

·国内期刊亮点·

发现白腐真菌 *Trametes* sp. SQ01 漆酶新功能



山西大学生物技术研究所杨秀清和文潇玮利用紫外可见光谱分析法,研究了漆酶对8种不同取代基的HOPDAs的转化情况,并对漆酶的稳态动力学参数进行了测定。

结果表明漆酶可以在没有任何中介物的条件下催化HOPDAs,并生成无色的物质,尤其是漆酶可以催化3,8,11-3CI HOPDA,而这一物质几乎不能被BphD和*Rhodococcus* sp. R04转化。稳态动力学分析表明,在5种HOPDAs中,10-CI HOPDA是漆酶的最适底物,其 K_m 与HOPDA和8-CI HOPDA相近。尽管3,10-2F HOPDA并不是漆酶的最适底物($K_m=17.02 \mu\text{mol/L}$),但是它的转化效率(k_{cat}/K_m)是最高的。这说明漆酶可以有效转化多种HOPDAs,这为多氯联苯的降解提供了一种新的思路。

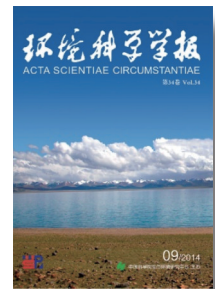
《微生物学报》[2014-08-04]

推荐人:《微生物学报》,张晓丽

O/H/O 生物工艺中焦化废水含氮化合物的识别与转化

为考察焦化废水中含氮化合物的去除过程,华南理工大学环境与能源学院易欣怡等在与实际生产 $330 \times 10^4 \text{ t} \cdot \text{a}^{-1}$ 焦炭工艺相配套的焦化废水处理工程O/H/O生物工艺中,检测了原水与生物出水中含氮化合物的种类与形态,以及各单元工艺中无机氮及部分有机氮化合物的浓度,分析特征化合物的转化。

研究发现,焦化废水原水中含有的无机氮化合物主要为 NH_4^+-N (33.6%)、氰化物(7.5%)、硫氰化物(40.4%), NO_2^--N 及 NO_3^--N 的含量约为1%,折算总氮浓度约为 $240 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$,占82.5%左右;有机氮当中,可检测到胺类14种,有机腈类22种,含氮杂环化合物76种,以总氮形式表达其浓度低于 $50 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$,约占17.5%。处理过程中, O_1 反应器能够把氰化物、硫氰化物氧化为氨氮,有机氮发生形态改变;H反应器中,环状含氮化合物通过水解作用实现分子开环转变为氨氮,回流液中的硝态氮实现反硝化转变为氮气; O_2 反应器能够将低价状态的含氮化合物转变为硝态氮;生物出水中,硝态氮占总氮的70%以上;含氮化合物的转化受反应器的性质与运行条件控制,表现出复杂性。



《环境科学学报》[2014-09-06]

提出含有平面结构场景的捆绑调整

捆绑调整是计算机视觉中三维结构恢复过程的重要步骤。捆绑调整通常将空间中点与点坐标的调整视为相互独立的过程,但是在包含有自然物和人工物的场景中,由于存在多余的自由度,这种调整方法会导致优化结果偏离真值。中国科学院自动化研究所模式识别国家重点实验室谢远帆等提出了一种带有共面约束和平面夹角约束的捆绑调整,用于优化带有平面的场景。

借助新的参数化方法,共面约束和夹角约束可以方便地进行表示,并且带有这2类约束的捆绑调整求解过程,仍然是一个无约束的非线性最小二乘问题。实验结果表明,这种带有先验信息的捆绑调整提供了对结构的更准确估计。由于先验信息的加入,增强型法方程的维度变高,借助了稀疏的求解技术和预条件子方法,大大降低了求解时间。最后,为了在实际应用中能够自动找出夹角约束,提出了一种基于最大完全图的贪心方法,该方法尽可能多地保留了夹角



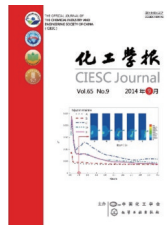
约束。《自动化学报》[2014-08-20]

4-硝基苯腈合成反应的热力学计算机模拟

华东理工大学化工学院吕乐等采用密度泛函理论中的B3LYP方法,通过计算机模拟,研究了4-硝基苯腈合成反应中各物质的结构。在此基础上对反应热力学进行了模拟计算,通过计算,优化了反应物与产物的几何构型与电子分布,并得到了4-硝基苯腈合成反应的主副反应焓变、Gibbs自由能变以及反应平衡常数。

模拟计算结果表明,主反应的焓变为 $-15.0 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$,为放热反应,副反应的焓变为 $10.0 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$,为吸热反应,主反应的标准Gibbs自由能变为 $39.7 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$,而副反应的Gibbs自由能为 $45.2 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$,该反应为不可逆反应。4-硝基苯腈合成反应的热力学性质的计算为反应工艺条件的控制和热力学研究提供了理论指导。

《化工学报》[2014-09-05]



高超声速飞行器前缘缝隙流动数值模拟研究

中国空气动力研究与发展中心空气动力学国家重点实验室张昊元等通过分析高超声速飞行器前缘防热瓦结构,建立了一种开缝前缘的简化模型。针对这一模型的流场通过求解三维可压缩Navier-Stokes方程进行了数值模拟。

研究了缝隙诱导形成的三维旋涡的空间分布特征和旋涡运动对物面气动加热的影响规律。模型圆弧段缝隙肩部倒圆区因存在较强的三维效应形成“常规”高热流区,而缝隙内主旋涡再附致使侧壁上存在一个“非常规”高热流区;模型平直段展向流动诱导缝隙上方出现较强的旋涡运动,同时流动在缝隙倒圆区形成分离涡并于缝隙侧壁面再附,受这些旋涡运动的影响,缝隙肩部倒圆区转变为局部热流低值区,缝隙侧壁上存在局部热流高值区。

《宇航学报》[2014-08-15]

(编辑 祝叶华)

