

蔬菜复合纸的大豆蛋白喷涂液雾化角度研究

侯红红¹, 杨传民¹, 田少龙², 王心宇¹, 陈诚¹

(1. 天津商业大学, 天津 300134; 2. 河北工业大学, 天津 300131)

摘要: **目的** 研究蔬菜复合纸的大豆蛋白喷涂液雾化角的计算方法, 及喷涂过程中工艺参数对大豆蛋白喷涂液雾化角度的影响。**方法** 运用 MATLAB 软件, 通过图像处理方法计算蔬菜复合纸的大豆蛋白喷涂液的雾化角度, 并利用响应面分析法研究喷涂参数对大豆蛋白喷涂液雾化角的影响。**结果** 单个因素中喷涂流量和气压对大豆蛋白喷涂液的雾化角有显著影响, 喷涂流量、气压及液压三者的交互作用对喷雾角度有极显著影响($0.0008 < 0.05$)。通过分析软件建立了雾化角与喷涂工艺参数之间的关系模型, 并得到了最佳喷涂条件。**结论** 当喷涂流量为 48.04 mL/min, 气压为 199 Pa, 液压为 151 Pa 时, 大豆蛋白喷涂液的雾化角最大值为 138.2637°。

关键词: 蔬菜纸; 大豆蛋白; 雾化角; 喷涂; 可食性包装纸

中图分类号: TB484.1; TS206 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3563(2014)03-0033-06

Spray Angle of Soy Protein Spray Coating Dispersions for Vegetable Composite Paper

HOU Hong-hong¹, YANG Chuan-min¹, TIAN Shao-long², WANG Xin-yu¹, CHEN Cheng¹

(1. Tianjin University of Commerce, Tianjin 300134, China; 2. Hebei University of Technology, Tianjin 300131, China)

ABSTRACT: **Objective** To investigate the calculation method of spray angle for soy protein spray coating dispersions (SPSCD) of the vegetable composite paper in the spraying process and the influence of spraying process parameters on atomization angle of SPSCD. **Methods** The spray angle of SPSCD for vegetable composite paper were calculated using MATLAB software based on the image processing method. The effect of process parameters on the spray angle produced during spraying process was also studied based on response surface methodology analysis. **Results** Among the single factors, the spray flow rate and pressure had a significant effect on SPSCD. The interaction of spray flow rate, air pressure and hydraulic pressure had a very significant effect on the spray angle ($0.0008 < 0.05$). The relational model between spray angle and process parameters was built by analysis software and the optimal spraying conditions were identified. **Conclusion** The spray angle of SPSCD could reach 138.2637°, when the flow rate was 48.04 cc/min, the air pressure was 199 Pa, and the hydraulic pressure was 151 Pa.

KEY WORDS: vegetable paper; soy protein; spray angle; spray coating; edible wrapping paper

可食性包装以其可食、无污染、环境友好等优越性受到国内外研究者的重视^[1-3]。蔬菜纸亦称纸菜, 是一种具有可食与保鲜包装双重功能的新型蔬菜深加工产品^[4-5]。纯蔬菜纸不具备封合性能, 在纯蔬菜纸表面喷涂一层大豆蛋白喷涂液, 使蔬菜复合纸具有

热封性能和较高的抗张强度, 但是大豆蛋白喷涂液的喷涂雾化和成膜过程影响着涂层的质量^[6]。

雾化是把液体射流碎裂成细小液滴群的过程。雾化过程是一极为复杂的物理过程, 它与流体的湍流扩散、液滴穿越气体介质时所受到的空气阻力等因素

收稿日期: 2013-10-11

基金项目: “十二五”科技支撑计划项目(2012BAD32B04)

作者简介: 侯红红(1987—), 女, 河北人, 天津商业大学硕士生, 主攻食品包装新材料。

通讯作者: 杨传民(1959—), 男, 河北人, 博士, 天津商业大学教授, 主要从事机械设计及理论、包装工程学科专业的教学和科研工作。

有关^[7-8]。雾化角指喷嘴出口到喷雾炬外包络线的2条切线之间的夹角^[9]。雾化角表征喷雾的发散度,是喷雾的空间特性。喷雾的基本形状为扇形、实心锥形、空心锥形和液柱流等4种。喷嘴的基本构造可以分为单靠液压喷雾的“单流体”,液体与气体混合的“二流体”等2种^[10]。

笔者采用形成扇形喷涂(或称直线型喷涂)的喷嘴结构,喷涂雾化整体形状直接影响涂层成膜质量和致密性。雾化整体形状受到母液的流变学特性、喷涂气压、电子脉冲数(流量控制)等的制约和控制。笔者研究了蔬菜纸喷涂过程中喷涂气压、液压及流量对大豆蛋白喷涂液雾化角的影响。

1 实验

1.1 材料和仪器设备

实验材料:天津市市售芹菜、大豆蛋白等原材料;食品级羧甲基纤维素钠(CMC)、甘油等添加剂。

实验仪器设备:IDTY4S2-16G型高速摄像机,美国Integrated design tools公司;电子脉冲喷涂设备,斯普瑞喷雾系统上海有限公司;ZQS2-150型打浆机,陕西科技大学机械厂;ZQS8-300S型蔬菜纸机,天津商业大学研制;WH7401-60型电动搅拌器,天津市华北实验仪器有限公司;DK-98-IIA电热恒温水浴锅,天津泰斯特仪器有限公司。

1.2 喷涂过程

喷涂过程^[11]示意图1。首先制备一种大豆蛋白喷涂液^[12](配方省略),将制备好的喷涂液加入储液罐,储液罐、气泵与喷枪之间分别通过管道连接。当传送到喷涂区域时喷涂母液,2个喷枪在同一直线上,且喷雾的范围有交叉,当传送带以一定速度移动

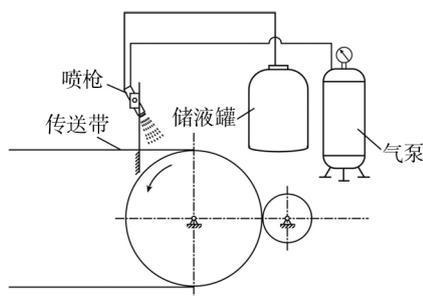


图1 大豆蛋白液喷涂过程

Fig.1 The spraying process of the SPSCD

时,喷涂范围覆盖整个基面。这个过程采用喷涂表面并随即干燥的方法实现了大豆蛋白粉与纯蔬菜纸的复合,这种喷涂成膜方法与流延成膜方法的区别在于形成了更薄的膜,且能使薄膜和可复膜的材料在成形时结合为一体。该工艺过程中喷涂母液可以单独成膜,亦可与任何可喷基材复合。

1.3 大豆蛋白液喷雾角的测定方法

喷雾角度对于喷嘴是一项非常重要的性能指标,由于从喷嘴喷射出的雾化角及雾化形状受外界因素的影响较大,如喷射压力和空气阻力等^[13],因此,喷雾图像不规则,边缘非直线。对喷雾角的计算国家尚无统一的标准。笔者参照文献^[14-15]介绍的方法,编写了计算大豆蛋白喷涂液出口喷雾角的程序。通过图像处理方法找到喷雾的图像边界,采用最小二乘拟合方法,用直线拟合最接近雾化射流的边缘曲线,2条拟合直线的夹角即为雾化角(每个条件下做8个平行实验,取平均值)。

1.3.1 出口喷雾角

出口雾化角被看作喷嘴雾化角的一种近似表示,见图2。从图2可知,在喷嘴出口作雾化边界的切线,2条切线的夹角即为出口雾化角 α ^[16]。 α 大说明喷束松散, α 小说明喷束紧密^[17]。

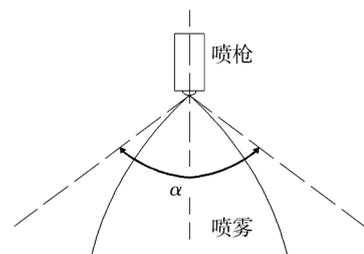


图2 出口喷雾角

Fig.2 The exit spray angle

1.3.2 图像采集

利用IDTY4S2-16G型高速摄像机通过图像采集卡把数字影像输入计算机,通过计算机观察动态图像,根据试验条件以4500帧/秒的频率采集大豆蛋白液下落过程的静态图像,见图3。

1.3.3 图像处理及雾化角的确定

利用MATLAB图像处理功能将图像转换成二值图像,转换后的二值图像见图4。从图4截取出口部分的图像,见图5,然后提取出口处图像的边界点,进行直线拟合。提取的喷雾图像边缘曲线及拟合直线

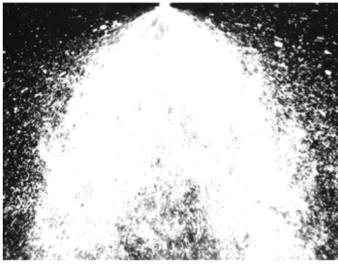


图 3 原始图像

Fig. 3 The original image

见图 6。图 6 中 2 条直线的夹角即为雾化角。



图 4 二值图像

Fig. 4 Two-value image



图 5 出口处图像

Fig. 5 The exit image

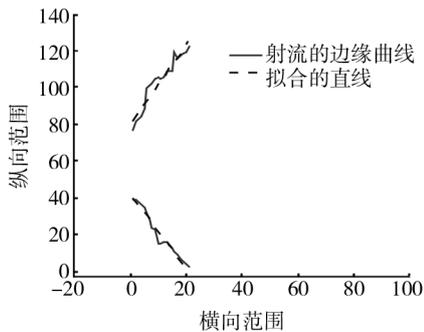


图 6 提提取出口的处图像边缘曲线及拟合直线

Fig. 6 Edges extracted from the spray image and its fitted straight lines

1.4 实验方法

1.4.1 大豆蛋白喷涂液流量、气压及液压对喷雾角的影响

实验条件:喷涂设备的气压和液压均为 200 Pa,

改变大豆蛋白喷涂液流量(30,35,40,45,50,55,60 mL/min);液压为 200 Pa,喷涂液流量为 45 mL/min,改变气压(100,110,120,130,140,150,160,170,180,190,200,210,220 Pa);大豆蛋白喷涂液流量为 45 mL/min,气压为 200 Pa,改变液压(140,150,160,170,180,190,200,210 Pa)。在上述每个实验条件下分别采集图像后,利用 MATLAB 软件进行喷雾角的测量。

1.4.2 蔬菜复合纸的喷涂试验条件优化

单因素试验过程中流量超过 50 mL/min 时,大豆蛋白喷涂液接触纯蔬菜纸的表面后出现倒流现象,这会导致蔬菜复合纸成品厚度不均而影响其整体质量。综合考虑喷雾角变化和喷涂效果,优化试验条件,流量取 40~50 mL/min。根据上述情况以及单因素试验结果,以液压、气压和喷涂液流量为影响因素,利用 Design-expert 软件优化喷涂雾化角度,实验设计水平见表 1。

表 1 优化试验中喷雾参数水平编码

Tab.1 Levels and codes of spraying parameters in optimization test

喷雾参数	编码	水平		
		-1	0	1
液压/Pa	X_1	150	165	180
气压/Pa	X_2	170	185	200
流量/(mL·min ⁻¹)	X_3	40	45	50

2 结果与分析

2.1 喷涂液流量对雾化角度的影响

喷涂过程中,设定喷涂气压、液压均为 200 Pa 时,流量不同对大豆蛋白喷涂液雾化角的影响见表 2。由表 2 可知,流量小于 55 mL/min 时,随着流量的增大,喷雾角呈上升趋势;当流量超过 55 mL/min 时,喷雾角反而减小。根据该实验结果,优化实验中流量

表 2 不同流量对大豆蛋白喷涂液雾化角的影响

Tab.2 Effect of different flow rates on spray angle of SPSCD

流量 /(mL·min ⁻¹)	喷雾角 /(°)	流量 /(mL·min ⁻¹)	喷雾角 /(°)
30	103.3455	50	112.8835
35	106.4866	55	127.6898
40	107.5474	60	127.2482
45	112.2522		

应为 40 ~ 55 mL/min。

2.2 喷涂气压对雾化角度的影响

蔬菜复合纸喷涂过程中,大豆蛋白喷涂液的流量为 45 mL/min,液压为 200 Pa 时,气压对喷雾角的影响见表 3。从表 3 可看出,气压由 100 Pa 增大至 210 Pa 时,喷雾锥角 α 由 86.6568° 增大到 112.4619°。气压小于 150 Pa 以下时,喷雾角较小且变化缓慢,气压超过 150 Pa 后,喷雾角急剧增大,但气压高于 200 Pa 后,喷雾角增大不明显。由此实验结果确定优化实验中气压为 170 ~ 200 Pa。

表 3 不同喷涂气压对大豆蛋白喷涂液雾化角的影响

Tab.3 Effect of different air pressures on spray angle of SPSCD

气压/Pa	喷雾角/(°)	气压/Pa	喷雾角/(°)
100	86.6568	160	102.2623
110	86.7506	170	103.4313
120	92.6405	180	105.7312
130	95.1858	190	108.8678
140	95.5561	200	112.2522
150	93.7221	210	112.4619

2.3 喷涂液压对雾化角度的影响

大豆蛋白喷涂液喷施流量为 45 mL/min,气压为 200 Pa 时,液压不同对喷雾角的影响见表 4。由表 4 可知,液压由 140 Pa 增大至 210 Pa 时,喷雾角最小值为 109.2583°,最大值为 120.6474°。随着液压的增加,大豆蛋白喷涂液的喷雾角呈先上升后下降再上升的趋势。液压小于 170 Pa 时,喷雾角随液压的增大而增大,且在 170 Pa 时达到最大,之后随着液压的增大,喷雾角反而降低,液压超过 190 Pa 时喷雾角又开始增大,但喷雾角仍低于 120°。故优化实验中,液压取 150 ~ 180 Pa。

表 4 不同液压对大豆蛋白液喷雾角的影响

Tab.4 Effect of different hydraulic pressures on spray angle of SPSCD

液压/Pa	喷雾角/(°)	液压/Pa	喷雾角/(°)
140	109.2583	180	115.6054
150	110.7058	190	109.3656
160	115.3896	200	112.2522
170	120.6474	210	119.8862

2.4 蔬菜复合纸的喷涂优化实验对雾化角度的影响

喷涂液流量、气压及液压的通用旋转组合设计实

验结果见表 5,喷雾角最大值为 138.0967°,最小值为 127.3243°,对喷雾角进行方差分析结果见表 6。

表 5 通用旋转组合设计实验

Tab.5 General rotatable central composite design

实验号	液压 X_1	气压 X_2	流量 X_3	喷雾角 Y
1	1.65	1.85	45.00	135.1952
2	1.80	2.00	50.00	134.2804
3	1.50	1.70	50.00	127.3243
4	1.65	1.85	45.00	136.4778
5	1.65	1.85	45.00	135.7443
6	1.50	2.00	40.00	136.3424
7	1.65	1.85	45.00	135.8415
8	1.65	2.10	45.00	135.4076
9	1.50	2.00	50.00	138.0967
10	1.40	1.85	45.00	132.5130
11	1.65	1.85	45.00	136.0138
12	1.80	1.70	40.00	129.3288
13	1.80	1.70	50.00	132.2837
14	1.65	1.85	45.00	135.0538
15	1.65	1.85	53.41	136.8370
16	1.65	1.85	36.59	128.9334
17	1.50	1.70	40.00	131.1348
18	1.90	1.85	45.00	133.4644
19	1.65	1.60	45.00	133.4616
20	1.80	2.00	40.00	135.1429

表 6 通用旋转组合设计回归方程方差分析

Tab.6 Analysis of variance of regression equation for the general rotatable central composite design

变异来源	平方和	自由度	均方	F 值	P 值
模型	157.0937	13	12.084 14	42.804 789	<0.0001*
X_1 -液压	0.452 581	1	0.452 581	1.603 146 1	0.2524
X_2 -气压	1.893 458	1	1.893 458	6.707 064 5	0.0412
X_3 -流量	31.233 45	1	31.233 45	110.636 06	<0.0001
X_1X_2	8.341 979	1	8.341 979	29.549 210	0.0016
X_1X_3	2.151 360	1	2.151 360	7.620 613 7	0.0328
X_2X_3	0.381 676	1	0.381 676	1.351 983 8	0.2891
X_1^2	15.305 91	1	15.305 91	54.217 074	0.0003
X_2^2	3.887 359	1	3.887 359	13.769 920	0.0100
X_3^2	16.412 15	1	16.412 15	58.135 629	0.0003
$X_1X_2X_3$	11.003 21	1	11.003 21	38.975 904	0.0008
$X_1^2X_2$	19.012 29	1	19.012 29	67.345 907	0.0002
$X_1^2X_3$	18.225 73	1	18.225 73	64.559 736	0.0002
$X_1X_2^2$	0.881 108	1	0.881 108	3.121 088 3	0.1277
残差	1.693 848	6	0.282 308		
失拟项	0.298 685	1	0.298 685	1.070 432	0.3483**
纯误差	1.395 163	5	0.279 033		
总值	158.7876	19			

注: * 为显著, ** 为不显著,显著水平为 $P < 0.05$ 。

由表6可知,气压和流量对大豆蛋白喷涂液的雾化角影响显著,尤其是流量($P < 0.0001$),液压对雾化角的影响不显著($0.2524 > 0.05$),气压、液压及流量三者之间的交互作用对雾化角影响显著($0.0008 < 0.05$)。

利用 Design-expert 分析软件对试验结果进行三次多元回归拟合,剔除不显著项后得到优化的回归方程为:

$$Y = 1025.37096 + 52.2493X_1 + 376.4621X_2 - 85.9437X_3 - 1353.0379X_1X_2 + 88.77046X_1X_3 + 17.4919X_2X_3 - 420.6911X_1^2 + 229.0139X_2^2 - 0.04269X_3^2 - 10.424667X_1X_2X_3 + 709.7187X_1^2X_2 - 20.8465X_1^2X_3 - 152.7561X_1X_2^2 \quad (1)$$

由表6可知,失拟项不显著($0.3483 > 0.05$),模型的 $P < 0.0001$,表明模型极显著。液压与气压对大豆蛋白喷涂液雾化角的影响见图7,流量与气压对大豆蛋白喷涂液雾化角影响的响应面见图8。试验中观察到雾化角越大时,形成的雾化液滴越细小且均

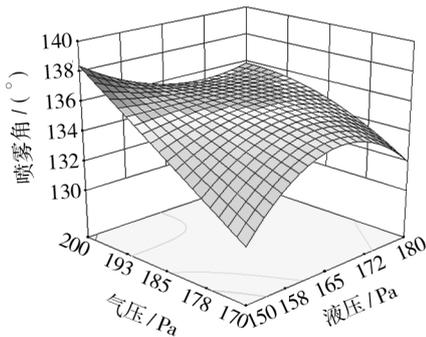


图7 液压与气压对大豆蛋白喷涂液雾化角的影响

Fig.7 Influence of hydraulic pressure and air pressure on spray angle of SPSCD

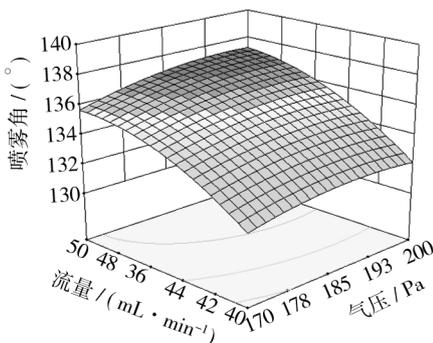


图8 流量与气压对大豆蛋白喷涂液雾化角的影响

Fig.8 Influence of flow rate and air pressure on spray angle of SPSCD

匀,其和纯蔬菜纸接触越紧密,制备出的蔬菜复合纸质量越好,所以将喷雾角最大值作为优化指标。通过分析软件优化喷雾角最大值时的最优实验方案:液压为151 Pa,气压为199 Pa,流量为48.04 mL/min。此条件下大豆蛋白喷涂液的理论预测雾化角为138.2780°,实际实验平均值为138.2637°,两者基本相符,说明该实验的优化条件和回归模型能够很好地应用于大豆蛋白喷涂液的喷涂工艺。

3 结语

利用 MATLAB 软件计算出了大豆蛋白喷涂液的雾化角。蔬菜复合纸喷涂过程中,喷涂参数对大豆蛋白喷涂液雾化角影响的重要性顺序依次为流量>气压>液压,并且喷涂参数三者之间的交互作用对喷雾角影响极显著。通过优化分析软件得到了喷雾角与喷涂变量之间的关系模型,并且该模型拟合效果很好($P < 0.0001$),以大豆蛋白喷涂液雾化角最大值为优化指标,最佳条件为液压151 Pa,气压199 Pa,流量48.04 mL/min。

参考文献:

- [1] FALGUERA V,QUINTERO J P,JIMENEZ A, et al. Edible Films and Coatings: Structures, Active Functions and Trends in Their Use[J]. Trends in Food Science and Amp Technology,2011,22(6):292—303.
- [2] JANJARASSKUL T,KROCHTA J M. Edible Packaging Materials[J]. Annual Review of Food Science and Technology,2010(1):415—448.
- [3] SU J,HUANG Z,LIU K, et al. Mechanical Properties, Biodegradation and Water Vapor Permeability of Blend Films of Soy Protein Isolate and Poly (Vinyl Alcohol) Compatibilized by Glycerol [J]. Polymer Bulletin, 2007, 58: 913—921.
- [4] SHAO C,YANG C,WANG X, et al. Characterization of Soy Protein-celery Composite Paper Sheet: Rheological Behavior, Mechanical, and Heat-sealing Properties [J]. Joarnal of Applied Ploymer Science,2012,125:255—261.
- [5] 闵玉涛,宋彦显. 蔬菜纸的研究进展[J]. 安徽农业科学, 2009(4):1779—1780.
- [6] MIN Yu-tao,SONG Yan-xian. Progress of Vegetable Paper Research[J]. Journal of Anhui Agricultural Science, 2009 (4):1779—1780.
- [6] 邵才,杨传民,王心宇. 大豆蛋白-芹菜复合纸力学性能

- 及热封性能研究[J]. 包装工程, 2011, 32(5): 1—3.
- SHAO Cai, YANG Chuan-min, WANG Xin-yu. Research on Mechanical Properties and Heat Seal Performance of Soybean Protein-celery Composite Paper[J]. Packaging Engineering, 2011, 32(5): 1—3.
- [7] 曹建明, 朱辉, 郭广祥, 等. 空气助力改善液滴雾化质量的研究[J]. 实验流体力学, 2013(1): 56—60.
- CAO Jian-ming, ZHU Hui, GUO Guang-xiang, et al. Study on Air Assistant to Improve Quality of Droplet Atomization [J]. Journal of Experiments in Fluid Mechanic, 2013(1): 56—60.
- [8] 蒋斌, 王子云, 付祥钊, 等. 内混式扇形空气雾化喷嘴参数研究[J]. 化工进展, 2011(2): 269—274.
- JIANG Bin, WANG Zi-yun, FU Xiang-zhao, et al. Numerical Study on Fan-shaped Air-blast Atomizer Parameters [J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2011(2): 269—274.
- [9] 汪铁林, 周玉新, 伍沅. 旋涡压力喷嘴的雾化特性[J]. 化学工程与装备, 2008(2): 6—10.
- WANG Tie-lin, ZHOU Yu-xin, WU Yuan. Atomization Characteristics of the Eddy Pressure Nozzle [J]. Chemical Engineering and Pharmacy, 2008(2): 6—10.
- [10] 付磊. 工业喷嘴喷雾特性测试系统研究与设计[D]. 天津: 天津大学, 2007.
- FU Lei. Research and Design on the System for Measuring Spray Characteristic of Industrial Nozzles [D]. Tianjin: Tianjin University, 2007.
- [11] 杨传民, 王心宇, 寇金宝. 蔬菜复合纸多喷枪喷涂复合系统: 中国, 202247529U[P]. 2012-05-30.
- YANG Chuan-min, WANG Xin-yu, KOU Jin-bao. Spraying Guns Composite System of the Vegetables Composite Paper: China, 202247529U[P]. 2012-05-30.
- [12] 侯红红, 杨传民, 汪浩, 等. 茴香及芹菜基可食性包装纸热封性能的研究[J]. 包装工程, 2013, 34(15): 23—27.
- HOU Hong-hong, YANG Chuan-min, WANG Hao, et al. Research on the Heat Sealing Performance of Fennel Based and Celery Based Edible Wrapping Paper [J]. Packaging Engineering, 2013, 34(15): 23—27.
- [13] 王彬. 雾化角对压力式液体雾化效果影响的理论及实验研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2007.
- WANG Bin. The Theoretical and Experimental Research of the Effect of Atomizing Angle on Pressure Type Liquid Atomization [D]. Chongqing: Chongqing University, 2007.
- [14] 邓巍, 丁为民, 柳平增, 等. 基于 MATLAB 的雾化图像处理及雾化角的测定[J]. 西北农林科技大学学报(自然科学版), 2006(7): 155—159.
- DENG Wei, DING Wei-min, LIU Ping-zeng, et al. A Method of Processing the Atomization Image and Detecting the Spray Angle [J]. Journal of Northwest A & F University (Natural Science Edition), 2006(7): 155—159.
- [15] 谭伟, 姚锡凡, 王斌, 等. 基于 MATLAB 的电控喷油器雾化角测量[C]//第十五届全国图象图形学学术会议, 2010.
- TAN Wei, YAO Xi-fan, WANG Bin, et al. A Measuring for Atomization Angle of Electronic-controlled Injector Based on MATLAB [C]//The 15th National Conference on Image Graphics, 2010.
- [16] 胡传胜, 熊洪亮, 虞先煌. 喷嘴液滴雾化细度和喷雾角测量装置的研究[J]. 能源研究与信息, 2001(4): 225—231.
- HU Chuan-sheng, XIONG Hong-liang, YU Xian-huang. An Apparatus for Determining Simultaneously the Atomized Particle Size and Spray Angle of the Atomizing Nozzle [J]. Energy Research and Information, 2001(4): 225—231.
- [17] FOQUE D, NUYTTENS D. Effect of Air Support and Spray Angle on Coarse Droplet Sprays in IVY POT Plants [J]. Transactions of the Asabe, 2011, 54(2): 409—416.

(上接第 38 页)

- [14] 黄宇, 刘庆林, 张新波. 含硅聚合物中小分子扩散行为的分子模拟[J]. 化工学报, 2007, 58(6): 1359—1365.
- HUANG Yu, LIU Qing-lin, ZHANG Xin-bo. Molecular Simulation of Transport Behavior of Penetrant Through Silicon-containing Polymers [J]. Journal of Chemical Industry and Engineering, 2007, 58(6): 1359—1365.
- [15] FRITZ L, HOFMANN D. Molecular Dynamics Simulations of the Transport of Water-ethanol Mixtures Through Polydimethylsiloxa [J]. Polymer, 1997, 38(5): 1035—1045.
- [16] HOFMANN D, FRITZ L, ULBRICH J, et al. Molecular Simulation of Small Molecule Diffusion and Solution in Dense Amorphous Polysiloxanes and Polyimides [J]. Computational and Theoretical Polymer Science, 2000, 10(5): 419—436.
- [17] HOFMANN D, FRITZ L, ULBRICH J, et al. Detailed-atomistic Molecular Modeling of Small Molecule Diffusion and Solution Processes in Polymeric Membrane Materials [J]. Macromolecular Theory and Simulations, 2000, 9: 293—327.