

致 谢

本调研为化学部的咨询任务。在进行中始终得到化学部和学部联合办公室的不断鼓励和组织上的支持,感谢华彦文和罗世华两位同志。在搜集材料、组织讨论、编写撰文中得到程雪琴、李惟梓和柳华同志许多帮助,也表示感谢。

郭慕孙、汪家鼎

发展中中国的 化工前沿

第一部份 调研摘要:发展中中国的化工前沿

..... (1—50)

第二部份 专家对化工前沿的撰文

..... (1—260)

第三部份 美国专家对化工展望和前沿的议题

..... (1—12)

调研摘要

发展中中国的 化工前沿

前言	1
推进化工的动力	4
当前化工进展的特征	12
前沿的选择	16
建议四个方面的化工前沿:内容举例概述	18
对于实施的建议	46
参考资料	49

前 言

1956 年的全国自然科学规划中就有化工分篇。在当时建国初期,经济建设为全国关注的主要问题,化工规划的内容侧重于生产工艺,学术以单元操作为主。1961 年编写第二次全国自然科学规划时,就提出了应用基础的重要性,化工规划主要以“三传一反”为中心。“三传”指动量、能量及质量的传递,动量传递包含化工中的流体运动;“一反”指化学反应。这都是 50~60 年代化工的学术前沿。“三传”最初由美国人 Bird, Stewart 和 Lightfoot 撰写成书,成为单元操作的基础科学。“一反”由荷兰学者 Van Krevelen 和英国的 Denbigh 等人将化学反应动力学与传递现象结合,成为化学反应工程。由于生产的需要,在强调独立自主、自力更生的原则下,化学工程成为全国规划中重点的第 28 项,简称为“国重 28”。

文化大革命之后,时隔 18 年的 1978 年,科学院牵头再次编写全国科技规划,为了集中力量推动化工,选择了四个优先领域:

△ 反应工程

△ 分离科学

△ 颗粒学

△ 生物化工

这次规划始终未形成正式文件,但其内容为化工科技界所周知。

鉴于以上情况,并想进一步建树化工,科学院化学部于1989年提出调研“化工前沿”的任务。与前几次规划相同,其目的在于重点突破,带动全局。起初考虑选择例如十个可以形成未来工艺的课题,邀请一些部级大单位入伙,既带预选意见又投资金。这一方案要求自筹经费、自提课题,需要大量组织工作,显然难于实现。后来,改为对化工科技界征稿,邀请提出根据概念、思维、事实、经验的开拓性研究,一旦成功,能创新科技思想。先后分发了千余份征稿书。至1991年底回收了32件意见,除少数新概念、新思想外大多属综述。

化学部任务下达不久,全国自然科学基金开展了各分支学科的学科发展战略研究的调研,其中化学工程调研组由19位专家组成,并动员了全国专家共计146人,提供了126篇材料,最后编成总报告的送审稿,计122页,分为四个主要部分:

- ① 化学工程学科的内容、地位和任务(属概述)
- ② 国内外化学工程发展现状和趋势(系概述全面展开的综述)
- ③ 我国化学工程学科近期发展的方向、重点和目标(为综述的选择)
- ④ 建议优先资助发展的化学工程前沿领域和课题(共21项)

该报告提出了从以上的②经两次选择成④的原则、以及如何贯彻落实④的建议。

上述调研报告的幅度基本上覆盖了当前化工科技的全局和我国思维产出的概况。国际上,近年来对化工前沿的调研有以下三份材料:

▲ Frontiers in Chemical Engineering, 1988,

National Academy of Science, Washington

▲ Perspectives in Chemical Engineering, 1991,

Academic Press, Boston

▲ Critical Technologies —

The Role of Chemistry and Chemical Engineering, 1992,

National Research Council, Washington

化学部的化工前沿亦将建立在上述国内外知识的积累、国内的人力和思想产出及其所拥有的物质条件。所谓前沿有两种含义:站队(别人的前沿)和创新(自己的前沿)。但是欲有产出,站在别人前沿时也得创造自己的小前沿。科研务必要求有所产出。写文章仅是表达产出的方式,有无产出需视其内容。一个领域有其前沿,小至其中一个分支、课题,也有其前沿。前沿是动态的,随着工业、经济、社会的需

求而不断向前推移,因此,脱离不了基本国情。

本调研首先分析了当前推进化工的主要动力,从而探讨了目前化工进展的特征,由此提出选择前沿的对策,归纳出四个方面的化工前沿及其内容举例。对这些代表性内容(共计30项),邀请了27位专家撰文,并组织他们座谈讨论。本调研报告一方面摘录了这些撰文和专家们的意见,另外全文刊登他们的原著。为了进一步展示国际上对化工展望和前沿的议论,本报告综合了美国专家的议题和意见。

推进化工的动力

当今推进化工的动力出自两个方面。一是**新兴产业**,这些产业需要三传一反的知识,但是这些知识在新产业中的应用又必需结合这些产业的特殊要求,由此,三传一反必须在原有的基础上延伸,补充新的内容。另一个动力出于化工**分支学科**本身的科技积累、交叉结合。

推进化工的**新兴产业**主要为生物、材料和环保工艺,简述如下。

生物技术——

大规模培养细胞虽可运用化工对于反应器设计的知识,但受到生命体系的制约,例如,为了加速传质可以加快搅拌,但过速搅拌会使细胞在强剪切力下被摧毁,由此向化工提出新的要求。

酶所能催化而生成的产物非属一般人造催化剂或不同催化剂的工艺所能获得。微生物生产酶的过程由生命过程控制,为了酶产物的工业化,必须了解这一生命过程的控制因素,特别有关其速率。为了改变酶的功能或为了获得某些特有功能、制造新的产物,化工必须与生命科学有所结合,进行细胞中 DNA 的改组。

化工与医学相结合中提出一系列需化工而又非传统化工的技术,例如与人体相容植入体内的塑料和金属的合成和制造,药物受控释放的方法及材料,及其在人体中的转移、扩散,在病灶的驻留和在人身中的消失的数学模拟。

材料——

化工出源于大宗化工产物——酸、碱、合成氨、汽油,其功能属化学,在使用中本身消失。材料的功能属物理,在使用中保持原状。

材料在其成份和纯度方面,不但有化学要求,其功能往往取决于

其物质结构,而材料的成份、纯度及结构又由其加工工艺所决定,这种工艺大都具有化工特征。用化工方法制造的材料,最广泛而具特色的为塑料。这些高分子在加工过程均属非牛顿流体,其流变性能与化工所习遇的材料大不相同,简单比较如下:

	<u>牛顿型流体</u>	<u>高分子</u>
搅拌	生成中心涡流	抱搅拌桨轴上升
挤压模出口	收缩变小	膨胀变大
内置线条	游荡运动	自趋正中

由于高分子流动性能的特殊,化工常用的流动、传递分析必须修正。且高分子的加工往往属间歇工艺,其控制目标除了产量外,往往更重要的为产物的特定性能,例如分子量分布。

制备高级陶瓷材料往往采用溶胶的凝胶工艺,将陶瓷前体(如甲基原硅酸脂)溶解后在严格控制的条件下水解,以获得多孔高分子量的凝胶。又如加入二氧化锆可在材料裂纹顶端产生介稳态相,阻止裂纹的延伸。这类产品的制备虽离不开三传一反原理,但要求与有关材料的知识结合,以保证产物的性能。又如陶瓷复合材料,通过改进纤维材料与本底的结合,可改进其脆性,增强其韧性,扩大其用途。纤维与本底界面分子间相互作用亦类同其它化工常遇的界面现象,延伸

这方面的知识也可研讨。

电子工业的基础材料硅的生产,从 SiHCl_3 的制备、精馏提纯,至其还原分解到多晶硅,可谓传统化工。但从多晶硅拉制单晶硅,已不为常用化工原理所覆盖,要求延伸已有化工知识至这一工艺对于单晶缺陷、杂质等的特殊要求。用单晶硅制造电子原件,已将传统的焊接线路改为化学加工。单晶硅片的刻蚀、涂复、包封等多数加工程序中化学气相沉积占有重要地位。虽这些都属三传一反范畴,其体系和目标要求已与传统大宗化工产物的生产已大不相同,为此传统的三传一反必须延伸与新的知识相结合。

光电材料中的光导纤维已在很大程度上取代了铜线通讯,其加工始于高纯石英管,在其内侧通过高温下的气相沉积,由 SiCl_4 掺杂 POCl_3 和 GeCl_4 形成近百层的高折光率的涂层,然后再次升温使石英管内塌,包裹成柱,再将之抽丝,然后覆盖有机物保护层。这一工艺虽也包含三传一反,但其几何体系及对产物高纯度和性能的要求远非一般化工类同。用金属有机化合物在电子材料中的汽相外延及汽相化学迁移为当前常用的技术,但尚未得到熟练于三传一反化工专家的充分研究、开发和改进。以光电转换的太阳能电池而言, Si 的效率已达 23%, GaAs 已达 26%, 如能降低生产成本, 化工有望为清洁、再生能源作出贡献。

超细粉末材料(指粒度 $10^{-3} \sim 1\mu$), 由于其比表面积의 增大, 表面电子和晶体结构的变化, 具有块料所没有的效应。超细粉末制成的陶瓷具有良好韧性。细达 0.02μ 的磁性粉末的矫顽力可比块料的矫顽力大至三个数量级, 可制成高记录密度、低噪音的磁记录介质。超细银粉的熔点可降至 100°C , 将其浆料进行低温烧结, 从而可用塑料代替陶瓷成为导电材料的基体。超细 Fe、Ni、 $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 混合轻烧结体可以代替贵金属作为汽车尾气净化的催化剂。超细材料制备工艺的放大, 以及表面处理工艺和设备的开发, 都属化工专家延伸其三传一反的知识所能承担并有望改进和提高的领域。

环保——

化工的一个重要的社会效应在于保护环境, 减少人类生活生产活动对环境的污染。对于过去对环境污染的重视不够, 有些工业已经污染了的环境, 要求随后处理; 对有些目前还在污染环境的工业, 要求采取补救措施, 予以纠正; 对将来的工业, 要求生产少污染环境和 不污染环境的产物。与常用的化工工艺生产有用产品所不同, 在环境保护中化工起的作用是无用产物的消毁。

当前引人注目的大气污染物之一为作为制冷工质和化装品等推进剂的氯氟烃 CFC, 这类化合物排放至大气中后, 上升至同温层受日

照光化学分解生成 Cl^{-1} , 后者扩散至南极上空, 在当地条件下, 于 HNO_3 微晶表面与 O_3 反应, 于是夺走了该地区的 O_3 , 破坏了 O_3 掩护地球表面生物的作用。这一大气化学的机理包含不少三传一反的原理, 但其规模大于任何常见的化工反应器。同时, CFC 的代替工质, 甚至不用工质的其它制冷技术, 也成为化工所能发挥作用的领域。由于对环境不利作用而另寻代替物的工作颇为普遍, 例如废水起泡沫的原因, 被追溯至洗涤剂烷基苯磺酸盐上的支链, 因此当前的支链都已用直链代替。

大气中的重大污染源为燃烧。燃烧产物 CO_2 已从 1958 年的 315ppm 升到当前的 335ppm, 成为全球温室效应的主要气体成份。这是采用化石燃料作为能源所不可避免的后果, 唯一的出路在采用其它能源, 但目前除了核能之外没有更好的办法。因此还须通过燃烧取得能源。世界上化石燃料的 90% 以上为煤, 燃煤的另一污染物为 SO_x 和 NO_x (分别指 SO_2 和 SO_3 以及 NO 和 NO_2)。技术经济业已指出燃烧烟气的后处理脱除 SO_x 和 NO_x 成本较高, 因而提出在燃烧过程中抑制 SO_x 和 NO_x 的生成。对 SO_x , 目前采用的有效方法为在燃煤时加入 CaO 或 CaCO_3 , 使生成 $\text{CaSO}_3/\text{CaSO}_4$ 与煤灰一起排走。但是在反应中生成的 CaSO_4 包裹于 CaO 之外, 形成硬壳, 阻止 SO_2 向固体内部扩散与剩余的 CaO 反应, 因此一般 CaCO_3 的利用率不到一半。当前极需的是用廉价的方法改造 CaCO_3 提高其利用率。对 NO_x , 其来源有二,

其一是煤中所含有机 N 化合物的氧化,其二是高温下空气中含 N_2 的氧化。当前的措施为采用两区燃烧,在缺氧条件下预烧,减少煤含 N 的氧化,然后将不完全燃烧的产物 CO , CH_4 等送至次级燃烧区,通入二次空气在富氧条件下烧尽。有关原理属三传一反范畴,但是迎合当前对燃气排放要求越来越高的环境法,改造技术、降低成本或寻找其它更经济的技术,为当务之急。

近年来化工**分支学科**在科学和技术上各有所发展、有所展望,促进了化工整体的前进,简述一些代表性的分支学科。

热力学——

业已从宏观关联为主的过去,进入以实验、宏观关联、分子理论和计算机模拟四相结合的当代工作方法。新的研究领域包括计算机辅助材料设计(高分子、复合材料、陶瓷、电子材料、吸附剂、催化剂等);表面和界面现象(LB膜、胶束、液滴等);生物技术和生物医学(蛋白质折叠、酶抑制剂设计等);微结构液体等。计算机模拟包括图象显示,演出成核、相分离、分子在界面的运动等。

流体力学和传递过程——

目前研究已进入从熔体中拉单晶、静态(无惯性)混合器、散料流动、自由表面流动、多孔介质中的多相流等。发展前景为用微观现象

来充实过去以宏观为主的三传研究,特别需研究的为非线性系统和计算机模拟和仿真。

动力学、催化和反应器工程——

当前极待模拟一些了解尚不够深刻的工艺:流态化、膜、陶瓷合成、薄膜的汽相沉积和刻蚀,滴流床。对催化剂极待了解其成份和结构与催化性能的关系和活性成份在催化剂载体颗粒中的分布及其催化性能的关系,并需观察在实际运行过程中催化剂的行为。对新兴产业中逐步增加应用的化学汽相迁移值得从多方面来进行研究。

过程工程——

过程分析和过程综合。稳态和动态过程的设计。人工智能的应用和非定量讯息的处理和分析。

表面、界面和微结构

具有一定功能的材料不全取决于其化学成份,而在很大程度上取决于其表面结构。为此需查明两种关系:结构与功能以及工艺和结构。这两大关系涉及许多工艺:催化剂(成份和几何特征,如分子筛,制备工艺和产品的微结构),希望设计有特定功能的催化剂;电化学和腐蚀;电子、光电和记录材料(刻蚀剂需与基片牢固结合、在光照下交联或分解、显象后线条清晰;汽相沉积中反应物如何与基片作用、

镀膜如何生长);表面活性剂、胶体和液相界面(膜、溶胶或泡沫的形成;均匀粒度的微粒的生长);膜(从以现象为基础的模拟进入分子量级的模拟)。

颗粒学

颗粒量测和颗粒数学,颗粒标征,颗粒测量方法,取样方法及理论,颗粒静力学、颗粒运动力学、颗粒物理、颗粒流体多相流动。

当前化工进展的特征

在新兴产业和化工分支学科的科技积累这两种动力的推动下,化工在当前的进展中呈现出一些**新的特征**,且保留了一些固有的历史特征,简述如下:

①化工专家需了解新的运用三传一反的领域,学习一些有关技术,虽不一定指望成为隔行专家,但需掌握足够的知识来找出问题、确定其内容;虽不能独立解决隔行问题,至少要能与专家对话、共同解决问题,同时,不能期望隔行专家在他们工作中提出三传一反问题。单元

操作并不出源于某专门产品的行业专家、而由精通若干行业的学者提出。当前的隔行专业在于生物学(特别是分子生物学)、电子技术、材料科学、现代检测技术、计算技术。

②对微观的探索——

化工的第一个里程碑在其创始,即单元操作,包括这一概念的产出及对工艺的具体划分和归类。第二个里程碑是BSL的三传,追溯至单元操作的机理,使之深化。这两个里程碑的共同特点是所选对象属宏观。进一步的深入该为微观的“三传”及“一反”的现象,其尺度从分散相的单体(液滴、气泡、颗粒)直至分子。将颗粒看为球形的假设将被更切乎实际的形态描述(Fourier analysis)所取代,且其形态在加工中的变化(新生相的取形、包括晶须)也需被纳入其加工时的模型,粒与粒之间的不同吸引力也该进入颗粒群的运动分析。界面的分子现象,包括传质、特别是基团的趋向和受到添加剂的影响,也将成为描述传递现象的重要部分。传统的以宏观和经验为主的化工热力学也趋向于应用量子力学从分子角度建立更为基础、面向对象更广的学术内涵。电子原件本身属微米级产品,复合材料要求从更微观的结构考虑其性能。化工分析将进入一个以微观为基础、中观述本征和宏观叙设备的多尺度时代,而目前较为广宽的领域为微观的研究,特别是实验,一方面阐明已知的现象,另一方面发现新的现象。

③非线性等数学难题与非定量信息及分析——

定量叙述将继续是工程界的发展方向。随着数学所描述的问题越深入细致,非线性的课题将越多;随着计算机的广泛应用,计算机模拟及图象输出的需求将越为普遍。虽然数学的发展不属于化工,但化工问题的求解不断依赖于新的数学方法:分数维、混沌等。另外,目前化工过程中方案的比较和选择往往涉及一些半定量和非定量的问题。这些问题的解决需运用人工智能及专家系统。

④交叉技术/学科——

两种技术/学科相结合往往能用其一的常规方法解决其二的难题,从而在结合处出现前所未有的活跃发展领域。当代一个极为有生命力的生长点例如反应/分离的结合,将反应产物随地引走,促使可逆反应继续进行。反应也可相互结合达到类同目的,例如煤在气化中可混入 CaO , 在燃烧同时与 CO_2 反应,提高产品中的 $\text{CO} + \text{H}_2$ 含量,而生成的 CaCO_3 在理论上可升温再生至 CaO 而重复使用。生物产品利用化工的知识设计反应器、进行下游中的产品分离和提纯,是已见成效的生物/化工结合实例。化工冶金是当前具有许多我国特色的技术/学科的结合。交叉技术/学科,嫁接不同领域的知识优势和问题,将继续成为化工发展的热点。问题是如何确定未来的交叉技术/学科领域。