核用离心萃取器的研制和应用	段五华 1330
铜基载氧体的制备及其反应性能研究	王杰,王文举,刘心志 1339
我国热化学碘硫循环制氢技术研究进展	张平,陈崧哲,王来军,徐景明 1348
逆冲断层对冲击矿压的影响机制研究	李振雷,窦林名,刘彪,蔡武 1357
石油焦与煤共气化制备富氢气体的实验研究	黄胜,纪丽媛,吴诗勇,吴幼青 1366
新型二十面体准晶 Ti ₃₉ Zr ₃₈ Ni ₁₇ Pd ₆ 的吸放氘特性研究	黄火根,李山荣,陈亮 1376
煤层冲击倾向性的主成分—模糊综合判别研究	蔡武,窦林名,何江 1382
我国露天开采矿山土地复垦现状	马力,李克民,李涛,常治国 1394

Modern Chemical Industry, Metallurgy,
Material and Energy

Material Science and Engineering

现代化工·冶金·材料·能源

中国工程院化工、冶金与材料工程学部
第九届学术会议论文集

材料科学与工程

“材料基因组计划” ——我国材料界的机遇与挑战

陈立泉

(中国科学院物理研究所)

摘 要

2011年6月24日,美国总统奥巴马宣布了一项超过5亿美元的“先进制造业伙伴关系”(Advanced Manufacturing Partnership, AMP)计划,而“材料基因组计划”(Materials Genome Initiative, MGI)是AMP计划中的重要部分,其目标是帮助美国企业发现、开发、生产和应用先进材料的速度提高到目前的两倍,从而促进美国制造业的复兴,保持美国的全球竞争力。

当今世界,科学上的竞争也是在商场上的竞争,创新带来巨大的经济效益有时会比战争带来的多得多。美国政府在当前财政窘迫的背景下推出这项计划是由于现在材料领域的发展正面临严峻挑战,新型材料从发现到进入市场经历的时间太漫长,而恰恰是这些先进材料可以帮助解决很多紧迫的问题,譬如新能源问题等。当前材料领域的发展模式是直线型的,从新材料被发现、开发、性能优化到产品设计整合、测试认证、生产销售,直到最后的回收利用,都是一步一步直线型发展的。这样的时间跨度平均是18~20年。而MGI则设想通过利用计算机技术的进步,根据量子力学基本原理从原子尺度出发,直接面向最终的应用需求,同时进行新型材料的搜索、设计、相图构建、合成和性质优化等过程,加速材料走向市场的步伐,从根本上改变材料领域发展的模式。

“人类基因组计划”通过DNA测序等获取人类基因的所有信息,为疾病发病机理、预测、治疗、控制、药物开发等提供依据,使得药物开发者可以预先排除大量无关、有害药物成分,从而加速新药的探索、开发、测试和生产销售过程。“材料基因组计划”与其类似,通过高通量的第一性原理计算,结合已知的可靠实验数据,用理论模拟去尝试尽可能多的真实或未知材料,建立其化学组分、晶体结构和各种物性的数据库,并利用信息学、统计学方法,通过数据挖掘探寻材料结构和性能之间的关系模式,为材料设计师提供更多的信息,拓宽材料筛选范围,集中筛选目标,减少筛选尝试次数,预知材料各项性能,缩短性质优化和测试周期,从而加速材料研究的创新。所以“材料基因组工程”更接近实际应用,覆盖范围更加广泛,它包括了几乎所有可能的化合物及其物性,对国民经济、国家科技竞争力和国家安全的重要性不言而喻。我们在“人类基因组工程”竞争中已经失去了领先的机会,当前应抓住“材料基因组计划”这一千载难逢的机遇,改变材料发展的模式,为先进制造业提供高端材料。

报告在介绍“材料基因组计划”的背景后,以MIT的G. Ceder研究组用“材料基因组计划”研究新的锂离子电池正极材料为例简要介绍“材料基因组计划”的操作过程,然后提我国如何开展“材料基因组计划”的设想和建议,以期开展讨论。

定向凝固晶体取向与界面各向异性

傅恒志 刘 林

(西北工业大学凝固技术国家重点实验室 陕西西安 710072)

摘 要:定向凝固晶向控制问题日益成为先进材料制备中的重要环节。本文以单晶高温合金为例,进行了定向凝固条件下多晶竞争淘汰形成单晶的过程及晶体生长取向的研究。在模拟和试验的基础上,建立了定向凝固过程中晶体生长方向、最大热梯度方向与晶体择优取向之间的关系及温度梯度和生长速度对该关系的影响规律。研究发现,固—液界面形态与稳定性是晶体择优取向与界面各向异性的函数,主要决定于界面局部形状位向及其动力学强度。文章还探讨了定向生长条件下界面各向同性与各向异性凝固系统晶体生长方向随界面移动速度变化的有关规律,并提出了在定向凝固中控制晶体取向的原则性建议。

Crystal Growth Direction and Interface Anisotropy During Directional Solidification

Fu Hengzhi Liu Lin

(State Key Laboratory of Solidification Processing, North Eastern Polytechnical university)

Abstract: Controlling the crystallographic orientation during directional solidification has becoming one of important parts in processing of advanced materials. In present presentation, the competitive grains growth and their crystallographic orientations during directional solidification are discussed in the case of Ni-based single-crystal superalloys. Based on the results of simulation and experiments, the relationship between growth direction, the preferential crystallographic orientation and the direction of maximum thermal gradient during directional solidification are established. Moreover, the effects of thermal gradient and growth rate on this relationship are investigated. It shows that the morphology and stability of solid-liquid (S/L) interface are a function of preferential crystallographic orientation and interface anisotropy, mainly determined by the local orientation of S/L interface and its anisotropic interface kinetics. Appropriate regularity about the change of growth direction of isotropic and anisotropic solidifying system with change of interface moving speed during directional solidification is also discussed. Some suggestions for controlling the crystal growth orientation during directional solidification in principle are also proposed.

作者简介:傅恒志(1929年—),男,材料及冶金专家,教授,博士生导师,中国工程院院士,俄罗斯宇航科学院外籍院士,国际高校科学院院士。

全光纤活体生物组织 3D 非线性光学内窥观察和 光量子治疗系统研究

赵连城

(哈尔滨工业大学光电材料与量子器件实验室 黑龙江哈尔滨 150001)

摘 要:本文阐述了绿色荧光蛋白的晶体结构和发光特性,以及荧光蛋白在异源细胞内能自发产生荧光,用于活细胞适时定位观察,研究外界信号刺激下蛋白的变化过程,获得自然真实状态。荧光蛋白成像技术使错综复杂的细胞结构和功能研究达到跟踪、定位、监测和动态观察。查明化学反应在细胞、组织间的传递过程。介绍了全光纤活体生物组织 3D 非线性光学内窥观察的主要优越性及其在生命科学、医学研究和药物开发中的应用。光量子光纤器件是指光动力治疗时光敏物质在光照下由基态激发所吸收的能量量子化,有利于促进细胞再生,提高疗效。将全光纤非线性光学内窥观察和光量子治疗光纤器件形成一体化集成系统。将实现重大疾病的早期检测、病灶的精确定位、靶向量子治疗与实时在线跟踪一体化。

关键词:生物成像技术;分子侦探;光量子光纤器件;荧光蛋白;非线性光学;激发光谱;发射光谱;光漂白;光量子治疗;量子点

1 引言

2008 年 10 月 8 日三位美国科学家因发现和研究“绿色荧光蛋白”(green fluorescent protein, GFP)做出突出贡献而获得诺贝尔化学奖。他们是 Osamu Shimomura (下村修)、Martin Chalfie、Roger Y. Tsien (钱永健),如图 1 所示。



Osamu Shimomura 下村修



Martin Chalfie



Roger Y. Tsien 钱永健

图 1 2008 年 10 月 8 日获“绿色荧光蛋白”诺贝尔化学奖的三位科学家

GFP 是一种在蓝色光激发下发出荧光的特殊蛋白质,它可使生物的微观与宏观之间架

作者简介:赵连城,教授,中国工程院院士,哈尔滨工业大学博士研究生导师,主要从事半导体异质结、量子阱和超晶格、共格量子点岛、双波段(双色)等光电薄膜材料和各种发光材料、光电转换材料、光导纤维和器件、信息存储材料、绿色荧光蛋白和分子荧光探针等研究,以及它们的结构分析与性能评价和工程技术应用等。

起联系的桥梁,通过观察发光效应推测出细胞、分子、基因(gene) 的活动。跟踪活体细胞内部和外部分子的实时变化,查明化学反应在细胞、组织之间的传递过程,被称为“分子侦探”。1961 年,Osamu Shimomura(下村修)在 *Aequorea victoria*(维多利亚多管发光水母)体内分离出 Aequorin(水母发光蛋白),并发现在阳光下呈绿色,在钨丝下呈黄色,在紫外光下呈强烈绿色,这是由于钙离子与水母素交互作用时发生了能量交换,从而产生发光效应。1962 年发表了相关论文^[1]。1974 年提取出 GFP^[2]。图 2 示出多管水母蛋白的荧光。

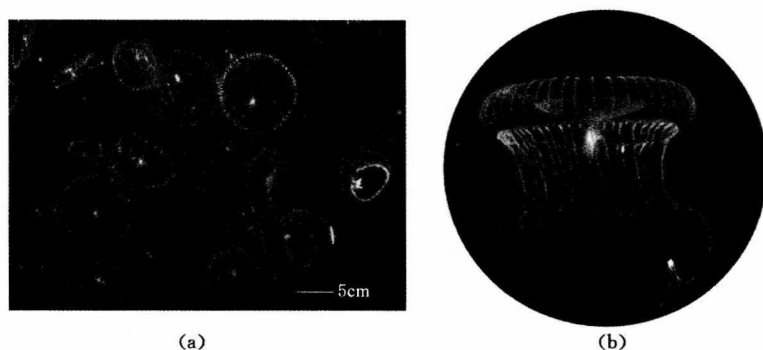


图 2 自然界的维多利亚多管水母

1985 和 1992 年,Douglas Prasher 先后提出水母素和 GFP 的 DNA(desoxyribonucleic acid 脱氧核糖核酸),为 GFP 成为“生物北斗”迈出关键一步。Martin Chalfie 1994 年用 GFP 使秀丽的隐杆线虫(通身透明、身躯纤细)的 6 个单独细胞有了颜色,引起轰动^[3]。这种发光遗传标记的重要意义受到科学界广泛重视。钱永健从分子生物学解释了 GFP 的发光机制,并对 GFP 进行了定向改造,使之能发绿色光以外的多种颜色^[4]。这种多色荧光蛋白标记技术,可实现同时对多个生物学过程进行追踪,由此发展起现代生物成像技术,可在活细胞中观察和研究生物学过程,无需解剖,被称为“起死回生”。GFP 基因常被作为报道基因,可转植到脊椎动物如老鼠身上,用于验证试验,如图 3 所示。

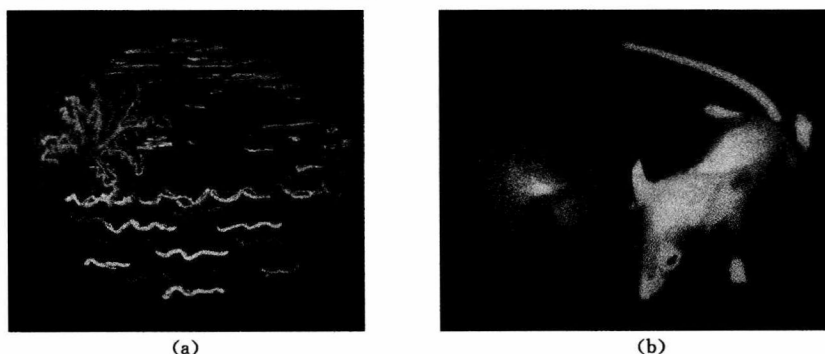


图 3 利用 GFP 使老鼠发出绿色荧光
(a) 脑部;(b) 全身

2 绿色荧光蛋白的发光特性和多色成像

2.1 GFP 晶体结构

GFP 由 238 个氨基酸残基组成, 分子量为 26.9 kDa, 最初是由 *Aequorea victoria* 中分离出来的, GFP 序列中的 65-67 位残基(Ser65-Tyr66-Gly67)可自发形成荧光发色基团—对羟基苯咪唑啉酮, 如图 4 所示。GFP 的四级晶体结构由 11 个 β -折叠组成, 呈柱状, 直径约 3 nm, 长约 4 nm。柱中央有一个 α 螺旋如图 5 所示, 发色基团在 α -螺旋上。蛋白的二级结构大部分为 α -螺旋和 β -折叠。天然 GFP 的荧光激发光谱如图 6 所示。其中激发光谱(图 6 中实线)的主激发峰在 400 nm 附近, 次激发峰为 470 nm。发射光谱(图 6 中虚线)的主发射峰为 505 nm, 肩峰为 540 nm。

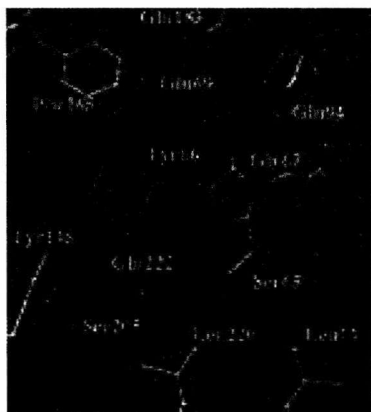


图 4 GFP 一级结构中第 65-67 位氨基酸残基(Ser65-Tyr66-Gly67)形成的荧光发色基团



图 5 GFP 四级结构, 柱状结构中央为带发色基团的螺旋

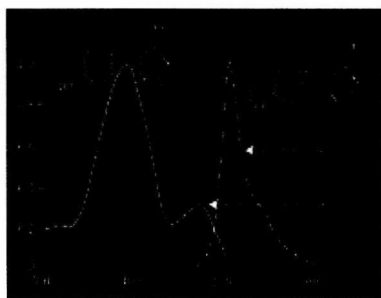


图 6 *Aequorea victoria* 的天然 GFP 的荧光激发光谱(实线)和发射光谱(虚线)

2.2 GFP 发光特性

1995 年钱永健完成单点突变(S65T)显著提高了 GFP 的光谱性质, 荧光强度和光稳定性也大大提高, 称为增强型绿色荧光蛋白(EGFP), 应用潜力提高。激发峰达到 488 nm, 发

射峰为 509 nm, 并与常用 FITC 滤光片匹配。荧光蛋白改造是越红越好, 普遍认为长波长光子激发对细胞和组织的光毒性小, 并且自体荧光和组织的光吸收也最小, 而且红色荧光基团对比度提高, 更适合体内成像, 因此荧光蛋白改造慢慢向红色偏移。并且荧光蛋白有同源物, 多样性丰富, 以至长波长荧光蛋白陆续出现, 并且名字动听, 如: mStrawberry、mCherry (2004 年), mApple (2008 年), mRuby (2009 年)。

活体荧光成像最好采用远红外荧光蛋白, 需要被 600 nm 或更长的光激发, 但这些光在到达深处组织之前即已被血红蛋白大幅度减弱, 至今尚未能开发出激发光谱在 700 nm 左右的荧光蛋白。水母素在钙刺激下发光, 其能量可转移至 GFP, 刺激 GFP 发光, 称为荧光共振能量转移 (FRET)。钱永健利用饱和突变和 DNA 重组改变胆绿素发色团蛋白残基, 发现了一种光稳定的红外荧光蛋白突变单体, 其激发波长为 684 nm, 发射波长为 708 nm, 当利用腺病毒载体在小鼠的肝脏表达这种突变体时, 观察到强烈的红外荧光^[4]。当采用红外荧光蛋白细胞成像时, 其细胞自体荧光几乎不存在, 图像清晰, 也可在共振能量转移 (FRET) 中应用, 对多种光敏色素吸收的最大值为 650~750 nm。通过常规的基因操纵, 用荧光蛋白标记其他目标蛋白时, 便可观察、跟踪目标蛋白的时间、空间变化, 达到过去难以达到的分辨率, 并可在活细胞或活体动物中观察到分子, 还可协助 HIV (Human Immunodeficiency Virus, 艾滋) 研究。还有一种光转换荧光蛋白 (EosFP) 能发出强烈绿光, 当用紫外照射时会变红, 这是一种最好的示踪标记, 将其与 HIV (艾滋) 的结构蛋白 Gag 相连, 可实时跟踪 HIV 病毒在感染细胞膜上是如何介入和释放的。

GFP 极其稳定, 耐受高温处理, 甲醛固定和石蜡包埋不影响其荧光性质, 无漂白现象, 用酸、碱或盐酸胍处理, 一旦恢复中性环境或取出变性剂, 荧光便可恢复, 发射光谱不变^[5]。GFP 为稳定的可溶性蛋白, 对抗原和抗体的标记效率为 100%。GFP 表达后折叠环化, 在氧存在下由 65-67 位的氨基酸残基 (Ser-Syr-Gly) 环化, 形成发色团, 无需加酶和底物, 在紫外和蓝光下均可发荧光, 并且不易猝灭。在 450-490 蓝光下, 可保持 10 min 以上^[6]。GFP 相对分子量小, 对细胞无毒性, 是良好的标记物。其 cDNA 全长为 2.6 kb, 但不影响与其连接的目的基因的表达。任何报告基因对连接的目的基因功能无影响, 原则上尽可能使用相对分子量小的报告基因, GFP 分子量较小为 27 000, 是其成为报告基因的一大优点。GFP 与目的基因融合后, 对目的基团结构功能无影响, 大量表达对细胞无毒性作用, 仍可连续传代培养。其他报告基因, 如萤火虫的荧光素酶, 虽不干扰细胞功能, 但其相对分子量大 61 000, 作为标记不如 GFP 理想。GFP 作为荧光靶使用方便, 可直接用于活体测定, 是唯一能在异源细胞内表达后自发产生荧光的蛋白, 可用于活细胞适时定位观察, 获得的状态自然真实^[4]。如蛋白向细胞核、内质网运动的状态。以及在外界信号刺激下蛋白的变化过程。

2.3 荧光蛋白多色成像

荧光蛋白及其衍生物功能多样, 已成功应用于微生物、生理学等生命科学领域, 在细胞培养和动物体基因表达中作为报告基因被应用, 在活细胞中用于追踪蛋白、组织和细胞组分定位和动态变化, 以及内部蛋白运输的监测。荧光蛋白成像技术是错综复杂的细胞结构和功能研究的重要途径。

荧光蛋白复杂的光谱和物理特性会影响实验准确性。其他特性, 比如摩尔消光系数、量子产量、光漂白率和依赖光谱特性的 pH 均可在体内检测出来。而生色团形成时间长短和蛋白的体外降解率都很难确定。因此, 全面了解荧光蛋白的固有特性十分必要。由光子引