

金属氢化物储氢研究进展——储氢系统设计、 能效分析及其热质传递强化技术

李 龙, 敬登伟

(西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 陕西 西安 10049)

摘要: 储氢技术的发展是氢能系统得以实用化的关键环节之一。近年来, 氢的储存, 尤其是移动式的随车储氢技术成为研究热点。围绕车载储氢技术, 着重介绍了目前研究较多的金属氢化物储氢技术, 并重点关注该储氢技术在系统设计、热质传递强化及效率提升方面所做的工作。

关键词: 储氢; 金属氧化物; 传热; 传质; 强化

中图分类号: TG139.7

文献标识码: A

文章编号: 0253-4320(2010)10-0031-05

Progress in hydrogen storage technique by metal hydride: Storage system design, performance analysis and heat and mass transfer enhancement

LI Long, JING Deng-wei

(State Key Lab of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: The development of hydrogen storage technologies is a key factor in the popularization of hydrogen energy system. Recently, the hydrogen storage, especially in on-board hydrogen storage has been given special attention. In this paper, the hydrogen storage techniques studied, especially metal hydride, are introduced. The attentions are paid to the system design, heat and mass transfer and efficiency enhancement.

Key words: hydrogen storage; heat transfer; mass transfer; enhancement

近年来, 氢的储存和应用技术研究已经引起了人们的极大关注。尤其是移动式的随车储氢技术更被认为是储氢技术的关键环节^[1]。衡量一种氢气储运技术好坏的依据有储氢成本、储氢密度和安全性等几方面。对于车载储氢技术, 美国能源部(US Department of Energy)提出到2010年, 车载氢源质量和体积储氢密度分别达到6%和45 g/L^[2], 而未来将会设定更高的储氢目标。氢的加注速度也需要达到1.5~2.0 kg/min, 以与车载燃料电池等氢能系统的消耗速率相匹配。储氢的能量效率也是必须考虑的问题, 一般将储氢能量效率定义为氢的低热值与储氢及使用过程的消耗的能量之间的比值。

目前常用的可以增加氢的能量密度的储氢方法主要有以下3种: 气态高压储存、深冷液化储存、储氢材料储氢(金属氢化物及其他氢化物)。上述储氢过程都涉及到吸放热过程, 这使得储氢系统的热管理成为重要课题。各类储氢方法也都面临着约束条件限制: 利用高压压缩技术储氢通常占用体积太大且能量密度不易达到要求, 液态储氢在输送过程中极易蒸发泄露, 从而导致安全事故。利用金属合金吸附技术在随车携带的系统上是当前研究的一

个热点, 不过储氢系统的质量控制、传热优化则是需要解决的问题。关于储氢技术目前已有很多综述见诸报道, 但多数集中于从材料角度进行介绍。本综述将围绕车载储氢技术, 重点介绍目前研究较多的金属氢化物储氢技术。另外, 与现已发表的多数综述不同, 本文中重点关注相关储氢技术在系统设计、传热强化及效率提升方面所做的工作。

1 传统的储氢技术

气态高压储存是最早实现商业化的储氢技术。由于氢的体积能量密度很低, 要实现随车使用, 必须将其压缩到很高的压力。工业储氢的压力一般要求至少为35 MPa。在室温下, 35 MPa的高压氢密度为22.9 g/L, 而70 MPa的高压氢密度为39.6 g/L。高强度碳纤维复合材料设计的储氢压力容器虽然可以达到70 MPa, 但其30 g/L的储氢体积密度与45 g/L的目标仍有差距。高压储氢面临的主要问题之一是相对于其他储氢技术其体积及质量密度均较低; 另一方面, 高压容器的危险性也影响了其进一步发展。从能量效率的角度, 将常压氢气压缩到70 MPa, 即使采用多级压缩、级间冷却技术其所需要的最小

收稿日期: 2010-07-08

作者简介: 李龙(1988-), 男, 博士生; 敬登伟(1977-), 男, 博士, 讲师, 研究方向为新能源与可再生能源的规模制备及利用, 通讯联系人, 029-82668769, dwjing@mail.xjtu.edu.cn。

压缩功耗仍要达到 10 161 kJ/kg, 压缩过程的强化传热技术则是降低压缩功耗的关键。高压氢的快速加注过程 (>1 kg/min) 产生的温升是另一个与传热相关的问题。氢气从高压的静态储罐加注到氢箱的过程所产生的反向节流效应使得气体温度快速升高 (高达 50°C), 这使得系统热负荷明显增加, 导致氢的加注量降低。

深冷液化储氢 (LH_2) 目前也已进入商业化。常压下的 LH_2 储温为 20.3 K, 密度为 70.8 g/L。一个 68 L 的 LH_2 储罐可储 5 kg LH_2 , 可以驱动一个燃料电池汽车续航近 500 km。液氢储存的最大缺点是其液化过程的功耗不断挥发损失。氢的液化过程包括其显热、潜热及正仲转化过程的理论总功耗至少会达到 14 280 kJ/kg, 而氮的液化过程仅消耗该能量的 6%。液氢储存过程的辐射热损及液态挥发所引起的压力升高都是需要解决的问题。而由于压差引起的储罐内部上下端沸点的微小差异则会使得储罐在受到扰动时产生剧烈沸腾。上述问题均使得液氢储存技术面临挑战。

基于金属氢化物在不同温度下可逆吸放氢过程的储氢技术近年来引起越来越多的关注。该技术比高压储氢技术更安全, 其储氢的体积能量密度与液氢相当。尽管多数金属氢化物的储氢质量分数目前仍小于 2.0%, 但随着大量储氢材料被开发出来, 该技术的储氢密度也得以不断提高^[3]。

2 金属氢化物储氢技术

在一定温度和压力下, 金属与氢反应, 会大量吸收氢而生成金属氢化物, 从而将氢储存和固定。反应有很好的可逆性, 适当升高温度和减小压力即可发生可逆反应, 释放出氢气。在氢气的吸储和释放过程中, 伴随着热的生成或吸收, 也伴随着氢压的变化。因此, 可利用这种可逆反应, 将化学能 (H_2)、热能 (反应热) 和机械能 (平衡氢压) 有机地组合起来, 构成各种能量形态转换。

鉴于金属储氢合金相对其他储氢方式在车载系统中较大的应用潜力, 对其储氢机理的研究始终

是热点。传统的金属储氢能效研究主要是基于传热传质分析。然而, 随着对储氢系统的要求不断提高以及对储氢机理的深入探索, 近年来利用其他分析方法对储氢效能进行深入分析也见诸报道。以下主要介绍传统热力学分析方法、热力学焓分析方法以及金属氢化物储氢的相变分析方法等。

2.1 金属氢化物储氢系统热力学分析

金属氢化物吸放氢过程是一个化学反应过程, 反应的热力学通常用压力-吸氢浓度等温线表示。如果考虑不同温度下的等温线, 则称作压力-浓度-温度 (PCT) 曲线 (如图 1 所示)^[4]。图 1 中 PCT 曲线可以分为 3 个区间。当氢的浓度 $x < 1$ 时, 氢溶解于金属的晶格内形成固溶体相 (图 1 中 I 区 α 相), 其结构与金属相类似。随着氢压的继续增加, H-H 原子间的相互作用逐渐增强, 金属晶格开始膨胀, 金属氢化物的 β 相开始出现。系统内有 α 、 β 和氢气三相 (p), 金属及氢 2 种组分 (c), 根据吉布斯相律, 其自由度 (f) 为 $f = c - p + 2$, 计算为 $f = 1$ 。因此在两相区 (图 1 中 II 区) 氢压将不会发生变化。 α 相向 β 相转变过程的平衡氢压可由范霍夫方程给出:

$$\ln P_{\text{eq}} = -\Delta H/RT + \Delta S/R$$

ΔH 和 ΔS 为相变过程的焓变和熵变。由该式可以看出, 平衡氢压的对数与温度的倒数成线性关系, 如图 1 右侧所示。

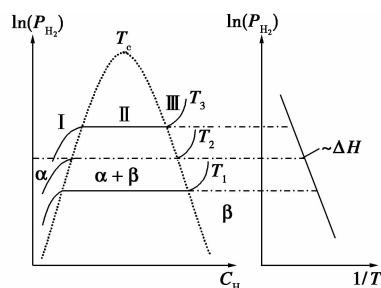


图 1 氢平衡压力与含氢浓度的理想变化曲线

值得注意的是, 对于理想情况, 无论是吸氢或放氢, 在相同温度之下, 过程都可认为是沿着同一条等温线进行, 即吸放氢等温线重合。而在实际过程中,

(上接第 30 页)

- [27] Bents D J, Scullin V J. Hydrogen-oxygen PEM regenerative fuel cell energy storage [R]. NASA/TM-2005-213381.
- [28] 逯应梅, 秦朝葵. 燃料电池混合发电技术 [J]. 电池, 2008, 38 (6): 389-391.
- [29] 陈哲良. 太阳能光电氢能系统 [J]. 能源工程, 2001 (1): 12-14.

- [30] 张涛君. 一种绿色能源: 太阳能电池-燃料电池供电系统方案 [J]. 铁道通信信号, 2003, 39 (7): 1-21.
- [31] 蔡可心. 风能-燃料电池联合供电系统 [J]. 新能源, 2009 (5): 50-51.
- [32] Daniel S, John D, Michael K, et al. Solar-powered regenerative PEM electrolyzer/fuel cell system [J]. Solar Energy, 2005, 79 (5): 544-550. ■

脱氢的滞后往往导致 P-C-T 曲线出现回滞环。

2.2 热力学焓分析方法

近年来,热力学焓分析也被用来设计和评估储氢系统。能量系统的焓分析综合了热力学第一和第二定律,并且特别考虑了环境因素。焓作为热力学指标是指系统从给定状态到与其周围介质达到热力学平衡所需做的最大功,是对系统进行经济性评估的重要参数。焓分析方法不仅考虑能量的量,而且还考虑能量的品位。对于高压储氢,压力储罐的压力比燃料电池所需的氢气压力要高,在这个过程中的焓损失主要来自于压力调节相关步骤。金属储氢是很有潜力的一种大容量储氢方式,对于这种方式,焓损失主要是交流电加热和冷却过程产生的,如果能利用太阳能等能源替代电能则有望有效降低过程焓损失。

Lopez 等^[5]描述了从可再生能源制氢时的主要氢气储存方式,并利用焓分析方法阐述了在设计和构建储氢系统时所需考虑的不同标准,并证明低压储氢尤其是金属氢化物储氢技术与其他储氢方式相比拥有更高的焓效率。Neelis 等^[6]通过对 8 种不同的燃料利用过程进行焓分析,给出了不同产氢方式和储氢系统的焓分析结果。通过分析可以找出反应过程中的热力学限制因素,从而确定并降低反应过程中的热损失。

2.3 金属氢化物储氢的相变分析方法

金属氢化物反应过程实际上就是从固溶体 α 相到氢化物 β 相的转变过程。因此,可针对该相变过程展开研究,从而确定影响反应的因素,即金属氢化物储氢的相变分析方法。

金属氢化物吸放氢速率对系统的应用至关重要,而该速率又完全依赖于反应床的传热传质特性^[7]。游离氢分子在合金表面的化学吸附速率依赖于氢原子在表面吸附并渗透入金属的能力^[8]。而金属氢化物吸放氢反应发生的位置同时也是相变发生的场所。随着氢含量的增加,固溶体开始形成氢化物相,并且在相变中伴随着潜热释放。在放氢反应中可以看到可逆的相变过程,这种相变过程对反应床的热管理有十分很重要的影响。在吸氢反应中,影响反应速率的因素和不同反应机理有关,例如化学吸附、表面渗透吸附、 α 相和 β 相中的扩散吸附以及相变反应过程中的吸附,其中最慢的控速步骤决定了整个过程的反应速率。

利用相变分析方法可以清晰地反映整个储氢系统内部的反应过程,并且可以考虑外界因素对反应

的具体影响,从而更加深入地分析整个反应系统。对储氢过程本质性的认识,例如马氏体相变以及从 α 相到 β 相的晶格变化过程则有待更深入地理解。

Gondor 等^[9]模拟了 LaNi_5 储氢合金的平衡氢压、吸氢容量与温度之间的关联,并且提出了一个考虑相变过程的动力性模型。通过随后的仿真模拟,表明了外部环境条件(氢压和温度)和参数值(反应器壁传热性能、气体固体的传导性能、黏度和孔隙率等)对于气体加注速率有重要影响。

3 金属氢化物储氢系统热质传递强化设计

在实际系统中,为提高反应速度,一般可将金属粉碎,以便增大接触面积。由于金属的种类不同,其反应条件也随之而异。普遍存在的问题是金属粉末在反应过程中的热交换问题以及粉末的泄漏问题,其中最主要的挑战还是热管理问题。例如,对于金属镁的氢化反应,提高反应速率的方法是将 MgH_2 球磨处理并向其中加入少量 Nb_2O_5 ,在 150°C 时,30s 内氢质量分数将超过 5.0%^[10]。该过程将在短时间内产生 2 kW 的热量,要保持样品室温度的恒定,有效的热管理至关重要。

为了强化这种快速的传热过程,学者研发了各种不同的反应器。在早期,Akiba 等^[11]采用了一个内部试样层厚度仅为 1 mm 的容器,该设计使得 Mg-Ni 合金反应过程中温度变化在 5 K 之间。将粉末试样平均分布在不锈钢管和同轴滤波管之间的环形区域也能达到较好的传热效果^[12-13]。为了维持一个统一的样品分布,Wang 等^[14]选择仅填充少部分环形区域,从而保证在反应稳定后温度偏差保持在 ± 0.1 K 之内。另外一种减少温度梯度的方法是将金属氢化物与惰性金属机械混合以增加试样的热容^[15]。不过,为了得到充分的绝热条件,金属碎渣的质量分数必须非常大,最高可达到 97.5%^[16],这将导致显著的氢气流动阻力。另外,碎渣的粒径大小也是一个重要参数,颗粒太小,良好的传热将会和较大的氢气流动阻力相抵消。

图 2 给出了一个样品质量为 1~2 g 的反应器设计示意图。反应器由不锈钢制成,可加热到 400°C 。试样粉末放置在不锈钢壁内的一个柱状狭缝内,宽度只有 1.25 mm,这样可以在热源和整个试样进行良好的热交换。直径 0.5 mm 的热电偶直接接触样品粉末,可更准确地测量出样品温度。反应器末端用一个手动阀封闭,这样可以向反应器中充入惰性气体,以阻止空气对样品的影响。

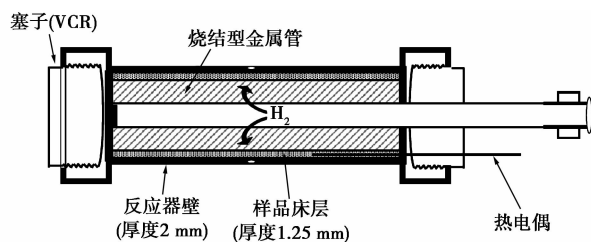


图2 典型的反应器示意图

金属氢化物粉末的典型粒径尺寸一般为 $50 \sim 100 \mu\text{m}$, 在 $10 \sim 100$ 个反应周期后, 合金粉化至平均粒径大小为 $1 \mu\text{m}$ 左右^[17]。比较好的金属氢化物粉末通常的导热系数都很低, 大概在 $0.1 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ ^[18]。一般可通过扩张面积, 如增加翅片、泡沫及网状设计, 或将金属氢化物与高导热性固体材料, 如铜、铝、镍等固定在一起对金属氢化物反应床强化传热传质^[19]。

在一种基于多孔金属泡沫设计的金属氢化物储氢箱中^[20], 反应器被金属板分隔成多个小区间, 每个区间都填充金属泡沫、金属滤网以及 U 型冷却管。泡沫材料一般都是铝制的, 它能够为金属氢化物粉末提供支撑, 同时可以强化内部的换热。泡沫一般占据大约 6% 的体积, 而金属氢化物粉末占据大约 80% 的空间, 剩下的空间是为床层膨胀而预留的^[21]。

最近的实验研究发现, 将石墨与金属氢化物混合有利于强化换热^[22]。将石墨加热使其体积膨胀, 然后将膨胀的石墨和金属氢化物粒子进行均匀混合, 2.1% (质量分数) 的膨胀石墨可以将金属氢化物粉末的导热率从 $0.1 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 提高到 $3 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ ^[23]。

合金粉末的导热效率很大程度上依赖于微粒之间的触点热阻。当粒子相互被压缩而紧密接触时, 接触面积和导热效率就会增加。因此, 内部压力高的微粒反应床比那些松散布置的反应床导热效率更高^[24-25]。然而, 微粒间布置过密的反应床的储氢量却会显著减小。例如, 紧密压实的铝氢化物比压紧前储氢量要低 67%^[26]。另外, 封闭的反应箱在过高的内部压力下可能会发生破裂。一种设计是在密闭反应箱内包含一个活塞式结构。活塞可以预先调整到某个压力值。一旦反应床的内部压力超过了这个压力值, 活塞将会向外移动, 从而为金属氢化物反应床的膨胀预留出空间来维持一个合适的压力水平, 实现足够的内部换热。

需要指出的是, 尽管燃料电池工作时的散热量和内燃机相差不多, 但是它的操作温度 (约为 80°C)

却比内燃机低很多。通常内燃机的冷却介质工作温度在 120°C 左右, 然而对于一个质子交换膜燃料电池, 则冷却介质的温度一般在 $60 \sim 65^\circ\text{C}$ 。内燃机散热器与周围环境温差是燃料电池的 2~4 倍。由于大多数汽车废热最终都是通过散热器排放到周围环境, 这也决定了金属氢化物储氢系统必须以空气为散热介质, 这使得对于车载储氢系统, 散热器需要更大的换热面积和更高的空气流动速度, 而这又无疑会增加汽车的功率消耗和氢箱体积。最近的后端散热器设计, 同时在冷却效果和空气动力学上展示出了优越性。除了对空气侧的改善之外, 采用多程横流式换热器也可以改善散热器的性能。另外的一些换热器强化技术 (例如, 嵌入变粗糙度换热器、不规则和波形翅片) 同样可以使换热器性能得到明显改善^[27]。

4 结语与展望

储氢作为氢能利用过程中与用户紧密相连的一个重要环节, 对其研究将具有重要意义。传统的高压压缩储氢和深冷液化储氢技术虽然方便、成熟, 但也带来了体积庞大和安全隐患等方面的种种问题。因此世界各国研究机构都致力于开发新的储氢技术及相应的储氢系统。而目前研究广泛的技术之一则是基于储氢材料的储氢技术。作为未来能源的氢能, 在燃料电池汽车或直接作为燃料应用于汽车上, 必须使储氢系统同时具有较高的质量储氢量和体积储氢量。这样, 利用储氢材料特别是金属储氢材料储氢将是目前最有潜力成功开发出随车应用的储氢技术。然而, 在对其储氢机理进一步分析时, 必须认识到这种储氢技术质量储氢量的局限性, 以及吸放氢过程中的氢气流动、换热等热质传递的过程的深层次影响因素, 才能使该技术在未来有所突破。

未来金属氢化物储氢系统性能优化设计可从以下几个方面开展工作: ①强化系统的传热传质性能, 提高系统效率; ②储氢合金的合理选择以及高性能储氢合金的研制开发; ③提高金属储氢系统的质量储氢量和体积储氢密度; ④降低成本, 提高金属氢化物储氢系统的竞争能力。未来工作中, 上述几方面的研究工作势必会改善目前金属储氢技术的这些局限, 使金属氢化物储氢技术更具竞争力, 并将该技术导向实用化。

参考文献

[1] 吴承康, 徐建中, 金红光. 能源科学发展战略研究[J]. 世界科

- 技研究与发展,2000,22(4):1-6.
- [2] US Department of Energy, Office of Hydrogen. Fuel cells, and infrastructure technologies. 2003, Multi-year research, development and demonstration plan [EB/OL]. <http://www.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/mypp/>.
- [3] Grochala W, Edwards P P. Thermal decomposition of the non-interstitial hydrides for the storage and production of hydrogen [J]. Chemical Reviews, 2004, 104(3):1283-1315.
- [4] L'eon A. Hydrogen technology [M]. Heidelberg: Springer-Verlag Berlin, 2008.
- [5] Lopez E, Isorna F, Rosa F. Optimization of a solar hydrogen storage system: Exergetic considerations [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2007, 32(10/11):1537-1541.
- [6] Neelis M L, vander Kooi H J, Geerlings J J C. Exergetic life cycle analysis of hydrogen production and storage systems for automotive applications [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2004, 29(5):537-545.
- [7] Muthukumar P, Ramana S V. Numerical simulation of coupled heat and mass transfer in metal hydride-based hydrogen storage reactor [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2009, 472(1/2):466-472.
- [8] Gondor G, Laydi R, L'excellent C. Kinetics of hydrogen absorption in getter materials for a cylindrical tank: Analytical and numerical resolutions [J]. Computer Methods in Material Science, 2006, 6(1):1-8.
- [9] Gondor G, L'excellent C. Analysis of hydrogen storage in metal hydride tanks introducing an induced phase transformation [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2009, 34(14):5716-5725.
- [10] Hanada N, Ichikawa T, Hino S, *et al.* Remarkable improvement of hydrogen sorption kinetics in magnesium catalyzed with Nb₂O₅ [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2006, 420(1/2):46-49.
- [11] Akiba E, Nomura K, Ono S, *et al.* Kinetics of the reaction between Mg-Ni alloys and H₂ [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 1982, 7(10):787-791.
- [12] Friedlmeier G, Groll M. Experimental analysis and modelling of the hydriding kinetics of Ni-doped and pure Mg [J]. Journal of Alloys and Compounds, 1997, 253/254:550-555.
- [13] Kircher O, Fichtner M. Hydrogen exchange kinetics in NaAlH₄ catalyzed in different decomposition states [J]. Journal of Applied Physics, 2004, 95(12):748-753.
- [14] Wang X, Suda S. Hydriding-dehydriding reactions of LaNi_{4.7}Al_{0.3}-H system under quasi-isothermal conditions [J]. Journal of Alloys and Compounds, 1993, 194(1):173-177.
- [15] Hammioui M E, Belkbir L, Gerard N. Study of a hydride forming system by thermogravimetry. Hydriding characteristics of LaNi₅ mixed with nickel [J]. Thermochemica Acta, 1994, 231(2):225-230.
- [16] Rudman P I S. Hydriding and dehydriding kinetics [J]. Journal of the Less-Common Metals, 1983, 89:93-110.
- [17] Sanchez R, Klein A, Groll M. Expanded graphite as heat transfer matrix in metal hydride beds [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2003, 28(5):515-527.
- [18] Kim K J, Montoya B, Razani A, *et al.* Metal hydride compacts of improved thermal conductivity [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2001, 26(6):609-613.
- [19] Oi T, Maki K, Sakaki Y. Heat transfer characteristics of the metal hydride vessel based on the plate-fin type heat exchanger [J]. Journal of Power Sources, 2004, 125(1):52-61.
- [20] Gadre S A, Ebner A D, Al-Muhtaseb S A, *et al.* Practical modeling of metal hydride hydrogen storage systems [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2003, 42(8):1713-1722.
- [21] Bogdanovic' B, Schwickardi M. Ti-doped alkali metal aluminum hydrides as potential novel reversible hydrogen storage materials [J]. Journal of Alloys and Compounds, 1997, 253-254:1-9.
- [22] Klein H P, Groll M. Heat transfer characteristics of expanded graphite matrices in metal hydride beds [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2004, 29(14):1503-1511.
- [23] Zhang J S, Fisher T S, Ramachandran P V, *et al.* A review of heat transfer issues in hydrogen storage technologies [J]. Journal of Heat Transfer, 2005, 127(12):2390-2399.
- [24] Asakuma Y, Miyauchi S, Yamamoto T, *et al.* Homogenization method for effective thermal conductivity of metal hydride bed [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2004, 29(2):209-216.
- [25] Wang J. Hydride development for hydrogen storage [C]//Proceedings of the 2004 Annual U. S. DOE Hydrogen Program Review, 2004.
- [26] Bogdanovic' B, Schwickardi M. Ti-doped alkali metal aluminum hydrides as potential novel reversible hydrogen storage materials [J]. Journal of Alloys and Compounds, 253/254:1-9.
- [27] Goldstein R J, Eckert E R G. Heat transfer: A review of 2001 literature [J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 2003, 46(11):1887-1992. ■

《现代化工》“海外纵横”栏目征稿启事

《现代化工》“海外纵横”主要介绍国外某一国家或地区热点科研领域的开发应用状况、开发方向,或某一行业的发展现状、发展方向和问题探讨,以及有突出表现的国外公司的科研动态和研发经验等。

有意投稿的作者,请与“海外纵横”栏目编辑童志勇联系,以确定合适的主题和格式。联系电话:010-64444105-839, e-mail: tongzy@cheminfo.gov.cn。(本刊编辑部)