

·学科进展与展望·

## 面向复杂结构的化学工程

——从第一届中美化学工程学术研讨会看化学工程学科的新动态

孙宏伟<sup>1</sup> 刘 铮<sup>2</sup>

(1 国家自然科学基金委员会化学科学部,北京 100085; 2 清华大学化工系,北京 100084)

**[摘要]** 第一届中美化学工程学术研讨会于2005年8月9—12日在北京召开,研讨会的宗旨是为中美两国化学工程学者提供一个交流平台,以促进其长期和高层次合作。来自中美两国20余所大学和研究单位的30名学者出席会议并就如下5个专题进行了详细的交流与讨论:(1)探索复杂结构的方法;(2)界面上的微尺度过程和传递;(3)复杂结构的制备;(4)大分子和生物分子过程;(5)可持续发展的化学工程。此外,会议还就21世纪化学工程科学研究和工程教育进行了交流。从此次研讨会中可以看出:复杂(分子、界面)结构的形成、调控与应用及相关的研究正在成为化学工程领域的一个新主题;分子模拟成为复杂结构研究的重要基本工具。在美国,正在发展中的化学与生物分子工程课程体系正在被越来越多的大学所采用,以培养研究、应用和开发复杂结构化学品的新一代化学工程师与科学家。

**[关键词]** 复杂结构,化学工程,新动态

为促进中美两国在化学工程基础研究领域的交流以及两国化学工程学者和专家深层次的合作,中国国家自然科学基金委员会和美国国家科学基金会从2005年开始举行中美化学工程双边学术研讨会,为中美两国化学工程领域学者的学术交流与合作提供一个平台。首届研讨会由清华大学化工系承办,于2005年8月9—12日在北京召开,出席研讨会的美方代表12人,其中美国科学院院士2名,青年科学与工程成就总统奖(Presidential Early Career Award in Science and Engineering, PECASE)获得者1名,美国国家科学基金会成就奖(NSF Career Award)获得者3名,中方会议代表18人,其中国家杰出青年科学基金获得者9名。本次研讨会由5个专题报告会和2个讨论会构成。5个专题为:(1)探索复杂结构的方法;(2)界面上的微尺度过程和传递;(3)复杂结构的制备;(4)大分子和生物分子过程;(5)可持续发展的化学工程;2个讨论会是:(1)21世纪化学工程:扩展的内涵和可利用工具;(2)21世纪的化学工程教育。

围绕上述主题,共进行了28个报告。参会代表

学术水平高,报告内容丰富,交流充分,展现了现代化学工程研究和应用的若干前沿和热点,下面就其中我们感受较深的问题进行简要综述。

### 1 复杂(分子、界面)结构成为化学工程与技术研究的新焦点

与经典大化工过程如石油化工和煤化工等领域的基础研究形成鲜明对比的是,制备具有特定功能的结构(如具有生物学功能的蛋白质的立体结构——即蛋白质体外折叠),具有特定性质的表面(如不吸附蛋白质或者微生物的表面)及具有特定结构的材料(如介孔材料,晶体晶须)等正在引起越来越多的化学工程学者的重视。美国华盛顿州立大学西雅图分校江绍毅教授研究组将分子模拟与实验研究相结合,研究生物/化学界面现象并指导界面的分子设计和合成。他们从分子水平解释材料抗蛋白质吸附的机理,发展了能抵御蛋白质与微生物吸附,特别是能够抑制生物膜形成的新表面材料,可望在食品包装、机械与装备的表面防护等方面取得重要应用。其研究成果还可以用于控制蛋白质分子在固体表面

本文于2005年9月19日收到。

的朝向和构象,发展植入型组织工程材料和生物传感器等。美国 Tulane 大学卢云峰教授研究组发展了以非共价作用力将具有纳米尺度的结构进行多级组装而形成可控的宏观结构的功能新材料,如用于燃料电池、热电偶、氢气发生装置中的金属或半导体的纳米线,响应环境变化而动态改变组装结构的自适应人工仿生系统(分子变色龙)等。南京工业大学陆小华教授研究组通过热力学和动力学分析,探讨具有特殊构造和功能的钛酸钾晶须的大规模制备过程中的机理和关键变量,实现了高级结构材料的大规模制备。中国科学院过程工程研究所马光辉教授研究组发展了特殊的微孔膜乳化过程,可制备粒径均一的微球和微囊,在生物分离介质和药物控释载体等方面具有很好的应用前景。清华大学刘铮教授研究组应用分子模拟与多层次结构分析的方法,揭示环境刺激响应性高分子(Smart polymer)与蛋白质相互作用及其对蛋白质折叠过程中构象转变的作用机制,设计并制备具有分子伴侣功能的智能高分子以辅助蛋白质体外折叠。在上述研究工作中,能够承载或者发挥预定功能的结构成为研究的目标,结构转换成为过程的热力学和动力学研究的焦点,而研究目标分子与环境的相互作用则成为结构研究的切入点。复杂(分子、界面)结构成为化学工程基础研究的新热点,而这一主题的拓展将成为发展分子工程的“核心知识与技术”的基础,值得我国学者的关注。

## 2 分子模拟成为复杂结构研究的重要基本工具

伴随复杂结构成为化学工程研究的新焦点,分子模拟正在成为一个基本工具而且也是当前化工学科基础研究领域最活跃的一个分支。美国纽约州立大学 Buffalo 分校的 Errington 研究组发展了一种直接确定模型体系相性质的方法。该方法数据搜集效率高,结果精确,可直接估算单组分体系的饱和性质,该方法也可用于多组分体系以及估算宏观主体和受限体系的相性质。美国 Vanderbilt 大学的 McCabe 研究组应用分子模拟和分子理论预测化学、生物及纳米结构体系的热力学和传递性质,发展了用 SAFT-VRX 方程预测混合物的相平衡和临界性质,理论预期与实验测定具有很好的一致性。更为重要和值得注意的是:分子模拟可以提供精细的局部微观图景,揭示微观结构并描述其转变过程,这为实验研究(从设计到检测)提供了很好的参考。华东理工大学刘洪来教授研究组以键长涨落和空穴扩散算法的 Monte Carlo 模拟(MC)与元胞动力学方法(CDS)对受限于两块平板之间的两嵌段共聚物—均聚物共混物的薄膜形态进行了计算机模拟,探讨共

混物中均聚物的组成、两嵌段共聚物链段的组成、膜厚、壁面作用能等因素对共混物薄膜的微相形态的影响。其 MC 和 CDS 模拟所得结果在微相定性鉴别上呈现了很好的一致性,与实验结果吻合。美国加州大学 Riverside 分校的吴建中与清华大学刘铮教授研究组合作开展蛋白质折叠过程的分子动力学模拟,将蛋白质的折叠过程抽象为蛋白质在一个球形受限空间内的构象转换过程,而将折叠抽象为蛋白质的疏水核心的形成与失去的过程,由此探讨限制空间的尺寸及界面性质对于蛋白质折叠的影响。研究结果对于筛选折叠助剂以构建适宜的限制性空间从而强化蛋白质折叠具有重要的指导意义。美国北卡罗来纳州立大学教授 Gubbins 院士则将研究工作深入到纳米尺度的化学反应和相转变,揭示纳米尺度空穴中受限相的性质和主体相性质的差异,其蒸气压、扩散速率、反应收率和速率都能在小孔中呈两个或更高数量级的改变,出现新相和表面效应。这些研究从分子的水平上揭示出微尺度化工过程在过程强化和创新方面所取得进展的内在原因。

综上所述,分子模拟已成为发展面向复杂分子结构的过程工程的核心工具,在化学化工及相关领域具有非常广阔的应用前景,就如同目前 Microsoft Office 一样,分子模拟技术的发展正在改变着化学化工领域的研究模式。可以预期的是,发展高效分子模拟工具将成为化学工程学科领域的竞争焦点和知识产权保护领域,而目前有关分子模拟的方法和软件主要由国外少数学术单位所发展,是其“知识经济”的典型特征产业,我国的化学化工领域则多处于消化和应用阶段,如果不迅速组织力量,差距将进一步拉大,导致软件重复进口,这一点必须引起我国有关部门和相关学科(如物理学、化学和化学工程学科)的重视。

## 3 化学与生物分子工程是当前化学工程高等教育的一个值得关注的动向

由于此次与会专家多来自大学,因此本次研讨会专门进行了一次化学工程高等教育的讨论会,两国专家进行了非常热烈的讨论。作为一门工程学科,化学工程学科的发展离不开工业需求的拉动和基础科学的推动,前者是方向,而后者则是产业创新、技术创新的源泉。工业水平发展的差异使得中美社会呈现出不同的需求。在美国,来自健康、医学、材料学等方面的需求成为巨大的推动力;而在中国,石油加工、煤化工在产值和规模上仍占有绝对优势,相比之下,精细化学品、医药、材料和信息对于技术和产品创新的需求更为旺盛,但受现有行业模式

和工业格局的影响, 这些需求并未被有机地整合到化学工程高等教育的内容体系中。

为适应化学工程科学研究及产业的发展, 目前在美国有许多大学将化工系更名为化学与生物分子工程系 (Chemical and Biomolecular Engineering), 以反映其教育和研究目标的转变, 即重视为正在迅速发展的生物、信息和材料等产业领域培养具有坚实的分子工程知识基础的人才; 同时注意将生物科学与技术所描述的由生物信息所调控的分子加工和转换的内容融合进化学工程的知识体系中, 因此, 分子工程是连接这两个知识体系的核心概念及桥梁。相应地, 在其课程体系中也加入了一定分量的生物学内容, 多数学校将生物类的课程作为学生本科的必修课, 学生根据需要选择其中的 1 门。为促进教师的知识更新, 更好地进行学科交叉, 华盛顿州立大学西雅图分校专门对非生物专业的教师开设生物类的课程。中方有关院校目前也在积极地进行课程体系改革, 但相比较而言, 我方教育的专业色彩还是较为突出。此外, 各校因办学目标、学生就业等方面存在的差异而采取了不同的模式, 目前还在探索中。特别值得重视的是, 美方专家在有关教育的报告中给

出了详细的每年各层次毕业生的数量及其首次就业的行业分布情况等翔实的数据, 这是值得我们学习和借鉴的。

#### 4 结束语

研究物质与能量的加工与转换过程的基本规律并将其工业化是化学工程学科的核心目标。在日益枯竭的资源与能源供给及抑制环境恶化的前提下, 以新过程和新产品满足不断增长的人口需要, 以及日益提高的人们生活质量的需要, 为“循环经济”提供先进产品、技术与工程平台, 是当代化学工程的首要任务。化学与生物分子工程的发展则可能为现代化学工程的工程、工艺、技术与装备的改进和创新提供知识动力, 因此值得我国科学界、工程界和教育界的相关人士重视。发展这一新体系则需要化学工程领域的学者与化学、物理和生物学等领域的学者协同努力, 凝练核心知识体系, 发展新的研究方法, 并努力推进其在工业上的应用, 最终使得化学工程学科在满足人类不断提高的需要中、在不断融入相关学科的成就并集成于化学工程的实践中得到持续发展。

## CHEMICAL ENGINEERING FOR COMPLEX STRUCTURES —AN OVERVIEW OF THE FIRST CHINA-USA WORKSHOP ON CHEMICAL ENGINEERING

Sun Hongwei<sup>1</sup>     Liu Zheng<sup>2</sup>

(1 Department of Chemical Sciences, NSFC, Beijing 100083;

2 Department of Chemical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084)

**Abstract** The First China-USA workshop on chemical engineering was held in Beijing, China during August 9 to 12, 2005. The main objective of this workshop is to provide a platform for exchanging of scientific information and to establish a sustainable cooperation between the American and Chinese scientists in the field of chemical engineering. Thirty delegates from over 20 universities and research institutions attended this workshop and contributed 30 presentations which were divided into 5 sessions: (1) approaches to probing complex structures, (2) microscale processes and transport at interface, (3) fabrication of complex structures, (4) process involving macro- and bio-molecules, and (5) chemical engineering for sustainable development. Two workshops focusing on the trends in today's chemical engineering research and education were also included. It is concluded from the presentations and discussions that the design, fabrication and manipulation of complex structures have become a new theme of today's chemical engineering research. Molecular simulation has been extensively applied as one enabling approach to probing complex structures. A new program entitled as chemical and biomolecular engineering has been launched by a growing number of universities in USA in order to produce chemical engineers and scientists contributing to the fundamentals and applications of complex structures.

**Key words** complex structures, chemical engineering, new trend