

论文的选题与写作

(化学化工类)

马沛生 主编



内容提要

本书将论文与科研结合起来,强调创新性、可靠性和应用性,注重撰写学位论文和期刊论文的规范,明示撰写中一些常见的错误。在关注撰写科技论文的一般规律及规定外,结合化学化工类论文展开讨论,指出其特点,并有针对性地进行举例。

本书可作为相关课程的教材,供学士生、硕士生、博士生使用,也可供传统的化学化工类及炼油、冶金、材料、医药、食品等过程工程类科技人员进行科研及撰写论文时的参考。同时本书也是一部使用方便的手册。

图书在版编目(CIP)数据

论文的选题与写作/化学化工类 杨沛生主编. —天津:天津大学出版社, 2005.12

ISBN 7-304-03900-0

I. ①杨… II. 杨… III. ①化学 原论文 原写作 原高等学校 原教材②化学工业 原论文 原写作 原高等学校 原教材 IV. ①F407.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 123456 号

出版发行 天津大学出版社
出 版 人 杨欢
地 址 天津市卫津路 89 号天津大学内 (邮编 300072)
网 址 <http://www.tjup.com>
电 话 发行部 022-27403572 邮购部 022-27403572
印 刷 天津泰宇印务有限公司
经 销 全国各地新华书店
开 本 185mm×260mm
印 张 15
字 数 350 千字
版 次 2006 年 1 月第 1 版
印 次 2006 年 1 月第 1 次
印 数 1 000 册
定 价 15.00 元

凡购本书,如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请向我社发行部门联系调换。

版权所有 侵权必究

前言

科技论文是科技交流的工具,是人类知识财富的重要组成部分,是推动经济及社会进步的有力推手,也是培养科技人员的有效工具,在培养本科生、硕士生及博士生的过程中起重要作用。

当前本科生和研究生在撰写学位论文和科技论文时都出现了或大或小的问题,例如反映在学位论文的初稿太差,需要导师三番五次地修改,几易其稿,而在各类科技人员及高校青年教师撰写科技论文时也常出现困难。帮助他们正确撰写论文是本书的初衷。

在各种论文中最重要的是学位论文和期刊论文,这也是本书要讨论的重点。

要写好科技论文首先要做好科研,科研是论文的基础,只有以好的科研成果为依托,才有可能写出好的科技论文,本书把这两者结合起来讨论,这是本书特色之一。在本书的内容安排上,论文撰写部分占主要篇幅。

在近 10 多年来,多家出版社出版了许多 (10 部以上) 有关撰写论文的书籍,在这些书的举例中大都以电子或机械为主,至今未见结合化学化工的著作。本书以化学化工类科研及撰写论文为讨论重点,也适用于材料、冶金、环境类科研论文的撰写,这是本书特色之二。由于作者知识的局限,本书的内容更偏重于化工。

本书注意限制字数,不引用较好或较差论文的大段文字,因为对长段的实例感兴趣的只是极少数读者,本书只引用最多几句话的实例,力求在简明的基础上说清楚优劣,使其在一定程度上达到教材和手册的作用,供学生在撰写学位论文时随时备查,这是本书的特色之三。

在撰写科技论文时,单位制是很重要的,考虑到本书的读者已系统学习过有关 3 的知识,本书只对单位的使用作简单的复习。

要写好论文,还应该注意逻辑的合理性,讲究语法,正确应用标点符号,但这不是本书的范围。

一些参考性的材料置于附录之中,附录中还有一些作者认为不成熟的想法,例如化工类毕业生设计的基本要求 (附录 1)。

本书在成书之前,作为教材已对天津大学研究生讲授 10 次以上,作为正式著作出版时内容已有极大变化。本书可供大部分过程工程行业的研究生、本科生、科技人员、青年教师在科研及撰写论文时参考,当然更适合于化学化工类人员使用。

书中还有一些作者自己的体会,例如“学士论文应该有创新吗?”作者将自己与他

此为试读,需要完整PDF请访问: www.ertongbook.com 会员

人的不同认识写入本书,希望引起进一步的思考。

本书虽无高深理论,但内容杂,涉及面广。要写好本类型书籍,作者应符合下列条件:①领导和参加过多个科研项目,其中包括不同类型且较高级别的项目;②撰写过许多论文,其中包括英文论文及国外论文;③撰写过专著;④多次指导毕业论文,且有指导硕士生、博士生的经历;⑤做过科技期刊或出版社的文字编辑工作。本书主编缺乏第⑤项经历,虽有在国内外发表论文 1000 多篇及出版著作 20 部的经验,但在许多方面还有不足,能力也有限,在书中仍有值得商榷之处,恳切希望读者指正。

本书由天津大学马沛生主编,并撰写大部分文稿,河北理工大学梁英华参加了第 1 章和第 2 章部分内容的编写,天津大学夏淑倩参加了第 3 章部分内容和附录 1 的编写,天津大学丛玲参加了第 4 章部分内容和附录 2 的编写。

目 录

第 1 章 科学研究与科研课题	1
1.1 科学与技术	1
1.2 科学研究	3
1.3 科研课题及其申请	3
1.4 选题原则	5
1.5 科研课题的分类	5
1.6 化学与化工类课题的特点	7
第 2 章 科学研究的进行	10
2.1 文献资料的收集	10
2.2 文献资料的检索	13
2.3 研究工作的实施	14
2.4 研究工作的结题	15
第 3 章 科技论文的基础知识	16
3.1 定义及分类	16
3.2 不同类型的科技论文	18
3.3 科技论文与科技著作、实验报告	19
3.4 学术论文的重要性	19
第 4 章 科技论文写作中的一般问题	20
4.1 写作的一般特点	20
4.2 科技论文写作的起点	22
4.3 常用标题与层次格式	23
4.4 论文的文字结构	25
4.5 图和表	26
4.6 字母、单位、数字	28
4.7 公式	29
4.8 结构式和化学反应式	29
4.9 科技英语的表达	30
第 5 章 科技论文的撰写	32
5.1 论文的前部	32
5.2 论文的中部	35
5.3 论文的后部	36

第 1 章 摇科技论文的发表	(2)
第 2 章 摇期刊的选择	(3)
第 3 章 摇论文的写作与投稿	(5)
第 4 章 摇审稿、修稿和发表	(7)
第 5 章 摇学位论文的提交和答辩	(10)
第 6 章 摇学位论文的提交	(11)
第 7 章 摇学位论文的送审	(12)
第 8 章 摇研究生论文的答辩	(13)
附录	(14)
附录 1 摇外文字母表和英汉译音表	(15)
附录 2 摇网上文献检索的技术要点	(16)
附录 3 摇国内外重要化学化工期刊总览	(17)
附录 4 摇校对符号及其用法	(18)
附录 5 摇化学符号中常用上、下标	(19)
附录 6 摇使用化学量的一些注意事项	(20)
附录 7 摇化工类研究生论文中常见错误	(21)
附录 8 摇有关化工类学士毕业设计	(22)
参考书目	(23)

第 4 章 科学研究与科研课题

4.1 科学与技术

人们已熟知科学和技术对社会和生产发展的重要性,但科学和技术不应混同。

在各种权威著作中对科学的定义有些不同,例如:“以范畴、定理、定律形式反映现实世界多种现象的本质和运动规律的知识体系。”“科学是关于自然界、社会和思维的知识体系。”也有的著作中定义科学为:“科学是人类在社会实践、科学实验、生产实践等有目的认识世界的活动中,获得的关于客观世界的知识。”在以上的定义中,都认为科学中有两个基本内容:事实和规律。自然界和社会上存在着各色各样的事实,虽然有些事实是显而易见的,但也有很多事实是互相牵连的,即有部分(甚至大部)是掩盖着的,因此发现事实,也存在着去伪存真的过程,比如放射性或化学品污染对人体影响的发现都是不容易的。科学的另一个内容是规律。规律是事物内部的、本质的、必然的联系,规律可以是定性的,更有升华后的定量的规律。规律必然是在一定条件下客观事实同一结果的重复出现,因而可以有预见性及指导性。以化学中的门捷列夫的元素周期律为例,它指引人们预测各元素的化学性质,甚至指导新元素的发现;又比如通过蒸气压测定,发现液体蒸气压随温度升高快速上升,又发现这是一个普遍的规律,得出普遍适用的数学关系式,并关联了各种物质的关联系数,在计算中只要输入温度及相应的关联系数,就可求出蒸气压,方便不同温度下的内插,并在一定条件下进行外推,这些方程不但可以用于手算,还广泛用于化工软件中,并大批量进入数据库及过程模拟计算中。从蒸气压与温度关系的研究过程可知,定理的规律常常是定性规律认识上的飞跃,是寻求高一层规律的过程。

科学的最基本要素是知识,知识是客观事实与规律的综合。知识可分为自然科学、社会科学、思维科学,也可把自然知识和社会知识高度概括和总结为哲学。本书只讨论自然科学。

自然科学作为科学体系的一个组成部分,是研究自然界各种物质和现象的科学,是人类在认识自然、改造自然的过程中所获得的关于自然界各种事物的现象和规律的知识体系。自然界中各种物质现象及其运动规律,对任何人、任何阶级都是相同的,具有同一性。在自然科学中一个正确的认识需要前后继承,并不断发展,这就是继承性;自然科学属于生产力,是推动社会发展的原动力,这是动力性;自然科学又具有

实践性,研究自然界的客观规律,必须经过客观实践的检验。

总结以上内容可以理解科学为“不断完善和发展的反映客观事实和规律的知识体系”。它常常是回答“为什么”的问题。

一般认为,在古代,技术是一种“手艺”,来源于古希腊语,起源于生产实践,在近代,技术又发展于科学实验,例如温度计的发明,催化剂的使用及不断改进都是通过科学实验所产生的技术。许多人认为技术包括工具及规则,以化工生产中技术为例,包括选用什么原料,反应、分离(提纯)中的方法及相应的设备,包括了生产工艺的所有内容,也可以强调是科学理论的应用,即化学工程原则在具体产品生产中的应用。

总之,技术有狭义和广义两种不同理解,狭义的理解是限制在工程学范围内,如机械技术、化工技术等;广义的理解则把它扩展到社会、生活、思维等领域。前者是工程所广泛使用的,也是本书所涉及的范围。

技术的根本任务是解决人类在改造客观世界的实践活动中“做什么”和“怎么做”的问题。“做什么”是指所做对象及目标,而“怎么做”是指手段和方法。技术具有自然属性,又具有社会属性。前者指必须符合自然规律,虽然这种规律不一定是使用者所自觉掌握的,自然属性使科学知识成为技术的主体要素;后者指任何技术都是为了社会需要,只有符合社会需要的技术才能得到发展和推广,技术发明和应用的过程还要受社会的评价及支配,不同的社会环境也影响技术发展的方向、模式、特点。

科学和技术都是推动社会和生产发展的决定因素,它们互为推动,而技术常常先于科学,通过大量事实的提供,可以归纳出一定范围的规律,抽象产生科学理论。以化工热力学的发展为例,首先是热机(蒸汽机)的发明,产生了热功机械,归纳了热与功的转化规则,形成了工程热力学,又把这些规律应用于化工生产,指导热功转换及能量的有效利用,并通过热力学函数应用于组成变化(化学平衡和相平衡),形成了化工热力学新的理论体系。从这个实例可见,科学和技术是紧密联系的,它们起源于实践。技术是发明,从实践上创造出新的东西、设备,例如蒸汽机、冷冻机、喷气机、锅炉、透平机;科学是发现,基于事实,提出规则,指导实践,例如提出了提高热机效率的条件,提供了化学反应和相平衡的极限计算方法,为化工生产优化工艺条件。总之,科学是技术的归纳和升华,技术是科学的演绎和使用,两者互为依存和推动,共同使人们更好地认识自然界,改进生产。科学与技术在一定程度上又是不可分的,特别是在新学科上,例如环境科学与环境技术、材料科学和材料技术常常被混用。

科学与技术的发展大体上都是从实践开始的,有许多是在实验室观察现象开始的,得出理论规律,进而指导实践,符合实践——理论——实践的规律。但也有例外,超临界萃取就是这样的。在 1940 年前后,就有超临界相平衡计算方法的研究,而其工业化研究要晚许多年,但考虑到高压相平衡早已有很多实验及理论研究,超临界萃取作为高压相平衡的一部分,其认识过程仍然是符合总的认识规律的。

软科学是指对科技、经济、社会发展战略和宏观控制进行研究,为决策提供科学依据的综合性科学,又称科学指挥学、战略科学、政策科学等。它综合运用系统理论

和方法决策科学与计算机技术等现代科学技术知识和手段,对各种复杂的社会问题和自然现象,研究它们的客观规律,寻求解决问题的途径和方案。由以上介绍可知,软科学不属本书讨论范围。

4.1 科学研究

科学研究包括对科学和技术的研究。科学研究首先是观察事物,排除干扰因素,取得大量物理、化学、数学现象及相关定量值,通过分析和归纳的方法,把现象及事实上升到规律性或理论性的水平。

科学研究必须有所创新,是对发展和发明的创新,是发现新事物、新现象、新规律,是发明新装置、新工艺。所谓“新”,既包括全新,也可以是对“旧”的改进,也可以是“移植”,即从其他行业或部门的技术转移到一个新的领域中。

科学研究可在多种场合下进行,可在实验室或在工业生产装置中进行,也可在空间或显微下进行,还可在计算机上进行模拟或计算,可以说是多种多样的。以化学工业中的科学研究为例,无论从安全、经济方面,还是从环境方面考虑,初步的科学研究和绝大部分的随后研究都是在实验室中进行的,也就是在实验室中进行化学和化学工程类型的研究,使化学工艺(技术)得以初步提出并逐步完整,取得尽可能多的化学的和物理的事实,并得出一批规律。然而,在实验室中是无法完全模拟工业生产条件的,为了减少此类“放大效应”,常常要做不同类型、不同规模的放大实验,或称中试,并尽可能避免在工业装置上进行研究所带来的风险。即使经过中试,在工业装置中投入生产时仍可能与原设想有一定偏离,新工艺的投产仍有研究的任务,投产过程中,对工艺也常常需要一定的调整。应该指出,中试研究及工业生产实施项目数量远小于实验室研究,这是因为:①有较大比例的小试结束后发现不很成功,不值得进行中试,也有部分中试结束后因各种原因未投入工业实现;②常常需要多次多方位地进行小试;③有些小试内容比较简单,有可能不经中试,直接进入工业装置运行;④化学类研究或另外一些基础性研究不可能也不立即追求发生经济效益,不需要扩大试验;⑤研究过程中,还常常需要计算类项目的配合,为求从观察事实到发现规律的过渡,这类小试验性的研究也为大生产的实现提高可靠性。从小型实验至大装置投产的研究过程,不但适用于化学工业,也适用于材料工业及其他大部分过程工业,例如冶金工业,此外,也基本上适用于环境工程的研究过程。

前文已经指出,小型实验在科学实验中占有绝大比例,也是本书重点讨论的内容。

4.2 科研课题及其申请

科学研究应该是长期的,但必然又是分阶段的,每个阶段都有相应的目标,对应

一个科研课题。系列课题可以是连续的,也可以有中断,或是跳跃式的;可以是同一批研究者在不同时间完成,也可能由不同国家很多研究者分别开展研究,最终达到一定的高度。

为完成科研目标,就需要组成一个课题组来完成它,而且一般需要几个人,在科研工作中相互协作共同完成。课题组共同指定目标,提出申请,安排研究计划,选定及加工设备,合理使用经费,在研究过程总结工作进展,调整计划,确定工作成果,改进不足,在适当时候发表论文或申请专利,至最后确定课题的完成,提交结题报告。在化学化工类课题中,极少数课题的实验不很复杂,可由单人完成,其中也包括一些计算性课题,此时个人也就代表课题组了。

所有课题都需要经费支持,因此也都需要经过一个课题申请过程及审批过程。在申请过程中,写好申请书常常是关键的一步。申请书应该出自审批单位,其中该填写的主要是项目名称、项目负责人、课题组成员及分工、内容摘要、国内外研究现状、主要依据、技术内容、要解决的主要问题、创新点、工作计划、工作基础、经费预算等内容。其中要注意以下几点:①申请人对此课题应该有一定权威性;②选题新颖,创新点明确也要具体,为使审查者确认内容的创新,申请人宜先做内容创新的自检或进行查新;③在课题依据中应说明申请人熟悉此课题相关的国内外进展;④本课题应该已开始进行,并已初步取得一些成果;⑤要说明实现本课题是有难点的,但申请人已有理论及方法上的准备,又有技术和仪器上的支持。总之,要使审查者感到课题的重要,并认为该课题组是能很好完成此项目的。

科研工作是需要积累的,有时还是世界性的,需由不同的课题组来共同完成。而科研课题又是有时间段的,每一课题只是一个“阶梯”,即提高一步,因此每一个课题不是绝对完整的,课题需要有创新及成果,但又有一定局限性。

来源 选题原则

选题是科研成败的关键,因为只有合适的选题才能取得成功。选题需遵循以下原则。

选题应是社会和国家的需要

所有课题应该在现在或将来对社会或国家有用。以混合物的物性测定或计算为例,该混合物应该是工业上已经存在或将要存在的,以适应化工设计或计算的需要,也可以是在环境中可能存在,或者在处理环境问题时可能存在的,而不应该是任选的两个或多个物质的混合物。也许所选择混合物的物性研究能解释某种物质分子作用的机理,即有理论发展的意义,这样的研究是为更广泛的应用打下基础,所以重要的仍然是符合有用的原则。在社会和国家的需要中,有些项目是急需的,例如某种关键理论、关键技术、关键方法、关键数据的建立或提供,这样的课题对社会或国家贡献更大,它们可得到更大的支持,这就是选题中迫切性原则。

圆选题要在总体上对社会有益

有的课题确实有创新,若能实现对社会进步也有促进,但实现时成本太高,这样的方案是无法实现的。以环境中化学品污染为例,有许多去化学品的方案其能耗或物耗都很高,引发所谓“环境成本”问题,而高能耗本身就是一种“二次污染”;又例如在物性估算方法中,有些方法需要引入更缺乏的物性,或者是“暗箱操作”,而难以推广,这些都不是好课题。这个要求也可理解为选题的实用性原则。

猿选题要有创新

新选题所研究内容不是去核实前人工作,而是去超过前人,若是“前无古人”就更好了,这一原则也大体上符合“前沿性”的要求,对一个很成熟的内容,很难从中找到创新点。

为了达到创新,在初步选定课题后,一是应该再思考本课题与前人工作的差异,明确本课题的新内容,二是要考虑继承与创新的关系,清楚前人工作的所有基础。选题若是属交叉学科或边缘学科就更好了,因为这些领域在发展中,存在更多的不清楚或争议,也有更大的创新空间。

遴选题要符合科学性

科学虽无禁区,但科研选题要符合客观事实和公认的理论。要提出新理论或修正理论,就必须符合更多的客观事实,又要在数学和物理上有依据。科技工作者要从唯物主义基本原理出发,按照科学思维,注意符合逻辑规律,达到既能创新,又不致陷入“永动机”类荒唐的方向中去。

缘选题要适应申请人和课题组的能力

选题的难度及广度是研究者才能的体现,与其主观能力一致。一般说,所申请的课题也常常与申请人的兴趣有关,因为兴趣是最好的“老师”,“兴趣”常常能指引研究者去寻找科技中的空白点,发现有创新可能的方向。

读选题应符合客观条件

恩格斯曾指出：“我们只能在我们时代的条件下进行认识，而且这些条件达到什么程度，我们便认识到什么程度。”（《自然辩证法》，图灵页，人民出版社，图灵页。在客观条件中首先是实验条件，包括实验设备、分析仪器、表征仪器等。客观条件也包括原料供应条件，更应注意时代的条件，即社会的认识水平，其中有数学和物理的知识水平，也包括计算机及软件的水平，一个现代化的大课题，常常要使用一些大型软件，一般说，课题组不可能将所有软件从头做起。目前在化工计算中广泛使用的 **Aspen Plus** 和 **Pro/Engineer** 大型软件，在过程模拟计算中发挥很好的作用，也在许多研究项目中广泛使用，而在近年发展起来的微观计算软件，在化学化工过程机理研究中是不可取代的。

苑选题要有适度的研究目标

选题要明确研究目标,相应的科研计划都是按目标安排的。研究者应该终身进行科学研究,而科研课题是有限期的,分阶段的,只能逐步完成研究,逐步公开成果,

经过反复修正,达到比较完善的地步。总之,选题要有创新,要有高度,又要根据主客观的实际,有“适可而止”的难度。这是适度性原则。

员豫 科研课题的分类

科研课题有多种分类方法,而有些课题又是兼有不同属性的。

员指定课题与自报课题

指定课题是指主管部门或生产企业下达到有关单位的研究任务,这些单位一般是其下属单位,又往往是先下达任务,后再提交申请书或确定任务(签订科研合同)。该上级单位一般是了解课题组过去的研究经历和能力的,才可直接提出要求。为了使上级单位考虑这样的任务,课题组也应该主动与上级单位、主管部门或企业联系,以期共同推进课题的开展。

自报课题是指课题组按自己的科研方向和能力向国家、省(或部)、市申报的各类基金项目,其中包括资助力很强的“愿猿”、“怨猿”项目,也包括重大项目、杰出青年基金等较强资助的项目,更包括国家、省或直辖市或部级自然科学基金项目。这样的课题需要课题组按工作的创新及自己的基础进行申报,在申报前若能了解同类课题过去审批情况就更好些,也应该了解同方向的研究者近年的研究进展。

圆实验性课题和计算性课题

化学、化工类学科起源于实验或实践,因此长时间被称为是经验学科,但从发展过程看,在化学、化工学科中已有许多计算的内容,其中也包括了许多理论计算的内容。以化学热力学和化工热力学为例,许多概念的使用,比如热力学函数的使用,大量实验数据是必需的,又为了内插和外推数据,甚至进行估算,大量的计算方程和计算方法是必不可少的,其中包括理论的或半理论(半经验)的计算。其他如物理化学、分离工程、反应工程等学科中也都是实验及计算互为补充的,又是不可或缺的。近十几年来,化学化工中基于理论的微观计算越来越发展,逐步变成学科的新分支,这也说明理论及计算在化学、化工学科及课题中的重要性在增加。总之,在化学、化工类科研中,实验性课题和计算性课题同样重要,而且有许多课题是两者兼有或并重的,虽然从总体算,目前实验性课题还占有更大的比重。

猿基础性课题、应用性课题和开发性课题

基础研究与基础科学直接有关。基础科学的本质是揭示客观世界的运动规律,是人类关于客观世界基本规律的知识体系,这样的知识体系是技术创新和革命的先导和源泉。相应的基础研究是通过研究自然现象和自然物,力求得到或观察到新的现象和规律。基础研究往往缺乏直接应用目的,但从长远看,一般都有应用效果,虽然可能是间接的,数学或天文学的研究当然是基础研究,但也还与其他科学的发展或人类生活有关。基础研究所需的经费大小不一,数学类的研究成本低,而天文、微观世界研究要使用昂贵的设备,费用高。基础研究所需时间长一些,可能在较长时间难

见成果,需要研究者持之以恒,也更需要国家和社会更多的支持和宽容。

应用研究是把基础研究成果应用到生产中去,相关的部门不但是生产企业,还包括各有关部门,例如设计院、研究院等,也包括社会上的一些部门,例如环保、检验、安全、消防等。应用研究更多反映在技术上,以新产品、新方法、新工艺、新设备、新数据为目标,追求最佳条件,提出新的工艺方法生产产品(已有产品或新的产品),推动生产和社会的进步。以催化反应的研究为例,在化学化工各类反应中,选择高收率、高转化率、低成本、少污染的催化剂都属于应用型研究,而总结各类催化剂及其反应所提出某类或某一催化反应的规律或其反应机理,也包括催化反应动力学研究可认为是基础研究。目前在大部分催化研究中,课题组除了在催化剂的配方、制备方法、工艺条件优化等方面进行工作外,也常常进行催化机理及动力学的研究,因为后者又能促进催化剂的改进,由此也可知基础研究和应用研究常常是互相渗透,在同一课题中体现。在互相渗透中,又有应用基础研究的称谓,有人认为它是解决基础研究新理论的用途及如何应用的,总之,它也介于两者之间。

开发研究是利用基础研究和应用研究的知识和成果,引入于新的领域或情况有差异的同一生产部门,也可理解为知识或技术的转移,在转移过程中,也可能产生新的知识或技术。

开发研究与应用基础研究之间很难有截然的分界。

源探求未知的课题、充实已知的课题和学术讨论性课题

这是课题的理论性分类。探求未知的课题是指理论上新学科的创建,或产生边缘学科的课题,从化学、化工、金属学科中产生材料学科就属于这一类,从化工与生物产生生物化工也属于这一类,安全学科或环境化工学科也是其他多种学科的组合。充实已知的课题是数量最多的,也是很重要的,虽然未必能解决重大问题,但总是推动社会和生产前进的,且在大量这类研究基础上,为量变到质变提供准备。学术讨论性课题是对已有事实和规律的再认识,也常常作为一些课题的组成部分。

4.1 化学与化工类课题的特点

与其他工业过程相比,化学工业有其特点,因而在化学化工类研究过程中也有所反映。

重化学工业涉及太多的化合物

至 19 世纪 50 年代,化学工业涉及的化合物还只有万种,其中最主要的是基本无机产品和大吨位的石油化工产品。随着精细化学品的大量涌现,化学工业中涉及的化合物越来越多,甚至已大大超过 10 万种。考虑到在生产流程中到处是混合物,要研究的对象可认为是无限的。

上述特点首先反映到科研中是课题量大,差别也大。为应付众多的化合物,又考虑不能每一个化合物的相关研究都从头做起,也不能做到完全周到,因此研究工作应

具有更多的规律性,使所得成果具有通用性,用最少量的实验取得最通用的结果是理想的课题或成果。这个特点要求课题的“外延性”。

作为化学工业及其他更多学科的重要基础,化学要涉及更多的化合物,以《月溪部藻藻手册》为例,至少已涉及有机化合物 怨园万个。这个特点也反映在化学类课题的研究中。

圆信息在化学化工的研究中更重要

由于化合物品种太多,应该把研究集中在新事物、新知识上,因此在化学化工类研究工作中更应该系统检索已有的知识或成果,避免研究工作重复,又保证本研究具有创新的成果。在化学化工研究中,早已有利用文摘(当年寻找信息的主要工具)的传统,而化学化工类文摘已有百年的历史,现在查阅网上信息已成为研究工作的重要支柱。

猿苛刻条件的使用

化学工业中有时要使用苛刻的条件。温度(和压力)可很高,也可很低,例如在裂解烷烃制乙烯的炉管中,温度要接近 怨园益,而电弧炉法裂制乙炔时,温度要高于 员猿园益。在 悦月分离中,塔顶温度可低于 原员缘益,而在空气分离装置可达 原园益。在高压法聚乙烯生产中压力可达 猿园兆帕,而在聚酯生产的缩聚反应中,可低于 园园千帕以下。在这种特殊条件下,物质的物性及计算方法都有很大变化,有时需要专门研究,相应地要专门的知识,甚至特殊的能力,在这种特殊条件下还要用特殊的设备及材料,以温度而言,就要求用耐高温或冷脆的材料。

有些化工产品要求高纯度,例如为生产高压聚乙烯,要求乙烯原料的纯度高达 怨怨豫或更高,对于这样的提纯要求也需要特殊的技术。

化学化工的发展与催化剂的使用是分不开的,但为达到更高的收率、选择性和生产能力,又要达到低污染物的生成及排放,催化剂要及时换代更新,因而这也为苛刻条件之一。

源新技术的引入

超临界技术、膜技术、等离子体技术等已广泛引入于化学、化工的研究中,有的已实际使用于化工生产中。以超临界技术为例,开始于化工的研究,已实现了工业化,并已跨出化工,成为一种新的环保技术。

缘化工与能源息息相关

化工产品中有许多是大吨位的,其年产量可达几万吨、几十万吨,甚至过百万吨,这些产品的原料主要是石油、天然气或煤,按每吨乙烯消耗 猿 源吨油品计,圆园园年我国生产 怨园万吨乙烯就要消耗 猿园园万吨以上的油品。由此可知,为生产乙烯、丙烯、丁二烯、苯、甲苯、悦芳烃等主要石化一级产品需要消耗大量石油,在我国能源平衡中占有重要地位;另外也可知,在生产乙烯的同时,同时生成的丙烯、丁二烯(及其他悦和悦烃),还有一系列的芳烃,都必须“配套”(按比例)使用。在一个化工企业中常常要同时生产多种化工产品,对此要进行协调。在油品转化为基础化工原料的过

程中,要遵循“能油则油,能化则化”的原则,使燃料油和润滑油的生产与基础化工原料的生产协调发展,尽可能满足多方面的需要,同时取得最大的经济效益。

基于以上特点,一些课题研究者应该对化工产品及油品都有充分的了解,同时更应该考虑能源与化工产品的组合关系,使每个碳原子与氢原子都得到充分利用。

适时要关注环境

化学化工的发展改善了人们的生活,改变了人们的衣食住行,同时它又是一把双刃剑,因为人们不得不面对化学品对环境产生的影响。例如,在 20 世纪 50 年代开始广泛使用的六六六及 DDT 类杀虫剂曾取得极好的效果,但由于其水不溶,细菌不吃,紫外线不分解,而使多氯化物的残余长期存于土壤中,并进入植物、昆虫、鸟类、哺乳动物体内。20 世纪 60 年代,名著《寂静的春天》推动了人们对环境问题的认识,在经济、政治多方面都产生了很大影响。

环境问题的涉及面在扩大,而其中重要的难题常常是化学品对环境的影响,著名的有全氟氯烃对臭氧层的破坏,这使大气中更多的氟氯引起更多的酸雨,汽车尾气中的氮氧化物成为城市中空气的重要污染源,聚乙烯、聚丙烯、聚氯乙烯、聚苯乙烯塑料制品引发“白色污染”,更不用说已众所周知的温室气体排放所引起的地球升温。为解决这些问题不可能不烧锅炉,不开汽车,停用空调和冰箱,停用塑料袋,而是应改进工艺。例如用对臭氧层不产生破坏或极少破坏的化合物代替全氟氯烃;限制燃料燃烧前的含硫量,并尽可能开展脱硫,更要对燃烧后的尾气脱除氮氧化物,甚至回收宝贵的硫资源;提出更高要求以减少汽车尾气中氮氧化物,改进尾气反应盒中的催化剂使氮氧化物更多还原为氮气;加强塑料回收或用热解制油,也可以用超临界水使其降解,或是用可降解塑料代替极难降解的传统塑料。但是以上这些措施只是部分解决(或是弱化)化学品的污染。温室气体的排放是更难解决的问题,实际上这也不是化工所带来的问题,它首先是能源所导致的。

上面只提到了几个典型的化学品污染问题,这不是所有的情况,其他还有一些重大的污染,例如剧毒农药的污染,苯并芘污染大气,汞污染水体,等等。限于篇幅尚未涉及。

除了涉及面广和更多人公知的一些化学问题外,还有许多有害的化合物从化工厂或其他行业的企业逸出,甚至从人们的生活过程中逸出(例如装修),需要认真处理。这些化学品因种类不同,产生或逸出的原因差异很大,需按其化学和物理特点分别处理,处理的方法主要是清除有害物的生成,避免其逸出或寻找逸出后的对策等。例如聚氯乙烯生产中逸出的氯乙烯单体是强致癌化合物,因此相关的化工工作者应该了解尾气中氯乙烯排出点的含量,设计回收及处理尾气中氯乙烯的工艺及计算方法,这类课题属化工类,也是环境的内容,或称为环境化工课题。

总之,在化工类课题中要关注环境,而在环境问题中更要注意众多物化性质及毒性相差很大的化合物,不要把化学品只限于氯气、氟气、二氧化硫、一氧化碳等有限的几种,避免

更复杂的环境问题形成,这正是环境化工的主要目标。若不了解化工的发展对环境的影响,一些课题可能犯方向的错误。

苑计算技术有重要地位

化学化工类研究课题中,计算技术已占重要地位,有些课题虽然以实验为主,但常常需要配以一定的计算,更有一些课题以计算为主,甚至全部都是计算。计算的目的是常常是使所研究的成果可以方便内插,甚至可以外推,也希望通过计算结合数学模型,使一些半经验的方程可适用于不同的参数变化条件,从而适用于更多的化合物,而这些参数条件及所涉化合物都是未经实验的。总之,要通过计算达到少做实验甚至不做实验而得到可靠结果的目的。

愿微观的概念越来越重要

微观概念在化学中的重要性早在“化学物理”学科中得到体现,在化工中传递现象、动力学历程等也与微观概念密切相关,而计算机的应用使模拟计算中有更多的微观因素。

若能严格计算分子内和分子间作用力,原则上可以计算该物质的全部物理和化学性质,由于物理和数学上的困难,严格的理论计算还是难于做到,于是不同程度的近似方法相继出现。分子轨道法是比较严格的量子化学计算方法,其认为分子总能量可认为是被电子所占据的分子轨道能量的总和。“从头算起”(~~从头算起~~)法是在分子轨道理论上发展起来的,并采取了几个重要的假定,以简化计算。目前已有多个重要软件可供不同情况下使用。

当前在化学、化工、材料类课题中,微观计算在大体上还只能起辅助作用,但发展速度快,并将在化学化工类研究中起更大的作用,应该引起研究者更多的重视。

以上几个特点可总体上归纳为化学、化工类研究中的复合性:①化学、化工间的复合性;②大量化合物间的复合性;③研究条件间的复合性;④实验与计算的复合性;⑤宏观、介观及微观研究的复合性;⑥化学化工学科与材料、信息、环境学科之间的复合性。

还应该注意到在众多的化学化工类课题中另一个引起差异的因素。大部分石化产品产量大、产值大、总利润大,对社会影响大,这些产品要消耗大量的能源,有更多的排污,所采用的技术路线要考虑国家总体原料及能源的政策及安排,也要更多涉及国家排污的总量控制,及可能产生的环境或社会影响。由于产量大,收率提高 员豫或是能耗下降 员豫都可能对企业有很大影响,并因此而处于有利的地位,为改进产品竞争性,企业需要对产品的工艺及涉及的工程进行“精雕细刻”,力求从节能、降耗及减排中处于国内外领先地位,因此对科研也随之有相应的要求。另一类产品与石化产品(或大吨位产品)完全不同,产量以吨计,甚至以千克计,总产值不很大,但单位产品产值高,利润也高,在一些时间段内,处于暴利阶段。这些产品包括药品、农药、化妆品、表面活性剂、照相化学品、磁性记录材料、染料、颜料、涂料、试剂和高纯物、食品和饲料添加剂、胶粘剂、催化剂和各种助剂、油田化学品等,总称为精细化学品(~~精细化学品~~)。国内也称之为精细化工。在相关的科研课题中,在合成工艺中需要更多

关注其化学反应,更多关注其表征方法,有时它们的物料消耗及能耗不占主导地位,设想若能生产出治疗癌症的药,在相当长时间内可能是不计成本的。

以上两大类产品及所对应的研究课题有共同点,但在研究过程中也会有很多不同,研究者应结合自己的能力、经历及其他条件,考虑当时的任务,选择主研方向及开展适当的工作。