

* 学部活动 *

发展中中国的化工前沿*

中国科学院化学部**

(北京 100864)

提要 本文分析了当前推进化工的主要动力,探讨了目前化工进展的特征,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,并提出了实施建议。

化学部的化工前沿的选择将建立在国内外知识的积累和国内的人力和思想产出及其所拥有的物质条件的基础之上。所谓前沿有两种含义:站队(别人的前沿)和创新(自己的前沿)。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。

一、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;二是化工分支学科本身的科技积累和交叉结合。

(一) 新兴产业

推进化工的新兴产业主要为生物技术、材料和环保工艺。

1. 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,由此,向化工提出新的要求。

酶所能催化而生成的产物非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,特别是有关其速率。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结合,进行细胞中 DNA 的改组。

化工与医学相结合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与制造,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体中的消失的数学模拟。

2. 材料。化工源于大宗化工产物——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

* 详见中国科学院院士咨询报告:“发展中中国的化工前沿”,中国科学院化学部,1995-3,322 页。

** 本咨询课题负责人为中国科学院院士郭慕孙、中国科学院院士汪家鼎。

料,最广泛而具特色的是塑料。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常遇的材料大不相同。

由于高分子特殊的流动性能,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,更重要的往往是产物的特定性能,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。这类产品的制备离不开三传一反原理(“三传”指动量、能量和质量传递,动量传递包含化工中的流体运动;“一反”指化学反应),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 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。这些虽都属三传一反范畴,但其体系和目标要求已与传统大宗化工产物的生产大不相同,为此,传统的三传一反必须延伸与新的知识相合。

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类同于一般化工。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,化工有望为清洁的再生能源作出贡献。

超细粉末材料(指粒度 10^{-3} — 1μ),由于其比表面积增大,表面电子和晶体结构发生变化,因而具有块料所没有的效应。超细粉末制成的陶瓷具有良好的韧性。细达 0.02μ 的磁性粉末的矫顽力可比块料的矫顽力大三个数量级,可制成高密度、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。

3. 环保。化工的一个重要的社会效应在于保护环境,减少人类生活与生产活动对环境的污染。由于过去对环境污染重视不够,对于工业已经污染了的环境,要求随后处理;对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无污染环境的产物。与常用的化工工艺生产有用产品不同,在环境保护中,化工起的作用是销毁无用产物。

当前引人注目的大气污染物之一,是作为制冷工质和化妆品等推进剂的氯氟烃 CFC。这类化合物排放到大气中,会破坏 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,也成为化工能发挥作用的领域。对环境不利而另寻代替物的工作也颇为普遍。

大气中的重大污染源为燃烧。燃烧产物 CO_2 已从 1985 年的 315ppm(百万分率)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,还需通过燃烧取得能源。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。当前亟需的是用廉价的方法改造 CaCO_3 ,提高其利用率。对 NO_x ,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,但为遵守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,已成为当务之急。

(二) 分支学科

近年来,化工分支学科在科学和技术上各有所发展,促进了化工整体的前进。一些有代表性的分支学科是:

1. 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。

2. 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与仿真。

3. 动力学、催化和反应器工程。当前亟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。对催化剂亟待了解其成份、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与催化性能的关系,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进行研究。

4. 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信息的处理与分析。

5. 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;表面活性剂、胶体和液相界面;膜。

6. 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。

二、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:

(一) 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。当前的隔行专业是生物学(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。

(二) 对微观的探索

化工的第一个里程碑是其创始,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(Bird, Stewart 和 Lightfoot)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。进一步的深入应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应进入颗粒群的运动分析。界面的分子现象,包括传质、特别是基因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、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,而目前较为宽广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。

(三) 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。随着数学描述问题的越加深入细致,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,目前化工过程设计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。

(四) 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。当代一个极有生命力的生长点是反应与分离的结合,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同样目的,例如,煤在气化中可混入CaO,在燃烧同时与CO₂反应,提高产品中的CO+H₂含量,而生成的CaCO₃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,是已见成效的生物与化工结合实例。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。

(五) 新产业的推动

生物化工虽为已经确立的交叉学科,但由于生物产品的迅速推出,将对反应和分离提出更高的要求,生物化工将不断被生物技术推动。新的功能材料的使用价值虽不在其化学而在其物理性能,但其制备将在很大程度上求助化工:超细颗粒、光、电、记录材料。问题是确定哪些新产业中有哪些化工能解决的新问题。

(六) 现有产业中的创新

现有的化工知识无疑能推动现有产业。生物化工和化工冶金为两个已见成效的事实。但化工所能推动的不一定是一个学科或技术的全局,而是也可以小至某一专业或课题。如欲使这种推动有所反馈来推动化工,一种方法是从一个国家的资源、经济、社会的特点去确定课题。例如对我国煤多油少的资源特点,从煤制液体燃料不一定追随现有的液化、气化道路,而可从电厂用煤,在燃烧之前用快速裂解,从煤中提炼出液体,然后将剩余的半焦送至锅炉。又如,世界稀土大半储于中国,在中国,稀土不能看作像国际上那样稀罕。为此,要充分利用我国稀土资源,首先要发展稀土的应用及廉价的提取方法。再如,我国石油资源以重质油为主,为此,能否提出更见效的加氢和制氢技术,以提高轻质组分的产出。从资源、经济、社会特色所产生的技术将具有出自这种背景的特色,而能将有关化工科研推向少有人占领的领域。

三、前沿的选择

本调研的目的是选出一些化工前沿领域和课题,希望能重点突破,起到带动全局的作用,尽可能在较短时间内用有限的投入去获得较多、较有水平的成果,即有较大的产出投入比。产出指研究成果的经济价值(近、中、远期)和社会价值(学科发展、国际影响);投入指科研人力、物力、财力。产出的效果取决于选题、做题和输出:

$$\text{产出} \propto (\text{选题}) \times (\text{做题}) \times (\text{输出})$$

选得好的题如做得不好,与做得好的选择不当的题,同样都产生不了好的结果。做好了题,如未能很好输出,同样不能产生经济或社会价值。做题的好坏取决于思路的生成及其在科技实践中的贯彻(实验、计算等):

$$\text{做题} \propto (\text{思路}) \times (\text{贯彻})$$

输出取决于组织、经费、配合条件、价值观念等:

$$\text{输出} = f(\text{组织、经费、配合、价值观念})$$

调研主要指选题;做题是研究人员的工作;输出主要靠组织领导。从我国化工在国际的科学技术输出,以及广泛、多种甚至重复的引进技术,可见化工在我国相对来说是比较薄弱的领域。因此,在选题时要综合考虑领域、课题、思想、人才。需要注意的是:

有课题的领域(异于知识叙述);有思想内容的课题(能贯彻执行的研究);有人牵头的思想

(能落实到人头)。

前沿选择必须突出人才资源的特色,既要重点支持做出了成绩、已有条件的工作,加速其科技产出,又需不断遴选人才,有计划、有步骤地支持新生力量,形成新的生长点。

四、四个方面的化工前沿:内容举例*

根据推进化工的动力、当前化工进展的特征、以及选择前沿的策略考虑,建议从四个方面来选择适合于发展中中国的化工前沿:①活跃的生长点;交叉边缘技术;②接受新兴产业的推动;③发挥我国资源、经济特色;④建立我国的学科优势。以下是这四个方面的例子:

(一) 活跃的生长点:交叉边缘技术

举例*:

例 1. 反应和分离过程的耦合。例 2. 耦合溶剂萃取的分离过程。例 3. 吸附蒸/馏。例 4. 化学反应与化学反应的耦合和解耦。例 5. 催化材料、催化反应器和催化工艺相结合。例 6. 无机膜与无机膜催化反应。

(二) 接受新兴产业的推动

举例*:

例 1. 超细粉末。例 2. 水热合成先进粉末材料。例 3. 等离子体法制取超细粉末。例 4. 粉末材料的标征。例 5. 发展中的电子化工材料。例 6. 动植物细胞培养。

(三) 发挥我国资源、经济特色

举例*:

例 1. 油藏化学工程。例 2. 天然气化工。例 3. 煤炭拔头工艺。例 4. 粉矿粉煤炼钢铁。例 5. 循环流态化床焙烧黄铁矿。例 6. 稀土的提取和提纯。例 7. 开发和综合利用盐湖。例 8. 沼气工程。

(四) 建立我国的学科优势

举例*:

例 1. 溶剂萃取进展。例 2. 萃取的前沿研究。例 3. 蒸馏中的基础和前沿问题。例 4. 固定床反应器——科学、技术和艺术。例 5. 聚合反应工程。例 6. 并流下行气固超细接触反应器。例 7. 颗粒流体系统的非线性行为。例 8. 分子工程和化学工程。

五、对实施的建议

本调研所形成的的是一个开放系统,永远不封闭。所选前沿均具有课题,课题均有明确的思想内容,思想均可落实到带头人,以强调选择的可操作性,及便于投入—产出第二个环节(做

* 详细阐述,请见咨询报告原文。

题)的可行。至于投入—产出第三个环节(输出)远非选题者所能控制。在任务带学科和学科促任务的统一中,本调研立足于学科建设,目标为通过以共性为主的研究来促进目前和将来任务的更好完成。在当前国情中,为使本调研能起作用,提出如下建议:

(一) 交叉组织

交叉学科、技术、工种往往迫于任务的需要。为促进学科发展而进行学科、技术、工种的交叉,需要采取一些有意识的组织措施,例如:

科研项目申请指南中,纳入交叉学科、技术、工种的条文;

科研管理者应对交叉学科、技术、工种进行选择、投资和组织(特别是科学院这样一个多兵种的科技大集体,对于交叉学科、技术、工种的并行和上下游结合,远未认真和充分地进行组织)。

(二) 自力更生开发资源

对于具有我国资源、经济特色的科研开发,尽可能留给中国人做,不但要选任务、列课题、找门户,还需在开发进程中不断加强科研管理。为此,需培养能够组织复杂而面广的开发工作、输出科技成果并联系生产的专业人才,和建立有关的规章制度。

(三) 控制技术引进

引进国外技术必须限定为中国不能开发或在限定期间开发不出的技术。凡是国内已有人开发的技术,要用征收技术引进税的办法来限制其进口,税收所得用于正在进行的开发工作。

对一切引进技术,必须征收消化吸收税。引进者在申请引进的同时需上交经过检验的消化吸收科技计划,并接受定期检查。二次引进同一技术,加倍征收消化吸收税,三次引进收税更高,依此类推。

税收是国家宏观控制技术引进的重要手段。

(四) 加强应用基础研究

首先需保护做出了成绩的应用基础研究队伍,保证其连续性;

不断精选人才和淘汰人员,重点维持国力能及的少数精华队伍;

对业已精选的队伍,提高投资强度,使在信息交流、设备购置与更新等方面,逐步(但尽快)达到国际水平;

改善这些专业人员的工作和生活环境,减少其非业务和亚业务的投入,使之安心于科技工作。