



共探颗粒学科前沿 共谋未来产业发展



第二届未来颗粒前沿论坛

THE 2nd FUTURE PARTICLES FRONTIER FORUM

摘要集

主办单位:

中国颗粒学会
陕西省科学技术协会

承办单位:

中国颗粒学会青年理事会 陕西省硅酸盐学会
西安交通大学 西北工业大学 西安电子科技大学 西北大学
陕西师范大学 西安建筑科技大学 西安科技大学 西安石油大学
中国科学院地球环境研究所 西安近代化学研究所

协办单位:

中国颗粒学会微纳气泡专业委员会
气溶胶专业委员会
流态化专业委员会
颗粒计算专业委员会
江苏省颗粒学会

2025年4月18-20日
陕西·西安



第一分论坛

流态化前沿论坛

主旨报告

DBSCAN聚类算法赋能持液气固流化床反应器
内部介观颗粒团聚体的定量表征

栾钧元¹, 周业丰^{1,*}

¹湘潭大学化工学院, 湖南湘潭, 411105

*Email: zhouyf@xtu.edu.cn

摘要正文: 为了进一步满足不同生产工艺的需求, 如烯烃聚合、催化裂化、喷雾造粒等[1-3], 需要在气固流化床中引入非连续相的液体, 形成持液气固流化床。液体的加入带来了液桥力, 这会诱导产生介观颗粒聚团, 显著影响反应器流化状态。颗粒聚团的增长与破碎极大地影响着反应器的流体动力学、热质传递和反应特性[4]。目前, 对介观颗粒聚团的研究大多局限在定性和半定量层面[5,6], 往往只能对现象进行表观描述和解释。相比之下, 定量分析具有更高的准确性、客观性和可比性, 可以获得全面且多尺度的介观颗粒聚团信息。因此, 有效的介观聚团定量表征与分析方法是不可或缺的。对比, 本工作提出了一种基于DBSCAN聚类算法的介观聚团定量表征方法, 准确识别了持液系统中的介观颗粒聚团, 获得了聚团大小、数目、时空分布等量化信息。在此基础上, 本工作结合液体力, 从微介宏三个尺度, 深入量化分析了介观团聚动态演变特征与演变规律。总的来说, 本工作开创性地提供了一种可有效定量表征介观颗粒聚团的方法, 实现了对介观颗粒聚团演变规律的量化解析, 对多相流反应器的优化设计具有重要意义。

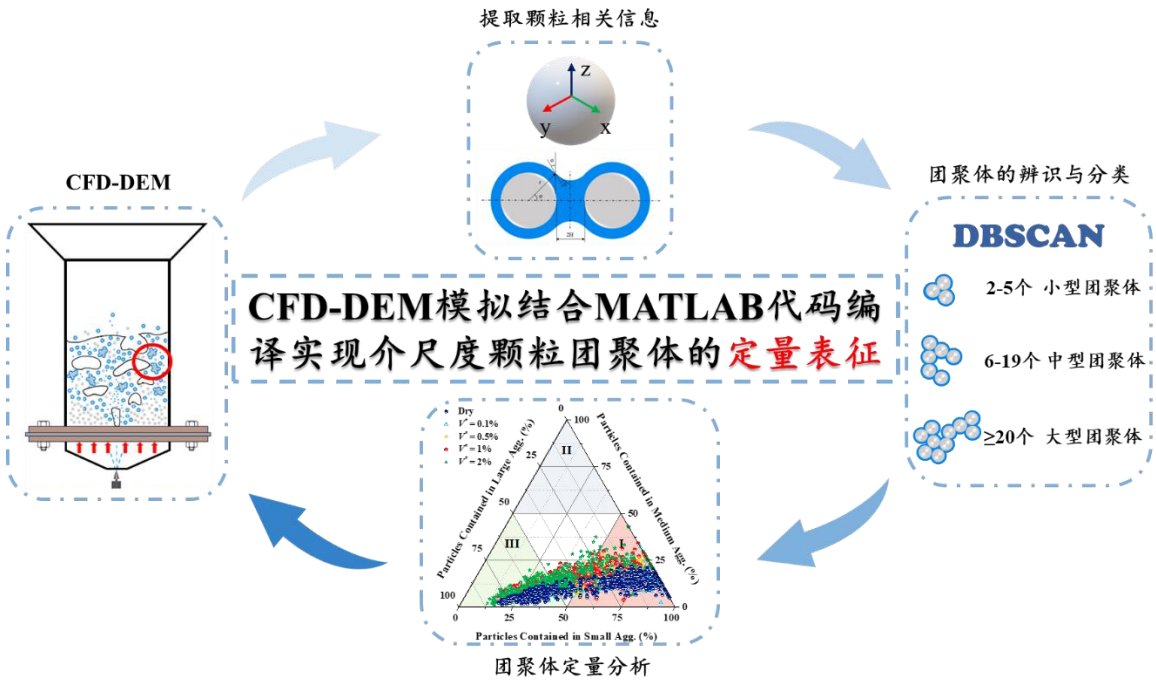


Fig. 1 The research idea of quantitative characterization of mesoscopic particle agglomerations proposed in this paper

关键词: 持液气固流化床; 颗粒团聚体; 定量表征

参考文献

[1] Li, Z.; Peng, W.-H.; Liu, W.-J.; Yang, L.-Y.; Naeem, A.; Feng, Y.; Ming, L.-S.; Zhu, W.-F., Advances in numerical simulation of unit operations for tablet preparation. *Int. J. Pharmaceut.* 2023, 634: 122638.

[2] Khani, Z.; Patience, G. S., Liquid atomization into gas-solid fluidized beds—A review spanning the micro-to macro-scale. *Powder Technol.* 2024, 434:119242.

[3] Li, S.-J.; Zhu, L.-T.; Zhang, X.-B.; Luo, Z.-H., Recent advances in CFD simulations of multiphase flow processes with phase change. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2023, 62: 10729-10786.

[4] Chuan Lim, E. W.; Hee Tan, R. B.; Xiao, Z. Mixing Behaviors of Wet Granular Materials in Gas Fluidized Bed Systems. *AIChE J.* 2013, 59: 4058-4067.

[5] Boyce C M, Ozel A, Kolehmainen J, et al. Growth and breakup of a wet agglomerate in a dry gas-solid fluidized bed[J]. *AIChE J.* 2017, 63: 2520-2527.

[6] Ahmadi Motlagh A H, Palanisamy K, Pougatch K, et al. Mechanistic model to simulate wet agglomerate breakage in a gas-solid fluidized bed[J]. *Chem. Eng. Sci.* 2019, 195: 995-1009.

高压流态化中的热波传递

张晨曦^{1,2}

¹清华大学化学工程系, 北京, 100084

²鄂尔多斯实验室, 内蒙古鄂尔多斯, 017010

*Email: cxzhang@mail.tsinghua.edu.cn

摘要正文:

在能源结构转型及化工产业绿色升级背景下, 芳烃作为关键基础化工原料, 需求持续增长。合成气制芳烃技术, 尤其是基于高压流态化体系的路径, 对高效利用资源、推动化工产业可持续发展意义重大。但合成气一步法制芳烃的强放热特性, 使高压流态化体系中的热波传递成为反应强化与设备性能优化的核心难题。气固流态化属远离平衡态的复杂耗散体系, 高压下, 气固相结构与热量传递的微观演化规律不明, 流动-传递效率与反应强度难以匹配, 制约着高压加氢流化床反应器的设计与操作, 传统理论无法解释其中独特的热波传递行为。本研究通过耦合双光纤阵列与面扫激光成像技术, 实现微秒级时间、亚微米级空间分辨率提升, 原位解析高压流态化中稀、密颗粒相动态结构。发现随操作压力升高, 稀、密相界面能降低, 出现“类凝并”现象: 密颗粒乳化相呈类晶格结构, 稀颗粒气泡相形成贯穿的低密度通道网络, 深刻影响热波传递。进而研究开发了“热颗粒脉冲-衰减”示踪法, 利用毫秒级热脉冲使床层局部温度阶跃, 集成红外热成像与高速摄像, 高精度测量热衰减时温度场与颗粒位移场。首次发现存在临界压力: 操作压力低于此值, 气固相结构为稀、密相共存, 热衰减曲线呈指数下降, 符合傅立叶方程; 高于此值, 压力诱导气固相结构重组, 热衰减曲线线性下降, 呈现非傅里叶热波传递现象。依托上述成果, 团队完成高压加氢多相流反应器装备制造, 实现 100 吨/年煤基合成气制芳烃中试验证。中石油专家组认定该工艺为国际首创, 已具备万吨级工业示范放大条件。

关键词: 高压流态化; 热波传递; 临界压力; 反应器

参考文献

- [1] 张晨曦. 《气固两相流的“超可压缩性”》, 2021, 科学出版社.
- [2] Y. X. Yu, F. Lu, H. L. Bai, F. Wei, C. X. Zhang, Discovery of asymmetric distribution of fine particles in fluidization using signal deflection reconstruction measurement, *Chem. Eng. Sci.* 2024, 285, 119564.
- [3] Y. X. Yu, F. Lu, H. L. Bai, F. Wei, C. X. Zhang, Effect of fines addition on heat transfer performance in gas-solid fluidized bed: An integrated experimental, simulation, and theoretical study, *Chem. Eng. J.* 2023, 476, 146806.
- [4] F. Lu, C. X. Zhang, Y. Wang, W. Z. Qian, F. Wei, Phase coexistence in fluidization, *AIChE J.* 2021, e17530.
- [5] F. Lu, C. X. Zhang, F. Wei, Compressibility of granular fluids, *Phys. Fluids* 2022, 34, 033307.
- [6] F. Lu, L. P. Li, Y. X. Yu, G. Tian, H. Xiong, J. Miao, F. Wei, C. X. Zhang. Road to Carbon-Neutral Aviation: One-Step Conversion of CO₂ to Sustainable Aviation Fuels. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2025, 64: 3118–3135.
- [7] Y. X. Yu, F. Lu, X. He, F. Wei, C. X. Zhang, Segregation of binary particles in gas-solid fluidized bed. *Front. Chem. Sci. Eng.* 2024, 18, 09.
- [8] 金涌, 程易, 白丁荣, 张晨曦, 魏飞*. 中国流态化技术研发史略. *化工进展*, 2023, 42: 2761.

邀请报告

双流化床气化过程设计与中试研究

曾亮^{1,*}

¹天津大学化工学院，天津，300350
*Email: zengl@tju.edu.cn

摘要正文：双流化床气化是能源转型阶段关键的技术研究方向。本工作通过数学建模和热力学模拟分析，对双流化床气化系统进行了设计优化，确定了热力学操作区间和最佳操作条件。设计并建成了5吨/天的双流化床气化中试试验平台。通过系统压力平衡分析，制定了固体循环控制策略，通过计算流体力学模拟分析，明确了关键循环控制部件的操作特性。中试装置调试过程中，建立了完善的压力压差监测体系，以及固体循环量控制和测量系统。在连续48 h的热态测试期间，系统处于稳定的压力平衡状态，载体循环倍率为10~11，考察了石英砂、白云石等床料对气化性能的影响。提出钙基化学链过程用于强化生物质气化制氢，动力学模拟结果表面利用氧化钙选择性吸收CO₂和焦油催化特性，可以有效去除焦油，提高粗合成气中氢气浓度。研究结果为双流化床气化反应器的设计和开发提供了重要的理论依据，并推动了双流化床气化技术向工业化应用的转化与发展。

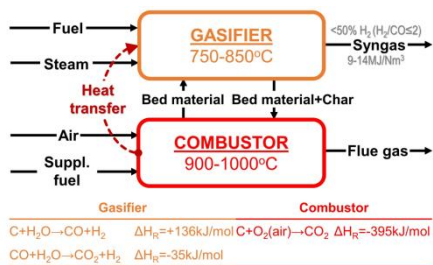


Fig. 1 Dual Fluidized Bed Gasification Scheme



Fig. 2 Dual Fluidized Bed Gasification Pilot Unit

关键词：双流化床气化；制氢；化学链

参考文献

- [1] G. Dziva, Z. Jia, Y. Xue, L. Zeng. Low-carbon, hydrogen-rich syngas from sorption-enhanced gasification: A review. *Carbon Capture Science & Technology*, 2025, 14: 100372.
- [2] H. Ren, L. Zeng, W. Li, Z. Tang, D. Zhang. Numerical Study on the Hydrodynamics of a Chemical Looping Combustion System with a Binary-Particle Mixture, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2023, 62: 15675-15686.
- [3] G. Dziva, Z. Jia, Y. Xue, L. Zeng. Hydrogen production from biomass via moving bed sorption-enhanced reforming: Kinetic modeling and process simulation. *Fuel*, 2023, 352: 129024.

金属分子筛复合催化剂用于C1催化转化

代成义^{1,*}

¹ 西北大学化工学院, 陕西省西安市, 710127

*Email: daicy@nwu.edu.cn

摘要正文: 微孔扩散限制在赋予分子筛择形性能的同时, 降低了催化剂的有效利用率。如何打破分子筛催化剂选择性和活性的“跷跷板”关系是相关领域的重要难题。如图1所示, 反应物在分子筛微孔中容易受到内扩散限制, 导致催化剂的有效利用率较低, 只有距离分子筛颗粒外表面较近的活性中心能够起到催化作用。基于此, 具有中空结构的分子筛被认为可有效提高催化剂的利用率, 受到相关学者的广泛关注。

中空分子筛封装金属催化剂在提高产物选择性, 抑制金属流失方面表现出显著优势。采用传统方法合成的中空分子筛通常是多晶结构, 即分子筛外壳是由具有更小尺寸的分子筛微晶团聚而成。这种结构的分子筛水热稳定性和机械稳定性较差, 且空腔外壳存在较多晶间空隙, 在一定程度上弱化了封装效果。合成分子筛单晶并将金属颗粒封装在其空腔内部具有较高的应用价值, 然而, 分子筛的刚性骨架使中空分子筛单晶的合成非常困难。

本工作聚焦新型中空纳米分子筛单晶封装金属催化剂的设计、合成及应用研究, 以提高催化活性, 促进目标产物生成, 抑制催化剂积碳和烧结为研究目标, 提出并确立了中空分子筛单晶封装金属(氧化物)纳米颗粒的合成方法。并重点研究了金属分子筛复合催化剂中“金属-酸”双活性中心在碳一催化转化制芳烃过程中的协同作用, 以及催化剂酸性和孔道调控对产物选择性的影响机制。

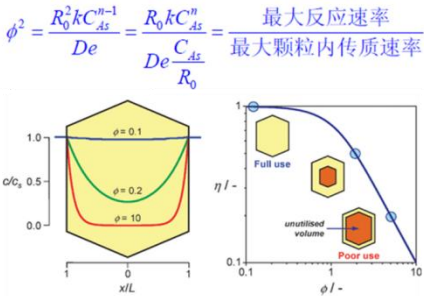


图1 泰勒模数与催化剂颗粒内反应物浓度（左）及催化剂效率因子的关系（右）

关键词: 金属分子筛; C1催化转化; 双功能催化剂

参考文献

- [1] Ke Ma, Siyuan Zhao, Meixin Dou, Xiaoxun Ma, and **Chengyi Dai***, Enhancing the Stability of Methanol-to-Olefins Reaction Catalyzed by SAPO-34 Zeolite in the Presence of CO₂ and Oxygen-VacancyRich ZnCeZrOx. ACS Catalysis, 2024, 14, 2, 594-607.
- [2] Yetong Li, Kailong He, Siyuan Zhao, Linyu Jiao, Huiyong Chen, Xiaoxun Ma, **Chengyi Dai***, Highly selective production of 2-methylnaphthalene by CO₂ hydrogenation and naphthalene alkylation. Chemical Engineering Journal 501 (2024) 157839.
- [3] Chengyi Dai, Anfeng Zhang, Min Liu, Xinwen Guo*, Chunshan Song*. Hollow ZSM-5 with silicon-rich surface, double shells and functionalized interior with metallic nanoparticles and carbon nanotubes. Advanced Functional Materials, 2015, 25, 7479-7487.
- [4] Chengyi Dai, Anfeng Zhang, Lin Gu, Chunshan Song*, Xinwen Guo*. Hollow alveolus-like nanovesicle assembly with metal-encapsulated hollow zeolite nanocrystals. ACS Nano, 2016, 10, 7401-7408.

多分散气固流态化系统的离散模拟与工业应用

贾颖^{1,2}, 张勇^{1*}, 段晨龙²

¹介科学与工程国家重点实验室, 中国科学院过程工程研究所, 北京 100190, 中国

²教育部煤炭加工与高效利用重点实验室, 中国矿业大学, 徐州 221116, 中国

*通讯作者: 邮箱: zhangyong@ipe.ac.cn (张勇)

空气重介流化床 (ADMFB) 是一种极具潜力的清洁煤分选技术, 尤其适用于中国干旱地区。然而, 多分散颗粒的分离与流化调控在工业应用中仍面临诸多挑战。本研究提出了一种混合模型, 用于研究工业尺度 ADMFB 的流动行为, 重点关注完整设备流动方案的计算。通过提出的倾斜煤分离模型 (ICSM) 与 EMMS-DPM-DEM 方法相结合, 提高了对煤颗粒分布、床层密度及停留时间的预测精度。该数值方法耦合了粗粒化 CFD-DEM 模型和 STL 构建方法, 能够精确模拟煤炭分选、介质颗粒循环以及内部构件运动。仿真结果经实验数据验证, 证实了 ICSM 的可靠性, 表明煤颗粒在床层内沿对角线方向分离, 因此需要采用倾斜给料方式 (最佳 60°), 以减少颗粒聚集并加速原煤进入分选区域。此外, 排料轮和刮板的运动引发了整体固相循环, 显著影响不同密度煤颗粒的停留时间分布。同时, 内部构件可增强床层密度均匀性, 促进密度分选效果。本研究在实验室尺度 ADMFB 模拟及气-固多相流行为多尺度验证的基础上, 成功实现了从实验室效果到工业应用的放大。通过采用离散介质颗粒模拟, 取代传统的连续介质模拟, 保留了系统的非平衡复杂特性, 为工业尺度气-固多相流研究提供了重要的理论依据。研究成果可为 ADMFB 工艺优化提供关键理论支持, 助力提升设备设计与生产预测能力, 实现更高效的煤炭分选。

关键词: 煤炭分选; 气固流化床; 多分散颗粒; 内部构件; 粗粒化模型。

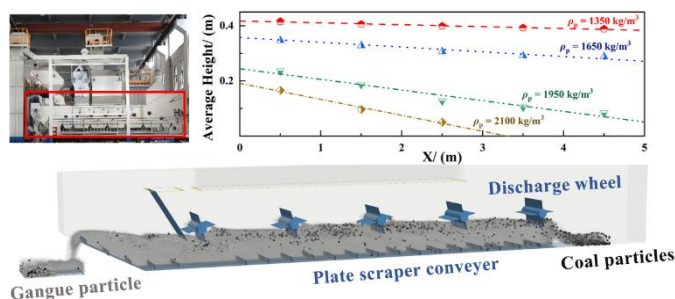


Fig.1 Inclined Coal Separation Model (ICSM)

参考文献:

1. Jia, Y.; Zhang, Y.; Xu, J.; Duan, C., Coarse-grained CFD-DEM simulation to determine the multiscale characteristics of the air dense medium fluidized bed. Powder Technology. 2021, 389, 270–277.
2. Jia, Y.; Zhang, Y.; Xu, J.; Duan, C., Multiscale modelling and simulation of coal separation process in a pilot-scale gas–solid fluidized bed, Chemical Engineering Journal, 2025, 161912.

Discrete Simulation of Polydisperse Gas-Solid Fluidization Systems for Industrial Application

Ying Jia^{1, 2}, Yong Zhang^{1*}, Chenlong Duan^{2*}

¹State Key Laboratory of Mesoscience and Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, P. O. Box 353, Beijing 100190, PR China

²Key Laboratory of Coal Processing and Efficient Utilization of Ministry of Education, China University of Mining & Technology, Xuzhou 221116, PR China

*Corresponding authors: Emails: zhangyong@ipe.ac.cn (Y. Zhang); clduan@cumt.edu.cn (C. Duan)

The Air Dense Medium Fluidized Bed (ADMFB) is a promising clean coal separation technology, particularly suitable for arid regions in China. This study presents a hybrid model to investigate the flow behavior of industrial-scale ADMFB, combining the Inclined Coal Separation Model (ICSM) with the EMMS-DPM-DEM approach to improve the accuracy of predictions on coal particle distribution, bed density, and residence time. The model integrates CFD-DEM with STL construction, enabling precise simulations of coal separation and medium particle circulation. Results, validated by experimental data, demonstrate that coal particles separate diagonally within the bed, with an optimal 60° inclined feed strategy reducing particle aggregation and improving separation efficiency. This research successfully bridges laboratory-scale simulations with industrial applications, providing a theoretical foundation for ADMFB process optimization, equipment design, and efficient coal separation.

Keywords: Coal separation, Gas-solid fluidized bed, Polydisperse particle, Internal components, Coarse-grained model.

References:

1. Jia, Y.; Zhang, Y.; Xu, J.; Duan, C., et al, Coarse-grained CFD-DEM simulation to determine the multiscale characteristics of the air dense medium fluidized bed. Powder Technology. 2021, 389, 270–277.
2. Jia, Y.; Zhang, Y.; Xu, J.; Duan, C., et al, Multiscale modelling and simulation of coal separation process in a pilot-scale gas–solid fluidized bed, Chemical Engineering Journal, 2025, 161912.

颗粒材料固 – 流态转化过程中的唯一组构临界面

文雨轩^{1*}, Yida Zhang²

¹ 华东交通大学, 南昌, 330013

² 科罗拉多大学博尔德分校, Boulder, CO, USA, 80309

*Email: yuxuan.wen@ecjtu.edu.cn

摘要正文: 颗粒材料在稳定条件下通常表现出明显的剪切模量和屈服应力, 即“固态”特性; 然而, 当外部环境 或荷载发生变化时, 颗粒体系可能转变为“流态”, 从而对地基和结构安全构成显著威胁。在岩土工程中, 该流态 包括常见的砂土液化现象: 当松散饱和的低黏聚力土体受到高频振动或循环荷载作用时, 孔隙水压力难以及时消散而持续累积, 导致粒间接触力和有效应力趋近于零, 承载能力急剧衰减。另一方面, 土体在达到经典临界状态后, 其体积与应力基本保持不变, 但应变可持续发展, 呈现一种摩擦流的特性。研究颗粒体系固 – 流态转化过程的核心问题是: 颗粒体系内部的细微观组构是如何演化的, 其背后的物理机制是什么, 能够进行量化描述? 本文基于离散元开源软件 YADE, 以球形颗粒为基础, 开展了一系列真三轴排水/不排水的单调与循环剪切数值试验, 并对体系的组构演化进行了系统研究。结果表明: 无论颗粒体系是由固态逐渐进入持续剪切的临界状态 (摩擦流), 还是在液化后继续施加剪切, 其组构张量的特征值均会收敛至该张量主空间中的一条唯一平面。我们将此平面命名为“组构临界面”, 这一发现为岩土颗粒材料从固态向流态的转化提供了具有普适意义的“锚定”标准, 对进一步理解和预测岩土体在动载或循环荷载作用下的失效机制, 以及地基稳定性评估与岩土工程设计均具有重要参考价值。

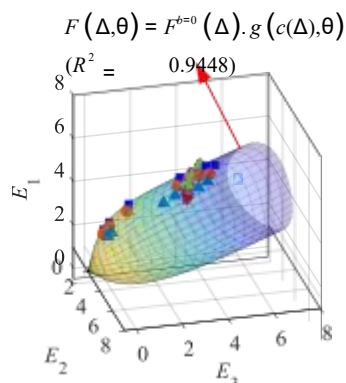


Fig. 1 Critical fabric surface for granular materials^[1]

关键词: 颗粒材料; 组构; 流固态转化; 离散元方法

参考文献

[1] Wen, Y. & Zhang, Y. (2023). Evidence of a unique critical fabric surface for granular soils. *Géotechnique* 73, No. 5, 439-454.

不同激励模式下流态化颗粒流体力学不稳定性比较

郭强^{1,*}, 杨宁²

¹中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室, 北京, 100190

²中国科学院大学化学工程学院, 北京, 100049

*Email: guoqiang@ipe.ac.cn

摘要正文:

颗粒物质(如沙粒和催化剂)在自然界和工业中普遍存在,但其流动行为的复杂性至今仍困扰着物理、地球科学、应用数学和化学工程领域的研究人员。尽管物质形态各异,已有大量研究发现在外界激励(如振动或气流)作用下,处于流态化的颗粒物质可呈现与流体流动相似的特性。比如,在颗粒体系中可发生与液体类似的流体动力学不稳定性现象,包括气体鼓泡、剪切诱导波动、瑞利-泰勒指纹结构(Rayleigh-Taylor fingering)和瑞利-贝纳德对流(Rayleigh-Bénard convection)等,但其内在机理常与传统流体存在本质差异。这类不稳定性现象为揭示常规流体与颗粒流动的物理共性与差异提供了理想研究体系,也对现有颗粒流变学模型提出了挑战。同时,这些不稳定现象往往具有结构化特征,研究其规律有助于优化工业过程中的颗粒处理过程,克服传统设备设计因颗粒运动的混沌特性所导致的一系列问题。

构建颗粒流动不稳定性的研究以往多采用振动或气流单一激励方式。最新研究表明,振动与气流协同作用的流化床体系(vibrated gas-fluidized beds)同样可使颗粒材料呈现类流体行为,并诱发与单一激励颗粒体系相似的流体动力学不稳定性现象。然而,不同激励方式诱发的颗粒不稳定性模式及其深层机制可能存在显著差异。本报告将首先综述振动-气流耦合激励下已发现的颗粒流体力学不稳定性类比现象,包括有序气泡结构[1],瑞利-泰勒指纹结构[2]、瑞利-贝纳德对流[3]、法拉第波(Faraday waves)[4]以及追赶-碰撞-翻滚(draft-kissing-tumbling)现象[5]。随后基于离散颗粒模拟,系统比较这些现象与单一激励条件下的异同特征。最后将探讨振动与气流的耦合作用机制,并展望通过振动与气流协同激励诱发新型颗粒流体力学不稳定性现象的可能性。

关键词: 流态化; 不稳定性; 振动; 气泡; 法拉第波

参考文献

- [1] Q. Guo, Y. Zhang, A. Padash, K. Xi, T.M. Kovar, C.M. Boyce, Dynamically structured bubbling in vibrated gas-fluidized granular materials, *Proceedings of the National Academy of Sciences* 118 (2021) e2108647118.
- [2] C.P. McLaren, T.M. Kovar, A. Penn, C.R. Muller, C.M. Boyce, Gravitational instabilities in binary granular materials, *Proceedings of the National Academy of Sciences* 116 (2019) 9263–9268.
- [3] Q. Guo, Y. Zhang, T.M. Kovar, K. Xi, C.M. Boyce, A Rayleigh–Bénard convection instability analog in vibrated gas-fluidized granular particles, *Soft Matter* 18 (2022) 3323–3327.
- [4] Q. Guo, W. Da, R. Wu, Y. Zhang, J. Wei, C.M. Boyce, Faraday wave instability analog in vibrated gas-fluidized granular particles, *Phys. Rev. E* 107 (2023) 034603.
- [5] O.J. Punch, Q. Guo, M. Gueye, J. Omid, M.W. Jordan, J.M. Sanghishetty, C.M. Boyce, Anomalous descent of intruders in vibrated gas-fluidized granular materials, *Phys. Rev. E* 111 (2025) L013403.

超微颗粒原子级表面调控为制药与增材制造精准赋能

张福鑫^{1, 2*}

¹清源创新实验室, 福建省泉州市泉港区福州大学石油化工学院, 362801

²福建省精细化学品先进制造技术工程研究中心, 福州大学, 350108

*Email: fw.zhang@qyil.ac.cn

摘要正文: 超微颗粒因其高的比表面积, 表现出优异的理化性质, 被广泛应用于医药、化工、材料等领域。然而, 由于颗粒间存在极强的相互作用, 超微药物颗粒和3D打印超微金属颗粒, 在应用过程中仍面临诸多挑战。如呼吸系统疾病的主要治疗方法是通过吸入器将药物颗粒直接输送到肺部。要到达肺部的效能部位, 需要药物颗粒的粒径小于 $5\ \mu\text{m}$ 。然而, 该尺寸范围内的颗粒的高内聚性通常会导致吸入器雾化不良, 从而导致抵达肺部的有效给药量低。此外, 吸入的药物通常会迅速从肺部吸收, 从而限制了它们的局部治疗效果。而对于激光粉末床熔覆 (L-PBF) 3D打印技术而言, 3D打印超微颗粒的性质对于获得高质量的打印产品至关重要, 例如在分辨率和强度方面。超微颗粒表面精准改性提供了根据所需配方设计定制颗粒关键功能的方法, 例如溶解性、润湿性、流动性和分散性。特别是, 原子和分子层 (ALD和MLD) 沉积改性技术通过在单个颗粒上生长影响粉末性能的纳米级薄膜, 进而实现对表面性质的原子级控制。理想的受控肺部药物递送系统通过延缓肺清除机制和有效的肺沉积来提供持续释放, 从而在较长时间内保持治疗浓度。此研究中, 我们分别展示了如何借助ALD来精准调节吸入级药物颗粒和3D打印粉末的表面性质。我们在超微药物颗粒上沉积了均匀的纳米级氧化物陶瓷薄膜 (如 Al_2O_3 、 TiO_2 和 SiO_2)。研究表明, 无论材料的性质如何, 药物颗粒的溶解释放会随着纳米膜厚度的增加而显著减慢。通过采集溶解过程中各个阶段的非原位透射电子显微镜 (TEM) 图样, 给出了药物缓释的机制主要是依靠溶解介质通过 ALD 薄膜的传输。此外, 通过快速筛选冲击器进行的体外雾化测试显示, ALD 薄膜包覆后的制剂的细颗粒分数 (FPF) 增加了约2倍, 这主要归因于陶瓷表面产生的颗粒间力的降低, 原子力显微镜 (AFM) 测量证明了这一点。同样的, 通过ALD工艺包覆的 SiO_2 功能薄膜不仅可以显著改善3D打印粉末的流动性和润湿性, 且改善效果会随着包覆膜的厚度增加而得到进一步增强; 此外, ALD薄膜还可以有效调节粉末的熔化行为。因此, 通过ALD进行的超微颗粒表面纳米工程在医药和增材制造领域非常有应用前景和竞争优势。

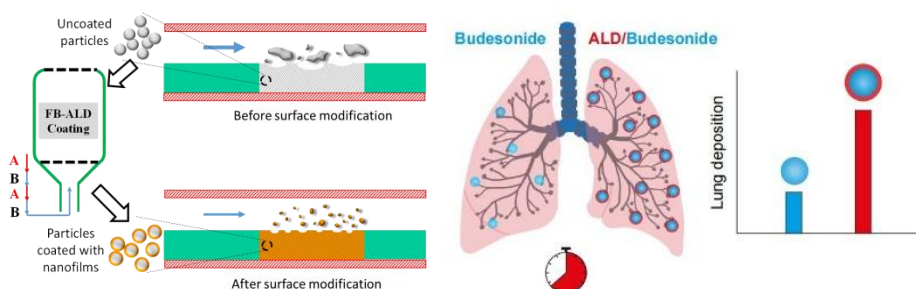


Fig. 1 ALD modifications of drug particles for controlled drug release and enhanced delivery

关键词: 超微颗粒; 核壳结构; 原子层沉积; 药物递送; 增材制造

参考文献

- [1] F. Zhang, K. Wu, D. La Zara, F. Sun, M. J. Quayle, P. Gunilla, F. Staffan, J. W. Chew, J. R. van Ommen. Tailoring the flow properties of inhaled micronized drug powders by atomic and molecular layer deposition. *Chem. Eng. J.* 2023, 462: 142131.
- [2] D. La Zara, F. Sun, F. Zhang, M. R. Bailey, F. Franek, z Kinga, B. Sivars, J. Horndah, S. M. Bates, M. Brannstrom, P. Ewing, M. J. Quayle, P. Gunilla, F. Staffan, J. R. van Ommen. Controlled Pulmonary Delivery of Carrier-Free Budesonide Dry Powder by Atomic Layer Deposition. *ACS: Nano* 2021, 15(4):6684–6698.

一种补偿策略用于旋风热解器内无动能损耗的气固传热过程强化

张楠¹, 潘雪儿¹, 杨景轩^{1*}, 连文豪², 郝晓刚^{1*}

¹太原理工大学, 化学与化工学院, 山西省太原市万柏林区迎泽西大街 79 号, 030024

²中北大学, 化学与化工学院, 山西省太原市尖草坪区学院路 3 号, 030051

*Email: yangjinxuan@tyut.edu.cn; xghao@tyut.edu.cn

摘要正文: 在旋风热解器中, 气固传热过程的增强通常伴随着动能消耗的增加[1]。遗憾的是, 在目前的文献中, 关于如何在不增加动能消耗的情况下改善气固传热过程的报道很少。为了应对这些挑战, 我们提出了一种补偿策略, 以全面优化旋风热解器中的流动特性, 从而同时实现传热过程的强化和较低的动能消耗。通常情况下, 对于局部区域的传热过程而言, 在固定的推动力条件下, 由于快速传热和低动能消耗是天然对立的, 所以几乎不可能同时实现[2]。然而, 在非均匀结构流动过程中, 整个反应器内是有可能同时实现这两个目标。这是由于对于高湍动强度的局部区域, 其热阻较小, 对应的传热速率通常较快, 但这是以消耗了过多动能为代价的, 对于强化整个反应器的传热过程效率较低。因此, 通过定向降低局部高湍动区的湍流强度来补偿低湍动区, 即增加局部低热阻区域的热阻, 同时增加高热阻区域的热阻, 能够实现更均匀的热阻分布, 从而优化整体流动和传热性能。在本文中, 这种全局优化方法被称为补偿策略。根据上述分析, 理论上可以同时实现传热过程的强化和动能消耗的降低。在旋风热解器中, 延长排气管插入深度(S)可迫使气体向下流动, 从而延长气固接触时间和改善传热性能。此外, 另有学者发现延长 S 可以降低压降, 但其内在机理及与传热的关系尚不明确[3]。在此基础上, 本研究利用排气管插入深度($S=30$ 、 45 、 60 和 90 mm)来实现定向调控旋风热解器中的流动过程以实现全局优化。利用计算流体动力学-离散元法(CFD-DEM)对传热过程及其控制机制进行了系统研究。结果表明, 通过调控 S 的长度可实现传热速率提升约21.6%, 同时降低了压降和动能消耗。此外, 通过深入分析其内在调控机制, 发现这一结果主要得益于对气流漩涡的优化以及气固协同特性的显著提升。这些结果成功实现了在强化传热过程的同时保持较低的动能消耗, 并且为后续的反应设计工作提供了宝贵的理论依据与指导方向。

关键词: 旋风热解器; 传热强化; 动能损耗; 补偿策略

参考文献

- [1] X. Li, Z. Li, W. Tao Experimental study on heat transfer and pressure drop characteristics of fin-and-tube surface with four convex-strips around each tube. *Int. J. Heat Mass Transfer*. 2018, 116:1085-95.
- [2] Y. Song, D. Liu, S. Sun, H. Kim Multi-objective optimization of heat transfer performance and power consumption of Taylor-Couette flow with elliptical helical slits wall. *Int. J. Therm. Sci.* 2025, 208:109474.
- [3] J. Chen, X. Lu, H. Liu, C. Yang Effect of the bottom-contracted and edge-sloped vent-pipe on the cyclone separator performance. *Chem. Eng. J.* 2007, 129(1):85-90.

深度学习加速的生物质鼓泡床快速热解瞬时分布预测

钟汉斌*, 俞晓东, 张君涛

西安石油大学西安市高碳资源低碳化利用重点实验室, 陕西 西安, 710065

*Email: hbzhong@xsyu.edu.cn

摘要正文: 生物质流化床快速热解是生物质资源高效利用的重要途径, 计算流体力学(Computational Fluid Dynamics, CFD)是揭示流化床反应器内复杂流动-特性的有效手段。但CFD模拟需要较高的计算资源, 而深度学习可以显著加速模拟预测过程。本研究首先建立了一种基于卷积神经网络(Convolutional Neural Networks, CNN)的深度学习模型, 利用CFD模拟获得的历史数据, 预测鼓泡流化床中生物质快速热解的瞬态分布。分别考察了输入序列长度、神经元数量、学习率和预测步长对模型性能的影响, 训练获得了最优模型参数。对模型短期预测(10帧)的准确性、长期预测(1000帧)的稳定性以及预测能力上限进行了分析, 结果表明该模型的短期预测性能较好, 长期预测仍具有合理的精度。然后针对基于CNN的初步模型在连续预测多步图像时性能进入瓶颈, 在原有基础上引入了长短期记忆网络(Long Short-Term Memory, LSTM), 并应用一种融合策略将CNN和LSTM有效的结合在一起, 构建了基于ConvLSTM的新模型。该模型集成了CNN的空间特征捕捉能力和LSTM的时间关系处理能力, 实现了单次多步的高效预测方式, 并提升了预测精度。最后, 面对融合网络复杂度较高导致的训练资源增加以及精度提升有限的情况, 提出了多尺度卷积与多层次特征连接两种设计思路, 开发了一种轻量级预测模型。该模型在单次多步的高效预测模式基础上极大的提高了预测精度, 实现了无矫正情况下的长时间持续精准预测。同时还针对模型训练时间长、硬件资源要求高的问题而引入了卷积优化理论, 显著削减了网络参数数量和运算量, 降低了模型的训练时间和对硬件性能的要求。所提出的深度学习模型为生物质快速热解反应器的高效精准模拟预测提供了新思路。

关键词: 生物质; 快速热解; 流化床; CFD; 深度学习

参考文献

- [1] Ricardo Vinuesa, Steven L. Brunton. Enhancing Computational Fluid Dynamics with Machine Learning. Nature Computational Science 2022, 2 (6), 358–366.
- [2] Hanbin Zhong, Qingang Xiong, Lina Yin et al. CFD-Based Reduced-Order Modeling of Fluidized-Bed Biomass Fast Pyrolysis Using Artificial Neural Network. Renewable Energy 2020, 152, 613–626.
- [3] Hanbin Zhong, Xiaodong Yu, Juntao Zhang, et al., Predicting Spatiotemporal Distributions in a Bubbling Fluidized Bed for Biomass Fast Pyrolysis Using Convolutional Neural Networks, Industrial & Engineering Chemistry Research, 2024, 63: 3744–3754.

稀疏气固流曳力模型研究

李庆展¹, 宋梓枫¹, 李飞^{1,2,*}, 陈延佩¹, 王维^{1,2}

¹中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室, 北京, 100190

²中国科学院大学化工学院, 北京, 100049

*Email: lifei@ipe.ac.cn

摘要正文: 稀疏气固流广泛存在于工业和自然环境中, 如气力输送、煤粉燃烧、沙尘暴、打喷嚏等等。由于颗粒浓度非常低, 传统方法对这些过程进行模拟时, 通常采用单颗粒曳力或Wen&Yu曳力模型, 相应的模拟结果表明模型对气速的预测精度较高, 但通常存在低估颗粒速度和高估滑移速度的问题[1, 2]。我们通过模拟进一步验证这一趋势, 并且发现人为增大曳力可提升对颗粒速度和滑移速度的模拟精度, 同时保持气速模拟的精度。这表明传统单颗粒曳力模型低估了稀疏流动中的曳力。针对该问题, 我们发展了三维高时空分辨率的粒子追踪测速(PTV)方法。结合气流场的粒子图像测速技术(PIV), 对稀相颗粒射流开展实验研究, 获得了气体与颗粒速度的空间分布特征。基于重构的颗粒轨迹和气流场(颗粒雷诺数30-300范围), 建立了一个新曳力模型, 预测的曳力显著高于标准单颗粒曳力, 验证了我们的推断。应用该模型和一些常用曳力模型如标准曳力、Gidaspow曳力[3]和Rudinger曳力[4]对稀疏颗粒射流过程进行了模拟, 结果如图1所示, 所有模型预测的气体速度分布都相似, 与实验值吻合较好; 但是仅本研究发展的LWL-E曳力模型能准确预测颗粒速度分布和滑移速度分布, 而其他模型则明显低估了颗粒速度、高估了滑移速度。

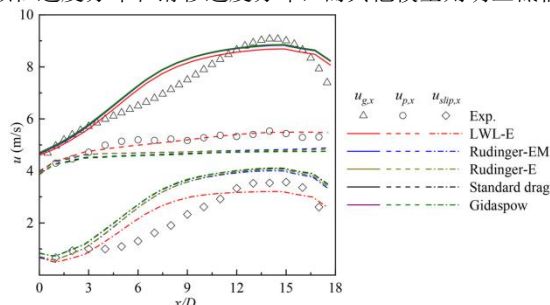


Fig. 1 Prediction of velocity distribution of dilute particle-laden jet with different drag models

关键词: 曳力模型; 稀疏多相流; 数值模拟; 高分辨率测量

参考文献

- [1] Z. Miao, S. Kuang, H. Zughbi, A. Yu, CFD simulation of dilute-phase pneumatic conveying of powders. *Powder Technol.* 2019, 349: 70–83
- [2] W.K.H. Ariyaratne, C. Ratnayake, M.C. Melaaen, Application of the MP-PIC method for predicting pneumatic conveying characteristics of dilute phase flows, *Powder Technol.* 2017, 310: 318–328.
- [3] D. Gidaspow, *Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions*. Academic Press, Boston, 1994.
- [4] G. Rudinger, Effective drag coefficient for gas-particle flow in shock tubes. *J. Basic Eng.* 1970, 92: 165–172.

管路冲蚀降阶重构 ROM 模型探索

穆丽静¹，何圣煊^{2,1}，陈昇¹，陈锡忠³，张永民²，刘岑凡^{1,*}

¹中国特种设备检测研究院，北京市朝阳区和平街西苑 2 号，100029

²中国石油大学（北京），北京市昌平区府学路 18 号，102249

³上海交通大学，上海市东川路 800 号，200240

摘要正文：冲蚀作为一种在气力输送管道中由高速流体或固体颗粒冲击材料表面导致的渐进式材料损失现象，是工业管路中常见的破坏失效形式。研究压力管道典型管件的冲蚀减薄现象，对于保证工业管线安全运行、预防事故发生有着重要的经济和社会意义。本文将针对煤化工管路冲蚀现象，开展降阶重构快速预测研究。降阶模型（Reduced Order Model, ROM）是在本征正交分解（Proper Orthogonal Decomposition, POD）基础上，结合Kriging 空间插值方法，实现多参数工况快速预测的机器学习方法。其中，首先采集全参数空间下的流场和冲蚀快照（压力、冲蚀速率等），构建高维数据集；通过奇异值分解（Singular Value Decomposition, SVD）提取流场和冲蚀信息数据的主要特征模态，并将高维数据投影到低维空间；建立输入条件（如流体速度、颗粒质量流量等）与降阶模态系数的映射关系，构建流场和冲蚀场降阶模型。相较于传统仿真方法，ROM 降阶模型在保证预测精度的前提下，大幅缩短了计算时间，可满足企业实时需求。本文将在传统 CFD 仿真方法基础上，将降阶模型与管路冲蚀研究相结合，实现管路冲蚀现象的快速预测，并通过与企业现场监测数据对比的方式对管路冲蚀 ROM 预测结果进行验证。

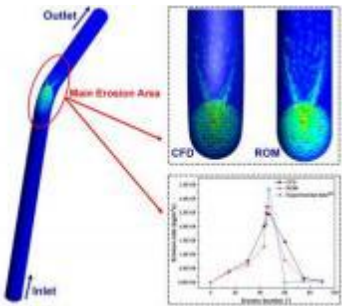


Fig. 1 Elbow pipe erosion rate comparison of ROM predictions and CFD results 关键

词：管路冲蚀；降阶模型；设计点选取；多相流；计算流体力学

参考文献

[1] Y.I. Oka, S. Mihara, T. Yoshida, Impact-angle dependence and estimation of erosion damage to ceramic materials caused by solid particle impact. *Wear*, 2009, 267 (1-4): 129-135.

[2] L. Mu, S. He, G. Deng, C. Zhang, C. Liu, Numerical study of erosion wear in elbow under the action of gas-solid flow. 14th International Conference on Quality, Reliability, Risk, Maintenance, and Safety Engineering (QR2MSE 2024), 2024, 86-91.

[3] Y. Jiang, E. Byrne, J. Glassey, X. Chen, Reduced-order modeling of solid-liquid mixing in a stirred tank using data-driven singular value decomposition. *Chemical Engineering Research and Design*, 2023, 196: 40-51.

[4] D. E, G. Xu, J. Cui, Q. Ye, C. Tan, R. Zou, A. Yu, S. Kuang, Prediction of instantaneous flow characteristics of hydrocyclone with long short-term memory network based on computational fluid dynamics data, *Powder Technology*, 2024, 439: 119668.

气固流化床的流场快速重构和演化技术探究

陈啸^{1,*}, 贺谢宇¹, 邓松¹, 周强^{1,2}

¹ 西安交通大学化学工程与技术学院, 陕西西安 710049

² 西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 陕西西安 710049

*Email: x.chen@mail.xjtu.edu.cn

摘要正文: 能够实现高效智能动态调控的流化床反应器的数字孪生技术是支撑国家能源技术革新、智能制造发展和助力“双碳”目标实现的战略必争技术。但因其复杂的多尺度流动反应特征, 导致目前仍缺乏快速精准的气固流化床的流场快速重构和演化技术。本文基于准确的高保真 TFM 模拟数据, 探究了适用于多相流反应器的数据降维和基于测点数据的物理场重构方案, 并基于长短期记忆网络利用简单的压力信号形成了初步的基于数据驱动的复杂多相流场动态演化方案。

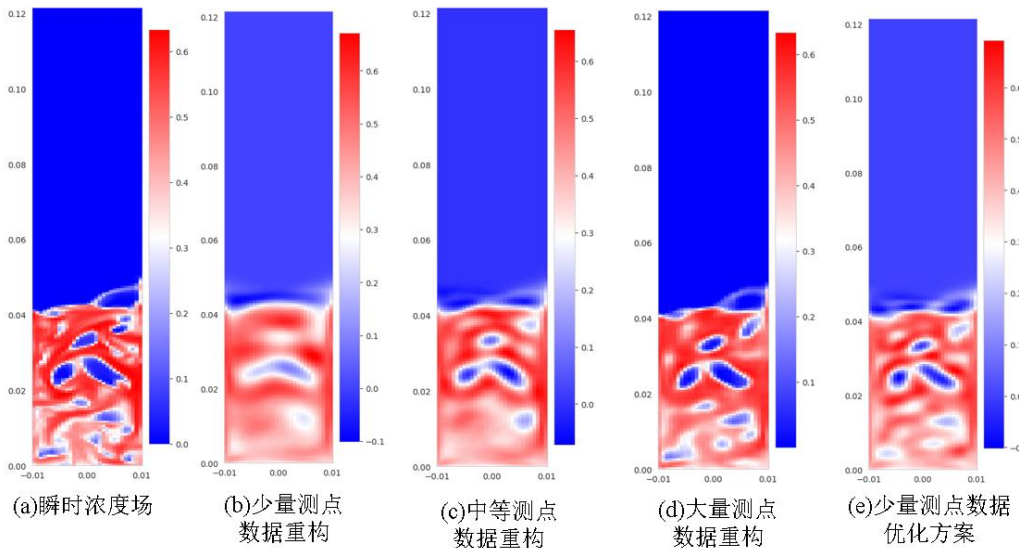


Fig.1 Data Dimensionality Reduction and Reconstruction for Complex Gas-Solid Flows

关键词: 气固两相流; 流化床; 数字孪生; 数据降维

Exploration of Rapid Flow Field Reconstruction and Evolution Techniques for Gas-Solid Fluidized Beds

Xiao Chen^{1,*}, Xieyu He¹, Song Deng¹, Qiang Zhou^{1,2,3}

¹School of Chemical Engineering and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, Shaanxi 710049

²State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an, Shaanxi 710049

* x.chen@mail.xjtu.edu.cn

The digital twin technology of fluidized bed reactors capable of achieving efficient and intelligent dynamic control is a strategically critical technology that supports national energy technology innovation, smart manufacturing development, and the realization of the "dual carbon" goals. However, due to the complex multi-scale flow and reaction characteristics, there is still a lack of rapid and accurate techniques for the fast reconstruction and evolution of flow fields in gas-solid fluidized beds. Based on accurate high-fidelity TFM simulation data, this paper explores data dimensionality reduction methods suitable for multiphase flow reactors and physical field reconstruction schemes based on measurement point data. Furthermore, a preliminary data-driven dynamic evolution scheme for complex multiphase flow fields is developed using simple pressure signals and long short-term memory (LSTM) networks.

Keywords: Gas-solid two-phase flow; Fluidization; Digital twin; Data dimensionality reduction

稀疏回归方法挖掘均匀冷却颗粒流系统流动控制方程

赵碧丹^{1,*}, 王军武¹

¹ 中国石油大学（北京）机械与储运工程学院

摘要:

随着大数据时代的来临及高精度离散模拟方法迅速发展,涌现出海量的高质量数据,如何从中学习出准确的物理规律仍是一个非常具有挑战意义的问题。因此,本文尝试利用稀疏回归方法,从离散微元法产生的数据样本中学习出均匀冷却颗粒流系统的流动控制方程。在多种操作条件和颗粒物性的工况下,该方法均能从 DEM 数据中挖掘得到准确的控制方程形式及合理的能量耗散源项。本工作初步证明了可利用纯数据驱动方法,从底层高精度数据中学习出颗粒流系统的宏观控制方程及核心本构关系。

关键字: 颗粒流, 控制方程, 稀疏回归方法, 离散微元法

*Email: bdzhao@cup.edu.cn

流化床中球形与柱状颗粒的运动与破碎特性研究

库晓珂*, 古傲林

浙江大学航空航天学院工程力学系, 浙江 杭州, 310027

*xiaokeku@zju.edu.cn

摘要正文: 流化床内颗粒的运动与破碎特性对物料的混合、输运和热转化等具有重要影响。现有用于表征颗粒破碎的颗粒替代模型 (PRM) 和键球模型存在碎片分布模式随机、子球间孔隙较大等问题。为改进上述问题, 本工作针对球形颗粒提出了基于改良PRM的受力点加密方法 (FPE) 和法向梯度方法 (PNG), 以更好地约束碎片位置和粒度分布, 并采用计算流体力学-离散单元法对流化床中颗粒破碎率、破碎区域分布和能量积累效率进行了研究。同时, 针对柱状颗粒, 提出一种结合键球和多球模型的湿纤维表征方法, 探讨了不同颗粒分辨率、键数及含水量对流化床中柱状颗粒破碎率、破碎位置和碎片长度分布等的影响规律。模拟结果表明, 由于小粒径碎片位置的差异, FPE和PNG在流化初期的粒度分布存在显著不同。柱状颗粒模拟结果显示, 整体破碎率与颗粒分辨率和键数呈负相关; 随着分辨率的增加, 柱状颗粒对湿度的响应减弱, 其破碎模式随湿度增加逐渐由单纤维碰撞破碎转变为纤维团与壁面碰撞破碎。研究结果可为流化床中球形和非球形颗粒的运动与破碎行为的过程调控提供指导。

关键词: 流态化; 球形颗粒; 柱状颗粒; 颗粒替代模型; 键球模型; 颗粒破碎

变径流化床反应器的多尺度模型与工程应用

鲁波娜^{1,2,*}, 许友好^{3,*}, 王维¹

¹ 中国科学院过程工程研究所, 北京 100190

² 中国科学院大学化工学院, 北京 100049

³ 中石化石油化工科学研究院有限公司, 北京 100083

*Email: bnlu@ipe.ac.cn; xuyouhao.ripp@sinopec.com

摘要正文:

为响应国家对车用汽油质量升级的重大需求, 双反应区概念应运而生, 旨在强化烯烃生成与转化的双重目标。该工艺的成功大规模实施不仅带来了显著的经济效益, 更推动了变径流化床(DTFB)催化反应器的创新研发与深入研究, 催生了一系列新型催化反应工艺。本研究首先介绍了DTFB催化反应器的概念起源, 通过分析烃类催化反应中的单分子和双分子机制, 确定了最大化目标产物的关键条件。进一步阐述了应用变径技术划分反应区所面临的科学技术挑战, 认为主要挑战在于实现流动与反应多模态的精确匹配, 这需要建立能够准确预测流型转变的曳力模型。鉴于流动结构受宏观参数和局部动力学的双重影响, 研究提出了双向耦合的EMMS曳力模型及其传质传热模型, 形成了多尺度计算流体力学(CFD)方法, 为流动与反应多模态的精确耦合及变径段的定量设计奠定了理论基础。随后开发的一系列配套技术为各区域温度、密度和气固接触时间的灵活控制提供了工程技术保障, 最终实现了DTFB催化反应技术的工业化、大型化和长周期运行。最后, 简要介绍了几种典型工艺及其应用效果, 并对未来工作进行了展望, 包括开发反应动力学模型的多尺度方法和基于CFD的工业级大模型。

关键词: 变径流化床; 多尺度模拟; 催化裂化; CFD

参考文献

- [1] Y. Xu, B.Lu, M.He, and W. Wang. Diameter-transformed fluidized bed based catalytic reaction engineering and industrial application. Engineering, 2025, accepted.
- [2] 许友好, 王维, 鲁波娜, 徐惠, 何鸣元, 中国炼油创新技术MIP的开发策略及启示[J]. 化工进展, 2023,42(09): 4465-4470

生物质流化床热化学转化的粒内传递多尺度MFM

罗浩¹，夏宇轩¹，吴晓琴¹，熊勤钢^{2*}

¹ 煤转化与新型炭材料湖北省重点实验室，武汉科技大学化学与化工学院，武汉，430081

² 制浆造纸工程国家重点实验室，华南理工大学，广州，510640

*Email: qingangxiong@scut.edu.cn

摘要正文：

流化床反应器由于具有良好的传热传质特性、原料适用性强、操作范围宽等优点^[1]，使其已成为生物质热化学转化过程的主要反应器^[2]。因此，生物质流化床热化学转化反应器的合理优化、调控与设计对提高生物质资源的高效利用具有重要的意义。由于生物质流化床热化学转化反应器内复杂的流动-粒内传递-粒外传递-反应行为，现阶段纯实验手段还难以对其进行全面高效地解析，需要发展生物质流化床热化学转化的数值模拟方法，其中基于介尺度结构的多尺度欧拉多流体模型（Multi-fluid model, MFM）能够降低计算量的同时（与传统MFM相比）保证模拟精度，是目前适用于工业流化床反应器模拟且效率较高的方法之一。然而，在现有多尺度MFM框架下，颗粒尺度通常为边界尺度，通常不考虑颗粒内的传递过程，而生物质流化床热化学转化中的生物质颗粒由于粒度较大，粒内传递过程对粒外传递和反应过程有显著影响，从而影响流化床反应器的多尺度物理化学特性，因此，急需发展考虑粒内传递过程的多尺度MFM模型。为此，本文通过定量比较生物质热化学转化（热解和生物质焦气化）一维模型和零维模型的模拟数据，获得粒内传递过程对粒外传递过程及生物质热化学反应的影响规律，借助化学反应工程中效率因子的概念，引入粒外传热修正因子、粒外传质修正因子、反应速率修正因子，建立粒内传递修正的零维模型，并将其与粒内传递多尺度MFM耦合，发展了针对生物质流化床热化学转化的粒内传递多尺度MFM。模拟结果表明，粒内传递修正的零维模型与单颗粒尺度的实验吻合较好，粒内传递多尺度MFM也可以合理的预测生物质流化床中的热化学转化过程。

关键词：多尺度CFD；热化学转化；生物质；粒内传递；流化床

参考文献

- [1] H. Luo, X. Wang, X. Wu, Q. Xiong. A review on CFD simulation of biomass pyrolysis in fluidized bed reactors with emphasis on particle-scale models, *J. Anal. Appl. Pyrol.*, 162, 2022: 105433.
- [2] C. Bu, L. Bo, X. Chen, G. Alberto, D. Liu, and P. David. Devolatilization of a single fuel particle in a fluidized bed under oxy-combustion conditions. Part B: Modeling and comparison with measurements. *Combust. Flame.*, 162 2015: 809-819.

生物质/塑料快速热解流化床反应器多尺度和人工智能赋能研究

高希^{1,2,*}

¹广东以色列理工学院, 广东省汕头市大学路 241 号, 515063;

²以色列理工学院, 以色列海法市, 3200003

*Email: xi.gao@gtit.edu.cn

摘要正文: 生物质/塑料快速热解流化床反应器是典型的多相、多组分、多尺度的复杂反应系统。本报告介绍了本团队在生物质/塑料热化学转化反应器的多尺度建模、人工智能及实验验证等方面的研究进展。通过高速摄像和基于机器学习的图像处理方法, 研究了生物质快速热解流化床反应器中的多组分流化现象。构建了基于机器学习的曳力模型, 研究了生物质和石英砂的混合和分离的流态化行为。构建了基于神经网络的可解释型热解动力学模型, 实现了热解动力学模型参数的最优化。开发了基于机器学习的离散颗粒模拟加速算法, 实现了离散颗粒快速准确模拟。开发了非球形颗粒模拟求解器SuperDEM, 实现大规模离散颗粒并行模拟, 研究了非球形颗粒的流化现象。构建了多尺度模型框架将复杂的反应动力学模型、颗粒内传递反应模型和流化床反应器模型耦合, 用于生物质/塑料快速热解流化床反应器的模拟、优化和放大。

关键词: 生物质快速热解; 流化床反应器; 人工智能; 多尺度建模; 非球形颗粒

Geldart C类脱硫灰超细颗粒的循环流态化构建及环流强化机制

李之辉, 宋大山, 路兵, 李玉梅, 王成秀*, 蓝兴英, 高金森

重质油全国重点实验室, 中国石油大学(北京), 北京市昌平区府学路 18 号, 102249

*Email: cwang1277@cup.edu.cn

摘要正文:

我国 CO_2 的排放中 70% 来自工业领域, 双碳背景下工业生产中的碳捕集备受关注。在国内炼油企业中, CO_2 的直接排放量占总排放量的 85% 左右, 其中以催化裂化装置的 CO_2 排放量占比最高, 占直接排放量的 25%-50%。然而烟气中硫氧化物的浓度高达 $600\sim 4500 \text{ mg/m}^3$, 会腐蚀设备并使得催化剂中毒, 因此工业烟气的深度脱硫技术对于 CO_2 捕集或提纯至关重要。烟气脱硫主要可以分为湿法、半干法和干法。其中湿法脱硫的脱硫效率高, 可达 98~99%, 但是产生大量废水; 半干法工艺脱硫效率约 80%, 脱硫灰颗粒以浆态形式参加反应, 颗粒的循环率很低, 脱硫成本不理想; 相比之下, 干法脱硫的工艺简单, 不产生废水, 但是由于现有反应器中脱硫灰颗粒和含硫烟气的气固接触效率较低, 脱硫效率往往较低。

脱硫灰颗粒属于 Geldart C 类颗粒, 相比于工业上广泛应用的 A、B 类颗粒, 脱硫灰颗粒的平均粒径更小 ($10 \mu\text{m}$), 颗粒间作用力更强, 粘性更大, 难以流化。气固环流反应器具有气固接触效率高、传热传质性能好和颗粒停留时间可控等优点, 目前在石油炼制领域已经实现了应用。基于此, 本研究提出一种强化 C 类脱硫灰颗粒流化性能的环流耦合提升管反应器, 并在此基础上不断优化改进, 最大程度地改善 C 类颗粒的气固接触效果, 以充分 C 类颗粒比表面积大的优势。前期研究发现, 增设环流结构后仍存在底部流化不完全的问题。通过利用切向进气的方式, 使气体在反应器内形成气旋, 从而进一步强化 C 类颗粒的流化效果。此外, 还尝试在反应器中增设了搅拌结构, 通过机械剪切方式, 破碎 C 类颗粒的稳定聚团。

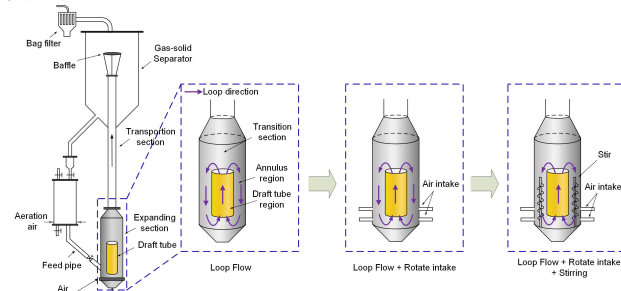


Fig. 1 Schematic diagram of the loop coupled riser reactor device improvement

图 2 对比了不同流化强化方式下的环流推动力和颗粒循环量。当表观气速为 3.5 m/s 时, 仅采用环流强化的情况下, 导流筒区气速 $U_{g-d} \geq 1.25 \text{ m/s}$ 时可形成中心气升式环流; 将环隙区的进气结构采用切向进气方式, 环流启动点降低为 1.10 m/s ; 进一步地, 在环隙区添加机械搅拌结构以充分破碎 C 类颗粒形成的颗粒团聚和堆积层后, 在导流筒区气速低至 0.5 m/s 时仍能保持较大的压力差, 说明搅拌改善了 C 类颗粒在环隙区的循环过程, 强化了颗粒的流化性能。以表观气速 $U_g = 3.5 \text{ m/s}$ 为例, 当导流筒区气速定为 1.5 m/s 时, 单一环流强化下颗粒循环速率为 $4.68 \text{ kg/m}^2\text{s}$; 在此基础上将环隙区进气方式改为切向旋流进气后, 颗粒循环速率增大为 $5.98 \text{ kg/m}^2\text{s}$, 增幅 27.8%; 进一步地在环隙区中添加机械搅拌, 桨叶在搅拌轴的带动下高频旋转剪切, 破碎 C 类颗粒运动过程中形成的团聚物及堆积层, 颗粒循环速率增大为 $8.17 \text{ kg/m}^2\text{s}$ 。

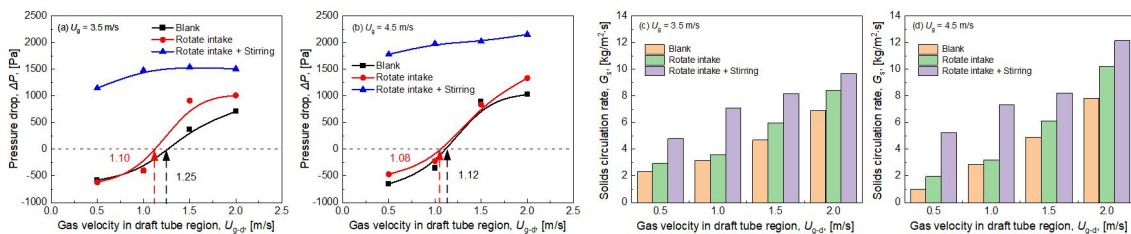


Fig. 2 Comparison of loop driving forces and particle circulation rate under various enhancement methods

关键词: 脱硫灰; 超细颗粒; 循环流态化; 环流强化; 旋流进气; 搅拌

The effect of particle orientation on the drag force for assemblies of prolate ellipsoids: random and preferential

Yong Chen^{1,*}

¹School of Transportation and Logistics Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan, 430063

* yongchen@whut.edu.cn

The lattice Boltzmann method with immersed moving boundary condition has been used to calculate the drag force for assemblies of prolate ellipsoids over a wide range of Reynolds numbers and aspect ratios. The simulation results indicate that the drag force for random orientation evolves as $\sin^2\theta$, whereas it evolves as $\sin^m\theta$ for preferential orientation (m being a function of Reynolds number, solid volume fraction and aspect ratio) which leads to a non-linear dependence on the orientation factor. Moreover, the comparison of the drag force between preferential orientation and random orientation for 0° and 90° shows a substantial difference. Thus, the drag force for random orientation cannot be computed using the drag force for preferential orientations 0° and 90° . The findings in current work can be used to derive more accurate drag force correlations for assemblies of prolate ellipsoids with random and preferential orientations.

Keywords: Drag force; Prolate ellipsoids; Random orientation; Preferential orientation.

References

- [1] Cao, Z., Tafti, D. K., Shahmam, M. Development of drag correlation for suspensions of ellipsoidal particles, Powder Technology, 2020, 369: 298-310.
- [2] Cao, Z., Tafti, D. K., Shahmam, M. Modeling drag force in ellipsoidal particle suspensions with preferential orientation, Powder Technology, 2021, 378(2): 274-287.
- Li, X., Chen, X., Yang, B., Zhou., Q. Direct numerical simulation of moderate-Reynolds number flow past arrays of ellipsoids, AIChE Journal, 2023, 69(10): e18162.

口头报告

加压流化床内宽筛分B类颗粒混合与分离行为研究

巴忠仁，聂伟，李春玉，赵建涛，房倚天

中国科学院山西煤炭化学研究所，山西省太原市桃园南路 27 号，030001

Email: bazhongren@sxicc.ac.cn

摘要正文：

宽筛分B类颗粒流态化在能源化工、氟化工、材料制备等过程工程中普遍存在，提高反应器内的气固接触效率和颗粒混合均匀性对增加反应转化率和选择性具有重要意义^[1,2]。然而，多组分颗粒间密度和粒径的差异使其存在分级流化行为，严重影响了反应器内的“三传一反”过程。解决上述问题的关键在于抑制气固流化系统多组分颗粒的分离行为，建立颗粒物性和操作气速与颗粒离析/混合特性的预测模型和调控机制^[3]。基于此，本项目对加压流化床内宽筛分颗粒的混合与分离行为及其调控机制进行研究，掌握压力和颗粒粒径对混合颗粒临界流化特性的影响，建立临界速度与颗粒物性和操作条件相关联的预测模型，提出实现多组分颗粒良好混合的最佳粒径和流化气速的匹配准则和调控方案。

关键词： 加压流态化；宽筛分B类颗粒；颗粒离析；颗粒混合

参考文献

- [1] M.J.A. de Munck, M. Dullemond, E.A.J.F. Peters, J.A.M. Kuipers. Experimental gas-fluidized bed drying study on the segregation and mixing dynamics for binary and ternary solids. *Chemical Engineering Journal*. 2023, 465: 142756-16.
- [2] C.M. Liu, Y.M. Zhao, Y.J. Li, Y.Q. Feng, C.L. Duan, C.Y. Zhou, L. Dong. A model for predicting the segregation directions of binary Geldart B particle mixtures in bubbling fluidized beds. *Particuology*. 2024, 90: 340-349.
- [3] J.W. Chew, C.M. Hrenya. Link between bubbling and segregation patterns in gas-fluidized beds with continuous size distributions. *AIChE J.* 2011, 57: 3003-3011.

适用于多分散系统的壁面传热模型构建

薛君¹, 余亚雄³, 张晨曦^{1,2,*}

¹鄂尔多斯实验室, 内蒙古鄂尔多斯, 017010

²清华大学化学工程系, 北京, 100084

³中南大学能源科学与工程学院, 湖南长沙, 410083

*cxzhang@mail.tsinghua.edu.cn

摘要正文: 气固流化床内颗粒与壁面的传热是流化床主要的热阻来源, 然而目前常用的双流体模型 (Two-Fluid model) 和 MP-PIC 模型无法解析颗粒与壁面的碰撞传热行为, 不考虑这部分热阻将导致高估壁面与颗粒的传热能力^[1-4]。为此, 本文基于 CFD-DEM 模拟及理论推导, 构建了适用于单分散及多分散体系的壁面传热模型。首先, 对传统适用于 DEM 的气膜厚度模型进行了修正。考虑到颗粒之间距离较小时, 气膜传热速率将大于颗粒的导热速率, 此时颗粒的 Biot 数不满足远大于 1 的条件, 颗粒不能简单地被看作等温系统。为此, 引入了颗粒的导热热阻进行修正, 该方法不仅避免了引入不确定的最小距离参数, 还引入了颗粒导热系数来考虑颗粒物性对传热的影响。然后, 基于 CFD-DEM 模拟结果, 本文进一步获得了颗粒与壁面的传热系数与固体体积分数以及颗粒与气体导热系数比值之间的函数关系。基于理论推导, 发现壁面换热系数与体积分数加权的颗粒直径成正比, 进而将该模型推广到适用于多分散体系。最后, 采用双分数体系对模型进行了验证, 验证结果还表明, 添加细粉可能显著增强颗粒与壁面的传热系数。

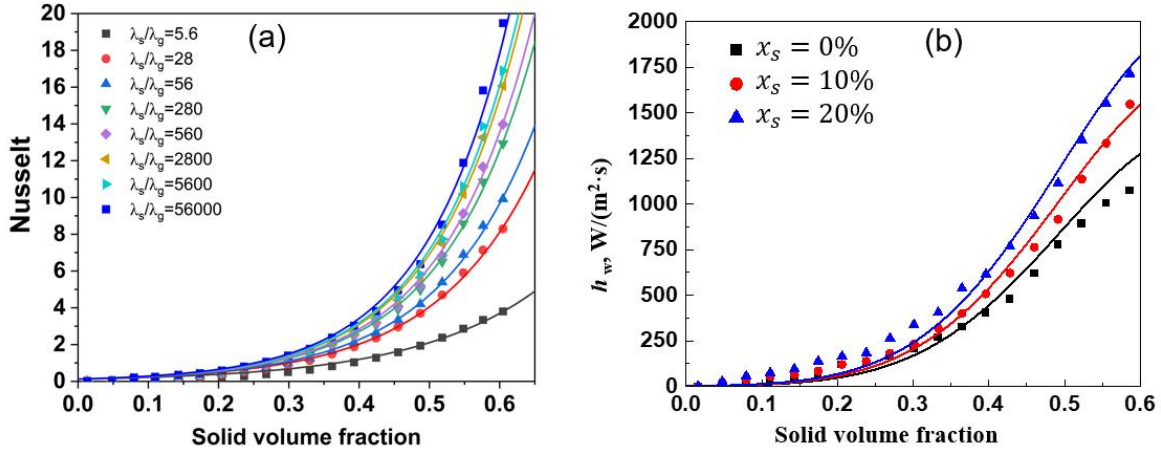


Fig. 1 (a) The dependence of particle-wall Nusselt number on the solid volume fraction at various heat conduction ratio between particle and gas; (b) The effect of the fines addition on the particle-wall heat convection coefficient for $\lambda_s/\lambda_g = 56$.

关键词: 流化床; 壁面换热系数; CFD-DEM; 多分散

参考文献

- [1] Peng Z, Doroodchi E, Moghtaderi B. Heat transfer modelling in Discrete Element Method (DEM)-based simulations of thermal processes: Theory and model development[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2020, 79: 100847.
- [2] Cheng G J, Yu A B, Zulli P. Evaluation of effective thermal conductivity from the structure of a packed bed[J]. Chemical Engineering Science, 1999, 54(19): 4199-4209.
- [3] Morris A B, Pannala S, Ma Z, et al. A conductive heat transfer model for particle flows over immersed surfaces[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2015, 89: 1277-1289.
- [4] Van Antwerpen W, Du Toit C G, Rousseau P G. A review of correlations to model the packing structure and effective thermal conductivity in packed beds of mono-sized spherical particles[J]. Nuclear Engineering and design, 2010, 240(7): 1803-1818.

布风板压降比对倾斜流化床失稳行为的调控

苗杰¹, 余亚雄³, 张晨曦^{1,2,*}

¹鄂尔多斯实验室, 内蒙古鄂尔多斯, 017010

²清华大学化学工程系, 北京, 100084

³中南大学能源科学与工程学院, 湖南长沙, 410083

*Email: cxzhang@mail.tsinghua.edu.cn

摘要正文:

流化床内气固均匀相互作用是维持其稳定流动与传质的关键因素。布风板压降与床层压降的比值（布风板压降比）对倾斜流化床（倾斜角 25° ）的失稳行为具有决定性影响。本研究通过实验测量与CFD-DEM模拟，系统研究了布风板压降比对床层稳定性的作用机制。结果表明，随着布风板压降比的增大，压力脉动呈现两阶段衰减特征：压降比低于临界值（约6%）时脉动急剧减小，超过临界值后衰减速率显著降低。这表明提高布风板压降比有助于促进气泡分布均匀化，并有效降低压力脉动幅度与气泡尺寸。进一步分析表明：（1）当布风板压降比低于临界值（约6%）时，床层内发生显著沟流现象，导致气泡聚并和压力波动加剧；（2）压降比超过临界值时，气泡分布趋于均匀，流态稳定性显著提升；（3）即使压降比达到或超过临界值（如100%），其变化仍持续影响床层稳定性与压力脉动特性。此外，增大压降比可提升床层整体压力，表明低压降比条件下布风板区域颗粒大量积聚，而提高压降比可有效减少该区域的颗粒堆积。本研究揭示了布风板压降比的临界效应对流态调控的关键作用，为倾斜流化床的稳定运行与优化设计提供了理论依据。

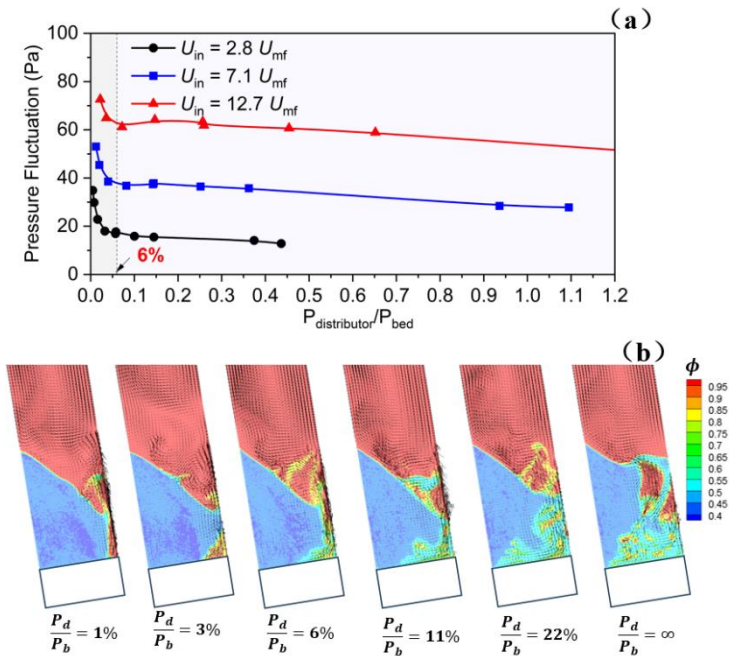


Fig. 1 (a) The effect of the ratio of distributor pressure drops on the pressure fluctuation by experiments. (b) The contour plot of solid volume fraction and solid flux vector at various ratios of distributor pressure drops.

关键词: 流化床; 分布板; 压力脉动; 气泡; CFD-DEM

参考文献:

- [1] 张晨曦, 蔡达理, 贾昱, 等. 流化床中气固均匀分布的失稳现象[J]. 化工进展, 2019, 38(1): 162-177.
- [2] Zhang C, Wang Q, Jia Z, et al. Design of parallel cyclones based on stability analysis[J]. AIChE Journal, 2016, 62(12): 4251-4258.
- [3] Zhang C, Li P, Lei C, et al. Experimental study of non-uniform bubble growth in deep fluidized beds[J]. Chemical Engineering Science, 2018, 176: 515-523.
- [4] Thorpe R B, Davidson J F, Pollitt M, et al. Maldistribution in fluidized beds[J]. Industrial & engineering chemistry research, 2002, 41(23): 5878-5889.
- [5] Grace J R, Cui H, Elnashaie S S E H. Non - uniform distribution of two - phase flows through parallel identical paths[J]. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 2007, 85(5): 662-668.

流态化颗粒传递网络的拓扑结构

鲁峰^{1,*}, 余亚雄², 苗杰³, 魏飞^{2,3}, 张晨曦^{3,2*}

¹ 四川大学化学工程学院, 四川省成都市武侯区一环路南一段 24 号, 610065

² 清华大学化工系, 北京市海淀区双清路 30 号, 100084

³ 鄂尔多斯实验室, 内蒙古自治区鄂尔多斯市康巴什区汇能科创大厦, 017000

*Email: lufeng@scu.edu.cn; cxzhang@mail.tsinghua.edu.cn;

摘要正文: 在化学工程领域, 连续介质假设、边界层理论和布朗运动是我们理解传质, 传热方面的核心基础。然而, 这些理论在流化颗粒物质上都失效了。了解颗粒动态传输调节的机制仍然是流态化领域的一大挑战。在这项研究中, 我们通过实验探测了颗粒液体在单颗粒尺度上的流体力学特性。我们的研究表明, 颗粒液体中强烈的密度波动产生了两种颗粒分散模式: 长程分散和带耗散的封闭扩散。为了模拟这些不同分散行为之间的流体力学相互作用如何共同影响颗粒液体中的整体传输速率, 我们基于图论和网络科学建立了颗粒传输网络。我们的框架可用于解决重要的理论问题, 如流化颗粒输运的非线性问题、非均匀结构中的多体相互作用以及流化床反应器的设计。

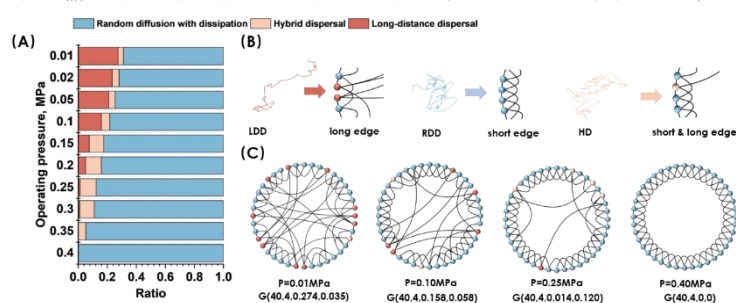


Fig. 1 Topological structure of particle transport networks in fluidization

关键词: 流态化; 颗粒传递网络; 拓扑结构

参考文献

- [1] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, Physics of the granular state, Science 255, 1523-1531 (1992).
- [2] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, & R. P. Behringer, Granular solids, liquids, and gases. Rev. Mod. Phys. 68, 1259-1273 (1996).
- [3] P. Richard, M. Nicodemi, R. Delannay, et al. Slow relaxation and compaction of granular systems. Nature Mater. 4, 121-128 (2005).
- [4] I. S. Aranson, L. S. Tsimring, Patterns and collective behavior in granular media: Theoretical concepts. Rev. Mod. Phys. 78, 641-692 (2006).
- [5] M. P. Dudukovic, Frontiers in reactor engineering, Science 325, 698-701 (2009).

Topological structure of particle transport networks in fluidization

Feng Lu^{1*}, Yaxiong Yu², Jie Miao³, Fei Wei^{2,3*}, Chenxi Zhang^{3,2*}

¹ School of Chemical Engineering, Sichuan University, China Sichuan, 610065

² Beijing Key Laboratory of Green Chemical Reaction Engineering and Technology, Department of Chemical Engineering, Tsinghua University, China Beijing 100084

³ Ordos Laboratory, Ordos, China Inner Mongolia, 017010

* lufeng@scu.edu.cn; cxzhang@mail.tsinghua.edu.cn

Abstract: In chemical engineering, the continuum hypothesis, boundary layer theory, and Brownian motion have played a central role in our understanding of mass and heat transport. In contrast, these theories all fail with the fluidized granular matter. Understanding the mechanisms that govern dynamic particle transport regulation still presents a major challenge in fluidization. In this study, we experimentally probed hydrodynamic properties in granular liquids at the single-particle scale. Our results reveal that the strong density fluctuations within the granular liquid give rise to two particle dispersion modes: long-range dispersion and confined diffusion with dissipation. To model how the hydrodynamic interactions between these disparate dispersion behaviors collectively influence the overall transport rate in a granular liquid, we have developed the particle transport networks based on graph theory and network science. Our framework can be applied to address important theoretical questions, such as the nonlinear problem of fluidized particle transport, many-body interactions within an inhomogeneous structure, and the design of fluidized bed reactors.

Keywords: Fluidization, Particle transport networks, Topological structure.

References

- [6] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, Physics of the granular state, Science 255, 1523-1531 (1992).
- [7] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, & R. P. Behringer, Granular solids, liquids, and gases. Rev. Mod. Phys. 68, 1259-1273 (1996).
- [8] P. Richard, M. Nicodemi, R. Delannay, et al. Slow relaxation and compaction of granular systems. Nature Mater. 4, 121-128 (2005).
- [9] I. S. Aranson, L. S. Tsimring, Patterns and collective behavior in granular media: Theoretical concepts. Rev. Mod. Phys. 78, 641-692 (2006).
- [10] M. P. Dudukovic, Frontiers in reactor engineering, Science 325, 698-701 (2009).

催化裂化沉降器智能预测预警技术

赵云鹏¹, 石孝刚¹, 高金森¹, 蓝兴英^{1,*}

¹ 中国石油大学(北京) 重质油全国重点实验室, 中国 北京, 102249

*Email: lanxy@cup.edu.cn

摘要正文:

流化催化裂化(FCC)是炼厂中重质油轻质化的重要工艺之一,其加工能力约占我国原油一次加工能力的27.2%,同时FCC工艺兼顾生产成品油和低碳化工品,使其成为在“减油增化”背景下炼油厂实现灵活生产的关键工艺。然而随着原料逐渐重质化,FCC工艺的长周期安全平稳运行受到严峻挑战,其中沉降器的结焦和跑剂故障所导致的非计划停工次数占比超过2/3,带来了巨大的安全风险和经济损失。对于结焦过程而言,固体焦块的形成缺乏有效的测量时候短,现有的数据测量仪表难以感知装置内部的结焦状态和结焦速率,通常只能在发生参数波动后进行补救性操作。跑剂受到多种操作参数和设备参数的共同影响,发生跑剂后的流场又会再次影响操作参数和设备状态,这种复杂的反馈机制导致跑剂故障原因诊断异常困难。这些难题导致了FCC沉降器的安全平稳运行操作极其被动。

为了解决上述难题,本文提出了实验测试-工业测量-CFD模拟-AI辅助诊断的四位一体智能预测预警技术。重组分油气和催化剂颗粒的自身性质是结焦和跑剂过程的内因,因此首先对其进行测试分析,得到各个组分油气的生焦率和和冷凝率模型,建立结焦速率机理模型,得到平衡剂和新剂颗粒的粒径分布,明确催化剂颗粒的机械强度和破碎性质。针对目标装置,采集生产周期内的DCS和LIMS数据并通过基于密度的聚类算法对其进行生产模式识别。根据典型生产工况进行CFD模拟计算,得到沉降器内全流场分布特性以及重组分液滴的运动状态,基于结焦速率机理模型,建立沉降器内各个关键部位结焦速率和操作条件之间的对应关系。同时补充计算各种典型故障工况下沉降器内的流场运动规律,为风险预测提供数据支撑。基于海量的工业测量数据和模拟数据来训练生成式深度神经网络,建立操作变量和场分布、结焦速率、跑剂风险之间的对应关系,从而实现关键工艺参数和指标的实时预测和预警,并在结焦速率超出阈值时提供具备可解释性的优化调控建议,整体研究思路如图1所示。相关智能预测预警技术成功在多套工业装置上进行了部署和应用,计算准确度不小于92.5%,能够根据现场参数变化快速溯源故障原因,并提供优化指导建议,结焦速率平均下降14.0%,显著延长了装置安全平稳运行周期。

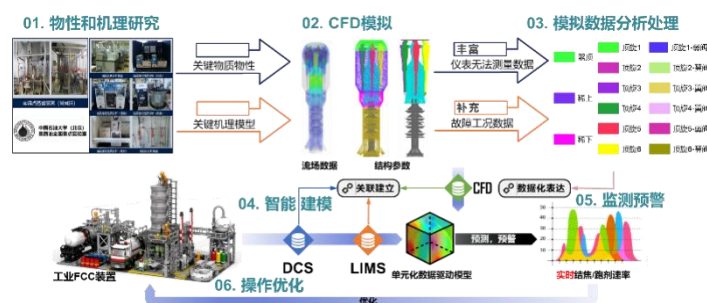


图1 沉降器结焦/跑剂智能预测预警技术示意图

关键词: 催化裂化; 结焦/跑剂; CFD; 人工智能

[1] Zhang Mengxuan, Yang Zhe, Zhao Yunpeng, Lv Mingzhu, Lan Xingying, Shi Xiaogang, Gao Jinsen, Li Chuankun, Yuan Zhuang, Lin Yang. A hybrid safety monitoring framework for industrial FCC disengager coking rate based on FPM, CFD, and ML. *Process Safety and Environmental Protection*. 2023, 175:17-33.

气固密相流化床中光纤信号数据处理的新方法

金伟星¹，范怡平¹，鄂承林^{1,*}，卢春喜^{1,*}

¹ 中国石油大学（北京），北京，102249

*Email: ecl510@126.com

* Email: lcxing@cup.edu.cn

摘要正文：

在气固密相流化床中，光纤探针（OFP）记录的瞬时信号，能够直观地反映流化床内的颗粒流动行为。本文提出了一种光纤信号数据处理的新方法，实验装置包括二维流化床、高速摄影机和光纤系统，通过实验的方式测量区分气泡相和乳化相的阈值电压。研究结果表明，该阈值电压不仅与流型密切相关，还与所使用颗粒的颜色存在关联。

此外，采用快速傅里叶滤波器对OFP信号进行预处理，滤除高频信号以增强气泡信号，并结合频域分析的方法揭示了气泡、颗粒聚团及单颗粒的振动特性。通过与多种方法进行对比，验证了该方法在测量鼓泡/湍动流化床流体动力学方面的适用性。通过对比鼓泡床与湍动床的流动特性，发现湍动床中大气泡频率显著降低，且气泡速度与频率在床层中心区域较高，壁面附近较低，这一空间分布特征在湍动床中尤为显著。颗粒速度与聚团频率/尺寸同样呈中心大、壁面小的分布特点。气泡相内的颗粒速度高于整体平均值，而乳化相颗粒速度则低于整体平均值，并建立了预测两相颗粒速度的关联式。最后，通过固含率时间序列分析局部固含率、局部相结构的波动，考察了流化床内局部两相动态特性。在此基础上，提出了动态流化质量因子来定量描述床层的动态流化质量。

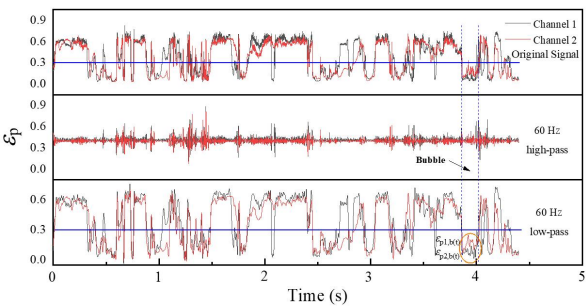


图. 1 原始光纤信号和滤波光纤信号的时间序列

Fig. 1 The time series of the original OFP signals and the filtered OFP signals

关键词：气固流化床；颗粒流动；气泡阈值；光纤探针

参考文献

[1] W. X. Jin, Y. Z. Song, L. Y. Li et al. An improved method to process the data of optical Fiber signals for identifying the instantaneous flow structure in a gas-solid fluidized bed[J]. Powder Technology, 2025(452):120475.

鼓泡床中磁性颗粒的感应加热特性研究

陈哲旭，谭钰鑫，张君涛，钟汉斌*

西安石油大学西安市高碳资源低碳化利用重点实验室，陕西 西安 710065

*Email: hbzhong@xsyu.edu.cn

摘要正文：为应对“双碳”目标带来的严峻挑战，化工过程的电气化已成为化工行业低碳转型的必然趋势。电磁感应加热技术（Electromagnetic Induction Heating, EIH）是一种磁性/导电材料通过吸收电磁能直接转换为热能的非直接接触式加热技术，其与传统加热方式相比具有加热效率高、响应速度快及操作简单等特点，已成为化工反应器由高碳氧热向绿色电热升级的重要方法。目前电磁感应加热在快速热解过程中的应用已有较多研究，但大部分针对固定床反应器^[1-4]。本研究将电磁感应加热应用于鼓泡流化床，使用 40-60 目铁粉颗粒作为床层颗粒，采用间歇施加磁场的方式对床层加热，标定床层升温及压降曲线，考察了铁粉床层颗粒氧化程度对床层温升影响，结果表明随着氧化程度的加深床层温升逐渐降低。同时考察磁性/非磁性颗粒混合床层的温升及压降变化，并将混合床层中的磁性铁粉颗粒与同等质量的铁棒内构件做对比，结果表明采用铁粉作为床层颗粒温升情况和能耗表现均优于铁棒内构件，可解决现有以铁棒作为内构件的感应加热流化床温度梯度大、升温不足等问题，为绿电驱动鼓泡流化床生产工艺的开发应用提供理论基础。

关键词：绿电；电磁感应加热；鼓泡流化床；磁性颗粒

参考文献

- [1] W. T. Tsai, M. K. Lee, Y. M. Chang, Fast pyrolysis of rice straw, sugarcane bagasse and coconut shell in an induction-heating reactor, *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2006, 76: 230-237.
- [2] Dideolu J. Daniel, Candice R. Ellison, Jacob Bursavich, et al., An evaluative comparison of lignocellulosic pyrolysis products derived from various parts of *Populus deltoides* trees and *Panicum virgatum* grass in an inductively heated reactor, *Energy Conversion and Management*, 2018, 171: 710-720.
- [3] Na Li, Yue Pan, Zhenghao Yan, et al., Cornstalk pyrolysis for syngas in a two-stage electromagnetic induction reactor, *Fuel*, 2023, 336: 127124.
- [4] Long Wu, Huameng Ma, Jingsheng Mei, et al., Low energy consumption and high quality bio-fuels production via in-situ fast pyrolysis of reed straw by adding metallic particles in an induction heating reactor, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2022, 47: 5828-5841.

高压流态化密相区的剪切膨胀现象

余亚雄¹, 魏飞^{2,3}, 张晨曦^{2,3*}

1 中南大学能源科学与工程学院, 长沙, 410083

2 鄂尔多斯实验室, 鄂尔多斯, 017000

3 清华大学化学工程系, 北京, 100084

*Email: cxzhang@mail.tsinghua.edu.cn

摘要正文:

高压流化床因其紧凑高效的特点在煤化工和石油化工领域具有重要应用价值, 但高压操作对颗粒流化行为的演变机制尚不明确^[1]。本研究采用实验与CFD-DEM模拟相结合的方法, 系统研究了操作压力对颗粒流化特性影响。研究表明: 在高压条件下, 流化床呈现明显的“密相稀释”现象, 具体表现为, 操作压力为1.2MPa时, 密相区颗粒浓度降低9%, 气泡相颗粒浓度增加12%, 同时气泡尺寸减小且数量增多。通过颗粒动理论对模拟数据进行分析发现, 高压导致密相区平均剪切强度提升10%, 正是这一变化通过剪切膨胀效应直接引发了颗粒体系的体积膨胀, 从而解释了密相区浓度降低的物理本质^[2-3]。该研究建立的“剪切-膨胀”模型为高压流化反应器的工程设计和工艺优化提供了重要理论基础。

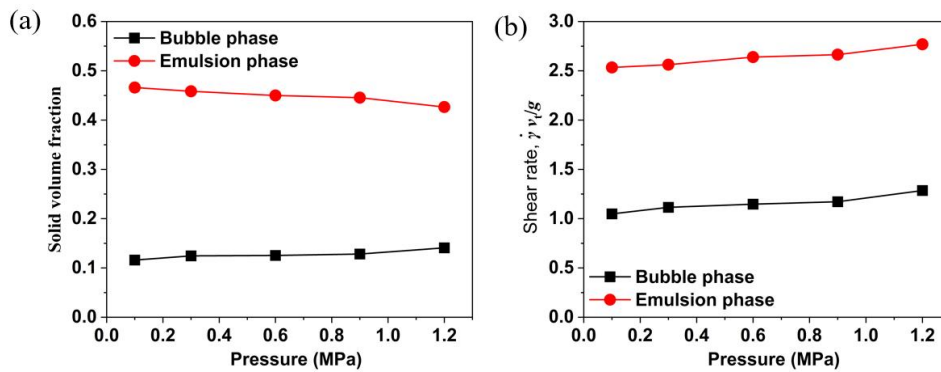


Fig. 1 The effect of operating pressure on the average solid volume fraction and shear rate

关键词: 高压流态化; CFD-DEM; 剪切膨胀

参考文献

- [1] Kunii D, Levenspiel O. Fluidization engineering[M]. Elsevier, 2013.
- [1] Berzi D. On granular flows: From kinetic theory to inertial rheology and nonlocal constitutive models[J]. Physical Review Fluids, 2024, 9(3): 034304.
- [2] Wang L, Jiang M, Zhou Q. Development of a filtered drag model considering effect of the solid shear rate[J]. Particuology, 2022, 71: 63-74.

基于CFD数值模拟的冷氢化流化床反应器 内构件结构优化研究

赵政¹, 杨景轩¹, 连文豪², 巴忠仁³, 郝晓刚^{1, *}

¹太原理工大学, 化学与化工学院, 山西省太原市万柏林区迎泽西大街 79 号, 030024

²中北大学, 化学与化工学院, 山西省太原市尖草坪区学院路 3 号, 030051

³中国科学院山西煤炭化学研究所, 山西省太原市桃园南路 27 号, 030001

*Email: xghao@tyut.edu.cn

摘要正文: 在多晶硅生产过程中, 冷氢化流化床反应器是实现四氯化硅高效转化的关键设备, 其气固接触效率和反应性能直接影响生产效率和产品质量。然而, 目前对于气体分布器、布风板及内构件等关键部件的设计优化仍存在诸多挑战[1]。为了深入研究这些部件对气固接触效率及反应性能的影响, 本研究采用理论分析与数值模拟相结合的方法。通过理论计算临界流化速度和床层空隙率, 分析不同粒径和表观气速条件下的床层密度变化规律, 其次, 利用计算流体力学(CFD)模拟技术, 对不同结构的气体分布器和布风板进行建模与仿真。有研究指出, 气体分布器的孔径分布、开孔率以及布风板的结构形式等参数对气固两相的混合均匀性和反应转化率的影响机制尚未完全明确[2]。通过 CFD 模拟, 可以直观地观察气体在反应器内的流动轨迹和分布情况, 从而优化气体分布器和布风板的设计, 以实现更均匀的气体分布和更高效的气固混合。在本文中, 通过二维模拟, 分别进行不安装挡板、安装十三层、十四层、二十一层挡板的模拟, 将四种情况进行对比, 同时对比曳力模型为 Gidaspow 及 Wen-Yu 在四种模型下的模拟结果。结果表明, 对于不安装挡板的情况, 安装十三层、十四层、二十一层挡板的情况均能提高气固接触效率, 在 Gidaspow 曳力模型下, 中心轴线位置上的固含率方差由 0.007 降至 0.001 左右; 在 Wen-Yu 曳力模型下, 固含率方差由 0.0029 降至 0.0018。同时对气体分布器孔径进行模拟, 当孔径设置为 5.5mm 时, 与均匀入口相比, 由于进气范围的减小, 导致气固接触不如均匀入口更加充分, 因此固含率方差有小幅度提高。通过上述研究方法及部分结论, 我们已经为后续的实验验证和优化设计奠定了理论基础。结合实验数据, 进一步优化气体分布器、布风板和内构件的设计参数, 以期冷氢化流化床反应器的性能提升提供更可靠的理论支持和技术指导。最终目标是实现更高效、更稳定的冷氢化反应过程, 为多晶硅生产的可持续发展提供有力支持。

关键词: 冷氢化流化床反应器; 气固接触效率; 流场调控;

参考文献

- [1] Yang S, Li H, Zhu Q. Experimental study and numerical simulation of baffled bubbling fluidized beds with Geldart A particles in three dimensions [J]. Chemical Engineering Journal, 2015, 259: 338-347.
- [2] Zhang Y, Lu C. Experimental Study and Modeling on Effects of a New Multilayer Baffle in a Turbulent Fluid Catalytic Cracking Regenerator [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2014, 53(5): 2062-2066.

旋风分离器筒体直径和处理气量对性能的影响及其流场机制

高世乾¹, 杨景轩¹, 郝晓刚^{1,*}

¹太原理工大学, 化学与化工学院, 山西省太原市万柏林区迎泽西大街 79 号, 030024

*Email: xghao@tyut.edu.cn

摘要正文: 旋风分离器是一种常见的气固多相流分离设备。其结构简单, 无运动部件, 能在高温、高压、高粉尘负荷等恶劣环境下正常工作。筒体直径是旋风分离器优化设计中的重要参数, 在时铭显院士提出的四参数优化设计理论、Stairman[1]提出的旋风分离器标准设计法中, 都以其为核心设计整个旋风分离器, 但在现有研究中, 由于处理气量与筒径的变化, 使得筒径对于旋风分离器的性能影响未能形成统一的结论, 且关于内部流畅机制的研究尚不完善, 有学者通过实验发现在改变或固定处理气量时, 增大旋风分离器的筒体直径, 其性能会有多种情况, 而内在关系不明确[2]。因此, 本研究将分离器入口尺寸固定为145 mm*63 mm, 其余结构尺寸与筒体直径呈一定比例, 入口气速选取15 m/s至32 m/s以及各自结构对应的理论计算最大效率入口气速 (MEIV), 采用计算流体力学 (Computational Fluid Dynamics, CFD) 方法对流场机制进行研究, 分析其性能变化成因。结果表明, 在处理气量相同的情况下, 随着筒径增大, 旋风分离器的分离效率增加, 压降持续降低, 逃逸率逐渐降低, 并且颗粒逃逸会由返混逃逸为主转变为短路逃逸为主, 这是因为分离器内部上行流的范围随筒径增大而增大, 超过了排气管管口范围, 根据学者[3]研究表明, 上行流具备二次分离颗粒的能力, 因此返混逃逸率降低。且随着筒径增大, 分离器内部切向速度与轴向速度都降低, 但是轴向速度降低更多且在大筒径结构中出现滞留现象, 增强了二次分离能力, 也使得返混逃逸率下降。在筒体直径保持不变时, 随着处理气量的增大, 分离器的分离效率增大, 压降也持续增加。这些结果有助于完善旋风分离器的优化设计方法, 为后续相关方向研究做出贡献。

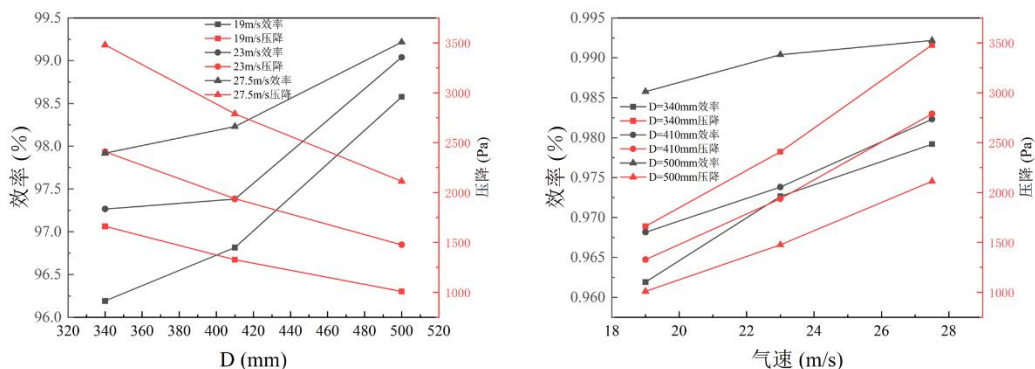


图1. 分离性能图

关键词: 旋风分离器; 筒体直径; 处理气量; 流场机制; 计算流体力学

参考文献

- [1] Stairmand C J. The Design and performance of cyclone separators [J]. Industrial & Engineering Chemistry, 1951, 29: 356-383.
- [2] Yuan Y, Sun G G, Zhou F Q, et al. Effects of the cylinder diameter on cyclone performance[J]. Acta Petrolei Sinica (Petroleum Processing Section), 2017, 33(4): 738-745.

Wu X L, Hang X D, Shi M X. Experimental research on particle concentration distribution in cyclone[J]. Journal of the University of Petroleum, China, 1993, 17(4): 54-59.

Numerical and experimental study on the particle erosion and gas-particle hydrodynamics in a co-directional swirling spouted bed

Biao Sun¹, Xinxin Che¹, Feng Wu^{1*}, Gang Wang²

1, School of Chemical Engineering, Northwest University, Xi'an, 710069, China

2, School of Civil Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China

*Corresponding author: Email: wufeng@nwu.edu.cn

Abstract: The experimental and simulative methods were used to study the hydrodynamic characteristics of gas-solid two-phase flow and particle erosion in co-directional swirling spouted bed (CSSB). The four-zone flow of particles was found in filling zone: separation zone, convergence zone, re-separation zone and particle accumulation zone. The internal reinforced structure effectively strengthened the radial velocity of particles in the cylinder. In addition, the two serious erosion zones on the axial swirl vane were respectively in the convergence zone and particle accumulation zone, the erosion heights were respectively and roughly 0.045 m on the A-face and 0.076 m on the B-face. The erosion heights on the cylinder internal walls were basically 0.15 m with the increase of inlet velocity. By comparing axial swirling spouted bed (ASSB), integrated multi-nozzle swirling spouted bed (IMSSB) and CSSB, it was found that CSSB had a better swirling effect and smaller intensity of particle erosion.

Keywords: CSSB; Flow characteristic; Characteristics of the erosion; Four-zone flow of particles; Internal reinforced structure

气-固流化床换热器强化研究

李建涛^{1,*}, 林春芸², 姚秀颖², 卢春喜²

¹宁夏大学化学化工学院, 宁夏银川市, 750021

²中国石油大学(北京)重质油全国重点实验室, 北京, 102249

* Email: jltli@nxu.edu.cn

摘要正文: 气固流化床换热器通常用于强放热过程中的移热。根据Mickley和Fairbanks提出的颗粒团更新模型, 固体颗粒与壁面的接触动力学对传热性能有重要影响。然而, 对接触动力学的系统研究很少, 尤其是工业中常见的伴随固体外部循环的流化床换热器。因此, 本研究搭建了一个中试规模的实验装置, 以研究伴随固体外部循环运动的气固流化床中的流体力学和接触动力学。结果表明, 在湍流流域下, 固体外部循环可以破碎大气泡, 导致在换热表面附近气泡尺寸较小且气泡频率较高; 在鼓泡流域下, 固体外部循环增加了颗粒团与浸没表面之间的接触距离。通过考虑固体径向混合、固体颗粒尺寸和固体质量通量的影响, 提出了预测颗粒团和换热表面接触距离的经验关联。耦合接触距离与局部颗粒团接触时间, 对颗粒团更新模型进行了修正。基于以上接触动力学特性, 提出了一种新型的折流板流化床换热器, 强化了传热表面与流化床介质之间的接触特性。与传统气固流化床换热器相比, 该新型的折流流化床换热器, 减小了气泡尺寸、增加了气泡频率、增强了气泡和颗粒的径向运动, 有效降低了颗粒团与换热表面之间的接触距离与接触时间, 实现了换热系数的显著提升。

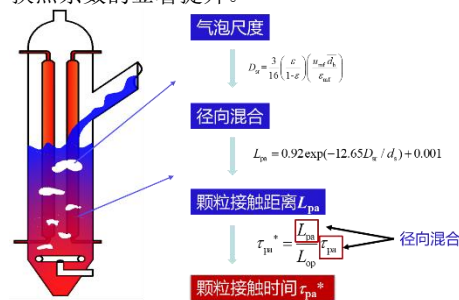


Fig. 1 Modified packet renewal model

关键词: 气-固流化床; 换热; 接触动力学; 过程强化

参考文献

[1] Chunyun Lin, Jiantao Li*, Lei Zhang et al., Bed-to-wall contact dynamics in a gas-solid fluidized bed with downward solid movement. Ind. Eng. Chem. Res. 63, 14326-14332(2024).

[2] Jiantao Li, Xiuying Yao, Lei zhang et al., Heat transfer intensification mechanism of a baffled fluidized bed heat exchanger. Ind. Eng. Chem. Res. 62, 545-555 (2023).

[3] Chunxi Lu, Jiantao Li, Xiuying Yao. Fluidized bed cooler with regional coordination enhancement: US 11,338,264 B2[P]. 2022.

重质颗粒基础流态化特性的探究

李舒月¹, 王欢^{1,2}, 周少强², 毛志宏¹, 张永民^{1*}, 王军武¹, 吴秀花²

(1 中国石油大学(北京)重质油全国重点实验室, 北京 102249; 2 中核第七研究设计院有限公司,

山西

太原 030012)

摘要正文: 气固流化床在工业中应用广泛, 但不同应用场景使用的颗粒密度差异明显。在天然铀转化、直接还原炼铁、化学链燃烧等过程中, 常使用密度在 4.0g/cm^3 以上的重质颗粒, 而传统化工和能源行业广泛使用的是密度较小的轻质颗粒。这类重质颗粒的流化行为与轻质颗粒存在显著差异, 给流化床的设计和操作带来了挑战。通过采用基础实验与数值模拟相结合的方法, 研究了颗粒密度对流化床气固流动特性的影响, 模拟结果与实验数据吻合, 显示出模型的可靠性。研究发现传统经验公式在预测高密度颗粒的最小流化速度时存在显著误差。同时, 研究表明, 随着颗粒密度增加, 流化性能明显下降, 表现为气泡增大、非流化区域增加、气体沟流现象严重以及床层膨胀率降低等问题。此外, 在核化工领域, 如 U_3O_8 还原流化床中, 不同粒径的颗粒流化状态较差, 尽管粒径较小的颗粒具有更高的转化率, 但整体反应效率依然偏低。研究表明, 优化流化床的操作条件和结构形式, 对于提高流化效果和反应转化率具有重要意义, 为高密度颗粒系统的理论研究和实际应用提供了新方法和视角。

基于斯托克斯数的变物性气固流化床滤波曳力模型

赵一鸣¹, 袁守正¹, 陈啸¹, 周强^{1,2,*}

¹ 西安交通大学化学工程与技术学院, 陕西 西安, 710049

² 西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 陕西 西安, 710049

*zhou.590@xjtu.edu.cn

摘要正文: 在流化床系统中, 准确预测曳力对于流化床系统的高保真模拟至关重要, 为此, 曳力模型需要适用于具有不同物性 (如Geldart A、B和D类) 的颗粒, 并能够在广泛的参数范围内具有可靠性。本研究使用细网格双流体方法模拟周期沉降系统, 获得其细网格数据, 研究了斯托克斯数 St 、密度比 DR 、无量纲滤波尺寸以及滤波固含率 $\bar{\phi}_s$ 对非均匀度 H_d 的影响。对于相同的 St 但不同的 DR , H_d 随着 DR 的增加而减小。相反, 对于相同的 DR 但不同的 St , 观察到一个约为0.32的临界固含率 $\bar{\phi}_{s,c}$: 当 $\bar{\phi}_s < \bar{\phi}_{s,c}$ 时, H_d 随着 St 的增大而增加; 而当 $\bar{\phi}_s > \bar{\phi}_{s,c}$ 时, H_d 随着 St 的减小而增加, 并对这一现象进行了解释。此外, 对于Geldart D类颗粒, 在高 St ($St > 20000$) 下, H_d 趋近于1。基于这些发现, 通过引入 St 来表征物性的影响, 构建了适用于宽物性参数范围的气固系统统一滤波曳力模型。所提出的模型在各种流化床的后验测试中表现出良好的性能。

关键词: 变物性; 流态化; 滤波曳力; 气-固流; 双流体

高压流化床中的混合动力学

刘鑫¹, 鲁峰², 余亚雄³, 张晨曦^{1,4,*}

¹鄂尔多斯实验室, 内蒙古鄂尔多斯, 017010

²四川大学化学工程学院, 四川成都, 610065

³中南大学能源科学与工程学院, 湖南长沙, 410083

⁴清华大学化学工程系, 北京, 100084

*cxzhang@mail.tsinghua.edu.cn

摘要正文: 停留时间分布 (RTD) 理论, 可以全面了解系统内部的流动模式, 获得系统的整体流动行为信息, 是反应器性能评价的重要指标, 是表征反应器内流体流动非理想性的核心工具^[1]。高压流化床混合动力学研究气固两相在高压下的流动、传质与反应耦合行为。高压条件下, 气体密度增大、气泡尺寸缩小且稳定性变化, 颗粒间作用力增强, 导致流化特性显著不同于常压环境^[2-4]。本文通过脉冲示踪法测量 0.2-1.2MPa 下 FCC 颗粒冷态下停留时间分布, 分析平均停留时间、Pe 等参数探究不同压力下流化床反应器混合特性与反混程度。结果表明, 压力在 0.2-0.8 MPa 时, 随压力升高, RTD 曲线变窄、拖尾减弱, 平均停留时间缩短, Pe 数上升; 0.8 MPa 为临界压力点, 流动趋近平推流 (Pe 数小幅下降), 停留时间最短。压力超过 0.8 MPa 后, RTD 曲线变宽且停留时间延长, 混合能力大幅减弱, 流动模式接近固定床。压力变化通过调控气泡行为与相间传质, 直接影响流化质量与反应效率。

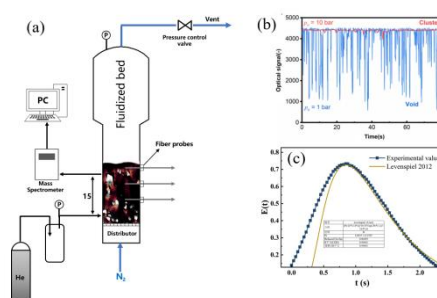


Fig. 1 (a)RTD test system. (b) Transient signals of solid volume fraction. (c)RTD fitting curve.

关键词: 停留时间分布; 高压; 反混; 混合动力学

参考文献:

- [1] NAUMAN E B. Residence Time Theory[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2008, 47(10): 3752-3766.
- [2] LU F, ZHANG C, WANG Y, et al. Phase coexistence in fluidization[J]. AIChE Journal, 2022, 68(2): e17530.
- [3] ZHANG C, LI S, WANG Z, et al. Model and experimental study of relationship between solid fraction and back-mixing in a fluidized bed[J/OL]. Powder Technology, 2020, 363: 146-151.
- [4] YU Y, LU F, BAI H, et al. Effect of fines addition on heat transfer performance in gas-solid fluidized bed: An integrated experimental, simulation, and theoretical study[J]. Chemical Engineering Journal, 2023, 476: 146806.

基于中心-面动量插值与通量重建的流体-颗粒模拟精度提升

李稳^{1,2}, 徐骥^{1,2}, 赵碧丹^{1,3}, 周泉⁴, 刘怡鸽^{1,2 (a*)}, 王军武^{1,3 (b*)}

¹中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室, 北京, 100190

²中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室, 北京, 100049

³中国石油大学(北京)机械与储运工程学院过程流体过滤与分离技术北京市重点实验室, 北京, 102249

⁴航天长征化学工程股份有限公司, 北京, 100048

(a*) Email: liuyige20@ipe.ac.cn

(b*) Email: jwwang@cup.edu.cn

摘要正文: 欧拉-拉格朗日方法是研究流体-颗粒流动的常用方法。本研究提出了一种新的中心对面动量插值方法和对中心通量重建方法, 以提高欧拉-拉格朗日方法在同位网格下反应流体-颗粒流动的精度。本研究在固定床、鼓泡流化和湍流流化三种不同的流化状态下, 对冷床和臭氧催化分解流化床的流体-颗粒流动行为进行了模拟, 证明了该方法的有效性。仿真结果与理论解进行了比较, 结果表明, 该方法在抑制高频振荡、提高平滑度和精度方面优于标准OpenFOAM求解器。

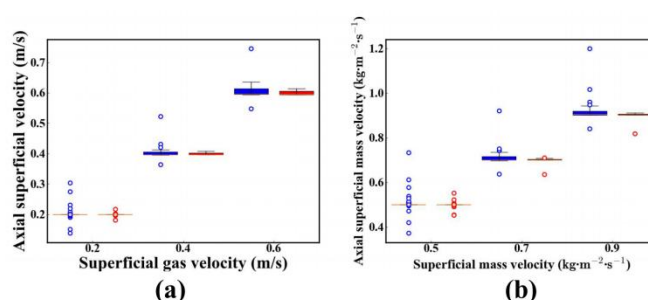


Fig. 1 Axial superficial gas velocity and mass velocity oscillations of the validation cases, the standard solver results are shown in blue while results of this study are shown in red. The numbers smaller than Q1 and larger than Q4 are outliers, represented by hollow circles.(a) Cold bed; (b) Ozone decomposition bed.

关键词: 欧拉-拉格朗日模拟; 流体-颗粒流动; 插值; 通量重建; 流化床

三种新型喷动床内干燥与脱硫过程强化研究

车馨心^{1,*}, 吴峰², 马晓迅²

¹西安科技大学, 西安, 710054

²西北大学, 西安, 710127

*Email: xinxin_che@xust.edu.cn

摘要正文:

作为一种高效的颗粒-流体接触器, 喷动床反应器具有结构简单, 喷射状态稳定等优点, 因此, 它广泛应用于脱硫、干燥和热解等许多领域。但传统柱锥形喷动床中的载气停留时间较短, 气体的径向扩散受到抑制, 存在气固径向混合不足和气固接触效率低下等问题, 影响了热质传递和反应效果^[1,2]。为了克服常规喷动床的局限性, 本文设计了三种带强化结构的新型喷动床: 纵向涡喷动床, 整体式多喷嘴喷动-流化床和旋流喷嘴喷动床, 并对常规和三种新型喷动床内干燥及脱硫过程进行研究, 为喷动床强化技术的应用提供理论支撑^[3]。喷动床内的烟气脱硫过程涉及多组分间的流动、水汽化相变、传热传质和反应过程, 采用多相流模型对常规喷动床及三种含强化构件的新型喷动床内干燥及脱硫过程进行模拟研究^[4]。

首先, 结合实验和模拟方法研究了常规及三种新型喷动床内湿颗粒干燥过程。喷动床颗粒干燥实验确定了三个典型干燥速率期, 明确了颗粒的临界含水量和平衡含水量分别为0.3和0.0002。基于实验系统建立并验证了喷动床内颗粒干燥过程的数理模型, 模拟分析了四种喷动床内干燥过程的流动及热质传递规律。实验与模拟结果表明: 相比于常规喷动床, 纵向涡喷动床、整体式多喷嘴喷动-流化床和旋流喷嘴喷动床内的颗粒干燥时间分别降低了6.67%、16.67%和20%, 加入内强化结构能够促进喷动床干燥过程强化。

其次, 对喷动床脱硫过程进行了模拟分析。结果表明: 四种喷动床脱硫过程的喷动形貌均呈现出不稳定、不连续的鼓泡状喷动。受料浆加入的影响, 常规喷动床内的颗粒会向床层一侧歪斜喷动, 而三种新型喷动床则能够较好地保持竖直喷动。相比于常规喷动床, 三种新型喷动床具有更好的相间换热、水汽化相变和相间传质效果。结果表明: 纵向涡、多喷嘴和旋流喷嘴结构能够提升水汽化速率, 增大出口气体液含率。在脱硫反应方面, 常规喷动床的脱硫效率为77.75%, 纵向涡喷动床、整体式多喷嘴喷动-流化床和旋流喷嘴喷动床的脱硫效率分别为80.85%, 87.97%和88.81%。

综合研究表明, 针对烟气脱硫与颗粒干燥过程, 强化效果由大到小依次为旋流喷嘴>多喷嘴>纵向涡, 强化效果最佳的均体现为旋流喷嘴结构。内强化结构与干燥和脱硫过程中的多相流动、热质传递及反应效率的动态关联规律, 对喷动床反应器过程强化技术的工程应用具有指导意义。

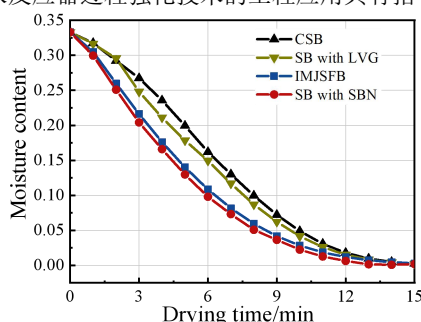


Fig. 1 Variation of particle moisture content with drying time in four spouted beds

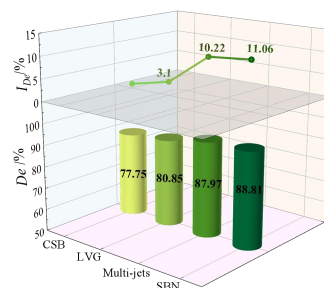


Fig. 2 3D diagram of desulfurization efficiency and enhancement factors of four spouted beds

关键词: 过程强化; 新型喷动床; 颗粒干燥; 烟气脱硫

参考文献

- [1] Sousa R C, Ferreira M C, Altzibar H, Freire F B, Freire J T. Drying of pasty and granular materials in mechanically and conventional spouted beds. *Particuology*, 2019, 42: 176-183.
- [2] Hu D, Zeng X, Wang F, Han Z, Ding F, Yue J, Xu G. Release behavior and generation kinetics of gas product during rice husk pyrolysis in a micro spouted bed reactor. *Fuel*, 2021, 287: 119417.
- [3] Zhao S, Wu F, Ma X, Zhou W. Effect of novel intensification structure on drying of particulate materials in spouted beds. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2022, 114: 263-275.
- [4] Che X, Wu F, Jing W, Ma X. Numerical study of multi-jet structure impact on flue gas desulfurization process in 3D spouted beds. *Chemical Engineering Journal*, 2023, 457: 124737.

基于 Geldart B 类颗粒的空气重介质流化床密度分布预测模型的改进

摘要：空气重介质流化床中气固两相形成的床层密度的时空分布特征对其传热、传质以及混合分离行为发挥着至关重要的作用。针对现有的床层密度关联式存在底部区域密度预测值偏低的问题，本文建立了基于局部气泡兼并与破裂行为的密度空间分布计算模型，并利用实验数据对不同区域模型系数进行了修正，弥补了现有床层密度关联式的不足。新模型的整体平均标准偏差控制在 $\pm 7.69\%$ 以内，与已有文献的数据吻合较好。该研究为气固流化床床层密度的时空分布预测提供了较为准确和可靠的理论基础。

液滴撞击多孔颗粒的动力学行为及其在油水分离中的应用

马丽坤^{1,*}, 白志山^{1,*}

¹华东理工大学, 上海市徐汇区梅陇路 130 号, 200237

*Email: malikun@ecust.edu.cn

摘要正文: 多孔颗粒被广泛应用于工业油水分离过程中, 如多孔纤维球、多孔吸附剂和多孔过滤球等, 油滴撞击多孔颗粒的动力学行为对含油废水的分离性能起到至关重要的影响, 但这些行为机理尚未被揭示。本研究对油滴撞击多孔颗粒的动力学行为进行了实验测量, 引入了Mask R-CNN卷积神经网络来准确、高效且全自动地捕捉液滴形貌演变。结果显示, 撞击动力学行为清晰地分为两个阶段: 阻尼振荡阶段(阶段 I)和渗透吸收阶段(阶段 II)。吸收容量、液滴粘度和液滴尺寸显著影响撞击过程。此外, 发现剪切流可以提高液滴吸收速率, 同时, 发现了不利于油水分离的多孔颗粒临界转速的存在, 此时会出现剪切诱导的液滴破碎现象。最终, 将振荡理论与达西定律结合, 提出了描述液滴形貌演变的半理论关联式, 该关联式具有清晰的物理意义和良好的预测准确性(平均相对误差MRE=6.62%)。

基于液相环境中液滴在多孔颗粒上撞击行为的可视化实验工作, 我们初步揭示了油水分离过程中液滴与多孔颗粒的相互作用行为, 基于推导得到的液滴形貌演变半理论关联式, 从理论层面上为优化工业油水分离性能提供了指导。这项工作对于旨在含油废水处理领域的化学工程界具有吸引力, 特别是那些专注于使用无污染物理方法强化油水分离过程的研究人员。

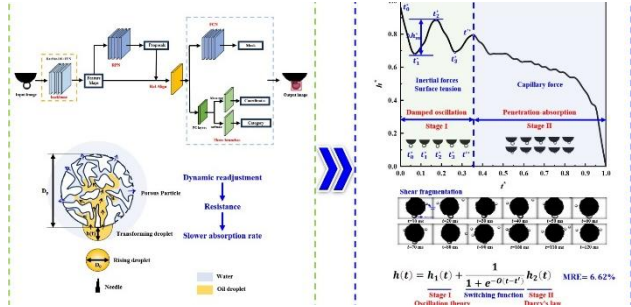


Fig. 1 Dynamic behavior of droplets impacting porous particles in oil-water separation

关键词: 液滴; 多孔颗粒; 过程强化; 动力学行为; 油水分离

参考文献

- [1] L. K. Ma, S. Kashanj, X. Li, S. L. Xu, D. S. Nobes, and M. Ye. Experimental investigation of fluid flow around a porous cube for Reynolds numbers of 400–1400. *Chem. Eng. Sci.* 2023, 269, 118443.
- [2] L. K. Ma, S. Kashanj, Z. S. Bai, Q. Guo, Q. H. Huang, D. S. Nobes, and M. Ye. Effects of permeability on the flow past porous spheres at moderate Reynolds number: A PIV experimental study. *Fuel*. 2025, 381, 133212.

脉动气固流化床细粒煤分选强化机制研究

李妍娇¹, 李德奇¹, 洪坤^{1,*}, 董良^{2,*}

¹淮阴工学院矿盐资源深度利用技术国家地方联合工程研究中心, 江苏淮安, 223000

²中国矿业大学煤炭加工与高效洁净利用教育部重点实验室, 江苏徐州, 221000

*Email: l233465974@163.com

摘要正文: 煤炭是国家能源安全的压舱石和稳定器, 其清洁高效利用是实现“碳达峰、碳中和”目标的重要途径。空气重介质流化床干法分选技术无需水, 可促进煤炭工业的高质量发展。 $+6\text{ mm}$ 粗粒煤已经实现高效的干法分选, 而对于 -6 mm 的细粒煤, 普通流化床并不能对其进行有效分选。将脉动气流的强制振动引入气固流化床, 可以减小气泡尺寸, 增大气固接触效率, 减少床层物料的沟流和短路情况, 提高床层密度的稳定性, 实现细粒煤颗粒的高效分选。本研究揭示了脉动气固流化床内加重质流化特性, 探究流化床的能量耗散机制。阐明振动能量抑制气泡生长的作用机制, 明确振动能量与气流协同作用下调节颗粒离析与混合的机理, 探明脉动流化床强化分选效果、增强床层密度稳定性的作用机制, 优化细粒煤分选操作参数, 为脉动流化床有效分选细粒煤提供理论依据。

关键词: 脉动流化床; 煤炭干法分选; 细粒煤; 气固分布; 密度调控

参考文献

- [1] 赵跃民, 张亚东, 周恩会, 等. 清洁高效干法选煤研究进展与展望[J]. 中国矿业大学学报, 2022, 51(03): 607-616.
- [2] IRELAND E, PITT K, SMITH R. A review of pulsed flow fluidisation; the effects of intermittent gas flow on fluidised gas-solid bed behaviour[J]. Powder Technology, 2016, 292: 108-121.
- [3] ALI S S, ARSAD A, ASIF M. Effect of modified inlet flow strategy on the segregation phenomenon in pulsed fluidized bed of ultrafine particles: A collapse bed study[J]. Chemical Engineering and Processing-Process Intensification, 2021, 159: 108243.
- [4] TANG T, HE Y, WU Y, et al. Pulsed gas regulation on heat and mass transfer behaviors in a wet particle fluidized bed[J]. Sustainable Energy Technologies and Assessments, 2021, 44: 101038.
- [5] MACHADO V G, HIRATA T A M, MENEGALLI F C. Agglomeration of soy protein isolate in a pulsed fluidized bed: Experimental study and process optimization[J]. Powder technology, 2014, 254: 248-255.
- [6] ZHOU C, LIU X, ZHAO Y, et al. Recent progress and potential challenges in coal upgrading via gravity dry separation technologies[J]. Fuel, 2021, 305: 121430.
- [7] GELDART D. Types of gas fluidization[J]. Powder Technology, 1973, 7(5): 285-292.
- [8] ERGUN S, ORNING A A. Fluid flow through randomly packed columns and fluidized beds[J]. Industrial & Engineering Chemistry, 1949, 41(6): 1179-1184.
- [9] WEN C Y, YU Y H. A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity[J]. AIChE Journal, 1966, 12(3): 610-612.
- [10] GRACE J R, HETSRONI G. Handbook of multiphase systems[M]. New York: Hetsroni MG Edition, Hemisphere, 1982.
- [11] LUCAS A, ARNALDOS J, CASAL J, et al. Improved equation for the calculation of minimum fluidization velocity[J]. Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development, 1986, 25(2): 426-429.

墙报摘要

基于机器学习的高密度循环流化床流动特性预测与可解释性分析

邓百炼¹, 孙俭¹, 李之辉¹, 王成秀^{1,**}, 钟汉斌^{2,**}, 蓝兴英¹, 高金森¹

¹重质油国家重点实验室, 中国石油大学(北京), 北京市昌平区府学路18号, 102249

²西安石油大学化学化工学院, 陕西省西安市电子二路东段18号, 710065

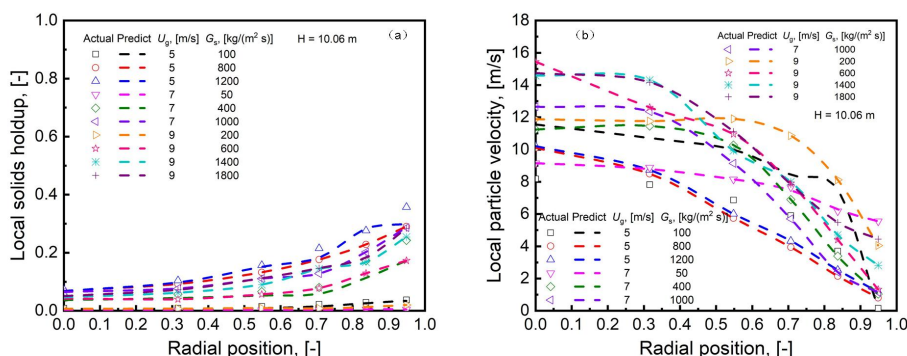
*Email: cwang1277@cup.edu.cn

**Email: hbzhong@xsyu.edu.cn

摘要正文:

为实现双碳目标, 炼化行业亟需减油增化转型, 高密度循环流化床因其气固通量大、返混低等优势成为重油催化裂解制烯烃的核心反应器。针对实验测量在工业装置推广受限的问题, 本研究基于自行搭建的18 m高、80 mm内径冷模实验装置数据, 采用机器学习构建了融合操作条件与聚团特性的流动特性预测模型。通过随机森林算法, 以均方误差(MSE)和决定系数(R^2)验证模型性能, 结果显示该方法能精准预测流场参数。进一步结合特征重要性排序与SHAP解释框架, 量化了操作变量与聚团效应对流化状态的交互影响机制, 揭示了多参数协同调控规律。

Fig.1 (a) 展示高密度提升管10.06 m轴向高度处颗粒浓度径向分布预测结果: 神经网络模型准确捕捉了不同操作参数下的分布规律。当 $G_s = 100 \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$ 时, 各径向位置颗粒浓度均较低; 随 G_s 增加, 边壁区浓度增幅显著高于中心区, 导致径向不均匀性加剧, 且低浓度中心区域范围缩小。模型成功预测了颗粒浓度径向梯度演变及颗粒浓度变化特征。Fig.1 (b) 表明局部颗粒速度预测值与实验值高度吻合, 准确复现了低 G_s 时“环-核”速度结构及高 G_s 时开口向下抛物线型速度分布。模型精度验证显示, 颗粒浓度与速度预测的决定系数 R^2 分别达0.942和0.973, 证实了模型对流动特性的高精度预测能力。

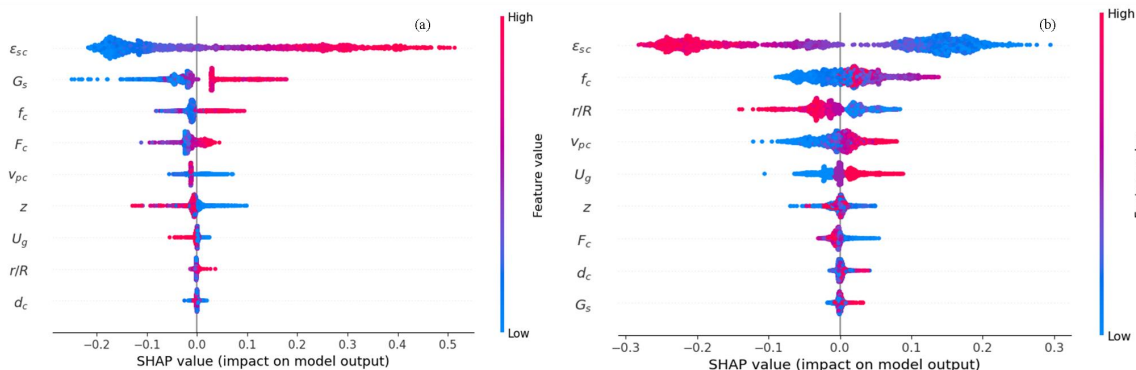


(a) Solids holdup prediction of axial distribution

(b) Particle velocity prediction of axial distribution

Fig. 1 Prediction result distribution by random forest model

Fig.2 (a) 基于随机森林的颗粒浓度 SHAP 分析表明, 聚团浓度、颗粒循环速率、聚团频率及聚团时间分数是主要影响因素, 其数值增大均会提升 SHAP 值及颗粒浓度预测值。当 $\epsilon_s > 0.17$ 、 $G_s > 800 \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$ 、 $f_c > 240 \text{ Hz}$ 时呈现正向效应, 其中颗粒循环速率达1200 $\text{kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$ 时 SHAP 值发生跃升, 反映颗粒量增加导致提升管内气固相互作用增强, 促使聚团数量增多、结构紧实。其余特征在 SHAP 零点附近密集分布, 表明其对预测存在混合效应或降低精度。Fig.2 (b) 显示颗粒速度主要受聚团浓度、频率、径向位置及尺寸影响: 聚团频率与尺寸增大会使提颗粒速度提高, 而聚团浓度与径向位置对颗粒速度的影响则与之相反。其中径向位置很好理解, 因为高密度循环床颗粒速度的径向分布就是中心高边壁低。而聚团尺寸越大则受气体曳力增大导致颗粒速度增加, 聚团浓度的增加致使聚团变得更为紧实, 所受重力也越大, 减小曳力对颗粒的加速作用, 所以颗粒速度也相应的减小。



(a) SHAP summary plot of solids holdup

(b) SHAP summary plot of particle velocity

Fig. 2 SHAP interpretability analysis

机器学习方法能高精度预测流化床流动特性轴径向分布, 揭示高密度循环流化床中流动与聚团的关联性。通过SHAP和特征重要性分析阐明参数影响机制, 验证结果与实验结论一致, 增强模型可信度。研究发现聚团与操作条件呈非线性关系, 凸显发展可解释性机器学习对探究聚团-流动因果机制的重要性。

关键词：高密度循环流化床；流动特性；随机森林；机器学习；可解释性分析

深度学习驱动的流化床颗粒追踪测速PTV

纪德龙¹, 李锐¹, 蒋兆晨^{1*}, Andreas Bueck², 何志霞¹

¹江苏大学, 能源研究院, 江苏省镇江市, 212000

²德国埃尔朗根纽伦堡大学, 颗粒技术所, 96114

*Email: zhaochenjiang@ujs.edu.cn

摘要:

颗粒追踪测速技术 (Particle Tracking Velocimetry, PTV) 是一种基于可视化试验平台的非侵入式光学测试技术, 通过识别并追踪流场中的离散相颗粒, 实现颗粒的分离与颗粒运动轨迹重构。随着深度学习 (Deep Learning, DL) 的引入, PTV在复杂三维流场重构、微米级和亚微米级粒子识别、物理信息神经网络嵌入以及追踪轨迹丢失等方面都取得了进展, 有望突破传统PTV在高颗粒浓度、高速度梯度等复杂工况下的测量瓶颈, 显著提升了测量的准确性和效率。基于计算流体力学耦合离散元 (CFD-DEM) 模拟获得的复杂流场中颗粒动力学特性, 可生成具有多物理场耦合特征的大规模高保真的颗粒图像, 能够为DL-PTV提供多任务联合训练数据集, 同步支持颗粒分离与轨迹追踪算法的优化。本文利用CFD-DEM模拟获得的颗粒位置信息^[1], 构建训练数据集, 选择交叉熵损失函数, 训练包含377个神经元的全连接神经网络 (FCNN), 优化原有的颗粒追踪算法。如图1所示, 针对流化床中随机时刻、随机位置 ($8 \times 8 \text{ cm}^2$), 其中颗粒速度范围是 $0 \sim 2.12 \text{ m/s}$, 局部颗粒体积分数 $0.33 \sim 0.63$; DL-PTV (训练周期30) 预测颗粒速度与CFD-DEM颗粒速度对比具有很好的一致性, 预测准确率 (正确预测数量/总数量) 达到98.81%。针对400个随机时刻、随机位置, DL-PTV的预测准确率达到95.48%, 预测准确度远高于传统的Voronoi和松弛概率算法。

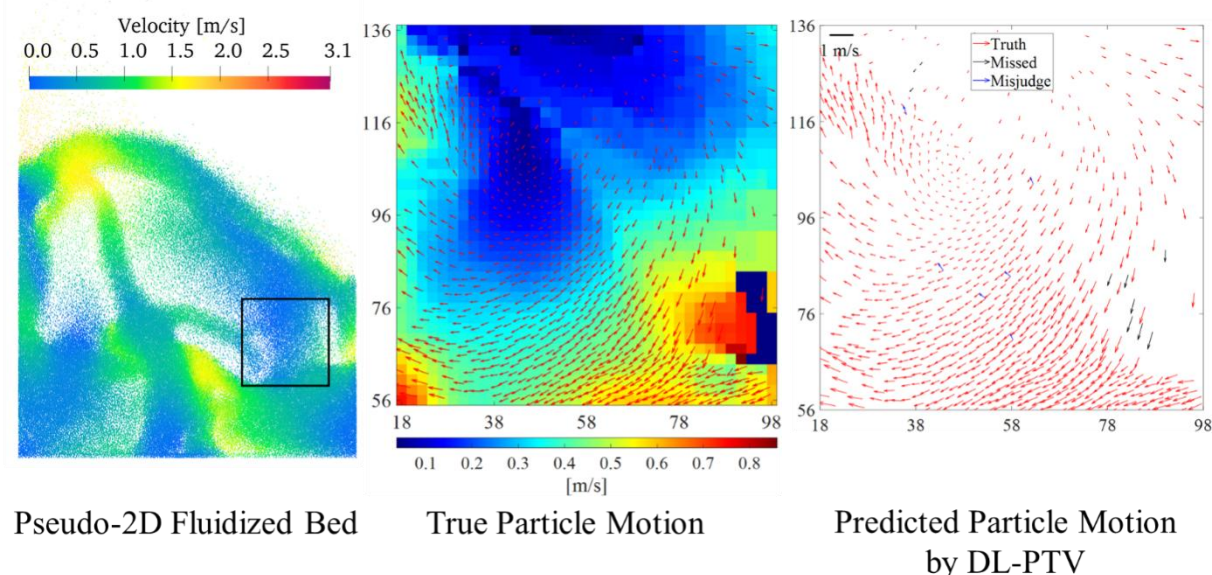


Fig. 1. Deep learning Particle Tracking Velocimetry by CFD-DEM data

关键词: 颗粒追踪测速 (PTV); 全连接神经网络 (FCNN); 流化床; CFD-DEM

参考文献

- [1] Z. C. Jiang, T. Hagemeyer, A. Bück, et al. Color-PTV measurement and CFD-DEM simulation of the dynamics of poly-disperse particle systems in a pseudo-2D fluidized bed[J]. Chemical Engineering Science, 2018, 179: 115-132.

CO₂ 加氢制可持续航空燃料中流态化技术的关键进展

李丽萍¹, 张晨曦^{1, 2, *}

¹ 鄂尔多斯实验室, 内蒙古鄂尔多斯, 017010

² 清华大学化学工程系, 北京, 100084

*Email: cxzhang@mail.tsinghua.edu.cn

摘要正文:

在全球积极践行“双碳”目标的大背景下, 航空业的低碳转型成为重要课题, 而可持续航空燃料 (SAF) 的开发则是实现这一转型的核心路径。本研究聚焦于CO₂加氢一步法制备SAF (CO₂AF) 工艺, 通过多尺度工程方法突破传统技术瓶颈, 成功构建“分子筛限域催化-流化传递强化-系统能效优化”的全链条技术体系。构建了由 ZnCr₂O₄与 ZSM-5组成的双功能催化剂体系, 突破了传统Anderson - Schulz - Flory (ASF) 分布的限制, 显著提高了CO₂转化率与重芳烃选择性, 为SAF的高效合成提供了关键支撑, 从本质上革新了SAF的制备方法。高压流化床反应器在CO₂AF工艺中发挥着重要作用。其优良的传热传质性能, 极大地促进了反应物的混合, 优化了热量管理, 为工艺的规模化发展提供了坚实的技术基础, 有力推动了CO₂AF工艺从理论研究走向工业实践。然而, 高压流化床反应器在实际应用中面临诸多挑战。在高压条件下, 颗粒运动呈现复杂特性, 存在特定的临界压力。当压力超过此临界值时, 流化床会从鼓泡状态转变为均匀状态, 导致颗粒混合效率与传热传质速率大幅下降, 形成“传输速率陷阱”。同时, 颗粒间的频繁碰撞会致使双功能催化剂的ZnCrO_x和H-ZSM-5活性位点分离, 进而降低催化性能。针对上述问题, 团队通过大量实验与理论分析, 揭示了高压下颗粒相态转变的规律, 明确了临界压力与颗粒尺寸的定量关系 ($p_c \propto 1/d_p^2$)。研究发现, 合理调控操作压力可有效抑制颗粒碰撞强度, 维持催化剂活性; 适量添加细颗粒 (不超过25vol%) 能够改善流化床的传热性能。目前, 百吨级中试实验取得了显著成果, CO₂转化率超过65%, 重芳烃选择性大于85 wt%, CO₂循环率高于95%, 连续运行时间超过1000小时, 产品符合ASTM - D7566标准。基于此, 团队正积极推进万吨级工业示范。本研究融合多相流理论、先进表征技术 (高速摄像/PIV/iDPC-STEM) 与过程系统工程, 创立“微界面反应机制-介观反应器设计-宏观系统集成”的流态化研发范式, 为工业级负碳燃料合成提供创新方法论, 有望推动航空业深度脱碳进程。

关键词: 二氧化碳利用; 高压流化床; 气固传递强化; 可持续航空燃料

参考文献

[1] F. Lu, L. P. Li, Y. X. Yu, G. Tian, H. Xiong, J. Miao, F. Wei, C. X. Zhang. Road to Carbon-Neutral Aviation: One-Step Conversion of CO₂ to Sustainable Aviation Fuels. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2025, 64: 3118–3135.

第二分论坛

多相流前沿论坛

邀请报告

基于网格自适应方法的高雷诺数颗粒两相湍流IB-LBM模拟

江茂强^{1,*}, 王亚宁², 柳朝晖²

¹武汉理工大学船海与能源动力工程学院, 武汉, 430063

²华中科技大学能源动力工程学院, 武汉, 430074

*Email: jiangmq@whut.edu.cn

摘要正文: 在深海采矿的颗粒多相流过程中, 颗粒直径较大 ($d_p=1\sim 10\text{ cm}$), 远大于常规颗粒多相流中颗粒的尺寸 ($d_p<1\text{ cm}$), 导致流动呈现高雷诺数颗粒两相湍流特征 $Re_p=O(10^3)\sim O(10^5)$ 。目前, 几乎所有的文献均采用CFD-DEM方法将颗粒看成点源进行研究, 忽略了颗粒的湍流尾涡作用。而颗粒的湍流尾涡作用需要超精细网格才能进行求解, 这对现有的均匀网格方法和低精度数值计算方法构成严重挑战。针对这一问题, 本文首先开发了网格自适应算法耦合浸入边界法和格子玻尔兹曼方法计算颗粒两相流, 进一步耦合基了高阶精度的LBM累积碰撞算子方法, 实现了颗粒两相湍流的高精度数值模拟平台。该平台能够精确模拟大颗粒在高雷诺数条件下的绕流流动和沉降行为, 并进行数值验证。本研究不仅为深海采矿中颗粒沉降的物理机制提供了深入理解, 也为数值模拟技术在高雷诺数流体动力学问题中的应用提供了新的解决方案。

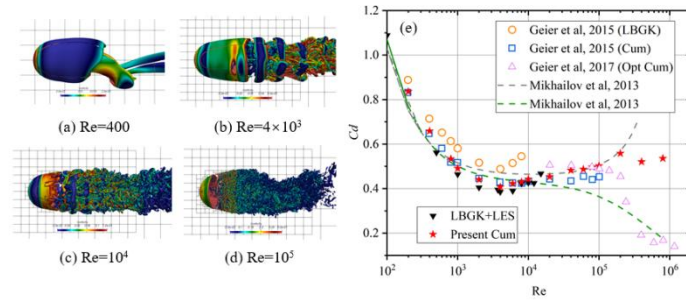


Fig. 1 Flow past a sphere using cumulant LBM-IBM and AMR technique.

关键词: 颗粒湍流; 格子玻尔兹曼; 浸入边界法; 网格自适应; GPU并行计算

参考文献

- [1] Geier M, Pasquali A, Schönherr M. Parametrization of the cumulant lattice Boltzmann method for fourth order accurate diffusion part II: Application to flow around a sphere at drag crisis[J]. Journal of Computational Physics 2017, 348: 889-898.
- [2] Wang Y, Wu Y, Zeng Y, Jiang M, Liu Z. An immersed boundary lattice Boltzmann method on block-structured adaptive grids for the simulation of particle-laden flows on CPUs/GPUs[J]. Computer Physics Communications, 2025, under review.

多孔储层多相流多尺度数值模拟方法研究进展

欧治松^{1,*}, 薛强¹, 万勇¹

¹中国科学院武汉岩土力学研究所, 武汉, 430071

*Email: zsou@mail.whrsm.ac.cn

摘要正文: 围绕地下储能、碳封存、污废填埋等重大需求, 针对地下多孔储层流体运移规律不清、力-热-化-生耦合作用机制不明、传统经验模型预测存在量级误差、工程设计缺乏科学有效依据等关键科学问题, 系统开展了多孔储层多相流多尺度模拟方法研究。在孔隙尺度多相流模拟方面, 为解决多孔储层复杂边界表示难题, 提出借助固体惩罚函数隐式考虑固体存在效应的虚拟边界法, 实现多孔储层孔隙流动与传输过程的高效流固统一描述。围绕孔隙多相流直接数值模拟仿真需要, 发展多孔介质孔隙多相流单场描述方法, 与流体体积模型结合, 实现孔隙多相流高效界面解析模拟。面向工程问题需要, 提出基于非均质结构存在效应的尺度升级表示方法, 实现工程问题模拟10万倍计算加速。相关方法被用于垃圾填埋场防渗系统安全评估、致密砂岩矿藏开采工艺设计等。

关键词: 多孔介质; 多相流模拟; 界面力学; 多尺度仿真; 地下储层利用

参考文献

- [1] Ou, Z., Xue, Q., Wan, Y., Wei, H., Chi, C., & Thévenin, D. (2024). A parameter-free and monolithic approach for multiscale simulations of flow, transport, and chemical reactions in porous media. *Journal of Computational Physics*, 514, 113203.
- [2] Ou, Z., Xue, Q., Wan, Y., Wei, H., Liu, L., Gharibi, F., & Thévenin, D. (2024). A one-field fluid/meso-structure coupling approach for multiscale transport in heterogeneous porous media. *Physics of Fluids*, 36(11), 113112.
- [3] Ou, Z., Wan, Y., Xue, Q., Chi, C., Gharibi, F., & Thevenin, D. (2024). A one-domain pore-resolved approach for multiphase flows in porous media. *Physics of Fluids*, 36(6).

太阳能驱动水蒸气氧载体氧化过程数值模拟研究

张子豪¹, 杨展玉¹, 魏利平^{1, 2, 3, *}

¹西北大学化工学院, 陕西省西安市太白北路 229 号, 710069

²陕西省碳中和技术重点实验室, 陕西省西安市太白北路 229 号, 710069

³陕北能源先进化工利用技术教育部工程研究中心, 陕西省西安市太白北路 229 号, 710069

*Email: weiliping@nwu.edu.cn

太阳能驱动的化学链反应可有效利用太阳能提高产品热值并减少碳排放, 采用传统固定床及流化床反应器很难兼顾高效热质传递和高稳定反应, 导致热转化效率低及反应不稳定。基于过程解耦强化思路, 将太阳能向氧载体传热过程与化学链反应过程解耦在内循环流化床中的两个相对独立空间, 布置与其相匹配的表观气速条件, 分别形成有利于强化传热及反应的气固流动结构, 进而通过氧载体在两空间之间有序循环调控热质交换, 为促进热-质-反应的时空匹配提供新途径。本文对仿鱿鱼鳍内循环流化床中还原后的氧载体进行水蒸气再氧化过程进行了数值模拟研究, 分析了进气隔板和顶部侧倾隔板对流体动力学、传热特性和反应特性的影响。研究表明: 低速区入口隔板的设计大幅度减轻了流动死区的不利影响, 反应器核心反应器床层温度增加了约 40K。其中带进气隔板的反应器颗粒循环速率增加了 18%, 带有倾角的进气隔板的反应器颗粒循环速率降低了 25%; 带进气隔板的反应器气体旁通率降低了 22.5%, 低速区最高气固滑移速度增加了 23.9%, 速度场和温度场之间的协同角降低了 3°, 反应器出口 H₂ 浓度增加了 6%, 太阳能热转换效率增加了 68.6%; 带有倾角的进气隔板和和顶部侧倾隔板的反应器分别降低了气体旁通率 86.4% 和 86.5%, 低速区最高气固滑移速度分别增加了 1.4 倍和 1.6 倍。速度场和温度场之间的协同角分别降低了 7° 和 6°, 反应器出口 H₂ 浓度分别增加了 24.3% 和 24.7%, 太阳能热转换效率分别增加了 35.2% 和 55.2%。本研究对完善载氧颗粒热质传递与反应协同调控理论, 为反应器中热-质-反应匹配提供重要理论支撑。

关键词: 太阳能, 氧载体, 数值模拟, 化学链重整, 内循环流化床

船舶蒸汽动力系统汽/水两相流界面光学探针测量 技术研究进展

肖颀^{1, 2*}, 柴盈华^{1, 2}, 王瑞奇^{1, 2}, 柯汉兵^{1, 2}, 黄崇海^{1, 2}

¹ 船舶热能动力全国重点实验室, 湖北省武汉市江夏区杨桥湖大道 19 号, 430205

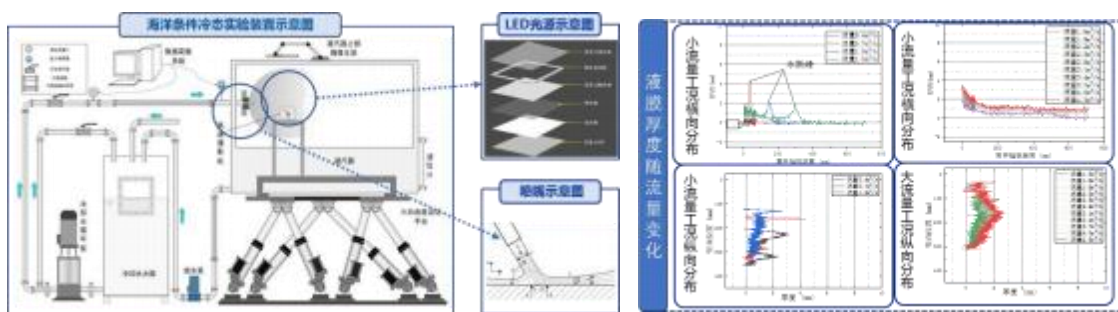
² 武汉第二船舶设计研究所, 湖北省武汉市江夏区杨桥湖大道 19 号, 430205

*Email: zhiyan7@sina.com

摘要正文: 动力系统是船舶的重要组成部分, 为船舶提供航行所需动力及全船电力等。船舶动力系统, 以蒸汽动力系统为例, 存在普遍的汽水两相流动, 如冷凝器、热力除氧装置、锅炉、蒸汽发生器等, 对汽水两相流中汽液界面识别至关重要。以直接接触冷凝器为例, 蒸汽冷凝过程中, 其冷凝速率与汽液界面面积直接相关, 同时, 其液位也需要维持在一定水位, 水位过高淹没喷嘴, 会诱发倒灌, 水位过低影响供水安全, 而相较于陆地平台, 船舶动力系统受摇摆等海洋环境影响, 汽/水界面演化更为复杂, 故识别汽/水两相流动界面, 掌握其动态演化规律至关重要。本文分别对船舶直接接触冷凝器汽/水膜界面、蒸汽发生器水位等开展光学探针测量技术研究。

针对直接接触冷凝器水膜厚度薄、边界动态变化等特点, 本文采用高速摄像结合LED光学探针方法(图1.a), 获得液膜投影面积及液膜厚度, 通过换算得到液膜面积。随后本文对喷嘴、挡板、冷却水温度等对液膜面积的影响进行分析, 构建模拟海洋条件的六自由度摇摆平台, 获得了摇摆参数对液膜面积的影响规律。研究结果表明, 液膜面积随冷却水流量、喷嘴角度以及喷嘴直径的增加先增大后减少, 整体换热系数随流量及喷嘴角度的增加而增大, 小角度倾斜可增加水膜面积, 横摇条件下液膜面积先增加后减小。

针对蒸汽发生器、冷凝器等液位测量, 本文探索了光纤探针结合内窥镜方法, 以内窥镜为基础, 以光学探针为提升的液位测量体系, 内窥镜提供整体液相可视化分布, 光学探针进一步增强汽液界面的识别能力, 弥补传统内窥镜方法界面在汽液相关过程中清晰度不足这一局限。测量结果表面在静态以及倾斜状态下, 蒸汽发生器中心区域局部气含率高于近壁区, 在摇摆角度较小时, 局部气含率略有上升, 摇摆周期较大时, 摇摆对蒸汽发生器内汽相分布及液位影响较小。



(a) 试验系统示意图

(b) 液膜厚度分布

图1. 海洋条件直接接触冷凝器光学探针汽/水膜界面测量

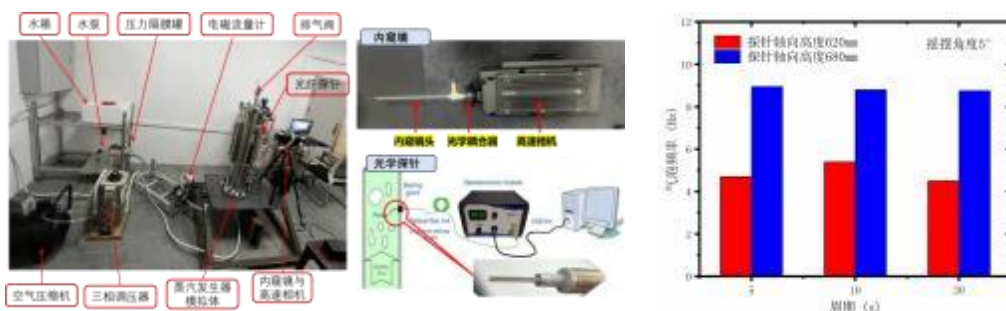


图2. 内窥镜结合光学探针测量蒸汽发生器液位及汽含率

关键词: 船舶动力; 汽/水界面; 摇摆; 水膜; 光学探针

口头报告

Molecule Single-file Diffusion Behavior inside Ultralong Individual Carbon Nanotube

Jingwei Wu¹, Fei Wei^{1,*}

¹Department of Chemical Engineering, Tsinghua University, No.30 Shuangqing Road, Beijing, 100084

* wf-dce@tsinghua.edu.cn

The hydrodynamic behaviors in nanoscale channel have attracted extensive interests in the past decades. Herein, we establish a mass spectrometer system to investigate the molecule transport in single ultra-long carbon nanotube. Heavy water (D_2O) was step inputted at the entrance of carbon nanotube and the residence time distribution (RTD) was measured by the detector of mass spectrometer. The obtained ion current-time curve was fitted and we find water and gas molecule confined in the nanotube both exhibit ideal plug flow and exit the carbon nanotube at the same time. Based on the existing models, the surprising result suggests both water and gas molecule exhibit the single-file system and without any back mix. This work not only provides a new method for studying fluid diffusion in the nano-sized domain, but also advances the way to the development of nanofluidics.

Keywords: Single-file diffusion, Carbon nanotube, Mass spectrometer, Nanofluidics

References

[1] K. Nelissen, V. R. Misko, F. M. Peeters, Single-file diffusion of interacting particles in a one-dimensional channel, Europhysics Letters (EPL) 2007, 80.

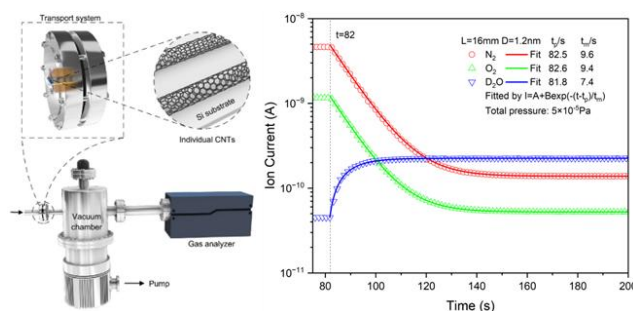


Fig. 1 Molecule diffusion through individual carbon nanotube. Ion current vs time curve was fitted by the equation $I = A + B \exp(-(t - t_p)/t_m)$, where t_p and t_m represent the time that fluid molecules pass the carbon nanotube and vacuum chamber respectively.

基于先进颗粒群平衡建模技术的碳烟动力学机制研究

何为¹, Yang Wenming², Gehan Amaratunga³, 吴少华^{1,*},

¹大连理工大学, 能源与动力学院, 大连, 辽宁, 中国, 116024

²National University of Singapore, Department of Mechanical Engineering, Singapore, 138600

³University of Cambridge, Department of Engineering, Cambridge, UK, CB2 1PZ

*Email: wushaohua@dlut.edu.cn

摘要正文:

碳烟是碳氢燃料在未完全燃烧条件下的产物, 其颗粒直径往往在几纳米至几微米之间, 可数十年悬浮于大气环境中, 对人体健康和大气环境造成严重的危害[1]。碳烟颗粒的形成过程极其复杂, 包含成核、碰撞、凝并、增长、氧化、破碎等过程, 并与周边气相组分发生复杂的化学反应。这对碳烟的数值仿真带来了极大的挑战。从而导致多年来关于能动设备(包括内燃机、锅炉、航空发动机等)内碳烟颗粒的模拟局限于简单的经验模型或者半经验模型, 忽略其复杂的颗粒动力学过程。

颗粒群平衡, 作为一种新兴的多相流建模技术, 可有效应用于碳烟颗粒的动力学仿真。颗粒群平衡方程在数学上表现为一系列强非线性偏微分方程, 可精确描述颗粒群尺寸分布函数在时间和空间的演化过程, 具有极宽的应用场景, 包括喷雾、纳米颗粒合成、晶体结晶、气泡流动、碳烟和气溶胶生成等[2,3]。然而颗粒群平衡建模技术面临着求解难度高、计算量大等问题, 阻碍其在工业界的广泛应用。矩方法通过将颗粒群平衡方程转化为少量低阶矩方程可以大幅度降低计算成本, 但矩方法本身存在大量的封闭性问题极大限制了其应用场景。本次报告将介绍一系列新型的颗粒群平衡方程数值求解算法: 基于投影技术的矩方法[3-8]。该系列算法通过在颗粒类型空间内引入一组半固定半移动加权粒子来追踪原始颗粒群的演化规律并完成对颗粒矩方程的封闭求解。这一系列算法, 包括矩量投影法, 双变量矩量投影法和三变量矩量投影法, 分别实现了针对一维类型空间和高维类型空间颗粒群平衡方程的数值求解, 而最新提出的混合分组矩量投影算法则有效结合了分组法和矩方法的技术, 实现了对颗粒尺寸分布函数的直接重构。这一系列算法保留了原始矩方法简单、高效、易于耦合CFD等优点, 同时有效解决了传统矩方法无法求解的颗粒负增长(氧化、破碎)等问题。将该算法耦合至PREMIX, OPPDIF和CHEMKIN中, 实现了在层流预混、非预混、对冲、扩散等不同燃烧条件下碳烟颗粒动力学过程的精准模拟, 探究了详细的碳烟颗粒生成及氧化机制。

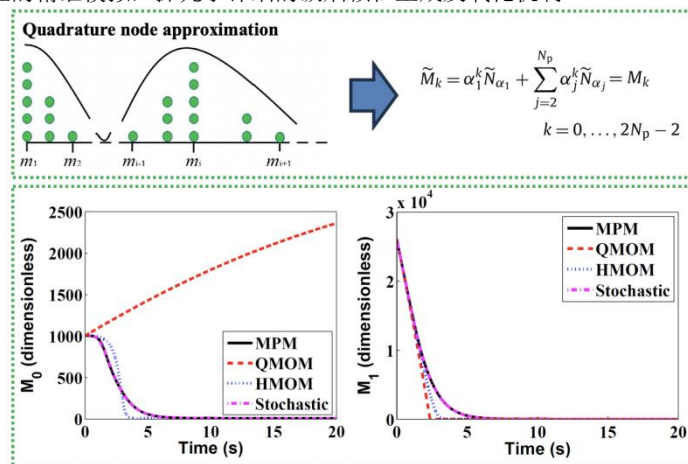


Fig. 1 Schematic of the projection-based moment method and its ability against the conventional methods of moments

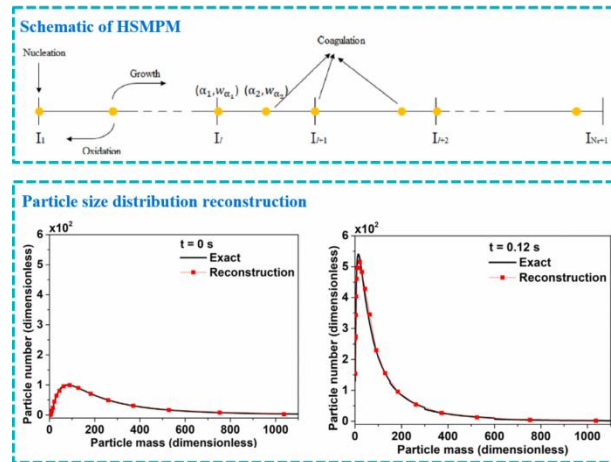


Fig. 2 Schematic of hybrid sectional moment projection method and its ability for reconstructing original particle size distribution

关键词： 碳烟；颗粒群平衡；矩方法；颗粒尺寸分布

参考文献

- [1] H. Bockhorn. Soot formation in combustion. Springer-Verlag, 2013.
- [2] D. Ramkrishna. Population balances: theory and applications to particulate systems in engineering. Academic Press: New York, 2000.
- [3] S. Wu, E. Yapp, J. Akroyd, S. Mosbach, R. Xu, W. Yang, M. Kraft. A moment projection method for population balance dynamics with a shrinkage term. J Comput Phys, 2017;330:960–80.
- [4] S. Wu, S. Yang, K. Tay, W. Yang, M. Jia. A hybrid sectional moment projection method for discrete population balance dynamics involving inception, growth, coagulation and fragmentation. Chem. Eng. Sci. 249 (2022) 117333.
- [5] Z. Zhang, X. Han, M. Wang, Z. Wu, X. Sun, S. Wu. A hybrid sectional moment projection method for modeling soot particle dynamics in laminar premixed flames. Fuel 331 (2023) 125731.
- [6] S Wu, EKY Yapp, J Akroyd, S Mosbach, R Xu, W Yang, M Kraft. Extension of moment projection method to the fragmentation process. J Comput Phys, 2017;335:516–534.
- [7] S Wu, C Lindberg, J Akroyd, W Yang, M Kraft. Bivariate extension of the moment projection method for the particle population balance dynamics. Comput. Chem. Eng. 2019;124:206–227.
- [8] T Yan, S Wu, D Zhou. A tri-variate moment projection method for multi-dimensional particle population balance dynamics. J. Aerosol Sci. 2024;179:106378.

Diffuse-interface lattice Boltzmann method for gas-liquid-solid multiphase flows

Zhnehua Chai¹, Chengjie Zhan², Xi Liu

¹ School of Mathematics and Statistics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, 430074

* Email: hustczh@hust.edu.cn

In this work, we will first present a thermodynamically consistent and conservative diffuse-interface model for gas-liquid-solid three-phase flows where a novel free energy is proposed for the gas-liquid-solid three-phase flows. Furthermore, a smooth indicator function of the solid phase is also introduced in the consistent Navier-Stokes equations to preserve the velocity boundary condition on the solid surface. Based on the developed diffuse-interface model, the fluid interface dynamics, the fluid-structure interaction, and the wetting property of the solid surface can be described simply and efficiently. Additionally, the total energy is also shown to be dissipative for the two-phase flows in the stationary geometries. To test the present diffuse-interface model, we then develop a consistent and conservative lattice Boltzmann method and conduct some simulations. The numerical results also confirm the energy dissipation and good capability of the proposed diffuse-interface model in the study of two-phase flows in complex geometries and gas-liquid-particle flows.

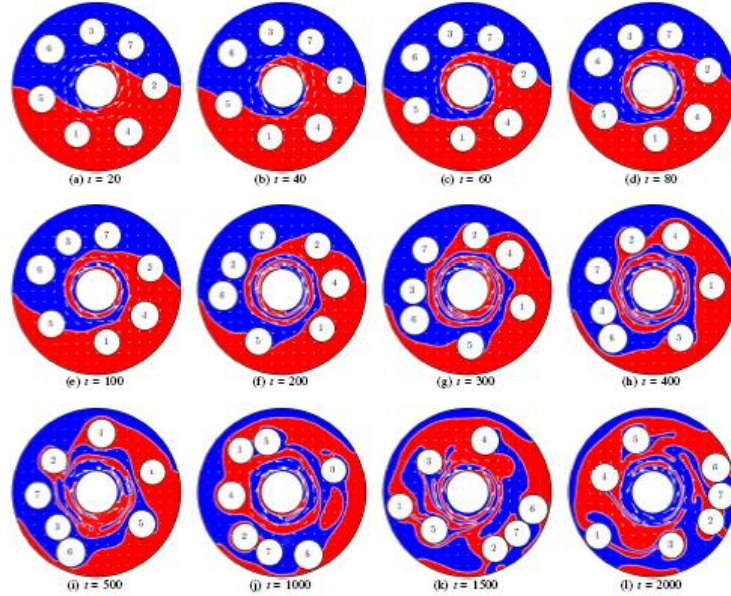


Fig. 1: The mixing of the fluids and particles in an annulus with inner rotating cylinder

Keywords: Diffuse-interface model, energy dissipation, lattice Boltzmann method, gas-liquid-particle flows.

References

- [1] C. Zhan, X. Liu, Z. Chai, B. Shi, A thermodynamically consistent and conservative diffuse-interface model for gas-liquid-solid flows, 2025, <https://arxiv.org/abs/2311.05097>.

低雷诺数流场中静止螺旋微型机器人的动力学行为研究

徐丹^{1,*}, 胡程志², 刘志强¹

¹中南大学能源科学与工程学院, 湖南长沙, 410083

²南方科技大学机械与能源工程系, 广东深圳, 518055

*Email: dan.xu@csu.edu.cn

摘要: 螺旋微型机器人因其能够在多种生物流体环境中执行复杂机动操作, 满足特定需求, 而被广泛视为生物医学应用的重要候选对象。深入理解其在流体环境中的动力学行为, 对于优化设计与控制螺旋微游动体, 以提升其性能至关重要。本研究采用直接数值模拟 (DNS) 方法, 基于高阶浸没边界-格子Boltzmann方法 (IB-LBM), 来研究低雷诺数流场中静止螺旋微游动体的流体动力学特性。在所提出的模型中, 提出并验证了一种用于螺旋微结构拉格朗日点定位的方法。此外, 为了实现该IB-LBM, 本文提出了一种计算体积分数的方法, 以区分螺旋主体与流体区域。研究所得的阻力预测结果与实验测量数据吻合良好。该方法被应用于研究分析螺旋微游动体的阻力和力矩如何随半径、长度和螺距的变化而变化。结果表明, 增大螺旋半径和螺距可有效降低螺旋微游动体所受阻力, 而增大螺旋长度则会显著增加阻力, 尤其是对于较大半径的螺旋微游动体而言。此外, 螺旋微游动体所受力矩对几何参数的变化极为敏感。研究中发现了一个有趣的现象: 当长度与螺距的比值增加时, 力矩呈现明显的波动变化趋势。这些研究结果有助于螺旋微游动体的优化设计。本研究所采用的DNS方法为深入探究螺旋微游动体与周围流体的流体动力学相互作用提供了一种新颖且有效的手段, 并对其设计提供了数据参考。

关键词: 螺旋形颗粒, 流体动力推进, 浸没边界方法, 格子Boltzmann方法

Solid Particles Suspension in Laminar Elliptical Stirred Tank Reactors

Xin Zhang¹, Yuan Yao², Anqi Li³, Zuohua Liu^{4,*}

School of Chemistry and Chemical Engineering, Chongqing University, Chongqing 401331, China

*Corresponding author: 14780624358@163.com and liuzuohua@cqu.edu.cn

To address the challenge of particle aggregation in the particle and viscous fluid mixing process, inspired by the dynamic behavior of biological populations, we propose an innovative design for an ellipsoidal mixing reactor by adjusting its elongation ratio to establish an asymmetric flow field. The periodic vortex reorganization induced by the variable-axis motion enhances the radial motion of fluid particles, thereby disrupting the repulsion region and attraction zones within the reactor, which improves fluid mixing behavior. By tracking particle trajectory dynamics and concentration field evolution, we establish a mixing efficiency evaluation model based on Shannon entropy (S) and propose an empirical discriminant for particle cluster elimination. This study provides a novel biorobotical-inspired approach and mixing strategy for addressing the difficult problem of solid-liquid mixing in high-viscosity systems.^[1,2]

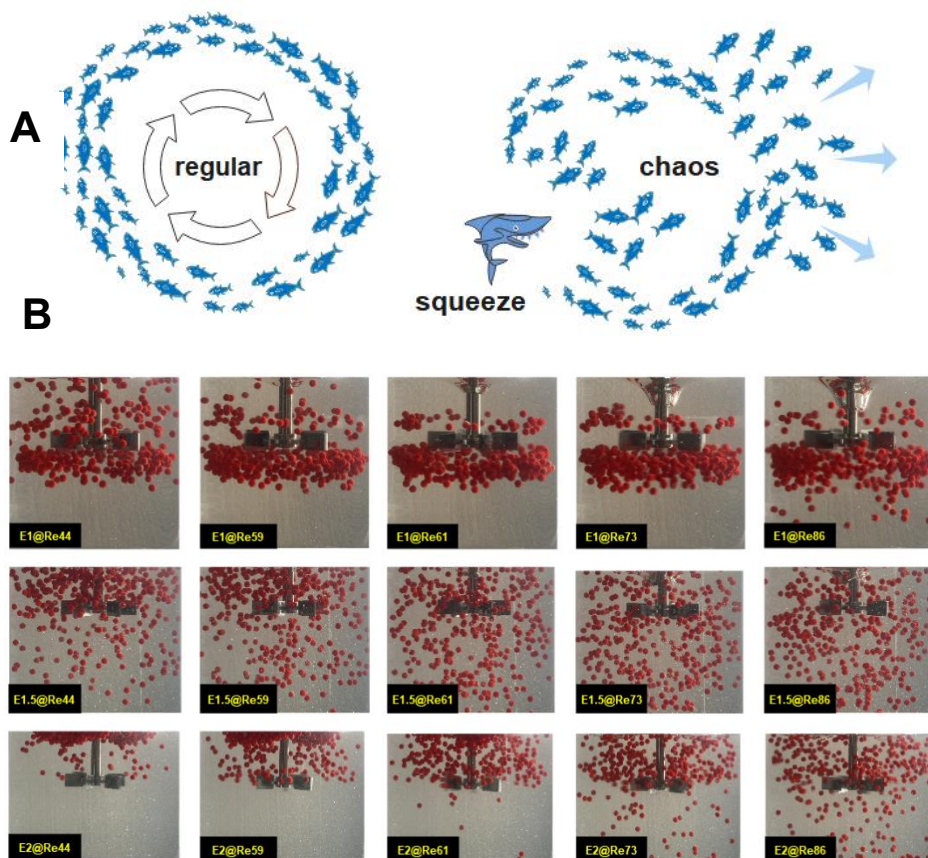


Figure 1: Environmental variables trigger the transition from order to chaos.:
(A) chaotic shoal of fish.(B)Elliptical mixing tanks eliminate granular clustering

Keywords: Stirred tank reactor, High-viscosity fluids, Solid particles suspension, Chaotic mixing, CFD.

References

- [2] Li A. Q., Yao Y., Zhang X., Wan Y., Li P., Wang Y. D., Tao C. Y., Liu Z. H., 2024. Using CFD and machine learning to explore chaotic mixing in laminar diameter-transformed stirred tanks. *Chem. Eng. J.* 499: 156201.
- [3] Li A. Q., Yao Y., Tang X. Y., Liu P. Q., Zhang Q., Li Q., Li P., Zhang F., Wang Y. D., Tao C. Y., Liu Z. H., 2024. Experimental and computational investigation of chaotic advection mixing in laminar rectangular stirred tanks. *Chem. Eng. J.* 485: 149956.

含颗粒的多相RM不稳定性指状结构的非线性段理论建模

刘恋¹, 孟宝清^{2,3*}, 田保林^{1,*}

¹北京航空航天大学航空科学与工程学院, 北京, 100191

²中国科学院力学研究所高温气体动力学国家重点实验室, 北京, 100190

³中国科学院大学工程科学学院, 北京, 101408

*Email: mengbaoqing92@foxmail.com, tianbaolin@buaa.edu.cn

摘要正文:

Richtmyer-Meshkov 不稳定性 (RMI) 因其在各种高能物理过程、工程系统中的关键作用而受到广泛关注。它对于理解惯性约束聚变、超燃冲压发动机超音速燃烧, 以及科学研究如超新星爆炸等方面至关重要。国内外学者已经对多相 RMI 体系进行了一些研究, 但是主流的理论仍然仅仅集中在线性段研究^[1-3], 对非线性段 RMI 发展的定量研究仍然缺失。尚未建立一个定量理论模型来解决多相 RMI 的非线性阶段发展演化的问题, 尤其表现在由强相间耦合控制下的 RMI 非线性振幅演化扰动增长、指状结构发展的定量表征和理论建模。因此, 本研究中我们针对此问题开展了研究。

在本研究中, 我们从含颗粒多相流的控制方程出发, 通过引入无旋、无粘、不可压的流体假设, 以及大 St 数下颗粒响应流场流动比较慢的近似条件, 建立含颗粒的多相流 RM 不稳定性发展的势流理论。随后对势流理论方程求解, 通过引入速度势函数, 引入 RM 不稳定性发展的准稳态的简化条件, 并进行摄动分析, 得到解方程。在解方程求解中, 根据尖钉气泡指状结构的物理规律和物理现象进行解的简化, 最终获得含颗粒多相的 RM 不稳定性中尖钉气泡等指状结构发展的理论模型。

同时, 我们通过理论推导建立了波后含颗粒负载的流场中界面速度发展的标度律, 通过数值模拟标定自由参数, 从而构建波后含颗粒流体界面的背景速度模型。基于背景速度和势流理论控制方程, 构建尖钉和气泡指状结构发展的理论模型以及混合区宽度非线性增长的理论模型。我们通过一系列数值模拟, 验证了我们提出的 RM 不稳定性非线性段演化的混合区宽度的理论模型、指状结构理论模型。

我们对多相理论模型进行分析, 总结了 RM 不稳定性发展中的无量纲参数, 并提出标度律。针对多相理论模型和单相理论模型的结果开展分析和对比研究, 获得颗粒流体耦合效应对 RM 不稳定性发展的影响规律。开展一系列算例模拟分析, 结合理论结论以及数值结果分析不同颗粒参数 (体积分数)、不同两相流体介质, 不同初始扰动幅值, 对激波冲击含颗粒界面失稳的机理和规律。

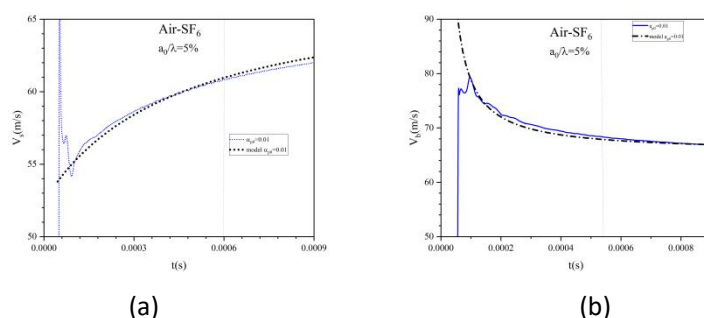


Fig. 1 The velocity of spikes and bubbles with theoretical model

关键词: RM不稳定性; 颗粒多相流;

参考文献

- [1] Ukai S, Balakrishnan K, Menon S. On Richtmyer–Meshkov instability in dilute gas-particle mixtures[J]. *Physics of Fluids*, 2010, 22(10): 104103.
- [2] Meng B, Zeng J, Tian B, et al. Modeling and simulation of a single-mode multiphase Richtmyer–Meshkov instability with a large Stokes Number[J]. *AIP Advances*, 2019, 9(12): 125311.
- [3] Meng B (孟宝清), Zeng J (曾军胜), Tian B (田保林), et al. Modeling and verification of the Richtmyer–Meshkov instability linear growth rate of the dense gas-particle flow[J]. *Physics of Fluids*, 2019, 31(7): 074102.

基于移动粒子方法的立管内气液两相段塞流模拟研究

李国兴¹, 阳熙松¹, 党会学¹, 郑学波¹, 常英杰^{1,*}

¹ 长安大学, 陕西省西安市南二环中段, 710064

*Email: yj.chang@chd.edu.cn

摘要正文: 立管是海上油气输送的关键部件, 通过连接海底井口和海上平台完成油气资源的输送。立管中的气液两相流是油气输送工程中的基本现象, 其复杂性源自界面动力学、相分布及湍流效应, 这些因素对压降、流型转变及输送效率有显著影响^[1]。基于有限体积法 (FVM) 和有限元法 (FEM) 的计算流体动力学 (CFD) 方法广泛应用于段塞流的模拟, 然而这些方法通常依赖于基于网格的计算, 导致在捕捉界面变形、液滴破碎和聚结等方面存在一定困难^[2]。相比之下, 基于粒子的方法, 如光滑粒子流体动力学 (SPH) 和移动粒子半隐式 (MPS) 方法, 提供了拉格朗日框架, 能够自然处理自由表面流和复杂界面动力学^[3]。Douillet-Grellier等人^[4]提出了一种具有入口和出口边界条件的二维 (2D) SPH多相流研究方法, 旨在获得高密度和粘度比情况下更为真实的流动特性。Xiao和Jin通过基于粒子的方法开发了一种混合二维模型, 用于模拟管道中的移动液塞^[5]。Rezavand和Hu^[6]采用基于黎曼求解器的多相SPH方法, 进行了三维 (3D) 拉格朗日数值模拟, 获得了水平管道中五种流态的颗粒流特性。这些基于粒子的方法为全面理解气液两相流现象提供了更为丰富的研究手段。在高气液流速下, 立管内往往会出现气相与液相交替的段塞流, 段塞流所引起的界面大变形对传统基于网格的数值方法提出了巨大的挑战。本文采用移动粒子半隐式 (MPS) 方法, 将流体离散为单个粒子来模拟气液两相流, 这些粒子通过定义模型 (例如压力和粘性力) 相互作用, 以求解流体运动的控制方程, 进而捕捉动态气液界面的变化, 探究了立管中气液两相段塞流的形成、发展和演变过程。

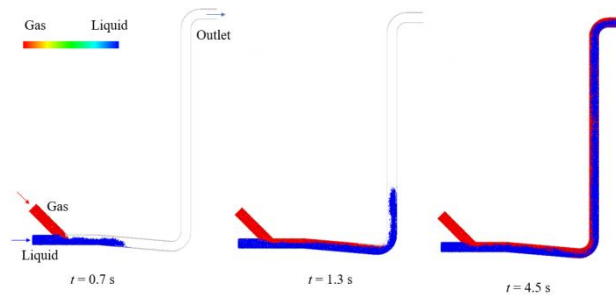


Fig. 1 Slug movement from 0.7 s to 4.5 s when the $v_{sg} = 0.25$ m/s, $v_{sl} = 0.4$ m/s.

关键词: 立管; 界面; 移动粒子; 两相; 段塞流

参考文献

- [1] Kim H. G., and Kim S. M., 2023, "Slug flow characteristics of air-liquid two-phase flow in horizontal pipes over a wide range of liquid viscosities", *Int J Heat Mass Transfer*, Vol. 208.
- [2] Shadloo M. S., Oger G., and Le Touzé D., 2016, "Smoothed particle hydrodynamics method for fluid flows, towards industrial applications: Motivations, current state, and challenges", *Comput Fluids*, Vol. 136, pp. 11-34.
- [3] Koshizuka S., and Oka Y., 1996, "Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid", *Nucl Sci Eng*, Vol. 123(3), pp. 421-434.
- [4] Douillet-Grellier T., De Vuyst F., Calandra H., and Ricoux P., 2018, "Simulations of intermittent two-phase flows in pipes using smoothed particle hydrodynamics", *Comput Fluids*, Vol. 177, pp. 101-122.
- [5] Xiao H., and Jin Y. C., 2022, "Development of explicit moving particle simulation method with applications", *Comput Fluids*, Vol. 235.
- [6] Rezavand M., and Hu X., 2024, "Numerical simulation of two-phase slug flows in horizontal pipelines: A 3-D smoothed particle hydrodynamics application", *Eur J Mech B Fluids*, Vol. 104, pp. 56-67.

冲击作用下含腔颗粒群的变形过程及高温区域形成模式研究

李帅¹, 孟宝清^{2,*}, 田保林^{3,*}

¹ 中国工程物理研究院研究生院, 北京 100088;

² 中国科学院力学研究所高温气体动力学国家重点实验室, 北京 100190;

³ 北京航空航天大学航空科学与工程学院, 北京 100191;

*通讯作者邮箱: mengbaoqing92@foxmail.com, tianbaolin@buaa.edu.cn;

摘要正文:

冲击作用下含腔颗粒群的热点形成及点火现象引起了研究者的广泛关注。然而, 在介观尺度下的研究较少, 大多数研究的加载方式集中在跌落试验和落锤试验上。因此, 迫切需要开展针对冲击作用下介尺度炸药颗粒群的塌缩变形、温升过程及耗散传热机制等方面的研究。本研究建立了适用于高速冲击下的炸药变形和温升问题的数学物理模型, 用于解析颗粒和流体的动力学和热力学过程。建立基于离散元方法的颗粒弹塑性模型系统地考虑了炸药颗粒之间的弹塑性碰撞过程和剪切历史效应, 可以精确模拟颗粒的运动过程和碰撞行为。颗粒的动量方程考虑了颗粒与流体之间的双向耦合并引入曳力模型, 能量方程则考虑了滑动摩擦, 滚动摩擦以及塑性碰撞等耗散项, 以及颗粒-颗粒、与颗粒-流体之间的传热效应。研究讨论了跌落和激波冲击下含腔颗粒群的变形塌缩, 温升过程以及耗散传热机理。研究表明, 冲击作用下的颗粒群的温升过程是一种时空关联现象, 伴随着空腔的塌缩, 颗粒群的变形, 以及局部高温区的形成。其中, 塑性耗散是跌落过程中颗粒群主要的温升来源, 两相传热则是激波冲击过程中颗粒群主要的温升来源。另外, 研究讨论了跌落速度, 炸药颗粒尺寸, 空腔尺寸, 空腔形状对跌落过程的影响, 讨论了激波强度对激波冲击颗粒群过程的影响。我们发现在跌落过程中, 炸药的温度演化可以分为 3 个阶段: 梯形高温区形成, 空腔坍塌以及颗粒床散化, 并最终在空腔附近和近壁面形成关键高温区; 对于圆形空腔, 空腔坍塌时的两股对撞的射流的形成是一种新的热点机制。在激波冲击过程中, 整个温升过程可分为 2 个阶段: 加速温升阶段和稳定温升阶段。初期, 塑性功的贡献不可忽略, 而波后高温气流对炸药颗粒群的持续传热是诱发空腔附近关键高温区形成的主要机理。

关键词: HMX炸药, 离散元方法, 弹塑性模型, 耗散机理, 两相传热

参考文献

- [1] M. Akiki, T.P. Gallagher, S. Menon, Mechanistic Approach for Simulating Hot-Spot Formations and Detonation in Polymer-Bonded Explosives, *AIAA Journal*, 55 (2017) 585-598.
- [2] V. Brizmer, Y. Kligerman, I. Etsion, The effect of contact conditions and material properties on the elasticity terminus of a spherical contact, *International Journal of Solids and Structures*, 43 (2006) 5736-5749.
- [3] K.T. Chua, R.H.C. Wong, J.J. Wu, Coefficient of restitution and rotational motions of rock-fall impacts, *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 39 (2002).
- [4] K.A. Gonthier, Multiscale Shock Heating Analysis of a Granular Explosive, *Journal of Applied Mechanics*, 72 (2005).
- [5] S. Kim, Y. Wei, Y. Horie, M. Zhou, Prediction of shock initiation thresholds and ignition probability of polymer-bonded explosives using mesoscale simulations, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 114 (2018) 97-116.

基于双变量矩投影法的碳烟颗粒破碎机理研究

武迎澳¹, Yang Wenming², 李晶³, 许鹏宏⁴, 吴少华^{1,*},

¹大连理工大学, 能源与动力学院, 大连, 辽宁, 中国, 116024

²National University of Singapore, Department of Mechanical Engineering, Singapore, 138600

³School of Mechanical and Power Engineering, Nanjing Tech University, Nanjing, China, 211816

⁴School of Vehicle and Energy, Yanshan University, Qinhuangdao, China, 066004

*Email: wushaohua@dlut.edu.cn

摘要正文:

碳烟的破碎过程是燃烧研究中的一个重要但相对被忽视的环节。碳烟的破坏主要通过氧化和碎裂两种方式进行, 氧化作用导致碳烟颗粒的尺寸和质量削减, 而碎裂则是具有交大体积的颗粒裂解为多个较小尺寸的颗粒。过往关于碳烟颗粒动力学的模拟研究多集中于碳烟成核、增长等阶段, 对于碳烟破碎的机制的研究以及相关建模方法极为欠缺[1]。本文旨在综合分析现有的碳烟颗粒破碎模型, 结合先进的颗粒动力学数值求解技术研究不同火焰条件下详细的碳烟颗粒破碎机制。

为此, 本文采用了如表 1 所示的两种广为应用的颗粒破碎模型[2, 3], 并将其引入到双变量矩投影法 (BVMPM) 框架中。BVMPM 作为一种高效且鲁棒的数值方法, 已在颗粒群平衡模拟中得到广泛应用[4]。本文将 BVMPM 算法与火焰模拟代码 (PREMIX 和 OPPDIF) 耦合, 深入分析了预混自由发展火焰、对冲火焰以及滞止火焰三种不同条件下碳烟颗粒的破碎机制。

结果如图 1 (a) 所示, 模型 2 预测精度较差, 原因在于该模型假设碳烟颗粒的破碎主要由剪切力引起, 而在层流预混火焰中并未观察到足够的剪切力来驱动颗粒破碎[5]。相比之下, 模型 1 预测效果较好, 尤其在对冲火焰和滞止火焰条件下, 该模型可准确预测碳烟颗粒数密度随火焰高度的演化规律。图 1 (b) 中观察, 在对冲火焰中, 碳烟颗粒在经过气体滞止面之前即发生氧化破裂, 导致颗粒数密度下降速率减缓, 这一现象在模拟数据中得到了体现, 表明破碎过程加剧了颗粒的增多[6]。然而实验数据中, 这一过程表现为数密度的增加。这是模型 2 假设碳烟颗粒的破碎与氧化速率直接相关, 但实际火焰中颗粒的氧化过程较为复杂, 导致该模型在某些情况下低估了破碎程度。本研究总结了现有的碳烟破碎模型, 并评估了它们在不同燃烧环境中的表现, 为今后更精确地描述碳烟破碎机制提供了重要参考。这些研究成果对于深入理解碳烟的物理化学行为及其在实际火焰中的动态演化具有重要意义。

Table 1
Summary of soot fragmentation research

Fragmentation Model	Year/Author/Ref	Fragmentation kernel
Model 1	2010. M.E. Mueller et al.[2]	$k_{f1} = \frac{k_{O_2} \chi \pi (n_p - 1) d_p^2}{\delta V}$
Model 2	2001.Stephen J. Harris[3]	$k_{f2} = A(n_{p,i})^{\frac{1}{D_f}}$

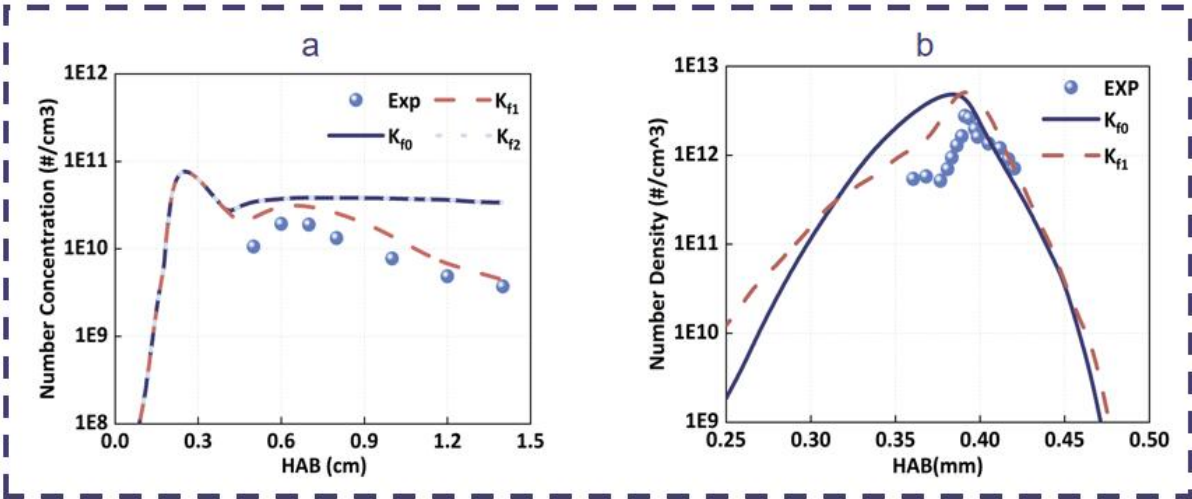


Fig. 1 Effect of fragmentation kernel on soot number density in an ethylene premixed flat flame (a) [7] and premixed counterflow flames of ethylene (b) [8]. Solid lines are without fragmentation, dashed lines are kener1, dotted lines are kener2, and symbols are experiments.

关键词：碳烟；矩方法；氧化破碎；颗粒群平衡

参考文献

- [1] Chu H, Hong R, Dong W, Zhang H, Ma X, Chen L. Recent advances in soot formation mechanisms: Oxidation and oxidation-induced fragmentation. *Fuel*. 2024;371:132046.
- [2] Mueller ME, Blanquart G, Pitsch H. Modeling the oxidation-induced fragmentation of soot aggregates in laminar flames. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2011;33(1):667-74.
- [3] Harris SJ, Maricq MM. The role of fragmentation in defining the signature size distribution of diesel soot. *Journal of Aerosol Science*. 2002;33(6):935-42.
- [4] Wu S, Lindberg C, Akroyd J, Yang W, Kraft MJC, Engineering C. Bivariate extension of the moment projection method for the particle population balance dynamics. 2019;124:206-27.
- [5] Neoh KG, Howard JB, Sarofim AF. Effect of oxidation on the physical structure of soot. *Symposium (International) on Combustion*. 1985;20(1):951-7.
- [6] Wang Y, Chung SH. Soot formation in laminar counterflow flames. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2019;74:152-238.
- [7] Tang Q, Mei J, You X. Effects of CO₂ addition on the evolution of particle size distribution functions in premixed ethylene flame. *Combustion and Flame*. 2016;165:424-32.
- [8] Gleason K, Carbone F, Gomez A. Effect of equivalence ratio and temperature on soot formation in partially premixed counterflow flames. *Combustion and Flame*. 2022;242:112088.

Chaos-Enhanced Mixing of Non-Newtonian Fluids in Multi-Axis Stirred Tanks

Shiliang Gu^{1,2}, Yuan Yao³, Songsong Wang^{1,2}, Anqi Li^{1,2}, Xin Zhang^{1,2}, Yu Wan^{1,2}, Zuohua Liu^{1,2*}

¹ School of Chemistry and Chemical Engineering, Chongqing University, Chongqing, China, 400044

² State Key Laboratory of Coal Mine Disaster Dynamics and Control, Chongqing China, 400044

³ School of Chemistry and Chemical Engineering, Chongqing University of Science and Technology, Chongqing China, 401331

* liuzuohua@cqu.edu.cn

In chemical production, stirred tanks reactors play a crucial role in determining internal mass transfer efficiency and process economics. The research team led by Zuohua Liu has achieved significant mixing enhancement in both laminar and turbulent flow regimes by modifying stirred tanks from circular to elliptical configurations.^[1] This study innovatively combines an elliptical stirred tank with dual-axis agitation, comparing the mixing performance of marine propeller and Rushton impeller in processing non-Newtonian fluids. Results demonstrate that under identical operating conditions, the marine propeller reduces average power consumption by 11.03%, achieves superior shear uniformity. Key parameters including fluid velocity, shear rate, and pressure were monitored at characteristic positions. Through calculation of maximum Lyapunov exponents and fractal dimensions, the mixing system was identified as chaotic, with corresponding chaotic attractors visualized for parameter analysis.

Keywords: chaotic attractor, shear uniformity, mixing efficiency, stirred tank, power consumption

References

- [4] Yuan, Yao, Peiqiao Liu, Qian Zhang, Zequan Li, Benjun Xi, Changyuan Tao, Yundong Wang, Zuohua Liu*. Effect of Aspect Ratio of Elliptical Stirred Vessel on Mixing Time and Flow Field Characteristics in the Absence of Baffles[J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2024. 65(6): p. 63-74.

粗糙床面斜槽两相稠密颗粒流的相态与分层特征

焦佳珺¹，吕鹏飞¹，安翼²，王晓亮^{1,3*}

¹北京理工大学，北京，100081

²中国科学院力学研究所，北京，100190

³北京理工大学（珠海），珠海，519088

*Email: wangxiaoliang52086@126.com

摘要正文: 泥石流等地质灾害和能源水力输送等工程中存在大量颗粒液体系统在斜槽的流动工况，因颗粒-颗粒、颗粒-液体相间影响，颗粒相表现出十分丰富的相态特征，多年来受限于实验观测技术，其内部运动学特征一直没有被较好地揭示。本文采用基于折射率匹配的“透明土”技术搭建了一套斜槽实验装备^[1]，采用溃坝类型实验可以获取秒级的准稳态流动，通过高速相机我们建立了粗糙床面内部切面的颗粒相运动学数据。采用Hoff圆等图像处理技术、时间统计和空间分层统计，最终构建了粗糙床面颗粒液体混合流的颗粒相运动学剖面，包括速度剖面、体积分数剖面、颗粒温度和剪切率，总计12个例子，包含不同开口高度和斜槽倾角。研究结果表明，稳态情况颗粒相的流动表现出显著的分层结构，总共包含颗粒层流、碰撞流、摩擦流和活塞流四种基本流动，而整体剖面我们发现存在3种组合情况，每种组合流动由2-3种基本流动组成，分别是模式A颗粒层流-摩擦流、模式B碰撞流-摩擦流、模式C碰撞流-摩擦流-活塞流，如图1所示。当斜槽倾角增加时，模式A会向模式B转化，即床面驱动力和粗糙度作用会使颗粒运动由层流转变为碰撞流。当开口高度增加时候，模式C会向模式B转化，即表层拱起的活塞流会因流动增强逐渐消失。以上研究成果增强了对斜槽颗粒液体混合流运动特征的理解，也为液相作用颗粒流变学的研究提供了重要的基础流动数据。

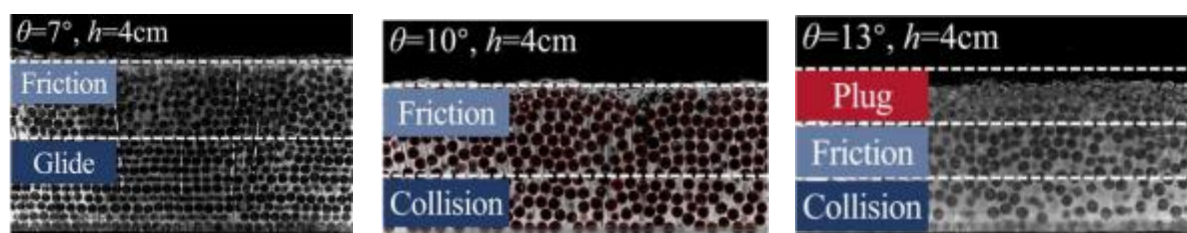


图 1.3 种典型斜槽稠密颗粒液体两相流的颗粒相相态，从左至右分别是“颗粒层流-摩擦流”、“摩擦-碰撞流”何“碰撞-摩擦-活塞流”

关键词: 稠密颗粒流；相态；分层；透明土

参考文献

- [1] Y. Sun, J. Jiao, Y. An, X. Wang, Q. Liu. Experimental study on internal flow structure and dynamics of dense liquid-particle flow down inclined channel. *Experiments in Fluids*. 2023, 64(9): 1

基于颗粒群平衡方法的质子交换膜燃料电池催化剂衰退研究

丁玉杰^{1,*}

¹ 西安建筑科技大学, 陕西省西安市碑林区文艺路街道雁塔路 13 号, 710055

*Email: dingyujie@xauat.edu.cn

摘要正文: 碳载铂催化剂衰退导致的活性面积损失是制约质子交换膜燃料电池运行效率与寿命的关键瓶颈之一, 背后涉及到催化剂衰退反应、颗粒群平衡与水热输运之间复杂的耦合机理。本文提出了一个颗粒群平衡方程来描述四种主要衰退机理(溶解、熟化、合并与脱离)下催化剂粒径分布演化与电化学活性面积损失。通过无量纲分析得到了衡量各个机理相对速率大小的无量纲参数(Da_{rdp} , Da_{cgl} , Da_{det})。在此基础上, 建立了基于CFD-PBE方法的燃料电池多物理场耦合衰退模型, 实现了粒径分布演化与电化学输出性能的单向耦合。结果显示, 沿阴极催化剂层厚度方向的非均匀衰退行为与铂离子传输过程相关, 靠近质子交换膜一侧的铂颗粒尺寸倾向于减小, 而靠近微孔层一侧的铂颗粒尺寸倾向于增大。通过负载电压循环, 可以对铂颗粒表面氧化物覆盖率进行实时调控, 从而实现活性面积的可逆恢复。本研究为燃料电池催化剂层的优化设计与运行策略提供了理论指导, 并拓展了颗粒群理论在电催化与燃料电池领域的应用。

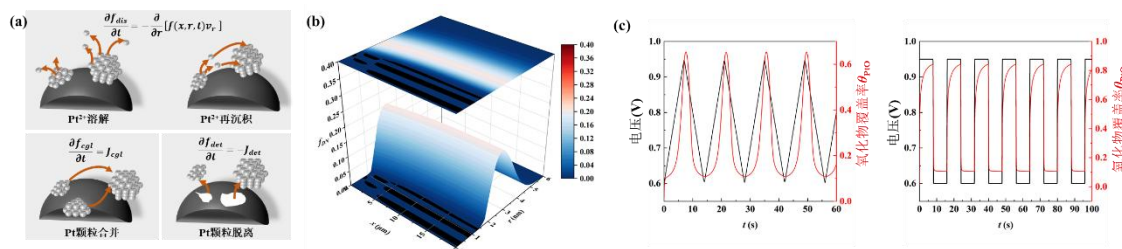


Fig. 1 (a) Degradation mechanisms of Pt/C catalyst particles; (b) Nonuniform degradation of particle size distribution function $f(x, r, t)$; (c) Oxide coverage fractions under triangular and square voltage cycles

关键词: 颗粒群平衡; 质子交换膜燃料电池; 催化剂; 耐久性; 多物理场耦合

参考文献

- [1] Y. Ding, Z. Fang, H. Zhang, X. Cheng, L. Li. Modeling the non-uniform degradation of PEM fuel cell catalyst with a multi-scale framework based on population balance equation. *Chem. Eng. J.*, 2025, 506: 159960.
- [2] Y. Ding, Z. Fang, Y. Yuan, M. Tian, J. Yu, L. Li. Particle size distribution degradation model for PEM fuel cell Pt/C catalyst based on population balance equation. *Chem. Eng. Sci.*, 2024, 300: 120590.

低雷诺数气-固两相悬浮体系的细颗粒团聚行为研究

刘文巍，付景文，石欣琳，黄云

中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室，北京市海淀区中关村北二街1号，100190

*Email: liuwenwei@ipe.ac.cn

摘要正文：

颗粒团聚是自然界[1]和工业[2,3]中常见的现象。本研究采用LBM-DEM方法进行数值模拟，旨在探讨在颗粒间范德华力作用下自由运动的气固两相悬浮体系中颗粒团聚的演化过程及其关键控制参数。研究表明，稳态团聚行为由颗粒粘附效应和惯性效应的竞争决定。根据表面能和密度不同，观察到三种可能的稳态：完全团聚、部分团聚和无团聚。对于完全团聚过程，其特征表现为通过颗粒间粘附作用二聚体快速形成，随后形成更大的团聚体并伴随团簇数量的逐渐减少，该过程可通过逻辑增长模型较好地描述。研究还发现，团聚过程与计算域尺寸无关，并且最终团聚状态与初始颗粒温度无关，不同初始条件最终会收敛至相同的稳态。此外，本研究还建立了团聚的临界颗粒温度和颗粒临界粘附速度的关联，并采用邦德数(Bo)[4]、团聚数(Ag)[5]和粘附数(Ad)[6]来描述颗粒团聚的临界条件。研究表明当以表面能和相对密度为变量时，这些无量纲数均能刻画发生团聚的边界，尽管其绝对数值存在细微差异。进一步，无量纲团聚数 Ag 还可扩展用于描述Geldart A类和B类颗粒之间的分界[7,8]。值得注意的是，临界值 $Ag=1$ 所确定的边界是基于先验的能量平衡推断而非经验地拟合得出。这些发现为气固悬浮体系中颗粒团聚及其与Geldart相图的关联提供了新的理论视角。

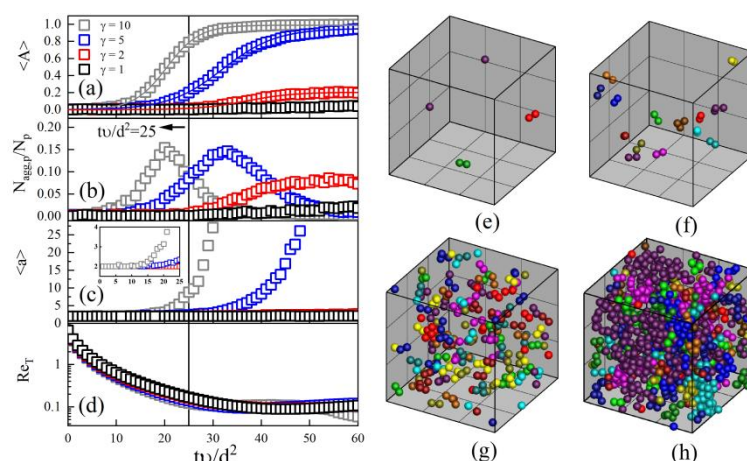


Fig. 1 (a) The fraction of agglomerated particles $\langle A \rangle$, (b) dimensionless agglomerate number N_{agg}/N_p , (c) average agglomerate size $\langle a \rangle$ and (d) Reynolds number defined by granular temperature, Re_T , as a function of dimensionless time tv/d^2 when fixed density ratio $\rho_p/\rho_f = 1000$ and different surface energy values, γ . The solid line are the fitting curves employing the logistic model. The right panels show the agglomeration distribution with different surface energy values, (e) $\gamma = 1$, (f) $\gamma = 2$, (g) $\gamma = 5$ and (h) $\gamma = 10$ at the same time $tv/d^2 = 25$.

关键词：颗粒团聚；范德华力；颗粒温度；Geldart颗粒分类

参考文献：

- [1] W. Li, N. Riemer, L. Xu, Y. Wang, K. Adachi, Z. Shi, D. Zhang, Z. Zheng, and A. Laskin, Microphysical properties of atmospheric soot and organic particles: measurements, modeling, and impacts, *npj Climate and Atmospheric Science* 7, 65 (2024).
- [2] B. Vowinkel, K. Zhao, R. Zhu, and E. Meiburg, Investigating cohesive sediment dynamics in open waters via grain-resolved simulations, *Flow* 3, E24, E24 (2023).
- [3] F. Pizzi, M. Rahmani, C. Romera-Castillo, F. Peters, J. Grau, F. Capuano, and L. Jofre, Impact of coagulation characteristics on the aggregation of microplastics in upper-ocean turbulence, *Advances in Water Resources* 193, 104798 (2024).
- [4] M. Capece, R. Ho, J. Strong, and P. Gao, Prediction of powder flow performance using a multi-component granular Bond number, *Powder Technology* 286, 561 (2015).
- [5] W. C. Q. LaMarche, P. Liu, K. M. Kellogg, A. M. Lattanzi, and C. M. Hrenya, Toward general regime maps for cohesive-particle flows: Force versus energy-based descriptions and relevant dimensionless groups, *AIChE Journal* 67, e17337 (2021).
- [6] S. Li, J. S. Marshall, G. Liu, and Q. Yao, Adhesive particulate flow: The discrete-element method and its application in energy and environmental engineering, *Progress in Energy and Combustion Science* 37, 633 (2011).
- [7] D. Geldart, Types of gas fluidization, *Powder Technology* 7, 285 (1973).
- [8] O. Molerus, Heat transfer in gas fluidized beds part 1, *Powder Technology* 70, 1 (1992).

高性能格子多相流体力学模拟软件 LMFD 研发进展

王利民^{1,*}

¹ 中国科学院过程工程研究所, 北京 100190

*Email: lmang@ipe.ac.cn

摘要正文: 传统CFD软件采用平均化方法处理介尺度非均匀结构, 掩盖了多相系统的本质特征, 难以揭示介尺度结构形成的物理机制及准确预测实际流动和传递过程。面向颗粒流体系统问题, 采用格子Boltzmann方法(LBM)和离散单元法(DEM)分别描述流体相传递及颗粒相运动, 实现了颗粒流体系统的颗粒解析直接数值模拟(PR-DNS)和离散颗粒模拟(DPS); 面向气液/液液问题, 提出了水平集LBM, 实现LBM直接求解水平集方程, 将相界面捕捉误差降低了一个数量级; 面向通用多相流方程, 推导了与体积平均Navier-Stokes方程等效的格子Boltzmann模型, 消除界面虚假速度, 并验证空隙率时空演化具有二阶精度, 为进一步构建格子Boltzmann框架下的双流体模型和混相模型提供理论基础; 结合GPU计算技术, 形成高性能格子多相流体力学模拟软件LMFD (Lattice-based Multi-Fluids Dynamics)。LMFD 实现了集“求解器”与“前、后处理”于一体的大规模仿真计算, 在多相流模拟仿真领域具有显著的算法优势, 同时能够保持大规模仿真计算时的并行效率, 为解决工程实际需求提供了可靠的数值工具, 目前已在航空、光伏、气象、生命医学多领域前沿交叉研究中发挥突出作用, 显示出该软件在解决工程问题的广泛应用前景。

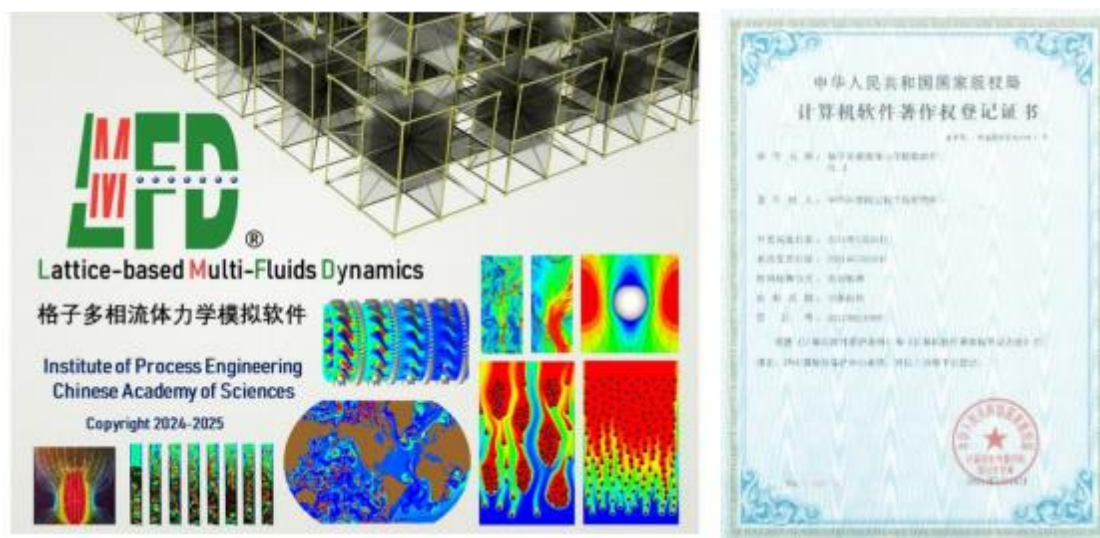


图 1 LMFD 多相流体模拟软件

关键词: LBM-DEM , LMFD软件, 格子Boltzmann方法, 水平集LBM , GPU

基于高压微流控芯片耦合原位拉曼的 CH₄ 水合物相变特性研究

殷振元^{1,*}, 张吉东¹, 宋子扬¹, 杨小雯¹, 周珂光¹

¹ 清华大学, 清华大学深圳国际研究生院, 广州深圳, 518055

*Email: zyyin@sz.tsinghua.edu.cn

摘要正文: 天然气水合物因其巨大的资源量与高能量密度而被视为一种前景广阔的能源。理解孔隙尺度下天然气水合物生成与分解动力学及其孔隙结构演化对优化天然气水合物开采工艺至关重要。本研究设计了一种高压微流控可视化耦合原位拉曼光谱装置 ($P_{max} = 20.0$ MPa), 实现孔隙尺度下气体水合物生成和分解过程的微米级观测与分子尺度组分原位分析。首先, 观测并分析了南海神狐海域温压条件下甲烷水合物的生长过程, 采用热激法探究了水合物分解过程中气-水-水合物界面与气泡演化规律。开发了图像识别算法分析了甲烷水合物生成过程中气-水-水合物三相饱和度演化及水合物生长速率。实验结果表明, 孔隙中存在两种不同的甲烷水合物生成机制: (1) 甲烷气泡主导的多孔型水合物, 拉曼表明多孔型水合物内甲烷气与水合物相共存; (2) 溶解气主导的晶体型水合物。晶体型水合物包裹在多孔型水合物周围并层状生长, 存在两种不同的晶体型甲烷水合物生长模式: (a) 枝晶形水合物生长, 进而触发相邻甲烷气泡成核; (b) 扇形水合物生长, 直至相邻甲烷气泡成核发生。两种类型的甲烷水合物生长动力学均表现出随时间变化的指数增长趋势, 这与甲烷气泡到水合物界面的距离变化一致。本研究为甲烷水合物在孔隙尺度下生成、分解与微气泡演化提供直接观测证据, 研究结果对深入理解水合物分解动力学提供基础数据支撑。

图 1 为本课题组自主搭建的高压微流控耦合原位拉曼光谱实验装置示意图^[1], 主要由 5 部分组成: (1) 配有可视化视窗和柱塞泵的围压夹持器, 最大压力可达 20.0 MPa; (2) 位于围压夹持器内的微流控芯片, 孔隙压力与围压保持为 1.0 MPa 压差, 最大孔隙压力可达 20.0 MPa; (3) 配有活塞容器和循环水浴的注入速率为 0.001~9.999 mL/min 的微流控恒速泵, 用于设定温度的甲烷气和水的注入; (4) 配有底部光源的高分辨率相机, 用于拍摄气-水分布与甲烷水合物生成与分解过程中形貌演化图像; (5) 配有 XYZ 位移控制平台的原位拉曼系统, 用于分析不同水合物形貌的分子尺度拉曼光谱。微流控芯片的温度由位于围压夹持器外水夹套和循环水浴控制, 并由位于微流控芯片上方的 PT-100 温度传感器监测。压力传感器位于微流控芯片的尾端。本研究观测并分析了南海神狐海域温压条件下 ($P = 15.0$ MPa) 甲烷水合物生成过程, 采用低温出口端扰动法与热激法诱导甲烷水合物生成和分解。

Fig. 2. Evolution of two types CH_4 hydrate (porous-type is in darkgrey and originates from the gas bubble, while crystal-type is translucent and grows outward from gas bubbles to trigger the adjacent gas bubbles nucleation) evolution in pore space at $t = 13.3, 50.3, 198.8, 201.7, 1775.4$ min.

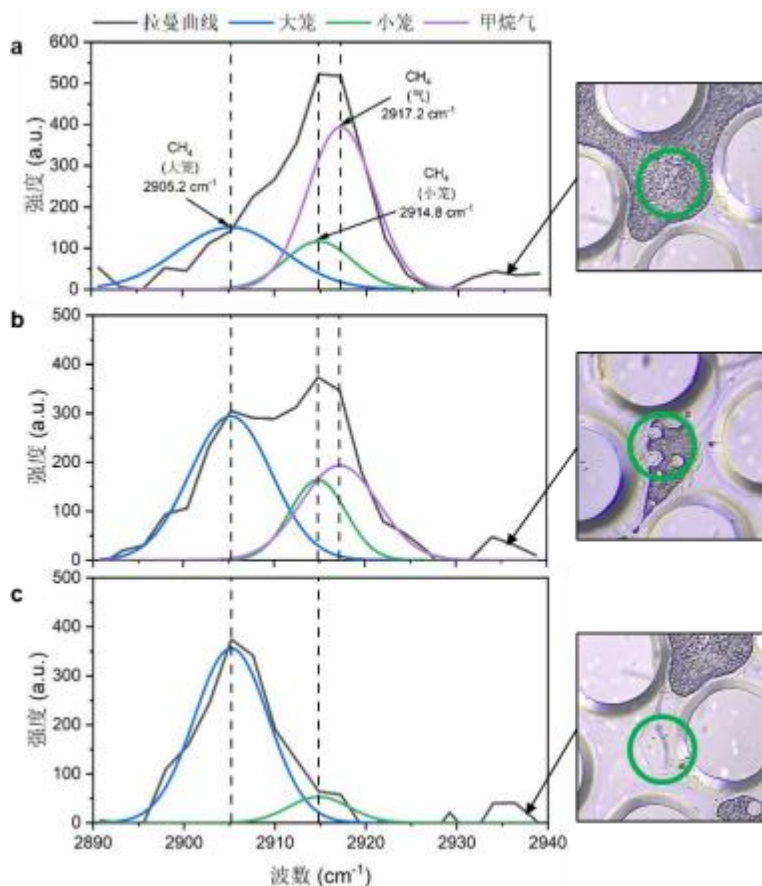


Fig. 3. Raman spectra of CH_4 hydrate (sI) cavities (black) on the microfluidic chip. CH_4 gas (purple, at 2917.2 cm^{-1}), Small 5^{12} cavities (green, at 2914.8 cm^{-1}) and the large $5^{12}6^2$ cavities (blue, at 2905.2 cm^{-1})

为探究气-水共存的多孔型水合物与晶型水合物的组分与结构，本研究分析了多孔型与晶型甲烷水合物的拉曼光谱，如图3所示。结果表明，气-水合物共存的多孔型水合物中存在水合物大笼峰（ 2905.2 cm^{-1} ）与气相峰（ 2917.2 cm^{-1} ）且以气相峰为主，表明晶型“桥接”诱导气液界面生成水合物膜后，甲烷气泡内仅少量气与孔壁表面水生成水合物，晶型水合物严重阻碍了气-液接触^[3]。然而，多孔型水合物长期稳定过程中，部分气-水合物共存状态转为纯水合物后，气相峰强度由393.7降低至193.3，大笼峰强增至293.8，表明部分甲烷气生成水合物。晶型水合物以大笼为主，未观测到小笼与气相峰。同时，晶型水合物的大笼峰强（356.0）高于多孔型的纯水合物峰（293.8），表明晶型水合物密度高于多孔型水合物。

孔隙尺度下甲烷水合物形态的可视化及其路径依赖性生长动力学的量化，对于理解天然气水合物在现场尺度上的形成和解离至关重要。在本研究中，我们开发了一种创新的微流控耦合原位拉曼系统，并集成了自主开发的图像分割算法，使得可以在孔隙空间

中以 $5.0\ \mu\text{m}$ 的分辨率直接观察和量化甲烷水合物的生长模式和动力学。实验结果为孔隙尺度下甲烷水合物的生长动力学以及甲烷水合物与相邻甲烷气泡之间的生长机制提供了重要见解。

关键词： 甲烷水合物；孔隙尺度；微流控芯片；原位拉曼；生长动力学

参考文献

- [1] Zhang, J., Yin, Z., Khan, S. A., Li, S., Li, Q., Liu, X., & Linga, P. (2024). Path-dependent morphology of CH₄ hydrates and their dissociation studied with high-pressure microfluidics. *Lab on a Chip*, 24(6), 1602-1615.
- [2] Yin, Z., Chong, Z. R., Tan, H. K., & Linga, P. (2016). Review of gas hydrate dissociation kinetic models for energy recovery. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 35, 1362-1387.
- [3] Zhang, J., Song, Z., Zhou, K., Li, Q., Jiao, H., & Yin, Z. (2024). Pore-Scale Analysis of the Permeability and Effective Thermal Conductivity of Hydrate-Bearing Sediments Based on a High-Pressure Microfluidics Approach. *Energy & Fuels*, 38(22), 22192-2

宽粒径分布气泡的气液两相流 CFD-DBM 仿真方法研究

刘子寒, 赵永志*

浙江大学能源工程学院, 浙江省杭州市, 310027

*Email: yzzhao@zju.edu.cn

摘要正文: 气泡流是过程工业中广泛存在的气液两相现象, 可用于加速化学反应速率、减少水下航行器流动阻力等。然而, 工业过程中也存在一些会造成危害的气泡现象, 比如近壁面处的气泡溃灭往往是气蚀产生的主要原因。因此, 气泡在液体中的行为研究始终是过程工业关注的关键问题。随着计算机技术的不断发展, 借助数值仿真手段了解气泡运动行为是促进工业过程效率提升的有力手段。其中欧拉-拉格朗日方法由于可以对每一个气泡进行追踪, 目前广泛应用于颗粒体系的研究当中。在实际过程中, 气泡的直径分布范围较大, 包含微米级到厘米级的气泡, 对于气液两相仿真来说, 如何处理宽粒径分布的气泡群与不同尺寸流体网格之间的关系成为数值仿真的关键问题。因此, 为准确研究气泡在液体中的运动行为, 本研究提出了一种适用于包含宽粒径分布气泡的CFD-DBM (计算流体力学-离散气泡模型) 仿真方法, 当网格尺寸大于气泡粒径时, 使用一种基于梯度插值的速度场重构方法提升气泡运动的预测精度, 当网格尺寸与气泡直径比较小时, 通过构建球形支持域来实现气泡曳力修正与流场孔隙率平滑, 提升计算精度与稳定性。通过该方法可预测气泡在液体中的流动、聚并及破碎过程。本研究通过与实验结果的比较验证了方法的准确性。最后, 分析了不同仿真参数对气泡运动、聚并及破碎行为的影响。

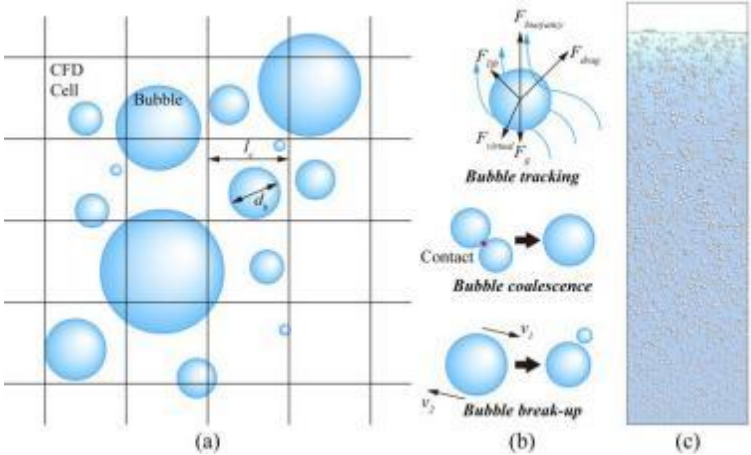


Fig. 1 Schematic illustration of the CFD-DBM simulation: (a) the size comparison between CFD cell and bubble with a wide diameter distribution, (b) the bubble dynamics tracking, coalescence, and break-up, (c) the simulation result of the bubble column and gas-liquid interface.

关键词: 计算流体力学; 离散气泡模型; 气液两相流; 气泡聚并; 气泡破碎

参考文献

- [1] Zihan Liu, Xiang Li, Du Zhou, Lianyong Zhou, Huaqing Ma, Kun Luo, Zhixiong Wang, Chao Xu, Yongzhi Zhao; An improved computational fluid dynamics-discrete bubble model for multiphase bubble flow simulation with a wide grid/bubble size ratio. *Physics of Fluids* 1 November 2024; 36 (11): 113330.
- [2] L. Zhou, T. Li, H. Ma, Z. Liu, Y. Dong and Y. Zhao, Development and verification of an unresolved CFD-DEM method applicable to different-sized grids, *Powder Technol.* 2024, 432:119127.

自由下落空心液滴生成机理研究

刘翔¹，许萧¹，张迎春¹，许萧^{1,*}

¹华东理工大学机械与动力工程学院, 上海市徐汇区凌云街道梅陇路 130 号, 200237

*Email: xxu@ecust.edu.cn

摘要正文：空心液滴具有比表面积大、液膜薄以及界面振荡等特性，因其独特的物理性质以及在化学工程中的潜在应用而备受关注。本研究聚焦于利用同轴喷嘴装置在纯水中可控地生成自由下落的空心液滴。通过系统的调节液体和气体流速，确定了稳定形成空心液滴的临界条件。结果表明，在液体雷诺数（34.69 - 260.19）和气体雷诺数（1.9 - 372）的特定范围内，可以实现包封概率为100%的空心液滴。其形成机制涉及环形区域内气泡浮力与液体拖曳力之间的平衡，这种平衡抵消了液膜的排水作用并阻止气泡逸出。研究人员开发了理论模型来预测临界气体雷诺数和生成概率，该模型与实验数据吻合良好。这项工作提供了一种新颖的微流体方法来抑制纯水中的气泡聚并，为气液传质应用中大规模生产空心液滴奠定了基础。

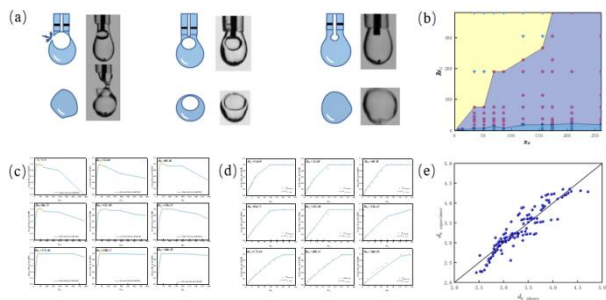


Fig. 1 Prediction of generation probability: (a) Three generation modes of hollow droplets; (b) Regime map and schematic of droplet formation in terms of liquid Reynolds number and gas Reynolds number; (c) Regime map and schematic of droplet formation in terms of liquid Reynolds number and gas Reynolds number; (d) The comparison of generation probability for mass conservation condition; (e) The comparison of bubble diameter.

关键词：空心液滴；生成概率；气液流；理论预测

基于气泡破碎与聚并的湿式氧化气升环流反应器放大机制研究

许薰，杨强，毕敬浩，刘翔

华东理工大学机械与动力工程学院, 上海市徐汇区凌云街道梅陇路 130 号, 200237

*Email: xxu@ecust.edu.cn

摘要正文：本研究聚焦于中国百万吨级乙烯工厂中广泛用于处理含盐废碱液的工业规模 ($\geq 160,000$ 吨/年)、高温 ($\geq 190^\circ\text{C}$) 湿式氧化 (WAO) 反应器。通过利用从无机盐溶液中获得的气泡聚并时间数据, 验证初始气泡尺寸对气升式环流反应器内气含率和环流速度的影响。本研究的目标是确定能够满足工业应用中反应器放大需求的最佳初始气泡特性。通过实验研究和数值分析发现, 虽然盐离子会抑制气泡聚并并提高气含率, 但同时也会减小小升流区和降流区之间的压差。此外, 在含盐体系中, 反应器顶部形成的泡沫层会增加液体的环流阻力。基于气泡聚并时间校正的群体平衡模型 (PBM) 被用于模拟实验室规模的含盐环流反应器中的两相流。通过调整初始气泡尺寸分布, 确定了环流速度和气含率之间的最佳平衡点, 这为工业含盐环流反应器的设计和放大提供了有价值的参考依据。

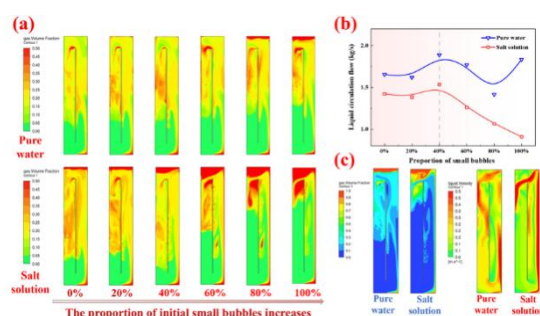


Fig. 1 Pure water system and simulated salt solution (coalescence time amplified by seven times), superficial gas velocity $U_g=0.08\text{m/s}$: (a) Gas holdup distribution cloud map with different initial small bubble proportion; (b) Relationship between liquid circulation flow and initial small bubble proportion; (c) Gas holdup and liquid circulation flow cloud map with 100% initial small bubble proportion.

关键词：废碱液；湿式氧化；气泡聚并；反应器放大

颗粒负载槽道湍流的颗粒解析直接数值模拟研究

张华海^{1*}, 李文杰^{1,3}, 王利民^{1,2*}

¹介科学与工程全国重点实验室, 中国科学院过程工程研究所, 北京市, 100190

²化学工程学院, 中国科学院大学, 北京市, 100049

³机械工程学院, 山东大学, 济南市, 250061

*Email: hhzhang@ipe.ac.cn, lmwang@ipe.ac.cn

摘要正文: 利用格子玻尔兹曼方法 (Lattice Boltzmann Method, LBM) 结合浸没运动边界法 (Immersed Moving Boundary, IMB) 和离散元方法 (Discrete Element Method, DEM), 实现了颗粒负载槽道湍流的颗粒解析直接数值模拟, 在颗粒与流体密度比 (ρ_p/ρ_f) 从1.5到10和固含率 (ϕ_v) 从2%到20%的范围内, 研究了颗粒的空间分布和对湍流的调制效应。模拟结果揭示了颗粒对槽道湍流的调制体现在三个方面: 颗粒的近壁面聚集阻断了槽道壁面涡向中心的汇聚过程, 颗粒表面脱落涡提供新的湍流生成来源, 以及颗粒诱发的高应变区增强了粘性耗散。颗粒分布在槽道法向和流向上均出现差异, 法向差异来源于槽道湍流的特性, 流向差异则源于重力诱导。

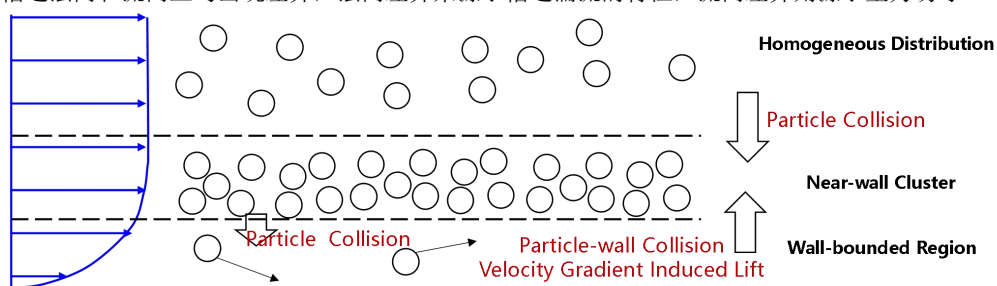


Fig. 1 Schematic diagram of particle aggregation mechanism in near-wall region of particle-laden turbulent channel flow

关键词: 颗粒解析; 直接数值模拟; 湍流调制; 颗粒多相流

参考文献

- [1] H.H. Zhang, W. J. Li, P.J. Sun, S.T. Fu, W.T. Su, J.X. Dou, X. Xiang, L. Ji and L.M. Wang. Particle-resolved direct numerical simulation of particle-laden turbulent channel flow. *Physics of Fluids*. 2025 (accepted).
- [2] W.T. Su, H.H. Zhang, S.T. Fu, X. Xiang and L.M. Wang. Particle-resolved direct numerical simulation of particle-laden turbulence modulation with high Stokes number monodisperse spheres. *Physics of Fluids*. 2023, 35(10):105120.

热驱动湍流中黏附颗粒动力学特性

黄瀚, 赵帅琪, 赵昆鹏, 白博峰*

绿色氢电全国重点实验室, 西安交通大学, 陕西西安, 70049

报告人: 黄瀚 (学生) Email: huanghanshuai11@stu.xjtu.edu.cn

*Email: bfbai@mail.xjtu.edu.cn

摘要正文:

黏附颗粒热湍流在流固两相流反应器中广泛存在^[1,2], 热对流驱动颗粒的运移和分散, 同时高温导致的颗粒间强烈黏附行为驱动团聚体的形成^[3]。在复杂的高温流体环境中, 黏附颗粒的力学行为及作用机制不清。本文采用四向耦合数值方法研究Rayleigh-Bénard热湍流中悬浮黏附颗粒的动力学行为。考虑了黏附颗粒的拖曳力以及颗粒之间的范德华内聚力和弹性阻尼碰撞力, 准确捕捉了团聚体的黏附、破碎和变形等复杂动力学行为。基于Source-in-Cell方法, 耦合了颗粒与流体之间的动量和热量交换。研究表明, 悬浮颗粒倾向于聚集在温度较高的底部热边界层区域, 研究揭示了高温诱导的强黏附力与团聚体Stokes惯性的空间不均匀分布是导致黏附颗粒聚集的主要机制。这一研究丰富了传统观点中认为仅由重力驱动颗粒聚集的力学机制。此外, 研究发现冷、热羽流的剪切作用能够促进团聚体的破碎和变形, 同时较强的颗粒间黏附力会抑制热羽流的动量强度, 当颗粒间内聚力与流体惯性力之比大于5时, 团聚体会严重扰动并且削弱热羽流结构。本研究揭示了热对流中的黏附颗粒的聚集和分散机制, 为工业过程中颗粒的选型与分布调控提供了理论支持。

关键词: 黏附颗粒; 热湍流; 颗粒动力学; 两相流动;

Flocculation of suspended cohesive particles in Rayleigh-Bénard turbulence

Han Huang, Shuaiqi Zhao, Kunpeng Zhao, Bofeng Bai*

State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering,
Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China

Adhesive particle-laden thermal turbulence is widely observed in gas–solid multiphase flow reactors^[1,2], where thermal convection drives particle transport and dispersion, while high temperatures enhance interparticle adhesion, promoting the formation of flocs^[3]. Due to the limitations of experimental techniques, the mechanical behavior and interaction mechanisms of adhesive particles in complex high-temperature fluid systems remain unclear. In this study, a four-way coupled numerical method is employed to investigate the dynamic behavior of suspended adhesive particles in Rayleigh-Bénard thermal turbulence. The model accounts for the drag force acting on particles, van der Waals cohesive forces between particles, and elastic-damping collision forces, enabling accurate capture of complex floc dynamics, including aggregation, breakage, and deformation. Momentum and heat exchange between particles and fluid are coupled using the Source-in-Cell method. Simulation results reveal that suspended particles tend to accumulate in the bottom thermal boundary layer, where temperatures are relatively high. The study identifies that strong thermally induced adhesion forces, along with the spatially non-uniform distribution of the Stokes inertia of flocs, are the dominant mechanisms responsible for particle aggregation, providing new insights beyond the traditional gravity-driven explanation. Moreover, shear effects from both cold and hot plumes are found to promote the breakage and deformation of flocs, while stronger interparticle adhesion suppresses plume momentum. When the cohesive number (Co) exceeds 26.9, flocs significantly disturb and weaken the thermal plume structures. This study elucidates the aggregation and dispersion mechanisms of adhesive particles in thermal convection and offers theoretical guidance for particle selection and spatial distribution control in high-temperature industrial processes.

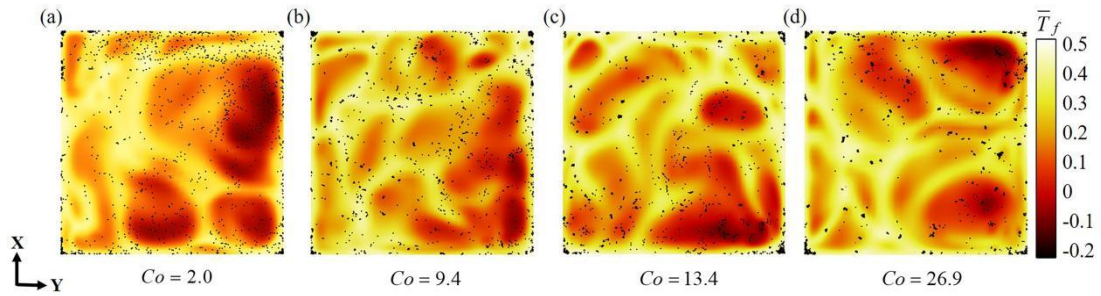


Fig. 1 (a)–(d) The instantaneous particle distribution within the defined thermal boundary layer $\lambda_{T, \text{define, hot}}$ and the instantaneous temperature distribution contour plot at $z = -0.45$, at the different cohesive number Co .

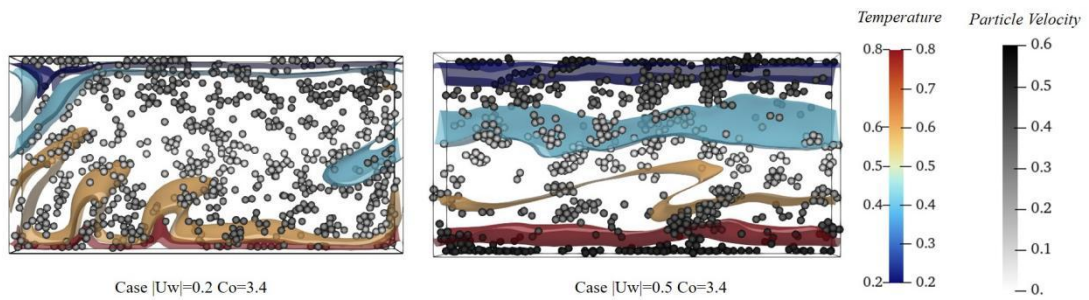


Fig. 2 Isosurfaces of fluid temperature and particle velocity cloud maps at time $t = 300$ under different wall shear velocities Uw in shear-driven thermal convection.

参考文献

- [1] D. Lohse and K.-Q. Xia, Small-scale properties of turbulent Rayleigh-Bénard convection, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **42**, 335 (2010).
- [2] S. Wang, H. Lu, Z. Shen, H. Liu, and J. Bouillard, Prediction of flow behavior of micro-particles in risers in the presence of van der Waals forces, *Chem. Eng. J.* **132**, 137 (2007).
- [3] K. Zhao, H. Huang, S. Zhao, B. Pei, E. Meiburg, and B. Bai, Intermediate temperature of supercritical water enhances the dispersion of cohesive particles, *Chem. Eng. Sci.* **286**, 119659 (2024).

已发表成果

- [1] Huang, H., Zhao, S., Zhang, R., Pei, B., Zhao, K., Bai, B., Flocculation of suspended cohesive particles in Rayleigh-Bénard turbulence, *Physical Review Fluids* (2025) 10(2): 024305.
- [2] 黄瀚, 赵帅琪, 张瑞, 赵昆鹏, 白博峰, 超临界水流速对煤颗粒群气化解氢速率的影响, *工程热物理学报* (2025) Accept.

Fluctuation and jamming of granular discharge

Shuai Zhang¹, Wei Ge^{1,*}

¹ State Key Laboratory of Mesoscience and Engineering, Institute of Process Engineering (IPE), Chinese Academy of Sciences (CAS), Beijing 100190, China

*Corresponding author: wge@ipe.ac.cn

Granular discharge is widely encountered in various industries, such as pharmaceuticals, food, and energy. In this work, the time interval t_{Δ} between the discharging of two consecutive particles from hoppers is characterized by its probability distribution function (PDF), aiming at capturing high-resolution information about fluctuation at small-scale and short-term. Simulation in the discrete element method (DEM) [1], validated by a high-speed camera system in experiments, was carried out to obtain statistical results for hoppers under various geometrical conditions. The PDFs shift from the asymmetric double sigmoid function to the Weibull function with the increase of orifice or hopper angle, while those in between can be well fitted by a linear combination of these two functions. Three modes of particle discharging were found and two of them were also found in the simulation of hard-sphere gas discharging through an orifice, suggesting that granular discharge can be regarded as a combination of gaseous random flow and single-thread ordered flow [2]. Furthermore, the clogging-collapsing phenomenon where the discharge is halted by a temporary arch and resumed with its spontaneous collapsing was investigated, the unstable arch with concave links and the residual kinetic energy are found as the mechanism behind the phenomenon [3]. These findings have practical implications for the design of hoppers in pharmaceutical and chemical engineering.

Keywords: Granular flow, DEM, Jamming, Fluctuation

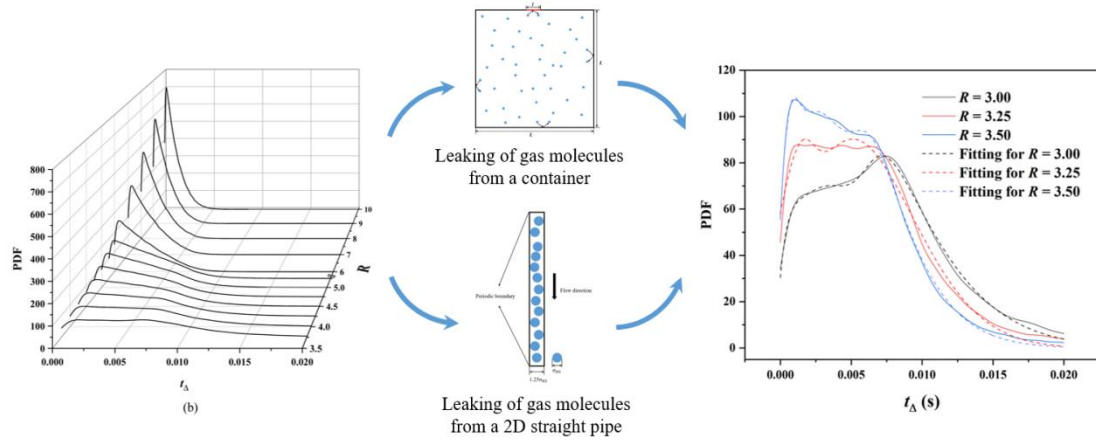


Fig. 1. Fluctuation characterized by the PDF and its formation mechanisms

References

- [5] P. A. Cundall, O.D. Strack, A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies, *Geotechnique* 29 (1979) 47-65.
- [6] S. Zhang, M. Zhao, W. Ge, et al. Bimodal frequency distribution of granular discharge in 2D hoppers, *Chemical Engineering Science* 245 (2021) 116945.
- [7] S. Zhang, W. Ge, G. Chen, et al. Numerical investigation on the clogging-collapsing events in granular discharge, *Powder Technology* 408 (2022) 117714.

性纤维颗粒界面解析 DNS 模拟

陈俊杰¹, 郭宇^{1,*}

¹ 浙江大学航空航天学院工程力学系, 中国杭州, 310027

*Email: yguo@zju.edu.cn

摘要正文: 刚性颗粒(如球形和圆柱形颗粒)在粘性流体中的相互作用和运动机制已被广泛研究并得到充分理解。然而,可发生显著弯曲变形的柔性纤维颗粒在两相流动中表现出更复杂的流体动力学行为,其流固耦合作用和动力学机制尚未完全阐明。本研究开发了一种高精度的直接数值模拟(DNS)方法,对柔性纤维颗粒进行了界面全解析处理,用于研究具有不可忽略体积的三维柔性纤维颗粒在粘性流体中的动力学特性。柔性纤维颗粒采用键连接球柱模型[1]进行表征,流场的求解则基于格子玻尔兹曼方法(LBM)[2]。通过系统分析,我们发现均匀流场中作用在柔性纤维颗粒上的无量纲阻力系数、升力系数和力矩系数受三个关键无量纲参数控制:

制:长径比 β 、阻力-弹性数 B 和雷诺数 Re 。研究进一步揭示了较易弯曲的各向异性柔性纤维颗粒的阻力系数随无量纲控制参数的变化规律,推导了一定参数范围内具有物理意义的半经验阻力系数公式,该公式的平均误差在3%以内。数值结果表明,纤维颗粒的阻力-弹性数 B 是柔性纤维颗粒形状的有效控制参数,阻力-弹性数 B 在一定范围内增大时,柔性纤维颗粒两端点之间的距离会迅速缩短,同时阻力系数急剧下降;当纤维颗粒的长径比 β 增大时,由于其在垂直于来流方向平面的投影面积增大,阻力系数随之增大。本研究有助于推动涉及柔性纤维颗粒的多相流模拟的发展,并对柔性颗粒材料(如生物质颗粒)的流态化和气力输送等工业应用具有重要意义。

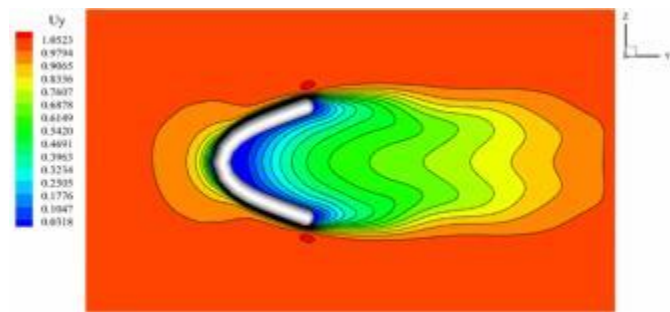


Fig. 1 Velocity contour for flow around a flexible fiber at $Re=100$

关键词: 柔性纤维颗粒; 阻力系数; DNS; DEM-LBM; 多相流

参考文献

- [1]Y. Guo, Q. Liu, Y. Li, Z. Li, H. Jin, C. Wassgren, and J. S. Curtis, Discrete element method models of elastic and ELASTOPLASTIC fiber assemblies,AIChE J. **67**, e17296 (2021).
- [2]Y. Liu, Y. Guo, B. Yang, D. Pan, Z. Xia, Z. Yu, and L.-P. Wang, Three-dimensional sedimentation patterns of two interacting disks in a viscous fluid, J. Fluid Mech. **960**, A25 (2023).

有效缩短流化床反应器稀相空间油剂接触时间的轴流旋分器分离特性研究

司道润, 卢非赣, 闫子涵*, 卢春喜*,

中国石油大学(北京)重油全国重点实验室, 北京市昌平区府学路18号, 102249

yanzihan2007@163.com

lcx725@sina.com

摘要正文: 由于现有的切入入口型旋风分离器对入口固相浓度和入口气速稳定性有着严格的要求, 流化床反应器中的一级分离器入口需设置在远高于TDH的高度。同时, 流化床反应器的沉降段直径较大, 完成反应后的油剂在其中稀相空间内上升的速度较慢。这两方面因素共同致使油剂接触时间过长, 从而加剧副反应程度, 降低了反应器中目标产品收率。针对此问题, 本研究借鉴分离性能更为稳定的导叶式轴向入口旋风管的分选理念, 拓展到以单一大尺寸旋分器代替多组旋风单管的新型旋风分离器, 对其性能进行了测试, 并进一步对其高径比进行了优化。实验结果表明该新型旋分器的压降与入口气速成二次函数关系, 压降仅为PV型旋风分离器的0.62, 且对于中位粒径 $10\mu\text{m}$ 以下的细颗粒物, 分离效率可达90%。进一步的优化实验结果表明, 随着高径比的减小, 新型旋分器的压降基本保持不变。并且在低入口气速下, 高径比的变化对新型旋分器的分离效率影响并不显著, 而在高入口气速下, 新型旋分器的分离效率随着高径比的减小降低, 但降幅仅在1%左右。说明除入口高度设置的降低之外, 该新型旋风分离器能缩小其高径比, 从而进一步降低流化床反应器沉降段高度, 缩短油剂停留时间。在此基础上, 通过对流场实验结果的分析, 得出高径比变化对压降的影响分为“摩擦面积变化”和“切流速度变化”两个方面, 而对分离效率的影响分为“分离空间长度变化”和“切流强度变化”两个方面, 压降和分离效率的变化皆为两方面因素共同作用下的结果。根据压降和分离效率对应的两方面因素的影响规律提出的新型旋分器的尺寸优化方向, 为结构优化提供了理论依据。

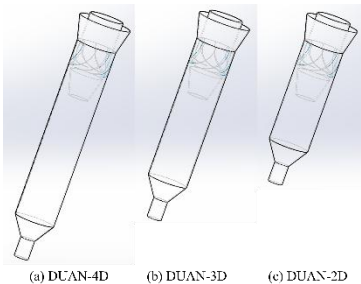


Fig. 1 Structure diagram of new cyclone separator, (a) $H/D=4.625$, (b) $H/D=3.625$, (c) $H/D=2.625$

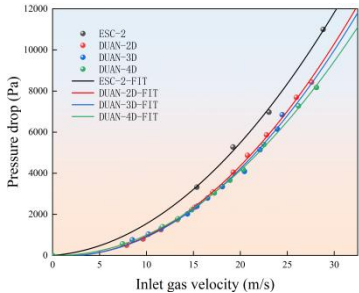


Fig. 2 Comparison of pressure drop of new cyclone separator

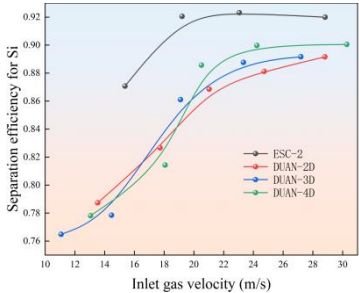


Fig. 3 Comparison of separation efficiency of new cyclone separator

关键词: 轴向入口旋风分离器; 高径比; 分离效率; 压降; 流化床反应器

参考文献

- [1] Si D, Yan Z, Lu C. Performance experiments and pressure drop prediction modelling of an energy-saving cyclone separator[J]. Fuel: A journal of fuel science, 2024(Sep.15):372.
- [2] Chen J, Shi M. A universal model to calculate cyclone pressure drop[J]. Powder Technology, 2007,171(3):184-191.
- [3] 金海峰, 张永民, 李国锋, 等. 甲醇制烯烃装置催化剂细粉跑损问题剖析[J]. 石油学报(石油加工), 2021,37(4):779-788.
- [1] 陈建义, 罗晓兰, 时铭显. PV-E型旋风分离器性能试验研究[J]. 流体机械, 2004,32(3):1-4, 43.

直流式气液旋流分离器分离特性试验研究

高金明¹, 吴兆龙¹, 鄂承林^{1,*}, 卢春喜^{1,*}

¹ 中国石油大学(北京)重质油全国重点实验室, 北京, 102249

*ec1510@126.com

*lcx725@sina.com

摘要正文: 悬浮床加氢裂化技术是当前提高重油、劣质油转化效率的关键技术之一。在此过程中, 重质烃类在高温高压下会以液滴的形态析出并游离在气态轻质烃中, 形成环状流或雾状流的气液两相混合流态。针对上述工艺中气液两相流无法满足实际分离精度需求的工程技术难题, 借鉴气固分离体系性能优异的气固旋流快分(SVQS)设计理念, 提出了一种内置封闭罩的共流式气液旋流分离器(C-GLVS)。通过大型冷模实验系统考察了两种不同结构GLVS的气液分离性能, 研究了进液量/浓度、旋臂喷口气速对分离性能的影响。结果表明增加了封闭罩的C-GLVS可以极大地改善GLVS中液滴夹带所造成的短路现象, 使气液分离效率有明显提升。

研究发现, 在封闭罩内实现预分离的气液两相混合物会在离心力作用下以“外液内气”的分布状态螺旋向下运动, 到达封闭罩底端后中心气流会不断地向上方排气口折返运动, 从而与液相碰撞, 发生紊流, 导致C-GLVS的分离效率出现下降。据此提出一种直流式气液旋流分离器(S-GLVS), 通过改变排气出口的方式来改善高气速下C-GLVS中气液两相在封闭罩底端发生碰撞所产生的“紊流”现象, 从进一步拓宽分离器稳定操作的气速范围。采用大型冷模实验系统考察了进液量/浓度、旋臂喷口气速对S-GLVS分离性能的影响。结果表明S-GLVS的分离效率受气速的影响较小, 其分离效率随气速的变化较为稳定, 且分离效率均值较高, 基本保持在90%以上。

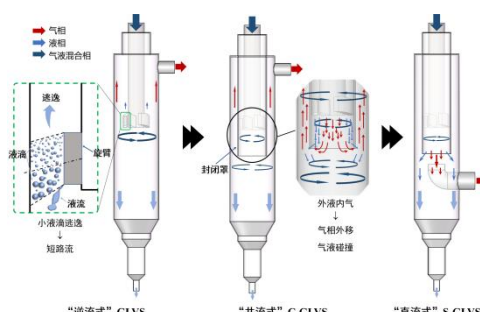


Fig. 1 The principle of GLVS, C-GLVS and S-GLVS

关键词: 气液分离; 旋流分离器; 气液共流; 分离性能

参考文献

- [1] 翟金红, 邱开辉. 悬浮床渣油加氢技术开发与进展[J]. 炼油与化工, 2022, 33(05): 13-15.
- [2] 孙凤侠, 卢春喜, 时铭显. 旋流快分器内气相流场的实验与数值模拟研究[J]. 石油大学学报(自然科学版), 2005, 03: 106-111.
- [3] 周闻, 鄂承林, 李永祺, 等. 新型多旋臂气液分离器入口旋流头的预分离特性研究[J]. 化工学报, 2021, 72(09): 4775-4785.
- [4] 高金明, 郭玉娇, 鄂承林, 等. 一种封闭罩内顺流多旋臂气液分离器的分离特性研究[J]. 化工学报, 2023, 74(07): 2957-2966.

低截面气速下气液旋流分离器性能研究

吴兆龙, 高金明, 卢春喜*, 鄂承林*

中国石油大学(北京)重质油全国重点实验室, 北京, 102249

*lcx725@sina.com

*ecl510@126.com

摘要正文: 随着全球能源结构转型的日趋严格, 原油资源重质化、劣质化态势的加剧对石油炼制技术提出了新的挑战, 开发高效的重油轻质化技术成为石油工业可持续发展的关键。而加氢裂化是一种在催化剂作用下使重油发生裂化和异构化, 分解为汽油、煤油及液化石油气等的重油轻质化加工技术。其原料适应性强、裂化产品质量高、生产过程清洁化等特点, 成为实现渣油资源清洁高效利用的关键技术手段。

在气液分离领域, 传统的分离技术主要包括重力沉降、惯性分离、过滤分离以及离心分离等几种方法。重力沉降器和惯性分离器因其结构简单、制造成本低廉以及较高的处理通量而具有一定的应用优势, 但其分离效率较低, 且所需分离时间较长。过滤式分离器则展现出卓越的分离性能, 压力降较小, 但在高气速下易发生雾沫夹带现象, 且过滤元件的清洗复杂, 维护成本高。相比之下, 离心式气液分离器凭借其连续操作、短停留时间、结构简单以及高分离效率等特点, 受到了学术界和工业界的广泛关注, 并在石油化工、能源等领域得到了广泛的应用与推广。

本研究以工业上常用的惯性+重力沉降气液分离器(结构①)为参比, 借鉴多旋臂式气液分离器(Multi-Spiral Gas-Liquid Vortex Separator, GLVS)分离效率稳定, 其关键部件旋流头的压降相对占比低, 旋流分离效率平均占比高的特点, 设计了低截面气速的气液分离器(结构②)。为了进一步消除结构②中环隙空间内上行旋转气流的扰动, 减小排气空间内气流的湍动, 增强液滴的聚结与分离, 设计了加设封闭罩的气液分离器(结构③)。

通过大型冷模实验对上述3种不同结构的气液旋流分离器在不同操作条件下的气液分离性能进行实验研究, 分析操作参数和关键结构参数对分离性能的影响, 确定分离器较优的区域。根据分离性能、实验现象分析, 发现结构③表现良好, 其在截面气速为 $0.116\text{m/s}\sim 0.332\text{m/s}$ 之间, 旋臂喷口气速为 $12.25\text{m/s}\sim 35.01\text{m/s}$ 之间进液量为 $70\text{kg/h}\sim 130\text{kg/h}$ 的操作条件下, 分离效率可稳定在 $91.1\%\sim 98.5\%$, 压降阻力系数仅为2.24。

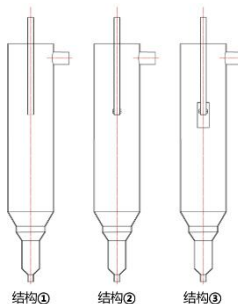


Fig. 1 Design of Gas-Liquid Vortex separator

关键词: 气液分离; 旋流分离; 低截面气速; 多旋臂; 分离性能

参考文献

- [1] 卢春喜, 周闻, 鄂承林, 等. 一种气液分离器: CN 201822012184.X [P]. 2019-10-18.
- [2] Jinming Gao, Weixing Jin, E Chenglin, et al. Flow characteristic and separation performance of co-current gas-liquid vortex separator[J], Powder Technology, 2024,443:119929.

筒体结构对轴流式旋风分离器的性能影响

卢非赣，司道润，闫子涵*，卢春喜*

中国石油大学（北京）重质油全国重点实验室，北京，102249

*yanzihan2007@163.com

*lcx725@sina.com

摘要正文：流化床反应器因其强大的工艺适应性，在MTO（甲醇制烯烃）、MTG（甲醇制汽油）、DCC（重油催化裂解）等工艺中展现出操作灵活、较高转化率等优势。同时文献也报道了流化床工艺的一些有待优化改进方面，以流化床MTO工艺为例，其产物烯烃在由密相床层向稀相空间转移时，常伴随大量催化剂颗粒的夹带，形成复杂的气固混合物。此混合物在抵达顶部旋风分离器进行分离前，受限于分离器入口高度，需以较低速度穿越较长的稀相区，这一过程中烯烃易在催化剂表面发生过度反应，直接降低了目标产物的收率。此外，副产物沉积会降低催化剂活性甚至致其失活，严重影响装置运行稳定性。鉴于此，研发一种新型高效低阻的气固分离设备，通过加快烯烃产物与催化剂分离最大限度缩短反应产物在稀相空间的停留时间可同步提升收率与催化剂使用寿命，已成为行业内亟待解决的关键技术难题。

本研究借鉴轴流式旋风管和PV型旋风分离器尺寸设计方法，在此基础上以大直径，低高径比为其尺寸特点，设计出两种不同筒体结构的新型轴流式旋风分离器，分别为“筒锥形轴流式旋风分离器”（VE型）及“直筒型轴流式旋风分离器”（HE型）。对比二者结构，HE型取消了VE型的锥段，灰斗和料腿结构，从而转变为长直筒结构。

通过大型冷模实验，选用325目硅微粉实验颗粒，探究两种不同筒体结构的新型旋风分离的分离性能，将VE型与HE型旋风分离器进行对比实验。实验结果表明，VE型和HE型的压降都与入口气速成二次函数关系。HE型在相同入口条件下的压降明显小于VE型的压降，同一条件下，压降最高可降低30%。在同一含尘浓度的分离实验状态下，二者的分离效率均随入口气速的增大而增大，在分离效率相当的情况下，HE型的压降要小于VE型的压降。

为探究二者是否符合高效低阻的设计初衷，对二者内部流场分布进行对比分析。流场分析表明，二者内部的静压沿径向从中心至边壁依次呈现低压区、中压区至高压区的分布格局，而沿轴向则展现出相对稳定的特征。二者内部的切向速度遵循典型的“兰金涡旋”模式分布，相较于VE型，HE型中的气流切向速度明显更大，这使其HE型内部流场更加稳定。在其升气管入口处，二者均存在二次流现象，相较于VE型，HE型中向内的径向速度较小，返混程度更小；向外的径向速度更大，分离效果更佳。通过优化HE型筒体结构，在低能耗下实现高效分离，为工业装置性能提升提供了新方案。

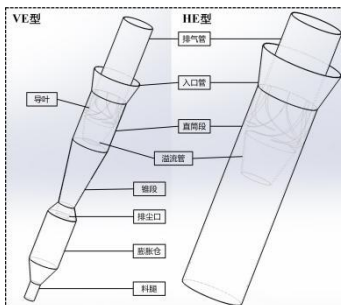


Fig. 1 Structure comparison of two different cylinder structures of spin-separation separators

关键词：轴流式旋风分离器；筒体结构；分离效率；压降；流场

参考文献

- [1] Si D, Yan Z, Lu C. Performance experiments and pressure drop prediction modelling of an energy-saving cyclone separator[J]. Fuel, 2024, 372: 132165.
- [2] 王锁芳, 赵浩宇, 柴金孟, 等. 出口结构对轴流式旋风分离器性能影响的数值模拟[J]. 安全与环境学报, 2024, 24 (02): 759-767.

基于欧拉-拉格朗日法的气液两相流大规模并行算法研究及其在多尺度低温空化流应用展望

当艺^{1*}, 明平剑^{1*}

¹ 中山大学, 先进能源学院, 深圳, 518107

*Email: xiaoy387@mail.sysu.edu.cn

摘要: 低温流体空化与空蚀现象对低温工程技术关键装备部件的安全性及可靠性有着重要影响。低温流体空化流动伴随着复杂的能量质量传递与混沌脉动, 以及从微观空泡相互作用到宏观空化的跨尺度演变, 属于强非线性、非稳态、多尺度耦合问题, 难以通过物理实验精确测量, 其跨尺度微观机理目前仍不明确, 并且缺少相应的多尺度低温空化流数值模型。目前, 基于欧拉-拉格朗日法的多尺度模型逐渐成为研究空化流动跨尺度过程的重要手段^[1,2]。在此背景下, 本报告围绕流体机械空化两相流CFD通用性关键算法, 首先简要介绍基于网格交界面拼接技术的多块动网格方法^[3]; 随后介绍耦合动网格的欧拉-拉格朗日气液两相流数值方法及其大规模并行计算研究^[4]。在此基础上, 进一步介绍了发展基于欧拉-拉格朗日法的多尺度低温空化流高保真数值模型所需要解决的关键问题。

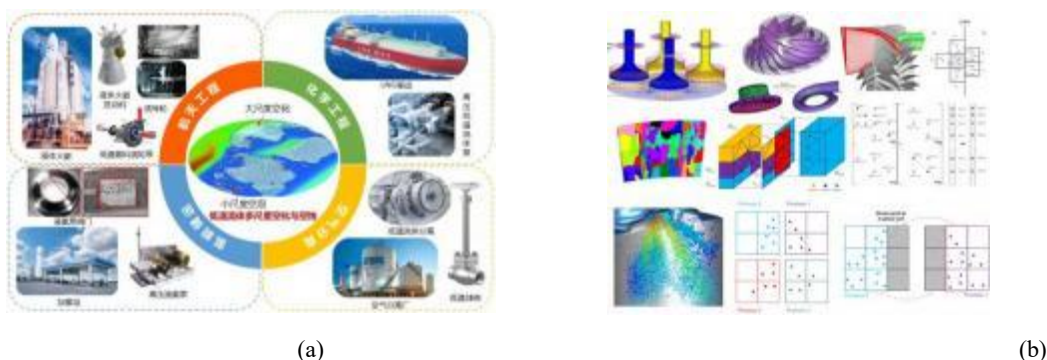


Fig. 1 Schematic of multi-scale cavitation and cavitation erosion in cryogenic engineering(a); and Euler-Lagrange method on dynamic multi-zone unstructured grids(b).

关键词: 多尺度模型; 欧拉-拉格朗日方法; 低温流体; 空化模型; 空蚀机理

参考文献

- [1]张阿漫, 李世民, 李帅, 等. 气泡动力学研究进展[J]. 力学学报, 2025, 57(1).
- [2]WEI A, YU L, QIU L, et al. Cavitation in cryogenic fluids: A critical research review[J]. Physics of Fluids, 2022, 34(10).
- [3]XIAO Y, MING P J, YANG W M. A scalable, robust parallel algorithm on handling of sliding non-conformal interfaces with an efficient supermesh method[J]. Journal of Computational Physics, 2022, 471: 111648.
- [4]XIAO Y, PENG Y, MING P J, et al. A robust parallel algorithm for Eulerian-Lagrangian method crossing sliding non-conformal interfaces[J]. Computers & Fluids, 2023, 264: 105974.

非球形颗粒的粘附疏松堆积极限研究

方筑¹, 张易阳², 李水清^{1,*}

¹清华大学能源与动力工程系, 北京, 100084

²清华大学核能与新能源技术研究院, 北京, 100084

*Email: lishuiqing@mail.tsinghua.edu.cn

摘要正文: 非球形细颗粒堆积现象广泛存在于自然界和深空探测、能源利用、化工制造等工业过程中。然而, 颗粒不规则几何形状叠加范德华粘附力, 引入了复杂的非线性效应, 现有的颗粒堆积理论无法准确预测堆积体的结构和形貌。本文采用随机弹道沉积方法, 获得了椭球体、球柱体和多聚体三种典型非球形颗粒的粘附疏松堆积 (adhesion loose packing, ALP) 极限结构。600万个颗粒的统计结果表明, 球形颗粒的堆积密度最大, 为0.1469。随着颗粒形状偏离球形, 堆积密度迅速降低并趋向于0。当长径比小于0.1或大于10时, 堆积密度与长径比间分别服从1和-2的幂律关联。对于给定的长径比, 堆积密度排序为: 球>长椭球>球柱>多聚体 (长径比小于3) 或球>球柱>长椭球>多聚体 (长径比大于3)。局部配位数与颗粒类型和几何形状完全无关, 不仅服从正态分布, 而且统计平均值均为2.001, 表明对于非球形颗粒堆积系统, 2仍是形成力学稳定堆积结构的最小配位数。球形颗粒的统计标准差最小, 为0.730。长径比趋向于0或无穷时, 统计标准差分别趋向于0.850和1.112。此外, 粘附疏松堆积体的径向分布函数主要由第一层接触颗粒贡献, 其中, 扁椭球的径向分布函数由短轴-长轴和长轴-长轴接触状态主导, 长条形颗粒由短轴-短轴和短轴-长轴接触状态主导。最后, 类比经典球形颗粒的填充理论, 结合径向分布函数, 构建了宽长径比范围下堆积密度与长径比之间的预测关联式。

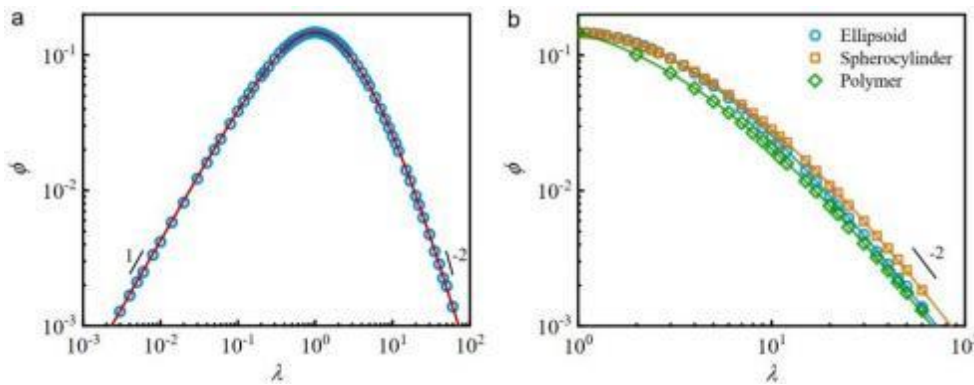


Fig. 1 The packing fraction of (a) ellipsoids (aspect ratio varying from 0.003 to 60) and (b) ellipsoids, spherocylinder and

polymers (aspect ratio varying from 1 to 60)

关键词: 非球形颗粒; 粘附疏松堆积极限; 随机弹道沉积方法; 堆积密度; 长径比

参考文献

- [1] Fang Z, Qian X, Zhang Y, et al. A new discrete element method for small adhesive non-spherical particles[J]. Journal of Computational Physics, 2024, 513: 113193.

Experimental study on liquid distribution characteristics in a trickle bed under non-uniform liquid inlet condition

Wenqian Tang^{1, &}, H Liu^{1, &}, J Li^{1, *}

1. State Key Laboratory of High-Efficiency Coal Utilization and Green Chemical Engineering, Ningxia University, No. 489, Helan Mountain West Road, Xixia District, Yinchuan City, Ningxia Hui Autonomous Region, Yinchuan, 750021

*Email: jtli@nxu.edu.cn

&These authors contributed equally

The performance of a trickle bed reactor (TBR) is largely determined by liquid distribution in the reactor. The liquid distribution characteristics under the non-uniform liquid inlet condition are investigated in a pilot-scale trickle bed reactor. It is found that the liquid distribution characteristics are mainly determined by the governing forces on the liquid. Therefore, dimensionless numbers including the Weber number (We) and the AB number (AB) are introduced to quantify the impact of governing forces. The results show that gravity is the primary governing force under the given conditions. Nevertheless, inertial and capillary forces show gradually more significant effects with enhanced gas-liquid flow rates and aspect ratios. Gravity and gas-phase inertial forces promote axial liquid diffusion, while capillary force and liquid-phase inertial forces promote radial liquid diffusion. Finally, an empirical correlation considering the governing forces is established to predict the liquid distribution uniformity.

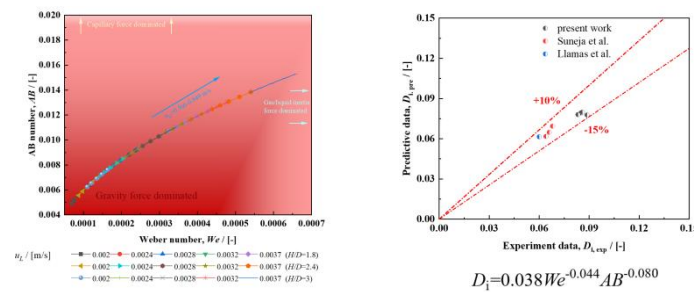


Fig. 1 Influence of different governing forces on liquid distribution **Fig. 2** Experiment analysis of liquid distribution

Keywords: trickle bed reactor; liquid distribution; non-uniform liquid inlet; governing force

References

- [1] D. Saxena, R.S. Gulia, F. Augier, Y. Haroun, V.V. Buwa, Experimental characterization of dynamics of bed-scale liquid spreading in a trickle bed, *AIChE J.* (2024).
- [2] R. Guo, B. Wei, X.Y. Lan, J.S. Gao, X.G. Shi, Flow characteristics and thickness distribution of liquid film in trickle bed reactor, *Powder Technol.* 408 (2022) 117739.
- [3] R.S. Gulia, D. Saxena, Y. Haroun, F. Augier, V.V. Buwa, Eulerian simulations of local liquid distribution in a Trickle Bed: Effects of flow rates and liquid properties, *Chem. Eng. Sci.* 282 (2023) 119212.

Study on flow characteristics and phase holdup in a slurry bubble column coupled with mild agitation

Hailong Liu¹, Q An¹, J Li^{1,*}

¹State Key Laboratory of High-Efficiency Coal Utilization and Green Chemical Engineering, Ningxia University, No. 489, Helan Mountain West Road, Xixia District, Yinchuan City, Ningxia Hui Autonomous Region, Yinchuan 750021

* jtli@nxu.edu.cn

A pilot-scale experimental system was developed to investigate mild agitation effects on bubble characteristics and phase holdup in a slurry bubble column. The results demonstrate that mild agitation enhances axial uniformity in solid holdup distribution while maintaining negligible influence on radial distribution. In the homogeneous flow regime, increased agitator speed intensifies bubble coalescence promoted by mild agitation. Conversely, agitation reduces bubble dimensions in the heterogeneous flow regime. The study reveals that mild agitation significantly affects gas holdup through bubble size modulation and trajectory alteration. An improved predictive model incorporating agitation effects was developed, demonstrating gas holdup predictions within 12.9% maximum deviation from experimental measurements.

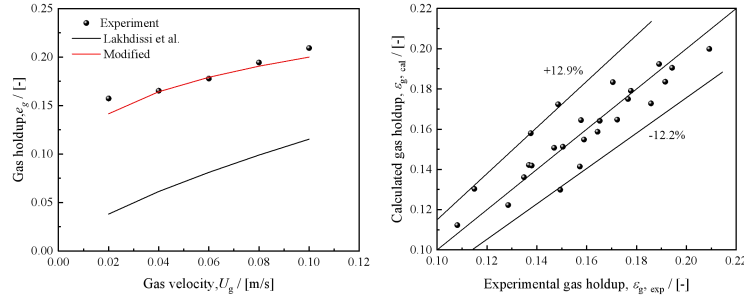


Fig. 1. Prediction of gas holdup by the modified correlation. **Fig. 2.** Predicted error of the gas holdup by modified correlation

$$\varepsilon_g = 0.017 \left(\frac{U_g}{\sqrt{gD_c}} \right)^{0.215} \left(\frac{2\pi r' n}{U_g} \right)^{0.21} \left(\frac{gD_c^3 \rho_{sl}^3}{\mu_{sl}} \right)^{0.03} \left(\frac{\rho_g}{\rho_{sl}} \right)^{0.23} \quad (1)$$

Equation. 1. The modified empirical correlation.

Keywords: Slurry bubble column; Mild agitation; Phase holdup; Bubble characteristic;

References

- [1] Li W, Zhong W. CFD simulation of hydrodynamics of gas-liquid-solid three-phase bubble column[J]. Powder Technology, 2015,286:766-788.
- [2] Sardeshpande M V, Gupta S, Ranade V V. Electrical resistance tomography for gas holdup in a gas-liquid stirred tank reactor[J]. Chemical engineering science, 2017,170:476-490.
- [3] Lakhidissi E M, Soleimani I, Guy C, *et al.* Simultaneous effect of particle size and solid concentration on the hydrodynamics of slurry bubble column reactors[J]. AIChE Journal, 2020,66(2).

高频脉动气流下的液体运动行为及气液流型演化规律

张鹏^{1,*}, 杨遥², 黄正梁², 王靖岱², 张浩淼², 孙婧元²

¹ 浙江大学宁波科创中心, 浙江宁波 315100

² 浙江大学化学工程与生物工程学院, 浙江杭州, 310027

*Email: zhangp94@zju.edu.cn

本研究基于高速摄像及液体受力分析, 揭示了高频脉动气流下液体运动行为和气液流型的演化规律。结果表明, 在高频脉动气流作用下, 振荡管内的液体以液滴和液流的形式运动, 并呈周期性波动。根据液体的形态变化特征, 单射气周期内液体的运动可分为扁平化段 (period 1)、铺展聚并段 (period 2) 和收缩分裂段 (period 3)。为揭示各运动阶段的主导力及其相对大小, 对液体进行了受力分析, 发现扁平化段的主导力为气动力, 铺展聚并段的主导力为气动力与黏性力的合力, 收缩分裂段的主导力为表面张力。同时, 扁平化段液体所受合力大小为铺展聚并段的数倍, 为收缩分裂段的数十倍。进一步地, 振荡管内的气液流型可分为分层夹带流与分层流, 两种流型最大的区别在于液滴的数量和中型液滴的占比。随着距射气口的距离 (x/L) 增加, 流型由分层夹带流逐渐转变为分层流。这是因为气动力随着 x/L 的增加而减小, 且作用位置向管道下方转移, 这导致液滴发生破碎的概率降低, 反之发生聚并的概率增加, 最终更容易形成大液滴和液流, 进而促进流型演化。最后, 通过归纳不同操作条件下的气液流型, 归纳获得了振荡管内的气液流型图。液体流量的增加将增加液滴间聚并概率, 而射气频率的增加则会降低液滴发生破碎的概率, 二者最终振荡管内都更容易形成液流/大液滴, 也更易使流型转为分层流。换言之, 高液体流量与高射气频率将更有利于分层流的形成。

关键词: 高频脉冲气流; 液体运动行为; 受力分析; 气液流型

湍流边界层内粘附性颗粒共振现象及其再悬浮模型

张易阳^{1,*}, 尤志凯¹, 方筑², 李水清²

¹清华大学核能与新能源技术研究院, 北京, 100084

²清华大学能源与动力工程系, 北京, 100084

*Email: zhangyiyang@tsinghua.edu.cn

摘要正文: 颗粒再悬浮广泛存在于自然界和工业过程中, 在空间探索、半导体制造、先进核能等多个领域受到关注。颗粒脱离壁面的过程受颗粒-壁面、颗粒-颗粒粘附, 颗粒-流体边界层相互作用等多个物理机制耦合影响。目前再悬浮问题应用较多的Rock n' Roll (RNR) 模型基于两点接触的物理假设, 所预测的固有频率接近MHz级别, 基本排除了湍流诱导共振的贡献。本文首先开展了微米级单颗粒再悬浮的高速显微观测实验, 发现了小粒径颗粒脱离壁面前湍流诱导的颗粒随机振动现象, 且其主要频率低于RNR模型预测1~2个数量级。频率与粒径存在 $(-3/2)$ 次方幂律关系。随后基于更为普遍的颗粒-壁面多次接触物理图景, 采用JKR粘附理论构建颗粒线性谐振模型, 所预测的固有频率与不同粒径 SiO_2 和 Al_2O_3 颗粒的实测结果均吻合很好, 并给出了湍流诱导颗粒共振发生的边界。在此基础上提出了新的融合湍流耦合共振的再悬浮概率模型, 与RNR再悬浮曲线相比显著改进了与历史实验数据的吻合度。最终将再悬浮概率模型与分离涡模拟方法结合, 实现了较小计算代价下大量壁面粘附颗粒再悬浮和运输的准确仿真。

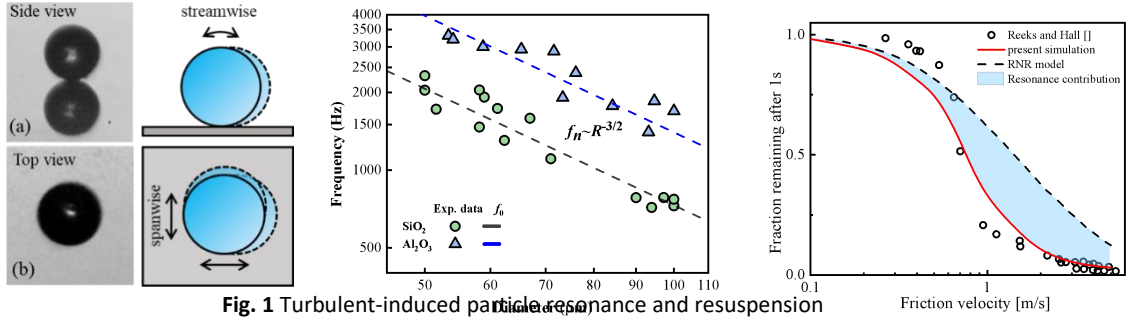


Fig. 1 Turbulent-induced particle resonance and resuspension

关键词: 颗粒再悬浮; 湍流诱导共振; 固有频率; 再悬浮概率模型

参考文献

- [1] M. Reeks, J. Reed, and D. Hall On the resuspension of small particles by a turbulent flow, J. Phys. D: Appl. Phys. 1988, 21(4):574.
- [2] P. Vainshtein, G. Ziskind, M. Fichman, and C. Gutfinger, Kinetic model of particle resuspension by drag force, Phys. Rev. Lett. 1997, 78(3):551.
- [3] B. Farzi, C. K. Vallabh, J. D. Stephens, and C. Cetinkaya, Critical rolling angle of microparticles, Appl. Phys. Lett. 2016, 108(11):111601.
- [1] F. Xu, K. F. Ren, and X. Cai Extension of geometrical-optics approximation to on-axis Gaussian beam scattering. I. By a spherical particle. Appl. Opt. 2006, 45: 4990–9.

煤间接液化工业管道弯头液固冲刷损伤规律研究

李勇超¹, 朱丽云¹, 陈昇^{2,*}

¹中国石油大学(华东)石大山能新能源学院, 山东省青岛市黄岛区长江西路66号, 266580

²中国特种设备检测研究院, 北京市朝阳区和平街西苑2号, 100029

*Email: chensheng_csei@163.com

摘要正文: 煤间接液化工业管道弯头是液固两相流冲刷损伤的高发区域, 对装置的长周期安全运行构成威胁。本文运用欧拉-拉格朗日CFD模拟方法, 结合能量最小多尺度曳力模型, 深入探究了不同空间布置、结构和操作参数下弯头的液固冲刷规律。研究发现, 水平流动弯头的下侧冲刷更为严重, 下行流动弯头的冲刷最严重位置更靠近出口端。入口流速和颗粒浓度的提升均导致冲刷影响区域扩大和最大冲刷速率增加, 但随着颗粒浓度升高, 最大冲刷速率的增长率逐渐降低。在弯曲角度方面, 45°时最大冲刷速率最小, 而90°和180°时速率相近。弯头直径的增大会使冲刷严重区域向出口端迁移, 但对最大冲刷速率的影响相对较小。高流速下, 下行管因重力加速作用冲刷速率增长更快。颗粒浓度的增加导致冲刷区域分散, 但分布形式保持不变, 颗粒间的“护盾效应”使得冲刷速率增长率下降。研究还发现, 不同空间布置的弯头在冲刷损伤方面存在显著差异。水平弯头由于重力作用, 颗粒在管道下侧聚集, 导致下侧冲刷更为严重。而下行弯头由于颗粒在重力作用下加速, 其冲刷最严重位置更靠近出口端。相比之下, 上行弯头的冲刷损伤相对较轻, 且冲刷区域分布较为均匀。此外, 操作参数对弯头冲刷的影响也十分显著。入口流速的增加会显著提高颗粒的动能, 从而加剧冲刷损伤。低流速时, 冲刷区域较大但速率较低, 而高流速时冲刷速率呈指数增长。颗粒浓度的增加则会提高冲刷区域的颗粒撞击频率, 但由于颗粒间的相互作用, 过高浓度时颗粒撞击壁面的动能降低, 导致冲刷速率增长率下降。本文的研究成果为煤间接液化装置弯头的冲刷损伤预测、监测和风险防控提供了理论支持。通过优化弯头的结构设计和操作参数, 可以有效降低冲刷损伤, 延长装置的使用寿命, 从而保障煤间接液化装置的长周期安全运行。未来的研究可以进一步探讨不同材料和涂层对弯头冲刷损伤的影响, 以开发更耐冲刷的弯头材料, 提高装置的可靠性和经济性。

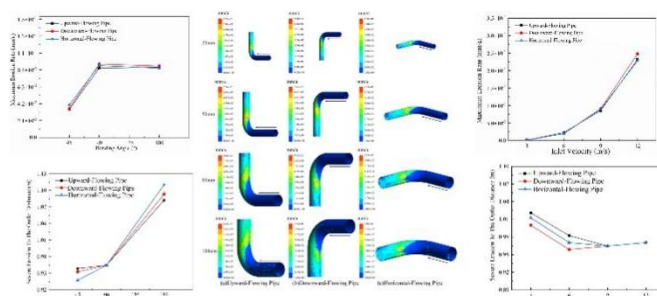


Fig. 1 Erosion distribution and most serious erosion position under different condition

关键词: 液固两相流; 冲刷; 弯头; 数值模拟

参考文献

- [1] Q.L. Zhang, Y.C. Wang, G.D. Li, X.J. Li, Y. Huang, Y.Z. Xu, Erosion-Corrosion Performance of EH36 Steel Under Sand Impacts of Different Particle Sizes, *Acta Metall. Sin.*, 59 (2023) 893-904.
- [2] P. Chen, B.C. Cui, J.C. Li, J.Q. Zheng, Y.Q. Zhao, Particle erosion under multiphase bubble flow in horizontal-vertical-upward elbows, *Powder Technology*, 397 (2022) 13.
- [3] H. Zhang, G. Li, X.Z. An, X.L. Ye, G.C. Wei, A.B. Yu, Numerical study on the erosion process of the low temperature economizer using computational fluid dynamics-discrete particle method, *Wear*, 450 (2020) 15.
- [4] H. Jin, H. Xiang, M. Wang, R. Wen, X. Liu, C. Wang, Numerical Study of Erosion Wear Characteristics in a High-pressure Black Water Angle Valve by Using CFD-VOF-DPM Method, *Journal of Applied Fluid Mechanics*, 17 (2024) 2061-2078.

液体中颗粒碰撞润滑过程的替代模型

安翼^{1,*}, 张丽华², 陈雪冬²

¹中国科学院力学研究所, 北京市海淀区北四环西路 15 号, 100190

²中国农业大学理学院, 北京市海淀区清华东路 17 号, 100083

*Email: anyi@imech.ac.cn

摘要正文: 液体中颗粒碰撞时会出现润滑过程, 由于其奇异性, 往往给全解析的CFD-DEM或实验测量带来困难。针对这一问题, 本文发展了一种基于润滑理论的新技术, 用于从有限分辨率的数据中重建完整的加速度时间序列, 并在此基础上进一步探索球与壁面垂直碰撞过程的替代模型。具体的, 我们首先使用基于四叉树/八叉树结构和嵌入边界方法的自适应网格细化, 高精度捕捉刚性碰撞过程, 并提供详细的润滑加速度数据。通过与液体中单个粒子碰撞行为的直接数值模拟的详细结果进行比较, 确认了重建的有效性。进一步将方法应用于实验数据, 成功重建了球形颗粒在液体中撞击墙面时的加速度。与方法比较发现, 该方法在颗粒碰撞测量方面提供了显著更好的准确性。进一步, 对不同工况下单颗粒的碰撞进行了批量的数值模拟, 得到了大量的润滑过程数据。通过对润滑过程的截断, 得出润滑碰撞参数与参数条件之间的关系, 基于上述数据分别利用St数和数据驱动量纲分析得到的新组合无量纲数X对等效恢复系数进行拟合, 得到等效恢复系数和等效碰撞历时的预测模型, 对比得知, 利用数据驱动量纲分析得到的无量纲数X得到的预测模型可信度高于传统St数的预测模型。将新无量纲数X应用于等效恢复系数和碰撞历时预测发现, 在有效范围内, 替代模型的预测结果误差较小, 因此可以有效替代全解析的CFD-DEM或实验测量。

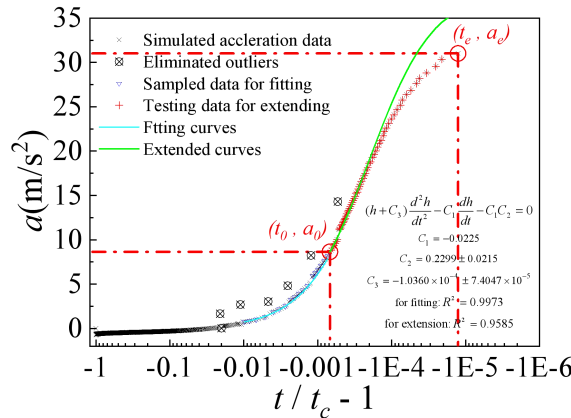


Fig. 1 Validation of data extrapolation method

关键词: 颗粒碰撞; 润滑过程; 替代模型; 数据驱动量纲分析

参考文献

- [1] B. Lambert, L. Weynans, and M. Bergmann, "Local lubrication model for spherical particles within incompressible Navier-Stokes flows," Phys. Rev. E 97(3), 033313 (2018).

其他活动

功能化水分子在多种材料中的有序分布与相互作用研究

康正中

湖北航天化学技术研究所，湖北省襄阳市樊城区清河路 58 号，邮编 441003

Email: kangzhzh2007@126.com

摘要正文：

水分子在生命的进化和材料设计中都扮演了重要角色，一方面水分子参与并促进部分生物/化学催化反应，另一方面水分子增加了固体材料的不稳定性从而对材料设计提出更高要求。水分子在材料中的宏观性质与其微观结构息息相关。受技术限制，材料中的微观水分子的分布和功能至今没有得到准确解析。此项研究综合运用量子化学、分子动力学模拟和元动力学等多种计算化学方法结合马尔可夫模型，深入研究了水分子在金属框架材料（MOFs）中的有序分布、理化性质和功能调控，并扩展到蛋白材料和固体含能材料等。（1）水分子在材料表面呈现致密有序分布。在距离金属框架材料表面1nm范围内，水分子存在多个水层结构，依次为结构水层和多个氢键水层。结构水层以化学吸附方式参与形成MOFs的缺陷结构；氢键水层以氢键等形式吸附并形成复杂的氢键网络。固体材料的活化温度可以调控水层结构和水分子分布。（2）水分子参与形成材料的理化性质，并调控客体分子的吸附分布。结构水参与形成MOFs中的Lewis酸位点和Bronsted酸位点，增加了材料酸性位点的多样性，并由此形成多重化学吸附模式。溶剂水参与和影响MOFs结构中客体分子的物理吸附模式。水层水在材料吸附位点上呈现灵活的交换跳跃运动，材料高温活化效果相关与其运动状态相关。（3）水分子深度影响材料的主客体相互作用。在非极性相互作用为主的吸附过程中，水层的物理阻隔不利于客体分子与材料的直接相互作用，在极性相互作用为主的吸附过程中，客体小分子通过挤走水分子抢夺吸附位点，之后水分子也通过氢键协助客体分子的吸附固定。（4）水分子的功能化作用在蛋白材料中也得到了呈现。在GPCR蛋白及其复合物体系中，通过对水分子的结合位置和能量进行系统研究发现了功能化水合位点，即蛋白特定结构表面存在的动力学和热力学稳定的结构水。这些功能化水合位点深度参与GPCR与信号蛋白、药物以及细胞膜等的识别结合。在此基础上开发了新的相互作用能评价方法，通过计算结合过程中水分子的能量来精确计算材料界面的相互作用。并改进了基于统计分析的小分子活性构象搜索方法，由此设计合成了全新一类的AHAS酶抑制剂，在抑制效果和抗性方面创造了新起点，有望成为新一类可商业化应用的AHAS抑制剂。（5）水分子的功能化作用也在分子层面揭示了含能材料ADN的吸湿机理，以及缺陷和杂质等促进ADN表面水化层的形成。

关键词：功能化水合位点；水层；金属框架材料；GPCR；分子模拟

参考文献

- [1] Chen, Y., Yan, Y., Chen, J., Zheng, B., Jiang, Y., Kang, Z., & Wu, J. A novel AHAS-inhibiting herbicide candidate for controlling *leptochloa chinensis*: a devastating weedy grass in rice fields. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2024 , 72(29), 16140-16151.
- [2] Hu, J., Sun, X., Kang, Z., & Cheng, J. Computational investigation of functional water molecules in GPCRs bound to G protein or arrestin. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 2023, 37(2), 91-105.
- [3] Yin, J., Kang, Z., Fu, Y., Cao, W., Wang, Y., Guan, H., ... & Kong, X. Molecular identification and quantification of defect sites in metal-organic frameworks with NMR probe molecules. *Nature Communications*, 2022, 13(1), 5112.
- [4] Fu, Y., Kang, Z., Cao, W., Yin, J., Tu, Y., Li, J., ... & Kong, X. Defect - Assisted Loading and Docking Conformations of Pharmaceuticals in Metal - Organic Frameworks. *Angewandte Chemie International Edition*, 2021, 60(14), 7719-7727.

Solid-Liquid Flow Dynamics in Deep-Sea Mining Under Ocean Current-Induced Vibrations

Zhuo Cheng¹, Bo Yin², Ke Wang^{1*}

1. College of Mechanical and Transportation Engineering, China University of Petroleum-Beijing, Beijing 102249, China

2. Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, LMFS, Beijing, 100190, China

* wang_ke@cup.edu.cn

Abstract

Deep-sea mining presents a potential solution to meet the growing demand for mineral resources, but significant challenges remain in ensuring the efficient and stable transport of minerals from the seabed to the surface. This study investigates the effects of ocean current-induced pipeline vibrations on the dynamic behavior of solid-liquid two-phase flow in hydraulic lifting systems by employing a coupled CFD-DEM approach. The influence of varying feed concentrations, transport speeds, and oscillation frequencies on particle dynamics, flow fields, slip velocity, and solid volume fraction was systematically analyzed. The results indicate that increasing feed concentration enhances axial velocity and turbulent kinetic energy, leading to stronger particle interactions but also increased system instability. Low-frequency oscillations (0.25 Hz) promote particle clustering and increased flow resistance, while moderate-frequency oscillations (0.5 Hz) enhance mixing and maintain system stability. In contrast, high-frequency oscillations (1 Hz) intensify turbulence and particle collisions, raising the risk of blockages. Sensitivity analysis reveals that feed concentration has the most significant impact on particle clustering, compared to transport speed and oscillation frequency. Additionally, an empirical formula for particle slip velocity was developed based on dimensional analysis and regression, demonstrating good agreement with both simulation data and published results. These findings provide valuable insights for optimizing the design and operation of deep-sea mining hydraulic lifting systems, aiming to enhance stability and efficiency under complex oceanic conditions.

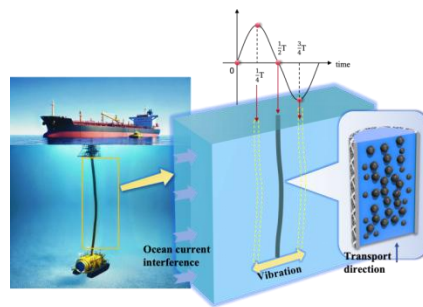


Fig. 1. Schematic diagram of numerical simulation of ocean current disturbance in deep sea mining

Keywords: Deep-sea mining, Solid-liquid two-phase flow, Ocean current-induced vibrations, Hydraulic lifting system, Particle slip velocity

References

- [1] Hu, Q., Li, Z., Zhai, X., Zheng, H., 2022. Development of Hydraulic Lifting System of Deep-Sea Mineral Resources. *Minerals* 12, 1319.
- [2] Zhu, Z., Lv, Y., Su, X., Zhang, J., Wang, R., Lu, W., Sun, J., 2023. Balance of Efficiency and Security-influence on Slurry Transport from the Diffusion of Flow Passages of a Deep-sea Mining Pump. *J. Appl. Fluid Mech.* 16, 1736.
- [3] Ge, Z., Zhao, H., Xu, N., Wang, Y., Zhu, X., Li, N., 2021. Analysis of Fluid-solid Coupling Vibration Response of Deepwater Functional Cabin in New Generation Underwater Production System. 2021 2nd International Conference on Artificial Intelligence and Information Systems (ICAIIIS), Association for Computing Machinery, New York, USA, Article 344, 1–6.
- [4] Li, F., An, C., Duan, M., Su, J., 2020. Combined damping model for dynamics and stability of a pipe conveying two-phase flow. *Ocean Eng.* 195, 106683.
- [5] Ortiz-Vidal, L.E., Mureithi, N., Rodriguez, O., 2017. Vibration response of a pipe subjected to two-phase flow: Analytical formulations and experiments. *Nucl. Eng. Des.* 313, 214-224.

AI赋能变径搅拌反应器研究

李安琪¹, 王运东², 陶长元¹, 刘作华^{1,*}

¹重庆大学化学化工学院, 重庆 401331

²清华大学化工系, 北京 100084

*Email: liuzuohua@cqu.edu.cn

摘要正文: 搅拌反应器广泛应用于化工、冶金、制药和食品等过程行业。然而, 流场中的介尺度隔离涡和中心涡耗散结构严重限制了反应器内的传质、传热以及化学反应速率。因此, 深入研究搅拌反应器中耗散结构的特征及其非线性动力学行为对于强化流体混沌混合至关重要。研究受“揉面团”过程的启发, 提出“挤压诱发混沌”的过程强化概念, 利用平面激光诱导荧光 (PLIF) 和计算流体力学耦合离散颗粒模拟 (CFD-DPM) 方法, 研发了一种变径搅拌反应器 (即椭圆/矩形搅拌反应器, DTST反应器)。结果表明, DTST反应器能够有效消除层流流场中的介尺度隔离涡和湍流流场中的介尺度中心涡。此外, 相比于圆柱形搅拌反应器, 在层流状态下, DTST反应器内面积覆盖率提高约1.8倍, 混合时间缩短约5倍; 在湍流状态下, DTST反应器气体卷吸能力大大提高。进一步, 为了便于从业人员高效操作和设备选型, 研究利用机器学习建立了不同设备参数和操作参数下流型的智能分类模型, 人工神经网络 (ANN) 分类模型的预测准确率高达97.6%。

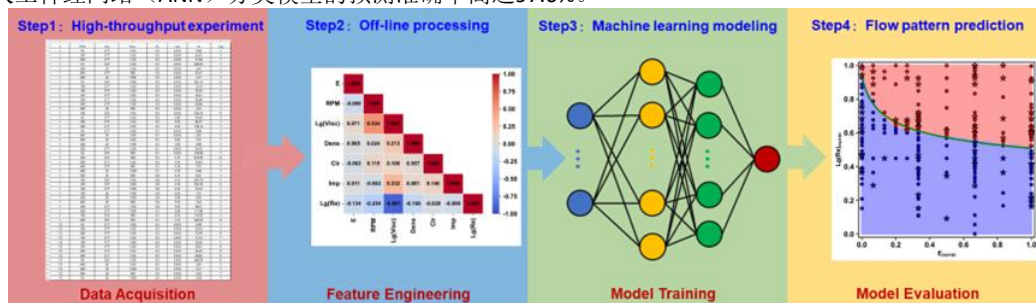


Fig. 1 Machine learning classification for the flow patterns in DTST reactors.

关键词: 变径搅拌槽反应器; 混沌混合; 介尺度涡; 机器学习; 过程强化

参考文献

- [1] A. Q. Li, Y. Yao, X. Y. Tang, P. Q. Liu, Q. Zhang, Q. Li, P. Li, F. Zhang, Y. D. Wang, C. Y. Tao, Z. H. Liu. Experimental and computational investigation of chaotic advection mixing in laminar rectangular stirred tanks. *Chem. Eng. J.* 2024, 485: 149956.
- [2] A. Q. Li, Y. Yao, X. Zhang, Y. Wan, P. Li, Y. D. Wang, C. Y. Tao, Z. H. Liu. Using CFD and machine learning to explore chaotic mixing in laminar diameter-transformed stirred tanks. *Chem. Eng. J.* 2024, 499:156201.

鼓泡流化床中颗粒流体两相流动和传热数值模拟研究

郭鑫垚¹, 刘国栋^{1,*}

¹ 哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 南岗区西大直街 92 号, 哈尔滨, 150001
*gdliu@hit.edu.cn

摘要正文:

鼓泡流化床因其优异的传热和传质性能, 在化工、能源等领域得到了广泛应用。准确预测鼓泡床内的气泡动力学行为对于深入理解颗粒的流动特性及传热机理至关重要。本研究采用了一种综合应力模型, 该模型同时考虑了颗粒间摩擦作用和间隙流体效应。通过与 Patil 等人[1]的鼓泡床实验数据及 CFD-DEM 模拟结果[1]对比, 验证了该模型能够准确捕捉实验中的气泡流动特性, 并且相比经典的 Agrawal 应力模型, 与实验吻合程度更好。此外, 在结合传热模型后, 该模型还能正确预测颗粒温度的时间演化过程, 进一步证明了其在气固两相流模拟中的适用性。

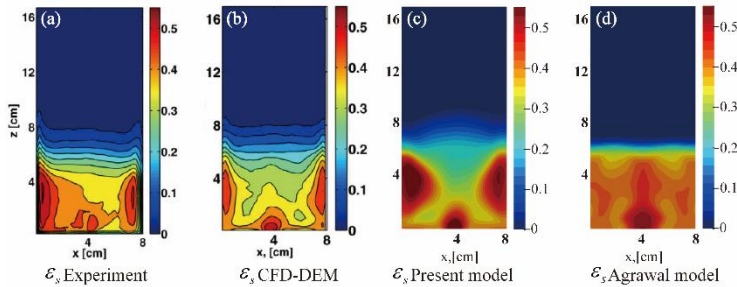


Fig. 1 Comparison of simulated and experimental time-averaged particle concentration distributions.

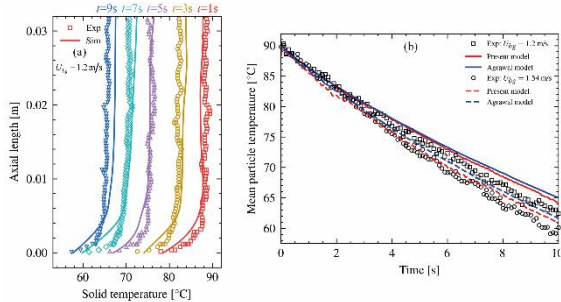


Fig. 2 Comparison of experimental and simulation results by Patil et al. [1] : (a) Distribution of particle temperature along the height and its temporal evolution; (b) Temporal evolution of particle temperature within 10 seconds.

关键词: 鼓泡床; 应力模型; 间隙流体

参考文献

- [1] A. Patil, E. Peters, J. Kuipers, Comparison of CFD-DEM heat transfer simulations with infrared/visual measurements, Chemical Engineering Journal, 277 (2015) 388-401.

高速液滴跨尺度雾化分散行为的工程计算方法研究

辛大钧¹, 薛琨^{1,*}, ...

¹北京理工大学, 北京市 海淀区 100081

*Email: 645721752@qq.com

摘要正文: 本文围绕超燃冲压发动机研制中液滴雾化分散精准控制的工程需求, 开展了液态燃料液滴高速雾化分散行为的跨尺度研究。通过激波管实验系统研究了液滴在韦伯数 (We) 28-4853范围内的变形破碎特性, 建立了完整的动力学模型体系。实验发现液滴变形阶段的无量纲横向变形量 (d_c/d_0) 遵循的二次方增长规律, 最大变形量 ($d_{c,max}/d_0$) 随 We 增加从2.1单调递减至1.5; 破碎时间参数呈现显著的非线性特征: 破碎开始时间 ($\tau_{b,i}$) 在 $We<250$ 时急剧减小, $We\geq 250$ 后趋于稳定; 质量衰减过程表现为三阶段"S"形曲线, 通过Logistic函数实现了 $We=250-4853$ 范围内的统一描述。基于离散元方法 (DEM) 发展了跨尺度计算框架, 创新性地采用虚拟母液滴和特征粒子群方法, 将4个代表性液滴扩展为能反映完整统计特性的粒子系统, 在保证计算效率的同时准确模拟了云团轮廓演化 (平均误差7.5%) 和浓度分布 (相似度94%)。数值验证表明, 该方法特别适用于剪切 ($We>250$) 和灾难性破碎 ($We>1000$) 模式, 为燃料雾化控制和发动机优化设计提供了有效的工程计算工具。

关键词: 液滴破碎, 离散元, 激波管, 跨尺度计算

参考文献

- [1] T. Inoue, R. Yamazaki, S.-I. Inutsuka. Turbulence and magnetic field amplification in supernova remnants: interactions between a strong shock wave and multiphase interstellar medium [J]. The Astrophysical Journal, 2009, 695(2): 825-33.
- [2] C. C. Kuranz, H. S. Park, C. M. Huntington, et al. How high energy fluxes may affect Rayleigh-Taylor instability growth in young supernova remnants [J]. nature communications, 2018, 9(1): 1564.
- [3] H. Mo, F.-S. Lien, F. Zhang, et al. A mesoscale study on explosively dispersed granular material using direct simulation [J]. Journal of Applied Physics, 2019, 125(21): 214302.
- [4] D. R. Guildenbecher, C. López-Rivera, P. E. Sojka. Secondary atomization [J]. Experiments in Fluids, 2009, 46(3): 371-402.
- [5] T. G. Theofanous. Aerobreakup of Newtonian and Viscoelastic Liquids [J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2011, 43(1): 661-90.
- [6] P. J. O'Rourke, A. A. Amsden. The Tab Method for Numerical Calculation of Spray Droplet Breakup [Z]. 1987 SAE International Fall Fuels and Lubricants Meeting and Exhibition. SAE International. 1987.
- [7] D. M. Snider, P. J. O'Rourke, M. J. Andrews. An incompressible two-dimensional multiphase particle-in-cell model for dense particle flows [R]. United States: Los Alamos National Lab. (LANL), Los Alamos, NM (United States), 1997.
- [8] V. Duke-Walker, W. C. Maxon, S. R. Almuhna, et al. Evaporation and breakup effects in the shock-driven multiphase instability [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2021, 908: A13.
- [9] I. M. Syahdan. On the Mach number Effects on Droplet Breakup in Laminar Flow [D]; University of Washington, 2015.
- [10] Z. Wang, T. Hopfes, M. Giglmaier, et al. Effect of Mach number on droplet aerobreakup in shear stripping regime [J]. Experiments in Fluids, 2020, 61(9).
- [11] T. Kamiya, M. Asahara, T. Yada, et al. Study on characteristics of fragment size distribution generated via droplet breakup by high-speed gas flow [J]. Physics of Fluids, 2022, 34(1): 012118.
- [12] K. Balakrishnan. Explosion-driven Rayleigh-Taylor instability in gas-particle mixtures [J]. Physics of Fluids, 2014, 26(4): 043303.
- [13] H. Mo, F.-S. Lien, F. Zhang, et al. A numerical framework for the direct simulation of dense particulate flow under explosive dispersal [J]. Shock Waves, 2018, 28(3): 559-77.

墙报摘要

非球颗粒混合行为的颗粒追踪测速实验和离散元模拟研究

李锐¹, 纪德龙¹, 蒋兆晨^{1,*} Andreas Bueck², 何志霞¹

¹江苏大学, 能源研究院, 江苏省镇江市, 212000

²德国埃尔朗根纽伦堡大学, 颗粒技术所, 96114

*Email: zhaochenjiang@ujs.edu.cn

摘要:

带挡板的旋转鼓是工业中常用的颗粒反应器, 被广泛应用于颗粒混合、干燥、包覆和化学反应^[1]。颗粒形状对颗粒运动轨迹和混合行为的实验和数值模拟研究对于优化颗粒处理工艺、提高生产效率具有重要的意义。本文基于 Mask R CNN 颗粒分离算法优化, 利用颗粒追踪测速 (PTV) 对带挡板可视化旋转鼓中两类非球颗粒的运动进行捕捉。综合基于超椭球离散元模型 (DEM) 模拟, 对比分析了不同转速下 (10 rpm、15 rpm 和 20 rpm) 颗粒的混合程度和混合速率。研究表明, Mask R-CNN 能够快速和准确地分离不同种类颗粒的中心位置和轮廓信息。如图 1 所示, 对于黄色片状颗粒, PTV 实验和 DEM 模拟获得的不同朝向 (T1, T2) 的颗粒数目比例基本相同; 而对于白色杆状颗粒 (R1, R2), DEM 模拟过高的估计了 R2 朝向颗粒的比例。总体上, PTV 实验结果与离散元模拟预测的片状和杆状颗粒的比例是一致的, 验证了超椭球模型的准确性。基于 Lacy 混合指标, 本文开发了表征非球颗粒混合的定量指标^[2]。实验表明, 在 15 rpm 转速下, 经过 10 s, 两类颗粒可以从最初的左右分离达到稳定混合, 平均混合度 98%, 波动约为 1.2%。DEM 模拟结果略高于 PTV 实验。

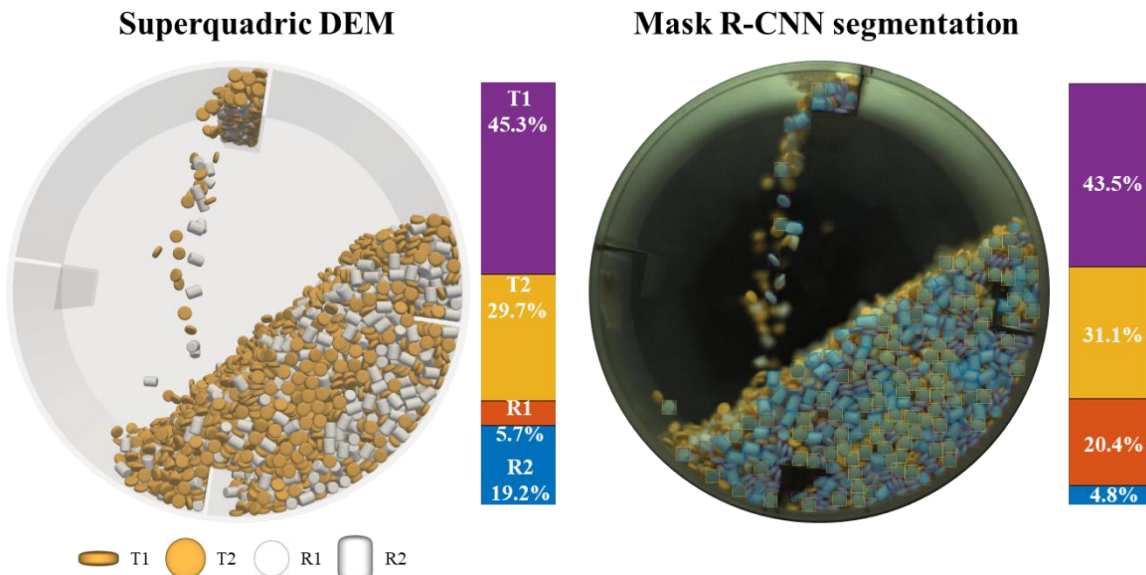


Fig. 1 Comparison between DEM simulation and Mask R CNN segmentation

关键词: 非球形颗粒; Mask R CNN; 超椭球; 旋转鼓; 混合

参考文献

- [1] Zhang L, Jiang Z, Mellmann J, et al. Influence of the number of flights on the dilute phase ratio in flighted rotating drums by PTV measurements and DEM simulations[J]. Particuology, 2021, 56: 171-182.
[2] Füvesi B, Goniva C, Luding S, et al. Mixing indices in up-scaled simulations[J]. Powder Technology, 2025, 456: 120775.

第三分论坛
低碳催化前沿论坛

邀请报告

微波催化分解 NO 脱硝、分解 H₂S 制氢、丙烷脱氢制丙烯

徐文涛*, 周继承

湘潭大学化工学院, 湖南湘潭, 411105

*Email: wentaoxu@xtu.edu.cn

摘要正文:

直接催化分解 NO 是最理想的脱硝方法, 但存在反应温度高、脱硝率低和氧阻碍等难题。直接分解 H₂S 同时回收氢和硫磺以取代克劳斯工艺, 是 H₂S 资源高值化转化的理想途径, 但存在分解温度高和严重热力学平衡限制等难题 (如: 1000° C 时平衡转化率仅为 20%)。CO₂ 氧化丙烷脱氢制丙烯具有提高脱氢平衡转化率和资源化利用 CO₂ 等优势, 是丙烯生产的理想路线之一, 但存在本征活性低、反应温度高、丙烯选择性差的难题。

针对上述难题, 本团队开展了系列气-固相微波催化研究^[1-5]。提出了微波催化高效直接分解 NO 脱硝新方法, 研发了系列廉价高效的微波催化剂, 可实现 250° C 低温时 NO 转化率高达 99.9 %。进一步, 提出了吸附-微波催化高效直接分解 NO 脱硝新方法, 研发了廉价高效吸附催化双功能材料, 实现了低能耗吸附-微波催化直接分解 NO, 其转化率可达 99.5%, 且具有良好的抗 SO₂、CO₂、H₂O 性能。提出了微波催化高效直接分解硫化氢制氢和硫磺新方法, 研发了系列高效微波催化剂, 实现了 650° C 时 H₂S 转化率高达 99.9%, 远超过热催化下的平衡转化率 (11%)。提出了微波催化 CO₂ 氧化丙烷高效脱氢新方法, 研发了系列绿色廉价高效的微波催化剂, 实现了绿色廉价催化剂上 550° C 时丙烷转化率和丙烯选择性高达 93.4% 和 69.8%, 远高于热催化下的 19.7% 和 95.3%。基于以上微波催化反应体系, 发现了微波选择催化效应, 揭示了微波直接催化效应。可为低能耗绿色深度脱硝提供、H₂S 资源高值化转化、低碳烷烃和 CO₂ 资源高值化利用提供新途径。相关成果获湖南省自然科学 2 等奖等荣誉。



图1 微波催化直接分解NO脱硝、微波催化分解H₂S制氢、CO₂氧化丙烷脱氢示意图

关键词: 微波催化; NO 分解; H₂S 分解; CO₂ 氧化丙烷脱氢; 微波催化效应

参考文献

- [1] J. Chen, W. Xu, J. Zhu, J. Zhou, *Appl. Catal. B*: 2020, 268: 118454.
- [2] F. Nie, X. Liu, H. Sun, J. Zhou, W. Xu, *Appl. Catal. B*: 2024, 357, 124332.
- [3] Z. Ma, W. Xu, Q. Wang, Q. Zhou, J. Zhou, *Chem. Eng. J.* 2022, 435: 135081.
- [4] C. Yu, Y. Yi, J. Zhou, W. Xu, *Inorg. Chem. Front.* 2023, 10: 3808.
- [5] Z. Ma, Q. Zhou, X. Liu, J. Zhou, W. Xu, *Chem. Eng. J.* 2024, 490: 151752.

钙钛矿型载氧体修饰策略、氧物种传输调控及催化烷烃化学链氧化裂解制烯烃研究¹

郝芳*, 陈磊

湘潭大学, 湖南省湘潭市, 411105

*Email: haofang.happy@163.com

摘要正文: 化学链氧化裂解是一种非常有前景的石脑油和短链烷烃裂解生产烯烃的技术。在这项研究中, 我们设计使用钙钛矿型载氧体设计修饰, 研究了无气态氧共进料的情况下的化学链氧化裂解新方法。结果表明, 载氧体的设计和修饰可增强烷烃的催化脱氢同时实现选择性烧氢, 修饰改性后的钙钛矿型氧载体表现出较高的反应活性、选择性和稳定性。研究发现, CaMnO_3 和 LaFeO_3 型钙钛矿的A、B位修饰和 Na_2WO_4 、 Li_2CO_3 等修饰可有效修饰载氧体的供氧行为, 设计合成的氧载体中的选择性晶格氧可显著降低 CO_2 的生成, 并且为石脑油和烷烃活化提供了催化表面, 修饰后的钙钛矿载氧体具有良好的结构稳定性和可再生性, 载氧体为氧化还原循环提供选择性高的晶格氧。这些发现为使用双功能(催化-储氧)氧载体通过氧化裂解将烷烃或石脑油转化为轻质烯烃提供了有效的方法。它还为应用于碳氢化合物高值化利用中的化学链/氧化还原技术的催化剂功能化设计提供了新思路。

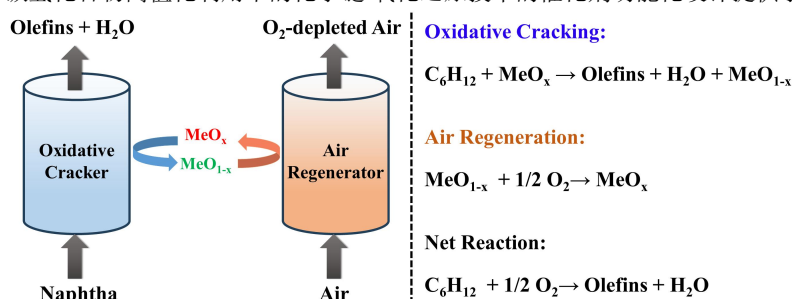


Fig. 1 A block flow diagram for the redox oxidative cracking (ROC) of naphtha

关键词: 钙钛矿载氧体修饰; 晶格氧物种传输调控、低碳烯烃制备; 烷烃化学链氧化裂解

参考文献

- [1] Hao, F.; Chen, L.; Jinshan Chi; Li Chen; Wei Xiong; Yunfei Gao. *J. Catal.* **2024**, *439*, 115727.
- [2] Hao, F.; Chen, L.; Zhang F.; Chi J.; Xiong W.; Liu, P. *Chem. Eng. J.* **2023**, *477*: 146894.
- [3] Hao, F.; Gao, Y.; Liu, J.; Dudek, R. B.; Neal, L.; Wang S.; Liu, P.; Li, F. *Chem. Eng. J.* **2021**, *409*: 128912.
- [4] Hao, F.; Gao, Y.; Neal, L. M.; Dudek, R. B.; Li, F. *J. Catal.* **2020**, *385*: 213.

甲烷热催化裂解高效制氢与高值碳研究

李双德^{1*}，曹梦杰^{1,2}，陈运法^{1,2*}

¹中国科学院过程工程研究所，北京，100190

²中国科学院大学，北京，100049

*Email: sdli@ipe.ac.cn

摘要：针对甲烷惰性强、难活化以及催化剂热烧结、积碳等瓶颈问题，研发热催化裂解甲烷制氢气和 high value carbon 技术，实现甲烷绿色化转化利用，契合国家双碳和氢能发展战略。水滑石，层状双氢氧化物 (Layered Double Hydroxides, LDHs) 是一类天然存在和人工合成的材料，通过前驱体合成过程，可以调节 LDHs 衍层板金属阳离子组成和配比。在合适温度下煅烧，LDHs 经过拓扑转变形成的混合氧化物催化剂具有高度分散的 M^{2+} 和 M^{3+} 金属氧化物。利用水滑石 LDHs 限域锚定与掺杂锚定策略以及两者之间的协同作用期望能够抑制 Ni 颗粒高温抗烧结抗积碳。研究发现了限域与掺杂对 Ni 颗粒尺寸的锚固现象，并进一步总结了 Ni 颗粒尺寸对甲烷转化率和提高氢气产率与反应稳定性的规律。引入 Cr、V 等元素，能够显著提高甲烷热催化裂解的低温转化率和长期稳定性。该技术为高效稳定甲烷热催化裂解制氢与高值碳调控提供了研究思路。

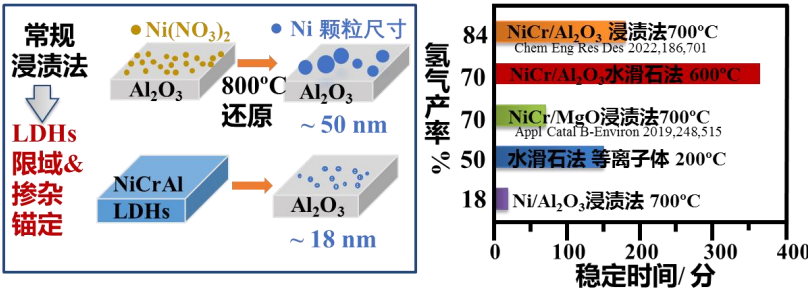


Fig. 1 Schematic of LDHs derived Ni/Al₂O₃ and H₂ yield with stability

关键词： 甲烷制氢；热催化；水滑石；限域锚定

参考文献

- [1] M. Cao, S. Li, S. Wang, W. Xu, X. Zhou, G. Ma, X. Wang, L. Nie, and Y. Chen. Designing highly active hydrotalcite-derived NiAl catalysts for methane cracking to H₂. *Fuel* 2024, 375: 132606.
- [2] M. Cao, S. Li, S. Wang, W. Xu, X. Zhou, G. Ma, X. Wang, L. Nie, and Y. Chen. Highly stable hydrotalcite-derived NiCrAl catalyst for methane cracking and directly application for electromagnetic wave absorption. *Fuel* 2025, 379, 133128

碳基能源催化材料设计与应用探索

齐伟^{1,*}

¹ 中国科学院金属研究所, 沈阳市沈河区文化路 72 号, 邮编: 110016

*Email: wqi@imr.ac.cn

摘要正文: 随着环境保护、可持续发展以及“碳达峰”和“碳中和”国家战略的迫切需求, 利用纳米碳材料实现传统金属催化材料的替代或高效利用是现代化学化工基础研究的热点和难点课题之一^[1]。本次汇报将重点介绍报告人研究团队近期在纳米碳催化氧气电化学还原^[2]以及有机物电化学氧化³等典型电催化反应过程中的应用, 以及碳基催化材料设计制备方面的最新研究进展。具体的研究工作思路是从认识催化反应活性中心、原位谱学表征、反应动力学和机理等涉及碳催化物理化学本质核心问题出发, 理解碳基催化剂结构-功能关系, 并以此作为依据指导新型高效碳基催化材料的设计制备。期望能够通过这一系列研究工作建立碳催化基础理论体系, 为碳基能源催化材料的产业应用奠定坚实的理论基础。更多进展请见课题组网站: https://www.x-mol.com/groups/IMR-Qi_Wei。

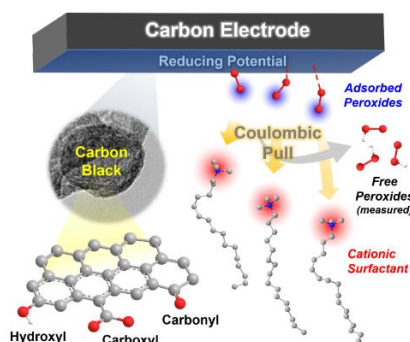


Fig. 1 Figure title in English

关键词: 碳催化材料; 过氧化氢电合成; 生物质电化学氧化; 活性中心

参考文献

- [1] W. He, X. Li, et al., W. Qi, Redox Concomitant Formation Method for Fabrication of Cu(I)-MOF/Polymer Composites with Antifouling Properties. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63, e202411539.
- [2] K. Wu, X. Lu, et al., W. Qi, Highly Selective Hydrogen Peroxide Electrosynthesis on Carbon: In-Situ Interface Engineering with Surfactants. *Chem.* 2020, 6, 1443.
- [3] X. Lu, K. Qi, et al., W. Qi, Selective Electrooxidation of 5-hydroxymethylfurfural to 5-formyl-furan-2-formic acid on Non-metallic Polyaniline Catalysts: Structure-function Relationships. *Chemical Science.* 2024, 15, 11043-11052.

口头报告

电催化 CO₂ 还原 Cu 基催化剂表界面性质研究

高文强

济南大学 化学化工学院 前沿交叉科学研究院, 山东 济南 250022

利用可再生电力能源催化还原二氧化碳 (CO₂) 制备高附加值化学品被认为是实现人工碳循环的理想途径, 而对催化剂和表面反应的认识是高活性和选择性 CO₂RR 电催化剂设计的基础。目前 Cu 仍然是性能最优的 CO₂RR 向多碳产物 (C₂₊) 转化的金属催化剂, 能在可观的电流密度下生成 C₂₊产物。Cu 表面的 CO₂RR 通常被认为经过两个串联反应过程完成: (1) CO₂ 还原为 CO, (2) CO 进一步还原得到 C₂₊产物。但是上述两步反应是否在 Cu 表面同一活性位点完成仍不清楚。此外, CO 吸附能被广泛认为是 Cu 基催化剂性能的关键描述符, 但仍缺乏实验验证。针对上述问题, 我们通过原位表面增强红外光谱结合同位素标记, 首次证实了 Cu 基催化剂表面至少存在两种不同类型的反应位点, 其中一种位点(CuCO₂)能够促进 CO₂ 到 CO 的转化, 另一种位点(CuCO)有利于 CO 进一步还原为 C₂₊产物。同时, 发现 CO 吸附能虽然可以定性的描述 CO₂RR 性能, 但在预测 C₂₊产物的选择性方面还有欠缺。通过 ¹³CO/¹²CO₂ 共电解实验, 我们发现 CuCO₂ 与 CuCO 的位点比例是另外一个 CO₂RR 性能的描述符。

低碳烷烃催化氧化制含氧化学品

殷海滨¹, 蒲正天¹, 马新龙^{1*}, 曾杰^{1,2*}

¹合肥微尺度物质科学国家研究中心, 中国科学技术大学, 230026

²化学与化工学院, 安徽工业大学, 243002

*Email: maxl18@ustc.edu.cn; zengj@ustc.edu.cn

摘要正文: 低碳烷烃分子的碳氢键类型较为单一且具有较大惰性, 将其活化与转化需要在苛刻条件下进行, 极大地限制了页岩气的绿色资源化利用。通过多相催化将碳氢键活化与氧化, 利用其在热力学方面的优势, 能够将低碳烷烃有效转化为高附加值含氧化品, 逐渐发展成为低碳烷烃催化转化的重要途径。尽管如此, 低碳烷烃的催化氧化依然面临过度氧化的挑战。一方面, 在高温条件下进行低碳烷烃脱氢过程极易发生过度活化诱导的碳碳裂解与积碳失活。另一方面, 由于催化氧化的含氧产物具备较低碳烷烃更易活化的碳氢键, 过度氧化为二氧化碳成为抑制低碳烷烃催化氧化的关键因素^[1]。鉴于此, 我们利用稀释的孤立活性位点与载体间协同作用, 通过串联催化过程实现了丙烷碳氢键的活化, 并直接转化为含氧化品丙酮。根据勒夏特列原理构建丙烷的串联催化路径, 不仅能够在较为温和的条件下提高丙烷转化率, 还较大幅度地抑制了丙烷积碳与碳碳裂解。进一步通过调整碳链长度, 能够实现C₃-C₈的烷烃转化为对应的酮类, 体现了该策略在烷烃碳氢活化与转化为含氧化品的可靠性和通用性^[2] (Editors' highlight)。

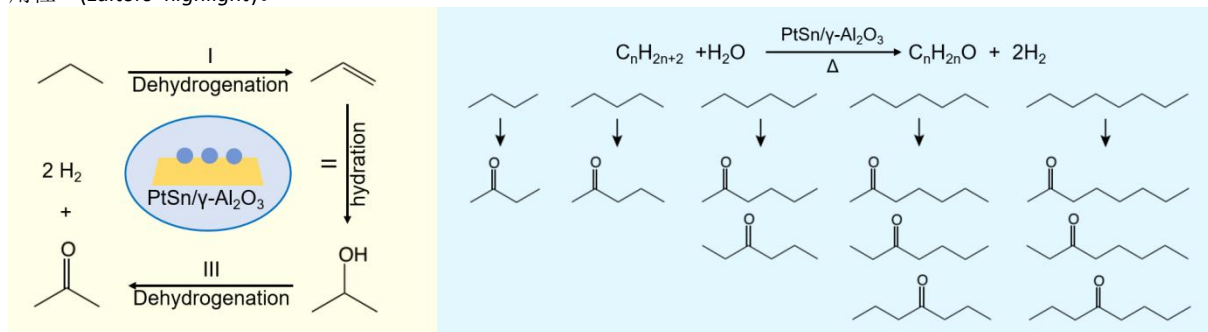


Fig. 1 Schematic illustration of three consecutive steps for acetone synthesis via propane wet reforming and the generality of the wet reforming strategy for ketone synthesis.

关键词: 低碳烷烃; 部分氧化; 串联催化

参考文献

- [1] Y. Wang, P. Hu, *et al.* C-H bond activation in light alkanes: a theoretical perspective. *Chem. Soc. Rev.* **2021**, 50: 4299–4358.
- [2] X. Ma, H. Yin, *et al.* Propane wet reforming over PtSn nanoparticles on γ -Al₂O₃ for acetone synthesis. *Nat. Commun.* **2024**, 15: 8470.

Catalytic oxidation of light alkanes to oxygenated chemicals

H. Yin¹, Z. Pu¹, X. Ma^{1*}, J. Zeng^{1,2*}

¹Hefei National Research Center for Physical Sciences at the Microscale, University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026, P. R. China

²School of Chemistry & Chemical Engineering, Anhui University of Technology, Ma'anshan, Anhui 243002, P. R. China.

* Email: maxl18@ustc.edu.cn; zengj@ustc.edu.cn

Keywords: light alkanes; catalytic oxidation; tandem catalysis

References

- [1] Y. Wang, P. Hu, *et al.* C-H bond activation in light alkanes: a theoretical perspective. *Chem. Soc. Rev.* **2021**, 50: 4299–4358.
- [2] X. Ma, H. Yin, *et al.* Propane wet reforming over PtSn nanoparticles on γ -Al₂O₃ for acetone synthesis. *Nat. Commun.* **2024**, 15: 8470.

CO₂加氢芳构化催化体系构筑

张晨曦^{1,2}

¹ 清华大学化学工程系, 北京, 100084

² 鄂尔多斯实验室, 内蒙古鄂尔多斯, 017010

*Email: cxzhang@mail.tsinghua.edu.cn

摘要正文:

在催化领域, CO₂加氢芳构化反应对实现碳减排与高附加值芳烃生产意义重大, 却面临选择性、活性与稳定性难以兼顾的难题。为达成CO₂加氢高效芳构化, 我们着力构建高性能催化体系。鉴于反应对产物高选择性的严格要求, 引入ZSM-5分子筛。但ZSM-5分子筛直孔道晶体学孔径(5.3 Å×5.6 Å)小于苯分子动力学直径(5.85 Å), 却能高效催化苯生成, 这一“孔径悖论”挑战了传统刚性孔道理论。借助原位扫描透射显微技术, 我们首次在原子尺度捕捉到ZSM-5分子筛直孔道与反应分子的动态交互过程。研究发现, 分子筛骨架依靠Si-O-Si柔性铰链, 将键角从135°调节至153°, 直孔道长轴拉伸15%, 形成9.73 Å的瞬时动态有效孔径; 同时, 反应分子调整取向, 最小临界截面尺寸缩至6.7 Å, 实现主客体协同形变, 突破传统孔径限制。基于此, 我们提出“动态有效孔径”概念, 构建动态适应扩散模型, 修正传统分子筛分理论, 并揭示了分子筛局部形变自补偿机制以维持晶体结构稳定, 确立了动态适应扩散理论, 为理解反应过程提供全新范式。在提升催化体系活性和稳定性方面, 我们创新性设计LaFeO₃钙钛矿。La³⁺大离子半径(1.36 Å)使得LaFeO₃钙钛矿中Fe-Fe键距拉长至3.9 Å, 远超Fe₃C₂形成所需的2.8 Å临界间距, 有效抑制Fe原子迁移聚集与碳化物生成; [FeO₆]八面体框架构建起三维阻隔网络, 阻断Fe纳米颗粒烧结失活路径; La元素空4f轨道通过强晶体场效应稳定[FeO₆]配位结构, 降低Fe的3d轨道态密度, 削弱Fe-C键作用, 使Fe氧化态稳定性提高40%; LaFeO₃钙钛矿富集的氧空位, 助力CO₂加氢芳构化中间体定向转化。最终构建的LaFeO₃钙钛矿/ZSM-5分子筛耦合催化体系, 在350°C、3MPa条件下, CO₂单程转化率超60%, 芳烃选择性达85%, 连续运行1000小时芳烃产率衰减率仅0.021%/h, 相比传统Fe基催化剂寿命提升15倍以上。我们首次揭示其协同抗碳化机制, 成功攻克了“不可能三角”难题。

关键词: CO₂加氢; 钙钛矿; 分子筛; 耦合催化剂

参考文献

- [1] H. Xiong, Z. Q. Liu, X. Chen, H. Q. Wang, W. Z. Qian, C. X. Zhang, A. Zheng, F. Wei*, In situ imaging of the sorption-induced sub-cell topologic flexibility of a rigid zeolite framework, *Science* 2022, 376, 491-496.
- [2] G. Tian, Z. W. Li, C. X. Zhang, X. Y. Liu, X. Y. Fan, K. Shen, H. B. Meng, N. Wang, H. Xiong, M. Y. Zhao, X. Y. Liang, L. Q. Luo, L. Zhang, B. H. Yan, X. Chen, H.-J. Peng, F. Wei, Upgrading CO₂ to sustainable aromatics via perovskite-mediated tandem catalysis, *Nat. Commun.* 2024, 15, 3037.
- [3] G. Tian, X. Y. Liu, C. X. Zhang, X. Y. Fan, H. Xiong, X. Chen, Z. W. Li, B. H. Yan, L. Zhang, N. Wang, H.-J. Peng, F. Wei, Accelerating syngas-to-aromatic conversion via spontaneously monodispersed Fe in ZnCr₂O₄ spinel, *Nat. Commun.* 2022, 13, 5567.
- [4] F. Lu, L. P. Li, Y. X. Yu, G. Tian, H. Xiong, J. Miao, F. Wei, C. X. Zhang. Road to Carbon-Neutral Aviation: One-Step Conversion of CO₂ to Sustainable Aviation Fuels. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2025, 64: 3118–3135.
- [5] G. Tian, X. Y. Liang, H. Xiong, C. X. Zhang, F. Wei, A perspective of CO_x conversion to aromatics, *EES Catal.* 2023, 1, 677–686.
- [6] M. T. Arslan, G. Tian, B. Ali, C. X. Zhang, H. Xiong, Z. W. Li, L. Q. Luo, X. Chen, F. Wei, Highly Selective Conversion of CO₂ or CO into Precursors for Kerosene-Based Aviation Fuel via an Aldol-Aromatic Mechanism, *ACS Catal.* 2022, 12, 2023-2033.

墙报摘要

基于煤分子模型对气化反应过程污染物转化机制研究

张龙阁¹, 李平^{1,*}

¹宁夏大学, 宁夏回族自治区银川市西夏区, 750000

*Email: liping@nxu.edu.cn

从分子水平上认识煤的结构有助于理解其复杂多样的反应特性, 从而为煤的高效加工利用提供理论支撑。本研究以我国西部典型煤种为研究对象, 综合运用工业分析、元素分析、固态 ^{13}C 核磁共振 (^{13}C NMR)、X 射线光电子能谱 (XPS) 和傅里叶变换红外光谱 (FT-IR) 等物理表征手段, 系统解析了煤样的理化特性, 获得了煤样中元素赋存形态、化学价态及化学键环境等关键结构参数。研究结果表明: 该煤样以芳香结构为主体骨架, 脂肪结构主要起连接作用, 芳香桥碳与芳香周边碳的比值为 0.319; 氧元素以醚氧 (C-O)、羰基 (C=O) 和羧基 (COO-) 形式存在, 氮元素以吡啶和吡咯形式赋存, 硫元素则主要呈现噻吩形态。基于上述结构信息确定煤分子式为 $\text{C}_{202}\text{H}_{153}\text{O}_{38}\text{N}_3\text{S}_2$, 分子量 3302.72, 构建了二维分子结构模型, 并通过分子动力学方法进行结构优化获得三维模型。将量子力学计算所得红外光谱和核磁谱图与实验谱图进行对比验证, 两者的良好拟合度表明分子结构构建具有合理性。依托分子模型, 采用反应力场分子动力学方法模拟煤的气化过程, 追踪不同气氛下污染元素的迁移转化规律, 研究发现: H_2O 气氛下主要生成含硫污染物 H_2S , 含氮污染物以 NH_3 和 HCN 为主; CO_2 气氛中噻吩硫会转化为 COS , 含氮污染物则新增 NO 和 NO_2 生成途径。并且通过模拟的可实现特点揭示了各类污染物的形成路径。

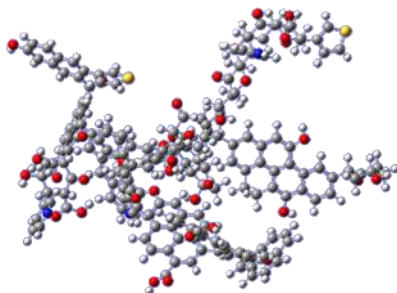


Fig. 1 Coal model configuration after optimization (Grey ball: C atom, red ball: O atom, white ball: H atom, blue ball: N atom, yellow ball: S atom).

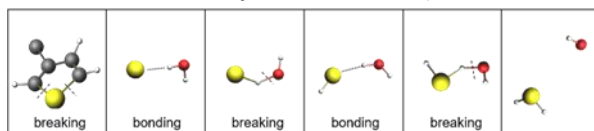


Fig. 2 Formation of H_2S under H_2O atmospheres (Grey ball: C atom, red ball: O atom, white ball: H atom, yellow ball: S atom).

关键词: 污染物转化; 煤大分子模型; 光谱模拟; 煤气化

参考文献

- [1] H. Yan, B. Nie, C. Peng, et al. Molecular Model Construction of Low-Quality Coal and Molecular Simulation of Chemical Bond Energy Combined with Materials Studio. *Energy & Fuels*, 2021, 35(21).
- [2] L. Li, D. Liu, Y. Cai, et al. Coal Structure and Its Implications for Coalbed Methane Exploitation: A Review. *Energy & Fuels*, 2021, 35(1).
- [3] C. Wang, Y. Xing, K. Shi, et al. Chemical Structure Characteristics and Model Construction of Coal with Three Kinds of Coalification Degrees. *ACS Omega*, 2024, 9(1).
- [4] T. Xu, D. Hong, C. Wang, et al. Investigation of N Migration during Municipal Sludge/Coal Co-Pyrolysis via ReaxFF Molecular Dynamics. *Energy & Fuels*, 2023, 37(17).
- [5] X. Liu, D. Song, X. He, et al. Coal macromolecular structural characteristic and its influence on coalbed methane adsorption. *Fuel*, 2018, 222.
- [6] M. Zheng, Y. Pan, Z. Wang, et al. Capturing the dynamic profiles of products in Hailaer brown coal pyrolysis with reactive molecular simulations and experiments. *Fuel*, 2020, 268.
- [7] P. Zou, A. Yuan, B. Zhang, et al. Study on pore structure and adsorption properties of coal and microscopic action mechanism of outburst. *Scientific Reports*, 2025, 15(1).
- [8] H. Chermin, D.W. Van Krevelen. Chemical structure and properties of coal. XVII-A mathematical model of coal pyrolysis. *Fuel*, 1957,

- [9] G. Li, F. Zheng, Q. Huang, et al. Molecular insight into pyrolysis processes via reactive force field molecular dynamics: A state-of-the-art review. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2022, 166.
- [10] M.D. Casal, M.F. Vega, E. Diaz-Faes, et al. The influence of chemical structure on the kinetics of coal pyrolysis. *International Journal of Coal Geology*, 2018, 195.
- [11] M. Gao, X. Li, L. Guo. Pyrolysis simulations of Fugu coal by large-scale ReaxFF molecular dynamics. *Fuel Processing Technology*, 2018, 178.
- [12] J. Wang, Q. Hou, F. Zeng, et al. Gas generation mechanisms of bituminous coal under shear stress based on ReaxFF molecular dynamics simulation. *Fuel*, 2021, 298.
- [13] Z. Mo, L. Xiaoxia, N. Fengguang, et al. Investigation of Overall Pyrolysis Stages for Liulin Bituminous Coal by Large-Scale ReaxFF Molecular Dynamics. *Energy & Fuels*, 2017.
- [14] F. Wei, G. Hongfeng, W. Gui, et al. Molecular model and pyrolysis simulation of Zaoquan coal. *CIESC Journal*, 2019, 70(4).
- [15] Z. Huang, W. Zhou, J. Wei. Study on the molecular structure model of tar-rich coal and its pyrolysis process. *Journal of Molecular Structure*, 2023, 1286.
- [16] R. Cui, W. Xu, Y. Zhang, et al. In-depth understanding of the rapid pyrolysis free radical reaction regulation mechanism of C-S bonds in coal at the molecular level. *Fuel*, 2025, 389.
- [17] Q. Luo, Y. Bai, J. Wei, et al. Insights into the oxygen-containing groups transformation during coal char gasification in H₂O/CO₂ atmosphere by using ReaxFF reactive force field. *Journal of the Energy Institute*, 2023, 109.
- [18] J. Zhou, J. Wang, S. Tang, et al. Simulations on coal water slurry gasification by molecular dynamics method with ReaxFF. *Journal of Molecular Modeling*, 2024, 30(7).

原料油雾化粒径对提升管反应器的影响

崔凌云*, 李国智, 王松江

中石化炼化工程（集团）股份有限公司洛阳技术研发中心, 河南洛阳, 471000

*Email: cuily.serg@sinopec.com

摘要正文：流化催化裂化装置（FCCU）是重油轻质化的重要装置，也是炼油企业实现炼化一体化转型发展的核心装置。提升管反应器是 FCCU 的核心设备之一，原料油在提升管内与催化剂接触混合，反应生成柴油、汽油、丙烯等轻质油和化学品，此过程中发生原料油的升温蒸发汽化，良好的相间传热与原料油的蒸发效率是提高催化裂化装置油剂间催化裂化效率的关键。以某炼厂 180 万吨/年催化裂化装置提升管为模型，通过数值模拟研究了催化裂化初始原料油雾化（简称“油雾”）粒径对提升管反应器油剂间传热传质及混合特性的影响。结果显示，35 μm 油雾比 70 μm 油雾具有更大的优势，35 μm 油雾在提升管低高度段油雾温度更低，且温度分布更加均匀；同一提升管高度段 35 μm 油雾粒径小，且油雾蒸发速度更快，达到 98% 蒸发量所需时间几乎是 70 μm 油雾的一半；35 μm 油雾时催化剂在提升管中心的聚集效应较弱，在不同高度横截面上均比 70 μm 油雾的固含率低，且油气在横截面上分布的更加均匀，促使原料油与催化剂的均匀混合，有利于催化裂化反应，改善产品分布，降低焦炭的生成，减少二氧化碳的排放，达到提效降碳的目的。

关键词：催化裂化；提升管反应器；原料油雾化粒径；传热传质；混合特性

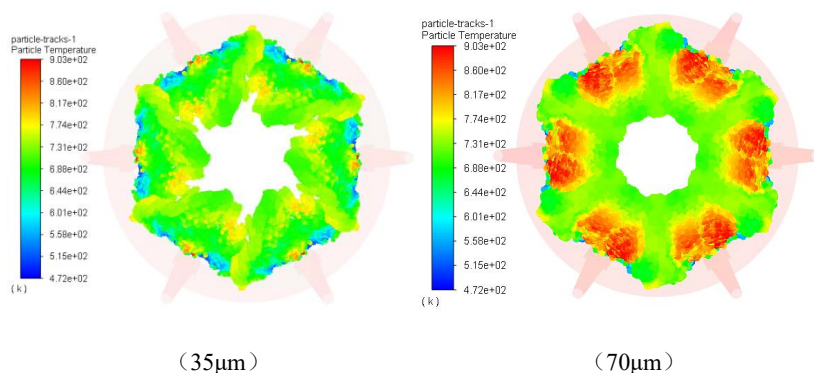


Fig. 1 Temperature distribution map of oil mist in the height range of 50-500mm

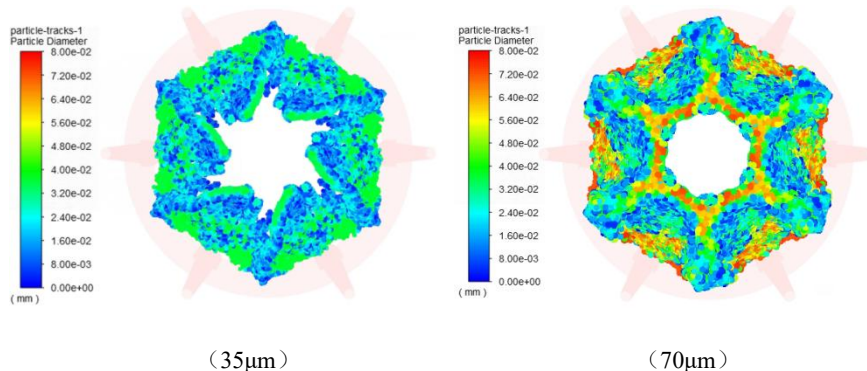


Fig.2 Particle size distribution map of oil mist in the height range of 50-500mm

The Effect of Initial Raw Oil Mist Particle Size on the Riser Reactor for Catalytic Cracking

Ling-yun Cui^{*}, Guo-zhi Li, Song-jiang Wang

Sinopec Engineering Group Luoyang R&D Center of Technology, Luoyang, 471000

^{*}Email: cui.ly.serg@sinopec.com

Fluid catalytic cracking unit (FCCU) is an important device for heavy oil lightening and a core device for refining enterprises to achieve integrated transformation and development of refining and chemical processes. The riser reactor is one of the core equipments of FCCU. The raw oil comes into contact and mixes with the catalyst inside the riser, reacting to produce light oils and chemicals such as diesel, gasoline, and propylene. During this process, the raw oil undergoes heating, evaporation, and vaporization. Good phase to phase heat transfer and the evaporation efficiency of the raw oil are key to improving the catalytic cracking efficiency between the oil and catalyst in the catalytic cracking unit. In this paper, using the riser of a 1.8 million ton/year catalytic cracking unit in a certain refinery as a model and used numerical simulation methods to study the effect of initial raw oil mist (referred to as "oil mist") particle size on heat and mass transfer and mixing characteristics of between catalyst-oil in a riser reactor for catalytic cracking. The results show that compared to 70 μm , 35 μm has lower oil mist temperature in the low height sections of the riser, higher temperature uniformity, faster oil mist evaporation speed in the same height range, the time of 35 μm that the evaporation capacity is 98% is almost half of 70 μm . And 35 μm has weaker catalyst aggregation effect at the center of the riser, lower solid holdup than 70 μm in different cross section. And 35 μm is more conducive to the distribution of oil gas, the mixing between feedstock oil and catalyst, catalytic cracking reactions, and optimizing product distribution, reduce the generation of coke, decrease carbon dioxide emissions, and achieve the goal of improving efficiency and reducing carbon emissions.

Keywords: catalytic cracking; riser reactor; raw oil mist particle size; heat and mass transfer; mixing characteristics

第四分论坛

多孔催化前沿论坛

邀请报告

原子层沉积助力多孔催化材料的精准合成

张健康^{1,*}, 覃勇^{1,2}

¹西北工业大学 生物与催化交叉研究中心, 西安, 710072

²青岛科技大学 材料科学与工程学院, 青岛, 266042

*Email: zhangjiank@nwpu.edu.cn

摘要正文: 原子层沉积(ALD)技术可在原子尺度实现对催化材料结构(颗粒尺寸及薄膜厚度)的精确调控^[1-4]。近年来, ALD技术被广泛的应用于多相催化领域, 诸多关于多孔催化材料的设计合成、双金属催化、单原子-团簇协同催化、金属尺寸依赖性催化及相关催化反应机理的报道都在一定程度上借助了ALD技术的快速发展^[1-4]。基于ALD在催化剂制备方面独特优势, 我们设计合成了一系列特定结构和功能的金属催化剂(空间分离结构的CoO_x/TiO₂/Pt催化剂、表面限域型原子级分散的Pt_{SA}-C/SiO₂等), 并探究了其在催化制氢、选择性加氢、催化氧化等反应中的性能及机理研究。

关键词: 原子层沉积; 多孔催化材料; 限域催化剂, 双组份协同催化; 单原子-团簇

参考文献

- [1] J. Zhang, Z. Yu, Z. Gao, H. Ge, S. Zhao, C. Chen, S. Chen, X. Tong, M. Wang, Z. Zheng, Y. Qin. Porous TiO₂ nanotubes with spatially separated platinum and CoO_x cocatalysts produced by atomic layer deposition for photocatalytic hydrogen production, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2017, 56, 816-820.
- [2] J. Zhang, Z. Gao, S. Wang, G. Wang, X. Gao, B. Zhang, S. Xing, S. Zhao, Y. Qin. *Nat. Commun.*, Origin of synergistic effects in bicomponent cobalt oxide-platinum catalysts for selective hydrogenation reaction, 2019, 10, 4166.
- [3] H. Xu, D. Lin, Z. Lv, X. Zhao, J. Xiao, L. Cui, J. Zhang, J. Yuan, X. Feng, Y. Qin, J. Zhang. Constructing SiO₂ supported atomically dispersed platinum catalysts with single atom and atomic cluster dual sites to tame hydrogenation performance, *JACS Au*, 2025, 5, 250-260.
- [4] J. Zhang, Y. Pan, D. Feng, L. Cui, S. Zhao, J. Hu, S. Wang, Y. Qin. Mechanistic insight into the synergy between platinum single atom and cluster dual active sites boosting photocatalytic hydrogen evolution, *Adv. Mater.*, 2023, 35, 2300902.

多孔纳米催化剂可控合成与性能调控

李国栋^{1,*}

¹ 国家纳米科学中心, 北京, 100190

*Email: liguodong@nanoctr.cn

摘要: 随着合成化学的快速发展, 新兴的多孔材料不断出现, 它们通常具有多样的拓扑结构、丰富的金属位点、多样性的有机配体、规则且可调的孔道、极大的比表面积等优良性质, 这些将有望为高性能纳米催化剂的构筑提供重要的平台。本次报告主要围绕着新型多孔纳米材料及其复合材料的结构设计、可控合成及其催化性能方面展开, 包括以下 3 个方面的内容: 1) 发展了多孔晶态材料中构筑双单金属催化位点的策略, 实现了空气气氛下两者协同高选择性氧化烯烃制备环氧烷烃。2) 发展了 MOF 基仿酶“纳米口袋”的可控合成策略, 利用单齿配体的变构效应显著提升金属节点催化乙酰丙酸酯氢化制备 γ -戊内酯的性能。3) 发展了纳米粒子与 MOF 复合结构的可控合成策略, 实现了两者限域孔道内协同催化加氢。这些将为高效多孔纳米催化剂的设计和可控制备提供新思路。

关键词: 晶态孔材料; 纳米粒子; 微环境调控; 协同催化

参考文献

- [1] X. Zhang, C. Yang, P. An, et al. *Sci. Adv.* **2022**, *8*: eadd5678.
- [2] Liu, H.; Liu, W.; Xue, G.; et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*: 11085.
- [3] G. Xue, H. Liu, W. Liu, et al. *Nat. Commun.* **2024**, *15*: 9659.
- [4] F. Zheng, Z. Cao, T. Lin, et al. *Sci. Adv.* **2024**, *10*: eadn9896.
- [5] T. Lin, Z. Cao, J. Pei, et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*: doi.org/10.1021/jacs.4c18288

动态界面与催化活性位的协同机制

汤禹*

福州大学，福建省福州市，350108

*Email: yu.tang@fzu.edu.cn

摘要正文:

在当前“双碳”战略背景下，化学与化工行业亟需进行产业升级和技术革命。近年来，报告人聚焦国家“双碳”战略重大需求，针对催化化学与化工行业转型升级面临的三大核心挑战：“催化活性位点动态演化机制不明、分子活化效率低下、多相催化界面协同不足”等科学与技术瓶颈，开展“智能化调控、绿色化转化、精准化设计”的催化创新研究。

在基础研究与理论探索方面，报告人基于反应工况下催化界面原位重构现象，聚焦反应驱动的动态界面变化，揭示活性位点重构与反应活性的动态平衡机制，助力催化剂稳定性的提升，实现催化界面设计的“智能化”。在多相催化研究中，反应气氛驱动的动态界面重构机制已成为核心科学命题。研究表明，工况参数通过改变表面化学势诱导催化剂发生原子尺度结构演化，兼具形成高活性亚稳态界面与引发活性组分失活的双重效应。报告人以Rh₁/CeO₂为模型，通过原位XAS/XPS与理论计算揭示了单原子催化剂动态演化规律：在甲烷重整中，CO化学势驱动Rh物种经历“单原子→纳米颗粒→原子簇→单原子”可逆重构。同时，基于二维硼基材料（TiB₂/h-BN）的强金属-载体相互作用研究取得突破：TiB₂载体通过TiO_x终端位实现甲酸室温高效脱氢与Pt核壳结构稳定封装，打破活性-稳定性权衡；h-BN体系在CO₂分压调控下实现BO_x覆盖层动态刻蚀，暴露Rh-BN活性界面，显著提升甲烷重整性能；引入CeO_x助剂抑制NiO迁移氧化，使Ni/BN在甲烷部分氧化中连续运行125小时无失活。该系列工作构建了“动态界面重构-化学势响应-助剂协同”多尺度调控理论，为设计耐高温（>600 °C）、抗积碳工业催化剂奠定基础，在合成气制备、氢能转化等双碳关键领域展现重大应用潜力。

在催化剂的功能设计与性能构筑方面，提出“双活性位点协同催化”机制，通过耦合不同功能的催化活性位，有效降低催化反应所需要的温度，设计高活性、高稳定性的催化剂，在低碳烷烃和生物质分子转化中实现催化剂设计的“绿色化”。从甲烷重整的催化位点协同活化反应物分子、芳醚脱氧的载体介导协同，到水相催化的限域-介质协同，逐步构建起多维度协同催化理论体系。通过揭示“分工活化-电荷优化-动态传输-环境耦合”的原子级作用机制，系统性突破了传统单活性位点的本征限制，在多个重要催化场景实现了低温高效转化，为碳中和目标下的催化剂理性设计提供了全新方法论。

以上研究层层递进，从甲烷重整的催化位点协同活化反应物分子、芳醚脱氧的载体介导协同，到水相催化的限域-介质协同，逐步构建起多维度协同催化理论体系。通过揭示“分工活化-电荷优化-动态传输-环境耦合”的原子级作用机制，系统性突破了传统单活性位点的本征限制，在多个重要催化场景实现了低温高效转化，为碳中和目标下的催化剂理性设计提供了全新方法论。

关键词: 多相催化；甲烷；二氧化碳；原位表征

参考文献

- [1] Yu Tang, et al., J. Am. Chem. Soc. 2024, 146, 32366–32382
- [2] Yu Tang, et al., J. Am. Chem. Soc. 2021, 143, 16566–16579
- [3] Yu Tang, et al., Nat. Catal., 2022, 119-127
- [4] Yu Tang, et al., Adv. Mater., 2021, 202101536
- [5] Yu Tang, et al., ACS Catal., 14 (2024) 11845-11856
- [6] Yu Tang, et al., Appl. Catal. B, 341 (2024) 123244

多金属 MOF 的精准合成与光谱表征

杨思卓¹

¹ 南京师范大学化材院，南京市仙林大学城文苑路 1 号，邮编 210023

*Email: yangsizhuo11@gmail.com

金属有机框架（MOFs）因其高度可调的结构和丰富的金属位点，在光催化领域展现出巨大应用潜力。其中，金属位点的精准调控对提升材料的电子结构、载流子分离效率及催化活性至关重要。然而，现有 MOFs 主要以单金属或无序分布的多金属为主，难以实现金属位点的精准调控，严重制约了催化性能的进一步提升。相比之下，多金属 MOFs 凭借异质金属间的电子协同效应、空间匹配优化及反应路径耦合，成为突破光催化瓶颈的关键。然而，如何在 MOF 骨架内实现金属位点的精准、有序分布，并解析其在催化过程中的动态协同机制，仍缺乏系统性的理论指导与高分辨率表征手段。

本报告将介绍多金属 MOF 的先进表征技术，并结合前期研究成果，重点探讨时空分辨光谱技术在 MOF/COF 催化研究中的核心作用。特别是，报告将阐述瞬态吸收光谱（fs-TAS）、原位 X 射线吸收光谱（XAS）及时间分辨荧光光谱（TRPL）等方法如何揭示单金属与多金属 MOF/COF 的光物理过程及催化机理。此外，围绕多金属 MOF 的精准合成策略与多尺度光谱学表征，报告人将介绍“动力学-热力学协同调控”策略，通过调控金属-配体作用，采用一锅法精准合成多金属 MOF，实现金属位点的有序分布与原子级精准调控。结合单晶 X 射线衍射（SCXRD）、X 射线吸收精细结构光谱（EXAFS）等手段，系统解析金属配位环境及电子结构（待发表工作）。我们的研究建立了一个多维尺度的 MOF/COF 材料表征框架，深入揭示其结构-性能关系，为光催化剂的理性设计提供了基础理论支持，阐明联用先进光谱手段对 MOF/COF 研究的重要意义。

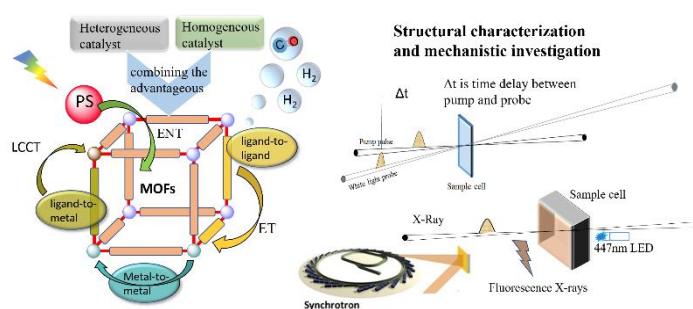


Fig. 1 Schematic illustration of MOF based photocatalytic hydrogen evolution. The catalytic process is investigated using ultrafast spectroscopy and synchrotron radiation techniques.

关键词：多金属MOF；EXAFS；瞬态吸收光谱

参考文献

- [1] S. Yang, C. Yang, C. Dun, H. Mao, R. S. H. Khoo, L. M. Klivansky, J. A. Reimer, J. J. Urban, J. Zhang*, Y. Liu*, Covalent organic frameworks with irreversible linkages via reductive cyclization of imines, *J. Am. Chem. Soc.*, 2022, 144(22): 9827-9835.
- [2] S. Yang, D. Streater, C. Fiankor, J. Zhang, J. Huang*, Conjugation and aggregation directed design of covalent organic frameworks as white light-emitting diode, *J. Am. Chem. Soc.* 2021, 143, 1061-1068.
- [3] S. Yang, W. Hu, X. Zhang, P. He, B. Pattengale, C. Liu, M. Cendejas, I. Hermans, X. Zhang, J. Zhang*, and J. Huang*, 2D covalent organic frameworks as intrinsic photocatalysts for visible light driven CO₂ Reduction, *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140, 14614-14618.
- [4] S. Yang, W. Hu, J. Nyukuchena, C. Fiankor, C. Liu, E. D. Kinigsten, J. Zhang, X. Zhang, J. Huang*, Unravelling long-lived ligand-to-metal cluster charge transfer state in Ce-TCPP metal organic frameworks", *Chem. Commun.*, 2020, 56, 13971-13974.
- [5] S. Yang; B. Pattengale; S. Lee; J. Huang*, Real time visualization of active species in a single-site metal-organic framework photocatalyst", *ACS Energy Lett.*, 2018, 3, 532-539.

电催化共价有机框架的结构设计

徐庆^{1,*}

¹中国科学院上海高等研究院, 上海市浦东新区海科路 100 号 9A 楼, 201210

*Email: xuqing@sari.ac.cn

摘要正文: 共价有机框架 (Covalent organic frameworks, COFs) 是由有机结构单元之间通过共价键连接而成并具有高度有序排列的晶态多孔材料。COFs材料具有良好的结构与功能可设计性。从分子设计出发, 拓展COFs种类与拓扑学结构, 面向功能需求进行结构设计, 能够充分发挥这类晶态聚合物的结构优势并赋予其在众多领域的应用。通过对COFs骨架结构的精准设计, 能够实现COFs材料在多种电催化中的应用, 包括电催化氧还原, 产氧, 合成过氧化氢, 以及二氧化碳还原等。¹⁻⁵

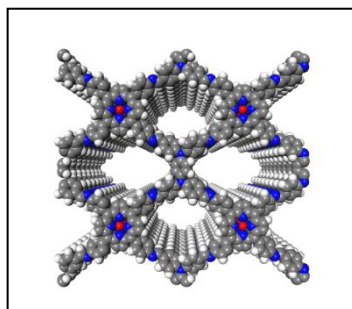


Fig. 1 Design and synthesis electrocatalytic COFs.

关键词: 共价有机框架材料; 电催化; 结构设计

参考文献

1. M. Liu, S. Yang, X. Yang, C. Cui,* G. Liu, X. Li, J. He, G. Zheng Chen, Q. Xu*, G. Zeng*, *Nat. Commun.*, 2023, 14, 3800.
2. S. Yang, Y. Wei, X. Li, J. Mao, B. Mei, Q. Xu*, X. Li*, Z. Jiang*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, e202313029.
3. X. Li, S. Yang, M. Liu, X. Yang, Q. Xu*, G. Zeng*, Z. Jiang* *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, e202304356.
4. S. An, X. Li, S. Shang, T. Xu, S. Yang, C.-X. Cui, C. Peng, H. Liu, Q. Xu*, Z. Jiang, J. Hu *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, e202218742.
5. M. Liu, S. Liu, C.-X. Cui, Q. Miao, Y. He, X. Li, Q. Xu,* G. Zeng*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, e202213522.

分子筛中铝对的辨识、定量及其对脱铝的影响

陈魁智^{1,*}, 孙玉婷^{1,2}, 侯广进^{1,*}

1.中国科学院大连化学物理研究所, 催化基础国家重点实验室, 大连, 116023

2.中国科学院大学, 北京, 100049

*Email: kchen@dicp.ac.cn; ghou@dicp.ac.cn

分子筛中的铝对 (Al pair) 与铝分布在催化中的作用非常重要, 但每个铝位点除了相互距离或在骨架落位有区别, 化学结构差异非常小, 均为 $\text{Al}(\text{OSi})_4$, 很难有效表征。这里, 我们将展示一系列基于二价阳离子交换、 ^1H NMR 定量、以及 ^1H - ^1H NMR 偶极耦合测距的铝对识别与定量方法, 并揭示了 ZSM-5 分子筛中三种不同类型的铝对并提供了其精确定量信息。进一步分析表明这三种铝对分别是位于六元环(6-MR)与十元环(10-MR)上的两种铝对以及朝向不同孔道的铝对。该方法较传统 $\text{Co}^{2+}/\text{Vis}$ 方法¹在铝对表征的精准、精确性上均有显著提升, 后者无法精确区分六元环与十元环上的铝对, 更无法获取朝向不同孔道的铝对信息。新方法中, 通过 ^1H - ^1H 偶极耦合定量铝对的方法相较于经典的离子交换法对样品无损, 可以获取更多原始信息。最后, 通过对一系列逐步脱铝调控并进行铝对的定量追踪, 我们发现铝对含量较高会使得脱铝更容易发生, 且快速脱铝可能主要由铝对导致的孔道内水分压增高导致, 而受 Al-O-Si 键角变化影响较小。另外, 两个 Al 原子倾向于依次脱除而不是同时脱除。据我们所了解, 铝对的存在对脱铝机制的影响还鲜有报道。

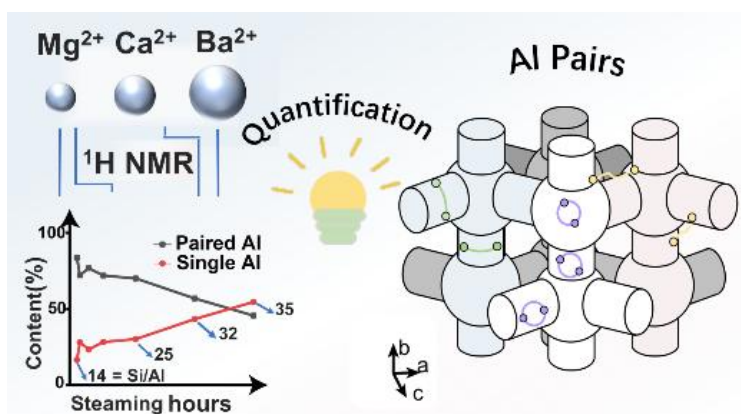


图 1. 固体核磁共振结合二价离子交换定量表征铝对并揭示其对脱铝影响

关键词: 分子筛; 固体核磁共振; 铝对定量; 脱铝

参考文献

- [1] J. Dědeček, E. Tabor, S. Sklenak, Tuning the Aluminum Distribution in Zeolites to Increase their Performance in Acid-Catalyzed Reactions *ChemSusChem* 2019, 12: 556-576
- [2] Y. Sun, L. Liang, M. Yang, Y. Ji, G. Hou, K. Chen Identification and Quantification of Al Pairs and Their Impact on Dealumination in Zeolites *J. Am. Chem. Soc.* 2025, ASAP, doi: 10.1021/jacs.4c14741

口头报告

光诱导自组装技术在功能分子筛催化材料合成中的应用

吴妹^{1,2*}（报告人），赵鑫^{1,2}，陈智强^{1,2}，徐玮川^{1,2}，毕玲玲^{1,2}，蒋金龙^{1,2}

1.淮阴工学院化学工程学院，江苏淮安，223003，中国

2.江苏省凹土资源利用重点实验室，江苏淮安，223003，中国

*Email: meiwu@hyit.edu.cn

摘要正文：

金属功能化分子筛催化剂在诸多氧化还原反应中应用广泛、前景广阔[1]。其合成研究广受关注，但如何实现金属在分子筛基体中的分布控制一直是其中富有挑战性且意义重大的研究热点。后引入法一般获得负载型金属功能化分子筛（金属/分子筛），金属分布于分子筛孔内或外表面，显然具有易烧结、分散度难以控制的弊端[2]；直接水热合成法中，金属的形成速度远快于分子筛骨架形成及晶化的速度，难免存在金属嵌入量有限，金属活性和稳定性难以控制的问题[3]。

本课题组提出一种光诱导自组装合成新思路，可有效控制金属在分子筛基体中的分布位置，针对性制备嵌入型和包覆型金属功能化分子筛。一步光诱导自组装合成及光诱导pH调控自组装合成策略被用于嵌入型金属功能化分子筛（介孔钛硅分子筛）合成（如图1所示），所合成的分子筛具有有序介孔结构和大量四配位骨架钛，骨架Ti含量(高达2.92 mol%)大于常规方法的合成极限（2.5 mol%）（如图1所示）。光致还原自组装合成策略则普适性应用于多种拓扑结构的功能分子筛，包括小孔分子筛LTA、SOD；中孔分子筛，MFI(ZSM-5, S-1)；FAU(X, Y zeolite)，金属Ni、Cu和Ru为活性金属被成功包覆于沸石分子筛内部，显示出优越的分散性和稳定性（如图2所示）。乙酰丙酸加氢的反应体系中，高分散的Ag-Ni封装在ZSM-5内部形成Ag-Ni@ZSM-5催化剂获得的乙酰丙酸转化率为100%， γ -戊内酯选择性能够达到98.5%（如图3所示）。

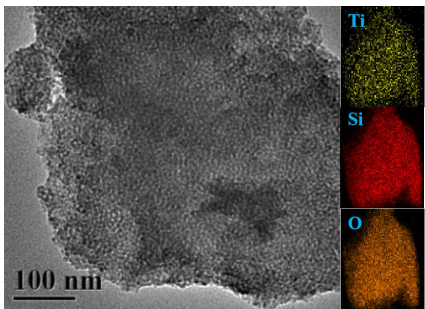


Fig. 1 Photo-induced self-assembly synthesis of Ti-SiO₂

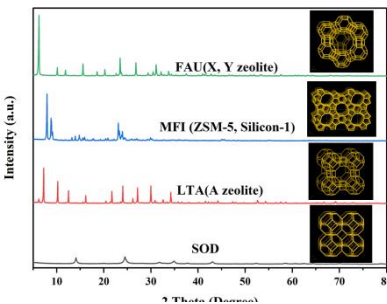


Fig. 2 XRD patterns of zeolites with different topological through Photo-induced Self-assembly Technology structures

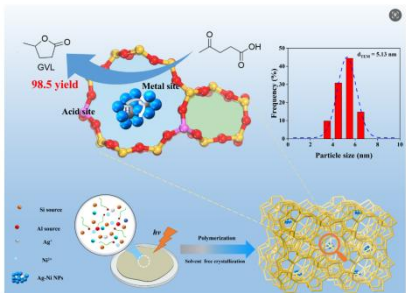


Fig. 3 Photochemical Preparation of Ag-Ni @ ZSM-5 for Levulinic Acid Hydrogenation

相对于传统制备路线的弊端，光诱导自组装技术的优势在于（1）操作便捷，只需几分钟到几十分钟就能完成分子筛骨架搭建；（2）参数可控，根据光参数和镀膜溶液参数就可以有效调控分子筛孔结构和金属分布位置；（3）环境友好，在常温常压下进行，不产生废液。

关键词：光诱导自组装；金属功能化；分子筛；金属-酸协同平衡

参考文献

[8] Jia X, Qin C, Friedberger T, et al. 2016. Efficient and selective degradation of polyethylenes into liquid fuels and waxes under mild conditions[J]. Science advances, 2(6): e1501591.

[9] Zhang Q, Gao S, Yu J. 2022. Metal sites in zeolites: Synthesis, characterization, and catalysis[J]. Chemical Reviews, 123(9): 6039-6106.

[10] Li R, Li Z, Chen L, et al. 2017. Synthesis of MnNi-SAPO-34 by a one-pot hydrothermal method and its excellent performance for the selective catalytic reduction of NO by NH₃[J]. Catalysis Science & Technology, 7(21): 4984-4995.

Application of Photo-induced Self-assembly Technology in the Synthesis of Functional Molecular Sieve Catalytic Materials

Wu Mei^{1,2*}, Zhao Xin^{1,2}, Chen Zhiqiang^{1,2}, Xu WeiChuan^{1,2}, Bilingling^{1,2}, Jing Jinlong^{1,2}

1. School of Chemical Engineering, Huaiyin Institute of Technology, Huaian Jiangsu, 223003, China

2. Key Laboratory of Attapulgit Resources Utilization of Jiangsu Province, Huai'an, Jiangsu, 223003, China*

meiwu@hyit.edu.cn

Metal functionalized molecular sieve catalysts are widely used in many redox reactions and have broad prospects [1]. Its synthesis research has been widely concerned, but how to control the distribution of metals in the molecular sieve matrix has been one of the challenging and significant research hotspots. The post-introduction method generally obtains the supported metal functionalized molecular sieve (metal/molecular sieve). The metal is distributed in the pores or outer surfaces of the molecular sieve, which obviously has the disadvantages of easy sintering and difficult control of dispersion [2]; In the direct hydrothermal synthesis method, the formation rate of metal is much faster than that of molecular sieve framework, which inevitably leads to the problems of limited metal embedding amount and difficult control of metal activity and stability [3].

Our research group proposed 1 new ideas of photo-induced self-assembly synthesis, which can effectively control the distribution of metals in the molecular sieve matrix and prepare embedded and coated metal-functionalized molecular sieves. One-step photo-induced self-assembly synthesis and photo-induced pH-regulated self-assembly synthesis strategies are used for the synthesis of embedded metal functionalized molecular sieves (mesoporous titanium silicalite molecular sieves) (as shown in fig. 1). the synthesized molecular sieves have ordered mesoporous structure and a large amount of 4 coordination framework titanium, and the framework Ti content (up to 2.92 mol%) is greater than the synthesis limit (2.5 mol%) of regular methods (as shown in fig. 1). The photo-reduction self-assembly synthesis strategy is universally applicable to functional molecular sieves with various topologies, including small pore molecular sieves LTA and SOD; Mesoporous molecular sieve, MFI(ZSM-5,S-1);FAU(X,Y zeolite), metal Ni, Cu and Ru are active metals successfully coated inside zeolite molecular sieve, showing superior dispersibility and stability (as shown in fig. 2). In the reaction system of hydrogenation of levulinic acid, the highly dispersed Ag-Ni is encapsulated in the ZSM-5 to form a Ag-Ni @ ZSM-5 catalyst, and the conversion rate of levulinic acid is 100%, and the selectivity of γ -valerolactone can reach 98.5%(as shown in Figure 3).

Compared with the disadvantages of the traditional preparation route, the advantages of the photo-induced self-assembly method are (1) convenient operation, and the material synthesis can be completed in only a few minutes to tens of minutes;(2) The parameters are controllable, and the pore structure and metal distribution position of the molecular sieve can be effectively controlled according to the optical parameters and the parameters of the coating solution;(3) It is environmentally friendly and can be carried out under normal temperature and pressure without waste liquid.

Keywords: Photo-induced self-assembly; metal functionalization; molecular sieve; metal-acid synergistic equilibrium

References

- [1] Jia X, Qin C, Friedberger T, et al. 2016. Efficient and selective degradation of polyethylenes into liquid fuels and waxes under mild conditions[J]. Science advances, 2(6): e1501591.
- [2] Zhang Q, Gao S, Yu J. 2022. Metal sites in zeolites: Synthesis, characterization, and catalysis[J]. Chemical Reviews, 123(9): 6039-6106.
- [3] Li R, Li Z, Chen L, et al. 2017. Synthesis of MnNi-SAPO-34 by a one-pot hydrothermal method and its excellent performance for the selective catalytic reduction of NO by NH₃[J]. Catalysis Science & Technology, 7(21): 4984-4995.

g-C₃N₄封装铂基催化剂在硝基芳烃氢化和班伯格重排中的“门控效应”

姚翀¹, 张群峰¹, 李小年^{1,*}

¹ 浙江工业大学化学工程学院, 杭州, 310014

*Email: xnli@zjut.edu.cn

摘要正文: 封装催化剂以其优异的稳定性而闻名, 但活性位点的封装通常会导致活性降低。为解决这一问题, 一种有效的策略是采用g-C₃N₄ (具有3-s-三嗪结构的石墨氮化碳), 它具有独特的孔道。这种材料就像一个守门员, 只允许H₂和H等小分子通过, 而阻挡铂和硝基苯等大分子, 从而防止铂流失。g-C₃N₄ 的“门控效应”可以增强H₂在铂表面的解离, 从而大大提高活性。此外, 电子从铂流向g-C₃N₄ (形成Pt-N键) 也有助于增强g-C₃N₄ 的H吸附能力, 从而促进吸附在g-C₃N₄表面的硝基苯的氢化。在将硝基芳烃转化为4-氨基苯酚、对甲氧基苯酚及其衍生物的氢化过程中, 控制产物选择性的关键是苯胺及其衍生物(中间体)的解吸。与铂表面相比, 在g-C₃N₄表面, 苯胺的吸附明显减少, 从而促进了选择性的提高(选择性提高了29.6%)。因此, Pt/C@g-C₃N₄ 催化剂打破了硝基芳烃加氢重排反应中活性和选择性之间的平衡, 在显著提高活性的同时确保了高选择性和稳定性。这些改进为工业化应用创造了有利条件。

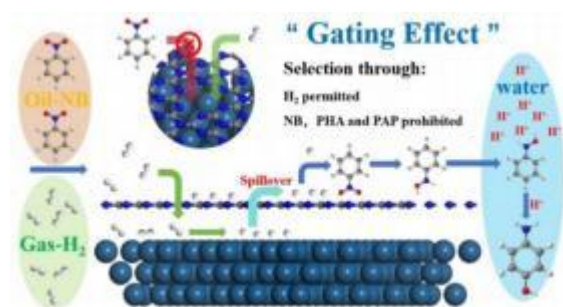


Fig. 1 Schematic diagram of H spillover and the reaction of nitrobenzene on the surface of

g-C₃N₄. **关键词:** 封装催化剂; g-C₃N₄; 多孔结构; 氢溢流

参考文献

- [1] Yao C., San J., Liu J., Luo J., Pan L., Lyu J., Feng F., Lin L., Lu C., Zheng Y., Wang J., Wang Q., Zhang Q., Li X. Gating effect of g-C₃N₄-encapsulated Pt-based catalysts for the hydrogenation and Bamberger rearrangement of nitroaromatics [J]. J. Mater. Chem. A, 2024.
- [2] Yao C., Wu J., Pan L., Yu L., Luo J., San J., Liu J., Lu C., Feng F., Xu X., Lin L., Yue Y., Wang Q., Zhao J., Zhang Q., Li X. Heteroatom doping-induced Pt dispersion and electronic effect for boosting the catalytic performance in the hydrogenation of nitrobenzene to p-aminophenol [J]. Chemical Engineering Journal, 2024.
- [3] Zhang Q., Yao C., Zhang F., Chen Y., Li Z., Zhou Y., Qin Y., Xu L., Feng F., Zhao J., Lu C., Zhang Q., Wang Q., Li X. Constructing oxygen vacancies in anatase TiO₂: enhancing acetylene semi-hydrogenation performance through H₂ heterolytic cleavage [J]. J. Mater. Chem. A, 2025.

COF光催化单线态氧驱动生物质增值联产过氧化氢

薛强¹, 李晗溪², 金鹏¹, 周旭凯^{1,2*}, 王峰^{1,2}

¹中国科学院大连化学物理研究所, 大连, 116023

²中国科学院大学, 北京, 100049

*Email: xkzhou@dicp.ac.cn

传统的H₂O₂光催化主要依靠光激发电子驱动氧还原, 空穴驱动水氧化。然而, 单线态氧(¹O₂)往往不被重视, 但它在生产H₂O₂过程中起着关键作用。与此同时, 光催化生物质转化也备受关注, 但将H₂O₂合成与生物质增值相结合的研究仍然很少见, 而且生物质通常生产的是低价值产品。

本研究通过共价有机框架(COFs)诱导¹O₂参与的Achmatowicz重排来实现糠醇(FFA)光催化增值并高效协同生产H₂O₂。该研究介绍了具有定制氮含量的聚酰亚胺基COF-N_{0.3}, 其代表了一种前所未有的高效生产¹O₂的平台。与成熟的卟啉基COF类似, COF-N_{0.3}通过受激发的电子-空穴对³O₂进行顺序氧化还原生产¹O₂, 表现出优异的选择性, 从而显著促进H₂O₂的生产。降低COF的含氮量可显著提高¹O₂的产量, 并显著提高H₂O₂的生成速率。在FFA中, 产生H₂O₂的主要途径是Achmatowicz重排, 其产生H₂O₂的速率为4549 μmol g⁻¹ h⁻¹, 是纯水中氧还原反应产生H₂O₂的速率的10倍。机理研究表明, ¹O₂可选择性地参与FFA, 绕过空穴氧化触发Achmatowicz重排, 产生有价值的6-羟基-(2H)-吡喃酮(PN), 转化率为99%, 选择性为92%。机理研究进一步揭示了从FFA到PN的合理反应途径, 表明单线态氧会优先与FFA结合, 绕过空穴氧化, 引发罕见的Achmatowicz重排。该反应会产生PN(66美元/g), 而不产生如2-呋喃甲酸(0.04美元/g)和糠醛(0.6美元/g)这种传统氧化产物。这种转化不仅将产品价值提高了2-3个数量级, 而且同时产生了额外的H₂O₂(Fig. 1), 通过将高价值化学品生产与高效的H₂O₂生产相结合, 为可持续光催化提供了一种变革性的方法。

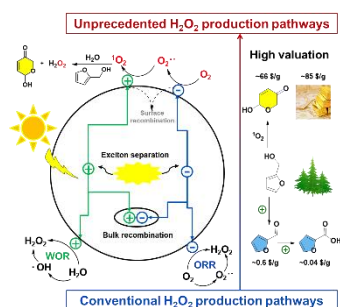


Fig. 1 Schematic representation of COF-N₀ for ¹O₂-promoted cooperative photocatalyzed coupling of biomass valorization and H₂O₂ Production.

关键词: 光催化; 单线态氧; 生物质增值; 过氧化氢; Achmatowicz 重排

参考文献

- [1] Xue, Q. Li, H. Jin, P. Zhou, X. Wang, F. Singlet-Oxygen-Driven Cooperative Photocatalytic Coupling of Biomass Valorization and Hydrogen Peroxide Production Using Covalent Organic Frameworks. *Angew. Chem., Int. Ed.* 2025, *n/a*, e202423368.
- [2] Wu, P. Du, F. Xue, Q. Li, H. Fu, M. Zhou, X. Wang, F. Photothermal-Catalyzed Hydrogen Peroxide Production Enabled by Gold-Organic Frameworks. *Adv. Funct. Mater.* 2025, *n/a*, 2420941.
- [3] Han, H. Xue, Q. Ding, J. Han, J. Li, H. Li, Y. Zhou, X. *ACS Appl. Polym. Mater.* 2025, *7*, 1338-1346.

微波诱导催化废塑料裂解耦合CO₂重整制合成气

申茜¹, 赵振宇¹, 高鑫^{1,2,*}

¹天津大学化工学院, 天津, 300354

²精馏技术国家工程研究中心, 天津, 300354

*Email: gaoxin@tju.edu.cn

摘要正文: 微波诱导催化裂解可以一步将废塑料转化为氢气与固体碳, 该技术路线具有快速升温、高产氢率、高选择性的优势, 有望实现废塑料的低成本、高值化转化^[1]。塑料裂解制得的碳材料以碳纳米管形式存在, 尽管在电催化材料制备方面具有广泛的前景, 但其高质量应用受限于金属杂质含量高、碳纳米管长度不可控等挑战, 且碳纳米管的累积阻碍了催化材料的循环利用^[2]。为解决这一问题, 本研究提出了微波催化热解与CO₂重整的耦合路线, 通过开发铁碳催化剂(Fe-CNTs)作为微波响应材料, 不仅解决催化剂积碳问题, 而且以CO₂为原料制备合成气原料(CO)为双碳目标的实现提供了新的技术路径。实验结果表明, 微波诱导超高温条件下, CO₂重整过程在几分钟内即达到70%的积碳转化效率, 且干重整过程增强了催化剂纳米颗粒的分散度, 提高了其催化裂解活性。经过CO₂干重整过程的Fe-CNTs再次投入废塑料裂解, 氢气产率达到28.89 mmol/g PP。多次循环连续实验表明, Fe-CNTs积碳去除效率高、催化裂解活性稳定。通过对实际塑料垃圾的应用, 证明了微波诱导CO₂气化废塑料制合成气在废塑料循环和CO₂减排的技术优势。

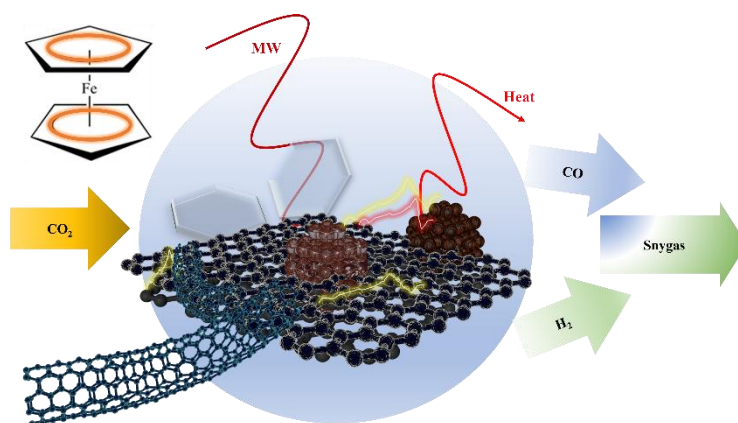


Fig. 1 Microwave-induced Fe-CNTs catalytic pyrolysis of PP coupled with CO₂ to produce syngas.

关键词: 微波; 塑料裂解; 合成气; 二氧化碳

沸石分子筛气体吸附孔径数据分析中的假峰问题

杨正红

理化联科（北京）仪器科技有限公司，北京市昌平区双营西路88号院2号楼2层，北京102299

电子信箱：jeffrey.yang@physi-chem.com；电话：13801191442

提要：经典孔径分析模型（BJH、HK、SF）常用于吸附数据分析，但这些模型仅适用于等温线特定部分的数据计算。因此，在物理吸附仪数据处理软件中采用“一键生成”的方法输出实验报告，往往得到很多错误的结果。因为用BJH计算闭合点在 P/P_0 约0.4的介孔分布往往出现4nm左右的窄分布假峰；在ZSM-5和硅沸石等这种MFI框架类型的沸石分子筛材料中用SF模型进行孔径分析，也可能出现假峰；在同时具有微孔和介孔材料中，单吸附层的形成可能导致对吸附等温线的额外贡献，出现假峰。因此，正确解释吸附等温线并获得可靠的孔径分布结果需要扎实的背景知识，避免导致对微孔和介孔孔径的错误判断和评估。

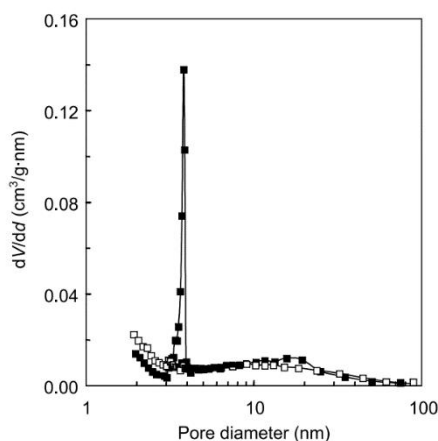
一、张力强度效应（TSE）在吸附等温线中的作用及其对孔径测定的影响

图1显示了煅烧和碱处理后的ZSM-5在77 K下的 N_2 吸附和脱附等温线。后者由于产生了介孔，在较高的 P/P_0 段显示出明显的迟滞现象，而煅烧样品中没有介孔。图1中的插图清楚地表明，强制闭合是由于在 P/P_0 0.41-0.48范围内沿脱附曲线的吸附体积突然下降造成的。这种现象通常被称为张力强度效应（TSE）。在这种情况下，由脱附曲线计算得到的大约4nm的峰值并不是材料的峰值孔径，因为它主要由吸附性质决定的，是假峰（图2）。当然，并非每个4 nm处的窄峰都必然是由于TSE现象造成的，判断PSD假峰的标准是吸附和脱附曲线是否都有该孔的窄分布。

图1 煅烧（○,●）和（□,■）碱处理的ZSM-5在77 K下的 N_2 吸附（空心符号）和脱附（实心符号）等温线。

插图：在 P/P_0 范围0.3-0.6（虚线方块）的等温线细节强调了 $P/P_0 \sim 0.45$ 处的TSE。

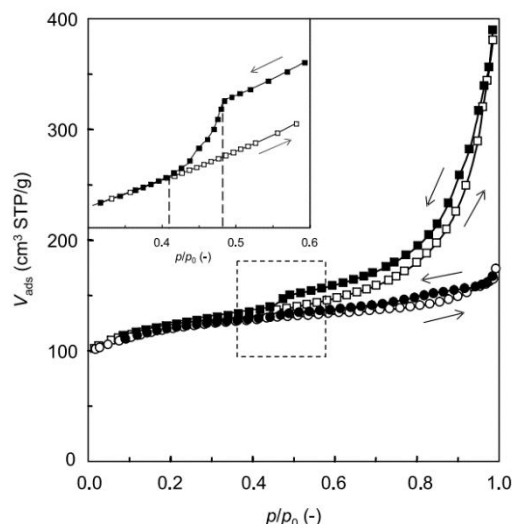
Fig. 1. N_2 adsorption (open symbols) and desorption (solid symbols) isotherms at 77 K of (○,●) calcined and (□,■) alkaline-treated ZSM-5. Inset figure: a detail of the isotherm in the P/P_0 range 0.3 - 0.6 (dotted square) emphasizes the TSE at P/P_0 0.45.



假峰

图2 从碱处理的ZSM-5在77 K下的 N_2 吸附（□）和脱附（■）等温线得到的BJH孔径分布。

Fig. 2. BJH pore size distribution derived from the (□) adsorption and (■) desorption branch of the isotherm of alkaline treated ZSM-5.



较大孔隙（ $d > 4$ nm）的存在是TSE现象的原因，但极小孔隙（ $d < 1.4$ nm）通过网孔效应也能对TSE做出贡献（见图3）。因此，由吸附曲线计算BJH孔径分布可以得到更可靠的数据结果。

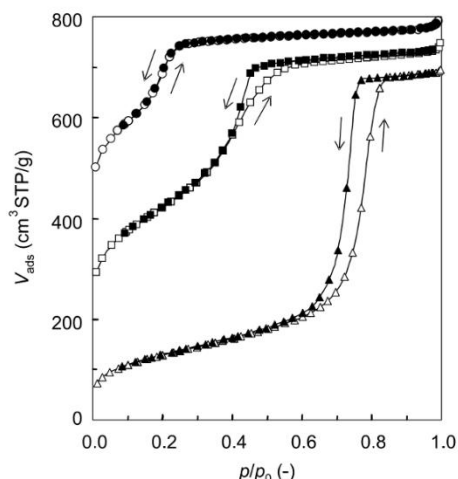


图3 N_2 @77 K时的吸附等温线(空心符号)和脱附等温线(实心符号)。其中，(○,●)为MCM-41分子筛(2 nm)，(□,■)为MCM-41分子筛(3 nm)，(△,▲)为SBA-15分子筛(8 nm)。括弧内为标称孔径值。

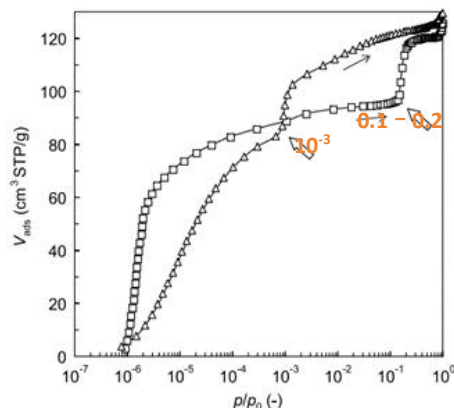
Fig. 3. N_2 adsorption (open symbols) and desorption (solid symbols) isotherms at 77 K of (○,●) MCM-41 (2 nm), (□,■) MCM-41 (3 nm), and (△,▲) SBA-15 (8 nm).

二、在MFI沸石中的从流体到结晶的相变

一般来说，ZSM-5和硅沸石等沸石分子筛上的吸附会产生I型类等温线，但无论用氮气还是氩气的吸附测量都受到MFI框架的特殊特性的影响，导致产生阶梯式等温线（图4），即在 $P/P_0 = 10^{-3}$ （Ar）和 $P/P_0 = 0.1 - 0.2$ （ N_2 ）时有额外的台阶。

图 4 硅沸石-1 沸石分子筛的高分辨 N_2 @77 K 吸附等温线 ($\square$) 和 Ar@87 K 吸附等温线 ($\triangle$)。

Fig. 8. High-resolution ($\square$) N_2 and ($\triangle$) Ar adsorption isotherms of silicalite-1, measured at 77 K and 87 K, respectively.



这种阶梯式等温线现象并不表明台阶处存在任何实际的多孔分布，而是因为微孔中吸附相的流体发生类晶体相变。相变似乎取决于微孔表面的能量特性。能量均匀的表面会在窄的 P/P_0 范围内产生明显的子台阶，而不均匀的表面则会显现出弥散模糊的台阶，覆盖更宽的 P/P_0 范围。就 MFI 沸石而言，这在很大程度上取决于框架的硅铝比(Si/Al)。Si/Al 比值非常高的材料（例如纯硅质顶级材料——硅沸石-1 的 Si/Al>100）具有能量相当均匀的表面，而增加 Al 含量（向 ZSM-5 转变）会导致能量不均。

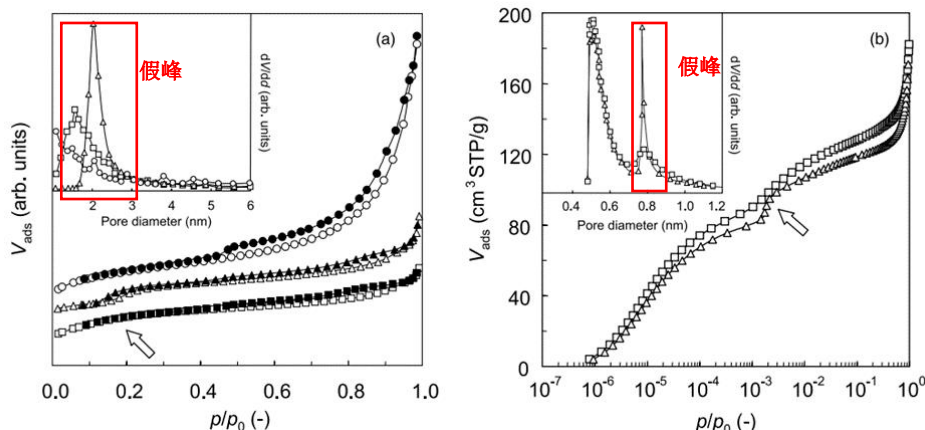


图 5 (a) N_2 @77 K 时的吸附等温线（空心符号）和脱附等温线（实心符号），其中 ($\square, \blacksquare$) 为煅烧后的 ZSM-5 分子筛，($\triangle, \blacktriangle$) 为水蒸汽处理的 ZSM-5 分子筛，($\circ, \bullet$) 为碱处理的 ZSM-5 分子筛。等温线已被重新缩放，以分离相变范围内不同材料的曲线。(b) 煅烧后的 ($\square$) 和水蒸汽处理 ($\triangle$) 的 ZSM-5 在 87 K 下的高分辨率 Ar 吸附等温线。插图：分别根据 BJH 和 SF 模型从吸附曲线得出的孔径分布图。

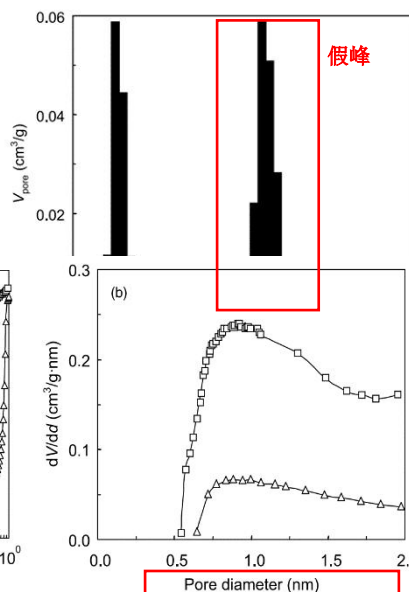
Fig.5. (a) N_2 adsorption (open symbols) and desorption (solid symbols) isotherms at 77 K of ($\square, \blacksquare$) calcined, ($\triangle, \blacktriangle$) steamed, and ($\circ, \bullet$) alkaline-treated ZSM-5. Isotherms have been rescaled to separate the curves of the different materials in the phase transition range. (b) High-resolution Ar adsorption isotherms at 87 K of ($\square$) calcined and ($\triangle$) steamed ZSM-5. Inset figures: PSD derived from the adsorption branch according to the BJH and SF model, respectively.

将SF模型应用于图4中的氩吸附等温线计算会得到双峰的孔径分布图（插图5b），其中0.55 nm的峰值孔径对应于MFI结构中的孔道。而图中0.8 nm处为假峰。这个假峰是因为SF模型将相变产生的等温线子台阶跃迁当作真实孔道导致的。同样，将BJH应用于氮吸附的介孔分布计算会在2nm以下产生假峰（插图5a），那里并不存在最可几孔径。

在目前的孔径分析模型中，流体到类晶体相变对微孔分布的影响几乎没有被考虑在内。即使NLDFT模型得到的PSD中还可能包括假峰。如图6所示，用美国知名公司的NLDFT计算的PSD结果显示，样品除了在0.56 nm处的预期孔径外，在0.9 nm左右还有一个额外的假峰（不存在的孔），该峰是通过氩吸附的NLDFT模型从硅沸石-1（图4）上的Ar吸附等温线的子台阶得出的。MFI与八面沸石、A型分子筛等其他沸石一样，广泛应用于催化和分离过程。因此，对于孔径分布中的假峰辨别和认知至关重要。

图6 由硅沸石-1 (silicalite-1) 沸石分子筛的Ar@87 K吸附NLDFT模型计算的微孔分布（等温线见图4）。

Fig. 6. NLDFT micropore size distribution derived from the Ar adsorption isotherm of silicalite-1 at 87 K (see Fig. 4).



三、在微介孔复合材料中的微孔区域假峰

对于同时具备微孔和介孔结构的材料，高含量介孔的存在会导致材料具有较大的介孔表面积，这将显著影响等温线低压段（微孔区域）的吸附行为，进而对 HK 和 SF 模型的微孔孔径分布（PSD）计算结果产生干扰。

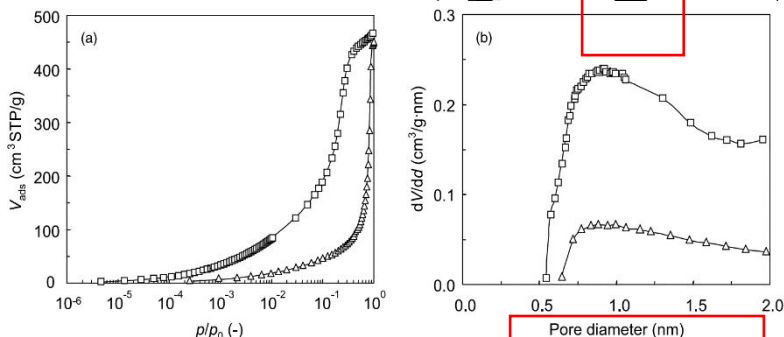


图7 MCM-41介孔分子筛（2 nm， $\square$ ）

和TUD-1介孔分子筛（10 nm，△）的高分辨Ar@87 K吸附等温线（a）及其SF微孔分布假峰（b）。

Fig. 7. (a) High-resolution Ar adsorption isotherms at 87 K and (b) derived SF micropore size distribution of (□) mesoporous MCM-41 (2 nm) and (△) TUD-1 (10 nm).

如图 7a 所示，纯介孔材料 MCM-41 和 TUD-1 的低压区氩吸附等温线，二者的孔径分别约为 2 nm 和 10 nm。尽管这些材料为纯介孔结构，但通过 SF 模型（图 7b）对吸附等温线进行分析得到的 PSD 结果在微孔范围内呈现出宽泛的弥散峰，且该峰峰值孔径约 1 nm。从微孔含量的角度来看，MCM-41 介孔分子筛的微孔含量似乎明显高于比表面积相对较低的 TUD-1 介孔分子筛。然而，事实上，这并非真实微孔的存在，而是由于高比表面积的介孔材料在低压区的吸附行为对传统微孔分析模型（如 SF 模型）产生了干扰。

如果对此一现象缺乏认识，可能会导致对该样品存在微孔孔径分布的误判，并得出样品微孔孔径分布变宽的错误结论。

关键词： 气体吸附 沸石分子筛 微介孔材料 孔径分析 假峰

参考文献

J. Groen, L. Peffer, J. Pérez-Ramírez. Pore size determination in modified micro- and mesoporous materials. Pitfalls and limitations in gas adsorption data analysis. *Microporous and Mesoporous Materials* 60 (2003) 1–17

Li-S电池：COFs的设计与合成

翟黎鹏^{1,*}

¹ 中原工学院先进材料研究中心, 河南省郑州市, 450001

*Email: lipengzhai@163.com

摘要正文： 锂硫电池因具有超高的理论能量密度，被认为是未来最有潜力的电化学储能体系。然而，正极侧硫反应动力学缓慢和电解液用量大的问题极大限制了锂硫电池的商业化应用。鉴于硫正极的固-液-固多相转化反应，需要借助高效催化材料，以实现贫电解液条件下高效的硫电化学反应。单原子催化材料（SACs）因具有较高原子利用率和可控电子环境，成为理想的硫电化学反应催化材料。本项目拟以一种新型SACs合成方法，设计开发含不同过渡金属的二维共轭卟啉基共价有机框架纳米片（CONs）作为高效硫反应催化材料。通过实验和密度泛函理论计算相结合，深入探究CONs结构组成及尺寸与催化硫电化学反应活性之间的构效关系，揭示CONs对锂硫电池反应的影响机制，提高贫液下锂硫电池的反应动力学。本项目将围绕CONs的制备、性质及单原子催化机制等关键科学问题展开探索，为构建高性能锂硫电池提供新思路。

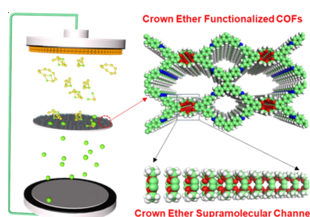


Fig. 1 Schematics of LiPS conversion on CE-COF electrocatalysts.

关键词： 共价有机框架；多硫转化；Li-S电池

参考文献

1. W. Qin, D. Han,* X. Zhang, H. Ma, Y. Wu, Z. Li, S. Bi,* **L. Zhai,*** Redox-active metal-covalent organic frameworks for dendrite-free lithium metal batteries. *Adv. Mater.* 2025, DOI: 10.1002/adma.202418638.
2. Z. Li, L. Sun, **L. Zhai,*** K.-S. Oh, J.-M. Seo, C. Li, D. Han,* J.-B. Baek, S.-Y. Lee,* Olefin-linked covalent organic frameworks with electronegative channels as cationic highways for sustainable lithium metal battery anodes. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 135, e202307459.
3. **L. Zhai,** G. Li, X. Yang, S. Park, D. Han, L. Mi,* Y. Wang, Z. Li,* S.-Y. Lee.* 3D Li+-accommodating covalent organic frameworks as ultralong cyclable high-capacity Li-Ion battery electrodes. *Adv. Funct. Mater.* 2022, 32, 2108798.
4. D. Han, W. Qin, M. Qiu,* Z. Zhu, L. Zhang, H. Li, Y. Wang, Y. Zhang, **L. Zhai,*** Covalent Organic Frameworks with Conductive EDOT Unit for Superior Lithium-Sulfur Batteries, *Nano Energy*, 2024, 134, 110585.
5. D. Han, L. Sun, W. Qin, **L. Zhai,*** Z. Li, Y. Sun, S. Tang,* Y. Fu,* Supramolecular Channels via Crown Ether Functionalized Covalent Organic Frameworks for Boosting Polysulfides Conversion in Li-S Batteries. *Energy Stor. Mater.* 2024, 65, 103143.
6. L. Sun,* Z. Li,* **L. Zhai,*** H. Moon, C. Song, K.-S. Oh, X. Kong, D. Han, Z. Y. Wu,* S.-Y. Lee,* L. Mi,* Electrostatic polarity-regulated, vinylene-linked cationic covalent organic frameworks as an ionic sieve membrane for long-cyclable lithium-sulfur batteries. *Energy Stor. Mater.* 2024, 66, 103222.

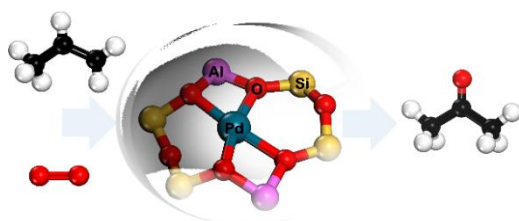
金属限域型分子筛上的烃类氧化反应研究

李玮杰¹, 邓欣¹, 李兰冬^{1*}

¹南开大学化学学院, 天津市, 300071

*Email: lild@nankai.edu.cn

实现对氧分子参与下的氧化反应, 尤其是烃类的选择性氧化, 并对氧化产物进行精准调控, 是一项极具挑战的任务。在此背景下, 含有限域金属离子的分子筛因其卓越的催化性能成为理想的催化剂。本工作中, 我们创新性地采用原位水热法构建了含有稳定且孤立的过渡金属离子FAU型分子筛 (Co@Y和Pd@Y) 催化体系, 为特定官能团的选择性催化 (如C=C和C-H键的活化) 提供了理想的配位环境。Pd@Y催化剂在烯烃选择性氧化至醛/酮的反应 (Wacker氧化) 中同样表现出色, 该体系的显著优势在于无需水和铜离子的参与, 仍可实现较高的反应效率和醛/酮选择性。通过NAP-XPS、CO-FTIR和Raman等先进表征技术, 我们揭示了Pd@Y在Wacker氧化过程中独特的Pd²⁺-Pd⁺-Pd²⁺氧化还原循环机制, 并通过DFT计算进一步验证了该机理。此外, Co@Y催化剂在乙苯的氧化转化中, 展现出了优异的催化性能。通过光谱分析结合密度泛函理论 (DFT) 计算, 我们揭示了氧气分子在孤立亚钴离子位点上的独特活化机制。活化后的氧气与乙苯作用产生高反应活性的O*物种, 从而实现了目标产物的精确调控。综上所述, 本研究采用的分子筛构筑策略为烃类选择性氧化提出了新机理, 并展现了其卓越性能在多个领域的广阔应用前景。



Wacker-type oxidation with Pd²⁺-Pd⁺ redox cycle

Fig. 1 Olefin Wacker oxidation catalyzed by Pd@Y

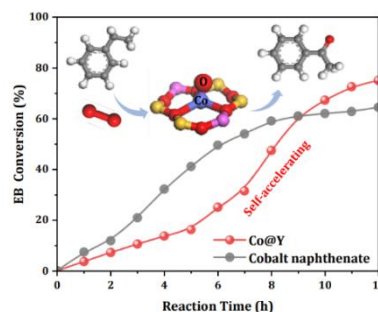


Fig. 2 Ethylbenzene selective oxidation catalyzed by Co@Y

关键词: 金属限域型分子筛; 烯烃Wacker氧化; 乙苯氧化; 氧活化

参考文献

- [1] Li, L*, et al. Zeolite-encaged isolated palladium redox centers toward sustainable Wacker-type oxidations. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146: 27600-9.
- [2] Li, L*, et al. Direct propylene epoxidation with molecular oxygen over cobalt-containing zeolites. *J. Am. Chem. Soc.* 2022, 144: 4260-8.
- [3] Li, L*, et al. Stable and uniform extraframework cations in faujasite zeolites. *J. Phys. Chem. Lett.* 2022, 13: 11419-29.
- [4] Li, L*, et al. Coordinatively unsaturated sites in zeolite matrix: Construction and catalysis. *Chin. J. Cat.* 2019, 40: 1255-81.
- [5] Li, L*, et al. Self-adjusted reaction pathway enables efficient oxidation of aromatic C-H bonds over zeolite-encaged single-site cobalt catalyst. *Chin. J. Cat.* 2024, 57: 133-42.

其他活动

限域传递与反应耦合

高铭滨*, 叶茂, 刘中民

¹ 厦门大学化学化工学院, 厦门, 361005

² 中国科学院大连化学物理研究所, 大连, 116023

*Email: mbgao@xmu.edu.cn

温度是影响物理、化学和生物过程的最重要参数之一。非侵入式测量局部温度（高空间分辨）的微小变化（高精度）的测温技术对于催化活性位工况条件的准确描述是至关重要的^{1,2}。本工作中，我们提出了在纳米孔沸石催化剂中原位合成发光温度敏感（LTS）纳米温度计的策略。基于原位合成 LTS 纳米温度计的策略，可以实现活性金属团簇在沸石中的空间落位的调控。纳米温度计和金属团簇活性位在沸石内共包封可以实现催化过程中纳米尺度上活性位点的时空分辨工况测温。

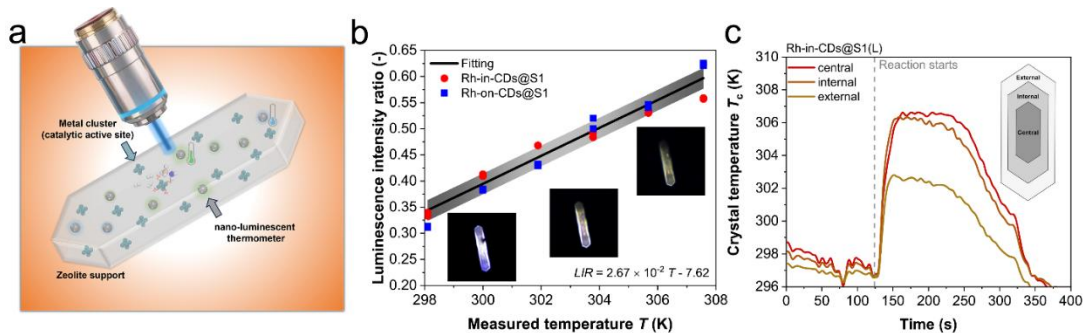


图 1: (a)光致发光测温的纳米温度计和金属团簇催化剂示意图；(b)发光强度比（LIR）与分子筛中纳米温度计温度（298 ~ 308 K）的校准曲线。(c)脱氢催化反应过程中分子筛催化剂内部温度的时空演变。

在图 1a 中，同时使用 405 nm 和 488 nm 的两个激发光，在 S1 分子筛内引导纳米温度计的光致发光。有趣的是，在图 1b 中，随着温度的升高，在相同的激发下，晶体的颜色由蓝色变为绿色。对于 Rh-in-CDs@S1(L)和 Rh-on-CDs@S1(L)样品，可以发现受限 CDs 的 LIR 与温度之间有很好的线性关系。这意味着 LIR 可以作为一个合适的温度指示器。本文采用脱氢反应作为放热模型反应。在图 1c 中可以发现，在催化过程中，靠近晶体中心的温升要高于靠近晶体边缘的温升。在这项工作中，我们还探讨了时空温差与催化动力学之间的关系。

通过清晰表征单个分子筛催化剂内温度的时空演变，这项工作为可视化单个分子筛催化剂内活性位点的工况温度提供了重要的技术方法。

关键词：分子筛催化剂；工况表征；限域扩散；限域传热；成像

参考文献

[1] T. Hartman, R. G. Geitenbeek, et al., ACS NANO, 2020, 14: 3725-3735.

[2] Y. Tian, M. Gao, et al., Journal of the American Chemical Society, 2024, 146: 4958-4972.

强化EMSI效应调控Pt-Pd/CeO₂多界面位点高效催化氧化甲苯机理研究

王磊，孙永刚，马玉龙*

宁夏大学化学化工学院，省部共建煤炭高效利用与绿色化工国家重点实验室，银川，750021

²工作单位，地址，邮编

*Email: yulongma796@sohu.com

摘要正文：分子氧和晶格氧的双重活化是挥发性有机化合物催化氧化的一个关键步骤。在这项工作中，我们使用MOF衍生的CeO₂作为电子供体，与Pt-Pd合金纳米颗粒构建了共催化剂，即Pt-Pd/CeO₂催化剂。详细表征结果显示，Pt-Pd合金物种诱导载体的电子供给增加，优化了金属-载体电子相互作用（EMSI）过程，并促进了晶格氧和分子氧的双重活化。Pt-Pd/CeO₂表现出优异的甲苯催化氧化性能，其TOFs（0.26 s⁻¹）高于Pt/CeO₂（0.05 s⁻¹）和Pd/CeO₂（0.02 s⁻¹）催化剂。一系列的原位实验技术和密度泛函理论计算表明，Pd价电子的引入可以显著增强Pt-Pd/CeO₂催化剂的EMSI效应，从而弱化Ce-O键，并促进晶格氧（O²⁻）和氧空位（O_v）的生成和循环，可以进一步增强Mars-van Krevelen过程和机制。此外，Pd电子传输过程优化了Pt物种的电负性，促进了甲苯的吸附和活化。这项工作对负载型合金催化剂上甲苯的氧化进行了深入研究，可以为合理设计工业应用的可靠催化剂提供实际指导。

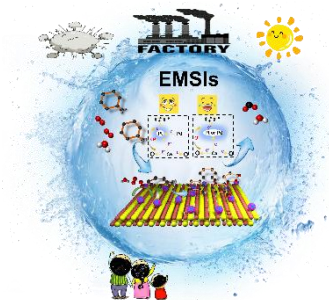


Fig. 1 Proposed surface mechanism and intrinsic mechanism of toluene oxidation over the EMSI-modulated Pt-Pd/CeO₂ catalyst

关键词：环境催化，甲苯氧化，EMSI，原位光谱，DFT计算

参考文献

- [1] L. Wang, Y.G. Sun, Y.L. Ma, M. Xu, J. Zhang, Y.B. Zhu, J. Ding, L. Zhu, J. Ma, W.X. Ji, L.Q. Wang, Y.Y. Li, Electron donation promotes the dual activation of lattice oxygen and molecular oxygen: The Pt-Pd/CeO₂ catalyst efficiently catalyzes toluene, *Journal of Catalysis*, 2023, 48, 115133.

第五分论坛

水系电池前沿论坛

邀请报告

高性能水系锌离子电池电极界面改性及关键材料制备

田华军^{1,2*}, 赵晨^{1,2}, 辛燕^{1,2}, 钟世雪^{1,2}, 葛运年^{1,2}

(1 华北电力大学, 国家储能技术产教融合创新平台, 2 能源动力与机械工程学院, 北京 102206,

E-mail: Huajun.Tian@ncepu.edu.cn)

摘要: 随着“双碳”战略的提出, 世界能源结构从传统化石能源向更为清洁、可再生的能源体系过渡。新能源技术的发展成为当代科技进步的重点。在这一过程中, 能源储存技术, 尤其是电池储能技术, 扮演着至关重要的角色。它不仅能够有效平衡电网的供需, 还能提高可再生能源的利用效率, 实现能源的持续和稳定供应。锌金属电池以锌金属作为负极, 通过二价锌离子进行能量存储, 实现了两电子转移, 具有更高的体积比能量。而利用水作为溶剂的水系锌电池其具有更高的安全属性。然而, 水系锌基电池目前还存在一系列关键科学问题和技术瓶颈亟需解决, 其中主要包括: 1) 充放电过程中, 金属锌负极表面存在不均匀的电场分布和吸附在锌表面的锌离子不受限制地二维扩散, 容易形成锌枝晶。锌枝晶容易刺破隔膜导致电池短路失效。2) 电池充放电过程中, 金属锌负极容易发生自腐蚀和电化学腐蚀现象, 降低锌负极的利用率。3) 在碱性锌空气电池中, 碱性电解质会引发锌负极的钝化和枝晶生长。总之, 如何解决水系锌离子电池关键材料制备、改性及深入开展水系锌离子电池存储机制研究是实现该高安全储能电池实用化应用的关键。本研究团队开发了系列水系锌离子电池关键正极材料以及锌基系列金属基负极界面改性技术, 并详细探讨了不同锌基电池在不同电解液体系下的界面反应机制与改性策略。通过引入合金基负极界面层有利于金属基电池负极界面反应动力学, 抑制枝晶的形成。本团队研究成果对面向本质安全长寿命水系锌离子储能电池关键电极材料的开发与设计提供理论指导。

关键词: 水系锌离子电池; 关键材料; 负极; 反应机制; 界面改性

高安全水系锌电池隔膜材料

徐桂银^{1,*}

¹先进纤维材料全国重点实验室，东华大学材料科学与工程学院，上海，201620

*Email: xuguiyin@dhu.edu.cn

摘要正文：水系锌离子电池(AZIB)的电化学性能受到锌金属负极稳定性差的制约。然而，使用传统的水系隔膜不利于锌金属的均匀沉积并且限制了电池循环寿命，阻碍了此类电池系统的大规模应用和安全性。在这里，我们报道了一种具有疏水/亲水结构域(标记为 PP-g-AA)的隔膜，其中聚丙烯(PP)聚合物主链能够阻隔部分水分子并防止副反应，接枝丙烯酸(AA)中的羧基官能团有助于调节界面电场和 Zn^{2+} 离子浓度场，从而显着促进锌离子通量的均质化，实现 Zn^{2+} 的无枝晶沉积。此外，PP-g-AA 隔膜组装的锌对称电池在 2 mA cm^{-2} 的电流密度下可维持4000 h以上的长期循环。组装的 $\text{Zn}||\text{Zn}_{0.27}\text{V}_2\text{O}_5\cdot n\text{H}_2\text{O}(\text{ZVO})$ 电池可在1000次循环后产生100%的保持率。该策略为进一步降低成本、促进AZIBs的工业化应用开辟了一条新途径。

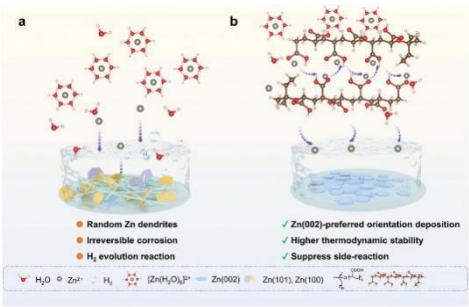


Fig. 1 Schematic illustration of the interfacial reactions at the electrode and electrolyte of Zn ions in AZIBs with (a) GF and (b) PP-g-AA separator.

关键词：水系锌离子电池；水系隔膜；锌金属稳定性

参考文献

- [1] X. Zhu, Z. Xu, T. Zhang, J. Zhang, Y. Guo, M. Shan, K. Wang, T. Shi, G. Cui, F. Wang, G. Xu, M. Zhu, Ultra-stable zinc anodes facilitated by hydrophilic polypropylene separators with large scale production capacity. *Adv. Funct. Mater.* 2024, 34, 2407262.

第六分论坛
退役锂电池清洁再生与能源颗粒
材料循环利用前沿论坛

主旨报告

能量输出锂回收技术：废旧电池资源化与废气治理新策略

摘要：

在“双碳”目标驱动下，锂离子电池（LIBs）退役潮催生了锂资源循环利用的迫切需求。传统回收方法（如火法冶金、湿法冶金）面临高能耗、高污染、低经济性等瓶颈。针对这一挑战，本研究提出一种电化学协同策略，通过联合废旧电池锂回收与工业废气中氮氧化物（NO₂）的捕获，同步实现锂资源回收、高纯度锂盐生产、清洁发电及废气净化等目标。该技术利用锂铁磷酸盐（LiFePO₄）电极的脱锂反应（ $\text{LiFePO}_4 \rightarrow \text{FePO}_4 + \text{Li}^+ + \text{e}^-$ ）与 NO₂ 的电化学还原（ $\text{NO}_2 + \text{e}^- \rightarrow \text{NO}_2^-$ ）之差，生成中间产物亚硝酸锂（LiNO₂），并通过空气氧化转化为高纯度硝酸锂（LiNO₃，纯度>99%）。该联合策略可以实现 97% 的锂回收效率以及每公斤电极回收产生 66 Wh 的电能，同时在回收过程中无需额外化学试剂消耗或高温高压条件，显著降低了碳排放与处理成本。此外，电位调控的 NO₂ 还原反应可选择性捕获含 CO₂/SO₂ 的工业废气中的 NO₂，克服了传统催化还原法对金属催化剂中毒失活的挑战。未来研究将聚焦三方面突破：一是优化锂离子膜稳定性与传质效率，提升规模化回收速率；二是开发多废气组分协同处理工艺，拓展对 NO 等污染物的兼容性；三是构建“电池回收-废气治理-锂盐再生”闭环产业链，推动锂资源从“线性消耗”向“循环增值”转型。

固态锂电池聚合物电解质的开发

郝舒萌^{1*}, 周伟东¹

¹北京化工大学, 北京市朝阳区北三环东路 15 号, 100029

* Email: haosm@buct.edu.cn

固态锂电池具有较好的安全性, 并可兼容锂金属/锂合金负极, 提升电池的能量密度。固态电解质是固态电池的关键材料, 其中聚合物电解质具有柔韧性高、界面接触好、成本相对较低等优势, 但其仍然面临三大问题: (1) 室温离子电导率偏低; (2) 电化学窗口窄; (3) 所用的锂盐成本较高。报告人聚焦聚合物分子结构设计, 致力于开发具有宽电化学窗口、高离子电导率的聚合物电解质。筛选了适配高电压锂金属电池的原位聚合路线, 从单体转化率和聚合物电解质电化学性能(Li⁺电导率和界面稳定性)两个方面, 对开环聚合和双键自由基聚合两种经典原位聚合路线进行了比较^[1]。利用“聚合物包水”结构, 拓宽了低锂盐浓度、高含水量水系电池电化学窗口, 并提供了锂盐回收策略, 为可持续发展绿色电池提供了新思路^[2]。

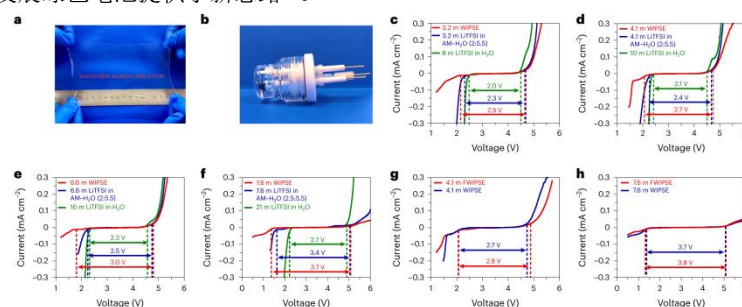


Fig. 1 Electrochemical windows of PHSEs and FPHSEs.

关键词: 固态电池; 锂电池; 聚合物电解质; 高电压; 原位聚合

参考文献

- [1] P. Li⁺, S. Wang⁺, J. Hao, X. Wang, S.-M. Hao, ⁺Y. Lu, H. Li, W. Zhou, ⁺Y. Li, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2023**, 62: e202309613.
- [2] S.-M. Hao⁺, J. Zhu⁺, S. He⁺, L. Ma⁺, W. Liu, Y. Zhang, X. Xie, X. Qin, X. Fan, H. Li, L. Zhang, ⁺W. Zhou, ⁺*Nature Sustain.*, **2024**, 7: 661.

微波-石墨烯能质作用的基础应用研究

韩晓刚*, 邓乐萍, 于琳竹

西安交通大学, 陕西省西安市中国西部科技创新港, 710100

Email: xiaogang.han@xjtu.edu.cn

摘要正文: 石墨烯吸收和转化微波能量产生剧烈的发光、放热和电弧等离子放电等现象。研究和利用该微波-石墨烯能质作用产生的极端条件进行理化反应, 如石墨烯表面处理、掺杂、复合等。本报告还将探讨这一技术用于气固相反应合成氨, 并尝试给出其机理。

关键词: 石墨烯; 微波; 合成氨; 能质作用

回收废铅酸电池用于 PEM 系统中的二氧化碳电解

摘要：全球变暖背景下，CO₂ 转化技术备受关注。通过电化学方法将 CO₂ 转化为甲酸等高附加值化学品，既能减少碳排放，又能实现资源循环，是“双碳”战略的重要方向。传统 CO₂ 电还原多在碱性条件下进行，但碱性环境会导致 CO₂ 与 OH⁻ 结合生成碳酸盐沉淀，造成催化剂失活和碳利用率低（高达 50% 碳损失）。如何避免碳酸盐形成，同时保持高效率 and 稳定性，是领域内长期未解的难题。铅酸电池全球年废弃量超 600 万吨，其电极含大量铅。若能将废弃铅回收并转化为高效催化剂，既能解决环境问题，又能降低电还原技术的成本，可谓“一举两得”。我们提出了一种创新的解决方案，从废弃铅酸电池中提取铅板，通过球磨工艺调控颗粒尺寸（微米至纳米级）。制备出铅-硫酸铅复合催化剂，兼具高导电性和化学稳定性。采用酸性电解液（pH=1），彻底规避碳酸盐沉淀问题。在电流密度 600 mA cm⁻²、电压 2.2 V 时，甲酸法拉第效率达 93%，单程 CO₂ 转化率 91%。连续运行 5200 小时（近 7 个月）性能无衰减，远超同类研究。通过原位表征技术发现，催化剂在反应中从 Pb-PbSO₄ 动态转变为 Pb-PbCO₃ 复合结构。DFT 计算表明，Pb-PbCO₃ 界面通过“晶格碳活化机制”优先吸附并活化 CO₂，抑制析氢副反应，从而在酸性条件下实现高效选择性。与阳极水氧化相比，采用氢氧化反应可降低系统电压，减少能耗。结合风电等可再生能源供电，每吨甲酸生产成本显著降低，具备规模化潜力。

退役石墨负极材料人工界面层修复研究

张海涛*

中国科学院过程工程研究所, 北京市海淀区中关村北二街 1 号, 100190

*Email: htzhang@ipe.ac.cn

摘要正文:

锂离子电池具有高比能、长循环、配置灵活等优点, 其在新能源汽车、储能和3C等领域具有广阔的应用前景。近年来, 退役锂离子电池量在逐年快速增长。天然石墨属于战略性不可再生矿产资源, 而人造石墨负极的制备是高耗能工艺, 因此对退役石墨负极的修复再生具有重要的经济和社会价值。本报告将归纳分析退役石墨负极的特性、除杂及再生过程形貌与微结构演变规律、人工界面层合成方法、离子传输改善提升机制, 阐明退役石墨修复再生电化学性能提升机理, 并对未来退役石墨负极高值化利用发展趋势进行展望。

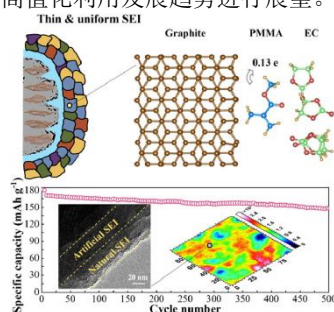


Fig. 1 Regenerated graphite anode enabled by an artificial electrolyte interphase layer

参考文献

- [1] Zhao L., Tian L., Li J., Shi F., Chang Y., Yan J., Zhang H.T. Recent Progress in the Recycling of Spent Graphite Anodes: Failure Mechanisms, Repair Techniques, and Prospects. *Energy Storage Materials*, 2024, 71, 103640.
- [2] Da H.R., Fang W.H., Zhu J.F., Li J., Pan S.S., Li J.J., Huang J.Q., Zhang, H.T., Zhang S.J. Superior Rate Capability of Small Regenerated Graphite Particles Induced by Homogeneously Distributed Current Density Derived from Cracks and Intrinsic Defects. *Small* 2023, 2304060
- [3] Da H.R., Pan S.S., Li, J., Huang J.Q., Yuan X.D., Dong H.T., Liu J. X., Zhang, H.T., Greatly Recovered Electrochemical Performances of Regenerated Graphite Anode Enabled by an Artificial PMMA Solid Electrolyte Interphase Layer, *Energy Storage Materials*, 2023, 56, 457–467
- [4] Da H.R., Li J., Zhang. H.T. Enhancing the depressed initial Coulombic efficiency of regenerated graphite anodes via the surface modification of a TiNb₂O₇ nanolayer. *Carbon*, 2022, 193,157-170
- [5] Da H.R., Zhang H.T., Gan M., Jiang D.F., Xing C.X., Zhang Z.Y., Fei L.F., Cai Y., Zhang, S.J. Epitaxial regeneration of spent graphite anode material by an eco-friendly in-depth purification route. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2021, 9 (48), 16192-16202

关键词: 退役石墨负极; 人工界面层; 电池回收; 储能技术; 能源材料;

复杂能源材料的超快精准合成与修复

万佳雨

未来电池研究中心，溥渊未来技术学院

上海交通大学

当代全球能源政策强调能源安全、绿色和低碳排放，凸显可持续能源发展的重要性。新能源技术与新型材料（尤其是先进电池材料）之间的联系显示了材料创新在推进可持续能源议程中的关键作用。然而，传统的材料长时间且劳动密集型的合成方法对高效地开发新材料构成了巨大障碍，从而阻碍了满足不断发展的社会需求的进程。为此，本报告探讨了先进电池材料的精确合成和回收利用方面的超快合成技术，可以秒级合成固态电解质及修复电池正极材料。这些先进方法有望彻底改变材料制备过程的效率。最后，我们将探讨在不同科学领域广泛采用超快合成方法所带来的机遇和挑战。

参考文献：

1. X. Hu#, Y. Yin#, C. Li, L. Zhou, L. Yang, Y. Feng, D. Zuo, C. Ning, D. Soham, S. Dai, L. Qiu*, L. Zeng*, H. J. Woo*, **J. Wan***, "Microwave-accelerated Direct Regeneration of LiCoO₂ Cathodes for Li-ion Batteries", **SCIENCE CHINA Chemistry**, 2024, Online (Invited paper for "Chemistry and the Dual Carbon Strategy" theme collection)
2. D. Zuo,# L. Yang,# Z. Zou, S. Li, Y. Feng, S. J. Harris, S. Shi, J. Wan and **J. Wan*** "Ultrafast Synthesis of Nasicon Solid Electrolytes for Sodium-Metal Batteries", **Advanced Energy Materials**, 2023, 13, 2301540
3. Y. Yin,# C. Li,# X. Hu, D. Zuo, L. Yang, L. Zhou, J. Yang, and **J. Wan*** "Rapid, Direct Regeneration of Spent LiCoO₂ Cathodes for Li-Ion Batteries", **ACS Energy Letters**, 2023, 8, 3005–3012
4. X. Hu, D. Zuo, S. Cheng, S. Chen, Y. Liu, W. Bao, S. Deng, S. J. Harris, **J. Wan***, "Ultrafast materials synthesis and manufacturing techniques for emerging energy and environmental applications", **Chemical Society Reviews**, 2023, 52, 1103-1128
5. Y. Feng#, L. Yang#, Z. Yan#, D. Zuo, Z. Zhu, L. Zeng, Y. Zhu*, **J. Wan***, "Discovery of High Entropy Garnet Solid-state Electrolytes via Ultrafast Synthesis", **Energy Storage Materials**, 2023, 63, 103053

失效锂电池电极材料的修复与再利用

周光敏

清华大学深圳国际研究生院，深圳清华大学城，518055

Email: guangminzhou@sz.tsinghua.edu.cn

报告摘要/Abstract:

随着新能源汽车、各类电子设备的普及，锂离子电池的使用量呈现爆发式增长，随之产生了大量废弃锂离子电池。废弃锂电池中包含大量的金属资源，处置不当既会造成资源浪费，也有潜在的环境风险。现有的商业化电池回收方法以火法、湿法回收方法为主，二者均需要将失效电池中的电极材料结构破坏到原子程度后进行再提取，用作新电极材料的制备，流程长、成本高，且涉及高温、强酸等极端条件的应用，经济效益与环境效益堪忧。如何开发创新的清洁回收方法，简化回收流程，开拓回收产物的再利用途径，是电池回收领域的重大挑战。报告人针对现有回收方法的缺陷，提出了在分子尺度直接对电极材料进行修复的直接回收思想，设计了低共熔溶剂直接修复失效钴酸锂正极、低温熔融盐修复高失效程度三元正极、多功能溶剂热及有机锂盐再生失效磷酸铁锂等创新回收方法；并对与之匹配的直接回收过程进行了闭环化设计；此外提出了失效电极材料向高性能电极材料、纳米催化剂等产物转化的高值化利用途径，大幅简化了回收流程，规避了极端条件的使用，为电池回收研究与产业提供了新的技术体系与理论指导。

废旧锂电电极材料的资源化再利用研究

吴兴隆*

东北师范大学，吉林省长春市人民大街 5268 号，130024

*Email: xinglong@nenu.edu.cn

随着锂离子电池大规模化应用于日常生活的各个方面，大量的废旧锂离子电池正在产生，如不能获得很好的回收处理，势必带来严重的资源浪费和环境污染等问题。在本次报告中，将重点介绍本课题针对废旧锰酸锂、磷酸铁锂等锂离子二次电池中锰酸锂正极、磷酸铁锂正极和石墨负极等整体电极，设计新型回收路线进行再利用方面的研究进展：（1）以废旧锰酸锂正极为原料，通过添加铁源和磷酸盐，控制制备了高性能碳包覆磷酸锰铁锂正极材料。过程中，废旧锰酸锂正极中原有粘结剂、导电炭黑等添加剂被用作碳源前驱体，实现了碳包覆磷酸锰铁锂中碳网络的构筑；（2）对废旧石墨负极进行回收处理，获得了高性能的钠离子电池和钾离子电池负极材料，并对其脱嵌钠/钾机理进行了原位XRD研究和分析。（3）分析废旧磷酸铁锂正极材料的失效机制，设计独特配位化学策略，实现了高效高性能修复；将废旧磷酸铁锂正极与废旧石墨负极复合，进行了正、负极材料的同步回收与再利用设计，开发了具有阴阳离子接力储能工作特性的新型双离子电池。

关键词：锂离子电池；废旧电池；钠离子电池；回收与再利用

参考文献

- [1] X.-X. Zhao, X.-L. Wu et al. Dynamic Li⁺ Capture Through Ligand-Chain Interaction for the Regeneration of Depleted LiFePO₄ Cathode, *Advanced Materials* 2024, 36, 2308927.
- [2] M. Du, X.-L. Wu et al. Upcycling the retired graphite/LiCoO₂ batteries for the high voltage graphite/LiCoPO₄-co-workable dual-ion batteries. *International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials* 2024, 32 (7), 1745-1751.
- [3] S.-H. Zheng, X.-L. Wu et al. Direct and rapid regeneration of spent LiFePO₄ cathodes via a high-temperature shock strategy. *Journal of Power Sources* 2023, 587, 233697.
- [4] M. Du, M., X.-L. Wu et al. Direct reuse of oxide scrap from retired lithium-ion batteries: advanced cathode materials for sodium-ion batteries. *Rare Metals* 2023, 42 (5), 1603-1613.
- [5] X.-T. Wang, X.-L. Wu et al. Prospects for managing end-of-life lithium-ion batteries: Present and future. *Interdisciplinary Materials* 2022, 1, 417-433.
- [6] Y. F. Meng, X.-L. Wu et al. Concurrent recycling chemistry for cathode/anode in spent graphite/LiFePO₄ batteries: Designing a unique cation/anion-co-workable dual-ion battery. *Journal of Energy Chemistry* 2022, 64, 166-171.
- [7] J.-L. Yang, X.-L. Wu et al. Advanced cathode for dual-ion batteries: Waste-to-wealth reuse of spent graphite from lithium-ion batteries. *eScience* 2022, 2, 95.
- [8] H.-J. Liang, X.-L. Wu et al. Staging Na/K-ion de-/intercalation of graphite retrieved from spent Li-ion batteries: in operando X-ray diffraction studies and an advanced anode material for Na/K-ion batteries. *Energy & Environmental Science* 2019, 12, 3575.

废旧锂电池正极材料直接再生技术研究

废旧锂电池正极直接再生技术具有碳排放低和二次污染少等优势，成为重要的电池回收途径。磷酸铁锂（ LiFePO_4 ）正极废料因锂缺失导致的 Li/Fe 反位缺陷和 FePO_4 晶格畸变，严重阻碍了其修复再生效率。本论文提出**预退火**策略诱导 FePO_4 相转换为 $\text{Fe}_2\text{P}_2\text{O}_7$ 相，释放材料内部残余应力以缓解晶格畸变，同时降低 Fe-O 键能，促进 Li-Fe 反位缺陷的消除，为补锂再生提供良性条件。此外，通过原位诱导表面导电碳网络重构，有效抑制再生 LiFePO_4 正极近表面结构的退化，再生料在 2 C 倍率下循环 1000 次后容量保持率达 80.2%。本项目提出的直接再生策略兼具显著环境与经济优势，并展现出突出的规模化应用潜力。

邀请报告

退役层氧正极/石墨负极的结构解析和高值化利用

摘要：在全球锂离子电池年产量突破 2.6TWh（复合增长率 25%）的背景下，电动汽车与储能系统的快速普及导致退役电池规模激增，引发严重的资源供应链危机与环境负担。当前主流冶金回收技术（火法/湿法）虽能提取金属元素，但存在能耗高（>800℃高温处理）、污染大（强酸使用量达 3-5L/kg 材料）回收成本高等问题。直接再生技术虽通过结构修复（锂空位填充、阳离子混排抑制）可恢复材料性能，但现有研究多局限于单一电极处理，且面临岩盐相转化不完全、锂离子扩散系数低等问题。负极端，石墨负极再生后比容量衰减显著。本研究提出协同再生策略，实现镍基层状氧化物正极（ $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ ）与石墨负极的闭环高值化利用。正极再生方面，创新开发复合锂盐辅助热分解诱导的三重修复机制：通过高温 XRD 实时追踪的锂源动态补偿、体相掺杂及离子导体包覆过程。负极再生方面，基于石墨层间距精准调控与缺陷工程，将退役负极转化为少层石墨烯薄片（FGF）预锂化催化剂。研究初步评估了电池闭环回收的经济性（处理成本降低 57%）与工业化适配性（兼容卷对卷制造）。

基于喷雾热解的退役动力电池优先提锂-前驱体制备一体化研究

李滔^{1*}

¹南华大学，湖南省衡阳市蒸湘区常胜西路 28 号，邮编 421001

*Email: li-tao@usc.edu.cn

退役动力电池的高效循环利用是推动电动汽车产业可持续发展的关键。然而，现有湿法回收技术试剂消耗大、高盐废水多，且回收产物需共沉淀制备正极材料前驱体，导致再生过程冗长、环保性不足，亟需突破性改进。本文提出“氯化浸出-喷雾热解-水浸分离”新方法，耦合优先提锂与前驱体制备两大环节：首先以氯化浸出将废旧三元正极材料转化为金属氯盐溶液，利用氯化锂与过渡金属氯盐的热解温差，通过喷雾热解技术使其转化为过渡金属氧化物和氯化锂粉体，最后水浸分离获得氯化锂及氧化物（可直接用作正极前驱体）。本文围绕多元金属氯盐热解的物相转变规律及其对嵌锂行为的影响开展研究，构建多元金属氯盐高温分解热力学模型及物相调控策略，并解析氧化物前驱体物相组成对正极材料电化学性能的作用机理，实现锂与过渡金属的高效分离及高品质氧化物前驱体制备。本研究将为退役三元动力电池的短流程、高值化循环利用提供理论和关键技术支撑。

关键词：退役锂离子电池；资治材一体化；选择性提取；喷雾热解；三元正极材料

湿法刻蚀助力高效单晶化回收

苏新*

哈尔滨工业大学（威海）先进锂电池技术研究中心
海洋科学与技术学院，山东省威海市环翠区文化西路 2 号，264200

*E-mail: sux@hit.edu.cn

报告摘要

碳中和背景下，电动车和储能市场快速增长，综合考虑环境保护、锂资源区域约束、贵金属价格因素，废旧锂离子电池(LIBs)回收再利用是一项必要工作^[1-2]。国内目前回收三元锂电池的方法是把正极材料酸溶解，除杂完后用化学沉淀法回收 Ni、Co、Mn 和 Li 等贵金属，但实际操作中存在污染大，能耗高和循环周期长等主要缺点^[3]。直接回收被认为是进一步在非破坏性条件下处理废 LIBs 的一种可能的替代方法^[4-5]，然而，大多数现有的直接再生方法仅仅集中在修复正极上，并未进一步提升其性能。

本工作基于磷酸定向蚀刻法将报废的三元 NCM 多晶材料直接再生为单晶材料，同时在升级回收过程中，在单晶 NCM 材料表面实现了包覆和离子的掺杂。得益于单晶结构和表面改性的协同效应，升级的单晶 $\text{LiNi}_{0.65}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.15}\text{O}_2$ 表现出优异的电化学性能，包括出色的倍率性能（10C 下~142 mAh g⁻¹）以及优异的循环稳定性（0.33C 下 100 次循环后~99%的保持率）。鉴于这种升级回收方法的简单性和有效性，提供了一种可持续的、节约资源的、高价值的报废 LIBs 回收处理新思路。此外，改性后的单晶回收材料能够有效减轻循环过程中的相不均匀性、结构坍塌和化学机械降解，有望克服现有正极材料的电压上限，提高锂的利用率和电池的循环寿命，为实现高压材料的应用提供了关键的指导意义^[6]。

关键词：锂电池回收；三元正极材料；刻蚀法；单晶；表面改性

参考文献：

- [1] T. Yang, D. Luo, A. Yu, Z. Chen, *Adv. Mater.* **2023**, 35, e2203218.
- [2] X. Xiao, L. Wang, Y. Wu, Y. Song, Z. Chen, X. He, *Energy Environ. Sci.* **2023**, 16, 2856.
- [3] Z. Liang, C. Cai, G. Peng, J. Hu, H. Hou, B. Liu, S. Liang, K. Xiao, S. Yuan, J. Yang, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2021**, 9, 5750.
- [4] R. E. Ciez, J. F. Whitacre, *Nat. Sustainability* **2019**, 2, 148.
- [5] Y. Jin, T. Zhang, M. Zhang, *Adv. Energy Mater.* **2022**, 12, 2201526.
- [6] K. Wang, H. Zhang, W. Dou, K. Wang, T. Wang, X. Su, *Adv. Funct. Mater.* **2024**, 2418866

动态共价聚合物气凝胶及在储能器件中的潜在应用

张新海*

上海市松江区人民北路 2999 号

xhzhang@dhu.edu.cn

动态共价聚合物气凝胶凭借其可逆化学键网络、高孔隙率及可调控功能化特性，为下一代高性能电池隔膜设计提供了新思路。本文基于聚亚胺气凝胶（PIA）的分子工程策略，提出一种自支撑功能化隔膜，通过精准调控电子云密度（ECD）分布，实现了锂金属电池（LMBs）中锂离子的高效传输与均匀沉积。该隔膜通过三(2-氨乙基)胺与 1,3,5-三(对甲酰基苯基)苯的动态亚胺缩合反应构建，形成富含亚胺（N1）和叔胺（N2）位点的三维网络。理论计算表明，N1 与 N2 位点因 ECD 差异，形成协同的“推-拉”效应，显著降低了 Li^+ 的界面扩散势垒，促进二维均匀成核，有效抑制枝晶生长。此外，PIA 隔膜具备 78% 的高孔隙率与 0.92 mS cm^{-1} 的离子电导率，其分级多孔结构可均匀化 Li^+ 通量，并限制阴离子迁移，进一步抑制空间电荷积累。实验表明，采用 PIA 隔膜的 $\text{Li}||\text{Cu}$ 半电池在常规碳酸酯电解液中循环 80 次后库伦效率达 91%，锂对称电池在 1 mA cm^{-2} 下稳定循环 450 小时，且锂沉积形貌致密无枝晶。与聚丙烯隔膜相比，基于 PIA 的 $\text{NCM811}||\text{Li}$ 全电池容量 200 次循环后保持率 84%。本研究通过分子尺度化学设计与多级孔结构耦合，为开发兼具高离子传输效率与界面调控能力的动态共价聚合物气凝胶隔膜提供了新范式，同时其动态共价键特性暗示潜在的可降解或可回收性，为绿色电池技术开辟了前瞻方向。

退役锂离子电池正极直接修复研究

在全球能源转型进程中，锂离子电池作为核心储能介质，广泛应用于便携电子设备及电动汽车等领域，其需求的指数级增长导致退役锂电量激增。传统锂电回收侧重材料提取再利用，存在流程冗长、污染重等问题。鉴于此，开发兼具高效、经济与环保特性的退役锂电正极修复技术成为当务之急。报告人探索了多种直接修复方法。借助 $\text{LiOH-Na}_2\text{SO}_4$ 熔盐策略，将退役多晶 $\text{LiNi}_{0.88}\text{Co}_{0.095}\text{Al}_{0.025}\text{O}_2$ (NCA) 升级为高附加值的单晶和富锂正极材料。运用 LiOH-NaCl 熔盐体系修复退役富镍 $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ (NCM)，恢复微观结构，显著消除 Ni^{2+} 和氧空位。针对退役磷酸铁锂 (LFP)，提出晶格重塑与非溶剂诱导相分离前躯体造粒相结合的方法，重新合成的材料性能优异。报告人在退役钴酸锂 (LCO) 正极片的自适应结构调控方面也进行了一些研究，近期研究关注退役层状正极材料的普适性升级回收策略。

可持续低温电解液的锂离子脱配体

锂离子脱除第一溶剂化壳层中的溶剂和阴离子（“脱配体”）所需要的能量较高，在整个传输中占有很大的能量比例，穿过 SEI 所需要的能量大约在 20 kJ mol^{-1} ，而脱配位所需要能量约为其 2~3 倍（ $50 - 70 \text{ kJ mol}^{-1}$ ）。理解不同类型电解液所产生的溶剂化层，明晰界面电荷转移对“脱配体”这一至关重要的过程，成为调控界面动力学反应的关键问题之一。本研究着眼于低温下 Li 离子的脱配体动力学，从电解液角度探究提升低温锂电池电化学性能的关键因素。

口头报告

基于第一性原理计算的硫基固态电解质回收方法研究

郝伟^{1, *}

¹上海交通大学, 中国上海市闵行区东川路 800 号, 邮编: 200240

*Email: simonhao@sjtu.edu.cn

摘要正文: 硫基固态电解质凭借其杰出的离子传导能力和界面兼容性成为推动全固态电池商业化进程的核心材料。构建有效的废弃电池回收体系, 不仅有望加速硫基固态电解质在电池领域的广泛采纳与可持续发展, 还能有效遏制硫化物不当处理引发的有毒气体排放, 实现经济效益与环境保护的双赢局面。本研究运用第一性原理计算方法, 结合从头算分子动力学模拟, 深入剖析了硫基固态电解质在电池循环周期中的失效机制, 并细致研究了废弃电池中电解质组分的种类与含量分布, 为设计精准的化学反应流程、优化工艺参数以及提升回收效率奠定了坚实的理论基础。进一步地, 我们探索了掺杂改性硫基固态电解质的回收策略, 通过对比分析不同掺杂元素与浓度下的回收条件及能量转换路径, 揭示了掺杂对电解质结构可逆性和回收反应动力学的影响规律。本研究不仅为硫基固态电解质的回收工艺优化提供了科学依据, 还开创性地探索了通过元素设计提升回收效率的新途径, 为实现其高效且环保的回收利用提供了坚实的理论基础与技术支持。

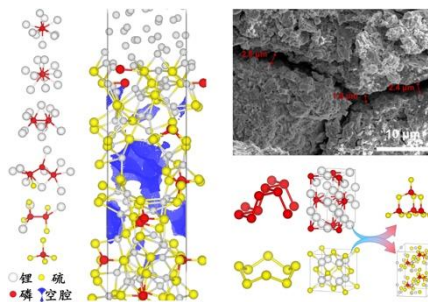


Fig. 1 Figure title in English

关键词: 硫基固态电解质; 衰退特性; 成分分布; 回收方法; 第一性原理计算。

参考文献

- [1] W. Hao, M. Lee, and G. Hwang* First-principles Assessment of Chemical Lithiation of Sulfide Solid Electrolytes and Its Impact on Their Transport, Electronic and Mechanical Properties. *J. Power Sources*, 2023, 560: 232689.
- [2] W. Hao, S. Basu, and G. Hwang* First-Principles Prediction of Reaction-Induced Structural Evolution at the Interface between Lithium Metal and Sulfide Electrolytes. *J. Phys Chem C*, 2024, 128(11): 4440-4447.

基于深度共晶体系的绿色电解液设计

摘要：在“双碳战略”驱动下，电动车及储能产业的高速发展推动锂离子电池需求激增，随之而来的废旧电池处理问题亟待解决。目前，正极材料的高效回收技术已趋成熟，石墨负极与隔膜的再生路径亦逐步完善，但传统电解液因其复杂的有机溶剂（如碳酸酯类）和有毒锂盐（如 LiPF_6 ）存在易燃、易分解、难回收等痛点，成为电池绿色循环的关键瓶颈。针对这一挑战，本研究提出基于深度共晶体系的绿色电解液设计策略，为电解液的全生命周期环保化提供创新方案。深度共晶电解液（Deep Eutectic Electrolytes）由低毒、低挥发的酰胺类溶剂（如 N-甲基-2,2,2-三氟乙酰胺）与热稳定锂盐（如 LiDFOB ）通过分子间强相互作用（如氢键、路易斯酸碱配位）构建，其独特的温度响应特性可实现液态-固态相态的可逆调控：在电池运行温度下保持高离子电导率，而在回收阶段通过升温诱导体系固化，便于通过物理筛分或溶解-析出法高效分离组分。此外，该体系组分可通过分子结构优化实现“绿色设计”，例如选用生物基原料或全氟化修饰以降低生态毒性。实验表明，此类电解液不仅具备宽温域（ $-20\sim 150^\circ\text{C}$ ）兼容性和非燃特性，其溶剂化结构的温度依赖性还可动态调控界面反应，减少高温副产物生成，进一步提升回收纯度。未来我们的研究将聚焦于三方面：一是开发多组分协同的深度共晶配方，兼顾高电化学性能与低温固化特性；二是构建闭环回收工艺链，结合溶剂萃取、膜分离等技术实现电解液组分的无损再生；三是推动与固态电解质、生物降解材料的交叉融合，打造从合成、应用到回收的全链条绿色电解液体系。这一技术路径有望突破锂电池可持续发展的最后一道壁垒，助力新能源产业真正迈向“零废弃”时代。

可持续高分子材料

机械互锁聚合物（MIPs）是一类具有独特拓扑结构的高分子材料，其分子链通过机械键相互锁定，赋予材料优异的动态性能和自修复能力。超分子化学为 MIPs 的设计与合成提供了理论基础，通过非共价相互作用（如氢键、 $\pi-\pi$ 堆积）实现分子间的精确组装。这种结合不仅拓展了高分子材料的应用领域，还为开发可持续高分子材料提供了新思路。通过引入可再生单体或生物基原料，机械互锁聚合物有望实现绿色合成与降解，推动高分子材料向环境友好型方向发展，助力可持续发展目标的实现。

摘要：随着电动汽车和智能电网的快速发展，高能量密度锂金属电池（LMBs）成为下一代储能技术的焦点。其中， $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ （NCM811）正极材料因其高比容量（ $>200\text{ mAh/g}$ ）和高压特性（ $>4.3\text{ V}$ ）备受关注。然而，传统碳酸酯基电解液（RCEs）与高活性锂金属负极及高压正极间的界面副反应，导致电极/电解液界面不稳定，引发锂枝晶生长、过渡金属溶出、产气等问题，严重限制了其循环寿命和安全性。针对这一挑战，本研究通过一步合成法开发了一种新型胶体电解质，利用均匀分散的 Li_3P 纳米颗粒协同稳定正负极界面，显著提升了 NCM811||Li 全电池的高压循环性能。

其他活动

失效磷酸铁锂正极材料的直接修复

摘要

针对退役磷酸铁锂电池正极材料结构塌陷与锂元素流失导致的容量衰减问题，本研究提出了一种直接修复技术实现活性物质再生，实现了从失效材料到高性能正极的一步法转化。目前该技术已完成吨级中试，修复成本较传统再生工艺大幅降低，在动力电池梯次利用领域具有显著技术优势，为构建电池全生命周期管理体系提供了关键技术支撑。

基于机械互锁聚合物的肌肉仿生的具备可循环功能的锂电池固态电解质

摘要

针对传统液态电解质在锂离子电池中存在的安全隐患和循环性能瓶颈，本研究创新性地开发了一种基于机械互锁聚合物（MIPs）的肌肉仿生固态电解质体系。该材料通过分子层面的轮烷 / 索烃结构设计，构建出具有动态可逆交联网络的三维超分子骨架，在室温下即可实现高离子电导率。该体系突破了传统固态电解质脆性大、不可回收的限制，成功实现了从材料设计到电池应用的全生命周期绿色化。

聚氨酯基可再生电解质

针对传统锂电池电解质存在的不可再生性及环境负荷问题,本研究开发了一种基于动态聚氨酯网络的可再生电解质体系,实现了材料的闭环再生。该体系突破了聚氨酯材料在电化学环境中的稳定性瓶颈,通过分子设计实现了电解质从制备到回收的全流程绿色化。

具备“快释放”功能的电池负极粘结剂

随着锂离子电池在新能源领域的广泛应用，废旧电池的高效回收成为实现可持续发展的关键环节。针对传统电池拆解过程中活性材料分离效率低、能耗高的问题，我们开发了一种具有“快释放”功能的新型水系粘结剂。该粘结剂通过分子结构设计，可使粘结剂网络在较短时间内迅速崩解，实现电极材料与集流体的高效分离。这种创新技术显著缩短了拆解周期，降低了能耗成本，为规模化电池回收提供了绿色高效的解决方案，对推动电池产业循环经济发展具有重要意义。

具备“可降解、再交联”功能的锂二次电池隔膜

摘要：

针对传统聚烯烃隔膜在锂二次电池中存在的环境不友好性及循环性能衰减问题，本研究设计了一种基于动态共价键网络的可降解再交联隔膜材料。这种“降解 - 再生”循环技术突破了传统隔膜的一次性使用限制，实现了电池材料的全生命周期闭环管理，为构建可持续电池产业链提供了重要技术支撑。

随着全球电动汽车和电子设备销售的快速增长，对可靠高效的电化学储能系统的需求变得越来越重要。然而，在锂离子电池中，用作商业负极材料的石墨在提高单位体积和重量的能量密度方面遇到了困难。锂金属作为高能量密度电池中最有吸引力的负极，具有更高的理论容量（石墨：372 mAh g⁻¹、锂金属：3860 mAh g⁻¹）和最低的氧化还原电位，成为下一代负极材料的理想候选者。尽管有这些优点，但金属锂电池仍存在一些挑战，例如锂沉积不均匀，形成锂枝晶，这会降低金属锂电池的循环寿命和安全性。

锂枝晶形成可以归因于较差的 Li⁺传输和不稳定的固体电解质界面（SEI）。为解决不理想 Li⁺传输和不稳定的 SEI 等挑战，以及抑制枝晶生长，研究者们开发了一系列策略：（1）开发无机材料涂覆修饰的隔膜，吸附阴离子，诱导高 Li⁺迁移数；（2）在电池循环之前对锂金属负极表面进行预处理以形成刚性 SEI；（3）引入保护层作为人工 SEI 以稳定负极界面；（4）改变电解液中盐-溶剂组成，加入各种添加剂以生成稳定的 SEI,调节 Li⁺传输机制和 SEI 结构组成。

目前，研究已发现各种类型的纳米颗粒表现出优异的抑制锂枝晶生长和提高金属锂电池的循环稳定性方面的关键作用。然而，目前关于悬浮电解液的研究有限，悬浮添加剂对于锂离子体相传导，以及界面结构和电化学过程的影响机制尚不明确；纳米颗粒的形貌、尺寸和化学成分等特性对于电解液物化性质（粘度，离子电导率，溶解化结构等）的调控机理有待研究，悬浮添加剂的筛选缺乏科学理论指导。本课题以通过调节不同电解液体系和电流密度控制锂沉积后在空气中氧化，来自制 Li₂CO₃，以及其他类型的悬浮添加剂，构建醚类和酯类悬浮电解液，系统研究悬浮添加剂对于电解液体系的影响规律，在纽扣型半电池（锂铜，锂对称电池）和实用化的磷酸铁锂全电池体系测试电解液处于不同测试条件和温度下的电化学性能，深入研究悬浮电解液提升电池性能的微观机制。

第七分论坛

含能颗粒前沿论坛

张睿^{1,*}

¹南京理工大学能源与动力工程学院, 江苏省南京市玄武区孝陵卫街 200 号, 210094

*Email: zhangrui@njust.edu.cn

摘要正文: 传统固体火箭发动机因结构简单、成本低等优势广泛应用于军事于航天领域^[1], 但其存在燃烧不可控、无法多次启停以及无法进行实时推力调节的缺陷, 难以满足现代战场和空间探测的战略需求^[2]。对此, 美国率先提出并研制了燃烧可控的电控固体推进剂, 通过施加电能控制推进剂点火/熄灭, 并通过电压大小调节燃速, 实现燃烧可控。然而目前已有的电控固体推进剂的性能无法满足大型发动机^[3], 并且在大型发动机应用中, 因其燃烧过程控制需持续施加电能, 导致系统能耗过高, 不利于推进剂燃烧全过程的控制。为此, 研究通过向适用于中、重型发动机, 但电响应性能较差的理查德·纳卡实验火箭推进剂 (RNX) 中, 引入改性粘合剂 (聚氧化乙烯, PEO) 提升导电性, 并引入改性金属 (纳米铝粉, nAl) 作为能量补偿, 研制了一种新型 RNX 基电控固体推进剂。通过燃烧启停实验评估电控响应特性, 并结合化学平衡计算软件 (NASA-CEA) 分析不同组分推进剂对理论燃烧性能的影响规律。结果表明, 引入的 PEO 与 RNX 推进剂的氧化剂硝酸钾通过分子间络合作用形成了导电网络结构, 显著改善了推进剂的电控性能, 在 25% 质量含量时电控性能最佳, 可实现 60 V 低电压点火及多次稳定启停控制; 其理论燃烧性能计算结果如图 1 所示, PEO 质量含量为 25% 的 RNX-PEO 推进剂相较于传统 RNX 推进剂, 理论比冲提升 20.5%, 绝热火焰温度提高 22.3%。nAl 的引入作为推进剂的能量补偿, 这一部分能量可以替代推进剂在通电燃烧时所需的电能, 在 3.5% 质量含量时推进剂具备断电自持燃烧能力, 并维持 60 V 的点火电压; 其理论燃烧性能计算结果如图 2 所示, 随着 nAl 质量分数的增加, 推进剂的理论比冲和绝热火焰温度均呈现递增趋势, 其中 nAl 质量含量为 3.5% 的 RNX-PEO-Al 推进剂相较于 RNX-PEO 体系, 理论比冲提升 2.4%, 绝热火焰温度提高 12.1%。电控固体推进剂的大型化仍是一个待解决的问题, 上述研究通过 nAl 和 PEO 的双组分改性, 在降低推进剂系统电控能耗的同时实现性能提升, 有望为电控固体推进剂的大型化应用提供新的思路。

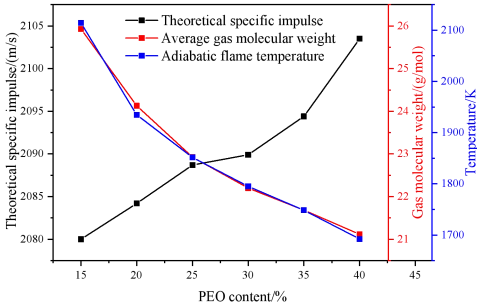


Fig. 1 RNX-PEO theoretical combustion performance

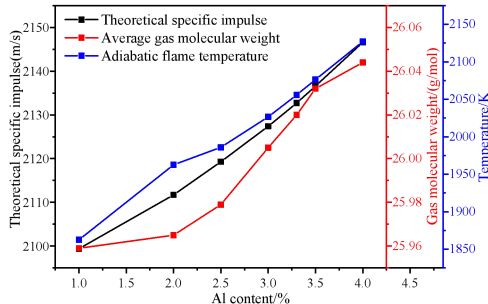


Fig. 2 RNX-PEO-Al theoretical combustion performance

关键词: RNX 基推进剂; 电控燃烧; 纳米铝粉; 聚氧化乙烯; 推进剂改性

参考文献

[1] 马帅, 郭健鑫, 周磊, 等. 固体火箭发动机技术发展综述[J]. 火箭推进, 2023, 49 (2) :1-14.
[2] 刘佩进, 魏少娟, 王琢璞, 等. 固体火箭发动机燃烧不稳定研究进展与展望[J]. 推进技术, 2021, 42 (9) :1921-1935.
[3] 夏旭, 付小龙, 胡少青, 等. 智能弹药用新型电控固体推进剂的研究进展[J]. 火炸药学报, 2024, 47 (4) :287-304.

口头报告

铁改性硼粉的微区复合与燃烧特征研究

王彦军¹, 张思源^{1,*}, 阴荫¹, 李铁刚¹

¹北矿新材科技有限公司, 北京市昌平区沙河富生路5号, 102206

*Email: zhangsiyuan@bgrimm.com

摘要正文: 硼的理论质量热值高达58000KJ/kg左右[1], 约为镁的2.3倍、铝的1.9倍[2], 是目前已知除铍以外质量热值最高的元素[3], 这也使得硼成为一种广泛应用于炸药和推进剂中的高能燃料[4]。然而, 由于硼表面有一层氧化物阻碍了硼的顺利点火[5], 并且硼在空气续燃烧时, 表面氧化层与空气中的水分在高温下反应生成了一种中间体[4,6] (即HOBO), 进一步影响了硼的持续燃烧过程。为了更大程度的释放硼的燃烧潜能, 使用铁对硼粉进行表面改性, 得到了铁含量5wt.%, 10wt.%, 20wt.%的硼铁复合粉。利用激光粒度仪、扫描电镜、高分辨透射电镜、电子探针、激光点火、燃速测试仪和同步热分析仪等设备分别对复合后粉末的粒径分布、微观形貌、界面元素分布和点火燃烧等性能进行表征, 结果表明复合粉D50均在1μm以下, 铁以小颗粒的形式嵌入硼聚集体, 在硼铁界面上观察到微区复合结构。铁含量5wt.%和20wt.%的硼铁复合粉在纯氧条件下激光点火观察到有爆燃现象, 铁含量5wt.%的硼铁复合粉在常压氧气下有最低的点火延迟106.1ms, 在3MPa压力下有最高的燃压846.47KPa, 铁含量10wt.%的硼铁复合粉的燃烧状态非常稳定, 在常压氧气下有最高的燃速24.86mm/s, 将硼的氧化反应温度提前到560.3℃, 铁含量20wt.%的硼铁复合粉有最高的氧化增重98.64%和峰释热焓20798.4J/g。

关键词: 硼; 硼铁复合; 激光点火; 燃烧性能; 复合性能

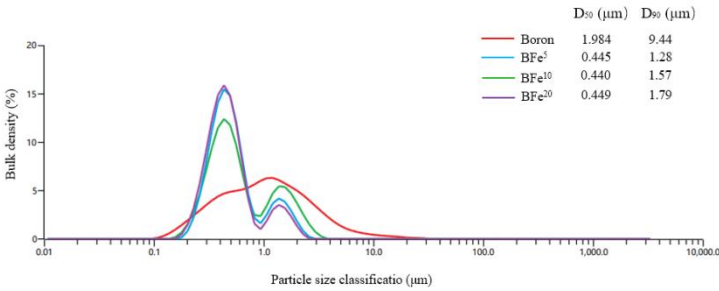


Fig. 1 Particle size distribution of 5wt.%, 10wt.%, and 20wt.% iron content composite powders

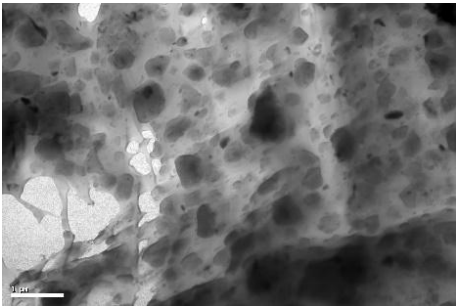


Fig. 2 High resolution transmission electron microscopy scanning image of composite powder

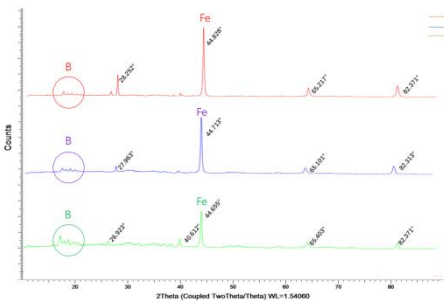


Fig. 3 5wt.% 10wt.% 20wt.% XRD pattern of iron content composite powder

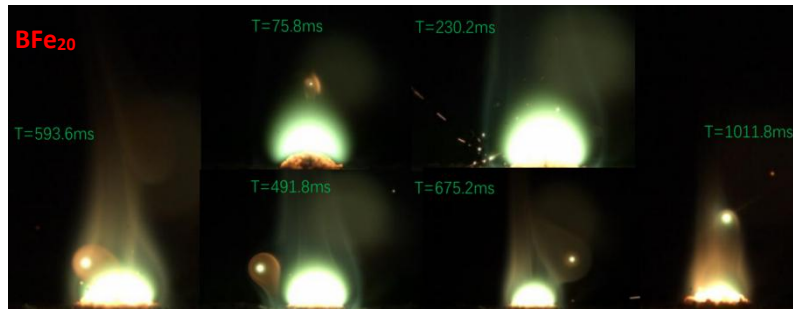


Fig. 4 20wt.% Laser ignition and detonation phenomenon of iron content composite powder

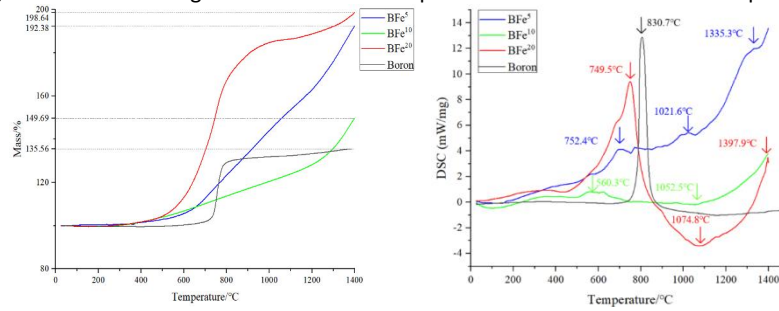


Fig. 5 5 wt.% 10wt.% 20wt.% TG-DSC curve of iron content composite powder

参考文献

- [1] Merrill K. King, Ignition and Combustion of Boron Particles and Clouds[J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 1982, 19: 294-306.
- [2] Jian Zheng, Research status of combustion performance of boron based fuel rich propellant[J]. Winged missile, 2003, 4: 50-57.
- [3] Ling-Qian Zang, A INVESTIGATION ON BORON USED AS A COMPONENT OF SOLID PROPELLANT[J]. Propulsion technology, 1990 (04): 56-62+79.
- [4] Kyle Sullivan Gregory Young, Michael R. Zachariah, Kenneth Yu, Combustion characteristics of boron nanoparticles[J]. Combustion and Flame, 2009, 156 (2): 322-333.
- [5] R.A. Yetter W. Zhou, F.L. Dryer, H. Rabitz, R.C. Brown, C.E. Kolb, Multi-phase model for ignition and combustion of boron particles[J]. Combustion and Flame, 1999, 117 (1-2): 227-243.
- [6] J.M. Semple A. Macek, Combustion of Boron Particles at Atmospheric Pressure[J]. Combustion Science and Technology 1969, 1: 181-191.

铝基复合材料的制备及燃烧性能研究

张婷婷, 姜艳秋*, 林凯峰, 杨玉林

哈尔滨工业大学, 哈尔滨, 150001

*Email: jiangyanqiu@hit.edu.cn

摘要: 为了解决铝基推进剂燃烧过程中铝的团聚问题, 设计并制备 AP@Al 复合材料。AP 分解产生的氧化性气体分散表面的铝粉颗粒, 同时有助于与铝粉的充分接触, 进一步促进铝粉的燃烧, 降低燃烧残渣颗粒尺寸。与物理混合样品相比, AP@Al 丁羟推进剂燃烧性能有效提高, 残渣颗粒明显缩小。

关键词: 铝粉; 丁羟推进剂; 燃烧

1 引言

在铝基推进剂燃烧时, 铝的团聚现象以及形成的凝相燃烧产物会造成严重的两相流损失, 导致比冲下降, 绝热层和喷管烧蚀加剧, 熔渣沉积, 影响发动机安全性能^[1]。

为了降低燃烧过程中铝粉的团聚现象, 促进铝粉燃烧, 研究人员开展了铝粉纳米化、添加含氟材料刻蚀铝粉表面氧化铝壳层、将氧化剂和铝粉复合构建微组分单元等工作^[2-4]。在铝粉表面形成氧化剂包覆层会提高推进剂的燃烧性能, 但同时也会带来感度高、吸潮吸湿加快等问题, 增加安全隐患^[4]。

本文从提高燃料铝粉与氧化剂的有效接触出发, 针对氧化剂在金属燃料表面包覆引起的高感度、低密度、易吸潮吸湿等问题, 结合表面处理技术和声共振混合技术, 将金属燃料组装在无机氧化剂表面制备 AP@Al 复合材料, 记录燃烧过程, 揭示燃烧机理。

2 结果与讨论

图 1 (a-b) 分别为原料 AP 和 Al 粉的扫描照片, 可以发现 AP 呈不规则椭球, 表面较为光滑, Al 粉为粒径 2~3 μm 的小球。将 AP 与 Al 粉物理混合后 (图 1c), Al 粉不均匀的分散在 AP 边缘, 可以看到 AP 表面基本呈现未被铝粉包覆的状态。图 1d 为使用表面处理后的 Al 粉通过声共振作用与 AP 混合后获得的 AP@Al 复合材料, 结合 Al、Cl、O、N 的元素映射图像 (图 1d₁-图 1d₄) 可以发现, 在 AP@Al 复合材料中, Al 粉均匀的分散在 AP 表面, 说明 AP@Al 复合材料的成功制备。

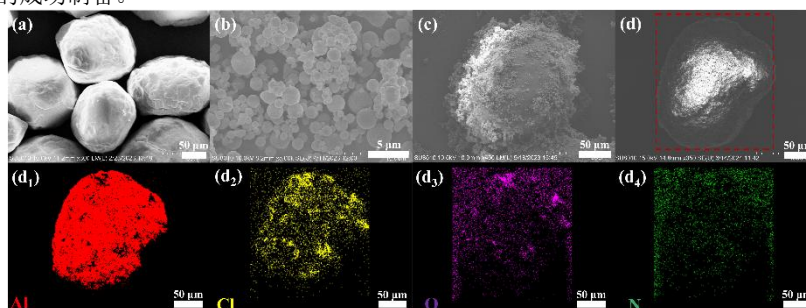


Fig.1 SEM images and element mapping images of different samples

(a) AP; (b) Al; (c) AP/Al; (d-d₄) AP@Al

图 2 为 AP@Al 丁羟推进剂燃烧机理示意图。在传统的铝基推进剂中, Al 粉不均匀的分散在黏合剂基体里, 不能与氧化剂充分接触, 因而不利于铝粉的充分燃烧。AP@Al 丁羟推进剂燃烧时, Al 粉紧密包覆在 AP 表面, AP 分解产生大量的氧化性气体, 有助于分散铝粉颗粒, 减少铝粉燃烧过程中的团聚现象, 促进铝粉与氧化性气氛的充分接触, 促进铝粉燃烧, 提高推进剂的燃烧效率。

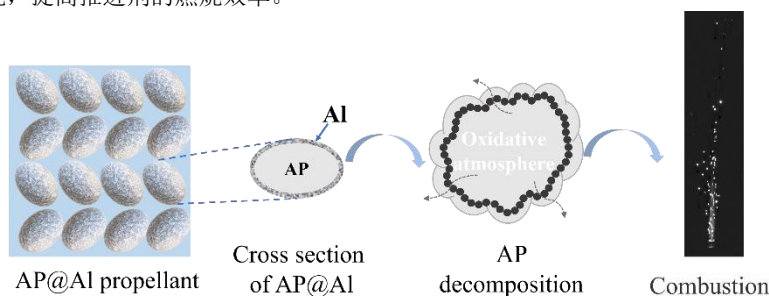


Fig.2 Combustion mechanism of AP@Al propellant

3 结论

(1) 通过表面处理技术结合声共振混合技术成功制备 AP@Al 复合材料, Al 粉均匀分散在 AP 表面。

(2) AP@Al 复合材料应用于推进剂中, 有效提高燃烧性能, 降低残渣颗粒尺寸。

参考文献:

- [1] 敖文, 刘佩进, 吕翔, 杨文婧. 固体推进剂燃烧过程铝团聚研究进展 [J]. 宇航学报, 2016, 37(04): 371-380.
- [2] R. Armstrong, B. Baschung, D. W. Booth, M. Samirant. Enhanced propellant combustion with nanoparticles [J]. Nano Letters, 2003, 3: 253-255
- [3] Z. Cheng, X. Chu, J. Yin, B. Dai, W. Zhao, Y. Jiang, J. Xu, H. Zhong, P. Zhao, L. Zhang. Formation of composite fuels by coating aluminum powder with a cobalt nanocatalyst: Enhanced heat release and catalytic performance [J]. Chemical Engineering Journal, 2020, 385: 123859.

- [4] X. Zhou, R. Xu, H. Nie, Q. Yan, J. Liu, Y. Sun. Insight into the precise catalytic mechanism of CuO on the decomposition and combustion of core-shell Al@AP particles [J]. Fuel, 2023, 346: 128294.
- [5] 刘晋湘, 陈江波, 王斐, 等. 固体推进剂含能颗粒粒度、形貌与感度特性的相关性研究 [J]. 装备环境工程, 2022, 19(10): 36-42.

金属基颗粒燃烧的分子动力学研究

李锐霄, 庞维强*

西安近代化学研究所含能材料全国重点实验室, 西安 710065 中国

E-mail: nwpu_pwq@163.com

金属（如铝、硼、铁等）基颗粒因其高能量密度、低碳排放等特性，在固体推进剂、可再生能源利用和金属燃料等领域具有广泛应用。金属基颗粒的燃烧机制复杂，涉及多尺度、多物理场的耦合，传统的实验手段难以全面揭示其微观机制。分子动力学（Molecular Dynamics, MD）模拟作为一种原子尺度的计算方法，能够有效捕捉金属基颗粒燃烧过程中的原子间相互作用和动力学行为，为理解其燃烧机制提供了重要工具。

分子动力学模拟的核心在于力场的选择，不同的力场适用于描述不同的物理和化学过程。经典分子动力学力场^[1]（如 compass、EAM 力场等）由于难以反映燃烧过程中化学键的断裂与生成，多用于模拟升温过程中材料的变化。Dilip Srinivas Sundaram 等人^[2]利用 EAM 力场研究了铝包覆镍纳米颗粒在升温过程中的熔化行为，发现镍和铝原子的扩散导致放热的金属间反应，显著加热颗粒。近年来，ReaxFF 力场^[3]得到了快速发展，也被广泛应用于金属及其复合物颗粒燃烧等研究。其被用于研究铝锂合金颗粒的微爆炸现象^[4]，研究表明微爆炸是由加热后粒子内的聚集、熔化、沸腾和团簇生长引起的。另外，从头算分子动力学(AIMD)^[5]等也被逐渐被用于探索燃烧过程中的机制。冯胜华^[6]通过 AIMD 研究了 Al/NiO 界面的燃烧机制，发现随着体系温度升高，平面平均变形电荷密度由有规律的对称分布变为沿整个体系中的均匀分布，表明体系铝热氧化还原反应传播到整个体系。不同的力场和方法各有优势，能够从不同角度增强研究者对金属及其复合物颗粒燃烧的认识。

随着计算能力的不断提升和计算方法的持续创新，分子动力学在金属基颗粒燃烧研究中的应用前景更加广阔。一方面，机器学习技术与分子动力学模拟的深度结合，能够在确保计算精度的前提下，显著提高计算效率，从而实现快速、准确的模拟结果；另一方面，通过构建诸如元动力学等新的计算方法，可以更加精确地模拟金属基颗粒在燃烧过程中所遇到的复杂问题，并为这些问题提供更为合理的理论解释。这些进展不仅加速了金属基颗粒燃烧的模拟过程，还提升了对金属基颗粒燃烧机制的深入理解，为金属基颗粒燃烧的研究与应用注入了新的活力。

关键词：金属基颗粒；分子动力学；燃烧科学

[1] F. Xiao, H. Zhang, W. Liu, J. Zhang, T. Liang, J. Hu, Y. Zhang, and P. Luo. Enhanced combustion performance of core-shell aluminum with poly(vinylidene fluoride) interfacial layer: Constructing the combination bridge of aluminum powder and poly(vinylidene fluoride). *Surf. Coat. Technol.* 2022, 439, 128410.

[2] D. S. Sundaram, P. Puri, and V. Yang. Thermochemical behavior of nano-sized aluminum-coated nickel particles. *J. Nanopart. Res.* 2014, 16(5), 1-16.

[3] P. Liu, J. Liu, and M. Wang. Ignition and combustion of nano-sized aluminum particles: A reactive molecular dynamics study. *Combust. Flame* 2019, 201, 276-289.

[4] Y. Zhou, Q. Mao, S. I. NG, Q. Chu, L. Liao, and B. Shi. Fundamental investigation on the micro-explosion of aluminum-lithium alloy particle. *Combust. Flame* 2025, 274, 113983.

[5] S. Feng, G. Xiong, and W. Zhu. Ab initio molecular dynamics studies on the ignition and combustion mechanisms, twice exothermic characteristics, and mass transport properties of Al/NiO nanothermite. *J. Mater. Sci.* 2021, 56(19), 11364-11376.

[6] 冯胜华, 铝、镁基纳米铝热剂结构和性质的理论研究 [D]. 南京理工大学, 2023.

High-performance aluminium-based metastable intermolecular composites achieved by the regulation of metal oxide catalyst via electrostatic spray

Yuming Chen^{1,2}, Chunling He¹, Yinglei Wang², Siping Pang^{1*}

¹School of Materials Science & Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081.

²Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an, 710065.

* pangsp@bit.edu.cn

This study enhances aluminum-based metastable intermolecular composites (MICs) by combining polyvinylidene fluoride (PVDF) encapsulation with metal oxides (Bi_2O_3 , Cr_2O_3 , MoO_3) via electrostatic spray. Core-shell structures with uniform interfaces were confirmed by SEM/TEM/XRD/TG-DSC. Molecular dynamics revealed strong PVDF-metal oxide adhesion via polarity-driven hydrogen bonding. Metal oxides reduced decomposition temperatures by 3-5%, with Cr_2O_3 lowering ignition delay >30% and boosting exothermicity. HMX- Bi_2O_3 composites showed 20.2% energy release increase, while AP-based systems prioritized rapid combustion. The scalable synthesis method and interfacial engineering insights establish a framework for designing high-performance MICs, balancing catalytic efficiency and energy density for propellants, explosives, and defense technologies.

Keywords: Nano-aluminum; MICs; Electrostatic spray deposition; Combustion catalysis; Interfacial engineering.

References

科技出版助力技术创新

——国防工业出版社与科技图书项目申报(以含能材料领域为例)

严春阻¹, 白天明²

^{1, 2} 国防工业出版社工业科技编辑室, 北京市海淀区紫竹院南路 23 号, 100081

*Email: ycy8803@126.com

摘要: 国防工业出版社围绕含能材料、火炸药及特种粉体领域, 构建覆盖“基础研究-技术转化-成果推广”的全链条出版体系。报告介绍了专著、译著、科普乃至数字成果等科技出版物, 出版前可推荐申报的国家级、省部级资助项目, 以及出版后可参评的各类专业奖项, 为科技工作者提供学术价值提升、经费资源获取、行业影响力拓展、技术转化加速等方面的支撑。推动《火炸药理论与技术丛书》《火工品前沿技术丛书》《特种超细粉体技术丛书》等系列科技图书出版, 为领域技术突破提供系统性知识支撑。

关键词: 出版; 项目申报; 含能材料

参考文献

[1] 国家出版基金办公室. 2025年度国家出版基金项目开始申报[EB/OL]. (2024-8-30) [2025-3-28]. <https://www.npf.org.cn/detail.html?id=2105&categoryId=26>

冲击加载下TATB堆积纳米球中的应力共享机制

董冠辰^{1,2}, 管佳璐^{1,2}, 吕静^{1,2}, 谈玲华^{1,2}, 黄晓娜^{3,*}, 杨光成^{1,4,*}

¹南京理工大学化学与化工学院, 中国 南京, 210094

²南京理工大学国家特种超细粉体工程研究中心, 中国 南京, 210094

³武汉大学电力与机械工程学院, 中国 武汉, 430072

⁴南中国工程物理研究院化工材料研究所, 中国 绵阳, 621900

*Email: 黄晓娜(xnhuang@whu.edu.cn); 杨光成(ygcheng@caep.cn).

摘要正文: 通过加工技术对纳米材料的形貌控制可以调节其各种性能, 但在含能材料领域将颗粒形态与冲击响应仍缺少直接联系的证据。基于分子动力学模拟, 我们比较了TATB球形和立方形堆积纳米颗粒的冲击动力学过程。我们发现, 球形构型在堆积时通过大尺度的弯曲形变, 形成了多层环状排布的TATB结构, 这种结构保留了TATB中完整的氢键-范德华受力网络, 具有独特的共享-逐级机械耗散途径。然而, 球形构型中存在更大尺寸的空隙, 这种缺陷在冲击载荷下的塌缩会形成更强的局部热点。这种理论层面的见解通为更安全的高能材料提供了一种设计概念, 并可能扩展到包含各向异性受力网络的其他球形体系。

关键词: TATB; 颗粒形貌; 堆积结构; 分子动力学

Weak Shock Behavior in TATB Nanosphere Attributed to Stress-sharing Mechanisms

Author (Guanchen Dong)^{1,2}, Second Author (J Guan)^{1,2}, Corresponding Author (X Huang)^{3,*},
Corresponding Author (G Yang)^{3,*}

¹School of Chemical Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing, China, 210094.

²National Special Superfine Powder Engineering Research Center, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing, China, 210094.

³College of Power and Mechanical Engineering, Wuhan University, Wuhan, China, 430072.

⁴China Academy of Engineering Physics Institute of Chemical Materials, Mianyang, China, 621900.

* X Huang (xnhuang@whu.edu.cn); G Yang (ygcheng@caep.cn).

Keywords: TATB; Structural morphology; Stacked configuration; Molecular dynamic.

含能材料的超细化技术

彭浩¹, 于志宏², 宋小兰^{1,*}, 王毅³

¹ 中北大学环境与安全工程学院, 中国 太原, 030051

² 中国人民解放军军事科学院防化研究院, 中国 北京, 102205

³ 中北大学材料科学与工程学院, 中国 太原, 030051

*Email: 宋小兰(songxiaolan00@126.com).

摘要正文: 含能材料具有能量密度高、释放速率快、燃烧效率优异等特点, 其组成包括发射药、猛炸药、起爆药、推进剂等。而含能材料的颗粒形貌及分布、尺寸、比表面积、孔隙尺寸及团聚状态等都能够对含能材料感度和能量释放的能力有所影响。机械球磨法是目前对含能材料进行超细化的一种安全可控且工艺操作简单有效的方法。该方法相较于其它细化技术, 一是受实验环境影响小, 二是能源消耗成本低, 三是对环境危害几乎没有, 四是可批量制备, 完全符合当前含能材料改性的发展趋势。采用最新的球磨工艺条件, 可以通过改变球磨时间, 磨球物料比, 磨球类型, 磨球尺寸将硝铵炸药(HMX、RDX、CL-20)、氧化剂(KNO₃、KClO₄)以及其它含能材料(PETN、HNS、TATB、LLM-105)的粒径调控至几百纳米到几微米, 从而批量制备出高纯度、高比表面积的超细含能材料。扫描电镜(SEM)结果显示, HMX、RDX及CL-20一级细化粒径分布为3~5 μm, 而HMX及CL-20二级细化粒径可进一步降低为300~700 nm; KNO₃可达到3~5 μm, KClO₄可达到1~3 μm; PETN可达到0.5~2 μm, HNS、TATB及LLM-105可达到300~700 nm。所有超细含能材料可规模化制备(500克/批次, 可放大产量), 且在制备过程中无杂质引入, 得率>95%。含能材料的微纳米化调控可以极大程度的改善其熔点、分解温度等多种热力学性能, 提高反应活性和能量释放效率, 进而改善含能材料的性能。同时, 随着含能材料尺寸的降低, 其受刺激敏感程度下降, 而反应活性增强, 有效的平衡了能量与安全性的矛盾, 有利于含能材料综合性能提高。

关键词: 机械球磨; 超细化; 粒径调控; 批量制备

Ultrafining Technology of Energetic Materials

Author (Hao Peng)¹, Second Author(Z Yu)², Corresponding Author(Y Wang)³

¹School of Environment and Safety Engineering, North University of China, Taiyuan, China, 030051.

²Institute of Chemical Defense, Chinese Academy of Military Sciences, Beijing, China, 102205.

³College of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan, China, 030051.

* X Song(songxiaolan00@126.com).

Keywords: Mechanical ball milling; Superfine; Particle size control; Batch preparation.

其他活动

火药装药台阶光面爆破裂纹扩展规律及破岩机理研究

梁昊^{1,*}, 许博¹, 王多良¹, 储亚坤¹, 李洪伟¹

¹安徽理工大学化工与爆破学院, 安徽省淮南市泰丰大街 168 号, 232001

*Email: lianghao@aust.edu.cn

摘要: 在目前光面爆破的研究领域中, 主要通过改变装药结构来减少围岩区的损伤, 从而提升其稳定性, 但超挖和围岩损伤等问题依然存在, 严重影响了开挖结构的安全。本文通过采用实验、理论计算和数值模拟相结合的方法, 系统地研究了火药装药台阶光面爆破作用下的岩石破裂行为和机理。对混凝土模型进行了不同孔距下火药装药台阶光面爆破实验, 使用高速摄影和数字图像相关技术分析了岩石的破裂行为, 并通过炸药装药台阶光面爆破作为对比, 研究分析了其超挖、振动及对围岩区损伤的差异。实验结果表明, 孔距 30 mm 时, 超挖深度由 5.62 cm 减少至 4.50 cm, 超挖面积由 15 cm²减少至 5 cm²; 在孔距 40 mm 时, 超挖深度由 10.59 cm 减少至 7.65 cm, 超挖面积由 300 cm²减少至 10 cm²。振动测试表明, 合速度在 30 mm 孔距下由 26.629 cm/s 降低至 13.582 cm/s, 在 40 mm 孔距下由 44.86 cm/s 降低至 14.765 cm/s。CT 扫描结果表明, 相同孔距下, 炸药装药台阶光面爆破作用下对围岩区造成了两处损伤, 而火药装药台阶光面爆破的围岩区无任何损伤。在上述实验的基础上, 通过理论计算得出, 准静态应力场所衍生出的拉应力沿着与开挖线垂直的方向, 控制裂缝沿着孔间连接线产生和扩展。随后, 通过 ANSYS/AUTODYN 数值模拟软件模拟了火药装药光面爆破作用下裂纹演化过程, 进一步证实了火药装药台阶光面爆破作用下, 裂缝的产生和扩展沿着孔间连接线方向并形成光滑的开挖轮廓面。

关键词: 火药破岩, 炸药装药对比, 超挖控制, 降低振速, 数值模拟

参考文献

- [1] LI Z, HU Y, WANG G, et al. Study on cyclic blasting failure characteristics and cumulative damage evolution law of tunnel rock mass under initial in-situ stress[J]. Engineering Failure Analysis, 2023,150: 107310.
- [2] LI X P, HUANG J H, LUO Y, et al. A study of smooth wall blasting fracture mechanisms using the Timing Sequence Control Method[J]. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 2017,92: 1-8.
- [3] WU X, GONG M, WU Y, et al. Experimental and numerical study on the cumulative-deck charging structure based on explosive sympathetic detonation in tunnel smooth blasting[J]. Alexandria Engineering Journal, 2025,116: 561-573.
- [4] HONG Z, TAO M, CUI X, et al. Experimental and numerical studies of the blast-induced overbreak and underbreak in underground roadways[J]. Underground Space, 2023,8: 61-79.
- [5] HU Y, LU W, WU X, et al. Numerical and experimental investigation of blasting damage control of a high rock slope in a deep valley[J]. Engineering Geology, 2018,237: 12-20.
- [6] YANG L, DING C, YANG R, et al. Experimental and Theoretical Analysis of Stress Superposition in Double-Hole Blasts[J]. Journal of Testing and Evaluation, 2020,48(5): 3550-3560.
- [7] PU C, YANG X, ZHAO H, et al. Numerical investigation on crack propagation and coalescence induced by dual-borehole blasting[J]. International Journal of Impact Engineering, 2021,157: 103983.
- [8] LEI Y, LIU J, ZHANG S, et al. Contrast test of different permeability improvement technologies for gas-rich low-permeability coal seams[J]. Journal of Natural Gas Science and Engineering, 2016,33: 1282-1290.
- [9] GU W, WANG Z, CHEN J, et al. Experimental and Theoretical Study on Influence of Different Charging Structures on Blasting Vibration Energy[J]. Shock and Vibration, 2015,2015(1): 248739.
- [10] WANG Z, LI Y, SHEN R F. Numerical simulation of tensile damage and blast crater in brittle rock due to underground explosion[J]. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 2007,44(5): 730-738.
- [11] ZHANG J, LIU Z, FU S, et al. Damage of Rock Mass by Double-Hole Blasting with Slit Charge and Development of Stress Wave under High In Situ Stress[J]. Shock and Vibration, 2022,2022(1): 6967057.

含蓖麻油现场混装乳化炸药的热分解特性研究

张迈¹, 丁士祥¹, 梁昊¹, 曾建钿¹, 王文秀¹, 鹿金旭¹, 李洪伟^{1,*},

¹安徽理工大学化工与爆破学院, 安徽省淮南市泰丰大街 168 号, 232001

*Email:1227002529@qq.com

摘要正文: 为探究含蓖麻油现场混装乳化炸药的热分解特性, 制备了四组含蓖麻油现场混装乳化炸药以及无蓖麻油乳化炸药试样, 将其与蓖麻油分别进行热重实验, 利用STA同步热分析仪探究其热反应特性。结果表明: 蓖麻油的加入使得现场混装乳化炸药的失重一阶段的失水过程延后失重更缓慢, 失重二阶段提前并出现多峰现象, 外推起始反应温度 T_{onset} 以及峰值温度 T_p 均有所增高。在一定范围内, 随着蓖麻油含量的增加, 乳化炸药活化能 E 先增大后减小, 当蓖麻油含量为2%时, 其活化能最大。Ozawa法求得数据达到 $135.78 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, 相较于不含蓖麻油的乳化炸药试样增大了24.32%, 此时其耐热性能最佳。

关键词: 蓖麻油; 现场混装乳化炸药; 热分解; 热分析

参考文献

- [1] 汪旭光. 乳化炸药[M]. 北京: 冶金工业出版社, 2008.
Wang Xu-guang. Emulsion Explosive 2nd ed.[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2008.
- [2] 魏国, 刘锋, 吴攀宇, 等. 振动作用对现场混装乳化炸药稳定性的影响[J]. 火炸药学报, 2022, 45(01): 90-96.
Wei Guo, Liu Feng, Wu Pan-yu, et al. Influence of Vibration on the Stability of Onsite Mixed Emulsion Explosive[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants (Huozhayao Xuebao)*, 2022, 45(01): 90-96.
- [3] 冯有景. 现场混装炸药车[M]. 北京: 冶金工业出版社, 2014.
Feng You-jing. On site mixed explosive truck[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2014.
- [4] 魏国. 机油/柴油比例对现场混装乳化炸药性能的影响[D]. 淮南: 安徽理工大学, 2022.
Wei Guo. Effect of the ratio of engine oil and diesel oil on the properties of field mixed emulsion explosive[D]. Huainan: Anhui University of Science and Technology, 2022.
- [5] Califano V, Calabria R, Massoli P. Experimental evaluation of the effect of emulsion stability on micro-explosion phenomena for water-in-oil emulsions[J]. *Fuel*, 2014, 117: 87-94.
- [6] Masalova I, Tshilumbu N N, Mamedov E, et al. Effect of oil type on stability of high internal phase water-in -oil emulsions with super-cooled internal phase[J]. *Chemical Engineering Communications*, 2018, 205(1): 1-11.
- [7] 李宝林. 脂类油相材料在现场混装乳化炸药的应用研究[D]. 郑州: 河南工业大学, 2016.
Li Bao-lin. The Studies on the Lipid Oil Phase Materials and Application in On-Site Mixed Emulsion Explosive[D]. Zhengzhou: Henan University of Technology, 2016.
- [8] 何祥, 刘锋, 陈皓楠, 等. 不同油相材料对现场混装乳化炸药抗挤压能力的影响[J]. 火炸药学报, 2022, 45(03): 425-431.
He Xiang, Liu Feng, Chen Hao-nan, et al. Effect of Different Oil Phase Materials on the Anti-extrusion Ability of On-site Mixed Emulsion Explosive [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants (Huozhayao Xuebao)*, 2022, 45(03): 425-431.
- [9] 朱帅, 刘锋, 汪猛, 等. 新型复合油相乳化炸药基质的非等温热分解特性[J]. 火炸药学报, 2017, 40(03): 47-52.
Zhu Shuai, Liu Feng, Wang Meng, et al. Non-isothermal Thermal Decomposition Characteristics of Emulsion Explosive Matrix Prepared by the New Type of Complex Oil Phase[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants (Huozhayao Xuebao)*, 2017, 40(03): 47-52.
- [10] 刘锋, 汪全, 吴攀宇, 等. 内相粒径对现场混装乳化炸药基质抗振动性能的影响[J]. 化工学报, 2022, 73(09): 4217-4225.
Liu Feng, Wang Quan, Wu Pan-yu, et al. Effect of internal phase particle size on vibration resistance of on-site mixed emulsion explosive matrix[J]. *CIESC Journal*, 2022, 73(09): 4217-4225.

可控高分子力化学合成

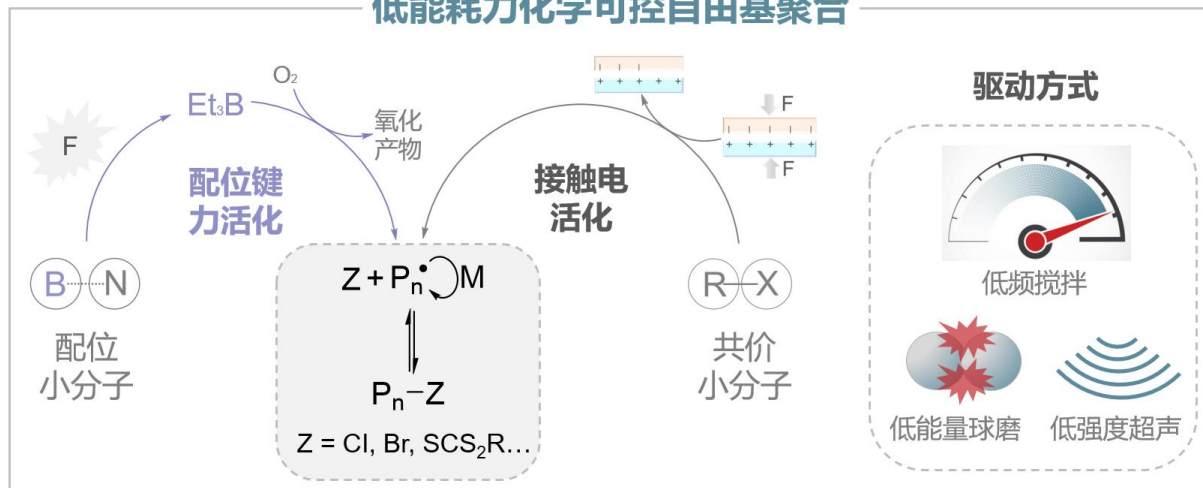
王振华*, 冯浩洋, 王晓宇, 王晨

西北工业大学柔性电子研究院, 西安, 中国, 邮编 710072

*iamzhwang@nwpu.edu.cn

摘要: 力(机械)化学主要研究机械力诱导的化学反应, 不仅能制备常规热、光活化方法难以制备的材料, 同时可以大幅减少有机溶剂使用, 为绿色化学提供新途径, 2019年被国际纯粹与应用化学联合会(IUPAC)列为有望改变世界的化学领域十大新兴技术之一。借助机械力的物理效应(剪切等)及化学效应(活化等), 报告人发展了低能量力化学可控自由基聚合新方法, 突破了传统聚合方法(本体、溶液、悬浮、乳液等)依赖于大量溶剂或者高温促进底物溶解、底物扩散、分子碰撞的瓶颈, 在无溶剂、常温常压下实现了难溶底物的聚合及不相容单元的共聚, 提升了复杂介质中(非均相/无溶剂/高填充体系)多组分共聚的可控性, 验证了其在特种材料合成与制备中的独特优势, 丰富了高分子力化学合成的应用场景, 本次会议具体将汇报以下内容: 1) 基于串联力活化催生自由基新机制开发低能耗力化学可控自由基聚合, 在无溶剂、空气下实现了高分子的精准合成; 2) 利用多相可控力化学自由基共聚策略, 解决多相体系热力学与动力学之间的内在矛盾, 实现功能高分子纳米杂化材料的可控绿色合成, 提升高填充特种材料的功能特性及工艺安全性。

低能耗力化学可控自由基聚合



关键词: 力化学; 可控自由基聚合; 无溶剂合成; 杂化材料

参考文献

- [1] Zhenhua Wang et al. Nature Communications 2024, 15 (1), 6179.
- [2] Zhenhua Wang et al. Journal of the American Chemical Society, 2023, 145 (49), 26532-26539.
- [3] Zhenhua Wang et al. Angewandte Chemie International Edition, 2023, 62 (37), e202309440.

硼的理论热值高，燃烧产物毒性低，作为化学火箭推进剂燃料应用前景广阔。但单质硼的点火温度高，且燃烧生成的氧化硼不易挥发，极大地限制了其在发动机中的燃烧效率。因此，申请人通过深入研究硼颗粒表面氧化膜生成消除机制及其中 B、O 的扩散迁移机理，揭示硼颗粒能量释放特性、关键影响因素和有效促进方法，研发制备新型硼基高能燃料并不断优化其综合性能，为其在航天动力系统的高效应用夯实了科学理论基石。

Boron has broad application prospects as a fuel of chemical rocket propellants because its high theoretical calorific value and harmless combustion products. However, the actual combustion efficiency of boron in the motor is limited greatly due to its high ignition temperature, as well as the less volatility of generated boron oxide. To change that, the applicant has studied deeply on the following topics: 1) the generation and elimination mechanisms of oxide layer on boron particles, and the diffusion and migration mechanisms of B and O atoms within the oxide layer; 2) the energy release characteristics of boron particles, the key influencing factors, and the effective promotion methods; 3) the development, preparation, and performance optimization of new boron-based high energy fuels. The main findings contribute the scientific theoretical foundations of efficient applications of boron in aerospace propulsion systems.

硝酸酯增塑聚醚推进剂燃烧特性与燃烧机理研究进展

敖小童¹, 付小龙^{1*}, 蔚红建¹, 张崇民¹, 姜丽萍¹, 孟赛钦¹

(1. 西安近代化学研究所, 陕西 西安, 710065)

(敖小童, 西安近代化学研究所, 是, aoxiaotong204@163.com)

固体推进剂技术发展的重大创新之一即为逐步打破“炸药与火药”、“双基与复合”之间的传统界限^[1-2], 在 20 世纪 70 年代末, 人们找到了可以为硝酸增塑的高分子预聚物——脂肪族聚醚或聚酯, 这类高分子取代传统的硝化纤维素之后, 改性双基推进剂中使用大量硝酸酯增塑而获得高能量的特点以及复合推进剂理想的三维网络所赋予的优良的力学性质被综合到一起, 形成了一类新的推进剂品种, 即硝酸酯增塑聚醚(NEPE) 推进剂^[3,4]。其力学性能良好, 工艺、弹道剂安全贮存性能满足生产和武器使用要求^[5-7]。

NEPE 推进剂综合了复合推进剂和双基推进剂的优点, 但也造成了其燃烧性能和燃烧机理的独特性^[8-9]。本文从 NEPE 推进剂的计算方法、燃烧实验和燃烧模型三个方面对 NEPE 推进剂进行探讨, 分析了现有燃烧模型对于 NEPE 推进剂的不足, 为改善 NEPE 推进剂的燃烧模型研究提供了一定的理论基础。作为一种新型的固体推进剂, NEPE 推进剂在战略战术武器导弹上具有广阔的应用前景。本文通过总结 NEPE 推进剂燃烧试验, 理论计算方法和现有燃烧模型, 对 NEPE 推进剂的燃烧机理与燃烧动力学模型进行了综述, 得出以下三点结论。

1. 由于其安全性和准确性, NEPE 推进剂的数值计算研究作为一种新型仿真方法逐步在推进剂研究中占有越来越大的比重。而其中, 量子化学方法和分子动力学方法研究较为深入, 化学动力学分析的主流仿真软件 CHEMKIN 由于推进剂燃烧的机理文件不够全面, 研究过程受到一定限制。

2. 关于 NEPE 推进剂实验研究的内容主要包括燃烧性能, 点火特性以及燃烧机理等相关研究。目前国内研究主要关注在对 NEPE 推进剂燃烧规律的研究方面, 对于 NEPE 点火特性和燃烧特性的研究较少, 试验的观测和分析不够全面深入, 关于其燃烧机理的研究仍不够透彻, 在结论上存在一些分歧。

3. 目前国内外对 NEPE 推进剂的燃烧模型进行了大量的研究。稳态燃烧物理模型在火焰分布及物化过程给予了详细的分析。细观燃烧模型分析固体颗粒尺寸、形状以及分布等对燃烧性能的影响, 以期达到辅助和优化固体推进剂配方设计以及装药设计的功能。自由基裂解模型可以用来预测 NEPE 推进剂的燃速变化规律, 并在一定程度上为 NEPE 推进剂的成分组成设计提供定性指导。

以上结论为进一步研究 NEPE 推进剂的燃烧过程奠定了基础, 也为建立及验证相关点火模型和燃烧模型提供理论依据。

关键词: 硝酸酯增塑聚醚推进剂; 点火性能; 燃烧理论模型; 燃烧机理

参考文献

- [1] 庞爱民, 王北海, 田德余. NEPE 类推进剂燃烧模拟[J]. 现代防御技术, 2003, 31(2): 29-32.
- [2] 朱伟浩, 王坤, 许丹丹, 等. 量子计算在化学等领域的应用[J]. 数据与计算发展前沿, 2022, 4(2): 131-140.
- [3] 王鸿美, 陈雄, 赵超, 等. NEPE 推进剂激光辐照下点火燃烧性能研究[J]. 推进技术, 2015, 36(8): 1262-1267.
- [4] Yan X T, Xia Z X, Huang L Y, et al. Study on the ignition process and characteristics of the nitrate ester plasticized polyether propellant[J]. 《国际航空航天工程杂志》, 2020, 63(4): 1-10.
- [5] Yan X T, Xia Z X, Huang L Y, et al. Combustion of nitrate ester plasticized polyether propellants[J]. 《浙江大学学报(A 辑)》, 2020, 21(10): 834-847.
- [6] 王瑛, 孙志华, 赵凤起, 等. NEPE 推进剂燃烧机理研究[J]. 火炸药学报, 2000, (4): 24-26.
- [7] 吴芳, 王世英, 庞爱民. NEPE 推进剂燃烧性能研究概况[J]. 推进技术, 2003, (7): 51-55.
- [8] 涂乘崑, 陈雄, 周长省等. NEPE 推进剂在氮气及空气中的点火燃烧特性[J]. 含能材料, 2022, 30(08): 811-818.
- [9] 相恒升, 陈雄, 周长省, 等. 环境气体氧含量对 NEPE 推进剂激光点火过程的影响[J]. 火炸药学报, 2016, 39(3): 75-79.

Research progress on combustion characteristics and mechanism of nitrate ester plasticized polyether propellants

Ao Xiaotong 1, Fu Xiaolong 1*, Wei Hongjian 1, Zhang Chongmin 1, Jiang Liping 1, Meng Saiqin 1
(1. Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an, Shaanxi 710065, China)

(Ao Xiaotong, Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Email: aoxiaotong204@163.com)

Abstract: Nitrate-plasticized polyether (NEPE) propellant is a typical high-energy propellant. The composition of NEPE propellant makes it have both the excellent mechanical properties of double base propellant and the high energy of composite propellant, but also forms its unique combustion mechanism. This paper firstly summarizes the numerical simulation calculation methods of NEPE propellant combustion, analyzes and compares the advantages of different numerical simulation methods, then studies the ignition performance and combustion characteristics of NEPE propellant, analyzes the combustion mechanism and combustion model of NEPE propellant, and provides a theoretical basis for the establishment and verification of relevant ignition and combustion models.

Key words: Nitrate ester plasticized polyether propellant; Ignition performance; Combustion theoretical model; Combustion mechanism

添加剂对铝基复合微球的性能影响

陈珊珊, 周威, 刘耀华, 黄蕾, 周星*

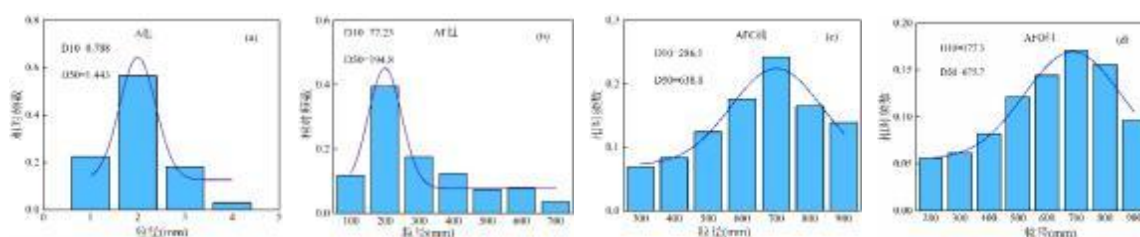
(国防科技大学 空天科学学院, 湖南长沙, 410073, xingzhou_nudt@nudt.edu.cn)

摘要正文: 微米铝 (Al) 粉在实际应用中存在反应活性低、流动性差和燃烧慢等缺点^[1]。为解决该问题, 常用方法是使用金属单质及其氧化物、含能材料、惰性聚合物等对 Al 粉改性^[2-5]。同时, 球形含能材料相比于其他形状被认为安全性更高, 流动性更好, 传热更快^[6]。因此, 本文通过聚偏二氟乙烯(PVDF)、碳纤维、氧化铋 (Bi_2O_3)对 Al 粉改性, 利用约束-乳液模板法制备了铝基复合微球。对比研究了 Al(A)、30% Al/65% PVDF(AF)、

30% Al/64% PVDF/1% 碳纤维(AFC)、30% Al/64% PVDF/1% Bi_2O_3 (AFO)和 30% Al/65% PVDF/1% 碳纤维/1% Bi_2O_3 (AFCO)微球的理化性质、燃烧性质和热分解特性。粒径测试结果(如图 1(a-e)所示)表明, 添加剂增大了微球粒径, 其中 AFCO 微球粒径分布更均匀, 平均粒径最大为 $668.4 \mu\text{m}$ 。孔径与比表面积测试结果(如表 1 所示)表明, 添加剂使微球孔容增大, 孔径分布更均匀, 提升了反应活性。表 1 中 AFCO 孔容最大为 $0.0616 \text{ cm}^3/\text{g}$,

此微球储气、储液以及吸附能力最好, 反应活性最大。粉体特性测试结果(如表 2 所示)表明, 添加剂改善了微球流动性, 其中 AFCO 相较于纯 Al, 流动性参数由 58 提升至 94, 流动性改善效果最优。将同一质量的样品均匀平铺到细小半圆管中, 在空气下使用点火丝点火测得样品长度和燃烧时间, 计算出表观燃速。表观燃速结果(图 1(f))表明, 添加剂减弱了点火难度, 提高燃速。纯 Al 在常压空气中无法被点燃, 使用添加剂后成功点火且微球燃速的大小顺序为 $\text{AFCO} > \text{AFC} > \text{AFO} > \text{AF}$, AFCO 燃速最大达 127.62 mm/s 。通过微球热分解曲线(图 1(g-h))推测添加剂提升燃速的原因是: 铝氟反应具有高放热量, 能提升能量释放效果; 碳纤维提供一个导热通道, 加速热量传递; Bi_2O_3 与铝发生反应, 能快速提高温度。由 TG-DSC 曲线得热分解参数如表 3 所示, 结果表明, 添加剂有效提高了热量释放, 其中 AFCO 放热量相较于纯 Al 提高了 896.17 J/g (约 200%)。综合分析结果表明, 使用 PVDF、碳纤维和 Bi_2O_3 这三种添加剂能有效改善微球粒径和流动性, 提升微球反应活性、燃烧速度和能量释放效果。

关键词: 铝基复合微球; 含氟聚合物; 约束-乳液模板法; 表观燃速



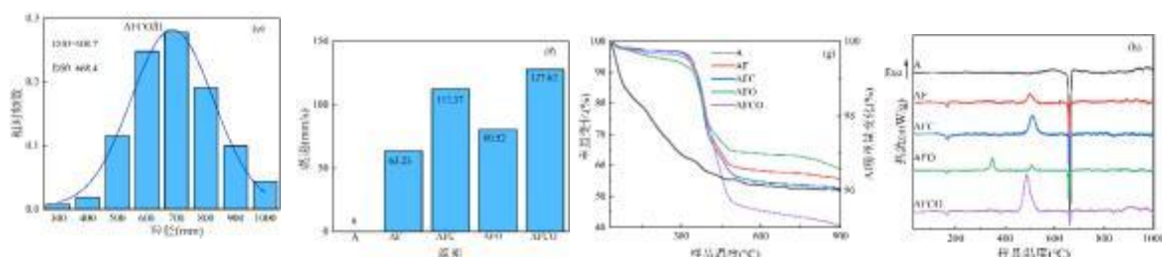


Fig.1 (a-e)Particle size distribution of microspheres;(f) Apparent combustion rate of microspheres;(g) TG curves of

microspheres; (h) DSC curves of the beads

Table 1 Pore size and specific surface area of microspheres

组别	BET 比表面积 (m^2/g)	单点总孔体积 (cm^3/g)	单点平均孔半径 (nm)	最可几孔径 (nm)
A	4.8257	0.040427	16.75	0.97
AF	4.6183	0.041314	17.89	1.30
AFC	10.7457	0.058728	10.93	1.07
AFO	5.6915	0.043252	15.20	1.22
AFCO	7.5347	0.061586	16.35	1.22

Table 2 Bead flow parameters of microspheres

组别	松装密度(g/cm^3)	振实密度(g/cm^3)	休止角($^\circ$)	平板角($^\circ$)	压缩度(%)	均齐度	流动性
A	0.52	0.85	33.92	63.86	39	2.41	58
AF	0.64	0.78	16.61	43.54	18	2.67	84
AFC	0.57	0.61	8.7	38.41	7	2.23	90.5
AFO	0.63	0.68	15.73	43.42	7	2.67	89
AFCO	0.53	0.54	6.65	34.64	2	1.48	94

Table 3 Thermal decomposition parameters of microspheres

组别	$T_b(^{\circ}\text{C})$	$T_{F1}(^{\circ}\text{C})$	$T_{F2}(^{\circ}\text{C})$	$T_{X1}(^{\circ}\text{C})$	$T_{X2}(^{\circ}\text{C})$	$\Delta H(\text{J/g})$
A	556.5	—	—	—	665.9	429.4
AF	77.79	—	503.0	167.6	658.9	-15.03
AFC	73.18	—	514.2	166.9	658.6	-157.7
AFO	72.67	348.8	505.7	166.7	657.5	-98.79
AFCO	70.71	—	487.3	165.8	656.3	-466.7

注: T_b 为热分解开始温度; T_{F1} 和 T_{F2} 分别表示与 AFO 样品第一个和第二个放热峰同类型峰的峰温; T_{X1} 和 T_{X2} 分别表示与 AFO 样品第一个和第二个吸热峰同类型峰的峰温; ΔH 是热解过程热量变化值。

参考文献:

- [1] Nengri M,Ciezki H K. Combustion of gelled propellants containing micro sized and nanosized aluminum particles [J].Journal of Propulsion and Power,2015,31 (1):400-407.
- [2] Cheng Z,Chu X,Zhao W,et al. Controllable synthesis of Cu/Al energetic nanocomposites with excellent heat release and combustion performance[J].Applied Surface Science,2020,513145704-145704.
- [3]Li S,Cheng JL,Guo T,et al.Comparative investigations of ternary thermite Al/Fe₂O₃/CuO and Al/Fe₂O₃/Bi₂O₃ from pyrolytic, kinetics and combustion behaviors[J].Defence Technology,2023,26180-190.
- [4]柯香, 张伟强, 张大鹏, 等.AI/PVDF 含能微球的制备及其性能分析[J].火炸药学报, 2021,44(06):865-872.
- [5]李杨, 陈存广, 刘新华, 等.碳纤维/铝基复合材料的制备与性能[J].海军工程大学学报, 2023,35(04):41-47.
- [6]吴灏, 周诚, 张义迎, 等.典型含能材料的球形化研究进展[J].含能材料, 2023,31(10):1068-1078.

墙报摘要

超细HNS致密化过程微观结构演化规律研究

罗宇^{1, 2}, 金波¹, 孙杰², 张浩斌^{2,*}

¹西南科技大学, 四川绵阳, 621010

²中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川绵阳, 621999

*Email: zhhb03@caep.cn

摘要正文: 随着微纳米科学技术的发展及武器装备性能需求的不断提升, 超细含能材料的研究受到广泛关注^[1]。2,2',4,4',6,6'-六硝基均二苯基乙烯(HNS)作为典型的超细炸药, 凭借其优异的热稳定性和起爆可靠性, 已成为军用雷管的核心装药材料^[2]。虽然将炸药颗粒压制成型可获得较高能量密度和良好综合性能的药柱, 但致密化过程中产生的微观缺陷会显著劣化其起爆性能和安全性能^[3]。为揭示超细 HNS 颗粒致密化行为与微观结构演变的关联机制, 本研究采用小角 X 射线散射(Small Angle X-ray Scattering, SAXS)技术, 系统研究了纳米结构 HNS 粉末在不同压制参数下的致密化行为。基于 Porod 定理, 定量表征了 120-200 MPa 压制压力下 HNS 药柱的孔隙率与比表面积变化规律, 在测得的 q 值范围内, 随着压制压力从 120 MPa 增至 200 MPa, 药柱密度从 1.43 g/cm³ 上升到 1.57 g/cm³ (提升9.8%), 而孔隙率从 10.90% 下降到4.19% (相对降幅61.6%), 比表面积从 9.81 m²/g 下降到3.48 m²/g (相对降幅64.5%)。值得注意的是, 在 180 MPa 压制条件下, 保压时间从 1 min 延长至 6 min 可使密度提升 4.6%, 孔隙率和比表面积分别降低 32% 和 27.6%。通过 100 °C 原位 SAXS 实验发现: 在保压时间为 10 min 时, 高压(200 MPa)试样的孔隙率下降速率显著高于低压(100 MPa); 而相同压力下不同保压时间的孔隙演化趋势具有高度相似性。分析表明, 压力参数对超细 HNS 致密化过程的影响高于时间参数。本研究通过 SAXS 技术研究超细炸药压制过程中微观尺度结构演变规律, 为优化超细炸药成型工艺提供了重要的理论依据, 对超细含能材料的工程应用化具有重要的指导意义。

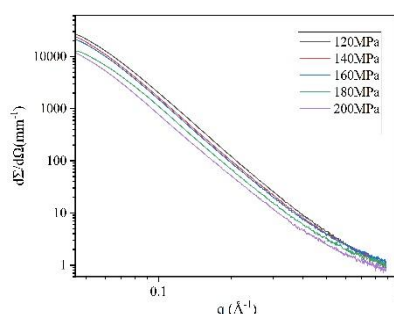


Fig. 1 Absolute scattering intensity of nano-HNS discs under different pressures

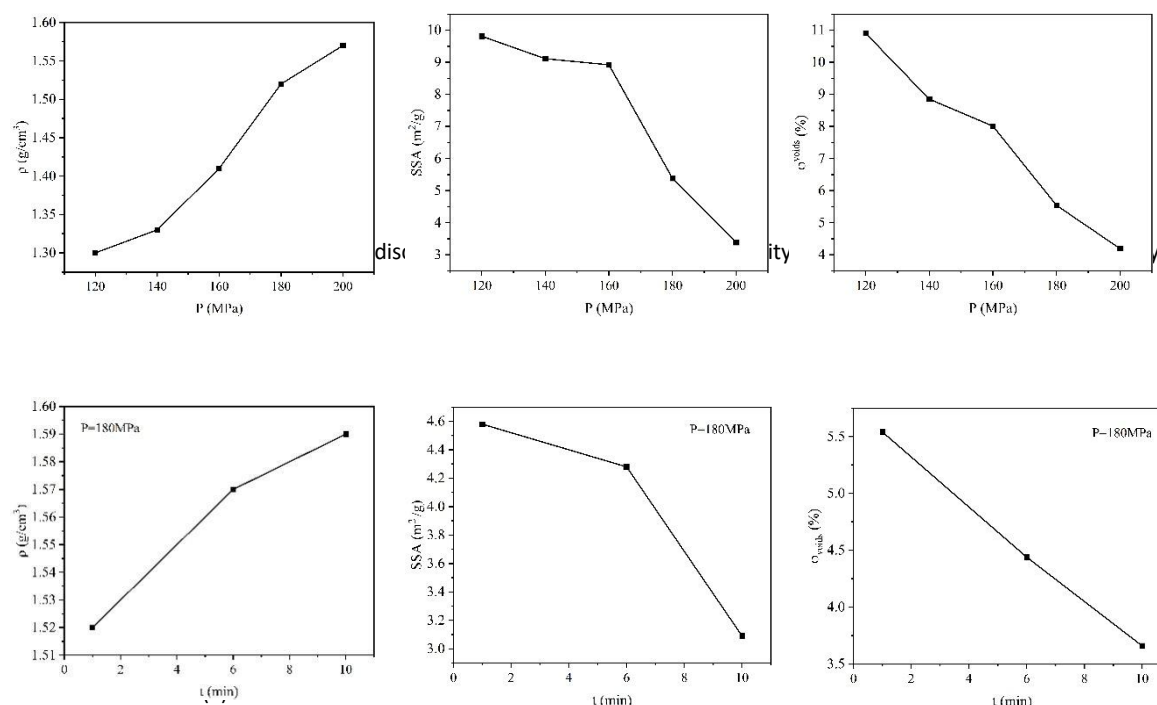


Fig. 3 Parameters of nano-HNS discs at 180 MPa at different times: (a) Density; (b) Specific surface area; (c) Porosity

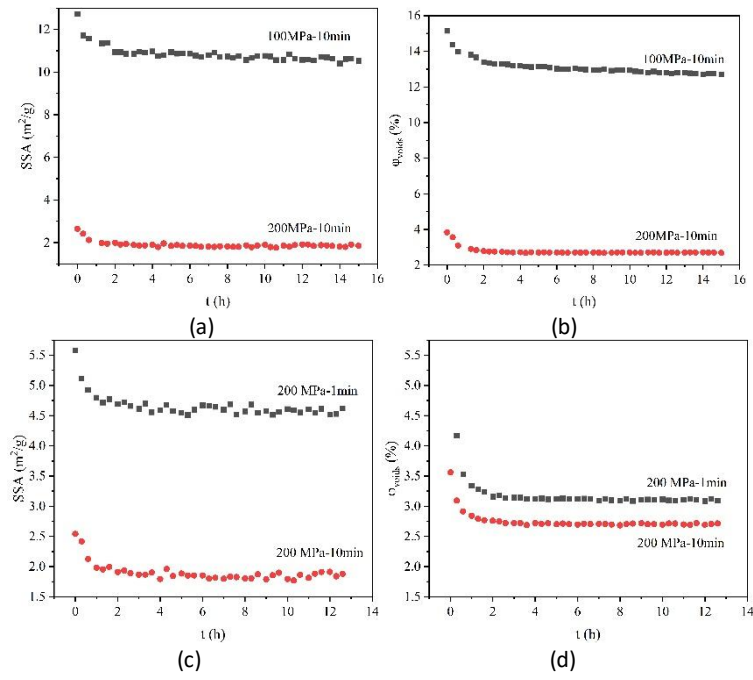


Fig. 4 In-situ SAXS data of nano-HNS discs at 100 °C: (a) (c) Specific surface area; (b) (d) Porosity

关键词：超细HNS；致密化；SAXS；微观结构

参考文献

- [1] Bhattacharya S, Agarwal A K, Patel V K, et al. Introduction to nano-energetic materials[J]. Nano-Energetic Materials, 2019: 3-7.
- [2] Liu Y, Li S, Xu J, et al. Three energetic 2, 2', 4, 4', 6, 6'-hexanitrostilbene cocrystals regularly constructed by H-bonding, π -stacking, and van der Waals interactions[J]. Crystal Growth & Design, 2018, 18(4): 1940-1943.
- [3] Zhou Y, Shi J, Li X, et al. An USAXS-SAXS study of nano-TATB under uniaxial die pressures[J]. Energetic Materials Frontiers, 2023, 4(3): 134-139.

第八分论坛

气溶胶污染与控制前沿论坛

邀请报告

挥发性有机物高效净化及二氧化碳资源化技术

黄宇^{1,*} 李荣¹, 朱丹丹¹, 石先进¹

¹中国科学院地球环境研究所, 陕西西安, 710061

*Email: huangyu@ieecas.cn

在空气质量持续持续改善与碳中和目标双重驱动下, 针对大气挥发性有机物 (VOCs) 与温室气体 (CO₂) 的同根同源性, 需开发低能耗、高效的VOCs控制技术及CO₂资源化新途径。针对VOCs净化中氧活化能力不足、低温下催化活性差等挑战, 通过活性位点结构定向设计构建多元化催化体系: (1) 开发碳封装过渡金属策略, 调控钴纳米颗粒电子结构使其呈现类贵金属特性, 显著提升常温氧活化能力^[1]; (2) 构建二维超薄钴基材料, 充分暴露表面活性位点, 实现甲醛常温高效降解^[2]; (3) 设计多组分串联催化剂, 耦合分子氧/晶格氧协同活化机制, 降低甲苯矿化温度^[3], 形成低能耗净化技术体系。针对人工光合作用光-暗反应时空耦合难题, 提出电子/质子解耦新机制: (1) 光反应阶段储存H₂O分解产生的质子与电子, 暗反应阶段自发释放还原CO₂为高值产物, 研发的Pt-WO₃纳米材料验证了全天候运行可行性^[4]; (2) 创新引入烟气余热加速暗反应动力学, 使CO₂选择性转化为乙烯的速率提升两个数量级^[5], 形成“太阳能驱动-余热协同”的碳资源化闭环技术, 为间歇性太阳能规模化应用提供工程解决方案。本研究通过材料表面调控与反应路径创新, 为大气污染与碳减排协同治理提供理论与技术支撑。

关键词: VOCs净化; CO₂资源化; 碳污协同; 环境催化; 解耦光-暗反应

参考文献

- [1] D. Zhu, Y. Huang, R. Li, T. Huang, J. Cao, Z. Shen, S. Lee Formaldehyde Oxidation over Co@N-Doped Carbon at Room Temperature: Tunable Co Size and Intensified Surface Electron Density. *ACS EST Engg.* 2021, 1: 917–927.
- [2] R. Li, X. Shi, L. Y. Huang, M. Chen, D. Zhu, W. Ho, J. Cao, S. Lee Catalytic oxidation of formaldehyde on ultrathin Co₃O₄ nanosheets at room temperature: Effect of enhanced active sites exposure on reaction path. *Appl. Catal. B: Environ.*, 2022, 319: 121902.
- [3] R. Li, Y. Huang, X. Shi, L. Wang, Z. Li, D. Zhu, X. Liang; J. Cao, Y. Xiong Dopant site engineering on 2D Co₃O₄ enables enhanced toluene oxidation in a wide temperature range. *Environ. Sci. Technol.* 2023, 5: 13236–13246.
- [4] X. Shi, Y. Huang, R. Long, Z. Wang, L. Wang, J. Cao, G. Zhu, Y. Xiong Sustainable all-weather CO₂ utilization by mimicking natural photosynthesis in a single material. *Natl. Sci. Rev.* 2024, 11: nwad275.
- [5] X. Shi, W. Peng, Y. Huang, C. Gao, Y. Fu, Z. Wang, L. Yang, Z. Zhu, J. Cao, F. Rao, G. Zhu, S. Lee, Y. Xiong Integrable utilization of intermittent sunlight and residual heat for on-demand CO₂ conversion with water. *Nat. Commun.* 2024, 15: 10135.

半干旱城市兰州机动车排放对大气气溶胶污染的贡献

田鹏飞

兰州大学大气科学学院

兰州市作为典型的半干旱盆地城市，其独特的地形和气候条件导致大气污染物扩散受限，机动车排放已成为 $\text{PM}_{2.5}$ 的重要来源。基于高分辨率在线监测数据的研究表明，机动车排放对 $\text{PM}_{2.5}$ 的年均贡献高达 37%，在秋冬季节尤为显著（冬季 35.7%，秋季 56.6%），且贡献随污染加重而增加。此外，机动车排放是元素碳（EC）的主要来源，占比达 70.3%~93.7%。通过分析 2021 年车辆限行政策的效果发现，严格限行期间 $\text{PM}_{2.5}$ 和 NO_x 浓度分别降低 10.6% 和 15.6%，其中直接排放、二次硝酸盐和道路扬尘共减少 $2.43 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ，贡献下降 9.0%。气象条件的影响仅占 15.1%，表明排放控制措施是 $\text{PM}_{2.5}$ 降低的主因。尽管车辆数量逐年增加，但限行政策仍显著减少了污染物排放。研究证实，机动车排放是兰州市 $\text{PM}_{2.5}$ 污染的关键来源，加强车辆管控（如推广清洁能源汽车和优化限行政策）是改善半干旱城市空气质量的有效途径。

口头报告

结合机器学习探究我国西北城市 EC 混合态的季节演变特征

李丽², 王启元^{1,*}, 田杰¹, 曹军骥^{3,*}, ...

¹中国科学院地球环境研究所, 西安, 710061

²西安地球环境研究院, 西安, 710061

³西安地球环境研究院, 西安, 710061

*Email: qywang@ieecas.cn

摘要正文: 元素碳 (EC) 与二次组分的混合状态导致在评估其辐射效应的不确定性大。然而, 二次包裹物影响 EC 的程度及潜在形成机制仍知之甚少。本文利用单颗粒气溶胶质谱仪 (SPAMS) 研究了中国西北重污染城市含 EC 颗粒在单颗粒水平上的混合状态。结果表明, 在冬季和夏季, 含 EC 颗粒占总测量颗粒的很大部分 (约 44%)。在六个主要 EC 颗粒类型中, 硫酸盐和/或硝酸盐混合的 EC (EC-sec: 26.9%) 和与 OC 混合的 (EC-OC: 24.3%) 颗粒在冬季最多; 夏季富含硫酸盐的 EC 亚类 (EC-sul) 明显增加, 使得 EC-sec 的贡献显著上升 (51.8%)。应用随机森林分析表明, 光化学、相对湿度 (RH)、相对酸度 (Ra) 和各种前体物是二次组分形成的关键因素, 包括与 EC 颗粒相关的硫酸盐、硝酸盐、铵盐、有机胺、草酸盐和含氮有机化合物 (NOCs)。由于 OH 自由基和 O₃ 的快速氧化降解, 含咪唑颗粒不能被明显预测。这些发现为典型 EC 包裹组分的大气演化提供了有价值的见解, 有助于增强模式预测黑碳气候影响的准确性。

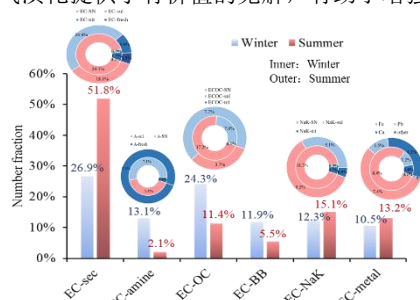


Fig. 1 Relative contributions of EC-containing particles from the six major classes and their major subclasses.

关键词: 含EC颗粒; 二次形成; 季节变化; 随机森林

参考文献

- [1] G. H. Zhang, X. F. Lian, Q. H. Lin, L. Li, W. Song, et al. High secondary formation of nitrogen-containing organics (NOCs) and its possible link to oxidized organics and ammonium, *Atmospheric Chemistry and Physics* 2020, 45, 4990–9.
- [2] G. H. Zhang, Y. Z. Fu, X. C. Peng, W. Sun, Z. B. Shi, W. Song, et al. Black carbon involved photochemistry enhances the formation of sulfate in the ambient atmosphere: evidence from in situ individual particle investigation, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2021, 126(19), e2021JD.
- [3] Q. Y. Wang, L. Li, J. M. Zhou, J. H. Ye, W. T. Dai, H. K. Liu, et al. Measurement report: Source and mixing state of black carbon aerosol in the North China Plain: implications for radiative effect, *Atmospheric Chemistry and Physics* 2020, 20, 15427–15442.

Mass spectral characterization and analysis of organic aerosol from primary anthropogenic sources

Jie Tian¹, Qiyuan Wang^{1,*}, Junji Cao²

¹Institute of Earth Environment, Chinese Academy of Sciences, Xi'an, 710061, China

² Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100029, China

* wangqy@ieecas.cn

A comprehensive understanding of mass spectra from primary anthropogenic sources is crucial for source apportionment of organic aerosol (OA) measured by mass spectrometer. However, localized mass spectral data in China are scarce. This study conducted a series of source emission experiments using a quadrupole aerosol chemical speciation monitor to characterize mass spectra of OA from crop residue burning (CRBOA), wood burning (WBOA), cooking emissions (COA), coal combustion (CCOA), and vehicle exhaust (VEOA). The extracted tracer fragments and diagnostic ratios from OA mass spectra were investigated, revealing their representativeness and effectiveness in distinguishing different anthropogenic sources. Uncentered correlation results showed that the subtype mass spectra of CRBOA, WBOA, and VEOA exhibited better internal consistency compared to those of COA and CCOA. Cluster analysis identified three clear categories of biomass burning, cooking emissions, and vehicle exhaust, while achieving a more fine-grained categorization would require additional methodologies beyond mass spectral difference analysis. This mass spectral characterization and analysis of OA from anthropogenic sources has significant implications for enhancing the accuracy of source apportionment and formulating more effective strategies for air pollution control in China with diverse primary emissions.

Keywords: Organic aerosol; Mass spectra; Anthropogenic sources; Similarity analysis

Non-Fossil Origin Explains the Large Seasonal Variation of Highly Processed Organic Aerosol in the Northeastern Tibetan Plateau (3,200 m a.s.l.)

Haiyan Ni^{1*}, Uli Dusek²

¹School of Environmental and Municipal Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an, 710055, China

²Centre for Isotope Research (CIO), University of Groningen, Groningen, 9747AG, the Netherlands

* nihaiyan@xauat.edu.cn

The climate effects of carbonaceous aerosols (CAs) are highly uncertain and debated. The high-altitude Tibetan Plateau (TP) is sensitive to climate change, however, sources and atmospheric processes of CAs in the TP are poorly known. This is particularly challenging for organic aerosols, due to the large number of species involved in their formation and transformation processes in the atmosphere. In recent years, dual-carbon isotope characterization (i.e., radiocarbon ^{14}C and the stable carbon isotope ^{13}C) has become a promising tool to elucidate the sources and formation processes of organic aerosols. With this approach, we found that organic aerosols in the northeastern TP (Qinghai Lake) are highly atmospheric processed, and their seasonal variability is driven by a variable largely non-fossil source. Findings from this study lead to a better understanding of the sources and formation mechanisms of organic aerosols in different seasons, and thus organic aerosols' effects on climate change.

Keywords: Organic aerosol; Radiocarbon; ^{13}C signature; Tibetan Plateau; Seasonal variation

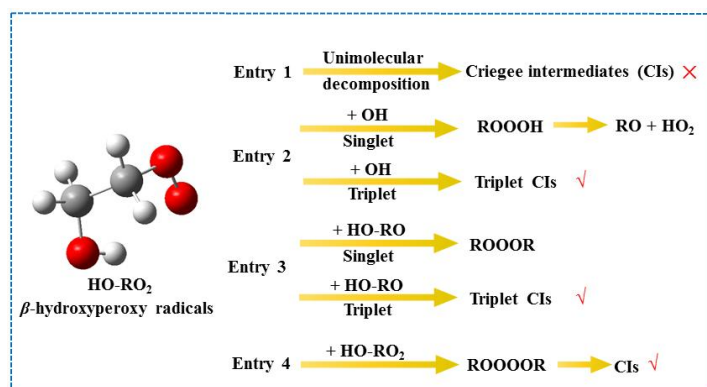
Molecular insights into the formation of Criegee intermediates from β -hydroxyperoxy radicals

Long Chen^a, Yu Huang^{*,a}, Yonggang Xue^a, Zhihui Jia^b

^a State Key Lab of Loess and Quaternary Geology (SKLLQG), Institute of Earth Environment, Chinese Academy of Sciences (CAS), Xi'an, 720061, China

^b School of Materials Science and Engineering, Shaanxi Normal University, Xi'an, Shaanxi, 710119, China

Abstract: Organic peroxy radicals (RO_2) and Criegee intermediates (CI, carbonyl oxides) are key reactive species in atmospheric chemistry, and can proceed various reactions influencing the recycling of radicals and the formation of aerosol particles. Carbonyl oxides have recently detected in the OH-initiated autoxidation reactions of unsaturated hydrocarbons. However, their formation mechanisms remain elusive. Herein, the β -hydroxyperoxy radicals (HO-RO_2) are selected as the model compounds to study the mechanism of their transformation to carbonyl oxides. Potential formation pathways of carbonyl oxides, including unimolecular decomposition, bimolecular reactions with OH radicals, HO-RO and HO-RO₂ radicals, are studied by using quantum chemical methods. The results show that the unimolecular decomposition of HO-RO₂ radicals undergoes through the direct cleavage of C-C bond to produce carbonyl oxides, but they are strongly endothermic. For the reactions of HO-RO₂ with OH radicals, the preferable pathway is the barrierless formation of ROOOH on the single PES, and their stability increases with increasing the number of methyl substituents. On the triplet PES, the formation of carbonyl oxides from H-abstraction reaction in the $-\text{CH}_x$ group is favorable for the unsubstituted and a methyl substituted HO-RO₂ radicals. For the reactions of HO-RO₂ with HO-RO radicals, the dominant pathway is the barrierless formation of ROOOR on the singlet PES, with dissociation back to the separate reactants being the lowest-energy pathway. The formation of carbonyl oxides is preferable on the triplet PES, and the methyl substitution is beneficial for decreasing the reaction barriers. The barrier for the formation of carbonyl oxides from the self-reaction of HO-RO₂ radicals significantly decrease with increasing the number of methyl substituents. The self-reaction of dimethyl substituted HO-RO₂ radicals forming $(\text{CH}_3)_2\text{COO}$ is able to compete effectively with the bimolecular reactions with HO₂ radicals. These findings enhance our understanding of the formation of carbonyl oxides from the photochemical oxidation of alkenes.



成都地区含碳气溶胶及其光学特征变化特征

毛鑫茹¹, 李玥¹, 刘璇², 姜懿航³, 袁亮^{1,*}

¹成都信息工程大学大气科学学院, 成都平原城市气象与环境四川省野外科学观测研究站, 四川 成都 610225

²成都市环境保护科学研究院, 四川 成都 610072

³河北省沧州市气象局, 河北 沧州 061000

*Email: yuanliang@cuit.edu.cn

摘要正文: 本文基于2020年6月15日至2022年4月15日在成都地区的观测数据, 分析了该地区含碳气溶胶及其光学特性的时空变化特征, 并探讨了两次典型污染事件中含碳气溶胶的变化特征及其对污染事件生成的影响。结果表明: 总碳(m_{TC})、元素碳(m_{EC})和有机碳(m_{OC})质量浓度均在冬季最高, 分别为 8.8 ± 6.4 、 2.8 ± 2.1 和 $6.0 \pm 4.5 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 而夏季浓度偏低。各类含碳气溶胶日变化受到交通高峰和边界层发展的影响, 呈现出早晚“双峰型”分布特征。因静稳天气有利于粒子老化, m_{OC}/m_{EC} 在冬季最高(2.8 ± 0.9), 而夏季则由于更多二次生成导致 m_{OC}/m_{EC} 高于春秋两季。波长指数(α)在四个季节的平均值分别为1.37、1.30、1.35、1.50。棕碳(BrC)对370 nm总吸收系数的贡献(P_{BrC})在冬季为最高, 贡献占比达34%, 可能是由于冬季生物质燃烧的排放和粒子累积老化导致 α 和 P_{BrC} 较高。成都地区颗粒物污染的形成主要源于一次排放污染物在静稳天气下的滞留与老化过程, 并伴随二次有机碳(SOC)的生成; 而在重度污染事件中, 含碳气溶胶的贡献则显著转向一次排放成分的直接累积。通过一起短期污染事件发现, 烟花爆竹燃烧引起了 α 、 P_{BrC} 以及 m_{OC}/m_{EC} 的增大, 表明了烟花爆竹的燃放也是BrC的重要来源; 而另一起长期污染事件中, m_{BC} 和 m_{OC} 浓度增大, α 和 P_{BrC} 降低, 由一次污染物BC累积导致。本研究为理解成都地区含碳气溶胶的时间变化及其对空气质量的影响提供了重要参考依据。

关键词: 含碳气溶胶; 黑碳; 棕碳; 光学特性; 吸收Ångström指数

参考文献:

- [1] Jacobson M. Strong radiative heating due to the mixing state of black carbon in atmospheric aerosols [J]. *Nature*, 2001, 409(6821): 695-697.
- [2] Kirchstetter T, Preble C, Hadley O, et al. Large reductions in urban black carbon concentrations in the United States between 1965 and 2000 [J]. *Atmospheric Environment*, 2016, 151(2): 17-23.
- [3] Laskin A, Laskin J, Nizkorodov SA. Chemistry of Atmospheric Brown Carbon [J]. *Chemical Reviews*, 2015, 115(10): 4335-4382.
- [4] Schauer J, Mader B, Deminter J, et al. ACE-Asia intercomparison of a thermal-optical method for the determination of particle-phase organic and elemental carbon [J]. *Environmental science & technology*, 2003, 37(5):993-1001.
- [5] Zhang Q, Shen Z, Zhang T, et al. Spatial distribution and sources of winter black carbon and brown carbon in six Chinese megacities [J]. *Science of The Total Environment*, 2020, 762(25(33)): 143075.
- [6] Zheng H, Kong S, Wu F, et al. Intra-regional transport of black carbon between the south edge of the North China Plain and central China during winter haze episodes [J]. *Atmospheric Chemistry Physics*, 2019, 19(7): 4499-4516.
- [7] Ding A, Huang X, Nie W, et al. Enhanced haze pollution by black carbon in mega cities in China [J]. *Geophysical Research Letters*, 2016, 43(6): 2873-2879.
- [8] Huang X, Wang Z, Ding A. Impact of Aerosol-PBL Interaction on Haze Pollution: Multiyear Observational Evidences in North China [J]. *Geophysical Research Letters*, 2018, 45(16): 8596-8603.
- [9] Bond T, Streets D, Yarber K, et al. A technology-based global inventory of black and organic carbon emissions from combustion [J]. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 2004, 109(D14).
- [10] Ramanathan V, Carmichael G. Global and regional climate changes due to black carbon [J]. *Nature Geoscience*, 2008, 1(4): 221-227.
- [11] Mkoma S, Chi X, Maenhaut W. Characterization of carbonaceous materials inPM2.5 and PM10 size fractions in Morogoro, Tanzania, during 2006 wet season campaign [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2010, 268(10): 1665-1670.
- [12] Balachandran S, Pachon J E, Lee S, et al. Particulate and gas sampling of prescribed fires in South Georgia, USA [J]. *Atmospheric Environment*, 2013, 81(12): 125-135.
- [13] 段卿, 安俊琳, 王红磊, 等. 南京北郊夏季大气颗粒物中有机碳和元素碳的污染特征[J]. *环境科学*, 2014, 35(7):2460-2467.
- [14] Choudhary V, Singh G, Gupta T, et al. Absorption and radiative characteristics of brown carbon aerosols during crop residue

- burning in the source region of Indo-Gangetic Plain [J]. *Atmospheric Research*, 2021, 249: 105285.
- [15] Izhar S, Gupta T, Panday A. Improved method to apportion optical absorption by black and brown carbon under the influence of haze and fog at Lumbini, Nepal, on the Indo-Gangetic Plains [J]. *Environmental Pollution*, 2020, 263: 114640.
- [16] Zhang Y, Forrister H, Liu J, et al. Top-of-atmosphere radiative forcing affected by brown carbon in the upper troposphere [J]. *Nature Geoscience*, 2017, 10(7): 486-489.
- [17] Liao T, Gui K, Jiang W, et al. Air stagnation and its impact on air quality during winter in Sichuan and Chongqing, southwestern China [J]. *Science of the Total Environment*, 2018, 635: 576-585.
- [18] Wang X, Dickinson R, Su L, et al. PM_{2.5} pollution in China and how it has been exacerbated by terrain and meteorological conditions [J]. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 2018, 99(1): 105-119.
- [19] 国家统计局. 第七次全国人口普查公报 (第三号) [EB/OL]. (2021-5-11). https://www.stats.gov.cn/sj/tjgb/rkpcgb/qgrkpcgb/202302/t20230206_1902003.html
- [20] 中华人民共和国公安部. 2024年上半年全国机动车达4.4亿辆 驾驶人达5.32亿人 新能源汽车保有量达2472万辆 [EB/OL]. (2024-7-9). <https://www.mps.gov.cn/n2254098/n4904352/c9650715/content.html>
- [21] 史芳天, 罗彬, 张巍, 等. 成都平原 PM_{2.5} 中碳质组分时空分布特征与来源 [J]. *环境科学*, 2020, 41 (02): 520-528.
- [22] 徐雪梅, 冯小琼, 尹寒梅, 等. 2018~2021年成都市碳质气溶胶变化特征分析 [J]. *环境科学*, 2024, 45 (07): 3870-3880.
- [23] 王璐, 袁亮, 张小玲, 等. 成都地区黑碳气溶胶变化特征及其来源解析 [J]. *环境科学*, 2020, 41 (04): 1561-1572.
- [24] Total Carbon Analyzer TCA08 User's Manual [EB/OL]. (2022-4). <http://www.mageescientific.com>.
- [25] Turpin B, Huntzicker J. Identification of secondary organic aerosol episodes and quantitation of primary and secondary organic aerosol concentrations during SCAQS [J]. *Atmospheric Environment*, 1995, 29(23): 3527-3544.
- [26] Pio C, Cerqueira M, Harrison R, et al. OC/EC ratio observations in Europe: Re-thinking the approach for apportionment between primary and secondary organic carbon [J]. *Atmospheric Environment*, 2011, 45(34): 6121-6132.
- [27] Wu C, Wu D, Yu J. Estimation and uncertainty analysis of secondary organic carbon using 1 year of hourly organic and elemental carbon data [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2019, 124(5): 2774-2795.
- [28] Wu C, Yu J. Determination of primary combustion source organic carbon-to-elemental carbon (OC/EC) ratio using ambient OC and EC measurements: secondary OC-EC correlation minimization method [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2016, 16(8): 5453-5465.
- [29] Castro L, Pio C, Harrison R, et al. Carbonaceous aerosol in urban and rural European atmospheres: estimation of secondary organic carbon concentrations [J]. *Atmospheric Environment*, 1999, 33(17): 2771-2781.
- [30] Liu C, Chung C, Yin Y, et al. The absorption Ångström exponent of black carbon: From numerical aspects [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2018, 18(9): 6259-6273.
- [31] Li J, Liu C, Yin Y, et al. Numerical investigation on the Ångström exponent of black carbon aerosol [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2016, 121(7): 3506-3518.
- [32] You R, Radney J, Zachariah M, et al. Measured wavelength-dependent absorption enhancement of internally mixed black carbon with absorbing and nonabsorbing materials [J]. *Environmental Science & Technology*, 2016, 50(15): 7982-7990.
- [33] Cappa C, Zhang X, Russell L, et al. Light absorption by ambient black and brown carbon and its dependence on black carbon coating state for two California, USA, cities in winter and summer [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2019, 124(3): 1550-1577.
- [34] Rosen H, Hansen A, Gundel L, et al. Identification of the graphitic carbon component of source and ambient particulates by Raman spectroscopy and an optical attenuation technique [J]. *Applied Optics*, 1979, 17(24): 3859-3861.
- [35] Chen L, Chow J, Wang X, et al. Multi-wavelength optical measurement to enhance thermal/optical analysis for carbonaceous aerosol [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2015, 8(1): 451-461.
- [36] 危诗敏, 冯鑫媛, 王式功, 等. 四川盆地多层逆温特征及其对大气污染的影响 [J]. *中国环境科学*, 2021, 41 (03): 1005-1013.
- [37] 李朝阳, 袁亮, 张小玲, 等. 成都碳质气溶胶变化特征及二次有机碳的估算 [J]. *中国环境科学*, 2022, 42 (6): 2504-2513.
- [38] Ding J, Huang W, Zhao J, et al. Characteristics and source origins of carbonaceous aerosol in fine particulate matter in a megacity, Sichuan Basin, southwestern China [J]. *Atmospheric Pollution Research*, 2022, 13(1): 101266.
- [39] Cui Y, Cao W, Ji D, et al. Estimated contribution of vehicular emissions to carbonaceous aerosols in urban Beijing, China [J].

Atmospheric Research, 2021, 248: 105153.

- [40] **Tao J, Zhang L, Cao J, et al. Source apportionment of PM_{2.5} at urban and suburban areas of the Pearl River Delta region, south China - With emphasis on ship emissions [J]. Science of The Total Environment. 2017, 574: 1559-1570.**
- [41] 李涵, 季政权, 丁皓, 等. 浙江省细颗粒物碳质气溶胶组分表征方法及污染特征研究[J]. 环境污染与防治, 2023, 45(10):1409-1415.
- [42] 李洁, 董晶晶, 孙思思, 等. 南京市城区和郊区 PM_{2.5} 中碳质组分特征差异及来源分析[J]. 环境监控与预警, 2024, 16(01):18-23+79.
- [43] 罗宇骞. 保定市采暖期含碳气溶胶浓度特征变化与成因研究 [D]. 中国环境科学研究院, 2024.
- [44] **Yao L, Huo J, Wang D, et al. Online measurement of carbonaceous aerosols in suburban Shanghai during winter over a three-year period: Temporal variations, meteorological effects, and sources [J]. Atmospheric Environment, 2020, 226: 117408.**
- [45] **Liu X, Tan X, Li X, et al. Characteristics, potential sources and interaction of carbonaceous components in PM_{2.5} in two adjacent areas in Shanxi, China [J]. Environmental Chemistry. 2024, 21(3).**
- [46] **Chow J. Measurement Methods to Determine Compliance with Ambient Air Quality Standards for Suspended Particles [J]. Journal of the Air&Waste Management Association. 1995, 45(5): 320-382.**
- [47] **Wang J, Virkkula A, Gao Y, et al. Observations of aerosol optical properties at a coastal site in Hong Kong, South China [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2017, 17(4):2653-2671.**
- [48] 白庚申. 山东和成渝地区大气 PM_{2.5} 中化学组分、来源解析及健康风险评估[D]. 山东大学, 2023.
- [49] **Sumlin B, Pandey A, Walker M, et al. Atmospheric Photooxidation Diminishes Light Absorption by Primary Brown Carbon Aerosol from Biomass Burning [J]. Environmental Science & Technology Letters. 2017, 4(12):540-545.**
- [50] 林欢, 袁亮, 刘璇, 等. 成都夏季云凝结核的变化特征及其影响因子[J]. 环境科学学报, 2023, 43(05):312-324.
- [51] **Yuan L, Yin Y, Xiao H, et al. Aerosol optical properties and the mixing state of black carbon at a background mountainous site in Eastern China[J]. Journal of Environmental Sciences, 2019, 83: 21-38.**
- [52] 张泽中, 袁亮, 刘璇, 等. 成都不同季节亚微米气溶胶粒径谱分布特征分析[J]. 环境科学学报, 2023, 43(06):27-38.
- [53] **Zhang Y, Li W, Li L, et al. Source apportionment of PM_{2.5} using PMF combined online bulk and single-particle measurements: Contribution of fireworks and biomass burning [J]. Journal of Environmental Sciences. 2024, 136:325-336.**

北京大气棕碳气溶胶的化学组成及粒径分布特征

邢书妍^{1,2}, 王晴晴³, 李丽娟¹, 张新^{1,4}, 王瑞¹, 韩月梅^{1,*}

¹中国科学院地球环境研究所, 黄土科学全国重点实验室, 中科院气溶胶化学与物理重点实验室, 西安 710061

²中国科学院大学, 北京 100049

³北京交通大学, 环境学院, 北京 100044

⁴西安交通大学, 人居环境与建筑工程学院, 西安 710049

*通讯作者 (Email: yuemei.han@ieecas.cn)

摘要: 有机气溶胶 (OA) 是大气颗粒物的重要组成部分, 由于其对太阳辐射的吸收和散射作用, 对大气辐射平衡和全球气候系统具有重要影响。OA 中含氮发色团 (如硝基芳香族化合物) 和共轭碳结构的化学物质在紫外及可见光波段范围内 (300–500 nm) 有较强的吸光性且具有明显的波长依赖性, 是影响气候的重要因子之一。然而现有研究对 OA 吸光能力的垂直及粒径分布规律的认识非常不足。本研究基于 2023 年北京冬季不同垂直高度及多个粒径范围的气溶胶样品的综合分析, 以探明紫外及可见光波段 OA 吸光能力及化学物种组成的垂直分布特征及粒径分布规律。研究结果显示, 细颗粒 OA 质量吸收系数 ($MAC_{365} = 1.17 \pm 0.80 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$) 显著高于粗颗粒 ($MAC_{365} = 0.11 \pm 0.09 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$), 表明积聚模态颗粒物对吸光的主要贡献。垂直方向上, OA 吸光能力呈现显著的时空异质性。温度与相对湿度的时空变化, 与 OA 吸光能力的垂直分布特征密切相关。近地面较高的温度及较低相对湿度会影响挥发性有机物的气-粒分配过程及颗粒物的液相反应, 不利于硝基芳香族化合物等吸光性含氮物质及共轭结构的生成。高层 OA 的吸光能力与污染物的湍流扩散及区域传输密切相关。在较大的风速下, 更多吸光能力强的 OA 被从近地面或其他区域送往高空, 生成的二次 OA 与该处一次 OA 混合, 呈现与近地面不同的吸光特征。而在中层 OA 吸光能力受到多种气象要素及区域传输的协同作用, 呈现更大的差异性。利用超高效液相色谱串联二极管阵列检测器及高分辨率静电场轨道阱质谱对化学物种进行了分析, 共鉴定出 36 种具有关键吸光性有机物种。其中含氮物种 (包括 CHN、CHON、CHNS 和 CHONS) 占比高达 81%, 特别是具有共轭结构的硝基芳香族化合物 (如 $C_7H_7NO_4$ 、 $C_8H_9NO_3$ 、 $C_7H_6N_2O_5$ 等) 对 OA 吸光能力具有显著贡献。此外, 7 种 CHO 类多环芳烃及其衍生物也是重要的吸光性物种。本研究结果有利于深刻了解城市大气吸光性有机气溶胶的特征, 对准确评估其气候环境效应和空气污染防控提供重要的科学支撑。

关键词: 有机气溶胶; 吸光性; 物种分子组成; 垂直分布。

纳米氧化锆异相结限域金属催化剂构筑及室温高效净化甲醛研究

高婵¹, 张宇飞^{1*}

¹西安建筑科技大学环境与市政工程学院, 陕西省西安市碑林区雁塔路中段 13 号, 710055

*Email: zhangyufei@xauat.edu.cn

摘要正文：开发一种适用于室内HCHO消除的高效、绿色和环境友好控制技术至关重要。目前，常温催化氧化技术被认为是一种行之有效的HCHO消除技术，本研究以四方-单斜氧化锆（TMZ）异相结界面作载体，采用碱性醇热还原法负载金属铂（Pt）单质和双金属铂-铜（Pt-Cu），合成Pt/TMZ和Pt-Cu/TMZ常温催化剂，并对其晶体组成结构、形貌特征、表面化学态、氧化还原能力、活性氧物种、反应中间/终产物以及HCHO降解性能等进行表征分析，研究负载金属-TMZ复合界面HCHO吸附活化、活性氧物种反应行为、中间/终产物生成与HCHO常温催化降解性能之间的内在关联，揭示不同金属单质负载的TMZ组成、结构与HCHO去除之间的构效关系。本研究为室内空气净化材料的研发提供了理论和技术的支撑。

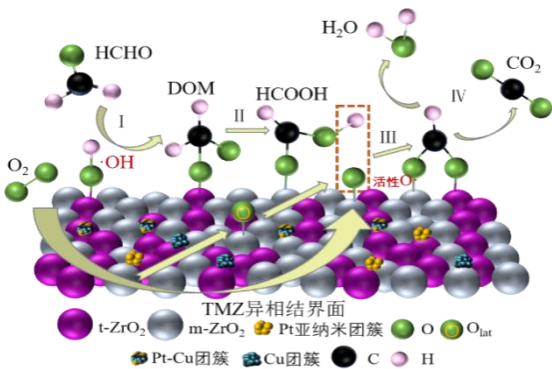


Fig.1 纳米氧化锆异相结室内催化甲醛的反应机制

关键词：纳米氧化锆异相结；限域金属催化剂₂；室内净化甲醛；活性中间体

参考文献

- [1] Peng, S.Q., Rao, Y., Li, T., Zhang, Y.F.*, Cao, J.-J., Lee, S.C., Huang, Y.*. Regulating the electronic structure of Ir single atoms by ZrO₂ nanoparticles for enhanced catalytic oxidation of formaldehyde at room temperature. *Chinese Chemical Letters* 2024, 35, 109219.
- [2] Peng, S.Q., Li, R., Huang, Y.*, Zhang, Y.F.*, Cao, J.-J., Lee, S.C. Interfacial dependent reactive oxygen species generation over Pt-ZrO₂ nanoparticles for catalytic oxidation of formaldehyde at room temperature. *Applied Surface Science* 2022, 600, 154056.

纳米异相结限域双金属催化剂构筑及催化氧化 VOCs 研究

哈·欧登¹, 张宇飞^{1,*}

¹西安建筑科技大学环境与市政工程学院, 陕西省西安市碑林区雁塔路中段 13 号, 710055

*Email: zhangyufei@xauat.edu.cn

摘要正文：开发一种适用于VOCs消除的高效、绿色和环境友好控制技术至关重要。催化氧化法因其经济可行性高、反应条件温和以及效率较高等优点，被认为是去除VOCs的有效途径之一。本研究以四方-单斜氧化锆（TMZ-400）异相结界面作为催化剂载体，采用碱性醇热还原法负载金属铂（Pt）单质和双金属铂-钴（Pt-Co），合成Pt/TMZ-400和Pt-Co/TMZ-400催化剂，并对其晶体组成结构、形貌特征、表面化学态、氧化还原能力、活性氧物种、反应中间/终产物以及典型VOCs甲苯降解性能等进行表征分析，解析催化材料催化氧化典型VOCs甲苯反应过程中的关键活性物种，揭示异相结表面关键催化活性位，构建纳米异相结催化降解典型VOCs甲苯的反应机制，阐述催化材料的组成-结构-表/界面性质-催化性能之间的构效关系。

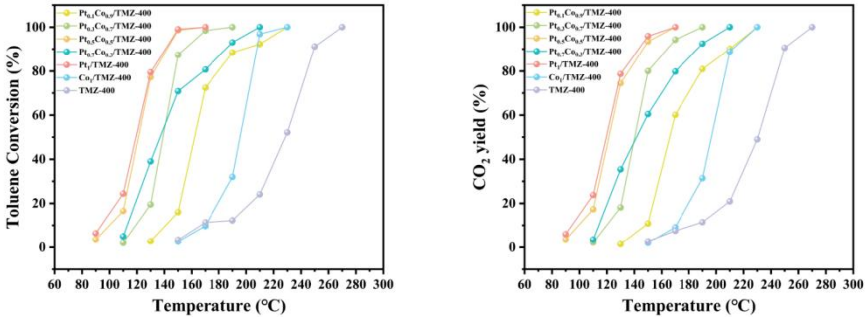


Fig.1 纳米异相结材料催化氧化甲苯的性能

关键词：纳米异相结；限域双金属催化剂；催化氧化VOCs；甲苯

参考文献

- [1] Li, S.J., Yu, X., Dong, X.Q.*, Meng, X.K., Zhang, Y.F., Qin, C.H. Non-thermal plasma coupled with $M\text{O}_x/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ (M: Fe, Co, Mn, Ce) for chlorobenzene degradation: Analysis of byproducts and the reaction mechanism. *Journal of Environmental Chemical Engineering* 2021, 9, 106562.
- [2] Yu, X., Li, S.J., Dong, X.Q.*, Zhang, Y.F., Zhang, Q., Zheng, H.C. A highly efficient multi-stage dielectric barrier discharge (DBD)-catalytic system for simultaneous toluene degradation and O_3 elimination. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry* 2022, 105, 393-404.

纳米限域双金属催化剂的构筑及光催化还原 CO₂ 研究

刘一萱¹, 张宇飞^{1,*}

¹ 西安建筑科技大学环境与市政工程学院, 陕西省西安市碑林区雁塔路中段 13 号, 710055

*Email: zhangyufei@xauat.edu.cn

摘要正文: 化石燃料的过度消耗, 导致大气中的CO₂含量急剧增加。开发一种简便、高效的CO₂转化技术面临着巨大的挑战。石墨氮化碳 (g-C₃N₄) 作为一种非常有前途的半导体光催化剂, 可有效地用于从大气中去除CO₂消除。本研究旨在针对g-C₃N₄基光催化剂所存在的缺点, 尝试通过形貌处理和元素掺杂等手段对其进行合理的改性, 从而设计合成出高效还原CO₂的g-C₃N₄基光催化剂 (DCN、Pt-CN、Co-CN、Pt/Co-CN)。研究揭示材料理化性质、界面结构、纳米限域尺寸效应、高密度金属单原子对CO₂吸附和活化及光催化效能的影响机制, 阐明多种共存污染物在非均相体系中材料表面的选择性吸附、迁移转化规律和降解路径。本研究通过元素掺杂和空位塑造为进一步构建氮化碳基的高效还原CO₂的光催化剂提供了新思路。

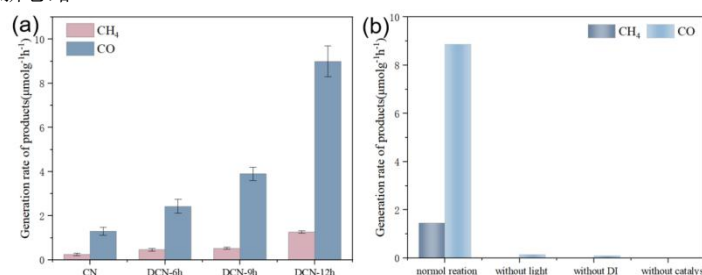


Fig. 1 DCN、Pt-CN、Co-CN、Pt/Co-CN四种材料光催化还原CO₂的性能

关键词: 纳米限域双金属催化剂; 光催化还原CO₂; g-C₃N₄; 光电性能

参考文献

- [1] Shi, X.; Huang, Y.; Bo, Y.; Duan, D.; Wang, Z.; Cao, J.; Zhu, G.; Ho, W.; Wang, L.; Huang, T.; Xiong, Y., Highly Selective Photocatalytic CO₂ Methanation with Water Vapor on Single-Atom Platinum-Decorated Defective Carbon Nitride. *Angewandte Chemie International Edition*, 2022, 61(27): e202203063.
- [2] Shi, X.; Huang, Y.; Long, R.; Wang, Z.; Wang, L.; Cao, J.; Zhu, G.; Xiong, Y., Sustainable all-weather CO₂ utilization by mimicking natural photosynthesis in a single material. *National Science Review*, 2024, 11(2): nwad275..

纳米异质/异相结构筑及其光热催化臭氧关键前体物研究

张宇飞^{1,*}

¹西安建筑科技大学环境与市政工程学院, 陕西省西安市碑林区雁塔路中段 13 号, 710055

*Email: zhangyufei@xauat.edu.cn

摘要正文: 臭氧 (O_3) 污染已蔓延至深冬雾霾季节, 针对 O_3 关键前体物 (甲醛、苯、甲苯和氮氧化物等) 种类多和单一技术难消除等问题, 亟待开展高效高选择性纳米光热协同催化, 控制其在封闭/半封闭环境浓度水平, 厘清其复合迁移转化机制与催化材料构效关系。在环境大气污染理论研究与控制应用紧密结合方向取得创新性成果: 聚焦封闭/半封闭空间持续释放的低浓度污染物, 定向设计高选择性的长效纳米异质/异相结限域单/双金属催化材料, 通过精细调控纳米异质/异相结界面单/双金属原子的均匀排布, 实现局域电荷密度强化和双晶界密度增加, 突破 O_3 关键前体物常温下难定位吸附和选择性光/热催化的难题。结合密度泛函理论 (DFT) 和先进原位动态表征等手段, 识别关键活性物种、特定吸附位点及催化反应中间产物, 揭示材料组成-表/界面性质- O_3 关键前体物降解反应路径之间的内在关联, 突破纳米催化在环境大气污染控制中的技术瓶颈; 研发高效常温催化长效除醛新技术和常温制备光催化薄膜新产品, 形成技术优势。未来研究面向封闭空间空气净化与灭菌杀菌的纳米催化协同技术, 为开创纳米催化与环境大气污染控制融合发展的新途径做贡献。

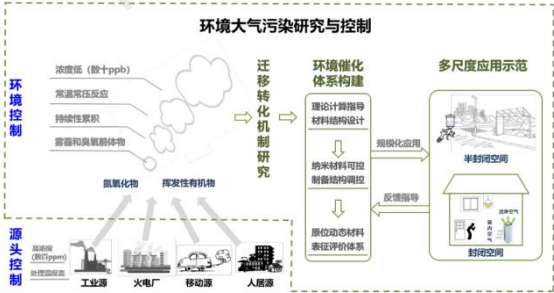


Fig.1 环境大气污染研究与控制领域的纳米催化策略

关键词: 纳米异质/异相结; 光热协同催化; 臭氧前体物; 密度泛函理论; 原位动态表征

参考文献

- [1] Peng, S, Rao, Y., Li, T., Zhang, Y., Cao, J., Lee, S., Huang, Y. *Chinese. Chem. Lett.* **2024**, *35*, 109219.
- [2] Wang, J., Wang, D., Song, Z., Jiang, N., Li, S., Zhang, Y., Huang, B., Zhou, H., Cui, Z., Wang, L. *Energy Environ. Sci.* **2023**, *16*, 3146–3157.
- [3] Peng, S., Li, R., Huang, Y., Zhang, Y., Cao, J., Lee, S. *Appl. Surf. Sci.* **2022**, *600*, 154056.
- [4] Yu, X., Li, S., Dong, X., Zhang, Y., Zhang, Q., Zheng, H. *J Ind. Eng. Chem.* **2022**, *105*, 393–404.
- [5] Li, S., Yu, X., Dong, X., Meng, X., Zhang, Y., Qin, C. *J Environ. Chem. Eng.* **2021**, *9*, 106562.

西北特大城市冬季气溶胶谱分布及吸湿性特征分析

叶树声¹, 袁亮^{1,*}

¹成都信息工程大学大气科学学院, 成都平原城市气象与环境四川省野外科学观测研究站, 四川 成都 610225

*Email: yuanliang@cuit.edu.cn

大气气溶胶对环境、气候和人类健康都有着深远的影响。随着气溶胶吸湿增长, 颗粒物的粒径、光学特性都将发生改变, 导致能见度恶化。乌鲁木齐是典型的西北半干旱城市, 由于其复杂的地形因素和气候条件, 冬季经常出现低能见度的天气过程。然而目前关于西北地区气溶胶吸湿性的研究很少, 因此有必要在乌鲁木齐开展吸湿性研究。利用在乌鲁木齐地区 2024 年 12 月 1 日-2025 年 1 月 10 日期间气溶胶数浓度粒径谱分布(10 nm-20 μm)和串联吸湿性差分迁移率分析仪(40-200 nm)的观测数据, 本文对乌鲁木齐市大气气溶胶数浓度和吸湿增长因子(g)的分布特征进行了研究。主要结论如下:

观测期间, 气溶胶数浓度谱分布的整体呈现单峰分布, 利用对数正态分布拟合得到其峰值粒径为 72.2 nm, 峰值数浓度最大为 19668 cm^{-3} , 峰值粒径和谱分布几何标准差(谱宽)为 2.50。粒径为 20-100 nm 的粒子在上午和傍晚的数浓度存在峰值。而气溶胶体积浓度的日变化呈现单峰分布, 峰值出现在下午, 谷值出现在上午。

在 90%相对湿度下, 乌鲁木齐地区 40、80、110、150 和 200nm 粒径粒子的平均吸湿增长因子(g_{mean})分别为 1.19、1.36、1.43、1.50 和 1.56, 除 40 nm 粒子外, 其余粒径粒子的 g_{mean} 均高于南京地区。40 nm 气溶胶粒子的吸湿增长因子平均概率分布(g -PDF)为单峰分布, 主要以不吸湿模态($g \leq 1.1$)为主, 80、110、150 和 200nm 粒子的 g -PDF 呈现明显的双峰分布, 由占主导地位的强吸湿模态($g \geq 1.33$)和较弱的弱吸湿模态组成, 其中 40 和 80 nm 粒子弱吸湿模态($1.1 < g < 1.33$)的占比比其他粒径大。40 nm 粒子的弱吸湿模态在凌晨和下午存在概率分布的峰值, 80、110、150 和 200nm 粒子则是强吸湿模态在凌晨和下午存在概率分布的峰值, 整体上看夜间强吸湿模态的粒子数目占总粒子数的比例高于白天, 气溶胶粒子的吸湿性更大。

关键词: 乌鲁木齐; 气溶胶; 谱分布; 吸湿性

参考文献

- [1] Yoon S C, Kim J. Influences of relative humidity on aerosol optical properties and aerosol radiative forcing during ACE-Asia[J]. Atmospheric Environment, 2006, 40(23): 4328-4338.
- [2] Heala M R, Kumarb P, Harrisond R M. Particles, air quality, policy and health[J]. Chemical Society Reviews, 2012, 41: 6606-6630.
- [3] Lebo Z J, Feingold G. On the relationship between responses in cloud water and precipitation to changes in aerosol[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2014, 14(21): 11817-11831.
- [4] Broday DM, Georgopoulos PG. Growth and deposition of hygroscopic particulate matter in the human lungs[J]. Aerosol Science and Technology: 2001, 34: 144-159.
- [5] Liu B Y H, Pui D Y H, Whitby K T, et al. The aerosol mobility chromatograph: A new detector for sulfuric acid aerosols[J]. Atmospheric Environment. 1978, 12(1): 99-104.
- [6] Gasparini R, Li R, Collins D R. Integration of size distributions and size-resolved hygroscopicity measured during the Houston Supersite for compositional categorization of the aerosol [J]. Atmospheric Environment. 2004, 38(20): 3285-3303.
- [7] Ogren JA, R.J. C. Implications for Models and Measurements of Chemical Inhomogeneities among Cloud Droplets[J]. Tellus B: Chemical and Physical Meteorology: 1992, 44(3): 208-225.
- [8] Tang IN. Chemical and size effects of hygroscopic aerosols on light scattering coefficients[J]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres: 1996, 101: 19245-19250.
- [9] Liu X, Gu J, Li Y, Cheng Y, Qu Y, Han T, Wang J, Tian H, Chen J, Zhang Y. Increase of aerosol scattering by hygroscopic growth: Observation, modeling, and implications on visibility[J]. Atmospheric Research: 2013, 132-133: 91-101.
- [10] 魏毅. 乌鲁木齐市大气污染成因及防治对策研究[J]. 干旱区资源与环境. 2010, 24(9): 68-71

- [11] Massling A, Stock M, Wehner B, et al. Size segregated water uptake of the urban submicrometer aerosol in Beijing[J]. *Atmospheric Environment*. 2009, 43(8): 1578-1589.
- [12] Ye X, Ma Z, Hu D, et al. Size-resolved hygroscopicity of submicrometer urban aerosols in Shanghai during wintertime[J]. *Atmospheric Research*, 2011, 99(2): 53-364.
- [13] Tan H, Yin Y, Gu X, et al. An observational study of the hygroscopic properties of aerosols over the Pearl River Delta region[J]. *Atmospheric Environment*. 2013, 77(3): 817-826.
- [14] 吴奕霄, 银燕, 顾雪松, 等. 南京北郊大气气溶胶的吸湿性观测研究[J]. *中国环境科学*, 2014, 34(8): 1938-1949.
- [15] 张茹, 汤莉莉, 许汉冰, 等. 冬季南京城市大气气溶胶吸湿性观测研究[J]. *环境科学学报*, 2018, 38(1): 32-40.

市碳排放立体监测与评估研究

魏崇¹

¹ 中国科学院上海高等研究院，上海市浦东新区，201210

*Email: weic@sari.ac.cn

摘要正文：二氧化碳（CO₂）和甲烷（CH₄）是辐射强迫最大的两种温室气体。城市作为人类社会经济活动中心，排放了70%以上的碳排放。2021年9月生态环境部印发《碳监测评估试点工作方案》，在上海市等城市开展碳监测综合试点。上海市是我国重要的经济、金融、贸易、航运和科技创新中心，是开展超大城市碳排放相关研究的合适城市，本研究利用卫星、地面固定站和移动监测实现城市温室气体立体监测。通过卫星监测、地基柱浓度监测、固定站高精度监测获得上海市CO₂和CH₄柱浓度和近地面浓度的年际变化、日内变化等时间变化特征；通过车辆走航监测、无人机走航监测获得上海市不同季节主干道路CO₂和CH₄空间分布特征以及0-500米垂直廓线分布特征。结合温室气体和大气污染物间相互关系，反映CO₂与含碳物质燃烧排放的大气污染物具有相似来源。应用¹⁴C和¹³C同位素示踪技术，解析出上海市不同化石源和非化石源的贡献比例。

关键词：温室气体；大气污染物；立体监测；时空分布；来源解析

参考文献

- [1] Wei Chong, Historical trend and drivers of China's CO₂ emissions from 2000 to 2020. *Environment, Development and Sustainability* 2024, 26, 2225-2244.
- [2] Wei C.; Wang M. H.; Fu Q. Y.; Dai C.; Huang R; Bao Q., Temporal characteristics and potential sources of black carbon in megacity Shanghai, China. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 2020, 125, (9), e2019JD031827.
- [3] Wei Chong; Wang Maohua; Fu Qingyan; Dai Cheng; Huang Rong; Bao Quan, Temporal characteristics of greenhouse gases (CO₂ and CH₄) in the megacity Shanghai, China: Association with air pollutants and meteorological conditions. *Atmospheric Research* 2020, 235, 104759.
- [4] Wei Chong; Wang Maohua, Spatial distribution of greenhouse gases (CO₂ and CH₄) on expressways in the megacity Shanghai, China. *Environmental Science and Pollution Research* 2020, 27, (25), 31143–31152.

基于地基和卫星观测的大气污染物排放模拟研究

李楠 Nan Li

南京信息工程大学

Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing, 210044, China

Abstract:

Satellite-based inverse modeling has the potential to drive aerosol precursor emissions, but its efficacy for improving chemistry transport models (CTMs) remains elusive because of its likely inherent dependence on the error characteristics of a specific CTM used for the inversion. This issue is quantitatively assessed here by using three CTMs. We show that SO₂ emissions from global GEOS-Chem adjoint model and OMI SO₂ data, when combined with spatial variation of bottom-up emissions, can largely improve WRF-Chem and WRF-CMAQ forecast of SO₂ and aerosol optical depth (in reference to MODIS data) in China. This suggests that the efficacy of satellite-based inversion of SO₂ emission appears to be high for CTMs that use similar or identical emission inventories. With the advent of geostationary air quality monitoring satellites in next three years, this study argues that an era of using top-down approach to rapidly update emission is emerging for regional air quality forecast, especially over Asia having highly varying emissions.

Road dust remains a significant contributor to PM_{2.5} pollution in the Guanzhong Plain (GZP), China, posing risks to human and ecosystem. This study assesses the impact of road dust on PM_{2.5} pollution in the Guanzhong Plain, China, by examining its toxic components, oxidative potential (OP), and source-related risks in commercial, traffic, and residential areas. The analysis focuses on the contributions of heavy metals and polycyclic aromatic compounds (PACs) to OP, utilizing an XGBoost-SHAP machine learning model for quantification and a land-use regression (LUR) model to link OP levels with urban micro-environmental factors. Additionally, a source-pathway-receptor (S-P-R) model develops a comprehensive risk index system. Findings indicate that commercial areas face severe Co and Ni contamination due to building material wear, with enhanced photochemical reactions evidenced by elevated levels of specific PAC derivatives. Residential zones show significant contributions from non-exhaust vehicle emissions, marked by high Zn and Cu levels, and possibly nitro-PACs from cooking fumes, with the highest OP rates linked to building density. PACs were the primary contributors to OP, with the top four responsible for 65.2%. The CR index system identified source comprised about a half to risk, pathway and receptors contributed the remaining half. This model demonstrated commercial dust was the most threatening, 50% samples in high level. Risk associated with transportation facilities and hospitals far exceeded that of other areas. In the study area, provincial city Xi'an was suffering from severe dust risk. This study highlighted the interaction between urban micro-environments, road dust toxicity, and oxidative health risks, further revealing the role of urban environments in risk assessment.

墙报摘要

用于放射性气溶胶捕集的雾化固定剂研究进展

李晟昊¹, 汪传高^{1,*}

¹中国原子能科学研究院, 北京, 102413

^{1,*}中国原子能科学研究院, 北京, 102413

*Email: carrot3562022@163.com

摘要正文: 在核设施退役以及核事故应急中, 会产生大量的放射性气溶胶, 人体长期处于这样的环境中都会受到危害, 引发各种疾病^[1]。使用雾化固定剂对放射性气溶胶进行捕集不仅可应用于降低空气中悬浮的放射性气溶胶, 还可用于固定表面松散污染。经雾化固定处理后, 被处理区域的放射性气溶胶水平可明显降低, 大大降低对操作人员的危害^[2]。本文从环保性, 实用性, 高效性等角度出发, 重点分析对比了糖类混合物、泡沫型^[3]、水溶性高分子醇溶液型^[4]、聚丙烯酸复配物型^[5]、两亲嵌段共聚物型^[6]等环保型固定剂的配方设计、通过捕集率、固定率及再悬浮率三项指标对以上雾化固定剂的气溶胶捕集性能及实际应用效果做出了评价, 其中部分雾化固定剂对气溶胶的捕集率于2h内可达90%以上, 以水溶性合成树脂为主要成分的雾化固定剂可以显著降低放射性气溶胶的再悬浮率。研究指出, 现有配方种类繁多且差异显著, 不同种类雾化固定剂对相应放射性气溶胶具有良好的捕集效率, 通过实际的应用能够看出, 放射性气溶胶雾化固定剂能够降低密闭区域内的气溶胶的污染, 对工作人员的安全给予更多的保障。但目前雾化固定剂存在适用条件不明, 不同种类雾化固定剂之间研究较为割裂, 没有相关的对比性实验的问题。此外, 针对固定的后端研究较少, 主要是有关其成膜性以及再扰动降尘实验较少。因此未来需进一步探究固定剂对不同气溶胶的适配性、极端条件下的稳定性及环境兼容性, 完善实验流程, 加强对实验的后端研究, 以推动其高效化、标准化与规模化应用。

关键词: 雾化固定剂; 放射性气溶胶; 捕集固定, 高分子聚合物

参考文献

- [3] 李光升, 金花. 俄开发核设施泡沫去污技术[J]. 国外核新闻, 2023(09):21.
- [4] 周刚. 综放工作面喷雾降尘理论及工艺技术研究[D]. 山东科技大学, 2011.
- [5] 陈二娟. 基于 PMMA-b-PMAA 的自脆型去污剂的制备及性能研究[D]. 西南科技大学, 2017.
- [6] 高帅, 乔海涛, 张景等. 放射性药品生产单位雾化固定高浓度 ¹³¹I 放射性气溶胶的初步研究[J]. 中国辐射卫生, 2021, 30(02):165-167. DOI:10.13491/j.issn.1004-714X.2021.02.009.
- [7] 卢彦志, 刘峰, 詹杰等. 气溶胶固定剂 PAM-b-PVTES 的合成及表征[J]. 精细化工, 2022, 39(04):806-811+836. DOI:10.13550/j.jxhg.20210997.
- [8] 武明亮, 张文俊, 唐德仲等. 放射性气溶胶雾化捕集固定试验初步研究[J]. 辐射防护, 2014, 34(02):81-85+90.

通用航空发动机燃用HEFA-SAF和RP-3排放碳烟颗粒的形态和纳米结构分析

曹阳¹, 陈龙飞^{1,2}, 胡雪欢^{1*}, Sow Chormg Haur³, 陈晓阳¹

¹北京航空航天大学能源与动力工程学院, 中国北京, 100191

²北京航空航天大学杭州国际创新研究院, 中国杭州, 311115

³新加坡国立大学理学院, 新加坡, 117542

*Email: huxuehuan@buaa.edu.cn

可持续航空燃料 SAF 是减少航空碳烟颗粒排放(数目或质量浓度)的重要途径。但对燃用 SAF 排放的碳烟颗粒微观特性的研究空白导致难以全面评估 SAF 的推广对于环境和公众健康的潜在影响。本研究对燃用 100% HEFA-SAF 和 RP-3 燃料的两种通用航空动力单元(航空活塞发动机(APE)与小型涡扇发动机(TB))排放的碳烟颗粒微观特性展开了详细探究, 旨在深入地理解两种航空燃料在碳烟颗粒的成核机制及其后续氧化性方面的差异。APE 和 TB 运行工况均涉及低负荷(7%), 中负荷(50% or 60%)和高负荷(100%)。EDS 结果表明, HEFA-SAF 碳烟聚集体在高负荷下具有较大的 C/O 比, 而 RP-3 碳烟聚集体在低负荷下具有较大的 C/O 比, 这表示衍生自 HEFA-SAF 的碳烟聚集体在高负荷下表现出更低的凝结概率。根据 HRTEM 图像统计, 两种航空燃料衍生的碳烟初级颗粒的平均粒径(D_p)均随发动机负荷的增大而增大, 但在所有负荷下 HEFA-SAF 初级颗粒 D_p 均小于 RP-3。尽管较小的颗粒可能导致较高的吸入风险, 对于使用 HEFA-SAF 的健康风险的评估还需综合考虑其排放数量或质量浓度的降低。对初级颗粒内部微晶的分析结果表明, 从低负荷增大至高负荷时, 两种航空燃料衍生的碳烟纳米结构的反应性均有所降低。但在低负荷下 RP-3 碳烟颗粒反应性较小, 而在高负荷下 HEFA-SAF 碳烟颗粒反应性更小。拉曼光谱分析表明, HEFA-SAF 碳烟颗粒具有较小的“核”(无定型碳)和较厚的“壳”(同心石墨层)的形貌。因此, 碳烟颗粒的含氧量、纳米结构及石墨化程度与发动机负荷密切相关, 这表明了航空发动机燃烧工况在可持续航空燃料替代性评估中的显著变异性。这些变异性起源于发动机负荷的改变影响了燃料-空气的混合与燃料热解在动力学时间尺度上的竞争结果。

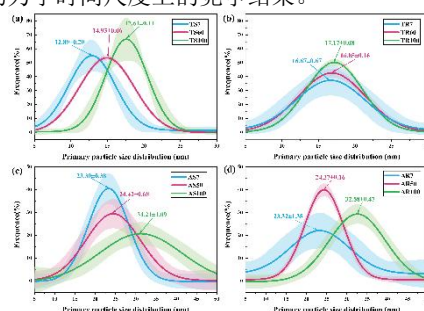


Fig. 1 Primary particle size distribution of TB and APE burning HEFA-SAF and RP-3 at 7%, 50% (APE) / 60% (TB), 100% load.

关键词: HEFA-SAF; 碳烟颗粒; 微观特性; 成核路径

Non-thermal plasma coupled with $\text{MO}_x/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ (M: Fe, Co, Mn, Ce) for chlorobenzene degradation: Analysis of byproducts and the reaction mechanism

Weiwen Yan¹, Yufei Zhang^{1, *}

¹School of Environmental and Municipal Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology,
No. 13 Yan Ta Road, Xi'an 710000, China.

*Email: zhangyufei@xauat.edu.cn

Chlorobenzene is a typical Cl-VOC that is extensively applied in the industries such as pharmaceutical, pesticide and dye, and may lead to giddiness and nervosism, aggravate the risk of cancer after prolonged exposure, and cause several atmospheric environment issues. This work investigated the decomposition of chlorobenzene in NTP catalytic systems using $\text{MO}_x/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ (M: Fe, Co, Mn, Ce) catalysts. The removal efficiency, mineralization rate and Cl selectivity of chlorobenzene elimination increased with increasing SIE, whereas the EY showed an inverse trend. All of these evaluation indicators significantly enhanced after introducing a catalyst, whereas the residual O_3 concentration decreased. $\text{CoO}_x/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ exhibited the best activity for chlorobenzene decomposition of the tested catalysts. This can be ascribed to the suitable redox ability and acidity of the $\text{CoO}_x/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ sample, as proved by the relatively low reduction temperature and weak acidity compared with the other catalysts. Several PCDD/Fs were detected for the first time during NTP catalytic process even though the discharge gas temperature was much lower than the temperature at which PCDD/Fs are formed through heterogeneous reaction. In plasma catalytic systems, the decomposition of chlorobenzene follows two pathways: 1) direct destruction by reactive oxygen particles in the gas phase of the discharge region; 2) further Oxidation by reactive oxygen species on the catalyst surface. Suitable acidity of the catalyst can also prevent the deposition of Cl species, thereby reducing the possibility of chlorination and the formation of chlorinated organics. The findings presented here provide new insight into the degradation of Cl-VOCs in NTP catalysis.

Keywords: Non-thermal plasma; Catalysts; Chlorobenzene; Degradation

References

- [1] S. Li, X. Yu, X. Dang, X. Men, Y. Zhang, C. Qin, Non-thermal plasma coupled with $\text{MO}_x/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ (M: Fe, Co, Mn, Ce) for chlorobenzene degradation: Analysis of byproducts and the reaction mechanism. *J Environ. Chem. Eng.* 2021, 9: 106562.
- [2] X. Y, S. Li, X. Dang, Y. Zhan, Q. Zhang, H. Zheng, A highly efficient multi-stage dielectric barrier discharge (DBD)-catalytic system for simultaneous toluene degradation and O_3 elimination. *J Ind. Eng. Chem.* 2022, 105: 393.

Interfacial Dependent Reactive Oxygen Species Generation over Nanoparticles for Catalytic Oxidation of Formaldehyde at Room Temperature

H.Y. Wang¹, Y.F. Zhang^{1,*}

¹*School of Environmental and Municipal Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, No. 13 Yan Ta Road, Xi'an 710000, China. *Email: zhangyufei@xauat.edu.cn*



Introduction

Formaldehyde (HCHO) as a primary indoor gas pollutant can increase the risk of asthma, dyspnea, or even teratogenesis and carcinogenesis. Long-term exposure to HCHO may impose detrimental effect on human health, even at very low ppm levels. Developing catalysts with superior catalytic activity and selectivity in formaldehyde oxidation at room temperature is therefore of great significance for both human and environmental health. Previous studies have shown that the catalytic activity closely relates to the reactive oxygen species generated by activating O_2 over catalysts surface, which is a key step in the reaction. Herein, Pt-VO-ZrO₂ was prepared by a two-step calcination of PVP-capped colloids supported on ZrO₂ in air. The catalyst forms the SMSI interface between Pt and monoclinic ZrO₂ support. The formation of specific metal-support interface can also contribute to SMSI and the specific sites at the metal-support interface are expected to enhance O_2 activation. By conducting in situ DRIFT analysis and DFT computation, the present study proposes the synergistic oxidation mechanism of reactive oxygen and hydroxyl over Pt-VO-ZrO₂.

Besides, ZrO₂ nanoparticles coupled low-loading Ir single atoms in N-doped carbon (Ir₁-N-C/ZrO₂) was prepared. Density functional theory calculation results and electron spin resonance spectra indicate that the introduction of ZrO₂ nanoparticles modulate the electronic structure of the Ir single atoms, promoting O_2 activation to $\cdot O_2^-$.

Aim

The objectives of the study were to (1) construct a strong metal-support interaction to enhance the activation of oxygen and oxidation of formaldehyde, (2) complete catalytic oxidation of formaldehyde at room temperature, (3) conduct in situ DRIFT analysis and DFT computation, to investigate the synergistic oxidation mechanism of reactive oxygen and hydroxyl on Pt-VO-ZrO₂, (4) investigate the promotional effect of ZrO₂ nanoparticles on HCHO oxidation

Experimental Methods

1. Physicochemical Characterizations
2. Catalytic Activity Tests
3. DFT calculations

Results

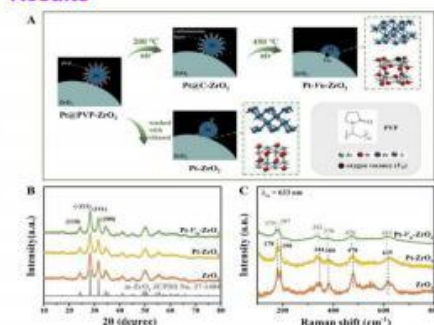


Figure 1. (A) Schematic synthesis of Pt-VO-ZrO₂. (B) XRD patterns and (C) Raman spectra at the excitation of 633 nm of ZrO₂, Pt-ZrO₂ and Pt-VO-ZrO₂.

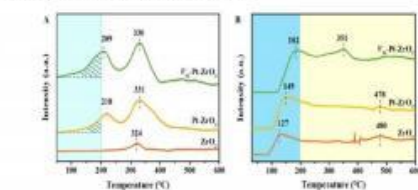


Figure 2. (A) H₂-TPR profiles (B) O₂-TPD of ZrO₂, Pt-ZrO₂ and Pt-VO-ZrO₂.

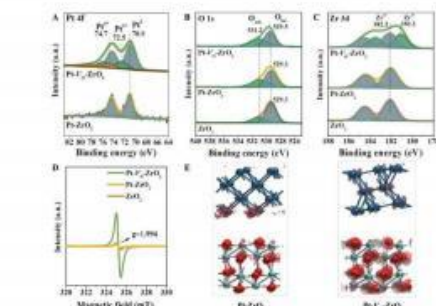


Figure 3. (A) Pt 4f, (B) O 1s, (C) Zr 3d XPS spectra and (D) Solid-state EPR spectra. (E) EDD results of Pt-ZrO₂ and Pt-VO-ZrO₂.

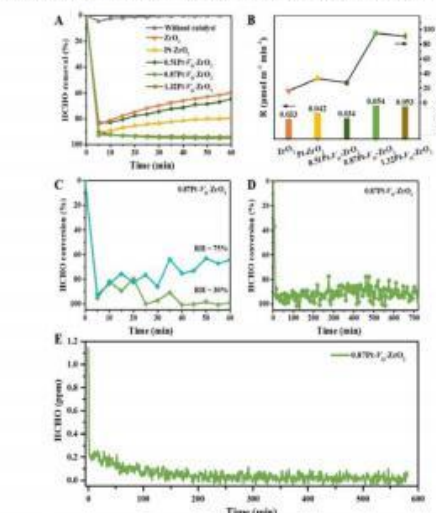


Figure 4. (A) HCHO removal as a function of reaction time and (B) HCHO conversion and the specific reaction rate. (C) HCHO conversion under RH of 30 and 75%. (D) Stability test. (E) Low-concentration HCHO (about 1 ppm) removal over 0.87Pt-VO-ZrO₂ for 580 min.

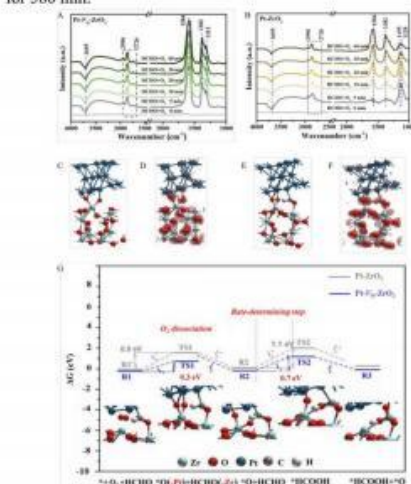


Figure 5. Time-on-stream intensity of in situ DRIFTS spectra over (A) Pt-VO-ZrO₂ and (B) Pt-ZrO₂. (C) O₂ adsorption configuration at the Pt-VO-ZrO₂ interface and (D) and electron density difference. (E) The co-adsorption HCHO and O₂ configurations and (F) and electron density difference. (G) The free energy for the reaction pathway of HCHO transformed into HCOOH at the Pt-VO-ZrO₂ interface.

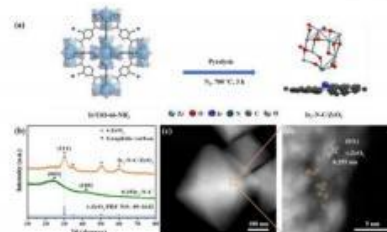


Figure 6. (a) Schematic illustration of the synthesis procedure of Ir₁-N-C/ZrO₂. (b) XRD patterns of Ir₁-N-C/ZrO₂ and Ir₁-N-C. (c) HAADF-STEM image of Ir₁-N-C/ZrO₂. (d) and Ir single atoms.

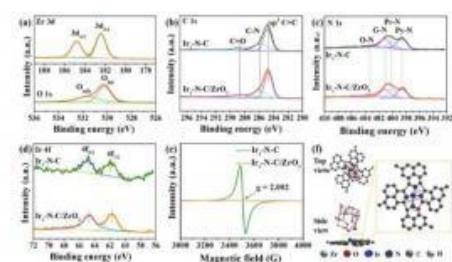


Figure 7. (a) High-resolution Zr 3d XPS spectra and O 1s XPS spectra of Ir₁-N-C/ZrO₂. High-resolution XPS spectra of Ir₁-N-C/ZrO₂ and Ir₁-N-C (b) C 1s, (c) N 1s, and (d) Ir 4f. (e) ESR spectra of Ir₁-N-C/ZrO₂ and Ir₁-N-C. (f) Mulliken charge of Ir₁-N-C/ZrO₂.

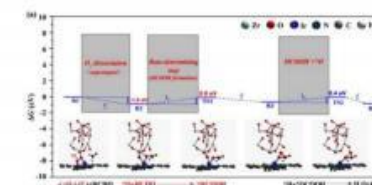


Figure 8. The activation energy of the major reaction path of HCHO oxidation transformed into CO₂ and H₂O at the Ir₁-N-C/ZrO₂ interface.

Conclusion

In summary, PVP could be in situ carbonized into carbonaceous layers at 200 °C and then gasified at 450 °C, forming the SMSI interface between Pt and monoclinic ZrO₂ support. The singly ionized VO induced by the SMSI interface capture and activate the molecular O₂, then proceed to generating the O^{*}. The generated O^{*} tends to link the (110) surface of ZrO₂ and the (111) surface of Pt as an electronic transmission channel for the selective oxidation of HCHO adsorbed on the (110) surface of ZrO₂. By conducting in situ DRIFT analysis and DFT computation, the synergistic oxidation mechanism of reactive oxygen and hydroxyl was proposed over Pt-VO-ZrO₂. The research contributes to the development of SMSI interface engineering for the catalytic reaction of HCHO at room temperature.

By engineering ZrO₂ nanoparticles with Ir single atoms in N-doped carbon (Ir₁-N-C/ZrO₂), the enhancing effect of ZrO₂ nanoparticles on HCHO oxidation was demonstrated by experimental results and DFT calculations. ZrO₂ nanoparticles can regulate the electronic property of Ir single atom through charge redistribution, synergistically promoting the activation of surface adsorption oxygen and surface lattice oxygen to generate reactive oxygen species. The Ir-C-Zr channel also accelerated the dissociation of O₂ to active oxygen atom (^{*}O). The formed reactive oxygen species could oxidize HCHO to DOM, formate species and CO₂ and H₂O rapidly. In brief, our work offers a new way to obtain the low-loading single-atom catalyst with superior catalytic activity towards HCHO oxidation by rational design.

第九分论坛

核电气溶胶前沿论坛

邀请报告

高温气冷堆输球管中石墨粉尘产生机理研究

彭威*, 孙琦, 于溯源

(清华大学, 北京 100084)

*Email: pengwei@tsinghua.edu.cn

高温气冷堆具有固有安全性, 是先进的第四代核反应堆。在高温气冷堆堆芯中, 石墨材料起到重要的作用, 它不仅是燃料颗粒的包覆材料, 也是慢化剂、反射层和屏蔽层等堆芯结构的主要材料。燃料球在堆芯的输运过程中由于球与球, 球与石墨构件以及管道等相互摩擦以及石墨元件的氧化等作用会产生石墨粉尘颗粒(几十纳米到几微米大小)。产生的石墨粉尘在氦气的夹带下形成石墨粉尘气溶胶, 在一回路中进行扩散、沉积、凝并等迁移演化过程。当部分石墨粉尘将沉积在一回路的关键设备上, 影响其热工水力性能。同时, 这些石墨粉尘还会束缚一定的放射性物质, 并随着石墨粉尘在一回路中运动, 进而迁移到一回路各个部件和设备中, 给各部件和设备的维护和检修带来不便; 其次在发生严重事故情况下石墨粉尘将通过管道破口泄漏到环境中, 从而给环境带来放射性污染。因此, 高温气冷堆一回路携带放射性的石墨粉尘颗粒是核安全评审源项研究的重要问题。

本文围绕石墨粉尘重要的产生机制石墨元件磨损以及石墨元件氧化的机理进行了研究。通过模拟高温堆运行的摩擦实验研究了高温堆球床内燃料元件磨损特性、粉尘的产生量以及颗粒形貌和粒径分布; 通过基于振动信号和可视化结合的实验, 揭示了高温堆输球管线中石墨燃料元件的磨损特性及石墨粉尘产生机理, 建立了球形燃料元件碰撞磨损的动力学模型, 发展了一套模拟燃料球运动的高效数值计算方法, 提出了燃料元件磨损产生石墨粉尘的多因素计算模型; 通过实验和数值模拟研究, 探究了石墨元件氧化腐蚀作用的机理和规律。

关键词: 高温气冷堆; 石墨粉尘; 颗粒; 粉尘产生

口头报告

安全壳喷淋系统对碘及其化合物去除效率的影响及地坑液池碘形态转化研究

唐甲璇^{1,2}, 李佳龙^{1,2}, 杨洋^{1,2}, 张卢腾^{1,2,*}, 潘良明^{1,2}, 朱隆祥^{1,2}, 孙皖^{1,2}

¹重庆大学低品位能源利用技术及系统教育部重点实验室, 重庆, 400044;

²重庆大学核工程与核技术系, 重庆, 400044

*Email: ltzhang@cqu.edu.cn

摘要正文: 放射性碘因其裂变当量高、易挥发并对人类甲状腺健康构成重大威胁, 成为严重核电站事故中释放的主要放射源之一。碘在反应堆安全壳内以气态和颗粒状不同物理形态以及 CH_3I 、 CsI 、 I_2 、 HI 等多种化学形式存在, 这些多样的状态和潜在的辐射影响使碘及其化合物的行为和化学分析成为核电安全研究的重要课题。尽管喷淋系统在减少碘蒸汽和碘气溶胶排放方面已展示出一定潜力, 但喷淋溶液的化学成分和液滴参数对碘去除效率的影响尚未得到充分研究。在复杂的化学和环境条件下, 碘及其化合物在地坑液池中的行为和形态转换尚缺乏系统分析, 特别是地坑液池中碘的化学反应机制尚未明晰。本文通过实验研究了喷雾系统在模拟严重事故条件下的碘去除效果, 并分析了地坑液池中不同碘形态的转化过程。结果表明, 喷洒初期气态碘浓度迅速下降, 喷淋溶液中添加碱性物质有助于碘及其化合物的去除。在液池中, 碘及其化合物主要以 I_2 、 I^- 、 I_3^- 和 IO_3^- 形式存在。提高喷淋溶液的pH值及温度可促进 I_2 还原为 I^- , 同时抑制还原性 I^- 转化为挥发性 I_2 , 从而有效减少事故后期碘源项的增加。这些发现为优化反应堆安全壳喷淋系统的设计和改进严重事故管理策略提供了科学依据。

关键词: 安全壳喷淋系统; 气溶胶; 碘; 化学分析

大破口事故下HPR1000反应堆安全壳内气溶胶迁移行为研究

常博康^{1,2,3}, 周涛^{1,2,3*}, 刘晓芳^{1,2,3}

¹东南大学能源与环境学院核科学与技术系, 南京, 211189

²核热工安全与标准化研究团队, 中国

³大型发电装备安全运行与智能测控国家工程研究中心, 南京, 211189

*Email: 101012636@seu.edu.cn

摘要: HPR1000先进压水堆属于第三代反应堆, 其特点在于安全壳采用非能动安全系统, 依赖重力、密度差、自然循环等自然力而非外部动力实现事故下的安全功能, 减少对外部电源的依赖, 大幅降低堆芯熔毁风险。大破口事故是指反应堆一回路冷却剂管道发生大面积破裂, 导致冷却剂快速流失的事故。大破口事故发生后, 堆芯熔融物与混凝土反应生成放射性气溶胶并释放到安全壳内, 造成放射性物质泄漏、传热恶化等安全隐患。通过大破口事故后反应堆安全壳内气溶胶迁移行为研究, 可为反应堆严重事故下气溶胶的预防提供理论依据。以Fluent仿真软件搭建HPR1000安全壳大空间几何模型并进行数值计算, 采用k- ϵ 模型研究气溶胶的湍流流动特性。研究结果表明, 事故发生后, 水蒸气从破口位置喷出, 将由反应堆压力容器隔壁面向中心位置扩散, 随后由出口处扩散至安全壳上部大空间中; 颗粒物跟随水蒸气在反应堆压力容器隔壁间释放后将全部扩散至上部大空间, 多数沉积在安全壳顶部, 少数沉积在安全壳侧壁面, 底部颗粒沉积最少。

关键词: 先进压水堆; 安全壳; 大破口事故; 气溶胶迁移

【第一作者】常博康, 2000.12, 陕西宝鸡, 东南大学能源与环境学院核科学与技术系, 硕士研究生。

【通讯作者】周涛, 1965.3, 陕西商州, 东南大学能源与环境学院, 教授, 博导, 核科学与技术系系主任, 核热工水力与安全, 101012636@seu.edu.cn

【基金资助】江苏省双创人才(JSSCRC2021500); 基于相场-流场耦合的相分离组织演变模拟技术(6903003092); 严重事故下气溶胶迁移行为CFD计算技术咨询服务(H20231150)

参考文献

- [1] 毛赏,周涛,卢怀畅,等.超临界CO₂在不同肋管中颗粒物沉积特性[J].东南大学学报(自然科学版), 2022,52(6):1114-1121.
- [2] 洪文鹏,王欣.粗糙流道微细颗粒物沉积特性的数值研究[J].中国电机工程学报, 2018,38(13):3889-3895.
- [3] 朱亮宇,周涛,秦雪猛,等.不同尺寸管道中细颗粒的沉积运动规律研究[J].核科学与工程, 2019,39(5):695-700.
- [4] 周涛,李子超,李兵,等.核电运行及事故颗粒物运动沉积分析方法研究[J].中国科学(物理学力学天文学), 2019,49(11):20-42.
- [5] 刘岩.基于CFD-DEM耦合的粗糙壁面颗粒趋壁沉积特性数值模拟[D]. 吉林:东北电力大学,2020.
- [6] Wang J Y, Guan Z Q, Gurgenci H, et al. Computational investigations of heat transfer to supercritical CO₂ in a large horizontal tube [J]. Energy Conversion and Management, 2018, 157: 536-548.
- [7] Wang J Y, Guan Z Q, Gurgenci H, et al. Numerical study on cooling heat transfer of turbulent supercritical CO₂ in large horizontal tubes [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 126:1002-1019.

运行压力对超临界 CO₂ 介质中细颗粒运动沉积的影响研究

周涛^{1, 2, 3*}, 毛赏^{1, 2, 3}, 何书宇^{1, 2, 3}, 常博康^{1, 2, 3}, 张豪磊^{1, 2, 3}

(¹东南大学能源与环境学院核科学与技术系, 南京, 211189)

(²核热工安全与标准化研究所, 南京, 211189)

(³大型发电装备安全运行与智能测控国家工程研究中心, 南京, 211189)

摘要: 超临界二氧化碳 (supercritical carbon dioxide, SCO₂) 是未来设计的一种小型反应堆重要的工作介质。然而, 在运行过程中, 可能产生细颗粒物杂质, 严重时威胁系统的安全运行。采用 FLUENT 软件, 对细颗粒运动沉积进行计算研究, 分析了运行压力对沉积的影响。结果表明: 传热系数在不同压力下首先单调递增然后单调递减, 在 $T_b/T_{pc}=1$ 附近达到最大值, 且 $P=8$ MPa 的传热系数峰值大于 $P=9$ MPa 和 $P=10$ MPa; 还可以发现, 随着压力的增加, 速度的峰值单调递减; 在相同的边界条件下, 壁面温度随 T_b/T_{pc} 表现为先增加, 然后有一个平缓的增加, 最后当 $T_b/T_{pc}>1$ 时, 壁面温度急剧增加。与 $P=9$ MPa 和 $P=10$ MPa 相比, $P=8$ MPa 具有更加明显的特征。

关键词: 超临界二氧化碳; 亚微米颗粒; 运动沉积; 压力; 传热系数

【作者简介】周涛, 1965.3, 东南大学核科学与技术系系主任, 教授, 博导, 博士, 核热工水力与安全, 13681148628, 101012636@seu.edu.cn

【基金资助】江苏省双创人才: 多介质中细颗粒物运动沉积研究 (JSSCRC2021500)

The effect of Operating pressure the Fine Particle Motion and Deposition in Supercritical CO₂

Zhou Tao^{1, 2, 3*}, Mao Shang^{1, 2, 3}, He Shuyu^{1, 2, 3}, Chang Bokang^{1, 2, 3}, Zhang Haolei^{1, 2, 3}

(¹Department of Nuclear Science and Technology, School of Energy and Environment, Southeast University, Nanjing, 211189)

(²Institute of Nuclear Thermal-hydraulic Safety and Standardization, Nanjing, 211189)

(³National Engineering Research Center of Power Generation Control and Safety, Nanjing, 211189)

Abstract: Supercritical carbon dioxide (SCO₂) is an important working medium for the design of a small-scale reactor in the future. However, during operation, fine particulate impurities may be generated, which can severely threaten the safe operation of the system. Using FLUENT software, computational research on the movement and deposition of fine particles was conducted, and the impact of operating pressure on deposition was analyzed. The results indicate that the heat transfer coefficient initially increases monotonically and then decreases monotonically with different pressures, reaching a maximum value near $T_b/T_{pc}=1$, and the peak heat transfer coefficient at $P=8$ MPa is greater than that at $P=9$ MPa and $P=10$ MPa. It can also be found that with the increase in pressure, the peak velocity decreases monotonically; under the same boundary conditions, the wall temperature increases with T_b/T_{pc} , then there is a gentle increase, and finally, when $T_b/T_{pc}>1$, the wall temperature increases sharply. Compared with $P=9$ MPa and $P=10$ MPa, $P=8$ MPa has more pronounced characteristics.

Keywords: Supercritical Carbon Dioxide; Submicron Particles; Motion and Deposition; Stress; Heat transfer coefficient

【Author Information】 Zhou Tao, born in March 1965, is the founding director of the Department of Nuclear Science and Technology at Southeast University, a professor, doctoral supervisor, and holds a PhD in Nuclear Thermal-Hydraulics and Safety. He can be contacted at 13681148628 or via email at 101012636@seu.edu.cn.

【Funding Information】 Jiangsu Province "Double Innovation" Talent: Study on the Motion and Deposition of Fine Particles in Multi-Phase Media (JSSCRC2021500).

一种求解双组份气溶胶布朗凝并问题的泰勒展开矩方法

李旭娟¹，于明州^{1,*}，徐鹏²，史晓磊³，卢志明⁴

¹中国计量大学，气溶胶科学与技术实验室，浙江省杭州市，310018

²中国计量大学，能源环境和安全工程学院，浙江省杭州市，310018

³中国原子能科学研究院，北京市，102413

⁴上海大学，上海应用数学和力学研究所，上海市，200072

*Email: mzyu@cjlu.edu.cn

摘要正文：双组份气溶胶广泛存在于大气环境和化工过程中，而布朗凝并现象是气溶胶颗粒的常见动力学机制。本文提出了一种新的求解双组份布朗凝并气溶胶问题的泰勒展开矩方法，考虑颗粒的分形维数。Smoluchowski凝并方程（Smoluchowski coagulation equation, SCE）是一个具有高度非线性的积分微分方程，它的求解到目前为止一直是一个非常具有挑战性的科学问题，尤其是当SCE从单组分问题扩展到双组份问题。学者们在该领域已经进行了大量的研究，最新的突破是Jiang等人在J. Aerosol Sci. 114 (2017) 94–106上发表的工作，成功地利用泰勒展开矩方法提出了一种新的求解双组份SCE的方法。但是，Jiang的工作的局限性在于仅仅考虑了有限尺度范围下的球形颗粒。本文在此基础上发展了Jiang的工作，考虑了颗粒的分形维数，将其扩展到任何粒径范围内双组份凝聚体的布朗凝并问题，使该方法成为一种更普遍和通用的研究方法。作为验证，选择了Jiang的工作和Lee 于1984提出来的对数正态分布矩方法来验证本文的方法。

关键词：Smoluchowski凝并方程；双组份气溶胶；布朗凝并；泰勒展开矩方法

铅铋快堆事故工况下碘的吸附和沉积行为研究

刘辰宇¹, 王雨晴¹, 吴涵玉¹, 倪木一^{1,*}

¹中山大学中法核工程与技术学院, 广东珠海, 519082

*Email: nimuyi@mail.sysu.edu.cn

铅铋快堆是目前正在快速发展的第四代先进核能系统之一, 铅铋快堆一回路采用高温液态铅铋作为冷却剂, 在严重事故下对堆芯释放的裂变产物具有一定的包容作用^[1-3]。碘作为铅铋快堆的主要裂变产物, 常被看作严重事故的早期环境指标, 因此研究高温 LBE 环境中放射性碘的蒸发与吸附特性, 对控制事故工况下辐射危害至关重要^[4]。本研究基于热色谱技术搭建了高温吸附实验平台, 研究了干燥氩气气氛下从 LBE 中蒸发的含碘蒸汽在不同材料壁面(熔融石英、316L 不锈钢)上的吸附与沉积行为, 利用蒙特卡罗法结合热升华原理, 模拟了含碘蒸汽在不同表面上的理论吸附焓, 结果显示熔融石英和 SS316L 的吸附焓分别为 -145 ± 10 kJ/mol 和 -148 ± 10 kJ/mol, 对应的沉积温度分别为 $448 \pm 11^\circ\text{C}$ 和 $440 \pm 12^\circ\text{C}$ 。通过进一步的 X 射线衍射 (XRD) 和扫描电子显微镜 (SEM) 表征分析, 发现实验条件下形成的主要沉积物为 PbI_2 。本研究确定的含碘蒸汽热力学数据与化学种态分析对于铅铋快堆在正常运行条件下和事故工况下的源项分析与安全评估技术具有重要的支撑作用。

关键词: 铅铋共晶合金; 碘吸附; 严重事故; 热色谱法; 蒙特卡罗模拟

参考文献

- [1] Alemberti, A., 2016. The Lead Fast Reactor: An Opportunity for the Future? *Engineering* 2(1), 59-62.
- [2] Fazio, C., Sobolev, V., Aerts, A., Gavrilov, S., Lambrinou, K., Schuurmans, P., Gessi, A., Agostini, P., Ciampichetti, A., Martinelli, L., 2015. Handbook on lead-bismuth eutectic alloy and lead properties, materials compatibility, thermal-hydraulics and technologies-2015 edition. Organisation for Economic Co-Operation and Development.
- [3] Gorse-Pomonti, D., Russier, V., 2007. Liquid metals for nuclear applications. *J. Non-Cryst. Solids* 353(32-40), 3600-3614.
- [4] Kurisingal, J.F., Yun, H., Hong, C.S., 2023. Porous organic materials for iodine adsorption. *J. Hazard. Mater.* 458, 131835.

铅铋堆放射性²¹⁰Po气溶胶吸附迁移行为研究

王雨晴¹, 刘辰宇¹, 吴涵玉¹, 王圣清¹, 倪木一^{1,*}

¹中山大学, 广东省珠海市香洲区大学路2号中山大学, 519085

*Email: nimuyi@mail.sysu.edu.cn

铅铋合金(LBE)因其良好的中子学经济性和热工水力学性能而被选为 LFR 的主要冷却剂, 然而铅铋堆在正常运行过程中, 会产生有剧毒且挥发性强的元素 ²¹⁰Po, 从而引发新的放射性安全问题。当反应堆破口或事故发生时, ²¹⁰Po 可与潮湿空气发生化学反应生成 H₂Po, 其可沉降在安全壳底部或附着到设备表面, 给职业人员带来放射性危害。在严重事故下, 放射性 H₂Po 气溶胶还可泄漏至厂外, 给公众和环境带来放射性安全问题。

本工作基于铅铋堆真实工况, 设计搭建一套用于不同工况下铅铋中放射性气溶胶的吸附和迁移行为实验平台。基于平台开展了温度梯度为 1073K~293K 时, 铅铋中 PbTe 气溶胶在不同材料吸附和迁移行为, 进而预测和开展不同材料对铅铋中 ²¹⁰Po 气溶胶的吸附和迁移行为分析。实验结果表明, 在 943~873K 温度梯度区间, 铅铋含 PbTe 气溶胶在 SiO₂ 和 SS316 吸附材料上出现了明显吸附。利用 XRD、SEM 和 TEM 联合分析可知, 吸附物质仍为 PbTe, 未发生化学吸附, 且 PbTe 在吸附材料表面形成了晶体结构。对铅铋含 ²¹⁰Po 气溶胶而言, 在相同温度梯度区间的吸附材料表面上生成了某种晶体结构, 发生了化学吸附并生成了不含 Pb 的化合物。由α探测器和液闪测量可知, 铅铋含 ²¹⁰Po 气溶胶更优先与 NaOH 发生反应。

本工作所开展的铅铋含 Te 及 Po 气溶胶吸附迁移行为研究可用于分析铅铋堆内 ²¹⁰Po 的产生及迁移行为, 为 ²¹⁰Po 的活度测量提供方法, 还可为反应堆内气溶胶的净化提出建议, 最终为铅铋堆的辐射防护措施提供参考。

关键词: 铅铋堆; ²¹⁰Po ; PbTe; 气溶胶; 吸附

事故条件下含碘射流闪蒸与滞留特性分析

吴翰¹, 胡立坚¹, 于建群¹, 周艳民¹, 谷海峰^{1,*}

¹哈尔滨工程大学, 黑龙江省哈尔滨市南岗区南通大街 145 号, 150001

*Email: heuwuhan@hrbeu.edu.cn

摘要正文: 在核电站严重事故中, 安全壳内放射性碘的释放与滞留特性对环境安全和公众健康具有深远影响。放射性碘因其高挥发性、较短的半衰期和高生物毒性, 成为核事故后安全壳内需重点关注的目标物质。在事故条件下, 高温高压的一回路冷却剂可能在管道破口处发生剧烈相变, 以射流形式进入二次侧, 发生闪蒸现象。这种浸没条件下含碘射流的闪蒸过程涉及复杂的物理化学行为, 其中的含碘物质以气态或气溶胶态形式扩散, 其滞留效率决定了安全壳整体对放射性核素的控制能力。目前国内外对于射流至气空间的闪蒸目前已开展了较多研究, 但对于浸没射流闪蒸过程中的具体机理、影响因素的实验研究较少; 对于含碘射流闪蒸过程中, 碘的存在是否会对闪蒸过程有影响, 闪蒸过程中碘的输运情况均尚不明确。因此, 本文针对破口事故下对含碘的高温高压水在浸没射流中的过程进行实验与理论研究, 阐明浸没含碘射流闪蒸的物理化学过程、识别并分析影响放射性碘滞留效率的关键参数、评估浸没射流闪蒸对安全壳内碘的滞留效果、探究射流闪蒸过程中影响碘的蒸发析出再传质的主要因素, 从而为事故源项分析提供理论基础。通过实验发现整体滞留效率普遍较高, 在 95% 以上, 其中滞留效率受到淹没深度、射流方向、射流压力、射流流量、射流浓度等多项参数的影响, 这些参数之间存在复杂的相互作用和反馈机制, 不同参数对滞留效率的综合作用呈现出非线性特征, 其影响机制涉及气溶胶的生成、输运和沉积等多个过程。此外, 以过热液体内部气泡生长为基础, 结合含碘气泡传质模型, 建立了射流过程中的碘的输运模型, 为事故条件下碘的行为模拟和去除研究提供相关基础。

关键词: 气溶胶碘; 闪蒸; 浸没射流; 气泡生长

参考文献

- [1] B. Cai, Q. Wang, S. Yin, H. Gu, H. Wang, H. Zhen, L. Zhang, Energy analysis of spray flash evaporation from superheated upward jets, *Appl. Therm. Eng.* 148 (2019) 704–713
- [2] Golliher, A. Licari, T. Jin, Testing of a compact flash evaporator system for exploration, 38th International Conference on Environmental Systems, San Francisco, California, (2008).
- [3] D. Saury, S. Harmand, M. Siroux, Flash evaporation from a water pool: Influence of the liquid height and of the depressurization rate, *International Journal of Thermal Sciences* 44 (2005) 953–965.
- [4] Y. Liao, D. Lucas, E. Krepper, R. Rzehak, Flashing evaporation under different pressure levels, *Nuclear Eng. Des.* 265 (2013) 801–813.
- [5] Rayleigh Lord. On the pressure developed in a liquid during the collapse of a spherical cavity[J]. *Philosophical Magazine*, 1917, 34: 94-98.
- [6] 季璨, 王乃华, 崔峥, 等. 高温高压喷雾闪蒸的蒸发特性[J]. *化工学报*, 2016, 67(05): 1771-1777
- [7] 景香玲. 高温水射流闪蒸过程的数值模拟研究[D]. 华北电力大学(北京), 2021.
- [8] 李柏震. 高压闪蒸室内流场数值模拟[D]. 哈尔滨工程大学, 2009
- [9] 周致富, 吴威涛, 王国祥, 等. R134a 闪蒸喷雾液滴动力学特征实验研究 [J]. *工程热物理学报* 2013, 34(1) : 87-90.
- [10] 蔡本安, 李石磊, 郭民承, 等. 基于液滴分析的高温高压流体喷射闪蒸模型研究[J]. *原子能科学技术*, 2021, 55(09): 1709-1720.

管束冷凝条件下气溶胶扩散泳迁移特性

鄂鑫诺¹, 谷海峰^{1,*}, 陈君岩², 周艳民¹, 孙庆洋¹, 于建群¹

¹ 哈尔滨工程大学, 黑龙江省哈尔滨市南岗区南通大街 145 号, 150001

² 中国核动力研究设计院, 四川省成都市双流县华阳长顺大道 1 段 328 号, 610005

*Email: guhaifeng@hrbeu.cn

摘要正文:

我国自主研发的第三代核电“华龙一号”设计有先进的非能动安全壳热量导出系统(PCCS)^[1], 可以将严重事故期间安全壳内的温度带至外部环境中。在反应堆发生严重事故会有大量的放射性物质以气溶胶的形式伴随着蒸汽释放到安全壳内, 在PCCS运行后, 水蒸气会在换热管束表面发生冷凝, 同时安全壳内的放射性气溶胶会在重力、布朗扩散、热泳、扩散泳等机制的作用下发生迁移^[2], 影响到严重事故期间放射性水平分布情况, 因此对该现象开展深入的实验研究是十分必要的。

本文自主设计搭建了实验装置, 开展了多管管束条件下气溶胶迁移特性实验研究, 以二氧化钛作为实验用气溶胶, 使用自主研发的高温高湿条件下迁移取样系统对实验压力容器内部的气溶胶进行取样工作, 实验主要开展了不同气体组分条件、不同蒸汽冷凝速率条件下以及不同数量换热管条件的气溶胶扩散泳迁移特性实验, 并对所获得实验数据进行了分析。如图1所示为不同蒸汽冷凝速率条件下气溶胶扩散泳衰减速率变化趋势, 从图1可以看出气溶胶扩散泳衰减速率随着蒸汽冷凝速率的增加, 并且从图1中也看出, 根据扩散泳衰减速率计算公式进行分析^{[3][4]}, 在相同蒸汽饱和温度条件下, 蒸汽摩尔份额越高, 扩散泳沉积速率越大; 此外当蒸汽冷凝速率相同时, 气溶胶扩散泳衰减速率随着蒸汽密度的提高而降低。实验过程中还对径向不同位置处的气溶胶浓度进行取样测量, 如图2所示为不同径向位置处气溶胶在扩散泳机制下的气溶胶浓度衰减变化规律, 当蒸汽份额较高时, 靠近PCCS换热管束位置的浓度低于远离换热管位置处的气溶胶浓度。本文还针对单管和六管束开展实验, 通过归一化处理获得气溶胶浓度变化规律, 从图3可以看出, 管束条件下的气溶胶扩散泳冷凝速率实验结果在高蒸汽份额条件下, 均低于模型计算结果, 此外单管冷凝条件下气溶胶去除速率与相比更大, 这是由于管束条件下的有效沉积面积较小导致的, 对数据进行拟合分析, 六管管束扩散泳去除效率约为单管去除效率的70%。

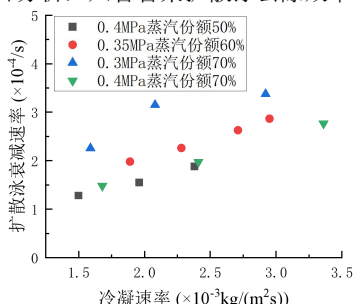


Fig. 1 Decay Rate of Diffusiophoresis

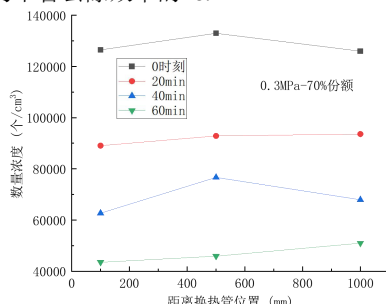


Fig. 2 Distribution Diagram of Aerosol Concentration Along the Radial Direction

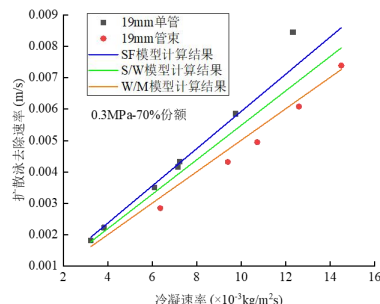


Fig. 3 Comparison of Experimental Values with Model-Calculated Values

关键词: 严重事故; 气溶胶; 扩散泳; 蒸汽冷凝; 不凝性气体

参考文献

- [1] 邢继, 孙中宁, 于勇, 等. “华龙一号”非能动安全壳热量导出系统研究[J]. 哈尔滨工程大学学报, 2023, 44(7):1089-1095.
- [2] 袁显宝, 魏靖宇, 张永红, 等. 百万千瓦级压水堆严重事故下裂变产物释放分析[J]. 核科学与工程, 2021, 41(6):9.
- [3] 孙雪霏, 陈林林, 魏严淞, 等. 非能动安全壳冷却对严重事故下气溶胶沉积影响分析[J]. 原子能科学技术, 2016. DOI:CNKI:SUN:YZJS. 0. 2016-12-018.
- [4] Chen J, Gao P, Gu H, Xinnuo E, Yu J, Chen Y. Experimental study of the natural deposition of submicron aerosols on the surface of a vertical circular tube with non-condensable gases[J]. Nuclear engineering and design, 2024, 417(Feb.):1.1-1.13.

事故序列条件下气溶胶自然沉降实验研究

李韬¹, 谷海峰^{1,*}, 王辉^{1,2}, 孙庆洋¹, 汤添皓¹, 于建群¹, 黄宁远¹

¹ 哈尔滨工程大学 黑龙江省核动力装置性能与设备重点实验室, 哈尔滨 150001

² 中国核电工程有限公司, 北京 100840

*guhaifeng@hrbeu.edu.cn

摘要正文: 发生严重事故时反应堆堆芯熔化, 大量放射性物质随蒸汽释放至安全壳内并以气溶胶的形式存在, 气溶胶会在重力沉降、泳动扩散等机制下在安全壳内自然沉降。随着严重事故序列的进行, 安全壳热工环境不断发生转变, 气溶胶的喷放特性如喷放时间长短、喷放速率等也会有所变化, 这为安全壳内气溶胶的沉降行为带来了很大的不确定性。为探究大尺度安全壳内事故序列条件下的气溶胶的自然沉积行为, 本文采用实验方法对于真实事故条件下的气溶胶的自然沉降行为进行研究, 重点关注气溶胶释放形式、释放时间、释放速率等因素对于气溶胶自然沉降行为的影响, 并初步探究了热工环境变化对气溶胶的沉降特性的影响, 实验结果表明, 事故条件下由于温度、压力的变化趋势一致, 其对于气溶胶沉降的影响减弱。气溶胶的释放形式、释放时间、释放速率均对气溶胶的浓度变化规律产生较大影响。本实验数据可用于华龙一号等堆型进行安全分析。

关键词: 气溶胶; 自然沉降; 事故序列; 大尺度安全壳; 严重事故;

参考文献

- [1] Xiang YU, Haifeng Gu, Weikai YIN, et al. Experimental research on droplets releasing characteristics of the bubble bursting behavior at a free surface with an aerosol[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2022, 173
- [2] 孙雪霆, 陈林林, 史晓磊等. 严重事故下水蒸气凝结对气溶胶扩散泳影响研究[J]. *原子能科学技术*, 2017, 51(01): 73-78.
- [3] Nuclear Regulation Commission. Final safety evaluation report related to certification of the AP1000 standard plant design. NUREG-1793, Sep (2011).

其他活动

Numerical Analysis of Spray Droplet Size's Effect on Removal Efficiency of Sub-micrometer Radioactive Aerosol Particles

Huan Wang¹, Chuangao Wang¹, Yuhan Liu¹, Jinsen Guo¹

1. Institute of Nuclear Safety and Environmental Engineering Technology, China Institute of Atomic Energy, Beijing, China

It has become evident that optimizing the critical spray droplet size throughout the spraying process, in conjunction with tailored spray systems in nuclear facilities, is essential for achieving optimal removal efficiency of sub-micrometer radioactive aerosols. Aerosol removal efficiency is a key metric for estimating the capacity of spray droplets to coagulate with aerosol particles within the volume they sweep as they fall. Numerous studies have shown that smaller-sized droplets can enhance the removal efficiency of sub-micrometer particles through mechanisms such as Brownian diffusion and interception. However, the evaporation dynamics of these smaller droplets, which contribute to thermophoresis and diffusiophoresis, are often overlooked. In this study, we conducted a numerical analysis to investigate the removal efficiency of sub-micrometer aerosols at varying spray droplet size using computational fluid dynamics (CFD) method. The sub-micrometer aerosol was modeled within the Eulerian framework, while the Lagrangian particle tracking method was adopted to characterize the spray droplet dynamics. A comprehensive set of aerosol collection mechanisms, including inertial impaction, interception, Brownian diffusion, thermophoresis and diffusiophoresis, was integrated into our CFD simulation through theoretical models to describe mass and heat transfer interactions between the spray droplets and the aerosol particles. Additionally, an evaporation dynamics model was incorporated to account for phase change of droplets. The results indicate that the evaporation rate increases significantly as droplet size decreases. An optimal evaporation rate can further enhance sub-micrometer aerosol removal efficiency by increasing phoretic forces. Moreover, the vapor flow generated by evaporation disturbs the local flow field, creating microscale vortices that may increase the likelihood of particle coagulation with the droplets.

Keywords: radioactive aerosol, removal efficiency, CFD, evaporate, spray droplet size

Reference:

- [1] Niemi, J. V.; Ondracek, J.; Teinilä, K.; Manninen, H. E.; Saarikoski, S.; Timonen, H.; Dal Maso, M.; Rönkkö, T. Comparison of Size Distribution and Electrical Particle Sensor Measurement Methods for Particle Lung Deposited Surface Area (LDSA^{al}) in Ambient Measurements with Varying Conditions. *Aerosol Research* 2024, 2 (2), 271–289. <https://doi.org/10.5194/ar-2-271-2024>.
- [2] Ardon-Dryer, K.; Huang, Y.-W.; Cziczo, D. J. Laboratory Studies of Collection Efficiency of Sub-Micrometer Aerosol Particles by Cloud Droplets on a Single-Droplet Basis. *ATMOSPHERIC CHEMISTRY AND PHYSICS* 2015, 15 (16), 9159–9171. <https://doi.org/10.5194/acp-15-9159-2015>.
- [3] Park, S. H.; Park, C.; Lee, J.; Lee, B. A General Solution for the Removal of Polydisperse Aerosol Particles and Application to Pool Scrubbing. *PARTICULATE SCIENCE AND TECHNOLOGY* 2018, 36 (5), 552–559. <https://doi.org/10.1080/02726351.2016.1276497>.
- [4] Liang, H.; Erkan, N.; Solans, V.; Suzuki, S. Numerical Simulation and Validation of Aerosol Particle Removal by Water Spray Droplets With OpenFOAM During the Fukushima Daiichi Fuel Debris Retrieval. *FRONTIERS IN ENERGY RESEARCH* 2020, 8. <https://doi.org/10.3389/fenrg.2020.00102>.
- [5] Sharma, A. K.; Liang, H.; Xu, R.; Ozdemir, E.; Miwa, S.; Terabayashi, R.; Suzuki, S.; Pellegrini, M.; Hasegawa, S.; Erkan, N. Radioactive Aerosol Control and Decontamination in the Decommissioning of the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station. *NUCLEAR TECHNOLOGY* 2023, 209 (12), 2030–2043. <https://doi.org/10.1080/00295450.2023.2186675>.

Analysis of the Release Rate of Radioactive Aerosols within Different Cutting Methods during Nuclear Decommissioning

Yuhan Liu¹, Huan Wang¹, Chuangao Wang¹, Jinsen Guo¹

2. Institute of Nuclear Safety and Environmental Engineering Technology, China Institute of Atomic Energy, Beijing, China

Radioactive aerosol, generated during nuclear decommissioning is the major source of internal radiation hazards, has not been well understood because of the limited data from the actual decommissioning. Various studies declare that aerosol size distributions of different cutting methods show the different characteristic. Although changes of particle size can lead to variations of deposition sites in human body, the differences in the radioactivity of the radioactive aerosols also affect the assessment of the internal radiation hazards. In this study, a device for collecting radioactive aerosol is designed to collect the maximization of aerosols generated during the cutting stainless steel pipes separately using circular saw and reciprocating saw, for subsequent analysis. Results indicate that the release rate of aerosols varies depending on the specific nuclide involved. For circular saw, the release rate of aerosol involving Cs-137 is from 1.41% to 3.92%, which is much higher than that for reciprocating saw, that is between 0.21% and 0.37%. The release rate of aerosol involving Co-60 from circular saw cutting process is much lower than that from reciprocating saw, is 0.008%. This study has revealed some characteristics of radioactive aerosols released in decommissioning operations, which can serve as a valuable reference for protecting internal radiation hazards during the decommissioning of nuclear facilities.

Keywords: radioactive aerosols, cutting methods, nuclear decommissioning, release rate

Reference:

- [1] Lee, M.-H.; Yang, W.; Chae, N.; Choi, S. Aerodynamic Diameter Distribution of Aerosols from Plasma Arc Cutting for Steels at Different Cutting Power Levels. *J Radioanal Nucl Chem* **2020**, 323 (1), 613–624. <https://doi.org/10.1007/s10967-019-06967-y>.
- [2] Zhou, F.; Chen, X.; Liu, H.; Feng, X.; Ma, T.; Zhang, Z. Characteristics of Radioactive Aerosols during the Pre-Decommission Phase of the Experimental Shielding Reactor. *Journal of Hazardous Materials* **2024**, 476, 135120. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2024.135120>.
- [3] Vishnyakov, V. I.; Kiro, S. A.; Ennan, A. A. Formation of Primary Particles in Welding Fume. *Journal of Aerosol Science* **2013**, 58, 9–16. <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2012.12.003>.
- [4] Ghosh, K.; Tripathi, S. N.; Joshi, M.; Mayya, Y. S.; Khan, A.; Sapra, B. K. Particle Formation from Vapors Emitted from Glowing Wires: Theory and Experiments. *Aerosol Science and Technology* **2020**, 54 (3), 243–261. <https://doi.org/10.1080/02786826.2019.1688758>.
- [5] Harish, V.; Ansari, M. M.; Tewari, D.; Yadav, A. B.; Sharma, N.; Bawarig, S.; García-Betancourt, M.-L.; Karatutlu, A.; Bechelany, M.; Barhoum, A. Cutting-Edge Advances in Tailoring Size, Shape, and Functionality of Nanoparticles and Nanostructures: A Review. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers* **2023**, 149, 105010. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2023.105010>.

墙报摘要

核设施退役中不同切割方式放射性气溶胶释放特性研究进展

蔡坤廷¹, 王欢¹, 刘禹含¹, 汪传高¹

¹中国原子能科学研究院, 北京 275 信箱, 102413

*Email: 1498691763@qq.com

核设施退役过程主要使用机械切割、激光切割、等离子切割的方式进行设备拆除与解体工作, 过程中伴随着大量放射性气溶胶的释出, 是造成现场工作人员内照射风险的主要来源。为了提升人员内照射剂量评估的准确性, 需要明确切割过程中所产生的放射性气溶胶的粒径与活度分布。本文在总结了大量研究后发现, 因切割工艺、对象的不同, 切割过程所产生的放射性气溶胶的活度、粒径均存在差异。机械切割过程中产生放射性气溶胶的空气动力学粒径范围为 0.03-20 μm , 粒径峰值集中在 6 μm 附近^[1]。激光切割产生放射性气溶胶的空气动力学直径范围为 0.1-15 μm , 粒径峰值集中在 0.3 和 5 μm 附近^[2,3], 若进行水下切割, 气溶胶会减少 80-90%^[4]。相比于机械切割与激光切割, 等离子切割过程中产生的放射性气溶胶粒径更小, 且活度浓度分布与被切割材料包含的元素有着密切的关系, 但活度主要集中在 0.1-1 μm 范围^[5], 其对于人体的危害性更大。现有研究表明等离子切割产生气溶胶的过程与金属蒸汽在温度变化过程中形成源项的过程有关^[6], 但这一机理尚不明确, 如何在等离子切割工程中既能提高切割效率的同时也能最大限度控制小粒径放射性气溶胶的生成, 需要对其切割过程中物质的相态变化、离子成核以及增长机制有更深入的研究。

关键词: 放射性气溶胶、等离子切割、成核机制、粒径分布

参考文献

- [1] J. Bernard, G. Pilot, J.P. Grandjean, Evaluation of Various Cutting Techniques Suitable for the Dismantling of Nuclear Components, European Commission 17919-EN, 1998.
- [2] J.P. Alfillé, D. de Prunele, G. Pilot, J. Schidknecht, J. Raoux, P. Frederick, V.S. Ramaswami, P. Muy, Application des procédés lasers CO2 et YAG à la découpe dans l'air et sous eau de structures métalliques, Proc the Topical Meeting on the Best of D&D, 1996.
- [3] G. Pilot, S. Fauvel, X. Gosse, G. de Dinechin, D. Vernhet, Measurement of secondary emissions during laser cutting of steel equipments, Nucl. Eng. Des. 238 (2008) 2124–2134.
- [4] S. Peillon, S. Fauvel, C. Chagnot, F. Gensdarmes, Aerosol characterization and particle scrubbing efficiency of underwater operations during laser cutting of steel components for dismantling of nuclear facilities, Aerosol Air Qual. Res. 17 (2017) 1363–1373.
- [5] Y. Oki, M. Numajiri, T. Suzuki, Y. Kanda, T. Miura, K. Iijima, K. Kondo, Particle size and fuming rate of radioactive aerosols generated during the heat cutting of activated metals, Appl. Radiat. Isot. 45 (1994) 553–562.
- [6] V.I. Vishnyakov, S.A. Kiro, A.A. Ennan. Formation of primary particles in welding fume. Journal of Aerosol Science, 10.1016/j.jaerosci.2012.12.003

第十分论坛

AI 与大气颗粒物交叉前沿论坛

邀请报告

典型非完全燃烧源有机组分的非靶标识别与毒性效应王悦倩、霍耀强、吴葳、郭子华、李庆^{1*}

1. 复旦大学 环境科学与工程系, 上海 200438

由于测量与识别方法的局限性，燃料非完全燃烧过程排放的气相和颗粒相有机物中大分部组分未得以有效鉴定。开展大气污染排放源的现场试验、全面解析污染物成分、建立颗粒物及其前体物的指纹图谱，将为污染排放的环境效应及健康风险提供精准评估，并进一步为有关政策措施的制订提供一定科学依据。本报告将基于全二维气相色谱构建的有机物指纹图谱，利用有效识别的分子结构，应用于气/颗粒相污染物的毒性效应预测。

基于贝叶斯神经场模型与多源数据融合的车载移动式碳污协同观测系统质控方法研究

骈宇庄^{1,2,3}, 徐锐^{1,2,3}, 李启航^{1,2,3}, 曹如晖^{1,2,3}, 刘永红^{1,2,3,*}

¹ 中山大学智能工程学院, 广州 510275

² 广东省智能交通系统重点实验室, 广州 510006

³ 广东省交通环境智能监测与治理工程技术研究中心, 广州 510006

*Email: liuyh3@mail.sysu.edu.cn

摘要正文: 城市碳排放与空气污染协同控制是实现“双碳”目标和改善环境质量的重要挑战。由于CO₂与污染物排放具有物理共位性^[1]和化学转化的动态耦合效应^[2], 单一污染观测难以全面揭示碳污协同变化特征^[3]。因此, 构建碳污协同网络化观测体系对于解析污染物与CO₂的相互作用机理、感知演变趋势至关重要。车载移动观测系统凭借近地面高时空分辨率, 可实时捕捉污染物的精细时空分布及动态波动^[4], 精准刻画区域即时排放特征^[5], 已成为实现碳污协同高效观测的重要手段之一。然而, 车载移动观测系统在理论研究上仍面临由于仪器运行状态自动诊断难、自动质控和误差补偿能力弱等带来的观测不稳定的(测量漂移^[6])难题挑战, 因此自动在线实时质控方法研究^[7]尤为关键。不同于实验室环境下的标准校准, 车载移动观测系统需在复杂环境中实现自适应、动态的质控机制^[8], 以保障测量数据的可靠性和一致性。

以往研究为部署后的校准质控提供了解决思路。固定监测站因配备高成本专业设备, 可提供精准的空气质量管理数据。传统校准依赖移动观测车辆与固定监测站缓冲区会合时的观测数据, 利用统计模型或机器学习算法^[9]进行同频拟合。但受限于成本的固定监测站点在城市中分布稀疏, 使得车辆驶入缓冲区机会有限^[10], 限制了校准的时空覆盖范围。为提高非缓冲区移动观测设备校准精度, 后续研究提出多跳校准^[11]和转移校准^[12]方法, 使移动车辆利用与其他移动车辆会合观测数据进行校准。但这些方法易受到误差累积和区域间污染物分布差异影响, 校准结果可靠性降低^[8]。

为提升车载移动式碳污协同观测系统在固定站缓冲区外观测数据的可靠性和准确性, 本文提出基于贝叶斯神经场模型与多源数据融合的实时校准框架(BNF-ANN)(如图1所示)。该方法利用固定站的稀疏空气质量数据挖掘时空关系, 重构污染物连续时空概率分布, 推断移动观测设备所在区域(虚拟站点)的空气质量 and 不确定性, 并结合神经网络实现动态校准。该校准框架包含虚拟站浓度推断和移动传感器校准两个阶段(如图4所示)。在浓度推断阶段, 本文利用贝叶斯神经场模型^[13]将固定站坐标映射为包含傅里叶特征和时间季节性特征的时空协变量。随后, 多层感知机结合自适应激活函数和数据分布噪声, 学习复杂非线性时空关系, 从而推断任意虚拟站点污染浓度, 并通过贝叶斯修正可学习参数, 以概率分布的置信度量化数据不确定性。在传感器校准阶段, 将移动观测设备任意采集区域的原始读数与当地气象特征、虚拟站点推断参考浓度和置信度相结合, 以原始读数及对应温湿度数据组作为输入, 通过人工神经网络构建移动传感器与虚拟参考站参考浓度的映射关系, 并利用置信度优化损失函数, 使模型更关注高置信度数据, 从而提升移动传感器的浓度校准精度。

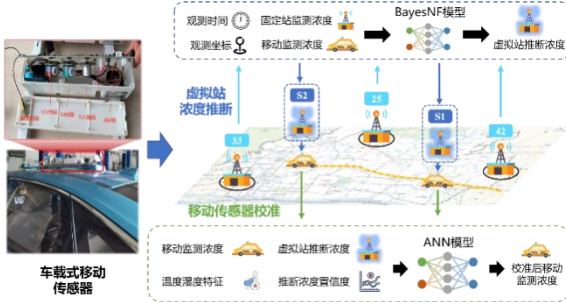


Fig. 1 BNF-ANN calibration schematic

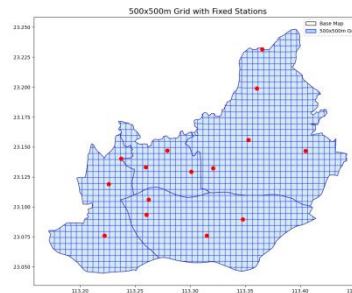


Fig. 2 Study area and fixed stations

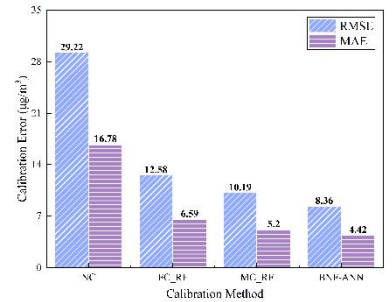


Fig. 3 Performance evaluation

本文以广州市核心区(越秀、天河、海珠、荔湾)为研究区域(如图2所示), 选取2023年5月1日至10日数据进行实验, 采用500m*500m空间分辨率和1小时时间分辨率。模型性能评估指标包括RMSE和MAE。移动车载式碳污协同观测数据来源于广州市320辆配备微型空气质量传感器的出租车, 以15s采样分辨率观测道路沿线PM_{2.5}、PM₁₀、NO、NO₂、TVOC、CO₂和温湿度。研究区域内共有15个固定监测站点, 每个站点均配备高精度观测设备。本文选取其中11个站点用于车载移动式观测系统浓度校准, 其余4个站点则用于测试校准方法。实验以PM_{2.5}作为研究对象, 采用无校准(NC)、固定站会合校准(FC_RF)和多跳校准(MC_RF)作为基准模型, 对比评估所提方法的校准性能(实验结果见图3)。结果表明, FC_RF可提高移动车载式观测数据的准确性, 但受限于固定站交会机会, 提升幅度有限。MC_RF通过增加交会事件扩充参考样本, 相较FC_RF具有更好的校准效果。BNF-ANN方法不完全依赖交会事件, 可在任意移动采集点推断虚拟参考样本, 提高数据利用效率, 实现最佳校准性能。

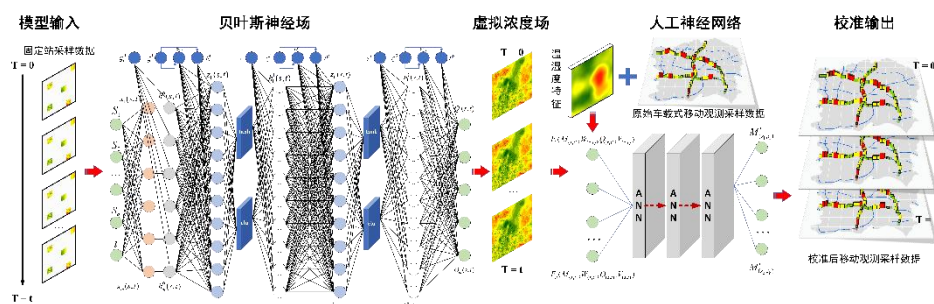


Fig. 4 BNF-ANN model calibration structure

综上，本文针对城市碳污协同观测中的车载移动式观测系统数据质控问题，提出一种基于贝叶斯神经场模型与多源数据融合的实时校准框架。该方法利用贝叶斯神经场模型重构固定站观测数据的时空浓度场，为移动观测时空点提供推断的虚拟站参考浓度，并结合人工神经网络实现移动-虚拟浓度实时校准。此外，通过概率分布量化数据不确定性并优化损失函数，提高校准精度。基于广州市核心区的移动观测数据进行实验验证，结果表明该方法较基准模型的校准精度提升17.96%。未来，将进一步聚焦车载移动观测系统时空校准方法，探索移动-固定共置数据的时空规律，以拓展多场景移动观测校准的适用性。

关键词：车载移动式观测；传感器浓度校准；贝叶斯神经场；虚拟站推断；碳污协同

参考文献

- [1] H. Park, S. Jeong, H. Park, et al. An assessment of emission characteristics of Northern Hemisphere cities using spaceborne observations of CO₂, CO, and NO₂[J/OL]. Remote Sensing of Environment, 2021, 254: 112246.
- [2] D. Yang, J. Hakkarainen, Y. Liu, et al. Detection of anthropogenic CO₂ emission signatures with TanSat CO₂ and with copernicus sentinel-5 precursor (S5P) NO₂ measurements: first results[J/OL]. Advances in Atmospheric Sciences, 2023, 40(1): 1-5.
- [3] T. Fujinawa, A. Kuze, H. Suto, et al. First concurrent observations of NO₂ and CO₂ from power plant plumes by airborne remote sensing[J/OL]. Geophysical Research Letters, 2021, 48(14): e2021GL092685.
- [4] J. S. Apte, C. Manchanda. High-resolution urban air pollution mapping[J/OL]. Science, 2024, 385(6707): 380-385.
- [5] J. G. Su, S. Aslebagh, V. Vuong, et al. Examining air pollution exposure dynamics in disadvantaged communities through high-resolution mapping[J/OL]. Science Advances, 2024, 10(32): eadm9986.
- [6] X. Liu, F. Concas, N. H. Motlagh, et al. Estimating black carbon levels with proxy variables and low-cost sensors[J/OL]. IEEE Internet of Things Journal, 2024, 11(10): 17577-17588.
- [7] D. Hasenfratz, O. Saukh, L. Thiele. On-the-fly calibration of low-cost gas sensors[C/OL]//Picco G P, Heinzelman W. Wireless Sensor Networks. Berlin, Heidelberg: Springer, 2012: 228-244.
- [8] J. Luo, Y. Hu, C. Yu, et al. Field reconstruction-based non-rendezvous calibration for low cost mobile sensors[C/OL]//Adjunct Proceedings of the 2023 ACM International Joint Conference on Pervasive and Ubiquitous Computing & the 2023 ACM International Symposium on Wearable Computing. New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 2023: 688-693.
- [9] X. Qin, L. Hou, J. Gao, et al. The evaluation and optimization of calibration methods for low-cost particulate matter sensors: inter-comparison between fixed and mobile methods[J/OL]. Science of The Total Environment, 2020, 715: 136791.
- [10] M. V. Narayana, D. Jaliha, S. M. S. Nagendra. Establishing a sustainable low-cost air quality monitoring setup: a survey of the state-of-the-art[J/OL]. Sensors, 2022, 22(1): 394.
- [11] J. Xiang, E. Austin, T. Gould, et al. Using vehicles' rendezvous for in situ calibration of instruments in fleet vehicle-based air pollution mobile monitoring[J/OL]. Environmental Science & Technology, 2020, 54(7): 4286-4294.
- [12] Y. Cheng, X. He, Z. Zhou, et al. ICT: In-field calibration transfer for air quality sensor deployments[J/OL]. Proc. ACM Interact. Mob. Wearable Ubiquitous Technol., 2019, 3(1): 6:1-6:19.
- [13] F. Saad, J. Burnim, C. Carroll, et al. Scalable spatiotemporal prediction with Bayesian neural fields[J/OL]. Nature Communications, 2024, 15(1):7942.

Quality Control of a Vehicle-Based Mobile Carbon-Pollution Monitoring System Using Bayesian Neural Field and Multi-source Data Fusion

Author (Yuzhuang Pian)^{1,2,3}, Second Author(Rui Xu)^{1,2,3}, Third Author(Qihang Li)^{1,2,3}, Fourth Author(Ruhui Cao)^{1,2,3}, Corresponding Author(Yonghong Liu)^{1,2,3,*}

¹ School of Intelligent Systems Engineering, Sun Yat-Sen University, Guangzhou 510275, China

² Guangdong Provincial Key Laboratory of Intelligent Transportation System, Guangzhou 510006, China

³ Guangdong Provincial Engineering Research Center of Traffic Environmental Monitoring and Control, Guangzhou 510006, China

* Email: _liuyh3@mail.sysu.edu.cn

The synergistic control of urban carbon emissions and air pollution is an important challenge to achieve the “dual-carbon” goal and improve environmental quality, however, it is difficult for single-pollution monitoring to comprehensively reveal the variations of the synergistic carbon and pollution changes^[1]. The vehicle-based mobile monitoring system has become an important means to enable the efficient monitoring of carbon-pollution synergy by virtue of its high spatial and temporal resolution^[2]. However, it faces the problem of measurement drift^[3] in practical applications and thus requires real-time calibration^[4]. A real-time calibration framework based on Bayesian neural field^[5] modeling combined with multi-source data fusion is proposed. The method utilizes the Bayesian neural field model to reconstruct the domain spatial-temporal concentration field, provides an inferred virtual station reference concentration for each mobile monitoring spatial-temporal point, and achieves mobile-virtual concentration calibration using an artificial neural network. In addition, the calibration accuracy is improved by quantifying the uncertainty of the data and optimizing the loss function through a probability distribution. The proposed method was validated using mobile monitoring data from Guangzhou City, showing a 17.96% improvement in calibration accuracy over benchmark models.

Keywords: Vehicle-based mobile monitoring; Sensor Concentration Calibration; Bayesian neural fields; Virtual Station Inference; Carbon-pollution Synergy.

References

- [10] T. Fujinawa, A. Kuze, H. Suto, et al. First concurrent observations of NO₂ and CO₂ from power plant plumes by airborne remote sensing[J/OL]. *Geophysical Research Letters*, 2021, 48(14): e2021GL092685.
- [11] J. S. Apte, C. Manchanda. High-resolution urban air pollution mapping[J/OL]. *Science*, 2024, 385(6707): 380-385.
- [12] X. Liu, F. Concas, N. H. Motlagh, et al. Estimating black carbon levels with proxy variables and low-cost sensors[J/OL]. *IEEE Internet of Things Journal*, 2024, 11(10): 17577-17588.
- [13] D. Hasenfratz, O. Saukh, L. Thiele. On-the-fly calibration of low-cost gas sensors[C/OL]//Picco G P, Heinzelman W. *Wireless Sensor Networks*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2012: 228-244.
- [14] F. Saad, J. Burnim, C. Carroll, et al. Scalable spatiotemporal prediction with Bayesian neural fields[J/OL]. *Nature Communications*, 2024, 15(1):7942.

基于大连相干光源的大气团簇及气溶胶成核机制研究

江 凌*

中国科学院大连化学物理研究所, 化学反应动力学全国重点实验室

辽宁省大连市沙河口区中山路 457 号, 邮编 116023

*Email: ljiang@dicp.ac.cn

摘要正文: 从分子形成大气团簇是气溶胶成核的关键步骤, 精确测量新粒子生成过程中成核前驱体的化学组成及其动态变化对揭示雾霾微观结构演化机制具有重要意义。目前, 离子物种由于带有电荷, 易于探测和质量选择, 研究最为广泛。中性物种由于缺乏电荷, 难于探测和质量选择, 实验研究非常困难。鉴于上述情况, 我们发展了基于大连相干光源的中性团簇红外光谱和气溶胶质谱两种实验方法, 实现了新粒子生成过程中成核前驱体化学组成及其动态变化的直接观测。在本报告中, 首先介绍这两种实验方法, 然后举例说明它们在大气团簇及气溶胶成核机制研究中的应用[1-7]。

关键词: 大气团簇; 气溶胶; 结构演化机制; 大连相干光源

参考文献

- [1] G. Li, C. Wang, Q. Li, L. Jiang*, et al., Infrared + vacuum ultraviolet two-color ionization spectroscopy of neutral metal complexes based on a tunable vacuum ultraviolet free-electron laser. *Rev. Sci. Instrum.*, **2020**, 91, 034103.
- [2] B. Zhang, L. Jiang*, J. Li*, X. M. Yang*, et al., Infrared spectroscopy of neutral water clusters at finite temperature: Evidence for a noncyclic pentamer. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, **2020**, 117, 15423.
- [3] Y. Chai, L. Jiang, S. H. Yang*, L. D. Li*, et al., Control of zeolite pore interior for chemoselective alkyne/olefin separations. *Science*, **2020**, 368, 1002.
- [4] X. Zang, L. Jiang*, et al., Aerosol mass spectrometry of neutral species based on a tunable vacuum ultraviolet free electron laser. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2022**, 24, 16484.
- [5] Z. Zhang, L. Jiang*, et al., Effects of NO and SO₂ on the secondary organic aerosol formation from isoprene photooxidation. *Atmos. Environ.*, **2024**, 318, 120248.
- [6] Y. Zhao, G. Li*, L. Jiang*, et al., Effects of NO_x and NH₃ on the secondary organic aerosol formation from α -pinene photooxidation. *Atmos. Environ.*, **2024**, 337, 120778.
- [7] X. Zang, L. Jiang*, et al., Effects of NO₂ and SO₂ on the secondary organic aerosol formation from beta-pinene photooxidation. *J. Environ. Sci.*, **2024**, 136, 151.

走向大气气溶胶成核模拟的通用模型

姜帅^{1,*}, 廉永健¹, 白旭荣¹, 袁若颖¹

¹南开大学环境科学与工程学院, 天津市城市交通污染防治研究重点实验室, 天津 300071

*Email: shuaijiang@nankai.edu.cn

摘要正文:

在全球尺度上, 大气新粒子生成对云凝结核数浓度的贡献近一半, 而云凝结核数浓度是表征气候变化的重要参量, 因此新粒子生成对全球气候变化有重要影响。在中国复合污染的背景下, 大气新粒子生成能够促进灰霾形成, 因此新粒子生成对空气质量有重要意义。然而, 复合污染条件下的多种前体物并存的多组成核机制的阐明变得非常困难。

针对有机酸参与的多组成核, 我们通过高精度理论计算探究了大气中丰度较高的甲酸 (FA) 分子在对流层大气条件下对 MSA - 乙醇胺 (MEA) 基团簇形成及气溶胶成核的作用, 这对阐明 MSA、MEA 和 FA 来源重叠的极地、海洋、城市及工业区等区域的二次气溶胶形成具有重要意义。本研究结合团簇热力学与动力学方法, 重点分析了大气温度和气态前体分子浓度对 MSA-MEA-FA 体系新粒子形成的热力学与动力学影响, 并剖析了 FA 在其中的作用机制。当前大气中涉及 FA 的新粒子形成机制尚不明确, 其大气来源与归宿仍缺乏认知。本研究可为 FA 的大气环境行为提供依据, 并补充 MSA-MEA-FA 三元成核机制对新粒子形成的贡献, 尤其对存在大量一次排放源或强二次生成的高浓度 FA 区域具有重要意义。

以上的研究基于量子化学与团簇动力学的研究方法, 然而此方法对于更多组分, 更大尺寸的团簇的处理几乎不可行, 而构建机器学习分子力场有可能成为一种解决思路。之后, 我们发展了人工智能驱动分子动力学模拟, 为有效降低团簇动力学模拟成核速率的不确定性提供了模拟方法¹。然而, 面对复杂多组分, 我们期望一种通用的模型描述, 针对现有ANI-2x的测试表明, 发展针对成核体系的通用模型是必要的²。最近, 我们整合大量成核分子团簇数据集, 结合深度神经网络的训练, 我们初步实现了复杂多组分体系的通用模拟, 为走向气溶胶成核模拟的通用模型奠定了基础。

关键词: 气溶胶成核; 分子团簇; 机器学习; 量子化学; 分子动力学

参考文献

- [1] Shuai Jiang*, Yi-Rong Liu, Teng Huang, Ya-Juan Feng, Chun-Yu Wang, Zhong-Quan Wang, Bin-Jing Ge, Quan-Sheng Liu, Wei-Ran Guang, Wei Huang, Towards fully ab initio simulation of atmospheric aerosol nucleation, *Nature Communications*, 13, 6067 (2022)
- [2] Shuai Jiang*, Yi-Rong Liu, Chun-Yu Wang, Teng Huang, Benchmarking general neural network potential ANI-2x on aerosol nucleation molecular clusters, *International Journal of Quantum Chemistry*, 123, e27087 (2023)

大气多组分成核机制

谢宏彬^{1,*}

¹大连理工大学环境学院, 大连, 116024

*Email: hbxie@dlut.edu.cn

摘要正文:

大气二次颗粒物影响人体健康与空气质量。成核是创造二次颗粒物的重要过程,但目前揭示的酸-碱二组分成核速率均低于外场观测值,表明成核机制缺失。由于成核过程具有前体物多、多步骤变粒径的特点,导致成核机制研究面临前体物万里挑一难,微观成核规律刻画难的问题。本研究采用量子化学计算结合机器学习,发展数据驱动的前体物识别方法,通过解析不同成核阶段团簇的分子间作用力,探索团簇形成规律,最终将识别的前体物与发现的规律用于揭示城市和海洋两个典型区域的多组分成核新机制,解决成核机制研究难导致成核机制缺失的问题。

首先提出将二聚体形成自由能作为表征成核潜力的参数,构建了前体物二聚体形成自由能数据库。基于数据库,采用机器学习方法,发展了二聚体形成自由能预测模型。将模型应用于潜在成核前体物的高通量筛查,识别出乙醇胺、三甲胺以及碘含氧酸等新型高潜力成核前体物。基于识别出的新型前体物,利用量子化学计算和大气团簇动力学模型相结合的方法,模拟了乙醇胺、三甲胺、亚碘酸等前体物与核心成核物种硫酸的成核过程。结果发现氢键、卤键及空间位阻弱相互作用力等在成核不同阶段影响团簇形成的稳定性,表明不同特性前体物在成核不同阶段发挥作用。将以上前体物与规律应用于城市和海洋大气的成核机制研究,首次发现了城市大气硫酸-二甲胺-三甲胺三组分协同成核机制和海洋大气硫酸-碘酸-亚碘酸三组分成核机制,并分别得到北京地区外场观测和CLOUD烟雾箱实验证实。

以上成果推动了大气成核理论的发展,为我国持续改善空气质量提供理论支撑。

关键词: 大气颗粒物; 成核机制; 弱相互作用力; 量子化学计算

参考文献

- [1] X.-C. He, M. Simon, S. Iyer, H.-B. Xie, B. Rörup, J. Shen, H. Finkenzeller, D. Stolzenburg, R. Zhang, A. Baccarini, Y. J. Tham, M. Wang, S. Amanatidis, A. A. Piedehierro, A. Amorim, R. Baalbaki, Z. Brasseur, L. Caudillo, B. Chu, L. Dada, J. Duplissy, I. El Haddad, R. C. Flagan, M. Granzin, A. Hansel, M. Heinritzi, V. Hofbauer, T. Jokinen, D. Kemppainen, W. Kong, J. Krechmer, A. Kürten, H. Lamkaddam, B. Lopez, F. Ma, N. G. A. Mahfouz, V. Makhmutov, H. E. Manninen, G. Marie, R. Marten, D. Massabò, R. L. Mauldin, B. Mentler, A. Onnela, T. Petäjä, J. Pfeifer, M. Philippov, A. Ranjithkumar, M. P. Rissanen, S. Schobesberger, W. Scholz, B. Schulze, M. Surdu, R. C. Thakur, A. Tomé, A. C. Wagner, D. Wang, Y. Wang, S. K. Weber, A. Welti, P. M. Winkler, M. Zauner-Wieczorek, U. Baltensperger, J. Curtius, T. Kurtén, D. R. Worsnop, R. Volkamer, K. Lehtipalo, J. Kirkby, N. M. Donahue, M. Sipilä and M. Kulmala, Iodine oxoacids enhance nucleation of sulfuric acid particles in the atmosphere. *Science* 2023, 382: 1308-1314.
- [2] H.-B. Xie, J. Elm, R. Halonen, N. Myllys, T. Kurten, M. Kulmala and H. Vehkamäki, Atmospheric Fate of Monoethanolamine: Enhancing New Particle Formation of Sulfuric Acid as an Important Removal Process. *Environ. Sci. Technol.* 2017, 51: 8422-8431.
- [3] F. Ma, H.-B. Xie, R. Zhang, L. Su, Q. Jiang, W. Tang, J. Chen, M. Engsvang, J. Elm and X.-C. He, Enhancement of Atmospheric Nucleation Precursors on Iodic Acid-Induced Nucleation: Predictive Model and Mechanism. *Environ. Sci. Technol.* 2023, 57: 6944-6954.
- [4] R. Cai, R. Yin, X. Li, H.-B. Xie, D. Yang, V.-M. Kerminen, J. N. Smith, Y. Ma, J. Hao, J. Chen, M. Kulmala, J. Zheng, J. Jiang and J. Elm, Significant Contributions of Trimethylamine to Sulfuric Acid Nucleation in Polluted Environments. *npj. Clim. Atmos. Sci.* 2023, 6: 75.
- [5] R. Zhang, F. Ma, Y. Zhang, J. Chen, J. Elm, X.-C. He and H.-B. Xie, HIO₃-HIO₂-Driven Three-Component Nucleation: Screening Model and Cluster Formation Mechanism, *Environ. Sci. Technol.* 2024, 58: 649-659.

大气气溶胶多尺度观测智能解析系统研发与应用

张运江^{1*}, 汪俊峰¹, 盖鑫磊¹

¹ 南京信息工程大学, 南京市宁六路219号, 210044

*Email: yjzhang@nuist.edu.cn

摘要正文: 近年来, 大气气溶胶的复杂性和多源性对精准监测与高效成因解析提出了巨大挑战。传统的观测和解析方法在空间、时间和组分解析能力上存在一定局限, 而多尺度观测技术的融合与人工智能方法的引入, 为深度挖掘气溶胶的形成机制及环境影响提供了新的机遇。针对这一需求, 本报告将介绍一种融合大气气溶胶多尺度观测技术与人工智能建模方法的智能解析系统。该系统基于高分辨气溶胶质谱观测、卫星遥感反演及地基区域尺度观测等数据, 结合机器学习与统计建模, 实现对气溶胶的年际变化归因分析、来源解析及化学演化机理研究。报告将详细介绍该解析系统的核心功能, 并结合多个典型应用案例, 包括自然沙尘暴气溶胶对臭氧化学的影响、基于在线气溶胶质谱观测的数据驱动来源解析与归因分析等, 展示该系统在探索气溶胶化学机制与自然-人为源相互作用方面的应用价值。

关键词: 多尺度观测; 人工智能; 气溶胶化学; 来源解析; 自然-人为源相互作用

分子水平识别大气棕色碳的吸光性质

胡敏^{1,*}, 徐楠¹, 王玉珏¹, 李晓¹, 曾凌寒¹, 陈士意¹, 郭松¹

¹ 北京大学环境科学与工程学院, 北京, 100871

*Email: minhu@pku.edu.cn

摘要正文：大气颗粒物中吸光性的有机物被命名为“棕色碳”（BrC）。棕色碳颗粒物与黑碳颗粒物（BC）被统称为吸光性碳质颗粒物（Light absorbing carbonaceous particles）。BrC 在大气中广泛存在，是具有极其复杂化学组成的吸光有机混合物，在全球气候和空气质量中发挥着至关重要的作用。不同来源及各种大气环境中的 BrC 的吸光性质变化较大，为准确揭示 BrC 的环境和气候效应带来很大的挑战。从分子组成的角度加深对 BrC 来源和性质的理解有利于提升模型的准确性。

本研究开发了一种约束型非负矩阵分解（NMF）模型，结合超高效液相色谱-二极管阵列检测器-超高分辨率质谱

（UHPLC-DAD-UHRMS）和机器学习，以非目标方式对可溶性有机气溶胶中各种物质的紫外-可见光谱进行了解

析，并用标准物质和测试样品对解析出的光谱进行了验证。在 MS1 级别成功识别出了大约 40,000 种吸光物质。研究表明，环境大气中的 BrC 是由包括弱吸光性物种在内的大量有机物组成的。先前基于少量生色团对 BrC 吸光特性的研究可能存在偏差。由此，通过解析每种物质的紫外-可见光谱，建立起吸光与化学成分之间的联系。

本研究选择我国典型大气颗粒物来源（生物质燃烧、燃煤、非道路柴油机、汽油机、餐饮源和典型液相生成源）和不同大气条件（不同季节、昼夜和不同污染程度）中甲醇提取的有机分子的紫外—可见光谱进行了解析，获得 BrC 的分子特性（包括分子质量、不饱和度、氧化程度、极性）及其吸光性质（吸光效率和波长依赖性）。研究表明，BrC 分子的光吸收能力随极性和氧碳比的降低而增强，而随分子质量和不饱和度的增加而升高。因此，基于不饱和度（DBE）和 O/C 建立了分子吸光效率的预测模型。同时，注意到随着分子吸光效率的增强，波长依赖性减

小，并利用公式推导阐述了这种关系。这种分子层面的分析为深入理解 BrC 吸光机制提供了重要视角，有助于在大气模型中更准确地表征 BrC。

关键词：棕色碳；分子特征；吸光性；来源；超高分辨率质谱

参考文献

[1] Xu N, Hu M*, Li X, Song K, Qiu Y T, Sun H X, Wang Y J, Zeng L H, Li M R, Wang H, Hu S Y, Zong T M, Bai Y,

Zhang Z, Li S D, Shuai S J, Chen Y F, Guo S. Resolving Ultraviolet–Visible Spectra for Complex Dissolved Mixtures of

Multitudinous Organic Matters in Aerosols, *Anal. Chem.*, 2024, 51

e2024GL108834. <https://doi.org/10.1029/2024GL108834>.

- [2] Xu N, Hu M*, Li X, Zeng L H, Wang Y J, Qiu Y T, Song K, Li S D, Shuai S J, Chen Y F, Hu J L, Guo S. Unraveling the Light-Absorbing Properties of Brown Carbon at a Molecular Level, *Geophys. Res. Lett.*, 2024, 51, e2024GL108834.

<https://doi.org/10.1029/2024GL108834>.

口头报告

空气质量改善下新粒子生成特征长期变化及其机制

尚冬杰*, 胡敏*, 汤丽姿, 冯泽玉, 陈仕意, 吴志军, 郭松

foxshang@pku.edu.cn; minhu@pku.edu.cn

北京大学环境科学与工程学院, 区域环境安全全国重点实验室, 100871, 北京

新粒子生成过程是指大气中气态污染物通过气粒转化过程生成纳米级颗粒物的过程, 是二次颗粒物的重要来源, 直接影响到气候变化和空气质量。随着空气质量持续改善, 一次颗粒物排放量下降, 新粒子生成诱发的二次颗粒物生成过程重要性可能逐渐增加。然而, 以往研究缺乏在我国城市大气中的长期观测, 限制了对空气质量改善过程中, 前体物浓度和凝结汇水平变化, 及其带来的新粒子生成特征长期演变的认识。

本研究在北京大学城市大气定位观测站, 开展了长达 9 年的观测实验, 涵盖大气污染防治行动计划开展全过程, 获取了新粒子生成发生频率、生成速率、增长速率长期变化, 并分析了二氧化硫、氮氧化物、气态硫酸等物种对新粒子生成特征的影响机制。基于气态硫酸-二甲胺成核强度因子定量构建了新粒子生成临界条件, 进而揭示出北京大气颗粒物表面积浓度与 SO_2 长年保持在 1:2 的相对削减比使得新粒子生成频率稳定于 40% 左右。使用受体模型法解析出新粒子生成、机动车排放、燃煤与生物质燃烧等过程对颗粒物数浓度的贡献, 发现随着大气中一次颗粒物的逐渐减少, 发生频率稳定的新粒子生成事件对颗粒物数浓度贡献从 19% 增长至 26%, 超越汽油车成为对颗粒物数浓度最大的贡献源。通过 2020 年新冠疫情期间与往年同期的数据比对, 发现机动车一次颗粒物显著降低, 而新粒子生成速率则明显上升, 推测出新粒子生成贡献颗粒物“种子”比例在封控措施影响下增加, 新粒子致霾增强。研究同时观测了新粒子增长的主要促进物种——氧化态有机物的组分变化, 发现随着人为源挥发性有机物排放的减少, 氧化态有机物总浓度降低, 但是氮氧化物的减排使得其中低挥发性组分比例上升, 对新粒子增长作用加强。

研究结果可以帮助厘清城市大气新粒子生成机制, 理解空气质量管控带来的复合环境效应, 并建立精准管控政策体系。

Real world particle size distribution from vehicle fleet and implication on emission control

Fuyang Zhang¹, Jianfei Peng^{1,*}, Ning Yang², Wei Hu³, Hongjun Mao¹

¹Tianjin Key Laboratory of Urban Transport Emission Research & State Environmental Protection Key Laboratory of Urban Ambient Air Particulate Matter Pollution Prevention and Control, College of Environmental Science and Engineering, Nankai University, Tianjin 300071, China

²Tianjin Eco-Environmental Monitoring Center, Tianjin 300191, China.

³Institute of Surface-Earth System Science, Tianjin University, Tianjin 300072, China

*Email: 1120230395@mail.nankai.edu.cn

Particle size distribution (PSD) of vehicular emissions is crucial for assessing their impacts on air quality and human health. However, real-world PSD data from vehicle fleet is scarce. Here, we conducted a two-week tunnel measurement of PSD from fleet emission. The estimated fleet-average emission factor for particle number (PN) was 2.6×10^{14} kg-fuel⁻¹. The PSD of vehicular emission peaked in nucleation mode, indicating a significant role of volatile particles likely formed outside exhaust pipes. Diurnal variations in PN correlated with traffic flow; however, high-emitting diesel vehicles, particularly those from other cities, caused notable spikes in PN and black carbon emissions during off-peak hours. Positive matrix factorization analysis confirms this critical role of high-emitting vehicles and also reveals the dominance of non-exhaust emissions on PM_{2.5} and PM₁₀. This study highlights the importance of stricter regulations on high-emitting vehicles and measures to mitigate nucleation mode and non-exhaust particles.

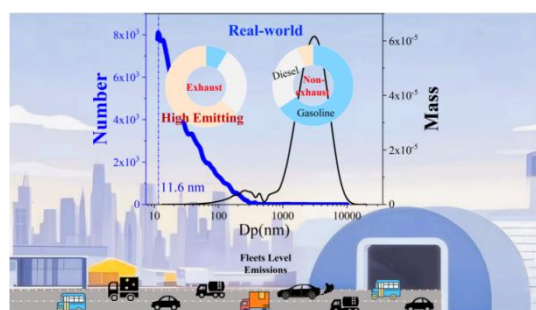


Fig.1 Graphic abstract.

Keywords: Particle size distribution; Particle number; Tunnel measurement; Nucleation mode

References:

[1] Fuyang Zhang, Jianfei Peng*, Hongjun Mao, et al. Real world particle size distribution from vehicle fleet and implication on emission control[J]. npj Clean Air, 2025, 1(1): 4.

2013-2022年北京市黑碳浓度、来源及辐射效应的长期趋势研究

谢宇¹, 曾凌寒¹, 胡淑雅¹, 王甜甜¹, 杜卓菲¹, 谭天怡¹, 徐楠¹,

陈仕意¹, 毛鉴炯¹, 胡敏^{1,2,*}

¹ 区域环境安全全国重点实验室, 教育部区域污染控制国际联合实验室, 北京大学环境科学与工程学院, 北京, 100871

² 江苏省大气环境监测与污染控制重点实验室大气环境与设备技术合作创新中心. 南京信息科技大学, 南京 210044

*Email: minhu@pku.edu.cn

摘要正文: 黑碳主要来源于生物质燃烧和化石燃料的不完全燃烧, 对空气污染和气候变化具有重要影响。对重点区域黑碳来源及辐射效应的长期分析, 有助于制定和优化更具针对性的空气质量管理措施。然而, 目前该领域的长期研究仍较为缺乏。本研究分析了2013至2022年北京地区黑碳的浓度及来源变化, 结果表明, 空气质量管理措施有效降低了黑碳浓度, 由2013年的 $2.23 \pm 1.94 \mu\text{g m}^{-3}$ 降至2022年的 $0.84 \pm 0.71 \mu\text{g m}^{-3}$ 。其中, 采暖季浓度降幅最显著, 主要得益于由燃煤向更清洁的天然气能源的转变。生物质燃烧和化石燃料源黑碳浓度均明显下降, 年平均下降速率分别为 $0.06 \pm 0.01 \mu\text{g m}^{-3} \text{ yr}^{-1}$ 和 $0.13 \pm 0.03 \mu\text{g m}^{-3} \text{ yr}^{-1}$ 。受新冠疫情期间交通管控措施影响, 2020和2021年的黑碳浓度达到最低水平, 该时期提供了研究交通受限条件下黑碳趋势的理想情景; 2022年措施放松后, 黑碳浓度有所反弹。为准确区分疫情因素与空气质量管理措施的效果, 研究计算了2013年和2019年黑碳的直接辐射效应, 发现其减少了约80%。本研究为理解北京市黑碳长期变化趋势及对既往减排措施的响应提供了重要依据, 有助于制定更具针对性的黑碳减排策略, 以持续改善空气质量和气候效应。未来研究可进一步引入基于机器学习的黑碳来源自动识别模型, 结合深度学习算法优化长期趋势预测和辐射效应模拟, 从而实现黑碳污染的快速溯源和精准管控。

关键词: 黑碳; 趋势分析; 源解析; 辐射强迫; 空气污染控制

Long-range transport potential (LRTP) assessment of the gas- (a) and particle-phase organics in Tibet using pixel-based analysis

Song Guo^{1,*}, Kai Song¹, Ying Yu¹, Kun Hu¹, Yuan Zhang¹, Chunxiang Ye¹, Min Hu¹

¹College of Environmental Sciences and Engineering, Peking University, 5 Yiheyuan Road, Beijing, 100871

* songguo@pku.edu.cn

To better understand the concentrations and impacts of gas- and particle-phase contaminants in a rural site of Tibet, a thermal desorption comprehensive two-dimensional gas chromatography-mass spectrometer (TD-GC×GC-MS) was utilized to qualify and quantify air pollutants. Almost all chemicals qualified were quantified or semi-quantified. Alkenes were predominant components in mass concentration, ozone formation, and secondary organic aerosol (SOA) formation. The key alkene compounds were α -pinene, cedrene, 3-carene. Intermediate volatility organic compounds (IVOCs) accounted for 26.4%, 92.3%, 15.5%, and 25.2% of the total gas-phase concentration, particle-phase concentration, ozone formation potential (OFP), and SOA estimation, respectively. Typical oxidation products of terpenes, i.e., pinediol and cedrol were detected, yet 2-carene-10-al and 5-isopropenyl-2-methyl-7-oxabicyclo[4.1.0]heptan-2-ol formation pathways were not reported in previous studies. By combining the pixel-based estimation of octanol–air partition coefficient (K_{o-a}), air–water partition coefficient (K_{a-w}), octanol–water partition coefficient (K_{o-w}), and OH rate constant (kOH), the long-range transport potential (LRTP) of chemicals were assessed. D6, D7, pinediol, bornyl acetate, cedrol, diisobutyl phthalic acid ester, nonanoic acid, and C22–C32 n-alkanes were found to be chemicals of high LRTP concern. The results of concentration weighted trajectory (CWT) analysis demonstrated that anthropogenic and biogenic sources from south and southeast Asia played a role in the local air pollution of Lulang, Tibet. This work provides insight into the occurrence, formation pathways, and sources of air pollutants in a typical rural site.

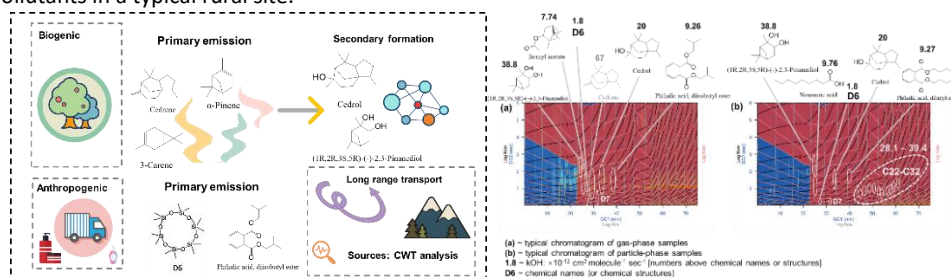


Fig. 1 Long-range transport potential (LRTP) assessment of organics with their chemical structures and OH rate constant.

Keywords: S/IVOCs, Comprehensive GC×GC MS, Pixel-based analysis, Tibet

References

- [11] Song, K., Gong, Y., Guo, S., Lv, D., Wang, H., Wan, Z., Yu, Y., Tang, R., Li, T., Tan, R., Zhu, W., Shen, R., and Lu, S.: Investigation of partition coefficients and fingerprints of atmospheric gas- and particle-phase intermediate volatility and semi-volatile organic compounds using pixel-based approaches, *J Chromatogr A*, 1665, 2022.

基于颗粒物弹跳系数测量的可解释机器学习方法预测城市大气颗粒物相态

裘彦挺¹, 刘玥晨¹, 吴志军^{1,*}, 王抚洲², 孟祥馨悦¹, 张子睿¹, 满睿琪¹, 黄丹丹³, 王红丽³, 高雅琴³, 黄成³, 胡敏¹

¹ 北京大学环境科学与工程学院, 北京市海淀区颐和园路5号, 100871

² 香港城市大学计算机学院, 香港九龙塘达之路83号, 999077

³ 上海市环境科学研究院, 海市徐汇区钦州路508号, 200233

*Email: zhijunwu@pku.edu.cn

摘要正文: 颗粒物的相态对于物质在大气中的气-粒分配、大气化学多相反应、颗粒物的冰核活性和增长中起着至关重要的作用¹。然而, 大气颗粒物相态的表征仍然具有挑战性, 基于颗粒物弹跳系数的测量方法是目前唯一可以用于在线表征颗粒物相态的方法。本研究基于多个站点的长时间颗粒物弹跳系数、颗粒物化学组成和环境相对湿度(RH)测量数据, 建立了用于估算城市地区大气颗粒物的弹跳系数 f 的机器学习模型, 并使用夏普利可解释算法(SHAP)对颗粒物化学组成和环境RH的重要性进行了评估。该模型在时空上具有高准确度($R^2 = 0.952$)和稳健性($RMSE = 0.078$)。使用该模型预测了全球主要城市地区大气颗粒物相态不同季节颗粒物的相态, 发现北半球中高纬度城市的颗粒物在所有季节都为液态, 而半干旱地区的颗粒物则保持半固态。在东亚地区的特大城市如北京和首尔, 颗粒物在春季和夏季为液态, 其他季节则为半固态。模型敏感性分析结果表明, 无机盐, 尤其是硝酸盐质量浓度占比对于颗粒物相态而言至关重要, 硝酸盐质量浓度占比的增加将导致颗粒物在更低的RH下保持液态(图1)。

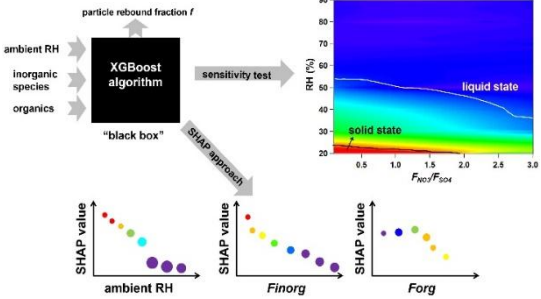


Fig. 1 The scheme of established explainable machine learning model for estimating particle rebound measurement based on aerosol chemical composition and relative humidity.

关键词: 颗粒物相态; 机器学习; 夏普利可解释算法; 颗粒物液态水含量

参考文献

[1] Shiraiwa M.; Ammann M.; Koop T.; Pöschl, U., Gas uptake and chemical aging of semisolid organic aerosol particles. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2011, 108: 11003-11008.

基于AI提升大气VOCs监测时间分辨率：从小时级到分钟级

程勇, 黄晓锋*, 彭妍, 曹礼明, 彭杏, 吴疆, 何凌燕

北京大学深圳研究生院环境与能源学院, 大气观测超级站实验室, 广东 深圳, 518055

*Email: huangxf@pku.edu.cn

摘要正文：大气挥发性有机化合物（VOCs）不仅影响环境质量，还可对人类健康构成威胁。因此，实现高精度、连续的在线监测，不仅有助于深入解析VOCs的光化学反应途径及其大气转化机制，还能为优化臭氧等二次污染物的形成与控制策略提供科学支撑。目前，用于大气VOCs在线监测的主要技术包括气相色谱-质谱联用（GC-MS）和质子转移反应飞行时间质谱（PTR-ToF-MS）。GC-MS具备高精度的定量能力，并能准确鉴别VOCs物种，但由于其采用间歇性采样，时间分辨率通常仅为小时级，难以捕捉短时尺度内的快速光化学过程。相比之下，PTR-ToF-MS基于软电离技术，可实现分钟级时间分辨率，但对低质子亲和力的VOCs检测灵敏度较低。本研究基于北大深圳大气观测超级站（PKU-AOSS）五年（2019-2023）长期综合在线监测数据，构建并提出了一种基于人工智能（AI）的自适应卷积树集成（ACTE）模型，以弥补现有VOCs监测仪器在时间分辨率和物种检测能力方面的局限，并高精度预测重构高时间分辨率（5分钟）的VOCs数据。模型评估结果显示，ACTE模型在大多数VOCs物种中的预测性能均优于其他常见的数据驱动方法，展现出更高的预测稳定性和精度。尤其是在低质子亲和力的烷烃和烯烃类VOCs中，其 R^2 分别为0.92和0.89。本研究进一步基于臭氧箱式机理模型，对不同时间尺度的VOCs数据进行了模拟。结果表明，高时间分辨率数据能更精细地解析臭氧及其关键反应路径的短时变化特征，相比之下，小时级VOCs数据的模拟则较为粗略，可能会导致对臭氧生成与损失过程的高估。本研究验证了AI技术在提升大气VOCs监测时间分辨率方面的有效性，并强调了高时间分辨率VOCs数据在解析快速光化学反应过程中的重要价值。

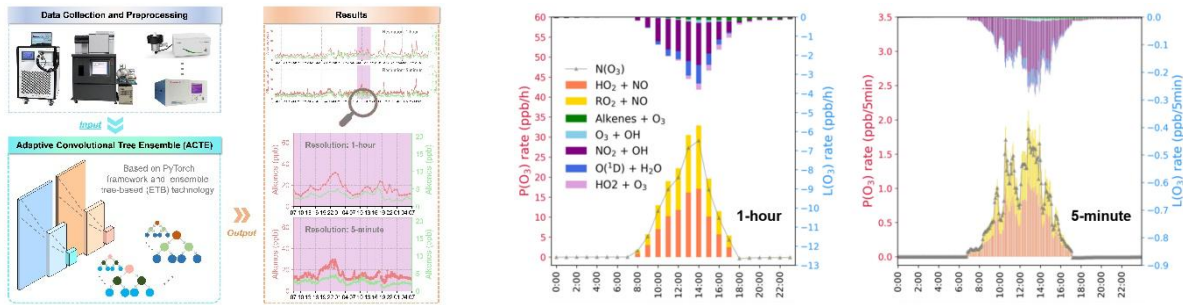


Fig. 1 Graphical abstract and comparison of simulated key reaction pathways of ozone at different time resolutions

关键词： VOCs; GC-MS; PTR-ToF-MS; 大气环境监测; AI

参考文献

- [1] Cheng Y., Huang X.F., Peng Y., Cao L.M., Peng X., Wu J., He L.Y. Enhancing time resolution of ambient VOC measurement data by machine learning: From one-hour to five minutes. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. 2025, 130: e2024JD042477.
- [2] Cheng Y., Peng Y., Cao L.M., Huang X.F., He L.Y. Identifying the geospatial relationship of surface ozone pollution in China: Implications for key pollution control regions. *Science of The Total Environment*. 2024, 930: 172763.
- [3] Cheng Y., Huang X.F., Peng Y., Tang M.X., Zhu B., Xia S.Y., He L.Y. A novel machine learning method for evaluating the impact of emission sources on ozone formation. *Environmental Pollution*. 2023, 316: 120685.
- [4] Cheng Y., He L.Y., Huang X.F. Development of a high-performance machine learning model to predict ground ozone pollution in typical cities of China. *Journal of Environmental Management*. 2021, 299.
- [5] Cheng Y., Zhu Q., Peng Y., Huang X.F., He L.Y. Multiple strategies for a novel hybrid forecasting algorithm of ozone based on data-driven models. *Journal of Cleaner Production*. 2021, 326.

机动车制动磨损颗粒物催化 SO_2 快速氧化生成硫酸盐

齐福园^{1,2}, 彭剑飞^{1,2,*}, 张进生^{1,2}, 吴琳^{1,2}, 毛洪钧^{1,2}

¹ 天津市城市交通污染防治研究重点实验室, 天津市南开区卫津路 94 号, 300071

² 南开大学环境科学与工程学院, 天津海河教育园区同砚路 38 号, 300350

*Email: 2932660990@qq.com

摘要正文: 大气硫酸盐形成机制的缺失仍然是全球城市雾霾治理的一个具有挑战性的问题。在过去的几十年里, 随着汽车尾气排放的显著减少和车队的电气化, 汽车刹车的非尾气排放已成为城市环境中气溶胶颗粒的主要来源。在这里, 我们系统地研究了制动磨损颗粒 (BWP) 对 SO_2 非均相转化的影响。实验结果表明, 含 $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 磁铁矿/有机碳复合组分的 BWP 可以在黑暗中催化 SO_2 非均相氧化为硫酸盐, 其对 SO_2 的吸收系数比已报道过的矿物质、黑碳、 $\text{PM}_{2.5}$ 等大气颗粒物高出约一个数量级。这是由于 BWP 中的有机碳 (OC) 通过 $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 氧空位为 O_2 活化提供电子, 促进活性氧物种 (O_2^{2-}) 生成; 元素碳 (EC) 则通过增强 SO_2 吸附-脱附过程, 协同加速 SO_2 氧化。本研究揭示了 BWP 界面反应可能是城市硫酸盐气溶胶先前未被认识的重要来源, 更重要的是阐明了 BWP 内部强催化体系对大气化学的潜在深远影响。

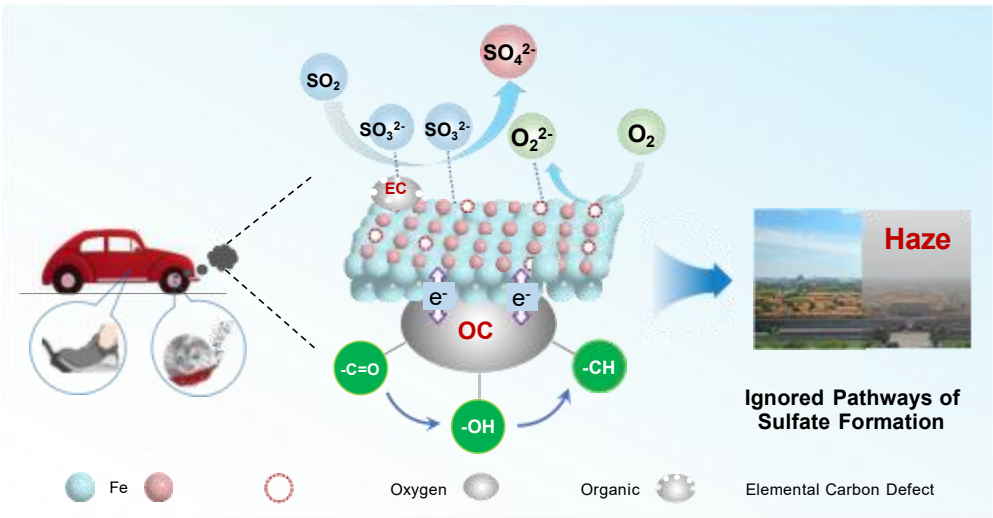


Fig. 1 Figure title in English

关键词: 硫酸盐生成; 制动磨损颗粒物; $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$; 非均相界面反应; 氧空位

参考文献

- [1] F. Qi, J Peng *, H. Mao, et al. Strong metal-support interaction (SMSI) in environmental catalysis: Mechanisms, application, regulation strategies, and breakthroughs. *Environ. Sci. Ecotechnol.* 2024, 22:100443. (IF=14)
- [2] W. Yang §, F. Qi §, K. Yu *, et al. Local electronic structure modulation of interfacial oxygen vacancies promotes oxygen activation capacity of $\text{Pt/Ce}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_{2-\delta}$. *ACS Catal.* 2024, 14: 5936-5948 (共一)(IF=11.3)
- [3] F. Qi, J Peng *, H. Mao, et al. Transforming waste brake pads from automobiles into Nano-Catalyst: Synergistic Fe-C-Cu triple sites for efficient fenton-like oxidation of organic pollutants. *Waste Manage.* 2024, 175: 225-234. (IF=7.1)

- [4] F. Qi, W. Yang, K. Yu *, et al. Oxygen defect engineering in Pt/CeO₂ catalyst for promoted selective oxidation of HMF to FDCA. *Appl. Surf. Sci.* 2025, 686: 162205. (IF=6.3)
- [5] F. Qi, W. Yang, K. Yu *, et al. Manipulating interfacial atomic structure of Pt/Ce_{1-x}Y_xO_{2-δ} to improve charge transfer capacity and catalytic activity in aerobic oxidation of HMF. *Appl. Surf. Sci.* 2022, 598: 153769. (IF=6.3)

其他活动

H₂O₂氧化途径驱动硫酸盐形成机制研究

张宇辰¹, ..., 李浩^{2,*}, 张秀辉^{1,*}

¹北京理工大学, 北京, 100081

²中国科学院生态环境研究中心, 北京, 100085

*Email: zhangxiuhui@bit.edu.cn

*Email: haol@rcees.ac.cn

摘要：硫酸盐作为细颗粒物（PM_{2.5}）的关键组分，对全球气候和环境变化具有深远影响^{1,2}。研究表明，在全球尺度上，H₂O₂氧化途径是硫酸盐生成的主导路径³。传统认为，H₂O₂氧化过程发生在体相^{4,5}，而最近研究发现，该过程在气液界面比体相快约700倍⁶，然而H₂O₂的界面氧化机制尚不清楚，界面反应机制与体相是否存在不同、界面为何加速该反应的发生等问题均有待探索。本研究采用第一性原理分子动力学模拟方法，系统探究并对比了界面和体相环境下H₂O₂氧化机制。研究发现气液界面与体相反应的速率控制步骤不同：界面区域中，反应的决速步是H₂O₂与HSO₃⁻反应生成过氧中间体（Fig. 1A 上图），而在液相中，决速步是过氧中间体重排生成硫酸盐（Fig. 1B 下图）。进一步研究发现界面反应活化能（4.13 kcal/mol）较体相（7.82 kcal/mol）降低46.9%（Fig. 1A-B），优势显著。该研究全面揭示了不同环境下H₂O₂氧化途径的机制差异和原因，为完善大气硫酸盐生成机制提供了理论依据。

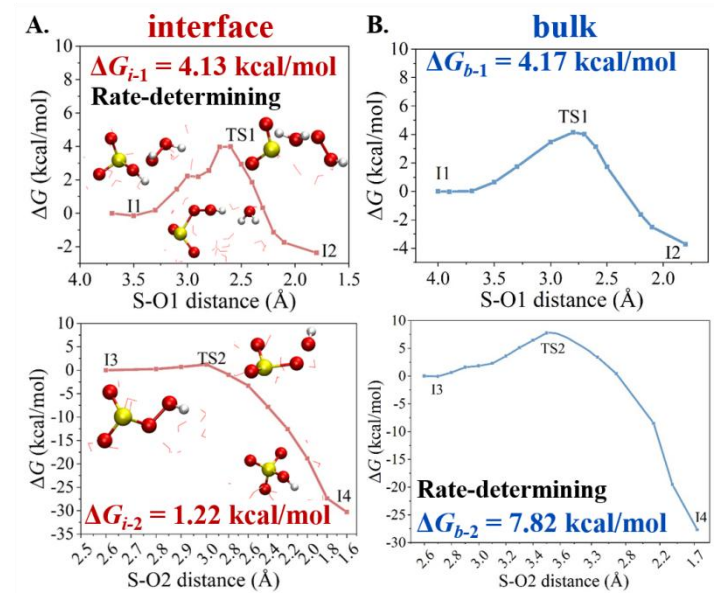


Fig. 1Free energy profiles for the reaction between H₂O₂ and HSO₃⁻ (A) at the interface and (B) in the bulk phase; in which the top shows the reaction : H₂O₂ + HSO₃⁻ → HOOSO₂⁻+H₂O and the below shows HOOSO₂⁻→ HSO₄⁻. H atom, white sphere; O atom, red sphere; S atom, yellow sphere.

关键词：硫酸盐形成；H₂O₂；气液界面；第一性原理分子动力学

参考文献

1. R. L. Mauldin III *et al.* A new atmospherically relevant oxidant of sulphur dioxide. *Nature* 2012, **488**, 193–196
2. Fang Zhang *et al.* An unexpected catalyst dominates formation and radiative forcing of regional haze. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2020, **117**, 3960–3966.
3. Jie Gao *et al.* Hydrogen peroxide serves as pivotal fountainhead for aerosol aqueous sulfate formation from a global perspective. *Nat Commun* 2024, **15**, 4625.
4. Mark A. Vincent, Ian J. Palmer, Ian H. Hillier, & Elena Akhmatskaya. Exploration of the Mechanism of the Oxidation of Sulfur Dioxide and Bisulfite by Hydrogen Peroxide in Water Clusters Using *Ab Initio* Methods. *J. Am. Chem. Soc.* 1998, **120**, 3431–3439.
5. Svetlana Shostak, Kitae Kim, Yevhen Horbatenko, & Cheol Ho Choi. Sulfuric Acid Formation via H₂SO₃ Oxidation by H₂O₂ in the Atmosphere. *J. Phys. Chem. A* 2019, **123**, 8385–8390.
6. Lin-Fang Li *et al.* Rethinking urban haze formation: Atmospheric sulfite conversion rate scales with aerosol surface area, not volume. *One Earth* 2024, **7**, 1082–1095.

A novel semi-analytical coefficient of restitution model based on new characteristics length and time for nonlinear the colliding viscoelastic particles

Zepeng Niu¹, Yongjun Pan², Gengxiang Wang^{1,*}

¹School of Mechanical and Electrical Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an, 710055, Shaanxi, China

²College of Mechanical and Vehicle Engineering, Chongqing University, Chongqing, 400044, China

* wanggengxiang@xauat.edu.cn

The coefficient of restitution (CoR) is a critical parameter for predicting the impact behavior of colliding particles. This investigation aims to develop a novel CoR model for viscoelastic particles by incorporating improved characteristic length and time parameters. Initially, a new characteristic length is defined by considering energy dissipation during the compression phase of the impact process, providing a foundation for deriving the characteristic time in cases of damped impact behavior. Subsequently, a new equation of motion of colliding particles is formulated based on two new characteristic length and time. The approximate analytical solution of the new equation of motion is solved using Taylor expansion when considering energy dissipation during the compression phase. Likewise, the proposed motion equation is solved simultaneously based on the inverse collision method. The impact velocity of colliding particles can be obtained by combining two different solutions from the new equation of motion. Therefore, a new CoR model can be derived based on the definition of the Newtonian's CoR. Moreover, the dimensionless maximum contact time during the compression phase is obtained based on the energy conservation of the whole compression phase. However, the new CoR model encounters a limitation when the impact velocity is zero as the denominator, which depends on impact velocity and the dimensionless maximum contact time leads to an undefined value. To address this issue, an infinitesimal quantity ϵ is introduced to the dimensionless maximum contact time ensuring the CoR model remains finite when the impact velocity approaches zero. Finally, the advantages of the new CoR model are demonstrated in comparison to existing models. A series of experimental data involving metallic and non-metallic contact materials validates the accuracy and reliability of the proposed model.

Keywords: CoR model; Characteristic length; Characteristic time; Inverse collision; Colliding viscoelastic particles.

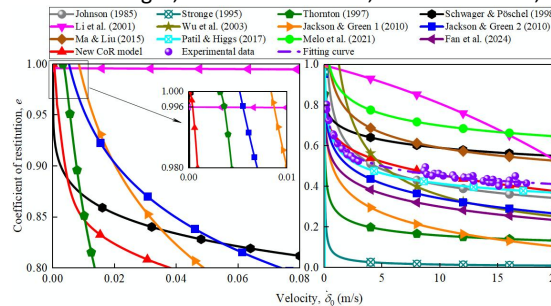


Fig.1 The comparison among the existing CoR models and the new CoR model when the contact material is metal

References

[1] H. Abutuqayqah, H. El hor, S. Saleem, The restitution coefficient of a particle repeatedly bouncing off a rough surface, Chaos,

Solitons and Fractals 179 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2023.114438>.

- [2] J. Wedel, M. Hriberšek, P. Steinmann, J. Ravnik, Coefficient of tangential restitution for non-spherical particles, *Powder Technol.* 437 (2024) 119526. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2024.119526>.
- [3] G. Wang, W. Jia, F. Cheng, P. Flores, An enhanced contact force model with accurate evaluation of the energy dissipation during contact-impact events in dynamical systems, *Appl. Math. Model.* 135 (2024) 51–72. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2024.06.034>.
- [4] M. Rodrigues da Silva, F. Marques, M. Tavares da Silva, P. Flores, A compendium of contact force models inspired by Hunt and Crossley's cornerstone work, *Mech. Mach. Theory* 167 (2022) 104501. <https://doi.org/10.1016/j.mechmachtheory.2021.104501>.
- [5] H. Abutuqayqah, H. El hor, S. Saleem, The restitution coefficient of a particle repeatedly bouncing off a rough surface, *Chaos, Solitons and Fractals* 179 (2024) 114438. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2023.114438>.
- [6] J. Kisilowski, J. Zalewski, R. Kowalik, On a Possibility of a Side Impact Collision Analysis Based on the Coefficients of Restitution, *Adv. Sci. Technol. Res. J.* 17 (2023) 257–268. <https://doi.org/10.12913/22998624/166567>.
- [7] K. Senetakis, Energy transport and dissipation in granular systems, *Granul. Matter* 25 (2023) 1–8. <https://doi.org/10.1007/s10035-023-01340-z>.
- [8] Y. Fan, H. Wang, T. Zhou, L. Zou, Z. Jiang, M. Hu, Prediction of Coefficient of Restitution for Impact Elastoplastic Spheres Considering Finite Plate Thickness, *Chinese J. Mech. Eng. (English Ed.)* 37 (2024). <https://doi.org/10.1186/s10033-024-01066-w>.
- [9] K. Lin, C. Ge, J. Qian, T. Guo, S. Xia, Exploring factors affecting the conversion of the coefficient of restitution to equivalent free fall drop height, *Packag. Technol. Sci.* 37 (2024) 67–83. <https://doi.org/10.1002/pts.2779>.
- [10] S. Yao, S. An, Z. Bai, S. Chen, Z. Kan, H. Meng, L. Yaping, Empirical investigation of parameter impacts on the three-dimensional coefficient of restitution of jujube at the time of harvest, *Postharvest Biol. Technol.* 212 (2024) 112859. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2024.112859>.

一种干细颗粒的无非物理吸引力粘性接触力模型研究

贾万勋, 王庚祥*

西安建筑科技大学, 西安, 710055

* wanggengxiang@xauat.edu.cn

摘要: 本研究发展了一种用于颗粒系统碰撞动力学仿真计算的黏弹性接触力模型, 然而, 在临近恢复阶段结束时刻出现了非物理吸引力, 导致过度预测颗粒系统的动态行为。为了解决这个问题, 本研究提出了一种优化策略, 以消除新黏性接触力模型中的非物理吸引力区域。对于粗颗粒系统, 非物理吸引力低估了微观接触特性 (例如, 接触持续时间、冲击后速度), 但由于非物理吸力较小, 以至于对粗颗粒系统的宏观运动影响较小。相比之下, 对于具有范德华力的细颗粒系统, 非物理吸引力对于细颗粒系统的微观和宏观行为均表现出过度预测。这项研究揭示了非物理吸引力和范德华力之间的耦合关系, 强调了消除非物理吸引力的必要性。仿真结果证明非物理吸引力导致了颗粒系统动力学性能预测出现较大误差, 尤其在细颗粒系统中。该工作提高了颗粒系统建模的精度, 为微/纳米颗粒系统动态行为的精确预测提供了理论依据。

关键词: 非物理吸引力; 黏弹性接触力模型; 范德华力; 颗粒系统

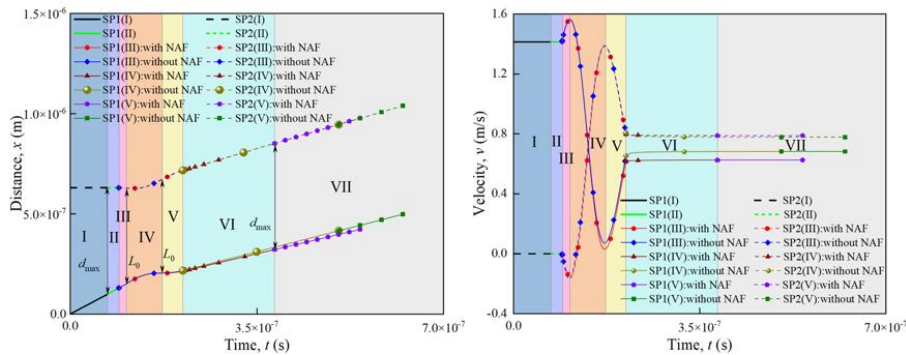


Fig.1 Comparison of displacements and velocities between eliminating NAF before and after in the fine particles

References

- [1] C.J. Coetzee, Otto C. Scheffle, Review: The Calibration of DEM Parameters for the Bulk Modelling of Cohesive Materials, *Processes* 11 (2023) 1–45.
- [2] U. Ali, M. Kikumoto, M. Ciantia, Impact of particle elongation on the behavior of round and angular granular media: Consequences of particle rotation and force chain development, *Comput. Geotech.* 165 (2024) 105858. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2023.105858>.
- [3] G. Wang, W. Jia, F. Cheng, P. Flores, An enhanced contact force model with accurate evaluation of the energy dissipation during contact-impact events in dynamical systems, *Appl. Math. Model.* 135 (2024) 51–72. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2024.06.034>.
- [4] X. Liu, X. Zhang, J. Li, Q. Zhu, N.G. Deen, Y. Tang, Regeneration of iron fuel in fluidized beds, Part I: Defluidization experiments and theoretical prediction model, *Powder Technol.* 420 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2022.118182>.
- [5] A.C. Dalmora, C.G. Ramos, L.G. Plata, M.L. da Costa, R.M. Kautzmann, L.F.S. Oliveira, Understanding the mobility of potential nutrients in rock mining by-products: An opportunity for more sustainable agriculture and mining, *Sci. Total Environ.* 710 (2020) 136240. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.136240>.
- [6] C. Coetzee, O.C. Scheffler, Comparing particle shape representations and contact models for DEM simulation of bulk cohesive behaviour, *Comput. Geotech.* 159 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2023.105449>.
- [7] M. Khan, R. V. More, L. Brandt, A.M. Ardekani, Rheology of dense fiber suspensions: Origin of yield stress, shear thinning, and normal stress differences, *Phys. Rev. Fluids* 8 (2023) 1–16. <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.8.064306>.
- [8] Y. Zhao, M. Liu, C.H. Wang, S. Matsusaka, J. Yao, Electrostatics of granules and granular flows: review, *Adv. Powder* <https://doi.org/10.1016/j.apm.2022.103895>.
- [9] S.Y. Joshi, S.A. Deshmukh, A review of advancements in coarse-grained molecular dynamics simulations, *Mol. Simul.* 47 (2021) 786–803. <https://doi.org/10.1080/08927022.2020.1828583>.
- [10] R. Muneer, P. Pourafshary, M. Rehan Hashmet, An integrated modeling approach to predict critical flow rate for fines migration initiation in sandstone reservoirs and water-bearing formations, *J. Mol. Liq.* 376 (2023) 121462. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.121462>.

气-液界面上，Fe(III)氧化S(IV)的机制研究

张晓梦^{1, 2, 3}, 李浩^{1, *}

¹中国科学院生态环境研究中心, 北京, 100085

²中国科学院城市环境研究所, 厦门, 361021

³中国科学院大学, 北京, 100049

*Email: haol@rcees.ac.cn (李浩)

摘要正文: 过渡金属离子 (TMs) 催化氧化S(IV)的过程作为大气硫转化的重要途径, 对二次气溶胶形成具有显著影响^[1]。最近, 实验研究发现气溶胶表面Fe(III)催化S(IV)的氧化速率显著快于体相溶液中的反应速率^[2-4]。然而, 目前对于气溶胶表面硫酸盐生成的反应机制在分子水平上的理解仍存在不足, 这限制了我们对大气硫化学基础认知的深入理解。在本研究中, 我们采用Born-Oppenheimer分子动力学模拟方法, 系统探究了在不同pH值(3-6)和不同配体(HSO₃⁻/H₂O)下, 气-液界面处Fe(III)氧化HSO₃⁻反应的微观机制。计算结果表明, 在气-液界面处, HSO₃⁻可被Fe(III)氧化生成SO₃•⁻, 在低pH(3-4)条件下具有更低的能垒(3.37 kcal/mol), 略低于高pH(4-6)条件下的6.78 kcal/mol, 说明低pH环境下Fe(III)的水解产物对S(IV)具有更高的氧化活性。究其原因, 弱酸性环境可能通过双重机制作用提高了催化效率: 一方面抑制了Fe(III)的水解, 另一方面促进了质子的供应。研究进一步发现, 以HSO₃⁻作为配体取代1个H₂O分子的氧化反应具有更高的能垒(7.66 kcal/mol), 这表明H₂O做配体比HSO₃⁻作配体的氧化途径在界面反应中更具竞争力, 因此揭示了配体环境对Fe(III)催化反应的影响机制。值得注意的是, 气-液界面处的氧化反应通过质子耦合电子转移(PCET)机制进行, 这一机制不仅为界面反应提供了理论基础, 还能更好地解释低pH条件下氧化活性更有利的原因。本文提出的反应机制从分子层面揭示了界面反应的重要性, 同时强调了考虑pH值和不同配体在研究过程中的重要意义。这些发现为深入理解硫酸盐的形成机制以及建立不同环境条件下的颗粒物形成模型提供了新视角, 对大气治理污染策略的制定具有一定的指导意义。

关键词: 硫酸盐气溶胶颗粒; 过渡金属离子氧化; 硫化学; 第一性原理分子动力学模拟

参考文献

- [1] W. Wang, M. Liu, T. Wang, et al. Sulfate formation is dominated by manganese-catalyzed oxidation of SO₂ on aerosol surfaces during haze events [J]. Nat. Commun., 2021, 12(1): 1993-2002.
- [2] K. J. Angle, E. E. Neal, V. H. Grassian. Enhanced rates of transition-metal-ion-catalyzed oxidation of S(IV) in aqueous aerosols: insights into sulfate aerosol formation in the atmosphere [J]. Environ. Sci. Technol., 2021, 55(15): 10291-10299.
- [3] X. Cao, Z. Chen, Y.-X. Liu, et al. Directly measuring Fe(III)-catalyzed SO₂ oxidation rate in single optically levitated droplets [J]. Environ. Sci.: Atmos., 2023, 3(2): 298-304.
- [4] J. Shao, Q. Chen, Y. Wang, et al. Heterogeneous sulfate aerosol formation mechanisms during wintertime Chinese haze events: air quality model assessment using observations of sulfate oxygen isotopes in Beijing [J]. Atmos. Chem. Phys., 2019, 19(9): 6107-6123.

境液相界面中卤素阴离子-氧气协同活化机制研究

曹轶群^{1,2}, 王卓³, 马庆鑫^{1,2,*}, 张秀辉^{3,*}, ⁴Joseph S. Francisco^{4,*}, 贺泓^{1,2,5,*}

¹环境模拟与污染控制国家重点联合实验室, 中国科学院生态环境科学研究中心, 北京, 100085,

²中国科学院大学资源与环境学院, 北京, 100049

³原子分子簇科学教育部重点实验室, 北京理工大学化学与工程学院, 北京, 100081

⁴宾夕法尼亚大学地球与环境科学系和化学系, 费城, 宾夕法尼亚州, 19104

⁵先进环境技术国家重点实验室, 中国科学院城市环境研究所, 厦门, 361021

*Email: qxma@rcees.ac.cn; zhangxiuhui@bit.edu.cn; frjoseph@sas.upenn.edu; honghe@rcees.ac.cn

摘要正文: 大气活性卤素 (Cl、Br、I) 是大气化学中的重要氧化剂, 可以通过氧化还原反应影响大气化学组成及大气污染物的寿命, 进而影响气候。通常情况下, 大气中的卤素物种主要以非活性的卤素阴离子形态存在, 因此从卤素阴离子到活性卤素物种的活化过程是大气卤素化学的关键。传统观点认为, 卤素阴离子的活化需要强氧化剂 (如OH自由基、臭氧等) 的参与。团队研究发现, 在大气气溶胶的酸性条件下, 水合氢离子 (H_3O^+) 可以促使氧气 (O_2) 和卤素离子 (X^-) 在气液界面上自发结合形成 $[X^-O_2-H_3O^+]$ 复合体, 该复合体可以被对流层光化学辐射激发 ($\lambda \geq 290nm$), 并通过质子电子转移过程自发生成卤素自由基 (X) 和 HO_2 自由基, 进而生成卤素单质 (X_2) 和OH自由基。该过程可以看作是卤素离子和氧气的协同活化, 不需要其他氧化剂的参与就可以生成表面活性氧物种 (ROS) 并增强大气氧化能力。这些ROS可以将二氧化硫 (SO_2) 氧化为硫酸盐, 促进二次硫酸盐形成。同时, SO_2 氧化反应产生的 H^+ 又可以促进 X 的活化, 这说明 SO_2 氧化和 X 活化具有协同促进作用, 总体上呈现正反馈效应。颗粒物界面过程对大气氧化性的增强和二次颗粒物形成的促进作用及其正反馈机制, 是我国“大气霾化学”污染区别于以往典型污染事件的重要特征, 也是“大气霾化学”研究的重要内容。该研究阐明了大气卤素的非均相反应活化机制, 突破了对大气中卤素阴离子活化的传统认知, 促进了对“大气霾化学”污染成因的深入认识。相关研究成果发表在 *Journal of the American Chemical Society*, *Angewandte Chemie International Edition* 等期刊上。

关键词: 界面反应; 活化机制; 卤素离子

基于机器学习的中国大气颗粒物数浓度模拟研究

龚康佳¹, 胡建林^{1,*}

¹南京信息工程大学环境科学与工程学院, 江苏 南京, 210044

*Email: gongkangjia@qq.com

摘要正文: 超细颗粒物由于粒径小表面积大, 数浓度比质量浓度对健康的影响更密切, 并且CCN数浓度的变化会影响云的性质和降水, 从而间接影响水文循环和气候。机器学习为估计超细粒子浓度水平的具有成本效益的措施。本研究基于2013年-2019年长期观测数据, 开发了一个包含基于卫星的测量、气象变量和污染物观测数据的模型, 以1公里分辨率估计每小时超细颗粒物浓度水平。通过5倍的交叉验证、时间和空间验证对性能进行了评估。本模型对核模态, 爱根核模态和积聚模态的估计相关系数分别为0.92、0.90和0.92, 显著优于化学传输模型WRF/CMAQ模拟效果。通过SHAP值来评估各变量的重要性, 发现对核模态数浓度影响最大的为PM_{2.5}浓度、相对湿度和AOD。对于爱根核模态, NO₂的重要性比PM_{2.5}更高, 且在新粒子形成期间NO₂更重要。对积聚模态的影响, PM_{2.5}浓度影响更大。超细粒子的估计可以进一步应用于流行病学研究中的短期和长期影响以及气候效应中研究中。

关键词: 机器学习、超细颗粒物、数浓度、估算模型

江西地区大气污染模式模拟改进与减排效果评估研究

左浩宸¹, 谢晓栋¹, 龚康佳¹, 白露¹, 文婕妤¹, 胡建林^{1,2,3,*}

¹ 南京信息工程大学环境科学与工程学院, 江苏省南京市浦口区宁六路 219 号, 210044

² 南京信息工程大学江苏省大气环境监测与污染控制高技术重点实验室, 江苏省南京市浦口区宁六路 219 号, 210044

³ 南京信息工程大学大气环境与装备技术协同创新中心, 江苏省南京市浦口区宁六路 219 号, 210044

Email: 202412120428@nuist.edu.co

摘要正文: 近年来, 江西省主要城市深入推进秋冬季大气污染防治攻坚行动, 将细颗粒物 (PM_{2.5}) 与臭氧 (O₃) 的协同治理作为重点任务。然而, O₃ 及硝酸盐、硫酸盐、二次有机气溶胶等二次 PM_{2.5} 组分对前体物排放变化的生成敏感性及其时间演变规律尚不明确, 且空气质量模式在本地的预测精度仍有待提升。针对上述问题, 本研究以 O₃ 与 PM_{2.5} 高污染时段为对象, 开展了多组模拟对比实验。通过引入 OBSGRID 地面与高空观测数据对 WRF 模式进行同化、选用不同版本的空气质量模型 CMAQ (v5.2 与 v5.4)、更新非均相反应机制、测试不同长度的模式启动期 (spin-up), 并采用最新反演排放清单, 构建了更具本地适应性的污染模拟系统。结果表明, 各项优化方案均不同程度提高了模拟精度 (南昌市 PM_{2.5} 模拟浓度的标准化偏差从高估 90% 降至 17%)。在此基础上, 进一步利用优化后的模型评估多种减排措施的效果, 发现将一次颗粒物排放削减 30%~50% 可显著降低 PM_{2.5} 浓度, 而 NO_x 每减排 10% 则会导致 O₃ 浓度平均上升约 5 μg/m³。本研究建立了本地化数值模拟系统, 揭示了 O₃ 及典型二次 PM_{2.5} 组分对前体物排放的敏感性及其时间演化特征, 并结合污染高值时段的敏感性与源解析结果, 提出了适用于南昌市的污染超标应急减排策略, 对区域污染精准防控提供了科学支撑。

关键词: 臭氧; PM_{2.5}; 化学传输模型; 减排路径

墙报摘要

民用燃煤排放经光化学氧化生成二次气溶胶特征的研究

倪心滢¹, 陈政¹, 万子超¹, 谭瑞¹, 朱雯斐², 楼晟荣², 郭松^{1,*}

¹ 北京大学环境科学与工程学院 环境模拟与污染控制国家联合重点实验室, 中国 北京, 100871

² 上海理工大学能源与动力工程学院, 中国 上海, 200093

*Email: songguo@pku.edu.cn

摘要正文: 我国是煤炭使用大国, 近年来虽然随着我国大气污染防治工作的深入和能源结构调整, 我国煤炭使用大幅下降, 但是从能源安全角度考虑, 燃煤在我国能源结构中仍然占据重要地位。其中民用燃煤虽然使用量占比低, 但是由于缺少有效的处理设备, 因此对我国北方尤其是秋冬季大气污染依然具有重要贡献。本研究基于美国 Aerodyne 公司的气溶胶生成潜势反应器 (Potential Aerosol Mass, PAM), 搭建了针对民用燃煤一次排放和二次转化的模拟体系, 利用美国 TSI 公司的扫描电迁移率颗粒物粒径谱仪 (Scanning Mobility Particle Sizer, SMPS) 测量一次颗粒物和二次颗粒物数量粒径谱分布, 利用美国 Aerodyne 公司的高分辨率飞行时间气溶胶质谱仪 (High Resolution Time-of-Flight Aerosol Mass Spectrometer, HR-ToF-AMS) 测量非难熔亚微米颗粒物化学组成, 深入探究了民用燃煤一次排放颗粒物特征与二次转化生成颗粒物随氧化状态和燃烧阶段的演变特征。实验结果表明, 民用燃煤排放一次颗粒物以硫酸盐为主, 占 PM_{10} 的 $72.50 \pm 55.86\%$, 其次为铵盐, 占比为 $22.34 \pm 13.36\%$, 有机物占比为 $2.94 \pm 1.77\%$, 有机气溶胶的排放因子为 $2.57 \pm 1.58 \text{ mg kg-fuel}^{-1}$ 。在本研究设定的 OH 暴露量条件下, 等效光化学龄 (Equivalent Photochemical Age, EPA) 为 0-4.74 天, 根据颗粒物化学组成的浓度、采样流量、稀释倍数, 计算了一次颗粒物组分的排放速率 (Emission Rate, ER) 以及二次颗粒物组分的生成速率 (Production Rate, PR), 即每分钟排放或生成的颗粒物的质量浓度。结果表明二次颗粒物生成速率随等效光氧化龄增加而增加, 其中二次有机气溶胶 (Secondary Organic Aerosol, SOA) 生成速率在 4.74 天达到最大值, 为 $1.62 \pm 0.62 \mu\text{g min}^{-1}$, 仅次于硫酸盐; 这一时刻, 有机气溶胶的增长倍数也达到最大, 为 44.68 倍, 显著高于先前研究中生物质燃烧排放以及实际烹饪条件下餐饮排放氧化后有机气溶胶的增长倍数, 但仍远低于机动车排放氧化后有机气溶胶的增长倍数, 因此燃煤排放二次转化对大气污染有重要贡献。为了研究方便, 本研究根据燃烧效率 (Modified Combustion Efficiency, MCE) 将燃烧过程分为初始、稳定、燃尽三个阶段。通过比较发现, 颗粒物质量浓度在整个燃烧过程中呈现先增后减的变化趋势, 而颗粒物峰值粒径随光氧化龄增加而增加。在燃烧过程中, 硫酸盐占比始终较大, 而有机物在初始阶段占比最高。

关键词: 二次气溶胶; 氧化流动管; 居民源排放; 燃煤排放

第十一分论坛
颗粒与生态材料前沿论坛

邀请报告

粉体技术在固体废物资源化中的应用

李辉*, 郑伍魁, 杨雨玄, 王飞, 乔志刚, 朱毅, 齐永乐

西安建筑科技大学材料科学与工程学院, 陕西, 西安, 710055

*sunshine_lihui@126.com

摘要正文: 工业固体废弃物的高效资源化是推动绿色低碳发展的关键课题。本报告以粉体颗粒的滚动造粒工艺为核心, 系统探究了固废粉体造粒技术优化及其功能化应用研究。针对矿渣、钢渣、赤泥等典型工业固废, 通过滚动造粒技术实现其资源化利用, 重点分析了成球率与工艺参数(圆盘倾角、转速、加水量、粉料细度)的关联性。并探究二次滚动造粒的可能性和影响因素。以固废粉体物料的滚动造粒为基础, 成功开发了空心陶粒、相变储热陶粒及多层蓄水陶粒等。其中, 空心陶粒在密度等级 600 下抗压强度达 7-8MPa; 相变储热陶粒潜热值 75.4 J/g, 渗出率低于 5%, 兼具高效热管理与稳定性; 多层蓄水陶粒通过梯度孔结构设计, 实现可控吸水与保水性能。此外, 核壳结构陶粒在重金属污染土壤固化中展现出显著效果, 利用壳层抑制传质传热, 提升 Cr 等重金属的固化效率。

研究表明, 固废的滚动造粒工艺在固废资源化领域具有广阔应用潜力, 通过工艺优化与功能化设计, 可满足建筑、环保、能源存储等多领域需求, 为工业固废高值化利用提供技术支撑。

关键词: 粉体颗粒; 固废; 造粒; 陶粒

XRD 全谱数据建模预测熟料性能的研究

摘要正文：硅酸盐水泥熟料具有复杂的多元多相结构，其性能预测极具难度和挑战性。现有工业产线数据建模方法，存在模型泛化能力不足、异变工艺或新工况不能识别响应、误差大等问题。本研究将 Transformer 架构与 CNN 设计相结合，提出了一种基于深度学习方法的 TransXRD 模型。该模型将一维卷积与自注意力机制相结合，实现熟料 XRD 全谱衍射数据的直接输入，避免了采用定量分析等预处理引发的数据信号的损失。采用从 6 家水泥企业收集 214 组不同来源、不同工况的熟料样品，通过输入包含 10° 到 55° 范围内的衍射峰序列，预测熟料的 28 天抗压强度。结果表明，与其他深度神经网络 (DNN) 模型相比，TransXRD 模型表现出优异的精度与泛化能力。其中，其在测试集的均方根误差 (RMSE) 为 1.15、均方误差 (MSE) 为 1.33、平均绝对误差 (MAE) 为 0.93、平均绝对百分误差 (MAPE) 为 1.76。针对训练集而言，100% 的数据预测误差在 2 MPa 以内，在测试集上，90% 的预测误差在 2 MPa 以内。该方法从材料本征组成结构特性出发预测其性能，为材料科学领域性能预测提供了新思路新方法。

口头报告

基于金属氧化物纳米颗粒的 抑菌混凝土设计制备及性能研究

朱正宇¹, 余伟^{1,*}

¹东南大学, 江苏省南京市江宁区东南大学路2号, 211189

²工作单位, 地址, 邮编

*Email: zzy19940218hhu@163.com

摘要正文: 本文围绕“电沉积法提升混凝土的抗微生物腐蚀性能”这一主题, 针对现有混凝土电沉积氧化亚铜技术效率低、表面沉积物少等问题, 开展了混凝土基体表面电沉积Cu₂O工艺参数研究。采用二电极法在混凝土表面分别制备了Cu₂O和Cu-Cu₂O薄膜, 通过XRD、SEM-EDS、ICP-OES、抑菌圈、流式细胞法和MIP等测试技术和方法探究了工艺参数对Cu₂O和Cu-Cu₂O薄膜物相组成、微观结构以及混凝土抑菌、物理性能的影响规律; 基于薄膜生长理论和动力学蒙特卡洛模拟, 揭示了不同工艺参数下Cu₂O粒子电沉积过程和Cu₂O薄膜生长机制; 基于表征结果和作用机理, 提出适用于混凝土基体的高效电沉积Cu₂O薄膜方法。

关键词: Cu₂O纳米颗粒; 混凝土; 电沉积; 抑菌性能

参考文献

- [1] Wu M, Wang T, Wu K, et al. Microbiologically induced corrosion of concrete in sewer structures: A review of the mechanisms and phenomena[J]. *Construction and Building Materials*, 2020, 239.
- [2] 荣辉, 於成龙, 马国伟, 等. 污水环境下混凝土的微生物腐蚀研究进展[J]. *硅酸盐学报*, 2021, 49(05): 988-999.
- [3] Grengg C, Mittermayr F, Koraimann G, et al. The decisive role of acidophilic bacteria in concrete sewer networks: A new model for fast progressing microbial concrete corrosion[J]. *Cement and Concrete Research*, 2017, 101: 93-101.
- [4] Bao M, Wang D, Liu S, et al. Electrodeposition and electrocatalytic activity of Cu₂O film on stainless steel substrate[J]. *Applied Surface Science*, 2012, 258(20): 8008-8014.
- [5] Wang M, Ni Y, Liu A. Investigation on the shape evolution of Cu₂O crystals in the antibacterial process[J]. *Journal of Crystal Growth*, 2017, 476: 17-24.
- [6] 原瑞霞. 电沉积法制备氧化亚铜及其防微生物附着研究[D]. 中国海洋大学, 2014.
- [7] 李伊苕, 李明辉, 赵文燕, 等. 电化学方法制备 Cu₂O 微晶及其形貌控制[J]. *现代仪器*, 2010, 16(04): 24-26.

颗粒增强多孔介质复合材料广义非完美界面 理论建模与数值分析方法研究

何兵¹，左文强¹，余伟^{1,*}

¹东南大学，江苏省南京市江宁区东南大学路2号，邮编 211189

*Email: bing1.he@foxmail.com

摘要正文：混凝土作为典型的颗粒增强多孔弹性复合材料，其力学性能显著受骨料-水泥浆体界面过渡区（ITZ）影响。ITZ（厚度约100 μm ）因水化反应形成，其力学物理特性与相邻基体和颗粒增强相存在显著差异，进而影响混凝土的整体性能[1-2]。针对传统有限厚度过渡层模型计算效率低的问题，本研究创新性地建立了零厚度广义非完美界面模型：基于无坐标界面算子理论，通过严格的数学渐近分析（精度 $O(h^2)$ ），将物理厚度为 h 的过渡层等效为满足Young-Laplace方程的非完美界面，实现了界面力学行为的精确表征。在数值方法层面，通过耦合扩展有限元法（XFEM）与水平集方法（LSM），构建了能够高效捕捉界面不连续特征的多场耦合求解框架。研究通过推导含球形夹杂无限大基体的解析解，系统验证了数值方法的收敛性与计算精度。研究表明，该方法能够精确捕捉界面跳跃效应，并高效计算弹性场与流体输运场。进一步，将该方法应用于多孔弹性复合材料的均质化分析，揭示了界面参数对宏观性能的调控机制。本研究为多孔弹性复合材料的界面力学建模与性能优化提供了新的数值工具，可推广至混凝土、岩石等多孔介质的跨尺度分析。

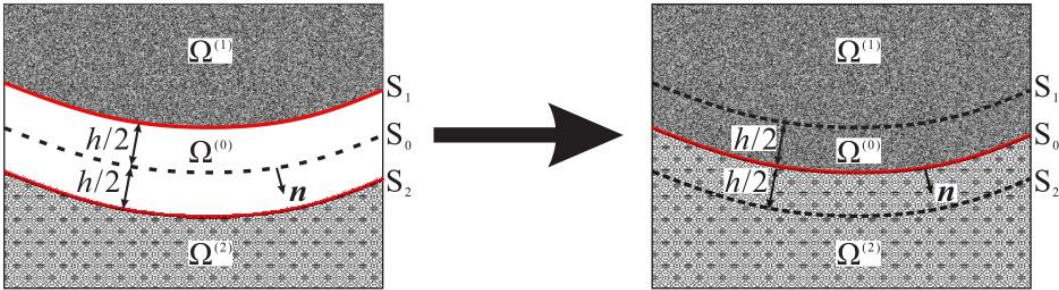


Fig. 1 The transformation of three-phase configuration into two-phase configuration by replacing the interphase with the imperfect interface

关键词： 多孔弹性复合材料；广义非完美界面模型；XFEM/LSM耦合算法

参考文献

- [1] P. Simeonov, S. Ahmad, Effect of transition zone on the elastic behavior of cement-based composites. *Cem. Conc. Res.* 1995, 25 (1): 165 – 176.
- [2] S. C. Ren, J. T. Liu, Q. C. He, An xfem-based numerical procedure for the analysis of poroelastic composites with coherent imperfect interface. *Comput. Mater. Sci.* 2014, 94: 173 – 181.

基于三维随机细观模型的珊瑚砂力学性能研究

吴彭钰，左文强，余伟*

东南大学材料科学与工程学院，南京市江宁区东南大学路 2 号，211189

*Email: wuzy@seu.edu.cn

摘要正文：本文建立了一种考虑珊瑚砂随机形状特性的三维（3D）细观颗粒模型，用于研究珊瑚砂在准静态和动态压缩载荷下的力学性能及损失破坏机制。首先，开发了一系列算法，用以生成或具有可控形状和大小配置参数的3D随机颗粒；然后，提出了一种结合重力作用和颗粒模型机械运动的压实算法，建立了具有不同颗粒级配的3D颗粒堆积系统。借助三维非结构化网格划分算法，构建了珊瑚砂颗粒系统3D有限元模型。最后，采用建立的3D细观模型对珊瑚砂的准静态和动态压缩行为进行了数值研究，研究内容包括应力-应变曲线、试件变形过程和珊瑚砂颗粒破碎模式等。结果表明，珊瑚砂在准静态和动态压缩载荷下的应力-应变曲线和变形模式存在明显差异。通过对珊瑚砂的变形过程和颗粒破碎的显式模拟和定量分析，可以充分了解不同载荷条件下珊瑚砂的颗粒响应和破坏机制。证明了所开发的3D细观尺度模型在模拟和分析砂粒系统力学性质方面具有显著的可行性。

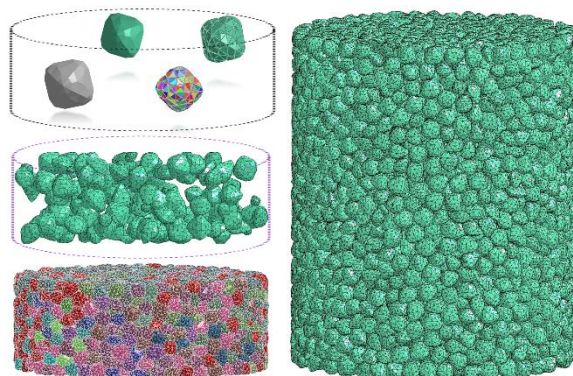


Fig. 1 考虑珊瑚砂颗粒随机细观特性的3D细观模型

关键词：珊瑚砂；细观模拟；三维细观模型；力学性能；颗粒系统

碳纳米管生长对称性破缺及其记忆性

柴琳, 魏飞*

清华大学化工系, 北京市海淀区清华大学, 100084

*Email: wf-dce@tsinghua.edu.cn

对称性是几乎所有科学领域的主题, 理解对称性破缺机制仍具有挑战性。与破坏进化对称性的突变类似, 材料中的缺陷为研究对称性破缺机制提供了全新角度。以超长碳纳米管中的单壁碳纳米管为研究对象, 采用四维扫描透射电子显微镜(4D-STEM)及综合光谱技术研究了碳纳米管进化生长系统中同代变异的对称性和跨代变异的对称性破缺特征。通过多种表征技术检测到不同构象的五边形-七边形对引起的变异, 这些变异在生长过程中充当时间标记, 缩短了单壁碳纳米管的寿命。从手性为 (n, m) 到 $(n \pm i, m \mp i)$ 单壁碳纳米管的同代变异中观察到五元环与七元环不同出现顺序的对称分布, 而这种对称性在跨代突变中被破坏。在同一根单壁碳纳米管上可发生多次同代变异, 手性指数 i 和 $-i$ 有规律地振荡, 直到停止生长。这种类型和效应以记忆的形式保留下来, 在后续生长过程中对单壁碳纳米管进行编码, 导致每次变异后长度缩短[1]。此外, 通过4D-STEM的原子尺度成像, 发现同代变异的记忆保留不仅存在于长程尺度(几微米), 而且在短程(~ 2 纳米)也有明显体现。更进一步, 基于4D-STEM得到的投影电荷密度分布, 观察到记忆性可能与手性无关, 而与同代和跨代变异中五元环和七元环上电荷分布特性有关。研究结果为更深入地理解碳纳米管中变异的对称性破缺和记忆保留提供了全新维度, 同时为后续的可控合成提供了指导。

关键词: 碳纳米管; 化学气相沉积; 拓扑缺陷; 变异; 记忆性

参考文献

[1] L. Chai, F. Wei*, et al., J. Am. Chem. Soc., 4c10400 (2024).

基于量子维数调控的纳米碳基混合型超级电容电极的设计制备与性能研究

李荣花,陆有朋,刘彩珠,王瑞琪,张慧,吴玉花*,白红存*

宁夏大学 省部共建煤炭高效利用与绿色化工国家重点实验室 化学化工学院, 银川, 750021

E-mail: yuhua236@126.com

hongcunbai@nxu.edu.cn

摘要: 超级电容器作为一种新型储能器件,因其高功率密度、长循环寿命和快速充放电等优点,在便携式电子设备、电动汽车和可再生能源等领域展现出巨大的应用潜力。碳材料作为超级电容器电极的核心载体,不仅是双电层电容的物理基础,更是赝电容材料功能化的关键平台。其高比表面积、导电性及化学稳定性为电极提供了高效的能量存储与传输能力,而多维复合设计进一步拓展了性能边界。

本研究创新性地采用维度梯度设计策略,选取零维碳纳米洋葱、一维碳纳米管和二维氧化石墨烯作为赝电容材料生长的基底,通过简单的均相水热法在基底上引入氧化镍,研究低维材料电子结构的量子限域和维度效应对电极材料电化学储能特性的影响机制。采用 XRD、TEM、XPS、TGA、BET 和 Raman 光谱等对复合材料进行了表征。并对这些复合材料的电化学性能进行了研究。结果表明,与原始碳材料相比,复合体系相较于原始碳基体均展现出显著的电容增强效应:其中 NiO@f-CNOs 复合电极的比电容达到 126 F g^{-1} ,较基材 f-CNOs 提升 91.4%; NiO@f-CNTs 表现出 236 F g^{-1} 的比电容,较 f-CNTs 基底提升 136%; 而 NiO@rGO 复合材料的电容增长率最为显著,其 136 F g^{-1} 的比电容较原始 GO 材料实现 4.41 倍的增长(增幅达 441%)。三种复合材料均表现出优异的电化学性能。进一步探索在低维度、小尺度的不同碳表面生长 NiO 对对超级电容器电容性能的影响。本研究为设计和开发高性能超级电容器电极材料提供了新的思路和理论依据。

关键词: 碳纳米洋葱; 碳纳米管; 氧化石墨烯; 维度效应; 超级电容器

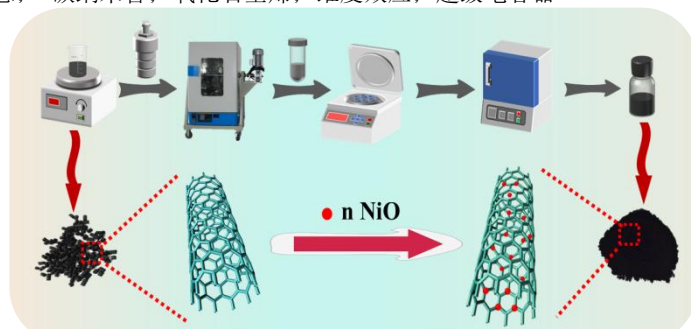


Fig. 1. Schematic diagram of stepwise synthesis of NiO@Carbon composites by homogeneous hydrothermal method.

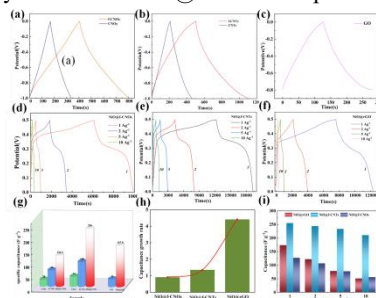


Fig. 2. (a-c) GCD (1 A/g), (d-f) GCD (1, 2, 5, 10 A/g), (g-i) specific capacitance

数据驱动的新型低碳水泥熟料定向设计研究

翟牧楠¹，张文生^{1,*}，叶家元¹，任雪红¹

¹ 中国建筑材料科学研究总院有限公司，北京市朝阳区管庄东里1号，100024

*Email: wensheng_zhang01@163.com

摘要正文：作为碳减排技术发展的方向之一，创新与发展低碳水泥熟料体系是水泥工业节能减排的重要路径。然而，现有低钙低碳水泥熟料的研发模式已无法满足日益增长的碳减排需求，因此高效、准确地设计兼具低碳排放与高性能的新型低碳水泥熟料成为亟待解决的问题。本研究通过自建高异质性熟料体系数据集，采用自训练策略与DNN相结合的模型框架，提出了一种定向设计新型低碳水泥熟料的SDACE模型。该模型通过自训练策略对数据集进行增广，实现了模型在小数据集条件下定向设计熟料体系的泛化性能。通过选用熟料矿相为单元基础要素，利用自研的水泥基材料高通量制备与智能化工作站随机制备四元、三元组分的熟料样品，构建专用数据集。以碳排放量、28d抗压强度为约束条件，定向设计新型低碳水泥熟料。结果表明，采用自训练策略对数据集进行增广后，数据量增大将增加DNN的神经元数及其层，模型可以更好地探明熟料组成-性能间的构效关系，现已探明38个新型熟料体系，72个组成配比。其中，39组配比的28d抗压强度大于42.5MPa，20组配比的28d抗压强度大于52.5MPa。该方法汲取了高通量制备与深度学习的技术优势，为新型低碳水泥熟料设计和性能优化提供了可行的技术路径。

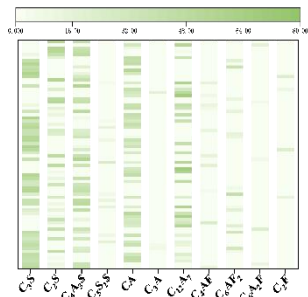


Fig.1 New low-carbon cement clinker composition based on carbon emissions and compressive strength

关键词：新型水泥熟料；深度学习；定向设计；高通量制备

其他活动

超细粉煤灰空心陶粒孔隙调控机制及其 复合相变材料循环稳定性研究

齐永乐¹, 乔志刚², 王飞³, 沟玉瑾⁴, 王雪宁⁵, 曹泰宇⁶, 郑伍魁^{1,*}, 李辉^{2,*}

西安建筑科技大学材料科学与工程学院, 陕西, 西安, 710055

^{1,*}zheng.wukui@xauat.edu.cn

^{2,*}sunshine_lihui@126.com

摘要正文: 粉煤灰空心陶粒因其独特的大空腔结构可以作为载体使用, 如与石蜡相变材料复合, 可用于建筑材料节能领域。本研究通过超细粉煤灰与一级粉煤灰的梯度复配, 揭示了超细颗粒在陶粒烧结过程中的孔隙定向调控作用。研究结果表明超细粉煤灰掺量为 20%且烧结温度为 1175°C时, 陶粒壳层形成分布跨度达 3 个数量级的梯度孔道结构, 实现“微孔吸附-介孔传质-大孔缓冲”的功能梯度匹配, 同时达到最佳的筒压强度 7.73 MPa。低于 1175°C时粉煤灰颗粒反应不充分, 高于则致密化加剧, 均会与陶粒内部大空腔的共同作用下影响其本身的结构强度。在制备的空心陶粒-石蜡二元复合相变材料中, 梯度孔道结构下的二元复合相变材料在 50 次充、放热循环中, 泄漏现象在第 5 次循环中不再出现, 此时的石蜡泄漏率最低为 2%。本研究提出的超细粉煤灰梯度复配策略为高性能相变储能材料开发提供了新范式。

关键词: 超细粉煤灰; 空心陶粒; 复合相变材料; 孔隙结构; 热循环

石粉堆积状态对免烧陶粒性能的影响

李洪强, 郑伍魁, 赵悦瑶, 王新颖, 孙金凤, 乔志刚, 李辉*

西安建筑科技大学材料与工程学院 西安 710055

摘 要: 花岗岩石粉是花岗岩石材加工过程中产生的切削废料, 严重污染环境且活性低下、颗粒细小, 难以作为建材直接使用。为了实现花岗岩石粉的高附加值利用, 本研究基于紧密堆积理论 (MAA 模型), 通过大掺量花岗岩石粉复合粉煤灰制备花岗岩石粉免烧陶粒, 研究免烧陶粒中原材料颗粒的堆积状态与胶凝活性对免烧陶粒性能的影响。研究表明, 应用最紧密堆积原理可以有效提高陶粒的强度, 原材料的堆积状态和活性共同影响陶粒强度, 最终制备出花岗岩石粉免烧陶粒强度均 >1.5 MPa, 其中以 65% 的花岗岩石粉、25% 的胶凝活性 77.5% I 级粉煤灰和 10% 的 P.O 42.5 水泥为原料, 制备出堆积密度 940 kg/m^3 , 筒压强度 5.76 MPa 的花岗岩石粉免烧陶粒。使用不同胶凝活性的粉煤灰发现, 最紧密堆积状态的陶粒强度是不紧密堆积状态陶粒强度的 2 倍, 分析堆积状态和原材料胶凝活性对花岗岩石粉免烧陶粒强度的影响, 得到免烧陶粒筒压强度模型, 并为今后其他低活性渣粉免烧陶粒的应用提供科学依据。

关键词: MAA 模型, 花岗岩石粉, 免烧陶粒, 筒压强度模型

煤气化细渣分质转化与功能定制：双功能气凝胶 及碳/沸石复合材料的设计与应用

刘彩珠，李荣花，朱治衡，王珏，吴玉花*，张慧，白红存*

宁夏大学省部共建煤炭高效利用与绿色化工国家重点实验室，化学化工学院，银川，750021

E-mail: cz15935173704@126.com

摘要：本研究针对煤气化细渣资源化利用难题，基于其高硅铝含量与残碳特性，创新提出“分质转化-功能定制”一体化技术体系。以宁夏宁东GSP气化细渣为原料，通过酸浸-煅烧-碱溶协同工艺实现碳硅组分的定向分离与功能重构：酸浸过程有效溶出金属杂质，煅烧调控矿物晶型转变，碱溶选择性提取硅铝组分形成硅源前驱体。硅源经溶胶-凝胶法可控制备亲/疏水双功能SiO₂气凝胶，残碳基质经原位转化合成碳/NaX型沸石复合材料。通过调节煅烧碱碳比（0.5-1.5）与凝胶pH值（4.5-9.0），实现气凝胶比表面积（552-940 m²/g）和最可几孔径（1-12 nm）的精准调控。并通过3D打印技术将疏水性SiO₂气凝胶与聚乙烯醇复合，构建具有分级孔道的轻质隔热材料。研究表明，6 nm孔径的亲水性气凝胶对盐酸四环素吸附动力学最优，而最大比表面积样品通过表面羟基形成的多重氢键网络与静电协同作用，实现90%的污染物去除率。碳/NaX型沸石复合材料对盐酸四环素的吸附量可达150 mg/g，去除率可达97%。本工作创新性实现了煤气化渣“分质转化-功能定制”一体化利用：硅源制备双功能气凝胶（亲水/疏水），残渣合成碳/沸石复合材料，形成“吸附-隔热”协同技术体系。全流程资源化率>90%，3D打印材料附加值大大提升，为煤基固废资源化提供了“组分解离-结构重构-功能集成”的全链条解决方案，具有显著的环境效益和工程应用价值。

关键词：煤气化细渣；分质转化；SiO₂气凝胶；3D打印；碳/沸石复合材料

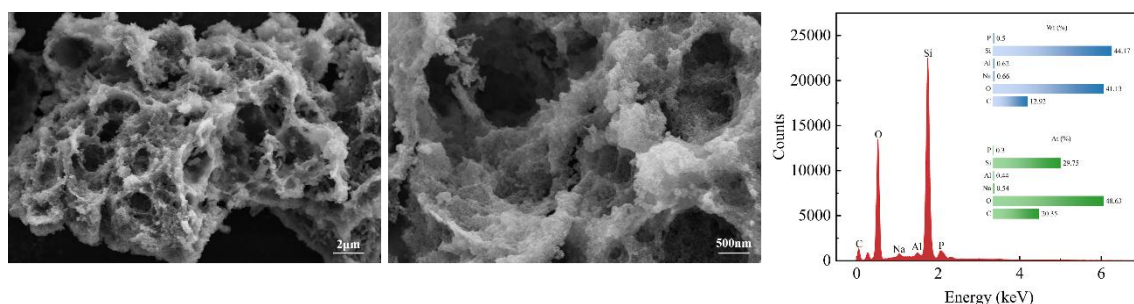


Fig. 1 SEM image and EDS spectrum of SiO₂ aerogel

墙报摘要

溶剂/声波耦合调控超长碳纳米管界面非共价作用

田宇轩¹, 岳鸿杰¹, 柴琳¹, 竺俞康¹, 陈思博¹, 张晨曦^{1,2}, 陈晓^{1,2}, 魏飞^{1,2,*}

¹清华大学化学工程系, 北京市 海淀区, 100084

²鄂尔多斯实验室, 内蒙古自治区 鄂尔多斯市, 017000

*Email: wf-dce@tsinghua.edu.cn

摘要正文: 超长碳纳米管的空间排布严重限制其力学强度, 其中碳纳米管间相互作用调控是关键因素。本研究设计了一种通过溶剂分散与声波振动耦合调控超长碳纳米管界面结构的策略, 实现了对碳纳米管间相互作用的有效调控。通过小分子溶剂与超长碳纳米管界面处的非共价作用重构, 显著降低了碳纳米管间的作用强度。借助声波振动作用, 进一步提升了溶剂分子在界面处的传质效率, 有效增强了超长碳纳米管界面非共价作用分布的均匀性, 从而优化界面稳定性, 有利于超长碳纳米管空间排布调控。本研究解析了溶剂分散与声波振动对界面非共价作用的协同调控机制, 为超长碳纳米管束阵列调控技术提供了重要理论依据, 推动超长碳纳米管力学强度实现新突破。

关键词: 超长碳纳米管; 界面结构; 非共价相互作用; 管束阵列; 力学性能

参考文献

- [1] Y. B. Bai, Fei Wei*, et al. Super-durable ultralong carbon nanotubes. *Science* 2020, 369: 1104-1106.
- [2] V. A. Davis, M. Pasquali*, et al. True solutions of single-walled carbon nanotubes for assembly into macroscopic materials. *Nat. Nanotech.* 2009, 4: 830-834.
- [3] Y. F. Guo, J. Kong*, et al. Soft-lock drawing of super-aligned carbon nanotube bundles for nanometre electrical contacts. *Nat. Nanotech.* 2022, 17: 278-284.
- [4] X. S. Zhang, J. Zhang*, et al. Carbon nanotube fibers with dynamic strength up to 14 GPa. *Science* 2024, 384: 1318-1323.

第十三分论坛

软物质与软材料交叉前沿论坛

邀请报告

翩翩起舞的光热气泡和自举升高的过冷液滴

邓道盛

复旦大学航空航天系，上海，200433

*Email: dsdeng@fudan.edu.cn

软物质（包括微纳颗粒、液滴、气泡及活性物质）在材料科学和化工能源等领域展现出广阔的应用前景。软物质界面的本质源于跨尺度效应与多参数耦合作用，涉及众多复杂的物理和化学过程，例如传热、相变、流动、液固耦合以及界面稳定性问题，

这些过程中蕴含着丰富而有趣的物理现象。本报告将重点介绍两项案例研究：在第一个案例中，近红外激光照射纯液体时，光热效应、界面流（热马拉高尼流动）和体相流（浮力流、驻点流）的协同作用形成了多模态“翩翩起舞”的光热气泡。第二个案例涉及过冷的水-乙醇多组分液滴，其中乙醇浓度在凝固前沿的局部富集触发了溶质马拉高尼流，实现了能够克服重力的“自举提升”现象。这些研究结果不仅揭示了界面流体力学的众多有趣现象，也为相关应用提供了技术支持。

参考文献

- [1] M. Hu, F. Wang*, Y. Q. Li, L. Chen, W. N. Wu, P. Huo, **Daosheng Deng***, 3D periodic orbiting of a photothermal bubble, *Phys. Rev. Lett.* 134, 104004 (2025).
- [2] M. Hu, Y. Q. Li, L. Chen, W. N. Wu, P. Huo, X. Gu, F. Wang*, **Daosheng Deng***, A hovering bubble with a spontaneous horizontal oscillation, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 121, e2413880121 (2024).
- [3] F. Wang, L. Chen, Y. Q. Li, P. Huo, X. Gu, M. Hu, **Daosheng Deng***, Self-lifting droplet driven by the solidification-induced solutal Marangoni flow, *Phys. Rev. Lett.* 132, 014002 (2024).
- [4] M. Hu*, F. Wang, L. Chen, P. Huo, Y. Q. Li, G. Xi, K. L. Chong, **Daosheng Deng***, Nearinfrared-laser-navigated dancing bubble within water via a thermally conductive interface, *Nature Communications* 13, 5749 (2022).

基于类河湾截面的流体操控及其在细胞富集和分离中的应用

摘要：针对当前细胞富集和分离技术严重滞后于实际应用需求，尤其是物理尺寸依赖性的可控富集和分离已成为制约其发展的关键瓶颈，本项目紧密围绕生物医药领域亟待攻克的核心科学难题，在国际上率先系统地开展了基于类河湾截面的循环肿瘤细胞物理尺寸依赖性可控富集和分离研究，取得了一系列具有显著创新性的研究成果。成功建立并发展了基于类河湾截面的循环肿瘤细胞富集和分离新方法；实现了利用物理尺寸差异进行细胞的惯性聚焦富集和分离；进一步发展了类河湾截面级联微流控芯片，实现了高通量、高效的细胞富集和分离。这些研究成果为推动细胞富集和分离技术的进步及其在生物医药领域的应用提供了有力支持。

自然条件下碳基界面离子凝聚与有序组装

张磊*

西安交通大学，陕西省西安市咸宁西路 28 号，710049

²工作单位，地址，邮编

*Email:zhangleio@xjtu.edu.cn

摘要正文：利用冷冻电子显微学、第一性原理计算、电子衍射等方法，我们在还原氧化石墨烯等碳基膜上直接观察到了常温常压水环境下基于阳离子- π 相互作用形成的二维CaCl、Na₂Cl等离子凝聚态物质，其中钙、钠等离子表现出反常化学价态行为。该类物质普遍具有室温铁磁性、金属性与压电性共存等新奇磁学和电学性质，可被制备成为原子尺度电子器件，可在生命物质中诱导产生明显的磁响应行为。考虑到金属阳离子和碳结构在地球上的广泛分布，结合目前包含锂、镁、锌、铜、铁等典型元素的反常化学计量比物质的持续验证发现，该类物质应广泛存在并在自然演化和生物进化中扮演基础作用，相关研究的深入探索有望为揭示自然界各种复杂现象的底层机制提供新维度，为物理、生物、医学、化学、材料等学科的交叉融合提供新领域。

关键词：反常化学计量比，阳离子- π 相互作用，室温铁磁性，冷冻电子显微学

参考文献

- [1] L. Zhang et al., Novel 2D CaCl crystals with metallicity, room-temperature ferromagnetism, heterojunction, piezoelectricity-like property, and monovalent calcium ions, *National Science Review* 2021, 8: nwaa274.
- [2] G. Shi et al., Two-dimensional Na-Cl crystals of unconventional stoichiometries on graphene surface from dilute solution at ambient conditions *Nature Chemistry* 2018, 10: 776-779.
- [3] Y. Zhao et al., Graphitic-like Hexagonal Phase of Alkali Halides in Quasi-Two-Dimensional Confined Space under Ambient Conditions, *ACS Nano* 2022, 16: 2046-2053.
- [4] Y. Yi et al., Two-dimensional anion-rich NaCl₂ crystal under ambient conditions, *Nature Communications* 2025, 16: 464.

基于离子调控策略下金属硫化物电磁波吸收性能研究

刘骁龙^{1,*}

¹ 西安电子科技大学, 陕西省西安市太白南路2号, 710071

*Email: liujiaolong@xidian.edu.cn

摘要正文: 过渡金属硫化物因其成本低廉、制备简单、合适的电磁参数和优异的物化性质而广泛应用于电磁污染防治及军事目标的雷达隐身。然而由于很难同时满足良好的阻抗匹配和强的电磁衰减能力, 常见的金属硫化物很难在较小的涂层厚度下获得宽频吸收特性, 尤其是低/中频。目前国内外对于金属硫化物的研究主要集中在复合策略下的异质电/磁材料的引入, 缺乏对材料组分、界面和缺陷水平的系统调控和研究, 大大限制了材料电磁参数的调控及其吸波性能的提高^[1]。因此如何建立起这些因素与材料电磁参数的对应关系, 进而揭示内在的微观电磁物理损耗机制将显得十分重要但充满挑战。针对以上问题, 本工作提出了多种离子调控策略(包括选择性离子交换策略、硫化增强策略、金属阳离子竞争反应策略、氟阴离子调控工程和阴离子掺杂诱导的空位工程^[2-7]等)来设计和优化材料的组分、界面、缺陷水平及其吸波性能, 为制备高性能、宽频带吸收的金属硫化物吸波材料提供了新的思路。

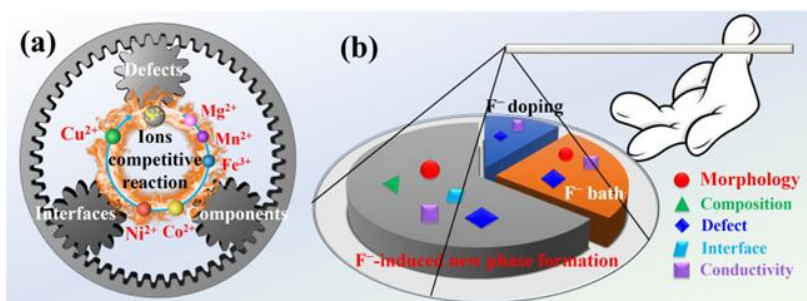


Fig. 1 (a) A ions competitive reaction strategy and (b) F⁻ regulation engineering toward metal sulfides for tailoring electromagnetic wave absorption

关键词: 过渡金属硫化物; 离子调控; 组分; 缺陷; 电磁波吸收

参考文献

- [1] J. Liu, H. Liang, B. Wei, J. Yun, L. Zhang, H. Wu, "Matryoshka doll" heterostructures induce electromagnetic parameters fluctuation to tailor electromagnetic wave absorption, *Small Struct.* 2023, 4: 2200379.
- [2] J. Liu, Z. Liu, J. Ren, H. bian, X. Zhou, M. Yin, S. Li, P. Zhang, D. Qu, B. Wei, H. Wu, Selective Ions Exchange Reactions Endow Defective Heterovalent Copper-Based Selenides With Enhanced Dielectric Polarization Response. *Adv. Funct. Mater.* 2025, 2420239. <https://doi.org/10.1002/adfm.202420239>
- [3] J. Liu, S. Zhang, D. Qu, X. Zhou, M. Yin, C. Wang, X. Zhang, S. Li, P. Zhang, Y. Zhou, K. Tao, M. Li, B. Wei, H. Wu, M. Li, B. Wei, H. Wu, Defects-Rich Heterostructures Trigger Strong Polarization Coupling in Sulfides/Carbon Composites with Robust Electromagnetic Wave Absorption, *Nano-Micro Lett.* 2025, 17: 24.
- [4] J. Liu, L. Zhang, H. Wu, D. Zang, Boosted electromagnetic wave absorption performance from vacancies, defects and interfaces engineering in Co(OH)F/Zn_{0.76}Co_{0.24}S/ Co₃S₄ composite, *Chem. Eng. J.* 2021, 411: 128601.
- [5] J. Liu, L. Zhang, D. Zang, H. Wu, A competitive reaction strategy toward binary metal sulfides for tailoring electromagnetic wave absorption, *Adv. Funct. Mater.* 2021, 31: 2105018.
- [6] J. Liu, L. Zhang, H. Wu, Enhancing the low/middle-frequency electromagnetic wave absorption of metal sulfides through F⁻ regulation engineering, *Adv. Funct. Mater.* 2021, 32: 2110496.
- [7] J. Liu, L. Zhang, H. Wu, Anion-doping-induced vacancy engineering of cobalt sulfoselenide for boosting electromagnetic wave absorption, *Adv. Funct. Mater.* 2022, 32: 2200544.

基于软材料的即时检测平台及应用

李菲^{1,*}, 牛纪成²

¹ 西安交通大学生命科学与技术学院, 西安 710049

² 西安交通大学仿生工程与生物力学研究所, 西安 710049

*Email: feili@mail.xjtu.edu.cn

摘要正文: 液体橡皮泥作为一种由疏水性颗粒包裹液体的新材料, 具有类似固体橡皮泥的可塑性以及液体的开放性和透气性, 是制备开放性流体芯片的理想材料。我们的研究以液体橡皮泥为基底材料, 发展了手动切割、磁控机械力切割和光热效应切割的三种液体橡皮泥塑形方法, 实现了系列具有开放性液体橡皮泥流体芯片的制备: 联合等电聚焦、比色分析方法和试纸检测平台等, 展示了液体橡皮泥流体芯片作为生化分析平台、化学合成平台、药物筛选平台和细胞培养平台等的应用。



Fig. 1 Development of liquid plasticine-based POCT platforms

关键词: 即时检测; 液体橡皮泥; 激光切水; 等电聚焦

参考文献

- [1] J. C. Niu, W. J. Liu, J. X. Z. Li, X. L. Pang, Y. L. Liu, C. Zhang, K. Y. Yue, Y. L. Zhou, F. Xu, X. G. Li*, F. Li*, Machining water through laser cutting of water in liquid pancakes, *Nat. Commun.* 2023, 14: 3853
- [2] J. C. Niu, Z. H. Bao, Z. N. Wei, J. X. Z. Li, B. Gao, X. F. Jiang*, F. Li*, A Three-Dimensional Paper-Based Isoelectric Focusing Device for Direct Analysis of Proteins in Physiological Samples, *Anal. Chem.*, 2021, 93(8): 3959–3967
- [3] Y. L. Zhou[#], J. C. Niu[#], Y. Zhou, F. Li*, Liquid Plasticine-Based Electrokinetic Enrichment of Proteins, *ChemistryOpen*, 2023, 12: e202200259.

亚纳米带电管道的流动输运与非平衡统计研究

谢彦博^{1,*}, 石得利², 张书颂², 鲁嘉嘉² 栾澍勇¹

¹ 西北工业大学 航空学院、极端力学研究院, 西安, 710072

² 西北工业大学 物理科学与技术学院, 西安, 710072

* Corresponding author: ybxie@nwpu.edu.cn

摘要正文: 在基于双电层(EDL)概念的泊松-能斯特-普朗克方程失效的情况下, 关于埃尺度(Angstrom scale)的流动和传输现象存在知识空白。二维材料的发展为研究极小尺度下的流动和传输现象提供了机会。然而, 对于大多数介电材料, 例如生物离子通道, 由于功能基团上的质子或带电物质的解离或吸附, 其表面从而获得电荷, 这与金属类石墨烯和碳纳米管表面的均匀电荷分布不同。我们的研究首先聚焦于纳米尺度下表面电荷与液固滑移之间的相互作用, 这对能量转换至关重要[1]。分子动力学模拟和理论模型表明, 均匀的表面电荷分布能够实现有利的滑移-电荷关系。相比之下, 在非均匀带电表面上, 由于被捕获在表面上的反离子引起的粘性阻力, 滑移受到强烈影响。因此, 受表面电荷影响的电动现象仍不明确, 需要在受限条件下进行研究。

我们通过实验在一维潜径迹埃通道中观察到了离子库仑阻塞现象, 这些通道由于羧基的存在而呈现非均匀带电[2]。与之前的研究不同, 我们将离子库仑阻塞归因于反离子与表面电荷之间增强的库仑相互作用, 因为阻塞效应强烈依赖于溶液 pH 值, 而 pH 值会影响表面电荷密度。在低电压下, 通道是非导电的, 被束缚在表面上的阳离子阻塞; 然而, 随着电压的增加, 由于束缚离子的释放, 通道变为导电状态。表面电荷密度的增加逐渐使电导趋于欧姆性。我们的分子动力学模拟支持了实验中观察到的现象, 并利用一维 Kramer's 逃逸理论框架对离子传输进行了合理解释, 该框架描述了非线性离子电流以及表面电荷密度对 I-V 曲线的影响[3]。

作为纳米尺度下的重要电动现象, 流动电流(streaming current)是一种更直接的现象, 因为它是由反离子脱附产生的。我们最新的研究发现, 在使用潜径迹膜的埃通道中, 流动电导变得依赖于压力[4]。只有当施加的压力超过阈值时, 流动电流才会出现, 这与现有知识中认为流动电流为常数的观点不一致。随着通道尺寸的增加, 压力依赖的流动电导现象逐渐减弱, 并在平均通道半径超过~2 nm 时消失, 进入恒定的流动电导状态。我们怀疑压力依赖的流动电导与非均匀表面电荷的影响相关, 因为即使在埃尺度通道中, 这种现象也很少被发现。我们的分子动力学模拟工作通过非平衡统计和马尔可夫链随机模型, 为非均匀带电通道中流动电流和水流通量的非线性响应建立了理论框架, 与实验中的现象相匹配[5]。

关键词: 限域效应、电动效应、电流体动力学

参考文献

- [1] Xie Y, Fu L, Niehaus T, et al. Physical review letters, 2020, 125(1): 014501.
- [2] Xie Y, Shi D, Wang W, et al. Nanoscale, 2023, 15(21): 9560-9566.
- [3] Zhang S, Fu L, Xie Y. The Journal of Physical Chemistry B, 2024, 128(38): 9206-9212.
- [4] Lu J, Luan S, Guo S, et al. arXiv preprint arXiv:2501.00238, 2024.
- [5] Luan S, Lu J, Xie Y. Molecular streaming in a charged Angstrom channel - a toy model. (under preparation)

电动力湍流微反应器及其在颗粒合成中的应用

韩靚颖¹, 朱月强¹, 庞晋安¹, 王雪靖^{2,*}, 马生华¹, 韩晓军^{3,*}, 王凯歌¹, 赵佳^{1,*}

¹ 西北大学, 光子学与光子技术研究所, 西部能源光子技术与功能材料省部共建国家重点实验室, 国家级光电技术与纳米功能材料国际联合研究中心, 陕西省光电子技术重点实验室, 西安, 710127

² 西北工业大学, 生命学院, 生物与催化交叉研究中心, 西安, 710129

³ 哈尔滨工业大学, 化工与化学学院, 城乡水资源与水环境全国重点实验室, 哈尔滨, 150090

*Email: wangxuejing@nwpu.edu.cn; hanxiaojun@hit.edu.cn; zwbayern@nwu.edu.cn

摘要正文: 颗粒的可控合成是软物质物理、化学工程与材料合成领域的重要课题。然而, 传统化工过程中缓慢的流动混合过程制约了反应合成过程的可控性。我们之前的研究中, 通过电场驱动的方式, 首次在微流体混合器内实现了电动力湍流 (Electrokinetic turbulence) [1], 展现出与传统高雷诺数湍流相似的统计特性, 证明在微流体内可以实现极为快速的混合, 为可控合成提供了可能。本研究通过开发高效能的电动力湍流微混合器, 实现了微流体的快速混合。进而, 基于该电动力湍流微混合器, 分别对无机和有机材料颗粒合成进行了实验研究。研究结果表明, 电动力湍流微反应器不仅可以快速实现纳米尺度的SiO₂颗粒的合成, 也可以高效实现微米尺度多腔磷脂囊泡的合成[2]。同时, 研究发现, 相较于传统湍流流场中的反应与合成过程, 电动力湍流流场中的电场与流体、反应物、中间体以及最终产物间都存在直接或间接的相互作用, 导致反应与合成过程具有显著的复杂性与更多的阶段性, 难以通过传统湍流反应理论进行预测。该研究不仅为颗粒合成技术提供了一种可行的方法, 有望应用于精细化工、制药等领域, 也对揭示复杂系统中软物质与物理场相互作用具有重要的科学意义。

关键词: 电动力湍流; 微反应器; SiO₂纳米颗粒; 磷脂囊泡

参考文献

[1] G. Wang, F. Yang, and W. Zhao. There can be turbulence in microfluidics at low Reynolds number. *Lab on a Chip*, 2014. **14(8): 1452 - 1458.**

[2] L. Han, Y. Zhu, J. a. Pang, X. Wang, S. Ma, X. Han, K. Wang, and W. Zhao. Synthesis of phospholipid vesicles by an electrokinetic turbulent microreactor. *Lab on a Chip*, 2025.

口头报告

细菌的游动姿态研究

冯佳*, 罗昊, 刘亚楠, 经光银

西北大学, 物理学院, 西安, 710127

*Email: fengwei@nwu.edu.cn

摘要正文: 姿态是物体优化能量利用、维持平衡并与环境互动的关键体现。鸟类通过滑翔减少空气阻力, 鱼类凭借流线型游姿提升游泳效率, 昆虫依靠独特站姿确保微小体型的稳定性。然而, 在微尺度下, 因为低雷诺数、布朗运动和表面张力等物理约束显著限制移动能力, 运动面临严峻挑战。所幸的是, 细菌作为地球上最早的生命形式之一, 巧妙地利用鞭毛实现了游动, 展现出直行-转向、摇摆旋进等多种灵活策略, 这些姿态不仅体现了细菌的适应能力, 也为微型机器的仿生设计提供了重要范本。近期, 我们发现了一种全新的细菌游动姿态: 胞体绕短轴旋转并实现高速前行, 这一现象超出了现有理论的预测。通过单细菌三维跟踪实验技术, 我们探讨了为何这一姿态此前未被观察到, 并进一步证实了细菌在三维空间中的灵活切换姿态。这一发现深化了对细菌运动规律的理解, 同时为仿生微型机器的设计开辟了新的可能性。

关键词: 鞭毛细菌; 游动姿态

油气驱替中改善贾敏效应的临界驱替参数研究

杨晓野¹, 姜璐¹, 曹功奇¹, 贺庆阳², 刘建林^{1,*}

¹中国石油大学（华东），山东青岛，266580

²中国科学院大学，北京，100049

*Email: liujianlin@upc.edu.cn

摘要正文：随着石油资源的不断开发，剩余油的分布和驱替已成为提高采收率的关键问题。在储层中，由于毛细力、粘滞力等流体力作用，形成了各种形式的剩余油，从而产生了贾敏效应，阻碍了驱油过程。本研究通过实验和理论模型相结合的方法，探讨了十二烷基硫酸钠（SDS）溶液对油滴在变截面毛细管中贾敏效应的影响。实验中，我们观察了在不同流速下，水驱替和 SDS 溶液驱替过程中油滴的形态变化。水驱替结果显示，在较低流速下，油滴会出现钉扎行为；而在较高流速下，油滴则会出现脱钉扎和破裂行为。为了深入分析这一现象，我们构建了一个力学模型，用于描述毛细管中不同截面下贾敏效应的演变过程。通过该模型，我们成功预测了油滴脱钉扎和破裂的两个临界流速，并与实验结果高度吻合。此外，研究还发现，与水相比，SDS 溶液中的油滴更容易通过整个毛细管，且随着 SDS 浓度的增加，油滴通过孔喉的时间显著缩短。基于此，我们还建立了确定总压差和最小施加压差的理论模型。另一方面，我们还考虑了油滴的重力影响，开展了 SDS 溶液对油滴在倾斜的变截面毛细管中贾敏效应的研究。水驱替结果表明，临界速度随倾角的减小而减小，并且在 SDS 溶液驱替条件下，油滴完全通过孔喉所需时间随着倾斜角度的减小和 SDS 浓度的增加而缩短。这些发现提供了对驱油机理的深入了解，有助于实现更高的原油采收率。

关键词：贾敏效应；表面活性剂；临界水速；临界压差

红细胞介导下的活性颗粒运动

西北大学 罗昊

摘要：细菌作为典型的自驱动颗粒，其运动机理的研究不仅在生物学、医学领域具有重要意义，也为微游体机器的设计提供了启示。现有研究大多聚焦于经典流体环境，而在真实生物流体中的研究相对较少，这主要归因于生物流体的复杂性。以血液为例，其内血细胞的高度可变形性、复杂的表面成分、极端的空间限制以及多样的流动状态，都对揭示细菌在该系统中的运动与迁移机制构成了新的挑战。基于此，本报告围绕血液系统中细菌的运动行为展开。首先，在静态流体条件下，我们探讨了细菌接触红细胞独特双凹型结构后的捕获与逃逸过程，实验揭示了细菌被红细胞捕获后呈现的三种典型逃逸模式，为理解其逃逸机制提供了新视角。其次，我们利用微流控技术构建了模拟毛细血管条件下的单列红细胞流，研究了流动状态下红细胞间涡流对细菌动态挟持效应的影响，从而进一步阐明了红细胞在血流中对细菌运动行为的调控作用。综合以上研究，我们期望本报告能为深入理解自驱动细菌与红细胞之间复杂相互作用机制提供参考。

液滴撞击热表面飞溅动力学行为

陶然^{1*}, 陈龙泉¹, 王钻开²

¹电子科技大学物理学院, 成都 611731

²香港理工大学机械工程系, 香港 999077

*Email: taoran@uestc.edu.cn

摘要正文: 液滴撞击固体表面后发生飞溅的现象广泛存在于自然界和工业过程中。本文系统探究了液滴撞击加热基底的飞溅动力学过程。研究表明: 在光滑表面上, 基底温度升高会显著抑制液滴飞溅; 而在粗糙表面上, 飞溅行为几乎不受基底温度影响。该现象可归因于气体在不同粗糙度表面的逃逸能力存在差异, 从而导致不同的流动失稳机制。通过分析开尔文-亥姆霍兹不稳定性对液滴飞溅的影响, 本文量化了空气逃逸过程与流动不稳定性发展过程的竞争机制, 进而界定了开尔文-亥姆霍兹不稳定性的适用范围, 并建立了飞溅临界速度随温度变化的理论预测模型。本文不仅加深了人们对高温或复杂表面条件下液滴飞溅动力学的理解, 还为工业应用中的液滴动力学调控提供了理论依据。

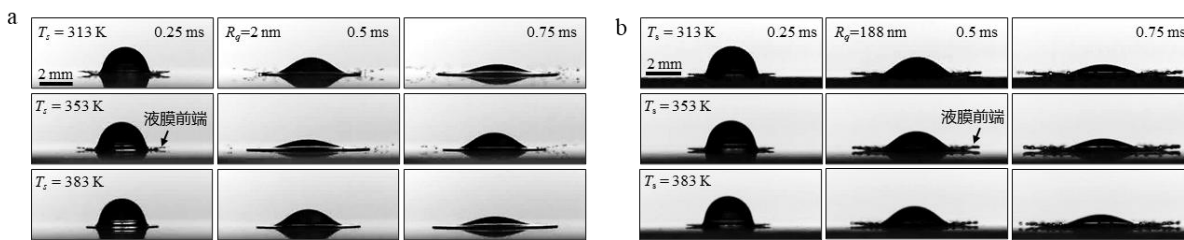


Fig. 1 (a-b) Snapshots of droplet splash dynamics with $We=518$ at different temperatures on (a) nanostructured surfaces ($R_q=188$ nm) and (b) smooth surfaces ($R_q=2.1$ nm).

关键词: 液滴动力学; 液滴飞溅; 界面流动

参考文献

- [1] R. Tao, C. Hao, B. Ji, F. Yu, X. Wang, J. Wang, P. Sun, Y. Jin, H. Gu, B. Li, S. Wang & Z. Wang. Surface Nanostructures Promote Droplet Splash on Hot Substrates. *Nano Lett.* 24(24), 7188 (2024).

固液界面水的相变

王春雷

报告摘要：界面上的水分子受到界面影响往往体现出不同于体相水的行为。我们发现固液界面水的相变行为对界面物理性质和生物功能有重要影响：1.我们预测这些水分子有序结构导致常温下固体表面上的“不完全浸润有序单层水”，即水滴与水层共存于固体表面，有助解决领域长期存在难题；2.生物分子利用界面水的结构实现控冰功能；3.界面水有序结构有特殊的太赫兹吸收峰，可精准调控固液物理性质。

参考文献

- [1] Zhang et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2025, 147, 5, 4411–4418
- [2] Q Zhang, C Wang et al., *The Innovation*, 2025
- [3] Z Zhu et al. *Nano Lett.* 24, 10, 3243–3248 (2024)
- [4] M Qu and C Wang et al. *Chem. Sci.* 13, 10546 (2022)
- [5] K Liu and C Wang et al. *PNAS*, 113, 14739 (2016)
- [6] C Wang and H Fang et al., *Phys. Rev. Lett.* 103, 137801 (2009)

乙醇蒸发驱动白酒液滴中的酯类自组装与颗粒的沉积

刘永明^{1,2,*}, 张智¹, 付浩然¹, 钟羊¹, 蔡璐¹, 袁思琪¹, 臧渡洋³

¹四川轻化工大学生物工程学院, 四川自贡, 643000

²三明学院教育与音乐学院, 福建三明, 365004

³西北工业大学物理科学与技术学院, 陕西西安, 710072

*Email: auliuym@mail.nwpu.edu.cn

摘要: 中国白酒通常具有相对较高的乙醇含量（52%或53%的酒精体积（ABV）），并具有强烈而浓郁的香味。当酒精度低于45%时，白酒会浑浊，风味会变得寡淡，但是这一现象尚未得到合理的解释。本研究采用液滴蒸发的方法来确定其潜在的机制。研究发现，酒精含量的降低（<45% ABV）触发了白酒中独特的长链脂肪酸乙酯在液滴内组装成尺寸从100 nm ~10 μm的颗粒。这些颗粒在内部流动的影响下，干燥后表现出白酒特有的咖啡环效应。有趣的是，这些颗粒包裹了水溶性或不溶性的风味化学物质，导致白酒的透明度和香气/风味急剧下降。本研究的结果为白酒的质量控制和白酒鉴别提供了新的思路。

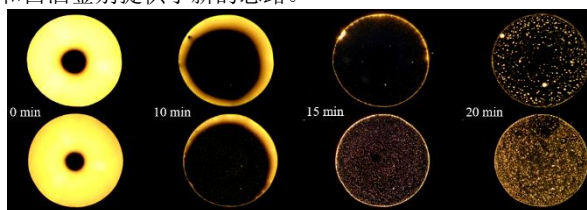


Fig. 1 Ethanol evaporation drives ester assembly and particle deposition in droplets of Chinese distilled liquors

关键词: 白酒; 颗粒; 沉积图案; 液滴蒸发

Ethanol Evaporation Drives Ester Assembly and Particle Deposition in Droplets of Chinese Distilled Liquors

Yongming Liu^{1,2,*}, Zhi Zhang¹, Haoran Fu¹, Yang Zhong¹, Lu Cai¹, Siqi Yuan¹, Duyang Zang³

¹ School of Biological Engineering, Sichuan University of Science & Engineering, Zigong Sichuan 643000

² School of Education and Music, Sanming University, Sanming Fujian 365004

³ School of Physical Science and Technology, Northwestern Polytechnical University, Xi'an Shaanxi, 710072

* auliuym@mail.nwpu.edu.cn

Chinese distilled liquor, known as *Baijiu*, typically has a relatively high ethanol content (52% or 53% alcohol by volume (ABV)) and is characterized by a powerful, heady scent. When its alcohol content is less than 45% ABV, *Baijiu* loses its flavor and becomes cloudy and tasteless; thus, it is relatively bland and thin. Since this phenomenon has not been reasonably explained, the aim of this study is to determine its underlying mechanism by examining the droplet evaporation. A 1.0 μL of droplets were applied to the substrate surface for evaporation. The results revealed that a reduction in the alcohol content (<45% ABV) triggered the self-assembly of unique long-chain fatty acid ethyl esters (LCFAEEs) into various nano- or microparticles with sizes ranging from 100 nm to 10 μm within the *Baijiu* droplets. These particles under the influence of internal flow and exhibit *Baijiu*-specific coffee-ring effects after drying. Interestingly, these particles encapsulated the water-soluble or insoluble flavor chemicals, resulting in the brightness and aroma/flavor of *Baijiu* decreased radically; this is the reason that a high alcohol content is needed in *Baijiu*. These findings offer new insights for the quality control of low-alcohol *Baijiu* and *Baijiu* identification.

Keywords: Chinese distilled liquor (*Baijiu*), esters, particles, deposition, drop evaporation

报告简介

微纳米颗粒裹覆在液体界面上形成的“颗粒筏（particle raft）”为一种新型的具有准二维结构的软物质（soft matter），具有诸多新奇的物理、化学和力学性质，因而在工程中有着广泛应用前景。作为一种散体物质，颗粒筏很难实现拉伸，但已有一些压缩的工作。本报告介绍了颗粒筏的各种新奇力学行为，包括拉伸、压缩、剪切、弯曲、裂缝闭合等。该过程涉及到毛细力与颗粒的相互作用、散体物质的变形、多场耦合等多方面的工作。这些研究对于颗粒筏在微流体器件设计、微型反应容器设计、矿物浮选、石油开采等领域的进一步应用提供了灵感。

凝结结霜中的凝结环

陈龙泉

电子科技大学物理学院学院，成都 611731

水滴在低温固体表面上结冰是一种常见的自然现象，在工程应用中可导致严重的技术、经济和安全问题，如降低电力传输效率和飞行器飞行安全。近年来学者对水滴结冰过程进行了大量研究，发现了许多新奇的物理现象。特别地，液-固相变释放的潜热会使水滴快速升温蒸发，所产生的水蒸气在极端环境下或先凝结后结霜（极度干燥环境）或直接凝华形成冰晶（极低气压环境），两者均可激发附近液滴结冰。本论文结合光学和红外成像技术，对凝结结霜过程中的液滴冻结现象进行了细致研究。研究表明，在足够疏水且导热系数较低的固体表面上，过冷水滴结冰会伴随着凝结环（由大量微液滴构成）的形成、生长和消失，其时间尺度跨越三个数量级。基于经典传热传质模型，我们建立了描述凝结环三个演化阶段的标度率，并进一步探讨了凝结环对霜层扩展的作用。

Scaling law of ultrasonic-induced bubbling toward solid-free air purification

Xiuxing Tang^{1,2}, Hongyue Chen^{1,2}, Xiaoliang Ji^{1,2}, Liang Zhang^{1,2}, Marco A.B. Andrade³, Muyang Zhang¹, Jieming Zhang¹, Minghao Zhou¹, Yichen Jiang⁴, Duyang Zang^{1,2*}

1 School of Physical Science and Technology, Northwestern Polytechnical University, Xi'an, China

2 Shaanxi Liquid Physics Research Center, Northwestern Polytechnical University, Xi'an, China

3 Institute of Physics, University of São Paulo, São Paulo, Brazil

4 School of Marine Science and Technology, Northwestern Polytechnical University Xi'an, China

*Correspondence: dyzang@nwpu.edu.cn

The interaction between ultrasound and the air-liquid interface is widely involved in sonar communication, medical imaging and acoustic detection, etc. In this work, we report an intriguing bubbling phenomenon occurring at the liquid surface exposed to acoustic radiation. The phenomenon can be robustly triggered once the distance between the liquid surface and the acoustic probe is adjusted to multiples of half sound wavelength. It is clarified the bubbling is attributed to the Helmholtz resonance of the liquid concavity caused by acoustic radiation force. The sizes of the final obtained

bubbles show a universal scaling law with acoustic Bond number and acoustic Reynolds number: $R \approx \lambda \cdot Bo_a \cdot \sqrt{Re_a}$, which is independent on the types of liquids. Moreover, it was found that the bubbling phenomenon showed a significantly enhanced particle absorption ability, thus shedding light on the developing of solid filter-free air purification techniques.

Keywords: Ultrasound, Air-liquid interface, Helmholtz resonance, Air purification.

References

- [15] X.X. Tang, H.Y. Chen, X.L. Ji, L. Zhang, M.A.B. Andrade, M.Y. Zhang, J.M. Zhang, M.H. Zhou, Y.C. Jiang, D.Y. Zang. Scaling law of ultrasonic-induced bubbling toward solid-free air purification. Science China Physics, Mechanics & Astronomy. Accepted(2025).
- [16] X.X. Tang, L. Zhang, M.H. Zhou, X.Y. Nong, C.L. Ding, Y.H. Shi, M.Y. Zhang, K. Mu, D.Y. Zang. Daughter bubbles generation via bubble bursting induced by ultrasonic radiation. Physics of Fluids. Accepted(2025).

基于涨落流体力学-分子动力学的跨尺度耦合建模及其在纳米流动领域的应用

李帆

西北工业大学 西安市友谊西路 127 号 710072

lifan_npu@nwpu.edu.cn

连续介质流体力学对宏观流动的求解已趋于成熟。但当流动特征尺度趋近微观量级时,连续介质近似面临失效风险。基于离散介质的分子动力学(MD)虽能精确表征微观流动行为,但其计算成本随体系规模呈指数增长。相较于单一尺度模型,多尺度方法在保证精度的同时显著提升计算效率。其中,序贯式耦合方法通过微观模拟预先生成本构参数,为宏观方程提供闭合关系,但其应用受限于严格的微观-宏观尺度分离条件。并发式耦合模型通过实时交互实现质量与动量通量守恒传递,降低了尺度分离要求,具有更广泛的适用性。但现有并发式模型在微观-宏观异质模型衔接方面存在不足,通常采用显式界面分隔不同分辨率区域,导致过渡区出现密度/压力振荡等非物理现象。针对上述问题,文献[1]提出基于两相流类比的并发式耦合框架,通过构建两相流的质量-动量守恒方程,实现涨落流体力学方程与 MD 的平滑耦合,其核心创新在于:1)将原子运动方程与连续介质表征视为同一流体的等效描述;2)通过定义"相"浓度函数调控模型分辨率,实现离散介质向连续介质的平滑过渡;3)在守恒约束下,方程中引入了源项,避免非物理相分离,并保持宏观密度与速度方差在"相"间的连续性。基于该理论框架,研究团队在开源 MD 软件中实现了简化版的三维单向耦合[2,3]模型,该版本忽略微观 MD 部分对宏观流体力学部分的反馈。单向耦合模型成功应用于猪圆环病毒衣壳水环境模拟,准确再现了衣壳结构稳定性及水分子/离子的跨膜运输特性[4]。进一步将其拓展至泊肃叶流中小分子扩散及纳米固液界面流动模拟,揭示了剪切诱导的横向迁移效应[5],实现了界面作用力的准确表征[6,7]。为进一步提升模型性能,研究团队通过建立离散粒子-连续流动的实时双向反馈机制,实现了完全双向耦合的三维模型[8],计算效率较单向耦合版本显著提升。这种基于两相流类比的跨尺度建模方法,为纳米流动系统的多尺度耦合开辟了新范式。

关键词: 多尺度力学理论与计算, 纳米流动, 固液界面微纳力学, 涨落流体力学, 分子动力学

参考文献

- [1] Markesteijn, A., Karabasov, S., Scukins, A., Nerukh, D., Glotov, V., & Goloviznin, V. Concurrent multiscale modelling of atomistic and hydrodynamic processes in liquids. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2014, 372(2021): 20130379.
- [2] Korotkin, I., Karabasov, S., Nerukh, D., Markesteijn, A., Scukins, A., Farafonov, V., & Pavlov, E. A hybrid molecular dynamics/fluctuating hydrodynamics method for modelling liquids at multiple scales in space and time. *The Journal of Chemical Physics*, 2015, 143, 014110.
- [3] Korotkin, I., Nerukh, D., Tarasova, E., Farafonov, V., Karabasov, S. Two-phase flow analogy as an effective boundary condition for modelling liquids at atomistic resolution. *J. Comput. Sci.* 2016, 17, Part 2, 446-456.
- [4] Tarasova, E., Korotkin, I., Farafonov, V., Karabasov, S., Nerukh, D. Complete virus capsid at all-atom resolution: Simulations using molecular dynamics and hybrid molecular dynamics/hydrodynamics methods reveal semipermeable membrane function. *J. Mol. Liq.* 2017, 245, 109-114.
- [5] Li, F., Korotkin, I., Farafonov, V., Karabasov, S. A. Lateral migration of peptides in transversely sheared flows in water: An atomistic-scale-resolving simulation. *J. Mol. Liq.* 2021, 337, 116111.
- [6] Li, F., Smoukov, S. K., Korotkin, I., Taiji, M., Karabasov, S. Interfacial Layer Breaker: A Violation of Stokes' Law in High-Speed Atomic Force Microscope Flows. *Langmuir* 2023, 39, 220-226.
- [7] Li, F., Korotkin, I., Karabasov, S. A. A multiscale algorithm to drastically reduce computational times when simulating liquid/solid interaction at atomic resolution with realistic hydrodynamics effects. *Communications in Computational Physics* 2025 (accepted).
- [8] Korotkin, I. A., Karabasov, S. A. A generalised Landau-Lifshitz fluctuating hydrodynamics model for concurrent simulations of liquids at atomistic and continuum resolution. *J. Chem. Phys.* 2018, 149, 244101.

声悬浮条件下液滴的相变传热机制及界面动力学研究

陈泓樾^{1), 2)}, 农先宇^{1), 2)}, 袁文轩^{1), 2)}, 臧渡洋^{*1), 2)}

1) (西北工业大学物理科学与技术学院, 超常条件材料物理与化学教育部重点实验室, 西安 710129)

2) (陕西液体物理中心, 西安 710072)

* 通信作者. E-mail: dyzang@nwpu.edu.cn

声悬浮作为一种非接触操控手段, 为液滴的相变传热、界面动力学及自组装等行为的研究提供了强有力的工具, 在微流控、生物工程、软物质科学及空间流体研究等方面具有广泛应用。然而, 声悬浮条件下多组分液滴的蒸发传质机制以及声场与流体界面动力学的相互作用机制尚未明晰。本课题围绕声悬浮条件下二元液滴的蒸发相分离及液滴凝并过程中液桥生长的动力学特性, 探讨声场如何影响液滴的相变传热及界面演化机制。

首先, 我们研究了环己烷-乙醇二元液滴在声悬浮条件下的蒸发行为, 发现了液滴蒸发过程中声流强化传热诱导的液相分离现象。声流作用使蒸发速率提升, 加剧蒸发冷却效应 (液滴表面降温约 16.8K), 导致空气中水蒸气凝结在二元液滴表面, 打破液滴内溶解度平衡而触发环己烷析出。该发现揭示了声场通过传热-传质耦合调控相变路径的新机制, 为声悬浮辅助非平衡相分离技术提供了理论依据。其次, 基于声悬浮液滴凝并实验, 阐明了声-毛细耦合作用对液桥界面动力学的调控规律。发现液桥的生长仍然遵循惯性力控制的 $d \sim t^{0.5}$ 的标度率关系, 且指数项数值对声场强度不敏感。然而, 标度前因子会随着液桥的纵横比变化, 其明显受到声场强度和液滴表面张力的共同影响。引入了无量纲数: Acoustic-capillary dynamics Number ($\Pi = \Delta P / P_A$), 量化声压与 Laplace 压的竞争机制: 早期阶段高横向曲率区域的 Laplace 压主导液桥扩展, 而声场通过调控颈部曲率间接增强生长各向异性, 突破了传统液桥动力学理论框架。此外, 作为对声场与流体界面动力学相互作用的进一步探讨, 我们研究了超声振动对毛细液桥粘附力的影响, 发现一定功率下超声能够显著提升毛细力, 可能与液桥内部声场分布及界面相互作用的增强有关。

本课题揭示了声悬浮条件下液滴的相变传热机制及界面动力学特征, 强调了声场在蒸发传质及液桥生长中的多重调控作用。这些研究成果不仅深化了对声场-液滴相互作用机制的理解, 也为非接触条件下的精确传质、界面调控及流体操控提供了理论支持。

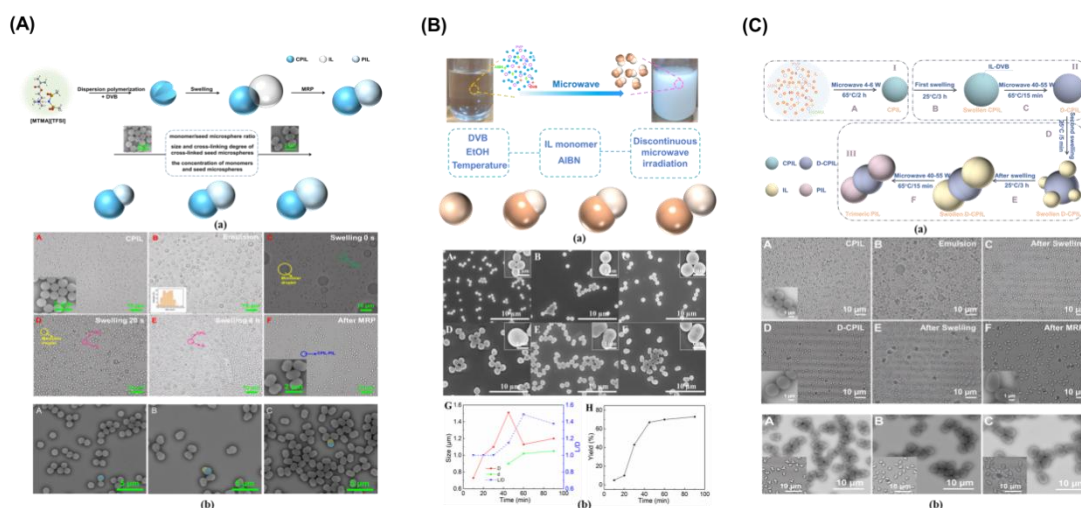
关键词: 声场调控; 相变传质; 液桥动力学; 声-毛细耦合

单分散双聚体和三聚体型聚离子液胶体颗粒的微波辅助制备与形貌控制*

尹剑波^{1,2,**} 胡旭峰¹, 李婧怡¹

(1. 西北工业大学物理科学与技术学院智能材料实验室, 西安 710129; 2. 西北工业大学物理科学与技术学院陕西液体物理(基础学科)研究中心, 西安 710129)

各向异性非球形聚合物微球颗粒(如雪人形、哑铃形等)具有许多潜在的应用。与球形微球相比,由于各向异性形貌效应,它们表现出独特的组装结构和特性。种子乳液聚合是一种制备各向异性聚合物微球的简单化学方法。自从 Sheu 等报道使用种子乳液聚合制备雪人状和哑铃状聚苯乙烯微球以来^[1],研究者发展了多种制备非球形聚合物微球颗粒方法,并拓展到更复杂形貌的胶体分子颗粒制备^[2]。然而,目前各向异性聚合物微球的制备主要集中在中性聚苯乙烯或聚甲基丙烯酸甲酯体系上,限制了应用范围。本报告介绍了我们最近关于单分散双聚体和三聚体型聚离子液胶体颗粒的微波辅助制备与形貌控制研究进展^[3-5]。



图(A)微波辅助种子乳液聚合制备双聚体型 PIL 微球: (a)制备过程; (b) 对应过程 PIL 微球形貌. (B)微波辅助分散聚合法一步快速制备双聚体型 PIL 微球: (a)制备过程; (b)微球形貌随时间演变过程. (C)微波辅助双交联种子乳液聚合法快速制备三聚体型 PIL 微球: (a)制备过程; (b)颗粒形貌演变过程; (c)微球形貌

参考文献:

- [1]H. Sheu, M. El-Aasser, J. Vanderhoff, J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem., 1990, 28, 653.
- [2]W. Li, H. Palis, R. M  rindol, J. Majimel, S. Ravaine, E. Duguet, Chem. Soc. Rev., 2020, 49, 1955.
- [3]X.F. Hu, J.Y. Li, X.P. Zhao, J.B. Yin, Polymer, 2024, 306, 127237.
- [4]X.F. Hu, J.Y. Li, X.P. Zhao, J.B. Yin, Polym. Chem., 2025, 16, 661.
- [5]X.F. Hu, J.Y. Li, L. Q. Xiang, J.B. Yin, Macromol. Rapid Commun., 2025, 2401154.

*本项目获得国家自然科学基金(52272305)资助; **联系人: jbyin@nwpu.edu.cn

软表面上的纳米形变、液滴蒸发与颗粒沉积

赵彬钰*

中国科学院青海盐湖研究所，青海省西宁市新宁路 18 号，810008

*Email: binyuzhao@isl.ac.cn

固-液界面相互作用对液体在固体表面的流体行为有重要影响，特别是在软材料上，其微观表面形变对与固-液界面相关的物理现象和过程尤为重要。在静态润湿现象中，液滴表面张力的垂直分量引起软表面形变，形成润湿脊（Fig. 1a-b）。当软表面被拉伸后，润湿脊的形貌发生变化，润湿脊在拉伸方向上伸长，其高度也出现规则的周期性变化，在垂直于拉伸方向上的两端远高于平行于拉伸方向上的两端。这使得液滴在拉伸软表面上蒸发时呈现各向异性的接触线移动，接触线沿平行于拉伸方向收缩得比其垂直方向更早更快（Fig. 1c）。当在液体中加入不溶纳米颗粒后，颗粒呈定向梯度沉积，形成类椭圆环形的沉积图案（Fig. 1d）。通过改变表面拉伸比例、倾斜角度、旋转角度等，可以制备多种复杂沉积图案。研究结果拓宽了我们对软表面和各向异性表面上液滴润湿和蒸发现象的理解，拉伸软表面上蒸发液滴的接触线各向异性运动为流体输运调控和表面精准图案化提供了新思路。

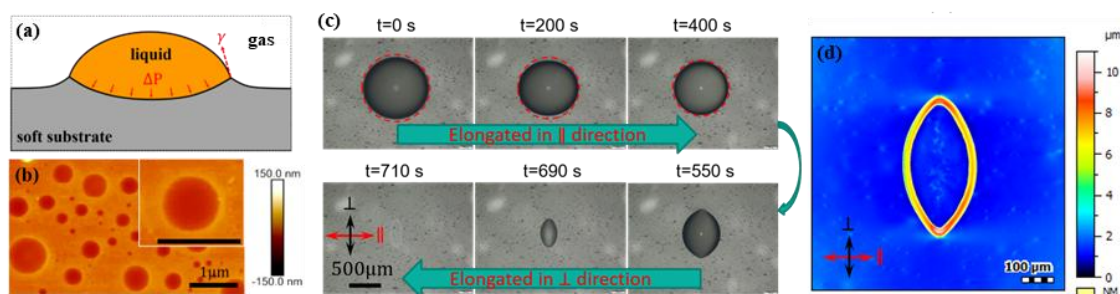


Fig.1 (a) 2D sketch of surface deformation. (b) AFM 3D image of surface deformation. (c) Droplet shape evolution during evaporation on a uniaxially stretched soft substrate. (d) 3D image of the final deposition pattern.

关键词： 软表面；润湿脊；液滴蒸发；接触线移动；颗粒沉积

参考文献：

- [1] B. Zhao, E. Bonaccorso, G. K. Auernhammer, and L. Chen, Elasticity-to-Capillarity Transition in Soft Substrate Deformation, *Nano Letters* 2021, 21, 10361-10367.
- [2] Y. Du, Y. Lin, E. Bonaccorso, J. Guo, K. Uhlig, L. Chen, B. Zhao, and G. K. Auernhammer, How Droplets Dry on Stretched Soft Substrates, *ACS Nano* 2025, 19, 7088-7907.

基于激光调控的颗粒筏动态行为研究

颗粒筏是由微米级疏水颗粒（如聚苯乙烯、二氧化硅等）在气液界面自组装形成的准二维弹性薄膜，其独特的力学特性（如弯曲刚度可调、自修复性等）使其在微纳结构制造、柔性传感器和动态超材料等领域备受关注。然而，传统机械接触式调控方法存在精度低、易损伤结构的局限性。本研究提出利用光场与颗粒-流体界面的耦合效应，通过空间调制的激光场实现颗粒筏的非接触式动态操控，系统解析其多物理场耦合机制，为智能软材料的设计与应用提供新范式。

实验采用 808 nm 连续激光器构建动态光场，选择振动标准筛子（200 目，孔径为 0.065 mm）将疏水二氧化硅颗粒抖落在水面上形成多层颗粒筏，并通过吹气装置将不与水面接触的颗粒吹走，附着在水面上的颗粒被留下，形成单层颗粒筏铺在水面上。且在纯水中加入特定材料，研究发现：（1）激光诱导的局部 Marangoni 效应可产生微米级流场，驱动颗粒发生定向运动；（2）光热效应引起的表面张力梯度使基底液膜产生凹陷变形，形成颗粒筏的曲面重构；（3）通过调控激光功率（0.1-2200 mW）和空间分布模式，可精准诱导颗粒筏产生褶皱、折叠、穿孔等结构相变。

本工作突破了传统机械接触式调控的局限性，为智能超材料设计提供了新思路。研究揭示的光热-流变耦合机制对发展新型光驱动软物质系统具有重要参考价值，相关成果在微反应器构建、动态光学器件开发等领域展现出广阔应用前景。

关键词：颗粒筏；激光操控；Marangoni 效应；动态调控；软物质

墙报摘要

声悬浮永不破裂气泡与气溶胶颗粒收集技术

姬晓亮¹⁾, 臧渡洋^{1)*}

1) (西北工业大学物理科学与技术学院, 西安 710129)

* (通讯作者dyzang@nwpu.edu.cn)

重力诱导排水是肥皂泡和泡沫的主要失稳机制之一，这极大限制了气泡在工业生产和日常生活中的应用场景。我们表明利用声场可以抑制重力排液并使气泡寿命延长 2 个数量级以上，同时通过液体补偿技术可进一步使气泡永不破裂。并且我们还提出了基于声悬浮气泡气-液界面吸附并过滤气溶胶颗粒的理论与技术策略，显著提高了液膜对气溶胶颗粒的吸附效率，实现了不依赖固体滤芯的颗粒污染物的快速吸附与净化。

关键词：超声悬浮、气泡、排液、稳定性、颗粒吸附

第十四分论坛

金属有机杂化颗粒前沿论坛

邀请报告

金属有机框架（MOF）原位还原：纳米微粒杂化材料制备新方法

付昱^{1*}

¹ 四川轻化工大学 化学与环境工程学院，自贡 四川，643000

*Email: yufu@suse.edu.cn

摘要正文：中金属有机框架（MOFs）具有丰富的孔道、多样的化学组成以及清晰的微纳结构，是一种理想的前驱体材料，一直受到人们的广泛关注。目前，使用MOFs前驱体的最常采用方式为热解，但是该方法能耗较大，反应条件剧烈，产物结构难于精准调控。因此，发展温和可控新的利用MOFs前驱体新方法具有重要意义。使用化学试剂还原MOFs金属离子是一种理想的转化MOFs方式。化学试剂还原可以实现价态调控、空间调控，以及选择性还原，生成的产物可保留原始形貌，兼具一定空隙率。我们研究小组开展化学试剂还原MOFs金属离子的工作。建立并完善化学试剂还原MOFs金属离子的方法和体系，揭示化学试剂还原MOFs金属离子的内在规律，阐明化学试剂还原MOFs金属离子的机制，利用化学试剂还原MOFs金属离子制备有机无机杂化材料，探索化学试剂还原MOFs金属离子的应用潜力，将为MOFs研究领域的发展开辟新的道路^[1-6]。

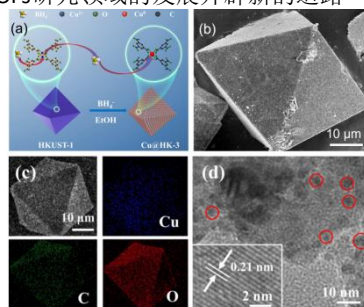


图1 NaBH₄化学还原HKUST-1(Cu)示意图 (a)以及产物SEM (b)，EDS (c)和HR-TEM (d)（红圈代表Cu纳米粒子）图。

关键词：金属有机框架（MOF）；还原；纳米粒子

参考文献

- [1] Bai, X. J.; Zhai, X.; Zhang, L. Y.; Fu, Y.; Qi, W., Site-directed reduction engineering within bimetal-organic frameworks for efficient size-selective catalysis. *Matter* 2021, 4 (9), 2919-2935.
- [2] He, W.; Li, X.; Dai, X.; Shao, L.; Fu, Y.; Xu, D.; Qi, W., Redox Concomitant Formation Method for Fabrication of Cu(I)-MOF/Polymer Composites with Antifouling Properties. *Angewandte Chemie International Edition* 2024, 63 (44), e202411539.
- [3] He, W.; Zhai, X.; Qiao, Z.; Chen, H.; Tian, W.; Fu, Y.; Chen, J., Reduction on specific lattice planes for metal - organic frameworks/poly-pyrrole composites with dilated porosity. *Journal of Materials Chemistry A* 2024, 12 (21), 12803-12809.
- [4] Fu, Y.; Zhai, X.; Wang, S.; Shao, L.; Bai, X. J.; Su, Z. S.; Liu, Y. L.; Zhang, L. Y.; Chen, J. Y., Fabrication of Metal Nanoparticle Composites by Slow Chemical Reduction of Metal-Organic Frameworks. *Inorganic Chemistry* 2021, 60, 16447-16454.
- [5] Hou, X.; He, W.; Zhai, X.; Chen, B.; Fu, Y.; Zhang, L.; Chen, J.; Fu, Y., Fabrication of a Cu(i)-carboxylate metal-organic framework by reduction of metal nodes for an azide-alkyne “click” reaction. *Inorganic Chemistry Frontiers* 2024, 11 (14), 4263-4269.
- [6] Hou, Xiaojiao; Gao, Xing; Zhai, Xu; He, Wenxiu; Fu, Yuanlin; Chen, Bingbing; Chen, Junyi; Fu, Yu, Fabricating Multivariate Metal-Organic Frameworks by Metal Site Reduction as Green Catalyst for CO₂ Conversion *ACS SUSTAINABLE CHEMISTRY & ENGINEERING* online

Reduction of MOF for preparation of nanoparticles

Yu FU^{1*}

¹School of Chemical and Environmental Engineering, Sichuan University of Science and Engineering, Zigong 643000, China

* yufu@suse.edu.cn

Metal-organic framework (MOF) is an ideal precursor material due to its rich pore structure, diverse chemical composition and clear micro-nano structure. Thermal pyrolysis is the main way to use MOF precursors. Its essence is the chemical reaction between carbon or oxygen and metal ions after the decomposition of organic ligands at high temperature. The prepared MOF derivatives are metal or metal oxidation and their carbon hybrid. However, this method has harsh conditions and low controllability of product structure. Using chemical reducing agent to reduce metal ions in situ is an ideal way to benefit MOF precursor. This method has mild conditions, can selectively reduce specific metal ions, and has the ability of localization and spatial positioning. At the same time, this method can reduce metal ions to low valence states, change the coordination structure of frame nodes, combine chemical reactions with intermolecular coordination changes, and induce interesting structural evolution of MOF. Therefore, the project plans to carry out the research on the directional reduction of metal ions in MOF by chemical reagents, clarify the process and mechanism of the reduction of metal ions in MOF by chemical reagents, reveal the key structure-activity relationship of the reduction of metal ions in MOF, develop new forms of MOF evolution and organic-inorganic hybrid materials, and open up a new path for the research in the preparation of MOF.

Keywords: MOF, Reduction, Nanoparticles

References

- [12] Bai, X. J.; Zhai, X.; Zhang, L. Y.; Fu, Y.; Qi, W., Site-directed reduction engineering within bimetal-organic frameworks for efficient size-selective catalysis. *Matter* 2021, 4 (9), 2919-2935.
- [13] He, W.; Li, X.; Dai, X.; Shao, L.; Fu, Y.; Xu, D.; Qi, W., Redox Concomitant Formation Method for Fabrication of Cu(I)-MOF/Polymer Composites with Antifouling Properties. *Angewandte Chemie International Edition* 2024, 63 (44), e202411539.
- [14] He, W.; Zhai, X.; Qiao, Z.; Chen, H.; Tian, W.; Fu, Y.; Chen, J., Reduction on specific lattice planes for metal-organic frameworks/poly-pyrrole composites with dilated porosity. *Journal of Materials Chemistry A* 2024, 12 (21), 12803-12809.
- [15] Fu, Y.; Zhai, X.; Wang, S.; Shao, L.; Bai, X. J.; Su, Z. S.; Liu, Y. L.; Zhang, L. Y.; Chen, J. Y., Fabrication of Metal Nanoparticle Composites by Slow Chemical Reduction of Metal-Organic Frameworks. *Inorganic Chemistry* 2021, 60, 16447-16454.
- [16] Hou, X.; He, W.; Zhai, X.; Chen, B.; Fu, Y.; Zhang, L.; Chen, J.; Fu, Y., Fabrication of a Cu(I)-carboxylate metal-organic framework by reduction of metal nodes for an azide-alkyne "click" reaction. *Inorganic Chemistry Frontiers* 2024, 11 (14), 4263-4269.
- [17] Hou, Xiaojiao; Gao, Xing; Zhai, Xu; He, Wenxiu; Fu, Yuanlin; Chen, Bingbing; Chen, Junyi; Fu, Yu , Fabricating Multivariate Metal-Organic Frameworks by Metal Site Reduction as Green Catalyst for CO₂ Conversion *ACS SUSTAINABLE CHEMISTRY & ENGINEERING* online

基于量子点忆阻器的离子动力学行为调控及神经形态计算

摘要： 忆阻器作为新型双端器件，凭借其突破冯诺依曼架构瓶颈的能力，以及高速运行、低功耗和易集成等优势，在信息存储、人工突触和模拟计算等领域受到广泛关注。近年来，围绕材料拓展、阻变机理、突触功能及仿生应用的研究已成为人工智能硬件领域的前沿热点。然而，离子动力学行为的不可控性引发的导电细丝随机生长，成为了忆阻器件实际应用的主要障碍。

量子点材料凭借其对离子迁移的局域调控能力，被认为是开发稳定存储和类脑计算单元的理想候选。在此基础上，本团队通过空位工程进一步优化材料本征结构，精准调控离子动力学行为，从而有效限制导电细丝的随机生长。建立完善材料分析体系，结合微观结构探究，有限元分析和第一原理计算，系统探讨本征空位周围的能量密度和电荷密度，及其对离子迁移势垒，迁移率及空位形成能的影响。构建通用的物理模型，指导材料体系优化，并实现导电细丝形成过程的可视化研究。进一步拓宽器件的仿生突触功能，实现包含经验学习，联想学习在内的多层次学习行为。结合神经网络在图像降噪，分类及高阶学习任务重的广泛应用，推动忆阻器在智能计算领域及其产业化进程。

三氮唑 MOF 热解产物的高度定制化合成和催化应用

热处理金属有机框架（MOF）材料是制备碳负载过渡金属基纳米催化剂的有效方法之一。我们发现，以三氮唑为配体的 MET 系列 MOF 的热解过程复杂，但得益于其结构中金属原子和 N 原子空间结构的预组装，以及饱和的金属-N 配位关系，MET 系列多个 MOF 具有在惰性气体中热解生成碳负载的氮化物或金属与氮配位的单原子、双原子等催化活性材料的潜力。因此，我们深入研究了 Mn、Fe、Co、Ni 和 Cu 基 MET 及其它唑基 MOF 的热解机理，运用原位透射电镜、原位 X-射线吸收等多种前沿表征技术探究了唑基 MOF 热解过程中的物相、元素化学态和微观形貌的演变过程。在揭示了热解机理的基础上，通过 MOF 前驱体在惰性气体中的可控热解来一步合成碳负载的过渡金属基纳米催化剂，并进一步优化其形貌与微观结构，揭示其作为电解水制氢等催化剂时的构效关系。

Metal-organic framework glass nanocomposites

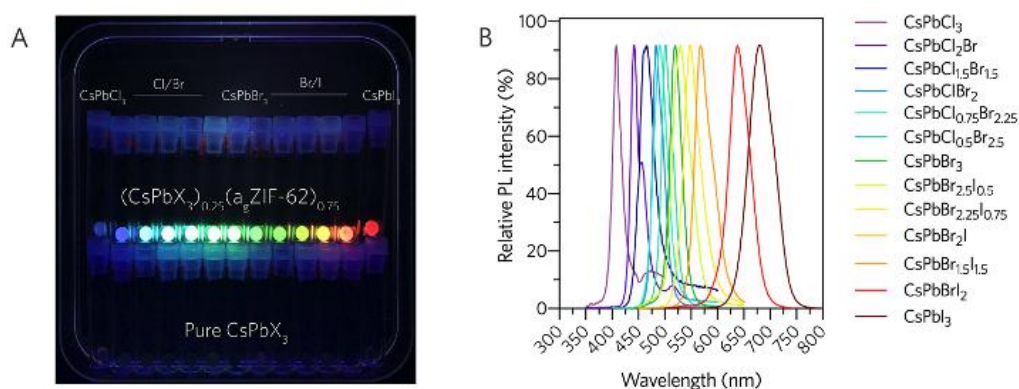
Jingwei Hou^{1,*}

¹School of Chemical Engineering, the University of Queensland, St Lucia, QLD 4072, Australia

* Jingwei.hou@uq.edu.au

The United Nations named 2022 the International Year of Glass to honour one of the world's most transformative and efficient materials and to emphasise the importance of glass material research. On top of inorganic, metallic, and organic glasses, metal-organic framework (MOF) glass has been recognised as the fourth generation of glass materials, also the very first new generation in the last 50 years. It is fabricated via melt quenching of a small group of metal-organic framework materials, generating a new generation of amorphous, microporous glassy materials. It offers accesses to an array of new composite materials.

For example, lead halide perovskite (LHP) semiconductors show exceptional optoelectronic properties. Important barriers for their practical applications, however, lie in their instability to polar solvents, polymorphism, phase segregation and sensitivity to the leaching of toxic metal ions. We recently reported a new type of scalable composites fabricated through liquid phase sintering of LHP crystals / zeolite imidazolate framework (agZIF-62) glass. The glass substrate can accommodate ionic, crystalline LHP particles. Interfacial interactions effectively stabilize the metastable LHP phase, passivate LHP surface defects and impart bright, narrow-band photoluminescence. The microporous ZIF glass provides effective protection for LHPs against immersion in water and organic solvents, alongside mechanical stress and heat. The composites show ultra-stable photoluminescence in water for over 10,000 h. These properties, together with their lead self-sequestration capability, will enable practical applications of LHPs, e.g. in photocatalysis and white light emitting diodes (LEDs).



Keywords: Metal-organic frameworks, nanocomposites

References

- [17] Jingwei Hou*, Peng Chen et al., "Liquid-phase sintering of lead halide perovskites and metal-organic framework glasses", *Science*, 2021, 374 (6567), 621-625.
- [18] Jingwei Hou, et al., "Metal-organic framework crystal-glass composites", *Nature Communications*, 2019, 10, 2580.

高性能 MOF 气体分离膜创制及放大

围绕化工、能源和环境等领域的众多气体分离过程，首先介绍了高性能 MOF 气体分离膜研究的必要性；然后指出现有 MOF 膜存在的不足：难以同时获得高通量和良好选择性，同时指出，目前很少有针对 MOF 膜进行放大的报道。紧接着，提出了我们的研究思路，通过构建超薄膜和孔道发达的自支撑 MOF 膜，来提高通量，同时获得高通量和良好选择性，并分别进行了 MOF 膜的规模化制备与应用研究。（1）首先，创制出 MOF 新材料，通过“聚合物界面诱导成核策略”，发现“低晶态 MOF 膜”新膜态，在聚合物支撑体上原位制备出兼具高通量和良好选择性的 MOF 超薄膜，实现了 C_3H_6/C_3H_8 的高效分离；进一步，通过“聚合物原位锚定”和“梯级成核-原位自修复”策略，实现了 MOF 超薄膜的大面积制备；并开发了 MOF 超薄膜的规模化制备技术和应用装置。（2）为进一步提高膜的通量，通过“聚合物辅助的 MOF 熔融”策略，制备出孔道发达的自支撑 MOF 玻璃泡沫膜，实现了 CH_4/N_2 等难分离体系的高效分离；进一步，提出“以玻璃化 MOF 为连续相、晶态 MOF/沸石分子筛为分散相”策略，通过玻璃化 MOF 和晶态 MOF/沸石分子筛可控相容，创制出高性能 MOF 玻璃混合基质膜；并开发了 MOF 玻璃泡沫膜的规模化制备技术和应用装置，推动了其应用。

MOFs型激光响应含能晶体材料的构筑研究

张祺^{1,*}

¹ 中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川 绵阳, 621999

*Email: jackzhang531@caep.cn

摘要正文: 起爆系统是完成武器系统中点火、起爆和做功的装置与系统。其安全性、可靠性和有效性直接关系到武器系统、运载火箭和航天器的效能。激光敏感起爆技术是一种新型的起爆技术, 具有安全、可靠和轻便的特点。首先, 该系统没有桥丝、飞片和引线, 避免了电磁脉冲和其他干扰信号引起的意外点火, 同时也避免了桥丝腐蚀导致的电阻变化或断裂, 确保了起爆的可靠性; 其次, 该系统不再使用对冲击和热电等常规刺激敏感的起爆药, 使其在生产、运输和使用过程中更加安全; 第三, 该系统不需要能量交换组件, 使得起爆装置更加便携和小型化, 激光能量的利用率更高。最后, 该系统还具有精度高、即时性好、简单安全且成本低的特点。因此, 激光直接起爆技术符合钝感弹药的发展趋势, 是先进起爆技术发展的重要方向。目前, 激光直接起爆技术的发展障碍主要受限于激光敏感起爆药。为此, 我们的团队创新性地将金属有机框架 (Metals Organic Frameworks, MOFs) 材料的形式与激光敏感起爆药相结合, 理论上突破了当前激光敏感起爆药因安全性差、能量输出低和光敏性差而导致的高起爆阈值问题。我们设计并构建了一系列具有低感度、高能量和高效率激光响应的新型激光敏感起爆药, 为激光直接起爆技术的快速发展和应用奠定了基础, 并为新型激光雷管的开发开辟了新思路。

关键词: 激光直接起爆技术; MOFs; 激光敏感; 钝感弹药;

参考文献

[1] Ruibing Lv, Pengyang Pan, Zhenghang Luo, Ying Wang, Quancheng Liu, Hu Deng* and Qi Zhang*
Single-crystal-to-single-crystal MOF encapsulation of copper azide to prepare laser-sensitive primary explosives. *Inorg. Chem. Front.*, 2024, 11, 8235

多元金属-有机框架的有序合成及应用

袁帅^{1*}

¹南京大学 化学化工学院, 南京, 210000

*Email: syuan@nju.edu.cn

多元金属-有机框架 (multi-component MOFs) 是由多种金属或有机配体通过配位键连接形成的有序晶体材料。不同金属位点或有机官能团可以被安插在多元MOF晶格的不同位置, 并通过结构设计调控各组分相对距离, 从而在原子精度上控制固体材料的结构。首先, 我们针对多元MOFs合成的难题, 开发了一系列后修饰反应, 将多种金属和配体逐步搭建在原始MOFs结构之上, 从而可控地增加MOFs的组分和复杂性^[1-3]。其次, 我们基于上述策略提出多元MOFs的逆向合成方法, 实现在原子精度上控制固体材料的结构^[4]。最后, 我们探索多元MOFs在仿生、协同催化、能源环境等方面的应用 (Fig. 1)^[5,6]。

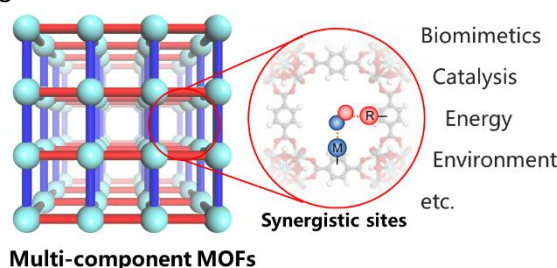


Fig. 1 Schematic representation of multi-component MOFs with synergistic sites and their applications.

关键词: 配位化学; 金属-有机框架; 催化

参考文献

- [1] Yuan, S.; Chen, Y.-P.; Qin, J.-S.; Lu, W.; Zou, L.; Zhang, Q.; Wang, X.; Sun, X.; Zhou, H.-C. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 8912-8919.
- [2] Yuan, S.; Zou, L.; Qin, J.-S.; Li, J.; Huang, L.; Feng, L.; Wang, X.; Bosch, M.; Alsalme, A.; Cagin, T.; Zhou, H.-C. *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 15356.
- [3] Yuan, S.; Zhang, P.; Zhang, L.; Garcia-Esparza, A. T.; Sokaras, D.; Qin, J.-S.; Feng, L.; Day, G. S.; Chen, W.; Drake, H. F.; Elumalai, P.; Madrahimov, S. T.; Sun, D.; Zhou, H.-C., *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 10814-10819.
- [4] Yuan, S.; Qin, J.-S.; Li, J.; Huang, L.; Feng, L.; Fang, Y.; Lollar, C.; Pang, J.; Zhang, L.; Sun, D.; Alsalme, A.; Cagin, T.; Zhou, H.-C. *Nat. Commun.* **2018**, *9*, 808.
- [5] Yuan, S.; Peng, J.; Cai, B.; Huang, Z.; Garcia-Esparza, A. T.; Sokaras, D.; Zhang, Y.; Giordano, L.; Akkiraju, K.; Zhu, Y.; Hübner, R.; Zou, X.; Román-Leshkov, Y.; Shao-Horn, Y., Tunable Metal-Hydroxide-Organic Frameworks for Catalyzing Oxygen Evolution. *Nat. Mater.* **2022**, *21*, 673.
- [6] Ke, S.-W.; Wang, Y.; Su, J.; Liao, K.; Lv, S.; Song, X.; Ma, T.; Yuan, S.*; Jin, Z.*; Zuo, J.-L.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 8267.

Multi-component metal–organic frameworks: Controlled synthesis and applications

Shuai Yuan¹

¹ School of Chemistry and Chemical Engineering, Nanjing University, Nanjing,
Jiangsu 210023, China

Multi-component metal–organic frameworks (multi-component MOFs) are crystalline solid materials constructed from multiple metal cations and organic ligands. A variety of metal sites and organic functional groups with controlled distances can be anchored onto pre-determined positions of the MOF lattice, which promises precise control over the structure at atomic precision. This presentation will introduce the synthetic methodologies of multi-component MOFs,^[1-4] and explore their potential applications in biomimetics, cooperative catalysis, energy, and environment (Fig. 1).^[5,6]

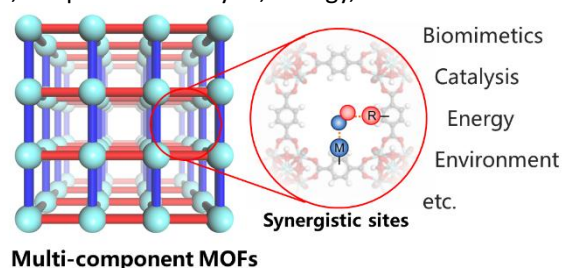


Fig. 1 Schematic representation of multi-component MOFs with synergistic sites and their applications.

Keywords: Coordination chemistry, Metal–organic frameworks, catalysis

References:

- [1] Yuan, S.; Chen, Y.-P.; Qin, J.-S.; Lu, W.; Zou, L.; Zhang, Q.; Wang, X.; Sun, X.; Zhou, H.-C. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 8912-8919.
- [2] Yuan, S.; Zou, L.; Qin, J.-S.; Li, J.; Huang, L.; Feng, L.; Wang, X.; Bosch, M.; Alsalme, A.; Cagin, T.; Zhou, H.-C. *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 15356.
- [3] Yuan, S.; Zhang, P.; Zhang, L.; Garcia-Esparza, A. T.; Sokaras, D.; Qin, J.-S.; Feng, L.; Day, G. S.; Chen, W.; Drake, H. F.; Elumalai, P.; Madrahimov, S. T.; Sun, D.; Zhou, H.-C., *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 10814-10819.
- [4] Yuan, S.; Qin, J.-S.; Li, J.; Huang, L.; Feng, L.; Fang, Y.; Lollar, C.; Pang, J.; Zhang, L.; Sun, D.; Alsalme, A.; Cagin, T.; Zhou, H.-C. *Nat. Commun.* **2018**, *9*, 808.
- [5] Yuan, S.; Peng, J.; Cai, B.; Huang, Z.; Garcia-Esparza, A. T.; Sokaras, D.; Zhang, Y.; Giordano, L.; Akkiraju, K.; Zhu, Y.; Hübner, R.; Zou, X.; Román-Leshkov, Y.; Shao-Horn, Y., Tunable Metal-Hydroxide-Organic Frameworks for Catalyzing Oxygen Evolution. *Nat. Mater.* **2022**, *21*, 673.
- [6] Ke, S.-W.; Wang, Y.; Su, J.; Liao, K.; Lv, S.; Song, X.; Ma, T.; Yuan, S.*; Jin, Z.*; Zuo, J.-L.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 8267.

墙报摘要

双离子电池石墨正极充放电过程中阴离子嵌入/脱出行为研究

高宁¹, 梁艳¹, 王平石¹, 郝凯¹, 高瑞^{1*}

¹ 西安交通大学化学学院, 西安市咸宁西路28号, 710049

*Email: gaorui@xjtu.edu.cn

摘要正文: 电池循环使用过程中电极材料组成和结构的不可逆转变是诱导其性能下降的主要因素。双离子电池作为一种新型的可充电电池, 其主要通过阴、阳离子分别在电池正、负极嵌入/脱出实现电能和化学能的相互转化, 因而具有高的工作电压, 此外, 双离子电池还具有环境友好、成本低等特点¹。然而, 双离子电池正极材料在循环过程中由于阴离子嵌入/脱出容易发生体积膨胀和结构变化, 限制了双离子电池的循环稳定性。本研究以双离子电池正极材料作为研究对象, 分别在宏观和微观尺度构建了片上电化学池² (On-chip electrochemical macro-cell) 和扫描电化学池 (Scanning electrochemical cell)³, 研究了宏观和微观尺度下高定向热解石墨 (Highly oriented pyrolytic graphite, HOPG) 材料的SO₄²⁻嵌入/脱出动力学特征和充放电行为, 并借助拉曼光谱原位测量了SO₄²⁻嵌入 / 脱出HOPG过程, 借助飞行时间二次离子质谱表征了HOPG中SO₄²⁻的分布。研究表明, 宏观尺度上SO₄²⁻嵌入 / 脱出HOPG表现出赝电容行为和电池行为共同作用的特征, 而在微观尺度上SO₄²⁻嵌入/脱出HOPG仅表现出赝电容特征⁴。此外, 电池的充放电方式也会显著影响HOPG中SO₄²⁻的分布, 循环充放电样品中SO₄²⁻呈半球形分布于样品浅层, 循环充放电样品中SO₄²⁻呈柱状分布且嵌入样品深度较深。本研究揭示了电池体系中微观限域结构对调控局部电场和离子分布以及增强离子嵌入/脱出动力学的促进作用, 对电池的结构设计和体系优化具有指导意义。

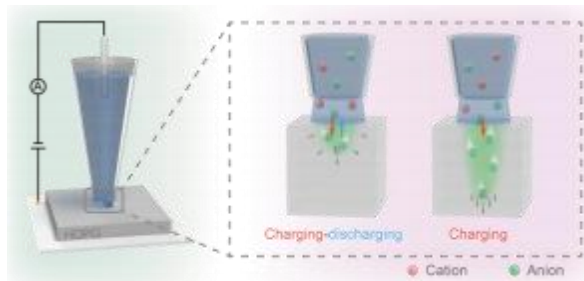


Fig. 1 The distribution of SO₄²⁻ inside HOPG during cyclic charging/discharging and continuous charging.

关键词: 扫描电化学池显微镜; 双离子电池; 高定向热解石墨; 阴离子嵌入; 飞行时间二次离子质谱

参考文献

- [1] Wu, X.; Xu, Y.; Zhang, C.; Leonard, D. P.; Markir, A.; Lu, J.; Ji, X., Reverse Dual-Ion Battery via a ZnCl₂ Water-in-Salt Electrolyte. *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141 (15), 6338-6344.
- [2] Voiry, D.; Fullon, R.; Yang, J.; de Carvalho Castro, E. S. C.; Kappera, R.; Bozkurt, I.; Kaplan, D.; Lagos, M. J.; Batson, P. E.; Gupta, G.; Mohite, A. D.; Dong, L.; Er, D.; Shenoy, V. B.; Asefa, T.; Chhowalla, M., The role of electronic coupling between substrate and 2D MoS₂ nanosheets in electrocatalytic production of hydrogen. *Nat. Mater.* 2016, 15 (9), 1003-1009.
- [3] Gao, R.; Edwards, M. A.; Qiu, Y.; Barman, K.; White, H. S., Visualization of Hydrogen Evolution at Individual Platinum Nanoparticles at a Buried Interface. *J. Am. Chem. Soc.* 2020, 142 (19), 8890-8896.
- [4] Simon, P.; Gogotsi, Y.; Dunn, B., Materials science. Where do batteries end and supercapacitors begin? *Science* 2014, 343(6176), 1210-1211.

第十五分论坛
生物医药颗粒前沿论坛

口头报告

尺寸均一的利拉鲁肽缓释制剂用于二型糖尿病治疗

高泽静^{1,2,3}, 韦祎^{1,2,*}, 巩方玲^{1,2}, 马光辉^{1,2,3,*}

¹中国科学院过程工程研究所生化工程国家重点实验室, 北京, 100190

²中国科学院过程工程研究所生物药制备与递送重点实验室(中国科学院), 北京, 100190

³中国科学院大学, 北京, 100049

*Email: ghma@ipe.ac.cn

摘要正文:

利拉鲁肽(Liraglutide)作为胰高血糖素样肽-1受体激动剂(Glucagon-like peptide-1 Receptor Agonist, GLP-1 RA)可与胰腺GLP-1受体结合, 促进胰岛B细胞分泌胰岛素, 降低血糖, 被广泛应用于二型糖尿病的治疗。然而, 该疾病具有需要终身治疗的特殊性, 但利拉鲁肽的半衰期仅为11-15 h, 需每日注射给药, 难以满足患者对高质量治疗的要求, 导致患者顺应性差。

因此, 本研究采用快速膜乳化技术结合复乳法($W_1/O/W_2$)制备了尺寸均一的利拉鲁肽聚乳酸缓释微球月制剂, 可用于二型糖尿病的长期治疗, 提高患者依从性(Fig.1)^[1]。研究发现利拉鲁肽的两亲性显著降低了制备过程中的油水界面张力, 从而稳定了初乳并减少药物向外水相逃逸, 最终实现较高载药量(>8%)和包埋率(>85%)。特别地, 通过改变初乳液滴大小, 可以调控微球内部结构, 进而改善利拉鲁肽微球的释药行为, 内部小腔室结构能有效降低微球突释, 从而优化利拉鲁肽的释放过程。进一步为评估微球中利拉鲁肽的释放行为, 本研究开展了体外释放实验及体内药效学研究。体内实验结果显示, 利拉鲁肽载药微球能有效降低二型糖尿病模型小鼠的空腹血糖(FBG)和糖化血红蛋白(HbA1c)水平, 同时改善小鼠胰腺及肝脏功能。综上, 利拉鲁肽缓释微球在二型糖尿病的治疗中展现出良好的应用前景, 并为改善患者依从性提供了一种有效的治疗策略。

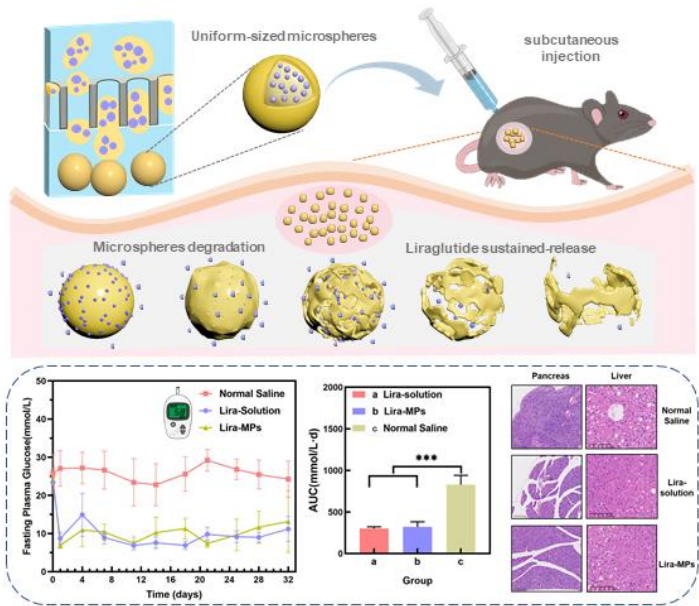


Fig. 1 Schematic diagram of the preparation and application effect of liraglutide sustained-release microspheres.

关键词: 聚乳酸; 快速膜乳化技术; 利拉鲁肽; 缓释微球; 二型糖尿病

参考文献

[1] Z. Gao, Y. Wei, J. Ge, J. Liu, Y. Qin, F. Gong, G. Ma, Development of 1 Month Sustained-Release Microspheres Containing Liraglutide for Type 2 Diabetes Treatment, *ACS Applied Materials & Interfaces*. **2024**, 16(20):25869-25878.

Antioxidant Particles to Enhance Vaccine Efficacy in Elderly

Hongyi Liu^{1,2,3,*}, Hua Yue^{1,2,3,*}, Wei Wei^{1,2,3,*}, Guanghui Ma^{1,2,3,*}

¹State Key Laboratory of Biopharmaceutical Preparation and Delivery, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190

²Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190

³School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100049

* Email: weiwei@ipe.ac.cn, hyue@ipe.ac.cn

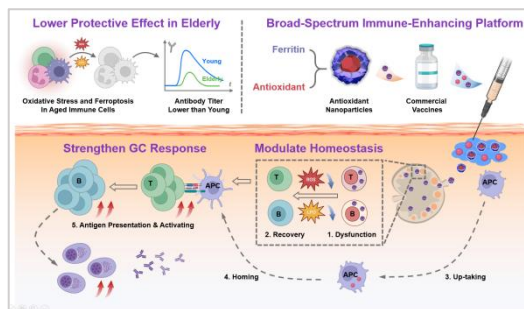


Fig. 1 Antioxidant particles to enhance vaccine efficacy in elderly

The vaccine efficacy exhibits age-related differences. By analyzing non-human primates, we found that age-related decline in immune function is primarily attributed to the antioxidant homeostasis disruption. We developed antioxidant nanoparticles capable of targeted lymph node delivery, which precisely restore homeostasis and enhance functionality in T and B cells. When combined with vaccines, they effectively restored redox homeostasis in aged mice, thereby amplifying vaccine-induced GC reactions and increasing the quantity and activity of Tfh and GCB cells. The particles elevated the antibody titers induced by a commercial COVID-19 vaccine (Alum) in aged mice to levels comparable to young, while enhancing neutralizing capacity against SARS-CoV-2 variants. For influenza vaccine (AddaVax), they increased antibody titers to >8-fold and improved vaccine protection in lethal influenza challenge models. Moreover, the particles also enhanced the vaccine efficacy in aged cynomolgus monkeys.

Keywords: Vaccine; Adjuvant; Elderly; Antioxidant; Nanoparticle.

References

- [1] 刘翊亦, 张瑜, 岳华, 马光辉. 疫苗颗粒佐剂[J]. 科学通报, 2025, 70(7): 888-899.
- [2] 魏炜, 马光辉, 杨微, 岳华, 王文婧. 一种用于低应答人群的疫苗增效剂及其制备方法和应用[P]. 2023104316040.
- [3] 魏炜, 马光辉, 岳华, 张瑜, 刘翊亦. 一种药物载体及其制备方法和用途[P]. PCT/CN2024/129092.
- [4] C. Wang, W. Zhang, Y. He, Z. Gao, L. Liu, S. Yu, Y. Hu, S. Wang, C. Zhao, H. Li, J. Shi, W. Zhou, F. Li, H. Yue, Y. Li*, W. Wei*, G. Ma*, D. Ma*. Ferritin-based targeted delivery of arsenic to diverse leukaemia types confers strong anti-leukaemia therapeutic effects. *Nat Nanotechnol.* 2021, 16(12): 1413-1423.
- [5] W. Yang, H. Yue, G. Lu, W. Wang, Y. Deng, G. Ma*, W. Wei*. Advances in delivering oxidative modulators for disease therapy. *Research.* 2022: 9897464.
- [6] F. Li, Y. Yang, H. Yue, S. Wang, X. Zhang*, W. Wei*. Microneedle patch loaded with ferritin-nanocaged doxorubicin for locally targeted drug delivery and efficient skin cancer treatment. *Particuology.* 2024, 88: 282-289.

微流控传质强化和颗粒形貌调控及其应用

陈东^{1,*}

¹浙江大学, 浙江省杭州市, 310027

*chen_dong@zju.edu.cn

摘要正文: 微流控技术已成为化学工程等多学科交叉前沿和热点研究方向, 其中微流控传质强化及其内在机制是该前沿方向的重要基础。面向这一前沿和重要领域, 围绕“界面调控”这一研究方向开展了一系列工作, 重点针对纳米颗粒形貌的调控, 展开了系统深入的研究, 研究确定了在微流控通道中, 溶剂的混合时间小于纳米颗粒的聚集时间, 这确保了不同材料可以共同沉淀析出^[1,2]。在此基础上深入研究了扩散系数对纳米颗粒形貌的影响, 实现了颗粒、微囊等不同颗粒形貌的调控^[3-5], 并针对大健康, 利用所制备的生物相容的颗粒、微囊等不同载体开展了应用探索^[6-8]。

关键词: 微流控; 传质强化; 界面调控; 颗粒形貌调控

参考文献

- [1] L. Kong[#], R. Chen[#], X. Wang, C. Zhao, Q. Chen, M. Hai, D. Chen*, Z. Yang*, D.A. Weitz*, Controlled co-precipitation of biocompatible colorant-loaded nanoparticles by microfluidics for natural color drinks. *Lab on a chip*. 19(12): 2089-2095.
- [2] B. Wu[#], C. Yang[#], B. Li, L. Feng, M. Hai, C.-X. Zhao, D. Chen*, K. Liu*, D.A. Weitz, Active Encapsulation in Biocompatible Nanocapsules. *Small*. 16(30): 2002716.
- [3] Z. Sun, C. Yang, F. Wang, B. Wu, B. Shao, Z. Li, D. Chen*, Z. Yang*, K. Liu*, Biocompatible and pH-Responsive Colloidal Surfactants with Tunable Shape for Controlled Interfacial Curvature. *Angew. Chem. Int. Ed.* 59(24): 9365-9369.
- [4] B. Wu[#], Z. Sun[#], J. Wu[#], J. Ruan, P. Zhao, K. Liu, C.-X. Zhao, J. Sheng*, T. Liang*, D. Chen*, Nanoparticle-Stabilized Oxygen Microcapsules Prepared by Interfacial Polymerization for Enhanced Oxygen Delivery. *Angew. Chem. Int. Ed.* 60(17): 9284-9289.
- [5] Z. Sun[#], C. Yang[#], M. Eggersdorfer, J. Cui, Y. Li, M. Hai, D. Chen*, D.A. Weitz*, A general strategy for one-step fabrication of biocompatible microcapsules with controlled active release. *Chin. Chem. Lett.* 31(1): 249-252.
- [6] D. Chen, E. Amstad, C. Zhao, L. Cai, J. Fan, Q. Chen, M. Hai, S. Koehler, H. Zhang*, F. Liang, Z. Yang, D.A. Weitz*, Controlled co-precipitation of biocompatible colorant-loaded nanoparticles by microfluidics for natural color drinks. *ACS nano*. 11(12): 11978-11985.
- [7] C. Yang[#], B. Wu[#], J. Ruan, P. Zhao, L. Chen, D. Chen*, F. Ye*, 3D-Printed Biomimetic Systems with Synergetic Color and Shape Responses Based on Oblate Cholesteric Liquid Crystal Droplets. *Adv. Mater.* 33(10): 2006361.
- [8] B. Wu[#], C. Yang[#], Q. Xin[#], L. Kong, M. Eggersdorfer, J. Ruan, P. Zhao, J. Shan, K. Liu, D. Chen*, D.A. Weitz, X. Gao*, Attractive Pickering Emulsion Gels. *Adv. Mater.* 33(33): 2102362.

其他活动

Selenized neural stem cell-derived exosomes: a neotype therapeutic agent for traumatic injuries of the central nervous system

Wenjing Wang, Guanghui Ma*, Wei Wei*

¹ State Key Laboratory of Biopharmaceutical Preparation and Delivery, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190

* weiwei@ipe.ac.cn; ghma@ipe.ac.cn

Oxidative damage and neuroinflammation are the hallmarks of exacerbated traumatic injury to the central nervous system (CNS). Drawing inspiration from the neuroprotective properties of exosomes derived from neural stem cells (NExo) and the reactive oxygen species (ROS) scavenging capacity of selenium, we developed an advanced NExo bearing ultrasmall nano-selenium (~3.5 nm) via lipid-mediated nucleation (SeNExo). In addition to maintaining the biological components of NExo, the resulting SeNExo exhibited a unique Se-O bond that dramatically enhanced its ROS scavenging performance. We elucidated that SeNExo utilized ligand (APOE)_receptor (LRP-1) interactions for blood-brain barrier (BBB) penetration. Through extensive analysis of proteomics, miRNA omics, and single-nucleus RNA sequencing, we revealed that SeNExo could alleviate neuronal apoptosis, restore glia homeostasis, and remodel glia-neuron network. Therefore, SeNExo conferred potent therapeutic benefits in a murine traumatic brain injury model and a spinal cord injury model, further support SeNExo as a neotype and a promising therapeutic agent for treating traumatic CNS injury.

Keywords: Neural stem cells, exosomes, selenium, blood-brain barrier, CNS injury.

喷雾干燥法制备羟丙基甲基纤维素低密度中空大颗粒研究

黄永鹏, 唐慧, 孟祥燕, 陈博*

核生化灾害防护化学全国重点实验室, 北京, 102205

*Email: NBC_BoChen@163.com

摘要正文: 在肺部药物递送中, 空气动力学直径在 $1 \sim 5 \mu\text{m}$ 之间的颗粒一般通过重力作用沉积到肺部, 大于 $5 \mu\text{m}$ 的颗粒主要通过惯性撞击沉积在胸腔外区域, 而空气动力学直径小于 $0.5 \mu\text{m}$ 的颗粒则通过布朗运动呼出体外^[1]。然而, 肺部还可能通过肺泡巨噬细胞的吞噬作用清除几何粒径为 $1 \sim 2 \mu\text{m}$ 的颗粒。低密度多孔大颗粒几何粒径较大, 聚集趋势低, 且可有效较少巨噬细胞的吞噬作用, 一直是肺部药物递送的研究热点。虽然低密度多孔大颗粒在肺部药物递送中展示出良好的应用前景, 但其仍有一些局限性, 例如: 不完全适用于所有药物, 药物释放曲线无法预测, 多孔结构容易造成颗粒破碎, 大规模生产难度大等。因此, 研发新型低密度大颗粒是研究热点和重大挑战。喷雾干燥工艺是药物制剂领域最成熟的技术之一, 也常用于制备低密度多孔大颗粒^[2]。羟丙基甲基纤维素(HPMC)具有溶解性能优异、低表面张力、低吸湿性、高玻璃化转变温度、优异的塑性变形等特点, 是药物制剂领域最常用的辅料之一^[3]。此外, HPMC还具有改善水难溶性药物溶解性能和生物利用度的优点^[4]。本文采用喷雾干燥工艺制备了HPMC颗粒, 考察了乙醇-水溶液体系对颗粒粒径和形貌的影响。结果表明, 乙醇与水的体积比对HPMC颗粒的粒径及形貌产生显著影响, 且可以得到一种新型的低密度中空大颗粒, 典型低密度中空大颗粒的粒径分布和形貌如图1所示。课题组后续将进一步研究这种典型低密度中空大颗粒形成的机理, 同时以HPMC为辅料进一步制备含药物的低密度中空大颗粒, 考察其用于肺部药物递送的性能, 为干粉吸入剂研发提供新的思路。

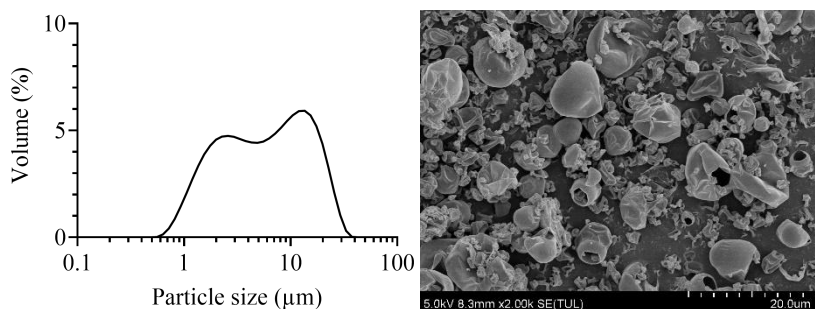


Fig. 1 Particle size and SEM images of typical hollow large particles

关键词: 肺部药物递送; 干粉吸入剂; 羟丙基甲基纤维素; 低密度中空大颗粒

参考文献

- [1] W. R. Ke, R. Y. K. Chang, and H. K. Chan. Engineering the right formulation for enhanced drug delivery. *Adv. Drug. Deliver. Rev.* 2022, 191: 114561.
- [2] A. N'Guessan, E. Fattal, D. Chapron, et al. Dexamethasone palmitate large porous particles: a controlled release formulation for lung delivery of corticosteroids. *Eur. J. Pharm. Sci.* 2018, 113: 185–192.
- [3] C. Jin, F. Wu, Y. Hong, et al. Updates on applications of low-viscosity grade hydroxypropyl methylcellulose in coprocessing for improvement of physical properties of pharmaceutical powders. *Carbohydr. Polym.* 2023, 311: 120731.
- [4] N. Fan, P. Ma, X. Wang, et al. Storage stability and solubilization ability of HPMC in curcumin amorphous solid dispersions formulated by Eudragit E10. *Carbohydr. Polym.* 2018, 199: 492–498.

药物辅料颗粒微量异质性探索：聚焦比表面积
与表面能量特性

严琨¹，席悦¹，Eric Brendle²，杨正红³，张盛宇¹，吴铎^{1,*}

¹苏州大学材料与化学化工学部，江苏省苏州市，中国，215123

²Adscientis, Wittelsheim, 法国，F-68310

³理化联科（北京）仪器科技有限公司，北京市，中国，102299

*Email: duo.wu@suda.edu.cn

摘要正文：药物辅料颗粒的表面特性，包括比表面积、表面形貌及表面能量等属性，在药物研发与生产过程中扮演着至关重要的角色。这些特性的精确测定不仅直接关系到辅料的物理化学性质，还深刻影响着最终制剂的性能表现。特别是，辅料的表面特性，如粉体流动性、压缩性及吸湿性，对固体制剂的成型质量与稳定性具有决定性的影响^[1]。然而，当前在比表面积与表面能量特性的表征分析方面仍存在显著的技术瓶颈。对于超低比表面积（ $< 0.1 \text{ m}^2/\text{g}$ ）的测试，常规方法往往面临检测灵敏度不足和脱气过程易引入误差等挑战。此外，即使不同批次的辅料颗粒在宏观形貌、尺寸和结晶特性上相似，其表面能量特性（包括色散表面能、表面酸碱性及分子粗糙度）的微量差异仍可能导致显著的性能差异，而现有技术对此类微观异质性的解析能力有限。针对上述问题，本研究以三个不同厂家的聚乙烯吡咯烷酮（Polyvinylpyrrolidone K30，PVP K30）为模型物质，采用梯度脱气控制技术结合恒温管路设计的物理吸附仪，实现了超低比表面积的高精度测定。同时，应用反气相色谱技术构建了表面能量异质性定量模型，系统解析了色散表面能、酸碱作用参数与分子粗糙度的差异。这些研究成果不仅为仿制药和新药开发中的质量控制提供了坚实的技术支持，还为药物原辅料表面特性的标准化检测方法的建立提供了重要的理论依据和实践指导。

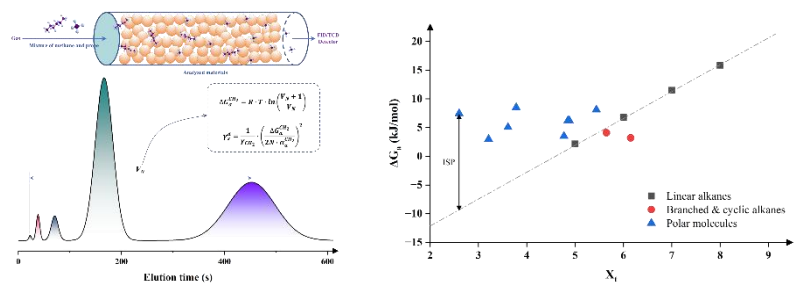


Fig. 1 Schematic graph of surface energetics characterization by inverse gas chromatography method.

关键词：聚乙烯吡咯烷酮；反气相色谱；物理吸附；表面能量特性；超低比表面积

参考文献

[1] Vikram Karde, Chinmay Ghoroi, Influence of surface modification on wettability and surface energy characteristics of pharmaceutical excipient powders, Int. J. Pharmaceut., 2014, 475, 351-363.

第十六分论坛

大气颗粒物健康效应前沿论坛

口头报告

民用固体燃料燃烧源暴露对氨基酸相关代谢的影响探索

顾芸瑄¹, 徐红梅^{1,*}

¹西安交通大学, 能动学院环境工程系, 西安市碑林区咸宁西路 28 号, 710049

*Email: guyunxuan@stu.xjtu.edu.cn

摘要正文:

空气污染已成为人类健康面临的最大的环境威胁之一, 每年导致约700万人过早死亡, 其中室内空气污染贡献超过一半。在我国西北农村地区, 固体燃料仍是最主要的家庭能源形式, 占比约85%, 对冬季PM_{2.5}贡献超过20%。PM_{2.5}中广泛存在的含氮有机物(NOCs), 包括尿素、游离氨基酸(FAA)、腈类、芳香胺等, 主要来源于生物质与化石燃料燃烧, 其对人体健康的代谢影响机制尚不清晰。

本研究基于我国西北农村实地调查, 采集使用固体燃料与电取暖人群的环境暴露样品与尿液样本, 分析PM_{2.5}和PM_{0.25}中六类NOCs的暴露水平, 结合靶向与非靶向代谢组学手段, 评估代谢通路变化, 并测定氧化应激与炎症生物标志物(8-OHdG、VEGF、IL-8、CRP)。通过PCA、PLS-DA、差异分析、KEGG富集与拓扑分析, 系统探讨NOCs暴露的健康效应通路。

结果显示, 固体燃料组PM_{2.5}中NOCs六大类浓度均显著高于电组, 尤以尿素和游离氨基酸为主导。FAA和腈类与8-OHdG、IL-8、VEGF、CRP呈显著正相关, 暴露-反应关系明确, 且在高浓度下呈现协同效应。靶向代谢组结果显示, 4-羟基苯乳酸、甲胍和血清素在固体燃料组中显著降低。非靶向代谢物富集于氨基酸、脂质、视黄醇(维生素A)和花生四烯酸等代谢通路, 提示固体燃料相关污染可能引发系统性炎症、氧化应激及神经代谢干扰。

本研究首次在农村实地人群中系统揭示了NOCs暴露与多条代谢通路和健康标志物之间的关联, 指出FAA和腈类可能是关键健康危害因子。结果为未来基于代谢组的暴露标志物筛选与健康风险评估提供了科学依据, 并为推动农村清洁能源转型提供分子层面支持。

关键词: 空气污染; 固体燃料; 含氮有机物; 代谢组学;

NTP灭活细菌气溶胶机制解析：单键态氧的主导作用与细胞膜氧化损伤

吉硕¹，王西亚¹，党小庆^{1,*}

¹ 西安建筑科技大学环境与市政工程学院 陕西省环境工程重点实验室，陕西，710055

*Email: jishuo789@163.com

摘要正文：

研究背景与目的：新冠疫情的爆发使得空气生物安全性问题备受瞩目，低温等离子体（NTP）技术可在常温常压下实现快速、高效节能的空气消毒，在提高空气生物安全性方面应用前景广阔。然而，NTP中的活性粒子对细菌气溶胶的灭活是一个复杂的多因素协同过程，过程中活性物种贡献程度及灭活机制进行有待深入研究。

研究方法：本研究通过改变放电电气氛并结合活性物种猝灭实验，探究在灭活过程中活性物种起到的贡献作用，结合表征明确NTP对细菌气溶胶的灭活机理。

结果与讨论：研究表明：介质阻挡放电（DBD）灭活大肠杆菌的能量效率（EE/O）为0.021 kW·h·m⁻³，枯草芽孢杆菌为0.027 kW·h·m⁻³，低于紫外线灭活的EE/O^[1,2]。相较于空气气氛，在氮气气氛下，细菌气溶胶灭活效率降低了65.0%~86.1%，活性氮(RNS)灭活效果有限；空气气氛放电产生的活性氧（ROS）包括¹O₂、O₂⁻和·OH，灭活贡献率分别为60.7%、23.3%和5.5%，灭活过程是以¹O₂为主导的非自由基氧化过程。NTP对细菌气溶胶的灭活效果主要来自于放电过程中产生的大量的¹O₂直接接触细胞膜结构，攻击磷脂双分子层与膜蛋白，不可逆转的损伤膜结构。胞外聚合物水解，细菌对¹O₂易感性增强，有利于灭活。细胞内容物及核酸由细胞膜结构孔洞中浸出，粘附于气溶胶表面，直接暴露在NTP中，进一步被降解为无机物，核酸变性细菌失去生物活性。持续产生以¹O₂为主的ROS由细胞膜结构孔洞进入胞内，积累并诱导胞内ROS水平升高，形成氧化应激效应，干扰细胞内ROS参与的代谢过程，超过抗氧化系统调节范围时，造成遗传物质损伤，细胞膜结构的破坏与氧化应激效应共同作用导致细菌死亡。

结论：本研究通过系统诊断活性物种贡献程度并结合表征分析，明确了NTP灭活细菌气溶胶的机理，为NTP空气消毒技术的优化与应用提供了重要理论依据，为开发高效空气消毒装置、提升空气生物安全性提供技术支持。

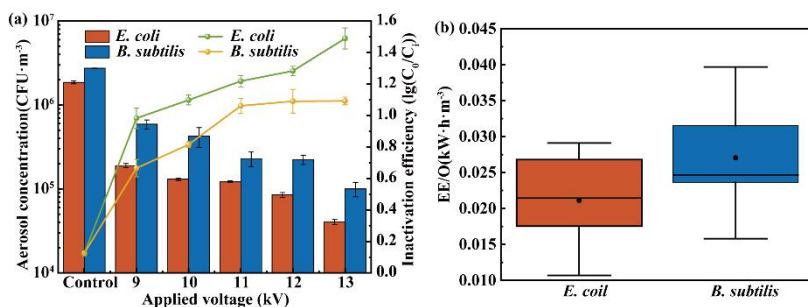


Fig. 1 Energy consumption of DBD reactor

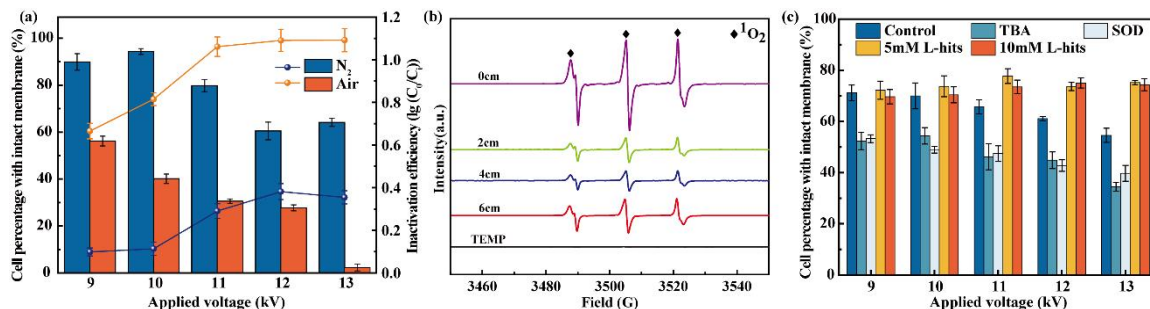


Fig. 3 Effects of air and pure N₂ atmosphere on DBD inactivated species

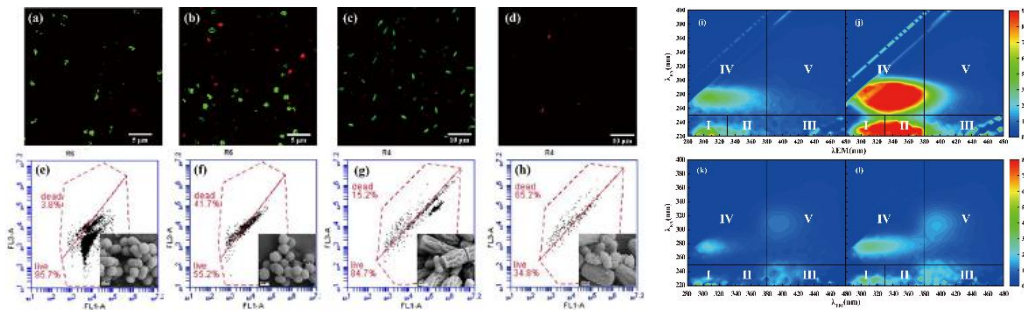


Fig. 4 Inactivation of the model bacteria by DBD

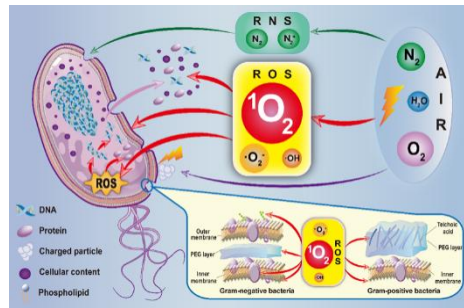


Fig. 5 Mechanism of NTP inactivating bacterial aerosol

关键词： DBD等离子体；细菌气溶胶灭活；活性物种贡献程度；单线态氧；细胞膜氧化损伤

参考文献

- [1] Y.H. Lu, R.X. Wang, H.L. Liu, A.C.K. Lai, Evaluating the performance of UV disinfection across the 222–365 nm spectrum against aerosolized bacteria and viruses, *Environ. Sci. Technol.* 2024, 58: 6868–6877.
- [2] P. Xiong, J. Hu, Inactivation/reactivation of antibiotic-resistant bacteria by a novel UVA/LED/TiO₂ system, *Water Res.* 2013, 47: 4547–4555.

元素碳颗粒与短期毒性的非因果关联

陈秀¹, 吴蒨¹, 李庆^{1*}

¹复旦大学, 上海市杨浦区邯郸路 220 号, 200433

*qli@fudan.edu.cn

摘要正文: 大气中的黑碳或元素碳 (EC) 颗粒与呼吸系统疾病存在流行病学关联^[1,2]。然而, EC的呼吸毒性效应未得到毒理学的证明, 导致难以构建EC与不良健康结局的因果关系。本研究通过整合新兴类器官与传统上皮细胞模型量化了EC颗粒的呼吸毒性以及其对大气细颗粒物 (PM_{2.5}) 的贡献。结果表明, 无论是人源气道类器官还是上皮细胞, 单纯EC (包括char和soot) 暴露诱发的急性呼吸毒性都较微弱。每单位质量EC的毒性比多环芳烃 (PAHs) 的毒性低两个数量级以上, 且对大气PM_{2.5}的贡献仅有1%。尽管我们发现EC浓度与大气PM_{2.5}诱导的毒性呈显著正相关关联 ($p < 0.0001$), 但直接的毒性结果显然表明这一关联不足以构成因果关系。通过追踪EC的来源发现, EC的中间产物PAHs分别贡献了固体和液体燃料不完全燃烧源PM_{2.5}总毒性效力的71.9 ± 12.2% 和 61.9 ± 32.8%, 且PM_{2.5}毒性与PAHs含量呈强相关性 ($r = 0.94$, $p = 0.002$)。因此, 本研究证明共排放的PAHs而非EC本身是PM_{2.5}短期呼吸毒性的主要驱动因子, 突破了对EC毒性的传统认知。这些发现为理解与暴露于颗粒物相关的呼吸健康风险提供了因果证据, 并有利于进一步建立有效的空气污染控制政策。

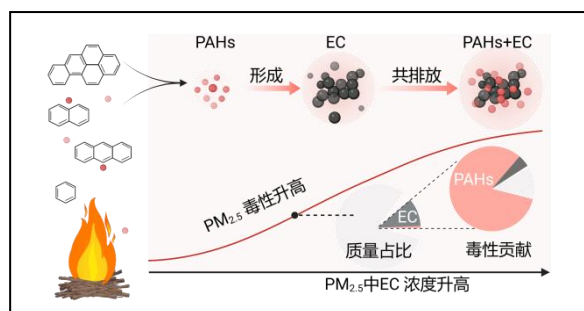


Fig. 1 PM_{2.5}-induced toxic potency associated with elemental carbon (EC) concentration is mediated by PAHs as a contributory cause

关键词: 黑碳; 元素碳; PM_{2.5}毒性; 多环芳烃; 健康风险

参考文献

- [1] K. R. Smith, M. Jerrett, H. R. Anderson, R. T. Burnett, V. Stone, R. Derwent, R. W. Atkinson, A. Cohen, S. B. Shonkoff, D. Krewski, C. A. Pope, M. J. Thun, and G. Thurston Public health benefits of strategies to reduce greenhouse-gas emissions: Health implications of short-lived greenhouse pollutants. *The Lancet*, 2009, 374(9707): 2091–2103.
- [2] Y. Li, D. K. Henze, D. Jack, B. H. Henderson and P. L. Kinney Assessing Public Health Burden Associated with Exposure to Ambient Black Carbon in the United States. *Sci Total Environ*, 2016, 539:515–525.

大气PM_{2.5}及其组分对儿童健康影响

李晶^{1,*}, 王雅琪, 连昕瑶, 郭剑辉

¹北京大学公共卫生学院儿童青少年卫生研究所, 北京, 100191

*Email:jing.li@hsc.pku.edu.cn

摘要正文: 大气细颗粒物 (PM_{2.5}) 及其组分对学龄儿童身心健康影响研究缺乏。基于具有全国代表性的横断面调查数据和儿童随访队列, 开展PM_{2.5}及其组分对儿童身心健康影响研究。身体方面关注儿童代谢综合征, 基于5万余名儿童青少年心血管健康数据, 结合多源数据融合反演的高分辨率PM_{2.5}组分浓度数据集, 探讨黑碳、硝酸盐、有机物、硫酸盐和土壤颗粒物5种PM_{2.5}组分长期暴露对儿童青少年代谢综合征的影响, 该研究发现长期暴露于PM_{2.5}和特定的组分, 尤其是黑碳, 可能会显著增加儿童代谢综合征 (MetS) 的患病风险。进一步基于纵向研究设计, 在2005-2018年间对北京市和中山市140万名6-19岁的学龄儿童展开随访调查, 旨在探究PM_{2.5}及五个主要成分对超重或肥胖发生率的影响, 并比较PM_{2.5}及其组分暴露对BMI变化轨迹的影响。研究发现PM_{2.5}及其组分 (硫酸盐、有机物和黑碳) 暴露与超重肥胖的发生风险增加显著相关。从暴露-反应曲线来看, 随着PM_{2.5}、硫酸盐、有机物和黑碳浓度的增加, 超重肥胖的发生风险呈现单调递增趋势。为了探究PM_{2.5}及其组分暴露与儿童BMI变化轨迹之间的关联, 研究选取了12万名在2005-2018年间至少进行了8次体检的儿童绘制BMI和BMI Z-score变化轨迹。结果表明PM_{2.5}及其五种组分暴露与儿童较高的BMI增长轨迹有关, 且显著增加儿童处于持续超重肥胖轨迹的风险。青少年心理健康问题日益突出, 已成为青少年疾病和残疾的主要原因之一。基于中国学生体质与健康调查的大样本数据、每日死因监测数据和北京市儿童青少年队列调查, 探讨大气污染与青少年心理健康的关系, 评估学校周边绿色环境在这些关系中的潜在调节作用, 并探讨了炎症的中介效应。

关键词: PM_{2.5}; 组分; 儿童, 流行病学

参考文献

- [1] Jing Li, Yanhui Dong, Yi Song, Bin Dong, Aaron van Donkelaar, Randall V. Martin, Liuhua Shi, Yinghua Ma, Zhiyong Zou*, Jun Ma*. Long-term effects of PM(2.5) components on blood pressure and hypertension in Chinese children and adolescents [J]. *Environment International*, 2022, 161: 107134.
- [2] Jing Li, Yi Song, Liuhua Shi, Jun Jiang, Xiaoyu Wan, Yaqi Wang, Yinghua Ma, Yanhui Dong*, Zhiyong Zou*, Jun Ma. Long-term effects of ambient PM2.5 constituents on metabolic syndrome in Chinese children and adolescents [J]. *Environmental Research*, 2023, 220: 115238.
- [3] Yaqi Wang, Weiming Li, Shuo Chen, Jingbo Zhang, Xiangtong Liu, Jun Jiang, Li Chen, Ziqi Tang, Xiaoyu Wan, Xinyao Lian, Baosheng Liang, Shaodong Xie, Jun Ma, Xiuhua Guo, Yanhui Dong*, Lijuan Wu*, Jing Li*, Petros Koutrakis. PM2.5 constituents associated with childhood obesity and larger BMI growth trajectory: a 14-year longitudinal study[J]. *Environment International*, 2024.
- [4] Jianhui Guo, Eric Garshick, Feifei Si, Ziqi Tang, Xinyao Lian, Yaqi Wang, Jing Li*, Petros Koutrakis. Environmental Toxicant Exposure and Depressive Symptoms[J]. *JAMA Network Open*, 2024.

典型生物质不完全燃烧源的有机指纹图谱和毒性解析

王悦倩¹, 吴葑¹, 李庆^{1,*}, 陈建民¹

¹复旦大学环境科学与工程系, 上海市大气颗粒物污染防治重点实验室, 中国上海, 200433

*Email: qli@fudan.edu.cn (李庆)

摘要正文: 生物质不完全燃烧排放成分复杂的气态和颗粒态有机污染物, 但其具体的化学组成和毒性特征尚未被充分识别。本研究通过全二维气相色谱-飞行时间质谱 (GC×GC-ToF-MS) 的非靶标分析方法, 解析了典型生物质不完全燃烧源排放有机物的化学指纹图谱, 并评估了其毒性强度。结果表明, 气态有机物的质量浓度和毒性当量 (TEQ) 分别为颗粒态有机物的 2.2–8.9 倍和 1.8–11.4 倍。中等/半挥发性有机物 (I/SVOCs) 在气态和颗粒态中均占主导地位, 其中 I/SVOCs 占气态总质量浓度和总 TEQ 的比例分别为 $78.9 \pm 9.2\%$ 和 $78.3 \pm 9.3\%$, 在颗粒态中分别占 $87.2 \pm 9.6\%$ 和 $89.8 \pm 7.2\%$ 。质量浓度与 TEQ 之间具有显著相关性 ($r = 0.91$, $p < 0.0001$), 表明对生物质不完全燃烧源而言, 基于质量浓度的污染控制策略与以健康风险为导向的控制策略具有一致的效果。本研究还筛选出若干能够表征生物质燃烧排放特征的有机标志物, 用于颗粒物源解析可提高污染源识别的精度。

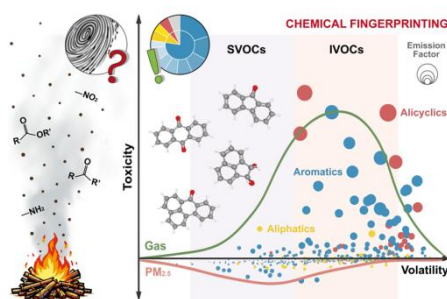


Fig. 1 Table of contents graphic. The chemical fingerprinting of typical incomplete biomass burning source profiles the relative mass concentration of organic species identified through nontargeted analysis.

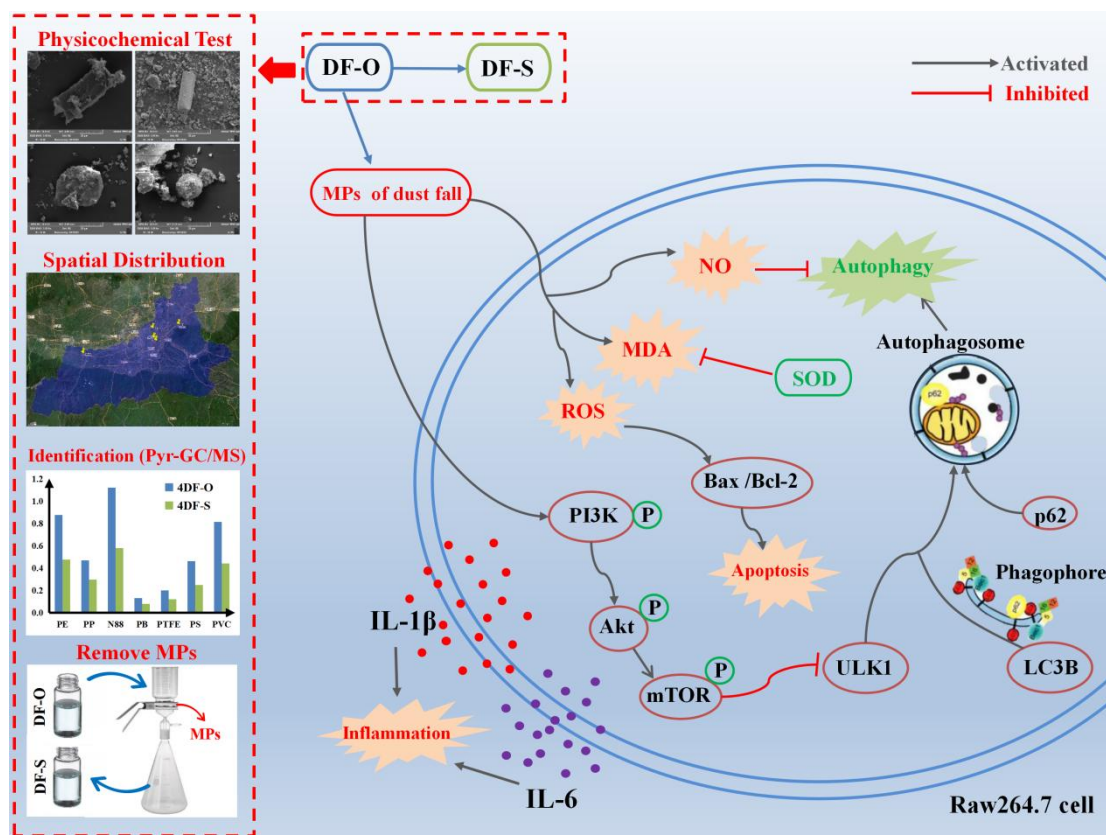
关键词: 空气污染; 生物质燃烧; 非靶标筛查; 有机物指纹识别; 毒性评估

参考文献

- [1] Guo, Z.; Chen, X.; Wu, D.; Huo, Y.; Cheng, A.; Liu, Y.; Li, Q.; Chen, J., Higher Toxicity of Gaseous Organics Relative to Particulate Matters Emitted from Typical Cooking Processes. *Environmental Science & Technology* 2023, 57, (44), 17022-17031.
- [2] Huo, Y.; Guo, Z.; Liu, Y.; Wu, D.; Ding, X.; Zhao, Z.; Wu, M.; Wang, L.; Feng, Y.; Chen, Y.; Wang, S.; Li, Q.; Chen, J., Addressing Unresolved Complex Mixture of I/SVOCs Emitted From Incomplete Combustion of Solid Fuels by Nontarget Analysis. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 2021, 126, (23), e2021JD035835.
- [3] Wu, D.; Zheng, H.; Li, Q.; Jin, L.; Lyu, R.; Ding, X.; Huo, Y.; Zhao, B.; Jiang, J.; Chen, J.; Li, X.; Wang, S., Toxic potency-adjusted control of air pollution for solid fuel combustion. *Nature Energy* 2022, 7, (2), 194-202.
- [4] Huang, G.; Wang, S.; Chang, X.; Cai, S.; Zhu, L.; Li, Q.; Jiang, J., Emission factors and chemical profile of I/SVOCs emitted from household biomass stove in China. *Science of The Total Environment* 2022, 842, 156940.

中国特大城市降尘微塑料通过 PI3K/Akt/mTOR 通路抑制细胞自噬

马雅静 孙健* 沈振兴 曹军骥



本研究鉴定了中国特大城市大气降尘中存在的微塑料类型,而且微塑料去除后的降尘(DF-S)相比原降尘(DF-O),保护性自噬水平有所恢复、细胞毒性明显降低,说明微塑料(MPs)的存在对降尘(DF)的细胞内稳态具有重要影响;同时对降尘微塑料(DF-MPs)潜在生物毒性及自噬抑制机制进行了阐明,发现 DF-MPs 主要通过调节 PI3K/Akt/mTOR 信号通路抑制自噬并激活凋亡程序,导致细胞氧化应激和炎症水平明显增加引起细胞毒性。该研究对大气 MPs 污染防治方向提供了一定的理论参考,为其健康风险评估提供了新的思路,并对未来 MPs 肺部毒性治疗药物的研发提供依据。

其他活动

煤火有机气溶胶潜在来源及环境影响

梁明^{1,*}，卓厚骏¹，杨舒涵¹，梁汉东²，程宏飞³

¹ 西安科技大学 陕西省煤炭绿色开发地质保障重点实验室，西安，710054

² 中国矿业大学（北京）煤炭精细勘探与智能开发全国重点实验室 北京，100083

³ 长安大学 地球科学与资源学院

*Email: mingliang@xust.edu.cn

摘要正文：煤火是煤层长期接触空气导致自发氧化至自燃后，逐步发展和形成一定的规模并对周围环境形成危害的现象。它不仅造成煤炭资源损失，而且会排放大量有毒有害气体、汞和颗粒物（气溶胶），对生态环境、人体健康造成巨大威胁。气溶胶成分复杂，来源多样，难以解析。因此，探究能够代表煤火源的分子标志物极为重要。我们以乌达典型煤火区为研究对象，对采集的颗粒物（PM_{2.5}）进行表征和有机组分分析，结果发现其不仅含有飞灰、硅铝酸盐、煤尘颗粒，而且还有丰富的多环芳烃（PAHs），包括“16PAHs + R-PAHs + HOOC-PAHs + HCO-PAHs”复杂分子系列。结合已报道文献和统计学方法，初步确定了萘和菲可作为煤火有机气溶胶的潜在分子标志物组合。这将有有望解决区域环境有机气溶胶的未知来源问题，为大气环境健康研究提供基础支撑。

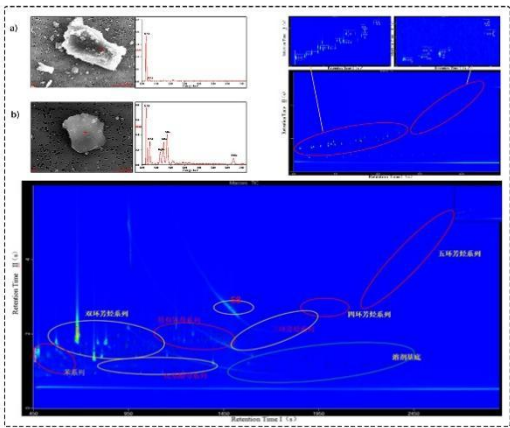


Fig. 1 Coal gas aerosol particles and mass spectrogram

关键词：煤火；颗粒物；质谱；健康

墙报摘要

Insight into the Size Markers and Eco-Health Significance of Microplastics and Plasticizers from Typical Sources in Northwest China

Liyan Liu¹, Hongmei Xu^{1*,2}, Mengyun Yang¹, Abdullah Akhtar¹, Jian Sun¹, Zhenxing Shen^{1,2}

¹Department of Environmental Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049, China

²SKLLQG, Key Lab of Aerosol Chemistry & Physics, Institute of Earth Environment, Chinese Academy of Sciences, Xi'an, 710061, China

*Corresponding author: Hongmei Xu, Department of Environmental Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University,

Xi'an, 710049, China. E-mail: xuhongmei@xjtu.edu.cn.

Abstract

Microplastics (MPs) and plasticizers are recognized as emerging pollutants. Research on atmospheric MPs from typical sources is limited, constraining the targeted management of pollution. Here, the characteristics and source profiles of eight types of common MPs and three classes of plasticizers (phthalates, benzothiazole and its derivatives, bisphenol A) emitted from plastic burning (PB), fruit bag burning (FB), road traffic (RT), agricultural film (AF) and livestock breeding (LB) sources were determined in PM_{2.5} and PM₁₀ in the Guanzhong Plain, northern China. PB features high proportions of poly(methyl methacrylate) and 2-hydroxy benzothiazole, with poly(methyl methacrylate) being more abundant in coarse particles (PM_{coarse}). FB exhibits the higher proportion of di-n-octyl phthalate in PM_{coarse} than PM_{2.5}. RT shows a distinguishable profile with high abundances of rubber. The abundance of 2-benzothiazolyl-N-morpholinosulfide in PM_{coarse} was twice that in PM_{2.5} for RT. Polystyrene is the most abundant MP in AF. LB shows the distinguishing feature of benzothiazoles, especially 2-benzothiazolyl-N-morpholinosulfide and N-cyclohexyl-2-benzothiazolesulfenamide. This study investigates the detailed fingerprints of MPs and plasticizers from typical atmospheric MP sources, especially some from rural area. MPs and plasticizers from these sources can cycle through the environment, posing significant eco-health impacts, which is the focus of future research.

Keywords: Microplastic and plasticizer emission source; Fine particulate matter (PM_{2.5}); Coarse particulate matter (PM_{coarse}); Phthalates (PAEs); 2-hydroxy benzothiazole (HOBT)

第十七分论坛

微纳气泡与液滴前沿论坛

主旨报告

常温下固液界面有序水层上的气泡和液滴

王春雷

报告摘要：我们预测这些水分子有序结构导致常温下固体表面上的“不完全浸润有序单层水”，即水滴与水层共存于固体表面上。而当气体分子在该有序水表面聚集时，则会形成水层上的纳米气泡，且气泡有高密度态。近期研究发现该水层体现出低介电常数和低阻尼性质。我们预测这种现象可出现在某些电极、氧化物或矿物表面，可能对矿物浮选、电极表面气体聚集状态有一定的启示意义。

- [1] C Wang and H Fang et al., Phys. Rev. Lett. 103,137801 (2009)
- [2] C Wang and H Fang et al, Science China, Physics, Mechanics & Astronomy, 57, 802 (2014)
- [4] M Qu and C Wang et al. Chem. Sci. 13, 10546 (2022)
- [5] L Huang, D Zhang and C Wang, Chin. Phys. B 34 (1), 014701(2025)
- [6] C Qi, Z Zhu, C Wang et al. J. Phys. Chem. Lett. 12, 931 (2021)
- [7] C Wang, et al., J. Phys. Chem. C 119 , 11679, (2015)

环状气垫 vs. 体相气泡：超疏水纳米多孔表面液滴

撞击过程的快速 X 射线成像

赵彬钰*

中国科学院青海盐湖研究所，青海省西宁市新宁路 18 号，810008

*Email: binyuzhao@isl.ac.cn

液滴撞击固体表面是日常生活中、自然界和工业过程中常见的一种现象。一般认为，当液滴高速撞击固体表面时，通常会在液滴与固体表面之间形成一层一定厚度的气膜，例如：在平整表面上撞击的液滴下方形成的超薄空气膜，在超疏水表面“饼状反弹”液滴下方形成的空气膜，以及在加热表面上莱顿弗罗斯特液滴下方的蒸气膜。我们在超疏水纳米多孔氧化铝表面上的液滴撞击过程中发现了另一种新颖的气膜形式——环状气垫，该环状气垫仅在一个较小的韦伯数范围（约4-8）内形成。利用高速摄像机和快速X射线成像直接观测了该环状气垫的形成和演化过程，结果表明：液滴在撞击表面后铺展再回缩的过程中，内部产生了一个空腔，其底部接近表面时存在一薄层液膜；如果该液膜坍塌，液滴下方会形成环状气垫（Fig. 1a），反之，液滴内部会形成一个体相气泡；液膜的坍塌是由空腔从中部被挤压而分裂后的瞬间一个向下的高速射流造成的，液膜的坍塌可以通过沿空腔的垂直壁面向上的毛细波传播和沿表面从液滴内部向外的内接触线（inner CL）移动得到证实（Fig. 1b）；液膜坍塌后形成了一个气环并向外铺展，液滴和表面在外接触线（outer CL）处的接触被打破后，气环中封闭的空气溢出，从而形成环状气垫。我们对环状气垫和体相气泡的形成条件、动力学过程进行了详细的对比研究。

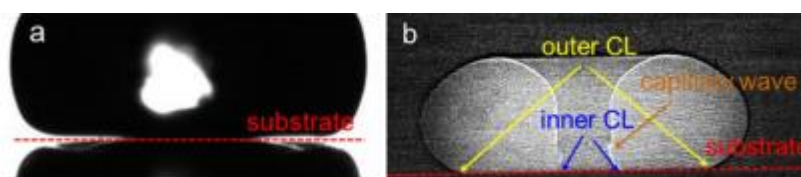


Fig. 1 (a) Ring-shaped air cushion underneath the impacting droplet observed by high-speed camera. (b) Collapse of the liquid film and the capillary wave at the wall of the air cavity observed by fast X-ray imaging.

关键词：液滴撞击；液膜；环状气垫；气泡；快速 X 射线成像

邀请报告

T型微通道内含表面活性剂的液滴界面失稳机理研究

张静刚^{1,*}, 王永光², 陈力¹, 沈林骏¹, 崔海航^{1,*}

¹ 西安建筑科技大学, 西安, 710055

*Email: jinggangzhang@stu.xjtu.edu.cn

本文采用格子玻尔兹曼方法探究了添加低浓度表面活性剂对 T 型微通道内液滴非等体积破裂的抑制策略, 其中微通道壁面由于制造缺陷产生的非对称性建模为两支通道出口之间的压强差 (ΔP^*)。当 $\Delta P^* = 0$ 时, 研究了表面活性剂在不同初始液滴长度 (l_0^*) 下对液滴动力学行为的影响。结果表明: 在较小或中等 l_0^* 值时添加表面活性剂会促进液滴变形和颈部断裂, 而在较大 l_0^* 值时表面活性剂的作用被削弱。当分支通道被液滴完全堵塞 (较大 l_0^* 值), 液滴长度随时间线性增加, 并且提出了两个公式用于预测干净和含表面活性剂液滴的长度随时间的变化。随后研究了 $\Delta P^* \neq 0$ 时表面活性剂在不同 ΔP^* 和表面活性剂浓度下对液滴颈部断裂的影响。随着 ΔP^* 增加, 干净和含表面活性剂系统中生成子液滴的体积比 (V_1/V_2) 均从 1 减小到 0, 然而干净系统中减小速率更大, 这表明添加表面活性剂能有效地抑制液滴非等体积破裂。受 ΔP^* 影响, 液滴在 T 型结发生非对称变形, 液滴底部界面两侧会产生不同的剪切速度, 导致液滴界面上表面活性剂浓度非对称分布。相应地, 液滴底部界面两侧会生成非对称的马兰戈尼应力, 从而抑制液滴界面发生非对称的变形和破裂。随着表面活性剂浓度增加, V_1/V_2 先快速增加, 随后基本保持恒定值, 最后略微减小。最后, 建立了描述 V_1/V_2 随 ΔP^* 和表面活性剂浓度变化的相图, 能用于选取最优的表面活性剂浓度以使表面活性剂对液滴非对称破裂的抑制效果最显著。

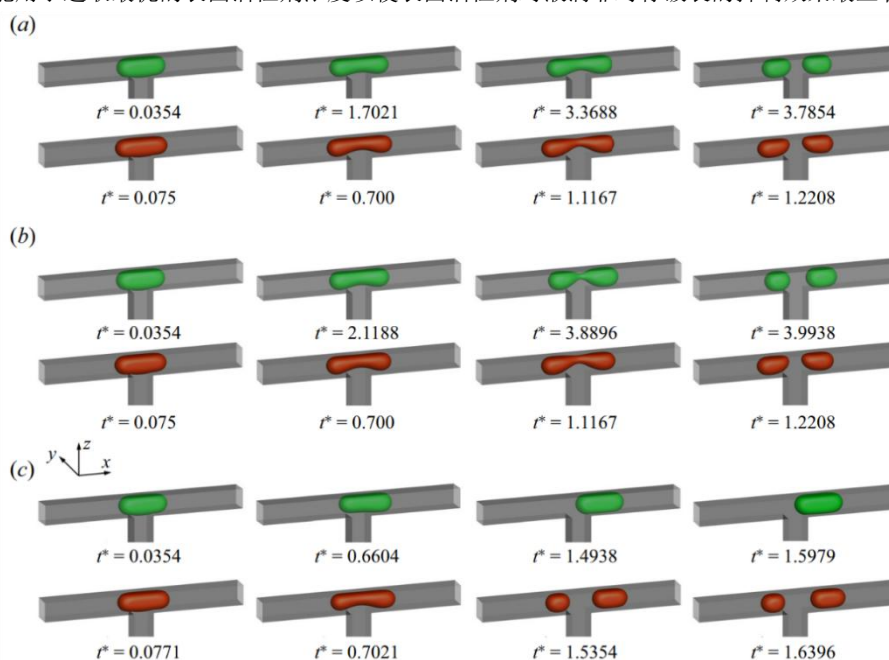


Fig. 1 Snapshots of the droplet flowing through a T-junction microchannel at (a) $\Delta P^* = 10^{-6}$ (b) $\Delta P^* = 3.33 \times 10^{-6}$ and (c) $\Delta P^* = 10^{-3}$ for the clean (top row) and surfactant-laden (bottom row) systems.

关键词：液滴颈部失稳；格子玻尔兹曼方法；表面活性剂，T型微通道

参考文献

- [1] Zhang JG*, Wang YG, Chen L, Shen LJ, Cui HH*. Modelling the passive breakup of a surfactant-contaminated droplet in a T-junction microchannel, *Journal of Fluid Mechanics*, 986: A23.

纳米气泡在微细粒关键金属矿产资源富集分选中潜在应用

张凡凡*

郑州大学，河南省郑州市科学大道 100 号，450001

*Email: fanfanzhang2023@zzu.edu.cn

纳米气泡一般指10微米以下的极小微泡，根据其存在形式分为体相纳米气泡和界面纳米气泡，具有比表面积大、终端末速低、寿命长等独特的物理化学特性。现代浮选理论认为纳米气泡可有效促进颗粒与浮选气泡间碰撞、粘附并抑制脱附（图1），扮演着“二次捕收剂”作用，提高浮选回收率。关键金属制约国家战略新兴产业发展及国家经济安全，关键金属矿产资源及其提取是关键金属安全供应的保障。然而，关键金属矿产普遍具有“稀”、“伴”、“细”特点，导致其回收难、利用效率低。目前通过水力空化、压差、温差等方式将纳米气泡引入微细粒矿物浮选中，有效地改善了锡石、钨矿、金红石、辉钼矿等浮选效果。纳米气泡将在微细粒关键金属矿物富集分选中发挥潜在应用优势。

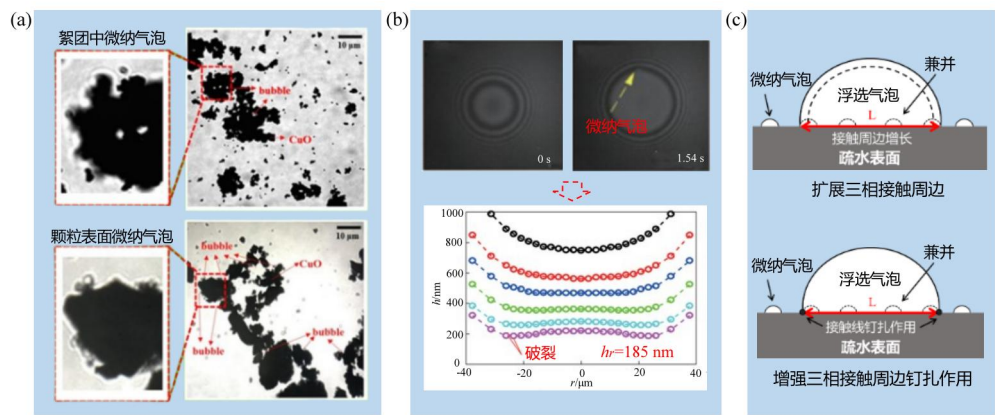


图1 纳米气泡桥接强化浮选过程：(a) 纳米气泡在颗粒絮团及颗粒表面的显微图像；(b) 气泡与疏水表面间液膜时空演化云图；(c) 纳米气泡扩展并增强三相接触周边

关键词： 纳米气泡；浮选；微细粒矿物；桥接；气泡矿化

参考文献：

- [1] F. Zhang, L. Sun, H. Yang, X. Gui, H. Schönherr, M. Kappl, Y. Cao, Y. Xing, Recent advances for understanding the role of nanobubbles in particles flotation, *Advances in Colloid and Interface Science*, 2021, 291: 102403.
- [2] F. Zhang, H. Cai, G. Fan, X. Gui, Y. Xing, Y. Cao, The role of interfacial nanobubbles in the flotation performance of microfine particles, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2024, 699(10): 134633.

电化学中纳米气泡行为的模拟及理论研究

郭振江¹, 张现仁², 王利民^{1,*}

¹中国科学院过程工程研究所, 北京, 100190

²北京化工大学, 北京, 100029

*Email: lmwang@ipe.ac.cn

纳米气泡在电化学过程中普遍存在, 尤其是在电解过程中。电极表面纳米气泡的存在覆盖了电极活性区, 致使能量转换效率显著降低。了解电极上纳米气泡的演化过程将有助于设计高效的电化学电池, 提高电解效率。通过分子动力学模拟方法及理论分析, 本研究系统地比较了电化学中界面纳米气泡在平滑和粗糙电极表面上的行为。在平滑的电极表面上, 受电极尺寸和电解速率的影响, 气泡会出现单点成核和多点成核两种现象。不同的产气量导致了单点成核也表现出三种不同情况: “生长-生长”、“生长-萎缩”和“生长-稳定”行为; 在粗糙的表面上, 产生的气泡在早期阶段接触线被锚定, 可通过多气泡协同作用或自发实现去锚定, 从而继续生长, 直到气泡的流入和流出气体达到平衡。此外, 本研究揭示了粗糙电极上界面纳米气泡的演化机制, 并利用动态平衡模型, 建立了界面纳米气泡的稳定性判据, 同时确定了界面纳米气泡接触角与底面直径之间的理论关系。该理论模型能够定性地描述气泡形状如何依赖于电极表面形貌, 也证明了很多复杂的纳米气泡在电极界面上的行为可以用纳米气泡流入和流出气体之间的竞争来解释。

关键词: 纳米气泡; 电化学; 分子动力学; 动态平衡; 界面

参考文献

- [1] Y. Ma, Z. Guo, Q. Chen, and X. Zhang. Dynamic equilibrium model for surface nanobubbles in electrochemistry. *Langmuir* 2021, 37: 2771-2779.
- [2] Z. Guo, Y. Feng, H. Zhang, Q. Wang, X. Zhang, and L. Wang. The behaviors of interfacial nanobubbles on flat or rough electrode surfaces in electrochemistry. *Langmuir* 2024, 40: 26661-26671.

旋流场中液滴内浓度分布规律及传质过程强化

帅云^{1,*}, 徐宇婷², 黄正梁², 王靖岱², 阳永荣²

¹浙江大学宁波科创中心, 中国宁波, 315100

²浙江大学化学工程与生物工程学院, 中国杭州, 310027

*Email: lqshuaiyun@zju.edu.cn

摘要正文: 在化学工业中, 液-液非均相体系, 常见于环氧化、硝化、皂化、磺化、烷基化反应和乳液聚合等多种非均相反应, 同时也广泛存在于液液非均相萃取等单元操作中^[1]。对于这两类非均相过程, 相间传质速率往往成为决定收率或萃取率的关键因素。在之前的研究中^[2], 我们发现旋流不仅能够大大强化传质, 而且在工业应用方面存在较大潜力, 但是目前对于旋流强化液液两相传质的机制尚不明确。液滴作为液液两相物质传递的基本单元, 认清流动液体中液滴内流动及传质规律具有重要意义。旋流与水平剪切流的不同之处在于其三维旋转剪切流的湍流流动特性, 故其对于液滴内流场的影响必然不同, 由此诱导的液滴传质行为也将显著不同。本文在甲基异丁基酮-乙酸-水体系中采用高速摄像法、平面激光诱导荧光技术(PLIF)与粒子图像测速方法(PIV)考察了旋流对单液滴传质过程中溶质浓度分布、内流场流动和传质特性的影响规律, 并提出了一种旋流场强化液滴传质的机制。实验结果表明, 当外流场静止时, 液滴由于界面张力梯度所引发的Marangoni效应会在液滴界面附近产生较大对流胞, 进一步由于密度差引发的Rayleigh-Bénard效应将对流胞变形成尺度较大的羽状流; 液滴外旋流引发了液滴内强制对流, 从而将对流胞分裂成数量更多、尺度更小的羽状流, 加快了溶质向界面扩散的速率, 使得相界面处的溶质浓度始终能及时得到补充, 改善了液滴内浓度分布的均匀性, 增大了界面处的传质推动力, 传质速率加快, 且随着旋流强度的增大, 传质速率加快越显著。进一步对比液滴的内外流场发现, 旋流场具有振荡的特性, 这种振荡不仅使液滴的内流场在“N”型流场与镜像“N”型流场之间高频切换, 并且还会使液滴左右摆动, 导致了溶质高浓度区域始终与薄边界层同侧, 这种高传质推动力与低传质阻力的协同作用显著强化了液滴的传质。最后, 以液相传质系数 k_L 为指标对液滴的传质性能进行评估, 发现 k_L 随旋流强度和液滴尺寸的增加而增大。

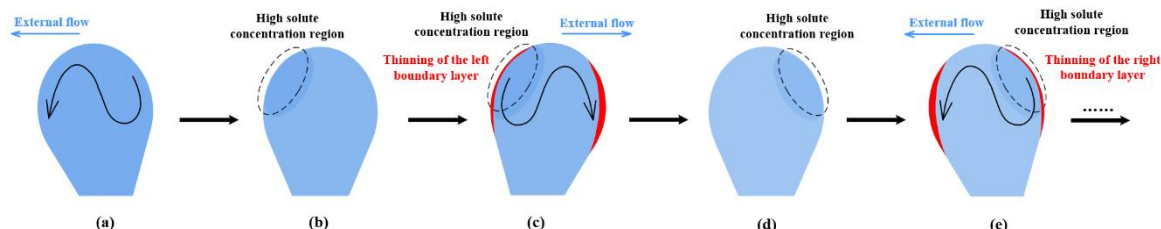


Fig. 1 Mechanism diagram of swirl intensified mass transfer

关键词: 液滴; 旋流场; 液-液界面传质; 过程强化

参考文献

- [1] A. M. Elmagbruk, M. Ye, Y. Wang, et al. A State-of-the-Art Review of Mixing in Microfluidic Mixers. *Chin. J. Chem. Eng.* 2008, 16(4): 503-516.
- [2] Y. Xu, Y. Shuai, Y. Yang, et al. Performance Evaluation and Scale-up of the Swirl-Venturi Microdroplet Generator. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2024, 63(18): 8416-8429.

电化学体系纳米气泡行为计算模拟研究

王振雷^{1,2}, 秦梦凯^{1,2}, 姜浩^{1,2}, 刘亚伟^{1,2,3*}

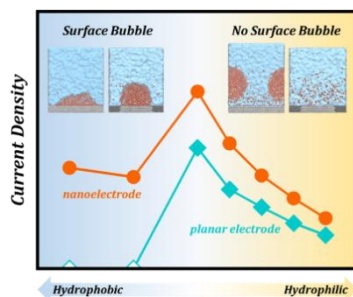
¹中国科学院过程工程研究所, 固态电池与储能过程北京市重点实验室, 北京, 100190

²中国科学院大学, 北京, 100049

³龙子湖新能源实验室, 郑州, 450000

*Email: ywliu@ipe.ac.cn

摘要正文: 在电化学体系中, 气泡的形成通常会覆盖反应活性面积和阻碍传质来降低反应速率, 然而控制纳米气泡成核动力学及其影响机制仍不明确。在本研究中, 利用分子动力学模拟探究了电解水过程中平板电极和纳米电极上的纳米气泡成核及反应速率, 并通过调节水-电极和气体-电极相互作用系统地调节了电极润湿性。模拟发现了不同的成核机制: 气层、表面纳米气泡、体相纳米气泡和无纳米气泡, 并揭示了润湿性与反应速率之间的火山形关系, 其中最佳润湿性能够在抑制气泡和确保足够反应物供应之间取得平衡, 从而实现性能最优化。在相同润湿性条件下, 纳米电极由于显著的边缘效应, 始终表现出比平板电极更高的电流密度。此外, 适度的驱动力可以在不引发表面气泡形成的情况下提高反应速率, 而过度的驱动力则会诱导表面纳米气泡成核, 导致反应速率受到抑制, 并引发由气泡生长和脱离驱动的复杂动力学行为。这些发现强调了精细调控电极润湿性和反应驱动力以优化纳米尺度气体析出电化学系统的重要性, 对全面理解气泡行为及其对性能的影响提供重要的理论依据。



关键词: 纳米气泡; 纳米电极; 润湿性; 电化学; 分子模拟

参考文献

- [1] Wang, Z.; Bai, L.; Dong, H.; Liu, Y.; Jiang, H.; Bai, Y.; Zhang, X., Modulation of Nanobubble Behaviors through Ionic Liquids during CO₂ Electroreduction. ACS Sustainable Chemistry & Engineering 2023, 11 (5), 1909-1916.
- [2] Wang, Z.; Bai, L.; Liu, Y.; Chen, Q.; Dong, H.; Li, Z.; Jiang, C.; Peng, K.; Li, K.; Bai, Y.; Zhang, X., Investigation on the dynamic behaviors of single surface CO nanobubbles during CO₂ electroreduction in ionic liquids. Chemical Engineering Science 2023, 276, 118771.
- [3] Liu, Y.; Zhang, X., A unified mechanism for the stability of surface nanobubbles: Contact line pinning and supersaturation. The Journal of Chemical Physics 2014, 141 (13), 134702.
- [4] Liu, Y.; Zhang, X., Nanobubble stability induced by contact line pinning. The Journal of Chemical Physics 2013, 138 (1), 014706.

磁活性污泥法耦合纳米气泡协同调控生物反应器运行效能及放大试验：生物降解能力和污泥脱水性能

张岂铭^{1,4}, 胡佳俊², 刘楠³, 李继香^{1,4,*}

¹中国科学院上海高等研究院, 上海

²上海大学, 上海

³郑州轻工业大学, 郑州

⁴中国科学院大学, 北京

*Email: lijixiang@sari.ac.cn

摘要正文：本研究采用磁活性污泥法耦合纳米气泡（MAS&NBs）协同调控生物反应器的运行效能。结果发现：生物降解能力方面，单因素实验表明MAS&NBs对COD和氨氮的降解均有明显的提升效果，响应面实验得出MAS&NBs的优化工况下可分别提升COD和氨氮降解率约15.8%和10.0%，这得益于体系内的高传质效率；污泥混合液特性研究表明，污泥颗粒粒径变大主要归因于MAS的混凝效应，较高的溶解氧水平归因于NBs的“缓蚀效果”，可溶性微生物产物（SMP）和细胞外聚合物（EPS）的含量和分布也发生了明显变化；污泥脱水性能方面，毛细吸水时间（CST）和特定过滤阻力（SFR）分别减少了33%和21%，这是因为SMP和EPS的变化降低了过滤过程的凝胶自由能、减少了结合水；生物群落和代谢活动分析表明，MAS&NBs可在短时间内改变微生物群落结构和优势物种组成，且微生物总体活性增加了约45.4%；自由基清除能力和抗氧化能力分析表明，MAS&NBs可以显著缓解环境改变所带来的细胞损伤和氧化应激，这可能是增强生物反应器运行效能的主要原因；本研究有望丰富和发展纳米气泡技术和磁活性污泥法在水处理领域的应用，并为经济高效的水处理工艺提供新思路。

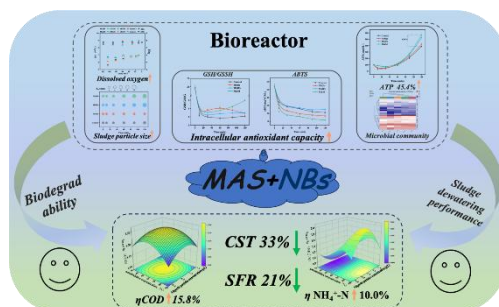


Fig. 1 The performance of MAS&NBs on bioreactor

关键词：磁活性污泥法；纳米气泡；生物降解能力；污泥脱水性能；氧化应激

参考文献

- [1] T. Wu, Y.Z. Liu, et al. Fe-Based Nanomaterials and Plant Growth Promoting Rhizobacteria Synergistically Degrade Polychlorinated Biphenyls by Producing Extracellular Reactive Oxygen Species, *Environmental Science & Technology*, 2023, 57, 34, 12771–12781.
- [2] S. Yaparathne, Z.E. Doherty, et al. Effect of air nanobubbles on oxygen transfer, oxygen uptake, and diversity of aerobic microbial consortium in activated sludge reactors, *Bioresource Technology*, 2022, 351, 127090.

合并或反弹：分裂的子液滴撞击振荡的母液滴

周谧，赵彬钰*

中国科学院青海盐湖研究所，青海省西宁市新宁路 18 号，810008

*Email: binyuzhao@isl.ac.cn

两个液滴撞击常导致合并或反弹。当一个液滴撞击接触角滞后较大的表面后，由于液滴的回缩及伴随的沃辛顿射流[1,2]，会先后溅射出两个较大的小液滴，第一个小液滴溅射速度较大，不能回落，而第二个小液滴（子液滴）溅射出后回落，并与留在表面上的大液滴（母液滴）撞击。由于表面接触角滞后较大，母液滴处于不断振荡中。我们研究了子液滴与母液滴的碰撞过程，发现即使韦伯数等传统参数相同，子液滴与母液滴碰撞后仍会出现合并或反弹两种截然相反的结果，合并情形下两液滴之间的气膜快速破裂，而弹跳情形下气膜始终保持稳定。此前研究表明，表面润湿性、液滴尺寸比、气膜特性等因素都会显著影响碰撞结果[3-5]，而本研究发现，母液滴撞击后产生的射流显著影响了液滴的残余表面势能，这种势能差异是决定液滴合并或反弹的重要因素，而不是韦伯数。

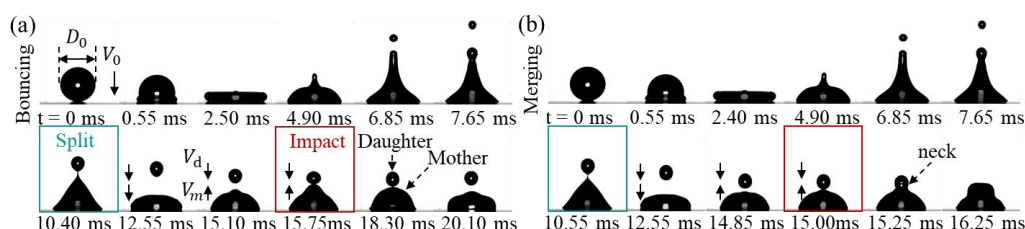


Fig. 1 (a), (b) Experimental images showing representative sequences of the bouncing case (a) and the merging case (b) for droplets ($D_0 \approx 2$ mm) impacting on the same alumina surface.

关键词：液滴撞击；液滴反弹；液滴合并；接触角；表面势能

参考文献

- [1] B. Zhang, V. Sanjay, S. Shi, Y. Zhao, G. Lv, X.-Q. Feng, and D. Lohse, Impact Forces of Water Drops Falling on Superhydrophobic Surfaces, *Physical Review Letters* 129, 104501 (2022).
- [2] S. Lin, D. Wang, L. Zhang, Y. Jin, Z. Li, E. Bonaccorso, Z. You, X. Deng, and L. Chen, Macrodrip-Impact-Mediated Fluid Microdispensing, *Advanced Science* 8, 2101331 (2021).
- [3] K.-L. Huang and K.-L. Pan, Transitions of bouncing and coalescence in binary droplet collisions, *Journal of Fluid Mechanics* 928 (2021).
- [4] G. Tang, P. Zhang, and C. K. Law, Bouncing, coalescence, and separation in head-on collision of unequal-size droplets, *Physics of Fluids* 24 (2012).
- [5] M. Abouelsoud and B. Bai, Bouncing and coalescence dynamics during the impact of a falling drop with a sessile drop on different solid surfaces, *Physics of Fluids* 33 (2021).

其他活动

微泡驱提高采收率驱油机理及应用

高雨*, 于九政, 王石头, 何令普, 宋昭杰, 常莉静

¹ 中国石油长庆油田公司油气工艺研究院, 陕西西安, 710018

*Email: gaoyu_cq@petrochina.com.cn

摘要正文: 低渗/特低渗油藏经历长期水驱开发后具有高含水、高采出程度的特征, 迫切需要新的开发技术以提高油藏动态采收率。微泡驱水气分散体系是以水为连续相, 气体介质以气泡形式稳定地分散于水中所形成的体系, 具有油藏适应性强、提高采收率幅度大、驱替介质成本和注入工艺改造成本低、操作简单等特点。微泡驱技术通过调整注入水离子类型和强度, 降低油/水、水/岩界面间作用力, 使油膜易于剥离, 同时依靠微气泡的弹性能量, 在油藏纵向上自适应调整, 扩大波及体积, 从而实现提高油井产量和大幅提高采收率的目的。电解质中离子会压缩气泡表面双电层, 降低气泡间范德华吸引力, 同时, 减少气泡聚并; K^+ 、 Na^+ 等离子能够降低气泡表面的表面张力, 减少气泡破裂的可能性, 从而提高微纳气泡稳定性。该技术降水增油效果显著, 替水减水作用明显, 具有较强的技术适应性和广阔的应用前景。

关键词: 微泡驱; 提高采收率; 降水增油; 减水

参考文献

- [1] Water-Imbibition Displacement Canit Release Relucant Spraberry Oil.Oiland Gas Journal, 1952, 49: 141-152.
- [2] 屈雪峰,雷启鸿,高武彬,张龙,何右安,王博.鄂尔多斯盆地长7致密油储层岩心渗吸试验[J].中国石油大学学报(自然科学版),2018,42(02):102-109.
- [3] 张志强,常娜,王社平等.微纳米气泡物化特性及其水处理应用研究进展[J].中国给水排水, 2023, 39(04): 24-30.
- [4] 张墨习,陈兴隆,吕伟峰,等.水气分散体系中微气泡振动提高微观驱油效率机理[J].石油勘探与开发,2024,51(06):1363-1373.
- [5] 魏振林,王鸿飞,陈亚亮,等.基于Marangoni效应的微气泡/液滴操控[J].化学进展,2024,36(10):1541-1558.

电学-光学双模表征揭示高盐油藏 纳米气泡“真实”粒径及界面行为调控机制

王荣荣^{1*}, 伦增珉¹, 张杰¹, 牛骏¹, 唐永强¹, 马涛¹

¹中国石油化工股份有限公司石油勘探开发研究院, 北京, 102206

*Email: wangrongrong.syky@sinopec.com

摘要正文:

本研究针对高盐多组分油藏环境中纳米气泡理化性质表征难题^[1], 创新性地采用电阻式脉冲传感 (RPS) 与纳米颗粒跟踪分析 (NTA) 对涡流空化制备的 (空气) 纳米气泡体系进行对比表征。实验发现: 在矿化度10000 mg/L 的模拟地层水中, RPS检测的纳米气泡中位粒径 (~90 nm) 显著小于NTA结果 (~240 nm), 首次证实RPS可突破传统光学方法的水合效应干扰, 获取更接近真实值的纳米气泡粒径^[2]。机制研究表明, 表面活性剂通过界面吸附改变纳米气泡真实粒径, 而电解质NaCl可诱导两性离子表面活性剂头基偶极发生取向重构 (平行→垂直界面)^[3], 导致流体动力学粒径增加。该工作通过建立电学-光学双模表征方法, 揭示了多组分介质与纳米气泡的构效关系, 为构建“纳米气泡-油藏环境”适配模型提供了关键实验依据, 对优化纳米气泡驱油技术具有重要指导价值。

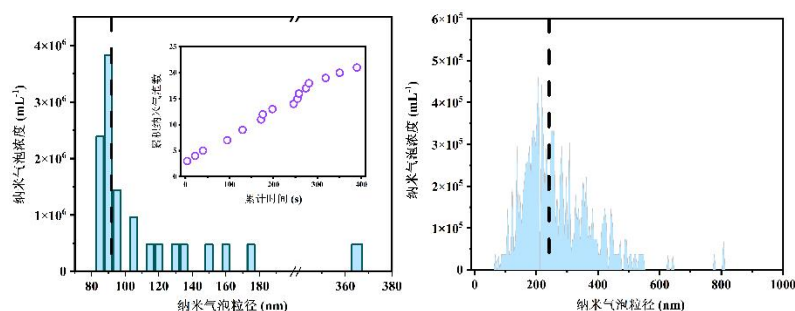


Fig. 1 Size distribution of nanobubbles in simulated formation water (10,000 mg/L NaCl) prepared via vortex cavitation shear for 60 minutes: A comparative RPS (left) and NTA (right) analysis

关键词: 纳米气泡; 双模表征; “真实”粒径; 高盐油藏

参考文献

- [1] X.-t. Ma, M.-b. Li and C. Sun, Measurement and characterization of bulk nanobubbles by nanoparticle tracking analysis method. *Journal of Hydrodynamics* **2022**, 34: 1121-33.
- [2] M. D. Graham, The Coulter Principle: Foundation of an Industry. *Journal of Laboratory Automation* **2003**, 8: 72 - 81.
- [3] A. Wu, Y. Gao and L. Zheng, Zwitterionic Amphiphiles: Their Aggregation Behavior and Applications. *Green Chem.* **2019**, 21: 4290-312.

第十八分论坛

颗粒测量前沿论坛

主旨报告

磁性复合颗粒的磁力-光热耦合抗菌性能研究

宣守虎*

中国科学技术大学 工程科学学院

四氧化三铁纳米复合材料由于其独特的磁学性能在化工、环境和生物医药等领域具有十分重要的应用。在外加旋转磁场作用下，磁性四氧化三铁显示出磁力刀效应，因而具有显著的磁力生物学功能。本研究从磁性四氧化三铁及其纳米复合颗粒的结构设计出发，提出了若干种磁性核壳结构制备方法，探究了核壳型磁性复合颗粒的结构与功能之间的相互关系，分析了四氧化三铁磁性复合颗粒的性能调控机制，解析了磁性复合颗粒的磁力增强光热抗菌性能，进一步探索了该类材料在抗菌等领域的应用前景。

邀请报告

基于单粒子显微成像的细菌快速检测及其药敏分析

方一民^{1,*}, 王馨怡¹, 徐郭海林²

¹南京医科大学药学院, 南京市龙眠大道 101 号, 211166

²江苏大学农业工程学院, 镇江市学府路 301 号, 212013

*Email: yfang@njmu.edu.cn

摘要正文: 临床上致病菌的快速检测及其耐药性分析, 可辅助医生尽早对症下药, 减少死亡率和医疗成本, 是实施精准医疗的重要前提。现有的细菌检测及其药敏分析方法由于检测时间长, 难以满足抢救危重症患者的迫切需求。本研究发展了免标记单粒子显微成像技术, 通过对单粒子运动特征的分析实现细菌的种类鉴定[1]及其耐药性分析。该方法无需样本处理, 检测速度快的优势, 为临床样本中致病菌的快速筛查及其药敏分析提供有效的解决方案。

关键词: 单粒子; 光学显微成像; 免标记; 细菌快速检测; 耐药性分析

参考文献

[1] S. Chen, Y. W. Su, J. J. Sun, et al. Label-free single-particle imaging approach for ultra-rapid detection of pathogenic bacteria in clinical samples. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2022,119(40): e2206990119.

Rapid Bacterial Detection and Antimicrobial Susceptibility Analysis Based on Single-Particle Imaging approach

Yimin Fang^{1,*}, Xinyi Wang¹, Guohailin Xu²,

¹School of Pharmacy, Nanjing Medical University, 101 Longmian Avn., Nanjing, 211166

²School of Agriculture engineering, Jiangsu University, 301 Xuefu Rd., Zhenjiang, 212013

*yfang@njmu.edu.cn

The rapid detection of pathogenic bacteria and analysis of their antimicrobial resistance facilitates timely administration of therapies, significantly reducing mortality rates and medical costs. Current bacterial detection and drug susceptibility analysis methods are time-consuming, limiting their urgent demands of rescuing critically ill patients. In this study, we developed a label-free single-particle imaging technique that enables bacterial identification [1] and antimicrobial resistance analysis through motion characteristic analysis of individual particles. This method is rapid, and pretreatment-free, providing an effective solution for rapid screening of pathogenic bacteria and drug susceptibility analysis in clinical samples.

Keywords: Single particle, optical microscopy, label-free, rapid detection of bacteria, susceptibility analysis.

References

S. Chen, Y. W. Su, J. J. Sun, et al. Label-free single-particle imaging approach for ultra-rapid detection of pathogenic bacteria in clinical samples. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2022,119(40): e2206990119.

光衰减法黑碳监测仪校准关键技术研究

刘佳琪¹, 张国城^{1*}, 潘一廷¹, 田莹¹

¹北京市计量检测科学研究院, 北京市朝阳区立水桥甲 10 号地址, 100107

*liujq@bjjl.cn

摘要: 黑碳气溶胶对于全球气候变化有重要影响, 其能够吸收太阳辐射, 一定程度上影响全球气候及生态环境, 被认为是仅次于二氧化碳的全球第二大温室效应气体。通过研制基于不完全燃烧法和悬浮液喷雾法的碳黑颗粒物发生装置, 实现浓度可控、成分可控的碳黑颗粒物标准源, 得到不同来源的黑碳气溶胶, 从而评价不同黑碳颗粒性质对光学衰减法的黑碳监测仪监测结果的影响。通过实验发现, 光学衰减程度与黑碳浓度呈现出明显的线性相关关系, 基于膜重量法的监测仪评价方法能够准确反映黑碳的浓度。本研究为进一步提高黑碳监测仪的准确性和稳定性提供了参考, 为环境监测工作提供更全面、可靠的数据支持。。

关键词: 不完全燃烧法; 悬浮液喷雾法; 黑碳颗粒; 光学衰减; 线性相关关系

参考文献

- [1] Moosmüller, H., Chakrabarty, R., and Arnott, W.: Aerosol light absorption and its measurement: A review, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 110, 844-878, 2009.
- [2] Yao Kong, Guorui Zhi, Wenjing Jin, Yuzhe Zhang, Yi Shen, Zhengying Li, Jianzhong Sun, Yanjun Ren, A review of quantification methods for light absorption enhancement of black carbon aerosol, *Science of The Total Environment*, Volume 924, 2024, 171539.

基于光散射的小型化粉尘在线检测技术研究

朱继宗¹, 王一鑫¹, 熊丽玲¹, 张博文¹, 卢利锋^{1*}

¹兰州理工大学 能源与动力工程学院, 甘肃省 兰州市 730050

*LULifeng89@163.com

摘要

工业粉尘暴露是危害人体健康、生产安全、生态环境的核心因素^[1]。在煤矿生产作业中, 工作人员由于长期吸入粉尘中的煤尘会导致尘肺病等不可逆的呼吸疾病^[2-3], 同时, 悬浮煤尘在达到一定浓度时可能引发爆炸, 仅在 2005-2020 年期间我国工业企业就发生 67 起粉尘爆炸事故, 造成上千人伤亡^[4], 平均每起事故导致的伤亡人数最多的粉尘为煤尘^[5], 粉尘污染还会扩散至大气和土壤, 改变生态平衡并增加环境治理成本。此外, 在天然气等其他领域, 输气管内的腐蚀性粉尘通过电化学反应加速管壁腐蚀, 导致管壁减薄、点蚀甚至存在穿孔风险^[6-7], 直接威胁管道安全运营与生态环境, 造成高昂经济成本。因此融合工程抑尘、实时精准监测粉尘浓度是保障安全生产的核心需求, 现有监测设备普遍存在体积大、精度低($\pm 15\%$)、量程窄($< 1000 \text{mg/m}^3$)、响应迟滞($> 1 \text{s}$)等问题, 难以满足高危场景实时预警需求。本研究基于光散射原理^[8-10]提出了一种小型化的粉尘在线检测装置, 该装置由光学检测模块、采样模块、信号处理与通讯模块, 实现了粉尘浓度在 $0-2000 \text{mg/m}^3$ 范围内的快速动态测量, 分辨率可达到 0.1mg/m^3 , 响应时间小于 0.1 秒。基于流体力学设计了传感器的宽型流体流通域, 大幅降低了光学元件表面污染概率。系统配置高速信号处理模块与 4G/WiFi 双模传输单元, 实现浓度数据实时本地显示(OLED 屏)与云端同步, 可以通过工业物联网平台实现远程的动态管理。此外, 为解决装置长时间运行时可能出现的零点漂移问题, 通过集成光学散射传感模块与信号处理模块提出了一种自适应信号处理算法, 将相对误差控制在 $\pm 5\%$ 以内。装置整体尺寸为 $250 \text{mm} \times 200 \text{mm} \times 80 \text{mm}$, 可适配井下巷道、管道内壁等狭小场景的安装需求, 通过现场测试表明, 该系统在煤矿巷道连续运行 120 小时无零点漂移, 误报率低于 3%, 为高危工业场景提供了一种高可靠性、低成本的粉尘监测解决方案, 对预防粉尘爆炸事故、优化职业健康管理具有重要工程意义。

关键词: 粉尘; 光散射; 在线检测装置; 自适应信号处理算

资金

国家自然科学基金资助项目 NO.52364003。

参考文献

- [1] 周庆华,孙晓悦,陈李媛,大气亚微米颗粒物对哺乳动物肺部毒性效应研究[J].安全与环境学报.2020.20(5):1983-1989.
- [2] Chu Yin,Holladay J. Scott,Qiu Yun.Air pollution and mortality impacts of coal mining: Evidence from coalmine accidents in China[J].JOURNAL OF ENVIRONMENTAL ECONOMICS AND MANAGEMENT.2023 Sep.121(1):102846.
- [3] Su Xin,Gu Hengqiong, Li Fajun.Global, Regional, and National Burden of COPD Attributable to Occupational Particulate Matter, Gases, and Fumes, 1990-2019: Findings from the Global Burden of Disease Study 2019[J].INTERNATIONAL JOURNAL OF CHRONIC OBSTRUCTIVE PULMONARY DISEASE.2023.18(1):2971-2983.
- [4] 陈刚,张晓蕾,徐帅,苗永春,我国 2005-2020 年粉尘爆炸事故统计分析[J].中国安全科学学报.2022.32(8):76-83.
- [5] 张晓蕾,陈刚,徐帅,中美粉尘爆炸事故统计和管理体系对比研究[J].安全与环境学报.2023.23(8):2769-2779.
- [6] 张洪玮,赵杰,李敬法,宇波,天然气掺氢输送环境下的腐蚀与氢脆研究进展[J].天然气工业.2023.43(6):126-138.
- [7] 张书成,吕玉海,裴廷刚,邓鹏,天然气管道腐蚀穿孔失效分析与寿命预测[J].腐蚀与防护.2020.41(6):74-78
- [8] Zhao H, Wang X, Wang R, Hua D, Li K, Ji F. Optimal static light scattering detection angle for particulate matter size and concentration measurement. Measurement Science and Technology. 2023 Sep 4; 34(12):125802.
- [9] Chaikov LL, Kirichenko MN, Krivokhizha SV, Kupov MR, Lobanov AN, Sverbil PP, Nagaev EI, Shkirin AV. Two Convenient Methods for Detection of Non-Dairy Fats in Butter by Dynamic Light Scattering and Luminescence Spectroscopy. Applied Sciences. 2023 Jul 25; 13(15):8563.

- [10] Han J, Liu X, Jiang M, Wang Z, Xu M. A novel light scattering method with size analysis and correction for on-line measurement of particulate matter concentration. *Journal of Hazardous Materials*. 2021 Jan 5; 401:123721.

金纳米颗粒光学成像在单分子生物传感中的应用

王毅*, 齐礼婷, 张磊

¹南京邮电大学材料科学与工程学院, 江苏省南京市文苑路 9 号, 210023

*Email: iamyiwang@njupt.edu.cn

摘要正文: 单分子光学成像技术不仅能够实现生物分子的高灵敏检测, 也能够从分子层面深入理解化学反应动力学过程与物理机制。金纳米颗粒 (AuNPs) 因其独特的光学特性在生物、医药、材料等研究领域有着广阔的应用前景。在单分子水平上研究AuNPs的实时动态行为对于构建功能纳米材料, 了解生物分子相互作用机制, 开发新型化学生物传感等具有重要的意义^[1, 2]。基于此, 本课题组以单个金纳米颗粒为光学探针, 通过对光学成像平台和图像处理方法的选择和优化, 实现单个探针分子的动态示踪, 发展了一系列能够用于单分子生物传感的高灵敏、高时空分辨的纳米光学成像技术^[3-5]。特别是, 我们利用单个金纳米颗粒的表面等离子体共振成像, 动态跟踪纳米颗粒在垂直基底方向上的热波动, 从而实现单个生物分子构象转变的实时探测以及生物分子相互作用过程中的热力学和动力学信息测定, 揭示了不同分子反应的动态细节和异质性信息, 在单分子领域具有极大的发展前景。

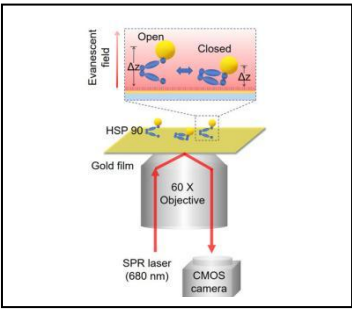


Fig. 1 Figure title in English

关键词: 金纳米颗粒; 单分子检测; 纳米光学成像

参考文献

- [1] Anker, J. N.; Hall, W. P.; Lyandres, O.; Shah, N. C.; Zhao, J.; Van Duyne, R. P., Biosensing with plasmonic nanosensors. *Nat. Mater.*, 2008, 7 (6), 442-453.
- [2] Xiong, B.; Huang, Z.; Zou, H.; Qiao, C.; He, Y.; Yeung, E. S., Single plasmonic nanosprings for visualizing reactive-oxygen-species-activated localized mechanical force transduction in live cells. *ACS Nano*, 2017, 11 (1), 541-548.
- [3] Wang, Y.; Tang, Z.; Chen, H.-Y.; Wang, W.; Tao, N.; Wang, H., Single-molecule calorimeter and free energy landscape. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 2021, 118 (23), e2104598118.
- [4] Wang, Y.; Zhou, Y.; Qi, L.; Wang, Y.; Sun, L.; Cai, M.; Fan, Q.; Zhang, L., Visualizing single-molecule protein conformational transitions and free energy landscape, *Analytical Chemistry*, 2024, 96: 12006-12011.
- [5] Zhang, W.; Wang, Y.; Wang, Y.; Lu, X.; Wu, W.; Fan, Q.; Zhang, L., A thermo-responsive rewritable plasmonic bio-memory by regulating single core-satellite gold nanocluster dissociation, *Nano Research*, 2024, 17(8): 7275-7282.

等离激元光化学反应单颗粒散射谱学测量

肖乐辉

湖南省，长沙市，岳麓区，中南大学，化学化工学院

lehuixiao@csu.edu.cn

关键词：单颗粒测量、散射谱学、等离激元

当光照射到贵金属纳米结构时，金属内部的自由电子通过外部电场和电子位移引起库仑力协同作用，随入射电磁场振荡。这种振荡导致金属附近的电磁场局域化，产生局域等离激元共振效应（LSPR），进而增强纳米颗粒附近的光激发与电场强度。等离激元纳米材料能将光吸收、电场、载流子和热效应有效地结合，并通过多种弛豫途径将光能转移到其它体系，驱动或者促进各种化学反应，实现光能与化学能的转化。等离激元纳米结构的光化学反应活性与其拓扑结构以及表面所负载的介质密切相关。通过耦合、掺杂负载过渡金属或者半导体结构，能有效的调控热载流子能量传递的路径进而提高光化学反应效率。然而对上述高反应活性等离激元结构热载流子能量传递路径的研究目前还较为初步。在催化过程中，纳米粒子表面晶格也可能发生动态变化，进而影响吸附质与表面结构的相互作用方式。在单颗粒水平上研究纳米粒子的催化反应过程及能量传递路径可去除材料异质性导致的系综平均，从统计学角度阐明催化反应机制。

参考文献：

- [1] Ye, Z.; Zhang, C.; Yuan, J.; **Xiao, L.***, Ligand-Receptor Interaction Triggers Hopping and Sliding Motions on Living Cell Membrane. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 25177–25185.
- [2] Chen, M.; Ye, Z.; Wei, L.; Yuan, J.; **Xiao, L.***, Shining at the Tips: Anisotropic Deposition of Pt Nanoparticles Boosting Hot Carrier Utilization for Plasmon-Driven Photocatalysis. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 12842-12849.
- [3] Wang, X.; Ye, Z.; Hua, J.; Wei, L.; Lin, S.; **Xiao, L.***, Fast Surface Restructuring within the Gap of Au Nanocube Dimer for the Enhancement of Catalytic Efficiency. *CCS Chem.* **2022**, *4*, 1074-1086.
- [4] Yan, Z.-J.; Wang, D.; Ye, Z.; Fan, T.; Wu, G.; Deng, L.; Yang, L.; Li, B.; Liu, J.; Ma, T.; Dong, C.; Li, Z.-T.; **Xiao, L.***; Wang, Y.*; Wang, W.*; Hou, J.-L.* , Artificial Aquaporin That Restores Wound Healing of Impaired Cells. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 15638-15643.
- [5] Geng, W.-C.; Ye, Z.; Zheng, Z.; Gao, J.; Li, J.-J.; Shah, M. R.; **Xiao, L.***; Guo, D.-S.* , Supramolecular Bioimaging through Signal Amplification by Combining Indicator Displacement Assay with Förster Resonance Energy Transfer. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 19614-19619.

生物质破碎路径对比研究与建模分析

刘林风

1 华东理工大学，上海市徐汇区梅陇路 130 号，200237

*Email:linfeng200916@163.com

摘要正文：生物质气化技术作为生物质能高品位利用的核心路径，其热化学转化过程通过将农林废弃物等可再生资源转化为高热值合成气，不仅实现了能量梯级利用效率的最大化，更在双碳战略框架下展现出独特优势。

粉碎工艺通过解构生物质致密组织结构，显著提升物料比表面积与反应活性，为后续热化学/生物转化构筑高效传质界面，是实现生物质能全组分定向转化的基础性保障。然而，粉碎过程的能耗阈值突破困难，导致生物质转化体系中传热传质动力学失衡，这一科学难题持续推动着多尺度破碎技术的开发与工艺的迭代创新，对构建低碳循环经济具有重要研究价值。本研究聚焦于林业废弃物木屑和农业废弃物稻壳两类典型生物质固废，

对比研究了直接破碎、多级破碎、筛分破碎和混合破碎四组破碎工艺体系，揭示了不同破碎方法在能耗、流动特性、表面形貌以及静力学和动力学特性等方面的优势。研究表明，与直接破碎相比，筛分破碎聚焦能耗与功能特性，突出其通过筛网分级实现“低能耗+高透气性”的协同，适用于气化等需气体扩散的场景；多级破碎强调渐进式优化，阶梯破碎减少重复粉碎能量损耗，细颗粒生成能力与水分控制优势适配精细化加工需求；掺混破碎体现材料协同效应，异质生物质共破碎通过形貌互补（木屑-稻壳）突破单一材料流动性瓶颈，兼具能耗与品质优势。基于Bond破碎方程与能量守恒定律耦合分析，研究建立水分流失与能耗预测模型，通过解析粒径分布与粒形特征参数并结合粒子间力的孔隙率表达式，推导出球形度(Φ)和堆积密度(ϵ)之间的线性相关性，能够有效预测不同破碎工艺下的粉体特性。本研究为生物质破碎工艺的优化提供了理论依据和数据支持，对推动生物质能的高效利用和产业发展具有重要意义，旨在优化生物质利用过程中的能源效率和提升颗粒质量。

关键词：木屑；粉碎过程；粒度分布；能耗

基于颗粒流动特性的生物质密相气力输送研究

陆海峰¹, 蒋春喜¹, 刘林风¹, 杜辉¹, 郭晓镭¹, 刘海峰^{2,1}

¹ 华东理工大学, 煤液化气化及高效低碳利用全国重点实验室, 上海煤气化工程技术研究中心, 上海 200237

² 辽宁石油化工大学, 辽宁 113001

*luhf@ecust.edu.cn

摘要正文: 生物质密相气力输送作为规模化生物质清洁高效利用的关键预处理环节, 其输送效率与稳定性直接影响后续转化工艺的经济性。本研究针对传统输送中易出现的管道堵塞、流量波动大等挑战, 借助实验室搭建的工业级管径 (50mm) 生物质密相气力输送平台, 面向农业废弃物资源利用, 以稻壳粉作为原料, 研究了正压气力输送系统中稻壳粉的密相输送特性, 阐明了操作参数对输送的影响规律。研究获得了加压机、流化气和调节气等对生物质质量流量、颗粒速度、浓度、输送固气比等气固两相流动参数的影响, 针对生物质物性与流动特性开展操作参数优化, 实现了生物质高通量稳定可控输送, 流量范围 3000-10000 kg/h、固气比高达 160 kg/kg。基于量纲分析和数据回归, 构建了压差驱动的生物质质量流量预测方程; 结合料罐内生物质流化状态和输送性能分析, 提出流化气的设计依据; 从输送相图出发, 结合颗粒拾取速度理论, 以流体力学无量纲数为基础建立了经济气速预测方程, 为调节气设计提供依据。研究结果为生物质密相输送系统的工业化设计提供了关键参数优化依据, 对推进生物质能源规模化应用具有重要工程价值。

关键词: 密相气力输送; 气固两相流; 生物质; 流动特性; 经济气速

水微液滴界面化学反应活性的原位测量研究

苏华^{1,2,*}, 周恺², 高佳², 王伟^{2,*}

¹南京中医药大学, 药学院, 南京市栖霞区仙林大道 138 号, 210023

²南京大学, 化学化工学院, 生命分析化学国家重点实验室, 南京市栖霞区仙林大道 163 号, 210023

*Email: suhua@nju.edu.cn; wei.wang@nju.edu.cn

越来越多的实验和理论研究表明, 处在界面上的水分子往往表现出明显不同于体相水分子的新奇物理、化学特性(比如界面上的强电场, 水分子的定向排列, 独特的酸碱性等)[1-2]。2019年, 斯坦福大学Richard N. Zare课题组意外研究发现, 当体相水的尺寸减少到10微米以下(即水微液滴)时, 水将自发转化为双氧水[3]。鉴于该技术巨大的应用前景, 近年来, 这一热力学上不允许的过程受到了科学界极大的关注。围绕这一过程是真实存在, 抑或仅是实验带来的假象, 学术界展开了激烈的争论。解析单个水微液滴中双氧水自发产生的动力学, 有助于解开这一谜团, 也有益于该独特界面化学反应活性的宏量化应用。近期, 我们借助于先进的微纳米加工技术, 将水微液滴“锁”在微孔阵列芯片之中, 构筑了稳定的油——水微液滴界面, 成功获得了寿命长达1h的水微液滴, 借助实时荧光成像技术实现了单个水微液滴中双氧水自发产生过程的动力学测量[4]。通过动力学分析, 该研究首次获得了单个水微液滴中双氧水自发产生的速率, 提供了水微液滴中双氧水自发产生发生在油——水微液滴界面的证据。受该界面反应活性测量结果的启发, 我们进一步利用具有丰富的微纳米级孔道结构的大孔树脂(工业上广泛用于水净化过程), 将水“锁”在孔道之中, 构筑了宏量、稳定的水微液滴, 并在1升反应体积的尺度上, 成功实现了双氧水的宏量、连续性合成, 展现了水微界面独特反应活性在双氧水绿色合成方面的前景[5]。

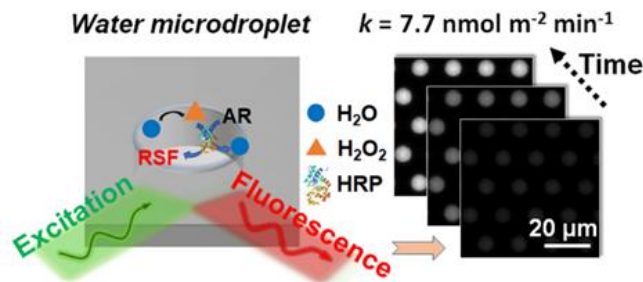


Fig. 1 Schematic illustration of measuring the kinetics of spontaneous generation of H_2O_2 in individual water microdroplets via *in situ* fluorescence imaging.

关键词: 微液滴; 双氧水; 界面反应动力学; 测量; 大孔树脂

参考文献

- [1] L. Shi, R. A. LaCour, N. Qian, J. P. Heindel, X. Lang, R. Zhao, T. Head-Gordon, W. Min Water structure and electric fields at the interface of oil droplets. *Nature* 2025, DOI:10.1038/s41586-025-08702-y.
- [2] R. LaCour, J. Heindel, R. Zhao, T. Head-Gordon The role of interfaces and charge for chemical reactivity in microdroplets. *J. Am. Chem. Soc.* 2025, 147: 6299-317
- [3] J. Lee, K. Walker, H. Han, J. Kang, F. Prinz, R. Waymouth, H. Nam, R. Zare Spontaneous generation of hydrogen peroxide from aqueous microdroplets. *Proc. Natl. Acad. Sci., U. S. A.* 2019, 116: 19294-8.
- [4] K. Zhou, H. Su, J. Gao, H. Li, S. Liu, X. Yi, Z. Zhang, and W. Wang Deciphering the kinetics of spontaneous generation of H_2O_2 in individual water microdroplets. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146: 2445-51.
- [5] J. Gao, K. Zhou, X. Guo, K. Yang, S. Yang, H. Su, Z. Zhang, and W. Wang Constructing scalable hydrophobic-water microinterfaces for catalyst-free generation of millimolar-level H_2O_2 from H_2O via macroporous resins. *Submitted*.

风洞管道中细微颗粒物浓度分布规律的数值模拟

报告人：奚健

上海北分科技股份有限公司，上海市浦东新区川图路 33 号 2 幢，邮编 201200

Jian.xi@sh-baif.com

研究背景

随着工业发展与能源消耗加剧，颗粒物（尤其是 PM_{2.5}）排放对环境和健康的影响日益严峻。为优化颗粒物排放监控技术，需深入理解气固两相流中颗粒物的运动规律。本文以上海北分公司的风洞实验室为研究对象，通过数值模拟探究风洞管道内细微颗粒物的浓度分布规律，旨在为环境监测与污染控制提供理论支持。

研究方法

1. 模型构建：

采用计算流体动力学（CFD）方法，基于欧拉-拉格朗日框架建立气固两相流模型。连续相（气流）通过 RNG $k-\epsilon$ 湍流模型求解，离散相（颗粒物）通过牛顿第二定律追踪轨迹，并引入随机轨道模型模拟湍流扩散效应。

2. 实验设计：

以实际风洞管道为原型，包含矩形入口段、90° 弯管段及圆形测量段。通过结构化网格划分，结合网格无关性验证，最终选定 138.3 万网格进行模拟。边界条件设置为速度入口（8.76 m/s）与自由出口，颗粒质量流率设定为 13 mg/s。

关键发现

1. 流场与浓度场关联性：

- 气流经过弯管后产生的二次流显著影响颗粒物分布均匀性，导致测量段内浓度梯度增大。
- 管道中心轴线颗粒浓度模拟结果与实验数据吻合度高，验证了模型的可靠性（见图 3 对比）。

2. 参数敏感性分析：

- 风速影响：管道内风速增加会降低颗粒物浓度，因其增强了颗粒扩散能力，减少局部积聚。
- 质量流率影响：入口颗粒质量流率增加直接导致浓度上升，二者呈线性正相关。

结论与意义

本研究揭示了风洞管道内颗粒物扩散的动力学机制，明确了弯管二次流与关键操作参数（风速、质量流率）对浓度分布的作用规律。成果可为以下领域提供指导：

- 监测技术优化：为颗粒物传感器布设位置与校准方法提供理论依据，提升监测精度。
- 工业应用：指导烟道设计与除尘系统改进，例如通过调整管道几何结构减少颗粒物沉积，或优化风速以平衡排放浓度与能耗。
- 政策支持：为环保部门制定颗粒物排放标准及监控策略提供数据支撑，助力空气质量改善。

创新点

- 首次结合风洞实验与 CFD 模拟，系统分析复杂管道结构下颗粒物分布的非均匀性特征。
- 提出基于随机轨道模型的颗粒追踪方法，为气固两相流研究提供了高精度的数值工具。

总结：通过多尺度数值模拟与实验验证，深化了对风洞管道颗粒物运动规律的理解，为环境监测与工业污染控制提供了重要理论依据。研究结果不仅具有学术价值，也为上海北分科技股份有限公司后续开发高精度监测设备奠定了技术基础。

关键词：风洞管道、气固两相流，颗粒物浓度分布，数值模拟，随机轨道模型

参考文献

- [1] 高贵生、大气细颗粒物 PM_{2.5} 污染源及防治措施[J].化工管理,2017(5):250.
- [2] Kliafas, Y. and Holt, M. (1987) LDV Measurements of a Turbulent Air-Solid Two-Phase Flow in a 90° Bend. Experiments in Fluids, 5, 73-85. <https://doi.org/10.1007/BF00776177>
- [3] Tsuji, Y., Kawaguchi, T. and Tanaka, T. (1993) Discrete Particle Simulation of Two-Dimensional
- [4] Huber, N. and Sommerfeld, Y. (1994) Characterization of the Cross-Sectional Particle Concentration Distribution in Pneumatic Conveying Systems. Powder Technology, 79, 191-210. [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(94\)02823-0](https://doi.org/10.1016/0032-5910(94)02823-0)
- [5] Akili, H., Levy, E.K. and Sahin, B. (2001) Gas-Solid Flow Behavior in a Horizontal Pipe after a 90° Vertical-to-Horizontal Elbow. Powder Technology, 116, 43-52. [https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(00\)00360-0](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(00)00360-0)
- [6] 宋勇. 旋风分离器内气固两相流数值模拟[D]. [硕士学位论文] 沈阳: 东北大学, 2011
- [7] 杨瑞昌, 赵磊, 巨泽建, 刘若雷. 使用扩散模型数值模拟二维湍流气固两相流[J]. 工程热物理学报, 2005, 26(z1): 113-116.

- [8] 李建锋、吕俊复、张海、等、排粉风机内部气固两相流动特性研究[J.流体机械,2008,36(2): 22-26.
- [9] Sa, Z., Li, F., Qin, B. and Pan, X. (2012) Numerical Simulation Study of Dust Concentration Distribution Regularity in Caving Stope. *Safety Science*, 50, 857-860. <https://doi.org/10.1016/j.ssci.2011.08.019>
- [10] Zhao, M., Liu, D., Ma, J. and Chen, X. (2020) CFD-DEM Simulation of Gas-Solid Flow of Wet Particles in a Fluidized Bed with Immersed Tubes. *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 156, Article ID: 108098. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.108098>
- [11] Yang, D., Li, G., Wang, Y., Wang, Q., Li, X., Huang, Q., et al. (2020) Prediction of Horizontal Pneumatic Conveying of Large Coal Particles Using Discrete Phase Model. *Advances in Materials Science and Engineering*, 2020, Article ID 1967052. <https://doi.org/10.1155/2020/1967052>
- [12] Bilal, F., Sedrez, T.A. and Shirazi, S.A. (2021) Experimental and CFD Investigations of 45 and 90 Degrees Bends and Various Elbow Curvature Radii Effects on Solid Particle Erosion. *Wear*, Article ID: 203646. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2021.203646>
- [13] Brusca, S., Famoso, F., Lanzafame, M., Mauro, S. and Strano, S. (2016) PM10 Dispersion Modeling by Means of CFD 3D and Eulerian-Lagrangian Models: Analysis and Comparison with Experiments. *Energy Procedia*, 101, 329-336. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2016.11.042>
- [14] Yakhot, V. and Orszag, S.A. (1986) Renormalization Group Analysis of Turbulence. I. Basic Theory. *Journal of Scientific Computing*, 1, 3-51.
- [15] 朱红钧. FLUENT 12 流体分析及工程仿真[M]. 北京: 清华大学出版社, 2011.
- [16] 胡霄乐. 细弯管内多粒径颗粒的气固两相流动规律分析[D]: [硕士学位论文]. 杭州: 浙江工业大学, 2015.
- [17] 李鹏飞, 徐敏义, 王飞飞. 精通 CFD 工程仿真与案例实战: FLUENT GAMBIT ICEM CFD Tecplot[M]. 北京: 人民邮电出版社, 2011.
- [18] 汪建兴, 王海民, 饶玲. 细小直角弯管流道的压力损失及迪恩涡特性[J. 流体机械, 2017, 45(3): 33-37.

安东帕粒度粒形表征的新技术进展

郑炳林

安东帕（上海）商贸有限公司 上海市闵行区合川路 2570 号科技绿洲三期 2 号楼 11 层

Johnny.zheng@anton-paar.com

摘要：奥地利安东帕公司在粒度粒形表征领域提供激光衍射粒度仪、动态光散射纳米粒度仪、动态图像粒度粒形分析仪、电泳光散射 Zeta 电位、流动法固体 Zeta 电位等完整的表征技术。几年来，安东帕公司在此领域持续投入研发，相继推出了一系列新技术、新产品。

在动态光散射纳米粒度和电泳光散射 Zeta 电位测量方面，具有专利的 cmPALS（连续监测相位分析光散射）技术（如图 1），对参考光束和调制光束进行连续相干监测，获得了更快的测量时间、在短运行时间内具有更高的再现性、最小化样品不稳定性的影响、具有更高的灵敏度和稳定性，并可以使用更大运动幅度的调制器。即使在外加电场极低的情况下，cmPALS 仍能获得高重复性结果，同时显著减少样品热降解。同时，Litesizer DLS 系列纳米粒度仪可提供三个散射角度的荧光滤光片和水平（垂直）偏振片。荧光滤光片可用于对具有荧光效应的样品进行准确测量，消除荧光干扰。垂直偏振滤光片可消除去极化光的干扰（例如由聚合物比色皿产生的杂散光），从而确保光学测量信号的纯净性。水平偏振滤光片则仅允许由颗粒的旋转扩散产生的去极化光通过，可用于检测样品中非球形颗粒的存在。

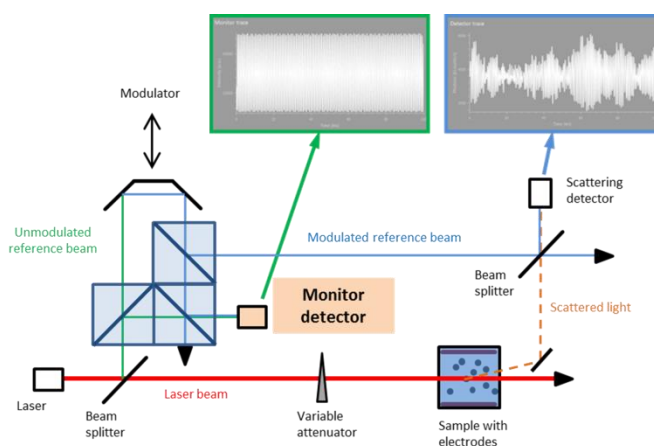


图 1 cmPALS 连续监测相位分析光散射技术

在激光粒度仪方面，安东帕 Litesizer DIF500 激光粒度仪提供了最宽的 $0.01^\circ - 170^\circ$ 检测器阵列，结合高功率的双波长激光器（如图 2），可以对 0.01 到 3500 微米范围内的粒径进行准确测量。另外，DIF500 于 Litesizer DIA 动态图像粒度仪具有极为方便的可互换的分散单元，可以在完全相同的分散条件下对同一样品进行双模式测试，从而可以对测量结果进行准确性和客观性验证，为激光粒度仪的测量数据提供参照。

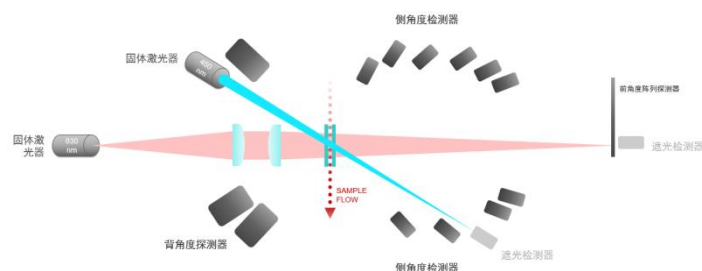


图 2 Litesizer DIF500 激光粒度仪光路

关键词：粒度，Zeta 电位，粒形，安东帕，Litesizer

幂律流体中基于Squirmer模型的新型Janus颗粒运动特性的研究

陈冬梅¹, 于明州^{1*}, 林建忠²

¹中国计量大学, 杭州, 310018

²浙江大学, 杭州, 310027

*Email: mzyu@cjl.edu.cn

摘要正文:

自驱动颗粒在非牛顿流体中的运动特性对于了解自然界微生物的运动和人造颗粒在实际中的应用具有重要意义, 然而此类研究较少。Janus颗粒是一类特殊的因表面不对称特性而导致运动的自驱动颗粒。本文基于Squirmer模型建立一种新型的Janus颗粒模型, 在幂律流体中采用格子Boltzmann数值方法和实验, (1)研究Janus颗粒在无界流场和槽道静止流体中的运动, 揭示Janus颗粒运动形态以及近壁运动轨迹和不同形态间的转换规律; (2)研究Janus颗粒在槽道流中的运动, 揭示流场雷诺数、阻塞比等参数对颗粒运动模式、颗粒横向平衡位置的影响; (3)研究多个Janus颗粒在槽道流中的运动, 揭示颗粒初始间距、尺度比对颗粒运动模式、颗粒横向平衡位置的影响。本文旨在给出受限微通道中Janus颗粒在多场耦合诱导下的运动模式, 阐明相关因素对运动模式的影响, 为自驱动颗粒在复杂流体中的运动机理提供新的解释。

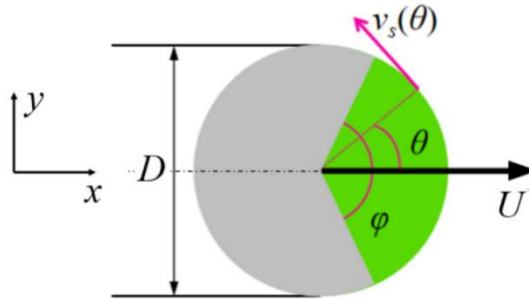


Fig.1 Schematic of velocity distribution on the surface of Janus.

关键词: 两相流; 自驱动颗粒; 幂律流体; 数值模拟

利用 FDTD 方法探讨远场散射偏振特性表征 纳米颗粒形貌的适用范围

华洪¹, 蔡天意¹, 刘泽奇², 蔡小舒^{1, 2}, 周骛¹

¹ 上海理工大学 能源与动力工程学院, 动力工程多相流与传热重点实验室, 上海, 200093

² 嘉兴美帕克仪器科技有限公司, 嘉兴, 314000

(Tel: 15651665013, Email: tycai@usst.edu.cn)

摘要正文: 纳米颗粒的形貌在催化、传感和生物医学等领域的应用性能中扮演着至关重要的角色。基于偏振图像动态光散射技术 (PIDLS), 作者团队创新性地提出了“光学球体度”的概念, 用于快速评估纳米颗粒的形貌特征。本文利用有限时域差分方法 (FDTD) 对不同长径比的AR模型、多种球凸模型和不同分形维数为主的堆积模型等颗粒开展远场偏振散射数值模拟, 研究了不同大小、形状、取向条件下纳米颗粒光学球体度的理论空间分布特征, 从而探讨了PIDLS技术在定量表征颗粒形貌及形貌均匀性方面的可靠性。本文在现有光学球体度的基础上, 研究了PIDLS测量技术的适用条件, 进一步验证了其在表征颗粒形貌方面的通用性。这对实现纳米颗粒快速、便捷、定量的粒度形貌测量具有重要的研究意义和应用价值。

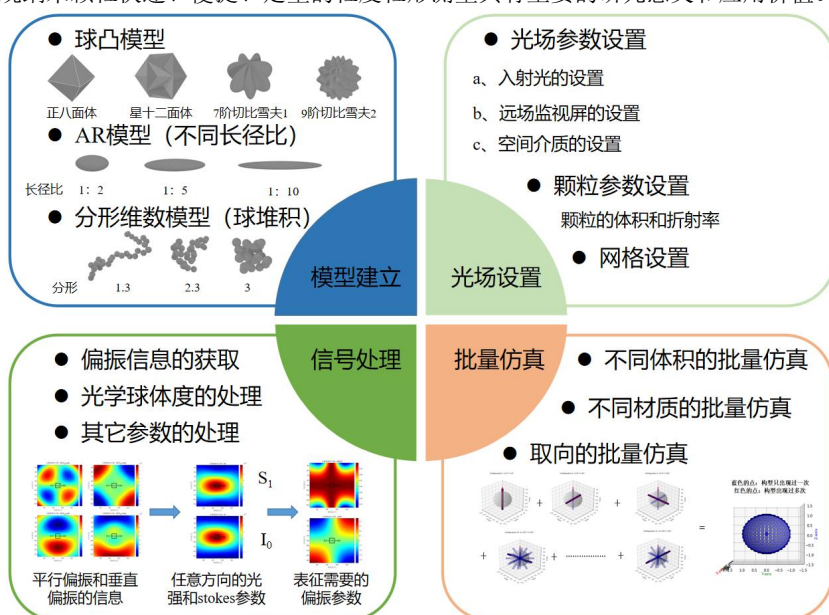


Fig. 1 摘要简介图

关键词: 非球形纳米颗粒; 形貌测量; 偏振图像光散射; 光学球体度; FDTD;

参考文献

- [1] WANG B, CAI T, CAI X, et al. Polarized imaging dynamic light scattering for simultaneous measurement of nanoparticle size and morphology[J]. Particuology, 2024,85: 213-223.
- [2] 徐怡,王金虎,金文雨,等.太赫兹波段下切比雪夫粒子散射特性研究[J].激光与红外,2024,54(03):346-354.

基于ESEM的水汽在颗粒团表面异质成核的可视化研究

闫荔¹, 鲁一汛¹, 徐俊超², 吴相承¹, 陈龙飞^{3,*}

¹中国计量大学机电工程学院, 杭州, 310018

²安徽工业大学能源与环境学院, 安徽, 243002

³北京航空航天大学杭州创新研究院国际碳中和研究中心, 杭州, 311115

*Email: chenlongfei@buaa.edu.cn

水蒸气在颗粒表面的异质凝结在颗粒测量、云雾形成、除尘等领域中起着至关重要的作用。然而, 由于实验手段的限制, 对异质凝结的第一步—颗粒成核, 特别是对具有复杂聚并结构的颗粒团的成核仍有待深入研究。本研究利用环境扫描电子显微镜 (ESEM), 对不同聚并结构的颗粒团表面的异质成核过程进行原位测量, 在纳米尺度直接获得颗粒表面结构对成核的影响规律。结果表明: 成核位点最初位于任意两个紧密连接颗粒的交界处, 而单颗粒表面的成核位点总是随机出现 (如图1所示)。我们建立了两个紧密连接颗粒上的成核模型, 基于布尔运算, 首次利用数值积分的方法求解出了两个颗粒团上的成核能垒, 发现两个颗粒交界处的成核能垒远远低于单个颗粒表面, 仅为单颗粒的三十七分之一。

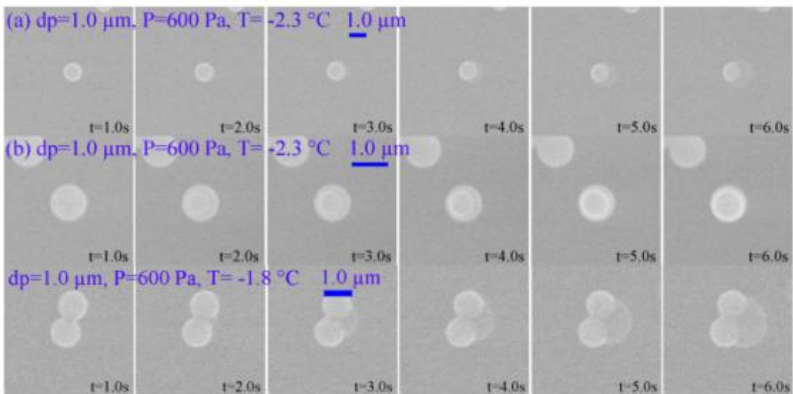


图1. The time-resolved images on single particle(SP) and two particles(TP).

最值得注意的是, 当水汽在复杂环状与链状结合的颗粒团上成核时, 成核总是在环状颗粒团的几何中心处开始。这是由于任意两个紧密连接颗粒的交界处具有较低的成核能垒和胚胎在交界处的聚并凝结, 环状颗粒团中的三重对称性的空间限制会显著提高了晶胚形成的概率。随后, 新生的晶胚液滴会继续凝结和生长, 有效地填充了环状颗粒和链状颗粒之间的间隙。(如图2所示)。

这一发现揭示了环状颗粒团中的三重对称结构的优化碰撞动力学, 并为细颗粒异质凝结在工业除尘技术中的应用提供了重要的理论基础。通过了解这些微观过程, 我们可以提高除尘系统的效率, 优化云形成和精确颗粒测量的条件。

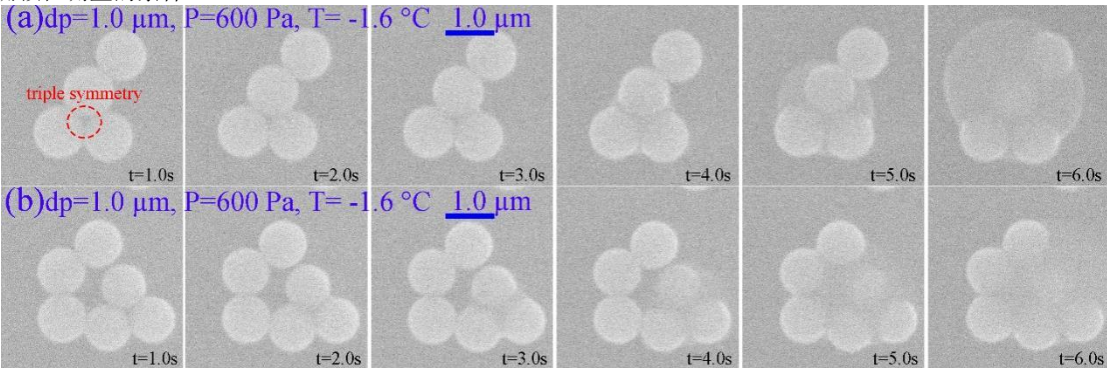


图2. The time-resolved images on complex circular and chain-shaped multi-particles.

关键词: 异质成核; 颗粒团; 成核能垒; 环境扫描电子显微镜 (ESEM)

基于扫描电化学池显微镜的单颗粒能源过程研究

高宁¹, 金力¹, 王平石¹, 刘鹏辉¹, 郝凯¹, 高瑞^{1,*}

¹ 西安交通大学化学学院, 陕西省西安市咸宁西路 28 号, 710049

*Email: rui.gao@xjtu.edu.cn

摘要正文: 燃料电池、电解水制氢、制氧等清洁能源的生成与利用技术, 已广泛应用于从微型电子器件到航天器的众多领域¹⁻³。在上述能源体系中, 电活性界面在空间上被掩埋在器件之中, 形成传统表征手段无法直接测量与准确表征的“掩埋界面”, 同时, 界面上单催化剂颗粒异质性进一步影响了界面动力学过程, 并放大催化反应在微纳尺度上的差异, 使得传统方法难以实现无损、高分辨率的界面动力学表征, 为探索界面态与催化反应间的构效关系带来挑战⁴。针对这一挑战, 本研究提出了一种伏安扫描电化学池显微镜 (CV-SECCM) 方法, 以析氢、析氧等经典电催化反应为研究对象, 探索单颗粒催化剂的反应动力学过程并进行电化学成像, 实现对微区多相界面过程的原位差异化测量⁵⁻⁶。例如, 通过研究由固体电解质层 (Nafion 膜) 和铂纳米颗粒 (PtNPs) 构成的埋藏界面处的 HER 反应动力学, 首次实现了 Nafion 膜下单个 PtNPs 的直接定位与电化学活性动态成像, 空间分辨率达 nm 级, 电流分辨率达到 pA 级。相关探索为单颗粒水平复杂、多相界面的原位电化学研究提供了新方法, 对能源器件界面优化设计具有重要指导意义。

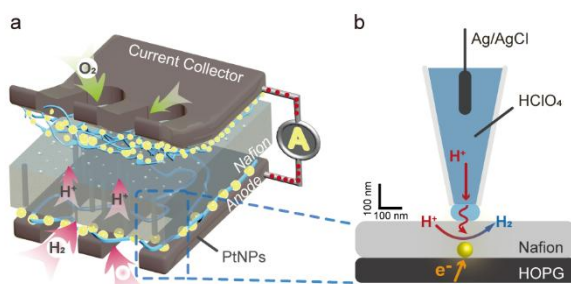


Fig. 1 Schematic of SECCM measurement measuring proton transport through nafion and reduction at a single Pt nanoparticle on an HOPG support.

关键词: 单颗粒电催化; 扫描电化学池显微镜; 析氢反应; 析氧反应

参考文献

- [1] Appleby, A. J., *Fuel cell handbook*. 1988.
- [2] Vielstich, W.; Lamm, A.; Gasteiger, H. A., *Handbook of fuel cells: fundamentals technology and applications*. Wiley New York: 2003; Vol. 2.
- [3] O'hayre, R.; Cha, S.-W.; Colella, W.; Prinz, F. B., *Fuel cell fundamentals*. John Wiley & Sons: 2016.
- [4] Zhou, X.; Shen, Q.; Wang, Y.; Dai, Y.; Chen, Y.; Wu, K., Surface and interfacial sciences for future technologies. *Natl. Sci. Rev.* 2024, nwae272.
- [5] Gao, R.; Edwards, M.; Qiu, YH.; Barman, K.; White, H., Visualization of Hydrogen Evolution at Individual Platinum Nanoparticles at a Buried Interface. *J. Am. Chem. Soc.* 2020, 142, 8890.
- [6] Gao, R.; Edwards, M.; Harris, J.; White, H., Shot noise sets the limit of quantification in electrochemical measurements. *Curr. Opin. Electrochem.* 2020, 22, 170.

基于三维动态追踪的单个颗粒表面电荷密度测量

陆昊¹, 梁霄², 龚湘君^{2,*}

¹华南理工大学土木与交通学院, 广州市天河区五山路 381 号, 510641

²华南理工大学材料科学与工程学院, 广州市天河区五山路 381 号, 510641

*Email: msxjgong@scut.edu.cn

摘要正文: 溶液中颗粒的界面电性与胶态分散的稳定性有很强关联。尤其是单个颗粒的表面电荷不仅是颗粒之间相互排斥或吸引力强度的度量, 也是颗粒界面稳定性 (例如微纳气泡) 的重要因素。在本研究中, 我们使用数字全息显微技术对特定强度均匀电场中的颗粒个体进行三维动态追踪。首先, 基于Stokes-Einstein关系实现了原位颗粒粒径测量。通过三维动态分析获得个体颗粒的运动速度, 从而根据颗粒受力状态和测定的粒径确定表面电荷密度。并且, 根据颗粒在特定电场区域的运动速度计算测得电泳迁移率, 进一步能够关联zeta电位。这种基于三维动态分析的全息微库仑计为研究气泡表面电荷特性和界面稳定性提供方法论指导。

关键词: 三维动态; 表面电荷; 稳定性; 微纳气泡

新一代药用撞击器采集效率的检测与影响因素研究

田莹¹, 刘佳琪¹, 冯端¹, 张国城^{1,*}

¹北京市计量检测科学研究院/国家生态环境监测治理产品质量监督检验中心, 北京, 100029

*Email: zhanggc@bjjl.cn

摘要正文: 新一代药用撞击器 (NGI) 用于评价药物制剂雾化后颗粒的空气动力学粒径及其粒度分布, 对于优化制剂颗粒吸入附着部位及治疗效果具有重要意义, 在吸入药物制剂检测领域具有广泛应用, 但目前缺乏相应的产品标准和检测手段, 导致对该类仪器的评价仅限于筛孔尺寸精度和数量, 评价缺乏科学性和系统性。本研究通过增加各级通道上下游采样孔道, 对 NGI 进行改造, 建立了以空气动力学粒径谱仪法的采样物理效率评价方法, 实现了该类新型设备的关键性能评价; 研究表明由于空气动力学法检测限 ($>0.5 \mu\text{m}$) 的影响, 可继续开发能测更小粒径颗粒数量的方法来评价高层级采样板采集效率, 从而进一步完善评价方法。同时, 探究了进气流量和滤膜对截止粒径的影响, 以及甘油涂层对物理采样效率的影响, 对 NGI 设备选型和仪器质量提升有重要参考意义。

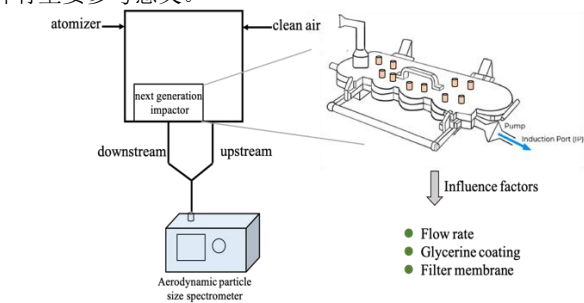


Fig. 1 Experimental frame diagram

关键词: 药用撞击器; 检测评价; 采集物理效率; 甘油涂层; 滤膜

参考文献

[1] 陈桂良, 侯惠民. 吸入用气雾剂雾粒测定方法的评价[J]. 中国医药工业杂志, 2007, (03): 194-199.

[2] 吴飞, 陈岚, 陈东浩. 吸气模式对吸入粉雾剂模型体外沉积性能的影响 [J]. 中国医药工业杂志, 2023, 54 (10): 1467-1474

[3] DOUB W, STEIN S, MITCHELL J, et al. Addressing the need for controls on particle bounce and re-entrainment in the cascade impactor and for the mitigation of electrostatic charge for aerodynamic particle size assessment of orally inhaled products: an assessment by the international consortium on regulation and science (IPAC-RS)[J]. AAPS PharmSciTech, 2020, 21(7): 239.

[4] 徐玉文, 梁翠荣, 谢元超, 等. 两种测定布地奈德气雾剂雾粒分布方法的比较[J]. 中国医药工业杂志, 2013, 44(09): 921-924.

[5] 王馨远, 高蕾, 周颖, 等. 3 种撞击器测定沙美特罗替卡松吸入粉雾剂的空气动力学粒径分布[J]. 药物分析杂志, 2020, 40(01): 186-197.

基于 G4 DNAzyme/hemin 的放射性锶离子和碘离子的选择性和灵敏的便携式比色检测

陈怡婷¹, 杨毅^{1,*}

¹南京理工大学 环境与生物工程学院, 江苏 南京 210094

*Email: yyi301@163.com

摘要正文: 锶-90 作为一种关键的放射性成分, 已引起人们的广泛关注, 但由于没有特定的能量束来指示其存在, 检测仍然具有挑战性。由于 ^{131}I 的半衰期短 (8.04 天)、难以在无核污染的情况下检测, 以及与其他人工放射性核素相比的分析方法不同, 对海水中 ^{131}I 的快速检测方法的研究非常有限。这项工作提出了一种基于适体的新型比色传感系统的设计, 用于可视化检测锶离子, 该系统利用 G4/血红素脱氧核糖核酸酶对 I^- 的协同催化作用。 Sr^{2+} 适体对 Sr^{2+} 的强亲和力导致适体折叠成 G4 结构。该方法基于血红素能够与 G4 自组装并形成具有强过氧化物酶样纳米酶活性的 G4/血红素复合物。同时, I^- 在 G4/hemin 存在下可协同催化 H_2O_2 氧化 TMB, 使其由无色变为深蓝色的 OxTMB, 从而实现 Sr^{2+} 的可视化检测。 I^- 对 H_2O_2 催化氧化 TMB 的影响随其浓度不同而变化, 表明该体系也可用于 I^- 的定量测定。此外, 还开发了一体化便携式比色测试平台, 实现了 I^- 的现场便携式检测, 为放射性检测分析提供了技术解决方案, 有助于有效监测环境中放射性 Sr^{2+} 和 I^- 的迁移。

关键词: 锶-90, 放射性碘, 过氧化物酶样, G4/血红素 DNA 酶, 综合便携式检测平台

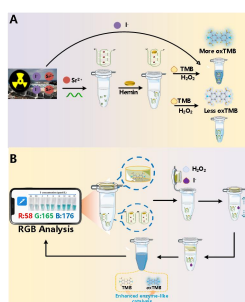


图 1 检测原理图

墙报摘要

多波长拉曼光谱研究燃烧源颗粒物微观结构特征：波长依赖性

陈晓阳¹, 陈龙飞¹, 曹阳¹, 胡雪欢^{1,*}

¹北京航空航天大学能源与动力工程学院, 北京, 中国, 100191

*Email: huxuehuan@buaa.edu.cn

碳质颗粒物的微观结构特征与其环境行为和健康风险存在显著的构效关系。本研究针对当前单波长拉曼表征体系存在的荧光干扰及探测深度限制等瓶颈问题, 创新性地采用多波长拉曼光谱联用技术 (532 nm、633 nm、785 nm), 系统解析了 MiniCAST 燃烧器 (MC)、柴油发动机 (DE)、航空涡轴发动机 (TS) 等典型燃烧源颗粒物及商用石墨 (P80) 的微观结构响应特征。基于 3L1G (Lorentzian 函数和 Gaussian 函数) 和 2L (Lorentzian 函数) 两种分峰拟合方法的对比, 定量表征了 D 峰 (~1350 cm⁻¹) 的位移特性以及 D 峰与 G 峰 (~1580 cm⁻¹) 的强度比 (I_D/I_G), 并通过 Ferrari 和 Basko¹ 提出的修正公式计算了微晶尺寸 (La)。同时, 结合徐俊等人²对于漂移系数 (α) 的定义, 探究了四种样品漂移系数的波长依赖性。

实验发现: (1) 在 G 峰归一化条件下, 所有样品的 D 峰呈现显著的随激发波长增大的依赖性红移, 其中 P80 样品的最大位移量达到 57.91 cm⁻¹, 剩余三种样品的平均最大位移量为 44.34 ± 0.57 cm⁻¹, 揭示燃烧源颗粒物与商用石墨中 sp² 杂化碳簇对拉曼激发波长敏感的差异性。(2) I_D/I_G 值随波长增加呈非线性增长趋势 ($\Delta I_D/I_G=0.81-2.13$), 表明长波长激发可增强结构缺陷检测灵敏度。(3) 微晶尺寸的计算结果显示, La 值与激发波长呈负相关关系。以 DE 样品为例, 基于 785 nm 数据的 La 计算值较 532 nm 平均减小 0.44 nm。(4) 漂移系数的变化规律揭示了激发波长与样品特性的耦合效应。DE 和 TS 样品的 α 值随激发波长的增加而逐渐减小, 特别是在 633 nm 至 785 nm 之间, α 值显著降低, 并在 785 nm 时降至负值。这一现象表明, 长激发波长 (如 785 nm) 能够有效抑制荧光干扰, 特别是在含有较多芳香烃和长链烃类化合物样品中, 短波长激发导致的强荧光效应得到了明显抑制。

本研究首次建立了“激发波长-缺陷结构-仪器响应”的定量关系模型, 提出基于源解析的波长优化选择策略: 推荐 785 nm 用于高荧光性新鲜烟尘 (如 DE/TS 颗粒) 的微晶结构分析, 而 532 nm 更适用于老化碳簇 (如 P80 颗粒) 的石墨化度测定。该成果为建立大气颗粒物多波长联合表征技术体系提供了重要的方法学参考。

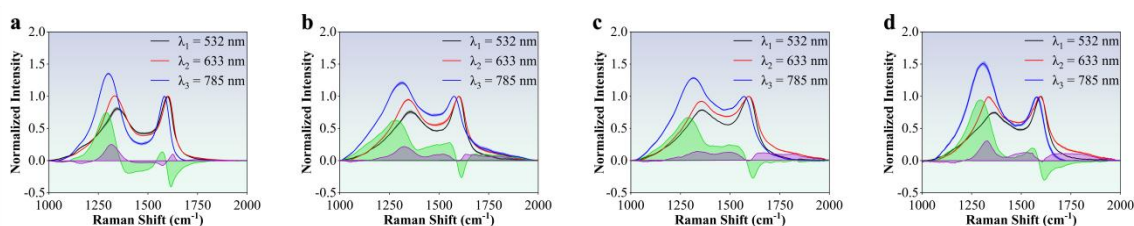


Fig. 1 Raman spectra of four samples (a) MC, (b) DE, (c) TS, and (d) P80 were measured at three excitation wavelengths. The green shaded area is the difference between λ_3 area and λ_1 area; the purple shaded area is the difference between λ_2 area and λ_1 area. (where λ is the excitation wavelength, $\lambda_1 = 532$ nm, $\lambda_2 = 633$ nm and $\lambda_3 = 785$ nm).

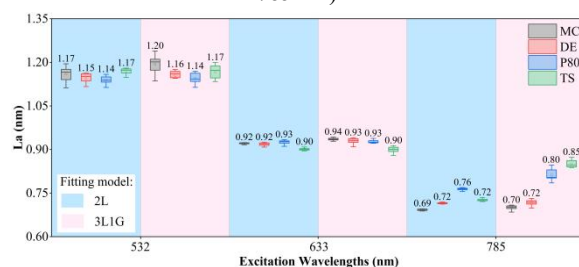


Fig. 2 Calculated La results for four samples under two split-peak fitting methods, 2L and 3L1G. The blue background indicates the results obtained by the 2L fitting method; the pink background indicates the results obtained by the 3L1G fitting method.

关键词: 燃烧源颗粒物; 拉曼光谱; 激发波长; 漂移系数

参考文献

- [1] Ferrari, A. C.; Basko, D. M., Raman spectroscopy as a versatile tool for studying the properties of graphene. *Nat Nanotechnol* 2013, 8 (4), 235-46.
- [2] Xiang, J.; Liu, J.; Xu, J.; Su, S.; Tang, H.; Hu, Y.; Mostafa, M. E.; Xu, K.; Wang, Y.; Hu, S., The fluorescence interference in Raman spectrum of raw coals and its application for evaluating coal property and combustion characteristics. *Proceedings of the Combustion Institute* 2019, 37 (3), 3053-3060.

基于卷积神经网络的气泡分割： 模型比较、优化及在微气泡检测中的应用

唐澳，蔡天意*，周嘉雯，龚文超，徐日辛，华洪，周骛
上海理工大学 能源与动力工程学院，动力工程多相流与传热重点实验室，上海，200093
(Tel: 15651665013, Email: tycai@usst.edu.cn)

摘要正文：气泡的准确分割和分析对于理解气泡的产生机制和改进工业微气泡检测至关重要。本研究旨在评估和优化基于卷积神经网络的气泡分割模型。首先，本文提出了一个系统的模型评价体系，包括一般的模型性能、离焦气泡预测精度和重叠气泡分割准确性评估。其次，比较了SplineDist, StarDist, YOLOv8-seg和Mask R-CNN等四种模型，并优化得出SplineDist-M16模型具有较快的图像处理速度（7.84 FPS）、较高的气泡尺寸预测精度和最小的误检测率（6.1%）。同时，SplineDist-M16更擅长边缘拟合和重叠气泡识别。本研究为工业应用中的实时微气泡检测铺平了道路，并建议通过模拟数据训练和增强重叠来进一步改进模型。

本研究首先构建了一套文丘里管式微气泡生成系统（**Fig. 1**），并通过阴影成像技术获得了不同工况下的实验气泡图片数据集。其次，从中筛选、分割构成了实验离焦气泡数据集，又结合BubGAN和离焦卷积技术生成了仿真气泡图片数据集。第三，运用上述数据集分别对比了StarDist、SplineDist、Mask R-CNN和Yolov8-seg等多种深度学习模型在气泡分割通用评价指标（**Table 1**）、离焦气泡边缘识别精度（**Fig.2**）和重叠气泡分割准确性（**Fig.3**）等方面的表现。最后，采用SplineDist-M16模型研究分析了水流量（**Fig. 4**）和背压变化（**Fig. 5**）对文丘里管微气泡发生器气泡生成特性的影响规律。

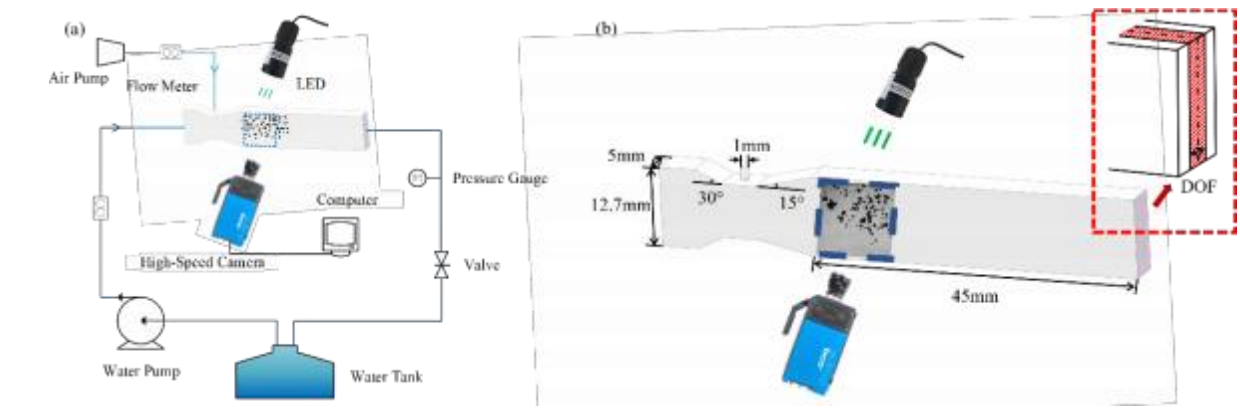


Fig. 1 基于文丘里式的微米气泡发生系统图 **Table 1** 各模型通用性能评价指标及评分

Model	FPS	AP	PQ	RQ	SQ	Recall	Precision	Score1 ^a	Score2 ^b
Splinedist-M8	8.70	0.866	0.836	0.928	0.900	0.945	0.912	38	16
Splinedist-M16	7.84	0.867	0.837	0.929	0.901	0.950	0.909	39	16

Splinedist-M32	6.07	0.863	0.841	0.926	0.908	0.924	0.929	33	12
Stardist-R8	9.47	0.866	0.818	0.928	0.881	0.928	0.928	36	16
Stardist-R16	8.65	0.860	0.847	0.924	0.916	0.937	0.912	35	15
Stardist-R32	7.41	0.861	0.851	0.925	0.919	0.937	0.914	37	14
YOLOv8-seg	42.37	0.839	0.734	0.912	0.804	0.954	0.874	24	12
Mask R-CNN	27.78	0.699	0.701	0.823	0.852	0.762	0.894	15	9

- a 所有性能指标均按数值打分，最大计9分，最小计1分，统计所有性能指标总得分
b 所有性能指标均按数值打分，最大计9分，最小计1分，计算FPS、AP和PQ得分之和

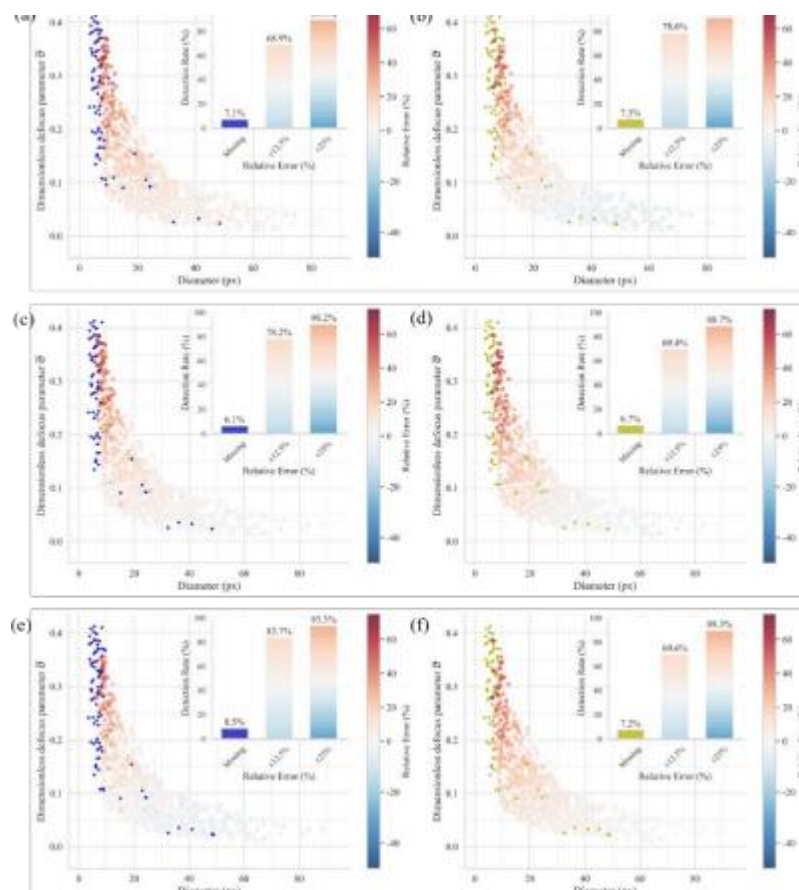


Fig.2 离焦气泡的粒度预测精度(a) SP8 (b) ST8 (c) SP16 (d) ST16 (e) SP32 (f) ST32

注：插入的柱状图显示了在不同允许误差条件下的遗漏检测率和识别的气泡比例

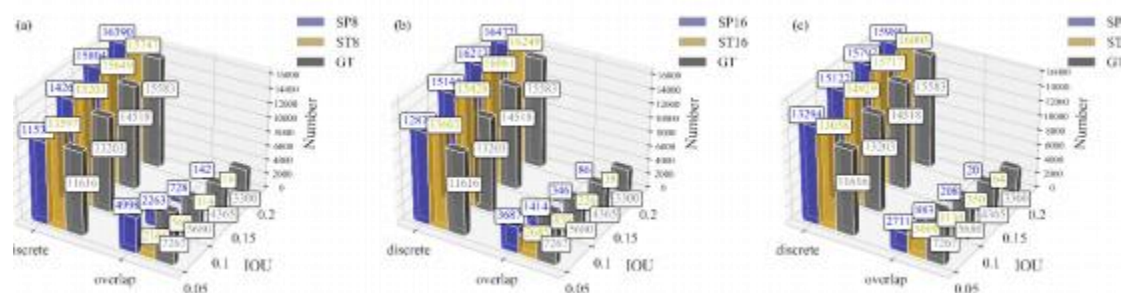


Fig. 3 重叠气泡分割结果(a) SP8/ST8 (b) SP16/ST16 (c) SP32/ST32

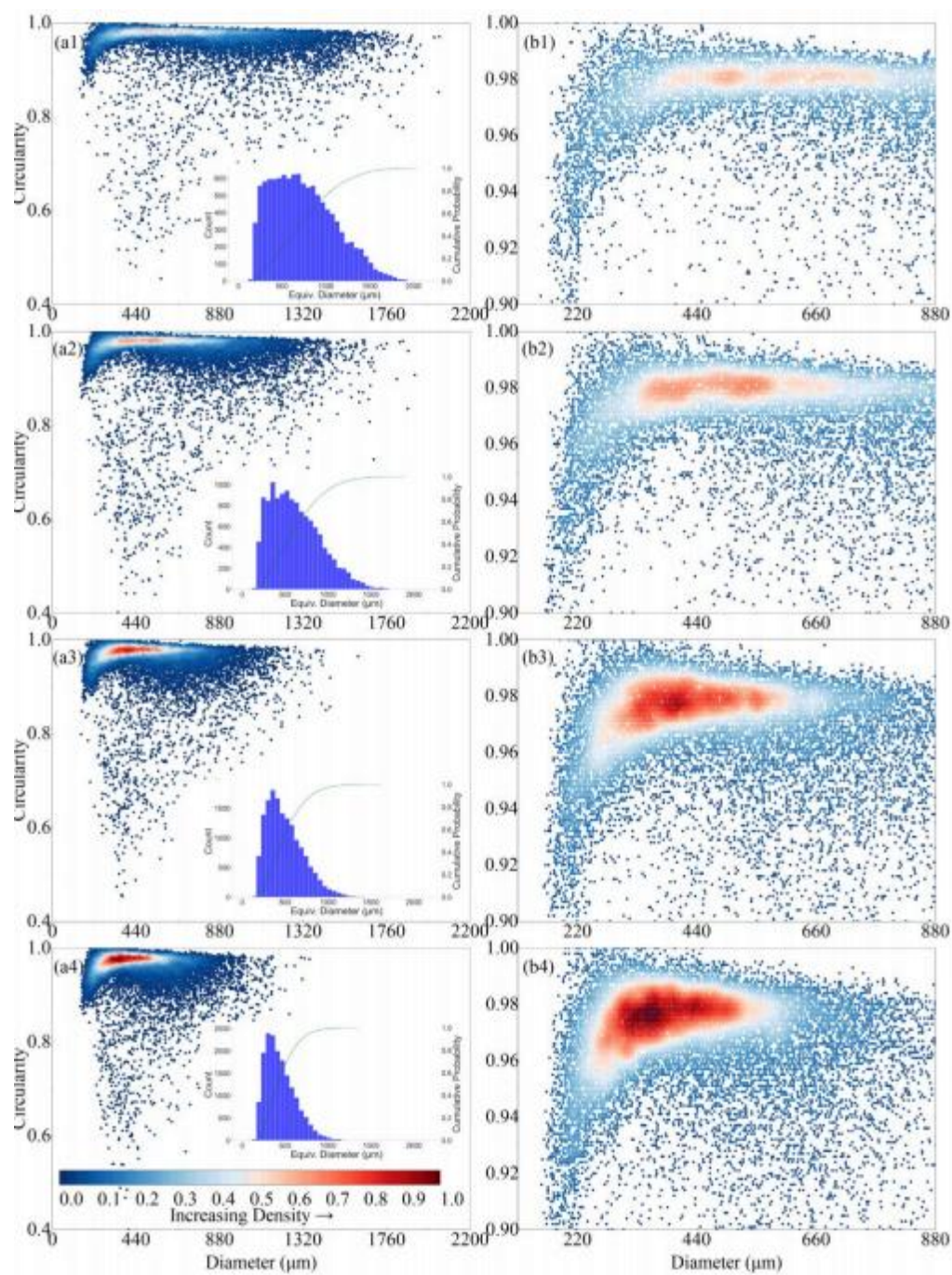


Fig. 4 水流量的影响 全范围: (a1)6L/min (a2)7L/min (a3)8L/min (a4)9L/min 局部: (b1)6L/min (b2)7L/min (b3)8L/min (b4)9L/min 注: 插入的直方图显示了不同大

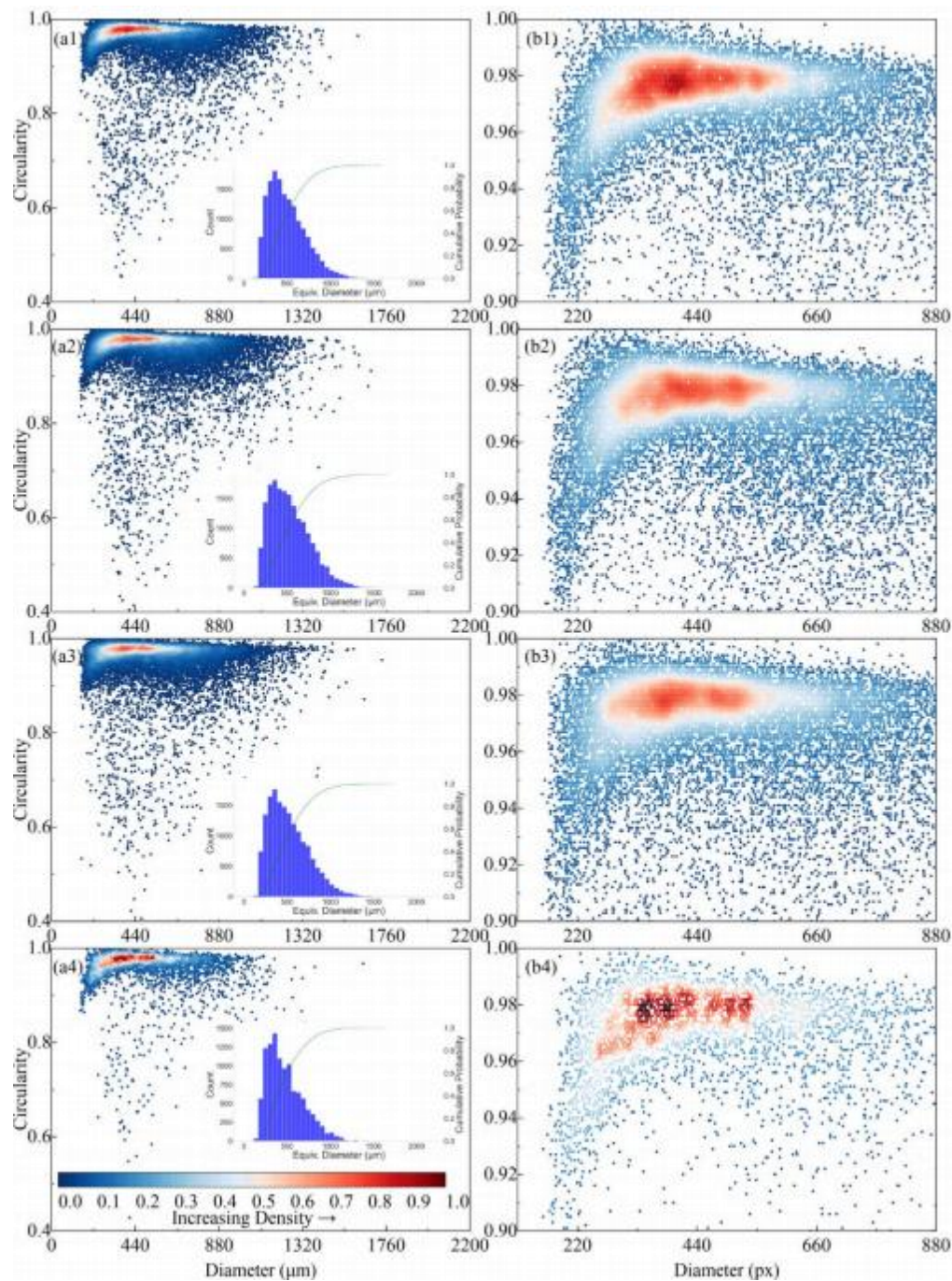


Fig. 5 背压的影响 全范围: (a1)0MPa (a2)0.03MPa (a3)0.04MPa (a4)0.05MPa 局部: (b1)0MPa (b2)0.03MPa (b3)0.04MPa (b4)0.05MPa 注: 插入的直方图显示了不同大小的气泡数

关键词: 微气泡、阴影成像、图像分割、离焦气泡、重叠气泡、U-Net

参考文献

[1] Cai T, Tang A, Xu R, et al. Balanced Deep Learning-Based Bubble Segmentation: Model Comparison, Optimization, and Application in Microbubble Detection[J]. Optimization, and Application in Microbubble Detection.