

国外动态

醛类捕捉/减量剂

日本东亚合成(東亞合成)公司开发了降低甲醛、乙醛等挥发性有机化合物(VOC)含量效果明显的醛类捕捉剂“KESMON”NS-231,并于2005年11月开始上市。

KESMON NS-231是采用无机功能材料的精密合成及复合化技术开发出来的,对日常生活中存在的多种臭气具有强力的消除效果。原理是与其与臭气进行化学反应,具有即效性,可在短时间内除去氨类气体(氨气等)、酸性气体(醋酸等)、醛类气体(甲醛、乙醛等)、含硫气体(二氧化硫、硫醇)等各种臭气。另外对用通常方法难以除去的低浓度臭气也很有效,消臭容量大,持续性好。一般认为乙醛比甲醛更难除去,KESMON NS-231比以往醛类消臭剂的消臭容量大10倍以上,对2种醛的除臭效果均很显著。将这种消臭剂添加到车内各部件中,对一般认为很难消除的乙醛有很强的消除效果,该公司现在正在开发耐热性高的产品。向臭气测定仪中加入0.1g KESMON NS-231及1L乙醛气体,5min后测定乙醛体积分数由开始的 1.1×10^{-4} 降低到检出极限 2.0×10^{-7} 以下。将KESMON NS-231和各种KESMON产品组合,除乙醛外,能降低烟臭等多种臭气的浓度,还可用于空气过滤器、空气净化器等中。

化学工業時報(日),2005(2583):5

重油加氢裂解工艺工业化

美国犹他州Headwaters公司在一直未透露的炼油厂进行专有的重油加氢裂解[称为(HC)3]工艺的工业规模试验。2005年早期该公司就开始为加拿大的西北Upgrading公司的重油加氢裂解工艺进行基础工程设计。西北Upgrading公司计划于2010年开始在Alberta地区建一重油改造项目,Headwaters公司的(HC)3工艺是该项目设计的一部分。(HC)3工艺是在气-液相反应器中将原油(渣油)中的重组分催化加氢裂解成洁净的轻组分,然后再加工成汽油、航空燃油和柴油。

现在,先进的加氢裂解工艺是用固体催化剂催化加氢,能够加工渣油的数量和最终产品的质量受固体催化剂物理结构的限制。例如,多数重油原料中的主要组分沥青质化合物不是尺寸大得难以进入催化剂的孔隙中,就是陷在孔隙中,从而使催化剂失活。

为了避免负载型催化剂的这些缺点,(HC)3工艺使用的是同一类金属纳米分散体催化剂,这种油溶性的(HC)3催化剂与进入加氢反应器前的渣油混合得很好。与现用的固体催化剂工艺相比,新工艺由于省却了固体催化剂所需的添加、监控和排放等装置,资金投入应该是比较低的,这是因为沸腾床、三相反应器体系的两相(气-液)体系操作比较简单。Chemical Engineering,2005,112(12):13

流化床褐煤气化器的能源效率得以提高

使褐煤达到最好的能源效率和环境性能的路线之一是将褐煤在流化床(FB)气化器中气化。褐煤是蕴藏在世界各地的丰富而廉价的燃料,然而有些产地如澳大利亚产的褐煤的气化在技术上就有些困难。澳大利亚的褐煤质地特别软,从而其中的细颗粒(直径小于 $100 \mu\text{m}$)比较多,所以气化器的设计要尽量减少未转化炭的损失,未转化炭以淘析灰的形式自装置中排出,故严重地影响其转化率。

由澳大利亚CSIRO矿物公司Seng Lim领导的研究小组与澳大利亚“合作研究中心”(CRC)共同从事的从褐煤制取清洁能源的研究工作已经成功地提高了中试规模的流化床气化器的操作效率。该流化床气化器每小时能加工250kg褐煤,操作压力1MPa、温度 1000°C ,用的是流体动力学物理模型。用CSIRO矿物公司建立的气化器冷流模型能够研究流化床内发生的流体动力学现象,特别是细颗粒的行为。

该中试规模的气化器物理模型已被成功应用于优化气化器的实际操作,为控制气化器中细颗粒的行为提供了很好的方法。细粉循环装置的改进使旋风分离器的细颗粒损失明显减少,促使更多的细颗粒滞留在反应区内。该研究小组运用许多试验技术分析了细颗粒在流化床气化器中的行为(如停留时间的分布),如运用磁铁随动取样结合分析技术

对其进行了研究,研究了各种构型的气化器(其中包括不同的细颗粒重新送入的位置和上升管中吹入次级空气通风管的类型)。

根据工厂数据和流程计算可以预计,气化路线的总效率可从普通粉化细颗粒(PF)沸腾反应器的效率25%提高到约45%。

Chemical Engineering,2005,112(12):14

连续生产可生物降解、可食用的牛奶蛋白膜

美国东部地区研究中心的农业研究服务部(ARS)开发出酪蛋白(一种牛奶蛋白)生产膜的连续工艺。这种可食用、防水的膜可用于包覆奶制品如奶酪,或作为包装酸奶或其他奶制品层合材料的一部分。研究人员称,也可向该膜中加入香精、维生素或矿物质以增加香味和营养。

该工艺方法是先用高压(5.5MPa)二氧化碳于 38°C 下从牛奶中提取酪蛋白,随即将酪蛋白与水 and 甘油混合后进行干燥,生成防水的、柔软的膜。目前一座中试装置已经建成,该装置能将溶液分布在合适的传送带上,将物料干燥成容易剥落的膜。ARS已经申请了该连续生产工艺的专利,正在寻找进行工业化的合作伙伴。

Chemical Engineering,2005,112(12):16

节省废水处理费用的新工艺

废水净化工艺中广泛使用的活性淤泥法是通过培养一种棕色、絮凝微生物消耗废水中的有机污染物,细菌消耗了污染物后结成球状絮凝物沉降到水处理槽的底部。此方法对净化污水高度有效,但有时淤浆中丝状细菌会生成网状物阻止淤泥的沉降,甚至会迫使装置停车进行清理。活性淤泥法的另一重大问题是细菌靠有机物生长,因消耗废料而迅速繁殖,这就需要过量的、要脱污的淤泥,从而增加排放淤泥的费用。

日本宇都宫(Utsunomiya)大学应用化学系酒井教授等向淤泥中添加了少许磁铁(Fe_3O_4)粉末来活化淤泥,解决了上述2个问题。当淤泥中的细菌消耗有机物料时也吸收磁铁,生成所谓的磁性活化淤泥。磁性活化淤泥粘附到处理槽顶部的磁性转鼓上,分离速率比在活性淤

泥方法中使用的重力分离速率快 100 倍。活性淤泥从转鼓上刮下回用于水处理。添加了磁性装置还能使该研究组更准确地确定工艺条件(如细菌的浓度),以避免产生过量的淤泥。

C&EN, 2005, 83(50):10

用微射流反应器合成医用成像剂

微射流反应器在医学上有潜在的用途,但微射流反应器中在进行多步操作时往往会被交叉污染、副反应、收率低等问题所困扰。美国斯坦福大学(Stanford University)和加利福尼亚大学(University of California)的学者用压力驱动的一体化微型阀门解决了此问题,在只有一枚硬币(便士)大小的微射流反应器中进行了多步合成,生产出高质量的产品,且收率很高。

该研究组用此器件合成了在正电子层析 X 射线摄影(PET)法成像中最常用的试样 2-[18F]-脱氧-D-葡萄糖([18F]FDG),收率和纯度都很高,而且比普通合成方法用的时间短。

生产[18F]FDG有5步化学反应:浓缩放射性的氟化物,将溶剂从水变换成乙腈,将试样的前驱体进行氟化,将溶剂变换成原来的水,将氟化的中间体进行酸解。该研究组用微射流反应器可以使用更高浓度的放射性同位素,从而使反应速率比普通合成方法的速率快。浓缩放射性同位素的离子交换柱是基片上一个新的部分。

C&EN, 2005, 83(51):13

日本增强其在新加坡的聚苯醚树脂生产能力

日本旭化成化学(旭化成ケミカルズ)公司和三菱气体化学(三菱ガス化学)公司在新加坡增强了变性聚苯醚(PPE)树脂原料 PPE 粉末的生产能力。

变性 PPE 树脂具有优良的耐热性、阻燃性、尺寸稳定性、机械特性等,它以家电、办公自动化(OA)产品、汽车产品的顺利发展为背景,以亚洲为中心,需求不断扩大。此次的生产能力增强地是在旭化成化学公司的 100% 子公司,即:生产 PPE 原料 2,6-二甲基苯酚和变性 PPE 树脂的旭化成塑料新加坡(以下简称 APS)公司以及 APS 与三菱气体化学公司的联合公司聚二甲基苯酚新加坡(以下简称 PXS)公司,变性 PPE 树脂原料

PPE 粉末的生产能力增强了 9 000 t/a, 预计于 2006 年 7 月装置开工,由此实现 PPE 粉末的生产能力为 39 000 t/a。

化学工業時報(日),2006(2585):4

环境对应型阻燃对苯二甲酸聚丁烯酯树脂

日本ポリプラスチック公司和ウインテックポリマー公司开发了一种不使用卤素的阻燃对苯二甲酸聚丁烯酯(PBT)树脂。它能够与 WEEE/RoHS 指令等相协调,该指令是面向电气电子器件材料所制定的环境与安全法规。除具有和以往的阻燃 PBT 同等的机械特性外,该树脂还实现了高水平的阻燃性和耐漏电性。

针对树脂的使用条件,此次开发的阻燃 PBT“ジュラネックスXFR 系列”采用了性能稳定、环境风险也低的磷系阻燃剂和阻燃配方,实现了 600~400 V 的 CTI 指数(表示漏电难以发生),长时间紫外线照射时所发生的黄变现象也大大减少。因此,除了代替溴系阻燃剂 PBT 和热固化性树脂外,还可开发其新用途。

工業材料(日),2006,54(1):14

能用全塑料、轧辊生产的薄膜液晶板的试制

日本新一代移动用途显示材料研究联盟(TRADIM)开始试制能用全塑料、轧辊生产的薄膜液晶板,并进行技术评价。由于已经完成了彩色过滤器、背光灯组件等主要部件的生产,所以改变了最初的样品供给计划,用参与企业 NEC 的技术,保留自己独有的板特性数据。

该薄膜液晶板由玻璃基板和 30 层膜构成,TRADIM 的目的在于将膜基板的 5 层结构变成轧辊生产。进入 2005 年,参与企业中的 JSR、住友ベークライト、大日本印刷公司开发了彩色过滤器,クラレ公司和东亚合成(東亜合成)公司开发了背光灯组件,偏光、位相差部件等也大致开发完成。重叠共 5 层 4 部件,用电路图案化和晶体管设置制作小型液晶板,用于今后收集、评价电气特性、图像表示特性、寿命等的的数据。如果该技术完成,那么就可将其应用于更加轻薄的手机显示器和电视等中。

工業材料(日),2006,54(1):15

可供液体和气体的微量泵

日本日机装(日機装)公司开发了一种泵,该泵不仅能供给液体,也可以供给气体,其流量是 1 $\mu\text{L}/\text{min}$,可根据驱动频率来加以控制。它是面向医疗领域装置而开发的,驱动电压是 120 V,功率 10 μW ,外形尺寸 22 mm \times 16.5 mm \times 4 mm。

此次开发的微量泵使用压电元件,把流量孔板驱动到上方,吸完液体和气体后,再驱动到下方,如此将液体和气体供给输出侧。流量孔板由单晶硅制造,周边部分用玻璃基板覆盖。此外,在流量孔板上没有压电元件,使用微电子机械系统(MEMS)技术形成微量泵,在称为微量流体设备的芯片上的微小流路内还可进行分析。

工業材料(日),2006,54(1):15

氯乙烯/丙烯接枝树脂

日本カネカ公司成功开发了在氯乙烯主链上接枝聚合丙烯酸酯系聚合物的新型氯系丙烯接枝共聚树脂(ブリクトマー),该产品兼有氯乙烯和丙烯系树脂的特性,即使不添加增塑剂也能够得到和半硬质、软质氯乙烯相同的物性。

制造氯乙烯和其他树脂的共聚合物时常用醋酸乙烯酯、聚氨酯、乙烯等单体和氯乙烯单体发生自由基聚合,因为氯乙烯单体和其他单体的反应性不同,属于无规则共聚体,氯乙烯单体和单独聚合体等的混合构成不能得到完全的接枝乃至块状共聚树脂。カネカ公司开发的技术是让反应性丙烯酸酯系聚合物和氯乙烯单体共聚,在氯乙烯主链上完全地接枝聚合丙烯酸酯系聚合物。与以往的氯乙烯树脂相比,接枝聚合有丙烯酸丁酯聚合物的树脂特征在于:熔融流动性高,有优良耐热性、耐候性;具有微相分离结构,有透明感的成形品。该产品不破坏氯乙烯特有的透明性、阻燃性和成形性等性质,即使在室外使用也不易发生黄变现象,强度很难下降,所以可应用于从硬质到软质的片材或薄膜中。

化学工業時報(日),2006(2584):2

生物体外的软骨再生技术

日本物质与材料研究机构(物質・材料研究機構)生物体材料研究中心采用使微小重力发生的特殊旋转培养装置,

将骨胶原作为细胞平台原料,在生物体外以自由的形式取得了软骨再生的成功。

根据旋转培养法,该中心已经开发了如下技术:在微小重力环境下,使细胞自由悬浮于培养液中并充分集合,形成三元组织。从兔子骨髓细胞,在生物体外构筑大型的软骨组织,但是很难控制其形状,并且在组织内部存在斑点。为了构筑可能均质成形的软骨,该中心试验了各种各样的细胞平台原料,在此过程中发现了骨胶原,利用它能得到形状可控且均质的软骨组织,通过短时间的培养可获取充分的力学强度,提高了其在医学应用的可能性。

化学工業時報(日),2006(2584):3

蒸汽隔离性多元乳酸瓶

日本塑料容器制造、销售商平和和化学工业所(平和化学工業所)和ユニチカ公司共同开发了以从バイオマス提取的多元乳酸树脂(テラマック)为主要成分的具有蒸汽隔离性瓶(商品名为バイオマス瓶),由多元乳酸树脂和通用树脂的多层构造构成。由于其蒸汽隔离性比用多元乳酸树脂单独材料做成的瓶子高约 8 倍,从而使其在各种食品、药品等的保存容器的实用化成为可能。

バイオマス瓶因为使用 70%(质量分数)以上的多元乳酸树脂,所以在削减了化石资源使用量的同时,减少了焚烧处理时 CO₂ 的产生量。所开发的容器内表面是聚苯乙烯等石油系通用树脂,外表面重叠了多元乳酸等的多层构造。以往,以多元乳酸为主的生物分解性塑料由于缺乏气体隔离性,阻碍了其在食品、化妆品等容器和包装材料领域的应用。尽管多元乳酸是疏水性的,但是具有高蒸汽透过性,因此不能作为有湿气产品的容器包装。

新产品的瓶子用直接吹气法成型,通过选择具有吹气成型加工性优良的树脂组合物,使该瓶具有下述性能,即:落下强度、スクイズ性、耐久性和耐候性等,并且成本也可以控制在以往的 PET 瓶的 2 倍左右。

化学工業時報(日),2006(2585):5

用于沙特阿拉伯的海水淡化设备中心的逆浸透膜模块

据日本东洋纺(東洋紡)公司最近报

道,建于沙特阿拉伯ラービグ地区(红海沿岸)海水淡化设备中,采用了该公司的逆浸透膜模块(ホロセップ)。

这种淡化水设备是在 2005 年 8 月三菱重工(三菱重工業)公司和丸红、日挥、伊藤忠商事等企业联合体(其目的在于:向住友化学公司和沙特アラモコ公司的联合公司、ラービグ、リファインング、アンド、ペトロケミカル公司供给电力、水、蒸汽)交换了正式合约后建设的,其海水淡化能力(包括正在建设中的装置能力在内)在中东海岸诸国中是最大的。该逆浸透膜模块日产量是从海水淡化 20.5 万 m³ 的淡水。设备的开工时间为 2006 年 1 月,商业运转时间预计为 2008 年 6 月。该逆浸透膜模块使用了由三醋酸纤维制中空膜,该膜具有氯素杀菌性,能防止微生物、藻类的繁殖,且具有优良的耐久性,在国内外有很多的运营业绩。在海外,在沙特阿拉伯ヤンブ市(日产量 12.8 万 m³)、ジェッグ市(日产量 11.4 万 m³)等的海水淡化设施中被采用。通过这次应用,在中东地区该公司的海水淡水膜的市场占有率在 50% 以上。此外,国内的“海之中道奈多海水淡化中心”(2005 年 6 月开始,国内最大规模的公司,日产量 5 万 m³)也采用该模块。

化学工業時報(日),2006(2585):5

用于液晶显示器的更亮的极化膜

现在,用碘或其他化合物吸附在聚乙烯醇(PVA)上的光吸附型极化膜占据着液晶显示器极化膜市场,但其透光率上限只有 50%,故需要用其他的膜来提高光线的弥散性和亮度。

日本旭化成(Asahi Kasei)公司开发出一种液晶显示器用的、能显示更明亮图像的极化膜,该公司计划在 2006 年 4 月后提供 A4 纸大小的样品膜,2007 年 4 月后将其工业化。

该公司计划先以小型和中型的液晶显示器市场为第一目标,并寻找其在大型液晶显示器和其他方面的应用,因为生产过程适宜于大规模生产。

该线-栅格式新产品是用塑料薄膜制作的,薄膜表面画有间距约为 120 nm 的铝线。与现用的以碘调节亮度的极化膜相比,新膜的亮度更高,能使液晶显示器更加明亮。该极化膜对光谱中的蓝色

部分也具有很高的极化度。

这是第一次用塑料薄膜制作线-栅格式极化膜,迄今为止极化膜一直是利用有细铝线的玻璃底板制作的。该公司没有透露新膜的生产工艺,但暗示没有使用照相法,故生产成本比较低,容易制作用于大尺寸液晶显示器的极化膜。

JCW,2005,46(2346):3

高性能极化膜

日本 Kuraray 公司开发出一种聚乙烯醇(Poval)极化膜(商品名为 VF-PE),其特点是比普通的膜具有较大的延伸性和相当好的光学性能。该公司于 2005 年 12 月初试售了样品,2006 年春开始进行工业生产。

该 Poval 膜是聚乙烯醇与一种疏水性单体的共聚物。该公司称,以 VF-PE 为原料能够制得具有较高导电性能、同时能提高电视图像对比度达 10%~20% 的极化膜。以 Poval 膜为基本成分的极化膜,其特点是透明度高,染色亲和力好,抗静电性和延伸性好。但是要用其生产更薄、更宽和高清晰度的电视屏幕,则上述特点还需加强。

Poval 膜的极化性能通常是用强化聚合过程和增加其延伸性的方法来获得的,但是聚合度高就会影响其延伸性。Kuraray 公司针对此问题成功地在聚合时将疏水性单体接在聚乙烯醇主链上,从而使聚乙烯醇具有明显的极化性和延伸性。

JCW,2005,46(2347):4

可调节温度的内衣

日本住友 3M 公司推出了一种合成棉质内衣织物,它能吸收身体在温度高时放出的多余热量,而在温度低时又将热量释出,从而能控制在冬季穿着的外套里的温度。该公司计划第一年销售额能达到 1 亿日元(83 万美元)。

该织物是丙烯酸树脂织物,其缝隙中有直径为 2~3 μm、内部装有石蜡的微胶囊。石蜡吸收身体多余的热量后从固相转变成液相,释放出蓄积的热量后又变成固态。

新的织物是将美国 Outlast 技术公司开发的高性能织物与住友 3M 公司生产非织造布的技术相结合而生产的,可用于商业性的、临时性的衣着或运动衣。

JCW,2005,46(2348):2

遇热收缩的物质

日本物理与化学研究所(RIKEN)的一个研究小组开发出一种随温度升高而显著收缩的物质,研究人员称之为“负热膨胀”。预期此物质能用在精密器件和需要避免热膨胀的元件方面。

新物质是非钙钛矿结构的氮化锰(Mn_3XN),在X位上的一些锌和镓原子被锗所取代。此物质于室温附近显示出连续的、明显的负热膨胀性,其负热膨胀率比具有同样性质的现有物质要大好几倍。研究人员称,随温度升高而产生的热收缩程度可以通过变更物质的成分及成分的比例来控制。

此物质是将一种X位上20%~70%的锌和镓原子替换成锗的物质与另一种X位上的锌和镓原子全部替换成锗的物质相混合,然后将混合物烧结制得的。这样制备的产品如同金属一样具有很高的导电性和导热性,它还有比铝和铁要高得多的机械强度。

JCW,2005,46(2348):3

高浓度一氧化碳中使用的 燃料电池电极

由日本Saitama工业研究所和Ecodevice公司的研究人员组成的研究小组开发出一种新的、能够在高浓度一氧化碳(CO)中产生足够电力的燃料电池电极。他们认为该电极能够在聚合物电解质燃料电池中工作,并将测试其长期稳定性,使电极能得到实际应用。

现有的燃料电池是用催化剂脱除CO对电极进行保护的,使电极不被CO破坏。而新电池的电极受到CO破坏后能在短时间内恢复其功能,即不需要使用脱除CO的催化剂。

此电极也像其他类似的电极一样使用铂催化剂,但它的催化剂层已经过特

殊处理。研究人员确定这种电极甚至在体积分数为0.1%的CO存在时也能很好工作,这一特性在类似的电极方面未见报道。

研究人员计划开发能经受体积分数为1%的CO的电极。使用这种电极可不必将作为燃料用的氢气进行精制,从而可以省去特殊的精制装置,也就节省为放置燃料电池所需的空间,因而能够节约成本。

JCW,2006,47(2353):3

可除去有机砷的新型土壤 处理系统

近来发现日本Kamisu地区的地下水受到污染及土壤受到有机砷化物的污染,故急需有新的土壤处理措施,以免因此造成有机砷环境污染。

日本国家先进工业科学与技术研究院(AIST)及三井工程与造船(Mitsui Engineering & Shipbuilding)公司共同开发出一种能从被剧毒物质污染的土壤中有用地提取出有机砷(主要是二苯亚砷酸)的技术,此技术使用了由低浓度磷酸和醇配成的清洗剂。研究人员确认此清洗剂能100%从土壤中除掉有机砷,且能循环回用;回收的有机砷的体积浓度低,故此技术能降低受污染土壤的处理费用。该研究院将进一步研究残留在土壤中极微量有机砷的控制浸出法,并计划研究出特定污染点的检验方法。

JCW,2006,47(2351):2

地下储存二氧化碳项目进入 第二阶段

日本地球创新技术研究所(RITE)将二氧化碳(CO_2)储存于地下水的项研究工作已进入第二阶段,接近实际应用。

2000—2004年的第一阶段工作中,研究人员在该研究所地处Teikoku油田Nagaoka矿的Iwanohara运作中心进行了

示范性试验,工作是研究 CO_2 注入地下蓄水层中的行为、机理及其模拟系统的开发。试验的监测工作全部完成,试验结果表明:注入地下蓄水层的 CO_2 累计达1万t,其他国家报道的数量以百万吨计。该研究所认为,即使考虑到日本复杂的地质条件,将 CO_2 注入蓄水层在技术上是可行的。

2005—2007年的第二阶段工作中,要组建6个研究组研究及测试以实际应用为目的项目各个方面。研究将包括:受压 CO_2 的监测、所需的技术装置、所需费用的计算、勘查全国能储存 CO_2 的蓄水层等。

JCW,2006,47(2351):5

碳纳米纤维

日本三菱材料(Mitsubishi Materials)公司的子公司Jemco公司开发出一种导电填料、一种涂料、一种以Jemco公司专有的多壁碳纳米管(MWNT)为原料的电池材料和薄片状的碳纳米纤维(CNF-P)。

这些新产品是用铁和钴等金属催化剂气相催化工艺合成的,结晶度很高,杂质少,比表面积也很小。在一种树脂组分中,即使只加少量由多壁碳纳米管分散的聚碳酸酯,也能使该树脂具有稳定的导电性且能使其质量不易变差。

含有多壁碳纳米管的模压制品具有很高的强度,当多壁碳纳米管均匀地分散在聚酯纤维中能提高聚酯纤维的强度,且可降低其电阻。也可将多壁碳纳米管分散到液体中,然后将液体涂覆于膜上得到透明的导电膜。Jemco公司已生产出各种各样含有多壁碳纳米管的溶剂。

在锂离子电池组件中使用CNF-P,可比现用的碳材料产生更大的功率和更好的电流特性。在个人计算机中CNF-P也具有充电和放电的可能性,这一点优于其他石墨材料。JCW,2006,47(2352):2

(上接第69页)

- [19] Morin C, Eichler A, Hirschl R, et al. DFT study of adsorption and dissociation of thiophene molecules on Ni(110)[J]. Surface Science, 2003, 540(2/3):474-490.
- [20] Liu Ping, Rodriguez J A, Mucherman J T. Desulfurization of SO_2 and thiophene on surfaces and nanoparticles of molybdenum carbide: Unexpected ligand and steric effects[J]. J Phys Chem B, 2004, 108:15662-15670.
- [21] Titiloye J O, Parker S C, Stone F S, et al. Simulation studies of the

structure and energetics of sorbed molecules in high-silica zeolites[J]. J phys chem, 1991, 95:4038-4044.

- [22] 王宁,袁文辉,毕怀庆. GCMC模拟法研究MFI型分子筛膜的吸附特性[J]. 材料科学与工程学报, 2004, 22(4):547-551.
- [23] 曹达图,高广图,汪文川. 巨正则系统Monte Carlo方法模拟甲烷在活性炭孔中的吸附储存[J]. 化工学报, 2000, 51(1):23-29.
- [24] 石灵娟,周函,代振宇. 几种典型硫化物在 MoS_2 晶面上吸附形式的研究[J]. 计算机与应用化学, 2004, 21(3):501-504.
- [25] 刘志平,黄世萍,汪文川. 分子计算科学—化学工程新的增长点[J]. 化工学报, 2003, 54(4):464-476. ■