

“微化学工程与技术”专题报道导读

微化学工程与技术是当前化学工程学科前沿,也是重要的化工过程强化技术之一。微化工技术可实现化工过程节能降耗和化工系统微型化并能提高过程安全性,已引起欧美等发达国家的高度重视。目前研究领域涉及化学激光器微型化、核燃料高效处理、火炸药的安全生产以及传统化工技术的更新换代。同时国外一些高校也开设微化学工程与技术的相关教学课程。本刊特邀 3 篇有关“微化工”的文章:“微尺度和纳米尺度过程系统工程的进展和挑战”、“微化工技术研究进展”、“欧洲微反应器技术的发展与应用现状”,并安排在本期同时刊出,以期引起国内化工工业界和学术界同行对微化学工程与技术研发与应用的重视。

——本刊编委:陈光文

专论与评述

微尺度和纳米尺度过程系统工程的进展和挑战

杨友麒

(中国化工信息中心,北京 100029)

摘要:从工业应用的角度对 20 世纪末以来在微尺度和纳米尺度领域的过程系统工程(PSE)进展做出综合评述。对新世纪对于该领域过程系统工程的挑战和实际进展做出归纳,对该领域的 PSE 的特点和方法论与传统 PSE 的差别进行了比较。指出前者可以认为是化学工程学科的一种延伸,而后者则是典型的复杂性系统,其采用的方法和工具与传统化学工程只有松散联系。

关键词:过程系统工程;微化学工程;纳米技术;分子工厂

中图分类号:TQ-9

文献标识码:C

文章编号:0253-4320(2007)10-0001-07

Microscale and nanoscale process system engineering: Challenge and progress

YANG You-qi

(China National Chemical Information Center, Beijing 100029, China)

Abstract: The progress of process system engineering(PSE) in the microscale and nanoscale worlds since the end of the 20th century has been reviewed in a viewpoint of industrial application. The challenges it faces in the new century and the real progress in it are pointed out. The features and methodology of microscale and nanoscale PSE are compared with the traditional PSE. It is pointed out that the former one is the extended area of chemical engineering, but the latter is a typical complicated system, and there is only incompact relationship between the traditional chemical engineering and it in methodology and implements.

Key words: process system engineering; microchemical engineering; nanotechnology; molecular factory

1 引言

按照 Schumpeter 的创新波段理论,从 1990—2005 年人类社会已进入数字网络/软件/新媒体的时代,而 2005 年以后更进入生物/纳米/信息时代。人类发现自己对微观世界的知识还是比较贫乏的,例如,在单个分子到分子团(1~100 nm)这一过渡尺度世界中,在 1981 年我们才学会测量到一个表面上的原子团,到 1991 年才掌握如何在一个表面上移动

原子,到 2002 年才会将组分原子组装到一个分子的指定物理位置上。所以,“分子加工”仅仅是 21 世纪才有的事。为了填补人类知识在微观领域的空白,各国不论是政府还是公司均投入大量的人力物力,力争在这种新的未知领域开发出更加有效的手段和具有新功能材料/设备,早日占领微观领域的制高点^[1-3]。而化学工程学科已从过去的常规尺度向微观尺度延伸,形成与化学学科领域重叠的部分,而这个新的重叠部分正是 21 世纪成果倍出的热点领域。

收稿日期:2007-08-29

作者简介:杨友麒(1935-),男,大学,教授级高工,从事化学工程、过程系统工程,计算机应用等方面的研究,通讯联系人,yang@pku.edu.cn。

在微观领域内又可以分为 2 个不同的时空领域:微过程系统和纳米过程系统。这 2 个领域从空间上看,大小相差 1 000 倍,研究的对象、研究方法及支配规律均有本质的差别。前者的过程特征尺寸为 $1 \sim 100 \mu\text{m}$,速度特征时间为毫秒(ms);而后者以分子团/分子为研究对象,以构建“分子工厂”为目标,其过程特征尺寸为纳米(nm),速度特征时间下降到微秒(μs)。这种情景如图 1 所示。

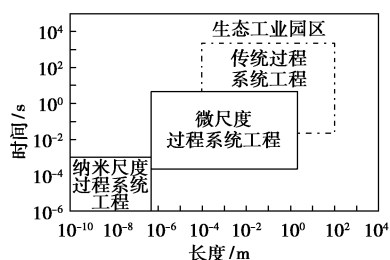


图 1 微观领域中与常规领域的过程系统工程的时空尺度划分

从化学工业精细化的发展也要求加快新产品的开发,特别要加快由实验室到商业化生产的时间,以提高竞争力。“在小尺度下学习,在大尺度上获利”已成为共识。过去“在小尺度下学习”是指实验室和中间试验,而现在则是指微尺度和纳米尺度。这不仅是说我们的研究开发创新环境可以在更小的尺度下进行得更好、更快、更便宜,而且只有在微观尺度下才能实现许多以往没有的新工艺和新材料^[4]。

过程设备的强化也导致向小型化的发展。如果说 20 世纪石油化工大发展的七八十年代,化工界力图通过设备及装置大型化来降低生产成本以取得竞争优势的话,那么到 20 世纪末就出现相反的趋势——小型化。用小型化/微型化技术强化过程设备是当前技术发展的重要趋势。这是由于微通道内的传热传质速率比常规尺寸设备提高 2~3 个数量级。此外还便于基于“三传一反”的过程深度集成,可以使过去要在不同设备中完成的单元操作集成在一个设备中完成,例如多功能微反应器、反应精馏、催化膜分离等^[5]。

2 微尺度过程系统工程

2.1 微化工系统的特点及优越性

计算机的集成电路和微机电系统(MEMS)从 20 世纪 80 年代就发展起来,到 1989 年 Ciba Geigy 公司已提出“微全分析系统 μ -TAS(Micro Total Analysis Systems)”作为大量药品筛选、DNA 排序等用途的分析仪器。到 1995 年在德国召开第一届“化学及生物

微反应器国际会议”,以及后来几乎每年均召开这样的会议,意味着微反应器工程新学科的诞生^[6]。到 1996 年 DuPont 公司已生产出示范微化工厂,用来生产使用小量的剧毒性化合物(如异氰酸盐)^[7]。

这样,集微机电系统设计思想和化学工程原理于一体,并移植集成电路及微传感器制造技术的一种高新技术——微化工技术(Microchemical Technology)就蓬勃发展起来。这种技术研究时空尺度在 $1 \sim 100 \mu\text{m}$ 和 $1 \sim 100 \text{ms}$ 的微型设备和并行分布系统的设计、模拟、生产控制和应用的规律。该系统从原理上有以下几个不同于常规化工系统的特点:

(1)相对尺度微型化对传递性质及作用力有明显影响,这可以由表 1 看出来^[8-9]。

表 1 传递性质的规模效应

	nm	μm	mm	m
长度(L)	10^{-9}	10^{-6}	10^{-3}	1
表面积(L^2)	10^{-18}	10^{-12}	10^{-6}	1
容积(L^3)	10^{-27}	10^{-18}	10^{-9}	1
比表面积(L^{-1})	10^9	10^6	10^3	1
传质速率($\propto L$)	10^{-9}	10^{-6}	10^{-3}	1
惯性力($\propto L^4$)	10^{-36}	10^{-24}	10^{-12}	1
黏力($\propto L^2$)	10^{-18}	10^{-12}	10^{-6}	1
界面张力($\propto L$)	10^{-9}	10^{-6}	10^{-3}	1
黏力/惯性力($\propto L^{-2}$)	10^{18}	10^{12}	10^6	1
界面张力/惯性力($\propto L^{-3}$)	10^{27}	10^{18}	10^9	1

①比表面积提高了 2~3 个数量级,常规通道的比表面积不超过 $1\,000 \text{m}^2/\text{m}^3$,而微通道可达到 $10\,000 \sim 50\,000 \text{m}^2/\text{m}^3$ 。

②黏性力/惯性力及表面张力/惯性力提高了几个数量级,使得微通道中通常是层流流动,传导热和分子扩散起主导作用,从而传热传质会得到显著强化。微换热器中的传热系数可达到 $25\,000 \text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$,比常规管壳式换热器的 $200 \text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ 高 2 个数量级。传质系数可达 $5 \sim 15 \text{s}^{-1}$,比常规填料塔的 $0.01 \sim 0.08 \text{s}^{-1}$ 也高了 2 个数量级。这就开启了在极端条件下实现高转化反应的可能。

③因惯性力作用极小,排除了湍流因素的干扰,因而可以使严格的化学反应动力学、传热传质特征都得到完美的体现。

(2)微型化使得反应物所需用量成数量级减少,反应时间大大加快,精度大为提高。微组合化学合成与分析系统使检测时间由原来的 2~3 h 下降到

50 s, 而精度可提高到仄摩尔(10^{-21} mol)^[10]。现代DNA检测器及“芯片上的药房”(pharmacy-on-a-chip)就是这种例证。

(3)本质安全及可控性好。由于特征尺寸小于火焰传播临界直径及微通道极强的传热能力,可以有效地抑制自由基爆炸反应,在很宽的操作范围内安全操作。即使发生爆炸,由于系统内物料滞留量很小,也不会造成严重后果,这就使过去常规设备条件下一些危险的化学反应可以实现。

(4)便于把实验研究用的反应器得到的成果直接放大到商业化生产。用并行放大(Numbering-up)替代传统的Scale-up,可以跳过耗时费力的中间试验放大阶段,可大大缩短实验室到市场的时间,这对于提高精细化工及制药行业厂商的竞争力十分重要,精细化工行业的50%反应可以用微反应器技术将间歇生产转为连续生产而受益^[11-13]。

(5)实现分布式生产的可能性。由于微化工系统是模块结构的平行分布式系统,可以便于在产品使用地分散加工并就地供应,这不仅消除危险品运输的潜在危险,而且可以使分散的资源得到合理的利用。这甚至对传统化学工业那种集中式的中央经济模式(只有少数几家大规模生产厂)提出挑战,将来的化学工业也许可以像电子、汽车工业那样,由分散的单独组分(组件)生产,最后再总装成产品^[14]。

(6)可以探索新的化学反应路径。利用微通道壁面和流体的相互作用,可以使反应器中的“热点”受到压抑,又可以消除传质限制因素,从而使一些高放热反应可以在较温和条件下实现,这也为探索新的、环境友好工艺路线开辟新途径^[15-16]。

2.2 微化工系统对过程系统工程的挑战

虽然微化工系统的研究甚至应用已不少,但是从工程角度(特别是过程系统工程)角度的研究却很少。这首先是由于微化工系统的先驱者多为化学家,而不是化学工程学者;其次,微系统的初创研究重点是微反应器的制造和应用,而非通用设计理论;第三,生产规模的商业应用才刚开始,因此放大设计尚无成熟的经验和理论。

这方面的进展和面临的挑战有以下几个方面:

(1)各种微反应器的数学模型。微反应器是整个微化工系统的核心,虽然这方面研究已很多,但对微时空尺度下传递过程与化学反应过程相互影响规律及数学模型的建立尚需要系统的研究工作,“各种反应器”包括单相、多相;无催化剂的、有催化剂的等等。有人试图找到指标 $\Phi = \text{反应速度}/\text{扩散速度的}$

“门槛”值来识别超过多大就可以不考虑几何形状对反应的影响^[4]。

(2)微尺度下的单元操作与常规尺度设备差别很大。首先,混合器成为关键单元,因为层流下主要靠分子扩散起混合作用,要想快速充分混合,只能靠减小扩散长度,因扩散时间与长度成反比,根据这一原则研发出以分隔-再合并(Splitting-Recombination)为原理的混合器^[17-18];其次,微通道中的流体力学与现有理论有偏离,两相流时表面张力起主导作用,偏离就更大。这方面我国清华大学、天津大学均进行了研究^[19-20]。再次,传热效滤也与常规概念不同,并非导热性越高的材料效率就越高,实验证明陶瓷、玻璃材料制成的换热器比金属的效率更高,这可能是因为轴向导热受到压抑的结果^[6,19]。文献[10]提出了一系列层流下的微单元操作,但并未进行其规律性研究,因为他们是化学家。新型的微尺度高效单元操作还正在不断推出,如接触时间只有0.1 s的无皂化高效乳化器及液滴聚合器;生产能力达到200 t/a的混合器^[21]。这些单元操作需要在实践中经过筛选、定型成为公认的常用单元操作后就可以进行模型化。

(3)过程集成与优化。微化工系统最大特点之一就是高度紧凑的集成。Gavriilidis等已指出:此前的系统有纵向集成、横向集成与混合集成之分,各有其优缺点,并指出制成“即插即用”(Plug-and-Play)模块集成到混合集成的母板上是今后的发展方向^[6]。目前的微过程集成和优化主要是从系统制造角度考虑的,尚没有通用的理论指导。Kirschneck提出三步设计步骤如图2所示^[22],其中的技术可行性研究是集成及优化步骤,包括流程优化和操作参数优化。Pfeiffer对微分离系统进行了多目标优化^[23]。Chow指出微化工系统设计中碰到大量的理论问题^[24]。这里的集成优化与常规系统比起来的难度还在于很难将其与微系统的加工制造工艺分开考虑,至少目前阶段如此。

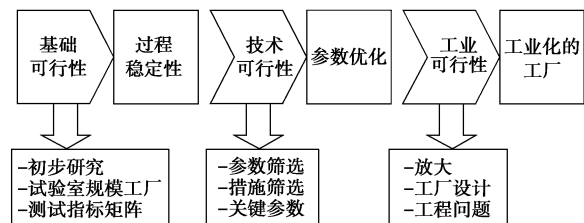


图2 在工业放大过程中的过程集成和优化

(4)微化工系统的工业放大。微化工系统至今

尚未大规模工业应用,存在以下障碍还没有完全突破:一是微通道要求流体洁净度高,否则容易结垢堵塞;二是并行放大时如何保证多通道之间的流体分布均匀;三是往往只能在新装置上试点,而用来替代现有工厂的传统常规装置尚存在相当大的阻力。

首先是大量平行微通道之间的流体均匀分配问题。最新的研究表明:可能产生的不均匀分布对微反应器性能的影响并不如想象那么大,Delsman 等人从理论推断和实验验证证明,微通道不均匀对反应器转化率效应值小于 0.5%;而通道的直径变化及内壁催化剂涂层不均匀的影响会大一点,可能降低总转化率 3%~5%^[25]。荷兰的 Rebrov 提出一种分布器由一个扩散锥体接一个厚壁筛子构成,放置在微反应器前面,可使不均匀度 $\leq 0.2\%$ ^[26]。

Torkovich 等提出了一个工业放大的方法论,如图 3 所示^[27]。他们显示了一个甲烷蒸汽转化反应器 SMR 如何由实验室放大成为 0.4 m³/s 产量的全程单个模拟反应器,然后又如何将 5 个反应器组合在一个容器中,再并联 4 个容器形成 0.4 × 5 × 4 = 8 m³/s 产能的工业装置。他们建议分布均匀指数 $Q \leq 20\%$ 就可以接受。其中:

$$Q = \frac{M_{\max} - M_{\min}}{M_{\max}}$$

M_{\max} 与 M_{\min} 分别代表通道中流量的最大值和最小值。

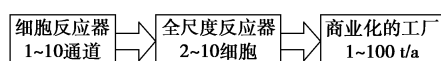


图 3 微反应器的工业放大

日本京都大学的 Hasebe 等人提出一个用 CFD 软件工具经 6 步法进行微化工系统设计放大的方法^[28-29]。欧洲共同体化工协会在 SUSTECH 框架下成立了 IMPULSE (Integrated Multiscale Process Units with Local Structured Elements) 计划,由欧共体的 20 个著名企业和研究所参加,旨在从 2005 年起开发一套微化工系统设计放大方法^[30],但报道只披露了思路,尚未看到具体成果。

(5) 模拟工具的开发。微化工系统的数学模型具有特殊的复杂性,这种复杂性来自微流体力学、传递现象、热学、化学动力学等多种因素强相互作用。早在 20 世纪 90 年代美国麻省理工学院 MIT 就开发了 MEMCAD 软件,用来分析 MEMS 及 Lab-on-a-Chip, 21 世纪又有 COMSOLab 的 FEMLAB 问世。现在使用较多的是基于有限元分析的 CFD 软件,虽然可以反映几何尺寸形状的影响,但它不具备质量和能量平

衡计算的功能,这就需把 CFD 与微化工系统的流程模拟结合起来。常规流程模拟软件无法适应微化工系统模拟的需要,因为微化工单元操作模型化的问题还没有解决,它们应当反映出微通道下的“三传一反”与常规尺寸理论的偏离。

(6) 微化工系统的操作与控制。微化工系统的自动控制碰到以下几个方面的挑战:反应器与其他单元操作与控制元件必须高度紧凑集成在一起,这意味着敏感元件、执行元件和控制单元都与微反应器集成在一起;流体停留时间很短,要求敏感元件和执行元件的响应时间必须很快;如果用数学模型预估控制(MPC),则模型计算时间必须快(要求比实时快 50~500 倍)^[31]。Palusinski 等指出,微通道设备涉及高频信号处理,不宜用当今流行的控制技术来处理,而适合用模拟电路处理,但模拟电路系统又随着复杂性上升而精度下降,所以根据应用要求把模拟/数字控制技术结合起来组态应用是最佳方案。他们提出的现场可编程模拟阵列技术(Field-Programmable Analog Arrays, FPAA)可满足这种要求^[32]。

多通道系统操作中一大问题是如何发现和诊断有哪个通道已被堵塞,日本京都大学 Hasebe 等开发了基于数据库及基于模型的 2 种堵塞诊断方法^[33]。

3 纳米过程系统工程

3.1 纳米技术与纳米系统

纳米技术是 20 世纪末发展起来的最重要、影响最广泛、最深远的高新技术。

从工程应用的角度,Roco^[2]将纳米技术 10 来年的发展分为 4 个时期:第 1 代是被动纳米结构的产品时代(1996—2001 年)。这期间主要发展了纳米颗粒分布材料,如纳米涂料、纳米金属、纳米聚合物及陶瓷等;第 2 代是主动纳米结构的产品时代(~2005 年)。这期间发展了晶体管、放大器、目标药物和传输系统、自适应结构等,这时已提出分子构造学(Molecular Tectonics),即把一些具有精巧准确度的功能分子团用来作分子反应器、分离器、分子管、发动机,以及输送材料的泵和选择性传播分子的分子门或通道。这一时期也研究了先进材料的纳米制造方法及跨学科的模拟与实验手段;第 3 代是三维纳米系统及纳米系统工程时代(~2010 年)。这个时期要开发各种综合与装配技术,例如生物组装、纳米尺度下网络化及多尺度构造。研究将集中于非均质纳米材料、分子团系统工程(包括导引下的多尺度自组装)、人工组织和敏感系统、纳米系统中的量子交互

作用,化学—机械加工及纳米电机械系统(NEMS);第4代是非均质分子纳米系统时代(~2015年)。这时在纳米系统中的每一个分子都有规定的结构并起不同的作用,由这种分子搭建的工程结构将形成全新的功能,这就与生物系统的工作类似,但不同之处在于生物系统是在水中处理信息,速度较慢,而且含有多层结构。这一阶段将出现分子加工厂、复杂大分子组装、健康及农业用的纳米系统生物学、在组织及神经系统层次上的人—机界面等。

正是纳米技术发展到了主动纳米结构的产品已比较成熟,三维纳米系统研究成为焦点的时候,纳米过程系统工程就应运而生了。麻省理工学院 MIT 的 Stephanopoulos 提出“分子工厂”作为下一代加工尺度前沿^[34],他们提出纳米过程系统工程,要对于这种“纳米尺度加工厂”的设计、模拟、操作和控制来研究一整套理论和工具,当然现在仅仅是开始。

3.2 纳米过程系统的特点及挑战

生物细胞可以看成为一个典型的纳米过程系统——“分子团工厂”。在一个真核细胞中,原生质细胞膜定义了工厂的边界,它允许选择性的分子流进和流出,而细胞器(也就是细胞核、原生质网膜、核内体、线粒体和溶酶体等)代表“分子团单元操作”。当生物学家揭示细胞过程的基础机制时,化学家们也合成了一系列新的具有模拟生物功能的分子团结构。

(1)单元操作。①反应器,不同构型(圆形、环形、管式……)及反应功能(包括催化);②分离器,包括纳米多孔质、膜、分子筛、分子通道、离子门等,可以选择性地传输离子、分子或立体异构体;③分子混合器及分割器;④能量生成和耗费单元。

(2)物料传输器。①纳米管,用各种驱动势能(化学的、沿管长电负荷)来传输离子、分子或立体异构体;②分子发动机、分子泵。

(3)控制元件。①信号载体,分子电线、分子构形变化的级联、表面负荷的方向性有效浓度;②执行机构,分子开关、分子门和分子阀。

分子结构学的研究已能利用一些比较简单的分子组装成具有以上功能的复杂“单元设备”,在这些分子构建模块中有大家熟悉的分子,例如,卟啉、多功能杂环、金属络合物(特别是氰基络合物)、氧化阴离子、邻苯二酚、硫属化合物、羧酸盐和多氢键分子等^[35]。

以这种“分子工厂”为对象的纳米过程系统工程面临以下挑战:

(1)描述分子工厂的尺度精确度与常规工厂差别巨大,其位置精度要达到几埃至几纳米。

(2)物料的性质特征描述不再能用平均值,因那是基于“物料连续性”假定。而对于纳米过程,当液体厚度尺寸为10个分子以上时,“物料连续性”假定还可以适用,而当用分子团单元操作构造分子工厂时,就不再能用连续性假定,而只能用单个原子或分子来描述了。

(3)设计和制造的方法论原理不同。常规加工过程设计与制造均是“自上而下”(Top-Down)的多层递阶模式,而纳米加工过程则是“由底而上”(Bottom-Up)的自装配(Self-assembly)、自组织(Self-organization)过程。自上而下无法达到精细的精确度。

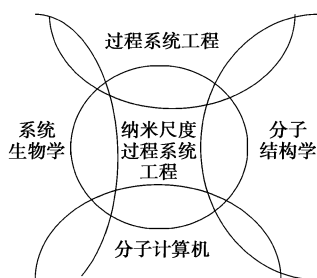
(4)操作控制原理不同。常规加工过程的时间特征常数通常以分钟计,而操作循环周期为几个小时或更长;到微化工厂时间特征常数为几秒,操作循环周期只有几分钟,其控制方法多为多变量中央集中控制/分布控制回路——中央协调控制;但对于纳米过程时间特征常数加快到毫秒,而操作循环周期仅几秒,只能用自调节控制(Self-regulation Control)。

(5)制约纳米过程的规律不同。传统过程系统工程规律不能适用于纳米尺度的过程,从本质上来说,那些自装配、自组织、自调节的纳米过程属于复杂系统的研究范畴。所谓“复杂系统”指的是由多个元件(组分)构成,而且这些元件的行为所遵循的法则会随时间而变化,而且这些元件联结的方式也是塑性的,其作用可以是流动的。因此,这种复杂系统与传统过程系统不同之处在于:后者可以通过大系统分解成子系统来解析分析各子系统功能,再通过集成组合成整个系统功能;而前者通过同样的办法未必能达到预期的整个系统的功能。这类复杂系统的研究手段是^[36-37]:①非线性动力学与混沌理论(Chaos);②统计物理学(包括 Probabilistic Approach);③基于智能体(Agent-based)的模型化;④网络理论。

3.3 纳米过程系统工程的边缘学科特点

如 Ottino 指出的^[3]:有的新兴学科分支是从老学科中派生出来的,其所用的工具还是原来老学科的延伸,而另一些新边缘学科从工具上看,则与老学科只有松散的联系。纳米过程系统工程则属于后者,毋宁将这门学科分支看成是在系统生物学(System Biology)、分子结构学(Molecular Tectonics)、分子计算学(Molecular Computer)和传统过程系统工程边缘成长起来的新科学分支,如图4所示。

系统生物学是研究生物系统的总体功能与构成



它的分子行为与性质之间关系的学问,是分子生物学和生理学之间的新界面。纳米过程系统工程是借助于系统生物学的成果来设计制造人造生物系统,例如硅细胞(Silicon Cells)就是这种成果^[38]。

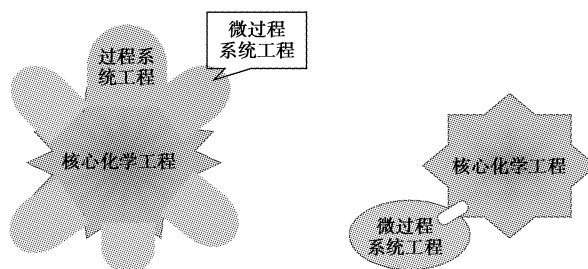
分子结构学是化学的现代分支,它研究分子如何在不同的作用力下形成分子网络(分子团);如何设计与生成具有特定功能的分子团。这门学科已取得生成从多孔金属—有机化合物到工程结晶等许多有意思的成果,为跨越有机和无机化学设计新材料提供结构设计原则乃至结构蓝图提供科学依据^[39-40]。

分子计算是在 1994 年 ADLEMAN 提出可以利用 DNA 来形成一个通用计算机之后才开创的新学科,它又是计算生命科学的一个部分。分子计算有 2 条路线:一种是沿着生物学的途径,揭示生物分子的计算能力,希望开发计算速度更快(海量平行计算)、更小(纳米尺度)和成本更有效(节能)的信息处理系统;另一条途径是沿着分子电子学(Molecular Electronics)的路径,设计制造更精确的电路的数字计算机。这只是传统数字计算机的微型化,其原理

与过去没有什么不同。分子计算把复杂纳米结构通过自组织生成也作为自己的主要研究课题^[40-41]。

4 微尺度、纳米尺度和常规尺度过程系统工程的比较

如果将以上不同尺度的过程系统工程的特征加以比较,就可以发现微尺度过程系统工程与纳米过程系统工程有很大不同,如表 2 所示。前者从方法论角度比较接近于传统过程系统工程,可以视为传统过程系统工程的延伸,而纳米过程系统工程从加工对象的表征、纳米系统(分子工厂)的设计/制造方法到过程的操作与控制都与传统过程系统工程大相径庭,例如,传统过程系统工程采用“自上而下”的方法论,而纳米过程系统工程则用“由底而上”的方法论,这就更接近化学及生物学的方法,而不是化学工程的方法论。如图 5 所示,微过程系统工程属于老学科的延伸,而纳米过程系统工程则属于那种与核心老学科只有松散联系的新学科分支。



(a) 学科分支的方法工具均为主题学科的延伸

(b) 新学科与主题学科只有方法工具方面的松散联系

图 5 不同学科分支与主题学科之间的关系

表 2 不同尺度的过程系统工程特征的比较

宏观制造系统	微制造系统	纳米制造系统
制造尺寸、拓扑形态及位置精度	以毫米为单位;单元操作的拓扑形态取决于成本与安全	以微米为单位;位置准确度可达微米;组态主要考虑空间利用和过效率
加工材料特征	以大批量平均性质为特征;使用加工液体和固体的本体性质就足够	几纳米至几百纳米;组态以总系统功能为主要考虑,位置准确度达到几埃到几百纳米
设计哲学及制造	基于“自上而下”的递阶策略;制造也是通过“自上而下”人/机控制建设	只要关键尺寸达 10 个分子以上,连续性假设依然适用。但超分子单元操作只能基于原子及分子组态,而不能基于本体性质
运行控制架构	时间常数为分钟;操作周期以小时计。控制系统为多变量中央控制或分布控制回路+中央协调	只能通过自由地和/或有引导地“自下而上”的分子和超分子自组织建造纳米系统(Bottom-Up)
	时间常数为秒;操作周期以分钟计。控制系统为多变量中央控制或分布控制回路+中央协调	时间常数为微秒;操作周期以秒计。主要控制机理为自适应、自整定

这种不同尺度方法的研究进入了复杂系统多尺度研究的领域^[42-44]。虽然过程系统是多层次、多尺度的,但多数并非“复杂系统”,可是纳米过程系统工程则由于其自组织、自装配的特点使之成为典

型的“复杂系统”。这样一来,把不同时空尺度下的现象关联起来就成为系统集成中的重要问题。正如李静海、郭慕荪等指出的那样^[41-42],这就需要找到时空的和解方案(Compromise),了解时空尺度变化时

其主导作用的机理不同的相互妥协办法,还应了解变量在时空平均数值时与局部瞬间数值之间的关系。

5 结语

不断向微观世界深入了解,开发微观尺度过程系统的新特性是20世纪末和21世纪初科学技术创新的重要方向,过程系统工程学科也是这样。在这个发展方向上,要区别微过程系统和纳米过程系统2种不同的特点,如果说前者还可以看作是老核心学科-化学工程的延伸的话,那么后者则是与老核心学科只有松散联系的全新科学分支。

随着微化工系统和纳米过程系统的迅速发展和日益商业化,急需过程系统工程理论、方法论和工具的创新,以便能对这些微小世界的科研和商业生产发展起到理论指导作用。

参考文献

- [1] Hegedus L L. Chemical engineering research of future: An industrial perspective[J]. *AIChE Jour*, 2005, 51(7): 1870 - 1871.
- [2] Roco M C. Nanoscale science and engineering: Unifying and transforming tools[J]. *AIChE Jour*, 2004, 50(5): 890 - 897.
- [3] Ottino J M. New tools, new outlooks, new opportunities[J]. *AIChE Jour*, 2005, 51(7): 1840 - 1845.
- [4] Genskow L R. Challenges and opportunities in process innovation, proceedings of 16th ESCAPE and 9th Intern Symp On PSE[C] // Marquardt W, Pantelides C. Amsterdam: Elsevier, 2006: 45 - 55.
- [5] Charpentier J C. The triplet "Molecular Processes-Product-Process" engineering: The future of chemical engineering[J]. *Chem Eng Sci*, 2002, 57: 4667 - 4690.
- [6] Gavrilidis A, Wan Y S S. Technology and applications of micro engineering reactors[J]. *Trans IChemE*, 2002, 89 Part A(1): 3 - 30.
- [7] Jensen K F. Microchemical systems: Status, challenges, and opportunities [J]. *AIChE Jour*, 1999, 45(10): 2051 - 2054.
- [8] Mae K. Advanced chemical processing using microspace[J]. *Chem Eng Sci*, 2007, 62: doi:10.1016/j.ces.2007.01.012.
- [9] 陈光文, 袁权. "微化工系统"展望 21 世纪的化学工程[M] // 中国科学院化学学部, 国家自然科学基金会化学部. 北京: 化学工业出版社, 2004: 57 - 71.
- [10] Kikutani Y, Ueno M, Hisamoto H, et al. Continuous-flow chemical processing in 3-dimensional microchannel network for on-chip integration [J]. *QSAR Comb Sci*, 2005(24): 742 - 757.
- [11] Roberge D M, Ducry L, Bieler N, et al. Microreactor technology a revolution for the fine chemical and pharmaceutical Industries[J]. *Chem Eng Technol*, 2005, 28(3): 318 - 323.
- [12] Boswell C. Microreactors gain new use as alternative to batch production [J]. *Chem Market Report*, 2004, 266(11): 8 - 10.
- [13] 李斌. 微反应器技术在精细化工中的应用[J]. *精细化工*, 2006, 23(1): 1 - 7.
- [14] Schwalbe T, Kursawe A, Sommer. Application report on operating cellular process chemistry plants in fine chemical and contract manufacturing industries[J]. *Chem Eng Technol*, 2005, 28(4): 408 - 419.
- [15] Kaisare N S, Lee J H, Fedorov A G. Hydrogen generation in a reverse-flow microreactor: I. Model foundation and scaling[J]. *AIChE Jour*, 2005, 51(8): 2254 - 2265.
- [16] Jensen K F. Microreactor engineering: Is small better[J]. *Chem Eng Sci*, 2001, 56: 293 - 303.
- [17] Wenner B V, Hessel V, Lob P. Mixers with microstructured foils for chemical production purposes[J]. *Chem Eng Technol*, 2005, 28(4): 401 - 407.
- [18] 骆广生, 陈桂光, 徐建鸿, 等. 微混合技术: 颗粒材料制备的关键之一[J]. *现代化工*, 2004, 24(7): 17 - 19.
- [19] 骆广生, 徐建鸿, 李少伟, 等. 微结构设备内液-液两相流行为研究及其进展[J]. *现代化工*, 2006, 26(3): 19 - 23.
- [20] 马友光, 付涛涛, 朱春英. 微通道内气液两相流行为研究进展[J]. *化工进展*, 2007, 26(8): 1068 - 1074.
- [21] 涂善东, 周帼彦, 于新海. 化学机械系统的微小化与节能[J]. *化工进展*, 2006, 25(5): 563 - 574.
- [22] Hessel V, Lowe H. Microchemical engineering: Components, plant concepts user acceptance: Part I [J]. *Chem Eng Technol*, 2003, 26(1): 13 - 24; Part II, 2003, 26(4): 391 - 428; Part III, 2003, 26(5): 531 - 544.
- [23] Pfeiffer A J, Siirola J D, Hauan S. Optimal design of microscale separation system using distributed agents, foundations of computer-aided process design (FOCAPD 2004)[C]. Austin, Texas: CACHE, 2004.
- [24] Chow A W. Lab-on-a-chip: Opportunities for chemical engineering[J]. *AIChE Jour*, 2002, 48(8): 1590 - 1595.
- [25] Delsman E R, de Croon M H J M, Schouten J C. The influence of differences between microchannels on microreactor performance[J]. *Chem Eng Technol*, 2005, 28(8): 367 - 375.
- [26] Rebrov E V, Ismagilov H Z. Header design for flow equalization in microstructured reactors[J]. *AIChE Jour*, 2007, 53(1): 28 - 38.
- [27] Tonkovich A, Rogers A. Microchannel technology scale-up to commercial capacity, trans: *IChemE Part A* [J]. *Chem Eng Res and Design*, 2005, 83(A6): 634 - 639.
- [28] Tonomura O, Hasebe S. Systemic Procedures for Designing a Microreactor with Slit-type Mixing Structure, Proceedings of 16th ESCAPE and 9th Intern Symp On PSE[C] // Marquardt W, Pantelides C. Amsterdam: Elsevier, 2006: 823 - 828.
- [29] Hasebe S. Design and integration of microchemical plants, proceedings of 8th Intern Symp On PSE[C] // Westerbug W, Chen B Z. Amsterdam: Elsevier, 2003: 89 - 100.
- [30] Bayer T, Jenck J, Matlasz M. IMPULSE: A new approach to process design[J]. *Chem Eng Technol*, 2005, 28(4): 431 - 438.
- [31] Kothare M V. Dynamics and control of integrated microchemical systems with application to microscale fuel processing[J]. *Comp & Chem Eng*, 2006, 30: 1725 - 1734.
- [32] Palusinski O A, Vrudhula S. Process control for microreactors[J]. *Chem Eng Progr*, 2001, 97(8): 60 - 66.

流体间混合,公式(3)可知,混合时间 t 与通道尺度平方成正比。通道特征尺寸减小不仅能大大提高比表面积,而且能大大强化过程的传递特性。

$$Nu = hd/k = 3.66 \quad (1)$$

$$Sh = k_c d/D_{AB} = 3.66 \quad (2)$$

$$t = d^2/D_{AB} \quad (3)$$

其中 Nu 为努塞尔数、 Sh 为谢伍德数、 D 为扩散系数。

化工过程中进行的化学反应受传递速率或本征反应动力学控制或两者共同控制。就瞬时和快速反应而论,在传统尺度反应设备内进行,受传递速率控制,而微尺度反应系统内由于传递速率呈数量级提高,因此这类反应过程速率将会大幅度提高;如氧碘化学激光器中的激发态氧发生器(氯气与双氧水碱溶液反应)^[6]、烃类直接氟化^[7]。慢反应主要受本征反应动力学控制,其实现过程强化的关键手段之一在于如何提高本征反应速率,通常可采用提高反应温度、改变工艺操作条件等措施;而中速反应则由传递和反应速率共同作用,也可采取与慢反应过程类似的措施。目前工业应用的烃类硝化反应大多属于中慢速反应过程,反应时间在数十分钟至数小时,在微反应器内可采用绝热硝化并同时改变工艺条件可使反应时间缩短至数秒。因此,从理论上分析几乎所有反应过程皆可实现过程强化。

2 微化学工程与技术发展现状与趋势

20世纪50年代末,著名的物理学家 Richard Feynman 曾预言,微型化是未来科学技术发展方向。

在各种时空尺度内,半个多世纪来的自然科学与工程技术发展的一个重要趋势是微型化,尤其是计算机为代表的信息技术的更新换代和微机电系统(MEMS)的发展已将“微型化”观念渗透到人类生活和工作的各个领域,并对人类文明进程产生重大的影响。

20世纪80年代初,Tuckerman 和 Pease 首次提出了“微通道散热器”的概念,成功地解决了集成电路大规模和超大规模化所面临的“热障”问题。1985年 Swift 等首先研制出用于2种流体热交换的微尺度换热器。20世纪90年代初,“微反应技术”概念就迅速引起发达国家的研究机构和大公司的关注,美国、德国、英国、法国、日本等重要的研究机构、高校以及许多大化工公司(如 DuPont、Bayer、BASF、UOP 等)相继开展了微化学工程与技术的研究。自1997年开始,每年举办一届以“微反应技术”为主题的国际会议;2003年4月召开首届“微通道和小通道”国际会议。

DuPont 公司的中心研究室于1993年利用微电子加工技术制造了首个芯片反应器,用于生产甲基异氰酸甲酯(MIC)和氰氢酸等有毒物质,预计该微反应器可年产18 t MIC。德国政府于2001年批准的微反应技术在工业过程中应用的示范项目(DEMIS™)及欧盟第六框架所实施的 Impulse 计划,旨在加速推进“微反应技术”的实用化进程。日本也非常重视这一技术,日本政府在2000年制定的“国家产业技术战略”中已把微反应器技术列为新的化工技术之一优先加以资助,同时成立国家级的研究

(上接第7页)

[33] Kano M, Hasebe S. Data-based and model-based blockage diagnosis for stacked microchemical processes[J]. Chem Eng Sci, 2007, 62: 1073 - 1080.

[34] Stephanopoulos N, Solis E O P, Stephanopoulos G. Nanoscale process systems engineering: Toward molecular factories, synthetic cells, and adaptive devices[J]. AIChE Jour, 2005, 51(7): 1858 - 1869.

[35] Reed C A. Molecular architectures, accounts of chem[J]. Research, 2005, 38(4): 215 - 216.

[36] Amaral L A N, Ottino J M. Complex systems and networks: Challenges and opportunities for chemical and biological engineers[J]. Chem Eng Sci, 2004, 59: 1653 - 1666.

[37] Charpentier J C, McKenna T F. Managing complex systems: Some trends for future of chemical engineering[J]. Chem Eng Sci, 2004, 59: 1617 - 1640.

[38] Westerhoff H V. Systems biology and silicon cell: Order out of Chaos,

Proceedings of 16th ESCAPE and 9th Intern Symp On PSE[C]// Marquardt W, Pantelides C. Amsterdam: Elsevier, 2006: 81 - 93.

[39] Hosseini M W. Molecular tectonics: From simple tectons to complex molecular networks[J]. Accounts of Chemistry, 2005, 38(4): 313 - 323.

[40] Kinbara K, Aida T. Toward intelligent molecular machines: Directed moyions of biological and artificial molecules and assemblies[J]. Chem Rev, 2005, 105(4): 1377 - 1400.

[41] Floudas C A. Research challenges, opportunities and synergism in systems engineering and computational biology[J]. AIChE Jour, 2005, 51(7): 1872 - 1884.

[42] Li J, Kwauk M. Exploring complex systems in chemical engineering: The multiscale methodology[J]. Chem Eng Sci, 2003, 58(3/4/5/6): 521 - 535.

[43] 郭慕荪. 化学工程的多层次结构[J]. 中国科学: B 辑化学, 2006, 36(5): 361 - 366.

[44] Li J, Zhang J, Ge W, et al. Multi-scale methodology for complex systems [J]. Chem Eng Sci, 2004, 59: 1687 - 1700. ■