



白春礼 杨 卫

17 世纪的科学革命使科学从普适的自然哲学走向分科深入，如今已发展成为一幅由众多彼此独立又相互关联的学科汇就的壮丽画卷。在人类不断深化对自然认识的过程中，学科不仅仅是现代社会中科学知识的组成单元，同时也逐渐成为人类认知活动的组织分工，决定了知识生产的社会形态特征，推动和促进了科学技术和各种学术形态的蓬勃发展。从历史上看，学科的发展体现了知识生产及其传播、传承的过程，学科之间的相互交叉、融合与分化成为科学发展的重要特征。只有了解各学科演变的基本规律，完善学科布局，促进学科协调发展，才能推进科学的整体发展，形成促进前沿科学突破的科研布局和创新环境。

我国引入近代科学后几经曲折，及至上世纪初开始逐步同西方科学接轨，建立了以学科教育与学科科研互为支撑的学科体系。新中国建立后，逐步形成完整的学科体系，为国家科学技术进步和经济社会发展提供了大量优秀人才，部分学科已进入世界前列，有的学科取得了令世界瞩目的突出成就。当前，我国正处在从科学大国向科学强国转变的关键时期，经济发展新常态下要求科学技术为国家经济增长提供更强劲的动力，创新成为引领我国经济发展的新引擎。与此同时，改革开放 30 多年来，特别是 21 世纪以来，我国迅猛发展的科学事业蓄积了巨大的内能，不仅重大创新成果源源不断产生，而且一些学科正在孕育新的生长点，有可能引领世界学科发展的新方向。因此，开展学科发展战略研究是提高我国自主创新能力、实现我国科学由“跟跑者”向“并行者”和“领跑者”转变的

一项基础工程，对于更好把握世界科技创新发展趋势，发挥科技创新在全面创新中的引领作用，具有重要的现实意义。

学科发展战略研究的核心是结合科学技术和经济社会的发展需求，在分析科学前沿发展趋势的基础上，寻找新的学科生长点和方向。在这个过程中，战略科学家的前瞻引领作用十分重要。科学史上这样的例子比比皆是。在1900年8月巴黎国际数学家代表大会上，德国数学家戴维·希尔伯特发表了题为“数学问题”的著名讲演，他根据过去特别是19世纪数学研究的成果和发展趋势，提出了23个最重要的数学问题，即“希尔伯特问题”。这些“问题”后来成为许多数学家力图攻克的难关，对现代数学的研究和发展产生了深刻的影响。1959年12月，美国物理学家、诺贝尔奖得主理查德·费曼在加利福尼亚理工学院举行的美国物理学会年会上发表了题为“物质底层大有空间——一张进入物理新领域的请柬”的经典讲话，对后来出现的纳米技术作出了天才的预见。

学科生长点并不完全等同于科学前沿，其产生和形成不仅取决于科学前沿的成果，还决定于社会生产和科学发展的需要。1841年，佩利戈特用钾还原四氯化铀，成功地获得了金属铀，可在很长一段时间并未能发展成为学科生长点。直到1939年，哈恩和斯特拉斯曼发现了铀的核裂变现象后，人们认识到它有可能成为巨大的能源，这才形成了以铀为主要对象的核燃料科学的学科生长点。而基本粒子物理学作为一门理论性很强的学科，它的新生长点之所以能不断形成，不仅在于它有揭示物质的深层结构秘密的作用，而且在于其成果有助于认识宇宙的起源和演化。上述事实说明，科学在从理论到应用又从应用到理论的转化过程中，会有新的学科生长点不断地产生和形成。

不同学科交叉集成，特别是理论研究与实验科学相结合，往往也是新的学科生长点的重要来源。新的实验方法和实验手段的发明，大科学装置的建立，如离子加速器、中子反应堆、核磁共振仪等技术方法，都促进了相对独立的新学科的形成。自20世纪80年代以来，具有费曼1959年所预见的性能、微观表征和操纵技术的

仪器——扫描隧道显微镜和原子力显微镜终于相继问世，为纳米结构的测量和操纵提供了“眼睛”和“手指”，使得人类能更进一步认识纳米世界，极大地推动了纳米技术的发展。

作为国家科学思想库，中国科学院（以下简称中科院）学部的基本职责和优势是为国家科学选择和优化布局重大科学技术发展方向提供科学依据、发挥学术引领作用，国家自然科学基金委员会（以下简称基金委）则承担着协调学科发展、夯实学科基础、促进学科交叉、加强学科建设的重大责任。继基金委和中科院于2012年成功地联合发布“未来10年中国学科发展战略研究”报告之后，双方签署了共同开展学科发展战略研究的长期合作协议，通过联合开展学科发展战略研究的长效机制，共建共享国家科学思想库的研究咨询能力，切实担当起服务国家科学领域决策咨询的核心作用。

基金委和中科院共同组织的学科发展战略研究既分析相关学科领域的发展趋势与应用前景，又提出与学科发展相关的人才队伍布局、环境条件建设、资助机制创新等方面的政策建议，还针对某一类学科发展所面临的共性政策问题，开展专题学科战略与政策研究。自2012年开始，平均每年部署10项左右学科发展战略研究项目，其中既有传统学科中的新增长点或交叉学科，如物理学中的软凝聚态物理、化学中的能源化学、生物学中生命组学等，也有面向具有重大应用背景的新兴战略研究领域，如再生医学、冰冻圈科学、高功率、高光束质量半导体激光发展战略研究等，还有以具体学科为例开展的关于依托重大科学设施与平台发展的学科政策研究。

学科发展战略研究工作沿袭了由中科院院士牵头的方式，并凝聚相关领域专家学者共同开展研究。他们秉承“知行合一”的理念，将深刻的洞察力和严谨的工作作风结合起来，潜心研究，求真唯实，“知之真切笃实处即是行，行之明觉精察处即是知”。他们精益求精，“止于至善”，“皆当至于至善之地而不迁”，力求尽善尽美，以获取最大的集体智慧。他们在中国基础研究从与发达国家“总量并行”到“贡献并行”再到“源头并行”的升级发展过程中，

脚踏实地，拾级而上，纵观全局，极目迥望。他们站在巨人肩上，立于科学前沿，为中国乃至世界的学科发展指出可能的生长点和新方向。

各学科发展战略研究组从学科的科学意义与战略价值、发展规律和研究特点、发展现状与发展态势、未来5~10年学科发展的关键科学问题、发展思路、发展目标和重要研究方向、学科发展的有效资助机制与政策建议等方面进行分析阐述。既强调学科生长点的科学意义，也考虑其重要的社会价值；既着眼于学科生长点的前沿性，也兼顾其可能利用的资源和条件；既立足于国内的现状，又注重基础研究的国际化趋势；既肯定已取得的成绩，又不回避发展中面临的困难和问题。主要研究成果以“国家自然科学基金委员会—中国科学院学科发展战略”丛书的形式，纳入“国家科学思想库—学术引领系列”陆续出版。

基金委和中科院在学科发展战略研究方面的合作是一项长期的任务。在报告付梓之际，我们衷心地感谢为学科发展战略研究付出心血的院士、专家，还要感谢在咨询、审读和支撑方面做出贡献的同志，也要感谢科学出版社在编辑出版工作中付出的辛勤劳动，更要感谢基金委和中科院学科发展战略研究联合工作组各位成员的辛勤工作。我们诚挚希望更多的院士、专家能够加入到学科发展战略研究的行列中来，搭建我国科技规划和科技政策咨询平台，为推动促进我国学科均衡、协调、可持续发展发挥更大的积极作用。



前 言

化学工程作为“揭示物质转化过程中质量传递、能量传递、动量传递以及分离和反应之间的内在关系，创建高效、清洁、节能、安全、经济的物质转化工艺和相关系统”的一门工程科学与技术学科，在一个多世纪的发展历程中，为人类社会的经济发展做出了巨大贡献！但随着“资源、环境、安全”等共性问题逐渐被社会普遍关注，以化学工程学科为主要支撑的化学与过程工业被贴上了“污染重”、“能耗高”、“危险大”等标签。因此，无论是节能减排，还是环境安全都急需化学工程学科新理论、新方法、新工艺、新装备、新技术的出现，变传统化工为“绿色”化工，在新的经济社会发展阶段，继续做出不可替代的重大贡献！

化工过程强化就是提高单位体积的反应、传热和传质的速率，最大限度发挥化学工艺系统（催化剂、工艺、装备等）全部潜能，实现化工过程的“更小、更快速、更安全、更便宜”，从而适应资源（原料）多样化、产品高值化、能量节约化、环境绿色化、过程安全化。因此，深入研究化工过程强化的科学内涵、系统分析化工过程强化的国内外研究现状以及强化途径和发展趋势、明确化工过程强化学科面临的主要问题与发展方向，不仅对化学工程学科的自身发展意义重大，而且对破解目前化学与过程工业发展面临的具体难题具有重要意义。

正是在这一重大需求背景下，国家自然科学基金委员会与中国科学院于2014年7月联合立项资助了“化工过程强化学科发展战略研究”项目。项目工作组在联合领导小组（张涛、段雪、何鸣元、田禾、张锁江、陈建峰院士）以及国家自然科学基金委员会化

学科学部五处孙宏伟、张国俊处长的直接领导下，先后于2014年9月18日、2014年11月26日、2015年10月28日、2016年2月26日、2016年9月10日分别在中国石油大学（北京）（3次）、中国科学院大连化学物理研究所、华南理工大学、天津大学召开了6次化工过程强化学科发展战略研究研讨会。明确了化工过程强化学科发展战略研究策略及工作进程；多次讨论并最终确定了化工过程强化学科的重点领域与方向；归纳总结出化工过程强化的四个重要途径和方法；提出了化工过程强化学科发展的具体建议与措施。研究的核心部分内容以“中英文摘要”形式集中呈现给广大读者，方便读者快速地从宏观层面对化工过程强化学科领域有一个相对全面的了解，对其总体把握学科发展全局方向有所裨益。

此外，本书还进一步提供了化工过程强化的四个重点领域方向——新材料（介质）强化、外场强化、核心反应器（装备）强化和过程耦合强化划分的具体过程强化的科学问题、强化方法与原理、强化应用实例等相关最新进展情况，以便从事具体相关研究和工作的读者更加深入系统了解化工过程强化的详细内容。

尽管尽量全面征求并尽可能反映化工学科主要研究专家学者的相关意见和思想，但由于学识及精力等限制，尚有不全面或不准确之处，望广大读者见谅。

感谢国家自然科学基金委员会给予的支持！感谢项目联合领导小组的具体指导和项目组全体成员的辛勤付出！感谢所有参与章节编写及会议研讨的专家学者给予的意见与建议！感谢科学出版社的帮助与支持！

张 涛

2017年8月



摘 要

本书围绕化工过程强化学科领域，阐述了化工过程强化的学科内涵及其重要性；梳理了化工过程强化的国内外研究现状、过程强化主要方法以及发展趋势；明确了化工过程强化面临的主要问题与挑战，并提出了今后发展的建议与措施。

一、化工过程强化的内涵与重要性

（一）化学工程学科的重要作用与新挑战

化学工程学科是运用自然或实验科学（如化学、物理）、生命科学（如生物学、生物化学）以及数学、经济学知识，实现化学品、原材料、能量的生产、转化、输运和合理使用的一门工程科学和技术学科。其核心内涵是揭示物质转化过程中质量传递、能量传递、动量传递以及分离和反应之间的内在关系，创建高效、清洁、节能、安全、经济的物质转化工艺和相关系统。其主要研究对象包括：能源和资源开发及高效利用、生物和制药过程、新材料开发和应用、物质合成与转化过程对环境影响以及减轻和消除环境污染的化学工程与技术等。

化学工程发展至今，对人类社会的工业发展做出了重大贡献。其服务领域也从传统的化学工业扩展到能源、材料、冶金、环境、生物、医药、食品等诸多进行物质与能量转化的过程工业，并不断与其他学科进行交叉融合，在满足国民经济发展的重大需求方面，所占据的地位和担当的角色举足轻重。目前，全国石油和化工行业有规模以上企业 28 652 家，全行业从业人数 600 余万人。2014 年我国石油和化学工业主营业务收入达 14.06 万亿元，其中，化学工业

主营业务收入达 8.76 万亿元，超过美国（美国化学品主营业务收入折合人民币 4.94 万亿元），居世界第一。目前，我国石油化工行业中有 20 多种产品的产量已经排名世界第一，如合成氨、化肥、纯碱、烧碱、电池硫酸、磷肥、农药和合成纤维等。

化学工业是以石油、煤炭、天然气、天然矿物、生物质等为原料生产农用化学品、有机和无机基本原料、合成材料、精细与专用化学品等多类产品的重要工业基础和支柱产业。化学工业的发展体现着一个国家的经济实力和整体技术水平。从国际上看，凡是化学工业实力强、技术水平高的国家基本是经济发达的国家，如美国、德国、日本、法国、英国、韩国；从国内来看，凡是化学工业强的地区大多是经济强省，如江苏、广东、山东、上海等。化工产品广泛用于工业、农业、人民生活等各个领域。它为农业生产提供化肥、农药和塑料薄膜等农用化学品；为能源工业（电力、交通、冶金和居民生活）提供天然气、液化气等燃料；为机械工业（航天、汽车、船舶、机械等）提供合成材料、涂料和胶黏剂等配套产品；为建筑业提供保温材料、建筑涂料、防火材料等建筑原材料；为军事工业提供军用化工产品；为人民生活提供各种相关的日用化学品等。据统计化肥对农业的增收大于 30%，化工材料特别是高性能材料为国家重大工程（大飞机、高速列车、嫦娥探月）以及电子工业、汽车工业、建筑领域等提供了不可替代的配套材料。化学工业还与七大战略新兴产业关系密切，节能环保、新材料、生物、新能源与化学工业也直接相关，新一代信息技术、高端装备制造、新能源汽车都离不开化学工业为其提供高性能材料。

化学工业在世界经济发展中也发挥着重要作用。例如，美国的化学工业是最大贸易盈余行业之一，是美国第三大制造业，其营业额占美国制造业营业额的 10% 左右，并成为全球最大的制造业部门之一。德国的化学工业是第四大工业部门，其营业额占整个加工工业的 10%，仅次于汽车制造业（20%）、机械制造业（13%）和电子工业（12%）。在世界贸易总额中，化工贸易是仅次于汽车贸易的第二大贸易领域。从一些发达国家的国际贸易情况看，化学工业的国际竞争力更强，占举足轻重的地位。例如，美国的化学品贸易

额在国家整体出口中仍维持领先地位，其出口额仅排在机械类产品之后，位于第2位；加拿大化学工业销售额中的3/4是靠出口获得；自2006年以来，德国化学产品出口额已经高于国内营业额；荷兰化工产品出口额占出口总额的20%，化工行业研发投入占研发总投入的25%；法国化学品（包括医药产品）出口额占化学工业销售额的60%。

经过多年快速发展，当前我国经济已经进入发展的新常态。经济增速换挡、发展方式转型、产业结构调整也造成企业发展中的阵痛，资源环境约束、产能供给过剩、成本上涨过快、产品价格下降等形成了市场倒逼机制，行业发展面临着一系列突出矛盾和挑战。此外，传统化学工业由于往往被贴上了“污染”“排放”“耗能”等标签，甚至出现了“谈化色变”的情况，发展遇到了前所未有的困难局面。总之，我国化学工业“大而不强”，国际竞争能力较弱，与世界化学工业强国相比还有较大差距。

1. 技术创新能力不足、科技竞争力不强

行业主要依靠劳动力成本优势获得市场竞争力，企业研发投入强度普遍不高，技术创新人才缺乏，以企业为主体的产学研协同创新体系尚未完全建立，造成技术创新能力不足，面临国外技术封锁和壁垒等制约。例如，我国40%以上的聚乙烯、聚丙烯等大宗高端合成树脂产品依赖进口，而普通树脂却产能过剩。因此，迫切需要由规模发展转向创新驱动发展，通过创新形成行业发展的新动力，取得新优势，加快“转方式、调结构”，转变以高投入、高消耗、低效率为主要特征的传统发展方式，努力走出一条资源节约型、环境友好型、绿色低碳的新型工业化路子，推动行业经济运行更有效率、更可持续发展。

2. 节能减排任务艰巨

化学工业能源消耗和污染物排放大，居工业部门前列。目前尽管部分行业的技术、装备有了很大的提高，但整体水平仍然较低，全行业达到国际先进水平的技术装备仅占1/3，能源利用率比发达国家平均低15%，一些产品单位能耗比发达国家高20%~30%。而

其中化工分离过程能耗约占产品加工总能耗的 70%。我国政府承诺到 2020 年，单位 GDP 二氧化碳排放降低 40%~45%。因此，只有加大技术创新力度，大力开发和推广节能新工艺、新技术，降低能源消耗和提高能量利用率，充分利用高新技术提升改造传统石化工业，才能提高生产效率，推进节能减排，促进产业升级。

3. 资源、环境、安全的压力骤增

化学工业是典型的资源约束性产业。90% 以上的原料来自于矿产资源，2014 年原油、硫黄、钾肥、天然橡胶的进口依存度分别达到 59%、48%、42% 和 80%。此外，环境、安全也越来越成为化学工业发展的重要制约因素，“三废排放”中废水排放占工业领域第三位、废气与废渣排放占第四位。安全问题也日益凸显，备受民众关注，严重制约了化学工业发展。因此，必须加快发展循环经济，大力推进清洁生产，实施化工过程的本质安全，促进绿色低碳循环发展。

综上，无论是节能减排，还是环境安全都急需化工学科新理论、新方法、新工艺、新装备、新技术的出现，需要化工过程强化新途径与方法，提升技术创新能力。变传统化工为“绿色”化工，为化学工业的发展与变革提供支撑。

（二）化工过程强化的内涵与重要性

化工过程强化就是提高单位体积的反应、传热和传质的速率，实现传递速率与反应速率匹配、传热性能与产热速率匹配、停留时间与反应速率匹配、反应器形式与反应类型匹配，最大限度地发挥化学系统或催化剂全部潜能，实现化工过程的“更小、更快速、更安全、更持续、更便宜”。

化学工程学科发展的一个多世纪过程中，尤其是在 20 世纪中后期，过程工业在市场和工厂规模方面极度扩张，带来了资源、能源过度消费，安全、环保问题也日益突出，功能新产品需求快速增加。与此同时，化工学科经历百年发展，在第一阶段“单元操作”和第二阶段“三传一反”的里程碑式发展后，20 世纪后期出现了“产品工程”“三传一反+X”“多（介）尺度理论与方法”等新范

式，但在解决过程工业面临的各种新的问题面前，也出现了明显瓶颈。而冒险采用各种新的工艺技术并不是市场和企业的首选。过程模拟、优化控制、设备强化等受到化学及过程工业的青睐。此外，20世纪后半叶出现的环境工程，在很大程度上推动了过程强化作为化工学科发展的重要目标。

化工过程的核心内容可用图1表示。在该化工过程构架中，人们重点关心如下几方面的问题。

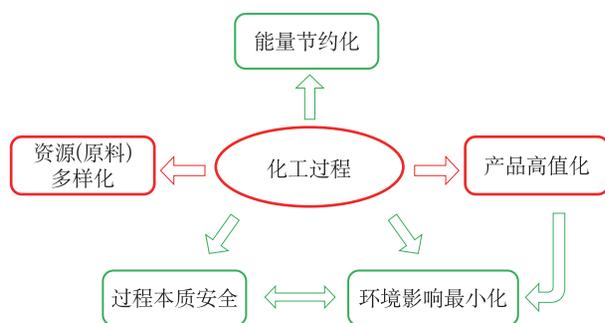


图1 化工过程核心内涵示意图

1. 资源（原料）的更高效利用

过程强化可以使得设备紧凑（加工单元集成化）且外形尺寸大幅度缩小，从而大大降低设备投资成本；生产能力提高，单位加工面积可以加工多种产品并大幅度减少土地成本；较高的产率和选择性可以显著降低原材料成本等。

2. 产品高值化

通过新的催化剂和工艺的强化，实现定向催化转化，显著提高反应的选择性，与分离纯化技术耦合强化，从而低成本制备高附加值产品。

3. 能源消耗最少

高的产品选择性和收率可使能量效率显著增加，过程能耗大大降低；过程产生的排放物减少从而大大降低废物处理能耗与成本。

4. 化工过程的本质安全

过程强化不但可以使用更小、更安全的设备，而且使过程得到更好的控制。例如，通过反应热的超高效移除或控制气液在规整催化剂内的流动，从而避免液体分布不均和热点的形成；通过减少有害物质的存量或过程中的能量，从而大大减少有害物质或能量失控引起的安全隐患。

5. 环境影响最小化

过程强化通过新型装备与技术的开发，可以显著改进制造和加工过程，大幅度提高设备产能，降低能耗或废物的产生，最终形成更廉价、更可持续发展的技术。过程强化带来的物质和能量强度的减少应该能够按比例减少环境的影响；过程强化借助于功能集成可以使得能量需求降低，从而降低 CO₂ 等废物排放量，减少过程工业对全球变暖的影响。

二、化工过程强化现状

（一）国内外化工过程强化研究现状

过程强化作为化学工程学科诞生于英国，以 1983 年帝国化学工业有限公司（ICI）的 Ramshaw 教授发表的《HIGEE（离心场）在传统精馏过程中的应用》的论文为标志。同年，世界首次过程强化年会在英国的曼彻斯特大学召开。直到 20 世纪 90 年代初期，过程强化仍然只是限于英国，主要涉及离心场的应用、紧凑高效换热、强化混合和集成技术。很快过程强化成为国际热点，很多国家的研究机构开始涉足该领域。例如，荷兰的 Delft 大学和 DSM 公司合作开展了结构化反应器的研究以及离心吸附技术；法国原子能中心（CEA）对紧凑换热设备开展了广泛研究；德国美因茨微技术研究所在微技术研究方面相当活跃；北京化工大学率先在我国开展了超重力方面的研发活动；美国的西北太平洋国家实验室（PNNL）在微通道换热器、MIT 在微反应器等方面开展了研究工作。许多化

工公司也参与了过程强化的研发及商业化工作，如 Eastman 公司的乙酸甲酯合成、Sulzer 公司的双氧水精馏、DOW 公司的次氯酸生产等。进入 21 世纪，无论是工业界还是学术界，过程强化的相关研究迅速增长，也由早期的大宗化学品生产过程开始进入生物加工和发酵以及精细化工等新领域。

1. 我国国家自然科学基金项目在化工过程强化方面布局

目前，在国家自然科学基金委员会（简称基金委）化工学科资助的十二个子方向几乎都与化工强化主题息息相关。从近年来化工学科支持的面上和重点基金分析来看，至少有近一半以上的项目是与化工强化相关的，无论是从化工热力学和基础数据、传递过程、分离过程、化学反应工程、化学系统过程，还是到能源化工、生物化工、环境化工、资源化工都不同程度涉及化工过程强化的理论、方法、材料、介质等，其实质的科学内涵和目标是为实现混合、传递或反应过程速率显著提升、系统协调和节能减排。此外，基金委在化工过程强化方向也及早部署了重大项目和重大研究计划。例如，“十一五”期间，重大项目“典型有机化工过程的传递与反应协同机制及强化”获得立项，该项目旨在建立快速反应体系内微纳尺度下的混合传递理论模型，阐明外场作用下物质传递与反应过程强化机理，实现典型有机化工过程传递与反应的协同与调控，为化学工业的“节能减排”奠定理论基础。“十二五”期间，立项的重大项目“基于限域传质机制的分离膜精密构筑与高效过程”则更加聚焦以分离膜为介质和手段的化工强化理论和应用基础研究。以李静海院士为首席科学家的重大研究计划“多相反应过程中的介尺度机制及调控”获得基金委批准立项，涵盖了如微化工、新型反应器、高效催化剂、离子液体等许多化工过程强化的手段、材料和介质，研究计划对于丰富化工过程强化科学理论和科学内涵发展具有重要意义。

此外，我国高等院所在化工过程强化的热点领域（如微反应器、超重力场、膜分离与反应、离子液体等）都已具有很好的研究基础。基金委通过面上项目、重点基金、重大项目、重大研究计划

几个层次上对化工过程强化方向进行了长期的持续资助，使得我国科学家在化工强化基础研究及服务国家重大需求领域取得长足进步，一些重要工业过程实现了化工强化的工艺和技术革新，创造了良好的经济和社会效益。例如，超重力强化技术在百万吨级 MDI 装置中取得应用；微通道反应器用于 3kt/a 纳米碳酸钙和 50kt/a 湿法磷酸净化；世界首套 100kt/a 复合离子液体烷基化装置的稳定运行等都是化工强化方向从基础到工业应用贯通式研究的典型例子。

2. 化工过程强化在 Scopus 中的发文情况分析

项目组委托爱思唯尔公司检索了化工过程强化 (chemical process intensification) 在 Scopus 中的发文情况。至 2015 年 2 月，检索到 2466 篇文章。化工过程强化的发文量每年都在增加，2004 年前的年发文量在 100 篇以下，2010 年后的年发文量超过 200 篇，近 5 年的年发文量保持在 250 篇左右。

(1) 主要发文期刊。分析发现，以 chemical process intensification 作为关键词的发文期刊主要有十种 (图 2)。五年间发文最多的是 *Industrial & Engineering Chemistry Research*，发文量为 124 篇；*Chemical Engineering Science* 排名第二，发文量为 59 篇。

(2) 主要发文国家。如图 3 所示，位于发文前三位的国家分别

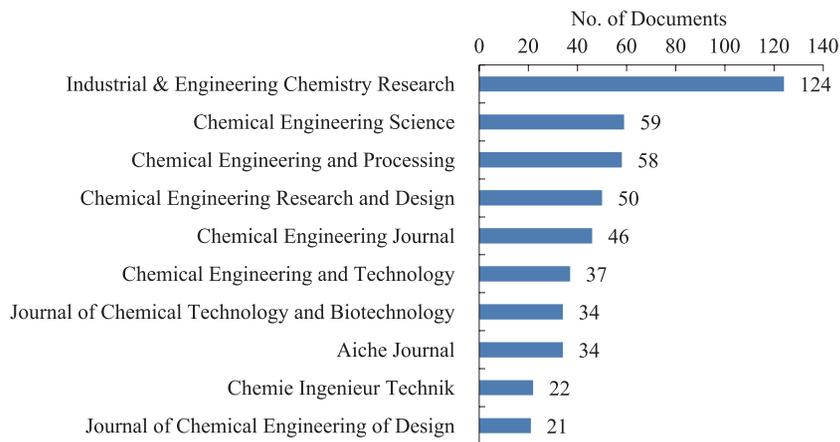


图 2 主要发文期刊情况

为美国、中国、德国，发文量在 280 篇以上。前十位的发文国家发文总量为 1878 篇，占有所有发文量的 60% 以上。

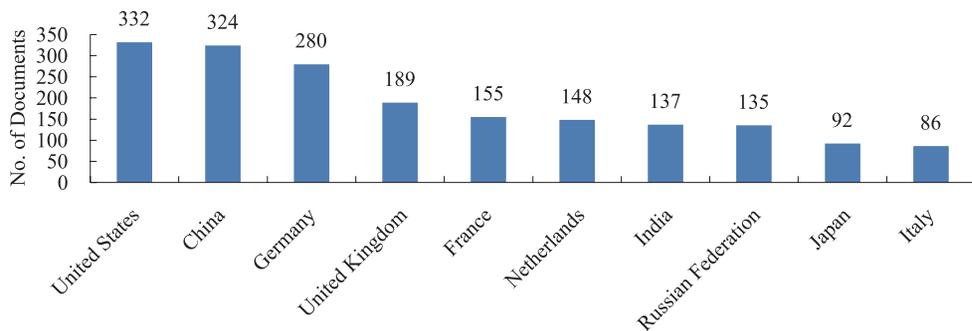


图 3 主要发文国家情况

(3) 主要发文机构。排名前三的发文机构为荷兰的埃因霍芬理工大学、印度的孟买大学化工学院、英国的纽卡斯尔大学，中国的北京化工大学排第六，清华大学排第九，分别发表 32 篇和 26 篇文章，如图 4 所示。

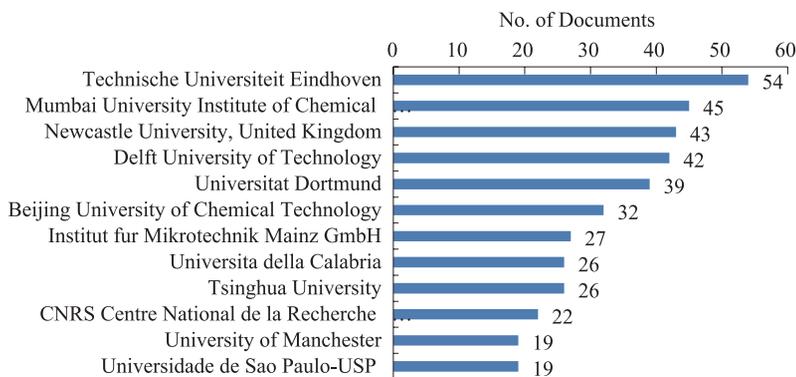


图 4 主要发文机构情况

3. 化工过程强化热点领域分析

通过分析 2010~2014 年的前 200 篇高被引文献，利用词频统计分析结果如图 5 所示。可以观察到主要的热点词包括膜、反应

(离心力、超声波、微波、光、电、磁、等离子体等外场)和新的过程控制方法(如振荡等非稳态操作)。新方法需要开发新设备、新设备开发也基于新方法,尤其对于外场强化。

3. 核心反应器(装备)强化

化工关键装备创新是实现化工过程强化的重要途径之一,是化工过程强化的最重要研究方向。例如,反应器作为化学工业的核心装备,它直接决定反应性能、产品质量、能耗以及物耗等。对于同一反应体系,若反应器形式不同,即使在同样的操作条件下,其反应性能也会表现出明显的不同,因为在不同的反应器内,流体的流动、混合、分散、传递性能均会有明显的差异,这些差异将直接影响体系的停留时间、反应器内的温度分布和浓度分布,进而决定反应过程的转化率、选择性等。再如,分离装备将在很大程度上决定一个化工企业投资、生产过程的能耗和物耗以及产品质量。对于同样的分离体系,若分离装备不一样,其中的多相流体的流动、分散和混合状态均会有明显的不同,这将直接决定分离体系内的传质面积、传质距离、流动的非理想性等,进而决定分离过程的收率、选择性和产品纯度等。

4. 系统耦合强化

化工生产通常涉及多种分离、反应等单元操作过程。其中,分离过程占整个化工生产过程能耗的比例极大(70%~80%)。同时,由于受到体系平衡态和副反应的限制,诸多反应过程的转化率难以进一步提升。单一的分和反应过程已经难以同时满足多组分、高纯度、精细化和经济环保等多重的化工产品生产需求。因此,需要将各种过程耦合,通过建立优势互补的新型高效组合技术和工艺流程,实现过程强化,提高生产效率,降低过程能耗,减少废物排放,达到总体效益最优及环境影响最小的效果,推进化工产业向绿色、高效化升级。化学工业中的过程耦合强化包含多重内涵,它既包括分离和反应过程之间的耦合强化,又包括各种分离过程之间的耦合强化等。

三、化工过程强化存在的问题与发展趋势

(一) 化工过程强化理论基础体系尚未形成

“三传一反”的通用方程由四项组成，时间项+对流项=扩散项+源项。其理论物理机制明确，物理内涵清晰，模型化形式统一。表达式如下：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi_i) + \text{div}(\rho u\varphi_i) = \text{div}(\Gamma \text{grad}\varphi_i) + S_{\varphi_i}$$

时间项 对流项 扩散项 源项

但从常规系统拓展到化工过程强化下的非常规系统（外场、等离子体、微波、超声波、超临界等）和极端过程（如纳微尺度、微化工过程等）时，是否仍然可以在“三传一反”理论框架下进行精准描述？

此外，化工过程强化理论体系的核心是模型化，任何理论体系的建立，没有量化的模型描述是没有意义的。

(二) 化工学科存在严重的“工科理科化”问题，其中过程强化应更关注实际应用

目前科技评价体系过于注重 SCI 论文和影响因子，导致化工领域做偏工程的人员和项目大幅度减少，化学、材料和生物等领域成为学科的主流，可能会对培养工业急需的工程人才和解决工业问题带来严重影响，并直接导致：①行业很多重大共性关键技术需要依赖国外进口，面临技术封锁和壁垒等制约，关乎国家与产业安全，急需依靠原创性基础研究加以解决；②行业科技进展严重滞后于基础研究。近 10 年我国化工科技界在基础研究取得长足进步，文章发表数量全球第一、过程强化领域发文排名全球第二，但对行业贡献却远远不够，迫切需要提升基础研究对行业共性重大技术的支撑能力。

(三) 化工过程强化缺乏产学研系统攻关平台

化学工业发展面临的“技术创新能力不足、节能减排任务艰巨、

资源环境约束”等巨大挑战，已严重制约化学工业的健康发展。导致这一严峻局面的主要原因有：

1. 行业基础研究和共性技术开发能力弱

随着早期开发类科研院所企业化转制，研究院所在科研队伍建设、科技投入及经济实力等方面有所削弱，且由于科技体制条块分割、单位间缺乏协同、创新要素流动不畅等问题，大大削弱了行业基础研究和共性技术开发工作。只有通过科技体制改革与创新，形成合力，聚焦行业重大基础研究与共性关键技术开发，才能适应化学工业面临的新挑战。

2. 基础科学研究与实际应用明显脱节

目前在化工创新技术研究中，尤其是围绕过程强化等学科热点，已形成一定的基础，取得了一些进展，但研究力量分散、缺乏合力，并且基础科学研究与实际应用明显脱节的问题依然存在。此外，化工学科特点之一的工程放大这道“鸿沟”还无法跨越，急需与行业企业协同创新攻关。

3. 工程转化及重大技术装备研制能力差

化工行业的产业转型升级的复杂化使得科学技术的发展与突破被置于越来越重要的位置。但由于自主研制能力严重不足、工程开发能力薄弱等原因，我国化学工业成果转化率还不到 30%，成套工业化技术不多、重大技术装备能力严重不足。

（四）急需突破一批重大化工过程强化关键科学技术

大化工和化工环保的观念正日益深入，正如过程强化涉及的多因素，在强化的过程中不仅仅需要考虑单因素的影响效果，同时要考虑整个的过程控制和优化效果。此外，过程强化引起的安全与环境问题也应给予重视。如何将化工过程和生物科技以及环保理念有机的结合，建立资源有效利用、产品生产效率高、生态保护完善的绿色生产和发展理念将是化工过程未来的发展趋势。

四、化工过程强化发展战略措施

（一）总体指导思想

以党的十八大精神为指引，以科学发展观为指导，以创新驱动推进我国化学工业可持续发展为战略目标，着力构建“以行业企业为主体、重大需求为导向、产学研相结合的协同创新体系”。紧密围绕化工过程工业“技术创新能力不足、节能减排任务艰巨、资源环境约束”等挑战，针对化工过程的原子节约、工业经济、产品和过程安全、环境友好等迫切需求，强化化工过程强化的基础研究、前沿技术研究以及重大共性关键技术开发，提高科学研究水平和成果转化能力，抢占科技发展战略制高点。

（二）化工过程强化主要研究方向

围绕凝练的一个核心科学问题：复杂体系极端条件下的传质、反应协同机制与调控，包括三个方面：“三传一反”的理论拓展、核心反应器与新材料的内因作用、外场强化及过程耦合的外因作用。

聚焦五个研究方向：

方向1：过程强化的理论基础

方向2：微反应器与过程强化

方向3：新材料（介质）与过程强化

方向4：外场协同过程强化

方向5：过程耦合强化

（三）过程强化目标

总体目标是抓住“化工过程强化”这一主题，以国民经济和产业发展的重大需求为目标，开展上下游贯通式的研究工作。组织优势协同攻关队伍，从基础理论到核心技术进行协同创新，突破制约我国化学工业高质量发展的理论和技术瓶颈，形成适合我国化学工业特点的过程强化理论与工程技术，培养一批化学工业领域科技骨干人才，建设成国际一流的技术创新基地，为引领企业科技进步、促进化学工业创新发展、保障我国能源安全做出应有贡献。力争在

过程强化理论、过程强化核心反应器、过程强化新工艺、外场协同强化新装备、过程耦合强化五个方面产生里程碑式的突破和成果。

1. 科学目标——实现共性科学问题的理论突破

开展化工过程强化的基础理论研究，使我国在化学工程强化学科领域跻身世界前三。化工过程强化的共性核心科学问题为复杂体系极端条件下的反应/传质协同机制与调控，包括以下三个方面。

(1) 理论拓展与突破：经典“三传一反”理论在化工过程强化条件下面临新的挑战，为适应和解决复杂体系和极端条件的基础科学问题，必须拓展突破经典“三传一反”理论体系。

(2) 内因本征作用：核心反应器与新材料（介质）对化工过程强化的作用机制。

(3) 外因协同作用：外场强化及过程耦合对化工过程强化的作用机制。

以量子化学计算为起点，以“三传一反”为核心，以系统工程优化全覆盖，以分子尺度、纳微尺度、设备尺度及系统尺度的基本理论无缝衔接为根本，构建化工过程强化理论基础体系。

2. 技术目标

突破一批化工过程强化的共性关键技术，形成一批拥有自主知识产权的重大技术成果，抢占一批世界技术制高点，促进科技成果转化，解决一批制约化学工业发展的重大问题。

(1) 奠定方法学基础和突破重大关键技术：重点围绕过程强化核心反应器、过程强化新工艺、外场协同强化新装备、过程耦合强化进行协同攻关，力争形成里程碑式的突破和成果。

(2) 形成3~5个里程碑式的化工过程强化应用范例：例如，微反应器强化技术用于制备高纯无机盐等大宗化学品；反应分离耦合膜反应器强化技术用于制备环己酮等高端精细化学品；超重力强化反应技术制备石油基磺酸盐等化学品；离子液体等新介质用于强化烷基化等重要石油化工过程；催化新材料用于强化煤/重油等劣质原料的高效转化。

3. 人才目标

形成一支化工过程强化研发的高水平队伍，培养一批化学工业领域科技骨干人才，建设成国际一流的技术创新基地。

（四）具体建议：组建成立国家自然科学基金委化工过程强化科学研究中心

围绕上述目标，以组建国家自然科学基金委化工过程强化科学研究中心为抓手，针对化工过程的原子节约、工业经济、产品和过程安全、环境友好等迫切需求，聚焦化工过程强化的基础研究、前沿技术研究以及重大共性关键技术开发，提高科学研究水平和成果转化能力，抢占科技发展战略制高点。力争在过程强化理论、过程强化核心反应器、过程强化新工艺、外场协同强化新装备、过程耦合强化五个方面产生里程碑式的突破和成果。

1. 中心组织框架（如图 6 所示）

建议化工过程强化科学研究中心由国家自然科学基金委员会和

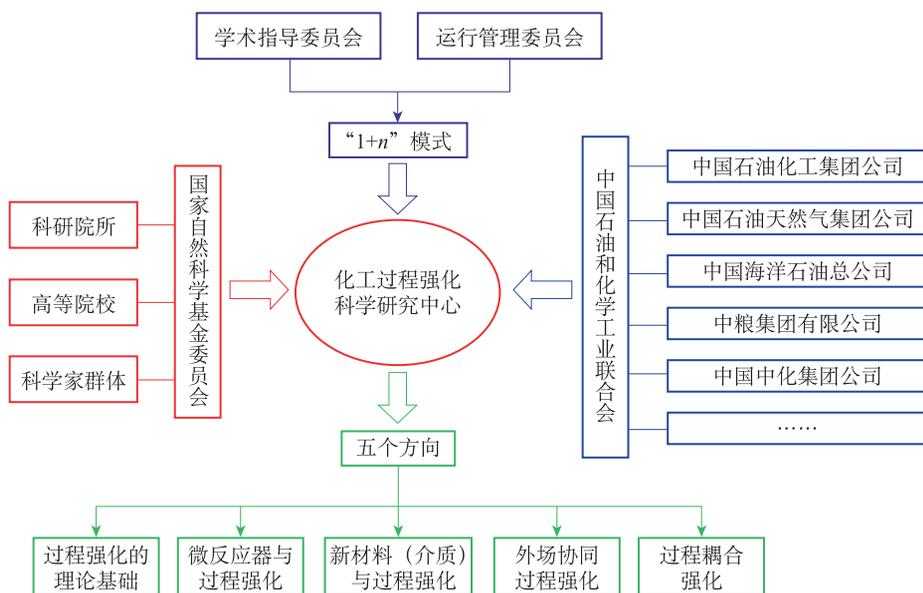


图 6 化工过程强化中心组织框架示意图

中国石油和化学工业联合会（以下简称石化联合会）共同支持成立。国家自然科学基金委支持高等院校及科研院所瞄准“化工过程强化”前沿领域开展基础性研究；石化联合会组织其会员单位提出促进行业转型升级的重大需求。通过化工过程强化科学研究中心平台，采用“固定PI+流动人员”的方式，协同攻关，打通上游基础研究和下游产业化的“最后一公里”。

2. 中心的运行模式

建议科学研究中心采用“1+n”模式，由一个依托单位和 n 个协同单位成立相对独立的科研实体，由国家自然科学基金委及相关企业专家建立学术指导委员会，把握中心发展方向，由基金委、石化联合会、依托单位及协同单位成立运行管理委员会指导中心运行。围绕5个研究方向，形成一支“固定+流动”的研究队伍。固定人员由15~20个PI为主；流动队伍以项目负责人及其团队随着承担项目而进入（项目结束，自动退出）。石化联合会及各大企业等会员单位面向国家的重大需求，结合科学家的研究兴趣与行业需要解决的关键科学问题，形成指南内容，通过化工过程强化科学研究中心发布指南，引导研究中心的科学家结合企业需求开展导向式科学研究。



Abstract

This book mainly focused on the subject of chemical process intensification, in which the connotation and the importance of this subject were stated, the research status of chemical process intensification at home and abroad, the method and the development trend of process intensification were described, the main problems and challenges of this subject were specified and suggestions and countermeasures were proposed for the future development of this subject.

1. Connotation and importance of chemical process intensification

Chemical process intensification refers to the technology that can improve the rates of chemical reaction and heat and mass transfer per unit volume, that can achieve the match between the rate of transport phenomena and the rate of chemical reaction, the match between the performance of heat transfer and the rate of reaction heat generation, the match between the residence time and the rate of chemical reaction, and the match between the reactor type and the reaction behavior, that can achieve the full potentiality of chemistry system or catalyst, and that can achieve the purpose of ‘smaller, faster, safer, more sustainable and cheaper production’.

During the past century of chemical engineering development, especially since the middle of 20th century, process industry has experienced explosive development in both market and plant capacity,

which has led to excessive consumption of resource and energy, to challenging problems of safety and environmental protection, and to rapid demand of new products with specific properties. The first stage of chemical engineering development mainly involved ‘unit operation’ while the second stage mainly focused on the milestone development of ‘transport phenomena and chemical reaction’. Since the end of 20th century, new schemes, including ‘product engineering’, ‘transport phenomena and chemical reaction plus other phenomena’, ‘multi- or meso- scale theory and method’, of chemical engineering have emerged. However, obvious bottleneck of chemical engineering development is also present when tackling the various problems in the process industry. Considering the potential risk, it is not the priority of market and company for adopting new technologies. Process simulation, optimized control and equipment intensification have been gradually favored by the chemical and process industry. In addition, the environmental engineering that emerged since the middle of 20th century has largely promoted the process intensification as an important target of developing chemical engineering. All of these new engineering technologies required the intensification of chemical process.

Currently, the core content of chemical process can be described by Fig. 1. In this scheme of chemical process, people mainly concern the following aspects.

1) More efficient utilization of resources (raw materials)

Process intensification can make the equipment more packed (integration of processing unit) and the size of the equipment can be largely reduced, which can largely reduce the investment cost. The processing capacity can be improved, and the unit processing area can provide more types of products and can reduce the land cost. The high product yield and selectivity can largely reduce the cost of raw materials.

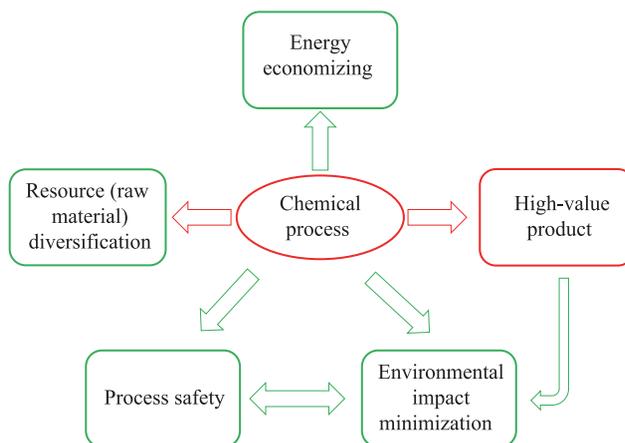


Fig. 1 Scheme of the core connotation of chemical process

2) High-value product

Through new catalyst and technology, targeting catalysis can be achieved, and the reaction selectivity can be greatly improved. By combining and intensifying the separation and purification technology, high-value product can be produced with low cost.

3) Energy consumption minimization

High product selectivity and yield can greatly improve the energy efficiency, and can greatly reduce the process energy consumption. Less emissions can be produced, which can greatly reduce the energy consumption and the cost of waste treatment.

4) Safety of chemical process

Process intensification can make the equipment smaller and safer, and can make the process be more easily controlled. For instance, through the highly efficient removal of reaction heat or controlling the flow of gas and liquid in structured catalyst, the non-uniform distribution and hot-spot of liquid can be avoided. Through reducing the stock of harmful materials or the energy during the process, the safety concerns regarding the

harmful materials or out of control of energy can be largely reduced.

5) Environmental impact minimization

Through the development of new equipment and technology, process intensification can greatly improve the process of manufacture and processing, which can largely improve the capacity of the equipment, reduce the energy consumption or the waste production, and finally develop cheaper and more sustainable technology. The reduction of intensity of material and energy can proportionally reduce environmental impact. With the aid of functional integration, process intensification can reduce the energy demand, which can further reduce the emission of waste, e.g. CO₂, and can reduce the impact of process industry on global warming.

2. Status quo of chemical process intensification

1) Status quo of research on chemical process intensification at home and abroad

Process intensification as a subject of chemical engineering was first proposed by Ramshaw from ICI in 1983 in England, which was marked by his publication on the application of HIGEE in traditional distillation. In this same year, the first international conference on process intensification was held in the University of Manchester in England. Until the ninetieth of 20th century, process intensification was still restricted in England, which covered the application, the packed and highly efficient heat exchange, the intensified mixing and the integration technology of centrifugal field. Process intensification was soon developed to be a hotspot of research in the world, and many research institutes from the world began to focus on this subject. For instance, Delft University of Technology in Netherland and the DSM started to cooperate in the investigation of structured reactor and of centrifugal adsorption technology. French Atomic Energy Commission

engineering supported by the National Natural Science Foundation of China (NSFC) are closely related to chemical process intensification. About half of the general and key programs in the subject of chemical engineering were related to chemical process intensification in the past few years. The theory, method, material and medium of chemical process intensification can be found in the following topics, including chemical thermodynamics and its fundamental data, transport phenomena, separation process, chemical reaction engineering, chemical systems engineering, energy chemical engineering, biochemical engineering, environment chemical engineering, and resource chemical engineering. The connotation and goal of all of these topics were to achieve great improvement in the rates of mixing, transport and reaction, to achieve balance in the system and to achieve energy-saving and emission-reduction. In addition, the NSFC has supported several major programs and major research projects in chemical process intensification, which has laid solid foundation for establishing the scientific research center of chemical process intensification. For instance, during the ‘11th 5 years’ program, the major program of ‘The synthetic mechanism and intensification of typical organic chemical process’ was approved. This program aimed to develop a mix-transport theoretical model at microscale for fast reaction system, to illustrate the intensification mechanism of transport phenomena and chemical reaction at the effect of external field, to achieve synthesis and regulation of the typical organic chemical process, and to laid theoretical foundation for ‘energy-saving and emission reduction’ for the chemical industry. During the ‘12th 5 years’ program, the major program of ‘Accurate construct and efficient process of separation film based on the mechanism of mass transfer in restricted area’ was approved, and this program aimed to investigate the theory and application of chemical process intensification with the medium and method of separation film. Academician Jinghai Li as a leading scientist organized a major research project of ‘Mechanism and

regulation of mesoscale phenomena in multiphase reaction process', which covered many methods, materials and medium of chemical process intensification that was involved in micro chemical engineering, new reactor, highly efficient catalyst, ionic liquid, etc.. This program is important for enriching the theory and scientific connotation of chemical process intensification.

In addition, research institutes in China have a solid research basis in the research hotspots including micro reactor, high gravity field, film separation and reaction, ionic liquid, etc., of chemical process intensification. The NSFC has given long-term support for the above-mentioned directions of chemical process intensification through general program, major fund, major project, and major research project. With this scientific support regarding the basic investigation, Chinese scientists have obtained many important findings in the field of basic research of chemical process intensification and the field of serving the national major demand, and some of the important industrial processes have achieved the renovation of process and technology for chemical process intensification. These industrial processes have created excellent economic and social benefits. For instance, the high gravity intensification technology has been applied in MDI with millions of tons per year. The micro channel reactor has been applied in the production of calcium carbonate with a capacity of 3kt/a, and in the purification of phosphoric acid through wet method with a capacity of 50kt/a. The first set-up in the world for performing alkylation using ionic liquid with a capacity of 100 kt/a has been stably operated. And all of these examples are the researches from basic study to industrial application of chemical process intensification.

2) Main method of chemical process intensification

(1) Intensification of new material (medium)

New material (medium) can be used as catalytic material and

as catalyst (structured catalyst, film catalytic material and catalyst, biocatalyst, ionic liquid as catalyst, etc.) to perform intrinsic chemical intensification for the reactions itself, and can also be used as new separation medium material (e.g. supercritical fluid, ionic liquid as solvent, etc.) to perform external physical intensification for the diffusion and mass transfer.

(2) Synthetic intensification at the presence external field

The development and progress of chemical process intensification have provided new motivity and vitality for chemical industry. The technology of chemical process intensification includes both intensification equipment and intensification method. Intensification equipment includes reactor and unit operation equipment with high performance of mixing, heat transfer and mass transfer. Intensification method includes integrated multi-functional reactor with reaction and separation, alternative energy (external field like centrifugal force, ultrasonic wave, microwave, light, electricity, magnetism, plasma, etc.) and new method of process control (e.g. unstable operation with vibrating). New methods require the development of new equipment, and the development of new equipment is also based on new methods, especially for the intensification through external field.

(3) Intensification of core reactor (equipment)

The renovation of key chemical equipment is one of the important ways of achieving chemical process intensification, and is also the most important research direction of chemical process intensification. Chemical equipment is the basis for achieving chemical production, and the modern chemical industry cannot be developed without chemical equipment. Chemical equipment is an important basis for assuring the implement of chemical process conditions and for assuring the quality of chemical product. For instance, reactor is the core equipment for chemical industry, and it directly determines the reaction performance, product quality, energy and material consumptions. For a same reaction

system, the performance can be totally different for different types of reactor even under the same operating condition, since in different types of reactor, the flow, mixing, diffusion and transport behaviors can be largely different, which can affect the residence time and the distributions of temperature and material concentration, and which will further determine the yield and selectivity of the reaction process. Therefore, the renovation of reactor remains an important research direction for chemical engineering. For another example, the separation equipment is also a core equipment for chemical industry, and this equipment largely determines the energy and material consumptions and the product quality for the investment and for the production. For a same separation system, if the separation equipment is different, the multiphase flow, diffusion and mixing behaviors can be different, which will determine the area for mass transfer, the distance for mass transfer and the non-ideality for flow in the separation system, and which will finally determine the yield, selectivity and product purification. Therefore, the renovation of separation equipment has attracted extensive attention from researchers. To conclude, the renovation of key chemical equipment is the basis of achieving modern chemical industry and its related green, safety and high efficiency, and is an important part of the research on chemical process intensification.

(4) Systemic coupling intensification

Almost all the chemical industries contain two important processes: reaction and separation. Chemical production uses raw materials from various sources and requires high product quality. The composition of the resulting products is complex and the chemical reaction mechanism is also complex. Therefore, chemical production usually contains various unit operations on separation and reaction. Separation consumes 70%-80% of the energy in chemical production. In addition, restricted by the system equilibrium state and side reactions, the conversion of chemical reaction is usually difficult for further improvement. A single separation

and reaction process is difficult to satisfy the multiple demands of multi-component, high purification, fine production and being economic and environment-friendly in chemical production. Therefore, it is required to couple various processes. The chemical process intensification can be achieved by establishing a new and efficient synthetic technology and technological process that can be complementary, which can improve production efficiency, reduce energy consumption and waste emission, and can achieve the maximization of overall benefit and the minimization of environmental impact, and can finally promote the chemical production toward the upgrading direction of green and high efficiency. The process coupling intensification in chemical industry has multiple connotations, which cover both the coupling intensification of separation and reaction processes and the coupling intensification of various separation processes.

3. Problems and development trend of chemical process intensification

1) The basic theoretical system is still in developing

The equation of ‘transport phenomena and chemical reaction’ is composed of four parts: time term + convection term = diffusion term + source term. The physical mechanism of this equation is clear and the physical connotation is clear, and the mathematical expression is universal as following:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi_i) + \text{div}(\rho u\varphi_i) = \text{div}(\Gamma \text{grad}\varphi_i) + S_{\varphi_i}$$

Time term Convection term Diffusion term Source term

However, when extending from the conventional system to non-conventional system (external field, plasma, microwave, ultrasonic wave, supercritical, etc.) and to extreme process (e.g. nano- to micro- scale, micro chemical process, etc.), it remains unknown whether the scheme based on the equation of ‘transport phenomena and chemical reaction’ is

still accurately applicable?

In addition, the theoretical core of chemical process intensification is modeling, and the establishment of any theoretical systems can be meaningless without the quantitative description with modeling.

2) The engineering subject is gradually focusing on science in the subject of chemical engineering, especially in the subject of process intensification

Currently, the SCI publication and its impact factor are over-addressed, which has led to the reduction of researchers and projects that are focusing on engineering in the field of chemical engineering. Instead, chemistry, material and bioengineering have been developed to be major research directions, which may bring negative impact on the cultivation of engineering talents and on the solve of industrial problems. In addition, this situation may cause the following problems. ① The major and common key technology in the industry may be lack of basic research, and it may be highly dependent on import, which can be restricted by the blockade and barrier on new techniques. This situation is closely related to the national and industrial safety, and requires to be solved by original and basic researches. ② The progress of technology in the industry is far behind of the basic research. In the past ten years, the chemical engineering and technology have experienced great improvement, and the amount of scientific publication is in the top 1 of the world and the publication in process intensification is ranked in 2nd in the world. However, original contributions are still limited and it is urgently required to improve the supporting role of basic research on common and major technology in industry.

3) The systemic platform of production, teaching & research is lacking

The healthy development of chemical industry is severely restricted by the great challenges including the lack of ability in technical renovation, the demand of energy saving and emission reduction and the restriction of resource and environment. It requires systemic renovation of technical mechanism and the synthetic renovation. It also requires to improve the level of research and development and to refine the technical supporting system. The achievement of chemical process intensification can be important for finally solving the major, common and key technical problems in the development of chemical industry.

(1) System renovation on technical mechanism, and to improve the ability of basic research and the ability of development in common technology

With the transition of previous institutes focusing on development, the research institutes were weakened in the establishment of research team, in the input of science and technology, and in the ability of economy. Due to the separation of technical system, the lack of cooperation among different departments, and the block of renovation element, it has greatly weakened the basic research and the development of common technology. Only through the reform and renovation of the technical system, and through the cooperation and the focuses on major basic research and on developing common key technology, the chemical industry can be promised to face new challenges.

(2) Achievement on synthetic renovation, and to solve the problem of disjointing basic scientific research and practical application

Currently, research on the technology of chemical renovation, especially for the research hotspots like process intensification, has contributed to a series of basic knowledge and progress. However, problems still exist in the distribution of research power, in the lack of

cooperation, and in the disjointing between basic scientific research and practical application. In addition, one of the characteristic of the subject of chemical engineering is the scale-up, which is a vast chasm that remains to be tackled, which urgently requires the cooperative renovation among different companies. The 'Research center for chemical process intensification' in NSFC is a platform for tackling the scale-up of chemical engineering.

(3) Improvement on engineering conversion and on the ability of developing major technical equipment, and to achieve breakthrough on the integrated industrial key technology

The complexity of transformation and update in chemical industry makes it increasingly important in the development and breakthrough of scientific technology. However, due to the lack of original research and the weakness in engineering development, the conversion of achievement in Chinese chemical industry is less than 30%, and it is of severe deficiency in the integrated industrial technology and in the major technical equipment.

4) It urgently requires to achieve a series of major and key technologies on chemical process intensification

The sense of general chemical engineering and environment chemical engineering has been increasingly important. Similar to the multiple factors in process intensification, it should consider the impact of a single factor in process intensification, and should also consider the impact of overall process control and optimization. In addition, more attentions should be given to problems of safety and environment relating to process intensification. The future development trend of chemical process is to organically combine the chemical process, the bio-technique, and the environmental idea, and to establish the idea of green production and development in efficiently utilizing resources, in improving product yield and in improving ecological protection.

4. Development strategy and measures for chemical process intensification

1) Main research directions of chemical process intensification

The research of chemical process intensification should focus on a single core scientific problem of ‘synthetic mechanism and regulation between mass transfer and reaction at complex and extreme conditions’. Three aspects should be considered, including the extension of the theory of ‘transport phenomena and chemical reaction’, the intrinsic impact of core reactor and new material, and the external impact of external field intensification and process coupling. Therefore, five research directions can be defined as following:

Direction 1: Theoretical basis of process intensification

Direction 2: Micro reactor and process intensification

Direction 3: New material and process intensification

Direction 4: Synthetic process intensification in the presence of external field

Direction 5: Coupling process intensification

2) Goal of process intensification

The overall goal is to focus on the theme of ‘chemical process intensification’, on the major demand of national development in economy and industry and on the research linking the upstream and the downstream. It should establish a research team with high talents for cooperating. Synthetic renovation should be performed from basic theory to core technology. Researches should make it possible in the breakthrough of theoretical and technical bottlenecks that restrict the high-quality development of Chinese chemical industry. Theory and engineering technology relating to process intensification should be gradually developed to match the characteristics of Chinese chemical industry. High-level talents in the field of chemical industry should

be cultivated. Advanced base for technical innovation should be established. It should finally make contributions to leading the technical development of industry, to promoting the innovation development of chemical industry and to ensuring the energy safety of China. It aims to have milestone breakthroughs and results in the following five aspects: theory of process intensification, core reactor of process intensification, new technology of process intensification, new equipment for synthetic intensification at external field and coupling of process intensification.

3) Suggestion of establishing ‘Scientific research center for chemical process intensification’ in NSFC

By establishing ‘Scientific research center for chemical process intensification’ in NSFC, and by focusing on the urgent demand of atomic-saving, industrial economy, product and process safety and environment-friendly production, it should strengthen the basic research, the research of cutting edge technology and the development of major, common and key technology. It should improve the level of scientific research and the ability of resulting conversion in order to seize the strategic commanding height. It aims to have milestone breakthroughs and results in the following five aspects: theory of process intensification, core reactor of process intensification, new technology of process intensification, new equipment for synthetic intensification at external field and coupling of process intensification.



目 录

总序	i
前言	v
摘要	vii
Abstract	xxv

第一章 绪论 1

一、新材料（介质）强化	1
二、外场强化	2
三、核心反应器（装备）强化	3
四、过程耦合强化	5

第二章 新材料（介质）强化 7

第一节 催化剂与过程强化	7
一、背景意义	7
二、科学基础	8
三、催化强化反应过程原理	10
四、存在的问题与未来发展	11
五、小结	16
第二节 结构化催化剂与反应器	16
一、背景意义	16
二、关键问题	22
三、强化原理	25
四、强化效果	29
五、小结	37

第三节	膜材料与反应分离	37
一、	背景意义	38
二、	膜材料与反应分离强化原理和强化途径	38
三、	膜材料与反应分离过程强化应用实例	42
四、	小结	51
第四节	生物催化与分离介质工程强化技术	51
一、	背景意义	51
二、	关键科学问题	52
三、	生物催化及生物分离强化原理	52
四、	生物催化及生物分离强化技术应用	57
五、	小结	69
第五节	超临界流体强化分离技术	70
一、	超临界流体萃取分离技术现状	70
二、	超临界流体强化分离的理论基础	73
三、	超临界轻烃萃取重油工程应用	81
四、	超临界流体萃取催化裂化油浆技术工业化	89
第六节	离子液体强化的反应及分离过程创新	93
一、	背景意义	93
二、	关键科学问题	94
三、	强化原理	95
四、	离子液体强化工业过程实例	97
五、	小结	105
参考文献	105

第三章 外场强化 121

第一节	超重力反应与分离强化技术	122
一、	背景意义	122
二、	强化原理	123
三、	关键问题	123
四、	超重力技术工业应用及强化效果	139
五、	展望	143
第二节	等离子体过程强化	144
一、	背景意义	144

二、强化原理	145
三、关键问题	146
四、等离子体过程强化效果	147
五、展望	160
第三节 磁稳床技术	161
一、背景意义	161
二、关键问题	161
三、强化原理	162
四、强化效果	163
五、展望	174
第四节 声化学反应器	174
一、背景意义	174
二、关键科学问题	176
三、声化学反应器研究进展	176
四、声化学微反应器——声化学和微反应器协同结合	181
五、展望	190
第五节 微波技术在化工领域中的应用	191
一、关键科学问题	191
二、微波干燥	192
三、微波提取分离	198
四、微波强化反应	204
五、展望	210
参考文献	210

第四章 核心反应器（装备）强化 221

第一节 微反应器及其强化技术	222
一、背景意义	222
二、强化原理	223
三、关键问题	224
四、强化效果	224
第二节 新型旋转液膜反应器用于材料制备技术	239
一、背景意义	240
二、关键问题	241

三、强化原理	242
四、强化效果	248
第三节 高效旋流分离设备及其强化技术	252
一、背景意义	252
二、强化原理	253
三、强化效果	268
第四节 燃料电池过程与强化技术	274
一、背景意义	274
二、燃料电池工作原理	275
三、强化原理与应用效果	276
第五节 静态混合反应器及其强化	304
一、背景意义	304
二、关键问题	305
三、强化原理	305
四、强化效果	307
五、小结	314
第六节 聚合反应器及其强化技术	315
一、背景意义	315
二、关键问题	315
三、强化原理与应用效果	316
第七节 生物反应器及其强化技术	327
一、背景意义	327
二、关键问题	328
三、强化原理	328
四、强化效果	339
参考文献	345

第五章 系统耦合强化 359

第一节 反应精馏	359
一、背景意义	359
二、关键问题	361
三、强化原理	367
四、应用实例	369

第二节 反应结晶	374
一、背景意义	374
二、关键问题	375
三、强化原理	376
四、应用实例	382
第三节 气体膜分离耦合过程	386
一、背景意义	386
二、关键问题	387
三、强化原理	388
四、应用实例	390
第四节 吸收-吸附-精馏耦合捕集CO ₂	396
一、背景意义	396
二、关键问题	396
三、强化原理	397
四、强化效果	397
第五节 新型耦合过程强化	403
一、背景意义	403
二、关键问题	403
三、强化原理	404
四、应用实例	405
参考文献	414

第六章 总结与展望 424

一、基础理论方面	424
二、新材料(介质)强化	425
三、外场协同强化	426
四、核心反应器(装备)强化	427
五、系统耦合强化	427

关键词索引 430



第一章

绪 论

化工过程要获得最大的反应转化速率和最少的副产物，浓度和温度分布要均匀。过程强化是提高单位体积的反应、传热和传质速率，使化学系统或催化剂发挥全部潜能。基于“三传一反”的N-S方程中包含物质传递、能量传递、动量传递，遵循对流机制和扩散机制。对流机制是流体主体流动产生的物理量在空间的输运，而扩散机制是物理量在空间有梯度而产生的推动力。反应过程作为源项耦合在传质方程中。因此，从广义上说，过程强化无非是对“物质传递、能量传递、动量传递”进行强化以及对反应过程本身的强化。具体实施途径：催化过程；特殊的反应介质（如离子液体、超临界流体）和高密度能源（如微波、超声）、离心场的应用；具有高比表面积的结构化反应器、微反应器以及反应器的周期操作等。按照强化的手段和方法可归纳为新材料（介质）强化、外场强化、核心反应器（装备）强化、系统耦合强化四个领域。

一、新材料（介质）强化

新材料（介质）既可作为催化材料和催化剂 [结构化催化剂、膜催化材料与催化剂、生物催化剂、离子液体（催化剂）等] 对反应过程本身通过内因进行化学强化，也可以作为新型分离介质材料 [如超临界流体、离子液体（溶剂）等] 通过外因对扩散传质进行物理强化。

复杂反应体系的化学工程特征都是多相流动-反应的非线性高度耦合，目前应用过程中存在的突出问题是反应器内原料与催化剂接触不均匀、传热传质效率低等导致传递环境与最优反应历程不协调，影响了原料定向催化转化反应的发生。催化剂的微观结构是由大量微观粒子（原子、分子、离子、

电子)组成的,处于配位不饱和等多种亚稳状态,因而具有较大的活化反应分子的能力;原子之间的凝聚作用形成的亚微观团簇,化学键处于非定域化状态,团簇尺寸、缺陷种类/数量决定底物分子的吸附和反应行为;催化剂颗粒的介观形貌、尺寸、分散度、晶面取向、载体的孔结构均对催化剂的活性和选择性具有显著影响;催化剂的宏观形状、多级结构协同效应、传质/传热过程强化,最终影响催化剂的活性和全寿命周期。因此,开展催化剂为主的过程内因强化具有重要意义。例如,结构化催化剂的强化主体由金属或非金属制成,其内部有大量截面均匀、微型直线通道。为了获得足够的孔隙率和催化活性表面,通道内壁通常覆盖涂层作为催化活性物质的载体从而实现过程反应强化;膜催化可通过控制某些反应物的进料分布,从而提高反应的选择性和收率或促进传质过程(如通过中空纤维膜实现直接供氧或溶解于液相)起到强化作用;生物催化过程强化的核心问题有:高效酶的发现和工程化、纳米酶的构建、包括辅酶在内的多酶协调催化体系、合成生物学技术开发和高效人工细胞构建等。

此外,在化工过程中,约90%的反应/分离需要材料介质(催化剂和溶剂)才能完成,因而材料介质创新是实现化工过程温和和高效转化的重要途径。新型介质和材料的出现,常常会带来重大的技术变革,同时也会对传统的理论方法、研究手段和计算模型提出挑战,如超临界流体、离子液体。超临界流体是指物质处于近临界区($1.2 > T_r = T/T_c > 0.95$, $5 > P/P_c > 1$)状态时作为流体表现出一些特有性质。其密度可在类似液体与气体之间变化,因而溶剂化能力很强,压力和温度的微小变化可导致其密度显著变化,从而对溶剂的溶解度能力等带来很大的变化;黏度、扩散系数等接近于气态下的数值而远高于液体状态,因此超临界流体具有良好的扩散传递性能等。超临界流体广泛用于萃取分离、反应、生物医药、材料制备等各个领域。离子液体介质具有液态温度范围宽、不易挥发、溶解能力强、电化学窗口宽等一系列优点。更重要的是,离子液体的可设计性使其可通过修饰或调整正负离子的结构及种类来调控其物理化学性质,从而选择和设计适合自己需要的类型和结构加以应用。目前离子液体作为溶剂、催化剂、电解液等,已在石油化工、煤化工、合成材料、环境保护、电化学等方面展现了广阔的应用前景。

二、外场强化

化工过程强化技术的发展与进步给相关的化工行业注入了新的动力和活力。化工过程强化技术包括过程强化设备和过程强化方法,前者主要包括具

有高效的混合、传热和传质性能的反应器和单元操作设备，后者主要包括反应-分离集成的多功能反应器、替代能量（离心力、超声波、微波、光、电、磁、等离子体等外场）和新的过程控制方法（如振荡等非稳态操作）。新方法需要开发新设备，新设备开发也基于新方法，尤其对于外场强化。

“场”普遍存在于自然界中。狭义上讲，将某一物理量在空间区域内的分布称为“场”；广义上讲，也可将能产生空间化学势差异的推动力称为“场”。在化学工业领域，反应和分离过程所使用的化工设备中就存在着各种场，如温度场、浓度场、密度场、速度场、压力场、引力场、重力场等。常规化工强化方式主要可借助于搅拌或构建新型的反应器内部结构来实现，搅拌是通过外部机械能转换成相关的流体混合所需要的动能，实现流体的主动式混合，而依靠反应器新型的内部构件可实现流体间被动式混合，但这两者的强化程度仍有待改善。利用外部替代能量的输入，如超重力场（利用转子转动产生的强离心力场）、磁场（磁场作用下，磁性颗粒聚集形成具有空间有序结构的磁链，可有效消除沟流和节涌、破碎气泡和大的颗粒聚团，大幅提高流固相接触效率）、超声场（主要利用空化声流和瞬态空化所形成的局部高温高压环境，引起流体的微扰和湍动，进而强化混合与传质，促进反应过程强化）、等离子体场（利用其高能电子及其他粒子所具有很高的反应活性和特殊的物理、化学性质）和微波（一种可穿透某些物质与极性组分作用产生热量的电磁能，以离子传导和偶极子转动两种方式直接作用于分子）等外场可大幅度提高化工过程的流动、混合、传质和传热性能。由此可见，外场强化是实现绿色化工的重要手段之一，也是当前化学工程领域优先发展的方向之一，尤其可为极端条件下的化工过程强化提供新途径，实现化工过程节能减排、绿色化和安全生产。

近年来，我国在超重力、等离子体、磁稳床、声化学反应器和微波技术等外场强化方面围绕关键科学问题，在基础研究、应用基础研究以及工业应用等方面取得了一系列重要进展。

三、核心反应器（装备）强化

化工关键装备创新是实现化工过程强化的重要途径之一，也是化工过程强化的最重要研究方向。化工装备是实现化工生产过程的基础，若没有化工装备也就没有现代化学工业的诞生，它是保障化工工艺条件实施和化学产品质量的重要基础。例如，反应器作为化学工业的核心装备，它直接决定反应性能、产品质量、能耗以及物耗等。对于同一反应体系，若反应器形式不

同，即使在同样的操作条件下，其反应性能也会表现出明显的不同，因为在不同的反应器内，流体的流动、混合、分散、传递性能均会有明显的差异，这些差异将直接影响体系的停留时间、反应器内的温度分布和浓度分布，进而决定反应过程的转化率、选择性等。因此反应器创新一直是化学工程学科的重要研究方向。再如分离装备，它与反应器一样是化学工业的核心装备。分离装备将在很大程度上决定一个化工企业投资、生产过程的能耗和物耗以及产品质量。对于同样的分离体系，若分离装备不一样，其中的多相流体的流动、分散和混合状态均会有明显的不同，这将直接决定分离体系内的传质面积、传质距离、流动的非理想性等，进而决定分离过程的收率、选择性和产品纯度等。因此分离装备的创新也一直受到研究者的广泛关注。总之，化工关键装备的创新是实现化学工业及其相关产业绿色、安全和高效的基础，是化工过程强化研究的重要组成部分。

近年来，化工装备创新及其过程强化技术已成为化工学科研究的前沿和化工产业发展的重要方向，国内外众多研究者开展相关方面的研究工作，部分工作也取得了突出进展。例如，通过提高换热器效率可将一个反应过程用时从原有的十几小时降到十几分钟；利用结构化反应器在同样的生产能力下可将反应器体积减小2个数量级；利用微反应器可以有效提高传质和传热性能，较常规设备的传质性能可提高至少1个数量级；利用转盘反应器可将某些体系的反应时间大幅度缩短、产品纯度大幅度提高。从目前的研究成果和产业化应用效果来看，对于化工关键装备创新及其过程强化技术的学术思想主要表现为以下三个方面。

(1) 设备尺度强化技术：即通过空间尺度的大幅度减小实现传递距离大幅度减小和传递比表面积的巨大提高，大幅度提高传递速率，进而强化反应和分离过程，这类创新的典型代表为微反应器、微换热器、微型传质设备和转盘反应器等。

(2) 设备结构强化技术：即通过反应器和分离设备内构件结构创新为反应和分离过程提供均一理想的环境，大幅度降低系统的非理想性，进而大幅度提高反应和分离过程的选择性和效率，其典型代表为结构反应器、静态混合反应器、分散-聚并型脉冲筛板塔和规整填料塔等。

(3) 速率匹配强化技术：即通过对于体系反应动力学和传递动力学性质的充分了解，优化反应器结构和能量输入大小及方式，实现传递和反应速率的匹配，进而有效降低反应和分离过程的能耗和物耗，有效提高过程的选择性，其典型代表为聚合反应器和生物反应器的创新及其过程强化。

近年来,我国化工研究者在化工关键装备创新及其过程强化技术方面同样取得了一些突破,如在微反应器、旋转床(盘)反应器、静态混合反应器、燃料电池关键装备、聚合反应器、生物反应器、旋流分离设备等均有创新,并产生了一些过程强化新技术,这些过程强化新技术对我国化学工业的技术进步以及化工基础理论的发展均产生了重要影响。

四、过程耦合强化

众所周知,几乎所有的化学工业系统中都含有反应与分离这两个重要的过程。化工生产的原料来源广泛、产品质量要求高,待分离体系组成、化学反应机理复杂。因此,化工生产通常涉及多种分离、反应的单元操作过程。其中,分离过程占整个化工生产过程能耗的比例极大(70%~80%)。同时,由于受到体系平衡态和副反应的限制,多数反应过程的转化率难以进一步提升。单一的分离和反应过程已经难以同时满足多组分、高纯度、精细化和经济环保等多重的化工产品生产需求。因此,需要将各种过程耦合,通过建立优势互补的新型高效组合技术和工艺流程,实现过程强化,提高生产效率,降低过程能耗,减少废物排放,达到总体效益最优及环境影响最小的效果,推进化工产业向绿色、高效化升级。化学工业中的过程耦合强化包含多重内涵,它既包括分离和反应过程之间的耦合强化,又包括各种分离过程之间的耦合强化。

对于分离-反应过程的耦合强化,通过分离过程将反应物与产物及时分离,打破化学反应平衡,从而促进目标反应的进行,达到提高反应转化率和选择性的目的。同时,通过化学反应将难分离组分彻底转化为其他物质,从而改变原有分离体系的组成和相平衡状态,实现分离推动力的增强,以获得较纯的目标产品。通过这两种互为因果的途径,保障了反应进程和分离效果的协同强化。因此,通过将反应与分离过程耦合,可以充分发挥过程的潜力,实现反应器和分离器在时间、空间尺度上的耦合集成、反应和分离的过程强化。例如,反应结晶是将化学反应过程和结晶分离过程相耦合,利用化学反应生成某种难溶或微溶的固相物质的结晶过程。在反应结晶过程中,初始过饱和度过高使得成核难以控制、纳米级的粒子的聚结难以有效控制、溶液结晶过程中晶体粒子的外部生长环境难以调控,从而使得晶体产品的晶须以及粒径难以得到有效的调控,研究反应结晶过程的机理与调控关键能够有效促进高端功能粒子产品的精制技术发展。再如,反应精馏是化学反应过程与精馏分离过程的有机耦合。反应精馏与反应、精馏分别进行的传统生产工艺相比,具有反应转化率高、产品选择性高、能耗和物耗低、流程简单、产

品分离负荷低、生产能力高、可连续化生产及投资少等优点。反应精馏耦合技术作为重要的化工过程强化技术之一，它不仅实现了反应过程与分离过程的有机结合，更重要的是通过反应与分离过程的耦合实现反应过程与分离过程的相互强化。

对于分离-分离过程的耦合强化，其特点是利用精馏、结晶、吸附、吸收、膜分离等不同分离技术的分离特性、成本特征和组合效应，通过多技术耦合的协同增效和优势互补，突破单一处理技术难以实现的复杂组分、宽浓度范围原料的综合分离和回收。分离物系的复杂性和多种分离技术的综合使用，对耦合技术的模拟和设计提出了更高的要求，这推动了化工数学模型、准确的过程模拟和分离序列设计方法的研究进程。同时，随着对过程设计精度的要求不断提高，分离系统的耦合集成度逐步提升，亟须对于分离体系的质量/能量流进行精确匹配和集成利用，这从根本上推动了传质、传热和反应过程耦合强化的新型分离技术开发。例如，对于 CO_2 这种典型的温室气体和常见的大宗气体原料，其捕集和提纯可通过吸收、吸附、膜分离、精馏等多种技术处理，而各种技术又有其各自的优势分离区间和成本特性，通过建立分离效率判据，确定吸收/膜分离/吸附精馏集成分离流程，可以低能耗、低成本地获得 CO_2 气体粗产品。然后，采用吸附-精馏耦合过程将粗产品进一步分离，从而突破了现有 CO_2 分离和提纯过程中能耗高、不能制备超纯 CO_2 的技术瓶颈，进一步延伸 CO_2 产品的产业链。通过分离过程的耦合强化，不仅可捕集、提纯和产品化大宗温室气体原料，实现产品价值提升和环境保护的双重目标，还可综合处理含有能源型气体组分（烃类、氢气等）的多源头、宽浓度范围废气，“变废为宝，变害为利”。例如，围绕低能耗、易耦合的膜分离技术构筑多技术耦合分离过程，通过流程整体设计与协同优化，整合各种分离技术对不同气体组分的分离特征，构建协同增效的耦合流程拓扑结构，解决化工气体处理中气源组成多、浓度变化大、非稳态排放等特点与单一分离技术局限性之间的矛盾，同时进一步提升过程的稳定性和适用性。

此外，伴随着耦合强化分离技术的发展，需要配套的新型高效分离过程装置随之进步，为进一步强化反应、分离过程的效果和控制精度，满足高纯度、精细分离、低能耗、环保等多重分离需求打下基础。

我国相关高等院校和科研院所的研究团队，针对高效过程耦合强化的瓶颈问题展开攻关研究，取得了优异的系列科研成果，在功能粒子产品、反应精馏、 CO_2 高效捕集与提纯、炼厂气综合回收等领域形成了一系列有代表性的先进技术和应用工程，对我国化工产业的节能减排、产业转型升级作出了重要贡献。



第二章

新材料（介质）强化

本章着重介绍催化剂与过程强化、结构化催化剂与反应器、膜材料与反应分离、生物催化与分离介质工程强化技术、超临界流体强化分离技术、离子液体强化的反应及分离过程创新六方面内容。

第一节 催化剂与过程强化

一、背景意义

催化在化工生产中已经发挥了非常重要的作用。随着人类社会的发展，面临的能源、环境与安全等问题愈发严重。要解决这些问题，催化将发挥更加重要的作用^[1]。使用催化剂也已经成为绿色化学十二原则之一^[2]。我国自改革开放以来，催化研究得到了飞速发展，取得了一些令世人瞩目的成果，解决了我国国民经济发展的一系列难题，如合成氨、清洁油品生产和环境污染治理等方面，我国已经形成一支在国际催化领域具有重要影响的研究队伍。特别是2006年，第16届国际催化大会在北京成功举行，标志着我国催化研究的国际地位显著提高。催化也是我国化工领域的研发热点，国内化工相关院所都有学者开展催化研究，这些院所包括中国科学院大连化学物理研究所（中科院大连化物所）、中国科学院过程工程研究所（中科院过程所）、中国科学院山西煤炭化学研究所、中国科学院兰州化学物理研究所、中国科学院上海分院、清华大学、天津大学、华东理工大学、大连理工大学、北京化

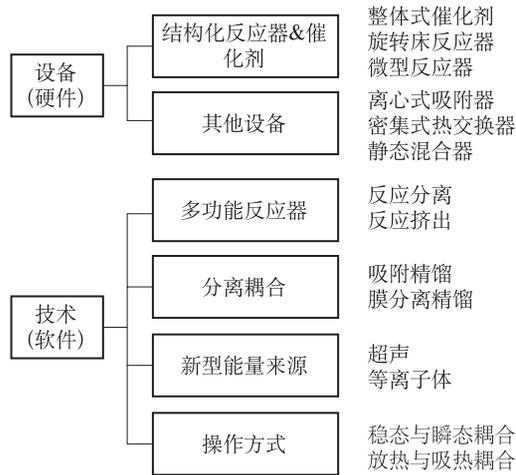
工大学、南京工业大学、浙江大学、中国石油大学、华南理工大学、四川大学、上海交通大学、西安交通大学、太原理工大学、浙江工业大学、福州大学等，以及中国石化各石油化工研究院、中国石油各石油化工研究院、北京低碳清洁能源研究所等。随着我国科学技术的发展，可以预期，我国催化化学科还将进一步快速发展^[3]。

过程强化在 20 世纪 90 年代逐步引入化工技术的发展领域。化学化工给人类创造大量新材料并给社会带来巨大推动作用的同时，人们也逐渐意识到，许多宝贵的化工资源并未得到有效利用，工艺生产过程产生大量排放物并造成严重的环境污染，化工过程存在“高能耗、高污染和高物耗”等现实问题。为了解决这一瓶颈，实现化学工业的可持续生产，与催化反应相关的过程强化技术应运而生。化工过程强化技术是以节能、降耗、环保、集约化为目标的新型技术，是目前国内外化工领域的研究热点。我国化工相关院所所在催化相关过程强化方面开展了各具特色的基础研究与技术开发，在超重力技术、膜过程耦合技术、微化工技术、磁稳定床技术、等离子体技术、离子液体技术、超临界流体技术、微波辐射技术等强化技术方面取得了长足的进步，部分技术如磁稳定床、超重力技术、离子液体技术、膜催化等实现了工业化应用或者开展了工业化试验。随着我国综合国力和科技水平的提高，可以预见，更多科学价值重大、应用前景突出的强化催化技术将不断涌现^[4]。

本章将结合过程强化技术的发展历程，首先介绍催化与过程强化的科学基础，在此基础上阐述强化催化反应过程的基本原理，最后结合催化与过程强化现阶段的发展进程探讨该领域存在的问题与未来发展趋势。

二、科学基础

过程强化是通过技术创新与系统协调，改进工艺流程，提高设备效率，使工厂布局更为紧凑，单位能耗和“三废”（废水、废气、固体废弃物）显著减少的新技术。在过程强化技术早期发展阶段，相关手段主要分为新设备与新技术两个方面，对应“硬件”与“软件”强化，如图 2-1 所示^[5]。从尺度上讲，该阶段主要研究的是宏观和介观尺度的现象与过程。对化学反应过程而言，微观与纳米尺度上的信息同样关键，同时也是过程强化技术未来发展的重要方向。

图 2-1 过程强化中的设备（硬件）与技术（软件）强化^[5]

微观与纳米尺度上过程强化的典型技术就是催化。催化原理如图 2-2 所示。催化剂的引入可以改变化学反应的动力学历程，进而提高反应速率、改变转化率和/或选择性，进而达到强化化学反应的目的。催化剂的存在不会改变热力学平衡，热力学不可行的反应即使采用催化剂也不可能实现。现代化工一些重要反应过程，如合成氨、甲烷蒸气转化等，都必须有高效催化剂的参与才能工业化运行。

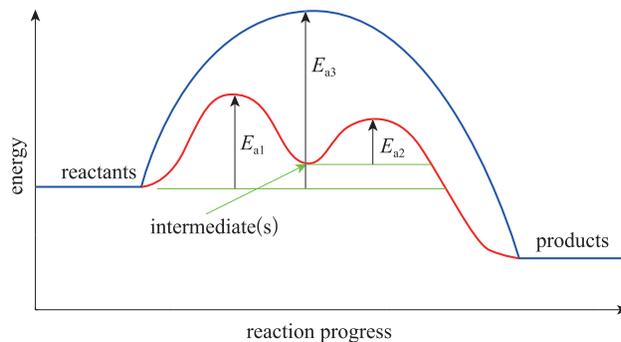


图 2-2 催化与非催化反应过程的能量变化

催化过程中从反应物到中间物种的活化能： E_{a1} ；催化过程中从中间物种到产物的活化能： E_{a2} ；非催化反应过程中从反应物到产物的活化能： E_{a3} ；能量：energy；反应物：reactants；中间（过渡）物：intermediate(s)；产物：products；反应过程：reaction progress

催化研究的任务大体上包括新催化剂或者相关新工艺的开发、旧工艺催化剂的改进、催化剂的失活分析及催化剂再生四个方面^[6]。化学工艺中的原

料预处理、原料转化为产物及产物分离等过程都经常需要借助催化作用来实现或强化。新型高效催化剂的开发意味着新工艺的实现。同时，随着原材料供给结构的改变及新的环境保护法规的实施，旧工艺催化剂必须进行改进。而催化剂的失活主要包括中毒、老化和积炭等因素。催化研究的目标在于制备高活性、高选择性、长寿命及符合其他工艺要求的高效催化剂。高活性意味着原料的充分转化；高选择性则能保证资源的有效利用以及三废的减少；长寿命则有利于工业生产中成本的降低，也有利于减少与催化剂制备相关的能耗、物耗和废弃物。此外，还需要满足机械强度等方面的工艺要求。为了实现高效催化体系的制备与应用，需要对催化剂机理进行研究。只有掌握了催化强化反应的原理，才能通过创新催化技术变革化学工业过程。

三、催化强化反应过程原理

随着科学技术发展，人们已经对催化反应实质有了较好的认识。催化反应过程中，反应物分子在催化剂表面吸附，反应物分子与催化剂表面通过吸附作用形成弱相互作用的键合，导致反应物分子在结构和电子分布上发生改变，从而使反应物分子更方便地转化为中间物种，进而改变反应物分子转化为产物的反应历程。换言之，催化作用的基础在于通过催化剂表面与反应物分子的相互作用对反应活化能进行调控，其本质为催化剂表面与吸附的反应物分子之间的电子传递^[7]。

基于以上催化作用原理分析可知，催化科学的关键问题主要包括以下三个方面。

1. 催化剂表界面结构的精准设计与构建

催化剂的催化性能与催化剂的表界面结构，特别是局域原子和电子结构密切相关。催化剂的表界面结构与反应物分子之间的能量及空间匹配很大程度上决定催化剂在反应过程中的催化效力。催化剂的表界面结构主要取决于催化剂的组成、尺寸和形貌等因素。随着纳米科技和现代合成方法的不断进步，人们得以可控制备具有特定结构和电子性质的催化剂表界面结构。这方面催化科学研究的关键在于从分子原子尺度上实现催化剂固体表界面局域原子和电子结构的精准设计与构建，进而借用现代的象征手段，获得催化剂的表界面结构对反应物分子的吸附和催化反应性能的影响。

2. 反应物分子在催化剂表界面的选择性活化与重构

催化作用产生的两个因素分别是催化剂的表界面结构和反应物分子的吸