CCPT13

2024 第十三届中国颗粒大会

The 13th China Congress on Particle Technology

摘要集

主办单位: 中国颗粒学会

承办单位: 中国科学院过程工程研究所

中国颗粒学会微纳气泡专业委员会

协办单位: 国际介科学组织

苏州大学

澳大利亚智慧过程设计和控制研究中心

中科森辉微球技术（苏州）有限公司

中国·苏州

2024年10月24日-28日

第 2 分会场：多相反应流理论及建模

机器学习辅助气固两相流流体动力学模拟

欧阳博，罗正鸿*

上海交通大学，化学化工学院化工系，金属基复合材料国重实验室，上海，200240

*Email: luozh@sjtu.edu.cn

摘要正文：机器学习在两相流领域应用已取得重要进展，包括但不限于本构模型建模，量化分析，流型识别，关键参数预测1。针对气固流化床流体动力学模拟中存在的“耗时”、“误差大”等问题，本课题组采用机器学习从时间与空间两个角度辅助气固两相流数值模拟，解决介尺度模型修正规律与高精度时间尺度加速机制两个关键科学问题，实现“更准”、“更快”的目标。具体来说，首先采用机器学习作为大数据回归工具，辅助介尺度曳力和固相应力的各向异性建模2,3；其次，从海量网格中读取微尺度、介尺度曳力数据进行数据驱动分析，归纳出各标记的贡献大小，并提出滑移速度无关的简化微尺度曳力模型表达式4,5；然后从时间尺度上实现加速数值模拟运算6；最后将上述模型应用于气固流化床进气方式优化中7。本研究从数据驱动的角度出发，构建了气固两相流流体动力学模型，从空间和时间两个尺度提高了数值模拟的计算速度于精度，阐明了气固相内、相间作用规律，为气固流态化反应器智能化开发提供了一种的新思路，有利于推动介尺度理论的发展。

关键词：机器学习；人工神经网络；计算流体动力学；亚格子滤波模型；介尺度修正

参考文献

[1] 朱礼涛, 欧阳博, 张希宝, 罗正鸿. 机器学习在多相反应器中的应用进展. 化工进展. 2021, 40(4): 1699-1714.

[2] Ouyang B, Zhu LT, Luo ZH. Data-driven modeling of mesoscale solids stress closures for filtered two-fluid model in gas-particle flows. AIChE J. 2021, 67(7): e17290.

[3] Ouyang B, Zhu LT, Su YH, Luo ZH. A hybrid mesoscale closure combining CFD and deep learning for coarse-grid prediction of gas-particle flow dynamics. Chem. Eng. Sci. 2022, 248: 117268.

[4] Ouyang B, Zhu LT, Wen ZQ, Chen X, Luo ZH*. Homogeneous drag models in gas-solid fluidization: big data analytics and conventional correlation. AIChE J. 2023: e18170

[5] Ouyang B, Zhu LT, Luo ZH. Interpretable machine learning analysis and automated modeling to simulate fluid-particle flows. Particuology. 2023, 80:42-52.

[6] Ouyang B, Zhu LT, Luo ZH. Machine learning for full spatiotemporal acceleration of gas-particle flow simulations. Powder Technol. 2022, 408: 117701.

[7] 罗正鸿, 朱礼涛, 魏慧龙, 欧阳博, 雷赫, 闻昭权, 张希宝. 分支型内构件及流化床反应器. CN113198396B[P].

气雾化制备金属粉末数值模拟研究

张超才[1]，徐进[1]，褚夫众[2]，周宗彦[1,2]

[1]江西理工大学,颗粒技术江西省重点实验室，南昌 330013

[2]澳大利亚国家智能过程设计与控制研究中心，蒙纳士大学化工系，墨尔本 VIC 3800

*Email: 1514781688@qq.com

摘要正文：气雾化是一种将气体动能转化为液滴表面能的技术，具有粉末粒径小、粒度分布窄和产量大的优点。然而，该技术也存在一些缺点，例如设备成本高、能耗较大以及雾化腔室内部难以实现可视化等问题。本研究通过结合流体体积法与离散相模型，对气雾化金属粉末制备过程中雾化室内喷嘴附近的区域进行了详细的建模分析。利用相似理论模拟了气雾化过程中金属粉末的制备，并深入探讨了雾化腔室内的流场特征、气液交互作用以及不同工艺参数的影响。结果显示，雾化室内的流场特征主要表现为项链状的膨胀波和回流区。通过分析膨胀波团内部的马赫盘，可以分辨出开涡和闭涡现象。在导流管内部，金属液流从平面状逐渐转变为凸面状，进而发展成拱桥状，最终形成突起。这一变化过程中的拱桥状是由向下流动与向两侧扩散的金属液流达到动态平衡所致；而凸面状则是小液滴在高速气流冲击破碎后，在回流区作用下与底部液面碰撞的结果。金属液滴内气泡的形成，可归因于液滴之间的碰撞。最后，研究发现喷嘴的距离与角度对雾化范围及回流区的形态有显著影响。基于这些发现，提出了最佳工艺参数的建议，为气雾化金属粉末过程优化提供了具有一定价值的参考依据。

关键词：气雾化；金属粉末；流场；气液相互作用

形状和刚度对柔性异形颗粒流摩擦特性影响的 DEM 研究

朱晶晶[1]，朱延平[1]，张浩[1,*]，安希忠[1]

[1] 东北大学，冶金学院，沈阳，110819

*Email:zhangh@mail.neu.edu.cn

摘要正文：本文采用离散元法（DEM），对柔性颗粒纤维流的摩擦特性进行数值仿真研究，旨在改进本构关系模型，从而提高复杂颗粒流动的颗粒动力学理论（KTGF）处理柔性颗粒的能力。首先，针对柔性颗粒纤维自身特性构建了DEM模型，并对模型精度进行了有效验证。然后开展数值模拟仿真深入研究了不同刚度和长径比（Ar）的柔性圆柱颗粒的Jenike剪切过程。探究了颗粒系统的法向载荷对剪切应力的影响规律，揭示了颗粒刚度以及Ar对颗粒系统内摩擦角的影响。研究发现，柔性圆柱颗粒的刚度越大，Ar对内摩擦角的影响越大，并且随着柔性圆柱形颗粒刚度的减小，颗粒间流动性增大，使颗粒系统的内摩擦角减小。最后，通过讨论柔性颗粒刚度和Ar对体系内摩擦角的影响，建立了柔性圆柱形颗粒摩擦特性的预测关联式。本文设计了柔性颗粒转鼓实验，分别采用DEM模型和基于预测关联式改进后的双流体模型进行数值模拟研究，通过双方实验结果的对比验证了提出的预测关联式对复杂颗粒流内摩擦角的预测能力。

关键词：离散元；颗粒刚度；纤维流；摩擦预测

宽粒径分布气泡的气液两相流 CFD-DBM 仿真方法研究

刘子寒 [1]，赵永志 [1,*]

[1] 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。

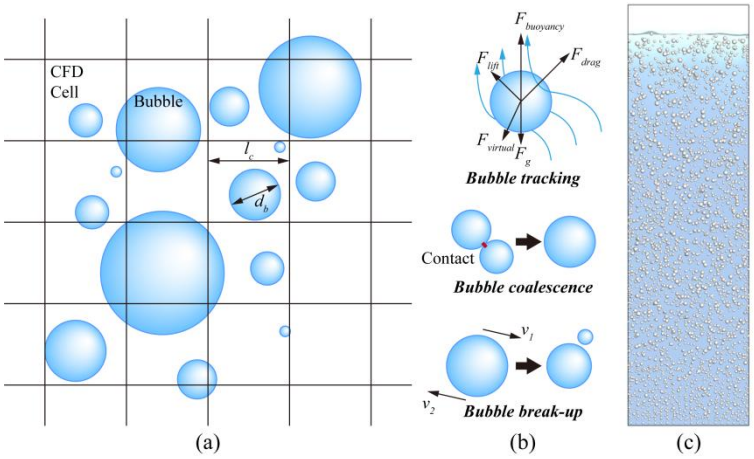


Fig. 1 Schematic illustration of the CFD-DBM simulation: (a) the size comparison between CFD cell and bubble with a wide diameter distribution, (b) the bubble dynamics tracking, coalescence, and break-up, (c) the simulation result of the bubble column and gas-liquid interface.

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] **Y. Lau, W. Bai, N. Deen, and J. Kuipers, Numerical study of bubble break-up in bubbly flows using a deterministic Euler–Lagrange framework, Chem. Eng. Sci. 2014, 108:9–22.**

[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.**

新型“环缝-孔”转炉氧枪结构对转炉多相流动特性及壁面侵蚀影响的数值模拟研究

闫浩炜[1], 陈君[1], 李超[2], 郭鹏越[1]，张浩[1,*], 安希忠[1]

[1]东北大学，冶金学院，多金属共生矿生态化冶金教育部重点实验室 110819，沈阳，辽宁

[2]鞍钢股份有限公司，鲅鱼圈钢铁分公司炼钢部 115007，营口，辽宁

*Email: zhangh@mail.neu.edu.cn

摘要正文：本研究提出一种基于射流汇聚现象的新型环缝-孔转炉氧枪，以加强转炉冶炼过程中的混合效率。首先通过与已公布的水模试验数据进行对比，验证了所建欧拉-欧拉模型模拟转炉顶吹搅拌过程的准确性。然后系统地研究了不同环缝与孔的宽度比和流量比对熔池流动特性和壁面侵蚀的影响。数值模拟结果表明，新型环缝-孔转炉氧枪能有效提高混匀效率并降低壁面磨损。随着环缝与孔的宽度比增加，混匀时间呈现出先减小后增大再减小的趋势，壁面磨损呈现出先减小后增大的趋势，其中最优宽度比为1:10。此外，随着流量比的增加，混匀时间逐渐减小，壁面磨损呈现出先减小后平缓再增大的趋势，综合考虑壁面磨损和混匀效率确定了最优流量比为1:12。本文的结果有助于理解转炉内的多相流动特性，可为提高转炉的冶炼效率、减少成分偏析和热量损失并延长转炉使用寿命提供理论支持。

关键词：转炉氧枪；汇聚性射流；多相流；壁面侵蚀；数值模拟

基于CFD-PBM的多粒径颗粒-流体流动及相变过程的模拟研究

徐丹 [1]，刘志强 [1,*]

[1] 中南大学能源科学与工程学院，湖南长沙，410083

*Email: liuzq@csu.edu.cn

摘要正文：相变材料浆体是相变材料结晶颗粒与载流体的混合流体，具有良好的流动性和高储能密度，可以广泛应用于储能领域。数值模拟其流动及相变过程是设计和控制输运系统的有效且低成本方法，但是传统的CFD方法必须假设颗粒为均一粒径分布，不能够客观描述多粒径分布及其粒径动态演化过程。本研究提出了一个CFD-PBM (数群平衡模型)的耦合模型来数值研究相变材料浆体的流动、传热和相变过程。其中，该模型采用CFD中双欧拉模型分别描述载流体与结晶颗粒的流动传热传质过程。特别地，采用PBM模型描述相变材料颗粒的多粒径分布及其动力学演化过程，将PBM动态预测后的颗粒粒径导入到CFD双欧拉模型修正预测颗粒相的动力学过程。该模型被应用于模拟研究冰浆（冰晶颗粒与水的混合物）冰浆在管道内的流动、传热和相变过程。对比传统CFD方法假设均一粒径，该CFD-PBM方法可以很好地描述冰晶颗粒的多粒径分布及其团聚、破碎和融化等动力学过程，预测出冰晶颗粒的空间上多粒径分布及时间上动态演化的过程。模型还对比分析了不同的运行参数下相应的冰浆流动、传热和传质过程。该方法为模拟研究相变材料储能浆体的流动、传热和传质过程提供了一个准确高效的研究工具。

关键词：相变材料浆体；CFD-PBM方法；粒径动力学过程；相变；流动传热模拟

流化床反应器中生物质氧化热解实验与多尺度建模研究

王冰 [1,2]，高希 [1,2,3*]

[1] 广东以色列理工学院，中国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

[3] 广东省能量转换材料和技术重点实验室，广东省汕头市，515063

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

摘要正文：生物质热化学转化制备高价值燃料、化学品和碳材料已成为我国可再生能源领域内一个重要的发展方向。目前，生物质快速氧化热解反应器中的多相传递和反应的调控尚未研究清楚，同时缺少精确的数学模型来描述生物质氧化热解多相复杂反应系统。本文研究了氧气浓度对流化床反应器内生物质颗粒快速氧化热解的影响，实现了流化床反应器内压降的分段测量并精确定量了气液固产物的收率和成分。实验表明随着氧气浓度的增加，生物气体产率增加，生物油和焦炭产率减少。在氧化条件下生物油中焦油的含量明显降低。同时，在开源软件MFiX中，开发了多尺度数学模型，包含详细的生物质氧化热解动力学模型、颗粒的非等温模型和基于CGDEM-CFD的反应器模型，并与床层压降、产物收率和组分等实验数据对比进行验证。模拟表明，氧气浓度会显著影响生物质颗粒和石英砂的分离、混合、生物质颗粒在反应器中的停留时间以及气液固产物分布及组分。本研究的结果为多相流化床反应器设计及生物质氧化热化学转化工业化提供了实验和理论基础。

关键词：生物质热化学氧化转化；流化床反应器；多尺度建模；MFiX

不匹配压力对超声速载颗粒混合层影响的数值研究

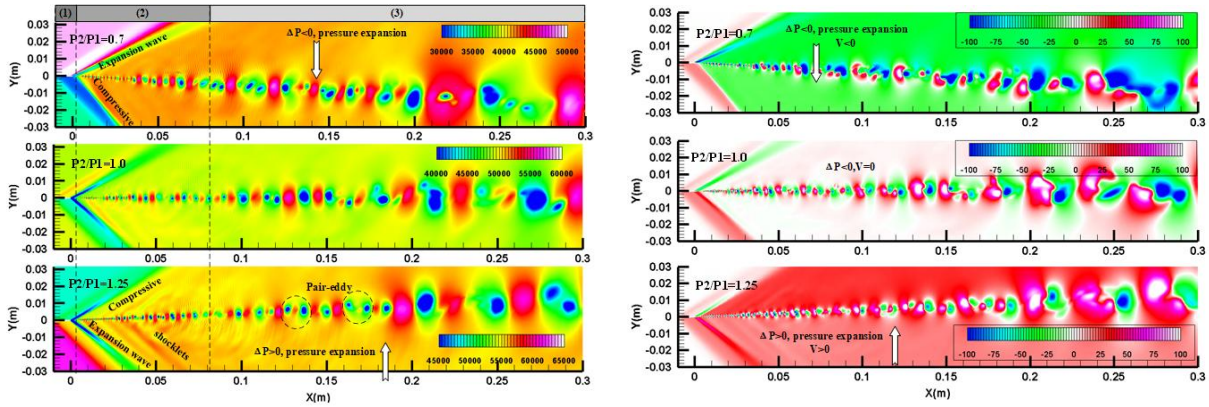
杨小龙[1]，李非[1]，李佩波[1,*]，汪洪波[1]，连城阅[1]，杨雪妮[1]

[1]国防科学技术大学高超声速技术实验室，长沙，410073

*Email: Email:lipeibo09@nudt.edu.cn

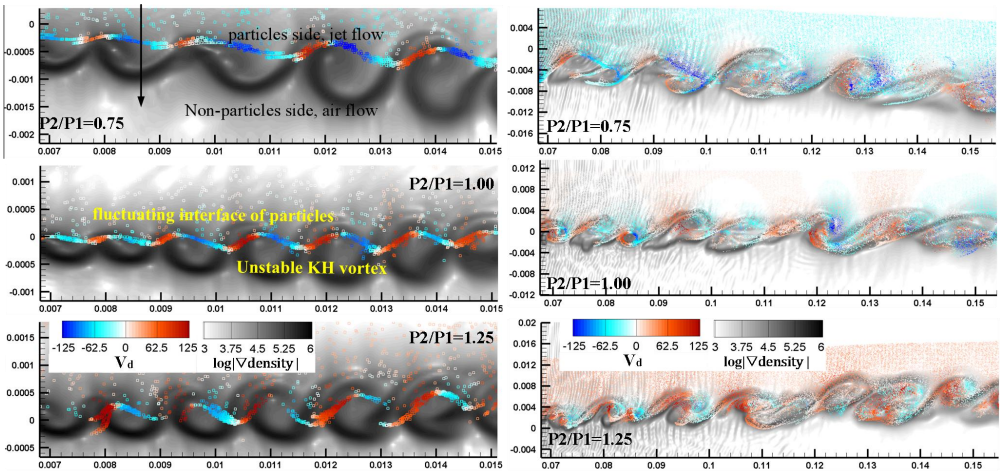
摘要正文：火箭基组合循环发动机(RBCC)在引射模式工作时，空气来流总压会随飞行高度和马赫数的变化而变化，使得火箭射流与空气来流总压难以匹配，形成压力不匹配的混合层[1]。本文采用大涡模拟与欧拉-拉格朗日方法结合的方法，分析了压力不匹配条件下，由气流和载颗粒射流组成的超声速混合层中，2μm和10μm直径单分散颗粒的混合特性。计算结果显示：压力不匹配会通过一道激波和压缩波转化为均匀压力场，并转换为横向气流对混合层的影响使混合层迅速偏转，见Figure 1。随着压力比的增加，波后的对流马赫数减小，混合层的增长速度略有增加[2]，混合层偏转越大。然而，由于粒子相对于横向气流的弛豫性质，粒子无法及时跟随混合层发生横向偏折，特别是在最初的上游剪切层区域(即Kelvin-Helmholtz 发展区, KH区)，见Figure 2(a)。因此，观察KH区与充分发展区的颗粒分布（Figure 2），并定量统计充分发展区的颗粒数量（Figure 3）。发现：相对于压力匹配条件，如果载颗粒射流受到非颗粒侧的横向气流作用时，颗粒将更容易进入到KH涡，并被KH涡所扰动，颗粒速度相对较小（Figure 2），导致混合层下游充分发展区内粒子数量明显增多，即两相混合明显增强（Figure 3）。相反，颗粒侧到非颗粒侧的横向气流作用则会减少颗粒进入混合层的数量，即削弱两相混合。对于大颗粒(10μm)，上述增强的两相混合效果变得更为明显（Figure 3），因为其更大的惯性和弛豫性让更多的颗粒进入了KH涡中，以及它提前了混合层完全发展区的起始位置。

关键词：RBCC；超声速混合层；颗粒流；



(a) Instantaneous pressure **(b) Instantaneous transverse velocity**

Figure 1 The turbulent characteristics of the single-phase mixing layer



1) KH developing zone　　2) developed zone

Figure 2 The gas-solid mixing layer at different P2/P1*where all the scales are equal, d_p=2μm Particles dots colored by the transverse velocity of particles

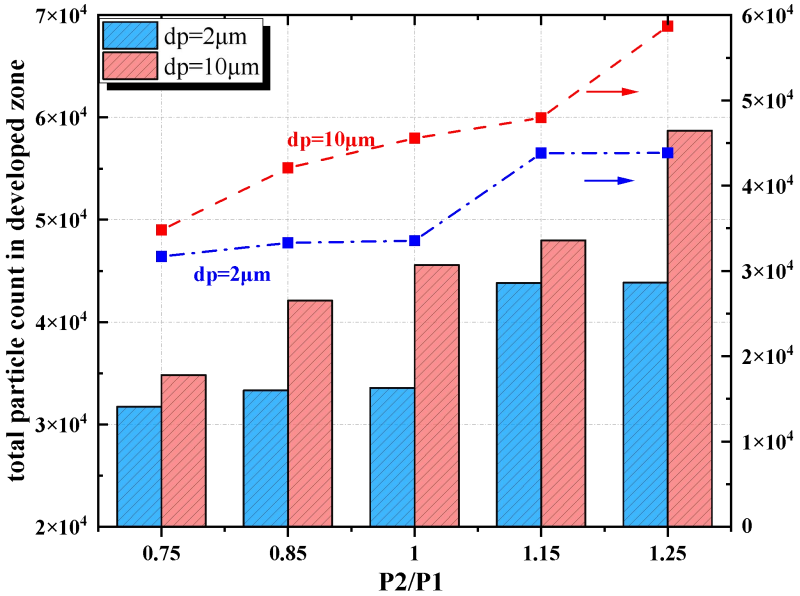


Figure 3 Total particles count in fully developed zone(0.25mm>X>0.1mm) for each case

参考文献

[1] ZHAO Y-Z Y T-Y W M-B S P-B L Y-H H B A R G J-R W F W W-D. Effect of pressure gradient on flow instability in the subsonic–supersonic mixing layer [J]. Physics of Fluids, 2023, 35(4):

[2] ZHANG D, TAN J, LI H. Structural characteristics of supersonic mixing enhanced by introducing streamwise vortices [J]. Applied Physics Letters, 2017, 111(11):

碳载多金属掺杂材料催化聚乙烯微波热解及C-H键选择性断裂机理研究

薛渊[1,*]，孙浩云[1]，吕碧绣[2]，胡中发[2]，高希[3]

[1]上海交通大学中英国际低碳学院，上海，201306

[2]苏州大学能源学院，苏州，215006

[3]广东以色列理工学院化学工程系，汕头，515063

*Email: yuan.xue@sjtu.edu.cn

摘要正文：微波催化热解技术是解决传统塑料热解能耗高、选择性差的有效途径。本文以铁基材料催化废弃聚乙烯热解为研究对象，系统探究加热方式（传统加热、微波加热）、过渡金属掺杂（Ni、Co、Mo）等对聚乙烯热解产物分布的影响。反应分子动力学模拟结果表明：相较于传统热解，微波热解可以提升聚乙烯热解反应速率，C-H键的选择性断裂得到加强；碳原子更易形成管状团聚前驱体，促进碳纳米管生成。聚乙烯微波催化热解实验结果显示：对铁基尖晶石进行碳载和过渡金属掺杂可以改变催化剂结构特征，显著提升其微波温升响应特性；碳载过渡金属掺杂铁铝催化剂可显著提升气态产物中氢气的选择性（~97%），并对碳纳米管产率和微观形貌起到较好的调控。以碳纳米管作为锂离子电池负极可获得250 mAh/g的可逆容量。

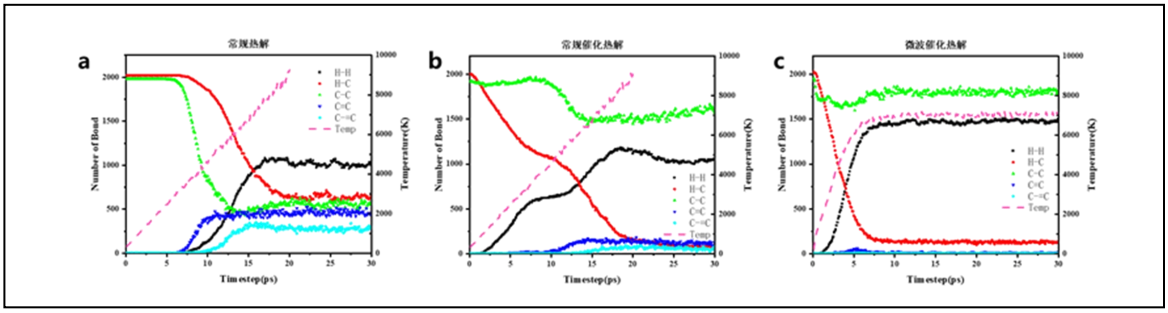


Fig. 1 Number change of characteristic chemical bonds

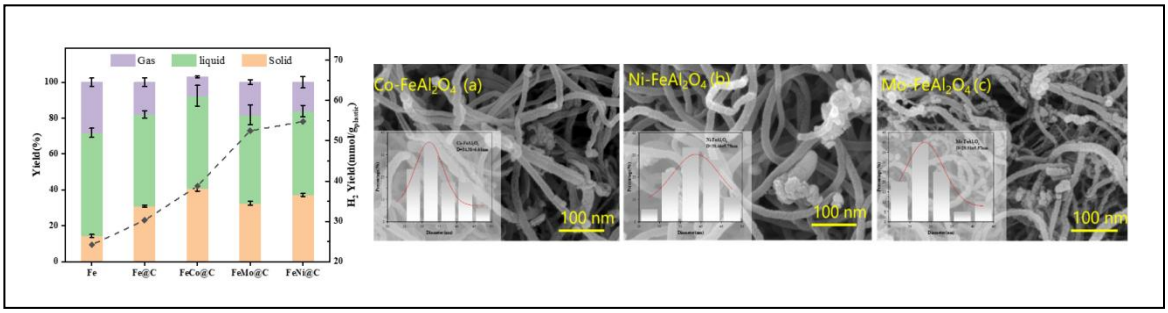


Fig. 2 Product distribution and SEM of CNTs

关键词：微波热解；聚乙烯；碳纳米管；反应分子动力学模拟；C-H键选择性断裂。

参考文献

[1] Putra P H M, Rozali S, Patah M F A, et al. A review of microwave pyrolysis as a sustainable plastic waste management technique[J]. *Journal of Environmental Management*, 2022, 303: 114240.

[2] Li S, Xue Y, Lin Y, et al. Synergistic activity of the Fe2O3/Al2O3 catalyst for hydrogen production through pyrolysis-catalytic decomposition of plastics[J]. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2023, 11(27): 10108-10118.

基于离散元法的锂离子电池极片辊压工艺优化数值模拟研究：粒径分布的影响

孙佳伟[1]，张浩[1,*]，安希忠[1]

[1]东北大学，冶金学院，多金属共生矿生态化冶金教育部重点实验室，沈阳，辽宁，110819

*Email: zhangh@mail.neu.edu.cn

摘要正文：锂离子电池的辊压工艺作为极片生产的一道关键工序，决定着电池的能量密度和安全性能。为深入研究极片辊压过程中的压实密度、弹性回复以及离子的流通性，本研究采用爱丁堡粘结接触模型（EEPA）建立了极片辊压离散元模型，通过对比纳米压痕实验与模拟正极极片的宏观力学差异，验证了所用模型的精度。而后系统地研究了正极极片内活性颗粒的三种粒径分布（高斯分布、平均分布、二元分布）对极片辊压力学性能的影响规律，并通过分析极片辊压过程的配位数、压力、弹性回复、颗粒相互力学作用等颗粒尺度信息，揭示了颗粒的辊压变形机理，最后通过 Voronoi 网络图得到锂离子在空隙中的转移路径。数值模拟结果表明，不同粒径分布会对极片压实密度和空隙分布产生显著的影响。相比于平均分布和二元分布，高斯分布粒径范围更广，颗粒间接触更紧密，压实度更高。但随着压实度的提高，空隙率减小，这会增加锂离子的转移路径，降低锂离子在电解液中的转移效率。本文的结果可为确定锂离子电池的最佳压实密度和空隙分布具有重要指导意义。

关键词：离散元法；锂离子电池；极片辊压；粒径分布

气固流化中颗粒气泡形成的不稳定性和临界性

鲁峰[1,*]，余亚雄[2]，苗杰[3]，魏飞[2,3]，张晨曦[2,3*]

[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：多颗粒系统在外界能量注入的情况下会呈现类似流体的特点被称为颗粒流化。当气体通过颗粒与颗粒之间的间隙时，流化颗粒物质中可以形成没有表面张力的颗粒气泡，这是一种奇特的不同于分子流体的反常现象。这些颗粒气泡在设备中起到混合颗粒的作用，对流化床反应器的传递性能起着非常重要的作用。但颗粒气泡形成背后的机理过程确实悬而未决的问题。近十年，物理学家在各种复杂颗粒系统中都观察到类似分子流体气-液或气-固相变的现象，并且可以很好的符合van der Waals方程。这启发我们从统计热力学角度重新审视颗粒气泡形成机理。本文报道了密相流化中气泡的不稳定性和临界性进行的实验和理论研究。在这项研究中，我们设计了一个理想的颗粒系统，通过工作压力来调节颗粒耗散。结果表明，颗粒系统的耗散存在一个临界值，超过该值就会形成颗粒气泡。通过模型讨论了颗粒相分离过程中由于颗粒耗散而造成的熵变化，建立相图揭示了颗粒系统中稀/密两相不寻常的非对称密度转变，这为流化颗粒物质中气泡的形成提供了一个新的理论框架。

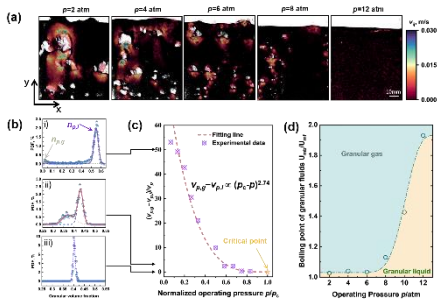


Fig. 1 Instability and Criticality of Bubbling in Fluidized Granular Matter. (a) Binary images of bubble patterns and the contour maps of particle velocity fluctuations corresponding to those binary images under different operating pressure; (b) PDFs of the particles volume fraction measured by a dual-optical probe at a certain operating pressure.: (i) p/p_c=0.067; (ii) p/p_c=0.567; (iii) p/p_c =1.00 (c) Correlation of ($v_{p,g}$− $v_{p,l}$) /v_p vs. p/p_c obtained by PDFs of particles volume fraction at a constant superficial gas velocity of 0.52 cm/s. Insets: symmetric pattern of phase diagram without dissipation α=0.50 (right side); asymmetric pattern of phase diagram with dissipation α=2.74 (left side). Experimental data for the dilute phase (yellow dots), dense phase (green dots), and the difference in density (purple dots). (d) The line of 'bubbling point' of fluidized granular matter.

关键词：流态化；颗粒气泡；颗粒耗散；相图

参考文献

[1] **Jaeger, H. M., Nagel, S. R., & Behringer, R. P. Granular solids, liquids, and gases. Rev. Mod. Phys. 68, 1259-1273 (1996).**

[2] **Argentina, M., Clerc, M. G. & Soto, R. van der Waals-like transition in fluidized granular matter. Phys. Rev. Lett. 89, 044301(2002).**

炉喉直径对小型高炉综合性能指标的影响的数值研究

王楠[1]，焦璐璐[2,*]，余艾冰[1]

[1]东南大学苏州联合研究生院，苏州，215123

[2]东南大学能源与环境学院，南京，211189

*lulu.jiao@seu.edu.cn

摘要正文：钢铁工业是关系到国民经济命脉的重要基础材料产业，在经济和环境压力不断上升的情况下，高炉生产的高效性尤为重要。炉型是高炉最基本的要素，其中炉喉直径是表征高炉上部形状的主要参数，其取值关系到炉料的运动和煤气流分布，是高炉实现高效、优质、低耗、长寿、环保的重要条件[1]。本文应用高炉过程模型，研究了炉喉直径对小型高炉综合性能指标及内部状态的影响规律。结果表明，随着炉喉直径增大，焦比呈现出先升高后降低的趋势；气体在上升过程中的动量和能量损失逐渐减小，压降逐渐减小；煤气停留时间先减小后增大，煤气利用率先降后增。本文针对炉喉直径进行了数值模拟研究，探讨了小型高炉的合理炉型，为其几何形状设计提供了依据。

关键词：高炉炼铁；炉喉直径；数值模拟

参考文献

[1] 项钟庸,欧阳标,王筱留.薄壁高炉的合理内型[J].钢铁,2012,47(10):14-19.

基于涡动力学的点力颗粒两相流摩阻分解理论方程

李青[1]，毕京源[2]，张传鸿[2]，潘翀[1,3*]

[1]天目山实验室，杭州，311115

[2]南京航空航天大学航空学院，南京，210016

[3]北京航空航天大学航空科学与工程学院，北京，100083

*Email: 1201214314@pku.edu.cn

摘要正文：近年来，相干涡结构对湍流边界层的影响，边界层摩阻分解和颗粒两相流边界层的研究发展迅速。首先，多尺度相干结构与湍流雷诺应力的产生密切相关[1]，如Fig.1所示；其次，摩阻分解理论[2]表明，湍流对边界层摩阻的影响主要体现在整个边界层内的雷诺应力生成；最后，颗粒对湍流边界层的雷诺应力生成会产生非单调的调制作用，使得含颗粒的边界层的摩阻与单相流的不同[3]。由此可见，湍流涡结构，摩阻分解理论工具，颗粒与边界层相互作用三者密切相关，无法分割开进行研究。有鉴于此，开发可以同时考虑湍流涡结构，颗粒与边界层相互作用的摩阻分解理论工具对于直接数值模拟和物理实验的数据分析都有着重要的意义。

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \omega_1}{\partial t}+\frac{\partial \omega_1 u_j}{\partial x_j}=\frac{\partial \omega_j u_1}{\partial x_j}+\nu\frac{\partial^2 \omega_1}{\partial x_j^{\,2}}+\varepsilon_{1jk}\frac{\partial f_k^p}{\partial x_j}\\
&\frac{\partial \omega_2}{\partial t}+\frac{\partial \omega_2 u_j}{\partial x_j}=\frac{\partial \omega_j u_2}{\partial x_j}+\nu\frac{\partial^2 \omega_2}{\partial x_j^{\,2}}+\varepsilon_{2jk}\frac{\partial f_k^p}{\partial x_j}\\
&\frac{\partial \omega_3}{\partial t}+\frac{\partial \omega_3 u_j}{\partial x_j}=\frac{\partial \omega_j u_3}{\partial x_j}+\nu\frac{\partial^2 \omega_3}{\partial x_j^{\,2}}+\varepsilon_{3jk}\frac{\partial f_k^p}{\partial x_j}
\end{aligned}\tag{1}$$

$$\begin{aligned}
&\vec{\tau_w}=-\nu\vec{n}\times\vec{\omega}=-\nu\begin{vmatrix} i & j & k\\ n_1 & n_2 & n_3\\ \omega_1 & \omega_2 & \omega_3\end{vmatrix},\tau_{w,i}=-\nu\varepsilon_{ijk}n_j\omega_k\\
&\vec{\tau_w}=\left[\tau_1,\tau_3\right]^T\\
&\tau_1=\nu(\omega_{2,w}-\omega_{3,w})\\
&\tau_3=\nu(\omega_{1,w}-\omega_{2,w})
\end{aligned}\tag{2}$$

$$\begin{aligned}
&\nu\frac{\partial^2 \omega_1}{\partial x_2^{\,2}}=\frac{\partial\left(\omega_1 u_2-\omega_2 u_1\right)}{\partial x_2}-\varepsilon_{1jk}\frac{\partial f_k^p}{\partial x_j}\\
&\nu\frac{\partial^2 \omega_2}{\partial x_2^{\,2}}=\frac{\partial\left(\omega_2 u_2-\omega_2 u_2\right)}{\partial x_2}-\varepsilon_{2jk}\frac{\partial f_k^p}{\partial x_j}\\
&\nu\frac{\partial^2 \omega_3}{\partial x_2^{\,2}}=\frac{\partial\left(\omega_3 u_2-\omega_2 u_3\right)}{\partial x_2}-\varepsilon_{3jk}\frac{\partial f_k^p}{\partial x_j}
\end{aligned}\tag{3}$$

$$\begin{aligned}
&\omega_1\left(I,1,K\right)=\omega_1\left(I,2,K\right)+\nu^{-1}\cdot\Delta x_{2,w}\int_0^{\delta}\left(\frac{\partial\left(\omega_1 u_2-\omega_2 u_1\right)}{\partial x_2}-\varepsilon_{1jk}\frac{\partial f_k^p}{\partial x_2}\right)dx_2\\
&\omega_2\left(I,1,K\right)=\omega_2\left(I,2,K\right)+\nu^{-1}\cdot\Delta x_{2,w}\int_0^{\delta}\left(-\varepsilon_{2jk}\frac{\partial f_k^p}{\partial x_2}\right)dx_2\\
&\omega_3\left(I,1,K\right)=\omega_3\left(I,2,K\right)+\nu^{-1}\cdot\Delta x_{2,w}\int_0^{\delta}\left(\frac{\partial\left(\omega_3 u_2-\omega_2 u_3\right)}{\partial x_2}-\varepsilon_{3jk}\frac{\partial f_k^p}{\partial x_2}\right)dx_2
\end{aligned}\tag{4}$$

$$\overline{\omega_{1,w}}=\overline{\omega_{1,w+}}+\Delta\cdot\nu^{-1}\int_0^{\delta}\left(\frac{\partial\left(\overline{\omega_1}\cdot\overline{u_2}-\overline{\omega_2}\cdot\overline{u_1}\right)+\left(\overline{\omega_1'u_2'}-\overline{\omega_2'u_1'}\right)}{\partial x_2}-\varepsilon_{1jk}\frac{\partial\overline{f_p^k}}{\partial x_j}\right)dx_2$$

$$\overline{\omega_{2,w}}=\overline{\omega_{2,w+}}+\Delta\cdot\nu^{-1}\int_0^{\delta}\left(-\varepsilon_{2jk}\frac{\partial f_p^k}{\partial x_j}\right)dx_2$$

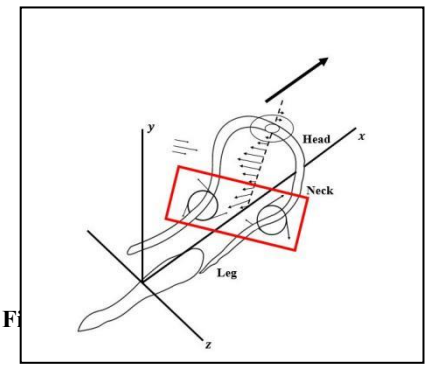
$$\overline{\omega_{3,w}}=\overline{\omega_{3,w+}}+\Delta\cdot\nu^{-1}\int_0^{\delta}\left(\frac{\partial\left(\overline{\omega_3}\cdot\overline{u_2}-\overline{\omega_2}\cdot\overline{u_3}\right)+\left(\overline{\omega_3'u_2'}-\overline{\omega_2'u_3'}\right)}{\partial x_2}-\varepsilon_{3jk}\frac{\partial f_p^k}{\partial x_j}\right)dx_2 \tag{5}$$

研究基于守恒形式的涡动力学方程对颗粒两相流边界层的摩阻分解问题进行理论推导，如图2和Eq(1)所示,其中，ω_i是涡矢量，u_i是速度矢量，f_k^p是颗粒反馈力源项矢量，$\varepsilon_{ijk}\frac{\partial f_k^p}{\partial x_j}$是颗粒力源项的旋度，$\nu$是流体运动粘度。Eq(2)是涡矢量形式表示的壁面切应力，其中，$\overrightarrow{\tau_w}$是切应力矢量，$\vec{n}$是壁面法向量，$\omega_{1,w},\omega_{2,w},\omega_{3,w}$是壁面涡矢量分量。沿边界层法向取长方体微元$dx_1\delta dx_3$，$\delta$表示边界层厚度，由于微元的流向和展向尺度$dx_1,dx_3$是小量，故引入一维简化假设，即在流向和展向的涡量矢量耗散项$\nu\frac{\partial^2\omega_i}{\partial x_1^{\,2}},\nu\frac{\partial^2\omega_i}{\partial x_3^{\,2}}$相比于法向$\nu\frac{\partial^2\omega_i}{\partial x_2^{\,2}}$是高阶小量。由于湍流边界层的摩阻分解问题只考虑统计定常态的物理量特性，引入湍流周期性假设消去非定常时间项，结合一维简化假设，Eq(1)变为Eq(3)。

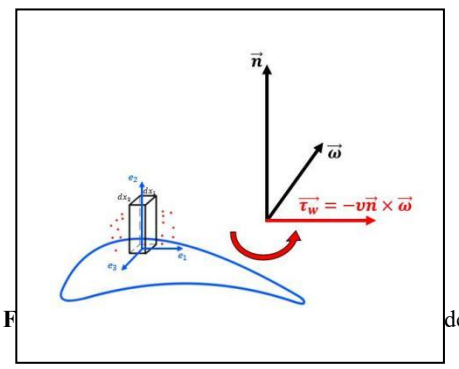
此外，对法向涡量矢量耗散项$\nu\frac{\partial^2\omega_i}{\partial x_2^{\,2}}$沿边界层法向进行积分和一阶差分导数离散，得到壁面涡矢量分量的表达式Eq(4)，其中$\omega_1(I,1,K),\omega_2(I,1,K),\omega_3(I,1,K)$是壁面涡矢量，$\omega_1(I,2,K),\omega_2(I,2,K),\omega_3(I,2,K)$是远离壁面一个数值网格距离的涡矢量，$\Delta x_{2,w}$是近壁面第一个数值网格。为了简化起见，$\overline{\omega_{1,w}},\overline{\omega_{2,w}},\overline{\omega_{3,w}}$表示壁面涡矢量，$\overline{\omega_{1,w+}},\overline{\omega_{2,w+}},\overline{\omega_{3,w+}}$表示远离壁面一个数值网格距离的涡矢量，$\Delta$表示近壁面第一个数值网格。结合上述公式Eq(1)-Eq(4)并进行雷诺平均，得到壁面涡矢量分量的最终表达式Eq(5)，即壁面涡矢量分量是近壁面平均涡矢量和螺度张量的函数。由于壁面切应力矢量Eq(2)是壁面涡矢量分量的函数，即壁面切应力矢量是近壁面平均涡矢量和螺度张量的函数。

新推导的理论方程表明：所有的壁面摩阻生成都是3D事件，准2D统计平均只是一种近似，其丢失了3D的涡动力学过程的信息,这与前人研究吻合[4]；从三维涡动力学的角度推导了摩阻分解方程，其各个贡献项可分为：近壁面平均涡量，平均螺度张量法向导数和脉动螺度张量法向导数沿壁面法向的积分。对于壁湍流而言，其湍流脉动对壁面摩阻的贡献完全由脉动螺度张量法向导数沿壁面法向的积分决定；颗粒项的直接贡献体现为点力源项的旋度，其对流场调制则体现为对近壁面平均涡量和螺度张量的改变，目前尚无法直接分析得知，需要进一步开展直接数值模拟分析。

关键词：涡动力学；湍流边界层摩阻；颗粒两相流；螺度张量



Fi



F den flow

参考文献

[1] C. XU. Coherent structures and drag-reduction mechanism in wall turbulence[J]. Advances in Mechanics, 2015, 45(1): 201504.

[2] W. Li et al. Decomposition of the mean skin-friction drag in compressible turbulent channel flow. Journal of Fluid Mechanics, 2019, 875:101-123.

[3] T. Zhou et al 2020. Non-monotonic effect of mass loading on turbulence modulations in particle-laden channel flow. Physics of Fluids, 2020, vol.32.

[4] J. Kim et al. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. Journal of Fluid Mechanics, 1987.177,133-166.

低碳炼铁高炉回旋区中煤和焦炭混合燃烧的CFD-DEM-DPM数值模拟研究

李萌[1]，李超[2]，吴官印[3,4]，安希忠[1,*]

[1]东北大学多金属共生矿生态化冶金教育部重点实验室，沈阳，110819

[2]鞍钢股份有限公司鲅鱼圈钢铁分公司，营口，115007

[3]海洋装备用金属材料及其应用国家重点实验室，鞍山，114009

[4]鞍钢钢铁研究院，鞍山，114009

*Email: anxz@mail.neu.edu.cn

摘要正文：深入研究回旋区的动力学行为对于优化高炉运行和操作具有重要意义。本文通过采用计算流体力学-离散元-离散相模型（CFD-DEM-DPM）来描述流体、颗粒和细粉的反应流动及其相互作用，并对三维高炉回旋区内的传输现象和热化学行为进行了详细分析。首先，验证了数值模型的有效性和准确性，确保其能够准确模拟实际工况。随后，探讨了喷煤量和不同富氢气体喷吹对燃烧特性（如气体组分质量分数分布、反应动力学速率）、热化学行为（如颗粒体积分数、回旋区尺寸、焦炭损耗、煤燃尽率、焦炭和气体的温升），以及动力学行为（如焦炭动能、床层应力分布）的影响。研究结果为实际生产中富氢燃料的选择以及回旋区内复杂反应过程的优化提供了新的见解。

关键词：高炉；CFD-DEM；煤；富氢气体；燃烧

液滴撞击固体颗粒的伪势 IMB-LBM 模拟

李朝生[1]，蔡容容[1*]

[1]华南理工大学化学与化工学院，广州 510641

*Email: lichaosheng_scut@163.com

摘要正文：基于伪势-格子波尔茨曼方法，本文提出了一种改进的流体-固体相互作用力格式，用于准确模拟液滴与固体颗粒碰撞过程中颗粒的表面润湿性。在研究中，引入了浸没移动边界法(Immersed moving boundary method, IMB)处理颗粒的曲面边界，考虑曲面边界上固体节点的体积分数的影响，将其纳入流体-流体和流体-颗粒之间的作用力计算。在颗粒表面上液滴的接触角和不同润湿性颗粒的接触线模拟中。相比于传统的反弹边界或插值边界处理方法，改进的IMB润湿边界格式模拟不同气液密度比下液滴在颗粒表面上的接触角，并且满足质量守恒，并且在液滴-颗粒周围的虚假速度更小，能够更准确模拟流体周围的速度。此外，通过了动态润湿过程的模拟进一步验证了改进IMB润湿边界格式的准确性。

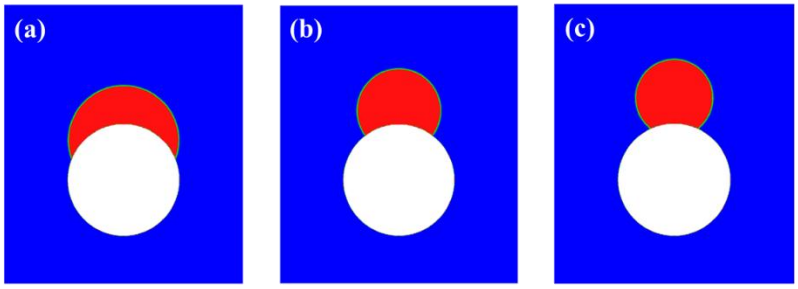


Fig. 1 Static contact angles obtained by the improved IMB scheme at density ratios of 750. (a) $\theta \approx 41°$, (b) $\theta \approx 90°$ and (c) $\theta \approx 120°$.

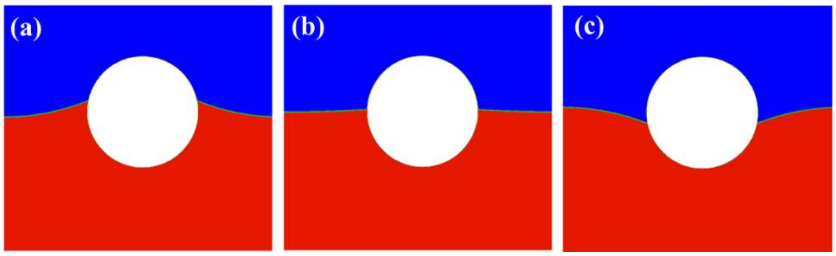


Fig. 2 Simulations for contact line on static cylinder. Phase interfaces captured by proposed schemes in contact with (a) hydrophilic cylinder (θ=60°), (b) neutral cylinder (θ=91°) and (c) hydrophobic cylinder (θ=120°).

关键词：液滴撞击；颗粒润湿性；浸没移动边界法；曲面边界

基于 DEM 与 CFD 稳态数据库的片状颗粒轨迹快速模拟研究

李冰辰[1]，林俊杰[1,*]，罗坤[1,*]，王帅[1]，樊建人[1]

[1]浙江大学能源清洁利用国家重点实验室，杭州，310027

*Email: linjunjie@zju.edu.cn; zjulk@zju.edu.cn

摘要正文：片状颗粒在能源、化工等领域具有广泛的工程应用背景，然而目前大多数模拟研究仅基于球形颗粒的假设，缺乏针对片状颗粒的普适且高精度的运动轨迹预测方法。为此，本文开发了一种离散元方法（DEM）与计算流体动力学（CFD）气动数据库耦合的模型，旨在分析片状颗粒的运动轨迹。研究发现，所建模型与实验数据具有良好的一致性。进一步分析表明，片状颗粒轨迹对初始俯仰角敏感，较小的俯仰角会显著增加颗粒的翻转运动和位移距离；相比之下，初始偏航角对轨迹的影响较小，而初始滚动角则对z轴方向位移起决定性作用。此外，随着片状颗粒厚度的增加，颗粒下沉更加明显，旋转减少，且等质量的片状颗粒表现出相似的流动特性。增加缩放因子（k）会使颗粒更易下沉且旋转减少，而等质量的片状颗粒则更趋向于沿来流方向运动。本文所提出的模型有望深化对片状颗粒流动行为的理解，并为流态化工业领域中片状颗粒运动轨迹的预测提供新的研究方法。

关键词：离散元方法；轨迹预测；片状颗粒；超椭球模型

颗粒入口管结构参数对气固旋流反应器内颗粒停留时间分布的影响研究

程婕[1]，朱文杰[1]，郭耀骏[1]，刘媛婧[1]，张明阳[1,*]

[1]山东建筑大学，山东济南，250101

*Email: cj15206456319@163.com

摘要正文：本文以煤经甲醇制丙烯工艺（MTP）为基础，设计了一种新型的气固旋流反应器。通过计算流体力学（CFD）方法，本研究对不同颗粒入口管结构参数下的反应器进行了周向、径向和轴向三个方向的颗粒停留时间分布（RTD）和颗粒平均停留时间（MRT）的模拟研究。研究发现，RTD 曲线呈现出典型的正态单峰分布特征。此外，颗粒的入射角度、加速管的有效长度以及进料管的插入深度对颗粒 RTD 曲线和 MRT 有着显著的影响。当颗粒入射角度为 30°时，未观察到尾峰的出现。当入射管长度超过 160mm 时，随着长度的增加，主峰的峰值降低，主峰区间变宽，并开始出现尾峰拖尾现象。同时，插入深度的增加会导致 RTD 曲线的主峰降低，平均停留时间（MRT）逐渐增加。

关键词：气固旋流反应器；计算流体力学；停留时间；涡流；返混

参考文献

[1] 董国亮,柳宏伟,温彦博,等. 首套流化床甲醇制丙烯装置工艺优化 [J]. 煤炭科学技术, 2024, 52 (04): 359-367.

[2] 李文艳. 甲醇制烯烃技术工艺及对比分析 [J]. 山西化工, 2020, 40 (03): 32-34. DOI:10.16525/j.cnki.cn14-1109/tq.2020.03.10.

[3] 张明阳,刘新辙,吴灵波,等. 液-液旋流反应器内混合特性 CFD-PBM 数值模拟 [J]. 烟台大学学报(自然科学与工程版), 2022, 35 (02): 214-222. DOI:10.13951/j.cnki.37-1213/n.210323.

[4] 段金鑫,毕京贺,韩霄,等. 离子液体烷基化用旋流反应器分离性能冷模实验研究 [J]. 高校化学工程学报, 2022, 36 (03): 387-397.

[5] 张正炜,吉华丽,张艳红,等. 旋流反应脱除天然气中 CO_2 研究 [J]. 天然气化工(C1 化学与化工), 2019, 44 (04): 80-85+112.

[6] **Li A ,Zhu L ,Wang K , et al. Particles residence time distribution in a gas-solid cyclone reactor using a CFD-DDPM tracer method [J]. Powder Technology, 2020, 364 205-217.**

[7] 李安俊,朱丽云,王振波. 轴向进剂位置对旋流反应器内流动结构影响 [J]. 高校化学工程学报, 2018, 32 (05): 1034-1041.

[8] 张艳,蒋明虎,张勇,等. 旋流场内固相颗粒停留时间与运动特性研究 [J]. 化工机械, 2018, 45 (04): 515-520.

[9] 张明阳,刘新辙,吴灵波,等. 液-液旋流反应器内混合特性 CFD-PBM 数值模拟 [J]. 烟台大学学报(自然科学与工程版), 2022, 35 (02): 214-222. DOI:10.13951/j.cnki.37-1213/n.210323.

[10] 刘英杰,蓝兴英,刘旭阳,等. 工业催化裂化汽提器内气固停留时间的数值模拟 [J]. 高校化学工程学报, 2010, 24 (05): 770-775.

[11] 张玉春,王振波,金有海,等. 超短接触旋流反应器混合腔内气固混合特性的数值模拟 [J]. 化工学报, 2012, 63 (02): 424-432.

气固两相反应流的高效欧拉-拉格朗日模拟方法

郭梦瑶[1]，林俊杰[1,*]，王帅[1]，罗坤[1,*]，樊建人[1]

[1]浙江大学能源清洁利用国家重点实验室，杭州，310027

*Email: linjunjie@zju.edu.cn; zjulk@zju.edu.cn

摘要正文：针对气固两相流建模和模拟中颗粒碰撞处理计算量过大的困难，本文将计算流体力学(CFD)和直接蒙特卡洛(DSMC)方法进行耦合，在欧拉坐标下采用Navier-Stokes控制方程求解气相运动，在拉格朗日坐标下耦合DSMC方法求解固相运动，利用高效的碰撞对取样方法，减少颗粒碰撞求解计算量。首先，对两种不同规模提升管内的冷态流动进行模拟研究，将实验结果与开发的CFD-DSMC、粗粒化计算流体力学-离散单元法(CFD-DEM)以及多相网格质点法(MP-PIC)方法的结果进行对比验证。在讨论了CFD-DSMC模型中关键参数对气固流动的影响后，耦合热化学反应模型，对生物质化学链气化过程进行数值模拟。结果表明，CFD-DSMC方法大幅度降低了计算时间，随着采样颗粒系数和粗粒化系数的增加，计算时间逐渐减小，冷态模拟结果误差逐渐增加。热态模拟出口产物气体组分与实验结果基本吻合，表明该方法在反应流模拟中同样适用。

关键词：颗粒碰撞；直接蒙特卡洛；气固两相流；欧拉-拉格朗日

考虑材料接触热阻的统一焓法的 LBM 液固相变模型

代佳琳[1,2]，雍玉梅[1],陈文强[1,2]，刘汶鑫[1,3]，李梦慧[1,4]，杨超[1,2]

[1]中国科学院过程工程研究所，北京市，100190

[2]中国科学院大学，化工学院，北京市，100049

[3]南京工业大学，化工学院，江苏省，南京市，211800

[4]大连大学，环境与化学工程学院，辽宁省，大连市，116622

*Email:daijialin20@ipe.ac.cn

摘要正文：复合相变材料（PCMs）固液相变储能常见于多种工程领域中，其中PCMs和基材间的接触热阻会显著减低传热储热效率。相比于一般温度形式的LBM相变换热模型，所采用的总焓固液相变LBM模型无需迭代计算，在固液PCMs热物性参数不同的条件下保证热流连续，稳定性高等特点，逐渐被广泛用于处理固液相变问题。但已有文献中的材料界面热阻模型都是基于温度形式定义，未见焓形式的材料界面热阻模型。因此，本文首先将温度形式的热阻模型扩展到焓形式，耦合Huang[1]提出的基于焓法的相变换热方程，在整个计算域内建立一个统一焓法的液固相变宏观模型，能够有效提高CPCMs相变传热的稳定性。其次，在所建立的焓形式热阻模型的基础上，在基材和PCMs的曲接触热阻界面上借用Hu等[2]提出的曲面插值格式，将热阻引入到界面晶格点的微观量计算中，进行带曲率材料接触界面的准确插值，由此建立起能够处理材料接触热阻的基于焓法的相变换热和流动过程的热LBM演化方程。为了验证所建焓形式材料接触热阻模型的有效性，对包含材料接触面热阻的两种材料热传导进行数值模拟，焓形式材料接触热阻模型温度场和温度形式的材料接触热阻模型及解析解吻合良好（图1）。

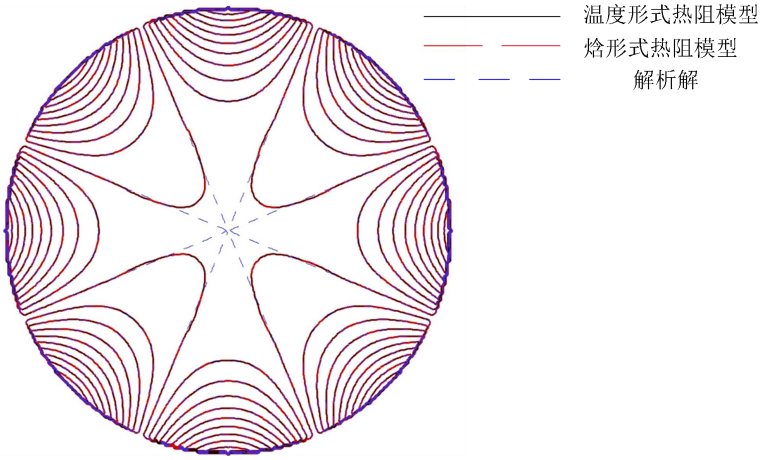


Fig. 1 Comparison of the simulation results of the two-form thermal resistance model with the analytical solution under the condition that the thermal resistance is not 0

为验证考虑材料接触热阻的统一焓法的LBM液固相变模型有效性，模拟了空腔中间包含方形固体基材的液固相变及自然对流问题，与文献结果吻合良好（图2）。

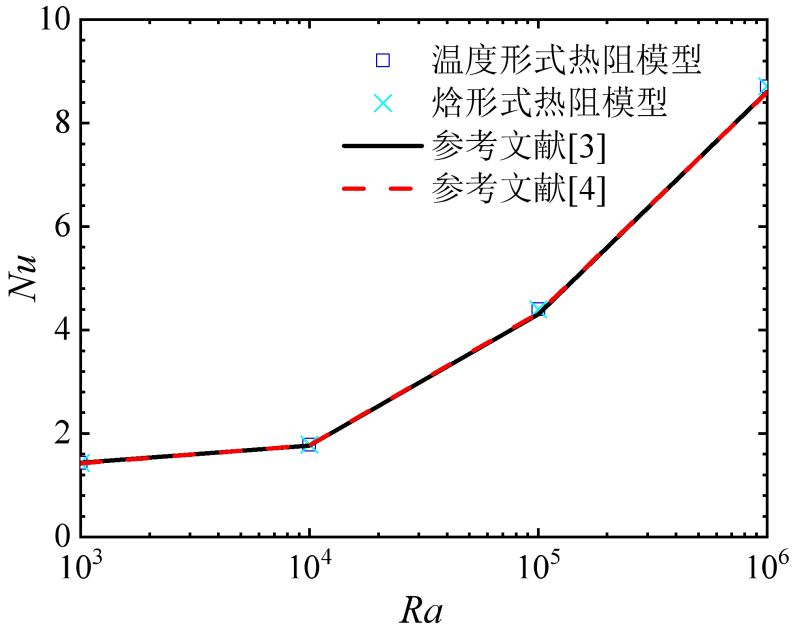


Fig. 2 Comparison of the simulation results of the thermal resistance model of temperature form and enthalpy form under different *Ra* numbers and the references[3][4]

本文研究了热物性、热阻及流动等因素对CPCMs的液固相变特性的影响，与温度形式的LBM液固相变模型进行比较，考察了材料接触热阻的统一焓法的LBM液固相变模型准确性、稳定性、计算效率。结果表明，焓形式的热阻模型能够有效提高计算效率，在热阻为零时，两种形式的热阻模型结果差别不显著，随着热阻增大，二者模型差别也逐渐增大；在热阻较大和两相热物性参数相差较大时，焓形式的热阻模型具有更高的稳定性。

关键词：复合相变材料；格子玻尔兹曼方法；固液相变换热模型；材料接触热阻模型；温法和焓法

参考文献

[1] **Huang R, Wu H, Ping C. A new lattice Boltzmann model for solid–liquid phase change[J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 2013, 59(Apr.):295-301.**

[2] **Hu Z, Huang J, Yong W A. Lattice Boltzmann method for convection-diffusion equations with general interfacial conditions[J]. Physical Review E, 2016, 93(4): 043320.**

[3] **Das M K, Reddy K S K. Conjugate natural convection heat transfer in an inclined square cavitycontaining a conducting blockJ]. International journal of heat and mass transfer, 2006, 49(25)4987-5000.**

[3] **House J M, Beckermann C, Smith T F. Effect of a centered conducting body on natural convection heattransfer in an enclosure[J]. Numerical Heat Transfer,1990.18(2): 213-225.**

基于 pf-LBM 两相流对催化剂颗粒内部润湿的数值研究

李梦慧 [1,2,*]，雍玉梅 [2],代佳琳 [2,3]，陈文强 [2,3]，杨超 [2]

[1] 大连大学，116622，大连市

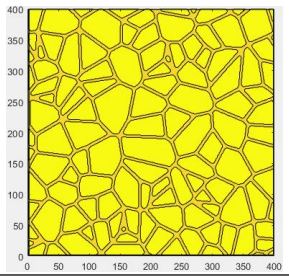
[2] 中国科学院过程工程研究所，100190，北京市

[3] 中国科学院大学，化工学院，100049，北京市

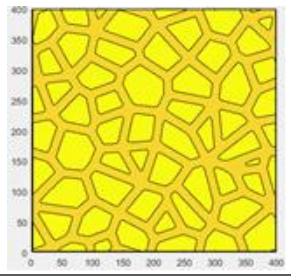
*Email: limenghui@ipe.ac.cn

摘要正文：催化剂作为促进反应进行的的媒介，广泛应用于化工、环境、医药和新能源等行业，在反应器中，催化剂颗粒内部的润湿特性对催化剂颗粒扩散和反应特性有着重要影响[1]。由于颗粒内部几何结构的复杂性和实验条件的局限性，颗粒内部的润湿条件很难准确获得。催化领域目前通常假设颗粒内全部润湿和全不润湿状态，因此造成现有催化剂颗粒反应的有效因子机理模型的偏颇性。因此，本文数值模拟多孔介质内气液两相流动过程，研究催化剂颗粒内部孔隙渣油润湿状态，获得内部润湿效率机理模型。

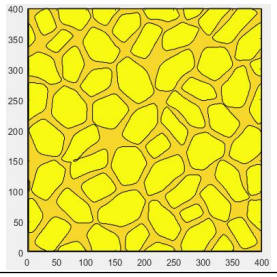
首先，针对渣油加氢催化剂颗粒的孔隙几何结构特征，我们提出了改进的Voronoi生成法-贝塞尔样条线光滑法构造双孔分布多孔介质几何模型的原理和算法，构建了双通道直径随机多孔介质孔隙结构（图1）。



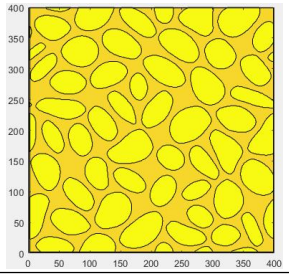
Single small-diameter channel



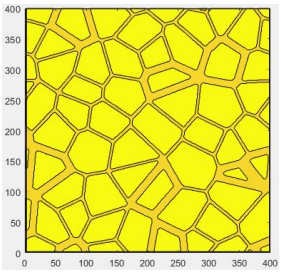
Single large-diameter channel



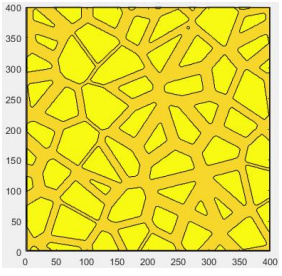
Small smooth curvature



Large smooth curvature



Small-diameter channel dominance



Large-diameter channel dominance

Fig. 1 Catalyst geometric reconstruction model based on Voronoi generation method

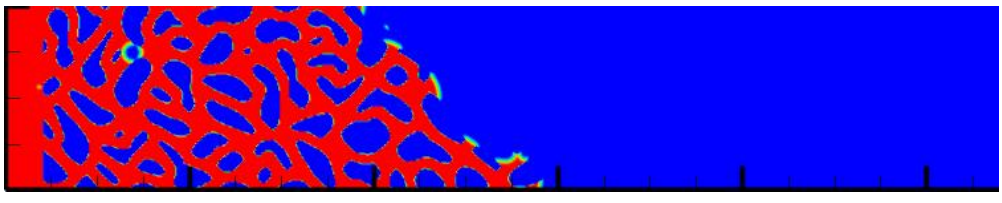
基于我们团队开发的相场格子玻尔兹曼方法（pf-LBM）两相流模型[2]，针对催化剂颗粒内部多孔介质复杂的内边界条件，我们提出了32种格点插值方案，提升复杂固体内边界格点的插值精度。通过气泡上升过程的数值模拟，验证了所建pf-LBM两相流模型的有效性；表 1 列出了测试条件下实验观测和相场LB模型计算得到的Re，由表中数

据可以发现，相场LB模型可以较为精准地预测气泡的上升动力学。同时通过气液两相流颗粒扰流算例，验证了32种格点插值方案处理内边界与pf-LBM两相流模型的正确性。

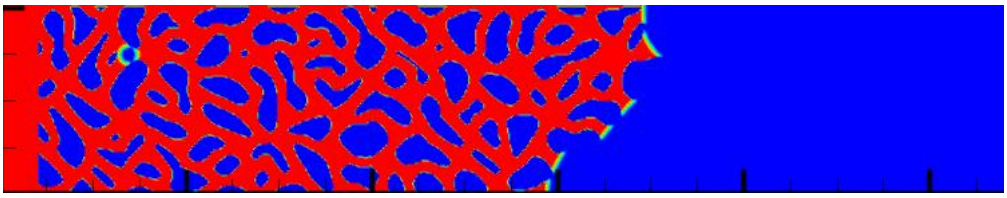
Table 1. Computational error statistics for *Re*

Re of Experiments	*Re* of Present Phase-field LB Model	Relative Error (%)
0.232	0.211	9.05
55.3	47.8	13.56
94.0	87.5	6.91
18.3	16.4	10.38
30.3	27.5	9.24

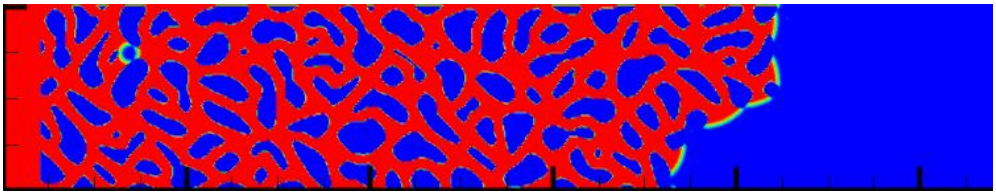
基于验证后的pf-LBM两相流模型及复杂内边界插值方案，本文模拟了不同物性、驱动力条件下多孔介质内渣油驱替气体过程见图2，分析了归纳了多孔介质内部润湿机理，归纳了孔隙率、平均孔径、曲折度、氢/油物理性质、氢/油比和驱动力影响渣油分布的规律，建立了催化剂颗粒内部润湿效率的经验关联式，从而定量掌握内部润湿状态并优化催化剂几何结构。



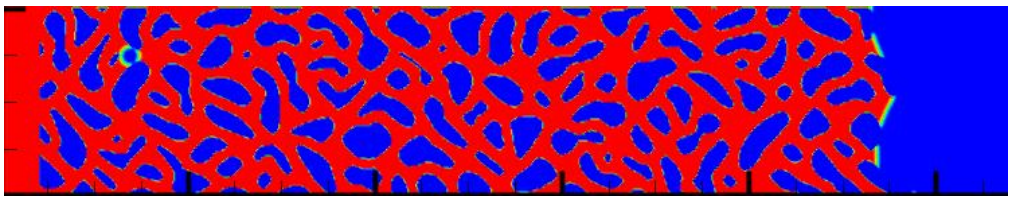
T=1×10^7



T=2×10^7



T=3×10^7



T=4×10^7

Fig. 2 Two-phase flow process of residue oil entering porous media

关键词： 渣油加氢，内部润湿；相场格子玻尔兹曼方法；多孔介质；两相流

参考文献

[1] **Fakhari A, Mitchell T, Leonardi C, Bolster D. Improved locality of the phase-field lattice-Boltzmann model for immiscible fluids at high density ratios. Phys Rev E. 2017 Nov;96(5-1):053301.**

[2] **Hanane Bouras, Yacine Haroun, Francisco Fortunato Bodziony, Régis Philippe, Pascal Fongarland, Frédéric Augier, Use of CFD**

for pressure drop, liquid saturation and wetting predictions in trickle bed reactors for different catalyst particle shapes. Chemical Engineering. 2022;249:117315.

线性剪切流中圆柱形颗粒与剪切稀化流体相互作用的数值模拟研究

姬敬博[1]，张浩[1,*]，安希忠[1]，Dongmin Yang[2]

[1]东北大学，冶金学院，沈阳，110819

[2]University of Edinburgh, School of Engineering, Edinburgh, EH9 3FB

*Email: zhangh@mail.neu.edu.cn

摘要正文：本文基于粒子分辨直接数值模拟（PR-DNS）研究了线性剪切流动的剪切稀化流体中圆柱形颗粒的阻力系数（C_D）、升力系数（C_L）和扭矩系数（C_T）。采用Carreau模型表征剪切稀化非牛顿流体的流变性质。首先，根据先前发表的数据验证了数值模型的准确性。然后，研究了雷诺数（Re）、纵横比（Ar）、流动指数（n）、Carreau数（Cu）和倾斜角（α）对C_D、C_L和C_T的影响。结果表明，剪切流中颗粒周围的流场结构和压力分布与均匀流中不同，并且剪切流中的颗粒会产生额外的C_L和C_T。流体的剪切稀化特性会改变颗粒周围的粘度分布，并且显著降低颗粒的C_D、C_L和C_T。通过将总力系数划分为压力贡献和粘性剪切贡献讨论了不同变量下C_D、C_L和C_T的变化规律和影响机制。综合考虑Re、Ar、n、Cu和α的影响建立了C_D、C_L和C_T的预测关联式。这些结果表明，在评估颗粒-流体相互作用时必须考虑剪切流动模式和剪切稀化特性，这为预测和控制剪切稀化流体中圆柱形颗粒的取向和分布提供了重要指导。同时，C_D、C_L和C_T的预测关联式可用于提高颗粒-非牛顿流体动力学模型的精度。

关键词：线性剪切流；颗粒-流体相互作用；剪切稀化流体；PR-DNS

鼓泡流化床放大过程中气泡特性变化规律研究

许源源，徐进，周宗彦

江西理工大学, 颗粒技术江西省重点实验室，南昌 330013

*Email: 1577413241@qq.com

摘要正文：鼓泡流化床中气泡的生成和运动能够有效地促进气固两相的混合，加快热量和质量的传递速度，使体系中的浓度和温度分布更加均匀，从而有利于提高反应效率和产品质量。在过去的研究中研究者对小尺度下鼓泡流化床中的气泡特性（例如气泡的大小、形状、破碎与合并以及上升速度等）进行了详细地研究，但对于在鼓泡流化床放大过程中气泡特性的变化规律尚不明确。本研究基于 CFD-DEM 耦合的数值方法对鼓泡流化床进行模拟放大，并进行实验验证，探究鼓泡流化床放大过程中气泡的产生和运动变化规律。模拟采用了三个不同尺度的流化床尺寸，对每个尺度下的气泡特性进行了详细的分析，并直接进行比较。结果表明，在流化床放大过程中，气泡的大小和形状以及速度变化和生命周期基本维持不变，气泡与流场的黏性力变化基本不变，随着流化床尺寸的增大气泡的形状和速度的波动逐渐减缓，气泡的破碎与合并次数逐步减少。这些结果为鼓泡流化床的设计和操作提供了一定的依据。

关键词：鼓泡流化床；气泡；放大规律；CFD-DEM

工业尺度螺旋输送机中颗粒流动和传热的模拟研究

葛雨馨[1]，林俊杰[1,*]，王帅[1,2]，罗坤[1,2,*]，樊建人[1,2]

[1]浙江大学清洁能源利用国家重点实验室，浙江杭州 310027

[2]浙江大学上海高等研究院，上海 200120

* E-mail: linjunjie@zju.edu.cn, zjulk@zju.edu.cn

摘要正文：螺旋输送机作为一种广泛应用于粉末与颗粒物料连续传输的关键设备，尽管在工业领域发挥着重要作用，但对其内部复杂多变的颗粒流动模式及热传递机制的理解尚显不足。鉴于此，本研究采用了一种高度精细化的离散元素法（DEM）模型，该模型集成了颗粒间碰撞动力学与热交换机制，旨在模拟垃圾焚烧飞灰低温热解过程中，工业级螺旋输送机的实际运行情况。通过将模型预测的颗粒流动模式与实验观测数据进行对比，成功验证了该DEM模型在反映真实物理过程方面的可靠性与精确度。研究深入剖析了螺旋输送机在不同操作参数下的颗粒行为特征，包括但不限于颗粒的速度分布、分布规律及温度响应。结果显示，螺旋输送机的上下级中颗粒平均速度分别为0.3908m/s、0.2620m/s。颗粒尺寸的不均一促使了颗粒在输送机内的偏析现象，且有部分细小颗粒粘附于螺旋叶片表面。在上螺旋中，颗粒主要被加热，上级出口处平均温度稳定维持在624.37K左右。下级螺旋的主要功能是保温，颗粒在其末端保持大约673.15K。在螺旋输送机两端观察到颗粒停滞区，这可能会导致设备内局部结渣，对设备的高效稳定运行构成潜在威胁。本研究有助于深入了解螺旋输送机内颗粒混合和传热过程，更为相关设备的设计与操作优化提供了理论依据与实践指导。

关键词：数值模拟；颗粒流；传热；螺旋输送机；DEM

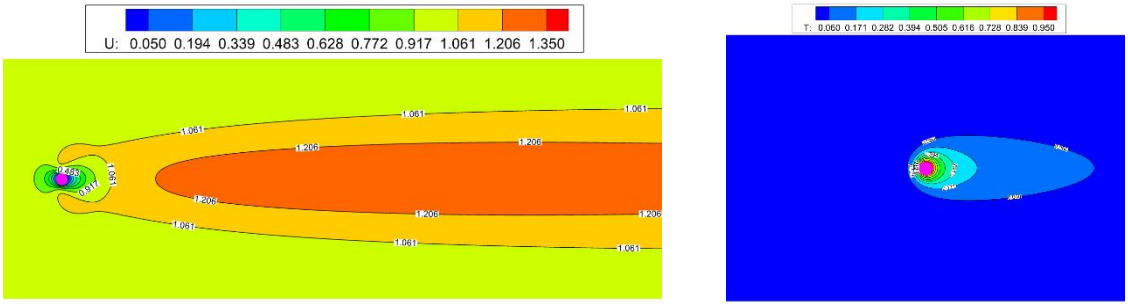
浮力作用下可压流动中球形颗粒受力和传热特性研究

陈勇 [1,*]

[1] 武汉理工大学，武汉，430070

*Email: yongchen@whut.edu.cn

摘要正文：低马赫数可变密度流动是自然界和工业界最常见的流动，如火山灰扩散、生物质气化和固体颗粒太阳能接收器等。在这些流动中由于气固两相温度差别较大（大于10%），布辛涅斯克近似不再适用，此时动量方程和能量方程需要耦合求解，气体密度、粘性和热传导系数都随温度的变化而变化。气体物性变化对气固相间的相互作用也有非常重要的影响[1-4]。因此，本研究拟采用格子玻尔兹曼方法[5]模拟研究低马赫数可变密度气固两相流动中颗粒雷诺数、弗劳德数和气固相对温差对颗粒受力和传热特性的影响规律(Fig. 1)，建立球形颗粒曳力和努塞尔数模型。新建立的模型能够用于CFD-DEM模拟研究低马赫数可变密度气固两相传热流动。



(a) (b)

Fig. 1 Normalized velocity (a) and temperature (b) distributions around a sphere. The buoyancy force is along with the flow direction.

关键词：低马赫数可变密度流动；气固两相；曳力；努塞尔数

参考文献

[1] **Kurose, R., Anami, M., Fujita, A., Komori, S. Numerical simulation of flow past a heated/cooled sphere. Journal of Fluid Mechanics, 2012, 692, 332-346.**

[2] **Nagata, T., Nonomura, T., Takahashi, S., Mizuno, Y., Fukuda, K. Direct numerical simulation of flow around a heated/cooled isolated sphere up to a Reynolds number of 300 under subsonic to supersonic conditions. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 120, 284-299.**

[3] **Ganguli, S., Lele, S. Drag of a heated sphere at low Reynolds numbers in the absence of buoyancy. Journal of Fluid Mechanics, 2019, 869, 264-291.**

[4] **Kiwitt, T., Fröhlich, K., Meinke, M., Schröder, W. Nusselt correlation for ellipsoidal particle. International Journal of Multiphase Flow, 2022, 149, 103941.**

[5] **Yuan, X., Wei, W., Fang, Z., Chen, Y. Lattice Boltzmann model for the low-Mach number variable-density flow. Physics of Fluids, 2022, 34(6), 066112.**

二元合金凝固过程中枝晶生长与气泡演化的相场建模

湛承杰[1]，柴振华[1,2,*]，孙东科[3]，耿韶宁[4]，施保昌[1,2]

[1]华中科技大学 数学与统计学院，武汉，430074

[2]华中科技大学 数学与应用科学跨学科研究所，武汉，430074

[3]东南大学 机械工程学院，南京，211189

[4]华中科技大学 机械科学与工程学院 数字化制造装备与技术国家重点实验室，武汉，430074

*Email: hustczh@hust.edu.cn

摘要正文：本文建立了二元合金凝固过程中气泡作用下枝晶生长的相场模型。在该模型中，通过考虑气泡、液态熔体和固态枝晶之间的相互作用，提出了一个复杂的气-液-枝晶系统的总自由能，该自由能在远离固相的区域退化为气液两相流的能量[1]，而在气泡消失时退化为热溶质枝晶生长的能量[2]。控制方程通常是通过最小化总自由能得到的，但这里做了一些修改，以提高气泡的守恒相场方程和溶质传输的对流扩散方程的能力。为了描述流体流动，在整个区域采用不可压缩的Navier - Stokes方程，其中流固耦合通过一个简单的扩散界面法来考虑。为了验证该相场模型，采用格子Boltzmann方法[3]研究了气液两相流动、枝晶生长以及气泡存在下的凝固等问题，发现该模型对此类复杂问题具有较好的模拟效果。

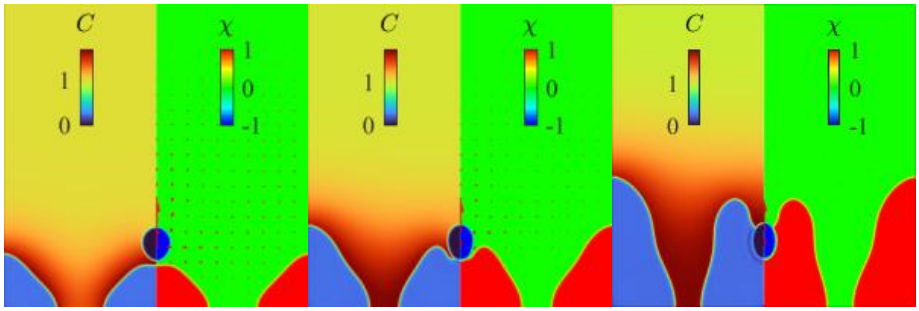


Fig. 1 The evolution of thermosolutal dendritic growth in presence of a gas bubble.

关键词：相场模型；合金凝固；枝晶生长；气泡演化

参考文献

[1] **D. Jacqmin, Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling. J. Comput. Phys. 1999, 155: 96-127.**

[2] **J. C. Ramirez, C. Beckermann, A. Karma, H.-J. Diepers, Phase-field modeling of binary alloy solidification with coupled heat and solute diffusion. *Phys. Rev. E* 2004, 69: 051607.**

[3] **C. Zhan, Z. Chai, B. Shi, P. Jiang, S. Geng, D. Sun, A diffuse-interface lattice Boltzmann method for the dendritic growth with thermosolutal convection. *Commun. Comput. Phys.* 2023, 33: 1164-1188.**

砂-柱形颗粒双组分流态化的SuperDEM-CFD耦合粗粒化方法模拟和试验验证

戴健健[1,2]，高希[1,2,3,*]

[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，3200003

[3]广东省能量转换材料和技术重点实验室，广东省汕头市，515063

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

摘要正文：研究砂子-生物质混合物的混合和分离特性对于生物质流化床反应器的设计、优化和放大具有重要的指导意义，然而混合物中百万级颗粒数和非球型形状给传统的DEM-CFD模拟带来了挑战。为实现砂子-非球型颗粒的大规模DEM-CFD模拟，本研究基于开源程序MFiX构建了一种SuperDEM-CFD耦合粗粒化方法，可同时对砂子和非球型颗粒进行粗粒化模拟。为验证开发的数值模型，我们在矩形流化床中开展了砂子及砂子-柱形颗粒混合物的流态化试验，测量了气速与床层总压降关系曲线及沿床高方向的压降分布。采用高清摄像机和基于机器学习的图像处理技术分析了柱形颗粒的床高频率分布和转角倾向分布，空隙率沿床高分布以及气泡特性。结果表明，SuperDEM-CFD耦合粗粒化方法模拟的气速与床层总压降关系曲线及分段压降分布与试验值相吻合，模拟的砂子和混合物的床层膨胀高度及空隙率沿床高分布与试验值吻合较好，柱形颗粒的高度和转角倾向分布规律与试验保持一致。总体而言，本研究构建的SuperDEM-CFD耦合粗粒化方法能够准确模拟大规模砂子-非球型颗粒系统的流态化、颗粒分布和混合特性，为后续进一步开展生物质流化床反应器传质传热和化学反应的模拟奠定了基础。

关键词：双组分颗粒；粗粒化模型；SuperDEM-CFD模拟；非球形颗粒；MFiX

Effects of flow distributor structures and particle-wall interaction on baghouse gas-solid flow

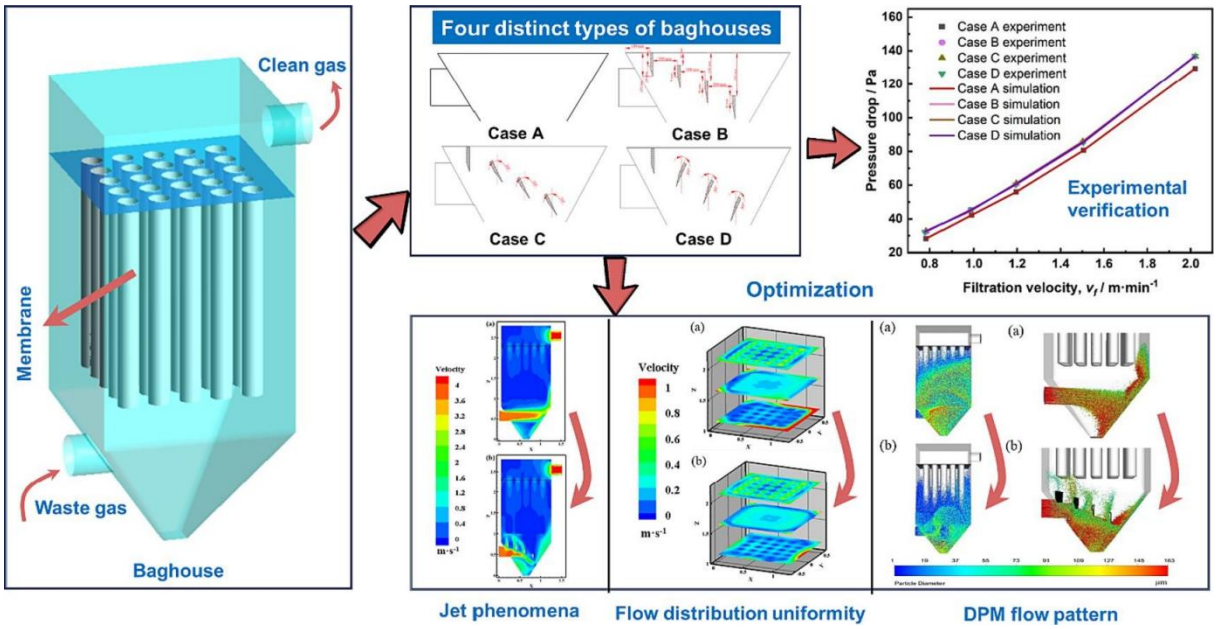
Yuhao Ding, Guangyu Zhou, Fanglei Cai, Feng Zhang*, Zhaoxiang Zhong, Weihong Xing

State Key Laboratory of Materials-Oriented Chemical Engineering, National Engineering Research Center for Special Separation Membrane, Nanjing Tech University, Nanjing 210009, China

*Email: Feng Zhang@njtech.edu.cn

Abstract: The uniform distribution of gas–solid two-phase flow inside the baghouse is a key factor in its performance. The Discrete Phase Model (DPM) was applied to study the flow characteristics and uniform degree of the flow distribution. The effect of flow distributor structures, characteristics of particles (such as size and restitution coefficient), and the particle–wall interaction on gas–solid two-phase flow were investigated by experiments and simulations. Results show that flow distributors greatly improve the uniformity of fluid distribution, while showing little effect on the filtration resistance. The flow distributors effectively avoid the occurrence of jet phenomena within the baghouse and significantly reduce the quality of dust on the surface of the filter bag. The weight has decreased by approximately 24.6 % in Case B (a flow distributor with four baffles perpendicular to the flow direction) compared to Case A (without a flow distributor and baffle). More particles will deposit on the surface of the filter bag with the increasing of restitution coefficient. The particle–wall interaction has a significant impact on particle motion when the particle sizes are larger than 150 μm, while the impact on particle motion is small when the particle sizes are smaller than 10 μm. These studies provide a basis for improving the uniformity of gas–solid two-phase flow inside the baghouse.

Keywords: Flow distributors; Gas-solid flow; CFD-DPM; Baghouse; Restitution coefficients.



References

[1] L.Y. Wang, et al, Effects of relative humidity, particle hygroscopicity, and filter hydrophilicity on filtration performance of hollow fiber air filters, J. Membr. Sci. 2020, *595*, 117561.

[2] S. Park, et al, Non-uniform filtration velocity of process gas passing through a long bag filter, J. Hazard. Mater. 2019, *365*, 440-447.

[3] A. Joubert, J.C. Laborde, L. Bouilloux, S. Chazelet, D. Thomas, Modelling the pressure drop across HEPA filters during cake filtration in the presence of humidity, Chem. Eng. J. 2011, *166*, 616-623.

Development of a slot-rectangular spouted bed thermoconversion reactor

Ziliang Wang[1,3*], Zhiwei Chen[2,3], Jim Lim[3]

[1]*National Engineering Laboratory for Reducing Emissions from Coal Combustion, School of Energy and Power Engineering, Shandong University, Jinan, China*

[2]*College of Materials Science and Engineering, Chongqing University, Chongqing, China*

[3]*Chemical and Biological Engineering Department, University of British Columbia, Vancouver, Canada*

*Email: zwang2022@sdu.edu.cn

Abstract: Slot-rectangular spouted bed (SRSB), with rectangular cross-section and slotted gas inlet, has been proposed to overcome the scale-up challenges of conventional spouted bed. It can be utilized in gas/particle processes such as drying of coarse particles, coating of tablets and torrefaction of biomass. However, application of SRSB was limited because of instability and insufficient hydrodynamic studies. In this presentation, the development history of SRSB is briefly introduced first. After that, its hydrodynamics, stability and scale-up of slot-rectangular spouted beds are discussed. Effects of reactors' geometries, particle properties, and operating conditions on its hydrodynamics are investigated. In comparison with the conventional axisymmetric spouted bed, flow regimes of SRSB are identified by means of both experimental and modelling tools, and new empirical correlations of its minimum spouting velocity and maximum pressure drop are developed.

Based on the above-mentioned hydrodynamics study, a potential application of SRSB on biomass torrefaction has been tried. Torrefaction, a thermal pretreatment method, is capable of modifying the physical-chemical properties of biomass and enhancing its calorific value. A detailed reactor and process design is introduced for biomass SRSB torrefier. And the performance of SRSB torrefier is tested comprehensively. In addition, the scale-up of SRSB torrefier is studied via experimental tests. The experimental results illustrate that the weight loss and energy yield of biomass during torrefaction barely change when the SRSB torrefier is scaled up from single-slot rectangular spouted bed to double-slot rectangular spouted bed.

Keywords: slot-rectangular spouted bed; hydrodynamics; application; torrefaction

References

[1] N. Epstein, J.R. Grace, Spouted and spout-fluid beds : fundamentals and applications. Cambridge University Press (2011).

[2] Ziliang Wang, Biomass torrefaction in slot-rectangular spouted beds, PhD thesis, University of British Columbia, 2018

从分子到反应器的烯烃高温催化模拟研究

鲁波娜[1]，郑默[1]，钟势坤[1]，吴玉婷[1]，许友好[2]

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

[2]中石化石油化工科学研究院有限公司，北京 100083

*Email: bnlu@ipe.ac.cn

摘要正文：当前，新能源、再生能源以及电动汽车的迅猛发展给成品油市场带来了巨大冲击，炼油能力结构性过剩问题日趋严重，将过剩的炼油能力部分转化为生产低碳烯烃等化学品产能，成为当前炼油行业的迫切需求。催化裂化（FCC）装置是主要炼油装置，也是石化行业中碳排放的主要来源。在 FCC 基础上提出的中石化靶向催化裂化工艺（TCO）耦合重质烃裂解、烯烃裂解等多个反应过程，有望一举达到减碳和“炼化一体化”的目的。本报告以 TCO 中最为重要环节-烯烃高温催化过程为切入点，发展从分子到反应器的模拟方法，从探索反应机理及骨架网络、工业催化剂反应动力学实验、新型反应器研发到全回路反应器系统的多尺度模拟，从而形成基于结构辨析的反应器网络模型及工业大模型，实现多元化原料和多过程耦合反应器系统的模拟研究，加速 TCO 工艺的工业化进程。

关键词：催化裂化；多尺度；靶向催化裂化；油转化；多尺度模拟

催化裂化乳化进料强化液滴微爆过程数值模拟研究

石孝刚[1]，赵云鹏[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，北京，102249

*Email: lanxy@cup.edu.cn

摘要正文：在重油催化裂化提升管进料段中，油滴的汽化过程对催化裂化反应影响重大。本文提出可通过乳化进料的方式，强化重油液滴的汽化效果，提高反应效率。为此，本文采用VOF方法建立了乳化油滴与催化剂颗粒的流动、传热与油滴气化模型，获得了提升管入口处油滴与催化剂颗粒的作用机制。结果表明，乳化油滴的变形过程取决于内部气泡的运动和变化，在微爆发生前，乳化液滴依次经过了生长、挤压和聚并等阶段。通过与相同条件下的纯油滴相对比，可以发现在碰撞过程发生后的50微秒内，乳化油滴可以减少32.6%以上的液膜覆盖面积，并且使得液相与催化剂表面的直接接触时间减少40%以上，如图1所示。乳化进料技术可通过水滴的微爆作用使得油滴实现二次雾化效果，使得重油液滴在催化剂表面的覆盖率大幅度降低，同时大幅度降低了液滴直径，微爆过程形成的二次液滴平均粒径在4-5 μm左右。乳化进料技术的二次雾化对提高重油液滴汽化速率、减少生焦率、提高轻质油品收率等都具有明显的促进作用。

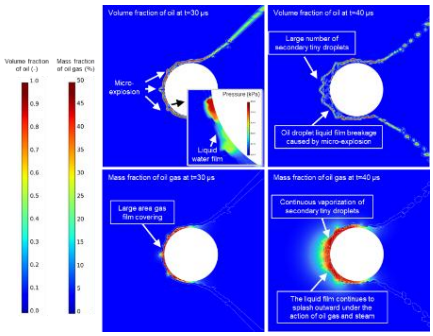


图1 乳化油滴在催化剂表面微爆过程

Fig. 1 Micro-Explosion of the emulsified oil droplet on catalyst particle

关键词：催化裂化；乳化油滴；碰撞；微爆

复杂液液流动中的液滴破碎过程的实验测量与PBM模拟研究

何益健[1]，孔博[1,*]

[1]化学工程系，广东以色列理工，广东汕头大学路 241 号，515063

*Email : bo.kong@gtiit.edu.cn

摘要正文：液-液（L-L）乳化系统在食品、制药、化工及其他工业中被广泛应用。液滴尺寸分布（DSD）是这些系统中的一个关键参数，而破碎通常在乳化过程中起主导作用。尽管破碎对DSD非常重要，但对这一过程的理解以及描述它的模型仍然有限。本论文解决了这些问题，分为两个部分：数值模拟工作和实验工作。

采用计算流体动力学（CFD）和基于高斯积分的矩方法（QBMM）模拟了在泰勒-库埃特（TC）装置中驱动的湍流液-液（L-L）乳状体流动。测试了各种破碎核函数和子代尺寸分布模型。总的来说，我们发现破碎核函数决定了平均液滴直径，而子代尺寸分布函数主要影响DSD的形状。使用Ravichandar等人[1]提出的方法调整了CT和Chen破碎核函数中的系数，发现它不适用于所研究的液体系统。MB和Lehr破碎核函数更好地预测了平均液滴直径，但它们不适用于L-L TC流中的高分散相粘度系统。在Re=10400时，MB破碎核函数和Lehr子代尺寸分布函数非常好地预测了实验DSD。M形Lehr子代尺寸分布函数在不同条件下表现出多样化特征，并在特定参数范围内表现出最佳性能。

液滴破碎实验是利用一个大半径比（约0.9）的泰勒-库埃特装置进行的。为研究粘度对液滴破碎的影响，在不同雷诺数下进行了一系列实验，粘度比范围从1到50。实验包含了高水平的湍流能量耗散率和广泛的粘度比范围，以研究湍流-粘度相互作用在液滴破碎机理中的影响。研究结果揭示了控制机制的主导权转移：在较低雷诺数下，粘度占主导地位，而在较高值时，湍流占主导。然而，这些机制之间的确切转换点需要进一步的理论建模和研究。

关键词：液滴破碎；乳化；CFD模拟；基于高斯积分的矩方法；泰勒库塔流

参考文献

[1] **K. Ravichandar, M. G. Olsen, and R. D. Vigil, Turbulent droplet breakage probability: Analysis of fitting parameters for two commonly used models, Chem. Eng. Sci. 2023, 266: 118311.**

人工智能赋能多相反应器多尺度研究

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@gtiit.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：人工智能；多尺度建模；生物质快速热解；非球行颗粒；流化床反应器

工业气流床气化炉气化反应流场数值模拟研究

张煜[1,*]，高琳[1]，杨勇[1]

[1]中科合成油技术股份有限公司，北京市怀柔区雁栖经济开发区C区乐园南二街1号，101407

*Email: zhangyu@synfuelschina.com.cn

摘要正文：气流床气化炉以煤种适应性广、碳转化率高、生产强度大等优势，广泛应用于工业煤气化过程中。近年来气流床气化技术的发展趋势主要为大型化、原料适用性广，能量综合利用等方面。气化反应室是气流床气化炉的核心部件之一，其反应流场分布特性对装备研发和运行状态分析具有重要的指导意义。由于气化反应室内温度和压力高，很难通过热态实验对反应流场进行测量。随着高性能计算能力的快速提升和工程计算软件的推广，越来越多的研究人员可以采用计算流体力学方法（CFD）能够对气化反应流场进行建模和数值模拟。本工作针对230MW的水煤浆气流床气化炉和560MW的干粉煤气流床气化炉建立的计算流体（CFD）模型，模型假设气化过程由四个过程构成，包括水分蒸发、热解过程、气相反应和焦炭反应。模型采用欧拉-拉格朗日方法描述气化反应室内气-含固煤浆液滴（水煤浆气化炉）和气-固（干粉煤气流床气化炉），气相流动由欧拉方法模拟，水煤浆液滴和煤粉颗粒的运动由拉格朗日方法追踪。通过数值计算可以得到气化反应室温度分布，组分浓度分布等信息，模拟结果较为直观地展示了气流床气化炉热态反应流场结构和特性分布，对指导气化炉开发和运行优化提供支持和依据。

关键词：气流床气化炉；计算流体力学；数值模拟

航空绿色单组元能源的燃料催化反应与传递过程研究

侯宝林*，王晓东，张涛

中国科学院大连化学物理研究所，辽宁省大连市沙河口区中山路 457 号，116023

*Email: blhou@dicp.ac.cn

摘要正文：为了满足航空飞行器紧急迫降，发动机故障空起以及执行任务过程中对瞬时大功率的需求，大部分的航空飞行器会装备除主发动机以外第二独立能源动力系统。目前，可选化学能源体系有锂电池、热电池、燃料电池、高压空气-煤油和单组元燃气等能源技术。锂电池具有功重比高，价格便宜和可多次重复使用的特点，但作为航空飞行器辅助能源动力存在快速大功率放电安全隐患大、-40℃低温环境下工作效率低等问题；热电池是一次性化学能源，工作时靠含能材料爆燃将熔盐电解质融化，小功率热电池已在部分装备中得到了应用，但对于功率超过10kW仍存在大功率瞬时安全放电的问题[1]；以氢和甲醇为燃料的燃料电池已在部分装备的持续供电中得到应用，但作为航空飞行器辅助能源存在响应时间无法满足要求的问题；高压空气-煤油的富油燃烧的能源发生技术，作为辅助能源已装备于美国的第五代F-35和F-22等飞机上[2]，但由于使用高压空气作为氧化剂，存在工作时间短（≯2min），系统复杂等问题；单组元燃气能源技术，是通过催化剂单组元燃料产生高温高压气体来推动涡轮做功，是一种不依赖于飞行高度的燃气类能源，已装备于F-16、U2以及我国部分飞机上，具有响应快，功率大和功重比高的特点，但目前仍主要以有毒肼-70为燃料，导致其应用场所受限，使用成本高，飞机机动能力差和威胁飞行员健康等问题。

在该研究中，我们发展了以含 N-N、N=O 化学键的含能离子液体为单组元燃料，开发了新一代绿色单组元燃气能源技术。基于元素守恒和吉普斯自由能最小，发展了多组份燃料设计理论，设计开发了多组份复杂体系的无毒 ADN 燃料；基于催化剂纳微孔道内流动-反应耦合理论，预测和优化了高活性高钌催化剂；基于颗粒固定床堆积形成非线性复杂受限空间内流动-传递-反应理论，优化设计了分解室。目前，在我国某型号飞机上完成了飞行验证，为我国新型航空飞行器提供能源。

关键词：应急动力（EPU）；单组元；催化分解；

Influence of drag model on CFD-DEM numerical simulation of coarse particle fluidized bed

Yaojie Xu [1], Jiawei Zhou [1,*], Xi Wei [1], Hongxiang Jiang [2]

[1]School of Mechanical Engineering, North China University of Water Resources and Electric Power, Zhengzhou 450045

[2] School of Mechanical and Electrical Engineering , China University of Mining & Technology, Xuzhou 221116

*xyj20010516@163.com

Abstract: Considering the Gidaspow, the Wen-Yu, the Syamlal-O'Brien, and the Huilin-Gidaspow drag model, herein, the Computational Fluid Dynamics-Discrete Element Method (CFD-DEM) coupled numerical simulation method is adopted to study the influence of different drag models on the numerical simulation results of gas-solid two-phase flow characteristics in a coarse particle fluidized bed. Bed expansion rate, local bed pressure drop, and particle bubbling characteristics at different inlet gas velocities are determined by numerical simulation and experiment. Results show that the three drag models can reproduce the particle fluidification process. The bed expansion rate simulated by the Gidaspow drag model is the closest to the experimental results. The Wen-Yu drag model has more advantages in the simulation of local pressure drop and fluctuation of the gas phase, and the intensity of gas-solid two-phase motion predicted by this model is the gentlest compared with the other three drag models. Therefore, the Gidaspow drag model is more suitable for simulating the motion state of particles, whereas the Wen-Yu drag model is better for simulating the gas phase parameter fluctuation.

Keywords: CFD-DEM; drag model; coarse particles; fluidized bed; flow properties

References

[1] Ahmadabadi E F, Haghshenasfard M, Esfahany M N. CFD simulation and experimental validation of nanoparticles fluidization in a conical spouted bed. Chemical Engineering Research and Design, 2020, 160: 476-485.

[2] Vejahati F, Mahinpey N, Ellis N, et al. CFD simulation of gas–solid bubbling fluidized bed: a new method for adjusting drag law. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 2009, 87(1): 19-30.

[3] Zhou Q, Wang J. CFD study of mixing and segregation in CFB risers: Extension of EMMS drag model to binary gas–solid flow. Chemical Engineering Science, 2015, 122: 637-651.

[4] Azizi S, Mowla D, Ahmadi G. Numerical evaluation of turbulence models for dense to dilute gas–solid flows in vertical conveyor. Particuology, 2012, 10(5): 553-561.

[5] Takabatake K, Mori Y, Khinast J G, et al. Numerical investigation of a coarse-grain discrete element method in solid mixing in a spouted bed. Chemical Engineering Journal, 2018, 346: 416-426.

[6] Feng Y Q, Yu A B. Assessment of model formulations in the discrete particle simulation of gas-solid flow. Industrial & engineering chemistry research, 2004, 43(26): 8378-8390.

[7] Rhodes M J, Wang X S, Nguyen M, et al. Use of discrete element method simulation in studying fluidization characteristics: influence of interparticle force. Chemical Engineering Science, 2001, 56(1): 69-76.

[8] Zhou H J, Xiong Y Q. Effect of drag models on simulation of dense-phase pneumatic conveying in horizontal pipe under high pressure. Journal of Southeast University: Natural Science Edition (in Chinese), 2020, 50(3): 496-506.

[9] Wang L, Jiang M, Zhou Q. Development of a filtered drag model considering effect of the solid shear rate. Particuology, 2022, 71: 63-74.

[10] Ishii H, Nakajima T, Horio M. The clustering annular flow model of circulating fluidized beds. Journal of Chemical Engineering of Japan, 1989, 22(5): 484-490.

[11] Wang X Y, Wu X Z, Jiang F, et al. Revised drag force model for the dense CFB riser and the experimental validation. Journal of Engineering Thermophysics (in Chinese), 2009, 30(2): 237-240.

[12] Wang, J W. Effect of granular temperature and solid concentration fluctuation on the gas-solid drag force: A CFD test. Chemical

Engineering Science, 2017, 168, 11-14.

[13] Yang N, Wang W, Ge W, et al. Simulation of heterogeneous structure in a circulating fluidized-bed riser by combining the two-fluid model with the EMMS approach. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2004, 43(18): 5548-5561.

[14] Chen C, Qi H Y. Development and validation of cluster and EMMS drag model. CIESC Journal (in Chinese), 2014,65(06):2003-2012.

[15] Wang, J., van der Hoef, M. A., Kuipers, J. A. M. Coarse grid simulation of bed expansion characteristics of industrial-scale gas–solid bubbling fluidized beds. Chemical Engineering Science, 2010, 65(6), 2125-2131.

[16] Zhou J W, Shangguan L J, Xu L G, et al. Mechanism and Characteristics of Light Medium Mixed Flow Pneumatic Conveying for Coarse Particle. Journal of Mechanical Engineering (in Chinese), 2022, 58(14):308-319.

[17] Li S, Zhao P, Xu J, et al. Direct comparison of CFD-DEM simulation and experimental measurement of Geldart A particles in a micro-fluidized bed. Chemical Engineering Science, 2021, 242: 116725.

[18] Zhou J, Shangguan L, Gao K, et al. Pickup characteristics of lump non-spherical particles in an oscillating airflow. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2020, 59(31): 14145-14156.

[19] Wen C Y, Yu Y H. Mechanics of Fluidization. Chemical Engineering Progress Symposium Series, 1966,62(6): 100-111.

[20] Ding J, Gidaspow D. A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. AIChE Journal, 2010, 36(4):523-538.

[21] Syamlal M, O'Brien T J. The derivation of a drag coefficient formula from velocity-voidage correlations. Technical Note, US Department of energy, Office of Fossil Energy, NETL, Morgantown, WV, 1987.

[22] Huilin, L., Gidaspow, D. Hydrodynamics of binary fluidization in a riser: CFD simulation using two granular temperatures. Chemical engineering science, (2003), 58(16), 3777-3792.

[23] Guenther C, Syamlal M. The effect of numerical diffusion on simulation of isolated bubbles in a gas–solid fluidized bed. Powder Technology, 2001, 116(2-3): 142-154.

[24] Nieuwland J J, Veenendaal M L, Kuipers J A M, et al. Bubble formation at a single orifice in gas-fluidised beds. Chemical Engineering Science, 1996, 51(17): 4087-4102.

化工制药多相系统的多尺度数字孪生及其应用

陈锡忠 [1]

[1] 上海交通大学，上海东川路 800 号，200240

*Email: chenxizh@sjtu.edu.cn

摘要正文：化工及制药过程在现代工业中发挥着至关重要的作用。这些过程通过复杂的物质能量传递和化学反应，生产出多样化的产品以满足市场的需求。然而，这些过程的多相多尺度复杂性为工业生产带来了诸多挑战，尤其在提高过程效率、保证稳定性和可靠性方面。数字孪生通过构建物理过程的数字化镜像，能够对多相化工和制药过程的行为进行模拟和预测，帮助研究人员和工程师优化操作条件，从而提升过程的稳定性和产品质量。结合实时数据和机理模型，数字孪生技术有助于深入理解及过程的优化控制。本报告将介绍报告人近期在固体药物制剂及多相化工过程的数字智能化模型开发和应用研究。

关键词：化工制药；多相系统；数字孪生

化学链制氢技术研究

孙立岩[1,*]，曹佳蕾[1]，章冉[1]，肖睿[1]

[1]东南大学，能源与环境学院，江苏 南京，211102

*Email: sunliyan@seu.edu.cn

摘要正文：氢能是一种清洁、高效的能源载体，当前主要通过煤化工、天然气重整等工艺来制备，过程中伴随着大量温室气体和污染物排放，需要经过分离和提纯等工艺得到高纯度氢气。化学链制氢是一种新兴的清洁高效制氢技术，通常系统包括燃料反应器、制氢反应器和空气反应器，利用金属氧化物作为氧载体，在不同反应器间实现质量和能量传递，目前使用最多的是铁基载氧体，通过将氧化-还原过程解耦，可以在不同反应器出口分别获得高纯氢气和二氧化碳，实现高效制备蓝氢或绿氢，越来越多的学者对化学链制氢技术开展深入研究工作，实验、理论计算、数值模拟都已经取得重要进展。近年来，机器学习技术快速发展，已成为化工过程优化和在线主动预测的强大工具，为化学链制氢的研究工作提供了新的研究思路，使得在化学链制氢的研究中应用基于数据驱动的方法成为可能。其中，基于物理信息约束神经网络(PINN）可以有效解决数据稀疏的情况，在原有模型的训练过程中加入部分先验知识，使其具有更强的可解释性并且减少对数据库的依赖。本文将介绍实验和机器学习辅助研究的研究进展，分别使用支持向量机、决策树、随机森林、人工神经网络和PINN进行模型训练，并使模型对不同工况的产氢量和操作条件的影响进行分析。本研究提供了一个快速预测制氢过程的方法，对氧载体的设计和化学链制氢工艺的优化具有指导意义。

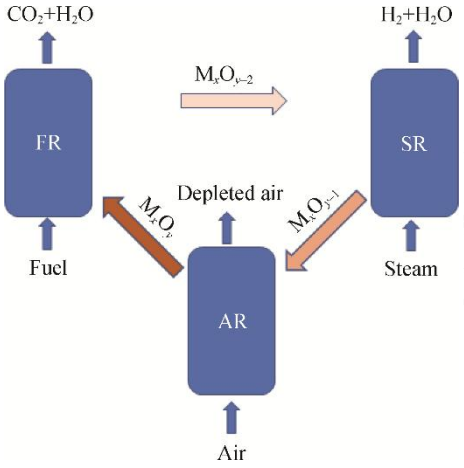


图1 化学链制氢示意图

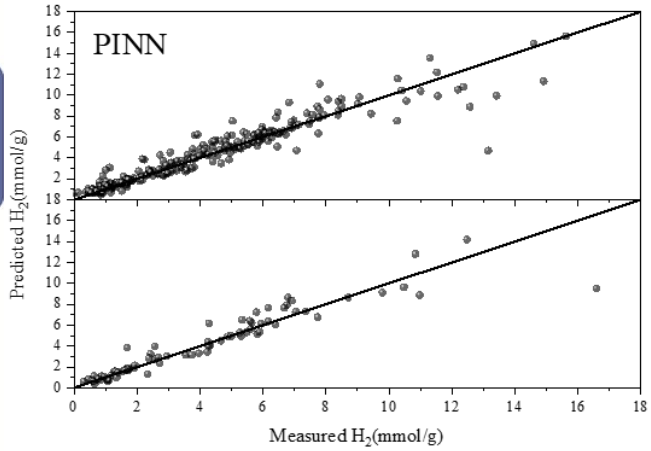


图2 使用机器学习预测产氢量结果

关键词：化学链技术；氢能；机器学习；载氧体

鼓泡流化床中 E-CAT 颗粒轴向动态分离

李程[1*]，骆彪生[1]，高希[2]

[1]机械工程系与广东省能量转换材料与技术重点实验室重点实验室，广东以色列理工学院，中国汕头，515063

[2]化学工程系与广东省能量转换材料与技术重点实验室重点实验室，广东以色列理工学院，中国汕头，515063 *Email: cheng.li@gtiit.edu.cn

摘要正文：本文总结了对在鼓泡流化床中非球形Geldart B和D类E-CAT颗粒混合物的时间分离/混合行为的全面原位测量。实验针对未筛分和已筛分的E-CAT颗粒进行，颗粒的粒径分布宽度不同，流化速度在1.3- 5U_{mf}范围内。通过高速压力和图像数据，对实验过程中的动态膨胀床高度和压降进行了时间分辨的定量分析。同时，开发了一种混合机器学习辅助的图像处理算法，用于量化不同轴向位置的瞬时颗粒粒径分布。结果表明，对于具有较宽粒径分布的未筛分颗粒，只有在较低的流化速度（1.3和1.6U_{mf}）下存在分离现象。相比之下，粒径分布较窄的颗粒在测试的整个气速范围内表现出良好的混合行为。研究发现，分离强度和空间范围与颗粒粒径分布宽度和流化速度分别相关。此外，通过分析压力、膨胀床高度、颗粒粒径和运动、气泡特性，我们提供了对分离过程的全面多尺度动态视图**[1]**。这一对过程的深入理解，以及所获得的时间分辨数据集，对于固-气多相流动中的数值模型基准测试和流化床设计优化具有重要意义。

关键词：鼓泡流化床；动态分离

参考文献

[1] Luo, B., Lu, B., Gao, X., & Li, C. (2024). Dynamic in situ measurement of axial segregation of E-CAT particles in a bubbling fluidized bed. Chemical Engineering Journal, 485, 149861.

基于解析非解析耦合算法的离散-连续多尺度多相算法

李林敏[1]，王尊江[1]，魏国来[1]

[1]全省复杂流动与流体工程装备重点实验室，浙江理工大学，杭州，110819

*Email: lilinmin1225@163.com

摘要正文：气-液-固三相系统中复杂的相间相互作用和多尺度相分布特征是目前多相流模型的难题所在。为研究气-液-固流化床中的流动特性，采用优化的流体体积法（VOF）和离散元方法（DEM）耦合求解器，并在OpenFOAM中整合了几种新的曳力模型。气液相连续界面通过带有锐化算法的VOF方法捕捉，离散固体颗粒则采用DEM方法追踪。颗粒体积分数通过分割体积方法计算，并对曳力模型在气液两相体系中的适用性进行验证。首先将该求解器应用于颗粒群入水过程的计算，以验证VOF-DEM方法的体积守恒性。为分析液体和气体中流体-颗粒相互作用的准确性，分别将该求解器用于液-固和气-固耦合过程的模拟。结果显示：在所研究的曳力模型中，van der Hoef曳力模型对于液-固和气-固相互作用均可适用。基于van der Hoef曳力模型，开展了不同气相速度下一小型气-液-固三相流化床中的流动特性分析，获得了不同流型特征。

关键词：离散单元模型；流体体积法；气液固三相；流化床；曳力模型

喷动流化床放大及应用研究

岳远贺[1,2]，赵微微[1,2]，饶中浩[1,2*]

1 河北工业大学能源与环境工程学院，中国天津，300401

2 河北工业大学热科学与能源清洁利用重点实验室，中国天津，300401

*Email: 2021101@hebut.edu.cn

摘要正文：喷动-气相沉积技术在相变胶囊封装的产业化方面有巨大的潜力。然而，为获得垂直稳定喷动流态，实验发现锥形喷动床的直径不得超过 300 倍所处理颗粒直径，该现象极大限制了喷动气相沉积技术在封装领域的推广应用。为解决喷动床的放大问题，本研究摒弃了传统的垂直喷动方式，探究采用矩形喷动流化床内偏转流态作为工作流态的可行性。研究表明，多喷口联合喷动可以实现喷动床的放大，且该新型流态具有很高的气固混合效率。

关键词：喷动流化床，放大，CFD-DEM, 封装，颗粒

气固流化床介尺度反应速率建模进展

周强[1]

[1]西安交通大学化工学院，西安，710049

*Email: zhou.590@xjtu.edu.cn

摘要正文：在气固两相反应流中，气相摩尔数随化学反应变化的非等摩尔反应通常会影响系统内的气固流动与反应行为，形成与等摩尔系统存在明显差异的非均匀结构。这种影响使介尺度反应速率的本构关系发生了根本的改变，对粗网格下的介尺度反应速率预测提出了新的挑战。而广泛应用于工业尺度数值模拟的粗网格方法，其准确性在很大程度上取决于其使用的各类介尺度模型。由于现有的介尺度反应速率模型并未考虑非等摩尔反应的影响，针对这一问题，本文通过对等温、固体催化且生成物摩尔数为反应物不同倍数的反应器系统在不同反应速率下进行高分辨率的细网格模拟，构建建模数据库。利用 Morris 分析、滤波技术、条件平均与相关性分析相结合的方法对数据进行处理。讨论了使用新变量（如周边固含率、气相密度梯度、速度散度、滑移雷诺数等）作为指标量修正介尺度反应速率模型的可能性。结果表明，滑移雷诺数是构建考虑非等摩尔反应影响的修正介尺度反应速率模型的关键指标量。利用上述研究成果，构建新的介尺度反应速率模型，以微观反应速率模型与修正前的介尺度反应速率模型作为对照组，对新模型的先验与后验效果进行评价。验证结果显示，新模型提升了流化床内固含率与反应速率分布的预测能力，对先前模型预测性的提升较为明显。

关键词：流态化；介尺度结构；反应速率

颗粒物矩方法在反应流碳烟预测中的应用与高维拓展

周德智[1,*]，阎瞳瞳[1]

[1] 上海交通大学密西根学院，上海市闵行区东川路 800 号，200240

*Email: dezhi.zhou@sjtu.edu.cn

摘要正文：反应流中的颗粒物生成与演化的研究在排放控制和功能材料合成等应用中具有重要意义。为了准确预测颗粒物的时空粒径分布，需要耦合粒数平衡方程与反应流控制方程进行联合求解。然而，粒数平衡方程的高维特性使得精确求解需依赖蒙特卡洛随机算法，这在基于空间差分的反应流求解中将导致难以承受的计算成本。矩方法通过对粒数平衡方程求和，可以通过求解前几阶矩的控制方程获得颗粒物在时空中的总体信息（如体积和数量），但也带来了矩控制方程中颗粒物源项的封闭问题。本文介绍了混合矩与矩投影方法在封闭矩源项中的应用，并将其推广到真实的层流碳烟火焰[1]、湍流碳烟火焰[2]和发动机碳烟预测[3]等实际应用中。同时，本文总结了当前颗粒物矩方法的不足，并探讨了其向高维多变量矩方法的扩展方法[4]。具体来说，本文利用混合矩方法与反应流方程的联合求解，预测了高压下层流扩散火焰中碳烟的生成与演化机制，并详细讨论了控制碳烟颗粒生成与演化的化学路径。针对高压湍流碳烟射流火焰，本文进行了混合矩求解，详细考虑了湍流-化学-矩的亚格子相互作用，精确预测了碳烟的体积分数，并解析了高压射流火焰中的碳烟生成演化机制。最后，本文将矩投影方法从二维变量扩展到三维变量，并通过与直接求解法的对比验证了其准确性，研究表明三维变量的矩投影方法能够精确预测颗粒物的总体分布，为未来追踪颗粒的多变量变化奠定了基础。

关键词：颗粒物矩方法；粒数平衡方程；碳烟生成演化；多变量矩方法

参考文献

[1] D Zhou, S Yang. Soot-based Global Pathway Analysis: Soot formation and evolution at elevated pressures in co-flow diffusion flames. Combustion and Flame 2021, **227**, 255-270.

[2] D Zhou, S Zou, WR Boyette, TF Guiberti, WL Roberts, S Yang. Pressure effects on soot formation and evolution in turbulent jet flames. Physics of Fluids 2023, **35 (1)**, 015105.

[3] S Wu, D Zhou, W Yang. Implementation of an efficient method of moments for treatment of soot formation and oxidation processes in three-dimensional engine simulations. Applied Energy 2019, **254**, 113661.

[4] T Yang, S Wu, D Zhou. A tri-variate moment projection method for multi-dimensional particle population balance dynamics. Journal of Aerosol Science 2024, 179, 106378.

深度学习辅助电场驱动流体流型识别

颜伟城[1]

[1]江苏大学，江苏省镇江市京口区学府路 301 号，212013

*Email: yanwc@ujs.edu.cn

摘要正文：外场（如电场、磁场或超声波）可有效地强化和调控多相系统。通过施加这些外场，可增强混合、传质和反应速率，实现高品质微纳颗粒生产，同时解决传统微流控装置生产固相颗粒时易堵塞问题。然而，在外场作用下，流动模式变得更加复杂，使得实验测量和识别变得困难，不利于掌握过程背后的基本规律。在本次报告中，将首先介绍近年来我们开发的外场强化颗粒制备技术及相应理论模型。随后，以电流体动力学（EHD）雾化作为电场强化的关键案例，介绍机器学习辅助的复杂流动模式识别方法。机器学习模型对 EHD 雾化模式识别的准确率最高达 99.867%。进一步的，我们通过实验获取了 30,000 张图像来训练卷积神经网络（CNN）模型以识别更为复杂的 EHD 喷雾模式，准确率可达 99.80%。最后，我们构建了一个包含 11,650 个实验数据点的数据库，用于训练深度神经网络（DNN）模型。机器学习模型为机理模型提供了重要的补充，极大的提高了模型预测效率，为理解电场强化微纳颗粒制备过程背后基本规律提供了有效手段。

含气膜冷却的涡轮叶片颗粒沉积及形貌变化规律研究

孙文静[1,*]，余江涵[1]，郑玉秋[1]，张靖周[1]

[1]南京航空航天大学，江苏省南京市秦淮区御道街 29 号，210016

*Email:wjsun@nuaa.edu.cn

摘要正文：大气污染物颗粒不可避免地随空气进入航空发动机，沉积在涡轮叶片表面、磨蚀叶片表面及气膜冷却通道、堵塞气膜孔等，从而影响涡轮叶片的稳定工作与寿命，甚至威胁发动机的安全工作。本文着力于探究随外涵冷却空气入侵涡轮静叶叶栅气膜孔冷却通道的颗粒运动与沉积特性，基于Realizable k-ε湍流模型与DPM颗粒离散相模型，耦合EI-Batsh颗粒沉积模型，通过数值模拟获得了颗粒粒径和冷却气流进气方式对叶片集气腔及气膜孔内的颗粒运动与沉积特性的影响规律。研究表明：小粒径颗粒随流性好，跟随冷却气流沿气膜孔前缘运动，大粒径颗粒的随流性较差，不断碰撞壁面后流出气膜孔。随着粒径增大，颗粒的沉积率明显降低，当粒径大于0.8μm，气膜孔内几乎无沉积。集气腔双向进气条件下，单排气膜孔中颗粒呈现两端气膜孔沉积较多、中间气膜孔内沉积较少的现象；单向进气条件下，在远离冷却流入口的气膜孔内颗粒沉积率最大，在靠近冷却流入口的气膜孔内几乎不沉积。

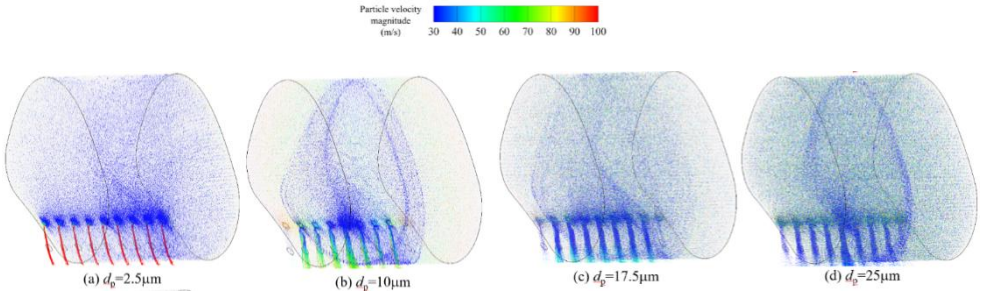


Fig. 1 Particle distribution characteristics in gas collection chamber for different particle sizes

关键词：气固两相流；涡轮叶片；颗粒沉积；数值模拟研究

参考文献

[1] El-Batsh H. MODELING PARTICLE DEPOSITION ON COMPRESSOR AND TURBINE BLADE SURFACES[J]. Israel medical association journal, 2005.

[2] 赵传鹏,刘松,谭晓茗等.气膜冷却射流对叶片微细颗粒沉积影响[J].航空动力学报,2022,37(03):545-554.

[3] 杨晓军,祝佳雄.涡轮叶栅通道内颗粒物沉积过程的数值模拟[J].航空学报,2017,38(05):36-47.

[4] 石旭东,齐凯,曾祥瑞等.航空发动机压气机叶片表面颗粒沉积数值研究[J].机械设计,2022,39(02):90-94.

[5] Bonilla C, Clum C, Lawrence M,et al.The effect of film cooling on nozzle guide vane deposition[R].ASMEGT2013-95081,2013.

[6] Cardwell N D, Thole K A, Burd S W. Investigation of Sand Blocking Within Impingement and Film-Cooling Holes[J]. Journal of Turbomachinery, 2010,132(2): 021020.1-021020.10.

[7] Bunker R S. Effect of Partial Coating Blockage on Film Cooling Effectiveness[C]//Asme Turbo Expo: Power for Land, Sea, & Air.2000.

[8] Na S , Cunha F , Chyu M ,et al.Effects of Coating Blockage and Deposit on Film Cooling Effectiveness and Heat Transfer[C]//44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit.2006.

[9] 黄珂楠，张靖周，郭文.气膜孔内局部堵塞对气膜冷却特性的影响[J].航空动力学报，2014,29(6):1330-1338.

[10] 周君辉.进气流道粒子磨蚀和涡轮叶片粒子沉积特性及其影响[D].南京航空航天大学,2019.

[11] Saeed M, Yu J Y, Abdalla A A A, et al. An assessment of k-ε turbulence models for gas distribution analysis[J]. Nuclear Science & Techniques, 2017, 28(10): 146.

[12] 曾平君,孙姝,黄河峡,等.直升机/粒子分离器一体化流场特性:第一部分前进比的影响[J].航空动力学报,2014,29(04):858-866.

基于混合分组矩量投影法的碳烟颗粒动力学模拟

吴少华[1,*]，Yang Wenming[2]，Gehan Amaratunga[3]

[1]大连理工大学，能源与动力学院，大连，辽宁，中国，116024

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

[3]University 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。本次报告将介绍一种新型的颗粒群平衡方程数值求解算法：混合分组矩量投影法[4,5]。该算法结合了分组法和矩方法的技术，通过在颗粒内部变量空间划分有限个分组，将原始的颗粒群平衡方程转化为针对每个分组的矩方程，并在每个分组内引入权重粒子拟合原始的颗粒群分布情况，同时在每个分组的下边界固定部分权重粒子实现对颗粒跨分组转化的直接追踪。该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，并实现了对详细颗粒尺寸分布函数的直接求解。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。

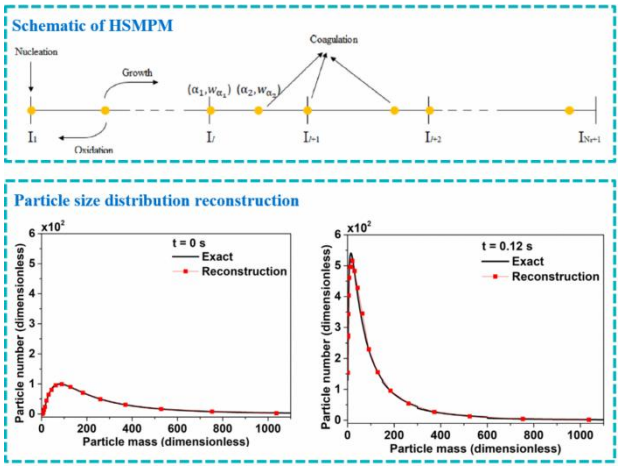


Fig. 1: Schematic of HSMPM algorithm and its ability for reconstructing original particle size distribution

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.**

MATLAB代码辅助持液气固流化床反应器内介尺度颗粒聚团的定量分析

栾钧元[1]，周业丰[1,*]

[1]湘潭大学化工学院，湖南省湘潭市雨湖区西郊羊牯塘, 411105

*Email: zhouyf@xtu.edu.cn

摘要正文：气固流化床作为一种实现气固两相流动的重要装置，具有突出的传热传质性能、操作范围广且能够连续处理颗粒相，在石化、冶金、制药、能源等多个领域都已得到了广泛应用[1,2]。为了进一步满足不同生产工艺的需求，需要在流化床中加入液相进而形成持液气固流化床，这类反应器主要在烯烃聚合、催化裂化、喷雾造粒等过程中应用。持液颗粒间的液桥力使颗粒具有一定的粘性，碰撞后发生粘结出现介观尺度的颗粒团聚体，显著改变床内流化情况。颗粒聚团的增长和破碎行为对流化床中流体动力学、热质传递以及反应等特性有重要影响[3]，因此实现介观聚团的有效表征与解析是非常有必要的。目前绝大多数介观颗粒聚团研究都停留在定性和半定量分析层面上[4,5]，往往只能对现象进行表观层次描述或解释，而定量分析方法更具精确性、客观性和可比较性，可以获得持液颗粒流化系统更全面的多尺度信息。因此，本工作借助MATLAB编译DBSCAN代码对团聚体进行了定量分析。使用代码对模拟数据进行二次分析，准确有效地识别和定义团聚体，获得颗粒团聚体的大小，数目和位置等量化信息，进而获得其动态演化规律。在此基础上，还研究了操作参数和液相性质参数对持液气固流化床内颗粒聚团行为及特性的影响规律。本方法具有高度的可拓展性，通过调整DBSCAN代码的参数，可适用于其他包含介尺度聚团的复杂多相流系统，为多相流反应器的优化设计提供重要依据。

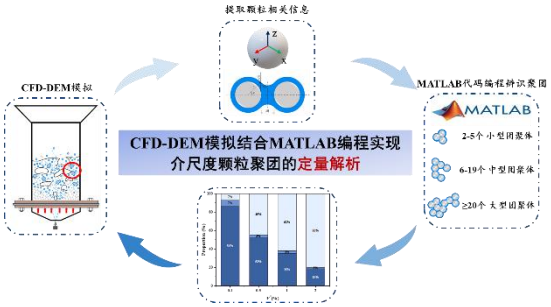


Fig. 1 Research ideas for quantitative analysis of mesoscale agglomerates

关键词：持液气固流化床反应器；介尺度聚团；定量分析；DBSCAN

参考文献

[1] **Ruoppolo, G.; Miccio, F.; Miccio, M.; Brachi, P.; Chirone, R. Sewage Sludge Ashes as a Primary Catalyst for the Abatement of Tar in Biomass Gasification: Bubbling versus Spouted-fluidized Bed Configuration. Can. J. Chem. Eng. 2021, 99 (8), 1706–1714.**

[2] **Xu, M.; Wu, Y.; Wu, H.; Ouyang, H.; Zheng, S.; Lu, Q. Experimental Study on Oxy-Fuel Combustion and NO Emission in a Spouted-Fluidized Bed with under Bed Feeding. J. Therm. Sci. 2021, 30 (4), 1132–1140.**

[3] **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 (11), 4058–4067.**

[4] **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 Journal, 2017, 63(7): 2520-2527.**

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

求解颗粒内传递的鼓泡床生物质热解 CFD-DEM 模拟

熊勤钢[1,*]，任冠龙[1]，王櫆[1]

[1]华南理工大学轻工科学与工程学院，广东·广州，510641

*Email: qingangxiong@scut.edu.cn

摘要正文：详细评估多尺度下的热物理化学特性对于发展先进的鼓泡床生物质热解技术具有重要意义[1]。由于鼓泡床内复杂的多相多尺度反应-传递过程以及高精度实验的局限性，当前对颗粒尺度下生物质热解过程的理解还不全面，而计算流体力学(CFD)是研究鼓泡床中生物质热解从颗粒到反应器尺度传递-反应行为的有效手段之一[2]。本报告将汇报直接求解颗粒内传递的从颗粒到反应器尺度的鼓泡床生物质热解 CFD-DEM 模拟。首先，开发了 CFD-DEM 框架下的颗粒尺度高精度模型，包括颗粒收缩、颗粒内反应与传热、气体扩散以及颗粒-流体-壁面间的热传递现象。随后，与相关研究结果进行对比，指出当前混合模型的不足之处，通过不断修正颗粒-流体-壁面之间的热物理化学信息交互，进一步提高模型的计算精度。最后，通过模拟鼓泡床内多生物质颗粒的热解过程，分析了产物产率、轴向和径向固含率、温度等的时空信息，捕获了颗粒的空间演化过程，同时探索了不同操作条件下的鼓泡床反应器特性，为鼓泡床生物质热解工艺的设计和操作优化提供了理论支撑。

关键词：生物质热解; 颗粒尺度; 反应动力学; 鼓泡床; CFD-DEM

参考文献

[1] X. Ku, F. Shen, H. Jin, J. Lin, and H. Li, Simulation of Biomass Pyrolysis in a Fluidized Bed Reactor Using Thermally Thick Treatment. Ind. Eng. Chem. Res. 2019, 58 (4), 1720-1731.

[2] H. Luo, X. Wang, X. Liu, X. Wu, X. Shi, and Q. Xiong, A Review on CFD Simulation of Biomass Pyrolysis in Fluidized Bed Reactors with Emphasis on Particle-scale Models. J. Anal. Appl. Pyrol. 2022, 162, 105433.

水平转筒反应器中的颗粒流模式及形成机制研究

杨晖[1,2]*，迟志鹏[1,2]，陈泉[2]，李然[2]

[1]上海健康医学院，医疗器械学院，200237

[2]上海理工大学，光电信息与计算机工程学院，200093

摘要正文：在化工、能源等领域，传热、传质及反应效率取决于原料的混合程度，当颗粒属性，如尺寸、密度等不同时，颗粒物质极易发生偏析行为致使颗粒物质局部属性趋于收敛从而呈现各向异性，这导致原料产能效率低下、过程控制困难等问题，因此，清晰颗粒物质的偏析机制机理是现阶段面临的关键问题。为了建立起偏析机制与颗粒流状态的系统性联系，本文归纳了以二维转盘系统为代表的自由表面颗粒流多分散偏析指标及模型，介绍了由单一因素，如尺寸、密度分别主导的渗流、浮力机制的发展历程；梳理了多因素共同作用下的竞争机制及各主导机制的有效作用域；提出“扭结-困结”模型解释了自由表面几何形态对偏析行为的影响。在对钟摆态下的多分散颗粒偏析行为进行初步探索中，发现液相的存在极大程度改变了现有偏析机制的理论框架，目前亟需新的理论框架涵盖液相对颗粒体系的力学影响。

参考文献：

[1] Kahlil F. E. Cui, Gordon G. D. Particle segregation and diffusion in fluid-saturated granular shear flows, Physical Review Fluids. 7 (2022) 014305.

[2] Shao Y F, Li A H, Wang Z Z, et al. Resonance-induced acceleration of the RBNE-BNE segregation inversion[J]. AIChE Journal, 2023, 69(8): 1-12.

[3] 周公旦, 孙其诚, 崔鹏. 泥石流颗粒物质分选机理和效应[J]. 四川大学学报(工程科学版), 2013, 45(1): 28-36.

[4] 杨晖, 张国华, 王宇杰 等. 密集颗粒体系的颗粒运动及结构测量技术[J]. 力学进展, 2018,48(1):542-588.

[5] Cui K F, Zhou G G D, Jing L. Mechanisms of size segregation in granular flows with different ambient fluids[J]. The European Physical Journal Conferences, 2021, 249: 14015.

[6] Xiu W Z, Li R, Chen Q, et al. Binary-size granules segregation from core pattern to streak pattern in a rotating drum[J]. Powder Technology, 2021,380(1): 518-525.

[7] E. Xiao, W. Zhang, Z. Chi, R. Li, Hui Yang, Particle segregation mechanism of Size-Density system in a rotating drum [J], Particuology, 2024.

柔性圆柱形颗粒流摩擦特性的颗粒尺度数值仿真研究及连续本构模型优化

张浩 [1]

[1] 东北大学，冶金学院，颗粒技术研究所，沈阳，110819

*Email: zhangh@mail.neu.edu.cn

摘要正文：目前描述复杂颗粒流动的颗粒动力学理论（Kinetic Theories for Granular Flow, KTGF）在精确建模和过程调控方面无法满足其日益增长的应用要求，大都无法考虑颗粒形状，变形等因素带来的影响，至今未形成完整的理论体系。鉴于此，采用离散元方法对柔性异形颗粒流的摩擦特性进行数值仿真研究（如Fig. 1所示），旨在改进本构关系模型，从而提高 KTGF 处理柔性异形颗粒的能力，为柔性异形颗粒流的深入研究提供强有力的工具。

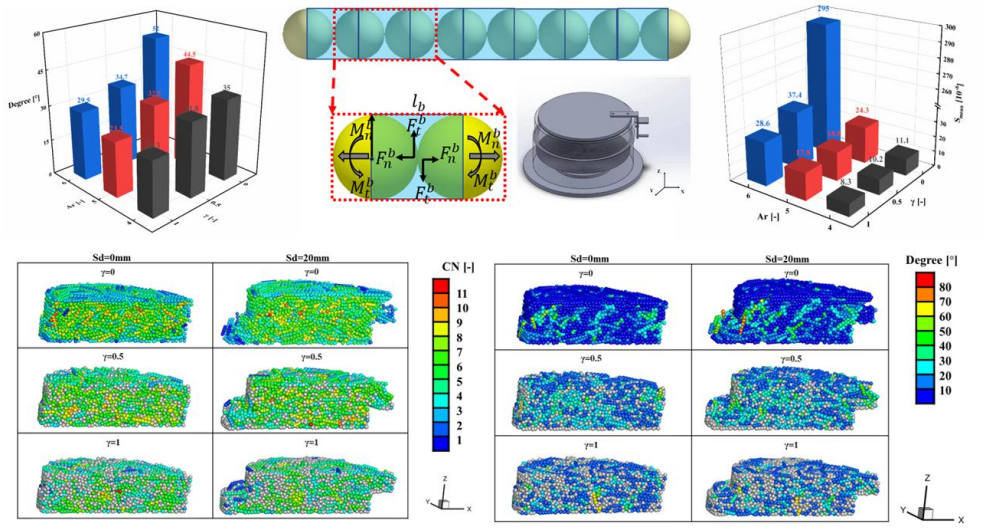


Fig. 1 Jenike shear process of flexible cylindrical particles

关键词：柔性颗粒；圆柱形颗粒；摩擦特性；模拟仿真；本构模型

真实燃料复杂体系反应网络的揭示

郑默[1,*]，李晓霞[1,*]

[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，北京市海淀区中关村北二条 1 号，100190

*Email: mzheng@ipe.ac.cn

摘要正文：燃料包括液体燃料（汽油、航油、柴油、高密度特种燃料油、生物油）和固体燃料（废旧塑料、生物质、煤），其热解和氧化是复杂的多相反应过程，研究其微观反应机理对认识多相反应流动、控制燃烧等热化学转化过程、提高燃料利用率而言至关重要。真实燃料组分通常复杂且结构多样，构建真实燃料热解和氧化的详细反应动力学机理是一项长期任务，而将燃料热解和氧化微观反应机理及动力学认识耦合到宏观反应器的数值模拟是燃烧相关领域长期奋斗的目标。限于实验技术难以直接检测到“短寿命”中间体和量子力学计算的成本极高，目前对 C4 以下燃料核心机理认识相对成熟，直接研究真实混合燃料或固体燃料复杂结构反应行为仍十分困难。ReaxFF MD 方法的兴起为直接考察真实复杂燃料体系的热解行为提供了可能性，可获得燃料反应过程中物种的演化趋势和物种参与的相对完整的详细反应，但同时获得的反应体系涉及到大量的中间体和多通道的反应，反应网络极为复杂。相应详细机理的复杂性决定了大规模模拟体系的反应分析是非人力所能及的，并且因缺乏动力学参数，无法直接用于燃烧反应器的数值模拟。

面向真实燃料热解和氧化体系，本工作提出并建立了基于反应自动分类的反应网络简化方法SRG-Reax（Skeleton Reaction network Generation for ReaxFF MD）[1]。利用 ReaxFF MD 模拟得到的反应物种的浓度和详细反应随时间的变化隐含的反应动力学信息[2]，特别是完整反应（反应位点）信息，采用机器学习中的tri-training 半监督分类方法结合主动学习的方法，构建了燃料热解和氧化反应自动分类模型，基于反应中心特征进行反应自动分类，通过合并同类型反应路径提取重要反应路径和物种，将大规模真实多组分复杂碳氢燃料体系的详细机理简化为可控的小规模骨干反应网络。该方法已成功应用于 RP-3 燃料经典的 3 组分和 4 组分替代燃料模型热解体系中正构烷烃、环烷烃和芳香烃骨干反应网络的自动构建；轮船柴油氧化过程>100,000个氧化反应的自动分类；废旧塑料主要组成聚丙烯裂解芳构化的关键反应类型自动识别等，为从 ReaxFF MD 模拟中构建和理解大规模复杂反应体系的全局反应机理提供了一种新的途径。

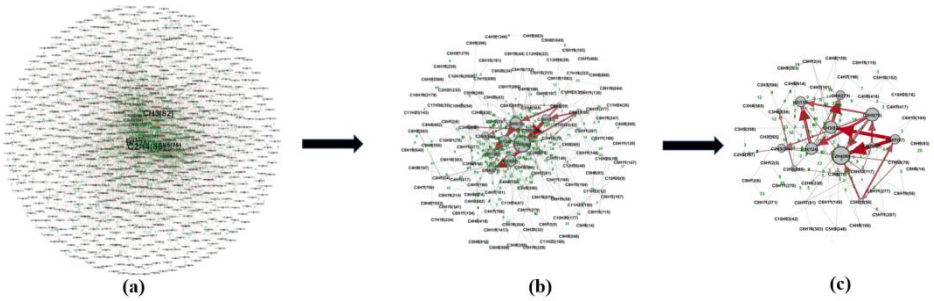


Fig.1 Detailed reaction class tagged network (RxCN) for the ReaxFF MD simulated pyrolysis reactions of the 45-component RP-3 model obtained on the basis of predicted reaction classes by the tri-training classifier: (a) Detailed RxCN of all reaction pathways; (b,c) Simplified RxCN obtained by selecting the top 15% pathways and top 5% of reaction pathways

关键词：机器学习；真实燃料的热解和氧化；化学反应分子动力学模拟；反应自动分类；骨干反应网络

参考文献

[1] Yang S, Li X, Zheng M, Ren C, Guo L. Generating a skeleton reaction network for reactions of large-scale ReaxFF MD pyrolysis simulations based on a machine learning predicted reaction class[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2024, 26(6): 5649-5668

基于相场模型的颗粒溶解/沉淀的扩散界面格子 Boltzmann 方法

杨晓峰[1]，柴振华[2,*]

[1]华中科技大学数学与统计学院，湖北省武汉市洪山区珞喻路 1037 号，430074

[2]华中科技大学数学与统计学院，湖北省武汉市洪山区珞喻路 1037 号，430074

*Email: hustczh@hust.edu.cn

摘要正文：本文发展了一种用于模拟颗粒的沉淀以及溶解的扩散界面格子Boltzmann方法。在该方法中，一个光滑的相场变量用于刻画流固界面，并通过Allen-Cahn方程的演化来体现沉淀或溶解过程[1]。根据扩散域思想，浓度方程和描述流体流动的Navier-Stokes方程被扩展到包含固相的整个区域，避免了直接处理复杂边界条件[2]。通过Chapman-Enskog展开，该方法可以正确恢复至相应的控制方程。为了验证所提出的扩散界面格子Boltzmann方法，模拟了一些基准算例，数值结果与解析解或已有结果吻合较好。最后利用该方法研究了更复杂的沉淀/溶解问题。

关键词：颗粒沉淀/溶解；格子Boltzmann方法；Allen-Cahn方程

参考文献

[1] **C. Bringedal, L. V. Wolff, and I. S. Pop Phase Field Modeling of Precipitation and Dissolution Processes in Porous Media: Upscaling and Numerical Experiments. *Multiscale Model Sim* 2020, 18: 1076-1112.**

[2] **J. Liu, C. S. Huang, Z. H. Chai and B. C. Shi A diffuse-interface lattice Boltzmann method for fluid–particle interaction problems. *Comput Fluids* 2022, 233:105240.**

微米级疏水颗粒撞击液滴表面的动力学行为研究

毕莉莉[1]，王飞[1,*]

[1]山西大学，太原，030006

*Email: Wangfei1859@sxu.edu.cn

摘要正文：颗粒对液滴表面的冲击在自然界和工业过程中普遍存在，国内外学者通过数值模拟和实验验证的方法探讨了不同撞击模型和不同粒径的颗粒撞击液面，但是由于观察方法有限，但大多数研究都集中在毫米级颗粒和垂直撞击上。本文通过高速摄像技术，观察到了微米级疏水颗粒垂直、水平和倾斜撞击液滴表面的过程，发现三种不同撞击角度下主要呈现出淹没、绕流和黏附三种行为。本研究探讨了颗粒的运动以及三相接触线与撞击角度α与临界韦伯数（We）之间的联系。实验结果表明，这三种撞击模式之间的临界韦伯数随着撞击角度的减小而增大。颗粒在撞击液滴表面的过程中，表面张力是主导的作用力。对于500μm颗粒，沉没和反弹的临界速度为0.12m/s，在淹没的过程中，表面张力为主导力。初始撞击速度越大，颗粒在撞击过程中受到的作用力越强，速度、位移和三相接触角的变化速度越快，颗粒越容易淹没到液滴之中。

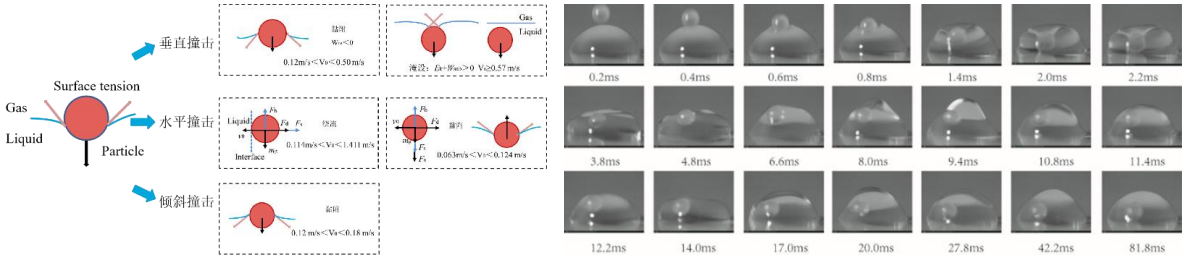


Fig.1 Classification of the motion modes of particles hitting droplets

关键词：液滴表面；表面张力；三相接触线；临界韦伯数

参考文献

[1] Jing Wang, Zhiguang Guo, Feiyan Fu, Locomotion behavior of air bubbles on solid surfaces, Advances in Colloid and Interface Science, Volume 332, 2024,103266.

[2] Ji, Zhu SJ, Liu RZ, Wang T, Niu YJ, Lu HF, Chen XL. Impact Behavior of Hydrophilic Micron Particles on a Planar Gas-Liquid Interface. Langmuir. 2019 Nov 26;35(47):15017-15028.

[3] Particle oscillation at corrugated membrane-water interface: An in-situ direct observation and implication to membrane fouling control, Separation and Purification Technology, Volume 307, 2023,122835.

基于欧拉-拉格朗日方法和浸没边界方法的WP11燃烧室两相反应流模拟

王煜栋[1]，王方[1,*]，金捷

[1]北京航空航天大学 能源与动力工程学院，北京，100191

*Email: fwang@buaa.edu.cn

摘要正文：WP11所采用的折流燃烧室结构复杂，针对该燃烧室的两相燃烧数值模拟需要高效的两相流模拟方法以及网格与边界条件处理方法。基于自研软件AECSC-IBM，采用欧拉-拉格朗日两相流模拟方法结合基于局部流形重构的浸没边界方法，并基于大涡模拟和概率密度函数输运方程湍流燃烧模型求解亚网格化学反应，实现WP11折流燃烧室的高保真模拟。两相燃烧模拟中针对拉格朗日框架下的液滴运动和欧拉框架下的湍流燃烧采用不同网格标记，模拟得到的出口径向温度分布规律与实验一致，平均相对误差为17.95%，表明欧拉-拉格朗日两相流模拟方法结合浸没边界方法能准确模拟折流燃烧室中的两相湍流燃烧现象。

关键词：浸没边界方法；大涡模拟；多相流；折流燃烧室；AECSC-IBM软件

参考文献

[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.**

[2] 薛明华,苏明旭,蔡小舒,超声多信号融合表征颗粒两相流实验研究[J].上海理工大学报，2009,31（1）:35-44.

[1] 宋双文，蒋荣伟，陈剑，等. 离心甩油折流环形燃烧室的性能试验[J]. 航空动力学报，2007，22(9)：1401-1404.

[2] 刘邓欢，金捷，王方，等. 涡轮喷气式发动机整机环境下折流燃烧室性能实验[J]. 航空动力学报，2015，30(10)：2410-2415.

[3] 王方，王煜栋，姜胜利，等. AECSC-JASMIN湍流燃烧仿真软件研发和检验[J]. 航空学报，2021，42(12)：128-140.

[4] 周玉珍，邵文清，王菊金，等. 涡扇发动机燃烧室三维冷态流场的计算[J]. 推进技术，2001，06：480-482.

[5] 余宗明，黄勇，王方. 方腔折流燃烧室冷态流场研究[J]. 推进技术，2010，05：533-538.

[6] 颜应文，宋双文，胡好生，等. 折流燃烧室两相喷雾流场的数值模拟[J]. 航空动力学报，2011，26(05)：1003-1010.

[7] 解晓东，李本威，伍恒，等. 折流燃烧室燃烧特性研究[J]. 兵器装备工程学报，2018，(2)：74-79.

[8] **SIVARAMAKRISHNA G, KUMAR S K. CFD analysis of gas turbine slinger combustor[C]. ACFD Symposium, India, 2012.**

[9] **RANA R, PRAJWAL A, SIVARAMAKRISHNA G, et al. Conjugate heat transfer analysis of a small annular combustor with centrifugal fuel injection system[C]. Gas Turbine India Conference, American Society of Mechanical Engineers, 2019, 83532: V002T04A003.**

[10] 阎超，于剑，徐晶磊，等. CFD模拟方法的发展成就与展望[J]. 力学进展，2011，41(05)：562-589.

[11] **PESKIN C S. Flow patterns around heart values: a numerical method[J]. Journal of Computational Physics, 1972, 10(2): 252-271.**

[12] 张漫，王铮钧，王晶，等. 航空发动机内流全场流动的大涡模拟[J]. 航空动力，2021，19(02)：57-60.

[13] 金捷，刘邓欢. 航空发动机燃烧室湍流两相燃烧模型发展现状[J]. 南京航空航天大学学报，2016，03：303-309.

[14] **JONES W P, PRASAD V N. Large Eddy Simulation of the Sandia Flame Series (D–F) using the Eulerian stochastic field method[J]. Combustion and Flame, 2010, 157(9): 1621-1636.**

[15] **JONES W P, MARQUIS A J, WANG F. Large eddy simulation of a premixed propane turbulent bluff body flame using the Eulerian stochastic field method[J]. Fuel, 2015, 140: 514-525.**

[16] **WANG F, LIU R, DOU L, et al. A dual timescale model for micromixing and its application in LES/TPDF simulations of turbulent nonpremixed flames[J]. Chinese Journal of Aerinautics, 2019, 32(4): 52-64.**

基于LES-TPDF的旋流燃烧室贫油熄火过程研究

雷金龙[1]，王方[1,2,3]，王煜栋[1]，林宏军[4]，金捷[1,2,3,*]

[1]北京航空航天大学能源与动力工程学院，北京，100191

[2]北京航空航天大学江西研究院，南昌，330096

[3]北航成都航空动力创新研究院，成都，611930

[4]中国航发沈阳发动机研究所，沈阳 110015

*Email: jinjie@buaa.edu.cn

摘要正文：贫油熄火边界是燃烧室的重要性能指标之一，对贫油熄火的过程进行研究有着重要的工程意义[1]。基于自研软件AECSC-IBM程序[2-8]，采用大涡模拟-概率密度函数输运方程湍流燃烧模型(LES-TPDF),结合Kundu提出的16组分23步详细化学反应机理[9]，计算域总网格数2700万，模拟计算某型号旋流燃烧室的贫油熄火过程。模拟得到不同当量比情况的三种燃烧状况，即远离熄火状态、近熄火状态和熄火状态。结合火焰因子(Flame Index)区分局部的火焰模式[10]，分为预混和非预混燃烧。观察到在稳定燃烧工况下，非预混释热率高于预混释热率，随着油气比降低，非预混释热率下降，但预混释热率变化不大；当油气比降低至临近熄火工况时，非预混与预混释热率数值相当。火焰锚点位于化学恰当比区域与回流区边缘交界处，若该位置火焰受冷气冲击而吹熄，则发生整体熄火。

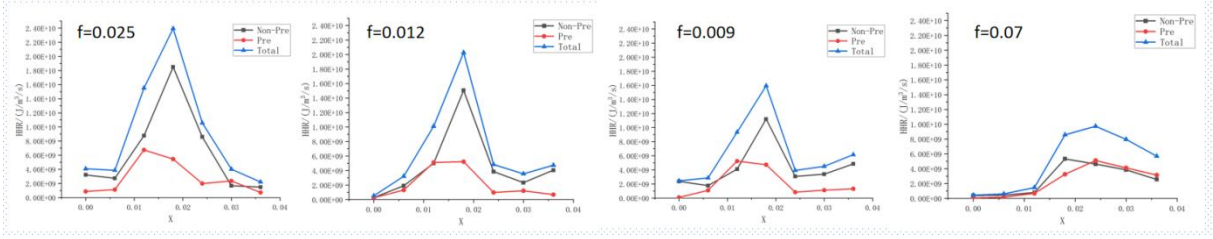


Fig. 1 Time-averaged premixed and non-premixed heat release rate along the x-axis.

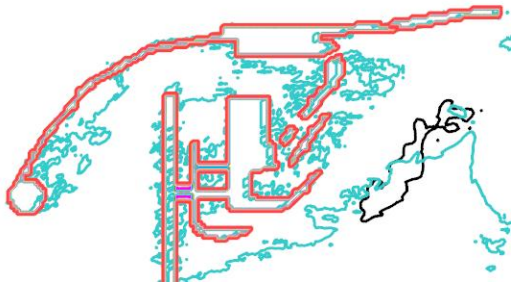


Fig.2 z=0 slice with zero mean axial velocity contour(blue line) and stoichiometric mixture fraction contour(black line)

关键词：大涡模拟；概率密度函数输运方程湍流燃烧模型；旋流燃烧室；贫油熄火

参考文献

[1] 王慧汝，金捷. 航空发动机燃烧室贫油熄火极限预测方法综述[J]. 航空发动机，2014, 40(5):72-78.

[2] 王方，王煜栋，姜胜利，等. AECSC-JASMIN湍流燃烧仿真软件研发和检验[J]. 航空学报, 2021, 42(12): 128-140.

[3] 王煜栋,王方,甘甜,等.基于曲线坐标系浸没边界方法的折流燃烧室模拟[J].推进技术,2023,44(05):125-137.

[4] 王煜栋,王方,金捷.多连通域曲线坐标系浸没边界方法及其检验[J/OL].工程力学,1-13[2024-08-20].

[5] 王煜栋，王方，周佳伟，等. AECSC-IBM航空发动机燃烧室数值模拟软件研发与检验[J]. 航空动力学报, 2022, 37(10): 2310-2323.

[6] 邢竞文，金捷，王方. 基于释热率分析的钝体贫油熄火过程分析[J]. 北京航空航天大学学报, 2022, 48(3):473-484.

[7] **Jones, W. P.; Tyliszczak, A. Large eddy simulation of spark ignition in a gas turbine combustor[J]. Flow, Turbulence and Combustion, 2010, 85: 711-734.**

[8] **Jones, W. P.; Marquis, A. J.; Vogiatzaki, K. Large-eddy simulation of spray combustion in a gas turbine combustor[J]. Combustion and Flame, 2014, 161: 222-239.**

[9] **Kundu K., Penko P., Vanoverbeke T.. A Practical Kinetic Mechanism for Computing Combustion in Gas Turbine Engines[A]. 35th Joint Propulsion Conference and Exhibit[C]. 1999.**

[10] **Achyut Panchal, Suresh Menon. Large eddy simulation of fuel sensitivity in a realistic spray combustor[J]. Combustion and Flame, 240(2022) 122161.**

固体火箭发动机近燃面凝相颗粒的运动特性研究

吴学婷[1]，杨文婧[1,*]，盛晴云[1]，陈贺[1]，王璜鹏[1]

[1]西北工业大学，航天学院，固体推进全国重点实验室，陕西省西安市碑林区友谊西路127号，邮编：710072

*Email:yangwj@nwpu.edu.cn

摘要正文：在固体火箭发动机中，燃烧面附近区域的颗粒行为复杂多变，包括颗粒堆积、颗粒碰撞和颗粒燃烧等多个方面，同时涉及到声边界层的影响。本文利用CFD-DEM模型对发动机横向过载及声场下燃烧面附近复杂的气-固-声多相耦合流动进行了数值研究，捕捉到了典型的颗粒运动规律。研究了不同颗粒直径、声压幅值及过载条件对颗粒空间运动的影响。模拟结果表明，横向过载导致颗粒的运动状态发生巨大变化，比如颗粒速度变化、颗粒悬浮和颗粒聚集区。声边界层内声辐射力的振荡幅值沿发动机径向呈波动性变化，颗粒在声边界层内会发生燃面处沉积现象或则，或在距燃面附近振荡现象，且振荡幅度随时间逐渐减小，最终出现悬停现象，在燃面上方形成颗粒聚集带。在横向过载及声场条件下，颗粒的运动行为会发生很大变化，颗粒空间分布的非均匀性明显增强。颗粒的这些运动变化会对局部热环境产生严重的热效应，导致局部放热率改变，并可能导致推进剂局部燃烧速率异常。

关键词：CFD-DEM；过载；声辐射力；凝相颗粒；近燃面

参考文献

[1] 杨文婧, 匡亮, 褚开维, 刘佩进. 基于 CFD-DEM 算法的固体火箭发动机气-固两相流模拟[J].推进技术, 2019, 40(07): 1546-1553.

[2] 崔立堃. 过载状态下固体火箭发动机内流场数值计算[J]. 战术导弹技术, 2017(3): 6.

[3] 李越森, 叶定友. 高过载下固体发动机内 Al2O3 粒子运动状况的数值模拟[J]. 固体火箭技术, 2008, 31(1): 24-27.

[4] Cai W , Yang V , Flandro G A . 1TURBULENT TRANSPORT IN ROCKET MOTOR UNSTEADY FLOWFIELD[J]. Solid Propellant Chemistry, 2015.

[5] Greatrix, David R . Inert Particles for Axial-Combustion-Instability Suppression in a Solid Rocket Motor[J]. Journal of Propulsion & Power, 2015, 24(6): 1347-1354.

环隙型微反应器内流体力学的数值模拟

白镓源[1]，严鹏[2]，何广湘[1]，杨索和[1]，马磊[1]，靳海波[1,*]

[1]北京石油化工学院，北京市大兴区清源北路 19 号，102617

[2]兰州理工大学，兰州理工大学石油化工学院应用化学系，730050

[*]jinhaibo@bipt.edu.cn

摘要正文：采用 Fluent 中的 VOF 方法，分别对环隙尺寸为 0.25mm、0.5mm 和 1.0mm 的环隙型微反应器内的气液两相流动特性进行了详细研究。考查流体流速、环隙尺寸、初始气含率、流体粘度等因素对流型、气含率、流动压降等特性的影响并与实验结果进行对比。根据模拟结果，绘制了环隙微通道内气液流型图，与文献中的实验数据吻合程度较高；建立了微反应器内的流动压降分相流模型，修正了模型参数 C 值的关联式；由模拟结果可知，Taylor 流区域会随着环隙尺寸的缩小而提前出现，流动压降会随着流体流速的增大而升高，液相对流动压降的影响要远远高于气相，同时表面张力的增加会对加速气泡聚并的速度。

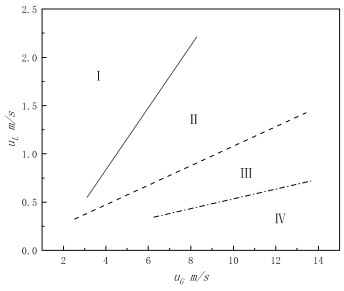


Fig.1 Simulation of Flow Regimes in Annular Microreactors

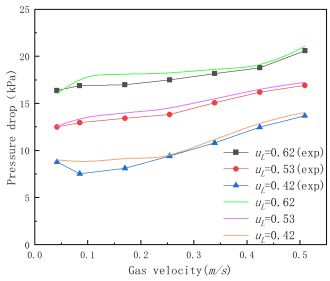


Fig.2 Pressure drop as a function of gas velocity

(I. Bubby flow II. Slug flow III. Annular flow IV. Disturbed flow)

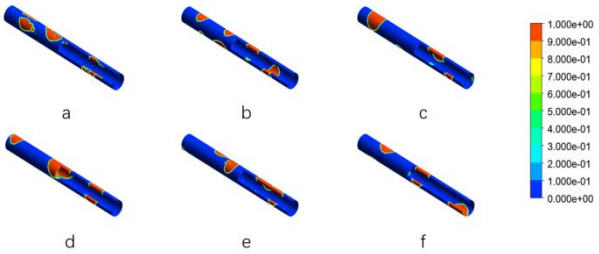


Fig.3 Simulation results for different surface tension

(a. $\sigma = 0.032$ b. $\sigma = 0.052$ c. $\sigma = 0.072$ d. $\sigma = 0.092$ e. $\sigma = 0.112$ f. $\sigma = 0.144$)

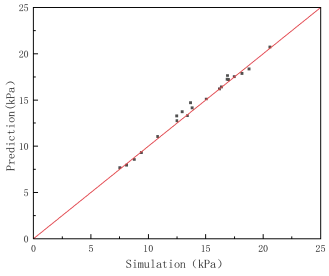


Fig.4 Comparison of Simulated and Experimental Pressure Drops

关键词：环隙型微反应器；多相流 VOF 模型；气液两相流动；压降

参考文献

[1] 谢晓哲.文丘里型环隙微通道流动特性的实验研究[D].北京石油化工学院,2023.

[2] 袁希钢, 宋文琦. T 型结构微通道气液两相流型的数值模拟[J]. 天津大学学报：自然科学与工程技术版, 2012, 45: 763-769.

[3] 戴莉. 微通道内的气液两相流动与传质研究 [D].天津大学,2010.

[4] Dongying Qian, Adeniyi Lawal, Numerical study on gas and liquid slugs for Taylor flow in a T-junction microchannel,Chemical Engineering Science,Volume 61, Issue 23,2006,Pages 7609-7625,ISSN 0009-2509.

[5] N.P Ekberg, S.M Ghiaasiaan, S.I Abdel-Khalik, M Yoda, S.M Jeter,Gas–liquid two-phase flow in narrow horizontal annuli,Nuclear Engineering and Design,Volume 192, Issue 1,1999,Pages 59-80,ISSN 0029-5493,https://doi.org/10.1016/S0029-5493(99)00078-3.

[6] Liu, H., Qi, D., Shao, X., & Wang, W. (2019). An experimental and numerical investigation of heat transfer enhancement in annular microchannel heat sinks. International Journal of Thermal Sciences, 142, 106–120. https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2019.04.006

[7] Chaurasiya, R. K., & Singh, K. K. (2022). CFD modelling of mass transfer in liquid–liquid core-annular flow in a microchannel. Chemical Engineering Science, 249. https://doi.org/10.1016/j.ces.2021.117295

[8] Ghadirzadeh, S., & Kalteh, M. (2017). Lattice Boltzmann simulation of temperature jump effect on the nanofluid heat transfer in an annulus microchannel. International Journal of Mechanical Sciences, 133, 524–534. https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2017.09.013

[9] Weng, H. C., & Chen, C.-K. (2009). Drag reduction and heat transfer enhancement over a heated wall of a vertical annular microchannel. International Journal of Heat and Mass Transfer, 52(3–4), 1075–1079. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2008.06.022

[10]K.A.Triplett,S.M.Ghiaasiaan,S.I.Abdel-Khalik,A.LeMouel,B.N. McCord,Gas–liquid two-phase flow in microchannels: Part II: void fraction and pressure drop[J],1999.

[11]M J F Warnier, E V Rebrov, M H J M de Croon, et al. Gas hold-up and liquid film thickness in Taylor flow in rectangular microchannels[J], Chemical Engineering Journal, 2008, 135(Supplement 1), S153-S158.

[12]LEEJ，MUDAWAR I Two-phase flow in high-heat-fluxmicro-channel heat sink for refrigeration cooling applica-tions : Part I-Pressure drop characteristics[J . Interna-tional Journal of Heat Mass Transfer，2005 ，48(5): 928.940.

[13]WAMBSGANSS M W，Jendrzejczyk J A，OBOT N TFrictional pressure gradients in two-phase flow in a small horizontal rectangular channel[J]. Exp Therm Fluid Sci，1992，5(1) :40-56.

第3分会场：流态化技术助力新质生产力

旋流快速热解器中流动、传热和反应行为探究

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，山西省太原市迎泽西大街79号，030024

2 中北大学，山西省太原市学院路3号，030051

*Email: xghao@tyut.edu.cn

摘要： 在“碳达峰”和“碳中和”的目标下，低碳能源清洁高效利用技术亟待探索。煤炭资源在我国一次能源消耗占比超过50%，其中随着优质煤种的快速消耗，低阶煤的高效利用日益引起关注[1]。低阶煤具有能量密度低、水分和挥发性含量高的特点，直接燃烧利用效率低。众多研究表明，以热解为先导的多联产技术制取高附加值化学品更加适合低阶煤清洁高效利用[2]。下行床由于其顺重力场的特点，流型近似平推流，契合低阶煤热解的反应特性。但是由于其固含率较低，且在重力场的环境下难以大幅度提升，导致传热速率难以满足煤颗粒热解的需求[3]，进而限制了其内部的热解过程。故本文借鉴旋风分离器的结构，额外引入离心力场，提出了旋流快速热解器，以期望作为更适合煤颗粒的热解反应器。本文采用了计算流体力学的方法研究了旋流快速热解器中的流动、传热和反应行为。初步研究结果表明旋流快速热解器中气固流型近似平推流。另外旋流快速热解器中颗粒被离心力束缚在近壁面处形成高固含率区，在同等颗粒质量通量的条件下，旋流快速热解器中的局部固含率高达0.3，而下行床中固含率仅为0.02左右。对于传热过程的研究发现，在颗粒同等停留时间的条件下，旋流快速热解器中的传热速率是下行床的四倍左右。其中对流传热是煤颗粒升温的主要因素，在旋流快速热解器中自然旋风长区域存在着更加剧烈的湍动从而导致了更快速的煤颗粒升温速率。随着气速的增大，旋流快速热解器中的煤颗粒出口温度显著提高，另外当气速增加时，气体流量的增大消耗了更多的热量导致煤颗粒获得的热量逐渐趋于稳定。在随后研究中考虑了热解反应的影响，研究发现在离心力的作用下，热解产生的挥发分迅速向中心低压区汇聚，随后从反应器上端排气口排出。这意味着气态反应产物能够及时从高温热解区迅速分离，从而降低二次反应提高热解产物收率。另外，反应颗粒在热解反应过程中会由于挥发分的释放导致颗粒的理化性质发生变化，从而会影响反应器中颗粒的流动和传热行为。

关键词： 低阶煤；旋流快速热解器；流动特性；传热与反应特性

参考文献

[1] H. Lian, N. Zhang, X. Pan, et al., Simulation of heat transfer in a downer-type pyrolyzer with binary particles by considering carrying gas role in the coal heating process. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2024, 63(4): 2011-2020.

[2] X. Pan, H. Lian, N. Zhang, et al., Simulation of the coal pyrolysis process in downer reactor with a mass transfer model based on the spatial superposition assumption. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2023, 172: 106010.

[3] Y. Ma, J. Zhu, Experimental study of heat transfer in a co-current downflow fluidized bed (downer). Chemical Engineering Science, 1999, 54(1): 41-50.

复杂气固两相流长时间快速预测：

物理规律约束的动态模态分解方法

王军武

中国石油大学（北京）

* E-mail: jwwang@cup.edu.cn

摘要：过程工业中很多气固两相流反应过程以小时/天为特征时间（如矿物焙烧过程），但常规 CFD 计算通常只算几十秒，这类过程的计算机模拟对 CFD 计算提出了严峻挑战。数据驱动方法被认为是解决复杂气固两相流快速预测的有效方法，但是现有纯数据驱动方法由于预测过程中误差不断累积增大，无法实现长时间预测。本文尝试耦合已知物理规律与纯数据驱动方法，提出受物理规律约束的动态模态分解方法（piDMD）。本方法通过对短时间气固两相流 CFD 模拟数据的分析和学习就可实现长时间快速预测，预测误差不随着时间增长而不断累积增大，而且预测过程只需要做简单的矩阵乘法，和 CFD 计算相比，效率可提高 2-3 个数量级。从而实现特征时间为小时/天量级的气固两相流快速计算和预测。

加压流态化的工程基础研究及应用

郝振华[1]，巴忠仁[1]，聂伟[1]，房倚天[1,*]

[1]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: fyt@sxicc.ac.cn

摘要：

加压流态化可以提高反应速率、改善传热、传质和混合性能、提高碳转化率、减小设备尺寸、提高系统的整体效率等优势，在化工、能源转化、冶金和环保等多个领域得到了广泛的应用。相比于常压流态化，加压不仅对气固流动特性、气泡/颗粒团聚状态、传热和传质行为具有重要影响，并且对实验测量手段和数值建模方法都提出了较高的挑战，目前对于加压流态化“三传一反”过程的理解仍较为匮乏。中国科学院山西煤炭化学研究所以流化床煤气化技术为背景，对B类颗粒加压流化特性进行了系统的研究，获得了不同压力、分布板结构、床层高度、颗粒直径和表观气速下的气泡行为，建立了加压射流流化床气泡直径预测模型；分析了压力对多段分级转化流化床流体力学特性、颗粒速度和浓度分布以及颗粒聚团特性的影响，获得了不同表观气速和颗粒循环量下多段分级转化流化床流化区域相图，修正了环核流动模型，建立了加压流化床多尺度非均匀结构的流动-气化反应模型；此外，还研究了喷嘴结构与气固射流动力学间的构效关系和调控机制，分析了喷嘴收缩效应对气固运动特性的影响，提出了通过改变喷嘴收缩角来调控涡旋尺度和强度的技术方法，揭示了喷嘴收缩效应和缩进效应加剧外剪切层不稳定性的机理，建立了湍动射流轴对称涡环轴向位移与湍流过渡长度的预测模型。加压流态化的工程基础研究有效支撑了多段分级转化流化床气化炉、粉煤气流床气化炉、锅炉超低负荷稳燃炉的开发。

关键词：加压流态化；气泡行为；颗粒聚团；喷嘴结构；宽筛分颗粒

参考文献

[1] J. G. Li, Z. H. Cheng, Y. T. Fang, H. Y. Wang, W. Nie, J. J. Huang, Y. Wang. Minimum and terminal velocity in fluidization of coal gasification materials and coal blending of gasification under pressure. Fuel. 2013, 110: 153-8.

[2] Z. Y. Wang, Z. H. Cheng, Y.T. Fang, J. J. Huang, Z. H. Hao, Y. Wang. Hydrodynamic characteristics of Multi-stage Conversion Fluidized Bed (MFB). Fuel Processing Technology. 2013, 115: 99-10.

[3] 宋素芳, 郝振华, 董立波, 李俊国, 房倚天. Bubble-based EMMS/PFB 模型的建立及在加压流化床浓相段的应用. 化工学报. 2017, 68(8): 46-53.

[4] R. T. Feng, J. G. Li, L. B. Dong, Z. H. Hao, Z. R. Ba, H. J. Zhan, Y. T. Fang. Gas-solid flow behaviors in a multi-stage circulating fluidized bed under elevated pressure. Chemical Engineering Science. 2018, 196: 1-13.

[5] Z. R. Ba, Y. B. Wang, J. T. Zhao, Z. H. Hao, C. Y. Li, X. Yang, Y. T. Fang. Comparative study of gas-particle transport characteristics subjected to the central and annular coaxial jets. Powder Technology. 2023, 413: 118080-15.

Encapsulation of nano-catalysts and construction of a fixed-fluidization catalytic system for heterogeneous hydrogenation reaction

Yufei He [1, *]

[1]State Key Laboratory of Chemical Resource Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing, 100029

* yfhe@mail.buct.edu.cn

Nano-catalysts, known for their unique crystal structures and surface properties, have been extensive applications in heterogeneous reactions[1]. Due to their nanoscale size and unsaturated coordination environment, nano-catalysts show extremely high catalytic performance compared with traditional catalysts by the enhancement of transfer process and chemical reaction. However, a new challenge emerges as nano-catalysts progresses toward industrial applications: the partial or complete loss of their structural advantages when transitioning to industrial-scale catalysts. Other issues like mass and heat transfer limitations also accompany[2]. The overlook of engineering results in underutilizing the benefit of nano-catalysts in existing industrial reactors. For example, ungranulated nano-catalysts in a fluidized bed are susceptible to pulverization due to particle collisions, leading to catalyst loss and increased complexity in subsequent separation processes. If loading nano-catalysts into fixed-bed reactors, significantly increased bed resistance could introduce considerable safety risks, while the uniform contact between reactants and the catalyst reduces the efficiency. Therefore, it is essential to develop new systems that maintain the structural advantages of nano-catalysts while being compatible with the demands of industrial applications. Herein, we propose a novel catalyst which assembling nano-catalyst within millimeter-sized hollow materials. The obtained assembling structure is then employed in the gas-liquid-solid phases hydrogenation of 2-ethylanthraquinone (EAQ), a crucial step in the production of the green oxidant hydrogen peroxide. The reaction is featured by a low activation energy barrier, with performance significantly limited by mass transfer. Based on this heterogeneous reaction, we develop a matched catalytic system with shell-fixation and encapsulated nano-catalyst fluidization characteristics, which exhibits a boosting H_2O_2 productivity of 2-ethylanthraquinone (EAQ) by the full use of the nanostructure benefit. The new structure of catalyst and fixed-fluidization catalytic system is expected to overcome the engineering challenges associated with the application of nano-catalysts.

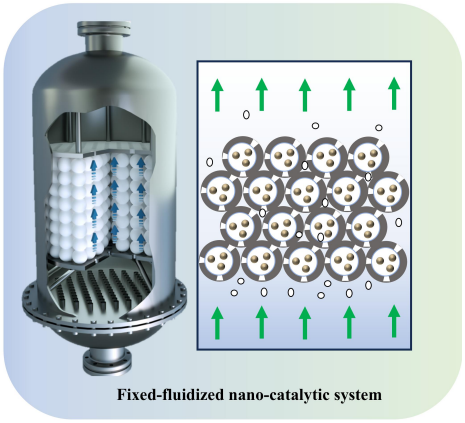


Fig. 1 The fixed-fluidized nano-catalytic systems

Keywords: Encapsulation of nano-catalysts; Hollow porous materials; heterogeneous hydrogenation; Fixed-fluidization catalytic system

References

[1] Monai M., Jenkinson K., Melcherts A. E. M., Louwen J. N., Irmak E. A., Aert S. V., Altantzis T., Vogt C., Stam W. v. d., Duchoň T., Šmíd B., Groeneveld E., Berben P., Bals S., Weckhuysen B. M. Restructuring of titanium oxide overlayers over nickel nanoparticles during catalysis. Science 2023, 380, 644-651.

[2] Huang H., Shi R., Zhang X., Zhao J., Su C., Zhang T. Photothermal-Assisted Triphase Photocatalysis Over a Multifunctional Bilayer Paper. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 22963-22969.

堆积颗粒的多态性：现象、机理及影响

朱全红*，刘东晖，张强，曹亚龙

青岛科技大学化工学院，青岛，266042

*Email: zhuqh87@163.com

摘要：堆积颗粒的多态性是指堆积颗粒可呈现不同的外观状态或颗粒群可被堆积成不同的外观状态。堆积颗粒的多态性在日常生活中随处可见。最为直观地，在一个平面上，颗粒群堆积而成的锥堆可具有不同的高度或角度；又比如，在一个圆柱筒体之中，颗粒群可堆积得到不同的高度或空隙率；再比如，对于二元混合颗粒，其堆积状态可具有不同的分级/混合程度。堆积颗粒为什么具有多态性，至今仍不清楚。综合文献报道分析，最重要的原因在于颗粒之间的接触力，即基于接触的颗粒间作用力，主要包括颗粒之间的粘附力、静摩擦力和压力。这些力可赋予颗粒群很多不同的堆积状态：上部的颗粒不仅会受到正下方颗粒的支撑，还会受到侧下方颗粒的支撑。接触力越大，堆积颗粒的多态性越显著，即可呈现更多不同的外观状态。

通常情况下，堆积颗粒只有一种稳定平衡状态。因此，颗粒群诸多堆积状态的稳定性值得分析。在堆积颗粒的诸多状态中，很多被证明处于亚稳定平衡：在受到较大扰动后，不能恢复到原来的状态。然而，这些亚稳定平衡态不同于水的亚稳态（如过冷或过热状态），而是类似于非晶态或玻璃态（amorphous state）。首先，在遇到较大扰动后，其不会快速而直接地转变为对应的稳定平衡态，而是会停留在其它亚稳定平衡态；只有在持续的扰动下，才会转变为对应的稳定平衡态。其次，堆积颗粒的亚稳定平衡态形成于颗粒之间的内摩擦力（internal friction），而不是潜在新相生成的困难；由于内摩擦力的存在，颗粒可被围困在亚稳定平衡位置。再次，给定工况下，水通常只存在唯一的亚稳态，但是堆积颗粒则可具有多种亚稳定平衡态；颗粒偏离稳定平衡位置的程度可显著不同。最后，由于堆积颗粒可具有多种亚稳定平衡态，很难预测实际上会得到哪种亚稳定平衡态。

无论是存贮、运输，还是各种处理，颗粒群（不是单个颗粒）的物性都至关重要，其准确测量是一项重要的基础研究课题。颗粒群很多物性的测量都是基于其堆积状态，比如松堆密度、最小流化速度、安息角、球形度、分级指数及小孔排料速度。然而，堆积颗粒的多态性导致了上述物性的测量具有较差的重复性和可比性。可以想象，如果不同研究者使用了不同的初始堆积状态进行测量，测量结果自然不具有可比性；如果同一个研究者的各次测量使用了不同的初始堆积状态，测量结果的重复性自然较差。假如颗粒群有且只有一种堆积状态，任何人、任何时候制备得到的堆积状态必然是相同的，之后的测量结果也会具有很好的重复性和可比性。

最后，由于堆积颗粒的多态性，制备得到的堆积状态会与历史路径密切相关。如何标准化颗粒的堆积状态对于之后的测量至关重要。我们的研究表明，通过塌落方法可实现颗粒堆积状态的标准化。首先，只要塌落速率控制得当，得到的塌落状态可具有很好的重复性。其次，存在一个独特的塌落状态，可统一不同研究者的选择。再次，这种独特的塌落状态符合人们关于颗粒堆积状态的常规认知。

关键词：颗粒群；堆积状态；多态性；亚稳定；物性测量

参考文献

[1] Q. Zhu, Y. Cao, Q. Zhang, W. Liu, H. Guan, D. Liu, H. Gai. Influences of polymorphism of packed particles bulk characterizations in fluidization realm. *Chin. J. Chem. Eng.* 2024, In press.

[2] PG. de Gennes. Granular matter: A tentative view. *Rev. Mod. Phys.* 1999, 71(2): 629-43.

分区控制变径流化床大颗粒生物质快速热解的CFD模拟

钟汉斌*，陈科宇

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：生物质的有效利用契合保障能源安全、大气污染防治及脱贫攻坚等国家重大战略需求。鼓泡流化床快速热解是生物质有效利用的重要手段，但由于要求原料粒径较小而导致能耗过高。而使用大粒径颗粒虽可显著降低能耗，但却存在生物炭难分离的技术瓶颈。目前双流体模型广泛用于生物质快速热解过程的CFD模拟研究，但缺乏描述颗粒变化规律的缩径模型，难以准确预测生物炭颗粒的夹带行为。因此，首先基于颗粒尺度的质量守恒建立了粒径变化模型，并与颗粒内传热模型耦合同时考虑大颗粒生物质的缩径和颗粒内传热效应，为大颗粒生物质快速热解过程的精准模拟提供重要手段。然后提出自下而上分为混合区、分级区和输送区的新型变径流化床反应器。底部混合区内径较小，气速较高，促进生物质颗粒与砂粒的混合行为，强化传热提高生物质颗粒的加热速率，从而保持较高的生物油产率。中部分级区内径大，气速低，促进生物炭颗粒与砂粒的分级行为，为后续输送分离提供基础。顶部输送区内径小，气速高，强化浮于床层上部生物炭颗粒的输送，并减小气相停留时间，弱化生物油的二次裂解副反应。最后采用所开发的粒径可变双流体模型对大颗粒生物质在分区控制变径流化床中的流动-反应行为进行CFD模拟，结果表明新型流化床反应器能够将生物炭与石英砂有效分离并吹出反应器，同时维持生物油产率基本不变，因此获得过程能耗低、生物炭能有效分离且生物油产率高的新型热解工艺。

关键词：变径流化床；生物质；快速热解；CFD；双流体模型

参考文献

[1] H. Zhong, Q. Xiong, Y. Zhu, S. Liang, J. Zhang, B. Niu, and X. Zhang, CFD modeling of the effects of particle shrinkage and intra-particle heat conduction on biomass fast pyrolysis. Renew. Energy 2019, 141: 236-245.

[2] 朱玉琴, 张馨予, 王欣, 钟汉斌, 许锋, 管雅倩, 生物质流化床快速热解多流体模拟的研究进展[J]. 西安石油大学学报(自然科学版), 2019, 34: 120-126.

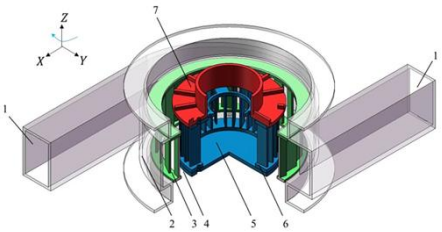
气力分选设备流场中颗粒运动建模及计算

于源*，宫智子，刘克润

北京化工大学机电工程学院，100029

*Email: yuyuanjd@263.net

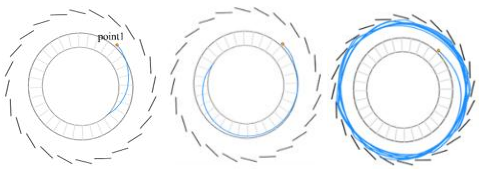
摘要：粉体颗粒在气力分选设备中进行粗细分离时受到的作用力复杂，颗粒运动受到多个因素影响，颗粒运动规律与分级性能直接相关，因此探究颗粒在粗细颗粒分离过程中的运动规律，一直是研究者关注的热点问题。随着计算机技术的发展，计算流体动力学 （Computational Fluid Dynamics, CFD）已成为解决科学和工程应用中复杂流动问题重要方法[1, 2]。现有研究大多基于气力分级时颗粒低浓度的特点，使用离散相模型（Discrete Phase Model, DPM）对其中颗粒进行仿真，未考虑颗粒间的相互作用，无法探究颗粒间碰撞、凝并、团聚、破碎和解团行为，不利于对分级过程“鱼钩效应”等现象的分析及对分级机理的探究。本文基于GPU（Graphics Processing Unit）并行计算技术，在Visual Studio 2015平台上开发用于气力分级机内颗粒运动模拟的仿真软件（Particle Motion Simulation，PMS），该软件考虑了湍流脉动对粒子扩散的影响，颗粒间相互作用以及颗粒与壁面碰撞，通过单颗粒运动数值计算可用于模拟并观察颗粒运动轨迹，通过多颗粒运动数值模拟可以预测气力分级设备的分级粒径d_{50}。对PMS的计算性能进行测试，通过与稠密离散相模型（Dense Discrete Phase Model，DDPM）对比加速性能，跟踪10e4个颗粒在分级机内运动轨迹，结果表明PMS相较于DDPM的加速比最大可以达到2.25。利用PMS预测的12-1200和12-1000工况下的分级粒径d_{50}，相较于DDPM和DPM，更接近物料分选实验d_{50}。该软件自主研发，具有良好扩展性和计算性能，可为进一步完善颗粒在分级机内的运动模型奠定良好基础。



1—Air inlet, 2—Volute, 3—Guide blade,

4—Annular region, 5—Center, 6—Rotor cage, 7—Spreading plate

Fig. 1 Structure diagram of turbo air classifier



(a) 10 μm (b) 20 μm (c) 30 μm

Fig. 2 Particle trajectories of the particles with different sizes

关键词：气力分选设备；颗粒运动建模；颗粒运动轨迹；分级粒径

参考文献

[1] 卢道铭, 范怡平, 卢春喜. 颗粒空气分级技术研究进展[J]. 中国粉体技术, 2020, 26 (06): 11-24.

[2] A. Hashemisohi, L.J. Wang, A. Shahbazi, H. Amini, Numerical analysis and experimental validation of hydrodynamics of a thin bubbling fluidized bed for various particle-size distributions using a three-dimensional dense discrete phase model, Particuology. 49 (2020) 191-204.

Particle motion modeling and calculating in the flow field of a pneumatic classification equipment

Corresponding Author (Yuan Yu) *, Second Author(Zhizi Gong), Third Author(Kerun Liu)
College of Mechanical and Electrical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China
* yuyuanjd@263.net

The forces on the powder particle are very complex when the coarse and fine particles are separated in a pneumatic classification equipment. Particle motion is influenced by several factors and the law of particle motion is related to the classification performances directly. Therefore, it is a hot researching issue to explore the particle motion law during the processing of the coarse and fine particles. With the development of computer technology, Computational Fluid Dynamics (CFD) has been the key method of solving the complex flow problems in scientific and engineering applications[1, 2]. Discrete phase model (DPM) can be used to simulate the movement of the particles in the classifier since there is a gas-solid dispersion system in the classification flow field, in which the dispersion phase is particle and the continuous phase is the air, and since the volume loading rate of the particles is low. However, the interactions between particles are ignored and simplified, and inter-particle collision, particle agglomeration, broken and dis-agglomeration of the agglomerates are not considered, which is not conducive to analyze the phenomenon of “fishhook effect” and explore the mechanism of the powder classification. Based on Parallel computing of Graphics Processing Unit (GPU), the simulation software Particle Motion Simulation (PMS) is developed to simulate the particle motion in the pneumatic classifier, in which the effect of the turbulent pulsation on the particle diffusion, interaction between particles and collision between wall and particle are considered. The motion trajectory of single particle can be numerically calculated and simulated, and the cut size can be predicted by numerical calculation on multi-particles’ motion. Compared to Dense Discrete Phase Model (DDPM), the accelerating ability of PMS can be reached to 2.25 when 10e4 particles are tracked. The predicted cut size d_{50} using PMS is closer to the experimental d_{50} than that predicted by DDPM and DPM. The software is developed independently, and its good expansion and computing performance can lay a solid foundation for improving the particle motion model in the pneumatic classifier.

Keywords: Pneumatic classifier, particle motion modeling, particle motion trajectory, cut size

References

[1] D.M. Lu, Y.P. Fan, C.X. Lu, Research progress of particle air classification technology, China Powder Science and Technology. 26 (2020) 11-24.

[2] A. Hashemisohi, L.J. Wang, A. Shahbazi, H. Amini, Numerical analysis and experimental validation of hydrodynamics of a thin bubbling fluidized bed for various particle-size distributions using a three-dimensional dense discrete phase model, Particuology. 49 (2020) 191-204.

结构双流体模型

赵碧丹[1,2*]，王军武[1,2]

[1]中国石油大学（北京）重质油全国重点实验室，102249

[2]中国石油大学（北京）机械与储运工程学院，102249

*Email: bdzhao@cup.edu.cn

摘要：连续介质模型兼顾计算效率与计算准确性，已被广泛应用于模拟非均匀气固两相流系统。非均匀介尺度结构显著影响气固复杂系统内的流动传递反应特性，因此我们基于介科学中“两种控制机制竞争中协调”原理：将气固复杂系统划分成流体控制的稀相和颗粒控制的密相，两个相互渗透的连续流体，按照多尺度分解方法逐一封闭复杂稀密相间/相内本构关系，从而构建控制方程与本构关系均考虑非均匀介尺度结构影响的、全新的结构双流体模型。一方面，系统验证结构双流体模型在多种气固复杂系统如高密度流化床、鼓泡床、循环湍动床、复杂全回路中的适用性，可基本证明此模型模拟准确度高、可广泛应用于多种流域；另一方面，通过解析壁面热边界层的影响，使得结构双流体模型可准确捕捉床层-壁面传热特性。

关键词：多相流，流态化，介尺度结构，颗粒动理论，连续介质模型

基于EMMS和群平衡模型的流化床多尺度CFD建模方法

胡善伟*，刘新华

中国科学院过程工程研究所，中关村北二街 1 号，北京，100190

*Email: swhu@ipe.ac.cn

摘要：

气固流化床反应器是典型的具有多尺度非均匀动态结构的复杂系统。实现对该类反应器定量描述和定向调控的关键是深入了解系统内介尺度结构的形成和演化特征。尽管EMMS模型有效考虑了局部非均匀结构对曳力本构关系的影响，但既往研究大多围绕静态的气泡和团聚物建立模型，网格内介尺度结构特征在特定操作参数和局部空隙率情况下为一定值。这样的处理方式忽略了气泡和团聚物动态演化的历史信息，很大可能导致计算网格内实际的介尺度结构信息和EMMS预测值不匹配，因此有必要在模型中进一步引入时间变量并考虑气泡和团聚物的时空动态演化。本研究等通过量化稀密相质量交换建立了团聚物的连续生长模型，初步建立了低通量床中团聚物群平衡方程，并在此基础上完善了连续介质模型、EMMS曳力和群平衡模型的耦合框架，随后还拓展了PBM在鼓泡流化床中的应用。由于考虑了介尺度结构时空动态演化对尺寸分布的影响，更准确地获取了计算网格内气泡或团聚物的实时结构信息，因而PBM模型的引入使曳力修正计算更加可靠。耦合模型可以有效避免实际团聚物直径和传统EMMS预测值不一致的现象，具有更好的自洽性。更重要的是，该算法可以直接计算反应器内不同位置处团聚物的尺寸分布随时间的演化规律，这对反应器的设计和优化无疑具有重要的意义。

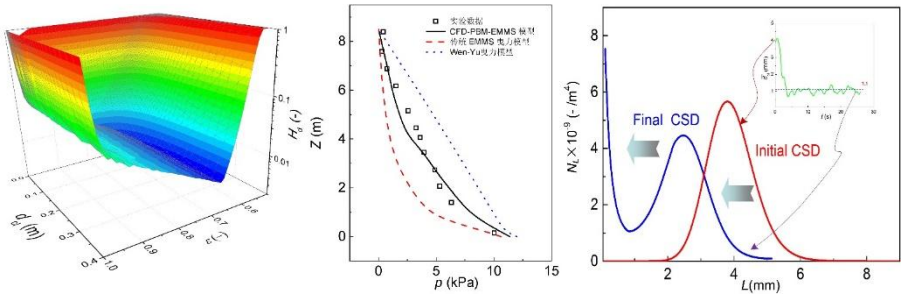


图 1　CFD-PBM-EMMS 耦合模型：（a）H_d 曲面（b）压力曲线　（c）团聚物尺寸演化曲线

本研究还建立了气泡的聚并频率模型和气泡的破碎频率模型以及鼓泡床气泡演化的群平衡模型。为了兼顾计算的精度和效率，本研究采用高斯积分矩方法对群平衡模型进行求解，并通过获得的矩序列获得各计算网格中的实时气泡直径。通过采用该气泡直径值对EMMS鼓泡曳力进行动态封闭，避免了传统EMMS曳力修正采用的经验关联式来封闭气泡直径项的弊端。另一方面，传统的高斯直接求积法（QMOM）虽然可以实现PBM的快速求解，但其众所周知的缺点是无法对气泡尺寸函数（PDF）进行有效的预测，而Class求解法虽然可以复现PDF，但求解速度极慢，使得粗网格模拟的优势荡然无存。为了解决这一问题，本研究采用拓展的积分矩方法对QMOM获得的低阶矩进行重构，实现了对气泡尺寸PDF预测的同时又不损失粗网格模拟的高效性。计算结果和实验数据呈现了良好的一致性。

关键词：流态化；曳力；群平衡；计算流体力学；EMMS

参考文献

[1] Hu S, Liu X. A CFD-PBM-EMMS integrated model applicable for heterogeneous gas-solid flow. Chem Eng J, 2020, 383: 123122.

[2] Hu S, Liu X. CFD-PBM simulation of gas–solid bubbling flow with structure-dependent drag coefficients. Chem Eng J, 2021, 413: 127503.

[3] Hu S, Liu X. 3D CFD-PBM simulation of gas–solid bubbling beds of Geldart A particles with sub-grid drag correction. Chem Eng Sci, 2023, 275: 118660.

流化床中单颗粒生物质燃烧特性研究

罗浩[1]，夏宇轩[1]，刘芯妍[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

流化床反应器由于良好的传热传质性能[1]，已成为生物质燃烧过程的主要反应器类型[2]。然而，由于流化床内部流动及生物质燃烧本生化学过程及颗粒内传递过程的强耦合特性，流化床中生物质的燃烧特性有待进一步阐明。为此，本文通过在线气体分析仪检测出来的CO_2/CO浓度折算出来的碳转化率以及摄像分析来分析流化床中单个生物质颗粒的热解时间和燃烧时间，并结合考虑了颗粒内外传递过程、详细生物质热解反应动力学、焦炭燃烧与气化、颗粒缩核过程的单颗粒模型，来研究流化床中生物质颗粒的燃烧特性。通过对比在线气体分析仪数据得到的热解时间与焦炭燃烧时间基本与摄像系统获得的热解与焦炭燃烧时间，发现二者基本一致，因此，可以基于在线气体分析仪检测出来的CO_2/CO浓度来研究流化床中单颗粒生物质的燃烧特性。研究结果表明，当生物质颗粒粒径大小（8 mm）和氧气浓度（21 vol%）相同时，流化床的温度越高（由750 ºC增加到 850 ºC），生物质的热解和焦炭转化时间稍微缩短；当流化床的操作温度（800 ºC）和氧气浓度（21 vol%）一定时，生物质热解时间和焦炭转化时间会随着颗粒粒径的增加显著增加，同时生物质热解和焦炭燃烧过程的耦合作用也会减弱；当氧气浓度变化（5%/10%/15%/21%）但操作温度和颗粒大小保持不变时，氧气浓度的增加对生物质热解时间的影响较小，但会显著降低焦炭燃烧所需要的时间，说明生物质的热解过程主要受传热过程控制，而焦炭的燃烧过程主要由颗粒外部O_2传质过程控制。上述结果也与单颗粒模型的模拟结果相一致。

关键词：生物质；燃烧；单颗粒；流化床；传热传质

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.**

旋涡结构演化及动力学特性对分离性能的影响机制

高助威[1,*]，王迎迎[1]，魏伟杰[1]，何兰[2]，张夏庆[1]，曾玲玲[1]

[1]海南大学化学化工学院，海南省海口市，570228

[2]海南大学食品科学与工程学院，海南省海口市，570228

*Email: gaozhuwei@hainanu.edu.cn

摘要：

《国家“十四五”规划（2021—2025年）和2035远景目标纲要》明确指出要集中优势资源攻关油气勘探开发等领域关键核心技术，加快深海、深层和非常规油气资源利用，推动油气增储上产。我国海域面积达470多万平方公里，海洋油气资源丰富。海上油田开发具有特殊性，且海上平台空间狭窄，对海上采油系统要求较高。在井下油水分离（Downhole Oil-Water Separation，DOWS）系统中，井下产出液经前处理后进入旋流器，在离心力作用下进行油水分离。旋流器内部流场多尺度旋涡的产生、发展以及批次之间的相互作用支配着其内部流动，并影响外部工作性能输出。

旋涡结构特征及其动力学特性的研究有助于流场宏观效应的调控。在旋流分离运动过程中，剪切作用对旋涡的产生和发展影响较大。当旋涡运动结构相对平衡时，能量损失较小。针对旋流分离器内部流动特性展开分析，作出最大切向速度包络面结构；围绕整体流场内外双旋Rankine涡结构运动趋势变化，深入讨论轴心处涡核摆动现象，研究其涡核破碎机理；同时，**提出非稳态旋涡结构特征的旋涡调控机制，采用适宜角度和合理间距的导流叶片稳涡构件来平衡旋涡运动，增强流动稳定性。**

关键词：海上油田开发；旋流分离器；旋涡结构演化；旋涡结构特征；导流叶片

流态化技术助力化工承压设备长周期安全高效运维

陈昇[1], 何萌[1], 闫子涵[2], 李飞[3], 鲁波娜[3], 王维[3], 卢春喜[2]

1 中国特种设备检测研究院，国家市场监督管理总局技术创新中心（炼油与化工装备风险防控）, 北京, 100029

2 中国石油大学（北京）, 北京, 102249

3 中国科学院过程工程研究所, 北京, 102249

*Email: chensheng_csei@163.com

摘要：

化工承压设备常承装高温、高压、易燃、易爆、有毒介质，流致损伤失效和介质泄漏致灾是影响其长周期安全运行的关键因素，严重时会导致中毒、燃爆等人财物损失和社会负面影响。流致损伤和介质泄漏原因及危害均来自于流体流动，多相非均匀流动、多场交互作用、多机理耦合作用常造成损伤失效和泄漏存在不确定性和隐蔽性，导致精准预测和科学预防难。本研究利用流态化技术，结合数值仿真和机器学习技术，建立了系列工程化流致损伤和介质泄漏预测模型，有效解决冲蚀、气蚀、结焦、露点腐蚀等流致损伤速率、位置精准预测和高危气态介质泄漏扩散演化和溯源定位精准预知难题，预测误差在20%以内。提出了基于风险的损伤失效和泄漏危害科学预防方法，打破工程上传统经验性、过度性、理论性预防方法的不足，可实现在役化工承压设备动态风险实时预知，有效保障设备长周期安全高效运维。

关键词：化工, 承压设备, 流致损伤, 泄漏, 风险

添加粗颗粒强化超细氧化铜流态化还原机制

薛雪[1,2]，李军[1,2,*]，朱庆山[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，化学工程学院，北京，100049

*Email: junli@ipe.ac.cn, qszhu@ipe.ac.cn

摘要：超细粉体流态化过程中极易因粘结团聚而导致失流，是超细粉体流态化的难点[1-3]。大量研究表明，添加粗颗粒可以显著改善原始超细粉体的流化质量[4,5]，并通过改变粗颗粒的添加比例来调节混合颗粒的流化质量，当超细粉体游离自团聚破碎成适合流化的尺寸时存在一个最佳添加比例[6]。采用加粗颗粒强化超细粉流态化反应时，颗粒间相互作用力的变化会影响颗粒的流化行为。本工作研究了惰性微球添加比例对超细氧化铜流态化还原行为的影响，揭示了该反应过程中两种不同的流化强化机制：自团聚流化和核壳流化。值得注意的是，自聚团流化不仅能实现超细氧化铜还原的流态化强化，并且能实现还原产物与玻璃珠微球的高效分离。该工作丰富了添加颗粒强化超细粉流态化反应的研究。

关键词：超细氧化铜；纳-微颗粒；流化床

参考文献

[1] Li J, Liu XW, Zhou L, Zhu QS, Li HZ. A two-stage reduction process for the production of high-purity ultrafine Ni particles in a micro-fluidized bed reactor. Particuology. 2015,19:27-34.

[2] Li J, Kong J, Zhu QS, Li HZ. Efficient synthesis of iron nanoparticles by self-agglomeration in a fluidized bed. AIChE J. 2017,63:459-468.

[3] Li J, Zhu QS, Li HZ. Relationship between reaction and diffusion during ultrafine NiO reduction toward agglomeration fluidization. AIChE J. 2021,67:e17081.

[4] Lauga C, Chaouki J, Klvana D, Chavarie C. Improvement of the fluidisability of Ni/SiO_2 aerogels by reducing interparticle forces. Powder Technol. 1991,65:461-468.

[5] Wang J, Xu B, Zhou T, Liang XZ. Agglomeration mechanism of nanoparticles by adding coarse fluid catalytic cracking particles. Chem Eng Technol. 2016,39:1490-1496.

[6] Song LY, Yang JS, Zhou T. Fluidization characteristics of TiO_2 nano-particles by adding FCC particles. J Cent South Univ Sci Technol.

加压流化床内宽筛分B类颗粒混合与分离行为及其调控机制研究

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：

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 continues size distributions. AIChE J. 2011, 57: 3003-3011.**

气固反应系统中介尺度反应和传质速率模型构建

黄哲庆，张正，王凌雪，周强，

西安交通大学化学工程与技术学院，陕西西安 710049

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

摘要：气固流化床反应器广泛存在于能源化工领域，比如生物质热解、甲醇制烯烃和流化床催化裂化等。在这些反应器中，受气固及固固相互作用，反应器中容易形成非均匀介尺度流动结构，这些介尺度结构将进一步影响反应器中的相间传递和反应过程。值得提及的是由于大尺度反应器颗粒数量巨大，反应器的数值模拟往往需要采用粗网格的双流体方法来实现。本文为了能够准确预测粗网格数值模拟的气固相间传递和反应过程，采用细网格双流体方法，针对一级气固不可逆反应过程，开展数值模拟研究。研究发现，在气固反应系统中，气固反应速率同时受到动力学和气固相间传质机制的影响[1]，为此本文提出同时考虑两种不同影响机制的介尺度反应速率模型。该模型类比于气固相间传热模型[2]提出了气固相间传质机制影响下介尺度气固相间传质模型和扩展了动力学机制影响下的介尺度反应速率模型[3]。为了进一步评估模型的预测能力，本文对所提出的模型开展先验性分析，结果表明新模型具有更好的预测性能。在此基础上，结合已构建的介尺度反应和传质速率模型，本文还开展粗网格的双流体数值模拟研究，结果表明新模型可以进一步提高粗网格模拟在预测组分质量分数和反应速率方面的准确性。

关键词：气固反应系统；细网格模拟；动力学控制；传质控制；介尺度反应速率

参考文献

[1] **Joshi SY, Harold MP, Balakotaiah V. Overall mass transfer coefficients and controlling regimes in catalytic monoliths. *Chem Eng. Sci.* 2009; 65(5):1729-1747.**

[2] **Z. Huang, C. Zhang, M. Jiang, Q. Zhou. Development of a filtered interphase heat transfer model based on fine-grid simulations of gas–solid flows. *AIChE J*. 2020; 66:e16755.**

[3] **Z. Huang, C. Zhang, M. Jiang, Q. Zhou. Development of a Filtered Reaction Rate Model for Reactive Gas-Solid Flows Based on Fine-Grid Simulations. *AIChE J*. 2021; e17185.**

纳米颗粒流态化原子层沉积在颜料TiO_2包膜领域的应用

郭婧[1,2,*]，柴猛[1,2]，牛炳康[1,2]，巢征驿[1,2]，刘有智[1,2]

[1]中北大学 化学与化工学院，太原，030051

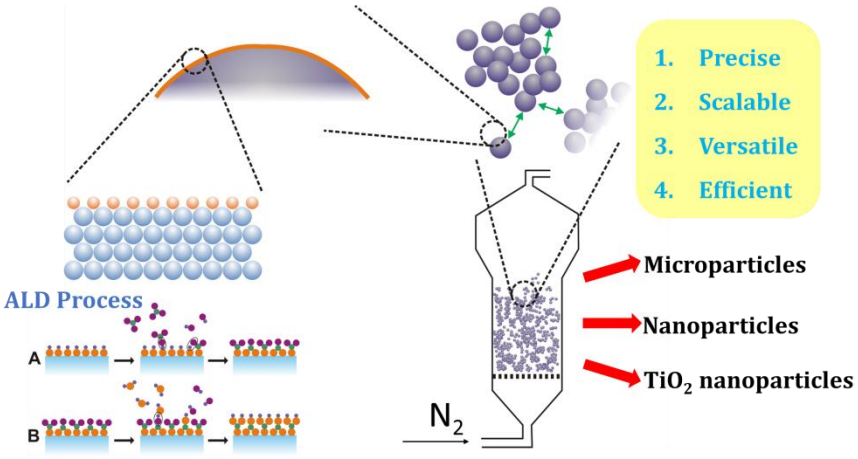
[2]化工过程强化山西省重点实验室，太原，030051

*Email: guojing0519@nuc.edu.cn

摘要：

TiO_2因其出色的亮度、白度、稳定性等被广泛用于涂料、塑料、造纸等领域。但TiO_2固有的光催化活性会促进其周围有机物的氧化分解，导致涂料变色、粉化。通常需在TiO_2颗粒表面包覆Al_2O_3、SiO_2或ZrO_2等透明惰性膜层提升颜料耐候性。膜层必须足够厚以屏蔽其光催化活性，但又需足够薄以保证TiO_2自身优异的亮度及白度不受影响。目前工业上主要采用液相包膜工艺，实现均匀包覆条件苛刻。本工作采用快速、有效、无废液、易于放大的气相包覆方法，将纳米颗粒流化技术与原子层沉积（ALD）技术相结合，实现大量微纳米颗粒表面的精准修饰，以满足未来绿色工业生产需求。本工作探究了纳米颗粒在自制常压振动流化床中的流化特性，保证大量纳米颗粒均匀流化。以$SiCl_4$和H_2O为前驱体在TiO_2纳米颗粒表面沉积超薄SiO_2膜，调控TiO_2的光催化活性，探明了膜层厚度与其光催化活性之间的关系，1 nm SiO_2膜可增强TiO_2的光催化活性，3 nm SiO_2膜却表现出光催化活性的完全屏蔽，证实了ALD在探究材料表界面效应方面的突出优势。并成功将高温ALD SiO_2拓展到室温下进行，且膜层中无Cl元素残留。采用密度泛函理论模拟探究了常温ALD SiO_2和高温ALD SiO_2的反应机理，有望将该成果应用到温度敏感型材料的沉积改性。以$Al(CH_4)_3$和H_2O为前驱体在TiO_2纳米颗粒表面沉积得到致密均匀的Al_2O_3膜，1 nm厚即可实现TiO_2光催化活性的完全屏蔽。进一步在室温下以$TiCl_4$和H_2O为前驱体在TiO_2纳米颗粒表面沉积无定型TiO_2膜，相比其他传统包膜材料，无定型TiO_2具有更高的光折射率，且在不引入外来物质的前提下即实现其光催化活性的屏蔽，更具应用潜力。本工作在保持了TiO_2优异颜料性能的同时，证明了界面工程在提高颜料耐候性方面的可行性和机理，所提出的基本方法也可为纳米颗粒表面修饰的设计提供指导。

关键词：流态化；原子层沉积；TiO_2；包膜；界面工程



高压流化床热传递行为的调控

余亚雄，鲁峰，魏飞，张晨曦 [1,*]

[1]清华大学化学工程系，北京，100084

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

摘要：高压流化床是合成氨、甲醇以及聚合物生产等化工过程中不可或缺的设备，操作压力对气固流化床的传热性能有着重要影响，而大多数流化床的研究仍局限于常压条件。因此，研究高压条件下流化床的传递特性及其调控手段具有显著的工业应用价值[1-5]。本文通过在冷热壁流化床[6]中添加不同比例的双分散混合颗粒（134 μm的粗颗粒与30 μm的细颗粒），系统研究了操作压力和双分散颗粒组分浓度对热传递性能的影响及其调控机制。实验结果显示，当床内仅含134 μm粗颗粒时，床内平均温度随着操作压力的增加缓慢下降，并在压力达到0.5 MPa时出现剧烈降低，该压力被定义为临界压力，随后平均床温基本保持不变。然而，当引入部分30 μm的细颗粒后，流化床的临界压力得到显著提升。特别是加入50%的细颗粒后，临界压力可以提升至0.8 MPa以上，流化床的整体温度也显著上升。以上结果表明，增加操作压力会降低流化床的传热能力，且操作压力大于临界压力时，传递性能将发生急剧恶化；但通过引入细颗粒能够显著提高临界压力，增强流化床的传热性能。此发现为在高压工况下优化流化床的传热性能提供了重要参考依据。

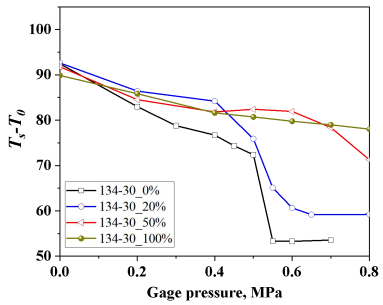


Fig. 1 流化床与环境的平均温差随随操作表压的变化

关键词：高压流化床；细颗粒；双分散；换热系数

参考文献

[1] Weimer A W, Quarderer G J. On dense phase voidage and bubble size in high pressure fluidized beds of fine powders[J]. AIChE journal, 1985, 31(6): 1019-1028.

[2] Cousins A, Zhuo Y, George A, et al. Development of a bench-scale high-pressure fluidized bed reactor and its sequential modification for studying diverse aspects of pyrolysis and gasification of coal and biomass[J]. Energy & fuels, 2008, 22(4): 2491-2503.

[3] Shabanian J, Chaouki J. Effects of temperature, pressure, and interparticle forces on the hydrodynamics of a gas-solid fluidized bed[J]. Chemical Engineering Journal, 2017, 313: 580-590.

[4] Lu F, Zhang C, Wang Y, et al. Phase coexistence in fluidization[J]. AIChE Journal, 2022, 68(2): e17530.

[5] Lu F, Zhang C, Wei F. Compressibility of granular fluids[J]. Physics of Fluids, 2022, 34(3).

[6] 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.

颗粒强化生物反应器助力精细化工企业扩容增产的应用性研究进展

邵媛媛[1,*],祝京旭[2,3]

[1] 诺丁汉大学卓越灯塔计划（宁波）创新研究院，宁波诺丁汉大学,中国 315100

[2] 化工与生物化工系，加拿大西安大略大学,加拿大 N6A 3K7

[3] 东方理工大学（暂名），中国 315200

摘要：

液固和气液固流化床的应用虽不及气固流化床普遍，但其在化学与生化、环境和制药过程中的应用潜力巨大也正不断发展。本报告将介绍一种液固、气液固流化床反应器——颗粒强化生物反应器（PEBR）近期在精细化工污水处理中的应用情况，以及结合工业应用经验发展的气泡诱导三相逆流化床（BIIFB）和气体驱动三相逆流化床（GDIFB）等新型流化系统和功能性颗粒载体的最新研发成果。与传统流化床系统相比，BIIFB和GDIFB均显示出更好的流化质量和更低的能耗，同时可补足传统流化床所不能实现的操作模式以满足不同的反应条件。可持续释放碳源的功能性颗粒载体研发不仅针对C/N失调工业尾水成功实现了快速脱氮而且可以进一步促进技术升级、降低整体工艺运行成本。颗粒强化生物反应器在精细化工污水处理中成功应用和深度研发成果不仅促进了液固和气液固流化技术的综合发展，而且为其进一步拓展工业应用领域提供了实践经验和理论依据。

关键词: PEBR，BIIFB, GDIFB, 功能性颗粒载体, 工业应用.

常温到 1600℃下气固流化床内鼓泡流态化向湍动流态化转变

张庆瑾[1,2]，付亮亮[1]，许光文[1]，白丁荣[1,*]

[1]沈阳化工大学资源化工与材料教育部重点实验室，辽宁 沈阳，110142

[2]沈阳工业大学材料科学与工程学院，辽宁 沈阳，110870

*Email: drbai@syuct.edu.cn

摘要：湍动流化床以其优良的传热、传质、高效等性能和规模化、连续操作的特点，在许多气固反应工业过程中得到成功应用。然而，目前关于湍动流态化的形成条件及其流动特性研究聚焦于常温和低于 1000 ℃ 的温度范围内，温度在 1000~1600 ℃的高温条件下的湍动流态化形成条件的研究仍处于空白，因而无法对高温气固流态化应用于高温材料合成和制备等方面的技术开发提供必要的支持。为此，本研究在常温到 1600 ℃的温度范围内，利用床层压力脉动测试和分析方法，系统的研究了鼓泡流态化向湍流流态化转变速度（U_c），探讨了包括温度、颗粒尺寸、静止床层高度以及测点位置等关键参数对流型转变的影响规律和机理。结果表明，在 600 ℃以下时，U_c 随温度升高而升高；在 600~1200 ℃的温度范围内 U_c 趋于稳定；当温度在 1200 ℃以上时，U_c 随温度升高而降低。进一步研究发现，以往文献中提出的 U_c 的经验公式不仅无法准确预测这一独特的 U_c 变化趋势，并且无法准确预测以往文献所报道的 U_c 实验数据。因此，我们基于文献和本研究的实验数据开发了新的 U_c 经验公式。上述研究成果对高温湍动流化床的基础研究提供了有力支持，并有助于推动其在工业应用方面的发展。

关键词：高温流化床；湍动流态化；转变速度；压力波动；颗粒间力

The Transition to Turbulent Fluidization in a Gas-Solid Fluidized Bed Operating from Ambient Temperature to 1600 ℃

Qingjin Zhang[1,2], Liangliang Fu[1], Guangwen Xu[1], Dingrong Bai[1,*]

[1]Laboratory on Resources Chemicals and Material of Ministry of Education, Shenyang University of Chemical Technology, Shenyang, 110142, China

[2]School of Materials Science and Engineering, Shenyang University of Technology, Shenyang, 110870, China

* drbai@syuct.edu.cn

Turbulent fluidized bed proves effective in industrial processes due to superior heat and mass transfer and chemical reaction performance. However, understanding the transition to turbulent fluidization remains limited, especially at temperatures exceeding 1000 ℃, making it challenging to develop high-temperature fluidized bed applications. This paper presents an experimental investigation on the turbulent fluidization onset velocity (U_c), measured in a 30 mm diameter bed using corundum particles with average diameters from 0.68 mm to 1.58 mm in temperatures from ambient to 1600 ℃. Experimental results reveal that U_c increases with temperature up to 600 ℃, stabilizes within the 600~1200 ℃ range, and then decreases above 1200 ℃, demonstrating the varying relative significance of hydrodynamic and interparticle forces at different temperatures. To help design and operate high-temperature applications of turbulent fluidization, we developed U_c correlations based on experimental data from both literature sources and this study, covering temperatures of up to 1600 ℃ and particles of Groups A to D.

Keywords: High-temperature fluidized beds. **Turbulent fluidization**. **Transition velocity**. **Pressure fluctuations**. **Interparticle forces**

流化床中柔性球柱状颗粒破碎 CFD-DEM 模拟

李瑞龙，库晓珂*

浙江大学航空航天学院，杭州市，310027

*Email: xiaokeku@zju.edu.cn

摘要：在流化床中，颗粒之间以及颗粒与壁面之间的碰撞会导致颗粒的破碎。本文耦合计算流体力学-离散元方法（CFD-DEM）和颗粒破碎模型，模拟研究了柔性球柱状颗粒在流化床中的破碎特性。重点探究了入口气体速度、颗粒尺寸、床层高度等条件的影响规律，颗粒破碎特性包括破碎颗粒的大小、破碎位置、破碎时间等。同时，对比了柔性颗粒与刚性颗粒破碎结果的差异，强调了柔性对颗粒破碎结果的影响特性。研究发现，该破碎模型能较好地模拟球柱状颗粒的破碎，并且随着入口气速的增加，颗粒破碎速度和破碎率也随之增加。

关键词：流化床；破碎；柔性；球柱状颗粒；CFD-DEM

纳米颗粒聚团流化床的双流体-群平衡模拟

张祖扬，刘道银*

[1] 东南大学能源热转换及其过程测控教育部重点实验室，江苏省南京市 210096

*Email: dyliu@seu.edu.cn

摘要：纳米颗粒通常是指粒径范围为1-100 nm的微小颗粒，由于微小的粒径和巨大的比表面积，纳米颗粒表现出优异的物理、化学、电磁和光学性能，在许多领域具有重要应用。流态化是一种高效的纳米颗粒分散、改性的工艺，纳米颗粒通常以多级聚团的形式流化，聚团由于相互碰撞和气流作用动态地破碎和重组，显著影响宏观流化行为。本研究基于双流体结合群平衡模型（TFM-PBM）对纳米颗粒聚团的流化进行了建模。采用TFM描述气固流动，同时在每个流体网格中求解群平衡方程计算局部聚团尺寸分布。根据聚团碰撞破碎-黏附特性，定义了临界黏附速度和临界破碎速度描述纳米颗粒的粘性。模拟得到的床层压降，膨胀比等特性和实验结果吻合较好。讨论了聚团临界黏附速度和临界速度比对流化行为的影响。在保持临界团聚速度不变的情况下，随着临界破碎速度比的增加，床层膨胀比降低，平均聚团尺寸增大，床层底部聚团的体积分数和直径增大。在保持临界速度比不变的情况下，随着临界速度的增加，床层膨胀比降低，平均聚团尺寸增大。进一步应用模型研究振动和搅拌等辅助流化手段对纳米颗粒聚团流化的影响。

关键词：纳米颗粒聚团流化；双流体模型；群平衡模型

Regulation characteristics and law of residence time distribution of polydisperse particles in numbered-up multiple-chamber fluidized bed reactors

Shuai Lu[1,2], Junwu Wang[1,3,4,*], Qingshan Zhu[1,2,3,*]

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

[2]School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100049, P. R. China

[3]Innovation Academy for Green Manufacture, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190, P. R. China

[4]College of Mechanical and Transportation Engineering, China University of Petroleum, Beijing 102249, PR China

* lushuai20@ipe.ac.cn

Fluidized beds are widely used in various fields of the industry due to the excellent gas-solid contacting efficiency and efficient mass and heat transfer performance[1-2]. However, how to simultaneously regulate the residence time of polydisperse particles and completely inhibit particle backmixing remains a challenge of fluidization technology. In this study, it is shown that adding elutriation pipes into multiple-chamber fluidized beds to strengthen particle elutriation and entrainment is an effective measure. Coarse-grained CFD-DEM simulation[3] results show that the addition of the elutriation pipe can completely inhibit the particle back-mixing between adjacent chambers, and the mean residence time (MRT) ratio of coarse and fine particles can be regulated to be larger than their diameter ratio. Furthermore, a study on the numbered-up multiple-chamber fluidized beds find that (i) the MRT ratio of coarse and fine particles can be larger than the 1.5th power of their diameter ratio with full suppression of particle back-mixing between adjacent chambers; (ii) the MRT of each size of particles is a linear function of chamber number, whereas the MRT ratio approaches an asymptotic value. The results are of guiding significance for improving the overall conversion rate of polydisperse particles.

Keywords: Fluidization; Discrete simulation; Elutriation; Mean residence time difference; Back-mixing

References

[1] Q. Zhu, H. Li, Z. Zou, Regulation of Particles Residence Time in GasSolids Fluidized Bed: Theory and Application, Chemical Industry Press, Beijing, 2020.

[2] Wang, J. Continuum theory for dense gas-solid flow: A state-of-the-art review. Chemical Engineering Science, 2020, 215, 115428.

[3] Lu, S.; Lan, B.; Xu, J.; Zhao, B.; Zou, Z.; Wang, J.; Li, H.; Zhu, Q. Optimization of multiple-chamber fluidized beds using coarse-grained CFD-DEM simulations: Regulation of solids back-mixing. Powder Technology. 2023, 428, 118886

太阳能旋流床吸热器内流动和传热特性研究

刘川铭，李安俊，朱子昂，朱丽云，王振波

（中国石油大学（华东） 新能源学院，山东青岛 266580）

Liuchuanming0118@163.com

摘要：吸热器是太阳能聚光热发电的关键部件，旋流床吸热器强化了床层与壁面的传热过程，具有更好的气固接触与颗粒混合特性，显著改善了流化质量，为获得吸热器内流动与传热特性的规律，建立了描述旋流床内气固两相流动和传热行为的欧拉-欧拉流动和传热模型，对有无旋流元件和不同截面速度和固气比为 1.77、106.55，1.51、104.19，1.24、106.55 的条件下进行研究，得到旋流床吸热器内固含率、颗粒轴向速度和颗粒温度的分布规律。结果表明：流化床和旋流床的固含率在空间上的分布呈现出环-核分布，颗粒的轴向速度在-0.5 至 1.5 米/秒的范围内变化，由于旋转作用，在旋流床中有更多的颗粒聚集在边壁，形成贴壁颗粒团，这导致气体对颗粒的曳力减小，在重力作用下颗粒出现返混现象，因此颗粒与热源的接触时间增加，使吸热过程更为平缓稳定，旋流床内颗粒的温度相比于流化床有显著提高。通过公式计算得出，增加旋流元件对传热效果有提升作用，与传统流化床相比，总体的传热系数提高了大约 80%。

关键词：太阳能粒子吸热器；流态化；气固两相流动；旋流强化；数值模拟

附图：

Simulations	*Um* (m/s)	Solid/gas ratio	Description
Trad	1.51	104.19	No swirling
Case 1	1.77	106.55	Swirling effect
Case 2	1.51	104.19	Swirling effect
Case 3	1.24	106.55	Swirling effect

Fig.1 saturated condition

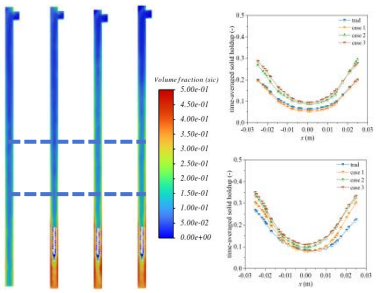


Fig.1 Time-averaged solid holdup

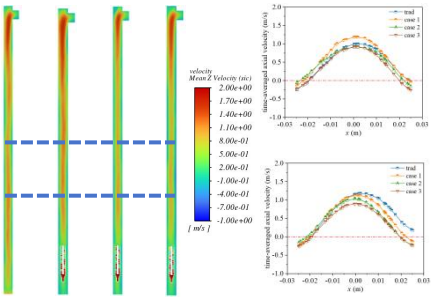


Fig.2 Time-averaged particle axial velocity

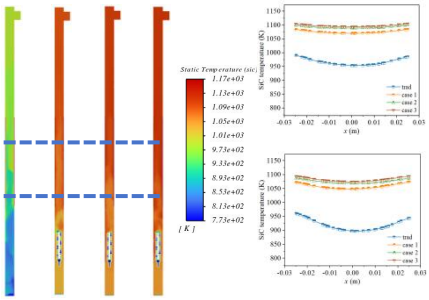


Fig.3 Temperature distribution of particles

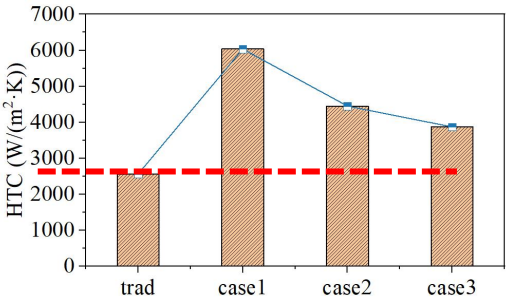


Fig.4 transfer coefficient

参考文献：

[1] 朱子昂,朱丽云,李安俊,等. 二次进气角度对流化床接收器中颗粒流动特性的影响 [J]. 热能动力工程, 2024, 39 (03): 150-157.

[2] BENOIT H,LOPEZ I P,GAUTHIER D,et al.On-sun demonstration of a 750 ℃ heat transfer fluid for concentrating solar systems:Dense particle suspension in tube[J]、Solar Energy、2015、118、622-633.

[3] 李永祺,常明,付金壮,等. 新型旋流-颗粒床耦合分离设备的三维气相流场分布 [J]. 石油炼制与化工, 2022, 53 (06): 84-92.

[4] 刘凤霞,韩震,于洋,等. 旋流强化换热器传热与流阻分析 [J]. 化工装备技术, 2024, 45 (01): 35-40.

基于受流场信息相关性约束的动态模态分解方法预测气固两相流

黎丹聃[1,2]，王军武[1,3,*]

[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

[3]中国石油大学(北京)机械与储运工程学院，北京，102249

▪ 邮箱：lidandan20@ipe.ac.cn

摘要：气固两相流广泛存在于自然界和化工过程中[1]。数据驱动方法在预测和模拟气固两相流方面具有快速、准确等优势[2,3]。本研究提出一种优化的受流场信息相关性约束的动态模态分解（dynamic mode decomposition with control，DMDc）方法，通过对输入的物理场信息进行数据结构的优化，从而实现对不同数量级的物理场信息长期且快速的预测。本研究将优化DMDc方法和传统DMDc方法的预测结果与CFD-DEM模拟结果对比得到结论如下：当预测的物理场的数量级远大于辅助预测的物理场的数量级时，例如借助固相分布特性预测压强分布特性，优化DMDc方法可以对气固鼓泡床内流动特性进行长期预测，而传统DMDc方法由于预测误差的快速累积则无法应用于长期预测；未来工作将进一步提升优化DMDc方法的预测精度。

关键词： 气固两相流；数据驱动；动态模态分解

参考文献

[1] Wang, J., Continuum theory for dense gas-solid flow: A state-of-the-art review. Chemical Engineering Science 2020, 215, 115428.

[2] Li, D., Zhao, B., Wang, J., Data-driven identification of coherent structures in gas–solid system using proper orthogonal decomposition and dynamic mode decomposition. Physics of Fluids 2023, 35(1), 013321.

[3] Li, D., Zhao, B., Lu, S., Wang, J., Physics-informed dynamic mode decomposition for short-term and long-term prediction of gas-solid flows. Chemical Engineering Science 2024, 289, 119849.

基于 K-means 方法识别下行床颗粒聚团特性

许世昌，孙俭，王成秀*，蓝兴英，高金森

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

*Email: cwang1277@cup.edu.cn

摘要：

气固循环流化床因具有气固间接触效果好、传质传热效率高等性质，在化工、冶金、能源等领域具有非常广泛的应用。典型的气固循环流化床根据气固流动方向的不同分为气固并流向上的提升管和气固并流向下的下行床。由于下行床具有气固顺重力场的流动特性，相比于提升管，展现出近平推流的气固流动特征，同时下行床具有气固接触时间短、气固轴向返混小、气固分布均匀等优点[1]，这也使其在以中间产物为目标产物的化工过程中展现出巨大的潜力。但下行床中颗粒并不是均匀分布的。受到强湍动作用的影响，颗粒在运动过程中会碰撞聚集，形成局部浓度较高的颗粒聚团。颗粒聚团内部颗粒的表面被外部颗粒覆盖，阻碍了气固相间的充分接触，进而影响床层内的传质传热[2]。

本研究采用高速摄像机记录了高 5 m 的二维循环流化床下行床内的流动行为。对距下行床入口 0.5 m 高度下的颗粒流场进行捕集，并利用 k-means 算法[3]对图像进行划分，实现了聚团的识别。通过分析聚团形貌特征对聚团进行分类，并基于对聚团固含率、聚团纵横比、聚团面积等聚团参数变化的分析，总结了颗粒聚团在下行床内的演变规律。

在下行床反应器中，聚团所受曳力方向与重力方向相反。在气体的曳力作用下，聚团会逐渐解离、形变直到达到能量损失相对较小的流线型结构。根据下行床内聚团的形态特点，我们主要将其划分为正 U 型和长链型两种，以长链型聚团为例，长链型聚团通常表现出“上稀下浓，上窄下宽”的特点，高纵横比的形态结构。这主要归因于气体曳力对聚团产生的轴向拉伸作用。Fig.1 展示了边壁区中长链型聚团发展与消散的固含率彩图以及提取出的聚团运动图像序列。在向下运动的过程中，长链型聚团的下半部分逐渐呈现出增宽和增浓的趋势，而上半部分则刚好相反，甚至在局部位置出现断裂。如 Fig.1b 所示，长链型聚团的面积变化相对平缓，在 9 ms 的时间内，聚团面积由初始的 1.54 cm^2 变为 1.22 cm^2，减少了约 20%。图中明显可以看出，聚团面积的缩小主要是由于聚团顶部区域的稀释与断裂。同时，聚团的底部在流动过程中也呈现出略微增宽的趋势。两种变化的叠加导致整个聚团的纵横比有所降低，从最初的 4.26 减小至 3.8。在这一过程中，聚团的平均固含率逐渐增大，这一变化主要是由于聚团顶部稀疏区域面积的减小以及底部对周围颗粒的吸收作用。

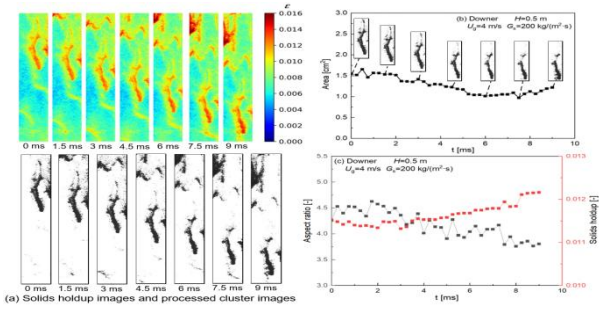


Fig. 1 Movement and development of long-chain clusters in downer

Fig.2 为下行床内聚团纵横比在横向上的分布情况。由图可知，在横向上，高纵横比的聚团主要集中在边壁区域。聚团平均纵横比的横向分布主要表现出两种不同的分布模式。一种为聚团平均纵横比在床层中心较低且变化相对平缓，而在靠近边壁附近显著增大；另一种为聚团平均纵横比在整个横向方向上表现出较为均匀的分布。分布模式的差异与床内的气固交互情况密切相关。以 G_s 为 100 kg/(m^2·s)的工况为例，当较低的气速 U_g 为 1-2 m/s 以及较高的气速 U_g 为 5-7 m/s 时，聚团的纵横比均在壁面附近出现了较为明显的增大。这是因为边壁对流动气体的摩擦作用，使得边壁附近的流体速度会相对较低，而床层内的颗粒会倾向于由高速区向低速区进行横向迁移，这导致了颗粒在壁

面上富集进而形成聚团。导致壁附近出现了大量依附在壁面上的长链聚团，故而壁面的纵横比相比中心区域明显增大。而当 U_g 为 3-4 m/s 时，各横向位置的聚团平均纵横比较为接近，这表明此时床层内的气固分布较为均匀，颗粒聚团的形态没有受到显著的局部因素影响。

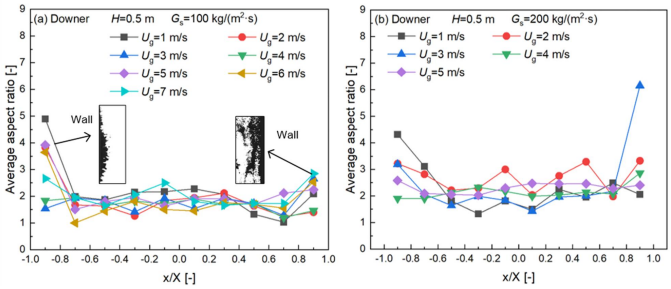


Fig. 2 Aspect ratio distribution of clusters in downer

总之，利用 k-means 方法对循环流化床下行床内聚团进行识别并对聚团在下行床内的运动与发展进行研究，研究发现下行床内聚团往往具有高于局部气速的垂直速度，因此，下行床内聚团受气体曳力影响明显。在下行床中聚团底部极易形成流线型轮廓，形态上主要以正 U 型与长链型为主。长链型聚团一般表现出“上稀下浓，上窄下宽”的结构，形貌为单一长拖尾，在向下运动的过程中，长链型聚团的上、下半部分宽度、浓度发生相反的变化，综合两种变化使得聚团面积减少、聚团横纵比略微降低，而固含率则有所增高，在横向分布上，受气速影响，颗粒会向边壁附近靠拢在边壁附近形成高纵横比的聚团，而当气速适中时，床层内的气固分布较为均匀，这种情况得到缓解。

关键词：下行床；颗粒聚团；高速摄像机；k-means算法

参考文献

[1] Zhu J X, Yu Z Q, Grace J R, Issangya A. Cocurrent downflow circulating fluidized-bed (Downer) reactors-A state of the art review [J]. Canadian Journal of Chemical Engineering, 1995, 73(5): 662-677.

[2] Cahyadi A, Anantharaman A, Yang S, et al. Review of cluster characteristics in circulating fluidized bed (CFB) risers[J]. Chemical Engineering Science, 2017, 158: 70-95.

[3] Wang C, Lan X, Sun Z, et al. Cluster Identification by ak-means Algorithm-Assisted Imaging Method in a Laboratory-Scale Circulating Fluidized Bed[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2021, 61(1): 942-956.

旋流强化环流耦合提升管内气固流动稳定性

焦雪燕，李玉梅，宋大山，王成秀*，蓝兴英，高金森

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

*Email: cwang1277@cup.edu.cn

摘要：

近年来，我国积极实施应对气候变化国家战略，提出了力争于 2030 年前达到峰值，争取 2060 年前实现碳中和的“双碳目标”。催化裂化是重要的石油炼制技术之一，研究表明，来自催化裂化装置的二氧化碳排放占直接排放的 40%左右[1]，并且催化裂化过程中催化剂的反应再生过程会产生大量含硫烟气，在 CO_2 捕集过程中，会腐蚀设备并使得催化剂中毒[2]，因此，工业烟气的深度脱硫技术对 CO_2 捕集至关重要。根据脱硫剂的干湿状态，烟气脱硫的方法可以分为干法[3]，半干法[4]和湿法[5]。半干法脱硫相比于湿法脱硫来说，没有污水废液的排放，相比于干法脱硫，脱硫的效率较高，可达到 90%左右。因此，半干法脱硫受到广泛关注，其中，循环流化床脱硫技术以设备占地面积小、投资费用低、传热传质效果好、能实现连续操作等的优点得到广泛应用。在循环流化床半干法烟气脱硫过程中，脱硫剂大多都是 CaO、$Ca(OH)_2$ 以及少量的粉煤灰组合而成，被称为脱硫灰颗粒。脱硫灰颗粒按照 Geldart 颗粒分类的原则，属于 C 类颗粒。C 类颗粒具备很多可利用的特征：表面积大、不连续表面多等，但其由于粒径小，颗粒间作用力增强，颗粒具有较强粘性，导致难以流化。因此，改善脱硫灰 C 类颗粒在循环流化床内的流动特性，对于循环流化床脱硫技术的广泛应用至关重要。

增强超细颗粒流化性能的手段主要有加入外场力[6]，添加流化助剂[7]等。但是加入外场力对设备要求较高，添加流化助剂可能会对后续产品分离造成影响。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，因此我们提出了环流耦合反应器，其在一定程度上对常规提升管反应器底部起到一定的增浓效果，但仍存在底部流化不完全的问题，需要进一步强化。常规流化床是在传统重力下进行流化，而旋转流化床的特点是在流化床中加入了离心力，又称离心流态化。旋转流化床分为动态旋转流化床与静态旋转流化床。旋转设备对操作条件和设备的复杂性要求都比较高，静态旋转流化床是利用切向进气口，使气体在反应器内产生气旋。静态旋转流化床较为容易操作和实现，因此，本研究采用旋流的方式强化环流耦合反应器流动。

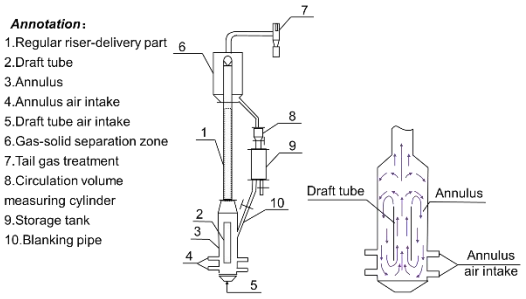
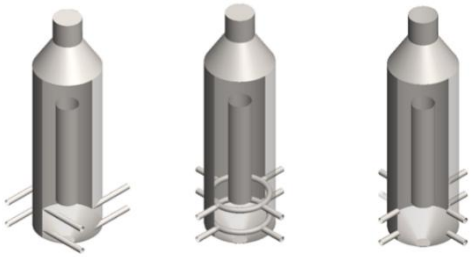


Fig.1 Schematic diagram of experimental setup for loop coupled reactor



(a) (b) (c)

Fig.2 Loop coupling reactor (a) swirling (b) coil (c) vertical air intake structure

如图 1 所示，该反应装置主要由环流段、扩径段、输送段、气固分离装置等组成，底部的环流段为强化超细颗粒流化起着非常重要的作用，基于对超细颗粒强化方式的调研，本研究最终选择旋流强化进气结构，并且与两种常见的常规进气结构-垂直进气及盘管进气进行对比，如图 2 所示。本研究选取的超细颗粒为脱硫灰颗粒，颗粒平均粒径为 10μm，颗粒密度为 1788kg/m^3。研究采用压力传感器获取反应器内不同轴向位置上的压力信号，采用 PV6M 型光纤探针测量局部颗粒固含率和速度，轴向上，在环流段设置 4 个测量点，分别为 z=0.1，0.2，0.3，0.4 m；径向上依据等面积法设置 8 个测量点，分别为 r/R=0，0.084，0.207，0.290，0.455，0.661，0.814，0.941。

稳定的环流流动机制是强化超细颗粒流化和探究超细颗粒在耦合反应器流动规律的前提。首先，需要建立该耦合反应器环流稳定流动的关键机制，探究旋流强化下的环流耦合反应器与常规环流反应器下环流形成的不同。环流根据形式可分为两种：中心气升式和环隙气升式。导流筒与环隙区的表观气速配比是形成中心气升式环流的关键，当导流筒区表观气速相对于环隙区过小时会使环流的方向发生改变甚至停止。本文的研究环境基于中心气升式环流反应器，因此探索中心气升式环流形成的气速配比条件是本研究的基础。

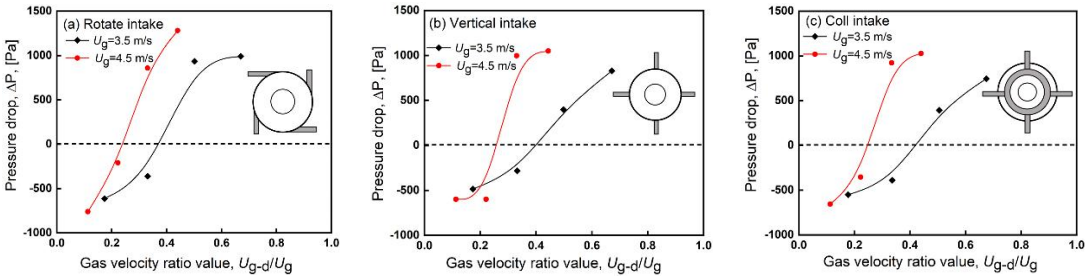


Fig.3 Variation of pressure difference between $U_{g\text{-}d}$ /U_g and bottom circulation section under different intake structures

为了确定不同进气结构下环流启动点的位置的差异，本研究利用无量纲数导流筒气速与提升管表观气速的比值 $U_{g\text{-}d}$/ U_g 与环流段底部压差的变化规律来比较。如图 3 所示，当 Δ P 等于 0 时，认为该点为中心气升式环流的启动点。从图 3 可以看出，在 U_g 为 4.5 m/s 的操作工况下，旋流强化下的启动点明显在垂直进气与盘管进气之前。在 U_g 为 3.5 m/s 的操作工况下，旋流的启动点的气速比为 0.240，而垂直进气为 0.259，盘管进气为 0.251，即使三种进气方式相差不大，但旋转进气启动点位于其余两种进气方式之前。因此，从以上两种工况的数据结果可以得出，在相同的提升管表观气速（U_g）下，旋流强化下中心气升式环流形成的启动点更靠前，操作弹性也更大。

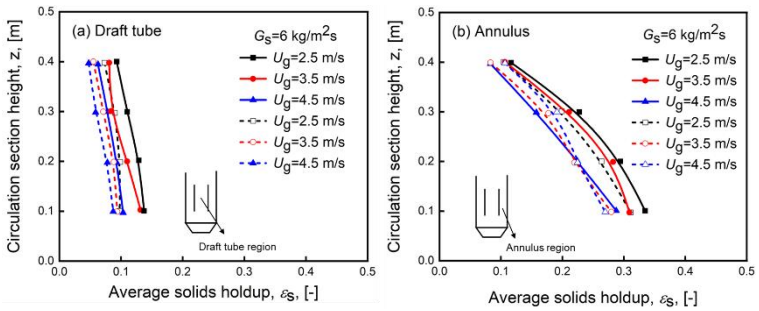


Fig.4 Axial solid holdup distribution of ultrafine particles under different operating conditions of rotate intake and vertical intake
(Note: dashed lines are vertical intake)

图 4 是超细颗粒在旋流强化与垂直进气在环流段的轴向固含率分布情况，从整体数据来看，旋流进气与垂直进气在环流段的固含率分布规律是一致的，即呈现出底部浓，随轴向高度升高逐渐降低的趋势。这说明旋流进气的强化方式并没有破坏环流耦合反应器内的基本流动规律。对比不同进气方式对超细颗粒流动的影响，从图中数据可知，不管是导流筒区还是环隙区，旋流进气下的固含率都大于垂直进气。这说明，虽然旋流进气没有破坏环流耦合反应器的基本流动规律，但是起到了增浓的效果。图 4（a）中的表观气速为 2.5 m/s 时，旋流进气下导流筒底部的颗粒固含率为 0.136，垂直进气下为 0.100，二者相差 0.036。旋流进气下导流筒顶部的颗粒固含率为 0.095，垂直进气下为 0.074，二者相差 0.021。图 4（b）中的表观气速为 3.5 m/s 时，旋流进气下环隙区底部的颗粒固含率为 0.310，垂直进气下为 0.278，二者相差 0.032。旋流进气下环隙区顶部的颗粒固含率为 0.103，垂直进气下为 0.083，二者相差 0.020。以上实验数据说明，在颗粒循环量相同的条件下，旋流进气对反应器内有增浓的效果，强化了超细颗粒在反应器内的流动，有助于超细颗粒在反应器内进行反应。

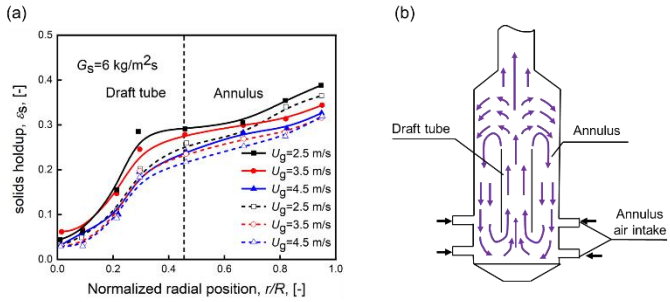


Fig. 5 Radial solid holdup distribution of ultrafine particles at different apparent gas velocities under rotate intake and vertical intake (Note: dashed lines are vertical intake)

图 5（a）展示了超细颗粒在不同表观气速下旋流进气与垂直进气下的径向固含率分布规律。从整体数据来看，两种进气方式的固含率径向分布规律是相似的，都呈现出中心稀边壁浓的分布规律。径向与轴向的固含率分布规律都说明旋流进气并没有破坏环流反应器中的流动规律。对比两种反应器的径向分布规律，同样可以看出，当循环量相同时，旋流进气强化下的颗粒固含率高于垂直进气下的颗粒固含率。以表观气速为 2.5 m/s 时为例，旋流进气下的中心处（r/R = 0）的颗粒固含率为 0.045，垂直进气下为 0.036，二者相差 0.009。旋流进气下的边壁处（r/R = 0.941）的颗粒固含率为 0.388，垂直进气下为 0.367，二者相差 0.021。如图 5（b）所示的旋流进气结构能够强化超细颗的流动，且对环流段起到了增浓的效果。

总之，本研究研究了超细颗粒在旋流强化下的环流耦合提升管内稳定环流流动机制，通过与其余两种常规进气方式进行对比，实验结果表明在相同的提升管表观气速下，超细颗粒在旋流强化下的环流耦合反应器中更容易形成中心气升式环流，较其余两种进气方式形成中心气升式环流的操作弹性更大。并且，将旋流强化进气与垂直进气下超细颗粒在环流段的颗粒固含率分布情况进行对比，两种进气方式下颗粒固含率的轴径向分布特性是相同的，这说

明旋流并未破坏环流反应器内的流动规律。但是旋流进气下的颗粒固含率较垂直进气大，这说明旋流进气强化了超细颗粒的流动，对反应器内颗粒起到了增浓的效果，有助于超细颗粒在反应器内进行反应。说明将旋流强化的方式应用到环流耦合反应器内是一种较为理想的气固流化手段。

关键词：烟气脱硫技术；超细颗粒；旋流进气结构；环流耦合反应器

参考文献

[1] 熊波, 陈健, 李克兵, 等. 工业排放气二氧化碳捕集与利用技术进展[J]. 低碳化学与化工, 2023, 48(01): 9-18.

[2] **Khoma M S, Vasyliv K B, Chuchman M R. Influence of the Hydrogen Sulfide Concentration on the Corrosion and Hydrogenation of Pipe Steels (A Survey) [J].** ***Materials Science*****, 2021, 57(3): 308-318.**

[3] **Matsushima N, Li Y, Nishioka M, et al. Novel dry-desulfurization process using Ca(OH)2 fly ash sorbent in a circulating fluidized bed [J].** ***Environmental Science & Technology*****, 2004, 38(24): 6867-6874.**

[4] **Zhou Y, Wang D, Zhang M. Study on Multiphase Flow and Mixing in Semidry Flue Gas Desulfurization with a Multifluid Alkaline Spray Generator Using Particle Image Velocimetry [J].** ***Industrial & Engineering Chemistry Research*****, 2009, 48(12): 5808-5815.**

[5] **Hansen B B, Kiil S. Investigation of Parameters Affecting Gypsum Dewatering Properties in a Wet Flue Gas Desulphurization Pilot Plant [J].** ***Industrial & Engineering Chemistry Research*****, 2012, 51(30): 10100-10107.**

[6] **Barletta D, Poletto M. Aggregation phenomena in fluidization of cohesive powders assisted by mechanical vibrations [J].** ***Powder Technology*****, 2012, 225: 93-100.**

[7] **Xu C C, Zhang H, Zhu J. IMPROVING FLOWABILITY OF COHESIVE PARTICLES BY PARTIAL COATING ON THE SURFACES [J].** ***Canadian Journal of Chemical Engineering*****, 2009, 87(3): 403-414.**

Filtration performance of a granular bed filter in a coupled separator

Ming Chang*, Yiping Fan, Chunxi Lu

State Key Laboratory of Heavy Oil Processing, College of Chemical Engineering and Environment, China University of Petroleum, Beijing, 102249, China

*changming0223@163.com

In this study, the filtration performance of the built-in granular bed in a cyclone-granular bed coupled separator is investigated. Cyclone is used to recover catalyst particles from the regenerated flue gas in the Fluid catalytic cracking by centrifugal force. While the granular bed captures fine dust particles smaller than 10 μm. Catalyst loss problem can be addressed by coupling different separation mechanisms in the coupled separator. To clarify the separation process, the necessity to elucidate the filtration performance is shown. The investigation has been performed for the velocity distribution, the bed dust deposition, and the filtration efficiency in the coupled separator under varying operating parameters. Experimental results indicate that the radial velocity component is a main influencing factor on the granular bed filtration efficiency. The outer-layer bed collector particles exhibit superior dust collection capabilities. Based on the intrusive dust sampling, a diagram is presented to clearly illustrate the primary mechanisms that govern dust movement in the bed. Furthermore, two parameters named by the local filtration efficiency (LFE) and the filtration efficiency across radius (FEAR) are proposed for analyzing the granular bed filter performance. The LFE exhibits a declining trend as the inlet air velocity increases. The dust size distribution analysis highlights the capacity of the bed to capture fine dust particles (<5 μm) which tended to accumulate at the inner layer. The FEAR, ranging from 91% to 97%, offers a comprehensive assessment of the coupled separator performance and structural optimization.

Keywords: Filtration performance; Coupled separator; Local filtration efficiency; Filtration efficiency across radius; Dust movement

References

[1] J. Heinrich, R. Slama, Fine particles, a major threat to children, Int. J. Hyg. Environ Health. 210 (2007) 617-622.
[2] C. H. Zheng, C. Kanaoka, Recent advances in dust collection technology and ISO standardization in bag filtration, J. Zhejiang Univ.-Sci. A. 19 (2018) 21-33.
[3] J. Lelieveld, The contribution of outdoor air pollution sources to premature mortality on a global scale, Nature. 525 (2015) 367-371.
[4] A. Hoffmann, L. Stein, Gas cyclones and swirl tubes: principles, design and operation, Applied Mechanics Reviews. 56 (2007) 59-77.
[5] X. Simon, Consequences of high transitory airflows generated by segmented pulse-jet cleaning of dust collector filter bags, Powder Technol. 201 (2010) 37-48.
[6] S. J. Park, Effects of a shroud tube on flow field and particle behavior inside a bag-filter vessel, Aerosol Sci. Tech. 37 (2003) 685-693,
[7] J. Song, G. Sun, Z. Chao, Y. Wei, M. Shi, Gas flow behavior and residence time distribution in an FCC disengager vessel with different coupling configurations between two-stage separators, Powder Technology. 201 (2010) 258-265.
[8] M. Chang, D. Lu, S. Gao, et al., Effects of the swirl space ratio on the performance of a coupling cyclone with a built-in granular bed filter: an experimental examination, Industrial & Engineering Chemistry Research. 60 (2020) 571-582.
[9] M. Chang, Y. Fan, J. Fu, A model for predicting the separation performance of a coupling cyclone with a built-in granular bed filter, Powder Technology. 399 (2022) 116941.

低阻高效旋流耦合快分分离特性研究

吕文浩[1]，袁炳昊[1]，卢春喜[1,*]，李乐妍[1]，南睿[1]

[1]中国石油大学（北京），北京，102249

* Email: lcxing@cup.edu.cn

摘要：

石油化学工业是我国的支柱产业，丙烯作为重要的石油化工产品之一，在国民经济中占有十分重要的地位，也是衡量一个国家经济发展水平的重要标志。随着全球能源多元化的发展，丙烯工艺路线也在不断革新。在目前急需增产丙烯的环境下，丙烷脱氢技术越来越受到重视[1]。提升管末端的出口快分系统要求气体与催化剂快速分离，防止发生不必要的反应[2]。本文通过一套模拟了实际工业上的提升管-沉降器-再生器系统的大型冷模装置，对比考察低喷出速度下带有折边形隔流筒的旋流快分系统和旋流惯性相耦合的新型快分系统的性能。在该实验装置上对比考察了两种快分结构的压降，分离效率和粒级效率随喷出气速、颗粒循环强度及细粉含量改变的变化规律，确定了最优的工作条件。以优化设计出更加适应于丙烷脱氢工艺的气固分离设备，同时改善提升管出口旋流快分系统[3]的分离性能，分析出催化剂破碎对新型 V^{+}QS 旋流快分系统分离性能的影响规律，提高其对细粉的分离能力，为旋流快分系统的进一步优化及工程设计提供基础数据。

关键词：低喷出速度；新型 V^{+}QS 旋流快分；高效率；低压降

参考文献：

[1] 陈浩, 詹小燕, 郭振宇. 丙烷脱氢工艺发展趋势分析[J]. 炼油技术与工程，2020, 50(11):9-13.

[2] 黄世平, 鄂承林, 王婷, 环流预汽提组合旋流快分系统分离性能的实验研究[J]. 过程工程学报，2016,16(01):41-47.

[3] 卢春喜, 蔡智, 时铭显. 催化裂化提升管出口旋流式快分(VQS)系统的实验研究与工业应用[J]. 石油学报(石油加工)，2004(03):24-29.

大差异混合颗粒流动与传热特性研究

宋雨珍[1]，周燏[1]，姚秀颖[1]，卢春喜[1*]

中国石油大学（北京），中国 北京，102249

*Email：lcxing@cup.edu.cn

摘要：

为了减少油品过剩，同时兼顾多产低碳烯烃的需求，对催化裂化装置工艺改进，结构优化势在必行。中国石油大学提出了多反应系统高效耦合流化催化反应新技术，拟开发出一种组合重油催化裂化与烃类催化裂解制烯烃的方法与装置[1]，可使需要补热的分子筛催化剂和需要移走热量的 FCC 催化剂在其中直接混合换热，从而有效利用重油催化裂化再生过程产生的过剩热量，解决低碳烃类催化裂解制烯烃热量不足的问题。针对这种新工艺中存在的热量不平衡现象，加装外取热器是一种有效维持整套催化裂化装置热平衡、利用自身过剩热量、保持装置平稳运行的手段。根据新工艺的要求，需要两种粒径差异较大的双组分颗粒在再生器与外取热器中充分混合换热。因此理解双组分大差异混合颗粒在外取热器中的流动和传热特性对外取热器的开发有着重要意义。

目前对于混合颗粒在流化床中的流动特性已有了不少的研究[2,3]，但是大差异双组分混合颗粒的传热特性研究较少。因此本实验以工业中常用的密相流化床外取热器作为实验主体，以不同比例的混合颗粒为研究对象，通过壳程静压分布、压力脉动分析和颗粒速度浓度分布对设备内部混合颗粒的流场进行深入研究，通过床层温度、换热表面温度及水温的分布对设备内部的换热过程进行研究，考察操作条件对于混合颗粒的换热影响，进一步耦合设备内的混合颗粒的流动与传热特性，找到混合颗粒流动与换热互相表征的联系，为进一步换热强化和工程应用提供参考。

关键词：流化床；混合颗粒；换热强化；压力脉动

参考文献

[1] 卢春喜, 金伟星, 鄂承林, 等. 一种双组分颗粒催化剂耦合流化床催化裂化的方法及装置: 中国专利, CN114262624B[P]. 2022.

[2] **STEFANOVA A. Heat transfer near the transition to turbulent fluidization[Z]. University of British Columbia, 2009.**

[3] **RICE R W, BRAINOVICH JR J F. Mixing/segregation in two‐and three‐dimensional fluidized beds: Binary systems of equidensity spherical particles[J]. AIChE journal, 1986,32(1): 7-16.**

旋流-颗粒床耦合分离器尾气循环分离特性研究

李欣磊，卢春喜*，卢春喜

中国石油大学(北京)重质油国家重点实验室，北京 102249

1021594521@qq.com

随着我国经济的快速发展和综合国力的提升，工业尾气和颗粒混合物排放量剧增，如冶金、水泥、煤矿、石油化工等行业，主要污染物包括高浓度粉尘颗粒物、部分硫氧化物、氮氧化物等有害物质[1]。为降低尾气主要污染物排放，先后出现诸多尾气处理技术，但仅靠单一的净化设备无法实现尾气高效净化，因此，亟待发展高效低能耗的气体净化新技术。本文对一种将旋风分离器与颗粒床过滤器耦合为一体的新型气固分离装备开展实验研究。首先利用旋风分离器的旋流离心分离作用对粒径较大的粉尘颗粒状进行脱除，再利用移动床对 10 μm 以下颗粒物进行拦截过滤。为了避免耦合装备压降持续升高，现有的提升管-喷动床再生结构利用带出速度的差异实现循环再生，但同时会导致 10 μm 以下的微细粉尘随喷动气流带出。通常情况下采用滤袋等对少了再生尾气携带的粉尘进行收集，这样有带来了少量二次尾气的再处理问题。此外，提升管-喷动再生系统中输运气体也会随粉尘颗粒排放到大气中。因此有必要对再生尾气循环处理，利用耦合分离器对尾气进行二次净化，实现过程清洁化的目标。以耦合分离装置为基础，将喷动再生尾气重新引入耦合分离器，通过大型冷模实验，对比分析尾气循环对分离性能、压降变化和分离效率的影响，明确尾气循环利用对耦合分离器系统自主高效运行的积极作用，为工程应用提供参考。

关键词：气固分离；耦合分离器；尾气循环

参考文献：

[1] 杨彦红. 化工生产过程中的尾气处理技术研究分析[J]. 皮革制作与环保科技, 2022, 3(9): 16-18.

[2] 高思鸿, 张丹丹, 范怡平, 等. 气体干法净化旋流吸附耦合设备压降特性[J]. 化工学报, 2018, 69(5): 1873-1883.

填料结构流化床流动及传递特性研究

南睿[1]，郑紫雨[2]，吕文浩，卢春喜[1,*]，闫子涵，范怡平

[1]中国石油大学（北京），北京市昌平区， 102249

*Email:lcxing@cup.cn

摘要：

目前国内外已报道的流化床反应器强化内构件主要有水平构件、垂直构件以及复合构件三类形式。流化床中安装内构件有利于气泡破碎提高气固接触效率，内构件的加入还可以有效抑制流化床中的气固返混行为；以往因 FCC 工艺中原料以及副产物由较多重质烃分子组成[1]，且其较容易在流化床-提升管反应器中产生结焦，汽提段不能采用较为复杂的结构，而 PDH 反应工艺中结焦量较少的反应环境更适合于采用挡板/填料结构的新型强化复合内构件。

常见的水平构件形式有多孔板、单旋或多旋导向内构件等，这类构件一般适于在气速较低的流化床中使用，当气速超过一定程度后，水平构件下方会出现大量仅含少量颗粒的“气垫”。“气垫”的出现会显著降低流化床的空间利用率，对传热和传质会产生不利影响。

垂直构件一般为垂直设置的管束、翅片管和平板等。采用垂直构件的流化床虽然不会出现“气垫”，但是有时会出现粘附在垂直构件上的“气节”，“气节”对传热传质多是不利的。另外，与水平构件相比，垂直构件对传质的改善以及对返混的抑制能力相对较差。

本研究的目的是为了提供一种可适用于更宽操作域、更方便制作以及安装、改造的新型结构的复合内构件，以在维持高效气固传质效率、低气固相返混率的基础上，使内构件可适用于更高的操作气速和颗粒质量流率，增加内构件的操作适用范围。

本研究采用光纤测量、压力采集以及气体示踪的方法[2-4]，考察填料式汽提器的气固流体流动特性和汽提效率等，这些结果可以直接反映所开发的复合内构汽提性能，将其与已发明的其他类型汽提器的性能进行对比，形成复合内构件的结构优化方案和设计放大方法。

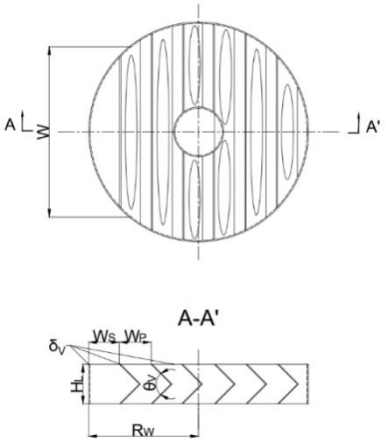


Fig. 1 New composite internal components

关键词：丙烷脱氢；汽提；复合内构件

参考文献

[1] GIDASPOW D. Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions [M]. San Diego, California, USA: Academic Press, 1994.

[2] 张永民，卢春喜，时铭显．催化剂汽提器内气固传质特性的研究[J]．高校化学工程学报，2004，18(4):409-413.

[3] SENEGAS M A, PATUREAX T, SELEM P, et al. Process and apparatus for stripping fluidized solids and use thereof in a fluid cracking process: US, 5716585 A[P]. 1998.

[4] 张永民,卢春喜,时铭显.湍动流化床中气泡行为和压力脉动特性的研究[J].石油学报(石油加工),2008,(03):263-268.

小粒径催化剂密相床流化性能模拟

刘顺[1]，黄新俊[1]，彭威[1,*]，梁金强[1]

[1] 中国石油大学（北京）克拉玛依校区，新疆克拉玛依，834000

*Email: pengwei@cupk.edu.cn

摘要：小粒径催化剂比表面积大，孔道浅，可加速重油油气在催化剂孔道中的扩散，提高催化裂化反应速率[1]，改善装置产品分布，增大反应液体收率。但是小粒径催化剂的细粉含量高，催化剂带出速度较小，容易发生跑损[2-4]。在工业应用前需要调整催化剂物性参数或优化催化剂颗粒粒度分布，以保证催化剂正常流化，同时降低催化剂跑损量[5-7]。本文使用 CPFD 方法研究不同平均粒径（50-70 μm）的催化剂在某 1 Mt/a FCC 装置再生 器二密相床层内的流化，考察粒度分布、颗粒密度与细粉含量对二密相床层高度与轴向颗粒浓度分布的影响规律。模拟模型如图 1 所示，模型为再生器侧沉降段，由稀相管、T 型快分、再生立管、循环立管、稀相空间组 成。结果表明，将催化剂平均颗粒粒径从 70 μm 降低至 50 μm，二密相床层高度下降 0.6 m，旋风分离器入口浓度从 4 kg/m³ 升高至 6 kg/m³，即小粒径催化剂易发生跑损；若固定催化剂平均粒径，将催化剂颗粒密度从 1250 kg/m³ 增大至 1500 kg/m³ 后，二密相床层高度可提高 1.6 m，但旋风分离器入口颗粒浓度基本不变，即调整催化剂颗粒密度无法改善催化剂跑损；若固定催化剂平均粒径为 50 μm，通过调整催化剂粒度分布切除平衡剂中 30 μm 以下细粉，二密相床层高度可以提高 0.7 m，旋风分离器入口浓度降至 3.7 kg/m³，降幅 38.3%，即平衡剂中 30 μm 以下细粉容易在再生器测跑损，切除细粉可有效降低小粒径催化剂的跑损量。

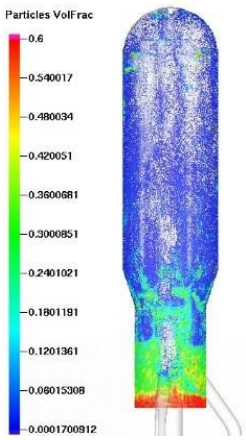


Fig. 1 Particle concentration in second dense phase bed

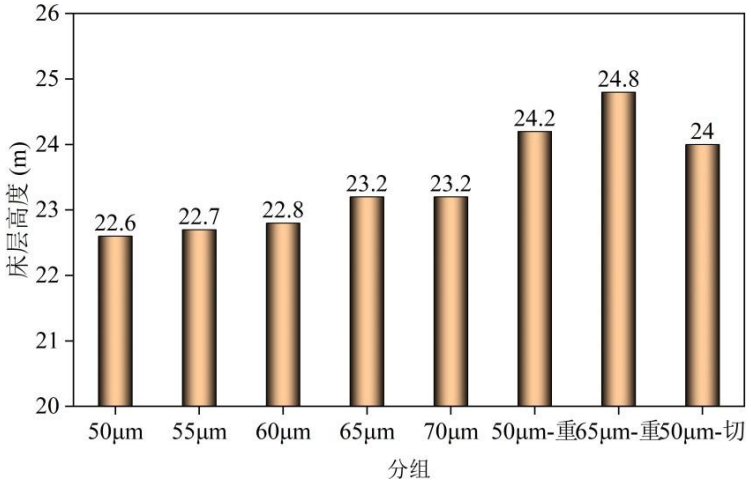


Fig. 2 Height of the second dense phase bed for different catalysts

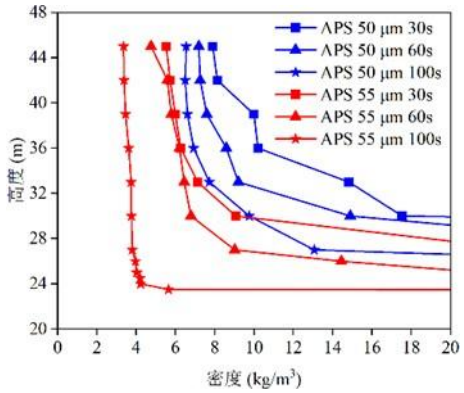


Fig. 3 Regenerator axial particle concentration distribution before and after particle cutting

关键词：小粒径催化剂；平均粒径；浓度；床层高度；细粉

参考文献

[1] 王文久. 催化裂化工艺技术优化分析[J]. 石化技术, 2023, 30(10): 80-82.

[2] 魏飞, 金涌, 俞芷青. 减小颗粒尺寸对流化床中两相流动行为的影响[J]. 化工冶金, 1998(01): 38-43.

[3] 王长青, 王垚, 金涌, 等. 平均粒径对气-固流态化特性的影响[J]. 化工学报, 1999(03): 367-372.

[4] 魏耀东, 刘仁桓, 时铭显. 催化裂化装置跑损催化剂颗粒粒度分布的测量和讨论[J]. 石油化工设备技术, 2004, (06): 1-4.

[5] 曾涛, 漆小波, 黄卫星, 等. 方形气固密相床中局部颗粒浓度分布的实验研究[J]. 高校化学工程学报, 2010, 24(05): 783-788.

[6] 付月, 徐祥, 雷福林, 等. 密相输运床中试装置气固流动特性的数值模拟[J]. 化学工程, 2018, 46(12): 74-78.

[7] 杨赛飞, 张永民, 付明义, 等. 催化裂化管式待生剂分配器颗粒分配特性及内部流动特性的 CPFD 模拟[J]. 石油学报(石油加工), 2020, 36(03): 600-608.

微气流辅助震动颗粒分选过程及分选机制的研究

韩雨芹，卢春喜*，
中国石油大学(北京)重质油国家重点实验室，北京 102249
1179455482@qq.com

从十八世纪六十年代第一次工业革命以来，全球能源事业消耗量日益增加，随之而来的粉尘环境污染问题也逐渐凸显。为有效脱除能源废气当中的有毒有害杂质[1]，尤其是固体颗粒，使排放到大气当中的气体达到环保排放标准，中国石油大学（北京）卢春喜团队研发出了新型气固分离设备，即旋流-颗粒床耦合分离装置，通过利用多种分离机制实现协同强化分离。为保证旋流-颗粒床耦合分离装置能够长期稳定运行，内置颗粒床层中的捕集颗粒以“捕集-再生-再捕集”的方式实现循环利用。现有的提升管-喷动床再生结构利用带出速度的差异实现循环再生，但是存在能耗高，捕集颗粒磨损破碎，分级效率低，操作弹性小等问题，仍需要进一步优化和改进。本文基于旋流-颗粒床耦合分离装置，搭建了一套新型的筛分装置[2]。利用微气流的辅助震动作用实现捕集颗粒与被捕获粉尘的分离，达到捕集颗粒再生的目的。本研究以玻璃珠为捕集颗粒，催化裂化催化剂为模拟粉尘，主要考察在不同的操作条件下（入口含尘浓度、入口气速、表观气速、捕集颗粒循环量等），颗粒分选过程的流动状态，并分析操作参数对再生效率、流动特性的影响，为进一步的结构优化和工程设计提供参考。

关键词：气固分离；筛分；再生

参考文献：

[1] 王涛. 烟气净化技术与早日实现碳中和[C]. 第二十一届中国科学家论坛论文集. 2023: 507-517.

[2] 卢道铭, 范怡平, 卢春喜. 颗粒空气分级技术研究进展[J]. 中国粉体技术, 2020, 26(6): 11-24.

一种考虑粒化温度的多项质点网格法固相应力模型

罗博[1]，余亚雄[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@mail.xjtu.edu.cn

摘要：流态化技术因其物料输送能力高、传热传质性能强等优点[1]，被广泛应用于能源、化工及食品加工等工业领域，如用于固废处理的内循环流化床锅炉、催化裂化流化床反应器、食品加工领域的流化床干燥及冷冻器等。流化床内气固两相流的流体动力学行为对反应器内的动量传递、质量传递、热量传递和化工反应过程（称“三传一反”）有着决定性的影响。目前，对气固流化床内颗粒的数值模拟主要采用的方法有欧拉-欧拉和欧拉-拉格朗日两种方法。多项质点网格法（MP-PIC）为粗颗粒离散方法的一种，用连续介质模型求解流体的控制方程，将许多物理性质相同的颗粒打包成一个计算粒子[2]，仅对计算粒子进行追踪，不再求解计算粒子间的颗粒碰撞，而是采用固相应力来模拟颗粒之间的碰撞效果[3-4]，从而提高计算效率。现有的固相应力模型存在参数的选择具有一定的经验性[5]、需要对参数进行大量的试错计算[6] 、计算结果存在误差等不足。固相应力模型用于实现颗粒间的碰撞效果，是MP-PIC方法的重要子模型，因此对于固相应力模型的修正具有重大意义。

本文基于MP-PIC方法，采用不同固相应力模型对气固流化床内颗粒流动特性进行了数值模拟。将MP-PIC模拟结果与CFD-DEM的模拟结果进行对比，结果表明MP-PIC方法在现有的固相应力模型下无法准确地预测气固流化床内颗粒流动特性；基于理论分析，建立了新的包含粒化温度、空隙率的固相应力模型，发现新模型可有效提高MP-PIC方法预测气固流化床内颗粒流化特性的准确性。

关键词：气固两相流；流态化；多项质点网格法；固相应力模型

参考文献

[1] **FAN L-S, ZHU C. Principles of Gas-Solid Flows [M]. Cambridge University Press 1998.**

[2] **Snider D M. An incompressible three-dimensional multiphase particle-in-cell model for dense particle flows[J]. Journal of Computational Physics, 2001, 170(2): 523-549.**

[3] **ABDREWS M J, O`ROURKE P J, The multiphase particle-in-cell (MP-PIC) method for dense particulate flows[J]. International Journal of Multiphase Flow, 1996, 22(2): 379-402.**

[4] **Snider D M, O`ROURKE P J, ANDREWS M. An incompressible two-dimensional multiphase particle-in-cell model for dense particle flows[R]. New Mexico: Los Alamos National Lab, 1997.**

[5] **AUZERAUS F M, JCACKSON R, RUSSEL W B. The resolution of shocks and the effects of compressible sediments in transient setting[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1988, 195: 437-462.**

[6] **KADYROV T, LI F, WANG W. Impacts of solid stress model on MP-PIC simulation of a CFD riser with EMMS drag[J]. Powder Technology, 2019, 354: 517-528.**

高速射流对下行床反应器内流动特性的影响

武立宁[1]，闫子涵[1,*]，霍德玺[1]

[1]中国石油大学（北京）重质油国家重点实验室，北京，102249

*Email: yzh@cup.edu.cn

摘要：

下行床反应器内气固两相流动方向相同，具有气固轴向返混小、停留时间分布窄以及颗粒浓度径向分布均匀等优点。但因顺重力场流动，床层内颗粒流化密度较低。反应器内为实现反应物与催化剂颗粒的均匀接触，原料以高速射流形式引入。本研究为探索下行床内射流与颗粒在不同接触形式下气固两相接触效果，同时分析不同射流速度对截面颗粒浓度的影响。研究发现，射流与颗粒逆流接触时装置内颗粒浓度受射流影响较小且径向分布均匀。

关键词：下行床，气固两相流，射流

虚拟质量力对液固散式流态化动力学特性的影响

祝赫，齐娜娜，张锴*

华北电力大学热电生产过程污染物监测与控制北京市重点实验室，北京，102206

*Email: kzhang@ncepu.edu.cn

液固散式流态化中颗粒在流体中分散均匀，颗粒与流体之间通过相间作用力实现动量的交换与传递，尽管曳力是最主要的作用力[1,2]，但是开停车以及工况变化会需要考虑虚拟质量力的影响。随着计算机科学飞速发展，基于流体动力学原理的 CFD（Computational Fluid Dynamics）方法已成为流态化研究的重要工具，其中基于欧拉-欧拉框架的双流体模型（Two-fluid Model, TFM）因具有剖析大型装置内复杂多相流动特征的显著优势而被广泛关注[3]。Brandani 和 Zhang[4]提出的简化双流体模型在液固流态化的模拟过程中彰显出了较好的预测结果[5,6]，但是该模型忽略了虚拟质量力的影响。因此，在 Brandani 和 Zhang 简化双流体模型[4]中引入虚拟质量力，开展液固流化床 CFD 模拟，考察虚拟质量力在不同床层状态下对流化特性和动态特性的影响机制。图 1-3 结果表明在表观液速突然减小的收缩过程中，虚拟质量力的影响可忽略不计；而在表观液速突然增大的膨胀过程中，随着膨胀进行床内呈现不规则的扰动，其原因是高浓度区底部颗粒不断脱落到低浓度区。

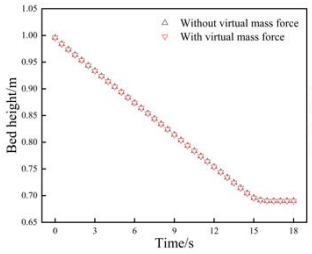


Fig. 1 Bed height variation in contraction process

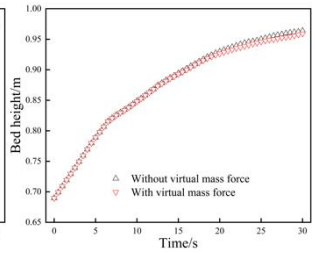
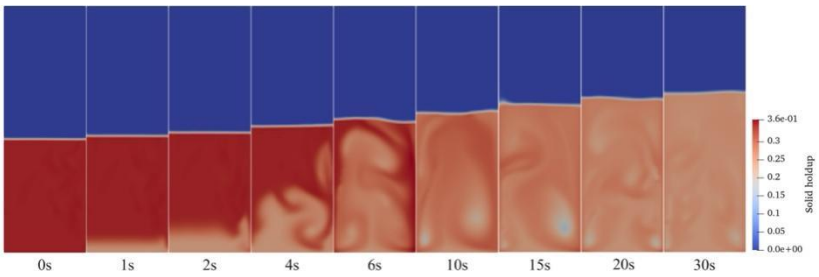
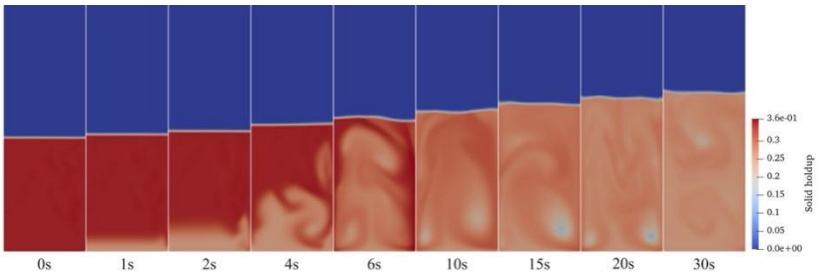


Fig. 2 Bed height variation in expansion process



(a) Without virtual mass force



(b) With virtual mass force

Fig. 3 Contour maps of solid holdup variation with time in expansion process

关键词：液固两相流；双流体模型；流体动力学；虚拟质量力

参考文献

[1] Gidaspow D. Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions[M]. Boston: Academic Press, 1994.

[2] Wang J. Continuum theory for dense gas-solid flow: A state-of-the-art review[J]. Chemical Engineering Science, 2020, 215: 115428.

[3] 李静海, 欧阳洁, 高士秋, 等. 颗粒流体复杂系统的多尺度模拟[M]. 北京: 科学出版社, 2005.

[4] Brandani S, Zhang K. A new model for the prediction of the behaviour of fluidized beds[J]. Powder Technology, 2006, 163(1-2): 80-87.

[5] Zhang K, Guan Y, Yao X, et al. Two- and three-dimensional computational studies of liquid–solid fluidization[J]. Powder Technology, 2013, 235: 180-191.

[6] 祝赫, 张仪, 齐娜娜, 等. 欧拉-欧拉双流体模型中颗粒黏性对液固散式流态化的影响[J]. 化工学报, DOI: 10.11949/04381157.20240347

利用压力信号和高速图像分析对二维振动流化床中团聚体动力学的研究

张亮，陆海峰*，刘海峰，郭晓镭

摘要：颗粒系统在类固态和类流态之间的过渡是由密度和应力状态的变化驱动的。在这方面，已证明机械振动在驱动颗粒系统相变时可降低非约束屈服应力和内聚力，从而实现有效的颗粒流化。在本研究中，首先对微纳米氧化铝粉末的物理和流动特性进行了表征。在 Mohr 和 Rumpf 方程的基础上建立了粒子间作用力的预测模型，以分析不同粒子系统之间复杂的粒子相互作用。利用图像处理和信号分析方法研究了二维振动床中团聚体的动态特性，以及振动能量激发团聚体在振动流化状态下运动和变形的机理。分析了粉末物理性质和振动参数（频率、振幅等）对颗粒流化的影响。

关键词：振动流态化，团聚体，颗粒间作用力，压力信号

Investigations on dynamics of agglomerates in a 2D vibrated fluidized bed using pressure signal and high-speed image analysis

Liang Zhang, Haifeng Lu*, Xiaolei Guo, Haifeng Liu

Shanghai Engineering Research Center of Coal Gasification, East China University of Science and Technology, P. O. Box 272, Shanghai 200237, PR China

Abstract: The transition of particle systems between solid-like and fluid-like regimes is driven by changes in density and in applied states. In this respect, mechanical vibrations in drive the unjamming transition have been proved to reduce the unconfined yield stress and cohesion, thus achieving effective particle fluidization. In the present work, the physical and flow properties of Micro-nano alumina powders were first characterized. A predictive model of inter-particle forces has been developed upon the Mohr's Circle and the Rumpf equation to analyze the complex particle interactions between different particle systems. We investigated the dynamic characteristics of agglomerates in a 2D vibrated bed and the mechanism under which the vibration energy excites the agglomerates motion and deformation in the vibration fluidization state using digital image processing and signal analysis. The effect of powder physical properties and vibration parameters (frequency, amplitude, etc.) on particle fluidization was analyzed.

Keywords: vibrational fluidization, agglomerates, interparticle forces, pressure signals

导流板对喷雾流化床内颗粒涂层生长过程影响模拟研究

邓爱明[1,2,3]，唐天琪[1,2,3]，何玉荣[1,2,3,*]

[1]哈尔滨工业大学能源科学与工程学院，哈尔滨市 150001

[2]黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室，哈尔滨市 150001

[3]哈工大郑州研究院，郑州市 450000

*Email: rong@hit.edu.cn

颗粒产品诸如肥料、催化剂、药品等在化学、能源转换和储存、制药等领域中发挥重要作用，其中80%以上的工业原料和70%左右的工业成品及中间产品都是以颗粒形态存在的[1]。流化床造粒由于其良好的反应器性能，能高效地实现颗粒的包覆和团聚，是应用最广泛的颗粒产品开发技术之一[2]。然而，流化床中的颗粒生长过程涉及到液滴喷入和蒸发、液滴沉积和颗粒表面液体蒸发并固化等一系列复杂的气液固三相相互作用的气液固三相相互作用，进而难以实现造粒过程的精确控制[3]。因此，开展喷雾流化床内颗粒生长过程中热质传递特性的研究，对于优化流化床操作及产品质量控制具有重要的工程意义。

针对喷雾流化床内颗粒涂层生长过程，研究者们开展了大量的实验和模拟研究。研究者通过采用高摄像系统[4]、红外热像仪[5]等监测床内颗粒流态分布、温度分布及涂层效率[6]。然而，由于喷雾流化床内颗粒涂层生长过程涉及到复杂的气液固三相相互作用。通过实验方法难以准确量化这些过程。随着计算能力的提高，数值模拟方法逐渐成为填补实验测量空白的重要手段。Madlmeir等人[7]采用CFD-DEM对颗粒涂层过程进行了模拟研究，通过对多组分喷雾液体的蒸发和喷雾干燥损失的量化，分析了气体流量、进气温度和喷雾速度对干燥性能的影响。Sutkar等人[8]采用CFD-DEM模型耦合传热传质模型研究了喷雾流化床内颗粒涂层生长过程。对比分析了导流板结构对于颗粒涂层过程的影响。尽管有关喷雾流化床内颗粒生长过程的研究逐渐引起了重视，然而由于喷雾过程的复杂性，目前的研究对于该过程的描述进行了大量简化，对于该过程的热质传递特性及颗粒生长机制仍有待进一步深入的研究。

本研究基于CFD-DEM模型发展了适用于描述喷雾流化床内颗粒涂层生长过程的“气体-液滴-颗粒”数学模型。将液滴看作离散颗粒，考虑了液相与气相的相互作用和液滴的蒸发；当液滴与颗粒发生碰撞时，假设液滴均匀包覆在颗粒表面，建立了颗粒涂层生长模型；采用液桥力模型描述液体的加入对于颗粒流动特性的影响，同时根据液体在颗粒表面的沉积和颗粒表面的蒸发更新颗粒表面液体量。并基于该模型开展导流板对于喷雾流化床中颗粒流动行为及热质传递特性影响研究，分析颗粒流动及热质传递过程对于颗粒生长均匀性的影响。

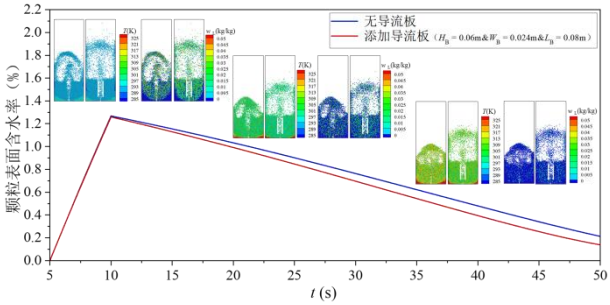


Fig. 1 Distribution of moisture content on the surface of particles varies with time

关键词：喷雾流化床；颗粒涂层生长；离散单元模型；热质传递特性

参考文献

[1] **C A M da Silva, J J Butzge, M Nitz, et al. Monitoring and control of coating and granulation processes in fluidized beds–A review[J]. *Advanced Powder Technology*, 2014, 25(1): 195-210.**

[2] **B Wang, X Sun, J Xiang, et al. A critical review on granulation of pharmaceuticals and excipients: Principle, analysis and typical applications[J]. *Powder Technology*, 2022, 401: 117329.**

[3] **S Y Pan, J L Ma, D Y Liu, et al. Theoretical and experimental insight into the homogeneous expansion of wet particles in a**

fluidized bed[J]. *Powder Technology*, 2022, 397: 117016

[4] **T Kolkman, M van Sint Annaland, J A M Kuipers. Whole-field imaging of temperature and hydrodynamics in a gas fluidized bed with liquid injection[J]. *Chemical Engineering Science*, 2017, 168: 23-40.**

[5] **E Milacic, M N Manzano, S Madanikashani, et al. Liquid injection in a fluidized bed: Temperature uniformity[J]. *Chemical Engineering Science*, 2022, 256: 117622.**

[6] **M Foroughi-Dahr, R Sotudeh-Gharebagh, N Mostoufi. Development of a PAT tool for monitoring the Wurster coater performance[J]. *International Journal of Pharmaceutics*, 2019, 561: 171-186.**

[7] **S Madlmeir, T Forgber, M Trogrlic, et al. Quantifying the coating yield by modeling heat and mass transfer in a Wurster fluidized bed coater[J]. *Chemical Engineering Science*, 2022, 252: 117505.**

[8] **V S Sutkar, N G Deen, A V Patil, et al. CFD–DEM model for coupled heat and mass transfer in a spout fluidized bed with liquid injection[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2016, 288: 185-197.**

Partial gasification kinetic and thermodynamic parameters of lignite in atmospheres with different O_2 concentrations using TG analysis

Bin Zhang, Qinhui Wang* (*: Corresponding Author)

State Key Laboratory of Clean Energy Utilization, Zhejiang University, Hangzhou, China, 310027.

*Email address: qhwang@zju.edu.cn

Abstract: In this study, non-isothermal gasification experiments of lignite (SC) at different O_2 concentrations were carried out using thermogravimetric analysis to analyze the effects of heating rate and O_2 concentration on the partial gasification kinetics and thermodynamic properties of SC. The Flynn-Wall-Ozawa (FWO), Kissinger-Akahira-Sunose (KAS), Coats-Redfern (CR) and integral master-plots method were used to determine the kinetic and thermodynamic parameters of SC gasification. The results indicated that SC gasification proceeded in three distinct stages. With increasing heating rate and O_2 concentration, the characteristic temperatures of SC gasification shifted to higher and lower temperatures respectively and the gasification rate increased. At an O_2 flow rate of 1.5 ml/min, the average activation energies for SC gasification calculated using the CR (n=1), FWO and KAS methods were 79.99 KJ/mol, 177.95 KJ/mol, and 173.84 KJ/mol, respectively. At an O_2 flow rate of 3 ml/min, the corresponding values were 76.81 KJ/mol, 128.28 KJ/mol, and 126.81 KJ/mol. The partial gasification mechanism function of SC was determined as $f(\alpha)=(1-\alpha)^n$, with the (n) being 2.7 and 2 at O_2 flow rates of 1.5 ml/min and 3 ml/min, respectively. The kinetic exponent was 1 in the CR method, resulting in lower calculated activation energies than the other two methods. Thermodynamically, the gasification process was endothermic in both atmospheres, with positive values for ΔH and ΔG. The ΔS was negative at an O_2 flow rate of 1.5 ml/min and positive at an O_2 flow rate of 3 ml/min, likely due to the increased oxygen content intensifying the gasification reaction.

Keywords: Coal partial gasification; Kinetic analysis; Thermodynamic analysis; Iso-conversional methods; Master-plots method

旋流快速热解器中气固传热过程优化

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，山西省太原市迎泽西大街 79 号，030024

2 中北大学，山西省太原市学院路 3 号，030051

*Email: xghao@tyut.edu.cn

摘要： 在“碳达峰”和“碳中和”的目标下，低碳能源清洁高效利用技术亟待探索。煤炭资源在我国一次能源消耗占比超过50%，其中随着优质煤种的快速消耗，低阶煤的高效利用日益引起关注[1]。低阶煤具有能量密度低、水分和挥发性含量高的特点，直接燃烧利用效率低。众多研究表明，以热解为先导的多联产技术制取高附加值化学品更加适合低阶煤清洁高效利用[2]。煤颗粒的快速升温可以提高热解反应中轻质液体和气态焦油的产率，并在一定程度上改善焦油的质量。为了提高煤颗粒在旋流快速热解器中的升温速率，本文采用CFD-DEM方法系统地研究了排气管插入深度（30、45、60 和 90 mm）对气固传热过程的影响。研究结果表明，延长排气管插入深度可将煤颗粒的升温速率提高约21.6 %。通过研究气固之间的流动特性发现，传热过程增强的根本原因是随着排气管插入深度的增加导致了湍动剧烈区的延长，强化了气固的对流传热过程，从而提高了煤颗粒的升温速率。排气管插入深度的延长能够改善旋流快速热解器中的流动过程并减小能量消耗。此外，随着排气管插入深度的延长，载气消耗节约了30.0 %，这有利于后续气体产物的分离和降低运行过程中的能耗。

关键词： 低阶煤；旋流快速热解器；CFD-DEM；传热过程

参考文献

[1] H. Lian, N. Zhang, X. Pan, et al., Simulation of heat transfer in a downer-type pyrolyzer with binary particles by considering carrying gas role in the coal heating process. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2024, 63(4): 2011-2020.

[2] X. Pan, H. Lian, N. Zhang, et al., Simulation of the coal pyrolysis process in downer reactor with a mass transfer model based on the spatial superposition assumption. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2023, 172: 106010.

基于卷积神经网络的过滤曳力模型开发及应用验证

李卓涵[1,2]，成有为[1,2,*]

[1]浙江大学化学工程与生物工程学院，浙江省杭州市，310058

[2]浙江大学生物质化工教育部重点实验室，浙江省杭州市，310058

*Email: ywcheng@zju.edu.cn

摘要正文：

气固流化床的粗网格尺度计算流体力学模拟的准确性很大程度上受使用的介尺度曳力的影响。传统显式曳力模型准确性受到颗粒类型、颗粒形状及操作条件等因素的影响，模型复杂且适用范围受限；卷积神经网络不仅能够考虑介尺度结构影响，还可利用周围流场信息，将宏观状态参数影响并入模型中。本研究在高网格分辨率细网格模拟流场中获得海量准确流场数据，并基于相关流场过滤标记对神经网络模型进行训练回归。使用开源包Pytorch训练神经网络模型，并于开源软件MFiX中耦合Libtorch库，运用训练好的神经网络模型进行流化床装置的粗网格模拟。从固含率、床层压降等方面对比了卷积神经网络与全连接神经网络及传统显式曳力模型的预测效果，并将模拟数据与流化床装置试验数据对比。结果表明，卷积神经网络的预测效果较优，相较于全连接神经网络能够进一步提升预测性能。本研究构建的卷积神经网络模型有助于进一步推进介尺度曳力模型在工业化方面的应用。

关键词：卷积神经网络；过滤曳力模型；气固多相流；MFiX

PCM结晶监测系统在新能源（锂电）行业的应用简介

唐远旺[1]

[1]北京海菲尔格科技有限公司，北京，100022

*thomas.tang@hiferg.com

新能源汽车的蓬勃发展带动锂电产业进入前所未有的大发展机遇期。随着需求的升温，无论是技术的快速创新，还是应用的迅速落地，锂电产业全链条展开了多技术路线、多应用模式、多组合方式的快速发展与探索。

在“双碳”愿景的推动之下，未来中国动力电池市场仍将出现快速增长，锂电相关产业对经济发展的提振效应会进一步释放。六氟磷酸锂、双氟磺酰亚胺锂、碳酸乙烯酯等的结晶过程中的成核、控温、搅拌等工艺参数的不同对产品的粒度分布、堆积密度、溶解速率等都具有重大影响，进而影响产品的应用范围、成本控制、能耗评估、出售价格等。PCM 结晶监测系统能够实现对六氟磷酸锂、双氟磺酰亚胺锂、碳酸乙烯酯等的结晶过程的实时监控并可根据监控结果实时调整过程工艺。PCM 可以实时记录结晶过程中的颗粒图像并实时分析晶体的颗粒度，同时给出晶体颗粒数量、晶体径长比、晶体生长速率等数据。不管是研发规格的还是工业规格的 PCM 结晶监测系统，都避免了取样后进行离线测试的不便和误差，可以真实反映结晶过程中晶体的变化情况，包括晶核形成、晶核数量、晶体生长、二次成核监控、过程颗粒度监控等。PCM 结晶监测系统已经成为获得高质量晶体产品、快速实现定制指定颗粒度晶体产品的有效手段。

Fig 1. Process Crystallization Monitoring in R&D

Fig 2. Process Crystallization Monitoring in pipeline

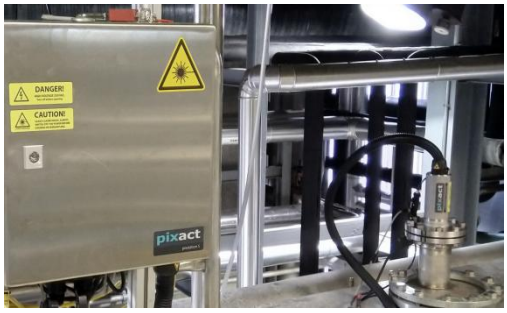


Fig 3. Process Crystallization Monitoring in large crystallizer

关键词：结晶监测；六氟磷酸锂；双氟磺酰亚胺锂；碳酸乙烯酯；晶体颗粒度

基于正交试验和灰色关联分析评价热解和燃烧条件对高钠煤钠、氯释放及炭产率的影响

田治华，王勤辉*（*：通讯作者）

能源高效清洁利用全国重点实验室, 浙江大学, 杭州, 中国, 310027.

*Email: qhwang@zju.edu.cn

摘要：本研究旨在研究高钠煤资源的高效清洁利用，重点研究热解和燃烧过程中钠(Na)和氯(Cl)释放引起的沉积和腐蚀问题。采用正交试验与灰色关联分析相结合的方法，研究了热解温度、煤粒度、气体流速、热解气氛对炭产率及Na、Cl释放量的影响。结果表明，对热解结果的影响程度依次为热解温度、热解气氛、气体流速、煤粒度。确定了最佳热解条件为:温度800℃，煤粒度范围0.075～0.150 mm，气体流速12 L/h，甲烷(CH_4)气氛。在此条件下，炭产率为64.51%，Na和Cl的释放率分别为28.34%和92.20%。在燃烧实验中，方差分析表明，O_2/N_2比的影响最显著，其次是燃烧温度，气体流速和煤粒度的影响较小。最佳燃烧条件为温度1000℃，煤粒度范围0.30～0.45 mm，气体流速6 L/h，O_2/N_2比1.0。在此条件下，灰分碳含量为0.81%，Na和Cl的释放率分别为75.10%和96.77%。本研究全面了解了高钠煤在热解和燃烧过程中的行为，优化了热利用工艺，为提高高钠煤资源的高效利用提供了理论基础。

关键词：高钠煤，热利用，Na和Cl迁移，正交试验，灰色关联分析

Investigation of the Effects of Pyrolysis and Combustion Conditions on sodium and chlorine Release and Char Yield in High-Sodium Coal

Zhihua Tian, Qinhui Wang* (*: Corresponding Author)

State Key Laboratory of Clean Energy Utilization, Zhejiang University, Hangzhou, China, 310027.

*Email: qhwang@zju.edu.cn

Abstract: This study addresses the efficient and clean utilization of high-sodium coal resources, focusing on mitigating deposition and corrosion issues caused by the release of sodium (Na) and chlorine (Cl) during pyrolysis and combustion. Orthogonal experiments combined with grey relational analysis were employed to investigate the effects of pyrolysis temperature, coal particle size, gas flow rate, and pyrolysis atmosphere on the yield of char and the release of Na and Cl. The results indicate that the order of influence on these outcomes is pyrolysis temperature, pyrolysis atmosphere, gas flow rate, and coal particle size. Optimal pyrolysis conditions were determined to be a temperature of 800 ℃, a coal particle size range of 0.075–0.150 mm, a gas flow rate of 12 L/h, and a methane (CH_4) atmosphere. Under these conditions, the char yield was 64.51%, with Na and Cl release rates of 28.34% and 92.20%, respectively. In the combustion experiments, variance analysis revealed that the O_2/N_2 ratio had the most significant impact, followed by combustion temperature, with gas flow rate and coal particle size being less influential. The optimal combustion conditions were identified as a temperature of 1000 ℃, a coal particle size range of 0.30–0.45 mm, a gas flow rate of 6 L/h, and an O_2/N_2 ratio of 1.0. These conditions resulted in an ash carbon content of 0.81% and Na and Cl release rates of 75.10% and 96.77%, respectively. This study provides a comprehensive understanding of the behavior of high-sodium coal during pyrolysis and combustion, optimizing the thermal utilization process and offering a theoretical foundation for improving the efficient use of high-sodium coal resources.

Keywords: high-sodium coal, thermal utilization, Na and Cl migration, orthogonal experiments, grey relational analysis.

高密度提升管和下行床聚团轴向分布特性

姜冬雪[1]，宋大山[1]，王成秀[1*]，蓝兴英[1]，高金森[1]，叶茂[2]，祝京旭[3]

[1]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

[2]低碳催化与工程研究部，中国科学院大连化学物理研究所，大连市中山路 457 号，116023

[3]颗粒技术研究中心，加拿大西安大略大学，加拿大安大略省伦敦市区，N6A 5B8

*Email: cwang1277@cup.edu.cn

摘要：

随着国内成品油消费量的稳定，减油增化已成为未来炼化行业发展的主要方向，将石油转化为高辛烷值液体燃料同时生产丙烯等丰富的化工原料的催化裂解过程是实现减油增化的重要途径。高密度循环流化床(HDCFB)的气固流动状态更接近于平推流，是较为理想的催化裂解反应器形式。高密度提升管内较高的颗粒浓度、较少的轴向返混以及较强烈的气固湍动保证了气固之间良好的混合和接触，有利于提高反应器内化学反应效率。但提升管内存在颗粒分布不均匀和催化剂颗粒容易发生聚集产生滑落和返混等缺点，在高苛刻度下操作无法满足生产需求。下行床反应器凭借轴径向分布均匀、停留时间分布窄的优点，成为一种具有广泛应用前景的循环床反应器。然而，下行床反应器内颗粒浓度很低，充分发展段内颗粒浓度仅能达到提升管的 25 - 40%，造成反应器处理效率下降，阻碍其在工业领域的应用。由于目前对高密度提升管和下行床宏观流动的研究已经取得了较多的成果，但对于聚团的研究还比较薄弱，所以有必要对 HDCFB 的提升管和下行床的聚团特性进行研究，本文主要研究的是 HDCFB 的提升管和下行床的聚团轴向分布，对于流化床的设计、大型化和运行都有着重要意义。

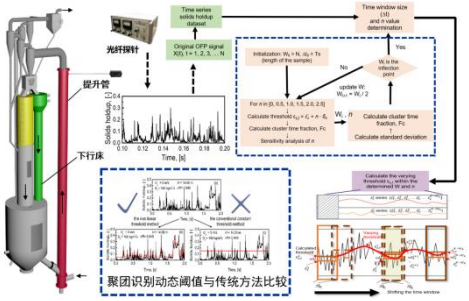


Fig. 1 Experimental setup and time-varying threshold determination method

实验装置和时变阈值确定方法如图 1 所示。其中，循环流化床提升管高 18 m，下行床高 7.6 m，内径均为 80 mm，装置主要包括提升管、气固分离系统、下行床和储料罐等。提升管中设立了 14 个轴向测量点。三维提升管中表观气速(U_g)分布在为 5、9 m/s，颗粒循环速率(G_s)范围在 100 ~ 1800 kg/(m^{2}s)之间。下行床中则设立了 10 个轴向测量点。下行床中表观气速(U_g)分布在为 1 ~ 5 m/s，颗粒循环速率(G_s)范围在 100 ~ 1100 kg/(m^{2}s)之间。流动特性实验中的 FCC 平衡剂的平均粒径为 85 μm，堆积密度为 970 kg/m^3，颗粒密度为 1500 kg/m^3。采用聚团固含率、聚团频率、聚团速度和聚团尺寸对颗粒聚团进行表征，得到了高密度操作下提升管和下行床聚团的轴向分布特性。

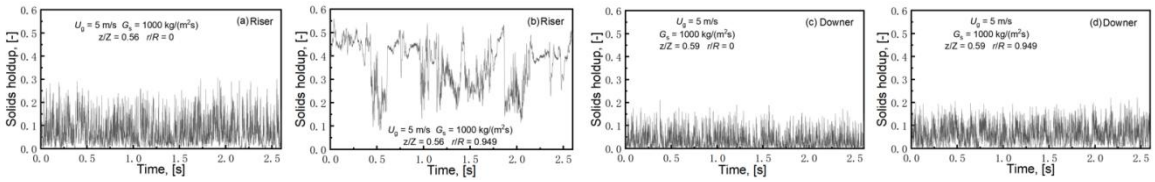


Fig. 2 Comparison of transient solids holdup in the downer and riser

图 2 对比了相同操作条件下，下行床和提升管充分发展段中心区和边壁区的瞬时颗粒浓度。不难看出，当操作条件和测量位置一定时，提升管中有着更高的颗粒浓度和更剧烈的颗粒浓度波动。下行床和提升管中颗粒浓度信号的最大差别在于提升管边壁区域的瞬时颗粒浓度存在长时间的高浓峰，而下行床中高浓峰的持续时间较短，基本与中心区域差别不大。这表明提升管中颗粒团聚的倾向更为严重，聚团在提升管中的存在时间更长。提升管

和下行床中聚团分布特性存在差异，因此，有必要对二者的聚团分布特性进行系统研究。

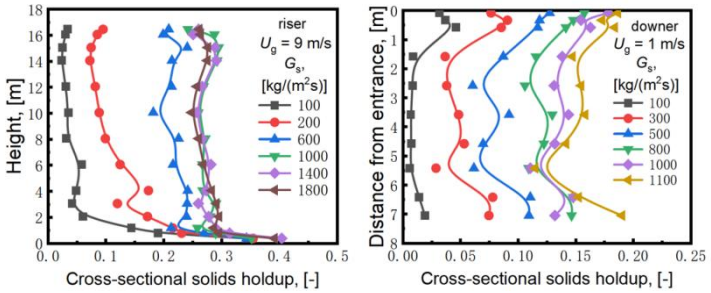


Fig. 3 Distribution characteristics of cluster solids holdup under different Gs of riser and downer

图 3 为提升管和下行床不同 G_s 下聚团相固含率的分布特性。从图 3 可以看出，提升管底部的聚团相固含率较高，随轴向位置增加固含率降低。随着 G_s 的增加，各轴向位置的截面平均聚团固含率增加。在达到高密度操作后继续增加 G_s，各轴向位置处的聚团固含率变化不明显甚至有所降低。下行床中，聚团固含率随轴向位置增加而降低，在 z = 2.58~5.42 m 的范围内，聚团固含率几乎不发生变化，保持在 0.008 左右。随着 G_s 的增加，各轴向位置处的聚团固含率增加。

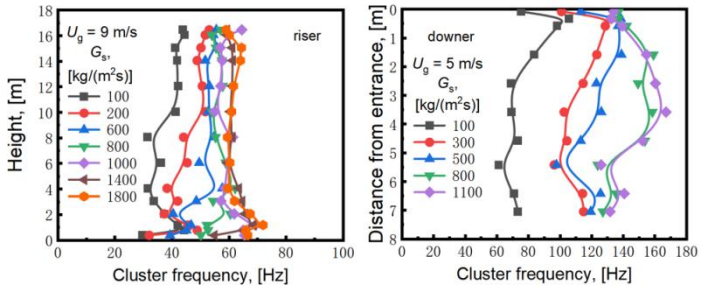


Fig. 4 Distribution characteristics of cluster frequency under different Gs of riser and downer

图4为提升管和下行床不同G_s下聚团频率的分布特性。从图4可以看出，聚团频率随轴向高度增加逐渐增大并保持稳定，当G_s = 100 kg/(m²s)时，提升管底部(z = 0.38 m)的聚团频率仅为29.6 Hz，而在充分发展段(z = 14.06 m)的聚团频率增加到了41.8 Hz。下行床中，随着G_s的增加，截面平均聚团频率呈增加的趋势。而在G_s = 800 ~ 1100 kg/(m²s)的操作条件下，充分发展段聚团频率较高，而入口段和出口段聚团频率较低。

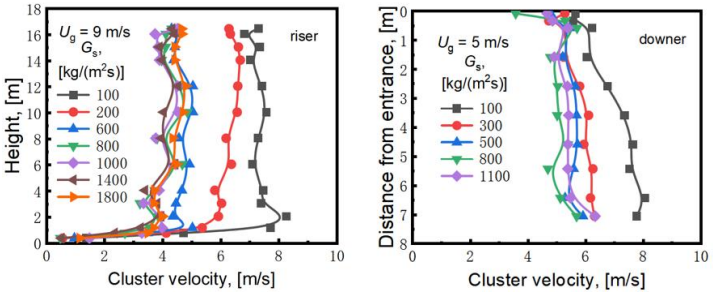


Fig. 5 Distribution characteristics of cluster velocity under different Gs of riser and downer

图5为提升管和下行床不同G_s下聚团速度的分布特性。从图5可以看出，在提升管底部(z = 0.38 m)的聚团速度仅为1.36 m/s，随着轴向位置增加，聚团速度逐渐增加并在提升管上部变化不大，且聚团速度随G_s的增加而减慢。下行床中，聚团速度在下行床入口处较慢，随着流动逐渐发展，聚团速度逐渐增加最后保持稳定。

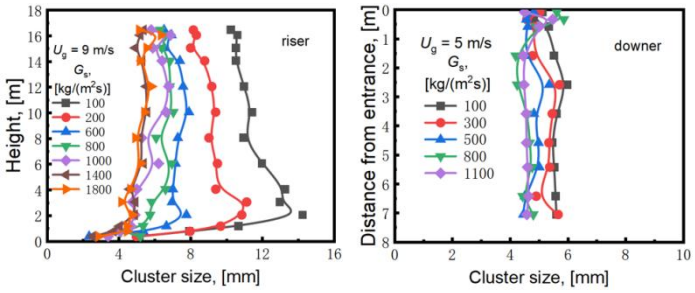


Fig. 6 Distribution characteristics of cluster size under different Gs of riser and downer

图 6 为提升管和下行床不同 G_s 下聚团尺寸的分布特性。从图 6 可以看出，提升管底部聚团尺寸更小而顶部的聚团尺寸更大，各轴向位置处的聚团尺寸随 G_s 的增加呈降低趋势。下行床中，聚团尺寸在入口段较大，随着距离入口的距离增加，聚团尺寸逐渐减小并保持稳定，高密度操作条件下聚团尺寸更小。

总之，在高密度提升管和下行床中，聚团特性参数在轴向上有着更为均匀的分布。在提升管和下行床中，随着 G_s 的增加，充分发展段的截面平均聚团固含率均增加，聚团尺寸均减小，聚团频率均增加。但提升管中的聚团速度减慢，下行床中聚团速度先随 G_s 的增加而降低，在达到高密度操作条件后继续增加 G_s，聚团速度有所增加。

关键词：提升管；下行床；聚团轴向分布特性

第 4 分会场：过程工程中的介科学与人工智能

人工智能在分子和过程同步设计中的应用

廖祖维 [1]

[1] 浙江大学

*Email: liaozw@zju.edu.cn

摘要正文：针对石油烃裂解过程引发剂筛选问题，开发了复杂反应动力学分析框架，构建了机理建模结合过程模拟的自动化解决方案，生成了引发剂的构效关系数据库，探究了引发剂调控裂解产物分布的作用机理。并通过数据驱动的方法，使用机器学习建立了引发剂的结构-性质预测模型，实现对引发剂分子结构的高通量筛选和生成自由基种类的准确预测。

报告人简介：中国系统工程学会过程系统工程专业委员会委员、中国化工学会信息技术应用专业委员会委员、《Chinese Journal of Chemical Engineering》、《Scientific Reports》期刊编委。研究领域过程系统工程。发表SCI论文200余篇，获授权发明专利30余项，主持国家基金3项、国家国际科技合作项目1项。获2016年国家技术发明二等奖（5/6）、2016年教育部技术发明一等奖（5/6）、石油和化学工业联合会科技进步一等奖（2020，2/15；2023,1/15）、首届石化行业专利优秀奖（2/12）。2020年获侯德榜化工科技青年奖，2021年获陈家镛论文奖，2019年入选美国化学会Industrial & Engineering Chemistry Research期刊评选的全球Class of Influential Researchers。

人工智能驱动的新材料研发：从数字化平台，到智能化创新

杨小渝 [1]

[1] 中国科学院计算机网络信息中心

*Email: kxy@cnic.cn

摘要正文：计算、数据、AI的融合，可有效地加快新材料研发。然而无论是材料计算还是机器学习，通过传统命令行操作的方式效率低、易出错，难以适应大规模数据处理和新材料智能研发的需求。为了应对这些困难，我们需要材料数据和计算基础设施，并在此基础上通过人工智能进行新材料的研发。本报告讲述如何通过MatCloud和MatFusion 构建新材料研发的数据基础设施，并在此基础上通过集成式材料数据机器学习与配方工艺优化AlphaMat, 以及材云大模型MatCloudGPT，进行新材料研发。以生物基聚氨酯分子设计为例，通过高通量材料计算和集成式材料数据机器学习，构建了相关聚氨酯分子结构数据库，并在不到2个月的时间内，找到两种具备潜在应用价值的新型生物基聚氨酯材料。实验合成及性能验证表明，这些材料的性能与预测结果高度吻合，将传统方法6个月时间缩短至2个月，效率提升了约70%。

本报告将详细介绍如何通过MatCloud、MatFusion、AlphaMat及MatCloudGPT搭建新材料研发的数字化平台，实现从数据基础设施到智能创新的完整解决方案，并展示其在新材料研发中的实际应用。

关键词：高通量计算；集成式材料数据机器学习；材料集成计算；AI驱动的新材料研发

报告人简介：杨小渝，博士，英国剑桥大学博士后，现为中国科学院计算机网络信息中心“百人计划”研究员，博士生导师，中国科学院大学岗位教授，英国雷丁大学访问教授。主要从事高通量材料集成计算、人工智能、多尺度模拟计算、材料数据库、材料信息学等研究。研发了我国首个高通量多尺度材料集成设计工业软件及平台MatCloud，并实现了成果转化。回国后主持或参与了国家发改委、国家自然科学基金、“十三五”国家重点研发计划“材料基因工程专项”、北京市自然科学基金、云南“稀贵金属材料基因工程”等项目和课题。发表学术论文50余篇，并著有3部英文学术著作。2010年获香港特别行政区“香港优秀人才入境”人才计划。2012年放弃赴港，直接归国。

人工智能锂键化学推动能源存储材料高质量发展

张强[1]

[1]清华大学

*Email: zhang-qiang@mails.tsinghua.edu.cn

摘要正文：我国提出力争2030年前二氧化碳排放达到峰值，努力争取2060年前实现碳中和。电化学能源是构筑太阳能-电能-氢能/动力/热能系统的新途径。发展基于锂离子的锂电池技术是电化学领域的长期关注的目标。采用理论与实验相结合的方法，系统地研究了多硫化物与氮掺杂碳材料之间形成的锂键的几何结构、键能、电荷分布、偶极等性质，提出锂键是一种偶极－偶极相互作用，并通过理论和实验核磁表征指认复杂体系中锂键的形成过程。锂键主要用于解释多硫化物与正极宿主材料之间的相互作用，但锂键的概念可以被广泛应用锂电池研究的各个方面，也为锂电池的机理研究提供了一种新的视角。本报告将锂键的概念引入到锂电池的研究中，并基于多硫化物与正极宿主材料相互作用的体系，系统地研究了锂键的几何结构、电子结构、键能、偶极等性质。希望锂键的概念在锂电池研究中取得更大的应用，因此将这一概念引申到电解液、锂金属负极等体系。基础原理上的新认识会更加清晰的认识自然界的本质，能够助力基于锂的化学电源探索和开发。

参考文献：

[1] Chen, X.; Bai, Y.-K.; Zhao, C.-Z.; Shen, X.; Zhang, Q., Lithium bond in lithium batteries. Angew. Chem. Int. Ed., 2020, 59, 11192－11195.

[2] Hou, T. Z.; Xu, W. T.; Chen, X.; Peng, H. J.; Huang, J. Q.; Zhang, Q., Lithium bond chemistry in lithium-sulfur batteries. Angew. Chem. Int. Ed. 2017, 56, 8178－8182.

[3] Lu, Y.; Zhao, C.-Z.; Zhang, R.; Yuan, H.; Hou, L.-P.; Fu, Z.-H.; Chen, X.; Huang, J.-Q.; Zhang, Q. The carrier transition from Li atoms to Li vacancies in solid-state lithium alloy anodes. Sci. Adv. 2021, 7, eabi5520.

[4] Chen, X.; Chen, X.-R.; Hou, T.-Z.; Li, B.-Q.; Cheng, X.-B.; Zhang, R.; Zhang, Q., Lithiophilicity chemistry of heteroatom-doped carbon to guide uniform lithium nucleation in lithium metal anodes. Sci. Adv. 2019, 5, eaau7728.

[5] Yao, Y.X.; Wan, J.; Liang, N.Y.; Yan, C.; Wen, R.; Zhang, Q. Nucleation and growth mode of solid electrolyte interphase in Li-ion batteries. J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 8001.

报告人简介：张强，清华大学长聘教授。曾获得国家自然科学基金杰出青年基金、中国青年科技奖、教育部青年科学奖、北京青年五四奖章、英国皇家学会Newton Advanced Fellowship、清华大学刘冰奖、国际电化学会议Tian Zhaowu奖、科学探索奖、可持续发展青年科学家奖。2017-2023年连续七年被评为“全球高被引科学家”。其热爱科学和教育事业，善于根据学生的自身特点和成长路径，因材施教，引导其找到自身兴趣，百花齐放，共同成长。指导学生中12人获得清华大学特等奖学金，3人获得全国大学生课外学术科技作品竞赛特等奖等奖励。长期从事能源化学与能源材料的研究。近年来，致力于将国家重大需求与基础研究相结合，面向能源存储和利用的重大需求，重点研究锂硫电池的原理和关键能源材料。提出了锂硫电池中的锂键化学、离子溶剂复合结构概念，并根据高能电池需求，研制出复合金属锂负极、碳硫复合正极等多种高性能能源材料，构筑了高性能电池器件。发表论文400余篇，h因子166，授权发明专利40余项。担任国际期刊Angew. Chem.首届顾问编辑、J Energy Chem, Energy Storage Mater副主编， Matter, Joule, ChemSocRev, J Mater Chem A, Adv Energy Mater, Adv Funct Mater, ChemSusChem, EnergyChem, 储能科学与技术，化工学报等期刊编委。担任国家重点研发计划储能与智能电网专项专家组副组长。曾获得教育部自然科学一等奖、化工学会基础科学一等奖等学术奖励。

微尺度液相分散过程中的介尺度结构调控

汪伟[1]

[1]四川大学

*Email: wangwei512@scu.edu.cn

摘要正文：液相分散过程是一类重要的化工过程，在微反应、分离、材料合成等方面具有重要作用。本报告主要介绍了微尺度液相分散过程中的介尺度结构调控，主要关注于界面两亲分子聚集态介尺度结构对液相分散过程的影响规律，着重介绍了界面两亲分子聚集态介尺度结构对液相分散体系的结构形貌、以及界面稳定性的调控，以期为液相分散过程的调控和强化提供科学指导。

报告人简介：四川大学化学工程学院教授、博士生导师，国家优秀青年科学基金获得者、四川省学术和技术带头人、英国皇家化学会Lab on a Chip新锐科学家。主要从事微流控技术和化工新材料的研究，在Acc Chem Res、Adv Mater、Angew Chem Int Ed、PNAS等国际学术期刊发表论文100余篇，授权中国发明专利50余项，受邀参编英文学术专著4部。担任中国化工学会微化工技术专委会副秘书长、精细化工专委会副秘书长，中国化工学会青年工作委员会委员等，任《化工学报》编委、以及Chin Chem Lett和Green Chem Eng等期刊青年编委。获四川省杰出青年科学技术创新奖、侯德榜化工科技青年奖、霍英东教育基金会高等院校青年科学奖等，作为主要完成人获国家技术发明奖二等奖1项、四川省科技进步奖自然科学类一等奖2项。

智能化工——以AI通专模型融合为突破

王笑楠[1]

[1]清华大学

*Email: wangxiaonan@tsinghua.edu,cn

摘要正文：人工智能（AI）与科学研究的融合为解决传统化工、新材料研发周期长、成本高的问题带来了新机遇，但适配材料研究的智能化方法也对算法模型提出了可解释、可通用、多尺度整合能力的新要求。本报告将介绍融合数据与机理、适配化工、新材料工程科学的智能研究方法体系，借助通专知识融合，数据平台支撑，大小模型并进，阐明有机分子、无机晶体、聚合物复合材料体系理性设计的机制，并结合AI集成指导新材料设计合成表征的自动化装置，发展智能化工研究方法。具体将介绍（1）面向材料体系复杂、难以参数化经验知识的挑战，构建了数据驱动融合知识的分子材料主动学习优化方法；（2）为解决研究效率和精度的限制，建立了关键材料与器件的精准智能合成与表征平台；（3）针对从原子级到宏观级的复杂数据和知识融合难的问题，建立多尺度数字孪生系统，力争实现智能化工的产业和社会价值。

报告人简介：王笑楠，清华大学化工系长聘副教授、研究员、博导，新加坡国立大学荣誉教授，新一代人工智能国家科技重大专项首席科学家、项目负责人，美国化学工程师学会 (AIChE) 可持续发展领域主席。国家高层次青年人才计划入选者。带领团队从事AI+能源化工材料的研究。在Nature Machine Intelligence、Nature Synthesis等期刊发表SCI论文150余篇，包括14篇ESI高被引论文，被引8600余次，H-index 54。担任Applied Energy等十本国际期刊副主编和编委，获美国化学会可持续化学与工程讲席奖、Cell Press中国女科学家奖、侯德榜化工科学技术奖“青年奖”，福布斯中国科技女性50，新加坡杰出青年首席研究员奖等奖项。入选全球学者终身学术影响力榜，连续三年被Elsevier评为全球前2% 顶尖科学家。

金属纳米催化剂的智能化筛选与应用

程道建[1]

[1]北京化工大学

*Email: chengdj@mail.buct.edu.cn

摘要正文：金属纳米催化剂被认为是实现工业催化剂贵金属等效减量化的重要途径。围绕金属纳米催化剂开发过程中如何实现高效筛选配方的关键科学问题，发明了基于结构描述符的金属纳米催化剂设计方法，基于“载体限域锚定”的原子级分散催化剂制备策略，以及金属纳米催化剂高通量制备装备，建成了耦合高通量实验与计算数据的金属纳米催化剂配方智能化筛选系统，应用于低碳烃类高效转化金属纳米催化剂的研发。开发的乙烯环氧化Ag基催化剂已完成中试放大制备，中试评价显示性能优于传统工业催化剂，该催化剂已完成批量生产，实现首次工业应用；开发的碳四烷基化原料选择加氢Pd基、Ni基合金催化剂，已先后在兰州石化、庆阳石化、大连石化、广东石化等企业实现工业应用。

报告人简介：程道建，北京化工大学化学工程学院院长，担任“十四五”国家重点研发计划“氢能技术”重点专项总体专家组成员、中国化工学会化学工程专委会秘书长、中国化工学会稀土催化与过程专委会副主任委员、中国化工学会过程模拟及仿真专业委员会副秘书长，国内核心期刊《化工进展》编委，SCI期刊Journal of Experimental Nanoscience和Molecular Simulation区域主编。主要从事化工领域金属纳米催化剂的设计、制备和应用研究。以第一或通讯作者在Nat. Catal.，Nat. Commun.，Angew. Chem.，ACS Catal.，Adv. Energy Mater.等期刊发表SCI论文170余篇。获得国家优秀青年基金（2018年），入选英国皇家化学会会士（2016年），入选爱思唯尔中国高被引学者榜单（2020-2023年）。以第一完成人的成果获中国化工学会基础研究成果奖一等奖等奖励4项，个人获评2022年度“青山科技奖”，中国化工学会侯德榜化工科学技术创新奖（2022年）和中国石油和化学工业联合会青年科学技术突出贡献奖（2022年）。

课题组及个人主页：

Cheng's Research Group (nanoalloy.com.cn)。

从数据中发现物理规律

孙浩[1]

[1]中国人民大学

*Email: haosun@ruc.edu.cn

摘要正文：现代科学的发展主要依赖于简洁而优美的数学方程，得益于符号方程可解释、可通用的特征，即便是复杂系统，其运行机制也可以被合理诠释。从数据中自动挖掘、提取控制方程作为一类典型的符号回归问题，是自然科学发展和工程应用中数据助力科学探索的前沿挑战。该报告将介绍符号学习与推理基本概念和方法，讨论如何从数据中自动提取数理方程，进一步探索用于描述未知系统状态的数学方程或定律、发现新知识。

报告人简介：孙浩，中国人民大学高瓴人工智能学院“长聘副教授、博导”，国家高层次青年人才，哥伦比亚大学博士、麻省理工学院博士后，曾任美国匹兹堡大学、美国东北大学终身序列助理教授、博导。从事智能科学计算理论方法与前沿交叉研究。在Nature Machine Intelligence（2篇）、Nature Communications（2篇）等国际一流期刊和ICLR、NeurIPS等计算机顶会发表论文70余篇。主持国家海外高层次人才计划青年项目、国家自然科学基金（重大培育、面上）、美国科学基金（重点、面上、专题）等科研项目十余项。先后获得福布斯北美30位30岁以下精英榜（科学类）、美国十大华人杰出青年、中国智能计算科技创新人物等荣誉。

气体分离过程系统集成：从基础研究到工业应用

邓春[1]

[1]中国石油大学（北京）

*Email: chundeng@cup.edu.cn

摘要正文：节能高效的气体分离技术研发一直是研究热点和能源化工行业的重大需求。提出了多孔浆液吸收-吸附耦合分离气体混合物的新工艺，建立了气-浆液体系的相平衡模型和宏观传质动力学模型，吸收-吸附耦合分离过程全流程模拟与多目标优化的数学模型，揭示了固-液耦合强化气体捕集和分离的机制，掌握了不同流程结构和操作参数对分离性能的影响规律，获得了优化的工艺流程结构和操作参数，为吸收-吸附耦合分离气体混合物的中试和工业装置设计提供基础数据和技术支撑。提出了炼厂气轻烃回收，氢气透平压力能回收与氢气系统协同优化方法，建立了石油化工企业/园区氢气系统优化的数学模型，揭示了质量/功量协同集成优化机制及其对系统性能（新氢量，系统功耗，年度总费用）的影响规律，为石油化工企业氢气系统集成优化提供最优决策方案。

报告人简介：邓春，教授/博士生导师，中国石油大学（北京）化学工程与环境学院，人工智能学院兼职教授。主要从事化工过程系统集成与优化、分离过程及流程模拟、人工智能与化工过程等方面的研究工作，主持国家自然科学基金面上项目4项（在研1项，结题3项），北京市自然科学基金面上项目1项，主持/参加企业委托课题10项，以第一作者和通讯作者发表期刊论文66篇；荣获教育部自然科学奖二等奖1项（排名3/4），中国过程系统工程青年科技奖，教育部在线教育研究中心“智慧教学之星”，北京高校“优质本科课程”《化工原理》，首届全国高等院校化工原理课程教学能力大赛一等奖（教授组），中国石油大学（北京）青年拔尖人才等。

人工智能算法加速复杂反应机理探索

韩优[1]

[1]天津大学

*Email: yhan@tju.edu.cn

摘要正文：对于传统的量子化学方法，受限于计算资源，限制了对复杂化学反应机理的深入探索。针对该问题，报告人发展了能精准描述超临界水、多相催化等复杂体系的反应力场，开发了能够快速获取复杂体系反应力场的人工智能算法，用于模拟大尺度、长时间的复杂化学反应。并发展了基于径向基函数（RBF）插值算法的机器学习模型，开展了对燃料燃烧机理的反应动力学参数优化研究，获得了能在宽工况范围内使用的燃料燃烧机理，考察了机理在不同燃烧实验上的预测性能。

报告人简介：天津大学化工学院英才教授、博导、国家级青年人才，英国皇家化学会Energy Advances期刊副主编、中国工程院 Frontiers of Chemical Science and Engineering 期刊编委、中国化工学会过程模拟与仿真专委会委员、中国化学会理论化学专委会委员。主持国家自然科学基金委联合重点项目、面上项目等5项、国家重点研发计划课题、子课题及省部级等项目10余项；以第一/通讯作者在PNAS、JACS、Angew. Chem. Int. Ed.、Phys. Rev. Lett.、ACS Catal.等期刊上发表SCI收录论文80余篇；获中国发明专利授权18件；2023年被中国化工学会和全球华人化工学会评为国际杰出青年化学工程师。

基于介尺度解聚-重组装的分子筛绿色制备及工业应用

鲍晓军[1]

[1]福州大学、清源创新实验室

*Email: baoxj@fzu.edu.cn

摘要正文：分子筛材料被认为是实现过程工业绿色化的基石，经过70余年的发展，分子筛材料科学与技术取得了巨大进步，但化学工业绿色发展的趋势使分子筛材料产业的可持续发展面临着巨大挑战，亟需发展分子筛的绿色合成技术以实现分子筛生产过程的绿色化。为此，本团队以廉价的天然硅铝矿物为原料，通过调控天然硅铝矿物解聚产物的介尺度结构及其在分子筛合成体系中的重组装行为，创新提出了一条基于天然硅铝矿物介尺度解聚-重组装绿色制备系列分子筛的新技术路线，基于该技术路线创制出系列微孔、等级孔分子筛(如ZSM-5、Beta、Y等)和杂原子分子筛(如FeCuZSM-5、FeCuSSZ-13等)，其中微孔和等级孔ZSM-5分子筛已完成工业生产，并在30余套清洁汽油生产装置上实现大规模工业应用，等级孔杂原子分子筛已完成工业立方级放大制备及在选择性催化还原(SCR)反应中的中试评价。

报告人简介：鲍晓军，福州大学化工学院教授、清源创新实验室执行主任。曾两次担任973计划项目首席科学家，2008年获国家杰出青年基金资助，2021年被评为全国杰出专业技术人才。兼任中国化工学会理事、中国颗粒学会理事、国务院学位委员会第八届学科评议组成员，相继任《Fuel Processing Technology》、《Chinese Journal of Chemical Engineering》、《Petroleum Science》、《燃料化学学报》等国内外期刊编委。长期从事清洁燃料生产技术、多级孔道催化材料的制备以及负载型催化剂纳微结构调变方法和应用的研究，主持开发了石油化工过程设备的故障诊断技术、催化裂化汽油加氢改质技术和分子筛的绿色合成技术。获国家科技进步二等奖2项、省部级科技成果一等奖7项、省部级教学成果特等奖和一等奖各1项，获授权发明专利170余件(其中国际10件)，在国内外期刊发表研究论文250余篇，主编参编著作6部。

机器学习势驱动的分子智能设计与合成

刘奇磊[1]

[1]大连理工大学

*Email: liuqilei@dlut.edu.cn

摘要正文：量子化学方法已成为溶剂、药物、催化剂等化工分子产品研发的重要计算工具。然而，传统的量子化学计算时间成本随分子系统复杂度呈指数级增长，阻碍了化工分子产品的高通量、大规模设计与筛选。本工作提出一种基于深度学习的分子势能面预测工具（Deep learning-based Potential Energy Surface prediction Tool, DeePEST），用于高通量量子化学计算。具体而言：首先，构建包含分子势能面信息的分子数据库；其次，利用深度学习方法(如PaiNN)构建分子三维几何结构与分子能量、原子力矩阵之间的分子构效关系，建立可精准高效预测分子势能面的机器学习势模型；最后，耦合机器学习势模型与分子几何优化算法(能量最小化算法、过渡态搜索算法等)，实现高通量优化分子几何结构的目标。本工作将DeePEST应用于分子产品性质预测、结构设计、逆合成规划等化工领域任务，有助于实现化工分子产品高通量、智能化设计与合成的目标。

报告人简介：刘奇磊，博士，大连理工大学副教授，博导，主要从事高端精细化学品智能设计与合成相关研究工作，通过耦合量子化学与深度学习，提出一种机理-数据融合驱动的机器学习势方法，为高端精细化学品精准构建分子构效关系、高效设计潜力分子结构、智能规划分子合成路线提供全新研究范式。主持国自然青基等纵向项目6项。在国内外学术期刊和学术会议上发表论文总计30余篇，包括AIChE J. 4篇(其中1篇连续两年被评为Top Cited Article)、Chem. Eng. Sci. 2篇、Ind. Eng. Chem. Res. 1篇、Green Chem. 1篇、Fuel 1篇。参编国内外教材/专著6项。公开中国专利3件、获批软件著作权6件，其中1件软著已授权转化20万元。获大连市青年科技之星、大连市高层次人才-青年才俊等荣誉奖项。

个人主页：http://faculty.dlut.edu.cn/liuqilei/zh_CN/index.htm

多相反应器颗粒流动测量与智能化反应评价系统开发

刘对平 [1]

[1] 榆林中科洁净能源创新研究院

*Email: liuduiping@dicp.ac.cn

摘要正文：本报告主要介绍两方面研究工作：一方面是显微内窥探头技术在甲醇制烯烃催化剂积碳测量、颗粒流动测量等方面的应用探索，重点针对甲醇制烯烃（DMTO）工业催化剂积碳量无法在线测量的问题，开发了基于微米尺度催化剂颗粒成像快速测量催化剂积碳量的光学测量方法，并研制应用于工业生产现场催化剂积碳量在线测量的智能化仪表系统；另一方面是AI+自动化技术在化学化工技术开发领域的应用探索，重点介绍本研究团队已开发的全实验流程自动化操作的多通道催化反应评价实验装置及软件系统，以及其在DMTO、DMTP等新催化技术开发方面发挥的作用。

报告人简介：刘对平，男，1989年2月生，榆林中科洁净能源创新研究院，副研究员。2019年博士毕业于中国石油大学（北京），同年进入中国科学院大连化学物理研究所低碳催化技术国家工程研究中心开展博士后课题研究，针对甲醇制烯烃（DMTO）工业催化剂积碳量无法在线测量的问题，开发了基于微米尺度催化剂颗粒成像快速测量催化剂积碳量的光学测量方法，并研制首套应用于工业生产现场催化剂积碳量在线测量的智能化仪表设备。2022年5月博士后出站加入榆林中科洁净能源创新研究院，重点开展人工智能在化学化工应用方面的探索工作，以探索传统能源催化技术开发范式的变革，带领团队成功开发了能源催化领域首套全实验流程自动化操作的多通道催化反应评价实验装置及软件系统，正在联合大连化物所研究团队开展DMTO、DMTP等新催化技术的工艺优化和反应动力学网络自主建模研究，并推动相关实验设备商业应用。曾获“博士研究生国家奖学金”、“国家公派出国留学”、“陕西省秦创原高层次创新创业人才”、“陕西省三秦英才引进计划”、“榆林市中青年科技创新领军人才”等荣誉及人才项目支持，已发表学术论文8篇，申请专利6项，承担省、市级科研项目各1项，参与中国科学院、榆林创新院、企业横向合作项目多项。

数据-机理驱动AI赋能化工过程优化

周鑫[1]

[1]中国海洋大学

*Email: xinzhou@ouc.edu.cn

摘要正文：在化工领域，复杂反应的优化传统上依赖于经验性模型和试验数据，但这些方法在面对多变量和非线性问题时往往存在局限性。本研究提出了一种数据-机理驱动的机器学习方法，将实验数据与化学反应机理相结合，构建高效且可解释的模型用于化工过程参数优化。通过融合数据驱动和机理模型的优势，我们不仅实现了对反应条件和催化剂选择的精准预测，还能够揭示关键参数与工艺性能之间的复杂关系,为化工过程的智能化优化提供了科学依据和技术支撑。研究表明，该方法显著提升了参数优化的效率和准确性，同时提供了对化工过程更深层次的理解和解释能力。这一创新性方法为推动化工过程的智能化与精细化控制提供了强有力的工具和新途径。

报告人简介：周鑫博士2020年在中国石油大学（华东）取得博士学位，之后在中国石油大学（华东） 重质油国家重点实验室做博士后，合作导师为挪威科技大学De Chen 院士，周鑫博士现为中国海洋大学化学化工学院副教授，主持国家自然科学基金青年基金项目、博士后面上资助项目等，主要围绕围绕能源化工、介科学与智能化工开展应用基础研究，近5年以第一作者/通讯作者在Nat. Com.、AIChE J、Chem. Eng. Sci., Chem. Eng. J., Ind. Eng. Chem. Res., Compu. Chem. Eng.、ACS Sus. Chem. Eng., J. Clean. Prod.等能源化工顶刊发表SCIE期刊论文30余篇。

极板凹凸结构对电解槽内部传质的影响

张璟昌 [1]

[1] 中国科学院过程工程研究所

*Email: zhangjingchang@ipe.ac.cn

摘要正文：压滤式水电解槽以其结构紧凑、气体纯度高以及气液循环流道结构简单等显著优势，成为制取氢气的常用设备，对于支撑双碳战略具有重要的意义。在压滤式水电解槽的运行过程中，电解质分布的均匀性直接关系到电解效率的提升与电极寿命的延长。本文采用格子玻尔兹曼方法，结合GPU加速技术，对电解质在凹凸极板流场的分布过程进行了模拟研究。同时，通过强化学习方法对凹凸结构的排布进行智能调整，以实现更优的电解质分布效果。模拟结果表明，强化学习所得的凹凸结构排布不仅能有效减小流动死区，还能确保电解质在极板上实现均匀分布，从而进一步提升了压滤式水电解槽的整体性能。

报告人简介：2016年毕业于重庆大学，获工学学士学位；2022年毕业于中国科学院大学/中国科学院过程工程研究所，获工学博士学位；2024年于中国科学院过程工程研究所博士后出站，并任助理研究员。研究方向包括LBM多相流模拟、微通道乳化过程、质子交换膜电解槽、多孔传输层中气液流动、搅拌槽反应器软件开发等。承担国家重点研发计划项目和工信部物性数据库项目，在AIChE J.、Chem. Eng. Sci.、Chem. Eng. J.、Curr. Opin. Chem. Eng.等国外化工期刊发表论文7篇，申请专利2项。

人工智能方法辅助化工新材料研发

彭鑫[1]

[1]华东理工大学

*Email: xinpeng@ecust.edu.cn

摘要正文：近年来，人工智能驱动的科学研究 (AI4Science)为解决复杂物质科学问题提供了新的途径和方法。借助图谱分析理解、复杂环境进化计算和自然语言处理等技术，通过对理论经验、计算科学和人工智能有机融合，为高效材料探索与开发实验的建模优化和无人化实验的机器人智能执行等环节提供了新工具和新思路。以分子筛催化剂为例，作为石化领域最重要的催化剂之一，其研发流程对提升相关行业的经济效益至关重要。然而传统研发流程中人力参与度高、研发周期长、数据分析困难等问题制约了分子筛工艺的探索和研发效率。其中，分子筛合成实验中产物结构的表征信息提取、从制备条件-结构特征-催化效率的全流程建模分析及工艺优化、以及无人化高效迭代实验所需的实验文本分析及机器动作自动编程技术是建成分子筛合成无人化实验室中需要克服的核心问题。为此，本报告将就人工智能技术推动分子筛智能研发及制备中的重要环节和主要技术进行分析，为绿色化工材料的智能制备和无人化材料研发提供新的研究思路。

报告人简介：彭鑫，特聘研究员、博士生导师。任上海市自动化学会理事，中国自动化学会技术过程的故障诊断与安全性专业委员会委员，中国自动化学会环境感知与保护自动化专业委员会委员，欧美同学会华东理工大学分会理事等。主要从事工业过程智能建模、控制及优化；人工智能驱动的科学研究（AI for Science/Engineering）；工业机器视觉方面的研究工作。主持科技部国家重点研发计划项目课题1项、国家自然科学基金面上及青年项目各1项、省部级基金3项。在国际重要期刊上发表SCI论文90余篇。授权国家发明专利13项，公开33项，登记软件著作权11项。相关研究获得2022年上海自然科学奖二等奖及2023年中国仪器仪表学会科技进步二等奖，并获2021年上海市浦江学者人才计划（A类）、上海市青年科技英才扬帆计划资助。

智能反应器工程

朱礼涛[1]

[1]上海交通大学

*Email: sjtu_zlt@sjtu.edu.cn

摘要正文：近些年来，以人工智能、数字孪生、大语言模型等为代表的智能化和数字化技术，给化学工程领域带来了新的挑战与机遇。采用数智化技术研究化学工程中的核心问题逐渐成为领域热点和前沿之一。本报告将以气固多相反应器的智能化和数字化研究为例，重点汇报本小组近期在多相流介尺度三传一反数据驱动建模、基于混合方法的反应器性能多目标优化、贝叶斯在线自动优化、加速计算等反应器智能化研究方面的初步工作。

报告人简介：朱礼涛，上海交通大学智慧能源创新学院（隶属于碳捕集中心），长聘教轨副教授。本、硕、博、博后分别在大连理工、上海交大（导师：罗正鸿教授 国家杰青/长江学者）、帕德博恩大学、帝国理工学院等机构学习或工作；迄今以第一/通讯作者在AIChE J. (6篇)、Chem. Eng. Sci. (8篇)、Ind. Eng. Chem. Res. (4篇)、Chem. Eng. J.（3篇)、Phys. Fluid.等国际化工与多相流领域主流期刊发表SCI论文近30篇；申请/授权国家发明专利5项；主持国自然青基等多项国家/省部级项目；获国家博新计划、德国洪堡学者、中国化工学会科学技术奖一等奖（R2）、中国颗粒学会优博学位论文奖、京博科技奖—京博优秀博士奖铜奖（中国化学会与京博集团联合主办）、中国石油和化学工业联合会CPCIF- Clariant可持续发展青年创新奖、加拿大班廷学者等；受邀担任Ind. Eng. Chem. Res.和Phys. Fluid.等化工与流体力学领域主流期刊客座编委，中国化工学会过程模拟及仿真专业委员会青年委员等。个人主页：https://www.senergy.sjtu.edu.cn/index/ziyoushizi/82.html

基于人工神经网络的气体泄漏溯源

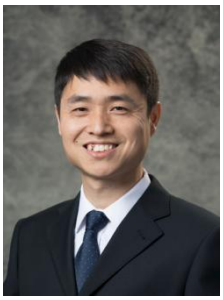
李飞[1]

[1] 中国科学院过程工程研究所

*Email: lifei@ipe.ac.cn

摘要正文：气体溯源机器人和溯源算法的结合是对气体泄漏事故准确溯源的重要方法之一，但此方法存在溯源时间较长的局限，而人工神经网络（ANN）与算法相结合能克服这一问题，实现准确快速溯源。本研究发展了一种基于ANN的溯源方法：首先提出针对典型化工园区的气体泄漏事故溯源方案，在此基础上应用高斯烟羽模型和CFD模拟分别构建了两种不同场景的气体泄漏扩散数据集，构建适用于不同气体泄漏事故的ANN溯源模型，结合数据集对溯源模型进行训练和优化。结果表明：ANN溯源模型成功实现了对气体泄漏源的准确预测，将溯源模型的预测点与真实泄漏点的距离控制在20 m内，其准确率达到84%以上；在输入一组监测点浓度数据后，ANN溯源模型可在0.001 s内预测出泄漏源位置，溯源速度显著高于当前机器人溯源方法。

报告人简介：李飞，男，博士，中国科学院过程工程研究所副研究员，硕士生导师，中国科学院特聘研究岗骨干成员，中国机械工程学会工业炉分会委员。研究方向包括多相流动的粗粒化模拟、基于EMMS的介尺度模型和煤的清洁利用研究。曾获得中国颗粒学会自然科学一等奖，中国工程热物理学会青年学者优秀论文陈学俊奖，中国颗粒学会优秀报告奖等。主持多项国家项目和企业合作项目，包括国家自然科学基金国际合作与交流项目、面上项目和青年项目，国家重大科研装备研制项目课题、重点研发项目子课题等。



CO_2制烯烃催化剂智能设计与工艺流程多尺度协同优化

杨庆春 [1]

[1] 合肥工业大学

*Email: ceqcyang@hfut.edu.cn

摘要正文：CO2制低碳烯烃（CTLO）过程存在质能转化效率、经济效益皆不佳的问题。本报告首先提出了一种基于差分进化算法的混合数据驱动框架，用于实现机器学习模型超参数的自动化最优配置，以及精准预测不同催化剂潜在的催化效能。其次，针对传统的CTLO过程热力学性能低的问题，采用先进㶲分析方法从内源性/外源性和不可避免/可避免等角度对单元和系统的总㶲损进行剖析，量化了该工艺真正的节能空间，并针对性制定了改进策略。最后，针对CTLO工艺经济效益不佳、碳排放量高等问题，探究了灰氢、蓝氢和绿氢等不同氢源对CTLO工艺技术-经济-环境性能的影响，为决策者们提供了量化支持。

报告人简介：杨庆春，合肥工业大学化学与化工学院副教授、系副主任，师从国家杰青钱宇教授。主要致力于智能化工、化工过程模拟与优化设计方面的研究，担任中国化工学会过程模拟及仿真专业委员会青年委员。先后主持国家自然科学基金青年科学基金项目、安徽省自然科学基金青年科学基金项目、重点实验室开放课题、企业技术研发项目以及合肥工业大学学术新人提升A、B计划。以第一作者或通讯发表2区以上SCI论文40余篇，包括1区Top 30余篇篇，化工三大顶级期刊10篇，2篇入选期刊封面。

炼厂氢气网络的超结构模型与智能优化

杨敏博[1]

[1]西安交通大学

*Email: yangmb@xjtu.edu.cn

摘要正文：氢气网络集成对炼厂的节能减排和降本增效有着重要意义，也是化工系统工程领域的研究热点之一。氢源的组成和压力是影响氢气回用的关键因素，但氢气的净化、加氢等过程通常涉及复杂的反应/传递机理，给氢气网络的建模和优化带来了挑战。基于氢气净化过程的严格模拟模型，本工作提出了模拟—数学混合建模框架，并建立了以智能优化算法作为全局算法来优化模拟模型的变量，内嵌确定性优化算法求解网络结构的求解策略；利用机器学习方法，建立了加氢过程的代理模型，实现了阱-源联动下的氢气网络集成优化，为炼厂氢气的高效利用提供了理论指导和方法依据。

报告人简介：主要从事化工系统工程方向研究，围绕化工过程的集成化、绿色化和智能化展开理论和应用研究，紧密结合化工行业节能减碳的重大需求，注重科研成果的应用和转化。主持国家自然科学基金项目2项，省部校级基金4项，企业横向课题3项；参与国家重点研发计划1项，企业课题7项。以第一/通讯作者发表论文40余篇，SCI论文31篇，EI论文4篇。研究成果在京博石化、云天化等企业落地应用，创造了显著的社会和经济效益。

个人主页：https://gr.xjtu.edu.cn/en/web/yangmb/home

电化学氢泵强化甲醇重整分布式热电氢三联供系统多目标优化设计及4E分析

肖武[1]

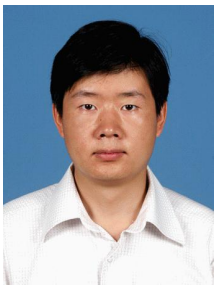
[1]大连理工大学

*Email: wuxiao@dlut.edu.cn

摘要正文：以氢能利用为基础的分布式能源系统灵活性高、可以灵活匹配可再生能源，因此对助力我国实现双碳目标具有关键作用；。考虑到氢气储运过程涉及高压、深冷低温等极端条件和氢泄露等关键技术问题，以甲醇为氢能载体的分布式能源系统因为储运便捷、环境友好等优势得到了众多学者的关注；。一方面，基于甲醇现场重整的分布式制氢系统可以有效解决氢气运输难题，提升加氢站的市场竞争力；另一方面，重整气可以供给燃料电池实现灵活电力生产，降低用户对集中式电网供电的依赖；。然而，由于重整气中CO的存在，系统需要配置CO选择性氧化脱除单元，在造成氢损失的同时提升了系统复杂度。

针对以上问题，本工作提出利用高温电化学氢泵（HT-EHP）耦合的高温质子交换膜燃料电池（HT-PEMFC）甲醇重整分布式热电氢三联供系统。利用甲醇现场重整为HT-PEMFC提供富氢重整气，并生产电力；利用高温电化学氢泵一步实现重整气高效净化，生产加压燃料电池级氢气，实现了含氢重整气的梯级利用避免资源浪费。基于Python和UniSim Design对系统进行了模拟及数据分析，通过响应面法（RSM）建立了耦合系统高精度代理模型（R2≥0.96），基于NSGA-Ⅱ算法实现了对耦合系统年度总成本（TAC）、净功率（WNet）和年氢气产量（"F"_("H"_"2" ",year")）的三目标同步优化，并基于LINMAP和TOPSIS多属性决策实现了最优解的选取，最后根据实际电力、氢气需求场景对优化后的系统进行了能量、烟和经济性（Energy, Exergy, Economic, 3E）分析；。结果表明：在氢电联供模式下净功率为122.3 kW，年氢气产量为37.6 t，此时电力成本为0.12 $/kWh，制氢成本为4.75 $/kgH2，动态投资回收期为4年，具有高操作柔性；在制氢模式下系统年氢气产量为79.3 t，制氢成本仅为3.81 $/kgH2，投资回收期仅为1.42年，相比前人提出的醇类重整制氢系统（Energy Convers. Manag. 2022; 252: 115088, 4.16 $/kgH2）降低了8.4%，具有最佳的收益效果；。综上所述，本工作为面向未来的分布式能源系统提供了可行的过程强化方案。

报告人简介：肖武，副教授，博士生导师。化工原理教研室主任，辽宁省工业VOCs综合治理及利用工程技术研究中心副主任。主要从事膜分离过程、过程系统工程和过程强化的研究。发表SCI论文70余篇。获授权发明专利30余项。实现了系列过程系统能量集成、炼厂氢气和VOCs资源膜法耦合回收等的工业应用，应用成果支撑了石油化工、环保等产业，关键分离过程能耗降低10%以上，累计为应用单位创效益超过3亿元/年。获国家科技进步二等奖1项、省部级科技奖励4项。



基于数据分解算法的熔池液位特性及浸没式喷枪寿命研究

肖清泰 [1]

[1] 昆明理工大学

*Email: qingtai.xiao@kust.edu.cn

摘要正文：有色金属熔池液位波动和飞溅对喷嘴寿命具有关键影响，在熔池内部高温和能见度有限的情况下，理解液位动态和喷嘴寿命的决定因素变得复杂。本研究旨在建立顶吹气液反应器的水模型，深入研究这些特性以及与之相关的喷嘴寿命。结合某火法冶炼公司的生产数据，采用完全自适应集合经验模态分解法和变分模态分解进行数据分析，通过径向基函数神经网络算法预报了反应器中的液位高度；通过混沌0-1测试计算混沌强度Kc，作为第二层分解的指标。此外，通过六阶多项式拟合揭示了物料处理能力与喷嘴使用寿命之间的关系。研究发现，所提出的组合模型显著改善了液位时间序列的预测准确度，预测精度提升到8.06%。每个操作条件的平均预测准确度超过96%，峰值准确度为97.93%。将组合模型应用于喷嘴寿命时间序列可用于预测物料处理趋势，对于渣挂操作和液位高度特性的掌握也显得至关重要。这些研究结果有利于为炉衬和喷嘴寿命研究以及涉及液位提取的其他工业应用提供有价值的见解。

报告人简介：昆明理工大学冶金与能源工程学院副教授、硕士生导师，第七届中国科协青年人才托举工程和云南省兴滇英才支持计划青年人才专项入选者。现为科技部冶金节能减排国家重点领域创新团队成员之一，省部共建复杂有色金属资源清洁利用国家重点实验室研究人员。以第一/通讯作者在国内外期刊上发表学术论文45篇，取得国家知识产权局授权专利18件，获云南省自然科学一等奖（排3）等科技奖励10余项。

个人主页链接：https://yn.kmust.edu.cn/info/1101/4221.htm

基于m-PIOT模型的甲醇制烯烃及其下游产业链定量研究

刘丹竹[1]，梁金强[2]，徐庶亮[1]，叶茂[1,*]

[1]中国科学院大连化学物理研究所

[2]中国石油大学（北京）克拉玛依校区

*Email: maoye@dicp.ac.cn

摘要正文：：化学品和材料在现代生活中扮演着至关重要的角色，因此，化工企业和园区亟需优化产业链的生产设计，以应对全球地缘政治格局和原材料市场波动的挑战。本研究基于中国西部某化工园区的生产数据，构建了甲醇及其下游产业链的实物型投入产出模型（m-PIOT），并对产业链中各产品之间的相互作用进行了定量分析。研究结果表
明，该园区的甲醇下游生产链中存在缺乏强拉动和支撑作用的产品部门；丙烯酸异辛酯和混合C4在产业链发展中具
有显著的拉动效应；原材料甲醇的感应系数高达21.81，对整个产业链具有较强的制约性。本文的研究成果为化工产
业链的生产设计和优化提供了创新的方法和视角，有助于改进资源配置、减少环境影响，并提升整体生产效率。该
模型的通用性使其在其他化工产业链中同样适用，为制定产业政策和资源配置提供了重要参考。

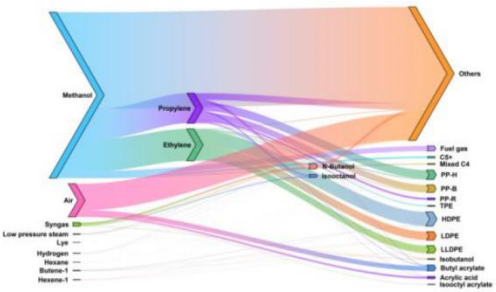


Fig. 1 Figure title in EnglishMaterial flow diagram of downstream methanol industry chain (allocated by quality)

关键词：投入产出模型；实物型；甲醇；产业链；物料流

参考文献

[1] Wachs L, Singh S. A modular bottom-up approach for constructing physical input–output tables (PIOTs) based on process engineering models[J]. Journal of Economic Structures, 2018, 7(1): 1-24.

[2] 陈艾，焦洪桥，王秀江，等. 新型煤化工产业生态化发展的政策分析、技术路径研究[J]. 煤化工, 2023, 51(3): 1-5.

报告人简介：刘丹竹，1983 年3 月，中国科学院大连化学物理研究所，工程师，主要从事多技术集成网络数学模型研究，人工智能与化工交叉融合研究。邮箱：liudz@dicp.ac.cn，电话：13889655525。

考虑渗透率的多孔颗粒流体动力学研究及应用

马丽坤[1]

[1]华东理工大学

*Email: malikun@ecust.edu.cn

摘要正文：多孔颗粒广泛应用于化工行业，包括油水分离过程中的多孔吸附剂颗粒、化学反应器中的多孔催化剂颗粒、矿物工程中的多孔煤粉颗粒等。多孔颗粒流动的流体动力学在控制和优化此类多相流过程中起着重要作用，有利于过程强化、提高效率及节约能源。

多孔颗粒内部多孔结构的存在会从本质上影响多孔颗粒的流体动力学特性，尤其体现在绕流特征和曳力系数方面。本工作采用实验方法测量了中等雷诺数下多孔颗粒绕流的流动特性和曳力系数，发现了描述多孔结构的重要参数渗透率对多孔颗粒流动有重要影响，提出了引入渗透率参数的新型曳力关联式，并将其应用于数值模拟过程以优化存在多孔颗粒的流动过程模拟结果。

报告人简介：马丽坤，现为华东理工大学博士后，2016年本科毕业于中国石油大学(北京)，2022年硕博连读毕业于中科院大连化物所，博士联合培养于加拿大阿尔伯塔大学，致力于化工过程强化中的多相流动研究，在多孔颗粒流体动力学基础研究及其应用方面已取得一些成果，在AIChE, CES, CEJ, I&ECR等SCI期刊发表多篇论文，主持国家自然科学基金青年基金、中国博士后科学基金特别资助等项目，参与多项国家级、省部级及企业技术开发项目。

面向流粒湍流破裂机理的现象学模型构建与分析

龚升高[1]

[1]湖南工学院

*Email: gongshenggao0827@163.com

摘要正文：化学、石油和制药等工业中的萃取、乳化、反应过程均聚焦液（气）-液湍流分散行为。其主因是用于表征湍流分散性能的分散相的尺寸分布和含率由流粒（液滴或气泡）聚并和破裂行为决定。因此，进一步了解流粒破裂机理对工程应用具有重要意义。本工作侧重于全能谱瓶颈效应、涡-流粒差异和破裂约束对流粒多元破裂机制的贡献，并发展了一个考虑上述三个方面的机理模型。在所提模型中，基于考虑全能谱瓶颈效应的高精度湍流参数实现了破裂机理模型封闭，推导了用于定量表征涡-流粒差异影响的数学关系，提出了可同时合理描述液滴与气泡破裂行为的新约束。本工作还系统分析了全能谱瓶颈效应和涡-流粒差异对涡-流粒碰撞/作用频率密度、破裂概率、破裂频率和子尺寸分布的影响，这些比较结果和分析充分证明了模型改进的必要性和优势。另外，所提模型预测结果能与不同条件下单流粒实验和流粒群实验的测量数据吻合良好，并与其他模型相比也表现出更佳的预测性能。整体上，本工作有利于夯实流粒湍流破裂模型的物理基础，进而提高模型的预测能力和工程应用范围。

报告人简介：

龚升高，2017年在湘潭大学获博士学位，现为湖南工学院化学与环境工程学院副教授，主要从事多相流反应工程、化学反应器模型化与模拟等领域的研究，主持国家自然科学基金项目、湖南省自然科学基金项目、湖南省教育厅项目及横向课题多项，在化工三大刊等发表多篇文章。

个人主页：https://www.hnit.edu.cn/hxyhjgcxy/info/1053/1055.htm

基于文本挖掘与数据驱动的金属氧化物释氧性能预测

江宇泷[1,2]，厉志鹏[1]，汤红健[1,*]，段伦博[1,*]

[1]东南大学 能源与环境学院，江苏 南京，210096

[2]东南大学-蒙纳士大学苏州联合研究生院，江苏 苏州，215123

*Email: tanghongjian@seu.edu.cn, duanlunbo@seu.edu.cn

摘要正文：金属氧化物的氧解耦循环能够应用于多个场景中，例如利用释氧的化学链氧解耦燃烧、利用反应能量循环的热化学储能以及利用还原态氧化物的热化学水解制氢、热化学还原CO2裂解等诸多能源低碳利用过程。然而，目前针对金属氧化物氧解耦过程的主要研究范式：实验试错与计算筛选，存在指导性弱、耗时费力等问题，本文提出了文本挖掘与数据驱动相结合的研究范式用于金属氧化物材料筛选与释氧性能预测。首先，基于大语言模型从已公开发表的大于5000篇文献中批量挖掘表征金属氧化物结构特征和释氧性能的文本数据，包括X射线衍射图谱、热重曲线、释氧量、释氧温度等。其次，对文本数据进行数据清洗和结构化表示，进而建立了包含550组 “结构特征-释氧性能” 完备的释氧材料数据集。然后，基于卷积神经网络（Convolutional Neural Network，CNN）模型，以表征金属氧化物材料结构特征的X射线衍射数据作为输入，以释氧温度、释氧量等释氧性能相关数据作为输出，准确构建了金属氧化物“结构特征-释氧性能”之间的映射关系。结果表明，CNN模型对于释氧量的回归系数R^2在训练集上达到了0.98，在测试集上达到了0.90，而对于释氧温度的分类预测的准确率在训练集上为100%，在测试集上为80%，模型对释氧量的直接预测有助于快速筛选出具备高释氧潜力的材料，而对释氧温度的智能预测有助于选择适用于特定应用场景的材料。本研究从研究范式变革角度出发，将文本挖掘与数据驱动有效融合，实现了金属氧化物材料释氧性能的高通量辨识与智能预测，为高性能释氧材料的快速筛选与定向设计提供了新的解决方案。

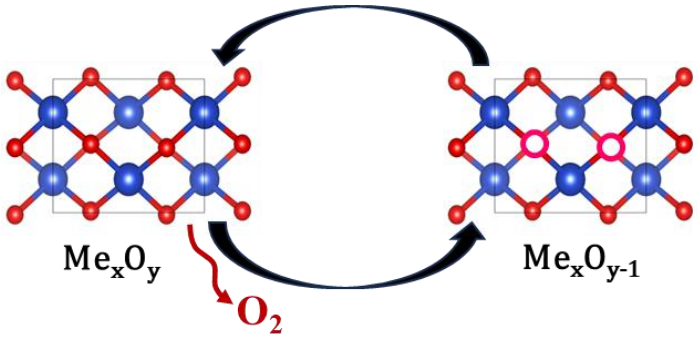


Fig. 1 Oxygen uncoupling process of metal oxide

关键词：氧解耦；文本挖掘；数据驱动；卷积神经网络

报告人/墙报展示人简介：

江宇泷，东南大学能源与环境学院硕士

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

气固反应系统中不同反应级数的介尺度反应速率模型构建

张正，黄哲庆，王凌雪，周强

西安交通大学化学工程与技术学院，陕西西安 710049

Email: huangzheqing@mail.xjtu.edu.cn

摘要正文：气固流化床反应器在许多工业过程中发挥着关键作用，包括生物质热解、甲醇制烯烃和流化床催化裂化等[1]。在气固流化床反应器中，受气固及固固相互作用，流化床内很容易形成非均匀介尺度流动结构，这些介尺度结构显著影响反应器中的反应速率。另外由于大尺度反应器的颗粒数量巨大，因此这些反应器的数值模拟往往诉诸于粗网格的双流体方法，然而粗网格数值模拟往往需要介尺度模型来封闭相关的控制方程。为提高气固反应系统反应速率预测的准确性，本研究基于细网格双流体方法(TFM)开展二维周期计算域中0.5和1.5级反应的数值模拟，进一步将已提出考虑两种不同反应速率控制机制的介尺度反应速率模型[2]拓展到非一级反应的系统，研究发现已提出介尺度反应速率模型可适用于不同反应级数系统。然而在气固相间传质机制下，介尺度反应速率修正因子在无量纲气固组分浓度差较小的情况下存在偏差。为此本研究提出一个更为普适的介尺度反应速率模型，并执行了先验性分析和粗网格数值模拟验证，结果表明已提出的模型在气固反应系统中均表现出良好的可预测能力。

关键词：气固反应系统；双流体模型；非一级气固反应；介尺度反应速率

参考文献

[1] **L. Fan, C. Zhu. Principles of Gas-Solid Flows.** ***Cambridge University Press.*** **1998.**

[2] **Z. Huang, Z. Zhang, L. Wang, Q. Zhou. Filtered reaction rate and interphase mass transfer models in reactive gas-solid flows.** ***AIChE J.***

报告人/墙报展示人简介：

报告人：张正（学生）

2018.9-2022.6 就读于中国石油大学（华东）

2022.9 于西安交通大学化工学院周强教授课题组攻读硕士学位

研究方向为气固两相流介尺度反应速率模型

H_2O 对 $Ca(OH)_2$ 脱硫反应加速作用机理研究

范圣玮[1]，汤红健[1,*]

[1] Key Laboratory of Energy Thermal Conversion and Control of Ministry of Education, School of Energy and Environment, Southeast University, Nanjing, Jiangsu, China, 210096,

*Email: 101013208@seu.edu.cn

摘要正文：二氧化硫（SO_2）是大气的主要污染物之一，对人类健康、生产生活及生态环境造成严重影响[1]。循环流化床半干法脱硫技术以氢氧化钙作为脱硫剂，兼具湿法的高效和干法的低能耗、低副产物生成的优势[2]，因系统简单、占地面积小、运行维护费用低等优势受到青睐[3,4]，但提高脱硫效率仍是关键挑战。现有研究表明，烟气中的水分能显著提高$Ca(OH)_2$的脱硫效果，原因可能包括加快晶体内固态离子扩散和改善脱硫剂的孔隙结构，降低气体扩散阻力[5,6]。本文通过实验和密度泛函理论，探讨了不同条件下$Ca(OH)_2$的脱硫效果，利用DFT计算研究了水对$Ca(OH)_2$脱硫反应加速作用的机理，提出了有利的反应途径，从理论上揭示了半干法脱硫反应的微观机理，为实验研究提供理论依据。实验结果显示，水能够加快$Ca(OH)_2$与SO_2之间的反应速率，也能提高$Ca(OH)_2$的单位硫容。DFT计算表明，HSO_3^-转化成$CaSO_3$的过程是$Ca(OH)_2$脱硫反应路径上的决速步骤，其能垒为2.18eV。水分子的加入，能够起到质子传递媒介的作用，减小H^+转移的空间位阻，使HSO_3^-转化成$CaSO_3$这一决速步骤的能垒降低了1.88eV，以此加速了脱硫反应。

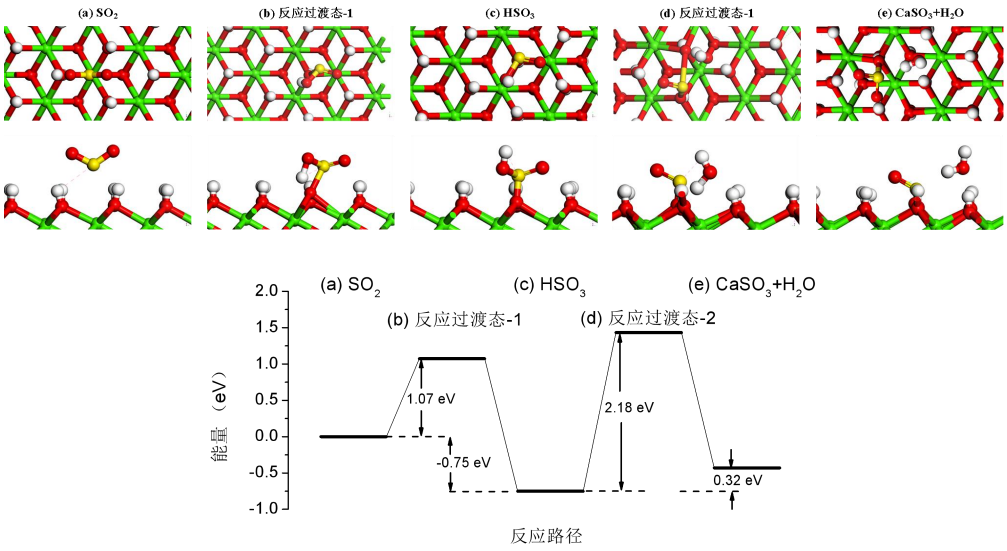


Fig. 1 Under anhydrous conditions, the desulfurization reaction pathway on the Ca(OH)2(001) surface involves: (a) initial adsorption of SO_2; (b) transition state-1 of the reaction; (c) intermediate product HSO_3; (d) transition state-2 of the reaction; and (e) final products $CaSO_3$ + H_2O.

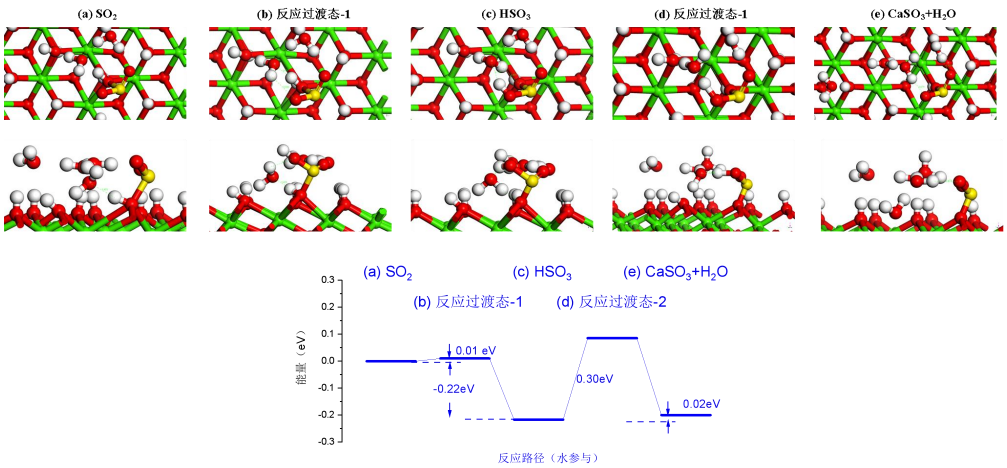


Fig. 2 Under aqueous conditions, the desulfurization reaction pathway on the Ca(OH)2(001) surface involves: (a) initial adsorption of SO_2; (b) transition state-1 of the reaction; (c) intermediate product HSO_3; (d) transition state-2 of the reaction; and (e) final products $CaSO_3 + H_2O$.

关键词： 半干法脱硫；氢氧化钙；水分子；反应动力学；密度泛函理论

参考文献

[1] Cheng G, Zhang C. Desulfurization and Denitrification Technologies of Coal-fired Flue Gas [J]. Polish Journal of Environmental Studies, 2018, 27(2): 481-489.

[2] Jan B W Frandsen, Spren kiil, Jan Erik Johnsson. Optimisation of a wet FGD pilot plant using fine limestone and organic acids[J]. Chemical Engineering Science. 2001, 56: 3275-3287.

[3] 张春霞，王海风，齐渊洪. 烧结烟气污染物脱除的进展[J]. 钢铁, 2010, 45(12): 1-11.

[4] 麻瑜. 循环流化床干法烟气脱硫技术分析[J]. 电力学报, 2007, (02): 204-206.

[5] Stewart M C, Manovic V, Anthony E J, et al. Enhancement of indirect sulphation of limestone by steam addition[J]. Environmental Science&Technology, 2010, 44(22): 8781-8786.

[6] Gullett B K, Bruce K R. Pore distribution changes of calcium-based sorbents reacting with sulfur dioxide[J]. AICh E Journal, 1987, 33(10): 1719-1726.

报告人/墙报展示人简介：

范圣玮，东南大学能源与环境学院 22 级硕士生，专业为动力工程及工程热物理，本次报告展示了我在半干法脱硫技术中水对 $Ca(OH)_2$脱硫反应加速作用机理研究中的最新成果，重点探讨了水分子在 $Ca(OH)_2$与 SO_2反应中的加速作用机理，旨在解决提高半干法脱硫效率的科学问题，提出了通过水分子作为质子传递媒介，降低反应能垒，从而加速脱硫反应的新机制，并通过密度泛函理论计算和实验数据分析验证了其有效性

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

机器学习辅助变径搅拌反应器流型智能预测研究

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: taocy@cqu.edu.cn, and 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99%。

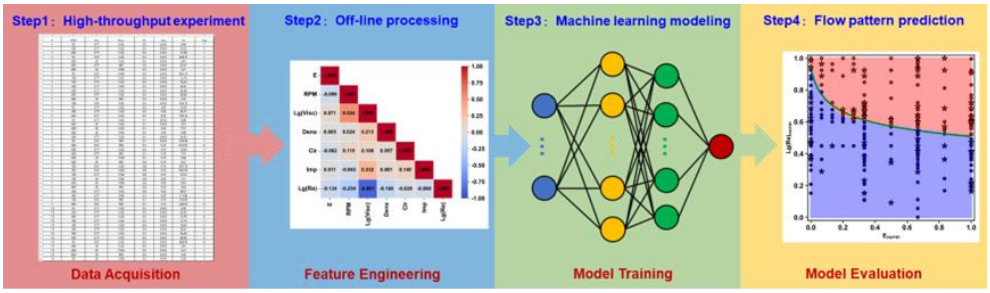


Fig. 1 Machine learning classification for the flow patterns in DTST reactors.

关键词：变径搅拌槽反应器；混沌混合；介尺度涡；人工神经网络；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.**

报告人简介：

李安琪，于 2019 年 6 月获得武汉轻工大学化学工程与工艺专业工学学士学位，2022 年 6 月获得中国科学院大学化学工程专业工学硕士学位，导师为中国科学院大连化学物理研究所叶茂研究员。主要研究方向为多相流测量与模拟。现为重庆大学 2022 级化学工程与技术专业在读学术博士研究生，导师为重庆大学刘作华教授。研究方向为 AI 赋能化工过程强化。截至目前，以第一作者身份已发表中科院一区论文 2 篇，申请国家发明专利 5 件（导师第一），参与国内外会议 10 余次，曾荣获第三届国际化工过程强化大会卓越学生奖（IPIC3 Excellence Student Award）。

报告人：学生（在读博士研究生）

低密度Geldart A类颗粒过滤曳力模型开发及过滤器类型研究

林海瑞[1,2]，成有为[1,2,*]

[1]浙江大学化学工程与生物工程学院，浙江省杭州市，310058

[2]浙江大学生物质化工教育部重点实验室，浙江省杭州市，310058

*Email: ywcheng@zju.edu.cn

摘要正文：

过滤曳力模型在流化床粗网格模拟中得到了广泛的发展和应用。本研究为拓展当前曳力模型的适用范围，针对密度相对传统FCC颗粒较小的Geldart A类颗粒物性开发一种新的曳力模型。通过高分辨率模拟的周期性流场获得了海量准确的流场数据，并基于此运用过滤的方法建立曳力模型的显式闭包使得模型能够应用于实际的粗网格模拟。同时考察了不同过滤器类型的过滤结果的差异，以及对基于不同过滤结果的所构建的过滤曳力模型在实际粗网格模拟时的流场预测性能进行评估。统计分析结果表明，采用中值过滤器得到过滤量与其他类型的过滤器如高斯、均值过滤器有明显的差异。此外，有效过滤器尺寸是造成不同方差的高斯过滤器与均值过滤器的结果差异的主要原因，在有效过滤器尺寸一致时高斯过滤器与均值过滤器得到了近乎相同曳力分析结果。冷模装置模拟结果表明，基于低密度颗粒物性开发的过滤曳力模型能够很好地预测低密度颗粒流化体系的流场。模拟得到的时均固含率轴向分布结果与试验值吻合较好，且优于基于FCC颗粒物性开发的其他过滤曳力模型。本研究构建的基于低密度Geldart A类颗粒物性开发的过滤曳力模型能够准确模拟低密度颗粒系统的流态化，为后续进一步开展流化床反应器传质传热和化学反应的模拟以及流化床放大设计奠定了基础。

关键词： 低密度颗粒；过滤曳力模型；双流体方法；湍动流化床

报告人/墙报展示人简介：

林海瑞，男，2000 年 2 月出生于浙江省温州市，2018 年 9 月进入浙江工业大学化学工程与工艺专业学习，于 2022 年 6 月获得工学学士学位。同年 9 月保送攻读浙江大学材料与化工专业硕士研究生，师从成有为副教授。现主要研究方向为低密度过滤曳力模型开发和流化床反应器多尺度数值模拟。联系方式：22260337@zju.edu.cn。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

第 5 分会场：面向绿色低碳过程的气液固多相流科学及应用

化学工程领域中的人工智能与数据科学：以气固流化床为例

罗正鸿[1]

[1] 上海交通大学/宁夏大学

*Email: luozh@sjtu.edu.cn

化学工程问题往往涉及到多尺度、多层次等特点，并且往往涉及多相流动、传递及反应行为，这些非稳态非线性行为，在各个尺度、各个层次、不同相界面间相互耦合、相互影响，极大地增加了理解并准确预测这些多尺度多相场特性的难度，且涉及到多个变量及多个目标，对反应器放大、工艺设计、系统控制等提出了挑战。这些化工过程中均离不开化工数据的支撑。近些年，随着人工智能的快速发展，化学工程逐渐向以数据科学为中心的方向发展。

本报告分三部分。第1部分是研究背景（如上），第2部分结合我们近期的一篇综述，简要回顾要人工智能及数据科学在化工中的一些典型的应用，第3部分汇报我们课题组近期一些相关工作，最后是总结与展望。

报告人简介：

Pelab.sjtu.edu.cn

罗正鸿，上海交通大学、宁夏大学教授，中国化工学会会士，国家杰青、国家万人领军人才、教育部长江学者特聘教授及“十四五”国家重点研发计划“煤炭清洁高效利用技术”重点专项总体专家组成员。长期从事（聚合）反应器工程研究。较为系统研究了气-固、气-液、液-液及气-液-固等多相反应器中多尺度流体动力学特征，归纳出各尺度模型耦合的“关键信息传递”方法，建立了描述流体动力学特征的多尺度计算流体力学模型，开发了气-固二相流两相相互作用力及界面传递模型，并成功应用于多家大型企业。发表 200 余篇 SCI 论文，应邀在 Chem. Rev.及 Prog. Polym. Sci.撰写综述，授权专利 20 项，获省部级科技奖 7 项（2 项一等），出版专著章节 2 章。自 2012 年以来一直担任国际粒群衡算（PBM）会议的科学委员会成员，目前也是 Ind. Eng. Chem. Res.副主编，Macromol. React. Eng., Int. J. React. Eng.及《化工学报》等期刊（顾问）编委。在研究生培养方面，已指导 3 篇博士论文入选上海交通大学优博（提名）、2 篇博士论文获京博博士论文铜奖及 1 篇中国颗粒学会优秀博士论文等。

离子液体中气泡多尺度演化行为及对反应-分离的影响机制

张香平[1]

[1]中国石油大学（北京）

*Email: xiangping.zhang@cup.edu.cn

离子液体作为一种新型绿色溶剂，有望替代传统有机溶剂，被广泛用于化工绿色生产、能源高效转化、高端材料合成等过程。上述过程中，气液接触是反应、分离过程最重要和最常见的工况之一，而气液接触以气泡的基本形式存在。气泡行为极大影响物质转化和能量利用效率，对其本质特征和运动规律的认识是精准设计新型结构反应器的关键，对节能减排和提高产品质量具有重要意义。

报告人简介：

中国石油大学（北京）教授，中国科学院过程工程研究所研究员，博士生导师，享受国务院特殊津贴。获国家杰出青年基金资助，入选国家“万人计划”、国家“百千万人才工程”等，任科技部重点领域创新团队负责人。

主要研究方向为化工热力学及系统集成、气体分离、离子液体、碳捕集与转化。主持国家重点研发计划、国家自然基金重点等项目多项，开发了多套绿色技术并实现了产业化。在 *Nature Commun*, *Chem Rev*, *AIChE J* 等发表 SCI 论文 318 篇；编著书和章节 5 本；获授权发明专利 70 余项。获国家技术发明奖二等奖（排名 2）、国家自然科学奖二等奖（排名 3）、中国化工学会科学技术奖基础研究成果奖一等奖（排名 1）、中国石油和化学工业联合会科学技术奖技术发明一等奖（排名 2）、闵恩泽能源化工杰出贡献奖、侯德榜化工科学技术奖成就奖、朱李月华优秀教师奖、中国科学院“三八红旗手”等。

个人主页：

https://www.cup.edu.cn/chem/szjs/jsdw/hxgyx1/jsyjy2/0ef1dff024424df3907befd617bbdddb.htm

浸没式旋转填充床反应器内气液流动特性及应用

初广文[1]

[1]北京化工大学

*Email: chugw@mail.buct.edu.cn

旋转填充床作为一种典型的过程强化设备，在尾气脱硫、二氧化碳吸收等气体为连续相的反应中展现出优异的性能。对于氧化、加氢、氟化等通常以气体为分散相为特征的反应，传统旋转填充床难以适用。

本研究面向气体为分散相的过程强化需求，提出了浸没式旋转填充床反应器。通过可视化技术结合计算流体力学模拟，研究了反应器内流动形态及气体分散特征，并进行了流动形态转变规律的探讨。进一步，采用多普勒光学探针技术对反应器内气泡尺寸分布、局部气含率进行研究，探讨了气泡尺寸及其分布规律，以及局部气含率变化规律。并以臭氧降解磺胺甲恶唑为模型体系，探讨了浸没式旋转填充床反应器强化臭氧传质及磺胺甲恶唑降解性能。

报告人简介：

北京化工大学化学工程学院教授，博士生导师，北京化工大学教育部超重力工程研究中心常务副主任，中国化工学会化工过程强化专业委员会委员，国家自然基金委杰出青年基金获得者（2017 年）。主要研究方向为超重力反应器工程，致力于超重力反应器的科学基础、新结构到工程应用的系统创新研究，主持研制了近百台工业超重力反应器，被中石化、中石油、中海油等公司采纳，应用于化工、环保、能源、新材料等领域，成效显著，超重力装备也出口至法国 TOTAL、瑞士 SBM 等国际著名公司。获教育部技术发明一等奖 1 项（排名 1），国家技术发明二等奖和国家科技进步二等奖各 1 项（排名 4，9）、省部级一等奖 3 项（排名 4，5，5）。

喷雾农药雾滴的空间飘移行为与剂量损失调控

马学虎[1]

[1]大连理工大学

*Email: Xuehuma@dlut.edu.cn

我国是农药生产和使用大国，但农药有效利用率较低（40.2%），其中空间传递过程中有高达30%以上的雾滴发生脱靶飘移，造成了农药的大量浪费和生态环境的破坏。本文聚焦于农药雾滴的空间飘移过程，搭建了空间运行过程的共性规律的实验和数值模拟研究平台，首次提出了空间运行过程的“二重维度”概念，分别从横向和纵向两个维度对雾滴在空间环境中的动态飘移行为和剂量传递规律进行研究，以阐明雾滴空间飘移的主控因素、流失规律、原因机制以及调控策略。综合多场景下不同尺寸雾滴的横向飘移距离差异，确定了易发生飘移的敏感雾滴粒径区间，从原理上诠释了雾滴“为何飘”以及“飘哪里”的问题。通过量化各因素对雾滴横向飘移距离的影响程度，明确了雾滴粒径和喷雾高度是可调控参数中影响雾滴飘移的主控因素。发现了纵向维度上雾滴的空间剂量传递过程呈现典型的分区效应，表现为近喷嘴稠密区雾滴间的相互碰撞行为和稀疏分散区雾滴的飘移扩散行为，并明确了碰撞和扩散行为对空间剂量传递的影响机制，明晰了雾滴“从哪飘”以及“飘多少”的问题。

报告人简介：

化工资源清洁利用辽宁省重点实验室 主任

超临界多组分流体中多孔煤颗粒反应动力学

白博峰[1]

[1]西安交通大学

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

超临界水气化制氢是煤炭资源实现清洁低碳、安全高效转化的重要技术方向。提升反应速率是规模化高效煤制氢的关键之一，其核心科学问题为超临界多组分流体与多孔煤颗粒的热质传递和化学反应，涉及流固异相反应、多组分流体均相反应、不规则多孔煤颗粒形态演化、颗粒间相互作用等相间物理化学效应。本报告介绍了煤炭超临界水气化制氢中煤颗粒形态演变试验技术和不规则多孔颗粒反应动力学数值方法，阐明了超临界多组分流体中煤颗粒的反应特性，揭示了颗粒气化反应的定量规律，为提升煤颗粒超临界水气化反应速率提供了理论支撑。主要进展如下：

（1）揭示了气化制氢过程中煤颗粒结构、形态的演化特性及其对反应速率的影响规律，发现颗粒表面尖锐结构显著促进气化反应；数值再现了颗粒内部不规则反应锋面的演化，得到了颗粒形态参数与反应速率间的定量规律，为优化煤颗粒制备促进气化反应速率提供了理论依据。

（2）查明了超临界流体中组分浓度对煤颗粒气化的影响规律，发现产物间的水气转化反应显著抑制了煤颗粒充分气化，煤颗粒孔隙内水气转化反应阻碍了煤的蒸汽重整反应、孔隙内多组分（非等摩尔）扩散过程，明确了增强颗粒表界面反应产物的扩散与输运是强化颗粒气化反应速率的关键。

（3）发现了气化制氢过程存在严重的煤颗粒团聚现象及气化抑制效应，揭示了粒径、温度及煤颗粒浓度对团聚的影响规律，数值模拟了团聚体在气化制氢过程的变形、破碎等形态演化，提出了团聚体形态结构与气化反应速率的定量关联式，为通过抑制颗粒团聚、提升气化反应速率提供了理论支撑。

报告人简介：

白博峰，西安交通大学二级教授、领军学者、国家杰出青年科学基金获得者、国家科技创新领军人才。现任中国工程热物理学会理事，多相流分会秘书长，中国锅炉压力容器标准委员会换热设备分委会副主任委员，中特促进会氢能装备工作委员会副秘书长。担任 Physics of Fluids 顾问委员会专家，英国机械工程师协会会刊 JMES、Measurement 等副主编，计算物理、中国石油大学学报等期刊编委，创办“热流体动力学”国际学术会议。参编国家标准 14 部、行业手册 4 部，发表中英文期刊论文 400 余篇，授权发明专利 40 余项，获国家技术发明二等奖 1 项，省部级科学技术奖一等奖 4 项，其他省部级奖励 4 项。

个人主页：https://gr.xjtu.edu.cn/en/web/bfbai

基于微纳结构的太阳能光热转换及海水淡化

何玉荣 [1]

[1] 哈尔滨工业大学

*Email: rong@hit.edu.cn

太阳能热利用是太阳能利用的主要形式之一，颗粒系统在太阳能热利用中发挥着重要的作用，广泛应用于新能源、储能等领域。开展太阳能热利用领域关键科学问题研究，对太阳能热利用的工程应用具有重要的学术研究价值和工程应用前景。

基于不同的微纳结构开展功能纳米颗粒强化太阳能光热转换机理及应用基础研究，从理论分析、数值模拟和实验等多个方面，深入研究功能纳米颗粒强化光热转换及太阳能热利用中的多相流能质输运关键科学问题，掌握纳米颗粒光热转换特性调控的技术手段，为颗粒系统在太阳能光热转换及海水淡化领域的工程应用提供理论基础。

报告人简介：

何玉荣，哈尔滨工业大学，能源科学与工程学院，教授，博士生导师，黑龙江省教学名师。致力于能源清洁低碳高效利用、超高热流密度器件散热等领域的多相流热物理学问题研究。已在国内外期刊发表和录用 SCI 收录论文 200 余篇，发表论文总计 SCI 他引 7000 余次，单篇最高 SCI 他引 638 次，H 因子为 52（Web of Science）。于 2004 年获得荷兰惠更斯奖学金，2006 年获得哈尔滨工业大学校优秀博士学位论文，2007 年获全国优秀博士学位论文提名，2008 年入选教育部新世纪优秀人才支持计划，同年，获黑龙江省留学人员报国奖，2013 年获国家自然科学基金委优秀青年基金，2014 年获哈尔滨市科技创新人才研究专项基金杰出青年基金，2016 年获得黑龙江省杰出青年基金，2018 年获校青年科学家工作室资助，入选 2018 年度国家级高层次人才计划。

https://homepage.hit.edu.cn/heyurong?lang=zh

气-液、液-液体系纳微界面反应强化几个实例介绍

張志炳[1]

[1]南京大学

*Email: zbzhang@nju.edu.cn

简要介绍微纳界面反应强化技术在百万吨柴油加氢装置、40万吨以上丁辛醇装置、10万吨丙交酯装置的寡聚、合成、分离过程的应用。

报告人简介：

張志炳,南京大学二级教授，博士生导师，南京大学化工学科主要创始人，现为“双一流”学科。中国化工学会首批会士，中国化工学会侯德榜化工成就奖和江苏省化学化工学会时钧化工成就奖获得者。历时 20 年，原创微界面传质强化技术，在江苏省委支持下，创建南京延长反应技术研究院，任院长兼首席科学家。长期从事绿色低碳化学制造技术研究。在国内外发表学术论文 200 余篇，已获国际国内知识产权 400 余项，其中国际 50 余项。主持完成了国家、省部和大型企业的项目 160 余项。获省部级科技进步一等奖 3 项、技术发明一等奖 1 项，国家科技进步二等奖 1 项（均为第一完成人），获国家发明创业特等奖 1 项（全国排名第二），中国国际发明展览会金奖 1 项，享受国务院特殊津贴。

含表面活性物质气液体系的CFD-PBM耦合模型研究

王铁峰[1]

[1]清华大学化工系

*Email: wangtf@tsinghua.edu.cn

工业过程多相流中通常含有表面活性物质，其对流动和传质行为产生显著影响。例如，由CO或合成气为原料，通过生物发酵法可合成乙醇和蛋白，该过程中生成的乙醇在水中即是表面活性物质，必须考虑其对体系的影响。我们基于计算流体力学（CFD）和群平衡模型（PBM）相耦合的策略，对气液体系建立了CFD-PBM耦合模型，通过包含气泡聚并和破碎的机理模型，该耦合模型对操作条件和物性参数在大范围内变化均具有较好的预测性能。本报告工作中，我们进一步在气泡聚并模型中详细考虑了表面活性物质的影响机制，不仅能在气泡尺度上准确预测不同表面活性物质浓度下的气泡聚并时间，还能在反应器尺度上预测气含率和气液体积传质系数的变化规律，为该类体系的反应器优化设计提供理论指导。

报告人简介：

王铁峰，博士、教授，清华大学化工系主任，国家“万人计划”科技创新领军人才。主要研究领域为清洁能源化工、多相流反应器和非均相催化。在 Nat. Synth.、Nat. Commun.、Chem、ACS Catal.、AIChE J.、Chem. Eng. Sci.等期刊和学术会议上发表论文 300 余篇，其中 SCI 收录 200 余篇，申请发明专利 40 余件，2020-2023 年四年连续入选爱思唯尔中国高被引学者榜单。入选科技部中青年科技创新领军人才、教育部新世纪优秀人才、北京市科技新星。获中国石化联合会科技进步一等奖 2 项、化工学会科技进步特等奖 1 项、中国有色金属工业科学技术一等奖 1 项、中石化集团公司科技进步一等奖 2 项。获侯德榜化工科技创新奖、侯德榜化工科技青年奖、中国石化联合会青年科技贡献突出奖。

非均相多酶级联催化与辅因子循环系统

孙 彦[1]

[1]天津大学

*Email: ysun@tju.edu.cn

生物体中，多酶复合体将不同功能的酶分子组装为精妙的生物分子机器，通过快速传递产物中间体、减少产物抑制效应以及高效再生辅因子等过程，充分发挥各个酶及辅因子的功能，实现生物分子机器的高效运转和生命活动的正常进行。利用酶的高选择性和特异性，体外生物催化可绿色高效生产各种有用化学品，同样需要多酶级联反应来实现。在体外如何模仿天然多酶复合体或生物分子机器，构建高效的多酶组装体系，实现高效的生物催化转化过程，是生物催化工程研究的重要挑战。近年来本课题组致力于模仿生物分子机器，研究构建新型多酶级联催化和辅因子高效利用系统，包括氧化还原酶的融合肽桥设计，通过辅因子通道效应大幅度降低辅因子浓度；共固定化多酶和辅因子，实现高效级联催化以及酶和辅因子的循环利用。本报告将主要介绍共固定化多酶与辅因子的非均相级联生物催化系统，包括聚电解质辅助氢键有机框架（HOFs）系统[1]和硅胶耦合微凝胶系统[2]。HOFs具有合成简单、生物相容性好等优点，可用于固定化酶。但是，HOFs通常表现出较低的固定化酶活回收率，并且难以将包括辅酶依赖的多酶级联体系限制于内部。我们建立一种聚电解质辅助的包封方法，可使不同的辅酶依赖的多酶级联体系以高负载量及高级联活性共包封于HOFs内，其通用性和高效性通过不同HOFs体系、多酶级联体系和辅因子得到证明。与相应的游离体系相比，非均相多酶级联体系的整体催化活性均显著提高，并且具有显著增强的稳定性以及卓越的循环利用性。

参考文献

[1] S. Liu, Y. Sun*, Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62: e202308562.

[2] S. Liu, X. Wu, X. Dong, Q. Shi, Y. Sun*: ACS Sustain. Chem. Eng. 2024, 12: 6366.

报告人简介：

孙彦，工学博士，教育部长江学者特聘教授，国家杰出青年科学基金获得者。1990 年获得东京大学工学博士学位，1993 年 11 月任天津大学化学工程系教授。2000 年获得国家杰出青年科学基金，受聘教育部长江学者。国务院学位委员会第五、六届化工学科评议组成员，教育部“长江学者与创新团队发展计划”项目负责人。现任 Journal of Chromatography A 主编，Chinese Journal of Chemical Engineering 副主编。主要从事生物化工和生物医药工程研究，发表 SCI 收录论文 400 余篇。出版中文专著 2 部，共编英文专著 1 部。指导毕业博士 60 余名。获省部级自然科学一等奖 1 项，二等奖 2 项，亚洲生物技术联合会亚洲青年生化工程师学会奖 1 项。

实验室主页：http://limb.tju.edu.cn/

三元正极材料前驱体颗粒大小与形貌调控

杨超[1]

[1]中国科学院过程工程研究所

*Email: chaoyang@ipe.ac.cn

发展锂电新材料技术与产业是实现“双碳”战略的重要路径，高能量密度高镍三元等高端前驱体之前被欧日韩等垄断，气液固三相搅拌反应结晶装备工业放大及如何精准调控前驱体颗粒大小与形貌是瓶颈难题。我们构建了气液固三相反应结晶过程的微观混合、前驱体晶体生长、团聚、破碎耦合模型和计算方法，研制出高效连续反应结晶智能测控系统，发明了曲面斜叶圆盘涡轮搅拌等适于三元前驱体制备的高效新装备，实现工业反应结晶装备的数字化精准放大设计，以及窄粒径分布、高球形度的高端前驱体产品按需工业生产，关键指标优于国外产品，技术应用覆盖全球>50%、国内>70%三元前驱体厂家。

报告人简介：

杨超，博士，研究员，中国科学院过程工程研究所所长。国家杰出青年科学基金获得者，教育部长江学者特聘教授，国家万人计划科技创新领军人才，北京学者。主要研究反应器工程、航天固体动力材料和电子级化学品。发表 SCI 论文 245 篇，授权发明专利 73 件（包括国际 9 件），获计算机软件著作权 52 项。先后获国家科技进步二等奖、国家技术发明二等奖、国家自然科学二等奖各 1 项，还获何梁何利基金科学与技术创新奖、中国青年科技奖等。主持国家重点研发、国家重点基金、国家重大科研仪器研制等项目。

微纳复合结构表面沸腾汽泡动力学和强化换热性能研究

魏进家[1]

[1]西安交通大学

*Email: jjwei@xjtu.edu.cn

提出了一种通过耦合柱状微结构钉扎效应和非均匀纳米墙的团簇状汽泡成核的新方法来提高低表面张力液体中的沸腾传热性能。实验研究比较了光滑表面、均匀/非均匀的纳米墙表面、柱状微结构表面和均匀/非均匀的纳米墙与柱状微结构表面复合的微/纳复合结构表面的汽泡动力学行为和池沸腾性能。相比于光滑表面，柱状微结构表面的平均气泡脱离直径和脱离周期显著减小，气泡脱离速度显著加快，但是汽化核心密度提高不是很显著。纳米墙表面汽化核心密度提高十分显著，气泡脱离直径和脱离周期减小较为显著，气泡脱离速度提高较为明显。与光滑表面相比，均匀/非均匀纳米墙表面在饱和池沸腾中CHF没有明显改善，但是最大HTC显著增加。微/纳复合结构表面的平均气泡脱离直径和脱离周期减小最为显著，气泡脱离速度和汽化核心密度均显著增加，出现“微气泡爆炸性喷射”的独特现象。微/纳复合结构表面的沸腾传热性能，包括到达CHF时的壁面过热度、CHF和HTC都显著提升，且随液体过冷度的提高而提高的趋势最为明显。通过耦合柱状微结构的钉扎效应和团簇气泡成核作用是促进汽泡脱离并提高沸腾性能的有效方法。

报告人简介：

魏进家，西安交通大学化学工程与技术学院教授、博士生导师，国家杰出青年科学基金获得者，教育部长江学者特聘教授，中组部万人计划科技创新领军人才。主要从事两相流动与传热，太阳能光热及化学转化与利用的研究，教育部化工类专业指导委员会委员，中国化工学会理事，中国力学学会流体力学专委会委员及多相流与非牛顿流体专业组组长，中国化工学会过程模拟与仿真专委会、过程强化专委会委员，《Chinese Journal of Chemical Engineering》等五个期刊编委。主持国家重点研发计划项目、国家自然科学基金重点项目、组织间合作项目、联合基金重点项目、863 重点课题及其他项目 20 余项。已发表国际期刊论文 300 余篇，出版专著 5 部（章），在国际学术会议上做邀请报告 20 余次，授权国家发明专利 30 余件、美国发明专利 1 项，获省部级自然科学一等奖 5 项。个人主页：https://gr.xjtu.edu.cn/web/jjwei

微通道反应器流场与微观混合性能分析及纳微材料制备

文利雄[1]

[1]北京化工大学

*Email: wenlx@buct.edu.cn

主要通过实验与CFD模拟方法，研究分析微通道反应器内液/液体系的流动与混合特性，探讨反应器结构与操作条件对微观混合性能的影响规律。在此基础上，利用微通道反应器通过共沉淀反应合成了一系列镍基复合金属化合物材料，将其作为超级电容器正极材料考察了反应器微观混合性能对所合成材料电化学性能的影响规律，试图初步阐明反应器内传递/混合性能与反应动力学结合调控反应过程的匹配机制。

报告人简介：

博士，现任北京化工大学 教授，博士生导师；《中国粉体技术》编委。主要研究领域为化工过程强化技术、纳微储能材料、界面与材料科学等。作为项目负责人承担了国家重点研发计划、国家科技支撑计划、国家“863”计划、教育部新世纪优秀人才支持计划、国家自然科学基金、北京市科技新星计划等项目。在“Chem. Eng. Sci.”、 “Chem. Eng. J.”、“Ind. Eng. Chem. Res.”、“中国科学”等国内外核心刊物上发表学术论文 100 余篇。

个人主页链接：https://chem.buct.edu.cn/2019/1217/c13236a175312/page.htm

Large eddy simulation of bubble column bubbly flow coupling with physics-based subgrid turbulent viscosity model and the SGS turbulence diffusion and added mass stress force models for heat and mass transfer

XIAOGANG YANG[1]

[1] 宁波诺丁汉大学

* xiaogang.yang@nottingham.edu.cn

The presence of bubbles or large solid particles substantially modifies the local small-scale turbulence structures. However, there has not been a a fundamental physically-based understanding to the turbulence modulation due to the coexistence of both liquid and dispersed phases. Based on the energy flux balance, a theoretical SGS viscosity model to consider the hybrid effects of shear turbulence and bubble induce turbulence is proposed. The SGS-filtered velocity fluctuations of the liquid phase can be envisaged as the turbulent eddies that act on the surface of bubbles, consequently causing the bubble dispersion. As a result, the so-called turbulent dispersion force and added mass stress force are usually considered as non-dominant forces in the interfacial momentum, heat and mass transfer but they have been overlooked in many Euler/Euler modelling of bubble column bubbly flows. The present study will demonstrate through Euler/Euler LES modelling that such turbulent dispersion of bubbles can be effectively indicated by the effect of turbulent eddies on bubble dynamics, i.e. the behaviour of bubble transport and interfacial heat and mass transfer, as revealed by Sommerfeld et al. (2018). The models of spatially filtered terms for turbulent dispersion force and added mass stress force were proposed and evaluated with the modification of the SGS eddy viscosity to reflect bubble turbulent dispersion and bubble induced turbulence.

报告人简介：

Professor Xiaogang Yang currently is Head of Department of Mechanical, Materials and Manufacturing Engineering at University of Nottingham Ningbo China. He received his BEng in Mechanical Engineering in 1982, MSc in Engineering Thermophysics in 1984 from Northeastern University, China and PhD in Chemical Engineering in 1996 from University of Birmingham in 1996. His research activities cover broad range of various engineering applications of energy technologies, focusing on developing different chemical reactors for reactive manufacturing and synthesis of nano and micro particle materials, MOCVD devices for solar energy utilisation, complex multiphase flows, turbulence modelling and aerodynamic design. Prof. Yang specializes in CFD modelling including LES simulation, DVM, turbulence modelling, casting process modelling, also bubble and particle dynamics, particle and bubble dispersion in multiphase turbulent flows. He has authored more than 180 publications in various international journals and major conferences. He is Ningbo ‘3315’ talent scheme holder.

电解水制氢电解槽的模拟：现状及进展

管小平[1]

[1]中国科学院过程工程研究所

*Email: xpguan@ipe.ac.cn

电解水制氢电解槽是绿氢经济的核心反应器。研究电解槽内部多相流、传质传热及电化学反应的耦合规律及调控机制是装备放大、设计、控制的科学基础。本报告将围绕电解槽不同尺度的数学模型、模拟方法展开讨论，介绍课题组在电解槽孔隙尺度模拟、宏观模拟等方面的工作，揭示电解槽内多相流分布、响应时间等的控制机制，并针对性地提出电解槽强化技术，解决内部流动分布不均的问题，为电解槽技术开发和放大提供科学指导。

报告人简介：

管小平，2015 年博士毕业于浙江大学化工工程与生物工程学院，现任中国科学院过程工程研究所副研究员。研究方向为多相反应器的介尺度理论及工程应用。入选中国科学院青促会（2023）、过程优青（2022）。主持国家自然科学基金面上项目、国家自然科学基金青年项目、国家重点研发计划子课题、北京市自然科学基金青年项目及企业合作项目等近 10 项。在 AICHE J、CES、IECR、CEJ 等国内外化工期刊发表论文近 50 篇。作为会议秘书长，协助主办了第 14 届国际气液和气液固反应器工程大会(GLS-14)、第 9 届国际 FORMULA 会议(FORMULA-IX)等国内外学术会议。应邀参加国内外化工领域学术会议做特邀报告 10 余次。

电子特气硅烷生产及应用中的多相反应器研究

肖文德[1]

[1]上海交通大学

*Email: wdxiao@sjtu.edu.cn

电子特气在半导体、光伏及平板显示等领域具有广泛的用途。与常规气体不同，其纯度一般都在99.9999%以上，总金属含量都在ppb以下。典型的产品是硅烷(SiH4)，它既是CVD法生产光伏电池片的抗反射膜Si3N4和棒状半导体级多晶硅的原料，也是流化床制备颗粒多晶硅的原料，还是芯片晶圆外延生长的原料，目前国内的市场超过30万吨/年。硅烷生产过程包括工业颗粒硅气化的流化床反应器，和硅烷生产的反应精馏塔，硅烷应用包括CVD法生产颗粒多晶硅的流化床反应器，和棒状硅的钟罩式反应器，以及薄膜沉积的薄膜反应器，涉及颗粒的气固反应。研究者近10年来在以上领域具有较多的研究，本次会议将给予简要介绍。

报告人简介：

上海交通大学特聘教授，1991 年博士毕业于华东理工大学化工专业，教育部“长江学者”特聘教授，上海市优秀科技“启明星”，教育部“跨世纪优秀人才”，享受国务院特殊津贴。主要从事能源、环境和材料领域相关的催化工程、反应工程、分离工程及化工系统工程研究。先后主持国家“九五”重点科技攻关项目和自然基金重点项目、科技部“十五”和“十一五”863 项目、河南省 2015 重大专项和 2019 年内蒙古自治区科技重大专项等重点研究项目及多项企业合作项目。相关成果已成功应用于能源、材料、电力等行业，创新研究和发明的烟气氨法脱硫技术在国内广泛应用，已有三百余套应用业绩；创新研究的 CO2 利用生产碳酸酯技术实现产业化，并广泛应用于锂离子电池溶剂；创新研究的煤制乙二醇技术也建成了多套工业化装置；创新研究的高纯硅烷生产技术实现了产业化，产品占据国内一半的市场。目前的重点研究方向是光伏及半导体的高纯硅基电子材料制备新技术，锂钠储能电池材料制备新技术，可降解功能材料制备新技术。

染料制造超重力过程强化

罗勇[1]

[1]北京化工大学

*Email: uoyong@mail.buct.edu.cn

面向染料安全高效制造的国家重大需求，聚焦染料制造超重力过程强化，从“理论-装备-应用”三个层面展开创新研究：阐明了丝网填料表面纳微结构与流体分散之间的构效关系，建立了量化纳微尺度分散效应的跨尺度Navier-Stokes方程；揭示了超重力环境下纳微尺度多相流传递-反应强化机制，构建了反应器数学模型，创制了染料制造超重力工业反应器；首创形成了超重力强化染料制造的连续化新工艺，合作建成了万吨级亚硝酰硫酸、分散橙288等三条工业生产线，实现了安全高效连续化生产。

报告人简介：

https://chem.buct.edu.cn/2019/1217/c13236a175338/page.htm

气液固氧化反应器流体力学行为的实验-模拟-应用一体化研究

靳海波*，何广湘，杨索和，白镓源，马磊，郭晓燕，谷庆阳

[1] 北京石油化工学院新材料与化工学院/燃料清洁化及催化减排技术北京市重点室，

北京大兴清源北路 19 号，北京，102617

*Email: jinhaibo@bipt.edu.cn

气液固氧化反应器作为化工、环保及能源等领域的重要设备，其流体力学行为直接影响反应效率、产品质量及能耗等关键性能指标。通过实验-模拟-应用一体化的方法，深入探讨了气液固氧化反应器内的流体力学行为规律。通过差压法、动态压力传感技术、电阻层析成像技术等测量方法研究气液固多相流反应器流体力学特性；通过建立CFD-PBM耦合模型，考察相间作用力的影响，修正了曳力模型，建立了多因素影响破碎与聚并模型，并将耦合模型用于加压空气-醋酸、加压加温空气-水-（TA）、加压加温N2-醋酸-（TA）等体系。在加温加压体系，压力与温度影响是一致的，压力与温度升高，子气泡分布范围变窄，气泡数密度增加，导致塔内气含率增加，且数值模拟的径向截面气含率和ERT的结果相一致，能较好的预测了高温高压气液两相流动参数。未来研究可进一步拓展至更多类型的多相反应器，完善数值模拟模型，提高预测精度，推动化工领域的技术进步与产业升级。

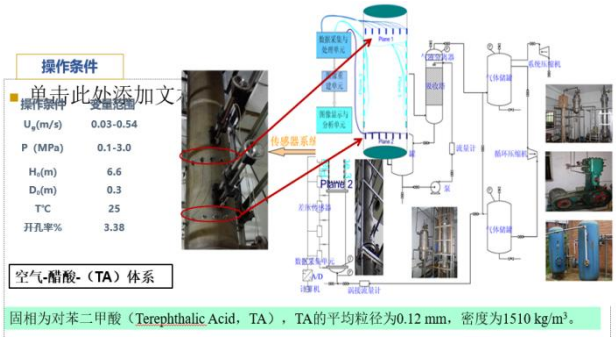


Fig. 1 气液固氧化反应器实验装置图与实验条件

关键词： 气液固多相流；氧化反应器；流体力学；CFD

参考文献

[1] Yan P, Jin H, Gao X, et al. Numerical analysis of bubble characteristics in a pressurized bubble column using CFD coupled with a population balance model[J]. Chemical Engineering Science, 2021, 234: 116427.

[2] Wang T, Wang J. Numerical simulations of gas–liquid mass transfer in bubble columns with a CFD–PBM coupled model[J]. Chemical Engineering Science, 2007, 62(24): 7107-7118.

[3] Yang N, Wu Z, Chen J, et al. Multi-scale analysis of gas-liquid interaction and CFD simulation of gas-liquid flow in bubble columns[J]. Chemical Engineering Science, 2011, 66(14): 3212-3222.

气液固多相结晶过程的成核及晶体生长特性

陈建新[1]

[1]河北工业大学

*Email: chjx2000@126.com

气液固多相复杂体系结晶过程中，气体辅助结晶涉及将微气泡和纳米气泡注入饱和溶液中，以诱导异质成核。微/纳米气泡的引入改善了结晶悬浮液的热/质传递，从而促进成核和晶体生长，并导致生长更大尺寸、粒度分布更均匀的晶体；如微/纳米气泡可促进硫酸钠晶体成核和生长，其作用可改变介稳相平衡区域大小。

报告人简介：

陈建新，先后在天津大学化工学院学习工作十年，后去德国纽伦堡大学和马丁路德大学做了两年客座研究员，回国后根据导师王静康院士建议来河北工大工作至今，任博士生导师，元光学者特聘教授；主要研究功能分离与材料、水处理与精细化学品、资源高效利用与环保，现也挂职中海油天津化工研究设计院副总工程师；主持国家重点研究计划课题、国家基金委联合重点项目多项项目；申请发明专利 47 项，发表文章 103 篇，承担过二十余个项目得到工业化应用，取得好的经济及社会效益。

颗粒-流体多相流系统传质过程中的计算传质学方法研究

李文彬[1]

[1]天津大学

*Email: richard@tju.edu.cn

颗粒-流体系统在化工过程工业领域应用场景广阔，但复杂的湍流效应和相界面结构使得系统内传质过程呈现显著的非线性特征，对颗粒-流体多相流传质技术发展与应用提出了挑战。为此，我们基于计算传质学方法，提出了湍流传质扩散模型，构建了颗粒-流体多相流传质过程的计算传质学模拟平台，探讨了颗粒-流体多相流系统中湍流扩散各向异性特征及其对传质过程的影响。进一步耦合颗粒分辨方法，提出了基于相界面结构分辨的计算传质学模型，建立起颗粒-颗粒群-反应器多尺度传质行为的关联。相关研究有利于实现颗粒-流体系统多相流传质过程的准确预测，为其优化放大与工业应用夯实基础。

报告人简介：

天津大学化工学院副研究员，主要从事化工传质分离过程模拟与强化研究，针对气液固三相在固定床、流化床等多种反应器内的传质过程提出了多尺度计算传质学模型，解决了颗粒-流体多相流系统复杂传质过程的准确预测问题，丰富了计算传质学理论。主持国家重点研发计划政府间国合项目课题、国家重点研发计划青年科学家项目任务、国家自然科学基金面上项目及青年项目、企事业单位合作项目等 20 余项。在多相流传质领域相关期刊上发表论文 50 余篇。
http://chemeng.tju.edu.cn/cn/szdw?type=detail&id=407

气泡破碎内部流动现象的建模、数值模拟及实验研究

张华海[1*]，付少童[1,2]，向星[1,2]，王利民[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: hhzhang@ipe.ac.cn

气泡在连续介质流动中的分散存在于许多工业过程中，例如化工、石油、制药等。气泡尺寸分布是破碎和聚并之间平衡的结果，是气液界面面积和动量、质量传递速率的关键参数。气泡破碎在气液流动中起着重要作用。近三十多年来，研究者已经开发了许多气泡破碎模型，然而这些模型的准确性需要通过实验或模拟数据来验证。气泡变形和破碎过程中一些重要物理机理，例如实验发现的变形气泡内部流动机制，并没有得到很好的研究，这导致模型与实际情况之间存在巨大偏差。基于伯努利方程理论建模、采用Allen-Cahn相场格子玻尔兹曼方法进行直接数值模拟以及实验全面研究了变形气泡内部的快速流动过程。系统分析了气泡尺寸、气液物理性质等关键参数对气泡破碎动力学行为的影响。实验观测及数值模拟很好地发现了气体从较小部分流向较大部分的气体流经气泡颈的内部流动。在高气体粘度下，由于粘性流动阻力增强；在低表面张力和高气体密度下，由于内流驱动力减弱；气泡破碎再分布程度较低。在高液体粘度下，由于气泡上升速度降低，气泡颈切断时间长于内流时间，最终母气泡未能破碎。数值模拟预测的颈部内部流速与理论计算值一致，这极大地验证了理论模型，强调了内部流动机理的重要意义。

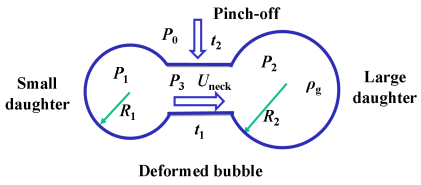


Fig. 1 Internal flow inside deformed bubble.

关键词： 气泡破碎；内部流动机制；直接数值模拟；理论模型；实验研究

参考文献

[1] H.H. Zhang, S.T. Fu, X. Xiang, W.T. Su, Z.J. Guo and L.M. Wang. Direct numerical simulations of internal flow inside deformed bubble by phase-field-based lattice Boltzmann method. *Chem. Eng. J.* 2024, 495: 153312.

[2] H.H. Zhang, Y.L. Wang, A. Sayyar, T.F. Wang. Experimental study on breakup of a single bubble in a stirred tank: Effect of gas density and liquid properties. *AIChE J.* 2023, 69(1): e17511.

[3] H.H. Zhang, G.Y. Yang, A. Sayyar, T.F. Wang. An improved bubble breakup model in turbulent flow. *Chem. Eng. J.* 2020, 386:121484.

报告人简介：

张华海，1995 年，中国科学院过程工程研究所助理研究员。于 2022 年在清华大学化学工程系获化学工程与技术专业的博士学位，同年任中国科学院过程工程研究所介科学研究部助理研究员，主要研究多相流数值理论与模拟，多物理场耦合多尺度仿真，多相流反应器设计优化和放大。在 AIChE J，Chem. Eng. Sci，Chem. Eng. J，Phys. Fluids 等期刊上发表学术论文二十余篇。获中国颗粒学会优秀博士学位论文奖、中国石油科学十佳论文奖。主持或参与国家自然科学基金、中科院战略先导专项 A 类课题、光合基金三期 A 类项目、过程工程研究所前沿基础研究项目、重点实验室自主部署课题、企业委托课题等十余项。

光热蒸发过程调控与微观水簇蒸发机制

李成成，钟雅洁，刘陈珏，黄玮[1]

[1]海南大学海洋科学与工程学院，海南省海口市人民大道 58 号，570228

*Email: huangwei@hainanu.edu.cn

太阳能界面蒸发过程研究在过去几年中收到持续广泛的关注，其功能不再局限于淡水提取，伴随的水或离子的迁移、富集等过程也被用于催化、发电、传感、防结冰以及提锂等领域。能量管理，如：太阳能捕获、热能利用、能量回收，是光热蒸发过程在各种应用场景中研究的核心问题。因此，我们团队在过去几年围绕光热界面蒸发过程中的能量流开展了一系列能量管理相关的研究工作，并探索其在南海资源开发中的应用潜力[1]。首先，我们基于三种典型的光热转换机制，进行广泛的光热材料研究，以尽可能的吸收太阳能并转换成热能[2-6]。其次，我们分别从宏观过程和微观过程进行材料与蒸发结构的设计，降低蒸发界面热损耗，同时优化微观蒸发模式，提升热能利用效率[7-9]。此外，通过构建多级蒸馏器件，进行蒸发潜热的回收；通过光热膜微纳通道结构的设计，充分捕获蒸发驱动离子迁移过程中蕴藏的水能[10, 11]。最后，构建单向流体膜结构实现水盐联产[12]，开发分级多孔生物质吸附剂[13]，为光热界面蒸发过程用于南海资源提取与岛礁环境修复中的进一步探索奠定基础。

关键词：光热蒸发；热管理；水簇

参考文献

1. J. Gui, C. Li, Y. Cao, Z. Liu, Y. Shen, W. Huang, X. Tian, Hybrid solar evaporation system for water and electricity co-generation: Comprehensive utilization of solar and water energy. *Nano Energy* 2023, *107*, 108155.
2. W. Huang, G. Hu, C. Tian, X. Wang, J. Tu, Y. Cao, K. Zhang, Nature-inspired salt resistant polypyrrole–wood for highly efficient solar steam generation. *Sustainable Energy & Fuels* 2019, *3* (11), 3000-3008.
3. W. Huang, P. Su, Y. Cao, C. Li, D. Chen, X. Tian, Y. Su, B. Qiao, J. Tu, X. Wang, Three-dimensional hierarchical Cu_xS-based evaporator for high-efficiency multifunctional solar distillation. *Nano Energy* 2020, *69*, 104465.
4. C. Tian, C. Li, D. Chen, Y. Li, L. Xing, X. Tian, Y. Cao, W. Huang, Z. Liu, Y. Shen, Sandwich hydrogel with confined plasmonic Cu/carbon cells for efficient solar water purification. *Journal of Materials Chemistry A* 2021, *9* (27), 15462-15471.
5. W. Song, H. Wang, Z. Zhang, Y. Cao, M. Zhang, P. Zhang, Y. Zhang, Z. Liu, Y. Shen, W. Huang, A scalable and anti-fouling silver-nickel/cellulose paper with synergy photothermal effect for efficient solar distillation. *Journal of Colloid and Interface Science* 2023, *650*, 1044-1051.
6. X. Wu, C. Li, Z. Zhang, Y. Cao, J. Wang, X. Tian, Z. Liu, Y. Shen, M. Zhang, W. Huang, Nitrogen-doped microporous graphite-enhanced copper plasmonic effect for solar evaporation. *Carbon Energy* 2024, *6*, e466.
7. C. Tian, J. Liu, R. Ruan, X. Tian, X. Lai, L. Xing, Y. Su, W. Huang, Y. Cao, J. Tu, Sandwich Photothermal Membrane with Confined Hierarchical Carbon Cells Enabling High-Efficiency Solar Steam Generation. *Small* 2020, *16* (23), 2000573.
8. Z. Chu, Z. Liu, Z. Li, Y. Cao, X. Tian, C. Jia, J. Wang, D. Wang, Z. Liu, W. Huang, Hierarchical unidirectional fluidic solar-electro-thermal evaporator for all-day efficient water purification. *Materials Today Sustainability* 2022, *19*, 100223.
9. L. Jia, Z. Liu, H. Hao, M. Zhang, X. Tian, W. Huang, Crystal Plane Engineering to Boost Water Cluster Evaporation for Enhanced Solar Steam Generation. *Nano Letters* 2024, *24* (5), 1753-1760.
10. J. Liu, J. Gui, W. Zhou, X. Tian, Z. Liu, J. Wang, J. Liu, L. Yang, P. Zhang, W. Huang, J. Tu, Y. Cao, Self-regulating and asymmetric evaporator for efficient solar water-electricity generation. *Nano Energy* 2021, *86*, 106112.
11. C. Liu, J. Gui, D. Li, Z. Liu, Y. Shen, W. Huang, H. Wang, X. Tian, Ionic Power Generation on a Scalable Cellulose@polypyrrole Membrane: The Role of Water and Thermal Gradients. *Advanced Fiber Materials* 2024, *6* (1), 243-251.

12. C. Li, Y. Cao, X. Tian, Y. Shen, J. Xiao, W. Huang, H. Wang, Z. Liu, Dual-hydrophilic Janus evaporator for Long-term and efficient Bimode solar evaporation. *Chemical Engineering Journal* 2023, *461*, 141954.

13. K. Lu, C. Liu, J. Liu, Y. He, X. Tian, Z. Liu, Y. Cao, Y. Shen, W. Huang, K. Zhang, Hierarchical Natural Pollen Cell-Derived Composite Sorbents for Efficient Atmospheric Water Harvesting. *ACS Applied Materials & Interfaces* 2022, *14* (29), 33032-33040.

报告人简介：

黄玮，海南大学海洋科学与工程学院，博士生导师，副院长，入选海南省拔尖人才、海南省南海新星人才、中国海水淡化与水再利用学会青年委员，担任海南大学科研创新团队负责人和党支部书记。主持国家级项目 2 项和省部级项目 4 项。发表 Nano Letters，Nano Energy，Small，Chemical Engineering Journal，Advanced Fiber Materials，Carbon Energy 等学术论文 40 余篇，授权国家专利 5 项。担任 PNAS，Advanced Materials，Nano Energy，Small，Advanced Science 等期刊审稿

船舶动力系统汽-水直接接触冷凝能质传递机理研究

肖颀[1]

[1]武汉第二船舶设计研究所

*Email: zhiyan7@sina.com

蒸汽-水直接接触冷凝是船舶动力系统中常见两相相变过程，是影响船舶热力除氧、冷凝换热效率的关键,具有换热系数高、体积重量小、可靠性高等突出优势，也存在界面强剪切且动态波动、相间能质传递剧烈、多相多组分共存等难点。本文分别针对蒸汽水下喷注和蒸汽-水膜直接接触冷凝过程开展实验和仿真研究，构建了汽水直接接触冷凝仿真模型，分析了不凝气含率、蒸汽流量、过冷度等影响规律，搭建了蒸汽-水膜直接接触冷凝冷/热态试验台，建立了水膜面积统计分析方法，分析了水膜破碎机制，为船舶动力系统热力除氧、喷射式冷凝器等关键设备奠定了理论基础。

报告人简介：

肖颀，武汉第二船舶设计研究所热能动力技术重点实验室研究员，先后入选中国科协青年人才托举工程、中国船舶集团有限公司青年拔尖人才计划等，长期从事船舶动力系统汽液两相能质传递及热工水力研究，主持国家自然科学基金、国防预研等项目 10 余项，多项成果成功转化应用，获国防创新团队奖、中国造船工程学会技术发明一等奖等省部/学会/集团级奖项 12 项，发表 SCI/EI 论文 40 余篇，第一发明人授权专利 24 项，登记软件著作权 5 项。

泰勒-库艾特涡流光反应器多相传递/催化反应耦合特性研究

王畅[1]，施伟东[1,*]，颜伟城[1,*]

[1]江苏大学，江苏镇江，212013

*施伟东 Email: swd1978@ujs.edu.cn

*颜伟城 Email: yanwc@ujs.edu.cn

泰勒-库艾特涡流光反应器具有轴向返混较小、剪切力弱、传质效率高等优点，被拓展应用于光催化领域，针对光催化技术缺少适配的反应器提供新思路。现有泰勒泰勒-库艾特涡流光反应器的相关研究主要集中于流场的分析及实验研究，缺少关于反应器内部的传递特性和传质效率的探究。本次汇报通过展示实验与模拟结合的方法，由实验提供参数，对模型进行验证，并获取反应动力学模型与建立的包含流场、辐射场及光催化剂的模型进行耦合获得综合模型，探明流场、辐射场及光催化剂之间的相互作用机制，归纳反应器操作条件及光催化剂性质等关键参数对光催化降解效率的影响规律及反应器与光催化剂之间的匹配规律，为泰勒涡流光反应器的设计优化提供科学指导。

关键词：泰勒涡流光反应器；CFD模拟；多相传递；反应器设计优化

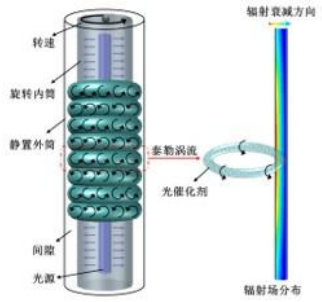


Fig. 1 The interaction between flow field, radiation field and photocatalysts in Taylor-Couette photocatalytic reactor.

参考文献

[1] Koe W S, Lee J W, Chong W C, et al. An overview of photocatalytic degradation: photocatalysts, mechanisms, and development of photocatalytic membrane. Environmental Science and Pollution Research International, 2020, 27(3): 2522-2565.

[2] Sacco O, Vaiano V, Sannino D. Main parameters influencing the design of photocatalytic reactors for wastewater treatment: a mini review. Journal of Chemical Technology & Biotechnology, 2020, 95(10): 2608-2618.

[3] Gonzalez Gil L V, Singh H, Da Silva J D S, et al. Feasibility of the taylor vortex flow bioreactor for mesenchymal stromal cell expansion on microcarriers. Biochemical Engineering Journal, 2020, 162: 107710.

[4] Wu Z, Kim D H, Kim W S. Batch cooling crystallization in non-isothermal Taylor Vortex Flow: effective method for controlling crystal size distribution. Crystal Growth & Design, 2016, 17(1): 28-36.

[5] Sczechowski J G, Koval C A, Noble R D. A Taylor vortex reactor for heterogeneous photocatalysis. Chemical Engineering Science, 1995, 50(20): 3163-3173.

[6] Dutta P K, Ray A K. Experimental investigation of Taylor vortex photocatalytic reactor for water purification. Chemical Engineering Science, 2004, 59(22-23): 5249-5259.

微气泡辅助的乙烯淤浆聚合技术

历伟[1]

[1]浙江大学化工学院/宁波科创中心

*Email: liwei2021@zju.edu.cn

针对淤浆法聚合存在聚合物分子链和聚集态结构调控能力弱等问题，本团队提出了淤浆聚合中活性链生长微环境调控的新思路，一方面向淤浆聚合体系中引入惰性微气泡对催化剂颗粒的间歇式撞击，在活性中心附近营造惰性气体/乙烯单体浓度“交变交替”的微观混合流场，构建“休眠-激活”的链段生长环境，从而降低了初生态UHMWPE的链缠结程度，成功在300L工业中试上制备分子量300-700万g/mol的低缠结UHMWPE。树脂通过干法纺丝制备了50D/100F的细旦纤维，纤度均匀性和强度明显提升（强度达41.44 cN/dtex）。另一方面，向淤浆聚合体系中引入低沸点液相惰性烷烃（例如丙烷），利用液相惰性烷烃的空化效应和蒸发吸热效应，在淤浆聚合体系中原位形成宽尺寸分布的微气泡和温差10-20℃的低温区，通过催化剂聚合特性和多温区流场热质传递行为的匹配，使催化剂活性颗粒在高低温区间高频穿梭聚合，拓宽了聚乙烯的分子量分布，降低了分子链的缠结程度，制得的产品的冲击和拉伸性能得到明显提升。

报告人简介：

国家优青，教授，博士生导师。长期从事烯烃聚合反应工程研究，通过催化剂结构设计、聚合工艺创新和加工技术优化三个方面构建聚烯烃多级结构调控新策略，实现聚烯烃高性能化。在催化剂技术、聚合反应工程和产品加工技术方面取得系列进展，以主要完成人获得中国石油和化学工业联合会科技进步一等奖 2 项。先后主持完成 2 款催化剂的工业应用和 5 种高性能聚烯烃产品的开发，参与高性能聚烯烃成套工艺技术开发 2 项。
https://person.zju.edu.cn/liwei2021#0

气-液-固多相微系统流场 PIV/PLIF 可视化研究

李琛[1]，马永丽[1*]，刘明言[1,2*]

[1]天津大学化工学院，天津 300350

[2]化学工程联合国家重点实验（天津大学），天津 300350

*Email: mayl@tju.edu.cn; myliu@tju.edu.cn

气-液-固多相微系统既有宏观多相系统高效的相间接触，又有微型反应器比表面积大、安全、环保等优点，在过程强化领域有较好的应用前景。然而，其多相流动、混合行为及控制机制等目前尚未深入揭示。采用双脉冲荧光粒子图像测速（LIF-PIV）和平面激光诱导荧光（PLIF）等可视化测试方法，对1 ~3 mm内径的气液微型鼓泡塔、液固和气液固微型流化床的流动和混合特性展开研究，以期揭示该类多相流微系统的流动及混合机制。

研究了气液微型鼓泡塔内的多气泡行为及气液流场。结果表明，气泡主要沿直线、Z型和S型轨迹上升。气泡高频生成和聚并引起的气泡径向振荡是形成S型轨迹的主要原因；当气泡沿S型轨迹上升时，气泡周围液相流场存在交替产生的反向涡流。建立了预测微型鼓泡塔内气泡尺寸与上升速度的经验关联式。

研究了液固微型流化床内的床层膨胀行为及流场特性。分析了液相流场的脉动速度、湍动能、涡量以及颗粒速度等特性及其在流化床轴、径向分布的差异。结果表明，较高表观液速下，颗粒运动剧烈，流场中存在湍流现象。颗粒的轴向速度主要由垂直向上的运动流体决定，颗粒的径向速度主要受涡流和颗粒表面摩擦力的影响。基于Richardson-Zaki方程建立了床层膨胀行为关联式。

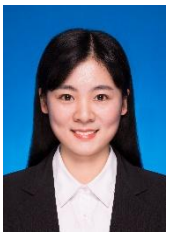
研究了气液固微型流化床内气泡与颗粒的运动特性及流场分布。结果表明，气液固微型流化床中气泡主要沿直线和S型轨迹上升，增加表观气速，对气泡径向运动影响较大；气泡尺寸和速度、颗粒的轴向和径向速度等宏观流体力学行为与旋涡的运动和发展等微观流体力学行为密切相关。建立了预测气液固微型流化床中气泡尺寸及上升速度的经验关联式。

研究了液固微型流化床混合器的混合性能。结果表明，该混合器的相对混合指数是相同内径无颗粒通道的3.07 ~ 9.55倍，混合时间减少了45.11 % ~ 99.59 %。当床层空隙率为0.65时，混合能量效率大幅提升；空隙率达到0.76时，混合有效因子和能量效率达到最大。建立了混合时间与比功耗的定量关系。

本研究结果可为多相微系统后续的数值模拟、传递和反应研究以及工业应用提供基础指导，具有重要的理论意义和实用价值。

关键词： 气-液-固多相微系统；流场；混合；粒子图像测速技术；平面激光诱导荧光

报告人简介：



李琛，博士毕业于天津大学化学工程专业，师从刘明言教授。参与完成多项国家自然科学基金及省部级科研项目，在化工及能源期刊 AIChE J.，Powder Technol. 等发表多篇科研论文，主要研究内容为微型气液鼓泡塔、微型液固及气液固流化床流场的可视化实验及模拟。

湿颗粒流态化中的流动和热质传递问题研究

许秋石[1]

[1]中科院过程所

*Email: qsxu@ipe.ac.cn

湿颗粒流态化技术在烯烃聚合、催化裂解等化工产业中均有广泛应用。相比于干颗粒流化床，湿颗粒流化床中存在更为复杂的多尺度流动与传递现象。通过高速摄像和数字图像处理技术对二维湿颗粒流化床中气泡特性进行测量，获取了床层中气泡数目、尺寸、形状、运动速度、气含率等特性随液体含量、操作气速等条件的演化规律。在湿颗粒流化床中增加液体含量和在干颗粒流化床中减小颗粒尺寸对提高内颗粒间内聚力与重力的比值都起着积极作用，使得大部分气泡特性呈现两阶段的变化趋势。这种气泡特性的两阶段演变类似于干颗粒流态化中颗粒尺寸减小的情况，颗粒的流态化特性从Geldart B类特性向A类再到C类转变。通过CFD-DEM模拟研究了不同喷液速率下顶部喷液流化床中颗粒和液滴的运动、热质传递规律，进而提出了一种基于含液离散相（湿颗粒和液滴）分布的云区直接识别方法。时均云层呈马蹄形，其面积随着喷液速率的增加而逐渐增大。由于液体蒸发吸热，云区中湿颗粒的温度比非云区干颗粒的温度低大约7℃。该工作对提升湿颗粒流态化及热质传递行为特性的认识具有重要指导意义，为发展高效的湿颗粒流态化技术奠定了基础。

报告人简介：

博士后，2023 年于中科院过程所获化学工程博士学位。研究方向包括多相流态化与热质传递、粘性颗粒高效流态化、工业反应器多尺度模拟与过程强化等。承担国家重点研发计划子课题、中核集团企业合作项目。在 AICHE Jounal 和 Ind. & Eng. Chem. Res. 等国内外学术期刊上共发表论文 6 篇。个人主页：http://www.mesolab.ac.cn/ktz/lcpic/rydw/ggcy/202304/t20230411_739391.html

气-液-液反应器在氢甲酰反应中的应用

蓝晓程*，王铁峰*

清华大学化学工程系，北京，100084

*Email:lanxc@tsinghua.edu.cn; wangtf@tsinghua.edu.cn

烯烃氢甲酰化（也称为羰基化反应）是一种重要的工业催化过程，通过在烯烃分子中引入一氧化碳和氢气，生成醛或醇。自其在20世纪40年代首次被发现以来，烯烃氢甲酰化在化学工业中得到了广泛的应用，尤其在生产醛类和醇类化合物方面。该反应具有高效、选择性好、原料丰富和工艺成熟等优点，因此在有机合成和工业化生产中占有重要地位。在烯烃氢甲酰化反应中，反应器的设计和操作条件对反应的效率、选择性和产物的质量都有重大影响。通过优化反应器的类型和操作条件，可以实现对目标产物的高效合成和选择性控制，从而提高反应的工业应用价值，这将有助于提升烯烃氢甲酰化反应的整体性能和可持续性。

目前工业上一部分氢甲酰化反应过程采用双液相工艺。水-油两相法要求反应器具备高效的气-液-液传质能力，其规模化生产的核心在于开发高效的气-液-液工业反应器装备。目前水油两相采用传统搅拌釜反应器，存在传质效率差、无法满足规模化放大生产的缺陷。本文针对水油两相法氢甲酰化合成醛/醇，开发无搅拌高效氢甲酰化反应器替代搅拌釜。通过冷态实验研究射流高效反应器的流体力学行为、气液液三相传质规律，研究操作条件、内构件结构等对气-水-油三相中气泡尺寸和油滴尺寸的影响规律；研究喷嘴与环流内构件强化气-液-液传质的机制，结合模拟和冷态实验，定量化和模型化双液相过程气-液-液反应器的放大规律。

关键词：气液液过程强化；工业应用；氢甲酰化

报告人简介：

蓝晓程：

清华大学化工系，助理研究员

研究方向为多相催化及反应器技术。面向能源化工和精细化工方向，发展催化剂可控制备技术，研究催化剂构-效关系及反应机理，定向构建催化反应所需的微环境和活性中心，开发相应的催化反应工程技术。针对能源化工和精细化工的重大技术需求，开发构件式浆态床、多级浆态床等新型反应器，结合反应工程与工艺，开发绿色连续化生产新技术。2021 年入职清华大学化工系，目前任清华大学化工系助理研究员；2019 年入选清华大学“水木学者”支持计划；主持博士后科学基金特别资助项目、博士后科学基金面上项目和自然科学基金青年基金。

流化床换热防垢节能技术的研究及工业应用

姜峰[1]

[1]天津大学

*Email: jiangfeng@tju.edu.cn

流化床换热防垢节能技术将流化床技术和换热过程相结合，可以有效解决换热设备的在线强化传热和防、除垢问题，具有明显的经济效益、社会效益和环境效益。报告主要围绕课题组近年来围绕该技术开展的基础研究和工业化应用进行汇报。

报告人简介：

天津大学化工学院副教授，化学工程系教学系主任，全国石油和化工职业教育教学指导委员会委员。长期讲授“化工原理”相关课程，“化工原理”首批国家级线上一流课程主讲教师，主编和参编教材 6 本。长期从事流化床换热防垢节能技术的研究及推广，解决换热器的在线强化传热和防、除垢问题，已经该技术应用于氯化钙蒸发、中药废水蒸发、氢氧化锂蒸发、硫酸锂蒸发和磷酸蒸发等多个工业生产过程。发表论文 60 余篇，获得国家授权发明专利 7 项。

多相微反应器内流动和传质特性研究

安敏[1]

[1]郑州大学

*Email: anmin@zzu.edu.cn

采用VOF-DEM耦合模型对3mm床径的小型气液固流化床进行了流体动力学模拟研究。针对单气泡行为，考察了在低气速下单个气泡在不同固含量床层中的形成和上升过程，并分析了气泡尾涡中的液体和颗粒速度分布。研究了不同气、液流速下，流化床中连续鼓泡流的起始至稳定过程，该过程中出现了由床层收缩所致的相含量的重新分布，借由对气泡尾涡的形成机制分析，解释了床层收缩流体动力学机制。考察了稳定鼓泡流床层中相含率的轴、径向分布，以及周期性演变的整体相含率的时均值随气、液流速的变化规律。针对一个带缠绕丝的孔阵列强化环隙式微通道内液液两相流流动行为和传质特性进行了实验和模拟研究。实验结果表明该微通道在单位面积有效产率方面表现优异，VOF模拟结果从流体力学特性方面解释了缠绕丝提升混合和传质特性的机制。

报告人简介：

安敏，郑州大学国家超级计算郑州中心，硕士生导师。2021 年 6 月毕业于中国科学院过程工程研究所（导师杨宁研究员）。主要研究方向：多尺度模拟方法与算法，面向多尺度模拟的高性能计算系统。专注于气液固三相系统的基础研究。同时运用实验测量，数值模拟和理论建模，针对气液固系统中的湍流和气泡行为，还有特别是颗粒对相间作用耦合机制产生的影响等问题开展了深入研究。先后参与和主持了多项国家级项目，作为核心骨干协助多家企业单位完成产品设计优化。河南省通信学会、颗粒学会、化学工程学会等会员，国内外期刊（POWDER TECHNOLOGY,CIESC，化工进展等）审稿专家。发表高水平论文十余篇。http://www7.zzu.edu.cn/nscczz/info/1212/2466.htm

A conceptual turbulent eddy viscosity model for gas-liquid two-phase flows

施炜斌[1]

[1]华侨大学

*Email: weibin.shi@hqu.edu.cn

The shedded turbulent eddies from the wake of bubbles leads to the presence of bubble-induced turbulence (BIT) in gas-liquid two-phase flow. BIT not only competes intensively with shear turbulence (ST) for the local dominance in time and space, but more importantly, BIT and ST together contributes to the entire liquid-phase turbulence. It is known that their individual contributions and their interactions can be reflected by the turbulence kinetic energy spectrum, with a slope of -5/3 when ST dominates while the slope becomes -3 when BIT takes control. However, questions still remain on how meso-scale structures, such as eddies due to BIT, interacts with shear turbulence to modulate the liquid-phase turbulence. For turbulence modelling, the effects of BIT are usually expressed by the linear superposition of a turbulent viscosity term or source terms on the basis of the single-phase Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) equations. Inspired by the electric resistance in the power circuit, the present work proposed a conceptual turbulent viscosity closure model that reflects the non-linear superposition of BIT and ST. Considering the intermittency of BIT, the proposed non-linear turbulent viscosity closure model can treat the collecting effects of wake attenuations. From the comparison of simulation results for different BIT models, it is found that the appropriate mathematical description for the non-linear superposition of turbulent viscosity terms is the key to correctly reflect the turbulence modulations in gas-liquid two-phase flows.

报告人简介：

施炜斌博士，毕业于英国诺丁汉大学，现任华侨大学机电及自动化学院讲师，福建省引进高层次人才，厦门高层次人才。主要研究方向包括气液、气液固多相复杂系统流体力学建模与仿真，复合材料设计与优化，生物绿色加工技术等，在 CHEM ENG SCI、INT J HEAT MASS TRAN 等期刊发表学术论文十余篇，参与及主持省部级以上自然科学基金、重点研发计划等项目 8 项。
个人主页：https://faculty.hqu.edu.cn/~e6vIvy/zh_CN/index.htm

动载荷作用下的微纳颗粒动力学响应特性与流动调控机理

陆海峰[1]，张亮，刘海峰，郭晓镭

[1] 华东理工大学

*Email: luhf@ecust.edu.cn

微纳颗粒的集群流动对于处理其储存、计量和输送非常重要。本文研究了动载荷作用下微纳颗粒在在微通道内的流动行为。利用图像处理和信号分析方法研究了动载荷下的团聚体的动态特性，探究了微纳米颗粒流经微通道内的聚团演化特性，分析了动载荷参数和微通道结构对粉体流动速率的影响规律以及振动能量激发团聚体运动和结构演变机理。聚焦微纳颗粒在载荷作用下的类固、类液及其类固-液转变过程的相变动力学行为，阐明微纳颗粒在动载荷下的动力学响应特性。动载荷可以有效改善微纳颗粒的流动性，微纳颗粒以聚集体的形式流动，其流动速率低至0.1 mg/s。研究了不同载荷条件下的流动模式和流率的变化规律，建立流率调控及其预测模型。通过优化工艺参数，实现了动载荷作用下微纳颗粒微通道高精度、高分辨率、宽范围的流动调控。

关键词：动载荷，团聚体，颗粒动力学，微量给料

密相流化床颗粒运动行为的磁性颗粒示踪技术检测

孙婧元[1,*]，杜嘉烨[1]，叶天洲[1]，张鹏[2]，王靖岱[1]

[1]浙江大学化学工程与生物工程学院，浙江，杭州，310058

[2]浙江大学宁波科创中心，浙江，宁波，315100

*Email:sunjy@zju.edu.cn

磁性颗粒示踪技术通过以单个磁性颗粒作为磁偶极子、追踪磁性颗粒在反应器中的长时运动轨迹，能够以非侵入的形式捕获不可视反应器中的颗粒流型分布及微观脉动特性。本工作建立了密相流化床颗粒运动行为的磁性颗粒示踪检测方法，分别以聚丙烯立式搅拌床和聚乙烯流化床为对象，研究了无粘、持液、粘性等颗粒体系的运动特征。针对搅拌床，发现三种颗粒体系在螺带搅拌的作用下均呈现周期性循环运动，且颗粒自转角度符合随机分布，但持液颗粒和粘性颗粒的运动速度明显低于无粘颗粒。揭示了三种颗粒体系的流型，建立了颗粒轨迹在料位面和底部处的小波峰出现周期的预测模型，并且发现持液颗粒的脉动强度最大且频谱分布最宽，粘性颗粒次之，无粘颗粒最弱。针对流化床，探究了无粘以及持液状态下的颗粒运动特征，构建了不同持液状态下的颗粒流型图，发现相比于搅拌床，由于流化床中的气固两相运动更为剧烈，持液状态对流化床中颗粒运动的影响并不显著。

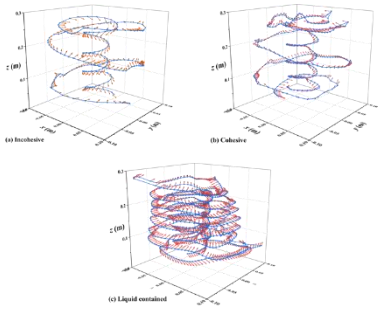


Fig. 1 Particle flow pattern in a polypropylene vertical stirred bed

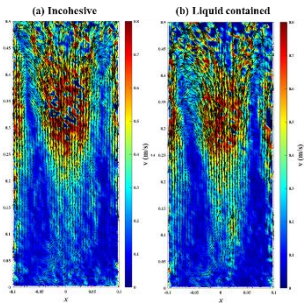


Fig. 2 Particle flow pattern in a polyethylene fluidized bed

关键词：磁性颗粒示踪；立式搅拌床；流化床；流型；脉动

报告人简介：

孙婧元，副教授，教育部青年长江学者，浙江省万人计划青年拔尖人才。2013 年获浙江大学化学工程博士学位，2014 年获英国学术院与皇家学会牛顿学者称号，2017 年起任职浙江大学化工学院。主要从事多相流检测、多相流反应器工程、烯烃聚合、计算流体力学模拟及分子动力学模拟等方向的研究，以第一作者或通讯作者在 AIChE J.、Chem. Eng. Sci.、Ind. & Eng. Chem. Res.、Macromolecules 等化工、高分子领域权威期刊发表 SCI 论文近 40 篇，EI 论文近 10 篇，获中国发明专利授权 20 余件，其中国际专利 2 件，登记软件著作权 1 件。

基于银纳米颗粒抗菌的医用抗感染高强度双网络水凝胶导尿管涂层设计与性能研究

蔡永伟[1,*]，李建祥[1]，杨红[1]，顾荣花[2]，李远菊[1]，Qi Zhao[3]

[1]重庆理工大学化学化工学院，重庆市巴南区红光大道69号，400054

[2]重庆大学附属肿瘤医院，重庆市沙坪坝区汉渝路181号，重庆，400030

[3]School of Science and Engineering, University of Dundee, Dundee DD1 4HN, UK

*Email: cyw@cqut.edu.cn

留置导尿管使用中引起的导尿管相关尿路感染（CAUTIs）是最常见的医院获得性感染之一。该感染会导致发病率和死亡率升高，对患者的生命安全和健康构成严重威胁。银纳米颗粒（AgNPs）作为一种光谱抗菌药物，具有强抗菌性、低毒性和低耐药性等优点，在临床应用和研究中得到了广泛关注。研发具有较强的抗菌和抗粘附双重功能的银纳米颗粒水凝胶抗菌导尿管涂层，以减少CAUTIs的发病率和减轻患者的医疗负担具有重要的意义。本研究通过化学还原制备纳米银颗粒抗菌剂和溶胶-浸渍法涂覆等技术手段在一次性乳胶导尿管表面上设计了多种超滑、抗菌和抗粘附的水凝胶涂层。并研究了水凝胶导尿管涂层的柔韧性、润湿性、抑菌性、抗粘附性和生物相容性等，并提出了抗菌和抗粘附机理等。本研究成果可为尿功能障碍、需长期临床护理等患者在减少尿路感染，降低医疗风险，改善生活质量，乃至推动医疗器械材料发展等方面提供了新解决方案和技术策略。

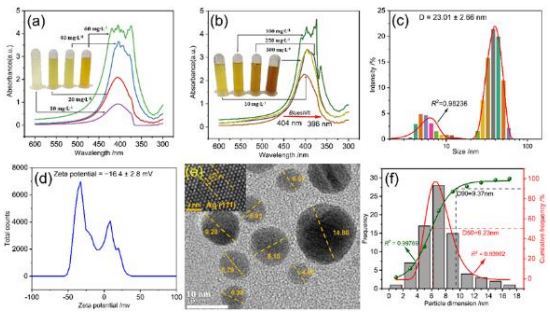


Fig. 1. **(a) and (b)** UV-vis absorption spectra of the Ag QDs solutions. **(c) and (d)** Size distribution and zeta potential of the Ag QDs(20), respectively. **(e)** TEM image and the lattice spacing of the Ag QDs(20). **(f)** The frequency histogram as well as the fitting results of the frequency and the cumulative frequency of the Ag QDs particle sizes.

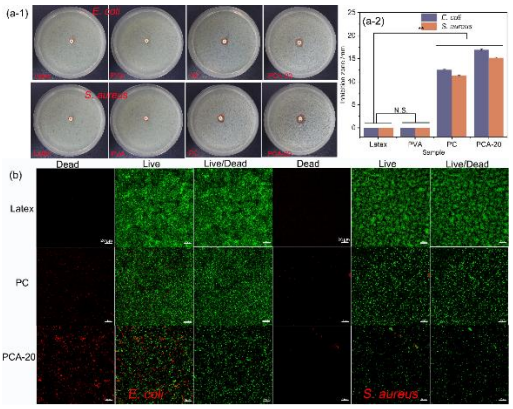


Fig. 2. **(a-1) and (a-2)** Photographs and diameter data of the inhibition zones of the bare Latex, the PVA, the PC, and the PCA-20 hydrogel-coated urinary catheters incubated in the incubator at 37 ℃ for 24 h against *E. coli* or *S. aureus* with concentrations of 106 CFU·mL^{-1}, respectively.

Fig. 2. (b) Fluorescence microscopy images of the samples impregnated in E. coli and S. aureus suspensions with concentrations of 10^7 CFU·mL^{-1} and incubation for 12 h at 37 ℃, respectively. All live bacteria were stained with SYTO 9 to emit green fluorescence and dead bacteria with damaged cell membranes were stained with PI to emit red fluorescence.

关键词：银量子点；抗菌涂层；导尿管；聚乙烯醇−壳聚糖水凝胶；协同抗菌机理

参考文献

[1] Y. Bai, K. Li, L. Ma, et al., Mussel-inspired surface modification of urinary catheters with both zwitterionic and bactericidal properties for effectively preventing catheter-associated infection, Chem. Eng. J. 2023, 455: 140766.

[2] Yang H, Chen Y, Cai Y*, et al. A feasible strategy of Ag nanoparticles-sodium alginate-polyacrylamide-polyvinyl alcohol

hydrogel coatings for preventing catheter-associated urinary tract infections. Prog. Org. Coat. 2024, 196: 108706.

[3] Li J, Yang H, Gu R, Dong Y, Cai Y*, et al. Fabrication of antibacterial Fe^{3+}-carboxymethylcellulose-polyacrylamide-Ag nanoparticles hydrogel coating for urinary catheters. Colloids Surf., A 2023, 672: 131680.

[4] Cai Y*, Yang H, Li J, et al. Antibacterial AgNPs-PAAm-CS-PVP nanocomposite hydrogel coating for urinary catheters. Eur. Polym. J. 2023, 196: 112260.

[5] Cai Y*, Gu R, Dong Y, et al. Fabrication of antibacterial polydopamine-carboxymethyl cellulose-Ag nanoparticle hydrogel coating for urinary catheters. J. Biomater. Appl. 2023, 38(1): 73-84.

电解质溶液中的气泡聚并机理研究

刘博, 杨强

华东理工大学

海水中经常可以看到白色的浪花，但在湖泊、河流中却很难看到。这主要是因为海水中溶解的盐分（电解质）抑制了气泡的聚并，使得风浪冲击生成的小气泡停留在海水中，折射光线形成白色浪花。但盐分不具备表面活性，且可抑制双电层斥力，按照传统胶体稳定性理论，盐分应该促进而非抑制气泡聚并；该传统理论-实际观测的冲突成为困扰科学家们几十年的难题。

利用自制仪器，我们采用光干涉测厚技术直接观测了碰撞间微纳米液膜的动态减薄行为。实验清晰地显示出，电解质溶液中液膜首先迅速减薄，但在厚度变薄到约 30-50 纳米时液膜减薄突然停滞，从而抑制气泡聚并。电解质溶液中液膜减薄行为与纯水、表面活性剂溶液中都存在显著差异。我们建立了考虑微纳米液膜中电解质输运的液膜排液模型，很好地解释了电解质溶液中的液膜减薄现象，终于揭示了困扰科学界数十年的物理机制。并对电解质溶液中的气泡聚并调控奠定了理论基础。

The Influence of Angular Frequency on the Dynamics of the Flow Induced by an Oscillating Sphere Travelling in Power-law Shear-thinning Fluid

Xianping Zhang[1,2*], Haimiao Wu[1]

[1] College of Mechanical Engineering, Xinjiang University, 777 Huarui Street, Shuimogou District, Urumqi City, Xinjiang Uygur Autonomous Region, China, 830049

[2] Graduate School of Engineering Science, Osaka University, 1-3, Machikaneyama, Toyonaka, Osaka , Japan, 5608531

Email: xpzhang@xju.edu.cn

Shear-thinning fluid occurs in many industrial fields, such as chemical engineering processes, wastewater treatment, oil recovery processes, and biological processes[1]. Dispersion of gas bubbles,drops and particles in the shear-thinning fluid systems induces more complex physical changes, compared to in the Newtonian fluid[2,3]. The behaviors of the flow induced by an oscillating sphere traveling in power-law shear-thinning fluid with the velocity of $U = 1 + A\cos wt$ (here, U, A, and w are the velocity of the sphere, the oscillation amplitude, and the angular frequency, respectively), are numerically investigated. Under the assumption that the convective effect is neglected, the unsteady Stokes equation and the mass conservative equation are solved by second-order central difference scheme and a simplified-marker-and-cell algorithm on the staggered grid. We pay attentions to the variation of the time-averaged drag force D on both the free-slip (FS) sphere and the no-slip (NS) sphere in the flow caused by the oscillation of the sphere over a wide range of $w \in [1,1000]$. The time-averaged drag force D shows almost independence on angular frequency w. Under the quasi-steady state assumption, the analytical solution can exactly capture the scaled drag force D/D_0 over a wide range of amplitude A. Even though the w dependence of D is small, the scaled drag force $D/D_{w=1}$ shows opposite behaviors at A = 5 and at A = 1, which can be explained by the energy balance expression.

Key words: Shear-thinning fluid; Oscillating sphere; Drag force; Power law

References

[1] R. P. Chhabra, Bubbles, Drops, and Particles in Non-Newtonian Fluids (CRC press, 2006).

[2] B. Casewell, O. Manero, and B. Mena, Recent Development on the Slow Viscoelastic Flow past Sphere and Bubbles, Rheol. Rev. 2004, 197-223.

[3] X. Zhang, K. Sugiyama, and T. Watamura, Drag force on an Oscillatory Spherical Bubble in Shear-thinning Fluid, J. Fluid Mech.,2023, 959, A3.

报告人简介：

张现萍，工学博士/硕导，现为新疆大学讲师。

教育背景：

2018/10-2023/09 大阪大学，机械工程，工学博士

2013/09-2016/06 中国石油大学（北京），化学工程与技术，工学硕士

2009/09-2013/06 中国石油大学（华东），化学工程与工艺，工学学士

工作经历：

2023/12-至今 新疆大学智能制造现代产业学院（机械工程学院），讲师

2020/04-2023/09 日本理化学研究所，研究助理

研究兴趣：

非牛顿流体流变动力学、气泡动力学、油气井流体力学、油气管道运输流体力学

离子液体中微纳气泡形成及流动传递行为研究

王宗旭[1,2]，褚俊杰[1,3]，白璐[1]，董海峰[1,2*]，张香平[1,3*]

[1]中国科学院过程工程研究所，北京，100190

[2]惠州市绿色能源与新材料研究院，广东惠州，516081

[3]中国石油大学（北京），北京，102249

*Email: hfdong@ipe.ac.cn; xiangping.zhang@cup.edu.cn

离子液体作为一种新型离子型介质，因其具有结构可设计性、极低蒸汽压、液程宽、催化及溶解性强等特殊性质，在气体分离、催化反应等领域展现出广阔的应用前景[1]。在上述应用中，气液接触是最常见的工况之一，气体在离子液体中一般以气泡的形式存在，离子液体中气泡的形成和运动直接影响到反应-分离效率[2]，因此研究微纳气泡形成及运动过程的影响机制具有重要意义。报告人主要从事微纳气泡形成及演化行为的研究工作，并取得一系列成果，本次报告详细讨论纳米气泡的成核及生长、纳米气泡的原位观测、微气泡的流动与传质等方面的研究进展，揭示微纳气泡的形成机制、流动与传质规律，阐明离子液体与微纳气泡之间的微观联系，为反应-分离过程中微纳气泡行为的调控提供理论指导。

关键词：离子液体；微纳气泡；反应-分离

参考文献

[1] Zhang Suojiang, Zhang Xiangping, Shi Chunyan, Wang Ke, Yuan Lei. Revolutionary technology of low-carbon chemical processes[J]. *National Science Review*, **2023**, 10(9): nwad132.

[2] Bao Di, Zhang Xiangping, Zhang Xin, Dong Haifeng, Zhang Suojiang. Research Progress of Bubble Behavior in Ionic Liquid Systems[J]. *Journal of Engineering Studies*, **2015**, 7: 305-312.

报告人简介：

王宗旭，博士毕业于中国科学院过程工程所，现在过程所从事博士后研究工作，研究方向为离子液体中微纳气泡演化行为及调控机制，在 *Chem Eng Sci*、*ACS Sustainable Chem Eng*、*Int J Hydrogen Energ*、*Green Chem*、*J Membrane Sci* 等期刊发表学术论文 7 篇；申请发明专利 6 项，获授权专利 2 项，2023 年获惠州市高层次人才，作为骨干成员参与了国家自然科学基金项目、中科院仪器研制项目等多项。

微纳尺度电流体动力学行为的分子动力学研究

李彬*，吴艳，向伟，王贞涛，王军锋

[1]能源与动力工程学院，江苏大学，镇江 212013，中国

*Email:binli@ujs.edu.cn

分子动力学（MD）方法的基本原理是求解牛顿运动定律，能够从微观角度分析物理现象产生的原因。近年来，MD 方法已广泛应用于微纳尺度电流体动力学行为（电聚并、电喷雾、电解过程气泡成核等）的机理研究。气/液、液/液界面的微纳尺度和瞬时特性是研究液滴/气泡动力学行为的重要挑战。微纳尺度动力学特性是宏观液滴/气泡动力学行为的基础。分子动力学（MD）模拟可以通过计算分子间相互作用研究微纳尺度液滴/气泡动力学行为，是研究流场和液滴/气泡瞬时行为的强大工具。分子动力学模拟方法基于更精确的范德华相互作用理论，可以在很短的时间内模拟能够决定宏观现象的纳米级气泡和液滴的现象。本课题组已采用分子动力学方法，系统研究了纳米液滴-液滴/界面电聚并行为特性（图 1、图 2）、电喷雾行为特性（图 3）、电解过程纳米气泡成核特性（图 4）等，揭示了微纳尺度液滴/气泡的电流体动力学行为机理。

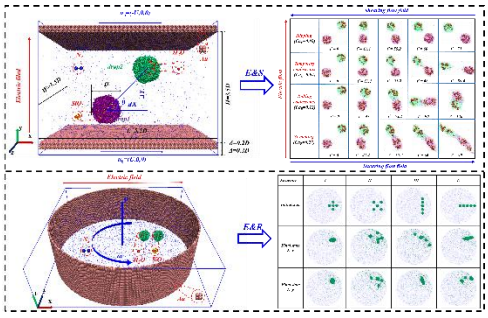


Fig. 1 Droplet - droplet coalescence process under electric-flow coupling filed

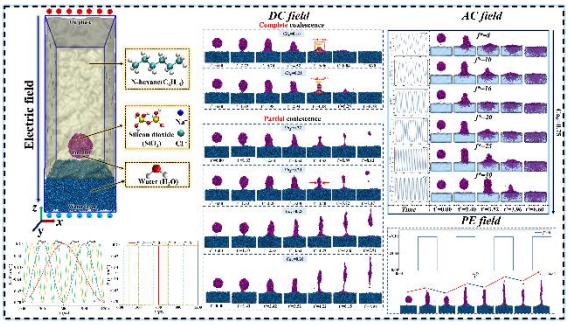


Fig. 2 Droplet - interface coalescence process under electric field

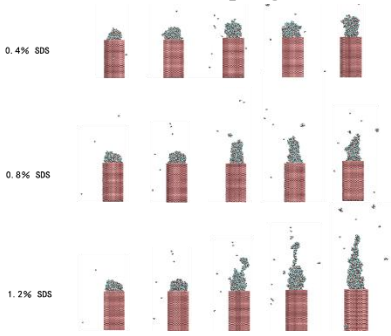


Fig. 3 Ethanol electrospray process

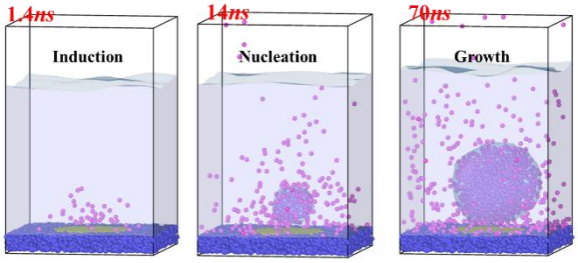


Fig. 4 Nano-bubbles formation in electrolytic hydrogen production production

关键词：液滴聚并；气泡成核；微纳尺度；分子动力学模拟；电流体动力学

参考文献

[1]Bin Li, Mingdong Ju, Xiaohui Dou, et al. Microscopic mechanism for nanoparticle-laden droplet-droplet electrocoalescence: A molecular dynamics study[J], Separation and Purification Technology, 2022, 299: 121768.

[2]Y. Wu, B. Li, et.al, Nanoparticle-laden droplet-liquid film electrocoalescence behaviors: A molecular dynamics simulation, Journal of Molecular Liquids, 2024,400: 124553.

[3] Yunchao Li, Zhentao Wang*, Bin Li*, et al. Molecular dynamics simulation of the cone-jet electrospray: Role of surfactants[J], International Journal of Heat and Mass Transfer, 2023, 214: 124388.

报告人简介：

李彬，男，1990 年 9 月生，博士、副教授、硕士生导师，现任江苏大学流体力学及多相流研究所副所长。主要从事能源多相流及节能减排新技术研究，所发展的荷电液-液两相复杂界面动力学研究方向在国内外形成了鲜明特色，主持国家自然科学基金、江苏省自然科学基金、中国博士后科学基金特别资助（站中）、中国博士科学基金面上资助（67 批、73 批）等省部级以上项目 5 项，江苏省高等学校自然科学研究项目（A 类）、江苏省博士后科研资助计划、重点实验室开放课题等市厅级项目 3 项，企业产学研合作项目若干；相关成果已在 *Int. J. Heat Mass Tran.*、*Int. J. Multiphas. Flow*、*Phys. Fluids*、*Sep. Purif. Technol.*、*J. Colloid Interf. Sci.*、*Chem. Eng. Sci.*、*Powder Technol.*、*J. Mol. Liq.*、*Langmuir*、*化工学报*等国际顶级期刊上刊出 SCI 论文 90 余篇，其中第一/通讯作者 SCI 论文 25 篇；授权发明专利 4 件、实用新型专利 2 件、软件著作权 2 件；获 2019 年中国工程热物理学会多相流学术年会“青年学者优秀论文陈学俊奖”、2023 年中国工程热物理学会多相流学术年会“科普作品最佳学科交叉奖”；连续 3 年受邀作中国工程热物理学会多相流学术年会 Keynote 报告（2021-2023 年），并受邀作 2023 年首届电磁流体力学研讨会邀请报告。研究工作为发展纳米驱采出液高效深度电脱水技术提供了理论依据和研究基础，具有重要的学术价值和广阔的应用前景。

CFD-PBM Prediction of SiO_2 Nanoparticle Precipitation in a Swirling Vortex Flow Reactor

Lu Liu[1], Xiaogang Yang[2,*], Yanqing Guo[2], Bin Li[2], Weibin Shi[3], Weibiao Zhou[1,4]

[1]National University of Singapore Suzhou Research Institute, Suzhou, 215123, China

[2]Department of Mechanical, Materials and Manufacturing Engineering, University of Nottingham Ningbo China, Ningbo, 315100, China

[3]College of Mechanical Engineering and Automation, Huaqiao University, Xiamen, 361021, China

[4]Department of Food Science and Technology, National University of Singapore, 117542, Singapore

Email: luliu_ruby@163.com

The swirling vortex flow reactor composes of two tangential inlet tubes connected by a round swirling chamber, where a strong 'Rankine vortex-like' flow with a great shear gradient in the radial direction can be generated. Such a vortex flow structure is able to trap the synthesized nanoparticles into the core to form aggregates. As an extension of our previous work on the controllable synthesis of SiO_2 nanoparticles using a swirling vortex flow reactor [1], this work further investigates the precipitation process of SiO_2 particles using a numerical approach with the coupling of the crystallization kinetics, the population balance model (PBM), and the computational fluid dynamics (CFD). Previous characterization results indicated that the final SiO_2 particles are primarily formed through the aggregation of primary particles. Therefore, in our simulations, particle aggregation was considered a dominant factor in determining the final particle properties. The population balance equations were solved using the Quadrature Method of Moments (QMOM) [2]. Additionally, we employed the Euler-Lagrange approach to track particle trajectories within the reactor and examined the turbulent dispersion effects on the particles. Given the significant impact of turbulence on the particle aggregation process can greatly increase the collision frequency between particles [3-4], a correction factor was introduced to modify the particle aggregation kernel. The results showed that the predictions using the corrected kernel function were in good agreement with the experimentally measured particle size distributions. This study combines experimental methods and numerical simulations to investigate the influence of various operational conditions on the evolution of the final particle size distribution during the particle synthesis process, providing theoretical references for the quantitative design, control, and scaling-up of industrial reactors.

Keywords: swirling vortex flow reactor, silicon dioxide nanoparticles; population balance model; aggregation kernel

References

[1] Y. Guo, X. Yang, G. Li, J. Yang, L. Liu, L. Chen, B. Li. Shear turbulence controllable synthesis of aggregated nano-particles using a swirling vortex flow reactor assisted by ultrasound irradiation, Chemical Engineering Journal, 2021, 405:126914.

[2] J. Bałdyga, W. Orciuch. Some hydrodynamic aspects of precipitation, Powder Technology, 2001, 121(1): 9–19.

[3] D.L. Marchisio, J.T. Pikturna, R.O. Fox, R.D. Vigil, A.A. Barresi. Quadrature method of moments for population-balance equations, AIChE Journal, 2003, 49:1266–1276.

[4] 郑帅, 谭大鹏, 李霖, 等. 微反应器计算流体力学与离散元建模及调控[J]. 浙江大学学报（工学版）, 2019, 53(7):1237-1251.

报告人简介：

刘璐（1992.2-），女，苏州工业园区新国大研究院，副研究员，研究领域为粉体材料制备，多相流动、混合及传递过程。

Factory-on-chip: microchannel parallel amplifier chip for continuous mass production of high-performance functional adsorption materials

Qifan Yu, Yuxin Wang, Hanyu Zhang, Yifei Li, Bingjie Wang*

East China University of Science and Technology, Shanghai, 200237

*bjwang@ecust.edu.cn

High-performance functional materials have attracted wide attention in numeral frontier fields, such as adsorption, catalysis and biomedicine due to their controllable microstructure and excellent chemical properties. However, the traditional synthesis technology still faces challenges in functional materials design, including difficult to control micro-nano structure, large particle size deviation and anisotropic function. On the contrary, droplet microfluidic technology has great potential in the preparation of high-performance functional materials because its advantages of precise microfluidics control and no amplification effect in parallel microchannel. In this study, based on the design criteria of parallel microchannels, a 12-channel parallel amplifier chip with independent fluid distribution region and droplet preparation region was designed and developed by laser engraving and hot pressing methods. Combined with CFD numerical simulation, the optimal structure with the central fluid inlet and secondary channel branch angle of 120° in the fluid distribution region was determined. Besides, mono-disperse porous chitosan absorbent were synthesized with a yield of 210 mL/h, average particle size of 587.32 μm, and the coefficient variation of 2.61%. The adsorption performance of as-prepared adsorbents towards methyl orange (MO) was up to 215.26 mg/g. This study provides a theoretical basis for batch synthesis of high-performance functional materials and the development of large-scale preparation equipment.

Keywords: Droplet microfluidics; Parallel amplifier chip; CFD numerical simulation; Functional materials synthesis; Dye wastewater treatment

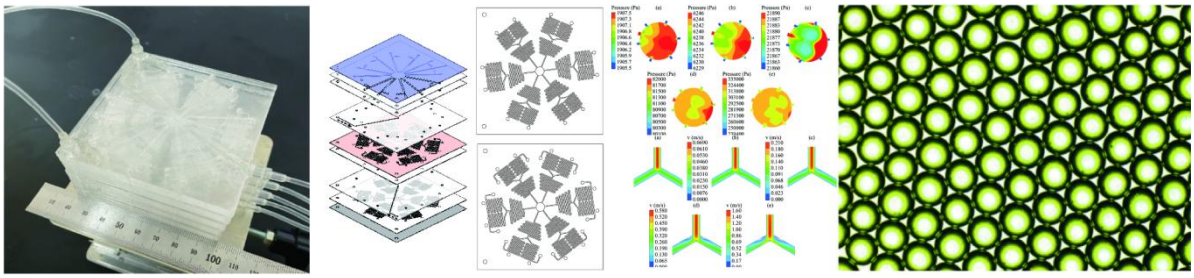


Fig. 1 Development and application of microchannel parallel amplifier chip with independent functional regions

References

[4] T T Han, *et al*. Factory-on-chip: Modularised microfluidic reactors for continuous mass production of functional materials, *Chem. Eng. J.*, 2017, 326,765-773.

[5] H Yi, *et al*. Parallelized microfluidic droplet generators with improved ladder–tree distributors for production of monodisperse γ-Al2O3 microspheres. *Particuology*, 2022, 62: 47-54

报告人简介：

于启凡，联系方式：yuqifan12@163.com

华东理工大学 机械与动力工程学院 硕士研究生

研究方向：限域空间微流体作用规律及调控研究

科研成果：发表 SCI 论文 1 篇，中文核心 1 篇，申请发明专利 3 件

基于多孔微结构流动的绿氢制取设备

樊森清[1,*]，刘敬芸[1]

[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

*Email: fansenqing86@scu.edu.cn

具有微细、且贯通性孔道结构的多孔介质（多孔泡沫、多孔膜等）可有效促进流体的热、质传递。通过在多孔介质的微细孔道中原位固载催化材料，可将其作为反应器的催化内构件。针对电解水制氢，构建了基于多孔微结构流动-催化一体结构的电解反应器，在电流密度为500-1000 mA·cm^{-2}的条件下，制氢的能耗仅4.0 kWh·Nm^{-3}，比工业碱性电解制氢能耗低20%-30%[1-4]。目前，根据现阶段研究结果，已成功研制出每小时100 L的电解水制氢堆栈及其系统，在6 M KOH、85 ℃、1200 mA·cm^{-2}的电流密度下，总电解小室为10的条件下，总制氢槽压仅18 V。针对甲醇重整制氢，将Cu/Zn/Al微颗粒固载于多孔膜孔道内制成多孔催化膜。在穿流过膜的条件下，产氢速率可达5-10 Nm^3·kg^{-1}·h^{-1}，设备体积产率达1000-2000 Nm^3·m^{-3}·h^{-1}，二者均比常规固定床反应器高出1个数量级[5]。为了进一步实现工程化，研制了“电磁感应加热-甲醇汽化-线圈冷却一体化”高度集成的甲醇制氢反应器，氢气产能达100 L·h^{-1}。

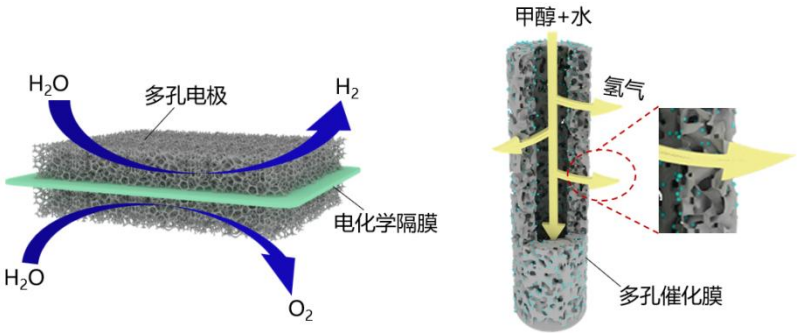


图 1 基于多孔微结构流动制绿氢的基本原理

关键词：多孔微结构；制氢设备；甲醇重整；电解水

参考文献

[1] Y. Chen, J. Chen, K. Bai, et al., A flow-through electrode for hydrogen production from water splitting by mitigating bubble induced overpotential, Journal of Power Sources, 2023, 561: 232733.

[2] G. Tang, Y. Chen, J. Chen, et al., Flow-through porous electrode for enhanced oxygen evolution reaction by promoting gas bubble release from water splitting, Chemical Engineering Science, 2024, 296: 120242.

[3] Y. Chen, J. Chen, K. Bai, et al., Microporous structure flowing integrated with electrolytic water splitting based on stacked mesh electrode for hydrogen production, Fuel, 2024, 358: 130317.

[4] J. Chen, Y. Chen, M. Yang, et al., Enhanced hydrogen production coupled with ethanol electrocatalytic oxidation by flow-through self-supporting electrode, Fuel, 2023, 354: 129441.

[5] S. Fan, Y. Chen, Y. Wang, et al., A flow-through catalytic membrane micro-reactor for hydrogen production by methanol steam reforming, Chemical Engineering Science, 2023, 282: 119283.

报告人简介：

樊森清，副教授，博导，四川大学“双百人才”、四川大学“青年科技学术带头人”，四川大学化学工程学院化学工程系副主任；主要从事醇基生物燃料流程再造、绿氢的高效制取与转存等研究；主持国家重点研发计划子课题、国家自然科学基金、四川省自然科学基金、中国石油科技创新基金等项目；实现了发酵-膜分离耦合制燃料乙醇从基础研究到工程示范的突破；研制了基于多孔微结构内件的制氢样机；以第一/通讯身份发表高水平研究论文 50 余篇；申请中国发明专利 10 余项，参编教材和专著各 1 本。

气溶胶近距离传播过程中的人员暴露实验研究

汪艳，陈晓乐*

[1]南京师范大学，能源与机械工程学院，南京 210046

*Email: xlc@njnu.edu.cn

基于大量流行病学证据，近距离病毒传播被确认为疾病传播的主要途径之一，相比远距离传播，其感染风险显著增加。本实验以雾化的生理盐水作为呼气气溶胶开展了近距离暴露实验，分析了人与人之间的距离及呼出粒径的大小对人体实际暴露水平的影响。实验结果发现，当呼出液滴初始中位径为 3.392 μm 时，随着社交距离从 60 增长到 140 cm，易感者面部、口喉及代表肺部的过滤装置的沉积率分别从 0.0263%降至 0.0037%，0.0085%降至 0.0014%，0.2056%降至 0.0016%。这表明距离增加有助于减少个体暴露风险。此外，当感染者的呼出粒径增长为 3.681 μm 时，易感者面部，口喉及过滤装置的沉积率均低于 3.392 μm 时的水平。测量发现，当感染者呼出粒径为 3.392 μm 时，易感者吸入的颗粒粒径为 1.856 μm；当呼出粒径为 3.681 μm 时，吸入的颗粒粒径为 1.560 μm，说明较大的液滴在传播过程中易受气流和蒸发等因素的影响，不易被吸气气流携带进入人体。

关键词：近距离传播，社交距离，呼气气溶胶，吸气气流

报告人简介：

汪艳（硕士研究生），就读于南京师范大学能源与机械工程学院人工环境工程专业

高压下煤颗粒着火特性研究

方冬东[1]，段元强[1,*]，段伦博[1,*]

[1]东南大学能源与环境学院能源热转换及其过程测控教育部重点实验室，江苏南京，210096

*Email: 15805174453@163.com

加压富氧燃烧是一种燃煤电厂碳捕集、利用和封存(CCUS)的潜在技术。加压富氧燃烧由于系统压力增加，可以减少电厂设备的尺寸和成本；此外，高压的环境也会增加锅炉的对流换热水平，提高换热效率；同时，高浓度和高压力的二氧化碳烟气大大降低了后续碳捕集能耗[1][2]。但由于高压下实验难度大，目前对于其基础实验的研究较少，主要集中在低压区，对高压环境下煤的燃烧特性探索匮乏。本研究在可视化的高压反应器中，探究了烟煤和无烟煤在 O_2/CO_2 气氛下，0.1～4 MPa 压力下的单颗粒着火特性。利用高速摄像机捕捉煤颗粒的燃烧过程，测定单颗粒煤的点火延迟时间和脱挥发过程。结果表明，在相同氧体积分数下，随着环境压力的增加，烟煤的点火延迟时间呈现先快速上升后逐渐下降的趋势，其中气相性质(密度、比热容、扩散系数等)的剧烈变化和挥发分的释放是导致点火延迟增加的主要因素，氧气分压和换热系数的增大都促进了挥发分的点火，导致后续点火延迟时间的缩短，同时烟煤的脱挥发过程时间与环境压力呈正相关关系。无烟煤在点火过程中表现为非均相点火，压力引起的气相性质的变化也延长了无烟煤的点火延迟时间。

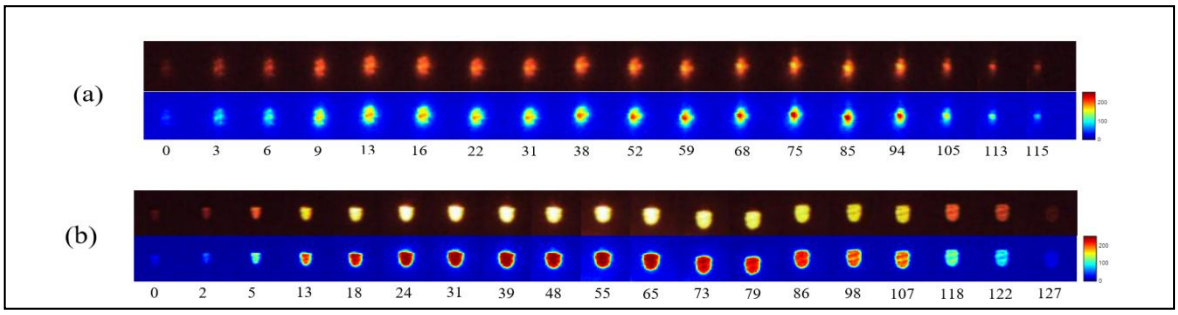


Fig. 1 Typical combustion pictures and pseudo-color pictures (50x50 pixels) under 1173K and 20%/80% vol O_2/CO_2, (a) bituminous coal (b) anthracite

关键词： O_2/CO_2燃烧；高压；点火特性

参考文献

[1] **J Hong, G Chaudhry, J G Brisson, et al. Analysis of oxy-fuel combustion power cycle utilizing a pressurized coal combustor[J]. Energy, 2009, 34(9): 1332-1340.**

[2] **A Gopan, B M Kumfer, J Phillips, et al. Process design and performance analysis of a Staged, Pressurized Oxy-Combustion (SPOC) power plant for carbon capture[J]. Applied energy, 2014, 125: 179-188.**

报告人简介：

方冬东(1993)，男，博士研究生，主要从事煤炭热转化，高压富氧燃烧等方面的研究，Email: ddfang_seu@126.com

螺旋管内沸腾流动特性研究

程林海[1]，谷海峰*，周艳民，陈斌，石依妍

[1]哈尔滨工程大学，黑龙江省哈尔滨市，150001

*Email: guhaifeng@hrbeu.edu.cn

螺旋管换热器由于其结构紧凑、传热效率高，在食品工业、石油制药、核工业、制冷和航天等诸多工业场景中得到广泛应用[1]。一般来讲，螺旋管内的二次流动以一定速度携带流体微团流向壁面，在与主流体运动叠加的过程中，使得壁面边界层的扰动明显增加，增大了流体搅混，减薄了边界层，强化了换热能力。并且螺旋结构还使得传热设备尺寸明显减小，具有更强的鲁棒性。结合这些优势，直流蒸汽发生器传热管常采用螺旋结构进行设计。本文在较宽的压力范围内（实验段入口压力为 0.2～14.1 MPa），获得不同热工条件下内径为 8.8 mm、螺旋直径为 568 mm 的立式螺旋管管内流动特性实验数据，并将实验数据与经典及近年关系式进行对比分析，为螺旋管蒸汽发生器的设计提供参考。

气液两相摩擦压降在二次流的作用下显得格外复杂。学者们一般将直管内经验公式加以修正来对螺旋管内摩擦压降进行预测。也有部分学者认为两相段湍流程度较强，导致螺旋结构对两相段摩擦系数无明显影响，直管内经验公式可用于预测螺旋管内摩擦系数。将实验得到的全液相折算系数与 Chen、Zhao、Xiao、Guo、Cioncolin、、Ferraris 提出的螺旋管内两相摩擦系数经验公式，和 M-N 直管经验公式进行对比。在各自的经验公式范围内，Zhao 和 Santini 的经验公式计算值偏差较大，平均偏差分别为 37.92%、24.88%。Cioncolini（1）、Cioncolini（2）和 Ferraris 的经验关系式，在其适用范围内对实验结果的预测精度较好，平均偏差分别为 17.86%、12.77%和-5.51%。当对不同经验公式进行外推至本实验全局工况，Cioncolini（2）的经验公式整体偏差最大，为 188.68%。Santini 经验公式虽然在其经验公式范围内预测精度较差，但经过外推后，Santini 经验公式平均偏差为-2.75%，90%的数据点的偏差在 35.29%，预测效果是所有经验公式中效果最好的。尽管 Santini 经验公式中未考虑热流密度的影响和螺旋结构的影响，但其在较大实验工况范围下的适用性较强。

关键词：气液两相流；流动阻力；二次流；

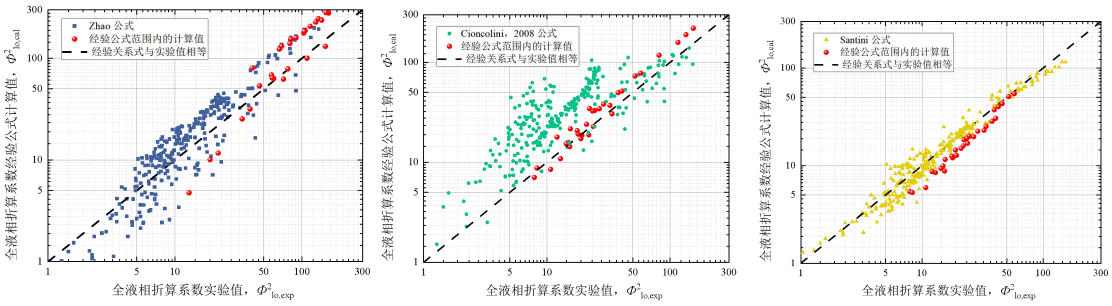


Fig.1 Comparisons of predicted two-phase frictional pressure drop and experimental resylts

参考文献

[1] **陈磊,阎昌琪,王建军. 蒸汽发生器多目标优化设计[J]. 哈尔滨工程大学学报,2014,35(3):336-341**

报告人简介：

程林海，男，吉林省白山市人，哈尔滨工程大学，博士在读研究生，从事热工水力方向。

高温流化床中细铁粉颗粒流动特性模拟研究

韩沛霖[1,2,3]，何玉荣[1,2,3*]

[1]哈尔滨工业大学能源科学与工程学院，哈尔滨，150001

[2]黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室，哈尔滨，150001

[3]哈工大郑州研究院，郑州，450000

*Email: rong@hit.edu.cn

铁粉作为一种可循环使用的燃料[1]，具有便于运输和存储的优势。在与氧气发生燃烧反应时，铁粉会释放大量热量，并生成氧化铁等产物。这些产物可以通过还原反应重新转化为铁，实现铁的循环利用。在这个循环过程中，铁元素通过氧化和还原反应在铁粉颗粒与氧化铁颗粒之间不断转换，从而完成能量的释放与储存。然而，由于反应过程强烈且迅速，这需要在成熟稳定的反应器中进行。流化床凭借其温度均匀和传热效率高的特点[2]，为颗粒系统提供了充足的动量和能量交换空间，因此成为实现铁循环储能过程的理想选择。在这一过程中，利用可再生能源从氧化铁中再生金属铁是一项极具潜力的技术。特别是使用绿氢对氧化铁进行直接还原，不仅能够完成铁燃料的循环，还能实现零碳排放，这在“双碳”背景[3]下具有十分重要的意义。然而，细小的铁粉颗粒在高温下容易发生团聚并进一步烧结，这成为阻碍细铁粉直接还原技术进一步发展的主要挑战。

因此，解析流化床铁循环系统中的流化与脱流化行为，是推动金属铁直接还原技术发展的关键一步。流化床铁循环系统中的脱流化现象与铁粉颗粒的团聚和烧结密切相关。在流化床铁循环过程中，细小的铁颗粒在气流的推动下发生剧烈碰撞，同时伴随着传热和传质的过程。高温下，颗粒表面可能出现缺陷，当颗粒碰撞时，原子尺度上的扩散会形成烧结颈，最终导致颗粒烧结。颗粒间的烧结力是影响烧结过程的关键因素[4]，其大小与烧结时间、材料性质等参数密切相关。大量颗粒烧结引发的脱流化现象极大地降低了流化床系统的传热和传质效率，给细铁粉直接还原技术的大规模应用带来了挑战。因此，越来越多的研究人员开始关注于流化床中的团聚体与床层板结之间的关联[5]。Xu等人[6]将范德华力视为主要的内聚力，建立了一个基于能量平衡的模型来预测团聚体的尺寸。Zhong等人[7]提出了一个数学模型，基于作用在颗粒上的阻力和内聚力之间的平衡来预测脱流化温度。这些模型在实验条件下均能较好地描述流化与失流化之间的界限。然而，稳定流化与不稳定或团聚流化之间的界限仍然难以区分。此外，由于流化床内部的整体流动较为复杂，这些模型还需要进一步的发展和完善。

本研究基于CFD-DEM方法，对流化床中细铁粉颗粒的团聚与烧结现象进行了模拟。在此基础上，本文进一步分析了铁循环流化床系统中的流化与脱流化行为，揭示了高温条件下细铁粉颗粒的流化机理，为工业领域流化床系统中直接还原铁粉技术的应用提供了理论指导和参考依据。

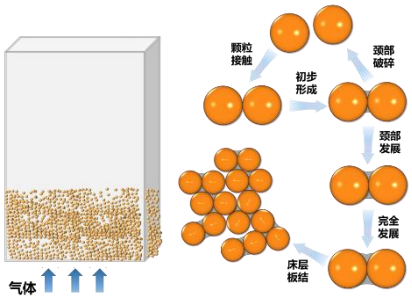


Fig. 1 Schematic diagram of particle sintering in fluidized bed

关键词：流化床；铁粉；储能系统；脱流化

参考文献

[1] **X. Liu, X. Zhang, J. Li, Q. Zhu, N.G. Deen, Y. Tang Regeneration of iron fuel in fluidized beds Part II: Reduction**

experiments. ***Powder technology.*** **2023, 420: 118183.**

[2] **T. Tang, A. Ren, T. Wang, Y. He Experimental study and DEM numerical simulation of dry/wet particle flow behaviors in a spouted bed.** ***Industrial & Engineering Chemistry Research.*** **2019, 58(33): 15353-15367.**

[3] 梁金强, 刘丹竹, 徐庶亮, 叶茂, 刘中民, “双碳”目标下能源安全定量评价方法[J]. 化工进展，2022, 41（03）:1622-1633.

[4] **X. Liu, C.J.M. Hessels, N.G. Deen, Y. Tang CFD-DEM investigation on the agglomeration behavior of micron-sized combusted iron fines.** ***Fuel.*** **2023, 346: 128219.**

[5] **X. Liu, N. G. Deen, Y. Tang. On the treatment of bed-to-wall heat transfer in CFD-DEM simulations of gas-fluidized beds.** ***Chemical Engineering Science.*** **2021, 236: 116492.**

[6] **C. Xu, J. Zhu Experimental and theoretical study on the agglomeration arising from fluidization of cohesive particles—effects of mechanical vibration.** ***Chemical Engineering Science.*** **2005, 60(23): 6529–6541.**

[7] **Y. Zhong, Z. Wang, Z. Guo, Q. Tang. Prediction of de-fluidization behavior of iron powder in a fluidized bed at elevated temperatures: Theoretical model and experimental verification.** ***Powder technology.*** **2013, 249: 175–180.**

报告人简介：

报告人：韩沛霖（学生），于哈尔滨工业大学攻读博士学位，导师为何玉荣教授。

喷射式凝汽器冷凝换热特性实验研究

柴盈华[1,2]，肖颀[1,2,*]，黄崇海[1,2]，林原胜[1,2]，柯汉兵[1,2]，李邦明[1,2]

[1]热能动力技术重点实验室，湖北武汉，430205

[2]武汉第二船舶设计研究所，湖北武汉，430205

*Email: 15274952687@163.com

喷射式凝汽器利用冷却水经喷嘴撞击折流板后形成的水膜与蒸汽直接接触进行冷凝传热，凝水再热阱汇集后流入凝给水系统，其凝传热系数可达0.1 MW/m²•K，远大于传统的间壁式冷凝器。蒸汽-水膜直接接触冷凝是喷射式凝汽器中最为重要的换热过程，换热系数远高于间壁式冷凝器、传热端差低（理论上可达0.2-0.5 ℃）、同时取消了换热管等壁面结构，结构简单紧凑。相比于传统间壁式冷凝器，具有体积重量小、可靠性高等优点，换热系数高等优点，是未来船舶动力系统的理想选择之一[1-3]。在喷射式凝汽器中，热量交换主要发生在液膜区域，气液界面能质传递剧烈，影响因素众多，存在着复杂的两相流过程。而蒸汽-水膜直接接触冷凝换热过程是喷射式凝汽器的关键，完整的仿真及实验难度较大，当前相关研究较少。现有的喷射式凝汽器主要应用于电厂，利用丰富的自然淡水资源作为冷却水，无需精确的设计方法来改善换热效率，因此对喷射式凝汽器的换热特性研究较少；蒸汽-水膜直接接触冷凝过程受到冷却水流量、喷嘴口径等关键喷射参数的影响，尚无相关研究。为此，本文搭建了热态实验台架，探究了冷却水流量、喷嘴喷射角度对蒸汽-水膜直接接触冷凝换热特性的影响，为后续船用喷射式凝汽器的设计奠定基础。

热态实验装置主要包括液膜-蒸汽换热系统、蒸汽供应系统、水供应系统和数据采集系统四部分组成，实验装置示意图如图1所示。

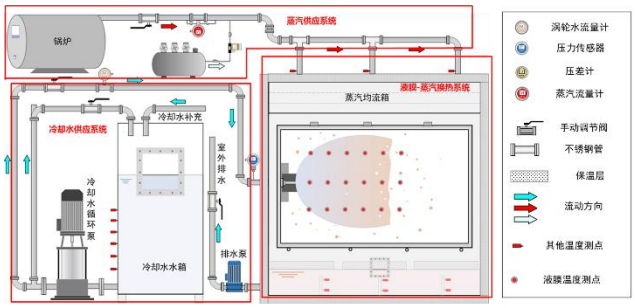
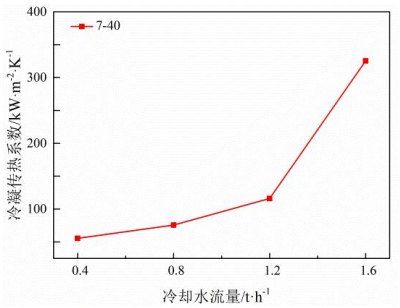
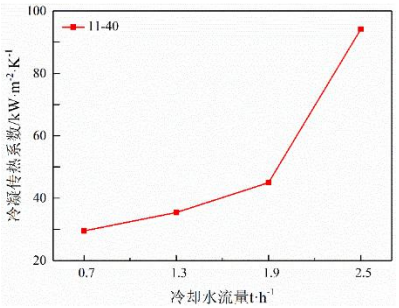
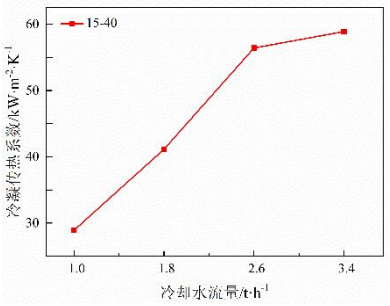


Fig. 1 Schematic diagram of the experimental device in hot state

图2(a)，(b)，(c)分别展示了7、11、15mm口径喷嘴在不同冷却水流量下的凝汽器整体换热系数，喷嘴喷射角度均为40°。通过图片可以看出，在三种不同口径的喷嘴下，随着冷却水流量的增大，冷凝传热系数均随之增大。







(a)HTC at 7 mm-40°nozzle (b) HTC at 11 mm-40°nozzle (c) HTC at 15 mm-40°nozzle

Fig. 2 Figure of variation of heat transfer coefficient of condensation with cooling water flow of different diameter nozzles

本实验中，喷射角度对冷凝换热系数影响较小。以 7mm 喷嘴为例，如图 3 所示，在三种不同口径的喷嘴下，冷却水流量相同时不同喷射角度下凝汽器换热量接近，换热量波动最大不超过 3.6%，可以认为喷射角度对凝汽器换热量几乎没有影响。

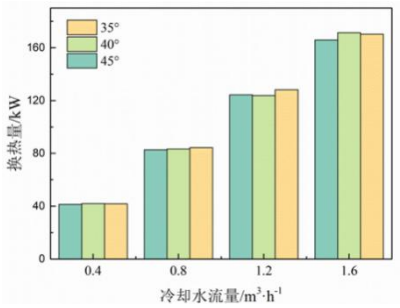


Fig. 3 Variation of heat transfer with cooling water flow at different injection angles

主要结论如下：

(1)冷凝器整体换热量与冷却水流量成一次线性相关。在三种不同口径的喷嘴下，喷嘴喷射角度一定时，随着冷却水流量的增大，在换热量和液膜面积的综合作用下，冷凝传热系数随之增大。在实际冷凝器中，可以适当增大冷却水流量以获得更好的冷凝换热效果。

(2)在35°、40°、45°三种不同角度下换热量相差较小，换热量波动最大不超过3.6%。受到冷却水成膜效果的影响，不同喷嘴角度下的冷凝传热系数略有波动。在7 mm喷嘴工况下，喷嘴喷射角度对冷凝换热特性影响不大。

关键词：喷射式凝汽器；换热特性；喷嘴；水膜

参考文献

[1] 付家兴. 喷射式凝汽器用于空冷机组尖峰冷却的理论与实验研究[D]. 华北电力大学，2019.

[2] 刘振华. 海勒式空冷机组冷端设备研究[D]. 天津大学，2003.

[3] H. R. Jacobs. Direct-contact condensation heat transfer[M]. Springer. 1988.

改变温度和压力气液固微型流化床液相返混特性

王泰基[1]，马永丽[1,*] 刘明言[1,2]

[1]天津大学化工学院，天津市津南区海河教育园区雅观路135号，天津 300350

[2]化学工程联合国家重点实验室（天津大学），天津市津南区海河教育园区雅观路135号，天津 300350

*Email: mayl@tju.edu.cn

微型气液固流化床反应器兼具多相流化床系统的高效混合与接触特性以及微系统的传递过程强化特性[1]。研究不同温度和压力下的微型气液固流化床内的液相返混特性，对该类反应器的设计放大、优化操作和有效控制等具有重要意义[2]。

以KCl为示踪剂，采用脉冲示踪技术，研究了10mm床径微型气液固流化床内的液相停留时间分布。液相为去离子水，气相为空气，固相为平均粒径 42～173mm 的玻璃珠，测量流化床出口液相的电导率，得到其停留时间分布曲线。结果表明，增大表观液速，分布曲线变窄，平均停留时间缩短，Pelect数增大；增大表观气速，分布曲线先变窄后变宽，平均停留时间变化不明显，Pelect数先减小后增大；固体颗粒的存在，使液相的停留时间有所增长，增大固体颗粒的粒径，分布曲线变窄，平均停留时间缩短，Pelect数增大。不同操作温度与操作压力条件下的停留时间分布变化结果表明：在操作温度范围25 °C-85°C条件下，升高温度，分布曲线峰值增高明显，分布曲线变窄，平均停留时间缩短。在85 °C条件下，增大表观液速、表观气速，分布曲线的变化与常温结果大致相同；升高压力，停留时间明显增加，分布明显不均匀，返混严重。不同黏度下停留时间分布变化结果表明，在黏度范围0.94-1.44 mPa·s下，随着黏度的升高，停留时间缩短，分布曲线变窄，Pelect数减小明显，接近于平推流。研究结果对于微型三相流化床的设计放大具有指导意义。

关键词：微型流化床；气液固流；高温高压；返混特性

参考文献

[1] **H. Guo, Y. L. Ma, M. Y. Liu, S. J. Li and J. W. Duan, Multibubble behavior and solid circulation rate in a gas−liquid−solid circulating microfluidized bed. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2023, 62, 18105–18121.**

[2] 姚东, 刘明言, 李翔南, 小型气-液-固流化床液相的停留时间分布[J]. 化工学报，2018, 69（11）: 4754-4762.

报告人简介：

王泰基（1999—），男，硕士研究生

2017 年 9 月-2022 年 6 月，在河南大学化学与化工学院获得学士学位

2022 年 9 月至今，在天津大学化工学院攻读硕士学位

课题名称:气液固微型流化床返混特性研究

Multi-objective Optimization of Radially Stirred Tank Based on CFD and Machine Learning

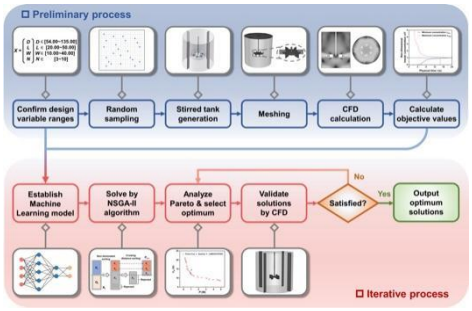
Xuezhi Zhao[1,2], Hanan Fan[1,2], Jie Fu[1,2,*]

[1]Key Laboratory of Biomass Chemical Engineering of Ministry of Education, College of Chemical and Biological Engineering, Zhejiang University, Hangzhou, Zhejiang, 310001

[2]Institute of Zhejiang University-Quzhou, Quzhou, Zhejiang, 324000

* jiefu@zju.edu.cn

Structural optimization is essential to improve the performance of mixing equipment. An efficient optimization strategy based on computational fluid dynamics, machine learning and the multi-objective genetic algorithm was proposed to predict and optimize the performance of the stirred tank. Single-factor analysis was performed to study the effects of structural parameters on power consumption and mixing time, which were reduced by 16.0% and 1.4%, respectively, in the optimized stirred vessel. To further optimize the stirred tank geometries and maximize the integrated performance, XGB coupled NSGA-II were utilized to minimize the power consumption and mixing time. The optimal design parameters from the Pareto front were identified by two well-known decision-making methods (LINMAP and TOPSIS), which decreased power consumption and mixing time by 12.3% and 13.4% compared to the stirred tank with the baseline structure. This research further confirmed the accuracy and reliability of the machine learning-based optimization method.



Scheme 1. Illustration of the workflow for predicting and optimizing the performance of the stirred tank

Keywords: computational fluid dynamics, machine learning, multi-objective optimization, stirred tank

References:

[1] Nadal-Rey G, McClure DD, Kavanagh JM, et al. Computational fluid dynamics modelling of hydrodynamics, mixing and oxygen transfer in industrial bioreactors with Newtonian broths. Biochem Eng J. 2022; 177: 108265.

[2] Vilardi G, Verdone N. Production of metallic iron nanoparticles in a baffled stirred tank reactor: Optimization via computational fluid dynamics simulation. Particuology. 2020; 52: 83–96.

[3] Visscher F, van der Schaaf J, Nijhuis TA, et al. Rotating reactors – A review. Chem Eng Res Des. 2013; 91: 1923–1940.

[4] Wu M, Jurtz N, Walle A, et al. Evaluation and application of efficient CFD-based methods for the multi-objective optimization of stirred tanks. Chem Eng Sci. 2022; 263: 118109.

[5] Xu L, Jia Z, Guo M, et al. Enhancement of macromixing performance of a stirred tank with a novel V-shaped punched baffle. Ind Eng Chem Res. 2023; 62: 3733–3746.

[6] John TP, Fonte CP, Kowalski A, et al. The effect of axial impeller geometry on the link between power and flow numbers. AIChE J. 2023; 69: e17871.

报告人简介：

姓名：赵学志

单位：浙江大学化学工程与生物工程学院

研究方向：生物质糖加氢反应器数值模拟

个人简介：就读于浙江大学化学工程与生物工程学院（硕转博），参与国家自然科学基金、浙江省自然科学基金及中石化横向课题等多个科研项目。研究方向集中在利用计算流体动力学（CFD）模拟与机器学习算法，研究和优化生物质糖加氢反应器（搅拌釜、固定床）。通过耦合 CFD 模拟与机器学习技术，深入分析反应器内部复杂的流体动力学行为，指导反应器结构设计和工艺参数优化，强化多相反应混合传质效率，进而提高反应效率。相关研究成果已在 AIChE J 上发表。未来，希望继续推动机器学习与 CFD 技术在生物质能源领域的深度融合，助力可持续能源的发展

气液固鼓泡床中$Ca(OH)_2$固定CO_2反应流数值模拟研究

张芳芳，李蔚玲*，沈佳明，吴士栋，孙健

南京师范大学能源与机械工程学院，江苏 南京 210023

*Email: liweiling06@njnu.edu.cn

随着化石燃料的大量燃烧，温室效应被广泛关注，减少CO_2排放技术研究中，化学吸收法是重要的技术方法[1]，被认为是减少烟气中二氧化碳排放最经济的方法，而矿物碳酸化是一种很有前途的碳捕集利用与封存技术。在这个过程中，CO_2与$Ca(OH)_2$反应生成$CaCO_3$, $CaCO_3$可以作为水泥的原料[2]，$CaCO_3$的多功能性和丰富性使其成为制药、填料、造纸、混凝土、塑料、染料和颜料工业中必不可少的配方成分，因此用氢氧化钙吸收CO_2可以看成是很有前景的固碳方法。氢氧化钙的主要来源是天然石灰岩，它的开采需要大量的能源，这不可避免地会导致二氧化碳排放量的大量增加。因此，对$Ca(OH)_2$的吸收很少有研究，并建议将电石渣等碱性固体废物用于该工艺。关于$Ca(OH)_2$的液相矿物碳酸化的模拟研究很少，大多数关于$Ca(OH)_2$碱性溶液的研究都只探讨了沉淀$CaCO_3$的合成问题[3, 4]，并未对其复杂的流动-传质-化学反应之间的相互作用进行阐述。本文建立了欧拉三相流的反应流模型，并耦合气液传质，重点考察反应器内为氢氧化钙浆液时，pH=12.5条件下碱液固碳流动、传质和反应过程。研究工况为气速U_g=0.082m/s，液固比L/S=30ml/g和CO_2浓度为100%，图1为模型的误差分析，将实验与实验数据相对比，从图中可以看出气含率的误差为5.99%，实验和模拟pH值的初始值和最终值如pH曲线所示，二者反应趋势相近，说明该模型的准确性较高。图2为该工况下的气含率、液相轴向速度、湍动能和湍流耗散率的时间平均值，可以看出随着传质的进行，气相二氧化碳传质进入液相导致气含率的降低，加入反应之后前期，20s-25s气含率持续降低，在反应后期，固相消耗逐渐减少，气含率逐渐回升，反应平衡时到达纯流动附近。时间平均液相轴向速度在传质时期和反应时期高于纯流动时期，因为固相氢氧化钙的消耗，导致液相变轻，使液相速度增加。图2中的湍动能，三个时期都相近，没有呈现出明显的规律；时间平均湍流耗散率的图可以看出纯传质时期的湍流耗散率和纯流动时期接近，加入反应后因为新组分的生成和反应的放热，导致反应时期湍流耗散率增大，反应结束后和流动传质时期接近。传质速率主要受CO_2浓度梯度的影响，传质初期二氧化碳浓度梯度最大，传质速率最高，15s时液相CO_2浓度饱和，传质速率最低，16s后加入反应，消耗CO_2，传质速率上升，反应达到平衡之后传质速率稳定在0附近，如图3所示。传质系数表征传质的阻力大小，主要受气含率、气液速度和相性质的影响，k_La越小，传质阻力越大，界面面积a对k_La的影响占主导，并且二氧化碳在水中的溶解受液膜控制，液膜的厚度会影响k_La的值，如图4所示。图5展示了该工况下的碳酸化效率随时间变化曲线，该工况下的氢氧化钙固碳能力较好，碳酸化效率在23s就可以达到100%，此时pH值在10附近，说明碳酸钙主要在pH=10以上沉淀，这也与文献中的发现一致[5]。该研究为鼓泡床中氢氧化钙吸收二氧化碳的建模提供了参考指导，同时也为鼓泡床中电石渣直接液相碳酸化技术提供理论参考。

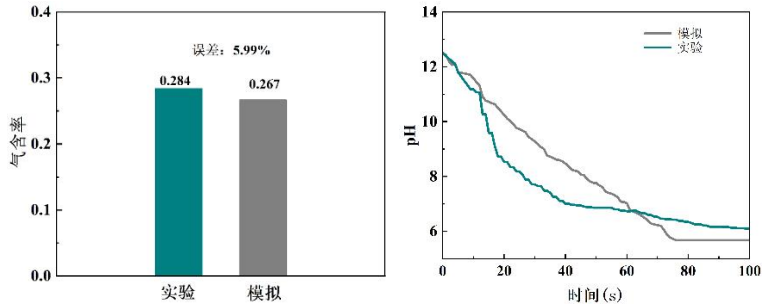


Fig. 1 Simulation results compared with the experimental data.

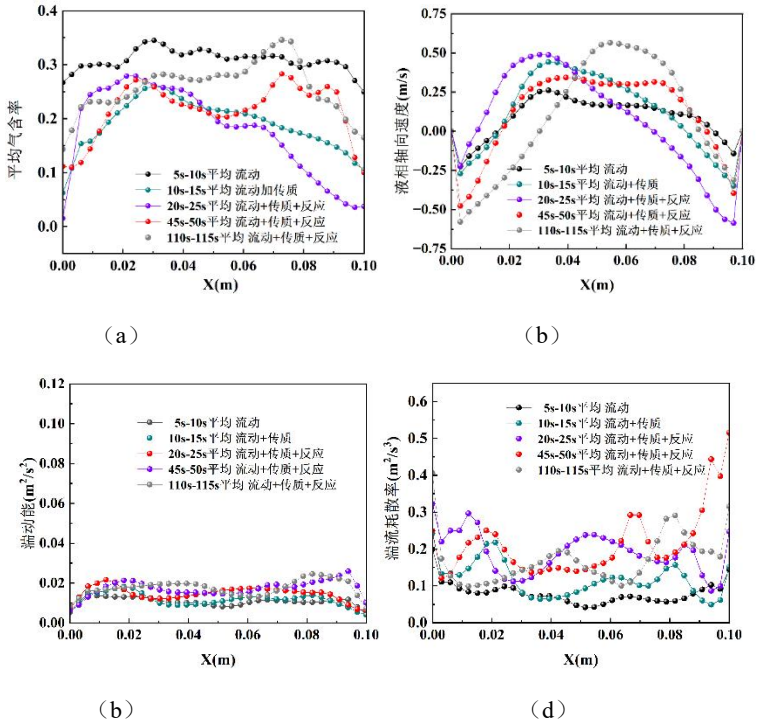


Fig. 2 Time-average value shifting with time

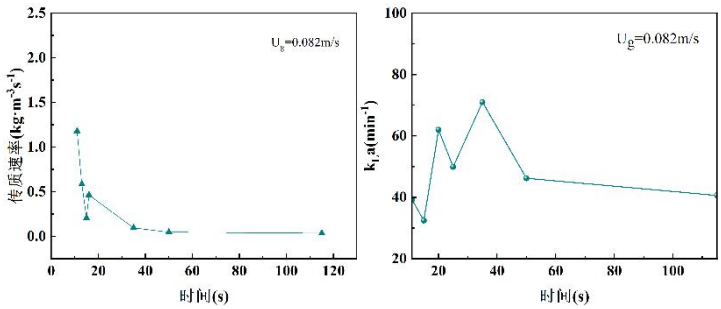


Fig. 3 Profiles of mass transfer rate shifting with time. **Fig. 4** Profiles of mass transfer coefficients shifting with time.

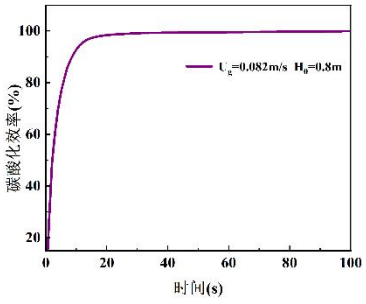


Fig. 5 Carbonation efficiency results.

关键词： 气液固鼓泡床；数值模拟；直接液相碳酸化；欧拉三相流；气液传质；

参考文献

[1] HAGHNEGAHDAR M R, RAHIMI A, HATAMIPOUR M S. A rate equation for Ca(OH)2 and CO2 reaction in a spouted bed reactor at low gas concentrations [J]. Chemical Engineering Research and Design, 2011, 89(6): 616-20.

[2] ZEVENHOVEN R, LEGENDRE D, SAID A, et al. Carbon dioxide dissolution and ammonia losses in bubble columns for

precipitated calcium carbonate (PCC) production [J]. Energy, 2019, 175: 1121-9.

[3] GRIMES C J, HARDCASTLE T, MANGA M S, et al. Calcium Carbonate Particle Formation through Precipitation in a Stagnant Bubble and a Bubble Column Reactor [J]. Crystal Growth & Design, 2020, 20(8): 5572-82.

[4] RIGOPOULOS S, JONES A. Modeling of semibatch agglomerative gas− liquid precipitation of CaCO3 in a bubble column reactor [J]. Industrial & engineering chemistry research, 2003, 42(25): 6567-75.

[5] HAN S-J, YOO M, KIM D-W, et al. Carbon Dioxide Capture Using Calcium Hydroxide Aqueous Solution as the Absorbent [J]. Energy & Fuels, 2011, 25(8): 3825-34.

报告人简介：

张芳芳

南京师范大学 能源与机械工程学院 研究生在读

主要研究方向：气液固鼓泡床流动与反应研究，多相流反应器数值模拟

邮箱：221912007@njnu.edu.cn

基于 CFD-PBM 模型的搅拌釜内锂电池前驱体沉淀过程研究

邓钧海[1]，周业丰[1*]

[1]（湘潭大学化工学院，湘潭 411100）

*Email: zhouyf@xtu.edu.cn

锂离子电池具有多功能性和高能量密度，因此在各种领域中得到广泛应用。这种快速增长的需求推动了大量的研究从而开发更大容量、更高能量密度、更长使用寿命、更安全的电池。这些特性是由阴极特性决定的，而阴极特性又是由前驱体材料所决定的。本工作基于 CFD-PBM 模型，对搅拌釜内前驱体的沉淀过程进行数值模拟研究。采用计算流体力学（Computational fluid dynamics，CFD）方法获得反应器内部的流场结构和湍流参数，使用群体平衡模型（Population balance model，PBM）对前驱体颗粒的成核、生成以及聚并现象进行预测，得到颗粒相的尺寸分布。本工作从反应器结构优化出发，探究了不同的内部结构对湍流参数的影响，进一步分析湍流对颗粒尺寸分布的影响，并结合工业中前驱体颗粒粒径的实际情况，确定较优的反应器内部结构。本工作为制备前驱体材料的反应器优化设计和过程强化提供了重要的理论支撑和参考。

关键词：CFD-PBM；搅拌釜；前驱体

Intensification of gas-liquid mass transfer using sub-millimeter bubbles: Experiments and CFD simulations

Xiaogang Shi, Jinsen Gao, Xingying Lan

State Key Laboratory of Heavy Oil Processing, China University of Petroleum (Beijing), Beijing, 102249, China

*Email: shixiaogang68@cup.edu.cn;

jsgao@cup.edu.cn

lanxy@cup.edu.cn

Sub-millimeter bubble can enhance the gas–liquid inter-phase mass transfer and show high potential to increase production efficiency. The flow behavior, bubble size and number density of sub-millimeter bubbles were characterized using the combined method of high-speed photography and deep learning-based image processing. Bubble detection, segmentation, and shape reconstruction were achieved using this method. This method can process sub-millimeter bubble images under gas holdup up to 20%. Mass transfer process and its influencing parameters were further investigated experimentally using CO2 and pure water. Computational Fluid Dynamics (CFD) model was established to study the flow and mass transfer mechanism of sub-millimeter bubbles. The bubble swarm effect and its influence on the calculation of gas-liquid drag coefficients were investigated for the gas–liquid two-phase flow of sub-millimeter bubbles under a wide range of gas holdups (0.02–0.21). The accelerating effect was observed in the experiments of gas‐liquid two-phase flows. Based on the experiments, an equation for the drag modification factors was proposed to include the bubble swarm effect. The accuracy and applicability of the proposed equation were validated by applying it together with the accurate single-bubble drag model in the CFD simulation by TFM. Mass transfer model was further developed for a single sub-millimeter bubble and bubble swarms, separately. Results show that the present flow and mass transfer model can be used to accurately describe the flow and mass transfer of sub-millimeter bubbles. The application of sub-millimeter bubble in intensifying the hydrogenation of heavy oil was further explored using the CFD simulations.

Keywords: Sub-millimeter bubbles; Intensification; Mass transfer

报告人简介：

石孝刚，1987 年 2 月生，汉族，山东省济南市人，博士，副教授，博士研究生导师。2010 年 6 月本科毕业于中国石油大学（华东），2017 年 5 月获比利时根特大学化学工程与技术专业博士学位。现为中国石油大学（北京）化学工艺系副主任，所在学科为化学工程与技术，主要研究方向为重质油加工、多相反应工程与数值模拟、化工过程强化。作为项目负责人/研究骨干主持/参与国家自然科学基金 1 项，中国石油大学（北京）引进人才基金 1 项，教育部留学基金委（CSC）项目 1 项，比利时根特大学交叉学科研究联盟“Ghent Bio-Economy”项目 1 项，国家自然科学基金重点项目 1 项，国家自然科学基金重大研究计划集成项目 2 项，国家重点研发计划子课题 1 项，企业合作项目 5 项，为中国石油大学（北京）“油气转化过程多相流动-反应耦合机制研究”青年创新团队骨干成员。获得中国颗粒学会自然科学奖一等奖（省部级，排名 3/9）1 项，中国化工学会基础研究成果奖二等奖（省部级，排名 2/8）1 项；发表论文 51 篇，其中 SCI 论文 39 篇；获中国发明专利 19 项，美国发明专利 3 项；指导学生获得各类国家级、亚太等类赛事奖励 6 项。

Numerical study on the bubbles behaviors on complex geometric surfaces with complex wettability based on 3D phase-field Lattice Boltzmann method

Wenqiang Chen [1, 2], Yumei Yong[1*], Hanyang Mo [1,3], Jialin Dai [1,2], Menghui Li [1,4] ,Chao Yang[1, 2*]

[1] State Key Laboratory of Petroleum Molecular & Process Engineering, CAS Key Laboratory of Green Process and Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China.

[2] School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

[3] Institute of Chemical & Environmental Engineering, China University of Mining and Technology-Beijing, Beijing 100083, China.

[4] College of Environment and Chemical Engineering of Dalian University, Dalian 116622, China.

Email: chenwenqiang@ipe.ac.cn

Bubbles trapped in the woven structures lead to the performance defects of composite materials. It is important to study the bubbles behaviors and regulation mechanism on the complex geometry and surface characteristics. A three-dimensional phase-field lattice Boltzmann method (PFLBM) for immiscible two-phase flow with large density and viscosity ratios was built, which takes into account surface tension, pressure force, viscous force and body force[1]. The three-phase wetting characteristics were successfully introduced on the plane and spherical surface by a geometrical way. The 3D two-phase model was validated by Laplace's law, and the wettability condition on the spherical surface was verified beacause the relative error between the measured and the specified contact angle is less than 2%. Then the complex geometric surfaces were constructed which consists of plane and spherical surface with complex wetting characteristics. An interpolation scheme was imposed at the junction lattices of two suface with differnet curvature. Basing on our built mathematical model, we systemly simulated a bubble motion on 3D complex geometric surfaces with complex wettability distribution. The geometrical shape, changable wettability, physical properties of fluids and driving force were investigated. By analyzing the force, flow field and shape evolution of the bubble in different moving stages, the bubble motion characteristics were got and the movement mechanism of the bubble on the complex geometric surfaces was revealed. Then we grasped how to control the bubble's behvaior on the complex surface shape with complex wettability distribution by surface tension, viscosity, driving force, wettability distribution, surface combined ways, surface curvature. The work would provide theoretical guidance and data support to improve the production quality of carbon fiber composites.

Key words: three-dimensional; phase-field lattice Boltzmann method; performance defects; complex geometric surfaces; wettability distribution

References

[1] MITCHELL T, LEONARDI C, FAKHARI A. Development of a three-dimensional phase-field lattice Boltzmann method for the study of immiscible fluids at high density ratios [J]. International Journal of Multiphase Flow, 107:1-15, 2018.

报告人简介：

陈文强，博士，现就读于中国科学院过程工程研究所，研究方向为基于格子 Boltzmann 方法的树脂-碳纤维复合材料成型调控数值研究，邮箱 chenwenqiang@ipe.ac.cn

费托合成浆态床反应器的CFD模拟

沈宪琨[1]，王铁峰[1,*]
[1]清华大学化学工程系，北京，100084
*wangtf@tsinghua.edu.cn

费托合成作为煤炭间接液化的核心技术对降低原油对外依存度，提高国家能源安全具有重要意义。浆态床反应器由于传热、传质效率高等优点被广泛用于费托合成过程[1]。但浆态床反应器内部流动行为复杂，流体流动、气液传质与化学反应相互耦合，同时费托合成反应发生在高温高压的费托蜡油中。现有模型研究主要集中在常压的气液两相流体系[2,3]，缺乏接近真实工业操作条件下的模拟工作，因而目前所建立的费托合成浆态床反应器模型普遍缺乏准确性，模型可靠性不足。本工作建立的费托浆态床反应器CFD模型，耦合群体平衡模型（PBM）以预测反应器内气泡大小分布（BSD）情况。CFD-PBM耦合模型考虑压力、温度[4]及催化剂颗粒[5]对BSD的影响，从根本上准确描述真实工业操作条件下浆态床反应器内的流动及传质行为。最后耦合工业铁基催化剂反应动力学建立完整费托合成浆态床反应器模型，并与工业示范装置（直径5.8 m，高度30 m）实验数据对比验证模型的可靠性。在此基础上，详细分析合成气表观气速、催化剂保有量、操作压力、合成气H_2/CO比等工艺参数对CO转化率、C_{5+}产量及CO_2、CH_4选择性的影响规律，从而获得优化的工业浆态床反应器操作条件，为工业浆态床反应器扩能提供了理论基础。

关键词：费托合成；浆态床反应器；CFD-PBM 耦合模型

参考文献

[6] Shu SL, Vidal D, Bertrand F, Chaouki J. Multiscale multiphase phenomena in bubble column reactors: A review. *Renew Energ*. 2019;141:613-631.
[7] Guan X, Xu Q, Yang N, et al. Hydrodynamics in bubble columns with helically-finned tube Internals: Experiments and CFD-PBM simulation. *Chemical Engineering Science*, 2021, 240: 116674.
[8] Yan P, Jin H, He G, et al. Numerical simulation of bubble characteristics in bubble columns with different liquid viscosities and surface tensions using a CFD-PBM coupled model. *Chemical Engineering Research and Design*, 2020, 154: 47-59.
[9] Zhang H, Sayyar A, Wang Y, et al. Generality of the CFD-PBM coupled model for bubble column simulation. *Chemical Engineering Science*, 2020, 219: 115514.
[10] Zhang H, Guo Z, Wang Y, et al. Effect of particles on hydrodynamics and mass transfer in a slurry bubble column: Correlation of experimental data. *AIChE Journal*, 2023, 69(3): e17843.

报告人简介：

沈宪琨，男，1999 年 6 月 1 日出生于辽宁省大连市，2021 年 9 月免试保送清华大学化学工程系攻读化学工程博士学位至今，主要研究方向为费托合成浆态床反应器研究，sxk21@mails.tsinghua.edu.cn。

基于钌催化剂的TMCB液相加氢制CBDO

甄浩[1]，杨索和[1]，何广湘[1]，马磊[1]，靳海波[1,*]

[1]北京石油化工学院新材料与化工学院/燃料清洁与先进催化减排技术北京市重点实验室，中国北京 102617

*Email: jinhaibo@bipt.edu.cn

2,2,4,4-四甲基-1,3-环丁二醇(CBDO)是一种性能优异的聚合物单体，在聚酯材料合成中具有广阔的应用前景。目前，CBDO主要通过对2,2,4,4-四甲基-1,3-环丁二酮(TMCB)加氢反应来获得，而高性能催化剂开发是该领域的研究重点之一。本文围绕TMCB加氢催化剂进行了深入研究，以γ-氧化铝为载体，以贵金属钌作为活性组分，通过等体积浸渍-化学还原法制备了一系列Ru/Al_2O_3催化剂，并以TMCB为原料，在固定床反应器上进行连续催化加氢合成CBDO，重点考察了催化剂制备工艺、反应条件对TMCB转化率与CBDO收率的影响。另外，通过XRD、BET、SEM、TEM等手段对催化剂进行分析，发现合成的Ru以纳米颗粒的形式分布在载体表面，表现出良好的催化效果。结果表明，当Ru负载量为6%，反应温度为90℃，压力为4 MPa, 质量空速为1 h^{-1}，氢酮摩尔比为300时， TMCB对CBDO的催化加氢效果最好。在此条件下，TMCB的转化率为99.75%，CBDO的收率达到87.91%。

关键词：2,2,4,4-四甲基-1,3-环丁二醇；2,2,4,4-四甲基-1,3-环丁二酮；贵金属钌；催化加氢

参考文献

[1] A. M. Nelson and T. E. Long. A perspective on emerging polymer technologies for bisphenol - A replacement [J]. Polymer International, 2012, 61(10):1485 - 1491.

[2] R. K. Shahni, M. Mabin, Z. Wang, and M. Shaik. Synthesis and characterization of BPA-free polyesters by incorporating a semi-rigid cyclobutene diol monomer [J]. Polymer Chemistry, 2020, 11(37): 6081-90.

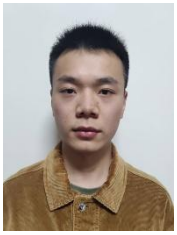
[3] M. Zhang, R. B. Moore and T. E. Long. Melt transesterification and characterization of segmented block copolyesters containing 2,2,4,4 - tetramethyl - 1,3 － cyclobutene diol [J]. Journal of Polymer Science Part A Polymer Chemistry, 2012, 50:3710-3718.

[4] B. Török, K. Felföldi, Á. Molnár, and M. Bartók. Transformation of organic compounds in the presence of metal complexes: VII. Selective reduction of diketones by hydrosilylation in the presence of rhodium(I) complexes[J]. Journal of Organometallic Chemistry, 1993, 460: 111-115.

[5] Y. Si, L. Yang, C. Wang, Y. Cheng, S. Yao, L. Wang, and X. Li. Liquid-phase hydrogenation of 2,2,4,4-tetramethyl-1,3-cyclobutanedione over supported Ru based catalysts[J]. Catalysis Communications, 2022, 166, 106453.

[6] 娄阳，张元礼，石鸣彦，李学，王咏梅，张晓琳，曹志涛. 2,2,4,4-四甲基-1,3-环丁二酮催化合成 2,2,4,4-四甲基-1,3-环丁二醇的工艺研究[J].石化技术与应用, 2015, 33(05): 405-407.

报告人简介：



姓名：甄浩

性别：男

学校：北京石油化工学院

专业：材料科学与工程

导师：靳海波

研究方向：贵金属催化加氢

研究主要成果：

1. Characteristics and catalytic behavior of Ru–Sn bimetallic catalysts for TMCB hydrogenation to CBDO
2. The liquid-phase hydrogenation of TMCB for preparation of CBDO by fluorine-modified Ruthenium-Stannum bimetallic catalysts

Design and construction of multiphase fixed-fluidized bed for 2-ethylanthraquinone hydrogenation

Yifeng Tu[1], Yufei He[1,*]

[1]State Key Laboratory of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing, 100029

* yfhe@mail.buct.edu.cn

The fixed bed plays a vital role in catalysis, energy and environment due to the advantages of easy recovery of catalyst, simple structure and convenient operation. Nonetheless, its high bed resistance, low mass and heat transfer efficiency can lead to uneven temperature distribution within the catalyst bed, increasing the likelihood of catalyst sintering and deactivation. In contrast, the fluidized bed, with its catalyst in a flowing state, presents advantages like reduced diffusion resistance, enhanced mass and heat transfer efficiency, and improved reactant conversion rates. However, challenges such as significant catalyst wear, difficulty in separating the catalyst from the reactants, and the fluid is prone to backmixing. To balance the "seesaw" effect between the issues of catalyst activity in fixed bed reactors and catalyst recovery in fluidized bed reactors, we proposed a novel fixed-fluidized bed design concept that combines the respective advantages of fixed beds and fluidized beds. In this approach, catalytically active catalyst particles are encapsulated in a free state within porous materials with hollow structures. These modular catalyst assemblies are then packed in the reactor in a fixed bed configuration. By controlling the flow velocity of reactants, the catalyst particles are localized fluidization in the cavity of the porous hollow material. Utilizing the pressure pulsation signal, a comprehensive data processing approach integrating visualization, mean value, standard deviation, wavelet transform, and power spectral density (PSD) is employed to develop a flow pattern analysis method and calculation model for gas-liquid-solid three-phase fixed fluidized beds. The new reaction bed exhibited excellent performance in the hydrogenation of 2-ethylanthraquinone (EAQ) to hydrogen peroxide.

Keywords: Multiphase fluid state; Time domain analysis; Frequency domain analysis; anthraquinone hydrogenation

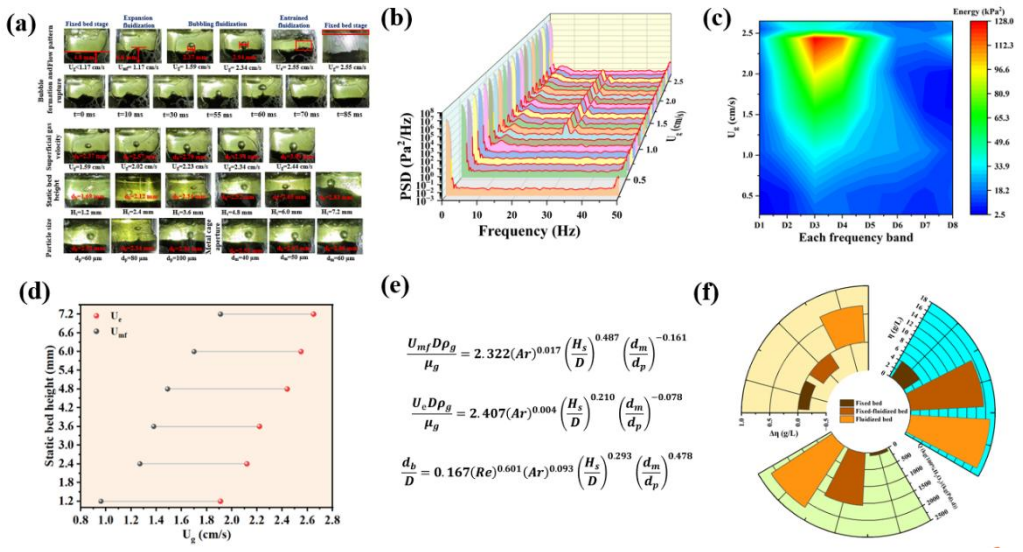


Fig. 1 (a) Visual analysis results under different operating conditions; (b) Power spectral density (PSD) at different gas velocity; (c) Wavelet decomposition at different apparent gas velocities; (d) Minimum fluidization velocity U_{mf} and minimum entrainment velocity U_e at different static bed heights; (e) Calculation model of minimum fluidization velocity, minimum entrainment velocity and bubble size (Parameter range:$40 \le d_p \le 80$ μm;$1.2 \le H_s \le 7.2$ mm; $20 \le d_m \le 60$ μm; D=20 mm; ρ_p=3300 kg/m^3; ρ_l=925 kg/m^3; ρ_g=0.076 kg/m^3; μ_l=1.43×10^{-3} Pa/s; μ_g=1.83×10^{-5} Pa/s) ; (f) Comparison of performance of EAQ hydrogenation in different bed types (Reaction conditions: T=50 °C, P=0.1 Mpa, catalyst=1.0 g, EAQ working solution 40 mL, EAQ concentration 120 g/L).

报告人简介：

北京化工大学化学学院李殿卿课题组研三学生

固体表面析氢过程气泡演化行为研究

冯源[1]，赖煜华[1]，金捍宇[1]，王帅[1,*]

[1]哈尔滨工业大学 能源科学与工程学院，黑龙江省哈尔滨市，150001

*Email: shuaiwang@hit.edu.cn

在电解水体系中，电极表面发生析氢反应。电极表面的气泡行为对于电解性能有较大影响，通过调控电极表面结构及气泡接触行为，可以优化电极上的气泡动力学，提高电解效率[1]。本文采用计算流体力学方法，基于VOF 模型，建立了电极跨界面传质气泡生长模型与动态接触角模型，研究了不同表面结构对于氢气气泡生长与脱离的作用规律。图 1 对比了不同电极表面参数下单气泡的生长行为，分析了气泡接触线与接触角的运动规律。由图可见，气泡在接触线运动受阻后，接触行为表现出三个不同的阶段，气泡产生形变并加速气泡脱离。

引入气泡实际质心与理想质心差异的无量纲量来表示气泡形变程度。图 2 给出了气泡即将进入颈缩阶段时的形变程度和气泡当量半径与接触角和初始沟槽半径的关系。结果表明，在各个接触角下，平板上气泡在进入颈缩阶段时有最小的形变程度和最大的当量半径，而沟槽结构对气泡形变程度的影响与表面接触角相关，较小的初始沟槽半径和较大的表面接触角会导致气泡横向生长覆盖多个沟槽，进而减小了气泡形变程度，导致更大的当量半径。在同一接触角下，较大的初始沟槽半径会降低气泡形变程度。不同表面结构上的气泡动力学与气泡形变程度相关，通过增加表面亲水性，控制沟槽结构分布等方式，可以加剧气泡形变程度，促进气泡脱离。

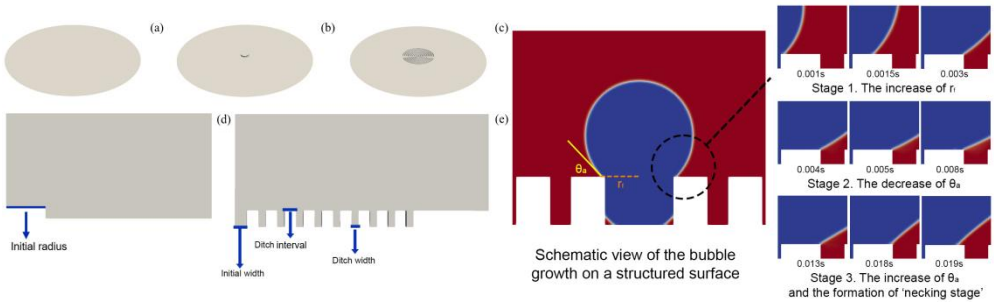


图1 凹槽电极结构表面气泡接触行为

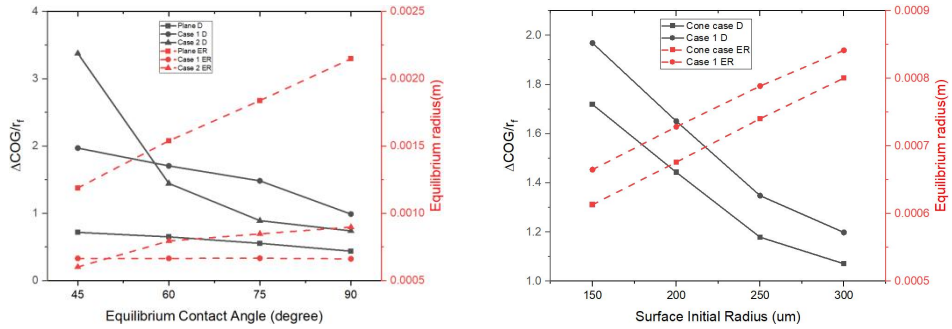


图 2 实际质心与理想球质心之间差别与电极表面性质的关系

关键词：电解水；气泡动力学；电极表面形貌

参考文献

[1] Taqieddin A, Nazari R, Rajic L, et al. Physicochemical hydrodynamics of gas bubbles in two phase electrochemical systems[J]. Journal of The Electrochemical Society, 2017, 164(13): E448.

报告人简介：

冯源，哈尔滨工业大学，博士研究生

Gas Holdupat Dynamic Equilibrium Region of a Bubble Column: Effect of Bubble Generator Performance

Xiao Xu[1]

[1]School of Mechanical and Power Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai, 200237, China

* xxu@ecust.edu.cn

Gas holdup along with the superficial gas velocity was systematically investigated in a lab-scale bubble column. The experiments were conducted in a bubble column with a height of 6 m at superficial gas velocity of 0.01 - 0.13 m/s. Experimental results show that dynamic equilibrium region was achieved at a distance of 2800mm above the bubble generator. Small initial bubble size will lead to higher gas holdup and slump trend. To overcome the trade-off between sufficient gas holdup and slump trend, a reasonable gas holdup without slump can be obtained by controlling the liquid mass flow in the nozzle. Based on previous empirical correlations and experiment data, asemi empirical correlation of gas holdup was established consider the flow regime transition and bubble generator performance. The semi empirical correlation in this work gives a fairly accurate prediction while several empirical coefficients were used

Keywords: Gas holdup; initial bubble size; Bubble column, flow regime transition, bubble generator

颗粒特性和加压方法对粉体压缩影响研究

王世丞，郭晓镭*，陆海峰，刘海峰

华东理工大学，上海煤气化工程技术研究中心

上海市徐汇区梅陇路 130 号，上海 200237

*Email: gxl@ecust.edu.cn

颗粒特性和加压方法都对粉体压缩行为有重要影响。粉体压缩的宏观特性是颗粒间微观相互作用的共同结果。颗粒特性包括粒度、粒度分布、颗粒形状、角度、硬度和表面粗糙度。机械加压是最常见的粉体压缩方式，通过对粉体施加机械推力来测试压缩性。粉体压缩性的测试主要有单轴压缩实验、凝固仪实验和 FT4 粉体流变仪的压缩测试装置等。这些试验为粉体在机械应力下的压缩性能提供了重要参考。气体也会对粉体产生压缩作用。在煤粉的高压料斗卸料装置中，由于料斗压力的增加，煤粉的压实度难以排出。料斗内气体加压过程中的气体压力梯度增加了粉床的固结程度，提高了堆积密度。通过 FT4 流变仪和加压可视化罐对具有不同平均粒径、球形度和附着力的粉体的压缩进行了实验研究。分析了由颗粒特性和加压方法引起的压缩性差异。结果表明，平均粒径越小，球形度越高，粘附力越大，粉体的可压缩性越大。在实验范围内，气体加压对粉体压缩的影响要比机械加压小。提出了压缩正应力与气体加压速率之间的关系，还讨论了不同加压方式的机理以及压缩位置和方式。

关键词：颗粒特性；机械加压；气体加压；粉体压缩

报告人简介:

王世丞，在读硕士生，目前就读于华东理工大学材料与化工专业，主要研究方向为超细粉体压缩及气固两相流。
报告人为硕士生在读。

水平管道中颗粒物质的流型演化规律及机理分析

杜辉，陆海峰*，郭晓镭，刘海峰

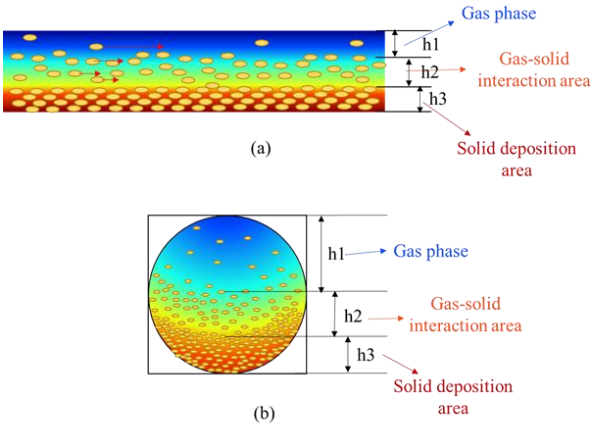
华东理工大学,上海煤气化工程技术研究中心,煤液化气化及高效低碳利用全国重点实验室

上海市徐汇区梅陇路 130 号，200237

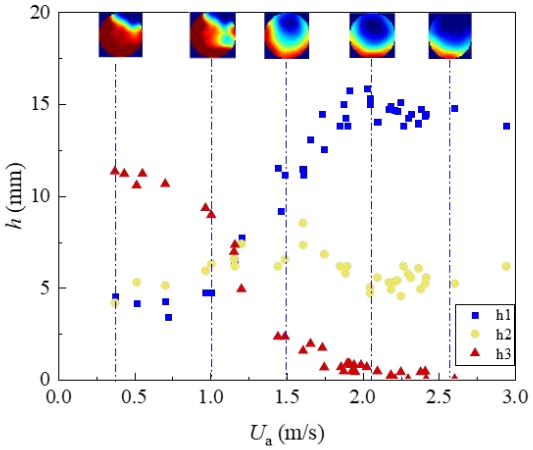
*通讯邮箱：luhf@ecust.edu.cn

气固两相流中，管内的流型演变规律及机理分析对于优化输送系统的设计和稳定高效运行至关重要。从相间作用方式的角度，密相输送过程中水平管道截面可以分为三个区域：固体颗粒运动、气相流动和气固强烈相互作用区域。电容层析成像(ECT)作为一种非侵入式流型测量方法，可以用于研究水平管道内流型变化规律。实验中，在控制固气比为 60～100kg/kg 的密相气力输送范围内，利用 ECT 表征管内流型的演变和截面上的浓度分布。分析了表观气速对管道内固体沉积、气相流动和气固相互作用区域的影响。在水平气力输送中，观察到了活塞流、环形流和分层流。利用雷诺数和阿基米德数之间的关系表征流型的转变。通过研究气固相互作用，探索颗粒在管道中流动模式的物理机制，建立气固相互作用模型，深入理解气力输送系统的工作原理。该工作为气力输送系统的设计和运行提供了理论基础。

关键词：气固两相流；密相气力输送；流型演变；建模分析



Different areas in the pipeline (a). along the flow direction, (b). pipeline cross section



Height variation of different areas in the pipeline

报告人简介：

杜辉，博士研究生，就读于华东理工大学。研究方向为颗粒堆积与流动性优化、粉体气力输送的设计及工艺优化研究、气固多相流的理论及建模分析。相关成果在 Powder Technology、Particuology 等期刊上发表。

固定床内颗粒-流体示踪过程的颗粒尺度模拟研究

胡乔娜[1]，李文彬[1,*]，唐忠利[1]，张东辉[1]

[1]天津大学化工学院，天津 300072

[*]Email: richard@tju.edu.cn

固定床广泛应用于化学过程工业中，相比于耗时耗力的实验方法，计算流体力学（CFD）提供了一种替代的固定床示踪实验模拟方法。宏观上，通过停留时间分布诊断流体流动的非理想性；微观上，通过颗粒分辨方法（PR）重构真实颗粒堆积结构，更准确地获得颗粒间隙的信息。同时，计算传质学方法能够在示踪过程中获得湍流传质扩散系数（D_t），无需提前估算未知的 D_t。本文首先结合计算传质学方法和颗粒分辨方法，提出了固定床流体示踪过程的颗粒尺度模型，并将模拟结果与实验结果进行对比，验证了模型的准确性。其次，本文对 PR-CMT 模型和 PM-CMT 模型进行了对比分析与讨论，并考虑了颗粒形状与管径比对示踪过程的影响。最后，对 PR-CMT、PR-D_{ax}、PR-Sc_t 和 PR-Laminar 四种模型进行了对比分析与讨论。

关键词：固定床示踪实验；计算传质学；颗粒分辨方法；湍流扩散；停留时间分布

报告人简介：

姓名：胡乔娜

专业：化学工程

目前在天津大学化工学院攻读硕士学位，师从李文彬研究员。主要研究方向为计算传质学，特别是固定床的应用研究。

空气对二元粉末装粉偏析影响的 CFD-DEM 耦合分析

李润梓[1],钟文镇[1,*],孙登超[1],吴晓晨[1]

[1]济南大学机械工程学院，山东 济南，250022

*Email: me_zhongwz@ujn.edu.cn

装粉工艺是粉末成型技术的一个关键环节，其偏析现象直接关乎粉末制品的最终质量和性能。鉴于空气作为流动介质的关键作用，深入探究其对装粉偏析的影响机制显得尤为关键。本研究的目的是阐明空气在垂直式与移动式装粉模式中的影响机制。本研究采用 CFD-DEM 耦合技术，引入适用于大范围空隙率变化的 Die filling 曳力模型，研究了空气对二元颗粒混合物在两种装粉模式过程中偏析行为的影响。创新性地构建了新型局部偏析指数，该指数基于局部区域内颗粒 1 与颗粒 2 体积比 k 相对于均混状态粉末的偏离程度，实现了装粉偏析程度的精准量化评估。首先通过数值模拟，对比了真空与空气条件下两种装粉模式的粉末流动特征，重点分析了局部空隙率变化。进而利用新型局部偏析指数精确度量了装粉结果的偏析程度，总结了真空与空气环境下垂直式与移动式装粉模式的空间偏析规律。研究发现，垂直式装粉与移动式装粉模式展现出截然不同的偏析机理，且空气对两者的作用效果大相径庭。特别地，垂直式装粉在真空环境下更有利于粉末均匀性，而移动式装粉在空气环境中则表现出更优的填充效能，为优化粉末装填工艺提供了坚实的理论基础与实验指导。

关键词：装粉；偏析指数；曳力模型；CFD-DEM；空隙率

参考文献

[1] 宋玉萍, 李芳, 郭菁. 粉末成型技术创新及其发展现状[J]. 中国有色金属, 2015(19): 66-67.

[2] R. Cabiscol, H. Shi, I. Wünsch, et al. Effect of particle size on powder compaction and tablet strength using limestone[J]. Advanced Powder Technology, 2020, 31(3): 1280-1289.

[3] R. C. Rowe, P. York, E. A. Colbourn, et al. The influence of pellet shape, size and distribution on capsule filling—A preliminary evaluation of three-dimensional computer simulation using a Monte-Carlo technique[J]. International Journal of Pharmaceutics, 2005, 300(1): 32-37.

[4] P. Lindskog. The future of ferrous PM In Europe[J]. Powder Metallurgy, 2004, 47(1): 6-9.

[5] C. Bierwisch, T. Kraft, H. Riedel, et al. Die filling optimization using three-dimensional discrete element modeling[J]. Powder Technology, 2009, 196(2): 169-179.

[6] A. Zakhvatayeva, W. Zhong, H. A Makroo, et al. An experimental study of die filling of pharmaceutical powders using a rotary die filling system[J]. International Journal of Pharmaceutics, 2018, 553(1): 84-96.

[7] O. Coube, A. C. F. Cocks, C. Y. Wu. Experimental and numerical study of die filling, powder transfer and die compaction[J]. Powder Metallurgy, 2005, 48(1): 68-76.

[8] R. Mendez, F. Muzzio, C. Velazquez. Study of the effects of feed frames on powder blend properties during the filling of tablet press dies[J]. Powder Technology, 2010, 200(3): 105-116.

[9] C. Y. Wu, A. Cocks, O. T. Gillia. Die filling and powder transfer[J]. int.j.powder metallugy, 2003.

[10] C. Y. Wu, L. Dihoru, A. C. F. Cocks. The flow of powder into simple and stepped dies[J]. Powder Technology, 2003, 134(1): 24-39.

[11] C. Y. Wu, A. C. F. Cocks. Flow behaviour of powders during die filling[J]. Powder Metallurgy, 2004, 47(2): 127-136.

[12] D. Tong, G. Vivek, S. Hamid, et al. Correlations between segregation intensity and material properties such as particle sizes and adhesions and novel methods for assessment[J]. Powder Technology. 2021;387 (0):215-226.

[13] Y. Wu,Q. Zheng,H. Zhu, et al. A micro-macro constitutive relationship for the pressure of solid phase in dense fluid-particle flows in hopper[J]. Powder Technology. 2024;434 (0):119268-119268.

[14] Y. Chung, C. C. Liao, Z. H. Zhuang. Experimental investigations for the effect of fine powders on size-induced segregation in

binary granular mixtures. Powder Technology[J]. 2021;387 (0):270-276.

[15] A. Zakhvatayeva, C. Hare, C. Y. Wu. Size-induced segregation during die filling[J]. International Journal of Pharmaceutics: X. 2019;1 (0):100032-100032.

[16] H. Claudia, R. G. Srikanth, S. Regina, et al. Simulation of particle size segregation in a pharmaceutical tablet press lab-scale gravity feeder[J]. Advanced Powder Technology. 2018;29 (3):765-780.

[17] U. V. Shah, V. Karde, C. Ghoroi, et al. Influence of particle properties on powder bulk behaviour and processability[J]. Int. J. Pharm. 518 (1–2) (2017) 138–154.

[18] T. Deng, V. Garg, H. Salehi, et al. An experimental study on free-surface rolling segregation and correlations with angle of repose and particle sphericity[J]. Powder Technol. 379 (2021) 307–320.

[19] A. Rosato, K.J. Strandburg, F. Prinz, et al. Why the Brazil nuts are on top: size segregation of particulate matter by shaking[J], Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 1038–1040.

[20] L. R. Lawrence, J. K. Beddow. Powder segregation during die filling[J]. Powder Technology, 1968, 2: 253-259.

[21] L. R. Lawrence, J. K. Beddow. Some effects of vibration upon powder segregation during die filling[J]. Powder Technology, 1968, 2: 125-130.

[22] J. A. Drahun, J. Bridgewater. The mechanisms of free surface segregation[J]. Powder Technology, 1983, 36:39-53.

[23] D. V. Khakhar, J. J. McCarthy, J. M. Ottino. Mixing and segregation of granular materials in chute flows[J]. Chaos, 1999, 9(3): 594-610

[24] H. A. Makse, S. Havlin, P. R. King, et al. Spontaneous stratification in granular mixtures[J]. Nature, 1997, 386: 379-382.

[25] J. Baxter, U. Tüzün, D. Heyes, et al. Stratification in poured granular heaps[J]. Nature, 1998, 391: 136

[26] Y. Guo, C.Y. Wu, K.D. Kafui, et al. 3D DEM/CFD analysis of size-induced segregation during die filling. Powder Technology. 2011;206 (1-2):177-188.

[27] Y. Guo, K. D. Kafui,C. Y. Wu, et al. A coupled DEM/CFD analysis of the effect of air on powder flow during die filling. AIChE Journal. 2008;55 (1):49-62.

[28] 吴晶晶, 蔡杰, 高亚东, 等. 基于 CFD-DEM 模腔填充过程中颗粒分离行为分析[J]. 中国粉体技术, 2022, 28(04): 90-99.

[29] Y. Guo, C. Y. Wu, C. Thornton. The effects of air and particle density difference on segregation of powder mixtures during die filling[J]. Chemical Engineering Science, 2011, 66(4): 661-673.

[30] E. N. Nwose, C. Pei, C. Y. Wu. Modelling die filling with charged particles using DEM/CFD[J]. Particuology, 2012, 10(2): 229-235.

[31] 蒋鸣, 周强. 气固流化床介尺度结构形成机制及过滤曳力模型研究进展[J]. 化工学报, 2022, 73(6): 2468-2485.

[32] 王振波, 张玉春, 徐春明. 不同曳力模型及颗粒碰撞恢复系数对短接触旋流反应器内气固流场的影响[J]. 化工学报, 2014, 65(6): 2034-2041.

[33] 李玉玺, 崔志刚, 马素霞, 等. 分区曳力模型的 2D 鼓泡流化床流动特性模拟[J]. 化学工程, 2021, 49(1): 49-53+69.

[34] W. Bian, X. Chen, J. Wang. A critical comparison of two-fluid model, discrete particle method and direct numerical simulation for modeling dense gas-solid flow of rough spheres[J]. Chemical Engineering Science, 2019, 210: 115233.

[35] O. Owoyemi, L. Mazzei, P. Lettieri. CFD modeling of binary-fluidized suspensions and investigation of role of particle–particle drag on mixing and segregation[J]. AIChE Journal, 2007, 53(8): 1924-1940.

[36] 石欣琳. 吸气式装粉的 CFD-DEM 曳力模型优化及耦合模拟研究[D].济南大学,2024.

[37] P. V. Danckwerts. Definition and measurement of some characteristics of mixtures[J]. Applied Scientific Research A, 1952, 3(4), 279–296.

[38] J. Doucet, F. Bertrand, J. Chaouki. A measure of mixing from lagrangian tracking and its application to granular and fluid flow systems[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2008, 86(12), 1313–1321.

[39] S. Oka, A. Sahay, W. Meng, et al. Diminished segregation in continuous powder mixing[J]. Powder Technology. 2017;309 (0):79-88.

[40] T. F. Zhang, J. Gan, D. Pinson, et al. Size-induced segregation of granular materials during filling a conical hopper[J]. Powder

Technology. 2018;340 (0):331-343.

[41] J. Zhang, Y. Tan, X. Xiao, et al. Comparison of roller-spreading and blade-spreading processes in powder-bed additive manufacturing by DEM simulations[J]. Particuology. 2022;66 (0):48-58.

[42] 钟文镇, 何克晶, 周照耀, 等. 粉末材料堆积的物理模型与仿真系统[J].物理学报,2009,58(S1):21-28.

[43] C. Kloss, C. Goniva, A. Hager, et al. Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM[J]. Progress in Computational Fluid Dynamics. 2012;12 (2/3):140-140.

[44] 钟文镇, 昃向博, 李国平, 等.球形玻璃珠填充模腔的流动特性试验[J].中国粉体技术,2019,25(06):32-37.

[45] C. Zheng, E. Yost, A. R. Muliadi, et al. Numerical analysis of die filling with a forced feeder using GPU-enhanced discrete element methods[J]. International Journal of Pharmaceutics, 2022, 622: 121861.

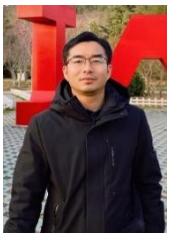
第一作者简介：

姓名：　　李润梓

学历：　　硕士研究生(学生)

研究方向：　　气固两相流的 CFD－DEM 分析

通讯作者简介：



姓名：　　钟文镇

学历：　　博士

职称：　　副教授

研究方向：　　气固两相流的 CFD－DEM 分析

国家自然科学基金青年基金，51605192

中国博士后科学基金第 57 批面上资助项目，

基金项目：　　2015M571635

山东省中青年科学家科研奖励基金，

BS2015NJ009

颗粒-气泡相互作用的三维模拟研究

占梦琴[1]，刘业飞[1,*]

[1]南京工业大学化工学院，南京，211816

*Email：yefei.liu@njtech.edu.cn

气液固三相反应器具有高处理能力、温度易于控制、相间混合均匀和传热、传质效果好等优点，已经广泛应用于石油化工、煤化工、环境工程、生物化工和制药等各种过程工业之中。气液固三相反应器作为广泛应用的反应器型式，具有更为复杂的时空多尺度变化特征，三相流动体系的非均匀性、非线性、非平衡性等特点使得人们对气液固反应器内部的多尺度结构缺乏充分的科学认识，很难从理论上指导和优化反应器性能。在气液固反应器中，催化剂颗粒与气泡之间的复杂相互作用是影响反应器宏观性能的关键因素，因此对颗粒-气泡相互作用过程进行系统的分析是很有必要的。由于计算机硬件的不断发展，计算流体力学（CFD）数值模拟逐渐成为了研究气-液-固三相反应器的有力工具，通过使用 CFD 可以模拟出颗粒运动轨迹以及气泡周围的流场分布和速度。VOF 可以精确模拟变形的气液界面，使用 VOF 方法[1]对三相系统气液界面的变化进行了模拟计算，通过 Navier-Stokes 方程[2]（$\frac{\partial\left(\rho\mathbf{u}\right)}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\rho\mathbf{uu}\right)=-\nabla p+\rho\mathbf{g}+\nabla\cdot\boldsymbol{\tau}+\mathbf{S}_b+\mathbf{S}_p$）来控制气泡-液体的动力学，其中 S_b 是表面张力源项，S_p 是颗粒-流体源项。使用连续性方程[2]（$\nabla\cdot\mathbf{u}=Q_p+Q_b$）来模拟气液固三相系统中的体积变化，其中 Q_p，Q_b 是有颗粒运动和气体注入产生的体积源项。DEM 可以描述颗粒群复杂的相互作用，采用 DEM 方法[3]计算颗粒的运动轨迹，颗粒的平移与旋转分别有线动量方程[2]（$\rho_{p,i}V_{p,i}\frac{d\mathbf{u}_{p,i}}{dt}=\sum_{j\neq i}^{N_i}\mathbf{F}_{p,i,j}+\mathbf{F}_{s,i}+\mathbf{F}_{g,i}+\mathbf{F}_{f,i}+\mathbf{F}_{lub,i}+\mathbf{F}_{b,i}$）和角动量方程[2]（$\mathbf{I}_i\frac{d\omega_{p,i}}{dt}=\sum_{j\neq i}^{N_i}\mathbf{M}_{p,i,j}+\mathbf{M}_{s,j}$）来进行控制，其中 F_p、F_s、F_f 和 F_b 是颗粒-颗粒、颗粒-壁面、颗粒-液体和颗粒-气泡之间的相互作用力，M_p 和 M_s 分别是由于颗粒-颗粒和颗粒-壁面碰撞引起的外扭矩。当需要了解气泡周围的流场细节以及颗粒的运动轨迹时，VOF 通常与 DEM 方法耦合，来模拟复杂的气-液-固三相流动。在三维模拟下，研究单个气泡和连续气泡产生的尾流对颗粒-气泡相互作用的影响，连续气泡上升过程发生的气泡聚并现象对颗粒的影响以及气泡的脱落，为了解气泡-颗粒相互作用和提高反应器的性能提供基础。

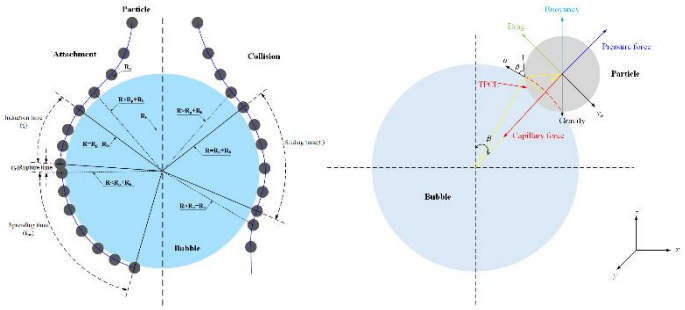


Fig. 1 Schematic diagram of particle-bubble interaction

关键词：VOF-DEM；三维模拟；颗粒附着；颗粒-气泡

参考文献

[1] Hirt C W, Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries[J]. Journal of computational physics, 1981, 39(1): 201-225.

[2] Xia H, Zhang Z, Liu J, et al. Modeling and numerical study of particle-bubble-liquid flows using a front-tracking and discrete-element method[J]. Applied Mathematical Modelling, 2023, 114: 525-543.

[3] Cundall P A, Strack O D L. A discrete numerical model for granular assemblies[J]. geotechnique, 1979, 29(1): 47-65.

高动量下逆浮力鼓泡过程CFD模拟研究

王荣涛[1]，刘业飞[1,*]

[1]南京工业大学化工学院，南京，211816

*Email: yefei.liu@njtech.edu.cn

气泡广泛存在于化工、环境、矿业和能源等诸多工业生产过程中，其运动行为直接或间接影响着相关工艺流程的高效运行。在鼓泡反应器中，气泡的运动行为往往伴随着气液或气液固等多相流动过程，因此对气泡运动规律的揭示和认识一直都是研究的热点和难点。孔口向下的管式气体分布器，因其具有防止孔口堵塞等诸多优点，因此在多相反应器中具有广泛的应用前景。为了高效的设计与优化此类鼓泡反应器，系统地研究向下孔口鼓泡反应器内部的流场至关重要。本文采用计算流体力学(CFD)方法研究了高动量向下孔口喷出气体的过程。采用HZDR[1]三维Euler-Euler-VOF混合模型，其在Euler-Euler模型的基础上，结合VOF的界面力，使得界面更加尖锐，使用SST k-ω湍流模型[2]，结合曳力[3][4][5]、升力[6]、湍流耗散力[7]等力的模型来描述气液流动的过程。仿真结果表明，在气体冲出孔口的瞬间会因气泡破碎产生大量的小气泡，随着大气泡一同的上升，由于气体出孔口的速度非常大，气泡带有非常大的动能，在大气泡上升的过程中其亦会破碎为小气泡。当大气泡接触液面的瞬间又会被破碎为小气泡，最后所有产生的小气泡均集中于液面附近。

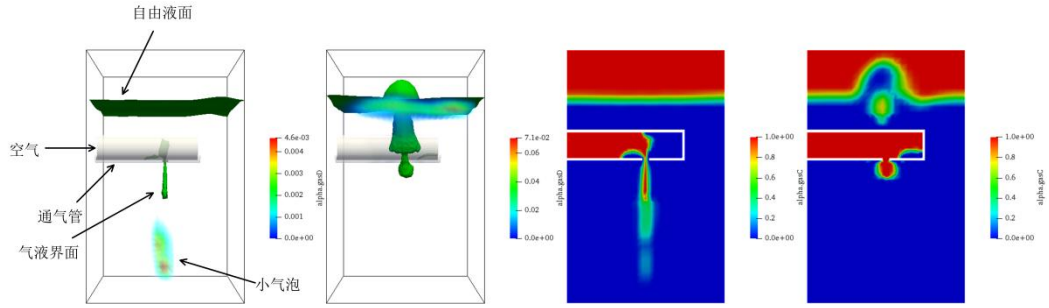


Fig. 1 Contours of volume fraction (gas) on conditions that are the driving stage (a)(c) and stable stage (b)(d)

关键词：气泡生成；逆浮力；高动量；CFD；混合双流体模型

参考文献

[1] **F. Schlegel, K. G. Bilde, and M. Draw HZDR Multiphase Addon for OpenFOAM (Version 10-s.1-hzdr.3). 2023.**

[2] **F. R. Menter Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *Aiaa J.* 1994, 32(8): 1598-1605.**

[3] **M. Ishii and N. Zuber Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows. *AIChE J.* 1979, 25(5): 843-855.**

[4] **L. Schiller and A. Naumann A drag coefficient correlation. *Z. Vereins Deutsch. Ing.* 1935, 77: 318-320.**

[5] **R. Meller, M. Tekavcic, B. Krull and F. Schlegel Momentum exchange modeling for coarsely resolved interfaces in a multifield two-fluid model. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 2023, 95(9): 1521-1545.-**

[6] **H. Hessenkemper, T. Ziegenhein, R. Rzehak, D. Lucas and A. Tomiyama Lift force coefficient of ellipsoidal single bubbles in water. *Int. J. Multiphase Flow*, 2021, 138: 103587.**

[7]**A. D. Burns, T. Frank, I. Hamill and J. M. Shi The favre averaged drag model for turbulent dispersion in eulerian multi-phase flows. *Proc. 5th Int. Conf. Multiphase Flow*, Yokohama, Japan, May 30 – June 4, 2004.**

墙报展示人简介：

王荣涛，男，1998 年 11 月出生，本科毕业于安徽理工大学，现就读于南京工业大学。

电解水体系纳微气泡形成及演化行为研究

褚俊杰[1,2]，王宗旭[2,3]，刘亚伟[2]，董海峰[2,3]，白璐[2*]，张香平[1,2*]

1 中国石油大学（北京），北京，102249

2 中国科学院过程工程研究所，北京，100190

3 惠州市绿色能源与新材料研究院，惠州，516081

*Email: lbai1207@ipe.ac.cn; xpzhang@ipe.ac.com

在电解水析氢过程中，电极界面产生的纳微气泡在气体演化反应的传质和能量效率中发挥着关键作用。因此，通过调控纳微气泡的演化行为，可以加速电子转移反应并克服与气体演化反应相关的能量损失[1]。离子液体作为一种新型绿色溶剂备受关注，其具有高离子电导率和宽电化学窗口等优点，并且能够调节电极/气体/电解质三相界面微观特性，被广泛用于电催化反应中[2]。本研究利用纳米电极和高速摄像观测手段，系统研究了电解水过程中纳微气泡的成核、生长和脱离行为以及离子液体对气泡演化行为的影响规律。结果表明，离子液体能够降低纳米气泡的成核临界过饱和度，有利于纳米气泡的形成，且随着浓度增加，纳米气泡的临界成核浓度和成核过电位逐渐减小。与常规离子液体相比，质子型离子液体抑制了纳米气泡的成核。这是因为质子型离子液体与铂电极之间存在较强结合能力，在改变电极界面双电层结构方面影响了气泡的成核过程。同时研究发现，当纳米气泡的逐渐生长和聚并为微米并最终脱离电极表面，在不同电解液中阴阳离子效应所引起的静电力是导致气泡从电极表面脱离的主要因素。本文研究结果深入阐明了纳微气泡动态演化行为规律以及影响机制，并为实现对电解水过程中气泡可控调节提供了重要理论支撑。

关键词：电解水；离子液体；界面；纳微气泡

参考文献

1. Lee, J. K.; Bazylak, A., Bubbles: The Good, the Bad, and the Ugly. *Joule* **2021,** *5* (1), 19-21.

2. 张香平;曾少娟; 冯佳奇; 苏倩; 刘磊; 黄玉红; 张锁江, CO_2化工:离子微环境调控的CO_2绿色高效转化. *中国科学:化学* **2020,** *50* (02), 282-298.

墙报展示人简介：

褚俊杰：中国石油大学（北京）在读博士研究生，导师为张香平教授，
研究方向为电解水析氢界面纳微气泡研究，目前发表文章 1 篇，待投 2 篇。
联系方式：jjchu@ipe.ac.cn

浆态床与流化床过渡实验研究

丁祖旺[1]，马永丽*，肖航，杨捷，刘明言

[1]天津大学化工学院，天津 300350

[2]化学工程联合国家重点实验室（天津大学），天津 300350

*Email: mayl@tju.edu.cn

流化床是固体颗粒在表观液速或气速的作用下悬浮流化，从而具有类似流体性质的操作系统。与固定床相比，流化床极大地强化了动量、质量和能量传递过程。浆态床是在气液鼓泡塔基础上装有尺寸很小的固体颗粒的系统，其特征与流化床有较大不同。为了在过程工业中更好地应用这两类三相反应器，有必要开展二者流动行为关系研究。作为两类重要的三相反应器，浆态床和流化床可通过研究流型等流动特征（包括固体颗粒的尺寸、密度、轴向固含率分布等）加以区分。对于流型的过渡，采用加速度振动信号检测与外置远心相机摄像两种方法，在固定表观液速、表观气速条件下，在床层高度为0.55m, 0.85m, 1.15m处，对三相流体系进行了加速度振动信号测试，获取了相应的时间序列信号，经处理得到功率密度谱。根据信号强度判断轴向固含率分布规律，结合实验现象与远心相机的可视化结果划分流型。在此基础上，通过时间信号序列的标准偏差分析，对流型划分结果进行验证，并总结了固体颗粒的加入对气泡行为的影响规律。结果表明：在表观液速为0.01m/s，无气体时，浆态床与流化床流型的过渡边界为150目(粒度100μm)；在表观液速为0.01m/s，表观气速为0.0033m/s时，浆态床与流化床流型的过渡边界为80目(粒度180μm)。

关键词：浆态床，流化床，振动信号，可视化，过渡

参考文献

[1] Fan L S. Gas-Liquid-Solid Fluidization Engineering[M]. Boston: Butterworth-Heinemann, 1989.

[2] 刘明言, 马永丽, 白丁荣, 等. 多相流态化[M]. 北京: 科学出版社, 2022. 8.

[3] 安敏, 刘明言, 徐晓萍. 流化床蒸发器中石墨管振动位移特性[J]. 化工学报, 2016, 67(2): 530-539.

[4] Sandra Orvalho, Masaaki Hashida, Maria Zednikova, et al. Flow regimes in slurry bubble column: Effect of column height and particle concentration [J], Chemical Engineering Journal, 2018, 351: 799-815.

墙报展示人简介：

杨捷，女，汉族，现年 21 岁，天津大学化工学院化学工程与工艺专业 2021 级在读本科生。

不同温度和压力下气液固微型流化床异丁烯叠合反应

孙岩[1]，马永丽[1,*]，刘明言[1,2]

[1]天津大学化工学院，天津市津南区海河教育园区雅观路135号，天津 300350

[2]化学工程联合国家重点实验室（天津大学），天津市津南区海河教育园区雅观路135号，天津 300350

*Email: mayl@tju.edu.cn

异丁烯叠合反应是一个重要的化学反应。在MTBE淘汰后汽油添加剂的代替品找寻以及原料C4的处理皆是重要课题。异丁烯二聚合成二异丁烯可以解决上述问题。目前已有相应的工业反应器，然而，其安全性和工艺效率仍然有待改进。为了解决这些问题，研制了一种床内径为10mm的新型气液固微型流化床反应器，进行选择性催化聚合反应。

研究了不同操作条件和溶剂性质对反应物异丁烯转化率和产物二异丁烯选择性的影响。从流体力学特性和气液传质通量角度解释了产生影响的原因。结果表明，在固定表观气液速以及反应压力的条件下，提高反应温度，在一定条件下会促进二聚反应，而超过一定范围后，产物转化率与选择性反而会下降。提高压力在一定范围内同样会让产率与选择性增大，超过一定范围会有所下降。而改变表观气液速对目标产物产率的影响并没不明显。选用正己烷与异辛烷两种溶剂进行实验，结果表明，产率受溶剂种类的影响较小，在反应过程中，选择性均在90%左右。在温度为110℃、压力为0.6MPa、气速为40sccm、液速为25ml/min时反应效果最好，产率可达70%。与传固定床反应器相比三相微型流化床的尺寸减小，减小了分子扩散的传质距离，固体颗粒和微型气泡不仅提供了更高的比表面积，而且引起流体动力学变化，即加剧界面扰动，有效加速了传质。研究成果可以为工业化反应器设计提供基础指导。

关键词：微型循环流化床；异丁烯叠合；高温高压；转化率

墙报展示人简介：

报告人：孙岩

目前在天津大学化工学院攻读硕士学位。本科毕业于大连理工大学化工学院化学工程与工业生物工程专业。目前研究方向为高温高压微型流化床反应器相关反应性能研究。

Research on Size Distribution and Trends of Micro-nano Bubble using Pixact Online Bubble Monitoring System

Yuanwang Tang[1]
[1]Beijing Hiferg Technology Co., Ltd., Beijing, 100022
*thomas.tang@hifer.com

The size distributions and trends of micro-nano bubbles that prepared with different parameters were investigated using Pixact online bubble monitoring system(CCPT12) and micro-nano bubble generator. The probe of Pixact online bubble monitoring system was inserted into the liquid mixture of bubble and water to record the images of bubbles that is generated from micro-nano bubble generator in time. Statistical parameters of bubbles such as: size distribution, bubble counts number and their trends with time were analyzed based on the images recorded. The results of different parameters was compared and the reason of generating different bubble size was discussed.

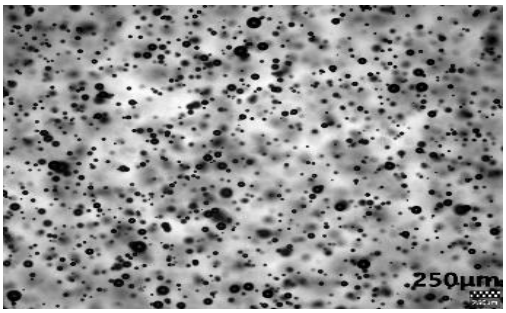


Fig 1. Image of micro bubbles

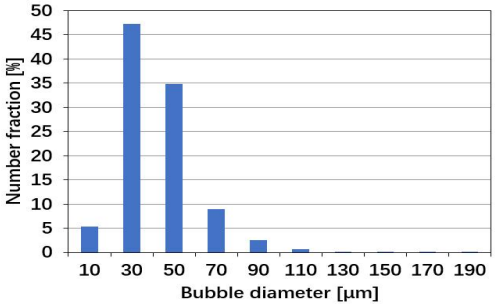


Fig 2. Size distribution of micro bubbles

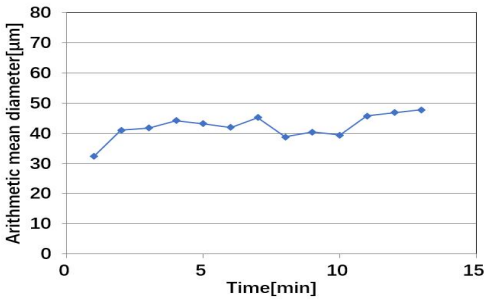


Fig 3. Trend of bubble size with time

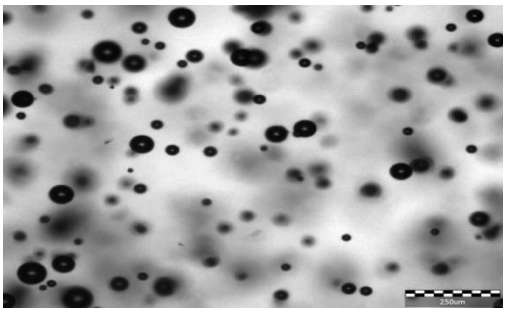
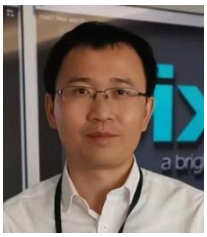


Fig 4. Zoomed Image of micro bubbles

Keywords: PBM; micro-nano bubbles; bubble size; bubble counts

墙报展示人简介：



唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器分析行业技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

第 7 分会场：能源转化

二氧化碳催化转化新过程

曾杰 [1,*]

[1] 中国科学技术大学，安徽合肥，230026

[2] 安徽工业大学，安徽马鞍山，243002

*Email: zengj@ustc.edu.cn

曾杰教授聚焦CO_2催化转化研究，在催化剂开发、反应器升级和反应路径设计方面取得系列进展。创制出Pb_1/Cu等纳米催化剂，将CO_2高效转化为甲酸等高值化学品；提出“纳米岛”策略，实现高稳定性单原子催化剂的有效构筑。通过固态电解质反应器设计，实现CO_2到甲酸、乙酸等不含电解质、免分离高纯化学品的连续制备。开辟出“电-生物耦合催化”制备食品分子新途径，将CO_2转化为高阶食品分子葡萄糖和食用油脂。

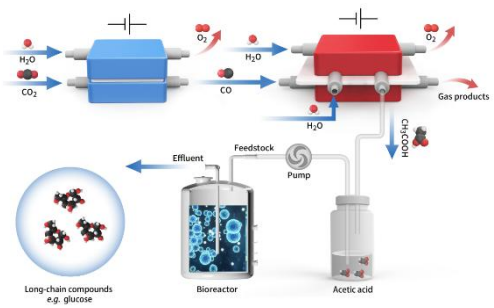


Fig. 1 Glucose Production from a hybrid electro-biosystem

关键词：二氧化碳；催化转化；纳米岛；单原子催化剂；固态电解质反应器

参考文献

[1] **T. Zheng, L. Meng, L. Wu, et al. Upcycling CO_2 into energy-rich long-chain compounds via electrochemical and metabolic engineering. *Nat. Catal.* 2022, 5: 388-396.**

[2] **T. Zheng, C. Liu, C. Guo, et al. Copper-catalysed exclusive CO_2 to pure formic acid conversion via single-atom alloying. *Nat. Nanotechnol.* 2021, 16: 1386-1393.**

[3] **X. Li, X. I. Pereira-Hernández, Y. Chen, et al. Functional CeO_x nanoglues for robust atomically dispersed catalysts. *Nature* 2022, 611: 284-288.**

[4] **H. Li, L. Wang, Y. Dai, et al. Synergetic interaction between neighbouring platinum monomers in CO_2 hydrogenation. *Nat. Nanotechnol.* 2018, 13: 411-417.**

[5] **L. Wang, W. Zhang, X. Zheng, et al. Incorporating nitrogen atoms into cobalt nanosheets as a strategy to boost catalytic activity toward CO_2 hydrogenation. *Nat. Energy* 2017, 2: 869-876.**

报告人简介：

曾杰，安徽工业大学党委常委、副校长，中国科学技术大学讲席教授。1998 年进入中国科学技术大学学习，2002 年获应用化学学士学位，2008 年获凝聚态物理博士学位，师从侯建国院士。2008 年赴美，在美国圣路易斯华盛顿大学夏幼南教授研究团队工作。2012 年，回到中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心任教授。2022 年 9 月，受聘中国科学技术大学讲席教授，同年 11 月起任安徽工业大学党委常委、副校长。入选国家杰出青年科学基金、国家“万人计划”科技创新领军人才、英国皇家化学会会士（FRSC），担任国家重点研发计划首席科学家。研究领域为二氧化碳催化转化技术。迄今为止，已在《自然》、《自然·纳米技术》、《自然·催化》、《自然·能源》、《自然·合成》、《自然·可持续性》等高影响力学术期刊发表了 256 篇论文，SCI 总被引用 27000 余次，H 因子为 86，入选 2019 至 2023 年的全球高被引科学家名录。申请中美专利共 87 项，出版书籍 5 部。荣获科学探索奖、中国青年科技奖“特别奖”、Falling Walls 科学突破奖、英国国际发明展年度国际发明“钻石奖”、中国科技产业化促进会科学技术一等奖、中国化学会-赢创化学创新奖、侯德榜化工科学技术青年奖、中国新锐科技人物、安徽省自然科学奖一等奖、安徽青年五四奖章等奖项。研究成果入选国家“十三五”科技创新成就展、2022 年中国十大科技进展新闻。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

NaY沸石的晶粒形貌控制合成和修饰及其催化裂化反应性能

申宝剑[1,*]，夏添[1]，刘鹏[1]，姜珊[1]，李程[1]，曾鹏晖[1]，郭巧霞[2]

[1]中国石油大学（北京）化工学院；重质油国家重点实验室；中国石油催化重点实验室，北京昌平，102249

[2]中国石油大学（北京）理学院，北京昌平，102249

*Email: baojian@cup.edu.cn

减小沸石分子筛晶体尺寸，不仅会增大其外表面积，减少晶体内部反应物/产物的扩散路径，而且还能够调节其表面性质、亲/疏水性、离子交换性能等性质，成为开拓或增强沸石分子筛新性能的重要研究方向。Y型沸石是催化裂化、加氢裂化、加氢改质等系列炼油催化剂的酸性活性组分，其晶体形貌、组成结构及酸性对催化剂的性能具有重要的影响。本文报导NaY沸石的晶粒形貌控制合成和修饰及其对催化裂化反应性能影响的研究。

在本课题组20多年NaY沸石合成研究的基础上，本工作通过改变NaY合成凝胶组成和合成工艺条件，有效调控了影响NaY沸石成核晶化前驱物的性质，并通过晶核生成所需场所（晶模，Negative Crystal）的构建，实现了对NaY沸石晶体大小和形貌的有效控制。合成的NaY沸石相对结晶度在95 %以上，骨架硅铝比（SiO_2/Al_2O_3，摩尔比）在5.2-5.7可控，BET比表面积为720 m^2/g以上，平均粒径（晶粒直径）在120-200nm，纳米片状占比达到40-85 %。经过对纳米片状NaY沸石和工业NaY沸石进行后改性处理，以此为活性组分制备催化剂的重油（VGO）催化裂化性能评价结果表明，与参比样相比，汽油收率明显提高，显示出良好的重油催化裂化性能。

关键词：NaY沸石合成；晶粒大小；晶粒形貌；催化裂化反应性能

报告人简介：

申宝剑，1986 年毕业于郑州大学化学系，获得学士学位；1991 年毕业于中国科学院兰州化学物理研究所和兰州大学，获得理学博士学位；1991-1997 年在中国石化洛阳石化工程公司炼制研究所工作，历任课题组长、研究室主任、副总工程师；1997-1999 年日本北海道大学触媒化学中心博士后；1999 年至今在中国石油大学（北京）化学工程与环境学院工作。现任教授，石油大学新材料开放实验室主任、院学术委员会主任，兼任中国石油集团催化重点实验室学术委员会副主任和清洁燃料重点实验室学术委员会副主任。是第八、九、十届校学术委员会委员、第十一、十二届校学位委员会委员。发表学术论文 130 余篇，获授权专利 90 余件。获得国家科技进步二等奖 1 项，省部级科技一等奖 4 项，其它省部级奖 7 项。2018 年获得侯德榜化工科学技术奖创新奖。是中国石油集团石油化工研究院特聘专家。荣获建国七十周年纪念章。是中国石油大学（北京）聘任的首批“领军学者”。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

纳米反应器的构筑与应用

刘健*

内蒙古大学化学化工学院，内蒙古呼和浩特市玉泉区锡林南路 49 号，010021

*Email: jian.liu@imu.edu.cn

自然界中的化学转化往往以串联反应的形式在限域的空间（细胞器/亚细胞器）中完成。设计合成具有特定功能的微/纳米反应器实现温和条件下的高效化学转化是催化科学的核心研究内容之一。研究微纳米空间中的化学转化机制，理解微纳限域空间、介质及界面对化学转化的影响规律是实现生物模拟的基础。因此，构筑功能微/纳米反应器并探究其在能源催化、体外诊断等领域的基础应用尤为关键。为此，我们(I)提出亚纳米反应器概念，发展了分子水平设计策略，从原子尺度到亚纳微米尺度，多层次精准控制活性位点的落位，实现了不同组成、结构和功能的微/纳米反应器的精准定制；(II)揭示了微/纳空间中的催化反应机制，并实现了级联催化反应在空间和时间上的耦合；(III)系统揭示了微纳反应器基于“构效关系”的优势效应，并深度拓展了其在绿色生产、安全储能以及医学检测等领域的针对性应用[1-5]。

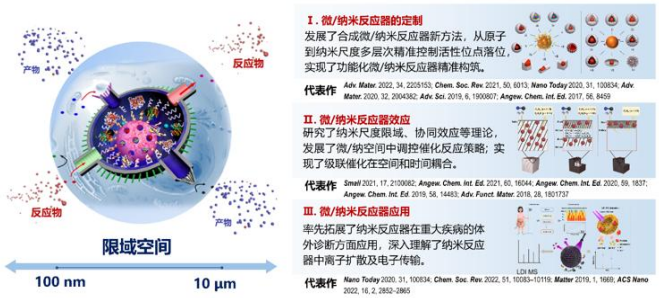


Fig. 1 Construction and Application of Nanoreactors.

关键词：纳米反应器，纳米化学，串联反应，细胞器

参考文献

[1] **C. Zhao, X. Y. Wang, J. Liu* et al., Angewandte Chemie International Edition, 2023, 62: 2218318.**
[2] **Y. T. Pi, Y. F. Ma, J. Liu* et al., Advanced Materials, 2022, 34(43): 2270296.**
[3] **P. P. Su, W. Pei, J. Liu* et al., Angewandte Chemie International Edition, 2021, 60(29): 16044-16050.**
[4] **H. Tian, J. H. Zhao, J. Liu* et al., National Science Review, 2020, 7: 1647-1655.**
[5] **C. Dong, Q. Yu, J. Liu* et al., Angewandte Chemie International Edition, 2020, 59(42): 18374-18379.**

报告人/墙报展示人简介：

刘健，博士，现任内蒙古大学化学化工学院教授、博士生导师，院长；入选教育部重大人才计划特聘教授、国家海外高层次人才引进计划等。连续六年入选科睿唯安高被引学者（2018-2023 年）。长期致力于纳米多孔材料的设计合成及在能源、催化相关领域的基础应用研究，在催化纳米功能材料的设计合成与应用、纳米反应器构筑等方面取得了一系列重要的原创性成果。迄今以第一作者及（共同）通讯作者在包括 Nature Mater. (1 篇), Nature Commun. (4 篇), Angew. Chem. Int. Ed. (15 篇), Adv. Mater. (5 篇), Natl. Sci. Rev. (2 篇) 等刊物发表正式论文 309 余篇，所发表论文被 SCI 引用超过 27000 余次，H 因子为 79。撰写英文书籍 10 章，发表专著一本，多次获邀在国内外学术会议上作邀请报告。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

金属纳米团簇在分子筛的快速封装及调控

于涛[1]，贾凯[1]，刘振东[1,*]

[1]化学工程联合国家重点实验室，清华大学化学工程系，清华大学，北京市海淀区，100084

*Email: liuzd@tsinghua.edu.cn

金属纳米团簇封装型分子筛材料通过将金属氧化物纳米团簇高效地封装在分子筛的孔道或笼状结构中，展现出在催化、光电等领域的广泛应用前景。这类材料不仅利用了金属纳米团簇的高分散性和高原子利用率，还充分发挥了分子筛的限域效应与择形效应[1,2]。然而，传统的合成方法往往存在封装效率低、时间长以及方法普适性差等问题，难以满足实际应用对高效合成的需求。本文提出了一种普适性强的快速封装策略，能够在极短时间内将金属氧化物纳米团簇封装至分子筛内[3-5]。研究中，通过调控合成温度、反应时间及前驱体的组成，实现了铜氧化物（CuO）和钴氧化物（CoO）纳米团簇在分子筛中的高效封装。实验表明，该方法在数分钟内即可完成封装过程，所得到的封装型材料具有良好的晶体结构和分散性。此外，在乙醇脱氢制备乙醛的催化反应中，封装后的CuO@silicalite-1 展示了优异的催化性能，显著提升了反应的选择性和长期稳定性 。该方法的成功应用不仅为催化剂的设计与制备提供了新的路径，也为其他功能性材料的开发开辟了新的方向。通过系统的实验研究，本文还探讨了不同合成条件对金属纳米团簇封装效率和分子筛晶体结构的影响。研究结果表明，温度和前驱体组成是实现高效封装的关键因素。此外，所提出的连续流动封装方法在工业规模的生产中具有巨大的潜力。本研究为金属纳米团簇封装型分子筛材料的高效合成及其在实际应用中的性能优化提供了重要的理论依据和实践指导，有望推动金属纳米团簇封装型分子筛在能源转化等领域的进一步发展。

关键词：金属纳米团簇；分子筛；限域封装；连续流动合成

参考文献

[1] H. Wang, L. Wang and F.-S. Xiao, ACS Cent. Sci., 2020, 6, 1685–1697.

[2] L. Liu and A. Corma, Chem. Rev., 2018, 118, 4981–5079.

[3] J. Zhu, R. Osuga, R. Ishikawa, N. Shibata, Y. Ikuhara, J. N. Kondo, M. Ogura, J. Yu, T. Wakihara, Z. Liu and T. Okubo, Angew. Chem., Int. Ed., 2020, 59, 19669–19674.

[4] T. Yu, Y. Wang, J. Xu and Z. Liu, React. Chem. Eng. 2024, 9, 1532-1540.

[5] T. Yu, J. Zheng, S. Su, Y. Wang, J. Xu and Z. Liu, JACS Au, 2024, 4, 985-991.

报告人/墙报展示人简介：

刘振东， 清华大学化学工程系助理教授、特别研究员、博士生导师，入选国家“海外高层次人才引进计划”青年项目。2015 年获日本东京大学博士学位，其后在东京大学和美国明尼苏达大学双城分校做博士后研究。2017 年 10 月至 2021 年 5 月任日本东京大学化学系统工程系助理教授，2021 年 6 月到清华大学工作。主要从事多孔材料的合成与应用、微化工过程等方面的研究。曾获清华大学优秀硕士毕业论文奖、东京大学工学部部长奖（研究奖）、学术期刊 Reaction Chemistry & Engineering 2024 Emerging Investigator 等荣誉。

一维孔道 *MRE 分子筛的可控合成及催化应用

李秀杰[1*]，刘稳[2]，朱向学[1]

[1] 中国科学院大连化学物理研究所，大连，116023

*Email: xiujieli@dicp.ac.cn

ZSM-48分子筛是一种具有一维10元环（0.56×0.56 nm）直孔道结构的硅铝沸石，隶属*MRE拓扑结构。一维孔道的择形优势和独特的酸性质使其在长链烷烃异构化、二甲苯异构化等反应中具有广阔的应用前景。一维孔道结构在保证优异择形的同时也带来了扩散受限的问题。ZSM-48分子筛天然的高硅铝比的特性在一定程度上限制了其在酸催化反应中的应用。本文采用多种合成策略，实现了对ZSM-48分子筛扩散和酸性质的调控，并以间二甲苯异构化为探针反应，对比研究了其异构化反应性能[1-4]。

研究发现，四乙基铵根离子作为晶体生长调节剂可以有效抑制ZSM-48分子筛棒状晶体的缩聚，成功得到具有超大介孔体积的ZSM-48分子筛[1]；氟离子作为辅助矿化剂，加速晶化实现球形ZSM-48分子筛的构筑，进而通过重结晶策略实现了骨架富铝化和中空结构的形成[2-3]；使用“非常规”晶种直接导向富铝多级孔ZSM-48分子筛的合成，成功实现“酸性-扩散”的协同调控[4]。

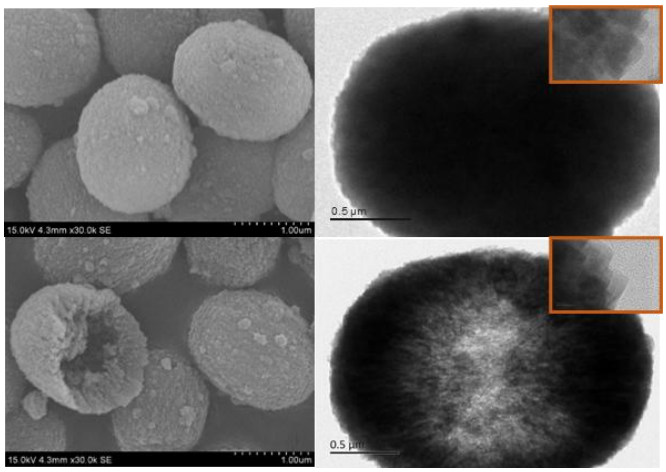


Fig. 1 SEM and TEM images of Al-rich *MRE zeolite with hollow structure

关键词：沸石分子筛，一维孔道，*MRE，富铝多级孔，异构化反应

参考文献

[1] W Liu, X.J. Li, et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2021, 13(27): 31756-31765

[2] W. Liu, X.J. Li, et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2022, 14(46): 52025-52034.

[3] W. Liu, X.J. Li, et al. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2023, 62(13): 5524-5532.

[4] W. Liu, X.J. Li, et al. *J. Colloid Interface Sci.* 2024, 653, 1715-1724.

报告人简介：

李秀杰，中科院大连化学物理研究所研究员，中科院区域发展青年学者，大连市重点领域创新团队负责人。面向国家和行业关键需求，聚焦关键分子筛材料绿色合成、烃类高效转化和重要化学品生产催化剂及技术的研发，开发了具有重要工业应用背景的多类分子筛材料绿色合成和特定组合改性新方法，为烷基化、异构化、胺化等多个催化和 VOCs 吸附过程提供关键材料支撑。

附：请在此处注明报告人为老师

沸石分子筛材料的设计合成

吴勤明*，孟祥举，肖丰收

浙江大学，杭州，310028

*Email: qinmingwu@zju.edu.cn

沸石分子筛已经广泛应用在石油化工、精细化工、环境保护等领域。当前，已有250余种沸石分子筛被国际分子筛协会授予结构代码。然而，在工业应用过程中的沸石分子筛种类占比却不到10%，这主要是因为面向工业应用的分子筛合成存在一定挑战性，如很多分子筛并非硅铝骨架结构、分子筛单一微孔传质受限、分子筛结构还不够丰富、合成原材料(如有机模板剂)价格高昂等。因此，亟需设计新路径定向合成分子筛。本报告内容主要分为以下四个方面：1）通过设计新型有机模板剂定向合成了具有特定结构的硅铝分子筛（如IWR和ITH）；2）通过设计新型有机模板剂定向合成了具有特定形貌的分子筛（如pentasil和FER）；3）通过设计新型有机模板剂创制了两种新型分子筛；4）开发了以沸石晶种导向和小分子醇填充为策略的分子筛绿色合成新路线。在开展上述基础研究的基础上，针对产业需求，实现了全硅ZSM-5和硅铝ZSM-22的绿色化生产及Cu-SSZ-13的低成本生产，且相关性能都达到了实际应用标准。

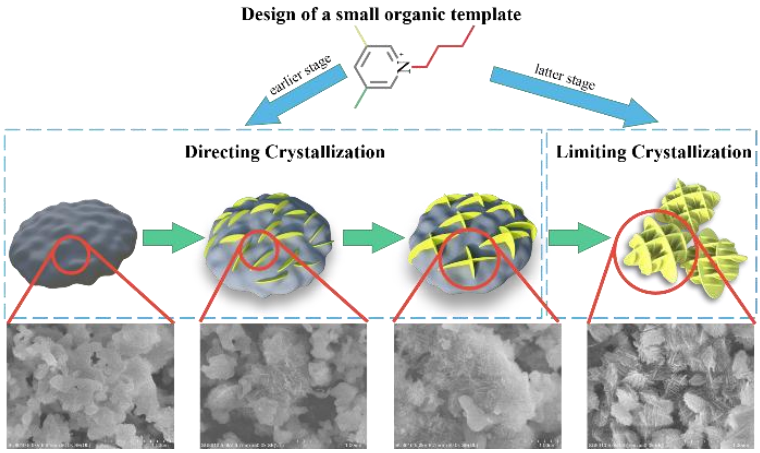


Fig. 1 Design of a small organic template for synthesizing pentasil zeolite nanosheet

关键词：沸石分子筛；新路径；催化应用

参考文献

[1] **Y. Ma, Q. Wu et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 2023, *145*, 17284.**

[2] **J. Shi, Q. Wu et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 2023, *145*, 7712.**

[3] **Y. Ma, Q. Wu et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 2022, *144*, 6270.**

[4] **C. Lei, Q. Wu et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020, *59*, 15649.**

[5] **Q. Wu, L. Zhu et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2019, *58*, 12138.**

报告人/墙报展示人简介：

吴勤明，博士，特聘研究员。2016 年 6 月毕业于浙江大学化学系获理学博士学位，导师为肖丰收教授；2016 年 10 月至 2019 年 3 月于浙江大学材料学院从事博士后研究；2019 年 4 月至 2020 年 3 月于日本富山大学从事博士后研究；2020 年 10 月入职浙江大学化学工程与生物工程学院。主要的研究方向包括沸石分子筛材料的新型合成路线、新型模板导向合成沸石分子筛材料、沸石分子筛材料的工业放大生产以及其在环境和能源等方向的应用。主持国家重点研发计划项目子课题、国家自然科学基金面上和青年项目以及浙江省自然科学基金杰青项目。2021 年获得中国催化新秀奖。目前已经以第一或通讯作者在 Natl. Sci. Rev.、J. Am. Chem. Soc.、Angew. Chem.、Acc. Chem. Res.、Chem. Soc. Rev.、Appl. Catal. B 等期刊发表论文 30 余篇，以第一发明人授权国家发明专利 20 余项。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

成相-析出型催化剂设计及其在能源转化过程中的应用

颜彬航 [1,*]

[1] 清华大学化学工程系，北京，100084

*Email: binhangyan@tsinghua.edu.cn

在全球碳减排背景下，利用可再生能源将二氧化碳催化转化为一氧化碳、甲烷和甲醇等重要化工原料对于实现碳中和目标具有重要意义。基于对二氧化碳催化转化过程反应机理和选择性稳定性调控机制的理解，课题组开发了成相-析出通用合成方法精准调控金属-载体相互作用及活性金属电子性质，实现了一系列高选择性及高稳定性金属催化剂的可控制备。基于尖晶、钙钛矿或固溶体等复合氧化物前驱体，成相-析出合成方法先通过高温煅烧成相实现活性金属的原子级分散，再通过选择性还原实现活性金属的可控析出。成相-析出合成方法可以有效提高活性金属分散度，增加活性位点数量，提高催化反应活性；可以精准调控活性金属电子性质，改变中间产物吸附强度，提高目标产物选择性；还可以显著增强活性金属与载体之间的相互作用，有效减缓甚至抑制活性金属烧结，提高催化剂的长周期稳定性。

为了从分子层面理解二氧化碳加氢催化剂选择性变化的起源，课题组采用成相-析出方法成功实现了Ni-$MgAl_2O_4$催化剂中活性金属粒径和电子性质的可控调节，指出了H_2辅助的CO解离活化温度可以作为镍基催化剂二氧化碳加氢产物选择性的定量描述符[1]，阐明了镍基催化剂在二氧化碳加氢反应中的构效关系；将Ni-$MgAl_2O_4$催化剂应用于甲烷二氧化碳干重整反应中，获得了优异的反应活性和良好的稳定性，进一步揭示了成相-析出型催化剂独特的气氛依赖失活机理[2]，提出了通过定期改变原料气体流动方向的进料策略，解决催化剂在反应过程中存在的活性位点损失问题，实现了高稳定性镍基重整催化剂的开发。

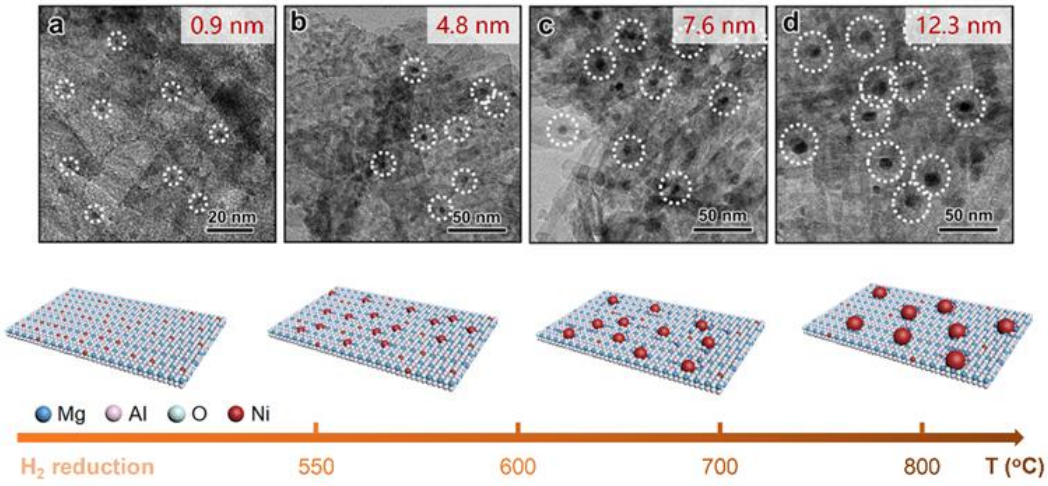


Fig. 1 Highly dispersed Ni catalysts derived from Ni-doped $MgAl_2O_4$

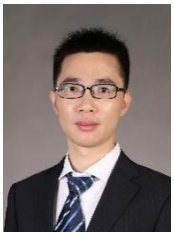
关键词：成相-析出；金属-载体相互作用；二氧化碳转化；选择性；稳定性

参考文献

[1] **Kai Feng, Jiaming Tian, Man Guo, Yaning Wang, Shenghua Wang, Zhiyi Wu, Jingpeng Zhang, Le He*, *Binhang Yan*. Experimentally unveiling the origin of tunable selectivity for CO_2 hydrogenation over Ni-based catalysts. *Applied Catalysis B: Environmental* 2021, 292: 120191.**

[2] **Kai Feng[#], Jiajun Zhang[#], Zhengwen Li, Yue Pan, Xiaozhi Liu, Zhiyi Wu, Xiao Li, Jiaming Tian, Yuxin Chen, Chengcheng Zhang, Qiangqiang Xue, Le He, Xiaohong Zhang, Yujun Wang, Bin Yang, Dong Su, Kai Hong Luo[*], *Binhang Yan*[*]. Spontaneous regeneration of active sites against catalyst deactivation. *Applied Catalysis B: Environmental and Energy* 2024, 344: 123647.**

报告人简介：



颜彬航，清华大学化工系副教授、博士生导师，主要从事原位/动态表征技术开发、本征反应机理揭示、高效催化剂理性设计等方面的研究工作，已发表学术论文 100 余篇，授权发明专利 20 余项，转化/许可发明专利 6 项；担任《Chinese Journal of Chemical Engineering》、《低碳化学与化工》和《化工高等教育》青年编委，曾获中国化工学会侯德榜化工科学技术奖青年奖、中国石化联合会科技进步奖一等奖（2/10）和教育部自然科学奖一等奖（2/9）等奖励。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

能源催化反应机制的原位同步辐射X射线吸收谱研究

丁韬[1,*]，姚涛[1,*]

[1]中国科学技术大学国家同步辐射实验室，安徽省合肥市合作化南路42号，230029

*Email: dingtao@ustc.edu.cn

在多电子催化能量转换反应中，原子级能源材料表面结构常易受到外加光辐照、热振动、电场或气体分子吸/脱附等影响而发生动态响应和重构。因此，精确探测催化剂在服役状态下原子尺度结构的动态变化对于催化剂的理性设计具有重要意义。我们基于同步辐射大科学装置发展了多种原位X射线吸收谱和原位红外光谱等技术，解决了传统非原位表征给出的结构不真实性问题，从而揭开高效能量转换机制的黑匣子，深入理解原子级位点在工况服役条件下的表面重构机制，并为今后理性设计和精准构筑新型高效催化剂提供了新的思路。

1．发展了原位同步辐射XAFS实验方法，建立了适用于固/液界面催化反应研究的XAFS实验装置。利用该装置，解析了原子级精确Ni_2活性位点在服役状态下局域原子和电子结构的演变机制。发现了初始的双核结构会发生桥氧吸附，催化反应过程中伴随着金属原子间相互作用增强，促进小分子高效活化；实时在线监测了单原子合金AuCu纳米颗粒的表面结构在电催化还原CO_2工作状态下的演变过程，精确表征了Cu单原子的原子结构和电子结构，发现了Cu单原子在电催化条件下，将从纳米颗粒的顶角位点迁移到更加稳定的（100）面内。

2．利用发展的多模态谱学连用技术，从原子和电子尺度揭示了Ru-RuO_x非晶多异质界面的原位生长及催化反应机制。通过同步辐射原位XAFS技术证实了Ru与RuO_x组分原子级分散，进而形成大量异质界面，可在超快时间尺度捕获空穴，促进电子空穴有效分离，助力高效人工光合成。实时在线监测了配体辅助团簇、单原子低温转化过程，阐明了Cl配体辅助Pd团簇和单原子转化的普适性规律，明确了材料表界面结构与催化性能的内在关联。

参考文献

[1] Liu, D.; Ding, T.*; Yao, T.* et al. *Nat. Commun.* 2023, 14: 1720.

[2] Li, S.; Ding, T.*; Yao, T.* et al. *Nat. Commun.* 2024, 15: 3416.

[3] Wang, S.; Ding, T.*; Yao, T.* et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 62: e202218630.

[4] Xu, A.; Ding, T.*; Yao, T.* et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63: e202410545.

[5] Ding, T.#; Liu, X.#; Yao T.* et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2021, 143: 11317-11324.

[6] Liu, X.; Ding, T.*; Yao, T.* et al. *Nano Lett.* 2020, 20: 8319-8325.

个人简介：

丁韬，中国科学技术大学研究员。2017年于中科大化学系获理学博士学位，2017-2019年在中科院大连化物所吴凯丰研究员团队从事博士后研究，2019年12月加入中科大国家同步辐射实验室姚涛教授团队。一直围绕能源材料成核生长及其光电催化复杂微观机制的科学问题开展研究工作，基于同步辐射大科学装置发展了多种原位X射线吸收谱和时间分辨紫外可见吸收光谱技术。已在*J. Am. Chem. Soc.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*Nat. Commun.*、*Nano Lett.*、*Chem. Sci.*等国内外重要期刊上发表学术论文70余篇，论文总引用3400余次，H因子31。作为项目负责人承担了国家自然科学基金青年和面上项目、国家重点研发计划子课题项目。曾获中科院青促会会员、中科大墨子杰出青年等。

附：报告人为老师。

单/双原子催化剂在温室气体利用与减排中应用研究

谢鹏飞[1,*]

[1]化学工程与生物工程学院，浙江大学，杭州，310058

*Email: pfxie@zju.edu.cn

原子级分散金属催化剂在温室气体小分子（如CH_4、CO_2等）消除中表现出优异的催化活性，但反应构效关系和机理解析是研究的难点。XAS、XPS、STEM等技术在催化剂结构、理化性质表征分析方面应用广泛，但原子层面的分析仍受限于表征方法时空分辨率低等原因。报告人课题组在前期研究中开发了一系列单、双原子催化剂，如Cu_1/BiOBr、Cu_2/ZMS-5、Pd_1Rh_1@CeO2、Cu_2@C_3N_4等用于CH_4燃烧，甲烷转化，CO_2还原等反应中，发展了理论计算辅助光谱解析方法，对原子级分散金属催化剂活性位的价态、配位环境等性质进行了深入分析，并与反应活性和限速步骤反应能垒进行关联，并提炼出基本科学规律，形成了系统科学认识，为催化剂理性设计提供了理论基础。

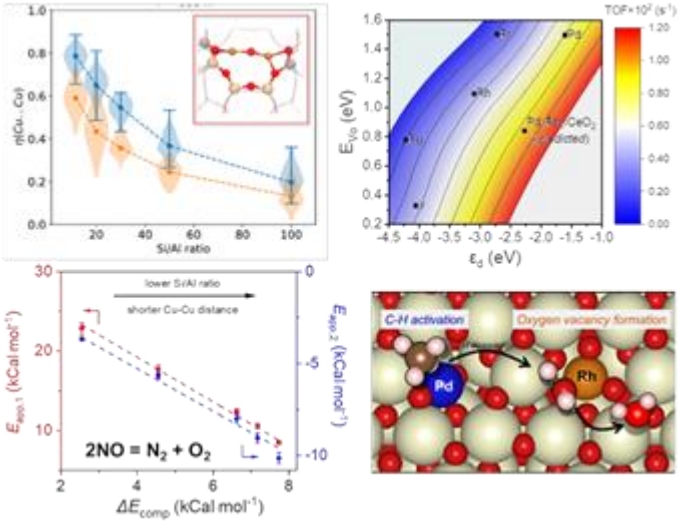


Fig. 1. Single/dual atom catalyzed greenhouse gas utilization and emission reduction

关键词：单/双原子催化剂；甲烷燃烧；甲烷部分氧化；CO2还原；绿色甲醇

参考文献

[1] P.F. Xie, T. Pu, G. Aranovich et al., *Nature Catalysis*, 2021, 4: 144-156

[2] P.F. Xie*, J. Ding, Z.H. Yao et al., *Nature Communications*, 2022, 13: 1375

[3] T. Pu, J.Q. Ding, F.X. Zhang et al., *Angew. Chem., Int. Ed.*, 2023, e202305964

[4] Y.R. Fan, H.M. Xu, G.Q. Gao et al., *Nature Communications*, 2024, 15: 6035

[5] M. Chen, N. Cao, Z. Wang et al. *ACS Nano*, 2024, 18, 7981-7988

报告人/墙报展示人简介：

谢鹏飞，浙江大学化学工程与生物工程学院“百人计划”研究员，博士生导师，国家高层次人才计划青年项目、浙江省杰出青年基金获得者。2016 年博士毕业于复旦大学化学系。后赴美国约翰霍普金斯大学化工系从事博士后研究，2021 年回国到浙江大学参加工作。 长期致力于单/双原子催化剂的开发及其在环境催化中的应用研究。成果在 *Science, Nature Catalysis, Nature Communications, Angewandte Chemie* 等国际知名期刊发表 SCI 论文近 60 篇，8 篇为高被引论文。获中国授权专利 9 项、美国授权专利 5 项，主持科技部重点研发计划项目，重点研发计划课题，基金委面上、浙江省领雁、企业横向等 10 项，高熵纳米催化剂研究获得了国际发明创造领域 R&D100 奖。

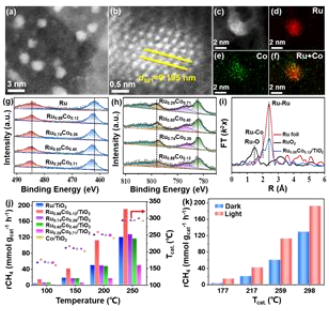
Ru 基复合光热耦合催化 CO_2 转化纳米材料

王凤龙*

[1] 山东大学材料科学与工程学院，济南 250061

*Email: fenglong.wang@sdu.edu.cn

光热催化CO_2加氢可以在温和的反应条件下将CO_2转化为增值化学品，引起了全世界的广泛关注。然而，实现理想的转换效率和高的产物选择性仍然具有挑战性，基于此我们开展了系列负载型金属光热催化材料研究，取得了如下结果： (1) 将窄带隙光热半导体作为Ru纳米颗粒的分散载体，设计Ru/$MnCo_2O_4$复合催化剂。Ru纳米颗粒与$MnCo_2O_4$界面处存在密切电子相互作用，在可见光照射下，光生电子从$MnCo_2O_4$转移到Ru纳米颗粒，提高了电荷分离效率，增强了Ru纳米颗粒的负电特性，促进了反应物分子的强吸附和快速活化。另外，$MnCo_2O_4$具有强的光吸收能力和优异的光热转化能力，作为纳米颗粒的“加热基底”，与Ru纳米颗粒之间形成了更强的局域电磁场，促进活性位点周围温度的提升，从而显著提高催化反应反速率；(2) 为了进一步降低贵金属使用量和催化材料价格，采用一步水热合成法制备了单分散且组分可以调控Ru_xCo_{1-x}合金纳米颗粒并将其负载于氧化物TiO_2纳米片表面，形成复合催化材料。由于金属合金纳米颗粒可调控的电子结构、优化的载流子分离效率、出色的光热转换能力等因素影响，复合催化材料表现出高效的光热耦合催化CO_2转化能力，组分优化的$Ru_{0.88}Co_{0.12}/TiO_2$复合催化材料表现出优于纯Ru催化剂的性能；(3) 另一种提高Ru金属利用率的思路是尽可能的降低其尺寸，以求获得更高的贵金属原子利用率。在这种思想指导下，我们成功合成了我们制备了Ru-F_4和Ru-O_4构型的单原子Ru基催化剂(分别命名为Ru-F_4 SAs/PA和Ru- O_4 SAs/PA)，证明了Ru位点配位结构的微调可以显著提高光-热协同催化过程中温和条件下CO_2加氢制甲烷的性能。对比研究表明，Ru-F_4 SAs/PA优于Ru-O_4 SAs/PA，在200°C常压光照(200 - 1100 nm, 1.9 W cm−2)条件下，CH_4产率为47.4 mmol g_{cat}^{-1} h^{-1},CH_4选择性为93.8%。理论研究表明，从Ru-O_4到Ru-F_4配位环



境的转变优化了电子态，从而增强了对反应物和中间体的吸附。优化后的电子结构促进了关键中间体物质的生成和转化，降低了CO_2转化的能垒，从而提高了催化活性。系列研究结果为设计高效的光热催化CO_2甲烷化催化剂和贵金属减量增效利用提供了新策略。

Fig. 1 (a) aberration corrected HAADF-STEM images of different magnifications, and (b-f) corresponding elemental mappings of $Ru_{0.60}Co_{0.40}/TiO_2$, (g) Ru 3p and (h) Co 2p core-level XPS spectra of Ru_xCo_{1-x} alloy nanoparticles, (g) FT-EXAFS spectra of $Ru_{0.88}Co_{0.12}/TiO_2$ and reference samples, (j-k) (a) CH_4 production rate over Ru_xCo_{1-x}/TiO_2 catalysts at different temperatures under light irradiation.

关键词：光热催化；二氧化碳转化

参考文献

[1] F. Wang et. al., Ir-CoO active centers supported on porous Al_2O_3 nanosheets as efficient and durable photo-thermal catalysts for CO_2 conversion, *Adv. Sci.*, 2023, 2300122.

[2] F. Wang et. al., Large-scale Synthesis of Multifunctional Single-Phase Co_2C Nanomaterials, *Adv. Sci.*, 2023, 2301073

[3] F. Wang et. al., Reinforcing the Efficiency of Photo-thermal Catalytic CO_2 Methanation through Integration of Ru Nanoparticles with Photothermal $MnCo_2O_4$ Nanosheets, *ACS Nano*, 2023, 17, 23, 23761–23771.

[4] F. Wang et. al., Ruthenium-Cobalt Solid-solution Alloy Nanoparticles for Enhanced Photo-promoted Thermocatalytic CO_2 Hydrogenation to Methane, *ACS Nano*, 2024, 18, 17, 11449-11461.

[5] F. Wang et. al., F-coordinated Single-atom Ru Species: Efficient and Durable Catalysts for Photo-Thermal Synergistic Catalytic CO_2 Hydrogenation to Methane, J. Mater. Chem. A, 2024,12, 20958-20966

报告人简介：

王凤龙，男，山东大学教授、博士生导师。

2016 年 4 月于澳大利亚新南威尔士大学化学工程学院获得博士学位（师从澳大利亚两院院士 Rose Amal 教授）；之后从 2016 年 4 月到 2018 年 3 月在日本京都大学从事研究工作（合作导师：京都大学副校长 Hiroshi Kitagawa 教授）；2018 年 4 月起任山东大学教授，博士生导师。主要从事光热材料用于催化及抗菌方面的研究工作，承担国家自然科学基金、山东省自然科学基金等科研项目，共发表论文 120 余篇，被引用 6000 多次，H 因子 44。担任国际期刊 Frontiers in Energy Research 副主编 (Associate Editor) 、Applied Organometallic Chemistry 编委、中国科协卓越计划期刊 ChemPhysMater 编委，曾获得欧洲材料学会青年科学家奖及山东省自然科学二等奖（第三位）等奖励和荣誉。

附：报告人不是学生

分子筛限域金属催化剂的合成与应用

孙启明*

苏州大学 材料与化学化工学部 化学科学国际合作创新中心 苏州，215123

*Email: sunqiming@suda.edu.cn

分子筛由于具有规则的孔道结构和优异的热稳定性，被认为是理想的限域制备超小尺寸金属物种的载体。[1] 近期，我们开发了“配体保护—原位合成”、“配体保护—直接氢气还原”、“形貌控制—初湿浸渍”等多种新颖的合成策略，制备出一系列分子筛限域亚纳米单金属Pd、Ru、Rh和杂化双金属Pd-Ni(OH)$_2$、Pd-Co(OH)$_2$、Pd-MnO$_x$、Rh-Ru团簇以及单原子Rh、Pt等催化剂，其在甲酸分解制氢、氨硼烷水解制氢、CO_2加氢和塑料化学回收等反应中展现出优异的催化活性和稳定性。[2-7] 我们利用原位封装策略制备了分子筛限域亚纳米Pt-Zn双金属团簇和配位不饱和的三配位Co催化剂。上述催化剂在丙烷脱氢反应中展现出文献报道的最优异的催化活性和丙烯选择性。[8, 9]上述工作为设计合成分子筛限域超小尺寸金属催化剂及其在烷烃脱氢等重要工业催化应用提供借鉴。

关键词：分子筛；限域效应；原位合成；多相催化；金属

参考文献

[1] Q. Sun, N. Wang, Q, Xu, Yu, J. Advances in Catalytic Applications of Zeolite-Supported Metal Catalysts. Adv. Mater., 2021, 33, 2104442.

[2] Q. Sun, N. Wang, Q. Bing, R. Si, J. Liu, R. Bai, P. Zhang, M. Jia, Jihong Yu. Subnanometric Hybrid Pd-M(OH)$_2$, M = Ni, Co, Clusters in Zeolites as Highly Efficient Nanocatalysts for Hydrogen Generation. *Chem*, 2017, 3, 477.

[3] Q. Sun, N. Wang, T. Zhang, R. Bai, A. Mayoral, P. Zhang, Q. Zhang, O. Terasaki, J. Yu, Angew. Chem. Int. Ed., Zeolite-Encaged Single-Atom Rhodium Catalysts: Highly-Efficient Hydrogen Generation and Shape-Selective Tandem Hydrogenation of Nitroarenes, 2019, 58, 18570.

[4] Q. Sun, B. W. J. Chen, N. Wang, Q. He, A. Chang, C.-M. Yang, H. Asakura, T. Tanaka, M. J. Hülsey, C.-H. Wang, J. Yu, N. Yan, Zeolite-Encaged Pd–Mn Nanocatalysts for CO_2 Hydrogenation and Formic Acid Dehydrogenation. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020, 59, 20183.

[5] N. Wang, Q. Sun, T. Zhang, A. Mayoral, L. Li, X. Zhou, J. Xu, P. Zhang, J. Yu. Impregnating Subnanometer Metallic Nanocatalysts into Self-Pillared Zeolite Nanosheets. *J. Am. Chem. Soc.*, 2021, 143, 6905.

[6] Q. Kang, M. Chu, P. Xu, X. Wang, S. Wang, M. Cao, O. Ivasenko, T. Sham, Q. Zhang, Q. Sun*, J. Chen*, Entropy confinement promotes hydrogenolysis activity for polyethylene upcycling. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, 62, e202313174.

[7] C. Li, G. He, Z. Qu, K. Zhang, L. Guo, T. Zhang, J. Zhang, Q. Sun, D. Mei, J. Yu. Highly Dispersed Pd-CeOx Nanoparticles in Zeolite Nanosheets for Efficient CO_2-Mediated Hydrogen Storage and Release. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, https://doi.org/10.1002/ange.202409001.

[8] Q. Sun, N. Wang, Q. Fan, L. Zeng, A. Mayoral, S. Miao, R. Yang, Z. Jiang, W. Zhou, J. Zhang, T. Zhang, J. Xu, P. Zhang, J. Cheng, D.-C. Yang, R. Jia, L. Li, Q. Zhang, Y. Wang, O. Terasaki, J. Yu, Subnanometer Bimetallic Platinum-Zinc Clusters in Zeolites for Propane Dehydrogenation. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020, 59: 19450.

[9] Z. Qu, G. He, T. Zhang, Y. Fan, Y. Guo, M. Hu, J. Xu, Y. Ma, J. Zhang, W. Fan, Q. Sun, D. Mei, and J. Yu. Tricoordinated Single-Atom Cobalt in Zeolite Boosting Propane Dehydrogenation. *J. Am. Chem. Soc.*, 2024, 146, 13, 8939–8948.

报告人/墙报展示人简介：

孙启明，苏州大学教授。孙启明于 2011 年和 2016 年在吉林大学获得学士和博士学位，导师为于吉红院士。随后在吉林大学、香港中文大学及新加坡国立大学从事博士后研究。2020 年 9 月加入苏州大学材料与化学化工学部担任教授，博士生导师。孙启明教授一直从事分子筛的合成与催化研究。目前，已发表学术论文 64 篇，其中以（共同）通讯或者第一作者在 Chem、J. Am. Chem. Soc.（4 篇）、Angew. Chem.（5 篇）、Adv. Mater.（4 篇）、Natl. Sci. Rev.等重要学术期刊发表论文 39 篇，9 篇论文入选化学领域 ESI 高被引论文，申请中国发明专利 13 项，获授权专利 7 项。先后荣获中国化学会“菁青化学新锐奖”和中国分子筛“新秀奖”。2021 年获聘江苏省特聘教授，2022 年荣获姑苏创新创业领军人才。作为项目负责人主持国家重点研发计划青年科学家项目等在研项目 8 项。目前担任《石油化工高等学校学报》编委会委员、《高等学校化学学报》和《Chemical Research in Chinese Universities》首届青年执行编委。2023 年入选美国斯坦福大学“全球前 2%顶尖科学家榜单”

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

锂二次电用电化学纳米反应器创制

李俊豪，石凯祥，刘全兵*

广东工业大学轻工化工学院，广东省广州市大学城外环西路 100 号，510006

*Email: liuqb@gdut.edu.cn

受插层化学本质上的限制，锂离子电池的能量密度已接其近理论上限，仍难以满足人们在多方面日益增长的储能需求。以金属锂为负极的锂硫二次电池，较传统锂离子电池可显著提出电池的能量密度，如锂硫电池的理论能量密度可达传统锂离子电池的 3~5 倍。然而，以硫作为正极的锂硫二次电池，虽然可以进一步提高理论能量密度，但有增加了活性物质硫利用率低、电极反应动力学慢、多硫化物中间产物的穿梭效应等问题。此外，以金属锂作为负极锂负极以沉积/剥离的形式进行充放电循环，锂金属表面是处于动态变化中，导致锂枝晶生长、SEI 膜破碎、生成死锂等问题。

受化学反应器和细胞工厂（器）工作原理启发，课题组设计了一系列“蛋黄-蛋壳”、“芯壳”结构电化学纳米反应器：1）导电炭材质的“壳”可以提高材料电导率；2）通过对“壳”组成设计（如 N、B、O、S 掺杂等），强化对多硫化锂的化学吸附和限域作用；3）多孔结构的“壳”利用毛细作用增强硫在壳层内部的负载，将硫或多硫化锂限域在壳层之内，同时提供了快速离子通道；4）通过对“内核”的组成和结构设计，可实现“亲锂”和“亲硫”作用，抑制穿梭效应；5）通过对“内核”的组成和结构设计，强化催化转化作用，提高电极反应动力学，改善电池的倍率和循环性能；6）“内核”与“蛋”之间的“空腔”还可以缓解锂硫反应的体积变化应力。应用于锂硫二次电池，如构筑复合锂负极、复合隔膜/夹层、复合硫正极等，多种途径协同促进提升电池性能，以期获得具有商用化前景的高比能锂硫二次电池。在理论计算的基础上，通过对纳米反应器的组成和结构进行优化和科学定制，提高含锂组分转化反应速率，抑制锂枝晶生长、“死锂”生成以及多硫化物穿梭。明确纳米反应器的形成机理，以及反应器组成、结构与其电化学性能的相互关系，揭示其构效关系；结合原位的电化学、谱学、显微技术以及各种离线的表征测试手段，深入研究复合电极/隔膜/夹层的表界面结构，明确各自对电池性能的促进机制。响应“双碳”战略下国家新能源领域战略发展需求，具有明确的需求、问题和目标导向，旨在通过材料科学和技术的手段解决锂二次电池背后的核心科学问题。

关键词：电化学纳米反应器，“芯壳”，“蛋黄-蛋壳”，锂硫电池

参考文献：

[1]. Junhao Li, Zhengyi Wang, Kaixiang Shi, Yujie Wu, Wenzhi Huang, Yonggang Min, **Quanbing Liu***, and Zhenxing Liang;“Bridge”for Li-S Batteries: Directional Migration and Rapid Conversion of Polysulfides [J]. *Advanced Energy Materials,* **2024**, 2303546

[2]. **Quanbing Liu**, Yujie Wu, Dong Li, Yan-Qi Peng, Xinyan Liu*, Boquan Li, Jiaqi Huang, Hongjie Peng*; Dilute Alloying to Implant Activation Centers in Nitride Electrocatalysts for Lithium–Sulfur Batteries [J]. *Advanced Materials,* **2023**, 35(7): 2209233

[3]. Yajie Sun, Wenzhi Huang, Jjunhao Li, Junda Pan, Haoxiong Nan, Huafeng Dong, Kaixiang Shi*, **Quanbing Liu***; Designing polysulfides adsorption- conversion on g-C_3N_4-based separator via doping heteroatoms boron and phosphorus towards high-performance lithium-sulfur batteries [J]. *AIChE Journal,* **2023**, 69(1): e17940

[4]. Junda Pan, Yajie Sun, Yujie Wu, Junhao Li, Wenzhi Huang, Kaixiang Shi, Yongxian Lin, Huafeng Dong, **Quanbing Liu***, Yolk-double shells hierarchical N-doped carbon nanosphere as an electrochemical nanoreactor for high performance lithium-sulfur batteries [J]. *Carbon*, **2022**, 198 (10): 80–90

个人简介

刘全兵，男，1984 年生，教授，博士生导师。广东省“珠江学者”特聘教授、广州市珠江科技新星。主要从事电化学能源存储和转换方面的研究，包括锂/锂离子/锂硫电池，电催化/燃料电池。获广东科技进步二等奖 1 项（排名第一），主持国家自然科学基金 4 项，参与 1 项 NSFC-广东联合基金重点项目和 1 项广东省重点领域研发计划项目，在 *Nat. Commun. Adv. Mater., Adv. Energy Mater., Angew Chem. Int. Ed., AIChE J.*等知名发表学术论文 120 余篇。

煤基碳材料结构调控及储能应用

郝健 [1,*]

[1] 宁夏大学，宁夏回族自治区银川市西夏区贺兰山西路 489 号宁夏大学贺兰山校区科技楼，邮编 750021

*Email: haojian2017@126.com

将煤转化为电容型储能碳（多孔炭电极）是实现低阶煤高值化利用的有效途径之一。然而，常规活化法很难兼顾孔隙与石墨化的协同调控，煤基多孔炭大多呈无定型结构，导电性不佳，虽比表面积可观，但其电容特性并不理想。针对上述问题，基于碱金属化合物活化-催化碳纳米材料生长的双功能性，提出煤催化活化耦合气相化学沉积技术，构筑石墨微晶多孔炭与碳纳米材料微纳复合结构，形成高效的石墨碳电子传输网络。基于煤中sp^2杂化芳香碳的结构转化，利用活化剂、石墨化剂调控多孔炭结构及活化气组成，获取活化过程中孔隙-石墨微晶-活化气组成的动态匹配规律；并结合动态监测及微观表征研究活化废气沉积过程，探明活化气在多孔炭催化剂作用下的裂解沉积规律，实现碳电极孔隙与石墨化协同调控。基于电极电化学性能分析，获取电极结构与电容特性构效关系，揭示石墨碳网络电容强化机制，为低阶煤高值化利用提供技术支撑。

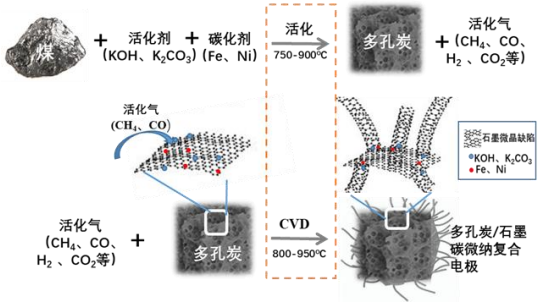


Fig. 1 Schematic illustration for controlling structure of coal-based porous carbon

关键词：低阶煤；多孔碳；石墨微晶结构；电化学性能

参考文献

[1] Lu Xu, Jian Hao*, Jing Wang, Yu Yang, Ruirui Zhao, Ruyi Zhang, and Xiao Yang, N doping porous carbon embedded in self-assembled three-dimensional reduced graphene oxide networks for electrochemical hydrogen storage, International Journal of Hydrogen Energy, 2023, (50):910-919.

[2] Jian Hao*, Ruirui Zhao, Lu Xu, Caixia Chi, and Haihong Li, Conversion of Coal into Graphitized Microcrystalline Carbon with a Hierarchical Porous Structure for Electrochemical Hydrogen Storage, Journal of Electronic Materials, 2023 (52):2034–2043.

[3] Ruirui Zhao, Jian Hao, * Xiao Yang, Ruyi Zhang, Caixia Chi, Hui Zhang and Qingjie Guo. Enhanced supercapacitor performance of porous carbon through tuning maceral composition proportion of coal. Physical Chemistry Chemical Physics, 2024, 26(7): 6037-6048.

报告人/墙报展示人简介：

郝健，宁夏大学，副教授，硕士生导师。2017 年毕业于哈尔滨工大学，获化学工程与技术博士学位。主持国家自然基金及省部级项目 8 项，横向课题 2 项，在化学/材料类期刊上发表研究论文 50 余篇（包括 Chemical Engineering Journal, Chemical Engineering Journal, Nanoscale, International Journal of Hydrogen Energy 等），申请并授权发明专利 10 余件。入选“西部之光访问学者”及“宁夏托举人才工程”。以第一完成人获第十六届宁夏自然科学优秀学术论文三等奖，作为主要完成人获中国颗粒学会自然科学二等奖，中国化工学会科学技术二等奖。担任中国颗粒学会青年理事及 Fuel，Separation and purification technology 等杂志审稿人。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：报告人非学生

锰空位和铂嵌入结构协同促进 CO_2 还原为 CO 的效率

杨元丽[a]，陈标华[a]，王宁[a*]

a 北京工业大学 环境科学与工程学院，北京，100124

Email: ning.wang.1@bjut.edu.cn

在负载型催化剂中，金属-载体界面处的电子效应可以优化催化剂的活性、选择性和稳定性，提高其在催化反应中的性能。缺陷工程可对催化剂的局部微结构、电子能带结构和化学特性进行调控，增强反应中间体的吸附和活化。在此，我们通过缺陷工程和离子交换策略制备了一系列 Pt 掺杂 MnO_x 的 Pt/MnO_x 催化剂。在反应过程中，$Pt(2)/Mn_2O_3$-SDC 催化剂获得了独特的界面结构，即 Pt 纳米团簇嵌入 MnO_x 载体。催化剂表面的锰空位促进了 CO_2 的吸附和活化。铂嵌入结构和锰空位的协同作用有助于将 CO_2 还原成 CO。因此，在常压、30,000 mL g_{cat}^{-1} h^{-1} 和 440 °C 条件下，$Pt(2)/Mn_2O_3$-SDC 催化剂的 CO_2 转化率为 30.5%，接近热力学平衡转化率，CO 选择性达到 100%。同时，$Pt(2)/Mn_2O_3$-SDC 催化剂在 300 小时的长周期测试中未观察到明显的活性衰减。这种缺陷工程策略实现了金属-载体界面和阳离子空位的协同作用，为开发新型高效负载型催化剂提供了宝贵的启示。

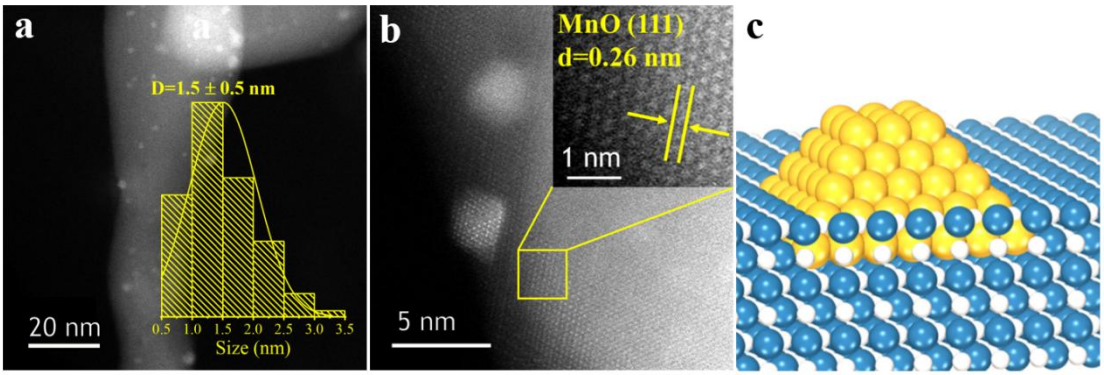


Fig. 1. HAADF-STEM images of the reacted Pt/Mn_2O_3-SDC catalysts (a, b) and the corresponding structural models (c).

关键词：二氧化碳加氢；逆水煤气变换反应；锰空位；Pt 基催化剂

参考文献

[1] X. X. Zhai, F. L. Jing*, W. Chu* et al., Fuel. 2021, 283, 11888

[2] H. X. Liu, C. J. Jia*, D. Ma* et al., Nat. Commun. 2022, 13,5800.

[3] J. Yu, X. T. Qin, Y. S. Yang* et al., J. Am. Chem. Soc. 2024, 146, 1071−1080.

报告人简介

杨元丽：北京工业大学，环境科学与工程学院，资源与环境专业博士研究生。研究方向为固废资源化及碳减排。主要进行 C1 小分子催化转化及高碳化学品的合成。本次报告题目为“锰空位和铂嵌入结构协同促进 CO_2 还原为 CO 的效率”。

报告人为学生。

合成气高效合成乙醇集成工艺

刘勇军*，黄伟

[1] 太原理工大学，山西省太原市迎泽西大街 79 号，030024

*Email: liuyongjun@tyut.edu.cn

合成气是连接煤炭资源与清洁燃料和高值化学品的重要纽带，实现合成气高质量转化是煤炭资源高效利用的核心，其效能的提高也可为实现“30·60双碳”目标做出实质性贡献。乙醇是重要的大宗化工原料和潜在的液体燃料资源，用途极为广泛，既可作为基本的化工原料，转化成许多化工产品；又可作为提高汽油辛烷值的添加剂，提高汽油的品质。由合成气合成乙醇由于保留了合成气中的氧和C-O键更能体现其高效性。甲烷和二氧化碳是合成气转化过程中不可避免的副产物，合理和巧妙地利用二者是进一步提高化石能源利用率的重要途径。通过将合成气“一步”合成乙醇与CH_4-CO_2两步梯阶转化耦合，形成集成工艺，实现合成气的高效转化和高选择性的合成乙醇。前者依托团队自创的完全液相技术制备的Cu基催化剂直接合成乙醇[1-4]，副产物CH_4和CO_2等再经过团队自主发明的梯阶转化工艺，在Zn-Ce/ZSM5催化剂上进一步转化得到乙醇[5]，最终实现在Cu基催化剂上的合成气高选择性地合成乙醇.最近我们还将浆态床用催化剂其拓展应用于固定床CO加氢制乙醇和C_{2+}OH反应中，催化剂显示出极佳的稳定性和炕烧结能力，CO单程转化率达到48%，液相产品中C2以上醇浓度达到70%以上。

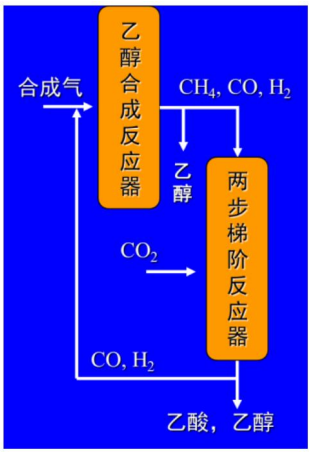


Fig. 1 Integrated technology of efficient synthesis of ethanol from syngas

关键词：合成气；乙醇；工艺集成

参考文献

[1] P. L. Jia, Y. J. Liu, R. Yang, P. Luo, and W. Huang, Insight into the structural sensitivity of CuZnAl catalysts for CO hydrogenation to alcohols, Fuel, 2022, 323: 124265.

[2] Y. J. Liu, N. Cui, P. L. Jia, X. Wang, and W. Huang, Synergy between active sites of ternary CuZnAlOOH catalysts in CO hydrogenation to ethanol and higher alcohols, ACS Sustain. Chem. Eng. 2020, 8: 6634-46.

[3] P. Luo, Y.J. Liu, K.J. Wang, Z.W. Li, C.Y. Zhang, Y.X. Wu, X.Y. Zan, W. Huang. Investigation of Al precursor for ethanol synthesis from syngas on Cu-based multifunctional catalyst. Fuel Process. Technol. 2023, 245: 107728.

[4] Y.J. Liu, Z.W. Li, P. Luo, N. Cui, K,J. Wang, and W. Huang. Size-dependent and sensitivity of copper particle in ternary CuZnAl catalyst for syngas to ethanol. Appl. Catal. B: Environ. 2023, 336: 122949.

[5] Y.J. Liu, C.Y. Zhang, R.J. Wang, Y.X. Wu, X.Y. Zan, S.Q. Tao, and W. Huang. Low-temperature thermocatalytic coupling of CH_4 and CO_2 to ethanol over Zn-Ce/ZSM-5 by a stepwise technique. ACS Catal. 2024, 14, 8823−35

报告人简介：

刘勇军，太原理工大学副教授，博士，硕士生导师。主要从事合成气、CH_4 和 CO_2 等 C1 化工与多相催化的基础与应用基础研究工作。以第一或通讯作者在 *Coordin. Chem. Rev., ACS Catal., Appl. Catal. B., J. Energy Chem., ACS Sustainable Chem. Eng.* 等国际期刊发表 SCI 论文 20 余篇，授权发明专利 10 余件(转化 1 件)。主持国家自然科学基金、山西省应用基础研究项目以及企业横向项目，作为核心骨干参与国家自然科学基金重点、面上、山西省重点研发计划和企业横向课题多项。担任《低碳化学与化工》、《煤炭转化》青年编委

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

‘Redox switches’ of Fe species on zeolite catalysts: Modulating the acidity and the para-xylene yield from methanol

Qiongfang Hu [1#], Hongmei Wang[1#], Chaojie Cui [1,*] Weizhong Qian [1,*]

[1]Department of Chemical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, PR China

* cuicj06@tsinghua.edu.cn ,qianwz@tsinghua.edu.cn

Molecular switches are widely reported in optical devices, computer logic calculations, medicine syntheses, and DNA sensor systems, but rarely reported in heterogeneous catalytic processes. In this paper, we reported a ‘Redox switch’ of Fe species to tune the acidity of a ZSM-5 based catalyst in the reaction of methanol to aromatics, in which the aimed product, para-xylene (PX), has a low yield since various types of acids on the catalyst activated many side reactions. Fe oxygenates and zeolite generate Lewis acids with medium strength, which activated the aromatization of methanol, but suppressed the dealkylation of xylene. Reducing Fe oxygenates resulted in the decrease of the conversion of methanol, the yield of aromatics, and the yield of PX simultaneously. However, the oxidation state of the Fe species and the associated catalytic performances can be recovered in the catalyst regeneration in the air at 550 °C. The ‘Redox’ switches dominated the regular fluctuation of the catalytic performance and remained stable in 16 reaction-catalyst regeneration cycles (up to 80 hours). This control strategy allowed a yield of PX up to 60% (carbon based) with a SiO_2-coated Zn/P/Fe/ZSM-5 catalyst, about 3-6 times higher than that of previous work. The result showed a new mode of acidity modulation of the catalyst.

Keywords: Molecular switches; Fe; ZSM-5; Methanol; Para-xylene

References

[11]Q. Hu, H. Wang, C. Cui, W. Qian. “Redox switches” of Fe species on zeolite catalysts: Modulating the acidity and the para-xylene yield from methanol. Carbon Future, 2023, 1, 9200001.

报告人简介：

王宏梅，清华大学化工系 20 级直博生，化学工程与技术专业，师从清华大学化工系骞伟中教授，研究方向：甲醇/戊烷的高值化催化转化。邮箱：whm20@mails.tsinghua.edu.cn。

附：报告人为在读博士生

Security of Light Olefins Production

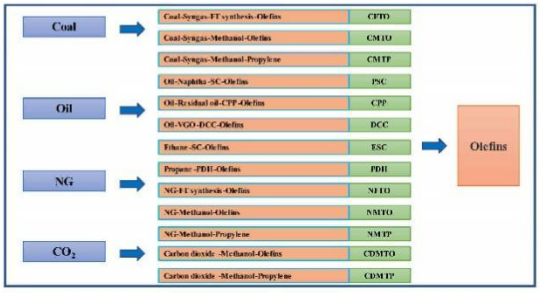
Jinqiang Liang[1], Danzhu Liu[2], Wei Peng[1], Shiguang Fan[1]

[1] Engineering Institute, China University of Petroleum-Beijing at Karamay, Karamay, 834000, China

[2] Dalian National Engineering Research Center of Lower-Carbon Catalysis Technology, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian, 116021, China

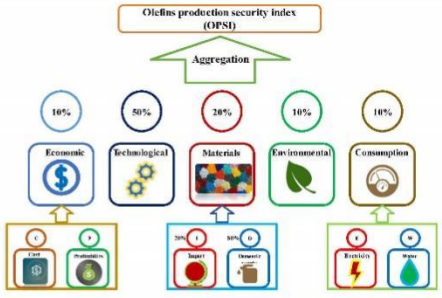
Introduction

- Light olefins, especially ethylene and propylene, are important chemicals widely used in synthesizing fibers, plastics, rubbers and many other basic materials, and playing an irreplaceable role in our daily life.
- In China, though 71% of the total ethylene production is produced from steam cracking of naphtha. Methanol to olefins (MTO), in which methanol is essentially produced from coal at industrial scale, has been rapidly developed in order to reduce China's import dependence of oil.
- Most of the evaluations on the production routes of light olefins have been conducted with the focus on the technological, economical, and environmental impacts. Few studies considered the security of the light olefins production routes, in spite that many researchers have already identified that minimizing the risks and thus ensuring stable production of light olefins for a country are critical for its economics and social development.



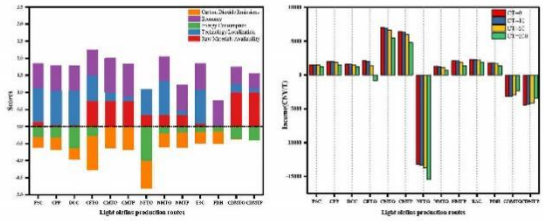
Methods

- A framework to account security of olefins production routes is designed, in which China is taken as the country of reference though this frame can be extended to production routes in any other industrial sectors in any other countries.
- The OPSI is composed of five dimensions, and a secondary dimension is set under the dimensions of economy, raw materials and energy consumption.
- In the reference case, the weighting of the five dimensions is 10%, 50%, 20%, 10% and 10% respectively, and those of the four sub-dimensions of the economy and energy consumption dimension are 50%, 50%, 50% and 50%, respectively.



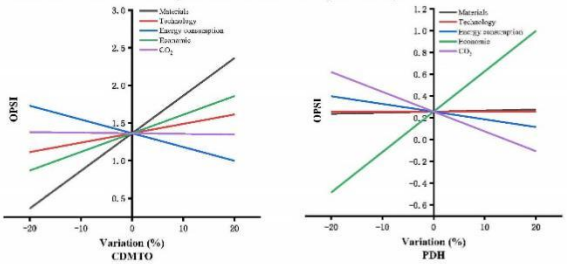
Results

- Except CDMTO and CDMTP routes, the profitability of the light olefins production routes decreases with the increase of carbon tax. In the reference case, when the carbon tax exceeds 100 CNY/t, the revenue of CFTO route may change from positive to negative.
- As a reference case, the OPSI of CPP, CMTO, PSC, ESC, CFTO and NMTO routes are 2.58, 2.60, 2.69, 2.72, 2.79, and 2.90, respectively.
- Nevertheless, the OPSI of PDH is 0.14. The OPSI of CPP, CMTO, PSC, ESC, CFTO and NMTO routes are 18.65, 18.78, 19.41, 19.62, 20.14 and 20.92 times that of the PDH route, respectively. It implies that CPP, CMTO, PSC, ESC, CFTO and NMTO routes have the advantage of high security performance compared with PDH route.
- Both CMTO and CMTP routes have high security performance and low weight sensitivity. The PDH route is entirely dependent on foreign technology and imported raw materials, which leads to poor security performance.



Conclusions

- **A security evaluation framework is proposed based on 13 light olefins production routes. It is evaluated comprehensively from five dimensions: economy, technology localization, raw materials, energy consumption, and carbon dioxide emissions.**
- The PDH route is entirely dependent on foreign technology and imported raw materials, which leads to poor security performance. Therefore, it is a big risk warning for policy makers and companies about to start light olefins production with the PDH process.
- CDMTO and CDMTP routes have the advantage of low carbon dioxide emissions and helpful to achieve carbon neutrality, but the low economic profitability.



Bibliography

[1] D. Xiang, Y. Qian, Y. Man, et al. Applied Energy 113, 639-647.
[2] J. Li, Y. Zhang, Y. Yang, et al. Applied Energy 312, 118791.
[3] X. Song, Z. Guo. Energy Conversion and Management 47, 560-569.
[4] I.V. Babich, J.A. Fuel 82, 607-631.

Fund Supported by the Strategic Priority Research Program of Chinese Academy of Sciences, Grant No. XDA21010100

附：请在此处注明报告人/墙报展示人不是学生。

Molecule Single-file Diffusion Behavior inside Ultralong Individual Carbon Nanotube

Jingwei Wu[1], Fei Wei[1,*]

[1]Department 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.

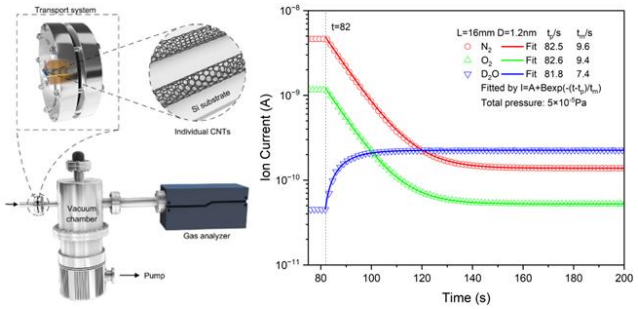


Fig. 1 Molecule diffusion through individual carbon nanotube. Ion current vs time curve was fitted by the equation $I=A+Bexp(-(t-t_p)/t_m)$, where t_p and t_m represent the time that fluid molecules pass the carbon nanotube and vacuum chamber respectively.

报告人/墙报展示人简介：

吴经纬，清华大学化学工程系博士生，师从魏飞教授，研究兴趣为超长碳纳米管内分子超输运行为

附：报告人/墙报展示人为学生

基于正己烷/甲醇耦合共芳构化反应烷基化强化制 pX 研究**

李海波，尹一晗，王勇杰，赵天生，吕俊敏*，范素兵*

宁夏大学，宁夏银川，750021

*Email: fansb@nxu.edu.cn, lvjunmin@nxu.edu.cn

对二甲苯（pX）是二甲苯（X）中附加值最高的产品。世界上 95%的 pX 用于生产对苯二甲酸（PTA）和聚对苯二甲酸乙二醇酯（PET），广泛应用于聚酯、化纤和制药行业。甲醇制芳烃（MTA）及耦合技术不仅能将低附加值的甲醇转化为高附加值的芳烃，还能缓解我国对石油资源的依存关系，推动我国煤炭资源的高效利用。研究表明[Zn,Ga]/ZSM-5 催化剂在正己烷耦合甲醇共芳构化反应中具有较高的 BTX 择性。Zn 物种与 BAS 相互作用形成 $Zn(OH)^+$，而 Ga 的引入进一步促进 $Zn(OH)^+$的形成，将 L/B 的比值从 0.09 调变到 1.00，有利于芳构化反应的进行。在甲醇/正己烷进料比为 7:3，430 °C, 1.0 h^{-1} 条件下，芳烃收率最高可达 65.7wt%，但 pX 选择性在 24%左右。在此基础上，采用一种烷基化强化的两级串联催化技术，反应示意图如图 1(a)所示，首先使用[Zn,Ga]/ZSM-5 进行共芳烃化反应以提供足够的芳烃，然后使用 HZSM-5@SiO_2 催化剂对芳烃产物的烷基化反应进行强化。研究发现，串联催化强化烷基化反应有助于提高 pX 的选择性和收率。与一段共芳构化反应相比，Z50@20P 使 pX 的选择性从 28%提高至 57%，pX 的收率也从 5%wt%显著提高到 13wt%。这归因于 Z50 外表面沉积的 SiO_2，不但能覆盖分子筛表面酸性位点还能起到修饰孔口的作用，从而抑制了烯烃的氢转移和 pX 的异构化反应、增强了甲醇制烯（MTO）和芳烃的烷基化反应。综上，两种功能催化剂的结合为高效生产 pX 提供了一条新的途径。

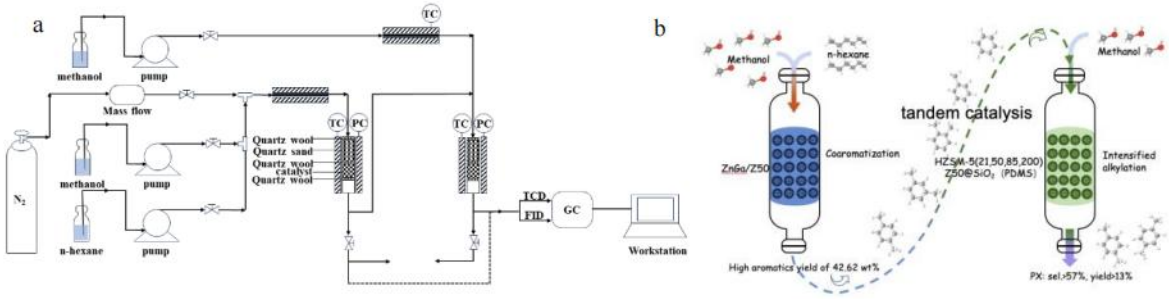


Fig. 1 Flow diagram of the two-step process (a) and schematic of reaction (b).

关键词：耦合共芳构化；烷基化；强化；对二甲苯；表面硅沉积

参考文献

[1] H. Li, B. Zhu, and X. Wan, Higher BTX yield in coaromatization of n-hexane and methanol over [Zn,Ga]/HZSM-5 catalyst. Fuel 2023, 338:127260.

[2] T. Fu, Y. Guo and Z. Li, Selective conversion of methanol to aromatics with superior catalytic stability by relay catalysis over quadruple ZSM-5 sequence beds with gradient-increasing acidity. Fuel 2022, 315:123241.

报告人/墙报展示人简介：

李海波，女，2022 级博士研究生，就读于宁夏大学化学化工学院，水资源利用与化学化工专业，博士指导教师 范素兵研究员，博士研究方向为煤基应用催化，主要围绕甲醇/正己烷耦合 CO 共芳构化制备芳烃开展相关研究。

博士期间主要成果：

1. **Li H**, Zhu B, Wang X, et al. Higher BTX yield in coaromatization of n-hexane and methanol over [Zn,Ga]/HZSM-5 catalyst[J]. ***Fuel***, 2023, 338: 127260；

2.**李海波**,吕俊敏,范素兵等.甲醇制芳烃研究趋势文献分析[J].*宁夏工程技术*,2023,22(03):239-251.

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：

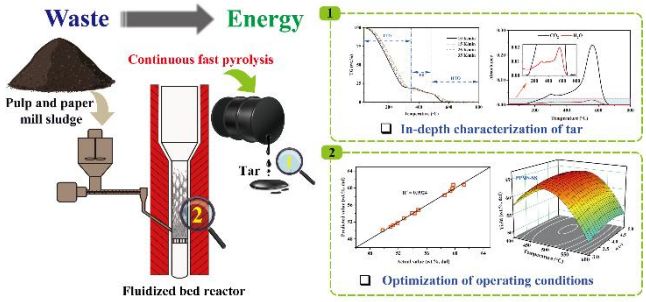
制浆造纸污泥流化床快速热解工艺优化及焦油的综合特性分析

陈方军，任冠龙，龙华，熊勤钢*

华南理工大学制浆造纸工程国家重点实验室，广东 广州 510641

*Email: qingangxiong@scut.edu.cn

流化床连续快速热解技术是实现制浆造纸厂污泥（PPMS）高效转为液体燃料实现废物利用的重要途径之一。本研究对某废纸制浆造纸厂的两种典型PPMS，即脱墨污泥(PPMS-DS)和污水污泥(PPMS-SS)在FBR中进行了连续快速热解实验，旨在探究不同操作参数对焦油产量的影响特性，确定最佳的操作条件以最大限度地提高焦油产量，并对所得焦油的物理化学特性和燃烧性能进行了全面表征。基于响应面法(RSM)和Box-Behnken实验设计，发现床层温度是影响焦油产率的最关键因素，其次是流化数，而颗粒大小影响较小，各参数间的总体交互作用不显著。在优化条件下，PPMS-DS和PPMS-SS的最高焦油产率分别为61.49 wt.% daf和66.13 wt.% daf。焦油的综合分析表明，PPMS-DS焦油具有较高的热值（39.16 MJ/kg）和较低的氧含量（4.68 wt.%），表现出优异的燃料性能和稳定性，使其适合作为替代燃料。PPMS焦油在燃烧过程中存在3个反应区域，即低温氧化（LTO）、燃料沉积（FD）和高温氧化（HTO）。在LTO区域主要释放可燃有机气体（C=C，C=O，C-O和C-H），HTO区域主要释放CO_2和少量CO。由于焦油中氮元素的存在，在燃烧过程中会产生一定量的氮污染物（NH_3和HCN）。PPMS焦油的燃烧动力学分析显示，LTO区域的表观活化能最低（PPMS-DS焦油为79.11 kJ/mol，PPMS-SS tar为77.48 kJ/mol），反应遵循反应级数模型，其阶数会随转化分数变化；FD最初遵循三阶反应模型，随后转变为三维扩散模型，而HTO遵循一阶反应模型。



关键词：制浆造纸污泥；快速热解；流化床；焦油；燃烧特性

报告人/墙报展示人简介：

陈方军，华南理工大学轻工科学与工程学院在读博士研究生，导师熊勤钢教授。研究方向为有机固废的热化学转化。目前以第一作者身份在 Energy Conversion and Management，Bioresource Technology，ACS Sustainable Chemistry & Engineering，Science of The Total Environment 期刊上发表 SCI 论文 4 篇。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

载体效应对负载型固体超强碱催化异丁烯选择性二聚性能的影响

孙晶晶[1]，靳海波[2,*]，孙继红[1,*]，杨索和[2]，何广湘[2]

[1]北京工业大学，北京，100124

[2]北京石油化工学院，北京，102600

*Email: jinhaibo@bipt.edu.cn，jhsun@bjut.edu.cn

2,4,4-三甲基-1-戊烯（2,4,4-TMP1）是一种高附加值化工中间体。通过固体超强碱催化异丁烯二聚制备 2,4,4-TMP1，为我国生产高质量防爆震且高辛烷值的烷基化柴油、汽油提供新思路[1-6]。该技术核心挑战在于制备高活性、高选择性、高稳定性的催化剂，并深入理解其催化作用机制。采用金属 K 熔融负载制备了固体超强碱 K/K_2CO_3，并通过改变载体的预处理温度优化了催化剂的活性和结构稳定性，有效控制异丁烯选择性二聚的行为。此外，采用了各种理化表征探究了 K/K_2CO_3 表面碱位的形成机理、碱位构成以及微观结构及电子特征等方面的差异，并建立了动力学模型，揭示了活性位结构与催化效率及选择性的内在联系。优化后异丁烯的转化率约为 49%，2,4,4-TMP1 的选择性为 80%。并推测金属钾微晶的晶格缺陷（如晶角、边缘和空位）附近的氧构成了超碱性位点。本研究不仅有助于明确固体超强碱 K/K_2CO_3 催化异丁烯二聚的反应历程，为我国 2,4,4-TMP1 单体的工业技术开发提供理论指导，而且有望解决国内混合 C_4 资源利用低的难题。

关键词：异丁烯二聚；固体超强碱；2,4,4-三甲基-1-戊烯；载体效应

参考文献

[1] 娄俊毅，MTO 技术副产轻烃综合利用分析[J]. 炼油技术与工程，2023，53（8）:33-36.

[2] 何英华，詹海容，朱丽娜等，混合 C_4 馏分综合利用技术进展[J]. 化工技术与开发，2013, 42（08）:40-44.

[3] 邢爱华，张新锋，索娅等，碳四烃类资源综合利用现状及展望[J]. 洁净煤技术，2015, 21（05）:66-70.

[4] 高凯敏，碳四烃类资源综合利用现状以及未来的展望[J]. 化学工程与装备，2017,（03）:174-176.

[5] 吴群英，炼油厂轻烃资源利用现状与加工趋势分析[J]. 炼油技术与工程，2019, 49（10）:1-8.

[6] 何庆阳，碳四烃类资源综合利用现状及展望[J]. 云南化工，2021, 48（05）: 24-26.

报告人/墙报展示人简介：

孙晶晶（1995-），女，博士研究生，北京工业大学，材料与化工专业，研究方向：固体碱催化烯烃低聚

附：报告人/墙报展示人是否为学生：是

硅醇巢β沸石负载铑纳米颗粒的对高碳烯烃氢甲酰化催化性能研究

陈浩烽[1, 2]，刘海燕[1]，靳海波[2,*]

[1]中国石油大学（北京）化学工程与环境学院，北京 昌平 102249

[2]北京石油化工学院新材料与化工学院，北京 大兴 102617

*Email: jinhaibo@bipt.edu.cn

氢甲酰化反应是工业上最大的均相过程之一，其中高碳烯烃氢甲酰化是重要的化学反应过程，广泛应用于高碳醛类的生产。多相催化相较于传统的均相催化表现出催化剂易于分离与回收、减少了含膦废物的排放和贵金属的损失等优势。但多相催化剂相较于均相催化剂活性较差。在本研究中，制备了负载在β分子筛上的铑纳米粒子催化剂。通过脱铝处理β沸石，形成大量硅醇巢，使其能够富集高碳烯烃，从而提高负载在β沸石上的铑元素的反应活性。该催化剂的转化频率约为5000 h^{-1}，接近均相反应的水平。机理研究通过理论计算、催化剂表征和催化活性分析表明，含硅醇巢的β沸石能够富集高碳烯烃，从而显著提升了分子筛表面铑元素的催化活性。

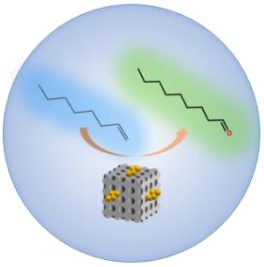


Fig. 1 Hydroformylation of high carbon olefins

关键词：高碳烯烃；氢甲酰化；催化剂；多相反应；

参考文献

[1] **LIU Y., LIU Z., HUI Y., et al. Rhodium nanoparticles supported on silanol-rich zeolites beyond the homogeneous Wilkinson's catalyst for hydroformylation of olefins[J]. Nature Communications. 2023, 14 (1): 2531.**

[2] **YU X., JI Y., JIANG Y., et al. Recent Development of Single-Atom Catalysis for the Functionalization of Alkenes[J]. Catalysts 2023, 13 (4).**

[3] **QI L., DAS S., ZHANG Y.F., et al. Ethene Hydroformylation Catalyzed by Rhodium Dispersed with Zinc or Cobalt in Silanol Nests of Dealuminated Zeolite Beta[J]. Journal of the American Chemical Society. 2023**

报告人/墙报展示人简介：

陈浩烽，中国石油大学（北京）化学工程与环境学院博士，师从靳海波教授、刘海燕教授，主要研究方向为高碳烯烃氢甲酰化生产、新型催化材料开发、工业催化，发表研究论文 5 篇、申请专利 2 项。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：学生。

负载方法对 Zn/SAPO-34 催化剂性能及其催化果糖脱水制备 5-羟甲基糠醛的影响

王陇豫[1]，杨索和[2]，何广湘[2]，刘海燕[1]，孟祥海[1]，刘植昌[1]，靳海波[2,*]

[1]中国石油大学（北京），北京，102249

[2]北京石油化工学院，北京，102600

*Email: jinhaibo@bipt.edu.cn

lzch@cup.edu.cn

5-羟甲基糠醛（HMF）是位于生物基材料产业链中游的典型平台化合物，其分子中同时含有呋喃环、羟基和醛基，是一种活性较强的多官能团化合物，可以通过氧化脱氢、氢化、水解、酯化等化学反应合成得到系列高附加值的化学品及新型高分子材料等[1]，在可再生领域中具有不可替代的地位。Zn 负载的分子筛催化剂在芳构化[2]、Heck 反应[3]、脱氢反应[4]等都表现出良好的活性，但是目前尚未发现将 Zn 负载型分子筛应用于果糖脱水生成 HMF 反应中的报道，因此探究 Zn 元素不同的掺杂方法对分子筛结构和性质的影响，同时了解 Zn 离子在分子筛骨架中的位置以及其不同位点的性质对提高果糖脱水反应生成 HMF 的转化率和选择性具有重要作用。通过热离子交换法、湿浸渍法以及物理混合法三种不同的 Zn 物种引入方式制备了一系列 Zn-SAPO-34 催化剂，并采用 XRD、FT-IR、BET、SEM、XRF、XPS、NH_3-TPD 以及 Py-IR 等表征手段对制备的系列催化剂的晶型晶貌、形貌结构、表面酸性以及 Zn 物种在催化剂中的存在状态进行探究。研究发现不同的 Zn 物种引入手段对催化剂的物理化学性质有明显不同的影响，不同的 Zn 物种引入方式对催化剂表面的酸强度和酸类型有明显不同的调变和影响，且 Zn 物种在不同催化剂中的存在状态有所不同。热离子交换法引入的 Zn 物种在催化剂中以 $ZnOH^+$和 ZnO 两种形式共同存在，而湿浸渍法和物理混合法引入的 Zn 物种分别以 $ZnOH^+$和 ZnO 两种形式单一存在于催化剂中。同时对制备的一些列 Zn-SAPO-34 催化剂催化果糖脱水制备 5-羟甲基糠醛(HMF)反应的催化性能进行研究，结果表明，热离子交换法制备的 Zn-SAPO-34 催化剂具有较好的催化果糖脱水反应的性能，HMF 收率达到 94.6%。此外，通过原位红外技术探究了 Zn 物种的引入对果糖脱水反应过程的影响，认为 Zn 物种的引入促进了果糖分子的转化。

关键词：果糖脱水；HMF；Zn；SAPO-34；不同制备方法

参考文献

[1] **D. Chi, F. Liu, H. Na, et al. Poly (neopentyl glycol 2, 5-furandicarboxylate): a promising hard segment for the development of bio-based thermoplastic poly (ether-ester) elastomer with high performance[J]. ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 2018, 6(8): 9893-9902.**

[2] **J. Biscardi, G. Meitzner, E. Iglesia. Structure and density of active Zn species in Zn/H-ZSM5 propane aromatization catalysts[J]. Journal of Catalysis, 1998, 179(1): 192-202.**

[3] **J. Penzien, A. Abraham, J. Bokhoven, et al. Generation and characterization of well-defined Zn^{2+} Lewis acid sites in ion exchanged zeolite BEA[J]. The Journal of Physical Chemistry B, 2004, 108(13): 4116-4126.**

[4] **Y. Ono. Transformation of lower alkanes into aromatic hydrocarbons over ZSM-5 zeolites[J]. Catalysis Reviews, 1992, 34(3): 179-226.**

报告人/墙报展示人简介：

王陇豫(1995-），女，博士研究生，中国石油大学(北京)， 化学工程与技术专业，研究方向：分子筛催化生物质转化。

附：报告人/墙报展示人是否为学生：是

含碳颗粒气化界面温度测量及动力学模型修正

沈中杰[1,*]，张海港[1]，刘海峰[1,2]

[1]华东理工大学，上海，200237

[2]辽宁石油化工大学，抚顺，113005

*Email: zjshen@ecust.edu.cn

颗粒温度的精确测量对于计算气固反应动力学参数和预测气化炉内碳转化至关重要。本研究将红外热像仪与高温热台相结合反应器开发了一种连续测量含碳颗粒气化界面温度的方法。基于此方法对外光透射率和温度场核进行了校正，获得了样品发射率、测量温度(Tr)与真实温度(T0)之间的关系。采用在线测温系统对单个煤颗粒气化反应过程中进行了原位试验测量和表征。对气化过程进行了瞬时温度测量对煤颗粒的总发射率进行了校正，进一步得到了气化过程中煤颗粒的温度分布和变化。考虑灰层作用下的传热和传质，对内部未反应碳芯的过程进行了建模研究，计算了内芯的反应温度，并与实际情况相吻合。结果表明，气化过程中从颗粒外围到内部的表面温度逐渐降低，即表层和内部温度不均一性，表面温度分布差超过80K。温度为1173~ 1373 K时，内部碳芯温度比表面低27 ~ 72 K。基于气化界面温度测量，提出了一种基于未反应核心温度修正的反应动力学模型。与传统模型相比，该模型的预测结果在初期和后期阶段与实验数据具有较好的一致性。研究结果颗用于分析颗粒内部温度分布、反应和矿物转化等，指导工业工程操作条件优化。

关键词：含碳颗粒；气化界面；温度；在线测量；建模

报告人/墙报展示人简介：

沈中杰，华东理工大学，资源与环境工程学院，副教授。研究方向：能源低碳清洁转化及存储。入选上海市“浦江人才”。主要从事煤、生物质等固体及铁矿粉等资源和能源原料的高温气固反应、清洁转化和高温相变及热化学储能等基础理论与技术开发。先后主持国家自然科学基金面上和青年项目、国家重点研发计划项目子课题，新疆自治区重点研发课题、企业委托项目等，作为研究骨干参与美国能源部国家能源技术实验室项目2项。在AIChE J.、Combust. Flame Energy、CEJ、MMTB等能源、化工、冶金领域著名期刊发表论文80余篇，授权专利多项。

Oxygen incorporation facilitated MoS_2 as an efficient and stable catalyst for the reverse water gas shift reaction

Yongning Yuan[1], Tuo Guo[1]*, Qingjie Guo[1],[2*]

[1]State Key Laboratory of High-efficiency Coal Utilization and Green Chemical Engineering, College of Chemistry and Chemical Engineering, Ningxia University, Yinchuan 750021, China

[2]College of Chemical Engineering, Qingdao University of Science & Technology, Qingdao 266042, China

* qingjie_guo@vip.sina.com (Qingjie Guo); tuo.guo.20@alumni.ucl.ac.uk (Tuo Guo)

A nanosheet MoS_2 catalyst is prepared via hydrothermal method and O incorporation by calcination strategy. The X-ray and BET characterizations show that the calcination results in a considerable increase in crystallinity and specific surface area (from 48.82 to 84.49 m^2/g), improving the efficient adsorption of CO_2. The situ DRIFTS spectra and DFT calculations reveal that redox mechanisms are involved in the RWGS reaction on MoS_2. CO desorption is facilitated by O incorporation through electron transfer from Mo to O atoms and the higher barriers of CO hydrogenation and dissociation. CH_4 formation is effectively suppressed by the edge sulfur vacancies through the weakened adsorption strength of CO. A remarkable CO_2 conversion (57%) and high stability (>1000h) are obtained at 600℃. This performance is superior to those of traditional supported catalysts. This study reports a promising two-dimensional layered material for exploring excellent performance catalysts for the reverse water gas reaction.

Keywords: Reverse water gas reaction; High stability; MoS_2; Surface oxygen; DFT calculations

报告人/墙报展示人简介：

袁永宁

女，在读博士生。

简历：

2015-2018 年 西北师范大学硕士研究生

2021-至今 宁夏大学在读博士研究生

附：报告人是学生

赤泥基钙钛矿载氧体化学链气化市政湿污泥的实验研究

安泽文[1]，王翠苹[2]，郭庆杰[1,*]

[1]青岛科技大学化工学院，山东省青岛市市北区郑州路 53 号，266042

[2]山东科技大学清洁能源实验室，山东省青岛市黄岛区前湾港路 579 号，266590

*Email: azw523@163.com

利用拜耳法铝业副产物赤泥为主要原料，配置不同比例的钙锰元素后经不同煅烧温度制备了$CaMn_{0.5}Fe_{0.5}O_{3-\delta}$型钙钛矿载氧体，在固定床反应器中进行了市政湿污泥化学链气化制备富氢合成气的系列试验。通过 XRD、SEM、GC 等表征手段对反应前后钙钛矿载氧体及合成气品质进行分析，结果表明，相较于 1050℃和 950℃煅烧的钙钛矿载氧体，850℃条件煅烧的钙钛矿载氧体制备富氢燃气的品质更优，合成气中氢气体积分数达到 44.7%，超过了干污泥中含氢转化为氢气的理论值，则污泥中水气化过程参与了重整制氢的反应，同时合成气中含较多的 CO_2。由 XRD 结果推断，850℃煅烧条件下，钙钛矿的晶相发育不完善，呈现弱晶化无定型状态，在甲烷部分氧化和高温水煤气变换反应方便表现出较大的活性，有利于产生 H_2。继而添加 $Ca(OH)_2$ 与载氧体掺混，完成 CO_2 的原位吸附，明显提高了合成气氢气体积分数及热值，合成气中氢气体积分数达到 83.7%。污泥水热解预处理同样对提高合成气品质具有促进作用，250℃条件制备的水热解污泥，利用 850℃煅烧的钙钛矿载氧体制备的合成气氢气体积分数达到 59.9%，热值达到 13.47MJ/Nm³，再添加 $Ca(OH)_2$ 实现 CO_2 的原位吸附后，合成气氢气体积分数达到 89.3%，热值达到 13.01MJ/Nm³。 950℃煅烧的赤泥基钙钛矿载氧体，其所得燃气富含甲烷，热值高。通过对湿污泥气化过程的碳氢元素的衡算，确定了湿污泥水分的迁移机制，其中一部分析出蒸汽参与了污泥碳气化及甲烷等重整反应，因此提高了氢气含率。本文所得结论对湿污泥化学链气化选择载氧体和燃料预处理具有指导作用。

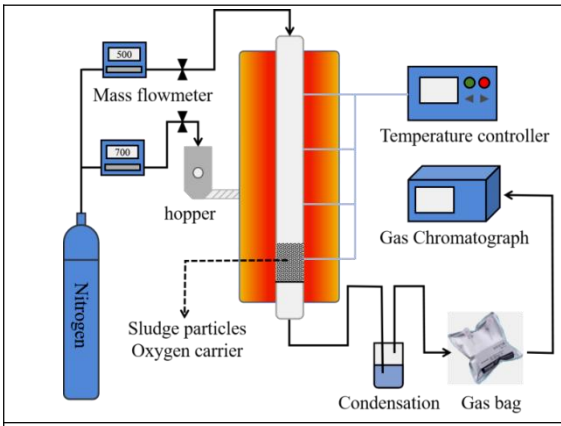


Fig. 1 Schematic diagram of experimental device

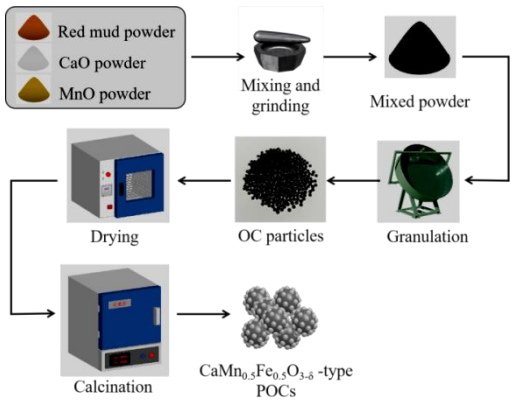


Fig. 2 Preparation process of $CaMn_{0.5}Fe_{0.5}O_{3-\delta}$-type POCs

关键词：市政湿污泥；钙钛矿载氧体；化学链气化；合成气；氢气产率

参考文献

[1] Zhang JX, Ma L. Comparative environmental sustainability study of an improved sewage sludge treatment and sludge reuse system based on emergy analysis in China. Appl Water Sci 2021;11(9):19.

[2] Liu YZ, Li B, Guo DT, Munir MT, Song L, Wu XF, et al. Feasibility of using different hydrothermal processes for sewage sludge management in China. Sci Total Environ 2022;838:15.

[3] Raynaud M, Vaxelaire J, Olivier J, Dieudé-Fauvel E, Baudez JC. Compression dewatering of municipal activated sludge: Effects of salt and pH. Water Res 2012;46(14):4448-56.

[4] Wang ZH, Song HW, Song L, Yin ZZ, Hui K, Gao WJ, et al. Dewatering municipal wastewater sludge using electro-coagulation combined with added free nitrous acid. Chemosphere 2022;306:10.
[5] Wu YJ, Xu Y, Zhang XD, Lu YT, He XY, Song BJ, et al. Experimental study on treating landfill sludge by preconditioning combined with vacuum preloading: Effects of freeze-thaw and $FeCl_3$ preconditioning. Sci Total Environ 2020;747:12.
[6] Yu SY, Zhang H, Lu F, Shao LM, He PJ. Flow analysis of major and trace elements in residues from large-scale sewage sludge incineration. J Environ Sci 2021;102:99-109.
[7] Zhang XD, Wang SD, Feng HQ, Sun LZ, Chen H, Huang YB, et al. Variation of gas composition and energy utilization in biomass CLG process with Fe and Ca oxides through thermodynamic simulation. Fuel 2022;310:14.
[8] Qin W, Luo LX, Chen SB, Iqbal T, Xiao XB, Dong CQ. Efficient strategy of utilizing alkaline liquid waste boosting biomass chemical looping gasification to produce hydrogen. Fuel Process Technol 2021;217:9.
[9] Li YK, Ma JJ, Hu XD, Guo QJ, Guo XT, Pan X. Nitrogen migration in coal during the chemical looping gasification reduction process using a nickel-based oxygen carrier. J Anal Appl Pyrolysis 2021;159:9.
[10] Wang LL, Shen LH, Jiang SX, Song T. Chemical looping gasification with potassium-catalyzed petroleum coke for enhanced production of H_2 and H_2S. Chem Eng J 2020;397:12.
[11] Samprón I, de Diego LF, García-Labiano F, Izquierdo MT, Abad A, Adánez J. Biomass Chemical Looping Gasification of pine wood using a synthetic Fe_2O_3/Al_2O_3 oxygen carrier in a continuous unit. Bioresour Technol 2020;316:9.
[12] Wang K, An ZW, Wang FY, Liang WZ, Wang CP, Guo QJ, et al. Effect of ash on the performance of iron-based oxygen carrier in the chemical looping gasification of municipal sludge. Energy 2021;231:9.
[13] Li M, Sun LZ, Chen L, Feng HQ, Zhao BF, Yang SX, et al. Syngas production from biomass chemical looping gasification with Fe_2O_3-CaO oxygen carrier. J Therm Anal Calorim 2022;147(14):7811-7.
[14] Wang YN, Tian X, Zhao HB, Liu KL. The use of a low-cost oxygen carrier prepared from red mud and copper ore for in situ gasification chemical looping combustion of coal. Fuel Process Technol 2020;205:10.
[15] Gu HM, Cui XB, Wang JQ, Li WQ, Wu XY, Wang L, et al. Natural Iron Ore as Oxygen Carrier Modified with Rare Earth Metal for Chemical Looping Hydrogen Production. Energy Fuels 2021;35(18):15234-42.
[16] Al-Qadri B, Wang XJ, Chen DL. Experimental Study on Chemical Looping Co-gasification of Alfalfa and Polyethylene with Iron Ore as the Oxygen Carrier for High H_2/CO Production. Energy Fuels 2022;36(13):6939-48.
[17] Wang S, Song T, Yin SY, Hartge EU, Dymala T, Shen LH, et al. Syngas, tar and char behavior in chemical looping gasification of sawdust pellet in fluidized bed. Fuel 2020;270:11.
[18] Khairul MA, Zanganeh J, Moghtaderi B. The composition, recycling and utilisation of Bayer red mud. Resour Conserv Recycl 2019;141:483-98.
[19] Wang YA, Bu HF, Zhao HB, Liu KL. Performance Evaluation of Inexpensive Cu/Fe-Based Oxygen Carriers in Chemical Looping Gasification of Coal. Energy Fuels 2021;35(19):15513-24.
[20] Wang YA, Tian X, Zhao HB, Liu KL, Dong YC, Su Z, et al. Synergetic effects of cement bonded copper ore and red mud as oxygen carrier during in-situ gasification chemical looping combustion of coal char. Fuel 2021;303:10.
[21] Liu F, Wu X, Zhang X, Yang L, Liu Y, Song ZC. Co-use of organic herbal residue and red mud waste for syngas production by chemical looping gasification. Int J Energy Res 2021;45(2):2195-210.
[22] Niu X, Shen LH. Ca- and Mg-rich waste as high active carrier for chemical looping gasification of biomass. Chin J Chem Eng 2021;38:145-54.
[23] Wei GQ, Deng LF, Yuan HR, Yang XX, Huang Z, Zheng AQ, et al. Enhanced chemical looping

gasification of biomass coupled with CO_2 splitting based on carbon negative emission. Energy Conv Manag 2022;260:11.
[24] Yang M, Song D, Li Y, Cao JZ, Wei GQ, He F. High-Quality Syngas Production by Chemical Looping Gasification of Bituminite Based on $NiFe_2O_4$ Oxygen Carrier. Energies 2023;16(8):17.
[25] Pan QH, Ma LP, Du W, Yang J, Ao R, Yin X, et al. Hydrogen-enriched syngas production by lignite chemical looping gasification with composite oxygen carriers of phosphogypsum and steel slag. Energy 2022;241:13.
[26] Liang WZ, Wang FY, Wang CP, Yang HR, Cui WW, Yue GX. Investigation on the oxygen-carrying performance and reaction kinetics of $CaMn_xFe_{1-x}O_{3-\delta}$ perovskites prepared from red mud. Fuel 2023;331:11.
[27] Njagi EC, Genuino HC, King'ondu CK, Dharmarathna S, Suib SL. Catalytic oxidation of ethylene at low temperatures using porous copper manganese oxides. Appl Catal A-Gen 2012;421:154-60.
[28] Zhao K, He F, Huang Z, Wei GQ, Zheng AQ, Li HB, et al. Perovskite-type $LaFe_{1-x}Mn_xO_3$ (x=0, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0) oxygen carriers for chemical-looping steam methane reforming: Oxidation activity and resistance to carbon formation. Korean J Chem Eng 2017;34(6):1651-60.
[29] Meshkani F, Rezaei M. Promoted Fe_2O_3-Al_2O_3-CuO Chromium-Free Catalysts for High-Temperature Water-Gas Shift Reaction. Chem Eng Technol 2015;38(8):1380-6.
[30] Cherkezova-Zheleva ZP, Zaharieva KL, Ivanov IB, Idakiev VD, Mitov IG. Synthesis of Improved Catalytic Materials for High-Temperature Water-gas Shift Reaction. Croat Chem Acta 2015;88(4):475-80.
[31] Kucharczyk B, Okal J, Tylus W, Winiarski J, Szczygiel B. The effect of the calcination temperature of $LaFeO_3$ precursors on the properties and catalytic activity of perovskite in methane oxidation. Ceram Int 2019;45(2):2779-88.

报告人/墙报展示人简介：

安泽文，男，1992 年生，汉族，在读博士研究生，研究方向为固体废弃物资源化利用。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是学生。

碳中性能源战略：基于生物质的氢气生产及其对温室气体减排的贡献

俞泽涛[1]，张增刚[1,*]

[1] 山东建筑大学，山东 济南，250101

[1,*]山东建筑大学，山东 济南，250101

*Email：1797501318@qq.com

利用生物质作为碳源有助于减少温室气体排放，因为生物质在其生长过程中吸收二氧化碳。当农业、涉农工业和林业的残留物被用作原料时，它不仅增强了循环性，而且加强了生物经济，为化石燃料经济提供了一种可行的替代方案[1]。此外，化石燃料能源价格的不稳定性、当地能源的稀缺性以及它们在欧洲各地的不均匀分布凸显了对替代能源的巨大需求[2]。然而，纤维素、半纤维素和木质素中最丰富的元素是氢，它可以通过利用生物质的焓含量还原为H_2。与电解从水中分离氢气相比，氢与碳原子结合所需的能量更少。这提高了利用生物质或生物质衍生原料生产氢气过程的效率，因为它构成了更节能的途径。通过计算本研究中作为原料的榛子壳的成分和性质，得到还原式$CH_{1.58}O_{0.59}$，对应于每1kg干壳可提取66gH_2[3]。这一过程还会产生气态H_2，其中含有44%的原料低热值(LHV)。在实际应用中，二氧化碳中的碳完全氧化可以为从水中还原氢提供能量，例如通过蒸汽气化。一般来说，生物基原料蒸汽气化产氢率比空气气化高3-5倍，并且产生的副产物较少[4]。因此，生物质蒸汽气化被认为是制氢的最佳方法[5]。生物质制氢效率高达69%。生物质可以经过各种热化学过程来生产生物中间体和纯氢，包括热解、液化和气化。这些技术越来越被视为与电解一道可行的选择。

关键词：生物质制氢；温室气体减排；蒸汽气化技术

参考文献

[1] A. Jain, S. Sarsaiya, M.K. Awasthi, R. Singh, R. Rajput, U.C. Mishra, …, J. Shi
Bioenergy and bio-products from bio-waste and its associated modern circular economy: current research trends, challenges, and future outlooks.Fuel, 307 (2022), Article 121859.

[2] G. Chen, I.A. Jamro, S.R. Samo, T. Wenga, H.A. Baloch, B. Yan, W. Ma Hydrogen-rich syngas production from municipal solid waste gasification through the application of central composite design: an optimization study
Int J Hydrogen Energy, 45 (58) (2020), pp. 33260-33273.

[3] N. Cerone, F. Zimbardi Gasification of Agroresidues for syngas production Energies, 11 (5) (2018), p. 1280.

[4] S. Piazzi, L. Menin, D. Antolini, F. Patuzzi, M. Baratieri Potential to retrofit existing small-scale gasifiers through steam gasification of biomass residues for hydrogen and biofuels production Int J Hydrogen Energy, 46 (13) (2021), pp. 8972-8985.

[5] Y. Hu, Q. Cheng, Y. Wang, P. Guo, Z. Wang, H. Liu, A. Akbari Investigation of biomass gasification potential in syngas production: characteristics of dried biomass gasification using steam as the gasification agent.Energy Fuel, 34 (1) (2019), pp. 1033-1040.

报告人/墙报展示人简介：

俞泽涛（2000 年），女，山东德州，汉族，学生，山东建筑大学 23 级人工环境工程专业硕士研究生，山东省济南市历城区凤鸣路 1000 号山东建筑大学热能工程学院，邮编：250101，手机号：15634132058，邮箱：1797501318@qq.com

异质结构纳米片 Co-Ni_3S_2-Cu/NF 电催化 5-羟甲基糠醛(HMF)生成 2,5-呋喃二甲酸(FDCA)

王娜[#1] 王陇豫[#2] 杨索和[1] 何广湘[1] 靳海波[*1]

1.北京石油化工学院 2.中国石油大学

jinhaibo@bipt.edu.cn

化石燃料的不可再生及其所造成的环境污染已经成为全球所要面临的重大难题[1-2]。因此，将清洁和可再生的生物质能源转化为高附加值的精细化学品和生物燃料至关重要[3]。5-羟甲基糠醛（HMF）被认为是最有前景的生物质衍生平台化合物之一[4-5]，在生产高附加值的化工产品领域具有广泛的应用前景。2，5-呋喃二甲酸（FDCA）作为 HMF 选择性氧化产物之一，是一种对于环境友好地高附加值生物质产品，它可以替代对苯二甲酸用于制备可降解无毒的生物基聚合物，能够减轻聚酯工业对于石油资源的依赖[6-7]。

本研究以自支撑导电材料泡沫镍为基底，利用简单的水热和电沉积技术，制备出 Co-Ni3S2-Cu/NF 异质结构纳米片电催化剂，同时考察了其在 5-羟甲基糠醛电催化氧化反应（HMFOR）中的催化性能，结果发现该催化材料对 HMFOR 具有较好的催化活性，在 1.45V vs.RHE 电位下，5-羟甲基糠醛(HMF)转化率、2,5-呋喃二甲酸(FDCA)收率和法拉第效率都接近 100%，并且在 6 次循环电解实验中，Co-Ni3S2-Cu/NF 依然保持良好的催化稳定性。此外，采用一系列电化学测试对 Co-Ni3S2-Cu/NF 的电催化活性进行考察，结果表明 Co-Ni3S2-Cu/NF 异质结构的形成不仅阻碍了 OH*脱质子为 O*，抑制析氧反应过程，同时增大了 HMFOR 过程的电流密度，增强了电子的导电性，进而为 HMFOR 提供了大量的电催化活性位点，提高了 HMFOR 反应的催化活性。XPS 和接触角测试结果表明界面电荷在 Co-Ni3S2-Cu/NF 界面重新分布有利于电子转移和底物吸附同时抑制析氧反应，从而提高催化活性。进一步使用原位阻抗表征技术探究了活性-电位-活性的关系，结果表明 Co-Ni3S2-Cu/NF 异质结构的形成能够加速 HMFOR 的反应动力学。同时利用原位红外表征技术揭示了 HMF 电氧化的反应路径为：HMF→HMFCA→FFCA→FDCA。本研究为开发具备卓越 HMFOR 性能的新型异质界面催化剂提供一条新的途径。

关键词：异质结构；原位红外；HMF；FDCA；抑制析氧反应；

参考文献

[1]Sun Y, Wang J, Qi Y, Li W, Wang C. Efficient Electrooxidation of 5-Hydroxymethylfurfural Using Co-Doped Ni_3S_2 Catalyst: Promising for H_2 Production under Industrial-Level Current Density. Adv Sci (Weinh). 2022 Jun;9(17):e2200957.

[2]G. Zhao, G. Hai, P. Zhou, Z. Liu, Y. Zhang, B. Peng, W. Xia, X. Huang, G. Wang, Electrochemical Oxidation of 5-Hydroxymethylfurfural on CeO_2-Modified Co_3O_4 with Regulated Intermediate Adsorption and Promoted Charge Transfer. *Adv. Funct. Mater.* 2023, 33, 2213170.

[3]Wu T, Xu Z, Wang X, et al. Surface-confined self-reconstruction to sulfate-terminated ultrathin layers on NiMo3S4 toward biomass molecule electro-oxidation[J]. Applied Catalysis B: Environmental, 2023, 323: 122126.

[4]Wang L, Jin H, Liu Z, et al. Investigation on the preparation of 5-Hydroxymethylfurfural through fructose dehydration using in-line FTIR and in-situ 13C NMR[J]. Journal of Catalysis, 2024, 432: 115450.

[5]Qi Y F, Wang K Y, Zhou Y, et al. Effects of different vacancies in nickel hydroxides on the electrooxidation towards 5-hydroxymethylfurfural[J]. Chemical Engineering Journal, 2023, 477: 146917.

[6]Liu J, Tao S. Laser Promoting Oxygen Vacancies Generation in Alloy via Mo for HMF Electrochemical Oxidation[J].

Advanced Science, 2023, 10(27): 2302641.

[7]Zhang Z, Deng K. Recent advances in the catalytic synthesis of 2, 5-furandicarboxylic acid and its derivatives[J]. Acs Catalysis, 2015, 5(11): 6529-6544.

墙报展示人简介：

姓名：王娜；学校：北京石油化工学院；研究方向：主要是做生物质转化，电催化 5-羟甲基糠醛生成呋喃二甲酸

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是学生：

铁磁性核壳结构催化烯烃氢甲酰化反应研究

陈倩倩，孙功成，范素兵*，吕俊敏

（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，宁夏银川，750021）

Email:fansb@nxu.edu.cn;19810824635@163.com

电话：19810824635

氢甲酰化反应生成的醛产物应用广泛，可以作为醇、羧酸以及胺等高值化学品生产的中间体，是工业应用中最大的均相反应之一，而 Rh 基均相催化剂分离难的问题带来了额外的反应成本，因此发展高效、稳定、易回收的非均相 Rh 基催化剂对工业化发展具有重要意义。核壳结构催化剂能够有效解决这一问题，其核心材料和壳层材料具有不同的性质和功能，结合包覆结构形成的限域效应，使得核壳结构催化剂表现出优异的协同作用和新特性，二氧化硅作为包覆材料能增强粒子在各种溶剂中的稳定性，防止其团聚。本研究利用 $RhCl_3·3H_2O$ 活性金属盐为原料，通过浸渍法合成了一种磁性核壳结构催化剂 Fe_3O_4/Rh，对磁性纳米粒子进行改性，使表面能够负载更多的活性金属，且纳米级别的载体在溶液中能够均匀分散，以提高整体的反应活性。此外，为了解决活性金属流失问题，在 Fe_3O_4/Rh 催化剂外表面进行硅包覆处理，使其更加稳定和易于回收。

关键词：核壳结构；磁性纳米粒子；SiO_2 包覆；氢甲酰化；催化剂

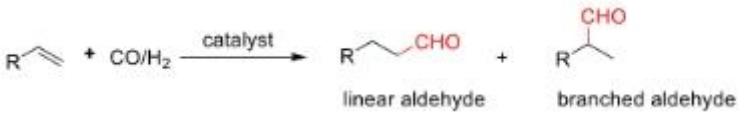


图 1.氢甲酰化反应途径

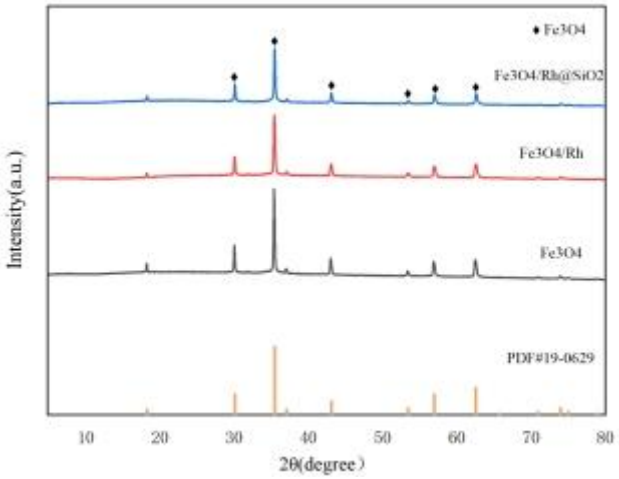


图 2.样品的 XRD 谱图

质子交换膜燃料电池膜电极结构设计及优化

郭成，周鹰杰，杨佳佳，姜海波*，李春忠*

华东理工大学材料科学与工程学院-上海多级结构纳米材料工程技术研究中心，上海市徐汇区梅陇路 130 号，200237

*jianghaibo@ecust.edu.cn

燃料电池是一种把燃料所具有的化学能直接转换成电能的化学装置，它通过电化学反应把燃料的化学能中的吉布斯自由能部分转换成电能，不受卡诺循环效应的限制，因此效率高。膜电极作为电池的核心部件，直接决定电池的性能。传统膜电极内部电荷传输、质量传输无序，造成铂催化剂利用率低、大电流下扩散极化严重等问题。本文通过简易的模板压印法、模板喷涂法在催化层表面构筑了相对宏观尺度上（>100 μm）的三维有序结构，实现了高电流密度下氧气和水的有序传输，有效降低了扩散极化的影响。具体内容如下：

（1）以尼龙筛网为压印模板，在催化层表面构筑了规则的沟槽结构。当沟槽面积占比适中（30 %~70 %）、沟槽深度约为8 μm时，电池的峰功率密度由630 mW cm^{-2}提升至705 mW cm^{-2}。加速老化测试结果证明模压后的膜电极寿命与未处理膜电极相当，催化剂的衰减速度较未处理膜电极更慢。该结构有利于水氧传输路径的分离。

（2）以镂空聚四氟乙烯薄膜为模板，利用气动喷涂法向催化层表面喷涂浆料，构筑有序的凸起阵列结构。结果表明，在膜电极催化剂载量相同的前提下，三维有序催化层较平整催化层性能更佳；当喷涂浆料中含疏水剂时，催化层表面构筑的有序亲疏水结构提高了质量传输效率，电池峰功率密度提升15 %，达830 mW cm^{-2}。

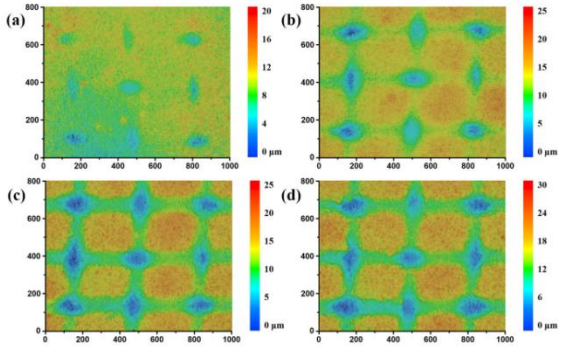


Fig. 1 Laser scanning confocal microscope photograph of CCMs imprinted with a pressure of (a)2 MPa, (b) 4 MPa, (c) 6 MPa, (d) 8 MPa

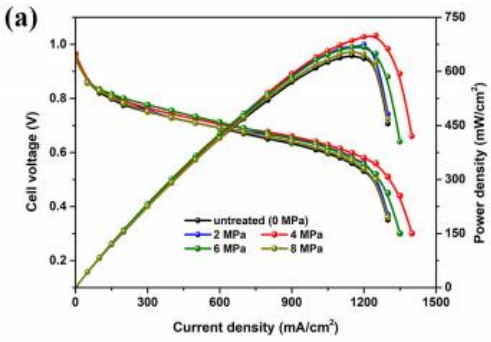


Fig. 2 Electrochemical performance of CCMs patterned with different pressures: (a) i-V & i-P curve

关键词：质子交换膜燃料电池；有序催化层；质量传输；水管理

参考文献

[1] A. Omosebi, R. S. Besser. Electron beam patterned Nafion membranes for DMFC applications. Journal of Power Sources[J]. 2013, 228: 151-158.

[2] M. H. Yildirim, J. T. Braake, H. C. Aran, D. F. Stamatialis, M. Wessling. Micro-patterned Nafion membranes for direct methanol fuel cell applications. Journal of Membrane Science[J]. 2010, 349(1-2): 231-236.

微孔层结构优化及其对燃料电池性能影响机制

王瑞欣，张文会，陈爱平，姜海波*

华东理工大学材料科学与工程学院，上海多级结构纳米材料工程技术研究中心，上海市徐汇区梅陇路 130 号，200237

* jianghaibo@ecust.edu.cn

质子交换膜燃料电池具有能量转换效率高、能量密度高和清洁无污染等优点，在构建未来社会再生能源结构具有重要意义。在气体扩散层（GDL）中，氢气和氧气以及加湿的水蒸气与反应生成的水是逆向传输的过程，容易造成水淹，导致电池效率大幅度下降。因此探究 GDL 中的气液传输机制并提出有效的水管理方法十分重要。本文主要研究了通过喷涂控温技术，制备微孔层裂纹结构，然后通过电子显微镜观察微孔层结构和裂纹分布，通过极化曲线和电化学阻抗谱的测试，研究裂纹结构对于燃料电池性能的影响。实验数据显示，在背压为 50 kPa 时，裂纹对质量传递影响较小。在无背压时，单电池的极限电流密度从 1000 mA/cm^2 增加至 1300 mA/cm^2，峰功率密度变化不明显。随着压力的减小，单电池的欧姆阻抗增加，同时也可以看出，在没有背压时的欧姆极化区域的性能低于背压为 50 kPa 的性能。裂纹的存在增加了扩散极化性能，但一定程度上减小了微孔层表面的粗糙度，增加了催化层与微孔层的接触阻抗，增加了欧姆阻抗。综合几条极化曲线可以得出结论：微孔层裂纹或凹槽的存在有效的提高了燃料电池的质量传输效率，有利于大电流密度下的扩散传输。

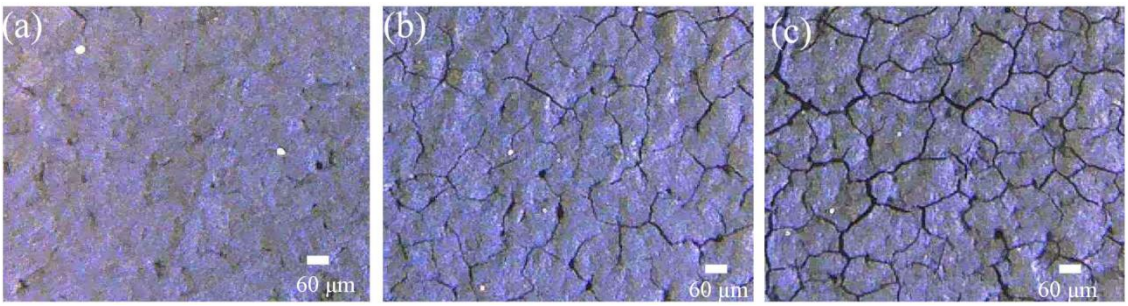


Fig.1 Microscope photos of MPL surface: (a) no cracked MPL, (b) cracked MPL 1, (c) cracked MPL 2

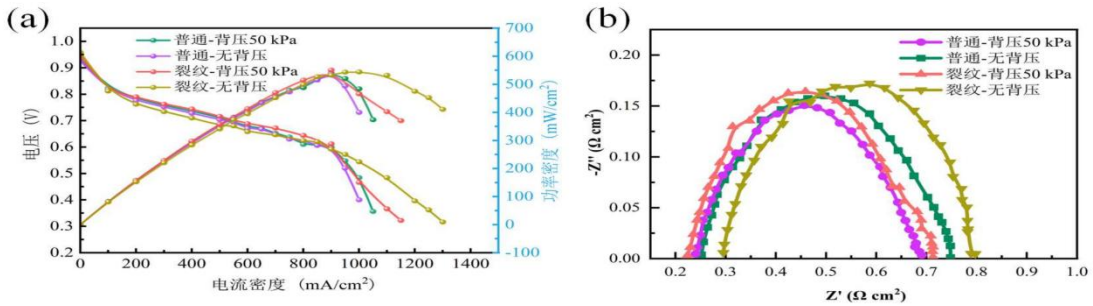


Fig.2 Fuel cell performance of crack GDL at different test pressures: (a) polarization curves (b)electrochemical impedance spectroscopy

关键词：燃料电池；气体扩散层；气液传输；微孔层结构

参考文献

[1] **C. S. Kong, D. Y. Kim, H. K. Lee, Y. G. Shul, T. H. Lee. Influence of pore-size distribution of diffusion layer on mass-transport problems of proton exchange membrane fuel cells. Journal of Power Sources. 2002, 108(1-2): 185-191.**

[2] **S. Basu, C.-Y. Wang, K. S. Chen. Phase change in a polymer electrolyte fuel cell. Journal of The Electrochemical Society. 2009, 156(6): B748-B756.**

金属基催化剂对麻风树油进行催化加氢处理制备生物柴油的研究进展

张夏庆[1]，何兰[2]，王迎迎[1]，魏伟杰[1]，曾玲玲[1]，高助威[1,*]

[1]海南大学化学化工学院，海南省海口市，570228

[2]海南大学食品科学与工程学院，海南省海口市，570228

*Email: gaozhuwei@hainanu.edu.cn

随着全球能源需求的不断增长以及对环境保护的日益重视，开发可再生的清洁能源成为当务之急。金属基催化剂催化加氢技术用于制备生物柴油，利用该类催化剂可将废弃油脂转化为高品质生物柴油，在生物柴油制备领域展现出巨大潜力。金属基催化剂搭配不同载体通过不同的脱氧途径在加氢脱氧过程起着关键作用并有效解决了能源短缺与环境污染问题。同时麻风树油油脂含量丰富是作为的不可食用的可再生柴油重要原料之一。以麻风树油为原料研究金属催化剂通过加氢脱氧(HDO) 提高生物油稳定性，对开发廉价绿色无污染且性能优越的催化剂有重要意义。本文首先介绍了常见的金属催化剂金属硫化物、金属氧化物、金属磷、贵金属、过度金属等。再介绍了麻风树油的特性以及催化加氢制备生物柴油的原理。讨论了催化剂的失活机制和再生方法。最后通过对比各类金属催化剂对麻风树油催化加氢选择性、使用寿命、工艺条件、脱氧效果、产率等综合讨论总结了这方面使用不同金属基催化剂的最新进展。本文在已有研究成果的基础上总结了研究现状并指出开发高效、低成本的金属基催化剂的未来发展趋势。为以麻风树油制备生物柴油的工业化应用提供理论支持和技术指导，以推动麻风树油催化加氢制备生物柴油技术的发展和应用。

PCM结晶监测系统在新能源（锂电）行业的应用简介

唐远旺[1]

[1]北京海菲尔格科技有限公司，北京，100022

*thomas.tang@hiferg.com

新能源汽车的蓬勃发展带动锂电产业进入前所未有的大发展机遇期。随着需求的升温，无论是技术的快速创新，还是应用的迅速落地，锂电产业全链条展开了多技术路线、多应用模式、多组合方式的快速发展与探索。

在“双碳”愿景的推动之下，未来中国动力电池市场仍将出现快速增长，锂电相关产业对经济发展的提振效应会进一步释放。六氟磷酸锂、双氟磺酰亚胺锂、碳酸乙烯酯等的结晶过程中的成核、控温、搅拌等工艺参数的不同对产品的粒度分布、堆积密度、溶解速率等都具有重大影响，进而影响产品的应用范围、成本控制、能耗评估、出售价格等。PCM 结晶监测系统能够实现对六氟磷酸锂、双氟磺酰亚胺锂、碳酸乙烯酯等的结晶过程的实时监控并可根据监控结果实时调整过程工艺。PCM 可以实时记录结晶过程中的颗粒图像并实时分析晶体的颗粒度，同时给出晶体颗粒数量、晶体径长比、晶体生长速率等数据。不管是研发规格的还是工业规格的 PCM 结晶监测系统，都避免了取样后进行离线测试的不便和误差，可以真实反映结晶过程中晶体的变化情况，包括晶核形成、晶核数量、晶体生长、二次成核监控、过程颗粒度监控等。PCM 结晶监测系统已经成为获得高质量晶体产品、快速实现定制指定颗粒度晶体产品的有效手段。

Fig 1. Process Crystallization Monitoring in R&D

Fig 2. Process Crystallization Monitoring in pipeline

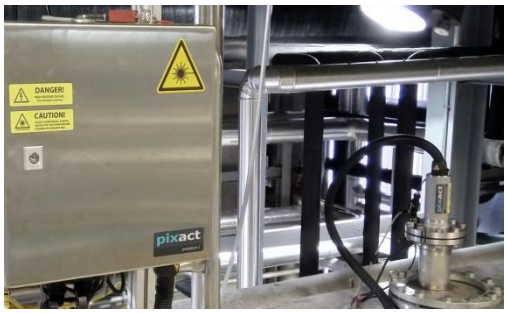
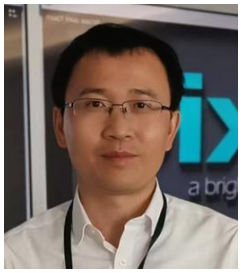


Fig 3. Process Crystallization Monitoring in large crystallizer

关键词：结晶监测；六氟磷酸锂；双氟磺酰亚胺锂；碳酸乙烯酯；晶体颗粒度

墙报展示人简介：



唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器行业的技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

附：墙报展示人非学生

第 8 分会场：面向未来的能源催化颗粒

分会场主题报告

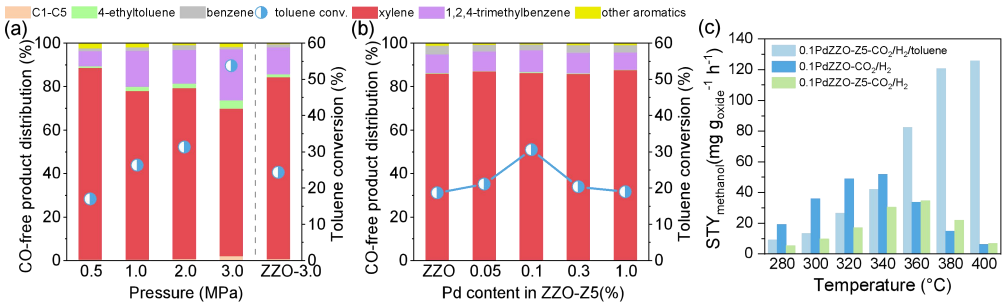
CO_2加氢耦合芳烃烷基化双功能催化剂的创新与应用

洪碧绿，袁　凯，周　玟，袁友珠*

固体表面物理化学国家重点实验室，厦门大学化学化工学院，厦门，361005

*Email: yzyuan@xmu.edu.cn

摘要正文：CO_2被广泛认为是一种丰富且可持续的碳资源，将其转化为高附加值化学品是缓解CO_2过度排放导致气候变化的有效途径之一。高附加值芳烃（如对二甲苯和均四甲苯）在聚酯纤维和航空煤油添加剂等领域中有广泛应用，因此，开发高选择性制备此类化学品的方法成为近年来的研究热点。本课题组率先提出以CO_2为碳源，通过CO_2加氢耦合甲苯烷基化反应制备高附加值芳烃[1]。该方法的二甲苯选择性高达92.4%，其中对二甲苯的占比达到70.8%。然而，CO_2加氢反应通常需要在高压下进行，若能使用低压绿氢，不仅可以降低储存和运输成本，还能显著提高经济效益。因此，探索在低压条件下有效实现CO_2加氢与芳烃烷基化耦合的双功能催化剂创新设计，显得尤为重要。为此，我们在传统$ZnZrO_x$–HZSM-5双功能催化剂（标记为ZZO–Z5）中加入贵金属Pd作为助剂，以提高催化剂的加氢能力，并将其应用于低压CO_2加氢耦合甲苯烷基化制对二甲苯的反应。研究结果显示，在0.5 MPa低压和360 ℃反应条件下，PdZZO–Z5中少量Pd物种即可达到ZZO–Z5在3.0 MPa下的甲苯转化率（见Fig. 1a和Fig. 1b）。此外，通过比较不同反应路径中的甲醇理论收率（见Fig 1c），进一步证明低压下CO_2加氢耦合芳烃烷基化反应的可行性。同时，我们也将这一策略应用到CO_2加氢耦合三甲基苯烷基化制均四甲苯的反应中[2]。Fig. 1d显示，通过在ZZO中引入Cu助剂，CuZZO–Z5在0.5 MPa下的均四甲苯收率与ZZO–Z5在2.0–3.0 MPa下的收率相当，且该催化剂在1100 h的稳定性测试中表现出优异的稳定性。综上可知，通过合理设计双功能催化剂，可有效实现低压CO_2加氢与芳烃烷基化的耦合，推动其在该耦合反应中的应用。



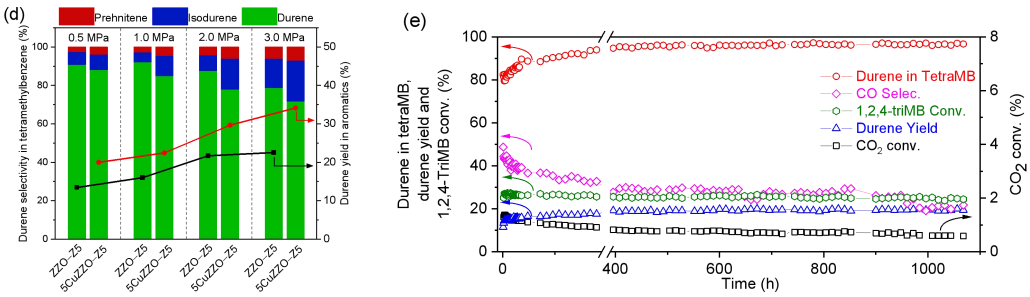


Fig. 1 (a-c) toluene methylation with CO_2/H_2 to *para*-xylene over PdZZO–Z5, (d-e) trimethylbenzene upgrade to durene by CO_2-mediated methylation over CuZZO–Z5.

关键词：CO_2加氢；烷基化；芳烃；双功能催化剂；绿氢

参考文献

[1] J. Zuo, W. Chen, J. Liu, X. Duan, L. Ye, Y. Yuan Selective methylation of toluene using CO_2 and H_2 to *para*-xylene. *Sci. Adv.* 2020, 6: eaba5433.

[2] Y. Lai, B. Hong, W. Zhou, D. Wen, Y. Xie, F. Luo, L. Ye, J. Zuo, Y. Yuan Upgrading trimethylbenzene to durene by CO_2-mediated methylation over Cu-boosted $ZnZrO_x$ integrated with HZSM-5. *ACS Catal.* 2024, 14: 11780–11793.

报告人简介：

袁友珠，厦门大学特聘教授/博士生导师，醇醚酯化工清洁生产国家工程实验室（厦门大学）主任。受聘担任中国化学会催化委员会和均相催化委员会委员，“催化学报”、“洁净煤利用”、“无机盐工业”和“Carbon Future”等杂志编辑；主要研究方向为用于碳基高值化学品合成催化剂制备与构效关联，在选择性加氢、合成气制乙二醇/低碳醇、生物木质素和 CO_2 高值转化利用等方面，主持完成国家基金重点/面上项目，科技部 973/863 和国家重点研发计划项目课题等 30 余项，在 Science，Sci. Adv.，Nat. Commun.，ACS Catal.和 J. Catal.等国内外期刊发表 200 余篇论文，H 因子 50，获授权发明专利 30 余件。获中国高校自然科学二等奖、教育部优秀骨干教师、福建省百千万人才工程、省和市高层次人才 A 类、厦门市拔尖人才和优秀教师等；合作成果“温和压力条件下实现乙二醇合成”入选 2022 年度中国科学十大进展。

能源化学过程单分子单粒子水平研究

徐维林*

工作单位：中国科学院长春应用化学研究所

*邮箱地址weilinxu@ciac.ac.cn

在本报告中，报告人介绍其研究团队在能源化学过程相关的基础与应用两方面的最新研究进展，主要是在单分子单粒子水平展开。在基础研究方面， 主要介绍在单分子水平的纳米催化研究中揭示的一系列用常规催化方法无法获得的全新催化信息， 包括单纳米粒子水平的催化动力学信息和热力学信息，比如表面不同类型原子的催化特性以及单纳米粒子表面活性模式时空上的动态变化等；在应用研究方面，主要介绍为氢电能量转换器件如燃料电池、水电解等开发的几种高性能、低成本的高性能低/非贵金属基催化剂的新型单原子催化剂材料。以上这些工作将有助于实现高效催化材料的理性设计和制备。

PEMFCs 阴极催化剂碳载体

梁海伟*

中国科学技术大学，安徽 合肥 230026

*Email: hwlinag@ustc.edu.cn

摘要正文：质子交换膜燃料电池（PEMFCs）技术大规模推向市场的瓶颈之一是PEMFCs电堆的高昂造价。PEMFCs电堆量产后，催化剂成本占据比例将达到40%以上，这是因为在阴极需要使用大量的铂基催化剂催化氧气的还原反应（ORR）。因此，PEMFCs的研发目标之一是在不损失额定功率和寿命前提下，大幅降低阴极铂用量。本报告将围绕铂基ORR催化剂，着重讨论如下几方面内容：1）PEMFCs的基本原理和电压损失分析；2）阴极催化剂尤其是碳载体对活化极化和传质极化的影响；3）丰田Mirai燃料电池汽车阴极催化剂树枝状介孔碳载体MCND的研发历程；4）本课题组有关介孔碳载体的一点初步结果，包括孔深度对活性和传质的影响。

关键词：PEMFCs；催化剂；碳载体；传质

报告人/墙报展示人简介：

梁海伟，中国科学技术大学化学系/合肥微尺度物质科学国家研究中心教授、博士生导师，国家杰出青年基金获得者。2006 年 7 月获华东师范大学化学专业学士学位，2011 年 6 月获中国科学技术大学博士学位，2012 年 5 月赴德国美因茨马普高分子研究所从事博士后研究，2016 年 1 月入职中国科学技术大学并担任 PI。迄今为止共计在 *Science* 等期刊上发表学术论文 100 余篇，论文共被引用 2 万余次。研究方向聚焦质子交换膜燃料电池阴极催化剂。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

高电压快充钴酸锂的超界面化学与性能调控

吴忠帅 [1,*]

[1] 中国科学院大连化学物理研究所，辽宁省大连市沙河口区中山路 457 号，116023

*Email: wuzs@dicp.ac.cn

摘要正文：

$LiCoO_2$ (LCO)是消费类电子产品中锂离子电池的主要正极材料。然而，高电压下不稳定的表界面结构和不利的电子/离子传导性严重阻碍了其高压快充特性的应用。针对这些挑战，报告人将主要介绍通过表界面梯度氟化策略、杂化离子/电子界面调控策略等方式，以及开发具有普适性的新型“鸡尾酒电解液”，进行超界面化学与性能调控，有效缓解了电极表界面结构降解和界面副反应，并加速界面反应动力学，有效提高了钴酸锂材料超高压下高倍率能力和稳定快充长循环性能。

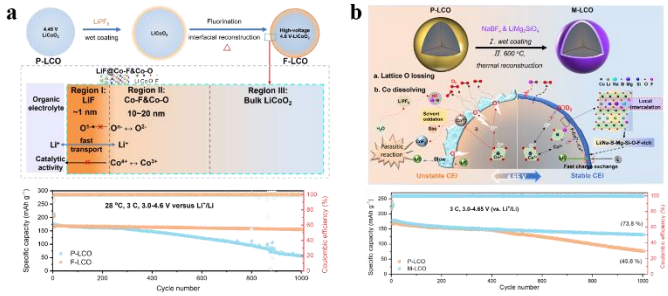


Fig. 1 (a) Trace fluorination reconstructed interface engineering for high-voltage fast charging 4.6 V $LiCoO_2$. (b) Hybrid ion/electron interfacial regulation stabilizes the cobalt/oxygen redox of ultrahigh-voltage 4.65 V $LiCoO_2$ for fast-charging cyclability

关键词：锂离子电池；高压快充；钴酸锂；界面化学

参考文献

[1] Z. Bi, Z. Yi, S. Feng, L. Zhang, G. Wang, A. Zhang, S. Liao, Q. Zhao, Z. Peng, L. Song, Y. Wang, Z. Zhao, S. Wei, W. Zhao, X. Shi, M. Li, N. Ta, J. Mi, S. Li, P. Das, Y. Cui, C. Chen, F. Pan and Z. S. Wu, Ultrathin dense LiF coverage coupled with a nearsurface gradient fluorination lattice enables fastcharging long-life 4.6 V $LiCoO_2$, *Energy Environ. Sci.* 2024, 17: 2765–2775.

[2] A. Zhang, Z. Bi, G. Wang, S. Liao, P. Das, H. Lin, M. Li, Y. Yu, X. Feng, X. Bao and Z. S. Wu, Regulating electrode/electrolyte interfacial chemistry enables 4.6 V ultra-stable fast charging of commercial $LiCoO_2$, *Energy Environ. Sci.* 2024, 17: 3021–3031

[3] Z. Bi, A. Zhang, G. Wang, C. Dong, P. Das, X. Shi and Z. S. Wu, Hybrid ion/electron interfacial regulation stabilizes the cobalt/oxygen redox of ultrahigh-voltage lithium cobalt oxide for fast-charging cyclability, *Sci. Bull.* 2024, 69: 2071-2079.

报告人/墙报展示人简介：

吴忠帅，中国科学院大连化学物理研究所研究员、二维材料化学与能源应用研究组组长、博士生导师、国家杰出青年科学基金获得者、英国皇家化学会会士、中组部引进海外高层次青年人才。主要从事二维材料化学与能源应用基础研究工作，包括微型储能器件、超级电容器、电池和能源催化。已在 *Energy Environ. Sci.*、*Nat. Commun.*、*J. Am. Chem. Soc*.等杂志发表学术论文 300 余篇，其中 IF>10 的论文 220 余篇，被 SCI 引用 41000 余次；50 余篇论文入选 ESI 高被引论文；获 2018-2023 年科睿唯安全球高被引科学家、国家自然科学奖二等奖、辽宁省科学技术奖励一等奖两次、中科院百人计划终期评估优秀等奖项/荣誉。担任 Appl. Surf. Sci.副主编、Natl. Sci. Rev.编委、Sci Bull.编委、J. Energy Chem.执行编委、Energy Storage Mater.客座编辑和国际编委等多项学术任职。承担科技部、中组部、基金委、中科院等 30 余个科研项目。

缺陷水滑石基纳米光催化材料

张铁锐*

中国科学院理化技术研究所，北京，100190

*Email: tierui@mail.ipc.ac.cn

摘要正文：光催化技术可直接利用太阳能驱动一系列重要的化学反应，具有能耗低、反应条件温和、无二次污染等优点，备受科研人员的关注。绿色光催化技术实用化的关键之一是发展低成本、高效的光催化材料。水滑石基纳米材料因组成结构易于调控、制备简便等优点而备受关注。近年，我们课题组通过在水滑石表面创造缺陷位的手段，分别实现了对反应物CO_2、N_2等吸附和活化的增强，进而提升了光催化CO_2和N_2加氢反应的催化活性。[1-10]。

关键词：光催化；水滑石；缺陷

参考文献

[1] Zhang T, et al. Nat. Commun. 2023, 14, 1909.

[2] Zhang T, et al. Adv. Mater. 2022, 34, 2207793.

[3] Zhang T, et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202211469.

[4] Zhang T, et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 21896.

[5] Zhang T, et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 2554.

[6] Zhang T, et al. Adv. Energy Mater. 2020, 10, 2002199.

[7] Zhang T, et al. Chem. Soc. Rev. 2019, 48, 1375.

[8] Zhang T, et al. Adv. Mater. 2019, 31, 1806482.

[9] Zhang T, et al. Adv. Mater. 2018, 30, 1704663.

[10] Zhang T, et al. Adv. Mater. 2018, 30, 18031.

报告人简介：

张铁锐，2003 年在吉林大学化学系取得博士学位。现为中国科学院理化技术研究所研究员、博士生导师。中国科学院光化学转换与功能材料重点实验室主任。中国化学会会士、英国皇家化学会会士。担任国家基金委“杰出青年基金”、创新群体项目、重点项目、国际合作重点项目负责人，国家重点研发计划重点专项项目首席科学家，英国皇家学会高级牛顿学者项目负责人。兼任 Science Bulletin 等期刊副主编。主要从事能量转换纳米催化材料方面的研究，在 Nat. Catal.等期刊上发表 SCI 论文 360 余篇，H 指数 114，入选 2018-2023 科睿唯安“全球高被引科学家”榜单。

金属氧化物催化 CO2 氧化烷烃脱氢制烯烃的研究

刘忠文

[1] 陕西师范大学，化学化工学院，西安，710119

*Email: zwliu@snnu.edu.cn

阴离子交换膜燃料电池催化基础探讨

胡劲松*

中国科学院化学研究所 北京 100190

* E-mail: hujs@iccas.ac.cn

报告摘要

碳中和愿景下氢能将成为未来终端能源的重要组成部分。燃料电池是清洁、高效利用氢能的重要途径之一，也是实现交通运输行业零碳化的重要技术。阴离子交换膜燃料电池（AEMFC）具有不依赖贵金属、催化剂与组件成本低、氧还原反应动力学快、水管理简化等诸多优点，但其应用瓶颈之一是仍缺乏高活性、长寿命的催化剂。本报告将着重探讨AEMFC催化剂开发与催化层构筑方面目前仍面临的挑战与难题，结合报告人在燃料电池催化剂基础研究领域的实例，探讨低成本、高性能非贵金属AEMFC电催化剂的设计与可控构筑，以及AEMFC催化层与膜电极性能提升目前仍存在的挑战与可能的发展机遇。

关键词：氢能，燃料电池，电催化，双碳目标

报告人介绍：

胡劲松，中科院化学所二级研究员，中国科学院大学岗位教授，国家杰出青年基金获得者，国家重点研发计划“氢能技术”重点专项项目负责人。主要从事氢能非贵金属电催化材料与器件的研究。发表论文 200 余篇， 引用 38000 余次，H 因子 94。曾获中国化学会青年化学奖、中国电化学会青年奖、Nano Research NR45 Awards 等奖励并多次入选科睿唯安全球高被引科学家。担任 Natl. Sci. Rev. 编辑工作组成员，催化学报、物理化学学报、Mater. Future、Nano Mater. Sci.、Smart Molecules 等杂志编委。

分会场邀请报告

碳包覆Ni/NiO$_x$光热助催化剂用于增强光催化制氢

杨志，刘羽芬，杨思源，方岳平，张声森*

华南农业大学材料与能源学院，生物基材料与能源教育部重点实验室，广东 广州 510642

* E-mail: zhangss@scau.edu.cn

摘要：高密度和紧密排列的受挫路易斯对（FLPs）的开发对于提高催化剂活性和加速反应速率至关重要。然而，构建高效的FLPs通过打破经典的路易斯键是一个巨大挑战。在这项研究中，我们在碳包覆含镍/氧化镍（Ni/NiOx@C）晶界形成过程中发现了Jahn-Teller效应。该效应促进了不同电荷极性的高密度氧（V_O）和镍（V_{Ni}）空位位点的形成，特别是FLP-V_O-C基本位点和FLP-V_{Ni}-C酸性位点。FLP-VO-C和FLP-V_{Ni}-C位点之间协同作用降低了水分子吸附和分解能势垒，并诱导出强烈光热效应。这种相互促进作用使得Ni/NiO$_x$@C成为一种优秀的光热辅助光催化制氢助催化剂。值得注意的是，Ni/NiO$_x$@C/g-C_3N_4 (NOCC)复合光催化剂在制氢方面表现出显著活性，产氢速率达到10.7 mmol g^{-1} h^{-1}，比纳米Pt助催化剂活性提高了1.76倍。此外，在波长为380 nm时NOCC实现了令人印象深刻的表观量子产率40.78%。这项工作为设计具有高密度和相邻FLP位点缺陷态多相助催化剂铺平了道路，并有望提高催化反应效率。

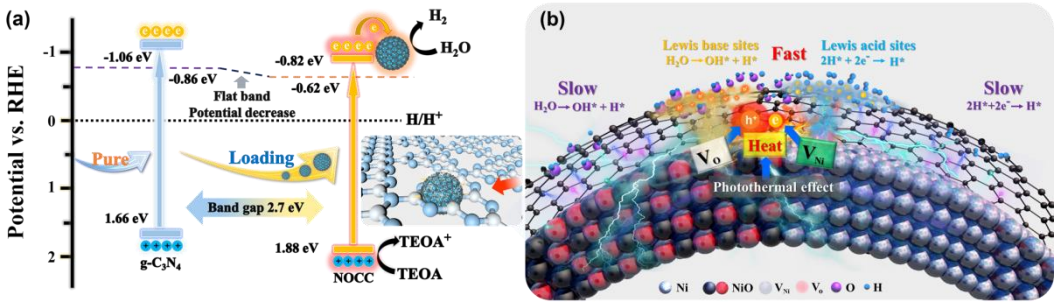


Fig. 1 Schematic diagrams of a) the band alignment and electron transfer in g-C_3N_4 and NOCC, and b) photothermal-assisted photocatalytic hydrogen evolution with frustrated Lewis pairs (FLPs) over Ni/NiO$_x$@C cocatalysts.

关键词：光催化析氢；g-C_3N_4；受挫路易斯酸碱对；Ni/NiO$_x$@C；光热助催化剂

参考文献

[1] Z. Yang, T. Huang, M. Li, X. Wang, X. Zhou, S. Yang, Q.i Gao, X. Cai, Y. Liu, Y. Fang, Y. Wang, S. Zhang, S. Zhang Unveiling the Synergistic Role of Frustrated Lewis Pairs in Carbon-Encapsulated Ni/NiOx Photothermal Cocatalyst for Enhanced Photocatalytic Hydrogen Production. *Adv. Mater.*, 2024, 36: 2313513

[2] Z. Yang, M. Li, S. Chen, S. Yang, F. Peng, J. Liao, Y. Fang, S. Zhang, S. Zhang Cocatalyst engineering with robust tunable carbon-encapsulated Mo-rich Mo/Mo_2C heterostructure nanoparticle for efficient photocatalytic hydrogen evolution, *Adv. Funct. Mater.*, 2023, 33: 2212746

[3] S. Chen, Z. Yang, J. Chen, J. Liao, S. Yang, F. Peng, L.-X. Ding, G. Yang, S. Zhang, Y. Fang, Electron-rich interface of Cu-Co heterostructure nanoparticle as a cocatalyst for enhancing photocatalytic hydrogen evolution, *Chem. Eng. J.*, 2022, 434: 134673

报告人/墙报展示人简介：

张声森，博士，教授。2010 年 10 月-2012 年 11 月，澳大利亚格里菲斯大学联合培养博士生；2012 年博士毕业于华南理工大学工业催化专业。2014 年进入华南农业大学从事教学科研工作。近年来主要在新型光催化材料的设计、制备及其在环境污染治理、环境监测和能源转换等方面的应用研究；相关研究取得了一系列的成果，目前已授权的国家发明专利 12 项，公开发表 SCI 学术论文 120 余篇，其中以第一作者或通讯作者署名在国际著名期刊 Adv. Mater.、Adv. Funct. Mater.、Appl. Catal. B.、Chem. Eng. J.、J. Energy Chem. 等发表的论文 50 余篇。先后主持的国家自然科学基金面上项目、广东省自然科学基金等 12 项科研项目。**附：请在此处注明报告人/墙报展示人是教师：张声森**

高活性ZnO/BiOBr基异质结光催化剂的制备与性能研究

税安泽*，蔡梅，俞呼雷，何超

华南理工大学材料科学与工程学院，广州五山，510641

*Email: shuianze@scut.edu.cn

摘要正文：光催化技术具有高效、简单、易处理等优点，在污染物降解、水分解制氢领域应用前景广阔，但是单一的光催化剂存在光生电子-空穴对复合严重和利用率低等问题。因此，如何提高光催化剂光生电子-空穴对的分离效率，增强光催化性能，以获得高活性、低成本的光催化剂是光催化领域的研究关键。鉴于单组份光催化剂难以解决上述问题，结合两种或多种光催化材料的光吸收特性及协同效应来构建异质结光催化剂已成为提高催化活性的有效策略。通过构建分级结构异质结，调控光催化剂的微观结构，可以加速光生电子-空穴对的有效分离、提高催化剂对光的吸收、增加活性位点的数量、加快反应物分子的扩散，从而显著提高光催化性能。然而，针对异质结光催化剂的相关研究目前主要集中在ZnO和BiOBr的简单复合，对分级结构ZnO和BiOBr基异质结光催化剂的报道少，且相关机理也没有详细研究。因此，本研究以超声化学法制备的ZnO和溶剂热法制备的BiOBr为基体，通过微观形貌的调控和多孔结构的优化，制备光催化降解效率和光催化制氢能力优异的分级结构ZnO和BiOBr基异质结光催化剂，并探讨相关的性能与机理，为低成本构建高活性异质结光催化剂提供一种新思路。

关键词：分级结构异质结；光催化；污染物降解；制氢

参考文献

[1] **Cai M, Du B, Shui A, et al. Fabrication of Hierarchical Hollow BiOBr@ZnIn2S4 Heterojunction to Enhance the Visible-Light-Driven Photodegradation of Dyes[J]. Applied Surface Science, 2023, 612: 155807.**

[2] **Cai M, Shui A, Du B. Constructing the ZnO/BiOBr Hierarchical Heterojunction for Efficient Pollutant Photodegradation Driven by Visible-Light[J]. Surfaces and Interfaces, 2023, 37: 102643.**

[3] **Ahmadpour N, Sayadi M, Homaeigohar S. A Hierarchical Ca/TiO2/NH2-MIL-125 Nanocomposite Photocatalyst for Solar Visible Light Induced Photodegradation of Organic Dye Pollutants in Water[J]. RSC Advances, 2020, 10(50): 29808-29820.**

报告人简介：

税安泽教授，华南理工大学材料科学与工程学院副院长、材料科学与工程国家级实验教学示范中心主任。中国颗粒学会理事、中国硅酸盐学会特陶分会理事、中国硅酸盐学会陶瓷分会理事、中国硅酸盐学会测试分会理事、广东省日用工艺陶瓷标准化技术委员会副主任委员，《Journal of Advanced Ceramics》编委、《现代技术陶瓷》编委。主要研究方向为结构陶瓷、功能陶瓷、功能粉体、储能材料、光催化材料、固废资源化利用等。到目前为止，共发表学术论文 250 多篇，其中 SCI

收录论文 100 余篇。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

碳基金属电极的结构设计及催化水分解研究*

侯 阳

浙江大学，化学工程与生物工程学院，杭州，中国，310027

Email: yhou@zju.edu.cn

摘要：利用太阳/风能等间歇式能源产生的绿色电能催化分解水制氢被认为是一种未来最有前景的可持续能源转化制氢技术。但是，能量效率低是目前制约该技术实际应用的主要问题。能量效率主要受限于电解水反应过程中缓慢的反应动力学和较大的过电位。因此，如何加快电解水反应速率以及降低电解反应过电势是亟待解决的关键科学问题。该项目针对这一问题展开了系统研究，率先提出了高能量效率转换过程中基于关键富碳非贵金属电极材料的结构设计原理，取得了系列创新性的研究成果：提出了微纳米有序结构设计强化电子高速输运的新思路，阐明了阵列有序结构促进电子定向传输的作用机制；提出了活性位微观结构调控提升本征催化活性的新方法，揭示了配位环境和能级结构调控活性位电子结构的作用原理；提出了异质结界面调变促进电解水反应动力学的新策略，建立了界面异质结与电解水反应动力学特性之间的相关关系，为构建新型高效电解水催化剂的设计和应用打下理论基础。

关键词：碳基金属，电解水，绿氢，催化剂设计

参考文献

[1] Wang, K. X.; Wang, Y. L.; Yang, B.; Li, Z. J.; Qin, X. T.; Zhang, Q. H.; Lei, L. C.; Qiu, M.;* Wu, G.;* Hou, Y.* Highly active ruthenium site stabilized by modulating electron-feeding for sustainable acidic oxygen evolution electrocatalysis[J]. Energy Environ. Sci., 2022, **15**, 2356-2365.

[2] Kong, Y.; Li, Y.; Sang, X. H.; Yang, B.; Li, Z. J.; Zheng, S. X.; Zhang, Q. H.; Yao, S. Y.; Yang, X. X.; Lei, L. C.; Zhou, S. D.;* Wu, G.;* Hou, Y.* Atomically Dispersed Zinc(I) Active Sites to Accelerate Nitrogen Reduction Kinetics for Ammonia Electrosynthesis[J]. Adv. Mater., 2021, **34**, 2103548.

[3] Chen, J. Y.; Li, Z. J.; Wang, X. Y.; Sang, X. H.; Zheng, S. X.; Liu, S. J.; Yang, B.; Zhang, Q. H.; Lei, L. C.; Dai, L. M.; Hou, Y.* Promoting CO_2 Electroreduction Kinetics on Atomically Dispersed Monovalent Zn(I) Sites by Rationally Engineering Proton-feeding Centers[J]. Angew. Chem., 2021, **61**, e202111683.

报告人简介

附：报告人为教师

侯阳，男，1982 年生，浙江大学化工学院研究员，博士生导师。主要从事“碳中和”背景下的可再生能源发电与绿色氢能研究，主持国家自然科学基金及省部级科研项目 10 余项。在 *Angew. Chem. Int. Ed* 等发表学术论文 230 余篇，论文总被引用 17,000 余次，授权发明专利 30 余件。曾获国家优青、省杰青、省千人、英国皇家化学会会士等奖励和荣誉。

有序大/介孔MOF基催化剂的设计及电催化应用

陈立宇*

华南理工大学，广州，510640

*Email: liyuchen@scut.edu.cn

摘要正文：

金属有机框架材料（Metal-organic framework, MOF）是由金属节点（离子或簇）和有机配体自组装而成的有序多孔材料。MOF可作为优异的前体设计组成和分布可控的碳基催化剂，在电催化领域具有潜在的应用前景。

我们致力于解决MOF基材料在电催化应用中面临的关键问题，针对MOF基催化剂金属位点本征活性差的问题，发展了“多配位层间协同调控”、“多金属间强作用界面构筑”等新策略，调控过渡金属电子结构以增强活性位点的本征活性，提升电解水和CO_2还原性能；针对MOF微孔结构影响活性位的可及性的问题，提出“构筑多级有序大、介、微孔MOF基材料”的思想，提升了材料的长程传质速率和近程金属可及性，获得了比常规微孔MOF基材料高5倍以上的电催化活性；针对MOF基电解水和CO_2还原体系能量效率低的问题，使用热力学有利的肼氧化替代不利的氧析出反应，构筑高效肼氧化辅助产氢和CO_2还原新体系，大幅降低体系槽电压，提升催化体系的效率和经济性。

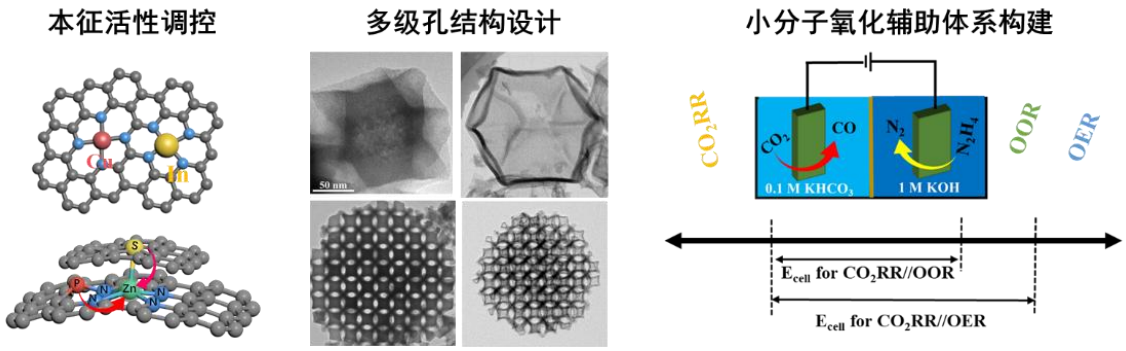


Fig. 1 Hierarchically ordered macro-/mesoporous MOF-based materials for electronic catalysis

关键词：MOF；有序大孔；多级孔；电催化CO_2还原

参考文献

[1] J. Ding, D. Guo, N. Wang, H.-F. Wang, X. Yang, K. Shen, L. Chen,* Y. Li,* *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, *62*, e202311909.

[2] W. Yao, J. Chen, Y. Wang, R. Fang, Z. Qin, X. Yang, L. Chen,* Y. Li,* *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, *60*: 23729.

[3] W. Yao, A. Hu, J. Ding, N. Wang, Z. Qin, X. Yang, Kui Shen, L. Chen,* Y. Li*, *Adv. Mater.*, 2023, *35*, 2301894.

[4] C. Hu, Y. Zhang, A. Hu, Y. Wang, X. Wei, Kui Shen, L. Chen,* Y. Li*, *Adv. Mater.*, 2023, *35*, 2209298.

[5] J. Ding, H.-F. Wang, X. Yang, W. Ju, K. Shen, L. Chen,* Y. Li,* *Natl. Sci. Rev.*, 2023, *10*, nwac231.

报告人/墙报展示人简介：

陈立宇，华南理工大学化学与化工学院教授，博士生导师，国家优秀青年基金获得者。主要从事金属有机骨架基纳米材料的设计制备以及电催化应用基础研究。主持国家自然科学基金优秀青年、面上项目、青年基金项目和广东省自然科学基金面上项目等科研项目。2021 年获大湾区林道青年科奖，2022 年获教育部自然科学一等奖，2024 年获国际催化大会“Young Talent”奖。发表 SCI 论文 70 余篇，论文累计引用 6000 余次，H 因子 35。以（共同）第一或通讯作者身份在 Science、Natl. Sci. Rev.、Chem. Soc. Rev.、Chem、Matter（2 篇）、Angew. Chem. Int. Ed.（2 篇）、Adv. Mater.（2 篇）、Chem Sci（4 篇）等国际著名期刊发表 SCI 论文 32 篇，其中 6 篇 ESI 高引论文。以第一/通讯作者撰写英文专著（Wiley 出版）两章。相关成果被 EurekAlert!、Materials Views-China 新闻报道，或被德国著名评论期刊 Synfacts 杂志 Highlight 报道。相关研究成果转化的创业项目获 2023 中国国际大学生创新大赛全国金奖。

附：报告人/墙报展示人非学生

电催化剂反应位点的设计和研究

於俊[1,*]，李思梦[2]，邱晨[2]，董峰[2]，蔡欣[3]，方岳平[3]，杨世和[2]

[1]深圳大学，深圳市南山区学苑大道1066号深圳大学丽湖校区，518071

[2]北京大学深圳研究生院，深圳市南山区西丽镇丽水路深圳大学城北大校区，518055

[3]华南农业大学，广州市天河区五山华南农业大学，510642

*Email: yujun@szu.edu.cn

化石燃料的大规模使用排放了大量的二氧化碳，导致近些年极端恶劣天气变多。为了实现国家“碳达峰，碳中和”的目标，一方面是从源头上减少二氧化碳的排放，及开发“绿色”的可再生能源如氢能；另一方面是将大气中的二氧化碳进行转化利用，实现碳平衡和碳循环。在催化剂的帮助下，利用可持续能源如太阳能或风能转化成的电能进行电解水制氢和将二氧化碳还原成工业原料是可持续的。为了提高氢能制取和二氧化碳转化的效率，需要开发高效而稳定的电催化剂。我们团队一方面致力于通过氧化铈与复合活性金属界面的调控来得到高本征活性的反应位点[1]，另一方面通过原位表征研究催化剂的反应过程从而反馈优化催化剂的结构（图1）[2-3]。

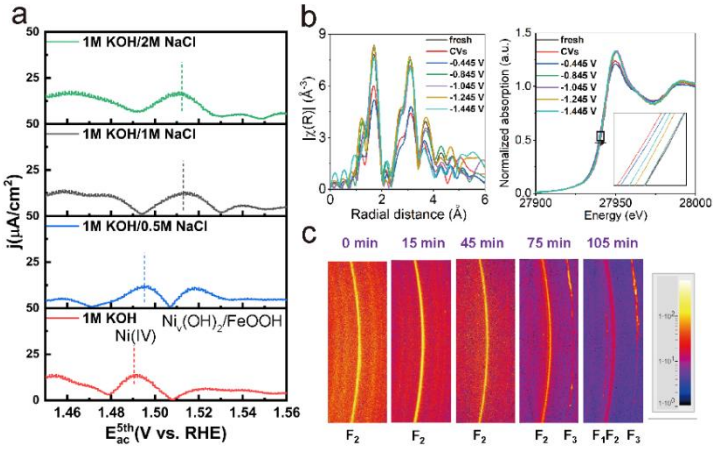


图1. （a）FTacV法研究Cl⁻浓度对Ni$_v$(OH)$_2$/FeOOH催化剂析氧过程中Ni(IV)生成电位的影响；二氧化碳电还原过程中电催化剂的（b）原子配位环境和电子结构（原位XAS）及（c）晶相（原位XRD）研究。

关键词：析氧反应；二氧化碳还原；电催化剂；活性位点；结构重构

参考文献

[1] **Jun Yu, Jian Wang, Xia Long, Lei Chen, Qi Cao, Jian Wang, Chen Qiu, Jongwoo Lim, Shihe Yang*. Formation of FeOOH Nanosheets Induces Doping of CeO_{2-x} with High Valence Ni for Efficient Water Oxidation. Advanced Energy Materials 2021, 11, 2002731.**

[2] **Simeng Li, Jun Yu*, Shengsen Zhang, Weitao Qiu, Xing Tang, Zedong Lin, Rongming Cai, Yueping Fang, Shihe Yang*, Xin Cai*. Operando Reconstruction of Porous Carbon Supported Copper Selenide Promotes the C_2 Production from CO_2RR. Advanced Functional Materials 2023, 34, 2311989.**

[3] **Feng Dong, Huan Duan, Zedong Lin, Haifeng Yuan, Min Ju, Xinjuan Du, Jinqiang Gao, Jun Yu*, Shihe Yang*. Unravelling the Effect of Cl^- on Alkaline Saline Water Electrooxidation on NiFe (oxy)hydroxides. Applied Catalysis B: Environmental 2024, 340, 123242.**

报告人/墙报展示人简介：

於俊，硕士毕业于清华大学，博士毕业于日本东京大学，博士后师从北京大学杨世和教授。现为深圳大学化学与环境工程学院助理教授、硕士生导师，主要从事氧化铈基催化材料的制备并将其应用于电解水制氢和二氧化碳还原。在 Adv. Mater.、Adv. Energy Mater.、Adv. Funct. Mater.和 ACS Catal. 等期刊上已发表 30 篇 SCI 论文，H 因子 20；其中第一/通讯作者共 17 篇，包括 11 篇中科院 JCR 一区 TOP 期刊；授权发明专利 5 项，主持国家、省和市的科研项目合计 5 项。《Journal of Rare Earths》（中科院一区，影响因子 4.9）和 cMat 杂志青年编委，曾获“博士后国际交流计划引进项目”和“深圳市海外高层次人才”。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

先进能源材料的构筑及应用

章根强

中国科学技术大学化学与材料科学学院

gqzhangmse@ustc.edu.cn

先进能源材料的构筑及其在洁净能源生产与转化过程中的应用具有决定性的作用，是实现双碳目标的重要因素。围绕先进催化材料的精准制备、性能调控及其应用研究，以小分子高效催化转化为高附加值产品为目标，开展了一系列工作。本报告中主要将汇报以下三个方面：1）发展了低能耗制氢新原理，实现了肼氧化辅助制氢能耗降低至 1.05 kwh/m^3，突破传统电解水制氢的热力学能耗极限；提出复合结构中双活性位点设计新原理，解决海水电解制氢中 Cl^-腐蚀这一关键挑战，将能耗降低至 2.65kwh/m^3； 2）基于开发的无机催化材料，实现了安培级工业电流密度下丙三醇氧化辅助电解制氢，在获得高附加值化学品的基础上降低制氢能耗；3）发展了 Cu 基催化剂的改性策略，发现 C-N 耦合新路径，实现含 C/N 小分子的高效催化转化。

1. Partially Exposed RuP_2 Surface in Hybrid Structure Endows Its Bifunctionality for Hydrazine Oxidation and Hydrogen Evolution Catalysis. Sci. Adv. **2020**, 6, eabb4197,

2. Manipulating dehydrogenation kinetics through dual-doping Co_3N electrode enables highly efficient hydrazine oxidation assisting self-powered H_2 production. Nat. Commun. **2020**, 11, 1853,

3. Defect-induced Triple Synergistic Modulation in Copper for Superior Electrochemical Ammonia Production Across Broad Nitrate Concentrations. Nat. Commun. **2024**, 15, 2816,

4. Low-coordinated Copper Facilitates the *CH_2CO Affinity at Enhanced Rectifying Interface of Cu/Cu_2O for Efficient CO_2-to-multicarbon Alcohols Conversion. Nat. Commun. **2024**, 15, 5172,

5. Arming Ru with Oxygen Vacancy Enriched RuO_2 Sub-nanometer Skin Activates Superior Bifunctionality for pH-Universal Overall Water Splitting. Adv. Mater. **2023**, 35, 2206351,

6. Electrochemical Biomass Upgrading Coupled with Hydrogen Production under Industrial-level Current Density. Adv. Mater. **2023**, 35, 2300935

铂表面氢电催化反应机理的表面增强红外光谱解析

朱尚乾 [1,*]

[1] 东南大学，南京，211189

*Email: sqzhu@seu.edu.cn

在碱性溶液中，铂表面HER/HOR的反应动力学速率比酸性环境中低2-3个数量级，机理仍不明确。本工作通过表面增强红外吸收光谱（SEIRAS），从分子水平解析了不同电解质溶液pH值下电化学界面的结构差异，发现*H中间体和界面H_2O的吸附强度均随溶液碱性增强而减弱。此外，碱性环境中铂电极表面*H的覆盖度显著高于酸性[1]。相关界面结构的变化是导致pH值效应的重要原因。

提升铂催化剂在碱性环境中的HER/HOR活性亦是领域研究热点之一。在众多催化剂改良策略中，对铂表面进行钌金属修饰具有较为显著的活性提升效果，但作用机制仍存在争议。本工作利用SEIRAS，对铂-钌电极表面的*H吸附位点进行了直接观测，发现两种原子表面均存在*H中间体。本工作亦报道电极的HER/HOR交换电流密度与电极表面的钌金属覆盖度存在良好的线性关系，证明铂-钌催化剂优异的HER/HOR活性源自表面钌原子的超高活性，而非较为认可的界面双功能效应[2]。

关键词：表面增强红外；氢电催化；反应机理

参考文献

[6] S. Zhu, X. Qin, Y. Yao, M. Shao, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142, 8748

[7] S. Zhu, X. Qin, F. Xiao, S. Yang, Y. Xu, Z. Tan, J. Li, J. Yan, Q. Chen, M. Chen, M. Shao, *Nat. Catal.* **2021**, 4, 711

报告人/墙报展示人简介：

朱尚乾现为东南大学青年首席教授，国家级青年人才。研究方向主要包括面向燃料电池和电解槽反应的：1）原位振动光谱学表征技术开发；2）高性能电催化剂合成；3）绿色电化学反应器开发等。目前已发表学术论文 60 余篇，谷歌学术总引用 6000 余次，H 指数为 35。以第一/共同第一/通讯作者身份在 Nat. Catal.，Joule，J. Am.Chem. Soc.，Angew. Chem. Int. Ed.，Adv. Mater.，等期刊发表论文 29 篇，其中 ESI 高被引论文 4 篇。现担任 Joule，Nat. Catal.，Nat. Commun.等国际期刊审稿人。入选 2022 年度国家级海外高层次青年人才项目，香港研究资助局博士后奖励计划（全球 50 人），全球前 2%顶尖科学家榜单（2022，2023）。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

谱学电化学滴定单原子催化剂的配位环境

蒋昆 [1,2,*]

[1] 复旦大学化学系，上海，200438

[2] 上海交通大学机械与动力工程学院，上海，200240

*Email: kunjiang@sjtu.edu.cn

原子级分散过渡金属催化剂 SAC 的开发对于催化位点的基础研究和催化性能的实际提升均有重要意义。相较大块的颗粒或本体金属材料而言， SAC 不仅有更多的反应活性位点暴露来提升反应活性，降低所需过渡金属的用量，而且得益于高度配位不饱和的电子结构，其对特定反应路径的选择性也有显著差异。通过调控不同的过渡金属中心原子或改变其周边的配位环境，是调控 SAC 活性中心电子结构的最常用手段。如何从宏观尺度上统计分析 SAC 中过渡金属原子的分散度，从微观的原子、分子尺度上观察不同配位结构在电催化反应中的动态演变，是揭示这类催化剂“构效关系”的先决条件。

对此，我将以原子级分散的Pt/C为例，总结前期第一性原理计算、非原位X射线吸收谱XAFS和CO探针分子特异性吸附的原位表面增强红外光谱ATR-SEIRAS联用技术，在Pt/C SAC分散度和活性位点结构滴定上的研究进展 [1]。进一步以酸性O_2还原为模型反应，通过调控Pt-C、Pt-N-C和Pt-S-C 的配位结构，以及Pt活性位点密度，实现了 $2e^-$和 $4e^-$氧还原路径的调控 [2-3]，为单原子催化剂的构效关系研究提供借鉴。

参考文献

[12] K. Jiang, X.-Y. Ma, S. Back, J. Zhao, F. Jiang, X. Qin, J. Zhang, W.-B. Cai, Local Coordination and Reactivity of a Pt Single Atom Catalyst as Probed by Spectroelectrochemical and Computational Approach, *CCS Chem.*, 2021, 3, 241-251.

[13] J. Zhao, C. Fu, K. Ye, Z. Liang, F. Jiang, S. Shen, X. Zhao, L. Ma, Z. Shadike, X. Wang, J. Zhang, K. Jiang, Manipulating the Oxygen Reduction Reaction Pathway on Pt-Coordinated Motifs, *Nat. Commun.* 2022, 13, 685.

[14] B. Ni, P. Shen, G. Zhang, J. Zhao, H. Ding, Y. Ye, Z. Yue, H. Yang, H. Wei, K. Jiang, Second-Shell N-Dopants Regulate Acidic O_2 Reduction Pathways on Isolated Pt Sites, *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146, 11181-11192.

关键词：单原子催化；表面增强红外光谱；氧还原反应

报告人/墙报展示人简介：

蒋昆，复旦大学青年研究员，上海交通大学长聘教轨副教授，博士生导师。2016.01 于复旦大学化学系获理学博士学位，随后赴美国哈佛大学、加州大学伯克

利分校、劳伦斯国家实验室从事博士后研究。2019.10 迄今先后在上海交大机械与动力工程学院、复旦大学化学系组建“能源催化与界面”课题组，开展谱学电化学和能源电化学器件相关的研究工作。目前以通讯/第一作者于 *Nat. Catal., Nat. Commun., JACS, Angew. Chem., Energy Environ. Sci.* 等国际能源化学主流期刊发表论文 50 余篇，包括 15 篇 ESI 高被引工作，h 指数 47；申请国际专利 2 项，授权中国专利 3 项；担任 *ACS Sustain. Chem. Eng.*，中国化学会《电化学》等期刊青年编委；主持国家海外高层次青年人才计划（2021）、科技部十四五重点研发计划青年科学家项目（2022）、国家自然科学基金委等项目。

太阳燃料合成系统中的传递过程强化

Jie Chen*
西安交通大学
jie.chen@xjtu.edu.cn

太阳能燃料合成是指利用太阳能、二氧化碳、水等可再生能源及资源合成碳氢化合物燃料，是将间歇性、分散的可再生能源进行储存的一种储能技术。目前，太阳能燃料合成技术分为光催化、光电催化和光伏-电催化三种技术路线。从基本原理看，每条技术路线的本质都是将光能吸收和转化为化学能，也可以将这一过程解耦为“光能转化为电能/热能”和“电能/热能转化为化学能”两个步骤。过程中的能量损耗主要包括光子损耗、载流子损耗和电化学损耗。因此，如何提高光化学转换过程的能量利用率是该领域的关键问题。本报告通过一些实例表明增强能量/质量传递过程可以提高太阳能燃料转换的效率，报告重点围绕长波段光子的捕获和吸收，载流子的定向传递的强化，以及表面催化反应过程，介绍了太阳能燃料合成系统中的能量/质量传输机理、强化能量转换的策略和方法以及太阳能燃料合成装置的放大。本文的研究结果可能为太阳能燃料合成领域的研究工作者提供一些启示。

报告人/墙报展示人简介：

陈杰，西安交通大学教授，获国家优秀青年科学基金（海外），陕西秦创原引用高层次创新创业人才，西安交通大学拔尖人才计划 A 类支持。获陕西省优秀博士学位论文、西安交通大学优秀博士学位论文奖励，2020-2023 连续四年获评斯坦福全球前 2%顶尖科学家。目前承担国家重点研发计划青年科学家项目课题 2 项，国家自然科学基金青年项目，企业委托课题 1 项。担任 eScience、Frontiers in Energy 青年编委。

长期从事太阳能光化学转化材料与器件的应用基础研究工作，迄今发表国际期刊论文 60 余篇，合作撰写专著 1 章，其中以第一/通讯作者于 Chem. Rev., J. Am. Chem. Soc., Adv. Mater., Nano Lett., ACS Energy Lett.(3), Adv. Energy Mater.(2), Sci. Bull.等高影响力 SCI 期刊发表论文 30 余篇，8 篇入选 ESI 高被引论文，1 篇入选 ESI 热点论文，所有成果论文累计引用 8000 余次，H 因子为 40。在 ACS、MRS 等重要国际学术会议做口头报告 20 余次。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

结构精准工业催化剂的设计与调控**

娄阳[a]*，郭耘[b]，朱永法[c]

[a]江南大学化学与材料工程学院，教育部合成与生物胶体重点实验室，江苏无锡，214122

[b]华东理工大学工业催化研究所、绿色化工与工业催化国家重点实验室，上海徐汇，200237

[c]清华大学化学系，北京海淀，100084

Email: yang.lou@jiangnan.edu.cn

本合理构建原子精确的活性中心对于提高其催化性能非常重要，但仍然具有挑战性[1,2]。在此，我们设计并构建了 ZSM-5 负载铜和银双单原子催化剂（Ag_1-Cu_1/ZSM-5 hetero-SAC），以促进使用过氧化氢为氧化剂直接氧化甲烷制甲醇。我们通过发展分级吸附策略合成了异双原子催化剂（Ag_1-Cu_1/ZSM-5 hetero-SAC），在 70 ℃的温度下，反应 30 分钟后其甲醇产率为 20,115 μmol•g_{cat}^{-1}，同时甲醇的选择性达到 81%，超过了单原子催化剂和纳米颗粒催化剂(**图 1 a-d)** 和大多数已报道最先进的贵金属催化剂。密度泛函理论计算表明，铜和银单核和双核活性中心间的动态切换促进了铜和银位点上高活性羟基物种的形成，促进了甲烷 C-H 键的激活(**图 1 e)**，并增强了银位点的稳定性，这是催化剂取得高性能的关键所在。我们相信双单原子活性位上的原子级设计策略将为设计先进的甲烷直接氧化催化剂铺平了道路[3]。

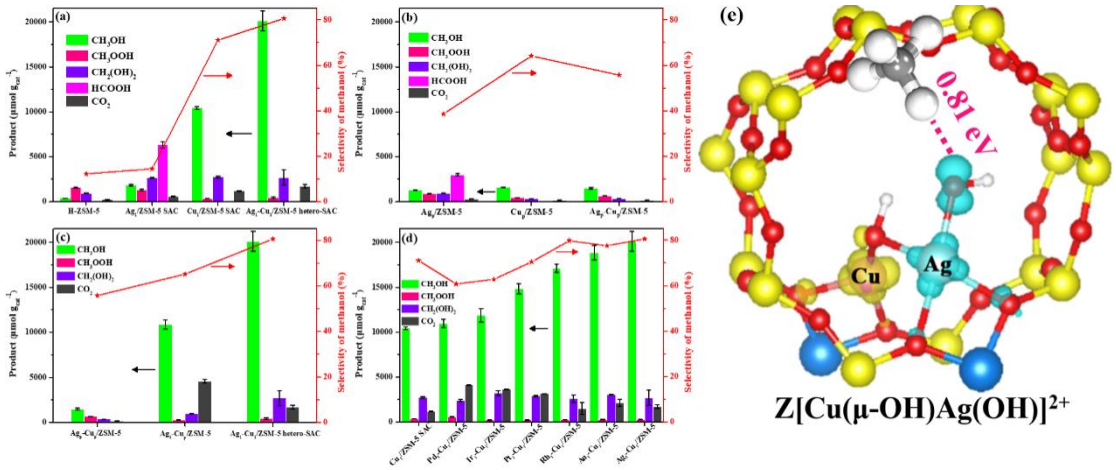


Figure 1 (a-d). 甲烷直接氧化的催化性能; **(e)**. 银铜异双原子位点的自旋电荷密度分布图以及其对 CH_4 第一个 C-H 键解离能垒。

关键词：甲烷活化，双原子催化剂，可控转化，一步氧化，催化剂设计

参考文献

[8] N. J. Gunsalus, A. Koppaka, S.H. Park, S. M. Bischof, *Chem. Rev.* 2017, 117, 8521-8573.

[9] Y. Lou, Y. Zheng, X. Li, N. Ta, J. Xu, Y. Nie, K. Cho, J. Liu, *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141, 19289-19295.

[10] 本工作得到国家重点研发计划青年科学家项目（2021YFB3501900），国自然区域联合重点基金（U21A20326）及江苏省特聘教授资助。

低功函非贵金属助催化剂促进光催化产氢机制研究

周小松*

岭南师范学院化学化工学院，广东清洁能源材料化学普通高校重点实验室，广东 湛江 524048

* E-mail: zhouxs@lingnan.edu.cn

摘要正文：电催化或光催化分解水产氢反应，是生产绿色氢能源的有效方法。为了实现低成本的氢能生产，迫切需要开发经济、高效的低功函非贵金属催化剂。在本研究中，通过制备一些低功函非贵金属催化剂，例如原位合成MoB_2，。将MoB_2纳米粒子掺入g-C_3N_4，得到了MoB_2@g-C_3N_4复合光催化剂，可以提高其光吸收能力，促进光生电荷的有效分离和转移。此外，MoB_2纳米粒子还可以作为加速H2释放的活性位点。复合光催化剂的产氢速度为418 μmol h^{-1} g^{-1}，是纯g-C_3N_4的51倍。该工作为开发可持续的非贵金属电催化剂和光催化剂奠定了基础。

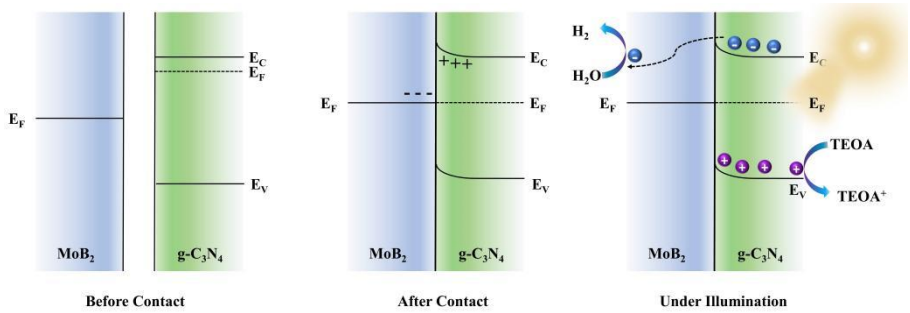


Fig. 1 Demonstration of the mechanism of photocatalytic H_2 evolution by MoB_2@g-C_3N_4 Schottky junction.

关键词：MoB_2；g-C_3N_4；光催化产氢。

参考文献

[1] Y.X. Xian, Z.Q. Li, L.Z. Peng, J. Luo, X.M. Ning, X.F. Zhou, X.S. Zhou, *Separation and Purification Technology*, 2024, 345, 127337。

[2] X. F. Zhou, Y. Tian, J. Luo, B.Jin, Z. Wu, X. Ning, L. Zhan, X. Fan, T. Zhou, S. Zhang, X. S. Zhou, *Adv. Funct. Mater.*, 2022, 2201518。

[3] X. F. Zhou, J. Luo, B. Jin, Z. Wu, S. Yang, S. Zhang, Y. Tian, Y. Fang, Y. Hou, X. S. Zhou, *Chem. Eng. J.*, 2021, 426, 131208.

报告人/墙报展示人简介：

周小松，博士，教授，岭南师范学院化学化工学院院长。2011 年 6 月，华南理工大学博士毕业；2016 年-2017 年，澳大利亚格里菲斯大学访问学者。主要从事纳米材料、人工光合成及环境绿色催化研究工作，入选 2023 年全球前 2%顶尖科学家榜单。近年来承担国家自然科学基金面上项目、广东省自然科学基金、广西重点研发计划等 12 项。公开发表 SCI 学术论文 120 余篇，授权发明专利 16 项。包括国际著名期刊 Adv. Mater.、Angew. Chem. Int. Edit.、Adv. Funct. Mater.、J. Mater. Chem. A、Chem. Eng. J.等发表研究论文，ESI 全球高被引 6 篇，被引用 4100 多次，H 因子为 40。获广东省教学成果一等奖 1 项。

基于原子层沉积技术修饰纳米催化剂用于CO_2热催化加氢研究

詹国武*，蔡东仁，蔡燕妹，夏叶刚，颜幸，张世杰

华侨大学集成催化剂研究中心，361021

*Email: gwzhan@hqu.edu.cn

摘要：随着现代工业的快速发展，集成纳米催化剂在能源高效转化及环境保护领域扮演着越来越重要的角色。集成纳米催化剂的性能与其结构、组成、尺寸等因素密切相关，从理论上设计催化剂结构并在原子尺度上对催化剂组成进行精准调控，可进一步提高催化效率及深入认识其反应机理。原子层沉积（Atomic layer deposition，ALD）是一种薄膜或纳米颗粒生长技术，利用其自限制生长特性可在多种基底材料上实现原子级别调控颗粒微观结构组成，进而有效调节纳米催化剂的稳定性和选择性。近期，本团队借助ALD技术在空心层状硅酸镍、Ni/In_2O_3、空心层状硅酸铜等纳米催化剂表面沉积金属氧化物薄膜，用于CO_2加氢反应，并深入研究金属氧化物薄膜对催化性能提升的作用机制。其中，利用原子层沉积技术在空心层状硅酸镍表面沉积一层Al_2O_3薄膜，能够有效阻止还原过程中Ni颗粒的烧结，使CO_2转化率从22.6%增加到66.9%，甲烷选择性从小于60%提升至90%以上，并且表现出优异的长周期反应稳定性。通过Al_2O_3-ALD技术在Ni/In_2O_3表面包覆一层Al_2O_3薄膜，能够有效抑制高温氢气条件下In_2O_3过度还原成In^0和Ni-In合金，防止催化剂失活；并且在CO_2加氢过程中促进In^0氧化为活性相In_2O_{3-x}，维持催化剂的高甲醇选择性（64%）。此外，为了使Cu与ZnO充分接触形成更多Cu-ZnO界面促进CO_2加氢制甲醇，利用ZnO-ALD技术在空心层状硅酸铜（$CuSiO_3$）表面沉积一层ZnO薄膜构筑高效ZnO催化剂。相较于单独$CuSiO_3$（甲醇选择性38.1%，甲醇时空收率0.24 g_{MeOH} $h^{-1}g_{cat}^{-1}$），5ZnO/$CuSiO_3$表现出更优异的催化性能（甲醇选择性68.1%，甲醇时空收率0.39 g_{MeOH} $h^{-1}g_{cat}^{-1}$）。另外，与传统浸渍法制备的ZnO/$CuSiO_3$(IM)，5ZnO/$CuSiO_3$具备更高的CO_2转化率（13.8% *vs*. 10.1%）和甲醇选择性（68.1% *vs.* 56.2%）。详细表征结果揭示了ZnO/$CuSiO_3$(IM)上ZnO以块状形式团聚在催化剂表面，而在5ZnO/$CuSiO_3$上ZnO则以薄膜的形式平铺在催化剂表面，确保Cu与Cu与ZnO充分接触形成更多Cu-ZnO界面，有助于CO_2活化和适当H_2解离，从而抑制CO的生成，避免反应中间体过度加氢生成CH_4。

关键词：CO_2加氢；集成纳米催化剂；原子层沉积；金属氧化物薄膜；作用机制

参考文献

[1] Zhan et al. *Appl. Catal. B-Environ.* 2023, 333: 122804.

[2] Zhan et al. *ACS Appl. Nano Mater.* 2022, 5: 9882-9892.

[3] Zhan et al. *Chem. Eng. Sci.* 2024, 283: 119394.

[4] Zhan et al. ACS Catal. 2024, 14: 8463-8479.

报告人简介：

詹国武，男，教授、博士生导师，获国家优秀青年科学基金、福建省闽江学者特聘教授、福建省百人计划、福建省杰出青年基金，担任华侨大学集成催化剂研究中心主任。本科（2009 年）、硕士（2012 年）均毕业于厦门大学化工系；博士（2016 年）毕业于新加坡国立大学 NGS 学院；2016-2018 年在新加坡国立大学化工系从事博士后研究；2018 年回国入职华侨大学化工学院。目前以第一/通讯作者发表 SCI 学术论文 130 余篇，包括 Nature Communication、Advanced Materials、AICHE Journal、ACS Catalysis、ACS Central Science 等；授权发明专利 15 件。主持国家自然科学基金优青项目、联合基金重点项目、面上项目、福建省杰出青年基金、科技部重点研发计划一级课题、省市级人才项目等共 15 项，获中国化工学会科学技术奖（基础研究成果奖）二等奖、厦门市科技奖一等奖。

选择性加氢介孔负载型金属催化剂的结构设计与性能研究

吴张雄*

苏州大学材料与化学化工学部，江苏省苏州市工业园区仁爱路 199 号，215123

*Email: *zhangwu@suda.edu.cn

加氢催化在精细化工、能源化工与环境化工等领域发挥重要作用。负载型金属催化剂是一类重要的加氢催化剂，包括负载型 Pd、Pt 等贵金属和 Ni、Co 等非贵金属催化剂。为提升这类催化剂的加氢活性、选择性与稳定性，结构设计与调控非常重要[1]。国内外学者围绕金属物种的尺寸与电子结构调控做出了大量杰出工作；围绕载体组成、晶相与孔结构的调控也开展了大量工作。本报告将介绍课题组在介孔负载型金属催化剂的结构设计与选择性加氢催化性能研究中的一些进展[2-6]，首先将介绍几种制备介孔负载型高分散金属催化剂的方法，包括无溶剂熔融浸渍法、气溶胶负载法与胶体法等，重点阐述这些方法在调变金属物种尺寸、表面性质以及在载体纳米孔道内的空间分布等方面取得的进展，然后阐述这些催化剂在硝基芳烃、CO_2 与 NO_3^- 加氢催化中的性能与影响因素，最后讨论催化剂中金属物种和载体的性质与加氢催化性能的一些内在联系。图 1 展示了 CO_2 热催化加氢制 CO 的一个进展，核心发现是对 TiO_2 负载的 Ni 纳米颗粒进行表面磷修饰后，可将该催化剂从 100%的甲烷选择性转化为 100%的 CO 选择性。

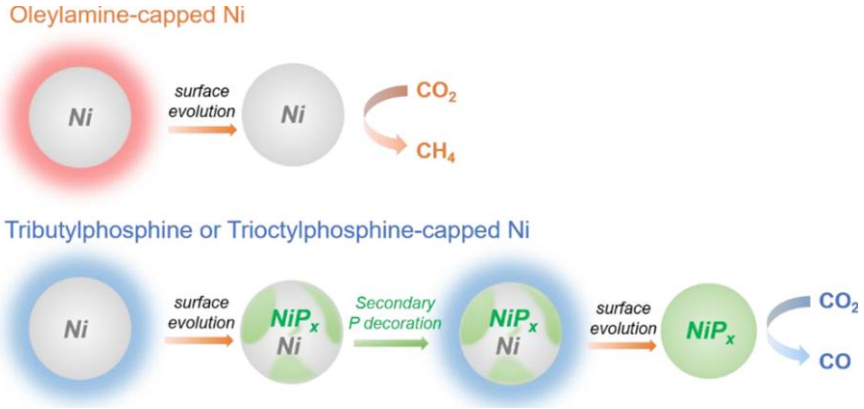


Fig. 1 Catalytic CO_2 conversion to CH_4 and CO on supported Ni and NiP_x nanoparticles

关键词：加氢催化；负载型催化剂；介孔催化剂；结构设计

参考文献

[1] L. Zhang, M. Zhou, A. Wang, T. Zhang, Selective Hydrogenation over Supported Metal Catalysts: From Nanoparticles to Single Atoms, *Chemical Reviews,* 2020, 120: 683-733.

[2] J.-J. Zhang, Y.-Y. Lou, Z. Wu, X.J. Huang, S.-G. Sun, Spatially Separated Cu/Ru on Ordered Mesoporous Carbon for Superior Ammonia Electrosynthesis from Nitrate over a Wide Potential Window, *Journal of the American Chemical Society*, 2024, doi: 10.1021/jacs.4c06657

[3] X.R. Wei, G. Johnson, Y.F. Ye, M.Y. Cui, S.W. Yu, Y.H. Ran, J. Cai, Z. Liu, X. Chen, W.P. Gao, P.J.L. Bean, W.J. Zhang, T.Y. Zhao, F.A. Perras, E.J. Crumlin, X. Zhang, R.J. Davis, Z.X. Wu, S. Zhang, Surfactants Used in Colloidal Synthesis Modulate Ni Nanoparticle Surface Evolution for Selective CO_2

Hydrogenation, *Journal of the American Chemical Society*, 2023, 145: 14298-306.

[4] H. Wang, Y. Zhang, Y.L. Zhang, Y.Q. Li, X.N. Wang, H.F. Wang, W.D. Wu, X.G. Bao, Z.X. Wu, Aerosol Spray Drying Guided Synthesis of Ultrasmall Alloyed Bimetallic Nanoparticles Supported on Silica for Catalytic Semihydrogenation, *Small*, 2023, 19: 2204744.

[5] X.R. Wei, M.Y. Zhou, X.C. Zhang, X.N. Wang, Z.X. Wu, Amphiphilic Mesoporous Sandwich-Structured Catalysts for Selective Hydrogenation of 4-Nitrostyrene in Water, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2019, 11: 39116-24.

[6] Z.J. Zhang, X.R. Wei, Y. Yao, Z. Chen, A.J. Zhang, W. Li, W.D. Wu, Z.X. Wu, X.D. Chen, D.Y. Zhao, Conformal Coating of Co/N-Doped Carbon Layers into Mesoporous Silica for Highly Efficient Catalytic Dehydrogenation-Hydrogenation Tandem Reactions, *Small*, 2017, 13: 201702243.

报告人/墙报展示人简介：

吴张雄，苏州大学特聘教授，曾入选“海外高层次人才引进计划”青年项目。研究方向为多孔材料的结构调控与多相催化应用，致力于将合成化学与绿色化工过程相结合，研发高性能多孔催化材料的制备新方法与新工艺，调控多孔催化材料的组成、孔道结构与界面性质，优化多孔载体与催化活性位点的相互作用，探索材料在几类重要催化反应（高级氧化、选择性加氢与电催化）中的应用及其作用机制。在 J. Am. Chem. Soc.、Angew. Chem. Int. Ed.、Adv. Mater.、Adv. Funct. Mater.、Chem. Eng. Sci.、AIChE J. 等期刊中累计发表学术论文 120 余篇，申请或授权国内外发明专利 20 余项，总被引一万余次。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：报告人为教师

光热/光化学协同催化材料

何乐*
苏州大学功能纳米与软物质研究院
lehe@suda.edu.cn

太阳能光催化有望为有效降低工业催化过程中的能耗与碳足迹提供重要途径。根据阿伦尼乌斯公式，太阳能光催化一方面能够凭借其光化学效应，降低化学反应活化能，有效促进化学反应进程；另一方面可以利用其热效应，实现催化界面高效的光热转换及局部温度提升，为反应提供热驱动力。然而，现有催化体系往往难以实现光热转换性能、热量管理能力与本征表面反应活性的兼容，催化性能还有待提升。发展满足光热及光化学催化各个过程要求的高活性、高选择性和高稳定性的协同催化体系依然是该领域发展长期面临的关键挑战。针对该挑战，报告人近年的研究工作从催化剂的光吸收能力、光热转换效率和本征催化活性三个方面入手，集中于“高效光热/光化学协同催化材料的设计与构筑、性能优化及机理研究”，取得了一系列创新的科研成果。催化体系构筑方面，基于核壳结构、二维材料、负载型团簇材料及界面效应、尺寸效应、表面等离激元杂化效应等调制策略，设计了一系列在太阳光谱范围具有高光响应与光热转换能力的高效催化体系；能量转换效率优化方面，提出了“纳米温室效应”的新策略、发展了“表面受阻路易斯酸碱对活性位点”的新理论，有效提升了光催化体系的热量管理能力及表面化学反应活性；协同催化性能方面，构筑了掺杂半导体、碳基复合材料等全光谱响应的高效光热/光化学协同催化体系，利用太阳能光催化，实现了对二氧化碳加氢、乙烷脱氢等工业反应的有效促进。上述研究为太阳光能高效利用与转化体系设计提供了新的思路。

关键词：光热/光化学协同催化，工业催化，二氧化碳还原，乙烷脱氢

碳基能源催化材料设计与应用探索

齐伟，

[1] 中国科学院沈阳金属研究所

*Email: wqi@imr.ac.cn

基于活化过硫酸盐降解抗生素的 MOFs 基复合材料的制备和机制

张永利，

[1] 佛山大学，佛山

*Email: 670511263@qq.com

微米锡基颗粒的电化学储钠性能

杨剑，

化学与化工学院，山东大学，济南

*Email: yangjian@sdu.edu.cn

尖晶石能源催化材料设计与应用

刘兆清

[1] 广州大学，化学化工学院，广州，510006

*Email: lzqgzu@gzhu.edu.cn

口头报告

硫化镉纳米颗粒提高你锂硫电池储能性能与稳定性

杨思源[1*]，张声森[1]，方岳平[1]，彭峰[2,*]

[1]华南农业大学，广东省广州市天河区五山路 483 号，510642

[2]广州大学，广东省广州市大学城外环西路 230 号，510006

*Email: siyuan_yang@scau.edu.cn

摘要正文：光电转换技术对我国推进能源革命和实现双碳发展具有重要意义。本项目运用“因果导向分析”思维，提出在集成式光充电锂硫电池（IPR-LiSBs）中引入窄带隙金属硫化物（M_xS_y）光电极，利用“可溶性多硫化物导致LiSBs循环稳定性差”与“窄带隙M_xS_y的光活性优异但需‘牺牲剂’增强其抗光腐蚀稳定性”两者之间的问题交叉点，形成“互补增效”机制。通过优化异质结型M_xS_y光电极的能带结构，提升光生电荷利用效率，缓解或抑制多硫化物副反应并降低“穿梭效应”，进而显著提高IPR-LiSBs的能量转换效率和稳定性。此外，项目将深入探究“电池极化效应”对无外加电压下，IPR-LiSBs仅通过光照即可实现能量转换/存储的具体作用机制与反应原理，为精确计算光电转换效率提供重要理论依据和计算标准。本项目填补了现有IPR-LiSBs在技术和理论基础方面的空缺，也为推动未来光能转换与储存技术的跨领域融合发展开辟新路径。

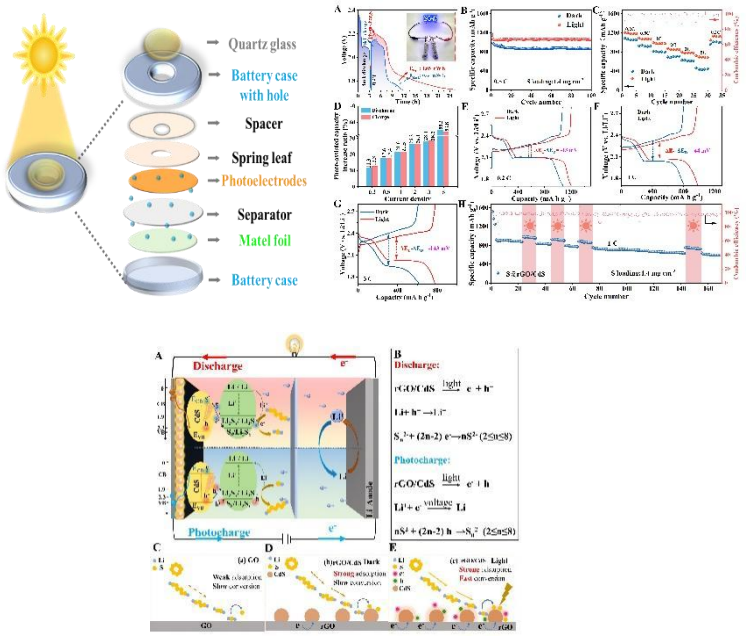


Fig. 1 (A) Assembly diagram of light charging lithium sulfur battery (left); Performance diagram of photovoltaic rechargeable lithium sulfur battery (middle); Diagram of photo assisted charging and discharging motor for lithium sulfur batteries (right).

关键词：太阳能；光充电；锂硫电池

参考文献

[1] **Angew. Chem. Int. Ed. 2024, e202403022.**

[2] **Journal of Power Sources 609 (2024) 234627.**

[3] **Journal of Energy Chemistry 79 (2023) 83–91.**

[4] **Chemical Engineering Journal 459 (2023) 141542.**

报告人/墙报展示人简介：

杨思源博士，现任华南农业大学材料与能源学院副研究员，主攻先进功能纳米材料的可控制备及应用、太阳能转换与利用、以及新能源储能材料与器件研发等领域。已主持并完成国家自然科学基金-青年基金 1 项，广东省自然科学基金 2 项，广州市自然科学基金项目 1 项，并参与了 9 项国家级和省部级科研项目。

以第一作者或通讯作者身份在国际知名期刊如《Angewandte Chemie International Edition》，《Applied Catalysis B: Environmental》,《Chemical Engineering Journal》,《Journal of Energy Chemistry》,《Small》,《Separation and Purification Technology》,《ChemSusChem》,《Journal of Materials Chemistry A》，《Journal of Power Sources》，《Chinese Journal of Catalysis》等发表 SCI 收录论文 90 余篇，H 因子为 38。

在指导学生方面，指导本科生和研究生参与大学生创新创业项目或科技竞赛项目，取得多项国家级和省部级立项认证。2023 年被授予第十一届广东省材料创新大赛金属材料分赛区一等奖及总决赛二等奖的优秀指导教师。此外，2017 年团队曾获得广东省科学技术奖二等奖。

附：报告人：教师

片层交联Ni/CeO_2催化剂的甲烷干重整反应性能研究

党成雄*

广州大学化学化工学院，广州，510632

*Email: cxdang@gzhu.edu

将CO_2与廉价而丰富的甲烷进行共处理（甲烷干重整，DRM）是当前通过再利用构建碳循环网络的重点，可在不进行基础设施大幅改建的情况下，将CO_2大规模重新转化成燃料或化学品，是CO_2开发利用最具前景的途径之一。CO_2与CH_4分子的化学惰性以及该过程的强吸热本质都要求干重整反应（DRM）在高温（>700 ºC）下进行[1]。这对作为干重整过程常用活性组分且具有工业前景的Ni基催化剂构成了严重的挑战，因为Ni的塔曼温度约为690 ºC，高温操作极易引起其烧结。另外，高温下CH_4裂解和CO歧化引起的严重积碳会覆盖住活性位，并引起反应器堵塞等问题。烧结和积碳都会导致干重整性能的快速衰减，这是当前干重整技术广泛应用面临的主要障碍。以CeO_2作为载体，通过利用Ce^{4+}/Ce^{3+}可逆价态转变产生的活性氧物种和氧空位[2]，可以在一定程度上消除DRM反应中的积碳，并稳定Ni颗粒。但目前Ni/CeO_2催化剂仍然面临着Ni颗粒烧结和晶格氧迁移效率低的问题，且CeO_2较差的热稳定会导致其储氧/释放氧能力快速衰竭。因此，亟需通过合理设计以提升Ni/CeO_2催化剂的抗烧结和抗积碳性能，从而满足DRM的实际应用需求。本工作合成片层交联的Ni/CeO_2催化剂，其利用CeO_2纳米片间交联产生的区域分割效应有效稳定CeO_2纳米片，避免其坍塌烧结。同时，片层交联的结构有效分隔Ni颗粒的同时延长Ni颗粒间的距离，从而减少颗粒间的接触烧结，提高了催化剂的抗烧结能力。此外，二维CeO_2纳米片提供的开放结构还有利于晶格氧的快速迁移和释放，从而产生大量的氧空位，并生成丰富的活性氧物种，进而原位消除积碳，以实现积碳的生成和消除过程的平衡，提高了催化剂的抗积碳性能。5Ni/CeO_2催化剂在700 ºC下经过10 h和50 h的DRM反应后，Ni颗粒尺寸仅从初始的22.6 nm增加到23.1 nm和26.9 nm，展现出较好的抗烧结性能。并且其在10 h和50 h反应后的积碳量分别为10.4%和9.6%，没有进一步增加，展现出优异的抗积碳性能。并且，还可以引入Zr来进一步促进CeO_2晶格氧的迁移和释放，从而更加有利于产生氧空位和形成活性氧物种，以增强催化剂对CO_2吸附与解离能力，并促进CH_4的解离，从而提高催化剂的DRM反应活性。

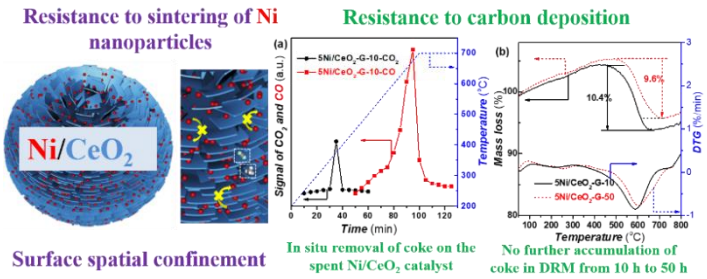


Fig. 1 Schematic diagram of the resistance to sintering and carbon deposition of lamellar cross-linking Ni/CeO_2.

关键词：片层交联；Ni/CeO_2；甲烷干重整反应

参考文献

[1] K. Feng, S. Qian, Z. Zhang, Z. Li, X. Sun, Y. Cheng, B. Yan, Functionalization of inert silica to construct Si-O-Ni interfacial sites for stable dry reforming of methane, Chem. Eng. J., 465 (2023) 142808.

[2] E. Yang, E. Nam, Y. Jo, K. An, Coke resistant NiCo/CeO2 catalysts for dry reforming of methane derived from core@shell Ni@Co nanoparticles, Appl. Catal. B, 339 (2023) 123152.

报告人/墙报展示人简介：

党成雄，广州大学化学化工学院副教授，毕业于华南理工大学化学与化工学院，主要从事生物质制氢、CO_2 捕获与催化转化、钙基化学链的构建与应用等领域的研究工作，为环境领域的 CO2 减排和能源领域的 H2 生产提供创新性的技术。目前以一作或通讯发表 SCI 论文 24 篇，其中中科院一区 16 篇，包括 Energ. Environ. Sci, Appl. Catal. B, Chem. Eng. Sci, J. Energ. Chem 和 Chem. Eng. J 等期刊上。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Ni 促进的 Mn_4N 在化学链合成氨中的高活性

薛秋艳[1]，郭拓[1*]，郭庆杰[1*]

[1]宁夏大学煤炭高效利用与绿色化学工程国家重点实验室，宁夏银川，750021

*Email: qingjie_guo@vip.sina.com (Qingjie Guo); tuo.guo.20@alumni.ucl.ac.uk (Tuo Guo)

氨是氮肥的主要原料，也是重要含氮化学品的氮源。因此合成氨关乎人类生存和社会的可持续发展。化学链合成氨（Chemical Looping Ammonia Synthesis, CLAS）是一种可持续绿色合成氨技术，该技术可以将合成氨分解成在常压下的几个独立的步骤，从而打破热力学限制，并使每个过程都可得到强化。因此可减少碳排放，提高能源利用效率。在不同温度和原子氮百分比的条件下，Mn 可生成多种稳定的中间相，这为 Mn_4N 作为氮载体提供优势。但 H_2 在 Mn_4N 在化学循环条件下仅有 3%至 8%的晶格氮转化为 NH_3。本研究提出了一种新策略来解决 Mn_4N 提取晶格氮的能力有限这一难题。即 Ni 促进 Mn_4N 介导的化学链合成氨过程。H_2 在 Ni 上具有相当大的迁移率，可以直接与 Mn_4N 表面的晶格氮反应生成氨。Ni 的引入增加了 Mn_4N 中的氮空位，增强了氮的活化。在 600℃的还原条件下，16 wt% Ni/Mn_4N 的氨产量高达 826 μmol g^{-1} h^{-1}，氨的转化率和生成选择性分别高达 51.46%和 91.21%。与 Mn_4N 相比提高了 72.30%。在 Ni 负载的 Mn_4N 可在 350℃下产氨，而 Mn_4N 只能在 500℃时产生少量氨。在 5 个循环周期后，由于 Ni 的损失导致转化率下降到 528 μmol g^{-1} h^{-1}。本研究有望推动更环保、更高效合成氨技术的发展。

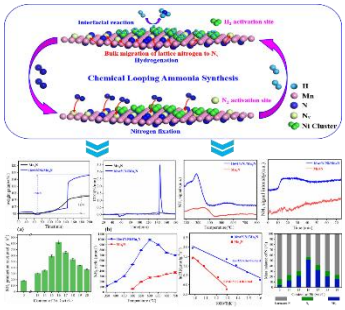


Fig. 1 Comparison of key data for Mn_4N and Ni loaded Mn_4N.

关键词：化学链；合成氨；Ni负载；Mn_4N；晶格氮

报告人/墙报展示人简介：

薛秋艳

女，在读硕士生。

简历：2018-2022 年　　南阳理工学院本科生

2022-至今　　宁夏大学在读硕士研究生

附：报告人是学生

$CaMn_{0.5}Ti_{0.375}Fe_{0.125}O_{3-\delta}$ 钙钛矿载氧体在化学链燃烧中的烧结和团聚特性

苗桢武，沈来宏*

东南大学能源与环境学院能源热转换与控制教育部重点实验室，南京，210096

*Email: miaozw@seu.edu.cn

摘要正文：在工业规模上制备具有良好循环稳定性的载氧体颗粒仍然是化学链领域的一个挑战。在这项工作中，通过工业规模的喷雾干燥造粒法制备了钙钛矿氧载体（$CaMn_{0.5}Ti_{0.375}Fe_{0.125}O_{3-\delta}$），并在流化床热重分析仪上进行了长期化学链燃烧测试。结果表明，载氧体颗粒的磨损起源于循环早期新鲜颗粒表面的不规则部分，颗粒上的化学应力随着氧化还原循环次数的增加而逐渐增加，增加了颗粒的磨损和烧结。此外，随着循环的进行，钙钛矿结构被破坏，载氧体与石英管壁和空气布风板发生化学反应，导致粘连。深度氧化还原循环反应表明，颗粒的团聚主要发生在还原阶段，由于颗粒粘连和床压的变化，床层在第37-43次和第47-55次循环期间进入反复的脱流期。固定床实验表明，颗粒活化来自循环过程中颗粒活性面积的增加，与颗粒是否流化无关。此外，团聚始于空气布风板和颗粒之间的接触面，并导致颗粒的氧化受阻，并因颗粒的过度还原而加深团聚。

关键词：钙钛矿；喷雾干燥造粒；流化床热重分析仪；团聚；化学链燃烧

报告人/墙报展示人简介：

苗桢武(1997)，男，在读博士，主要研究方向为化学链技术。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是学生

生物质基金属有机骨架材料对烟气 CO_2 的吸附与催化转化

徐怡翎，马德龙，王淇，夏凯，孙德帅*

青岛大学 化学化工学院，山东 青岛 266071

*Email:luckysds@163.com

现有的 CO_2 捕获存储和利用技术存在过程能耗高，制约了该技术的发展。对捕获 CO_2 的直接利用则有利于降低 CCUS 过程能耗。以 Cu 为金属中心，以 L-天冬氨酸和 L-谷氨酸为有机配体，利用共沉淀法法合成的生物质有机金属骨架材料（MOFs）对烟气中的 CO2 实现捕获以及催化转化研究。通过 FTIR、XPS、XRD 以及 TG 等对合成的 MOFs 进行了结构表征。通过循环固定床吸附法考察了 MOFs 对模拟烟气 CO_2 吸附性能的影响[1]；吸附在 MOFs 中的 CO_2 能够缓慢释放，直接与环氧氯丙烷进行环加成反应，制备环状碳酸酯[2]。实验结果表明在 298 K，1 bar 下，Asp-Cu 对 CO_2 的吸附量为 277 $mg \cdot g^{-1}$，Glu-Cu 的吸附量为 253 $mg \cdot g^{-1}$。高温可使吸附的 CO_2 缓慢释放，Asp-Cu 具有良好的循环稳定性，在 20 次循环吸附后吸附能力基本保持不变。但 Glu-Cu 经过 20 次循环后的吸附量降低到初始值的 90%。直接环加反应中，CO_2 转化率在 Asp-Cu 体系中高达 90%，而在 Glu-Cu 体系中则仅有 73.5%。在 3 次吸附-催化循环过程中 MOFs 效率基本稳定。

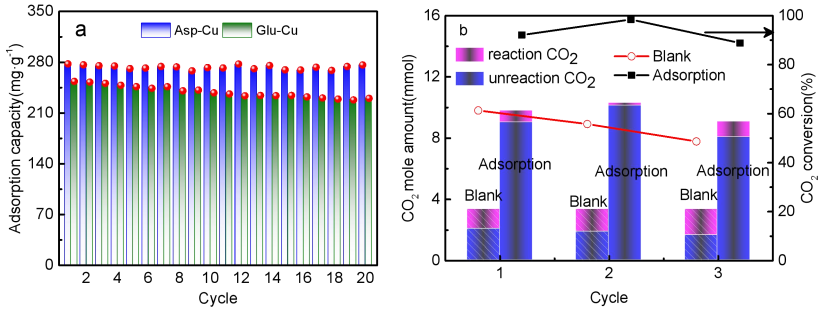


Fig.1 the adsorption-desorption cycle (a) and adsorption-catalysis cycle (b) of MOFs for CO2.

关键词：金属有机骨架；吸附剂；催化剂；CO_2；烟气

参考文献

[1]J. Zhang, J. Ma, C. Liu, et al. Bio-base metal organic frameworks as potential CO_2 adsorbents. Kore. J. Chem. Eng. 2024. https://doi.org/10.1007/s11814-024-00201-6

[2] Y. H. Zou, Y. B. Huang, D. H. Si, et al. Porous metal–organic framework liquids for enhanced CO_2 adsorption and catalytic conversion. Angew. Chem. Int. Edit. 2021, 60(38):20915-20920.

孙德帅简介：

青岛大学化学化工学院副教授，2002 年至今在青岛大学从事化工专业教学与科研工作，先后承担国家自然科学基金，省基金，省重点研发项目，国家安全重大基础研究子专题等多项课题。在 Chem Commun, Sep Purif Technol, J Hazard Mater 等国际刊物上发表论文 40 余篇；获授权 15 项国家发明专利。获山东省技术发明奖、青岛市技术进步奖、以及山东省高等教育教学成果奖等奖励。

新型高比表面积ZIF-8@$CsPbBr_3$用于光催化CO_2

郭赛男 [1,2], 王洁欣 [1,2*]

[1] 北京化工大学有机无机复合材料国家重点实验室，北京，100029

[2] 北京化工大学超重力工程技术研究中心，北京，100029

*Email: wangjx@mail.buct.edu.cn

利用高效催化剂将CO_2光催化还原至高附加值的化学原料或燃料被认为是解决人类面临的能源枯竭与温室效应问题的重要方案之一[1]。当前，将钙钛矿纳米晶体嵌入金属有机框架（MOFs）中，使其具有高光吸收系数、可调电子性能、高比表面积和金属原子可调谐性，用于增强光催化CO_2还原，是国内外研究热点[2]。然而，现有的钙钛矿-MOF结构颗粒尺寸大，且由于Pd吸附到MOFs的孔中会破坏其多孔结构，导致比表面积严重下降，从而影响CO_2吸附，使光催化性能降低[3]。因此，设计开发高比表面积钙钛矿-MOF复合材料非常重要。

鉴于此，本工作设计了一种新型钙钛矿-MOF结构，以双金属含Pb MOF作为转换体，经过后处理将配位的Pb进行转化，从而形成新型钙钛矿-MOF复合材料，显著降低了复合材料的尺寸，维持了MOF的多孔结构和高比表面积。复合材料的 τ_{aver}仅为2.91 ns，与纯钙钛矿相比，其荧光寿命明显更短。这意味着新型ZIF-8@$CsPbBr_3$结构之间可以提供一种新的电荷转移途径，验证了复合异质结系统中电子-空穴的络合可被有效的抑制。在300W氙灯下评估样品的光催化活性，发现$CsPbBr_3$对CO_2还原的光催化活性不足；当$CsPbBr_3$引入ZIF-8中后，光催化CO_2还原活性显著增强，ZIF-8@$CsPbBr_3$的CO_2转化率接近180 μmol·$g^{-1}h^{-1}$，几乎是$CsPbBr_3$的3倍。在连续4次循环测试后，光催化CO_2转化为CH_4和CO的转化率分别保持在98.42%和97.35%，表明所制备的ZIF-8@$CsPbBr_3$具有高的光稳定性。

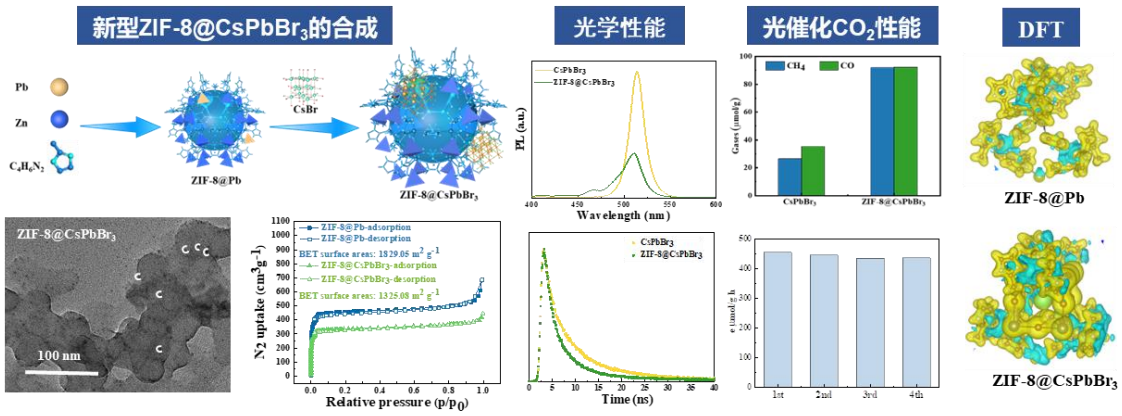


Fig. 1 The schematic diagram of the synthesis scheme of the novel ZIF-8@$CsPbBr_3$ structure and photocatalytic CO_2 reduction performances.

关键词：钙钛矿；MOF；光催化；CO_2还原

参考文献

[1] Y. Q. Li, Y. M. Lei, D. Z. Li, A. D. Liu, Z. Zheng, H. M. Liu, J. W. Guo, S. Y. Liu, C. N. Hao, and D. H. He, Recent progress on photocatalytic CO_2 conversion reactions over plasmonic metal-based catalysts. *ACS Catal.* **2023**, 13, 10177-10204.

[2] J. Hou, Z. Wang, P. Chen, V. Chen, A. K. Cheetham, and L. Wang, Intermarriage of halide perovskites and metal‐organic framework crystals. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 19434-19449.

[3] S.-N. Guo, D. Wang, and J.-X. Wang, ZIF-8@$CsPbBr_3$ nanocrystals formed by conversion of Pb to $CsPbBr_3$ in bimetallic MOFs for enhanced photocatalytic CO_2 reduction. *Small Methods.* **2024**, 2301508.

报告人/墙报展示人简介：

郭赛男，女，北京化工大学化学工程学院在读博士生。主要研究领域：卤族钙钛矿材料的制备、光催化二氧化碳等。2022 年获北京化工大学化学工程专业硕士学位，随后继续攻读本校化学工程与技术专业博士学位。至今，以第一作者已在 Langmuir、Small Methods 期刊上发表 SCI 论文 2 篇。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

金属间化合物催化剂的简便合成及其在氧还原反应中的优异催化耐久性

余盛伟[1]，毕璨元[1]，张丽丽[1]，曾嘉熙[1]，杨佳佳[1]，姜海波[1,*]，李春忠[1,*]

[1]华东理工大学，上海市徐汇区梅陇路130号，200030

*jianghaibo@ecust.edu.cn

摘要：制造铂基合金催化剂是提高贵金属利用率和降低燃料电池阴极氧还原催化剂成本的有效策略。然而，FCC型固溶合金结构稳定性较弱，不适合在酸性电解质中长期循环。[1] 要使铂合金催化剂转化为更稳定的金属间结构，通常需要进行热处理，而高温不可避免地会导致纳米颗粒团聚，从而损失电化学活性面积。[2] 在这项研究中，为了在制备金属间化合物结构的同时避免颗粒烧结，引入了尿素进行高温共还原。所制备的 $L1_0$-PtFe/C 的质量活性为0.69 A/mg_{Pt}，是商用 Pt/C（0.09 mA/cm^2）的7.6倍。经过50 k加速耐久性测试，$L1_0$-PtFe/C 显示出更强的稳定性，半波电位仅下降13 mV，质量活性仅下降25.9%。

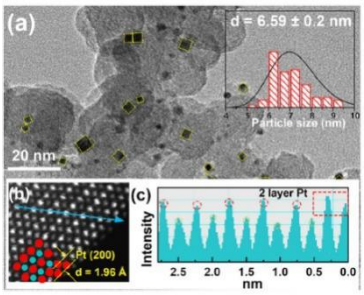


Fig. 1 Morphological characterization of o-PtFe/C.

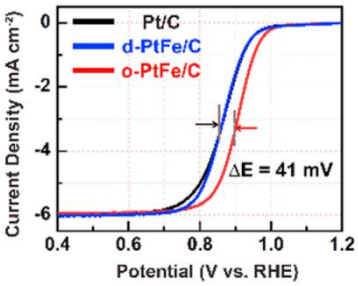


Fig. 2 ORR performance curves of Pt/C, o-PtFe/C and d-PtFe/C.

关键词：燃料电池；氧还原反应；金属间化合物

参考文献

[1] M. Zhou, J. Guo, B. Zhao, C. Li, L. Zhang and J. Fang, Improvement of Oxygen Reduction Performance in Alkaline Media by Tuning Phase Structure of Pd-Bi Nanocatalysts. J. Am. Chem. Soc., 2021, 143, 15891-15897.

[2] Z. Yu, S. Xu, Y. Feng, C. Yang, Q. Yao, Q. Shao, Y. F. Li and X. Huang, Phase-Controlled Synthesis of Pd-Se Nanocrystals for Phase-Dependent Oxygen Reduction Catalysis. Nano Lett., 2021, 21, 3805-3812.

报告人/墙报展示人简介：

余盛伟，男，1996 年 8 月 25 日生，2018 年本科毕业于华东理工大学材料科学与工程学院，2023 年在华东理工大学获博士学位，2023 年至今于本校做博士后研究员。课题研究方向为碱性燃料电池阴极氧还原反应催化剂。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Direct nitrogen fixation by synergistic combination of microwave plasma with MoO_3/γ-Al_2O_3

Ying Zhao*, Zijing Chen,Yue Ruan, Kunpeng Wang, Ling Zhu

School of Pharmacy, Anhui Xinhua University, Hefei 230088, Anhui, China

*E-mail of corresponding author: zy0808@mail.ustc.edu.cn

As the global demand for sustainable energy and nitrogen fertilizers continues to rise, the shortcomings of the traditional Haber-Bosch nitrogen fixation process are becoming increasingly apparent[1]. In response, plasma-based nitrogen fixation technology has garnered significant attention [2, 3]. As illustrated in Figure 1, a microwave plasma oxidation nitrogen fixation reactor has been designed and constructed utilizing microwave plasma technology [4]. This reactor employs a 0.1 $mol \cdot L^{-1}$ KOH aqueous solution for tail gas absorption. By modulating experimental parameters and leveraging gas chromatography, ion chromatography, and other analytical instruments, a quantitative analysis of the reaction products was conducted. Experimental outcomes reveal that microwave power, N_2/O_2 flow rates, and reaction duration exert notable influences on the efficiency of oxidative nitrogen fixation. Furthermore, isotope labeling experiments have confirmed the direct conversion of N_2 into chemical species under microwave plasma, primarily yielding NOx as the major product, albeit accompanied by side products such as NO and N_2O. These findings underscore the potential of microwave plasma technology in advancing nitrogen fixation processes towards greater efficiency and sustainability.

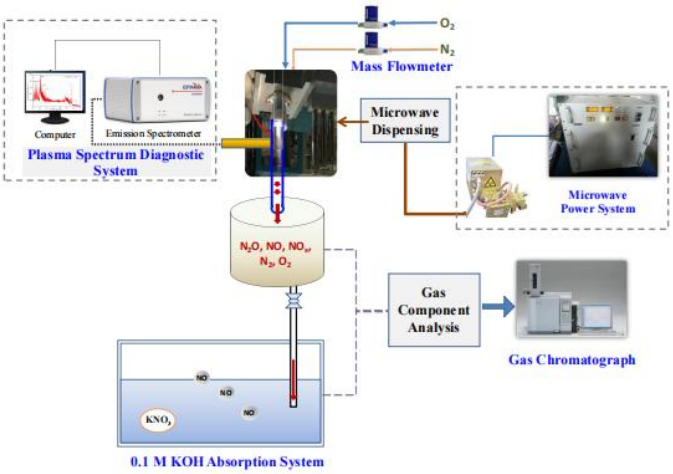


Fig.1 Schematic diagram of microwave plasma oxidation and nitrogen fixation process

To significantly augment the efficiency of NOx production, microwave plasma technology is integrated with catalysis, offering a synergistic approach[3, 5]. The 5% MoO_3/γ-Al_2O_3 catalyst was prepared using the impregnation method, and its physicochemical properties were analyzed through characterization methods such as XRD, SEM, BET, and TGA. The results indicate that this catalyst exhibits excellent thermal stability, a unique layered structure, and a large specific surface area, which are favorable for the adsorption and activation of nitrogen molecules. Even after multiple reactions, the catalyst maintains high activity. Under the influence of microwave plasma, the MoO_3/γ-Al_2O_3 catalyst can effectively promote the dissociation of N_2 molecules. By optimizing parameters such as microwave power, gas flow rate, and

reaction time, the generation of by-products can be suppressed, enabling an N_2 conversion rate of 35.40% and a NOx generation rate of 21.80%, with a nitrogen fixation energy consumption of approximately 0.95 MJ·mol-1 N. Furthermore, the synergistic effect of microwave plasma and the MoO_3/γ-Al_2O_3 catalyst provides new insights into efficient and environmentally friendly nitrogen fixation technology, potentially reducing energy consumption and environmental impact while supporting sustainable energy sources and nitrogen fertilizer production. Future research will continue to optimize reaction conditions and catalyst structures, explore the mechanism of synergistic effects, and lay the foundation for industrial applications.

This project is partially supported by Natural Science Research Project of Anhui Educational Committee Nos. KJ2021A1168, and University Synergy Innovation Program of Anhui Province Nos. GXXT-2022-026.

Keywords: microwave plasma; MoO_3/γ-Al_2O_3 catalyst; nitrogen fixation; synergy

References

[1] K. Rouwenhorst, F. Jardali, A. Bogaerts, L. Lefferts. Correction: From the Birkeland-Eyde process towards energy-efficient plasma-based NO(X) synthesis: a techno-economic analysis. Energy Environ Sci, 2023, 16, 6170-6173.

[2] S. Shen, Y. Chai, Q. Shen, Y. Jiang, X. Fang, Y. Pan. Gas-phase amination of aromatic hydrocarbons by corona discharge-assisted nitrogen fixation. Sci Rep, 2021, 11, 2841.

[3] Y. Zhao, Y. Zhao, R. Shi, B. Wang, G. Waterhouse, L.Z. Wu, C.H. Tung, T. Zhang. Tuning Oxygen Vacancies in Ultrathin TiO(2) Nanosheets to Boost Photocatalytic Nitrogen Fixation up to 700 nm. Adv Mater, 2019, 31, e1806482.

[4] T. Kim, S. Song, J. Kim, R. Iwasaki. Formation of NOx from Air and N2/O2 Mixtures Using a Nonthermal Microwave Plasma System. Jpn J Appl Phys, 2010, 49, 126201.

[5] B.S. Patil, C. N., L. J., O.I. A., H. V., W. Q. Low Temperature Plasma-Catalytic NOx Synthesis in a Packed DBD Reactor: Effect of Support Materials andSupported Active Metal Oxides. Applied Catalysis B: Environmental, 2016, 194, 123-133.

墙报展示人简介：

赵颖，1983 年 8 月，博士，安徽新华学院药学院讲师。毕业于中国科学技术大学等离子体物理专业，研究方向为低温等离子体应用，在催化剂材料的研究领域中开展了相关的基础性研究，发表 SCI 论文十余篇。

附：墙报展示非学生

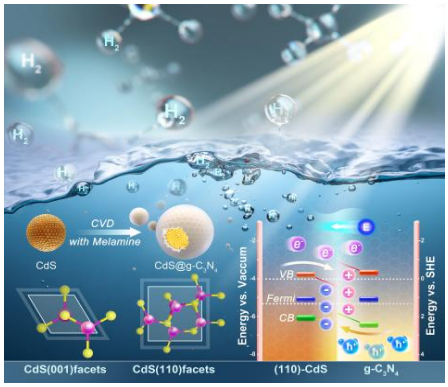
Band Alignment Tunning for Photocatalysts via Facets Engineering

Xiaohong Yang*[1], Xiaoli Ran[1], Youchao Zhang[1]

[1]Key Laboratory for Ecological Metallurgy of Multimetallic Mineral, Ministry of Education, School of Metallurgy, Northeastern University, Shenyang 110819, China

* yangxh@smm.neu.edu.cn

The heterojunction is a great approach to profit the photogenerated electrons and holes separation and then enhance the photoelectric current for the photochemical reactions, such as the hydrogen evolution reaction. The intrinsic of the enhanced electrons and hole separation is ascribed to the appropriate band alignment between the two contact materials and plenty of research has reported the different band alignments formed by the different contacted bulk nanomaterials. Few studies focus on the precious crystal structure-related band alignment. Here, we investigated the polyheptazine structured g-C_3N_4 together with the wurtzite CdS formed different band alignments through the different exposed crystal planes of CdS. It was found that along with the annealing temperature, the CdS will dominantly expose with the (110) facets and then form the S-scheme heterojunction with the g-C_3N_4. The formed built-in electric field between the valence band of CdS and the conductive band of g-C_3N_4 accelerates the recombination between the photogenerated electrons from CdS and holes from g-C_3N_4. Meanwhile, it promotes the separation of the photogenerated electrons with holes from g-C_3N_4, resulting the superior photocatalytic HER performance. The study supplies a new venue for preciously tunnelling the band alignments between the heterogeneous catalysts for optimising the photoelectric properties.



Keywords: Facet engineering, CdS@g-C_3N_4, HER, water splitting

References

[15] W. Wang, M. Xu, X. Xu, W. Zhou, Z. Shao, Perovskite Oxide Based Electrodes for High-Performance Photoelectrochemical Water Splitting, ANGEWANDTE CHMIE-INTERNATIONAL EDITION, 59 (2020) 136-152.

[16] C.C. Liao, Y.T. Yao, S. Kogularasu, P.H. Liao, M.L. Lee, J.K. Sheu, Cobalt Oxide Nanofilms on n-GaN Working Electrodes for Photoelectrochemical Water Splitting, J. Phys. Chem. C, 124 (2020) 25196-25201.

报告人/墙报展示人简介：

- 杨晓红副教授 2014 年毕业于澳大利亚新南威尔士大学材料科学与工程学院获博士学位，2015 起任东北大学冶金学院讲师、副教授。主要研究方向为 纳米半导体材料的低温绿色合成、密度泛函理论计算模拟、新型纳米复合材料的设计与应用开发，如能量转化材料、气体传感材料、环境催化材料等。作为项目负责人先后主持中国博士后基金，青年教师科研创新基金，中国自然科学青年基金等多项科研项目，东北大学交叉融合重点研发项目。作为主要成员参与东北大学基本科研业务费学术创新团队项目，科技部国家重点研发计划项目。发表学术论文 90 余篇，其中 SCI 论文 83 篇。合作出版学术专著 2 部，申请国家专利 18 项，授权 15 项。先后在中国、韩国、日本、澳大利亚、新加坡组织的国际学术会议上做大会报告。论文分别发表于“Journal of Materials Chemistry A”，“Journal of Colloid & Interface Science”， “Chemical Engineering Journal”，“Sensors & Actuator B”，“ACS sensors”，“Langmuir”，“International Journal of Hydrogen Energy”， “powder tehchnology”等高水平国际期刊上。其中一篇在 NRL 期刊上发表的论文 2016 年被 BIOMEDLIB 机构评为纳米颗粒合成领域的前二十名（排名第一）。目前，总引用达 1333 次， H 因子为 27（google scholar，2024 年 6 月）。

附：杨晓红、东北大学、不是学生、邮箱：yangxh@smm.neu.edu.cn

自牺牲BiOBr模板法合成α-Bi_2O_3/Bi_3O_4Br光催化剂及其固氮性能研究

付洪权*，谌柏文，张娟，廖钫，高和军，廖运文

西华师范大学化学化工学院, 四川 南充, *637000*

*Email: fubestone@163.com

摘要正文：氨是工业生产和人类生活中重要的物质之一。传统Haber-Bosch固氮法需高温、高压及甲烷热解的氢气，固氮过程能耗高[1]。因此，探索低能耗、绿色的合成氨方法是研究热点。光催化固氮作为一种可持续、环境友好的固氮策略。Bi基光催化剂因无毒、廉价、稳定且带隙适宜，在光催化反应中展现出巨大应用潜力[2]，其中，BiOBr基半导体具有良好的光催化固氮效率[3]。本研究以BiOBr为前驱体，通过不同浓度的碱溶液刻蚀处理，成功制备出富含氧空位（OVs）的α-Bi_2O_3/Bi_3O_4Br异质结光催化剂，并具有优秀的光催化固氮活性。实验结果表明，α-Bi_2O_3/Bi_3O_4Br-OVs异质结催化剂的活性主要来源于其丰富的氧空位，如图1a所示。该催化剂最大的光催化固氮活性(238.67 μmol·g^{-1}·h^{-1})，并具有较好的循环稳定性，如图1b所示。与单组分BiOBr相比，α-Bi_2O_3/Bi_3O_4Br-OVs异质结不仅拓宽了可见光的吸收范围，还提高了电荷载流子对的分离效率，增加了量子产率，从而显著提升了光催化固氮的产率。本研究为光催化固氮提供了新研究思路。

Table 1. Catalytic Activity of BiOBr-0.1 Catalysts for Nitrogen Fixation[a]

Catalysts	Atmosphere	Solvent	Light (420nm)	Yield NH_4^+ (μmol·g_{cat}^{-1}·h^{-1})
/	N_2	Methanol (5%v/v)	light	[b]N.D.
BiOBr-0.1	N_2	Methanol (5%v/v)	dark	N.D.
BiOBr-0.1	Air	Methanol (5%v/v)	dark	N.D.
BiOBr-0.1	Ar	Methanol (5%v/v)	dark	N.D.
BiOBr-0.1	N_2	/	light	N.D.
BiOBr-0.1	N_2	Methanol (5%v/v)	light	238.67
BiOBr-0.1	N_2	CH_3CN (5%v/v)	light	N.D.
BiOBr-0.1	N_2	AgCl	light	15.2
BiOBr-0.1	Ar	Methanol (5%v/v)	light	N.D.

[a]Reaction conditions: 15 mg of catalysts, 95% of deionized water, and 5% of CH_3OH were added into the reactor with 0.3 MPa N_2. NH_4^+ yield of photocatalytic nitrogen fixation consumption was normalized by catalyst mass. NH_4^+ yield = n_{NH4+}/ (t × $m_{cat.}$), where n_{NH4+} is amount of NH_4^+, t represents the reaction time, and $m_{cat.}$ represents the catalyst mass. The NH_4^+ yield is determined by Nessler's reagent method at

420 nm using a UV-2600 UV−vis spectrophotometer. [b] N.D. = not detected.

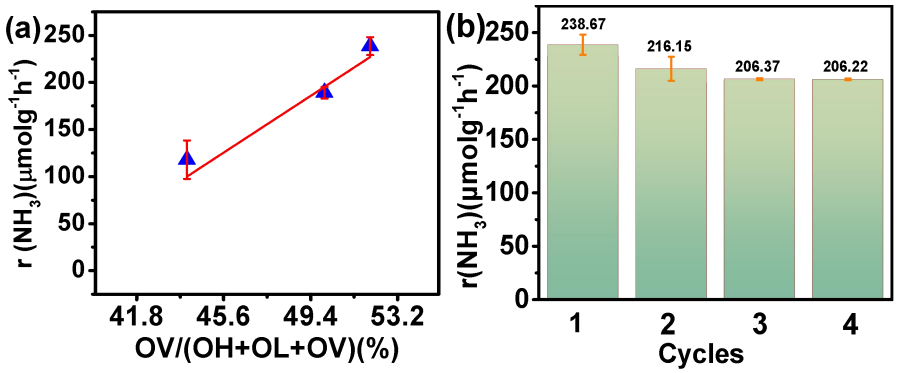


Fig. 1 (a) The relationship between BiOBr-0.1 NH_4^+ yield and oxygen vacancy ratio. (b) Recyclability of BiOBr-0.1 for four runs.

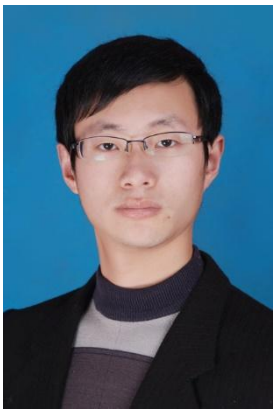
关键词：光催化固氮；溴氧铋；异质结；氧空位

参考文献

[1] Spatzal, T., et al., *Ligand binding to the FeMo-cofactor: structures of CO-bound and reactivated nitrogenase.* Science, 2014. 345(6204): 1620-1623.
[2] Xue, X., et al., *Oxygen Vacancy Engineering Promoted Photocatalytic Ammonia Synthesis on Ultrathin Two-Dimensional Bismuth Oxybromide Nanosheets.* Nano Letters, 2018. 18(11): 7372-7377.
[3] Zhang, Y., et al., *In Situ Construction of Porous β-Bi_2O_3/BiOCOOH Heterojunction Photocatalysts: Enhancing Nitrogen Fixation Activity by the Synergistic Effect of Oxygen Vacancies and Lattice Oxygen.* ACS Applied Energy Materials, 2022. 5(8): 9503-9511.

报告人/墙报展示人简介：

付洪权，博士，副教授，毕业于华南理工大学工业催化专业，主要研究纳米碳材料、铋基光催化材料及其吸附、催化反应特征，并运用密度泛函理论（DFT）计算相关催化反应机理。在 *ACS Catalysis*, *Analytical Chemistry*, *Applied Catalysis B: Environment and Energy*, *Green Chemistry*，*Journal of Colloid and Interface Science* 等期刊发表论。



附：墙报展示人为老师

ZnO负载金属催化剂表界面结构调控及构效关系研究

普颖慧 [1,2]，牛一鸣 [1,2]，张炳森 [1,2*]

[1] 中国科学院金属研究所，沈阳材料科学国家研究中心，沈阳，110016

[2] 中国科学技术大学，材料科学与工程学院，沈阳，110016

*Email: bszhang@imr.ac.cn

负载型催化剂中“金属-载体相互作用”（MSI）机制解析对催化剂结构设计和性能调控具有重要作用，是多相催化领域研究的重要内容之一。通过MSI能够实现对活性金属组分分散、相结构和表界面结构的调控，使其具有特殊的化学吸附和催化性质，进而提高反应的活性和选择性。原位电子显微学方法是解析催化剂在化学环境中动态结构演变的关键技术，能够在纳米/原子尺度上观察活性结构的形成和反应，对催化剂活性结构的调控具有重要作用。基于此，本报告以ZnO负载金属催化剂为研究对象，利用透射电子显微学为主要手段，系统研究了不同化学环境中ZnO载体与负载金属之间的MSI机制，并关联催化反应建立准确的构效关系。主要分为以下三部分：

（1）低维纳米材料结构和形貌的透射电子显微学统计研究：以不同形貌ZnO为模型材料，利用透射电子显微术对ZnO的形貌、暴露面和长径比进行了系统表征，基于电子晶体学研究了选区电子衍射在ZnO纳米棒和纳米片形貌和长径比表征中的应用，为利用透射电子显微术对低维纳米材料的形貌和结构表征提供了一种简便、准确的统计方法。

（2）Pd 在 ZnO 载体不同晶面的烧结行为及 CO 氧化反应研究：利用原位气体-加热透射电镜样品台系统研究了 CO 氧化反应中“金属-载体相互作用”对 Pd/ZnO 催化剂结构和性能的影响规律，揭示了 ZnO 不同晶面对活性组分 Pd 烧结行为和反应中稳定性的影响。

（3）“反应金属-载体相互作用”调控 Ni 活性结构用于高效加氢：系统研究了不同化学环境下“反应金属-载体相互作用”对 Ni/ZnO 催化剂活性结构的调控机制，成功获取 Ni_3ZnN 间隙氮化物结构，实现了对金属 Ni 几何和电子结构的调控，有效提升了其在 1,3-丁二烯选择性加氢反应中的性能。

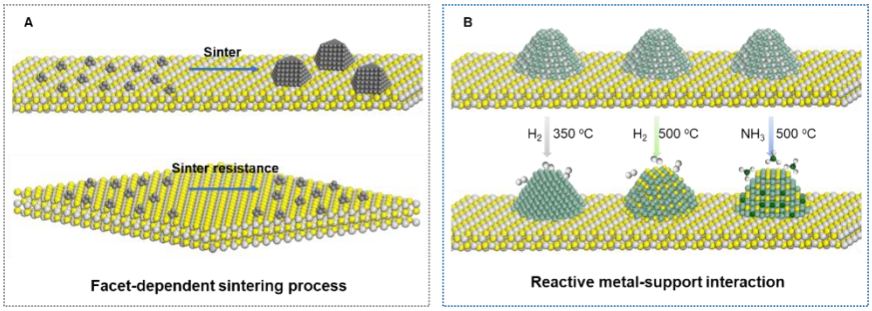


Fig. 1 (A) Schematic of facet-dependent sintering processs of Pd/ZnO catalysts. (B) Schematic of reactive metal-support interaction of Ni/ZnO Catalysts.

关键词：透射电子显微学；ZnO；金属-载体相互作用；表界面结构；构效关系

参考文献

[1] Y. H. Pu[#], Y. M. Niu[#], Y. Z. Wang, S. Y. Liu and B. S. Zhang*, Statistical morphological identification of low-dimensional nanomaterials by using TEM. Particuology 2022, **61**, 11-17.

[2] Y. H. Pu, Y. M. Niu*, Y. Z. Wang, Q. Liang, L. Zhang and B. S. Zhang*, Sinter resistance and activity enhancement via a facet- dependent metal support interaction of Pd/ZnO catalysts in CO oxidation. *J. Phys. Chem. C* 2021, **125**, 20351-20359.

报告人/墙报展示人简介：

普颖慧，女，中国科学院金属研究所 2022 级材料物理与化学专业在读博士研究生，主要围绕负载型催化剂表界面结构调控及原位解析开展工作。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：学生

A novel phase-mixed $Bi_2MoO_6/Bi_{14}MoO_{24}$ heterogeneous nanorods for efficient degradation of tetracycline

Author (Junhui Yi)[1], Second Author(Xiaojing Xiao)[2], Corresponding Author(Changlin Yu)[1]

School of Chemical Engineering, Guangdong University of Petrochemical Technology, Maoming 525000, China.

E-mail: yuchanglinjx@163.com

Abstract: Bismuth molybdate has attracted much attention as a visible semiconductor photocatalyst with great application potential, but bismuth molybdate materials often have scientific problems such as poor separation of photogenerated charges and weak activation ability of photogenerated electrons for O_2. The S-type $Bi_2MoO_6/Bi_{14}MoO_{24}$ nanorods heterojunction was successfully fabricated using hydrothermal treatment and high-temperature calcination combined method. The novel phase-mixed heterojunction showed high photocatalytic efficiency and stability. Transient photocurrents and Kelvin probe force microscopy (KPFM) demonstrated faster separation of the phase-mixed heterojunction photogenerated carriers. From the EPR spectrum, it can be analyzed that the material produced super oxide anion ($\bullet O_2^-$) and hydroxyl (•OH) active group. Accordingly, a possible S-type photocatalytic charge transfer mechanism is proposed. This research enriches the phase-mixed heterojunction system and provides a reference for the design of efficient photocatalysts in the future.

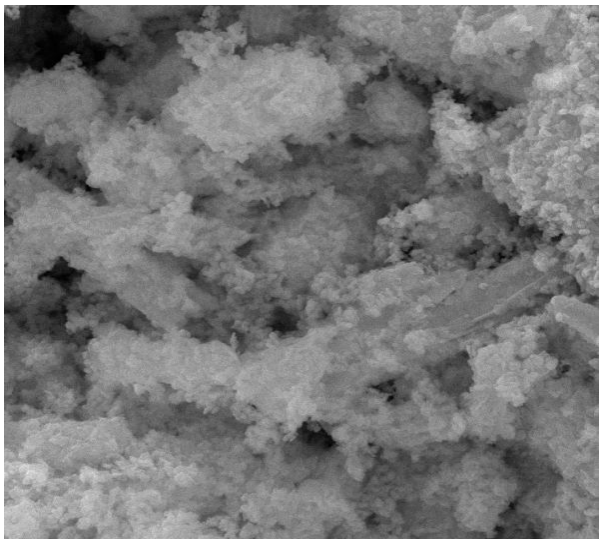


Fig. 1 $Bi_2MoO_6/Bi_{14}MoO_{24}$ heterogeneous nanorods

Keywords: $Bi_2MoO_6/Bi_{14}MoO_{24}$; heterogeneous nanorods; tetracycline removal

References

[1] M. Xu, A. Zada, and Y Qu, et al. Ti_2O_3/TiO_2 heterophase junctions with enhanced charge separation and spatially separated active sites for photocatalytic CO_2 reduction. *Phys.Chem.Chem.Phys.,2020, 22, 4526*.

[2] Y. Peng,*, K. Wang, and A. Xu*, Fabrication of one-dimensional Bi2O3–Bi14MoO24 heterojunction photocatalysts with high interface quality CrystEngComm, 2017, 19,237

墙报展示人简介：

易均辉，博士研究生，副教授，2015 年毕业于华南理工大学，同年加入广东石油化工学院。主要从事能源与环境催化基础与应用研究，目前主持省部级项目 2 项，主要参与国家自然科学基金 1 项，市厅级项目 2 项和横项课题 1 项。在 Journal of Hazardous Materials、Materials& design、Separation and Purification Technology、Ceramics International 发表论文多篇。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

氧化升级回收聚乙烯塑料制长链二元酸

黄垒*

上海大学理学院纳米科学与技术研究中心，上海，中国，200444

*Email: leihuang@shu.edu.cn

塑料产量在2019年达到3.68亿吨，预计到2050年将超过11亿吨，约占全球石油用量的20%，然而大多数塑料在使用后被遗弃、简单填埋或焚烧，带来了系列环境问题。利用化学方法将塑料升级回收为小分子、单体或者更有价值的其它化学品，使废弃塑料“重获新生”，成为塑料回收利用的热点方向。其中，聚乙烯是应用最为广泛的一种塑料，由于其稳定的碳骨架和缺乏特定的官能团，导致化学回收的温度高、产物选择性低，迫切需要开发高效的化学升级回收技术。

最近，我们开发了一种催化氧化工艺，可在温和条件下将废聚乙烯（PE）塑料转化为长链二元酸[1, 2]，相继开发了贵金属催化剂和非贵金属催化剂体系，可在1.5 MPa的压力和160 ℃的温度下，将PE塑料升级回收为长链二元酸（M_w, 558 g/mol）；对不同的PE原料和回收塑料，也表现出优异的性能。该工作为聚乙烯废塑料的回收提供了一条新的路径，并有望扩展到其他高价值化学品和PE以外的其他塑料。

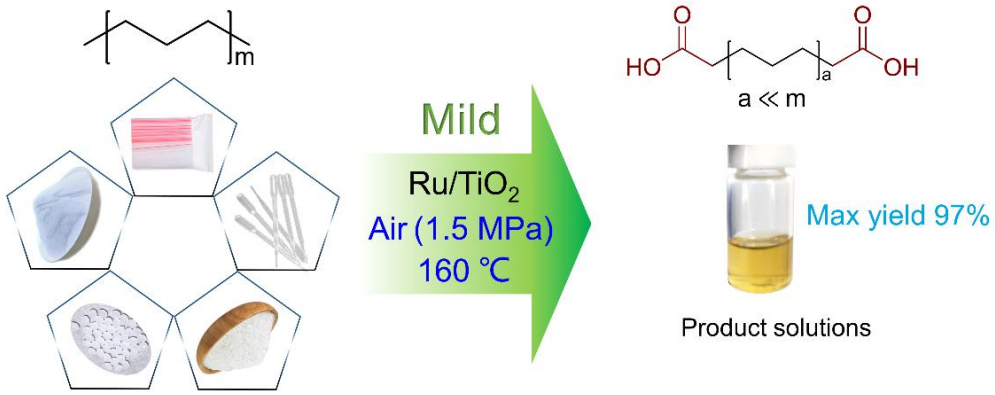


Fig. 1 Catalytic oxi-upcycling of polyethylene to aliphatic dicarboxylic acid under a mild condition

关键词：塑料；升级回收；催化氧化；过渡金属；选择性

参考文献

[1] K. Wang, R. Jia, P. Cheng, L. Shi, X. Wang and L. Huang. Highly selective catalytic oxi-upcycling of polyethylene to aliphatic dicarboxylic acid under a mild hydrogen-free process, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, 62, e202301340.

[2] K. Wang, F. Yan and L. Huang. Recent progresses and challenges in upcycling of plastics through selective catalytic oxidation. *ChemPlusChem*, 2024, e202300701.

报告人简介：

黄垒，男，上海大学副研究员，博士生导师，中国颗粒学会青年理事、上海市颗粒学会理事，入选斯坦福大学发布的 2023 年全球前 2%顶尖科学家（2022 年度）榜单。致力于塑料高价值化学回收、催化和传感纳米材料设计及应用，已在

Angew Chem Int Edit、Chinese J Catal、J Catal、Appl Catal A/B、ACS Nano 等国际刊物上发表研究论文 70 余篇，被引 5000 余次。担任 Angew Chem Int Edit、Appl Catal B 等期刊审稿人。目前已申请发明和实用新型专利 40 余项，多项授权。主持承担了国家自然科学基金面上和青年项目、上海市科委国际合作项目等；注重产学研合作，承担多项企业研发项目，部分产品已应用示范。

面向生物质转化的颗粒催化剂

谌春林[1, *]，张建[1]

[1] 中国科学院宁波材料技术与工程研究所，宁波，315201

*Email: chenchunlin@nimte.ac.cn

摘要正文：在全球能源危机和环境问题日益严重的背景下，可再生能源和绿色化学的研究成为了科技发展的重要方向。在可持续发展领域，生物质因其丰富的储量、可再生性和环境友好性，发挥着日益重要的作用。在这一背景下，通过糖脱水制得的5-羟甲基糠醛（HMF）作为一种关键的生物质平台分子脱颖而出，并在合成包括呋喃基聚合物、精细化学品和生物燃料在内的多种重要化学品中发挥着核心作用。然而，HMF分子结构中的高活性醛基、羟基和呋喃环，为选择性调控HMF高效合成和定向转化带来了巨大挑战。针对以上问题，国内外研究者通过采用均相和非均相催化方式，借助热催化、电催化、光催化和光电催化等途径，通过理性设计催化剂和精准控制反应条件，实现了HMF的高效制备和转化，为生产各类呋喃基化学品提供了有力支持。近年来，我们率先建成了千吨级HMF生产线，并在今年4月通过了科技成果鉴定。同时，我们通过热催化和电催化方法氧化或还原生物质使之进一步升值，并比较了两类催化方法的优缺点。本报告主要汇报我们在HMF合成、氧化、还原方面的最新研究进展[1-3]。

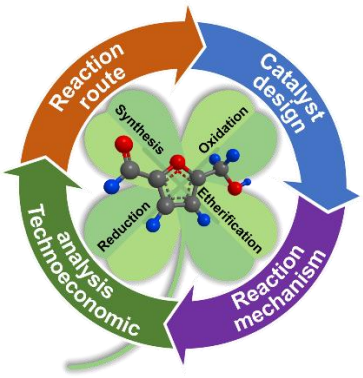


Fig. 1 Research topics in our group: Synthesis and conversion of 5-hydroxymethylfurfural

关键词：5-羟甲基糠醛；催化合成；催化转化

参考文献

[1] C. L. Chen, M. X. Lv, H. L. Hu, L. Y. Huai, B. Zhu, S. L. Fan, Q. G. Wang, J. Zhang*, 5-Hydroxymethylfurfural and its Downstream Chemicals: A Review of Catalytic Routes, *Adv. Mater.*, 2024, 2311464.

[2] J. Liu, B. Zhu, Y. Zhong, S.L. Fan, L.Y. Huai, H.L. Hu, Y. Yang, J. Zhang*, C.L. Chen*, Turning damages into benefits: Corrosion-engineered cobalt foam for highly efficient biomass upgrading coupled with H_2 generation, *Chem. Eng. J.*, 2023, 472: 144877.

[3] Y. Gao, S. L. Fan, B. Zhu, S.I. El-Hout, J. H. Lyu, J. Zhang*, C. L. Chen*, Cobalt and nitrogen co-modified graphitic carbon: A bifunctional catalyst for thermocatalytic and electrocatalytic oxidation of HMF to FDCA, *Catal. Today,* 2024, 440: 114847.

Particle catalysts for biomass conversion

Chunlin Chen[1,*], Jian Zhang [1]

[1]Ningbo Institute of Materials Technology & Engineering, Chinese Academy of Sciences, Ningbo, 315201

* chenchunlin@nimte.ac.cn

Amidst the escalating global energy crisis and environmental concerns, research into renewable energy and green chemistry has emerged as a pivotal direction for technological advancement. Within the realm of sustainable development, biomass stands out for its abundant availability, renewability, and environmental friendliness, playing an increasingly crucial role. In this context, 5-hydroxymethylfurfural (HMF), derived from sugar dehydration, has emerged as a key biomass-derived platform molecule, occupying a central position in the synthesis of diverse and important chemicals, including furan-based polymers, fine chemicals, and biofuels. Nevertheless, the highly reactive aldehyde group, hydroxyl group, and furan ring within the HMF molecular structure pose significant challenges for the selective and efficient synthesis as well as directed conversion of HMF.

To address these challenges, researchers worldwide have adopted both homogeneous and heterogeneous catalytic strategies, leveraging thermal, electrocatalytic, photocatalytic, and photoelectrocatalytic approaches. Through rational catalyst design and precise control of reaction conditions, these efforts have enabled the efficient preparation and transformation of HMF, providing robust support for the production of various furan-based chemicals. Recently, our team has taken the lead in establishing a kiloton-scale HMF production line, which successfully underwent scientific and technological achievement evaluation in April this year. Concurrently, we have explored the oxidation and reduction of biomass for value enhancement via thermal and electrocatalytic methods, comparing the merits and drawbacks of these two catalytic approaches. This report primarily showcases our latest research advancements in the synthesis, oxidation, and reduction of HMF. [1-3]

Keywords: 5-hydroxymethylfurfural, catalytic synthesis, catalytic conversion.

References

[17] C. L. Chen, M. X. Lv, H. L. Hu, L. Y. Huai, B. Zhu, S. L. Fan, Q. G. Wang, J. Zhang*, 5-Hydroxymethylfurfural and its Downstream Chemicals: A Review of Catalytic Routes, *Adv. Mater.*, 2024, 2311464.

[18] J. Liu, B. Zhu, Y. Zhong, S.L. Fan, L.Y. Huai, H.L. Hu, Y. Yang, J. Zhang*, C.L. Chen*, Turning damages into benefits: Corrosion-engineered cobalt foam for highly efficient biomass upgrading coupled with H2 generation, *Chem. Eng. J.*, 2023, 472: 144877.

[19] Y. Gao, S. L. Fan, B. Zhu, S.I. El-Hout, J. H. Lyu, J. Zhang*, C. L. Chen*, Cobalt and nitrogen co-modified graphitic carbon: A bifunctional catalyst for thermocatalytic and electrocatalytic oxidation of HMF to FDCA, Catal. Today, 2024, 440: 114847.

报告人简介：

谌春林，研究员、博士生导师，中国化学会高级会员、颗粒学会会员，长期从事纳米材料制备、

表征、催化与电化学研究，包括生物质热催化、电催化、光催化转化，以及甲烷燃烧、CO 氧化、烷烃氧化脱氢。在 *Nature Commun.*、*Adv. Mater.*、*ACS Catal.*、*Appl. Catal. B*、*J. Energy Chem.*、*Chem. Eng. J.*等期刊发表论文 60 余篇，申请国内和 PCT 专利 30 余项、授权中国专利 6 项、授权美国专利 1 项、成果转化 11 项，主持国家、省、市项目 11 项，担任 *Adv. Mater.*、*Adv. Funct. Mater.*、*Appl. Catal. B*、*Chem. Eng. J.*、*Green Chem.*等 30 余本期刊审稿人。

光/电催化5-羟甲基糠醛氧化反应研究

余文清，霍韵滢，郭　聪，张　巧*，彭　峰*

广州大学化学化工学院，广东广州，510006

*Email: zhangqiao@gzhu.edu.cn (张巧),, fpeng@gzhu.edu.cn (彭峰).

摘要正文： HMF的催化氧化过程可以产生多种有价值的化学产品，包括2,5-二甲酰呋喃、5-羟甲基-2-呋喃甲酸、5-甲酰-2-呋喃甲酸和2.5-呋喃二甲酸(FDCA)。其中, FDCA是生物基聚合物如聚乙烯呋喃酸酯的关键单体, 展现出取代石油衍生的聚对苯二甲酸乙二醇酯的潜力。如何有效利用可再生太阳能对生物质进行转化成为了一个研究热点。直接利用太阳能或者利用太阳能发电产生电能将5-羟甲基糠醛(HMF)转化为生物燃料和高附加值的含氧化学品，将为可再生能源转化为化学品提供了一条有前途的替代途径。

项目研究了在Au/rutile和Au/anatase体系研究了暗态和可见光条件下催化氧化HMF反应，Au/rutile在283、293和303 K下光驱动HMF氧化反应速率是暗态条件下3.36、1.38、0.93倍，Au/anatase光驱动HMF氧化反应速率是暗态下2、1.06、0.98倍，研究表明可见光对HMF氧化反应的促进作用与温度有关，低温下可见光促进HMF氧化反应更明显。暗态和可见光下Au/rutile催化HMF氧化的表观活化能分别为92.57和52.14 kJ/mol，Au/anatase分别为53.38和43.42 kJ/mol，动力学结果表明可见光能够降低反应能垒促进反应的进行。项目利用新颖的酸腐蚀诱导策略，原位构建了自支撑式$Ni(OH)_2$/NF电极表现出稳定、高效的电化学氧化HMF性能, HMF转化率接近100%, FDCA产率与法拉第效率都在90%左右，催化剂具有良好的稳定性，连续5次电解循环的$Ni(OH)_2$/NF催化活性仍然保持稳定。原位形成策略使$Ni(OH)_2$与NF之间形成致密的界面，有助于在电化学反应中保持良好的导电性和稳定性。原位电化学阻抗测试、原位拉曼和开路电位测试结果表明，较好的催化性能得益于$Ni(OH)_2$在HMF氧化过程中动态循环演化为NiOOH，而HMF分子迅速消耗原位形成的NiOOH物种，生成FDCA，同时NiOOH在此过程中被还原为最初的$Ni(OH)_2$。将反应体系应用于连续流动电解池装置，探究了流速、电压对HMF电化学流动池反应体系的影响，在160 mL min^{-1}和1.65 V (vs. RHE)的条件下，该装置能够稳定运行60 h, FDCA的产率高达27 mg h^{-1} cm^{-2}，表现出较好的应用潜力。综上，利用太阳能光催化或者光-电转化生物质制备高附加值化学品，耦合了太阳能和生物质能两大清洁能源，是解决能源和环境问题的重要途径，具有重要的意义。

关键词：光催化；电催化；5-羟甲基糠醛；催化氧化

参考文献

[1] Wenqing Yu, Ying Wang, Hanwen Zhang, Qiao Zhang,* Shengyang Wang, Zhiting Liu, Guangxing Yang, and Feng Peng* Insights into the Selective Oxidation of 5‑Hydroxymethylfurfural over Au/TiO_2 Catalysts under Photoexcited and Dark States . ACS Sustainable Chem. Eng. 2023, 11, 13116−13125

[2] Yunying Huo, Cong Guo, Yongle Zhang, Jingyi Liu, Qiao Zhang*, Zhiting Liu, Guangxing Yang, Rengui Li*, FengPeng* Realizing efficient electrochemical oxidation of 5 -

hydroxymethylfurfural on a freestanding $Ni(OH)_2$/nickel foam catalyst. Chinese Journal of Catalysis. 2024, 63, 282-291

报告人/墙报展示人简介：

张巧，博士，广州大学化学化工学院副教授，硕士生导师，广州大学百人计划引进人才，2019 年入选广州市高层次人才青年后备人才。主要从事电催化、光催化、液相催化、生物质催化等方面研究，以第一作者、通讯作者和合作作者在国际主流学术刊物上发表 SCI 学术论文 20 余篇，多篇文章发表在国际权威学术期刊 Nano Energy，ACS Catal., Nano Res.，J. Catal. 等杂志上，累计引用 2000 余次。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

光催化剂电子结构调控强化电荷分离性能研究

艾敏华[1,*]，潘伦[1]，邹吉军[1,*]

[1] 天津大学化工学院，天津市海河教育园雅观路 135 号，300350

*Email: aiminhua@tju.edu.cn

摘要正文：光催化是一种将太阳能转化为高价值化学品的可再生能源技术，其中光催化剂的性能与半导体的电子性质密切相关。基于电子的电荷和自旋两大内在属性，通过自旋极化调控和功能异质结构建来强化电荷分离性能、构筑界面电荷定向传递通道，创制高效光催化剂体系。一方面，面向自旋极化特性调控难度大，自旋极化增强电荷分离机制不明的问题，发现了金属缺陷诱导电子自旋极化的现象，揭示了金属缺陷诱导电子产生自旋极化的机制；发现了纯无机氧化物中原子级手性结构的构建可有效诱导室温下的自旋选择性效应，促进电荷分离和长寿命载流子的产生。另一方面，面向双组分半导体界面电荷传递动力不足的问题，提出了通过吸附调节相对功函数，实现界面电子传输路径转换和氧化/还原位点的高效利用；提出通过缺陷工程构建了压电型同/异质结，实现压电效应和同/异质结特性有效耦合，形成了界面定向传递通道，显著促进了界面电荷分离。这些工作为调控光催化剂中电荷和自旋属性依赖的电荷分离过程提供了思路。

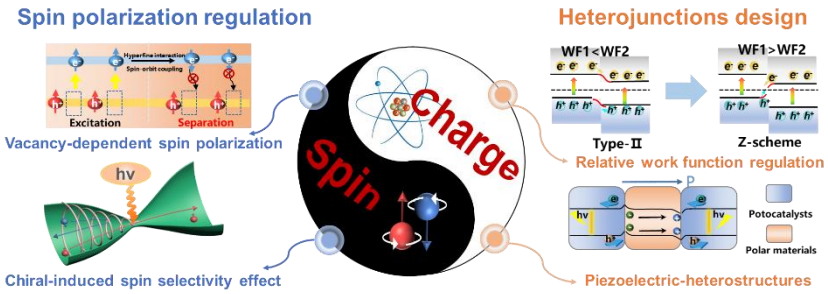


Fig. 1 Electronic structure regulation for promoting charge carrier separation

关键词：自旋极化；自旋选择效应；压电效应；缺陷工程；电荷分离强化

参考文献

[1] **M. Ai**, L. Pan*, J.-J. Zou*, *Nat. Commun.* 2023, 14: 4562.

[2] L. Pan[1], **M. Ai[1]**, J.-J. Zou*, *Nat. Commun.* **2020**, 11: 418.

[3] **Ai M.**, Pan L.*, *Green Energy Environ.* **2024**, 9 (9): 1466-1476.

[4] **Ai M.***, Zou J.-J.*, *J. Mater. Chem. A*, **2024**, 12 (9): 5366-5376.

[5] Chen Y.; Lin M.; **Ai M.***; Zou J.-J.; Pan L.*, *Chem. Eng. Sci.*, **2024**, 295: 120174.

报告人/墙报展示人简介：

艾敏华，天津大学助理研究员，主要从事高效光催化剂设计和光合成高能燃料研究，聚焦自旋催化剂设计、缺陷催化材料开发和光反应机理研究。以第一/通讯作者在 Nature Communications(2)、AIChE Journal、Chemical Engineering Science、Applied Catalysis B-Environmental、Green Energy &

Environment 等期刊发表论文 11 篇，1 篇入选 ESI 高被引论文。主持国家自然科学基金青年项目、中国博士后创新人才支持计划、中国博士后科学基金第 74 批面上、航空科学基金等基金项目。参加国内外学术会议共计 11 次，其中邀请报告 3 次，口头报告 4 次。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Enhanced glycerol oxidation toward dihydroxyacetone over gold/palladium binary nanocatalysts by structure control

Yuanming Feng[1], Yunpeng Bi[2], Chunmei Zhou[1,*]

School of Chemistry and Molecular Engineering, Nanjing Tech University, Nanjing 211816

Gold/palladium binary catalysts have been widely used to the selective oxidation of glycerol to produce value-added chemicals. In this work, Au, Pd, AuPd alloy, Au@Pd core-shell, and Au-Pd Janus nanoparticle catalysts prepared by sol-immobilization and photochemical deposition methods were employed to the selective oxidation of glycerol toward dihydroxyacetone (DHA). The results showed that the activity of glycerol oxidation and the selectivity to DHA largely depended on the configuration of Au and Pd. Mechanistically, the activation of glycerol and oxygen molecule was significantly promoted with the increase of the contact ratio between Au and Pd. That was, the turnover frequency of glycerol and DHA generation rate over the alloyed AuPd nanoparticles were remarkably higher than those of Au@Pd core-shell and Au-Pd Janus nanoparticle catalysts. It was due to the close contact of Pd with Au atoms remarkably promoted the electron transfer from Pd to Au, resulting in increasing the activity of Au sites, and moderately inhibiting the activity of Pd sites, which benefited to generate DHA rapidly. Up to 61% yield of DHA was achieved at 87% glycerol conversion over the alloyed AuPd catalyst.

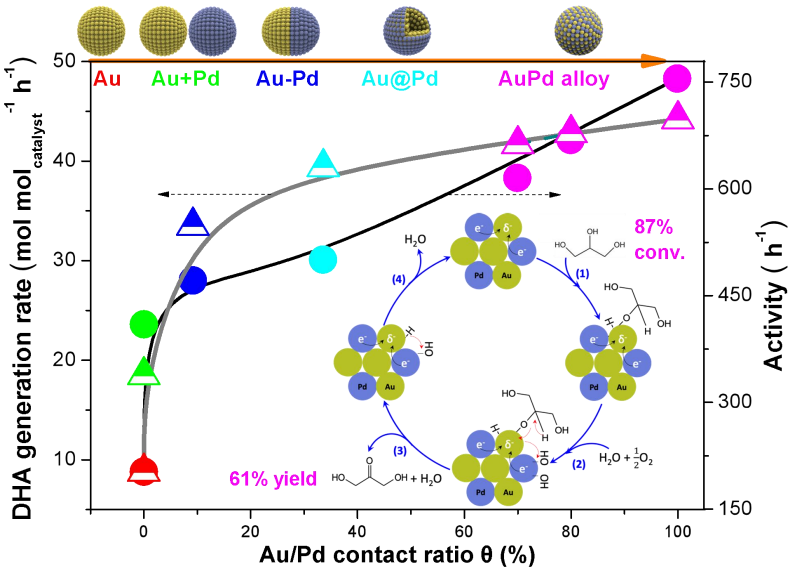


Fig.1 Correlation between Au/Pd contact ratio and catalytic performance for differnt CNT supported catalysts.

Keywords: Gold/palladium catalyst, Structure control, Glycerol oxidation, Dihydroxyacetone

References

[20] X. Wan, C. Zhou, J. Chen, W. Deng, Q. Zhang, Y. Yang, Y. Wang, Base-Free Aerobic Oxidation of 5-Hydroxymethyl-furfural to 2,5-Furandicarboxylic Acid in Water Catalyzed by

Functionalized Carbon Nanotube-Supported Au-Pd Alloy Nanoparticles; ACS. Catal., 2014, 4, 2175-2185.

[21] Y. Meng, H. Wang, Y. Dai,J. Zheng, H. Yu, C. Zhou, Yanhui Yang; Modulating the electronic property of Pt nanocatalyst on rGO by iron oxides for aerobic oxidation of glycerol；Catal. Comm., 2020, 106073.

[22] P. Luo, J. Wang, W. Rui, R. Xu, Z. Kuai, D. Yang,X. Wan, C. Zhou, Y. Yang, Y. Dai, Ball-milling-induced phase transition of ZrO2 promotes selective oxidation of glycerol to dihydroxyacetone over supported PtBi bimetal catalyst; Chem. Eng. J., 2023, 467, 143502.

水分子活化对水系电催化的影响机制

杨光星*

[1] 广州大学，化学化工学院，广州，510006

*Email: yanggx@gzhu.edu.cn

摘要正文：能源电催化在现代能源转换与储存技术中至关重要，被广泛应用于燃料电池、电解水制氢、电催化合成等领域。在水系电催化过程中，除了反应底物分子直接参与反应外，水分子也常常作为关键参与者介入其中。以醇类电氧化反应为例，水分子需经历活化解离过程，生成具有氧化性的羟基，继而氧化表面含碳物种。然而，若水分子的活性过强，可能导致催化活性位点被氧化而失活，或引发其他副反应。对于在酸性条件下的氧还原反应(ORR)，当电位较高时，水分子的活化对ORR的具体影响机制尚不完全明确。因此，在涉水的电催化反应体系中，确定水分子是否需要被活化、在何种位点上被活化以及何时被活化，是深入解析水分子参与催化过程的关键所在，同时也是理性设计高效催化剂所面临的核心挑战。(1)针对长期以来的氧还原(ORR)起始电位高的难题，揭示了Pt催化剂上ORR的高过电位主要来自于水活化导致的Pt表面氧化，通过抑制水活化，动力学上减缓Pt氧化，进而提高ORR起始电位。(2)针对CO电氧化电位高的难点，发现Pt催化剂表面上H2O活化位点与CO吸附位点不同，通过模拟指出两种位点的会理分布是理性设计高效电催化剂的关键因素。(3)针对乙醇完全电氧化效率低的问题，发现并揭示了H_2O活化解离与C-C键断裂均是乙醇完全电氧化的速率控制步骤，通过创制能匹配这两步活化能的催化剂，有效提高了乙醇完全电氧化性能。

关键词：水分子活化；氧气还原；CO电氧化

参考文献

[1] Zenan Wu, Guangxing Yang*, Qiao Zhang, Zhiting Liu*, and Feng Peng*. Deciphering the high overpotential of oxygen reduction reaction via comprehensively elucidating the open circuit potential, Energy Environ. Sci., 2024, 17, 3338-3346.

[2] Yajun Zheng, Hedan Yao, Ruinan Di, Zhicheng Xiang, Qiang Wang*, Fangfang Lu, Yu Li, Guangxing Yang*, Qiang Ma, and Zhiping Zhang*. Water coordinated on Cu(I)-based catalysts is the oxygen source in CO_2 reduction to CO, Nat. Commun., 2022, 2577.

[3] Dongyan Shen#, Yong Liu#, Guangxing Yang*, Hao Yu, Peng-Fei Liu, and Feng Peng*. Surface-structure sensitive chemical diffusivity and reactivity of CO adsorbates on noble metal electrocatalysts. Appl. Catal. B, Environ., 2021, 281, 119522.

[4] Guangxing Yang, Lida Farsi, Yuhan Mei, Xing Xu, Anyin Li, N Aaron Deskins, and Xiaowei Teng*. Conversion of ethanol via C–C splitting on noble metal surfaces in room-temperature liquid-phase. J. Am. Chem. Soc., 2019, 141(24), 9444–9447.

S型$BiVO_4$/NiAl-LDH异质结高效去除水体中抗生素

罗金*，周小松，周训富

岭南师范学院，广东省湛江市赤坎区寸金路 29 号，524048

*Email: luojin1108@lingnan.edu.cn

摘要：光催化降解技术被认为是最有前景的废水治理技术，其关键是开发高效、稳定、廉价的半导体光催化材料，一直是国内外研究的热点之一。镍铝水滑石（NiAl-LDH）作为一种新型的可见光催化材料，因其独特的结构和优异的光电性质等，被广泛应用于光解水制氢、光还原二氧化碳和光降解有机污染物。然而，单一NiAl-LDH仍面临光生载流子分离效率低、活性位点不多、氧化还原反应速率慢等问题，导致其较低的光催化活性。基于此，本文采用水热法原位构建S型$BiVO_4$/NiAl-LDH复合光催化材料，并利用XRD、SEM、XPS、UV-vis、PL等技术对所制备样品的结构、形貌、组成和光学性质进行了表征，考察了其在可见光下降解四环素的光催化性能。实验结果表明，复合适量的$BiVO_4$能显著提高NiAl-LDH光催化降解四环素的活性，当复合$BiVO_4$的质量为400 mg时，其降解四环素活性约为单一NiAl-LDH的21倍，这可能源于构建的S-异质结不仅促进了光生电子和光生空穴的有效分离，还保持了NiAl-LDH的强还原能力和$BiVO_4$的强氧化能力。这将为进一步发展高效稳定廉价的S型异质结光催化材料提供切实可行的实验依据。

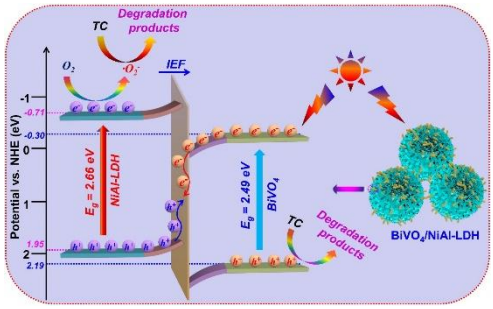


Fig. 1 Proposed photodegradation mechanism of TC over the $BiVO_4$/NiAl-LDH under visible light irradiation

关键词：$BiVO_4$；NiAl-LDH；S型异质结；光催化降解；四环素

参考文献

[1] L.Y. Zhang, J.J. Zhang, H.G. Yu, et al. Emerging S-scheme photocatalyst, *Adv. Mater.*, 2022, 34: 2107668.

[2] F.Y. Li, G.H. Zhu, J.Z. Jiang, et al. A review of updated S-scheme heterojunction photocatalysts, *J. Mater. Sci. Technol.*, 2024, 177: 142-180.

[3] G.J. Li, Y. Deng, T. Li, et al. Efficient photocatalytic NO oxidation over novel NiAl layered double hydroxide/$Bi_4Ti_3O_{12}$ Z-scheme heterojunctions with boosted charge separation and O_2 activation, *J. Mater. Chem. A*, 2023, 11: 13640-13652.

[4] J. Luo, X.F. Zhou, F. Yang, et al. Generating a captivating S-scheme $CuBi_2O_4/CoV_2O_6$ heterojunction with boosted charge spatial separation for efficiently removing tetracycline antibiotic from wastewater. *J. Clean. Prod.*, 2022, 357: 131992.

[5] J. Luo, J.Y. Chen, X.T. Chen, et al. Construction of cerium oxide nanoparticles immobilized on the surface of zinc vanadate nanoflowers for accelerated photocatalytic degradation of tetracycline under visible light irradiation. *J. Colloid Interf. Sci.*, 2021, 587, 831-844..

报告人/墙报展示人简介：

罗金，男，湖南邵阳人，1983 年 11 月出生，博士、副教授。近年主要从事纳米碳催化与光催化方面的基础与应用研究，围绕与化学工艺绿色化、新能源开发及高效利用有关的前沿科学问题，利用新颖纳米碳催化材料开展绿色化工新技术研究及新型可见光催化剂设计与应用研究。以第一作者或通讯作者发表 SCI 论文 30 余篇，其中 ESI 高倍引论文 2 篇，主持广东省自然科学基金项目 3 项，在纳米材料制备与环境催化研究领域形成特色。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

单团簇催化反应历程的单分子电子学表征技术

卫彩云[1]，高铭滨[1,*]，洪文晶[1,*]

[1] 厦门大学化学化工学院，福建省厦门市思明区思明南路 422 号，361000

*Email: mbgao@xmu.edu.cn

摘要正文：

金属纳米团簇(NCs)的尺寸介于单原子和纳米颗粒之间，NCs通常具有独特的电子结构，因此表现出非凡的催化活性。通过在NCs的表面上引入配体能够有效地避免金属团簇聚团形成纳米颗粒和调控金属电子结构以改进催化活性等优势。发展针对单一纳米团簇的活性位-配体相互作用以及催化反应过程中分子的动态演化过程，以期在单一团簇尺度下精准地建立团簇结构-反应活性关系，从而合理设计金属纳米团簇催化剂。本工作基于单分子电子学表征技术的基础上，构筑了能够锚定在纳米电极/电子回路上的NCs，通过亚纳米空间精准操作平台能够控制移动电极与团簇的纳米间隙，从而准确的控制金属团簇表面的分子反应，从精密电子学测量获得的信号中可以准确分析金属-配体相互作用以及相应的动态催化过程。

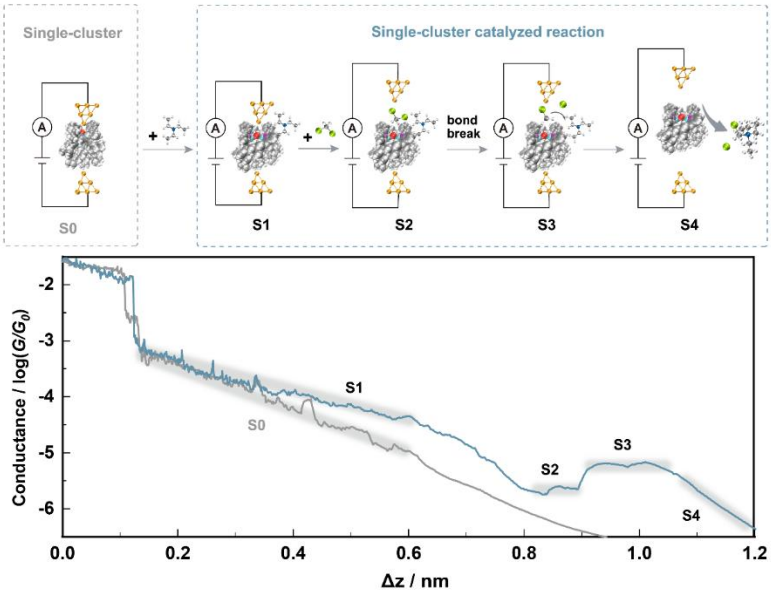


Fig. 1 Break junction measurements of the individual molecule catalysis at single-cluster

图1展示了NCs上典型的催化反应过程，通过精准调控纳米间隙可以表征得到不同反应历程的电导信息，结合理论模拟计算能够获得NCs上的详细动态催化历程。本工作为单团催上微观反应机理与动力学的研究提供了一种独特的新技术与方法。

关键词：金属纳米团簇；单分子电子学；动态催化；精准化学

参考文献

[1] **A. Zhang, X. Y. Zhuang, J. Liu et al. Catalytic cycle of formate dehydrogenase captured by**

single-molecule conductance. *Nat. Catal.* 2023, 6: 266-275.

[2] **Z. H. Sun, J. Wang, L. Sun et al. Dynamic Evolution and Reversibility of a Single Au25 Nanocluster for the Oxygen Reduction Reaction. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146: 20059−20068.**

报告人/墙报展示人简介：

高铭滨，厦门大学化学化工学院副教授，获得厦门大学南强青年拔尖人才支持计划支持。2021年在大连化物所获得工学博士学位，师从刘中民院士与叶茂研究员，同期获得中科院大连化物所优秀博士人才奖励。近年来主要从事动态催化过程中分子限域动力学、传质与传热的新表征技术与先进模拟研究工作，其中重点发展了时空超分辨单分子谱学技术。以第一作者以及通讯作者(含共同)身份在 *J. Am. Chem. Soc.*，*Nat.Commun.*(4 篇)，*Angew. Chem. Int. Ed.*，*AIChE J.*(2 篇)，*Energy Environ. Sci.*，*ACS Catal.*等国际期刊发表学术论文 15 余篇。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生副教授

墙报

墙报展示人：王帅，哈尔滨工业大学，教授

双分散孔催化颗粒甲烷蒸汽-干法联合重整性能研究

王帅 [1,*]，赖煜华 [1]，金捍宇 [1]，杨学松 [1]

[1] 哈尔滨工业大学 能源科学与工程学院，黑龙江省哈尔滨市，150001

*Email: shuaiwang@hit.edu.cn

蒸汽-干法联合重整技术因在原料气中引入水蒸气，可以通过积碳与水蒸气的反应转化，有效地降低积碳的形成与沉积，进而提高重整性能[1]。本文采用双模板法制备大孔-介孔双分散孔催化剂[2]，以异丙醇铝作为铝源，P123作为小孔模板剂，微晶纤维素MCC作为扩孔剂，制备介孔-大孔双分散载体。不添加纤维素制备介孔单分散载体。以醋酸镍作为活性组分，采用等体积浸渍法制备催化剂，并采用压片法制备成型颗粒。制备多孔催化剂样品，并搭建了甲烷催化重整制氢系统，如图1所示，由配气部分、催化反应部分、分析测试部分三部分组成。固定床催化反应系统在温度973K和常压条件下运行，入口各组分流量分别为34ml/min CH_4，34ml /min CO_2和34ml/min水蒸气。

图 2 给出了单分散孔和双分散孔催化颗粒下，反应器燃料转化率和氢气产量的结果。由图可知，单分散孔颗粒的甲烷转化率不足 10%，添加 1.5g 微晶纤维素和 2.0g 微晶纤维素的双分散孔颗粒的甲烷转化率可分别提高至 40%和 60%。同时可以观察到，双分散孔颗粒的氢气产量也明显升高，添加 2.0g 微晶纤维素的双分散孔颗粒的氢气产量比单分散孔颗粒提高了 1.5 倍。图 2 给出了使用单分散孔和双分散孔催化颗粒下，反应器出口气体组分分布。与比单分散孔颗粒相比，双分散孔催化颗粒的出口处甲烷和二氧化碳含量降低，氢气含量提高，一氧化碳含量略有降低。从上述实验结果可以看出，双分散孔颗粒相对单分散孔颗粒在甲烷双重整反应中具有更高的选择性。

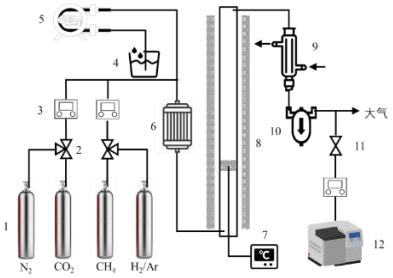


图 1 催化重整实验系统

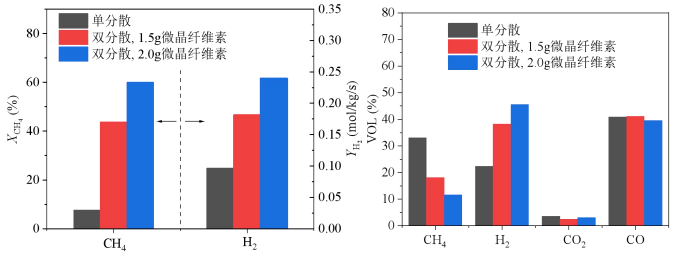


图 2 甲烷转换率、氢气产量以及组分体积含量

关键词：催化重整；双分散催化颗粒；微晶纤维素

参考文献

[1] Z.Zhang, G.Bi, J.Zhong, J.Xie. Key features of nano $Ni_xMg_{1-x}Al_2O_4$ spinel for biogas bi-reforming: CO_2 activation and coke elimination. International Journal of Hydrogen Energy.2024, 53: 383-393

[2] 陈学兵，陈刚，栗嘉琪，杜岳. 双模板法制备大孔/介孔HPW/SiO_2催化剂及其氧化脱硫性能研究. 现代化工. 2023,43(07):95-98

致谢：国家自然科学基金(52076060)

非晶 CoO/Cu_2O 异质界面富集活性氢增强硝酸盐电催化合成氨

刘家豪[1]，陆徐宸[1]，贾晓杰[1]，沈建华[1],朱以华[1*]，李春忠[1, 2]

[1]上海多级结构纳米材料工程研究中心，超细材料制备与应用教育部重点实验室，华东理工大学材料科学与工程学院，上海，200237

[2]华东理工大学化学工程学院，上海，200237

* yhzhu@ecust.edu.cn (Yihua Zhu); czli@ecust.edu.cn (Chunzhong Li).

通过电催化将硝酸盐还原为有价值的氨，为氨提供了一条绿色、可持续的合成路线。电催化硝酸盐还原反应（NO_3RR）涉及两个关键反应步骤：硝酸盐脱氧和亚硝酸盐加氢。其中，亚硝酸盐加氢反应是被认为是该过程的限速步骤。在此，我们设计制备了非晶 CoO/Cu_2O 催化剂（a-CoO/Cu_2O），通过构建非晶 CoO 与 Cu_2O 异质界面富集活性氢，并协同催化 NO_3RR。制备的 a-CoO/Cu_2O 催化剂表现出优异的 NO_3RR 性能，在−0.4 V 电位下，NH_3 法拉第效率最高可达 95.72%，最大产率为 0.96 mmol h^{-1} $mgcat^{-1}$；在流动池中，−800 mA 电流下，NH_3 产率最高可达 12.14 mmol h^{-1} $mgcat^{-1}$。a-CoO/Cu_2O 的高 NO_3RR 活性归因于非晶 CoO 和 Cu_2O 在界面上的协同级联效应[1]，其中 Cu_2O 作为 NO_3^-的吸附位点，而非晶 CoO 的加速活性氢生成促进亚硝酸盐加氢反应。这项工作为设计以非晶结构为中心的多位点级联催化剂以实现高效的 NO_3RR 提供了一种策略。

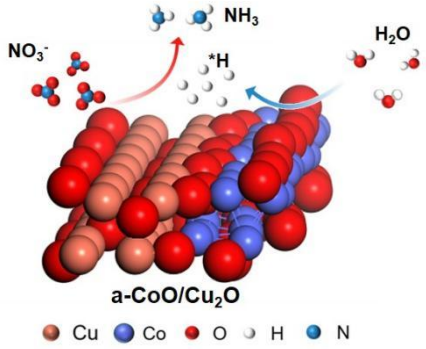


Fig 1 Schematic of the NO_3RR synergistic cascade effect catalysis mechanism of a-CoO/Cu_2O.

关键词：电催化；硝酸盐还原；非晶态；氨合成；活性氢

参考文献

[1] He, W., Zhang, J., Dieckhöfer, S. et al. Splicing the active phases of copper/cobalt-based catalysts achieves high-rate tandem electroreduction of nitrate to ammonia. *Nat. Commun.* 2022, **13**, 1129.

报告人/墙报展示人简介：

刘家豪

华东理工大学材料科学与工程学院

导师：朱以华

Email：1315770513@qq.com

2018-2022 年，在浙江农林大学就读本科，2022-至今，在华东理工大学攻读硕士。硕士期间主

要从事能源纳米材料，结合实验与理论探索材料在电催化领域的基本机制，以设计高性能可再生催化体系，研究方向主要 NO_3RR。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

报告人姓名：杨虹宇 **所在单位：**四川师范大学 **职位：**学生 **邮箱：**981065403@qq.com

Hierarchical porous tannic-acid-modified MOFs/alginate particles with synergized adsorption-photocatalysis for water remediation

Hong-Yu Yang[1]，Yan-Xu Chen[2]，Wang Qi[1]，Mao-Jie Zhang[1,*]， Zhang Ping[2]，Wei Wang[2]

[1] College of Engineering, Sichuan Normal University, Chengdu, Sichuan Province, 610101

[2]School of Chemical Engineering, Sichuan University, Chengdu, Sichuan Province，610065

* Email: zhangmaojie@sicnu.edu.cn

Abstract: Organic dye contaminants pose increasing threats to water ecological systems and global sustainability. Rational development of functional particles with adsorption-catalysis synergy is envisioned as a powerful route for enhanced water remediation. Here, hierarchical porous MOF-integrated alginate particles with synergized adsorption and photocatalytic degradation is developed for effective water remediation. The particles exhibit unique mesh-like Ca-alginate (CaAlg) networks with incorporated macro-/micro-porous zeolitic imidazolate framework-8 (ZIF-8) nanoparticles, both modified with negatively-charged tannic acid (TA). The TA-modified mesh-like CaAlg (CaAlg@TA) networks serve as highly porous absorbents, while the TA-modified ZIF-8 (ZIF- 8@TA) nanoparticles serve as both hierarchical porous nano-absorbents and photoactive nano-catalysts. This combination simultaneously harnesses the advantages of CaAlg@TA networks and ZIF-8@TA nanoparticles to achieve adsorption-photocatalysis synergy for efficient water remediation. As demonstrated by removal of toxic and carcinogenic dye methylene blue (MB), these particles show much higher performances with fast adsorption and high capacity (1277 mg g-1), as compared to control group particles without adsorption-photocatalysis synergy. Meanwhile, the adsorption-photocatalysis synergy largely suppresses undesired secondary water contamination from the MB-adsorbed particles, and benefits particle regeneration to achieve good reusability for repeated MB removal (>95.5 % for 10 cycles). This work provides a simple and flexible route for rational fabrication of MOF-integrated particles with adsorption-photocatalysis synergy, and thus may open up new horizons for developing advanced functional particles for effective water remediation.

Keywords: Metal-organic frameworks , Adsorption-photocatalysis synergy , Organic dyes , Water remediation

References

[1] L.C. Tian, S.Y. Zhou, J.J. Zhao, Q.F. Xu, N.J. Li, D.Y. Chen, H. Li, J.H. He, J.M. Lu, Sulfonate-modified calixarene-based porous organic polymers for electrostatic enhancement and efficient rapid removal of cationic dyes in water, J. Hazard. Mater. 2023, 411, 129873.

[2] G. Lee, D.K. Yoo, I. Ahmed, H.J. Lee, S.H. Jhung, Metal-organic frameworks composed of nitro groups: Preparation and applications in adsorption and catalysis, Chem. Eng. J. 2023, 451, 138538.

[3] R. Al-Tohamy, S.S. Ali, F.H. Li, K.M. Okasha, Y.A.G. Mahmoud, T. Elsamahy, H. X. Jiao, Y.Y. Fu, J.Z. Sun, A critical review on the treatment of dye-containing wastewater: Ecotoxicological and health concerns of textile dyes and possible remediation approaches for environmental safety, Ecotoxicol. Environ. Saf. 2022, 231, 113160.

[4] Y.Q. Guo, Z.Y. Jin, X.L. Li, F. Wang, Y.Y. Yan, L.Y. Feng, Nitrogen-doped carbon derived from reindeer manure for tetracycline hydrochloride removal: Synergetic effects of adsorption and catalysis, J. Environ. Chem. Eng. 2022, 10, 108286.

[5] A.I.A. Soliman, A.-M.-A. Abdel-Wahab, H.N. Abdelhamid, Hierarchical porous zeolitic imidazolate frameworks (ZIF-8) and ZnO@N-doped carbon for selective adsorption and photocatalytic degradation of organic pollutants, RSC Adv. 2022, 12, 7075–7084.

报告人简介：

杨虹宇，四川师范大学工学院硕士研究生

研究方向为微化工技术与功能材料。

附：报告人为学生

绿色电子供给与活性氧自由基消除助力NADH光合成

陈裕[1]，石家福[1,3,4,*]，姜忠义[2,4,5,*]

[1]单位天津大学环境科学与工程学院，天津，300072

[2]天津大学化工学院，天津，300072

[3]中国科学院过程工程研究所生物化学工程国家重点实验室，北京，10090

[4]化学科学与工程协同创新中心，天津，300072

[5]新加坡国立大学与天津大学联合学院，福州，350207

*Email: shijiafu@tju.edu.cn; zhyjiang@tju.edu.cn.

摘要正文：烟酰胺类辅酶NAD(P)H是绝大多数氧化还原酶催化反应过程中的“能量货币”，保障了反应中所需的质子和电子供给。构建绿色、高效的辅酶NAD(P)H合成系统是酶催化生物制造过程可持续进行的关键。利用清洁能源如太阳能驱动的NAD(P)H人工光合成具有能量来源绿色，反应条件温和，过程高效且可持续等优势。理想的NAD(P)H光合成系统应具备如下特征：1)绿色的电子供给过程；2)高的能量转化效率；3)低的NAD(P)H氧化降解。目前，NAD(P)H光合成研究多集中在通过催化剂结构设计提升能量转化效率，然而绿色电子的供给及NAD(P)H的氧化降解问题亟待解决。在这里，我们报道了一种新型的NADH光合成系统，该系统包含电子供给模块和活性氧自由基(ROS)消除模块。其中，生物质衍生物的氧化作为电子供给模块提供电子，超氧化物歧化酶/过氧化氢酶(SOD/CAT)级联催化作为ROS消除模块抑制NADH氧化降解。葡萄糖作为电子供体，可被氧化为葡萄糖酸和甲酸等增值化学品，保证了反应的持续性。同时，SOD/CAT的级联催化极大地消除了系统内的ROS，最终使得NADH产量提高了2倍，初始反应速率和转化频率分别提高了2.50倍和2.54倍。我们的研究为NADH的光合成与生物质到化学品转化的耦合建立了一个新颖而高效的平台。

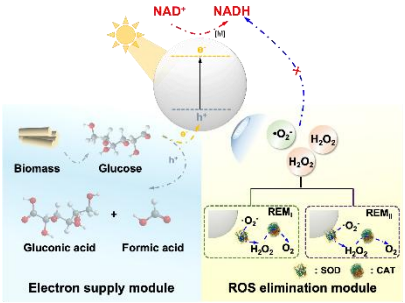


Fig. 1 An innovative NADH photosynthesis system where biomass derivatives oxidation is designed as electron supply module (ESM) to supply electrons and superoxide dismutase/catalase (SOD/CAT) cascades catalysis is designed as reactive oxygen species (ROS) elimination module (REM) to inhibit NADH degradation.

关键词：生物质氧化；NADH氧化；NADH光合成；ROS消除

参考文献

[1] **Y. Chen, J. F. Shi, Y. Z. Wu, Z. Y. Guo, S. H. Li, W. P. Li, Z. H. Wu, H. J. Wang, H. F. Jiang and Z. Y. Jiang. NADH photosynthesis system with affordable electron supply and inhibited NADH**

oxidation[J]. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, e202310238.

报告人/墙报展示人简介：

天津大学环境科学与工程学院在读博士生。2019-2022 年就读于天津大学环境科学与工程学院，获硕士学位。2022 年至今，于天津大学环境科学与工程学院攻读博士学位，师从石家福教授。研究方向为人工光合系统的构建和应用。目前以第一（或共同第一）作者身份在 *Angew. Chem. Int. Ed., Appl. Catal. B Environ.*期刊上发表论文 2 篇，获授权中国专利 2 项。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：

学生

报告人：霍韵滢；学生；工作单位：广州大学；邮箱：2112205118@e.gzhu.edu.cn

自支撑Ni(OH)$_2$/NF催化剂高效电催化氧化5-羟甲基糠醛反应研究

霍韵滢[1#], 郭　聪[1#], 张永乐[1], 刘婧怡[1], 刘芝婷[1], 张　巧[1,*], 杨光星[1], 李仁贵[2,*], 彭　峰[1,*]

[1]广州大学化学化工学院，广东广州，510006

[2]中国科学院大连化学物理研究所，大连洁净能源国家实验室，催化基础国家重点实验室，辽宁大连，116023

*Email: zhangqiao@gzhu.edu.cn (张巧), rgli@dicp.ac.cn (李仁贵), fpeng@gzhu.edu.cn (彭峰).

摘要正文：随着太阳能发电能力的不断提高，如何有效利用可再生太阳能产生的电能对生物质进行电化学转化成为了一个研究热点。5-羟甲基糠醛(HMF)通过电化学实验转化为生物燃料和高附加值的含氧化学品，为将可再生电力转化为化学品提供了一条有前途的替代途径。HMF的电催化氧化过程可以产生多种有价值的化学产品，包括2,5-二甲酰呋喃、5-羟甲基-2-呋喃甲酸、5-甲酰-2-呋喃甲酸和2.5-呋喃二甲酸(FDCA)。其中，FDCA是生物基聚合物如聚乙烯呋喃酸酯的关键单体，展现出取代石油衍生的聚对苯二甲酸乙二醇酯的潜力。然而，尽管镍基催化剂广泛应用于HMF电催化氧化反应，但其相对较差的导电性和稳定性仍然限制了其潜在的应用。

本文报道了新颖的酸腐蚀诱导策略，原位构建了自支撑式Ni(OH)$_2$/NF电极，研究了腐蚀溶液的浓度和酸蚀时间对泡沫镍电催化氧化HMF性能的影响。结果表明，较高的酸浓度和较长的酸蚀时间有利于HMF电化学氧化反应。酸诱导刻蚀Ni(OH)$_2$/NF电催化剂表现出稳定、高效的电化学氧化HMF性能，HMF转化率接近100%，FDCA产率与法拉第效率都在90%左右，催化剂具有良好的稳定性，连续5次电解循环的Ni(OH)$_2$/NF催化活性仍然保持稳定。原位形成策略使Ni(OH)$_2$与NF之间形成致密的界面，有助于在电化学反应中保持良好的导电性和稳定性。原位电化学阻抗测试、原位拉曼和开路电位测试结果表明，较好的催化性能得益于Ni(OH)$_2$在HMF氧化过程中动态循环演化为NiOOH，而HMF分子迅速消耗原位形成的NiOOH物种，生成FDCA，同时NiOOH在此过程中被还原为最初的Ni(OH)$_2$。将反应体系应用于连续流动电解池装置，探究了流速、电压对HMF电化学流动池反应体系的影响，在160 mL min^{-1}和1.65 V (vs. RHE)的条件下，该装置能够稳定运行60 h，FDCA的产率高达27 mg h^{-1} cm^{-2}，表现出较好的应用潜力。

综上，本文提供了一种简单、经济、易于实施的设计策略，利用酸腐蚀诱导策略在泡沫镍上原位构建出Ni(OH)$_2$催化剂并应用于电催化氧化HMF反应中，探索了镍基催化剂电催化氧化HMF性能，实现了HMF分子的高效转化，同时将其应用于小型连续流动电解池体系，为HMF电化学工业化提供可能性。

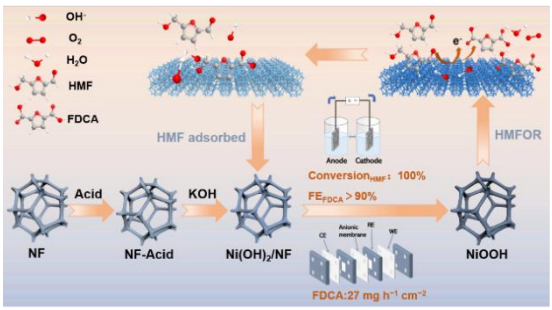


Fig. 1 HMF oxidation electrochemical reaction on nickel foam (NF) in 3H-Type and Continuous Flow Electrolytic Cells.

关键词：酸腐蚀诱导；5-羟甲基糠醛；电催化氧化；镍基催化剂

报告人/墙报展示人简介：

霍韵滢，广州大学化学工程研究生。主要从事生物质电催化研究，以第一作者身份在 Chinese Journal of Catalysis 发表 SCI 学术论文 1 篇，申请国家发明专利 1 项。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是学生

配体的电子诱导效应对酞菁铜电催化还原二氧化碳的影响

方俊[1]，秦彬皓[2]，杨光星，张巧，彭峰[1,*]

[1]广州大学，化学化工学院，广东广州，510006

[2]广东省科学院中乌焊接研究所，广东省先进焊接技术重点实验室，广东广州，510650

*Email: fpeng@gzhu.edu.cn

利用配体的供/吸电子诱导效应，使分子催化剂MTPP和MPc金属中心的电子密度发生变化，从而实现对催化活性、产物选择性和反应途径的精细调节[1,2]。然而，配体电子诱导效应能够产生这种调变能力的潜在机制，并未得到深入、细致的研究。为了明确配体的供/吸电子效应对CO_2RR的影响，本工作选取酞菁铜作为研究对象，以典型的供电子-NH_2（CuPc-NH_2）和吸电子-F (CuPc-F_8)取代酞菁环上的-H，利用原位红外表征、理论计算和电化学性能表征分析，发现CuPc-NH_2催化剂对CO_2还原的活性比CuPc显著增强，产物CO法拉第效率可接近100%；而配体的吸电子诱导效应则导致CuPc-F_8催化剂主要发生析氢反应，CO_2还原反应活性很低，主要产物为甲酸。理论计算结果表明不同配体取代造成这种CO_2RR产物活性差异的原因，首先是Cu中心周围电子密度的改变，造成CuPc-X对CO_2吸附能力的不同。另外，配体基团对靠近高电子占据态密度的贡献不同造成CuPc-X与CO_2的HOMO-HOMO带隙宽度的不同，从而引起电子转移能力差异。不同配体造成HOMO的对称性和空间取向变化，从而导致不同种类吸附中间体的倾向，造成CuPc-X在CO_2RR中产物选择性的差异。

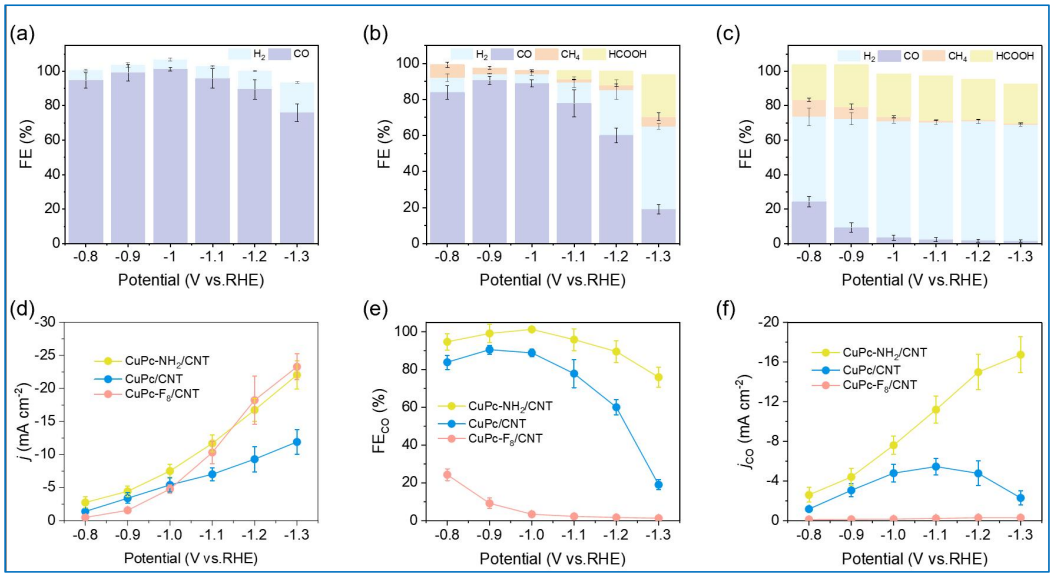


Fig. 1 CO_2RR performance of (a) CuPc-NH_2/CNTs, (b) CuPc/CNTs and (c) CuPc-F_8/CNTs. (d) j_{sum}, (e) FE_{CO}, (f) j_{CO} and (g) Tafel slopes of CuPc-X/CNTs.

关键词：电催化；二氧化碳还原；酞菁铜催化剂；电子效应

参考文献

[1] C. Rooney, M. Lyons, Y. Wu, et al., Active Sites of Cobalt Phthalocyanine in Electrocatalytic CO_2 Reduction to Methanol [J]. *Angew. Chem. Int. Ed.,* 2023, 63: 202310623.

[2] J. Fang, Y. Zhu, X. Long, et al., Theoretical calculations and experimental verification of carbon dioxide reduction electrocatalyzed by metalloporphyrin [J]. *J. Colloid Interf. Sci*., 2024, 668: 366-374.

报告人简介：方俊，女，广州大学化学化工学院工业催化 2022 级硕士研究。

焦块/壳聚糖气凝胶用于太阳能光热海水淡化及盐结晶处理

魏伟杰[1]，何兰[2]，王迎迎[1]，张夏庆[1]，曾玲玲[1]，高助威[1,*]

[1]海南大学化学化工学院，海南省海口市，570228

[2]海南大学食品科学与工程学院，海南省海口市，570228

*Email: gaozhuwei@hainanu.edu.cn

摘要正文：

以具有光热效应的固体废物石油焦回收再利用为灵感制备用于光热海水淡化的焦块/壳聚糖气凝胶，将球磨后的石油焦粉末经过机械搅拌的方式均匀负载到壳聚糖/乙酸溶液中，加入戊二醛进行交联，构建多孔、高效光热转换性能的多孔焦块/壳聚糖气凝胶。通过调节石油焦的不同负载量，探究不同石油焦含量的焦块/壳聚糖气凝胶对水蒸发速率、光热转化性能的影响。在此基础上，以该气凝胶做蒸发器，设计太阳能光热蒸发器，使盐在边缘结晶，达到盐回收处理的目的。该装置制作简单、成本较低，做为蒸发器的焦块/壳聚糖气凝胶具有较高的机械强度和耐久性，且壳聚糖为可生物降解的材料，此项研究为解决全球水资源短缺、焦块固废处理和盐结晶问题提供新思路，并能应用于大规模生产和实际工业中。

关键词：石油焦；壳聚糖；气凝胶；光热转化；盐结晶

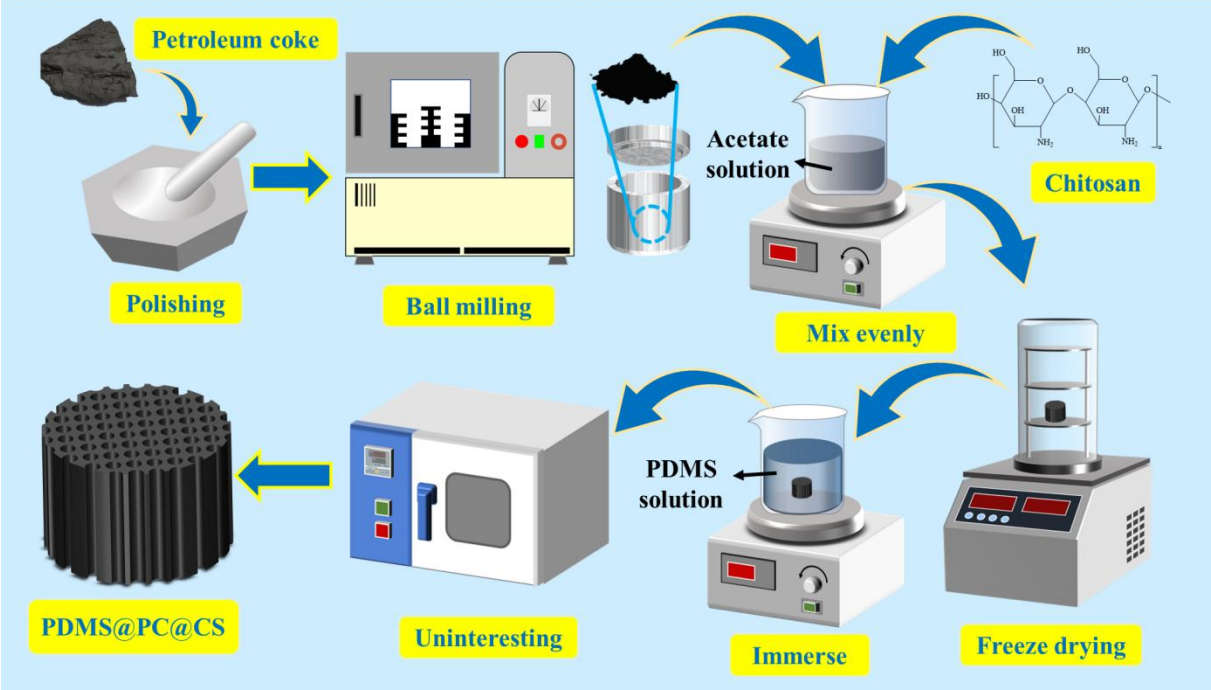


Fig. 1. Preparation process of coke block/chitosan aerogel.

报告人：陈洁；工作单位：广州大学研究生；邮箱：chenjie7227@163.com

酸碱性电解质中甲醇电氧化的统一电催化描述

陈洁[1]，杨光星[1,**]，张巧[1]，刘芝婷[1]，彭峰[1,*]

[1]广州大学，广东广州，510006

*Email:fpeng@gzhu.edu.cn（彭峰）, yanggx@gzhu.edu.cn（杨光星）

摘要正文：以Pt盘电极作为模型催化剂，在酸性和碱性电解质中，甲醇电氧化可统一使用3个过程描述，本质上是*OH的来源方式不同。首先是电解液提供的OH^-氧化甲醇形成氧化峰；而后增加到一定电位时，水活化产生的OH^-继续氧化甲醇，当电位升高产生的OH^-过量时，OH^-进而氧化Pt形成PtO，PtO不具有催化氧化甲醇能力，此时电流急剧下降。最后在电压持续升高时，H_2O被活化为*H_2O，而不被活化为*OH，因此Pt不会继续被OH-氧化，而未被氧化的Pt催化*H_2O与甲醇反应。在碱性电解质中，第一过程的甲醇氧化极限电流与OH^-的浓度、旋转圆盘转速呈线性关系，通过调控甲醇浓度、OH^-浓度以及转速可实现甲醇氧化电流最大化。以商业Pt/C催化剂为例，调控其条件后甲醇氧化电流可达27.3 A mg_{Pt}^{-1}。

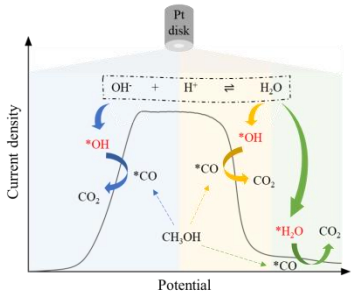


Fig. 1 Methanol electrooxidation mechanism diagram

关键词：Pt、甲醇电氧化、酸碱性电解质

参考文献

[1] Rus E D, Wakabayashi R H, Wang H S, et al. Methanol Oxidation at Platinum in Alkaline Media: A Study of the Effects of Hydroxide Concentration and of Mass Transport[J]. *Chemphyschem*, 2021, 22(13): 1397-1406.

[2] Monteiro M C O, Jacobse L, Koper M T M. Understanding the Voltammetry of Bulk CO Electrooxidation in Neutral Media through Combined SECM Measurements[J]. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 2020, 11(22): 9708-9713.

[3] Romano R L, Oliveira M G, Varela H. The Impact of Water Concentration on the Electro-Oxidation of Methanol on Platinum[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2020, 167(4): 6.

[4] Katayama Y, Kubota R, Rao R R, et al. Direct Observation of Surface-Bound Intermediates During Methanol Oxidation on Platinum Under Alkaline Conditions[J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2021, 125(48): 26321-26331.

[5] Melle G B, Hartl F W, Varela H, et al. The effect of solution pH on the oscillatory electro-oxidation of methanol[J]. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 2018, 826: 164-169.

[6] Chen X T, Mccrum I T, Schwarz K A, et al. Co-adsorption of Cations as the Cause of the Apparent pH Dependence of Hydrogen Adsorption on a Stepped Platinum Single-Crystal Electrode[J]. *Angewandte Chemie-International Edition*, 2017, 56(47): 15025-15029.

[7] Chung D Y, Lee K J, Sung Y E. Methanol Electro-Oxidation on the Pt Surface: Revisiting the Cyclic Voltammetry Interpretation[J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2016, 120(17): 9028-9035.

[8] Hayes J R, Zeller D, Friesen C. The Influence of Platinum Surface Morphology on the Electrooxidation of Methanol in Alkaline Solutions[J].*Ecs Transactions*, 2015, 13(23):93-103.

报告人/墙报展示人简介：

陈洁，广州大学化学工程研究生，主要从事 Pt 基催化剂醇类电化学研究。以第一作者身份在 International Journal of Hydrogen Energy 发表 SCI 学术论文 1 篇，申请国家发明专利 1 篇。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

第 9 分会场：矿物颗粒低碳高效利用

氢基直接还原铁球团熔化过程的数值模拟

林晓萍[123]，倪冰[12*]，上官方钦[12]

[1]中国钢研科技集团有限公司钢铁绿色化智能化技术中心，北京 100081

[2]冶金智能制造系统全国重点实验室，北京 100071

[3]钢铁研究总院有限公司冶金工艺研究所，北京 100081

*Email: nibingcisri@163.com

倪冰，中国钢研科技集团有限公司，正高工，nibingcisri@163.com

摘要正文：在降碳减排背景下，基于氢气直接还原的电弧炉炼钢新流程是钢铁行业实现绿色可持续发展重要方向。在氢冶金-电炉流程中，通过竖炉生产出氢基直接还原铁球团（HDRI）后，HDRI 经过电炉熔分或冶炼，可以形成高纯铁或高端特种钢等最终产品。在电炉内冶炼时，HDRI 容易相互粘结成为大块，甚至形成“冰山”现象，恶化了冶炼工况条件。HDRI 的熔化是影响电弧炉冶炼周期及能耗的关键。本研究基于 HDRI 的基本特性，利用 Comsol 建立了低碳熔池中 HDRI 熔化模型，研究了直径为 16mm 的 HDRI 熔化过程。计算模拟结果表明：HDRI 熔化过程可以分为生成凝钢层、凝钢层熔化、HDRI 本体熔化三个阶段，多个 HDRI 在熔化过程前两个阶段中容易发生粘结现象，影响粘结的主要因素是 HDRI 间距、HDRI 预热温度、熔池温度。随着 HDRI 间距增大、HDRI 预热温度升高、熔池温度升高，粘结现象减轻，熔化时间缩短。一般钢水冶炼时熔池温度为 1873K，考虑这一温度下，当两个间距为 10mm、初始温度为 300K 的 HDRI 熔化时不发生粘结；当预热温度达到 973K 时，间距为 6mm 的两个 HDRI 也不发生粘结。本研究为 HDRI 在电弧炉中的应用工艺优化提供了理论依据。

关键词：氢冶金-电弧炉流程 HDRI 熔化 HDRI 粘结

参考文献

[6] Ren M， Lu P T， Liu X R， et al. Decarbonizing China’s iron and steel industry from the supply and demand sides for carbon neutrality［J］. Applied Energy，2021，298：117209

[7] Eder W. Environment-Climate-Energy: Quo Vadis, Industry BHM Berg-Hüttenmännische Mon. 2017;162:494–497.

[8] Spreitzer D., Schenk J. Reduction of Iron Oxides with Hydrogen—A Review. Steel Res. Int. 2019;90:1900108.

[9] Fruenhan R. Oxygen versus EAF steelmaking in the 21st century[J].Transactions of the Indian Institute of Metals, 2006, 59(5): 607-617.Miller F P,Vandome A F and Mcbrewster J. Electric Arc Furnace[M]

[10] Miller F P Vandome A F and Mcbrewster J. Electric Arc FurnacelM.Germany: Alphascript Publishing, 2010.

[11] Toulouecski Y N, Zinurov I Y Fuel arc furnace (FAF) for effective scrapmeltingM]. Singapore, Springer Briefs in Applied Sciences and Technology.2017.

[12] Dworak, S.; Rechberger, H.; Fellner, J. How will tramp elements affect future steel recycling in Europe? A dynamic material flow model for steel in the EU-28 for the period 1910 to 2050. Resour. Conserv. Recycl. 2021, 179, 106072.

[13] TANAKAH.Resources trend and use of direct reduced iron in steelmakingprocess[]]. Kobelco Technology Review，2015，33(1): 1-7.
[14] Deng S, Xu A J,Yang G, et al. Analyses and calculation of steel scrapmelting in a multifunctional hot metal ladlelJ . Steel Research International2019,90(3): 1-10.
[15] HUKLAA,DEO B, ROBERTSON D G C.Modeling of Scrap Dissolution inMolten Iron FOR the CASE of Heat Transfer Controlled Process J . Journal ofHeat Transfer，2019,142: 1.
[16] LIU M,MA G, ZHANG X, Kinetics of Scrap Melting in Iron-Carbon Bath,The Minerals,Metals & Materials Society (ed.), TMS 2020 149th, 2020 :1047-1059
[17] Penz, F.M.; Schenk, J. A Review of Steel Scrap Melting in Molten Iron-Carbon Melts. Steel Res. Int. 2019, 90, 1900124.
[18] DHARMA-RAO V,SARMA P K. Direct contact heat transfer in sphericalgeometry associated with phase transformation-a closed-form solutionJ]International Journal of Heat Mass Transfer，1985,2810): 1956-1958.
[19] VLADIMIR GFusion of Low Carbon Steel Scrap in the Middle Carbon SteelMelt[J]. Kovine zlitine tehnologije，1996.
[20] ZHOU B, YANG Y X, Study of Melting Behaviour of Aluminium Scraps inMolten Melts,TMS Fall 2002 Extraction and Processing Division Meeting onRecycling and Waste Treatment in Mineral and Metal Processing: Technicaland Economic Aspects,2002 : 1-11.
[21] KAZUMI M,HIROYUKI N Study on the Rate of Scrap Melting in theSteelmaking Process[J].Tetsu-to-Hagane，1969,55(5): 347-354.
[22] Cárdenas, J.G.G.; Conejo, A.N.; Gnechi, G.G. Optimization of energy consumption in electric arc furnaces operated with 100% DRI. Metal 2007, 2007, 1–7.
[23] Kirschen, M.; Badr, K.; Pfeifer, H. Influence of direct reduced iron on the energy balance of the electric arc furnace in steel industry. Energy 2011, 36, 6146–6155.
[24] Kirschen, M.; Hay, T.; Echterhof, T. Process Improvements for Direct Reduced Iron Melting in the Electric Arc Furnace with Emphasis on Slag Operation. Processes 2021, 9, 402.
[25] Li, J.; Barati, M. Kinetics and Mechanism of Decarburization and Melting of Direct-Reduced Iron Pellets in Slag. Met. Mater. Trans. B 2009, 40, 17–24.
[26] Sharifi, E.; Barati, M. The Reaction Behavior of Direct Reduced Iron (DRI) in Steelmaking Slags: Effect of DRI Carbon and Preheating Temperature. Met. Mater. Trans. B 2010, 41, 1018–1024.
[27] Pfeiffer A, Wimmer G, Schenk J. Investigations on the Interaction Behavior between Direct Reduced Iron and Various Melts. Materials (Basel). 2022 Aug 18;15(16):5691.
[28] [8]ZHANG L Y.Modelling on melting of sponge iron particles in iron - bath(J].Steel Research，1996,67(11): 466-473.
[29] ZHANG L Y OETERS F. Mathematical modelling of alloy elting in steelmelts[].Steel Research，1999,70(4-5): 128-134.
[30] OETERS F,ZHANG L,HAULER C,LEITNER J. Laboratory experimentsand process modelling of the melting and dissolution of low-density ferro-molybdenum in steel melts[J]. Steel Research，200072(2): 71-71.
[31] Hornby, S.; Madias, J.; Torre, F. Myths and realities of charging DRI/HBI in electric arc furnaces. Iron Steel Technol. 2016, 1-2/2016, 165–175.
[32] Hay, T.; Echterhof, T.; Visuri, V.-V. Development of an Electric Arc Furnace Simulator Based on a Comprehensive Dynamic Process Model. Processes 2019, 7, 852.
[33] Hay, T.; Reimann, A.; Echterhof, T. Improving the Modeling of Slag and Steel Bath Chemistry in an Electric Arc Furnace Process Model. Met. Mater. Trans. B 2019, 50, 2377–2388.

报告人简介：

倪冰，工学博士，正高级工程师。先后在安阳钢铁和中国钢研工作，长期从事现代钢铁长短流程领域的基础理论、冶炼技术集成、产品研发和推广应用等工作，提供咨询服务解决方案，擅长高效化、绿色化、智能化炼钢生产技术的开发和实践。特别是作为短流程领域资深冶金专家，具有 20 多年从业经历，是短流程冶金的资深工程师。先后接触和服务过国内外 100 余家钢企，经历科研、技改、工程等 100 余个项目，和钢铁产业链上下游企业单位有密切合作。在日本东京都、美国 Pittsburgh、德国 Fuchs、奥地利 Linz、瑞士 Gerlafingen、俄罗斯、泰国等多地进行访学交流和工程设计，主持和参与了包括国家自然科学基金面上项目在内的科研基金项目 10 余项，发表论文 80 余篇，授权发明和实用新型专利 10 余项。

附：报告人，倪冰，正高工。

微晶石墨基各向同性石墨关键技术研究及应用开发

申克 1*，黄正宏 2，康飞宇 3

1. 湖南大学材料科学与工程学院，长沙，410082

2. 清华大学材料学院，北京，100084

3. 清华大学深圳国际研究生院，深圳，518055

*Email: shenk@hnu.edu.cn

摘要正文：天然微晶石墨的石墨化度高，颗粒具有近各向同性特征，因此是各向同性石墨的理想原料。项目在国家科技支撑计划、国家自然科学基金和湖南省科技计划等项目的资助下，由清华大学、湖南大学、清华大学深圳国际研究生院和永安市鼎丰碳素科技有限公司合作完成，创新性利用微晶石墨低热膨胀系数的特性，发明了微晶石墨基各向同性石墨，解决了微晶石墨的高附加值利用技术难题。研制的低热膨胀系数各向同性石墨产品，其热膨胀系数比进口核石墨IG-110降低30%，产品在永安鼎丰碳素科技有限公式实现批量生产，并中标中核集团气冷微堆项目，服务国家重大战略需求。成果经中国非金属矿工业协会评估为整体达到国际先进水平，其中在微晶石墨基各向同性核级石墨材料制备理论与技术方面达到国际领先水平。

关键词：微晶石墨；核级石墨；各向同性石墨

报告人/墙报展示人简介：

申克，男，工学博士，湖南大学材料科学与工程学院教授、博士生指导教师。主要从事炭石墨材料的基础理论研究与应用技术开发。具体研究方向包括：(1)先进碳素材料（等静压石墨）的制备理论，(2)高纯度碳材料，(3)核级石墨的评价与表征，(4)石墨的辐照效应等。主持国家自然科学基金 3 项，中国石化、中核集团、清华大学核研院科研项目多项。在 CARBON，JOURNAL OF NUCLEAR MATERIALS，NUCLEAR ENGINEERING AND DESIGN 等期刊上发表论文 30 余篇。多次在世界碳材料大会，国际核石墨专家会，中日韩碳材料研讨会等国际会议上做重点报告。获 2022 年湖南大学优秀教师，湖南大学 2022 年教师教学基本功大赛二等奖，第 29 届国际核工程大会最佳论文奖。兼任先进炭材料及应用技术湖南省重点实验室副主任，《炭素技术》编委，《物理化学学报》青年编委，中国颗粒学会青年理事，核学会核石墨及碳材料测试与应用分会理事等学术职务。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

汇报人：张海庆，学生，重庆大学材料学院，653340148@qq.com

氢气和一氧化碳混合浓度对浮氏体还原动力学的影响

张海庆，白凌霄，邓君一，徐健 *

重庆大学材料科学与工程学院，重庆，400044

*Email: jxu@cqu.edu.cn

对环境问题的日益关注促使钢铁行业探索更清洁的能源选择，氢气作为化石燃料的替代品具有应用潜力。过去针对铁氧化物还原行为对研究，覆盖了热力学、动力学、微观形貌、还原膨胀、还原粉化等方面的特征[1]，并发现氢气对提高反应效率同时减少二氧化碳排放有着重要的意义[2]。然而，当氢气部分取代一氧化碳作为铁氧化物的还原剂，一方面两种气体组分在还原过程中的相互作用较少涉及[3]，另一方面两者的混合浓度对上述作用的影响也值得深入探究[4]。

我们探究了当界面化学反应成为反应的控制性环节时，800℃下 H_2 和 CO 混合浓度分别在 30% 和 50% 两个水平下，两者共同还原浮氏体的过程中的相互作用。采用线性规划法来确定 H_2 和 CO 在共同还原过程中的各自贡献，并基于气体利用率进行验证，主要结论如下：（1）在 0.2-0.6 还原度范围内，当 H_2 和 CO 的混合浓度为 30%时，H_2 的还原能力是 CO 的 1.6 倍，一氧化碳脱氧能力的增强可使一氧化碳利用率提高 1.51 倍，而当两者的混合浓度为 50%时，CO 的利用率相较单一气氛下则没有明显变化；在 0.6 还原度以后，反应逐渐由内扩散控制时，两者之间会出现一个此消彼长的过程，如图 1a 所示，氢气的贡献率逐渐增大，一氧化碳的贡献率逐渐降低；（2）氢气（类比“大白兔”）、一氧化碳（类比“小灰兔”）和氧（类比“胡萝卜”）之间的相互作用机制被类比为“兔子拔胡萝卜”，如图 1b 所示，当两只“兔子”共存时，“大白兔”因其更高的反应性而更快地到达“胡萝卜”。在拔出一个“胡萝卜”时，它无意中松动了“地形”，使“小灰兔”能够更有效地拔出一个“胡萝卜”，从而体现了 H_2 和 CO 在还原过程中的协同作用。当“兔子”的数量不断增加时，“大白兔”会迅速占据可用的“胡萝卜”，限制了“小灰兔”的活动空间，从而抑制后者发挥作用，故 H_2 的存在对 CO 效率的提升作用是有限的。

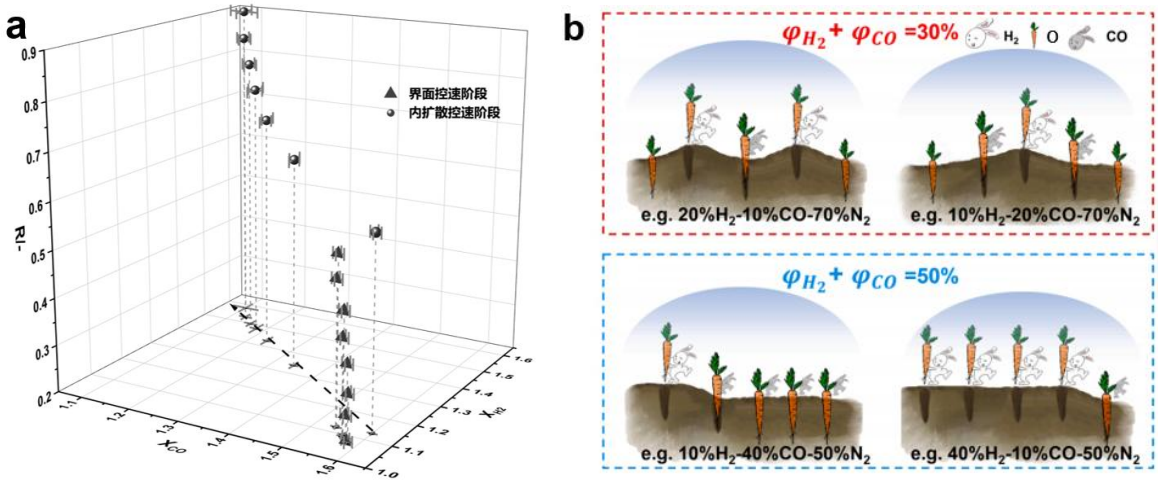


Fig.1 (a) The interaction coefficient between the total concentration of H_2 and CO at 30% with increasing reduction degree.(b)illustration of synergistic interactions at a combined H_2 and CO concentration of 30% and 50%.

关键词： 还原动力学；一氧化碳；氢气；混合浓度；相互作用

参考文献

[1] **K. Ma, J. Deng, G. Wang, Q. Zhou, J. Xu. Utilization and impacts of hydrogen in the ironmaking processes: A review from lab-scale basics to industrial practices, International Journal of Hydrogen Energy, 2021, 52: 26646-26664**

[2] **Lu, F. et al. Carbon formation on the surface during the reduction of iron oxide particles by CO and CO/H_2 mixtures. Chemical Engineering Science,2019,205, 238–247.**

[3] **1. Deng, J., Bai, L., Ma, P., Ma, K. & Xu, J. An Electric Circuit Analogy Model for Analyzing the Relation Between CO and H_2**

in Interfacial Reduction Reactions. Metallurgical and Materials Transactions B,2022,53, 2867–2872.

[4] **1. Bai, L., Deng, J., Wang, J., Zhang, H. & Xu, J. Beyond summative Effects: Synergistic enhancement in the gaseous interfacial reduction of Wüstite by the combined use of hydrogen and carbon monoxide. Chemical Engineering Science ,2024,298, 120349.**

报告人简介：

张海庆，男，重庆大学材料科学与工程冶金工程专业在读研究生，主要研究方向为：氢气与一氧化碳还原铁氧化物的竞争机制。

附：请在此处注明报告人是否为学生：是

报告人：闫姝璇，中南大学化学化工学院在读博士研究生，邮箱 yansx1996@163.com

Peroxymonosulfate activation by N-doped 3D graphene from spent lithium-ion batteries for organic pollutants degradation: An insight into the degradation mechanism

Shuxuan Yan[1], Xiangping Chen[2,*], Ying Yang[1], Tao Zhou[1,*]

[1]Hunan Provincial Key Laboratory of Chemical Power Sources, College of Chemistry and Chemical Engineering, Central South University, Changsha 410083, PR China

[2]College of Chemistry and Chemical Engineering, Hunan Normal University, Changsha 410081, PR China c National & Local Joint Engineering Laboratory for New Petro-chemical Materials and Fine Utilization of Resources, Hunan Normal University, Changsha 410081, PR China

* xiangping_chen@hunnu.edu.cn, zhoutao@csu.edu.cn

The large-scale retirement of lithium-ion batteries (LIBs) has raised increasing concerns about recycling spent graphite with low value-added[1]. However, it remains challenging to design a low energy consumption and high value-added approach for upcycling spent graphite. This study proposes a novel recycling strategy involving the reconstruction of porous architectures through nitrogen-doped graphene using $NH_3 \cdot H_2O$ to enhance the deactivation resistance of rhodamine B (RhB) degradation via peroxymonosulfate (PMS) activation.

Spent graphite with defects and polar functional groups were used as the feed materials. Specifically, the prepared defective nitrogen-doped graphene (SNGO-2) shows well-defined 3D interconnected structure due to the introduction of $NH_3 \cdot H_2O$ welding the separate lamellas together (Fig.1 a). After N-doping, two broad and weak diffraction peaks shifted to 26˚ (002) and 43˚ (100) for SNGO and NGO, respectively, could be attributed to the removal of oxygen-containing functional groups from the lattice of the carbon network and the successful doping of N atoms (Fig.1 b). The presence of C=N/C-N bonds and the disappearance of oxygen-containing groups confirmed the successful doping of N on SNGO-2/NGO-2 by replacing C and O, which was consistent with a previous analysis (Fig.1 c). The peaks at N 1s corresponding to graphitic N clearly increased from 0.35% to 3.04% with the addition of $NH_3 \cdot H_2O$ due to the higher stability of graphitic N. Graphitic N exhibited the highest E_{ads} (-2.86 eV) for the PMS molecules, confirming that PMS molecules were likely to be adsorbed and cleaved at the graphitic N site (Fig.1 d-e).

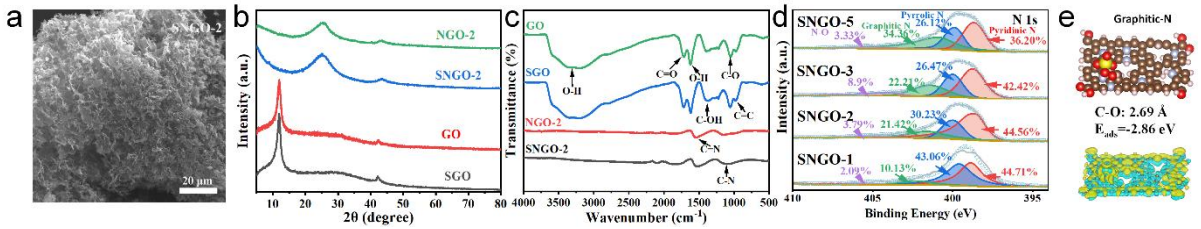


Fig. 1 (a) Preparation of N-doped graphene. Characterization spectrum of SGO, GO, SNGO-2 and NGO-2 (b) XRD patterns, (c) FT-IR curves, (d) XPS spectra of N 1s and (e) PMS structure models after adsorbed on graphitic N.

The prepared defective nitrogen-doped graphene (SNGO-2) can efficiently activate the PMS under a broad pH range and a real water matrix (Fig.2 a). The catalyst remained active after four repetitions without obvious activity loss (Fig.2 b). The analytical and density functional theory calculation results suggested that graphite N plays the dominant role in activating PMS with the formation of reactive oxygen species. The quenching, electron paramagnetic resonance and electrochemical results indicated that the singlet oxygen plays a dominant role, while the free radicals of superoxide radical, sulfate radical and hydroxyl radical work together during the degradation of RhB into CO_2 and H_2O through demethylation, chromophore cleavage, opening-ring and mineralization (Fig.2 c-e).This study proposes a promising strategy for upcycling spent graphite from spent LIBs into environmental functional materials with potential application in effluent treatment.

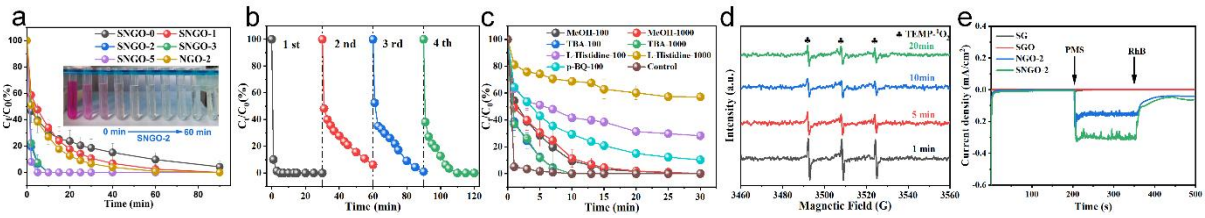


Fig. 2 (a) Efficiencies of different SNGO-x system for RhB removal, (b) reusability of SNGO-2, (c) RhB degradation at different radical scavengers with various concentration, (d) EPR spectra of $^1O_2$ and (e) current response after the additions of PMS and RhB.

Keywords: Spent lithium-ion batteries, Waste graphite, Nitrogen-doped graphene, Advanced oxidation process, Catalytic mechanism

References

[23]S. Natarajan, V. Aravindan, An Urgent Call to Spent LIB Recycling: Whys and Wherefores for Graphite Recovery, Advanced Energy Materials 2020, 10, 2002238.

报告人/墙报展示人简介：

闫姝璇，中南大学化学化工学院 2021 级博士研究生，化学工程与技术专业，导师为周涛教授和杨鹰教授，研究方向为废旧锂离子电池回收与循环利用。以第一/通讯作者发表 SCI 论文 6 篇。

报告人/墙报展示人为学生

纳米颗粒疏水性对皮克林乳液浮选微细石墨的影响机理

高继轩[2]，卜祥宁[1,2*]，倪超[1,2]，谢广元[1,2]

[1]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，221116

[2]中国矿业大学 化工学院，江苏徐州，221116

*Email: xiangning.bu@foxmail.com

作者简介：

第一作者：高继轩，博士研究生，研究方向：Pickering 乳液、乳化、浮选，邮箱：1436288644@qq.com

通讯作者：卜祥宁，讲师，博士（后），讲师，博士（后）从事超声波强化矿物分离和富集过程方面的研究，Tel：0516－83995486，E-mail: xiangning.bu@foxmail.com。

摘要：皮克林乳液是一种以超细固体颗粒为乳化剂的乳液，相较于传统的表面活性剂类的乳化剂，具有乳化剂用量少、生物相容性好、环境友好等优点。笔者前期研究已经证实皮克林乳液可以实现煤油的乳化和对石墨浮选效率的提升。然而，皮克林乳液矿物浮选中纳米颗粒疏水性的作用仍需进一步明晰。为此，研究了不同烷基化程度的二氧化硅纳米颗粒制备的皮克林煤油乳液的乳液性质及其对微细石墨浮选效果的影响；从Zeta电位分布、油滴粒度、接触角等角度研究了纳米颗粒疏水性对微细石墨表面疏水性的影响规律；借助分子模拟和石英微晶体天平测试分析，解释了皮克林乳液在石墨表面吸附过程中纳米颗粒疏水性的作用机理。

关键词：皮克林乳液；纳米颗粒；疏水性；煤油乳化；微细石墨；浮选

大直径泥水盾构排浆管道颗粒运动及磨损规律研究

冯皓，贾浩*

浙江理工大学 浙江省复杂流动与流体工程装备重点实验室，杭州，310018

*Email: jiahao@zstu.edu.cn

摘要正文：在隧道盾构工程中，土方及碎石颗粒经前段刀盘切削后，尺寸通常在10mm至110mm之间，主要集中在30mm至60mm[1]，进入排浆管道后，这些颗粒会对排浆管壁产生磨损。本文通过建立泥水盾构排浆管道模型（管道内径500mm），采用CFD-DEM耦合方法，并利用Archard磨损模型，研究了不同体积分数和流速下管道内土方及碎石颗粒的运动特性及管道磨损情况。研究表明，体积分数变化对颗粒的平均速度影响较小，大部分颗粒在管道内以推移运动为主；管道进口倾斜管段随着颗粒体积分数增加或泥浆流速增加，倾斜管段后段会产生堆积现象，当泥浆流速低于3.5 m/s时，堆积现象尤为明显(Fig.1)，并且与临界沉淀流速计算结果3.5 m/s相似，当泥浆流速为3 m/s时接近临界流速，此时管道内颗粒速度最小值为0.01 m/s，接近静止状态，因此需要控制排浆管道泥浆流速大于3.5 m/s，以保证长时间运输时管道不会发生堵塞；在距离管道进口约0.9 m处的管壁磨损较为严重，管道连续弯道处在管道中磨损量最大，是最容易发生泄漏的位置(Fig.2-3)；体积分数和泥浆流速的增加均会加深管道的平均磨损深度，体积分数每增加1%，平均磨损速率增加1.38×10^{-8} mm/s，泥浆流速每增加0.5 m/s，平均磨损速率增加1.93×10^{-8} mm/s，然而随着泥浆流速的增加，壁面磨损面积会减少。

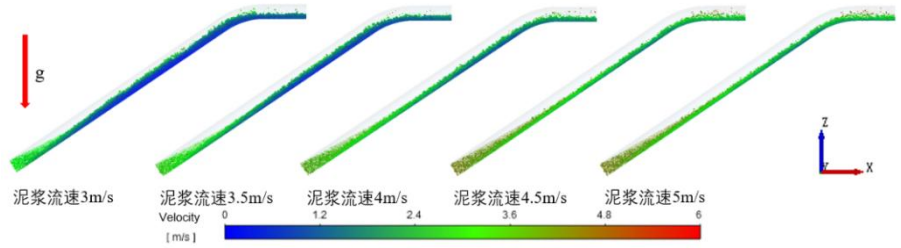


Fig. 1 Figure Distribution of particle movement speed at different flow rates of inclined pipeline

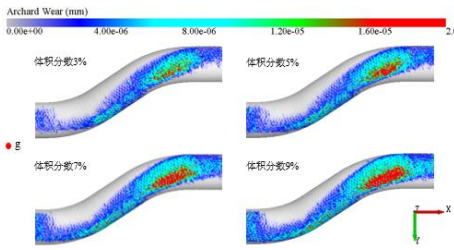


Fig. 2 Wear conditions of the maximum wear position of different volume fractions

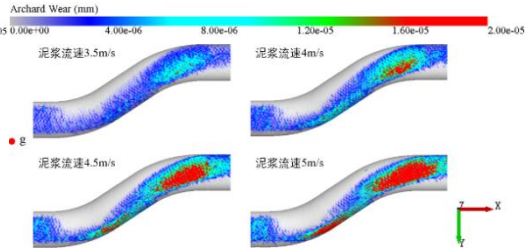


Fig. 3 Wear conditions of the maximum wear position of different flow rates

关键词：泥水盾构；管道磨损；固液两相流；粗颗粒；浆料

参考文献

[1] **Yingran F, Xinggao L, Shuning H, et al. Failure analysis of slurry TBM discharge pipe in complex strata combined with wear and vibration characteristics. Engineering Failure Analysis, 2023, 150**

报告人简介：贾浩　男，1988 年 7 月生，博士/特聘副教授，2018 年于西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室/能源与动力工程学院获得博士学位。2019 年进入浙江理工大学机械与自动控制学院（现机械工程学院）能源与动力工程系工作，现为浙江省全省复杂流动及流体工程装备实验室固定成员。主要从事粗颗粒非均质固液两相流、深海矿产水力采集和输送、泥水盾构管网流动特性等领域的研究工作，主持国家自然科学基金 1 项，浙江省自然科学基金 2 项。作为校内负责人参与浙江省重点研发项目 1 项，参与国家自然科学基金 2 项。主持横向项目 1 项（合同经费 108 万）。发表 SCI 论文 10 余篇，授权发明专利 3 项，软件著作权 1 项。获陕西省高等学校科学技术奖二等奖一项。

附：报告人为教师

毛朋飞、中国矿业大学、学生、pfmao@cumt.edu.cn

Study on vibration separation of wet and viscous agglomeration based on Discrete Element Method

Pengfei Mao[1], Xu Hou[1], Weinan Wang[1,*], Chenlong Duan[1,*]

[1]School of Chemical Engineering and Technology, China University of Mining and Technology, Xuzhou, 221116.

* wangwn@cumt.edu.cn

* clduan@cumt.edu.cn

The complex movement behavior of wet and viscous materials in the classification process, such as bonding into agglomerates, plugging holes, etc., seriously affects the vibration separation of materials. In order to solve the problem of worse vibration separation effect caused by adhesion of wet and viscous materials, the fragmentation behavior of wet and viscous agglomerates in the process of linear vibration separation was studied in this paper. Firstly, three-dimensional equal diameter agglomerate composed of viscous and wet particles was constructed based on surface energy. The discrete element method was used to investigate the influence of different motion states on the fragmentation of a single agglomerate and the fragmentation behavior and energy variations of multiple agglomerates under different excitation conditions respectively. It is found that the optimum fragmentation state can be achieved by adjusting the position, speed and angle of the collision of agglomerate. By changing the excitation conditions respectively, it is concluded that when the frequency is 21 Hz, the amplitude is 8 mm, and the inclination is 14°, the bonds between the agglomeration particles is broken the most, and the fragmentation effect is the best. This study provides a new idea for studying the energy variation of the agglomerates of wet and viscous particles, and also offers a reference for alleviating the difficult separation problems caused by agglomeration of wet and sticky materials.

Keywords: Wet particles; Discrete Element Method; Vibration separation; agglomeration

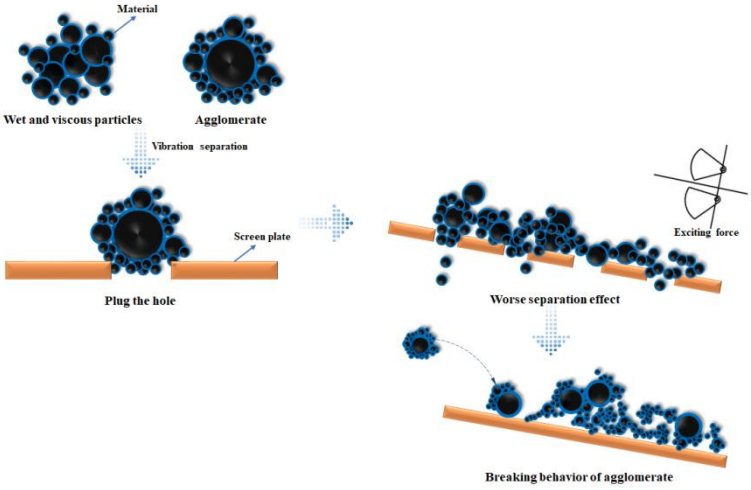


Fig. 1 Problems of vibration separation caused by viscous and wet materials

References

[24]Z. Zhang, S. Zhang, A Method for Humidifying Fine Particles of Coking Coal: Agglomeration Characteristics and Dust Dynamics Analysis, Powder Technology, 2021, 394, 1039-1049.

[25]L. Zhou, Sh. Yang, W. Chen, X. Wang, Z. Yuan, L. Yang, H. Wu, Chemical Agglomeration Properties of Fine Particles Immersed in Solutions and the Reduction in Fine Particle Emission by Adding Emulsion Polymers, Fuel Processing Technology. 2018, 175, 44-53.

[26]A.D Salman, G.K Reynolds, J.S Fu, Y.S Cheong, C.A Biggs, M.J Adams, D.A Gorham, J Lukenics, M.J Hounslow, Descriptive Classification of The Impact Failure Modes of Spherical Particles, Powder Technology, 2004, 133-144, 19-30.

[27]Vo, Thanh-Trung, Erosion Dynamics of Wet Particle Agglomerates, Computational Particle Mechanics, 2021, 8, 601-612.

[28]J. Yang, W. Tao, J. Gao, D. Yu, J. Zhou, L. He, Y. Yao, Measurement of Particle Agglomeration and Aggregate Breakdown of Reclaimed Asphalt Pavement, Construction and Building Materials, 2021, 296, 123681.

[29]K. Geng, J. Yao, J. Lu, P. Sun, L. Cui, Y. Dong, Promoting Fine Particle Agglomeration through Organic Agglomeration Solutions with Charged Atomization, Fuel, 2022, 328, 125342.
[30]R. Michel, J. Kaknics, E.D Bilbao, J. Poirier, The Mechanism of Agglomeration of The Refractory Materials in a Fluidized-bed Reactor, Ceramics International, 2016, 42(02), 2570-2581.
[31]K.J. Dong, A.B. Yu, I. Brake, DEM Simulation of Particle Flow on a Multi-deck Banana Screen, Minerals Engineering, 2009, 22, 910-920.
[32]Z. Zhou, L. Huang, H. Jiang, P. Wen, L. Zhao, Y. Zhao, C. Duan, Z. Luo, Z. Wang, C. Liu, Z.Wang, Kinematics of Elastic Screen Surface and Elimination Mechanism of Plugging during Dry Deep Screening of Moist Coal, Powder Technology, 2019, 346, 452-461.
[33]W. Wang, C. Duan, H. Jiang, S. Yu, Z. Zhou, J. Qiao, Y. Zhao, M. Pan, Mechanism of Overcoming Plugging and Optimization of Parameters for Rigid-flexible Coupled Elastic Screening of Moist Fine Coal, Powder Technology, 2020, 376, 113-125.
[34]L. Zhao, Z. Zhu, Y. Zhao, Q. Zheng, F. Xu, W. Wang, H. Jiang, C. Duan, Laboratory-scale Validation of a DEM Model for the Cross-Screen Processes of Wet Coals, Powder Technology, 2024, 431, 119091.

墙报展示人简介：

毛朋飞，在读博士研究生，从事颗粒筛分、矿物加工领域的研究工作。发表 SCI 论文 5 篇，获第六届高等学校矿物加工专业学生实践作品大赛一等奖等国家级学科竞赛 4 项。

附：请在此处注明墙报展示人是否为学生：学生

唐远旺、北京海菲尔格科技有限公司、非学生、thomas.tang@hiferg.com

PCM结晶监测系统在新能源（锂电）行业的应用简介

唐远旺[1]

[1] 北京海菲尔格科技有限公司，北京，100022

*thomas.tang@hiferg.com

新能源汽车的蓬勃发展带动锂电产业进入前所未有的大发展机遇期。随着需求的升温，无论是技术的快速创新，还是应用的迅速落地，锂电产业全链条展开了多技术路线、多应用模式、多组合方式的快速发展与探索。

在“双碳”愿景的推动之下，未来中国动力电池市场仍将出现快速增长，锂电相关产业对经济发展的提振效应会进一步释放。六氟磷酸锂、双氟磺酰亚胺锂、碳酸乙烯酯等的结晶过程中的成核、控温、搅拌等工艺参数的不同对产品的粒度分布、堆积密度、溶解速率等都具有重大影响，进而影响产品的应用范围、成本控制、能耗评估、出售价格等。PCM 结晶监测系统能够实现对六氟磷酸锂、双氟磺酰亚胺锂、碳酸乙烯酯等的结晶过程的实时监控并可根据监控结果实时调整过程工艺。PCM 可以实时记录结晶过程中的颗粒图像并实时分析晶体的颗粒度，同时给出晶体颗粒数量、晶体径长比、晶体生长速率等数据。不管是研发规格的还是工业规格的 PCM 结晶监测系统，都避免了取样后进行离线测试的不便和误差，可以真实反映结晶过程中晶体的变化情况，包括晶核形成、晶核数量、晶体生长、二次成核监控、过程颗粒度监控等。PCM 结晶监测系统已经成为获得高质量晶体产品、快速实现定制指定颗粒度晶体产品的有效手段。

Fig 1. Process Crystallization Monitoring in R&D

Fig 2. Process Crystallization Monitoring in pipeline

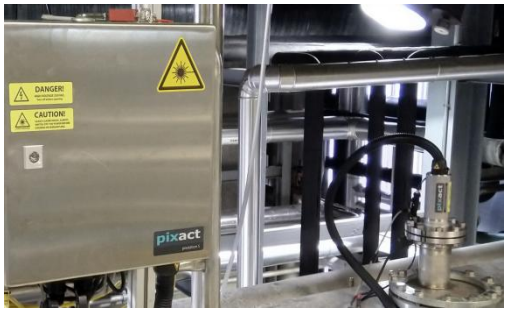
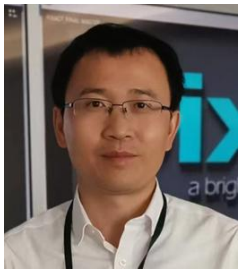


Fig 3. Process Crystallization Monitoring in large crystallizer

关键词：结晶监测；六氟磷酸锂；双氟磺酰亚胺锂；碳酸乙烯酯；晶体颗粒度

报告人简介：



唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器行业的技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

附：非学生

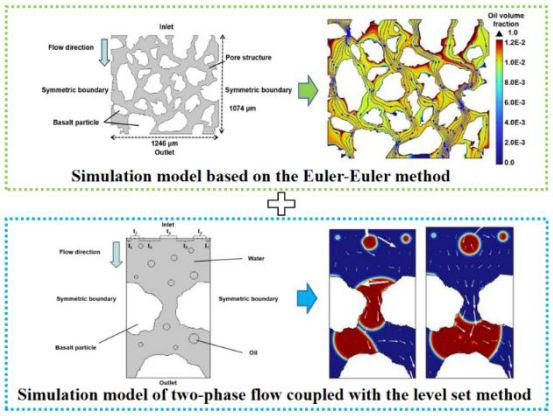
Performance evaluation of basalt particles for oil-water separation based on experiments and numerical simulations

Cun-Guang Liang [a], Liang Hou [a], Hui Li [a], Peng-Cheng Ma [a*]

[a] Laboratory of Environmental Science and Technology, The Xinjiang Technical Institute of Physics and Chemistry, Key Laboratory of Functional Materials and Devices for Special Environments, Chinese Academy of Sciences, Urumqi, 830011, China.

[*] Corresponding authors: mapc@ms.xjb.ac.cn (P.-C. Ma)

The discharge of oily wastewater is increasing daily, and it has become a complex problem that urgently needs to be solved in industries such as petroleum and petrochemicals. The development of efficient and environmentally friendly materials remains a hot topic at present. Basalt has good durability, abundant resources, and low cost. Its rough and porous surface gives it good filtration and adsorption properties and massive potential in oil-water separation applications. In this work, basalt particles were used as filtration materials, and the performance and mechanism of basalt in oil-water emulsion separation applications are systematically studied through physical experiments and numerical simulations. This study delves into the impact of basalt particles' physical characteristics on oil-water separation, identifying a clear link between particle size, shape, porosity, and separation efficiency. Smaller particles were more effective at reducing turbidity and chemical oxygen demand but also reduced the throughflow of the separation medium. The dynamic behavior of oil droplets [1] within the porous structure was numerically analyzed based on the Euler-Euler model and the coupling of the two-phase flow and level set method [2, 3]. The oil-water separation efficiency and droplet trajectory were analyzed under different conditions, considering the deformation of the droplets, kinetic viscosity, and interactions among the droplets [4]. The simulation results show the real-time movement, aggregation, and detachment of oil droplets within the porous filter. The results are useful for understanding the microscale process of demulsification and provide theoretical guidance for designing more efficient oil-water separation systems.



Keywords: Oil-water separation; Basalt particles; Aggregation; Simulation.

References

[35]D. K. Kim, G. Choi, T.-J. Ko, S. Shin, S. J. Kim. Numerical investigation of oil-water separation on a mesh-type filter. Acta Mech 2022, 233, 1041-1059.

[36]A. Salama. On the estimation of the leaked volume of an oil droplet undergoing breakup in cross flow filtration: CFD investigation, scaling, and a macroscopic model. Separation and Purification Technology 2020, 252, 117459.

[37]J. Chaudhuri, K. B. Ehrhard, Numerical investigation of coalescence filtration: Multiphase flow through fibrous structures. Separation and Purification Technology 2021, 257, 117853.

[38]S. Wang, F. Javadpour, Q. Feng. Confinement Correction to Mercury Intrusion Capillary Pressure of Shale Nanopores. Scientific Reports 2016, 6, 20160.

报告人/墙报展示人简介：

梁存光，甘肃人，博士毕业于中国科学院大学，目前在中国科学院新疆理化技术研究所任助理研究员。主要从事矿产资源开发利用领域的工作，专注于玄武岩热-力学特性研究和气-固或液-液过滤方面的多物理场耦合仿真研究。在 Energy、Chemical Engineering Science、中国表面工程等国内外期刊发表论文 18 篇（其中第一作者 8 篇），申请专利 3 项，授权 2 项。曾先后获得研究生国家奖学金、硕士优秀毕业论文、第十五届自治区优秀论文三等奖，并在“国科大杯”和“率先杯”创新创业大赛中分别获得分项赛决赛二等奖和复赛优胜奖。参与完成自治区、中国科学院等省部级科研项目 4 项，参加相关研究领域学术会议 6 次，在玄武岩纤维高值化应用过程中的多物理场模拟研究领域拥有扎实的知识储备与丰富的实践经历。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

天然/城市矿物短流程制备锂离子电池材料

葛鹏

中南大学资源加工与生物工程学院

摘要：

新能源产业是我国战略性新兴产业的重要组成部分,也是我国实现能源绿色转型的重要支撑。而矿产资源是保证新能源行业健康有序发展的重要物质基础。广义而讲，我国矿产资源主要分为天然矿产资源与城市矿产资源。若想运用于先进绿色储能领域，二者均需要经过冶炼提纯工艺，该环节环境污染大、能耗高、关键元素利用率低。若能跳过冶炼提纯环节，实现矿产到高能新材的短流程使用，意义重大。近年来，申请人针对天然/城市矿产资源利用率低、流程长、污染大等问题，通过矿物加工、材料学、界面化学等多学科知识融合，开展天然/城市矿产资源短流程储能利用系统研究，探索天然/城市矿物再生新方法，实现天然辉锑矿、废旧锂离子电池正负极材料高值化利用，节能降耗并大幅度提升资源利用率。

氧气高炉低碳炼铁技术路径的数值模拟探索

焦璐璐[1*]，匡世波[2]，余艾冰[2]

[1]东南大学能源与环境学院，南京，中国，210096

[2]ARC Industrial Transformation Research Hub for Smart Process Design and Control, Department of Chemical and Biological Engineering, Monash University, Clayton, VIC, 3800, Australia

*Email: lulu.jiao@seu.edu.cn

摘要正文：

氧气高炉（OBF）具备高煤比、利用系数高、顶煤气热值高、大幅减少 CO_2 排放等优势，但是也面临“上部过冷”和“下部过热”两个方面的问题。还原性气体喷吹被认为是解决上述问题的有效方案。本文采用数值模拟的方法对氧气高炉低碳炼铁新工艺进行探索性研究。本工作基于团队最近开发的基于 CFD 的三维高炉炼铁过程模型而完成，该模型考虑了许多高炉特有特征，包括 3D 矿焦分层结构、3D 软熔带位置和形状预测、3D 死料堆形状预测、3D 滴落状液体流动、产率预测和炉料颗粒尺寸变化等特征。具体地，首先运用模型系统研究了传统高炉向氧气高炉的逐步转变过程，探索了不同富氧浓度下高炉碳减排的潜力，并与生产实践数据进行对比，验证了本团队数值模型在工程应用当中的适用性。此外，还在全氧高炉条件下，利用模型系统研究了喷吹气体流量、CO_2 浓度和温度对全氧高炉内部状态和综合性能指标的影响规律，以进一步对全氧高炉喷吹策略进行优化，并对其碳减排潜力进行探索。在下一步研究过程中，还将发挥数值模型低成本和低风险的优势，对氧气高炉的工程放大进行探索性研究，以期为氧气高炉在全国范围内的推广应用提供一些建议。

关键词：氧气高炉；低碳炼铁；数值模型；计算流体力学

报告人简介：

焦璐璐博士，现任东南大学至善博士后，专注于过程冶金与过程工程领域的研究工作。他于 2013 年获得北京科技大学热能工程学士学位，2016 年取得硕士学位，并于 2020 年在澳大利亚蒙纳士大学获得化学工程博士学位。2020 年 7 月至 2022 年 1 月，他在蒙纳士大学苏州校区担任副研究员，并在余艾冰院士领导的颗粒系统仿真与建模实验室（SIMPAS）开展研究。自 2023 年 6 月起，焦博士担任 BHP-宝武-蒙纳士低碳冶金知识中心（LCM 中心）秘书长。

焦博士的研究重点在于高炉炼铁过程仿真模拟，尤其侧重于高炉炼铁过程模型的工业应用，拥有超过 8 年的相关研究经验。他作为项目核心成员，参与了多个由澳大利亚研究委员会（ARC）、国家自然科学基金（NSFC）及工业界资助的高炉建模项目，累计科研经费达 1500 万元。焦博士在高炉仿真建模领域共发表了 13 篇 SCI 论文，其中 7 篇发表在行业著名期刊《MMTB》，并已获得 7 项发明专利授权。

此外，焦博士还入选了“江苏省 333 高层次人才培养工程”和“江苏省卓越博士后计划”，同时担任《炼铁》杂志青年编委，并受邀为 5 个 SCI 期刊的审稿人。他在学术和工业领域均取得了显著成就，持续推动低碳冶金领域的前沿研究。

姓名：张嵩雪

工作单位：中国矿业大学

是否为学生：博士研究生

联系邮箱：sxzhang@cumt.edu.cn

Kinetic screening process model under gradual change of aperture ratio and the effect on the screening efficiency

Songxue Zhang[1], Jiahao Pan[1], Weinan Wang[1,*], Chenlong Duan[1,*]

[1]School of Chemical Engineering and Technology, China University of Mining and Technology, Xuzhou, 221116

* clduan@cumt.edu.cn; wangwn@cumt.edu.cn

Screening is one of the most effective methods of particle classification and utilization. In the screening process, the particle group and the screen surface constantly collide with each other, so the screen surface is an important carrier, and its structural characteristics significantly affect the movement of the particle group, thus playing a decisive role in the final classification efficiency. This research focuses on the structural characteristics of different sections of the screen surface, and takes the aperture ratio as the key index to design a variety of new screen surfaces with the aperture ratio gradually changing along the screen section. In order to predict the motion of particle groups in the screening process, the discrete element method (DEM) was used for experimental research. Based on the method of least square and regression analysis, the kinetic screening process characteristics under the gradual change of the aperture ratio of the screen surface were expounded. The gradual rate of aperture ratio k_r was used to expand the kinetic screening process model, the accuracy of the model is verified under different vibration intensity. Compared with the linear relation in the classical model, power regression is more suitable for fitting the kinetic screening process model under gradual change of aperture ratio. Based on the above research, the influence of the gradual change of aperture ratio on the screening effect was revealed through the screening tests of different degrees of aperture ratio gradient. The spatial distribution of particles penetration behavior on the screen surface was investigated. The results show that the process of fine particles passing through the screen surface can be accelerated by reducing the aperture ratio gradually, and the greater the reducing degree, the more significant the effect.

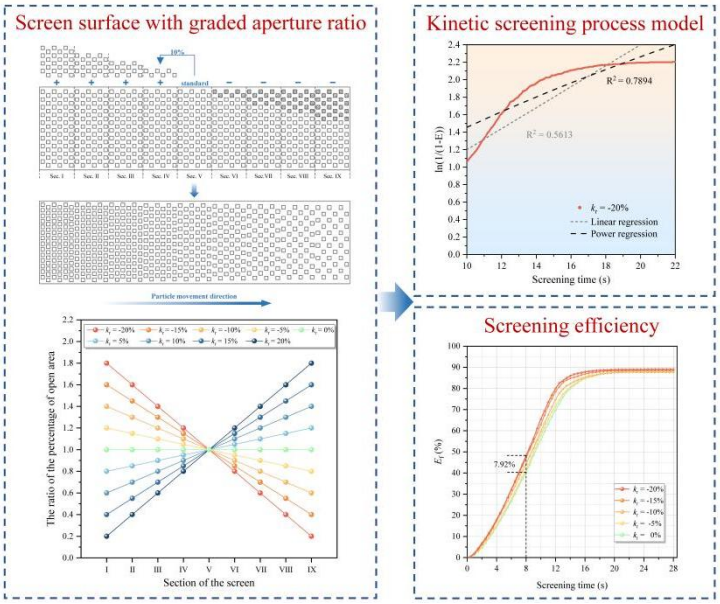


Fig. 1 Kinetic screening process model and the screening efficiency under gradual change of aperture ratio

Keywords: Kinetic screening process model; Screen surface design; Aperture ratio; DEM; Regression analysis

References
[39]F. Elskamp, H. Kruggel-Emden, Review and Benchmarking of Process Models for Batch Screening Based on Discrete Element Simulations, Advanced Powder Technology. 2015, 26, 679–697.
[40]M. Trumic, N. Magdalinovic, New Model of Screening Kinetics, Minerals Engineering. 2011, 24, 42–49.
[41]A. Davoodi, M. Bengtsson, E. Hulthén, C.M. Evertsson, Effects of Screen Decks' Aperture Shapes and Materials on Screening Efficiency, Minerals Engineering. 2019, 139, 105699.
[42]C. Duan, J. Yuan, M. Pan, T. Huang, H. Jiang, Y. Zhao, J. Qiao, W. Wang, S. Yu, J. Lu, Variable Elliptical Vibrating Screen: Particles Kinematics and Industrial Application, International Journal of Mining Science and Technology. 2021, 31, 1013–1022.
[43]W. Wang, X. Hou, P. Mao, M. Pan, S. Yu, H. Jiang, J. Qiao, C. Duan, Kinematic Characteristics of Key Structures and Time Evolution Law of Material Distribution Characteristics During Flip-flow Screening, Minerals Engineering. 2023, 201, 108241.
[44]X. Hou, W. Wang, J. Pan, P. Mao, S. Zhang, C. Duan, Optimization of Flip-flow Screen Plate Based on DEM-FEM Coupling Model and Screening Performance of Fine Minerals, Minerals Engineering. 2024, 211, 108694.
[45]M. Jahani, A. Farzanegan, M. Noaparast, Investigation of Screening Performance of Banana Screens Using LIGGGHTS DEM Solver, Powder Technology. 2015, 283, 32–47.
[46]Z. Li, J. Liang, P. Jia, X. Tong, Parameter Optimization and Mechanism Research of Double-layer Variable Screen Surface Vibrating Screen, Particulate Science and Technology. 2023, 41, 661–673.
[47]G. Shen, Z. Chen, X. Wu, Z. Li, X. Tong, Stepwise Shape Optimization of the Surface of a Vibrating Screen, Particuology. 2021, 58, 26–34.
[48]O. Afsari, K. Hashemnia, Optimized Design of a Linear Vibrating Screen Based on Efficiency Maximisation and Mesh Wear Minimisation Employing Discrete Element Method, Particuology. 2024, 90, 307–322.

墙报展示人简介：

张嵩雪，在读博士研究生，从事颗粒筛分、矿物加工领域的研究工作。发表 SCI 论文 2 篇，获第六届全国高等学校矿物加工工程专业学生实践作品大赛一等奖等国家级学科竞赛奖励 3 项。

墙报展示人是否为学生：是

汇报人：张福川，重庆大学材料科学与工程学院研究生，zhangfc813@163.com

氢气对铁矿石颗粒软熔滴落行为的影响

张福川[1]，贺坤[2]，武庆慧[1]，赵运建[2]，王刚[2*]，徐健[1*]
1.重庆大学，材料科学与工程学院，重庆 400044
2.中冶赛迪工程技术股份有限公司，重庆 401122
*Email: Gang.B.Wang@cisdi.com.cn / jxu@cqu.edu.cn

氢能源被认为是替代一氧化碳用于还原铁氧化物最有潜力的清洁能源之一[1]。在900℃以上还原铁矿石颗粒，H_2比CO更具优势，用H_2替代CO降低了气体渗碳，从而提高了填充床再加速收缩转变的温度，显著改善透气性能[2,3]。本研究以10-12.5mm直径的烧结矿颗粒为研究对象，结合熔滴实验，初步探究H_2对烧结矿颗粒填充床软熔滴落行为的影响规律。研究结果表明：在900℃以上通入H_2气氛，不同于通入CO气氛的是烧结矿颗粒填充床的收缩转变温度从1000℃增加至1100℃左右，提高了100℃；其收缩曲线也不再是单纯地线性增加，在1200℃后开始加速收缩，呈现大幅度收缩趋势，同时伴随着压差的急剧上升；其软化起始温度明显增大，从1106.8℃增加至1139℃，软化温度区间变窄，熔化起始温度明显降低，从1263.2℃降低至1202.2℃。综上，H_2加快了浮氏体还原到铁这个过程，减小了软熔温度区间，不断推进铁液滴落，减少填充床中的熔融金属，极大改善了填充床层的透气性。

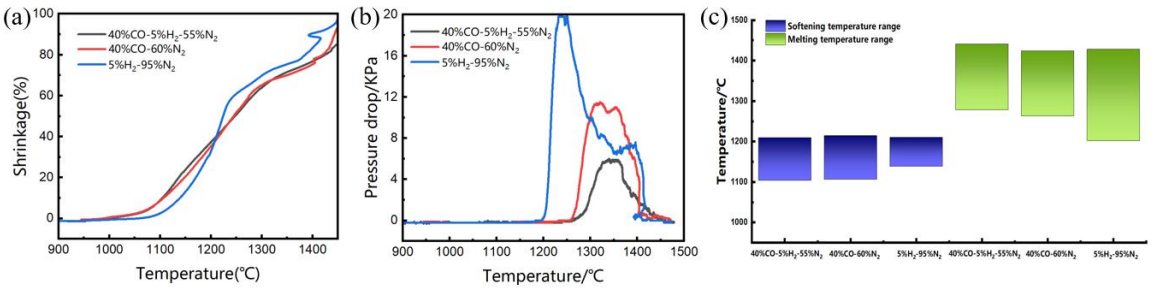


Fig. 1 Comparisons of experimental results in term of (a) the shrinkage, (b) the pressure drop, and (c) the softening and melting temperature range

关键词：氢气；烧结矿；填充床；软熔滴落

参考文献

[1] Chen F, Mohassab Y, Jiang T, Sohn HY. Hydrogen reduction kinetics of hematite concentrate particles relevant to a novel flash ironmaking process. Metall Mater Trans B, 2015, 46(11): 33-45.

[2] Kaihui Ma, Jian Xu, Junyi Deng, et al. Hydrogen impact on the shrinkage behaviors of wustite packed beds above 900˚C. Int. J. Hydrog. Energy, 2019, 44(36):19555-19562.

[3] Kaihui Ma, Junyi Deng, Jian Xu, et al. Utilization and impacts of hydrogen in the ironmaking processes: A review from lab-scale basics to industrial practices. Int. J. Hydrog. Energy, 2021, 46(52):26646-26664.

作者简介：

张福川，男，出生于 1999 年 8 月，重庆大学材料科学与工程学院研究生，主要研究方向为：炼铁过程炉料高温物理化学性能转变。

邮箱：zhangfc813@163.com

第 10 分会场：创新能源颗粒，培育能源颗粒新质生产力

大力发展能源颗粒，推动新能源高质量发展

张强

清华大学化学工程系，北京 100084

* E-mail: zhang-qiang@mails.tsinghua.edu.cn

大力发展新能源，需要新能源发电技术和储能技术发挥关键支撑技术。随着锂离子电池位代表的技术的不断迭代，除了开发新的电极材料，电极制备及电池组装过程中能源颗粒技术的革新也对电池性能至关重要。

理性设计颗粒材料的固有尺寸和初始聚团态，将单个颗粒的活性位充分暴露到电子/离子界面上，才能使能源颗粒在器件中发挥最大功效。先进的电极制备工艺不仅能提高电池的电化学性能，更能够减少经济成本、提高电池制备能效、最大程度降低对环境造成的不利影响。因此，揭示电极制备过程中的能源颗粒问题对电极特征及性能的影响，对优化电极制备参数、获得高比能、长寿命的储能设备十分重要。本报告以锂电池用能源颗粒为典型体系，深入总结了锂离子电池电极制备过程中材料处理技术的最新进展，重点分析了电极浆料制备、涂布、电极干燥、碾压以及干法电极制备过程中的能源颗粒问题对电极微结构及电化学性能的影响，旨在电池尺度上实现最优化的电极结构和最优的电化学性能。

参考文献

1. Liu H, Cheng XB, Yan C, et al ***Particuology*** 2021, 57, 56.

2. Shi P, Feng S, Song YW, et al. ***J Am Chem Soc*** 2024, 146, 14754.

3. Xu P, Shuang ZY, Zhao CZ, et al. ***Sci China Chem*** 2024, 67, 67.

报告人简介：

清华大学长聘教授。曾获得国家自然科学基金杰出青年基金、中国青年科技奖、教育部青年科学奖、北京青年五四奖章、英国皇家学会 Newton Advanced Fellowship、清华大学刘冰奖、国际电化学会议 Tian Zhaowu 奖。2017-2021 年连续五年被评为“全球高被引科学家”。长期从事能源化学与能源材料的研究。近年来，致力于将国家重大需求与基础研究相结合，面向能源存储和利用的重大需求，重点研究锂硫电池的原理和关键能源材料。提出了锂硫电池中的锂键化学、离子溶剂复合结构概念，并根据高能电池需求，研制出复合金属锂负极、碳硫复合正极等多种高性能能源材料，构筑了锂硫软包电池器件。发表论文 300 余篇，h 因子 134，授权发明专利 40 余项,部分技术已转化。担任国际期刊 Angew. Chem.首届顾问编辑、EES Batteries 主编、J Energy Chem 副主编、Particuology 能源颗粒主题编辑，Matter，化工学报等期刊编委。担任国家重点研发计划储能与智能电网专项专家组副组长。曾获得教育部自然科学一等奖、化工学会基础科学一等奖等学术奖励。

多孔结构金属化合物的可控构筑及储能机制

周国伟*，何妍妍*，李军辉

山东省高校轻工精细化学品重点实验室，济南市多尺度功能材料工程实验室，齐鲁工业大学化学与化工学院，山东省济南市长清区大学路 3501 号，250353，山东 济南

*Email: heyanyan@qlu.edu.cn；gwzhou@qlu.edu.cn

多孔结构的设计合成已成为化学和材料科学前沿的一个重要的研究领域，同时是纳米技术发展的主要研究热点之一。多孔结构无机材料具有较高的载流子迁移率、规则有序的孔道结构、孔径大小连续可调、充足的活性位点和基于层次结构的稳定框架等优势备受瞩目，在光催化、能源存储与转化领域有着广泛的应用前景[1-4]。构筑了系列多孔结构金属氧化物、硫属化物纳米材料，如核－壳结构PANI/TiO_2、蛋黄－双壳结构$NiFe_2V_2O_8$@NC、多孔蛋黄壳结构Mo掺杂$NiCo_2O_4$、蛋黄－双壳结构$Mn_{0.5}Zn_{0.5}Co_2O_4$/C、核－壳结构Ni－CeO_2@PAIN、核-壳结构$SnSe_2$/$NiSe_2$@NC、CoSe/$MoSe_2$-C异质结、分级花状SnS_2/NiS_2@S-rGO等，提出了不同形貌多孔结构的形成机理，并探讨了其作为电极材料应用的储锂、储钠机制。为多孔结构无机材料的设计、性能提升及其储能应用提供理论依据和指导。

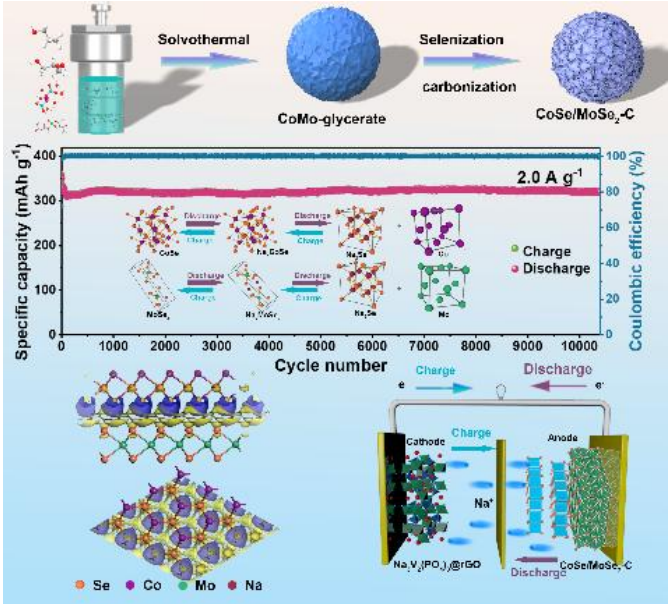


图1 CoSe/$MoSe_2$-C异质结的构筑及储钠性能

关键词：多孔结构；金属化合物；储能

参考文献

[1] H. Li, Y. He*, Y. Dai, Y. Ren, T. Gao, G. Zhou*, *Chem. Eng. J.*, 2022, *427*: 131784.

[2] H. Li, Y. He*, Q. Wang, S. Gu, L. Wang, J. Yu, G. Zhou*, L. Xu*. *Adv. Energy Mater.*, 2023, *13*: 2302901.

[3] X. Wang, K. Feng, B. Sang, G. Li, Z. Zhang, G. Zhou*, B. Xi, X. An, S. Xiong*. *Adv. Energy Mater.*, 2023, *13*: 2301670.

[4] J. Li, Y. He*, Y. Dai, H. Zhang, Y. Zhang, S. Gu*, X. Wang, T. Gao,G. Zhou*, L. Xu*, et al. *Adv. Funct. Mater.,*2024, DOI: 10.1002/adfm.202406915.

报告人简介：

周国伟，二级教授，博士生导师。国务院政府特殊津贴专家、山东省优秀科技工作者、山东省优秀研究生指导教师等，主持国家自然科学基金、山东省自然科学基金重点项目等多项，获山东省科学技术奖一等奖、二等奖多项，在国际知名期刊 *Adv. Energy Mater., Adv. Funct. Mater., Angew. Chem. Int. Ed., Chem. Eng. J.*等发表 SCI 论文 150 余篇，获授权发明专利 50 余件。

理论和数据驱动的固态离子输运研究

侯廷政 [1,*]

[1]清华大学深圳国际研究生院，材料研究院，广东省深圳市南山区，518055，中国

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

摘要正文：在全球从化石能源向绿色能源转变的过程中，高能量密度储能体系的发展至关重要。在此背景下，采用固态电解质替代液态电解质材料有望推动高能量密度锂金属电池的应用。当前，传统的无机固态电解质和聚合物固态电解质体系存在界面兼容性差、电化学稳定性差和离子导电率低等难以克服的问题。由于材料原位微观表征困难、实验研发成本高，多尺度模拟和高通量计算在固态电解质的理论机理和计算筛选研究中发挥着越来越重要的作用。首先，针对准固态电解质材料离子输运机理不明确的问题，我们通过理论与实验相结合的方法，验证了金属有机框架基准固态电解质材料中“溶剂辅助跳跃”为主导的离子输运新机理，提出了通过调控材料孔洞大小和穿插度提高离子电导的新策略。其次，针对聚合物基复合固态电解质室温离子电导率低等问题，我们发展了聚合物基电解质的多尺度模拟方法，提出了有机-无机复合固态电解质界面微环境调控策略，构筑了具有不饱和金属位点的新型电解质填料，实现了固态电解质高离子导率、高离子迁移数和固态电池长寿命稳定运行。最后，针对材料界面接触和界面副反应这一瓶颈问题，我们正在开发无机晶体材料界面生成和优化算法，预期建立固态电池关键材料界面数据库，为解决固态电池界面问题提供理论和数据支持。

关键词：固态电池；固态电解质；无序岩盐型正极

参考文献

[1] Guo, S.‡; Tan, S.‡; Ma, J.; Chen, L.; Yang, K.; Zhu, Q.; Ma, Y.; Shi, P.; Wei, Y.; An, X.; Ren, Q.; Huang, Y.; Zhu, Y.; Cheng, Y.; Lv, W.; Hou, T.*; Liu, M.*; He, Y.*; Yang, Q.; Kang, F.* Dissociation mechanism of lithium salt by BaTiO3 with spontaneous polarization. *Energy Environ. Sci.* 2024, *17*, 3797–3806.

[2] Zhu, Y.‡; Lao, Z.‡; Zhang, M.‡; Hou, T.*; Xiao, X.; Piao, Z.; Lu, G.; Han, Z.; Gao, R.; Nie, L.; Wu, X.; Song, Y.; Ji, C.; Wang, J.; Zhou, G.* A locally solvent-tethered polymer electrolyte for ultra-long-life lithium metal batteries. *Nat. Commun.* 2024, *15*, 3914.

[3] Hou, T.‡; Xu, W.‡; Pei, X.; Jiang, L.; Yaghi, O. M.*; Persson, K. A.* Ionic Conduction Mechanism and Design of Metal–Organic Frameworks Based Quasi-Solid-State Electrolytes. *J. Am. Chem. Soc.* 2022, *144*, 13446-13450.

Theory and Data Driven Study of Solid-State Ion Transport

Tingzheng Hou[1,*]

[1] Institute of Materials Research, Tsinghua Shenzhen International Graduate School, Tsinghua University, Shenzhen 518055, China

* tingzhenghou@sz.tsinghua.edu.cn

The development and application of high-capacity energy storage has been crucial to the global transition from fossil fuels to green energy. In this context, solid-state lithium batteries emerge as promising candidates to fulfill the requirements by substituting liquid electrolytes with solid-state electrolytes (SSEs). However, conventional inorganic solid electrolytes and polymer solid electrolytes have encountered limitations stemming from poor interfacial compatibility and low ionic conductivity, respectively. To circumvent the challenge, novel electrolyte systems have been explored, including composite solid electrolytes formed by combining inorganic fillers with polymer, and quasi-solid state electrolytes achieved formed by integrating organic solvents into solid electrolyte matrices. To propel the evolution of solid electrolyte design, a more comprehensive understanding of ion transport behavior and the formulation of innovative design strategies are imperative. By employing a hybrid theoretical and experimental approach, we have identified solvent-assisted hopping as the predominant pathway for Li^+ conduction within intrinsically anionic metal–organic framework (MOF)-based quasi-solid-state electrolytes. Furthermore, we have developed design strategies aimed at regulating the local environment at the interface between inorganic fillers and the polymer phase within composite electrolytes, thereby achieving enhanced ionic conductivity and prolonged battery cycling.

Keywords: Solid-state batteries; Solid-state electrolytes; Cation-disordered rocksalt-type cathodes

References

[1] Guo, S.‡; Tan, S.‡; Ma, J.; Chen, L.; Yang, K.; Zhu, Q.; Ma, Y.; Shi, P.; Wei, Y.; An, X.; Ren, Q.; Huang, Y.; Zhu, Y.; Cheng, Y.; Lv, W.; Hou, T.*; Liu, M.*; He, Y.*; Yang, Q.; Kang, F.* Dissociation mechanism of lithium salt by BaTiO3 with spontaneous polarization. *Energy Environ. Sci.* 2024, *17*, 3797–3806.

[2] Zhu, Y.‡; Lao, Z.‡; Zhang, M.‡; Hou, T.*; Xiao, X.; Piao, Z.; Lu, G.; Han, Z.; Gao, R.; Nie, L.; Wu, X.; Song, Y.; Ji, C.; Wang, J.; Zhou, G.* A locally solvent-tethered polymer electrolyte for ultra-long-life lithium metal batteries. *Nat. Commun.* 2024, *15*, 3914.

[3] Hou, T.‡; Xu, W.‡; Pei, X.; Jiang, L.; Yaghi, O. M.*; Persson, K. A.* Ionic Conduction Mechanism and Design of Metal–Organic Frameworks Based Quasi-Solid-State Electrolytes. *J. Am. Chem. Soc.* 2022, *144*, 13446-13450.

报告人/墙报展示人简介：

侯廷政，清华大学深圳国际研究生院助理教授、特别研究员、博士生导师。长期致力于能源材料的化学理论机制与理性设计研究，近年来共发表相关领域学术论文 30 余篇，其中通讯及(共同)一作 12 篇，包括 Nat. Commun.、J. Am. Chem. Soc.、Angew. Chem. Int. Ed.、Adv. Mater.、 Energy Environ. Sci. 等高水平国际期刊发表论文，论文总被引 7,000 余次，ESI 高被引论文 9 篇，h 因子 20。担任 Energy Mater. Devices 期刊青年编委，Nat. Catal.、Nat. Commun.、J. Am. Chem. Soc.、Adv. Funct. Mater.等国际期刊审稿人。曾获 2019 年教育部自然科学奖一等奖、2018 年 IOP China Top Cited Author Award 和 2022 年度国家优秀自费留学生奖学金。长期担任美国材料基因组计划龙头项目 Materials Project 的核心开发者，贡献核心代码 8 万余行。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

碳基材料的表界面调控及太阳能利用性能研究

孟祥桐*，邱介山*

[1] 北京化工大学，北京市朝阳区北三环东路 15 号，100029

*Email: mengxt@buct.edu.cn, qiujs@buct.edu.cn

摘要正文：太阳能是一种清洁高效、分布广泛的可再生能源，其在全球可再生能源体系中占据重要地位。太阳能利用技术主要包括光电转换、光热转换和光化学转换三种方式。其中，光电/光热转换器件的光吸收率、能量转换效率、稳定性等性能与材料的微观结构、表界面物理化学性质、化学组成等密切相关。碳材料具有来源广泛、维度可调、表面电子/原子结构可控、光吸收率高、导电性能优异、稳定性好等诸多优势，故在太阳能利用技术领域展现出极大应用潜力。围绕太阳能利用技术对碳基关键材料的应用需求，报告人所在的“石油和化工行业新型碳基功能材料重点实验室”（邱介山教授为负责人）锲而不舍地开展了系统的研究工作。本报告将围绕光热转换（光热界面蒸发）和光伏转换（太阳能电池）中碳基材料的结构调控和荷质传输强化，基于维度工程、表面工程等策略，介绍数种碳基材料的设计制备及表界面调控方法，包括石墨烯、石墨烯与有机相复合物、多孔碳、石墨烯纳米带等。

关键词：碳材料；太阳能利用；表界面性质；调控

参考文献

[1] **H. Zou, X. Meng*, J. Qiu*, et al., Hofmeister Effect-Enhanced Hydration Chemistry of Hydrogel for High-Efficiency Solar-Driven Interfacial Desalination, *Adv. Mater.* 2023, 35: 2207262. (ESI highly-cited)**

[2] **X. Zhao, X. Meng*, J. Qiu *, et al., Topographic Manipulation of Graphene Oxide by Polyaniline Nanocone Arrays Enables High-Performance Solar-Driven Water Evaporation, *Adv. Funct. Mater.* 2023, 35: 2209207.**

[3] **Y. Ma, X. Meng*, J. Qiu *, et al., Scrutinizing Synergy and Active Site of Nitrogen and Selenium Dual-Doped Porous Carbon for Efficient Triiodide Reduction, ACS Catalysis, 2023, 13: 1290-1298. (ESI highly-cited)**

[4] **J. Li, X. Meng*, J. Qiu *, et al., Valence Engineering via Manganese-Doping on Cobalt Nitride Nanoarrays for Efficient Electrochemically Paired Glycerol Valorization and H_2 Production, *Adv. Funct. Mater.* 2024, 34: 2316718.**

[5] **Y. Du, X. Meng*, J. Qiu *, et al., Dimensionality Engineering toward Carbon Materials for Electrochemical CO_2 Reduction: Progress and Prospect, *Adv. Funct. Mater.*, 2024, DOI: 10.1002/adfm.202408013.**

[6] **X. Meng, C. Yu*, X. Song, J. Qiu*, Zhiqun Lin*, Scrutinizing Defects and Defect Density of Selenium-Doped Graphene for High-Efficiency Triiodide Reduction in Dye-Sensitized Solar Cells. Angew. Chem. Int. Ed., 2018, 57: 4682-4686.**

报告人/墙报展示人简介：

孟祥桐，北京化工大学青年教学名师，化学工程学院副教授。从事功能碳材料开发及光热/光电转换、电化学合成的应用基础研究。2018 年于大连理工大学获得博士学位；2016-2018 年在佐治亚理工学院交流学习。以第一/通讯作者身份在 *Adv. Mater.*、*Angew. Chem.*、*Adv. Energy Mater.*、*Adv. Funct. Mater.*、*ACS Catal.*、*Nano Energy* 等国际刊物上发表论文 30 余篇，5 篇论文入选 ESI 高被引，已授权国家发明专利 6 件。作为项目负责人，主持国家自然科学基金青年基金、广西省自然科学基金面上项目等课题。荣获首届“化工与材料”京博博士论文奖铜奖、石化联合会-Clariant 可持续发展青年创新奖等荣誉。目前担任*物理化学学报*、*Carbon Energy*、*Green Carbon* 等学术刊物的青年编委。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

人工智能设计锂电池电解液

陈翔[1,*]

[1]清华大学，北京，100084

*xiangchen@tsinghua.edu.cn

电解液是锂电池的核心组成之一，主要发挥传输锂离子的功能，被形象地誉为“电池血液”，显著影响电池实际性能。然而，先进电解液设计开发面临着溶液化学规律复杂、电解液分子数目庞大、电解液组分间强关联优化难等挑战。本报告将主要讨论人工智能技术如何解决当前先进电解液研发的瓶颈难题，包括数据驱动发掘电解液溶剂化学规律，高通量计算构建电解液数据库，机器学习定量关联电解液分子结构与理化性质以加速上亿分子空间中电解液分子的精准设计，从而为下一代锂电池电解液提供潜在方案，为实现我国“双碳”目标提供关键技术支撑。

关键词：锂电池；电解液；人工智能；大数据库

参考文献

[1] Yao, N.; Chen, X.;* Fu, Z.-H.; Zhang, Q.* Chem. Rev. 2022, 122, 10970–11021.

[2] Chen, X.; Zhang, Q.* Acc. Chem. Res. 2020, 53, 1992–2002.

[3] Chen, X.; Shen, X.; Li, B. et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 734–737

[4] Chen, X.; Li, H.-R.; Shen, X.; Zhang, Q. Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 16643–16647

[5] Chen, X.; Shen, X.; Hou, T.-Z.; Zhang, R.; Peng, H.-J.; Zhang, Q. Chem 2020, 6, 2242–2256.

[6] Chen, X.; Liu, X.; Shen, X.; Zhang, Q. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 24354–24366.

[7] Yao, N.; Chen, X.;* Shen, X. et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 21473–21478.

[8] Gao, Y.-C.; Yao, N.; Chen, X.* et al. J. Am. Chem. Soc. 2023, DOI: 10.1021/jacs.1023c08346.

[9] Yao, N.; Sun, S.-Y.; Chen, X.* et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202210859.

报告人简介：

陈翔，清华大学副研究员，国家优秀青年基金获得者。主要从事能源化学基础理论研究，提出了锂键化学、离子－溶剂结构等概念，构建了全球领先的电解液数据库，开发了人工智能设计电解液的方法与软件平台，形成了一系列高水平研究成果。以（共同）第一/通讯作者身份在 Chem. Rev., Sci. Adv., Chem, Angew. Chem., J. Am. Chem. Soc.等期刊发表 SCI 论文 40 余篇，H 因子 67，被引 17000 余次；研究成果曾获教育部自然科学一等奖(3/8)等；入选 2023《麻省理工科技评论》TR35 亚太区和 2020－2023 科睿唯安全球高被引学者；承担国家自然科学基金、中国科协青年托举工程、科技部重点研发专项子课题等项目；担任 Nature, Nat. Catal., Nat. Commun., Joule, Angew. Chem., Adv. Mater.等期刊独立审稿人，J. Energy Chem.期刊客座编辑，Chinese. Chem. Lett., Green Carbon 青年编委和中国颗粒学会青年理事。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

聚合物电解质的结构设计与固态电池性能研究

徐若谷[1]，张柯欣[1]，王玉洁[1]，李峰[1]，孙振华[1,*]

[1]中国科学院金属研究所，辽宁省沈阳市文化路 72 号，110016

*Email: zhsun@imr.ac.cn

摘要正文：近年来，传统的锂离子电池越来越接近其能量密度的极限，使用易燃有机电解液也使得其安全性受到严峻的考验。因而，亟需开发下一代兼具高能量密度和高安全性的电化学储能器件。固态电池是采用固态电解质代替液态电解质的新型电化学储能器件，其具有安全性能高和能量密度高的特点。目前，研究者们已经开发了包括聚合物固态电解质、无机固态电解质及复合型固态电解质等多种研究体系。其中，聚合物电解质因其轻质、易成膜以及与电极间良好的界面接触等特点，被广泛应用于固态电解质的研究。但是，聚合物电解质的室温离子电导率较低和界面稳定性差，影响了它在固态电池中的广泛应用。针对这些问题，我们将多硫化锂接在PEO链末端，多硫化锂可提高PEO的锂离子迁移数和离子电导率，提高电化学稳定窗口，形成稳定化学界面，实现长循环稳定性[1]。我们通过分子改性，在PEO电解质中构建均质快速离子通道，实现力学性能、离子电导和电化学性能的显著提升[2,3]。提出固化的局部高浓度电解质策略，通过解耦离子配对和离子传输，有效提高了电解质的离子电导率和电解质/电极间的界面兼容性，进而实现了可在宽温度区间工作及优异快充/快放能力的固态锂金属电池[5]。利用电化学聚合原位引入导电聚合物层来解决固态聚合物电池的界面问题，实现电极与电解质膜之间的低界面电阻、高稳定接触，提高电解质与锂负极界面的相容性[6]。这些工作，为聚合物固态电解质和固态电池研究奠定了基础。

关键词：聚合物电解质；固态电池；离子电导；界面稳定性

参考文献

[1] C. G. Sun, Z. X. Wang, L. C. Yin, S. J. Xu, Z. A. Ghazi, Y. Shi, B. G. An*, Z. H. Sun, H. M. Cheng, F. Li, Fast lithium ion transport in solid polymer electrolytes from polysulfide-bridged copolymers, *Nano Energy* 2020, 75, 104976.

[2] S. J. Xu, Z. H. Sun, C. G. Sun, F. Li, K. Chen, Z. H. Zhang, G. J. Hou, H. M. Cheng, F. Li, Homogeneous and fast ion conduction of PEO-based solid-state electrolyte at low temperature, *Adv. Funct. Mater.* 2020, 30, 2007172.

[3] R. G. Xu, S. J. Xu, F. Wang, R. Xiao, P. Tang, X. Y. Zhang, S. Bai, Z. H. Sun, F. Li, Double crosslinked polymer electrolyte by C-S-C group and metal-organic framework for solid-state lithium batteries, *Small Struct.* 2023, 4, 2200206.

[5] S. J. Xu, R. G. Xu, T. Yu, K. Chen, C.G. Sun, G. J. Hu, S. Bai, H. M. Cheng, Z. H. Sun, F. Li, Decoupling of ion pairing and ion conduction in ultrahigh-concentration electrolytes enables wide-temperature solid-state batteries, *Energy Environ. Sci.* 2022, 15, 3379.

[6] J. G. Zheng, C. G. Sun, Z. X. Wang, S. J. Liu, B. G. An, Z. H. Sun, F. Li, Double ionic–electronic transfer interface layers for all-solid-state lithium batteries, Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 18448.

报告人/墙报展示人简介：

孙振华，中国科学院金属研究所，研究员，博士生导师。研究工作主要面向高比能、高安全的新型电池体系，开展关键电极材料、电解质和器件性能研究，已经在 Nature Commun.、Chem. Soc. Rev.和 Energy Environ. Sci.等 SCI 期刊发表论文 120 余篇，被引用 1.2 万余次（Google scholar），H-index 为 53，申请发明专利 25 项。曾获得中国颗粒学会自然科学一等奖（排名第二），入选了中国科学院青年创新促进会优秀会员和辽宁省“兴辽人才计划”青年拔尖人才。担任中国颗粒学会青年理事会理事，Transactions of Tianjin University 编委，SusMat、eScience 和 Chinese Chemical Letters 青年编委。

复合固态电解质及其固态电池设计与性能调控

潘龙

[1] 东南大学材料科学与工材学院，江苏南京，211189

摘要正文：固态电解质是固态锂金属电池（SSLMB）的核心部件之一，有望同时实现高能量密度和高安全性。虽然无机固态电解质（例如氧化物、硫化物）具有快速离子传导性，但由于其刚性和脆性大，导致其与电极的界面接触不良；聚合物电解质具有良好的界面兼容性和接触性，但通常表现出较低的离子电导率。因此，复合固态电解质（CSE）正在成为SSLMB的一种有前途的解决方案，因为它能够将聚合物的柔韧性与无机材料的高离子电导率相结合。本报告将介绍我们课题组在CSE方面的最新进展。首先，我将讨论一种牺牲抑制剂策略，该策略可有效抑制氟聚合物/石榴石界面反应，实现离子电导率高达1 mS/cm且在5V下稳定的CSE。其次，介绍一种惰性填料策略，其可显著提高离子电导率，同时降低CSE的总成本。最后，将概述本课题组为实现CSE大规模生产所做的努力。

关键词：固态电解质；聚合物；填料、界面、固态锂金属电池

参考文献

[1] **L. Pan**, S. Sun, G. Yu, X. X. Liu, S. Feng, W. Zhang, M. Turgunov, Y. Wang*, Z. Sun*, ***Chemical Engineering Journal***, 2022, 449, 137682.

[2] **L. Pan**, S. Feng, H. Sun, X. X. Liu, P. Yuan, M. Cao, M. Gao, Y. Wang*, Z. Sun*, ***Small***, 2024, Accepted.

[3] Y. Wang, P. Yuan, X. X. Liu, S. Feng, M. Cao, J. Liu, S.-Z. Kure-Chu, T. Hihara, **L Pan***, Z.M. Sun*, ***Advanced Functional Materials***, 2024, Accepted.

高比能锂硫电池的失效分析与调控策略研究

李博权[1,*]，陈子贤[1]，黄佳琦[1]

[1]前沿交叉科学研究院，北京理工大学，北京，中国，100081

*Email: libq@bit.edu.cn

摘要正文：

锂硫电池具有高达2600 Wh/kg的理论能量密度，被认为是极具潜力的下一代高比能二次电池体系之一。目前锂硫软包电池可以实现超过400 Wh/kg的实际能量密度，但是其循环寿命十分有限。

本报告围绕高能量密度锂硫软包电池的失效机制与调控策略开展研究。首先构筑了实际能量密度400-500 Wh/kg的锂硫软包电池并进行充放电循环，指认了首圈放电比容量低和放电极化随循环快速增加为高能量密度锂硫软包电池的关键失效特征。对一圈充放电后的锂硫软包电池进行拆解分析，以硫元素的空间分布为抓手进行定量研究，发现电解液中存在大量无法充分转化的多硫化锂，是导致实际放电比容量较理论值有较大差距的关键因素。

对循环失效的锂硫软包电池进行系统失效分析，循环后的正负极均能够提供较高的容量与较快的动力学，表明失效电池中的正负极性能未有明显衰退。对失效后的软包电池进行注液，发现电池的性能回升至失效前水平，进而指认电解液干液是导致高能量密度锂硫软包电池失效的关键因素。进一步分析了导致电池干液的原因并关联其产生较大放电极化的化学机制。通过标定循环前后正负极与隔膜的持液量，证实了电解液干液的原因是正极结构随循环发生较大的体积形变致使空隙体积增大所致。而通过低电解液极化解耦的模型实验，指认了多硫化锂传质极化是导致其放电终止的原因，而贫电解液条件下产生的电化学极化是导致软包电池失效的关键因素。

基于上述结论，本工作提出了氧化还原辅助介体调控的化学原理，通过化学修饰多硫化锂强化其氧化还原介导能力，为多硫化锂的歧化与归中反应提供额外的反应路径，进而大幅提升硫正极的氧化还原反应动力学与硫化锂的沉积容量与维度，构筑了能量密度高达700 Wh/kg的锂硫软包电池器件。

关键词：锂硫电池；软包电池；失效分析；高能量密度

参考文献

[1] **Z.-X. Chen, B.-Q. Li*, J.-Q. Huang*, et al. J. Am. Chem. Soc. 2023, 145: 16449-16457**

[2] **Q. Cheng, B.-Q. Li*, et al. J. Energy Chem. 2023, 76: 181.**

[3] **Z.-X. Chen, B.-Q. Li*, J.-Q. Huang*, et al. Adv. Mater. 2022, 34: 2201555.**

[4] **Z.-X. Chen, B.-Q. Li*, J.-Q. Huang*, et al. Energy Storage Mater. 2022, 53: 315.**

[5] **G. Ye, B.-Q. Li*, et al. J. Energy Chem. 2022, 66: 24.**

报告人/墙报展示人简介：

（简介内容采用宋体五号字体）

李博权，北京理工大学前沿交叉科学研究院副研究员，博士生导师。主要从事锂硫电池等高比能二次电池的化学机制、材料构筑与器件应用等方面的研究。相关研究成果发表 SCI 论文 100 余篇，包括 44 篇 ESI 高被引论文，引用 17000 余次，H 因子 72，授权 7 项中国发明专利。主持科技部重点研发计划课题、国家自然科学基金等项目，入选 2021－2023 年科睿唯安全球高被引科学家。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

锂金属电池负极失效调控

金成滨[1*]，盛欧微[2]，张强[3]，陶新永[4]

[1] 中国计量大学材料与化学学院，浙江杭州，

[2] 杭州电子科技大学材料与环境学院，浙江杭州

[3] 清华大学化工系，北京

[4] 浙江工业大学材料学院，浙江杭州

*Email: jincb@cjlu.edu.cn

摘要正文：锂金属负极由于不稳定的SEI膜，枝晶生长，界面腐蚀等原因造成死锂的产生和积累，严重恶化电池性能和寿命。发展了两类策略以其解决死锂难题：（1）抑制性策略，即通过电解液调控，界面层设计，骨架材料构筑等减少死锂的产生和积累；（2）疏导型策略，通过引入反应型氧化还原介质，对死锂进行转化和再利用。基于上述策略，纽扣型及软包型电池性能大幅提升。

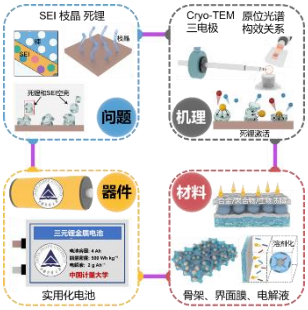


Fig. 1 金属锂负极失效调控

关键词：锂金属；界面；失效机制；调控策略

参考文献

[1] **C. B. Jin, et al Rejuvenating dead lithium supply in lithium metal anodes by iodine redox. Nat. Energy 2021, 6 (4), 378-387.**

[2] **C. B. Jin, et al A corrosion inhibiting layer to tackle the irreversible lithium loss in lithium metal batteries. Nat. Commun. 2023, 14, 8269.**

[3] **C. B. Jin, et al Taming solvent-solute interaction accelerates interfacial kinetics in low-temperature lithium-metal batteries. Adv. Mater. 2023, 35 (3), 2208340.**

[4] **C. B. Jin, et al Reclaiming inactive lithium with a triiodide/iodide redox couple for practical lithium metal batteries. Angew. Chem. 2021, 60 (42), 22990-22995.**

报告人/墙报展示人简介：

金成滨，中国计量大学材料与化学学院学术副院长，研究员，博新计划入选者，长期从事新型二次电池储能材料和电池化学微观机制研究，致力于构筑高比能、长寿命、高安全的锂金属电池体系。师从浙江工业大学陶新永教授，清华大学张强教授。在 Nature 子刊、Science 子刊等知名期刊发表论文 60 余篇，引用 5700 余次。主持参与国家自然科学基金、省基金等 9 项，国家授权发明专利 8 项。任 Nature、Angew. Chem.、Adv. Energy Mater.、ACS Nano 等期刊审稿人，eScience、APM、EEM 青年编委等。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

全固态电池正极界面稳定性研究

孙硕*， 赵相玉*

南京工业大学材料科学与工程学院，南京，210000

* sunshuo@njtech.edu.cn；xiangyu.zhao@njtech.edu.cn

全固态锂电池（ASSBs）因其优异的安全性和高能量密度而备受关注。然而与液态体系不同，固态电解质无流动性。任何应变的非均匀性，无论是在正极颗粒内部还是在固态电解质/正极界面，都会产生机械应力，尤其在高电荷状态下，高的应力应变会破坏材料完整性，产生微裂纹和断裂。体积变化的正极材料会排斥周围的固态电解质，引起严重的界面脱触，导致固态电池快速衰减失效。研究表明通过引入低应变的第二相结构，可以有效降低整体正极材料结构变化，稳定正极/固态电解质界面，对固态电池实现长循环发挥着关键作用，为设计和构建长循环稳定、高能量密度、高安全性的全固态锂电池提供了一种可借鉴的思路。

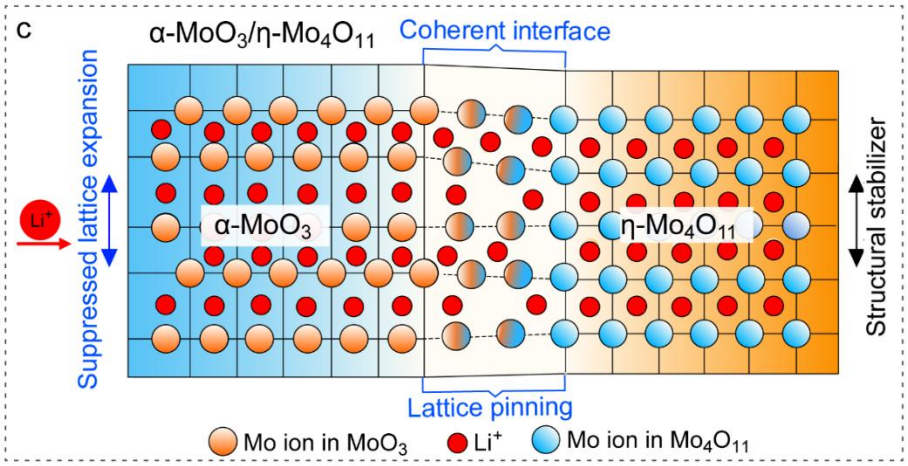


图 1 共格界面设计实现低体积膨胀

关键词：固态电池；高能量密度；低应变正极；正极/固态电解质界面

参考文献：

[1] S. Sun et al., Science Advances, 2022,8(47): eadd5189.

[2] S. Sun et al., Nature Communications, 2023, 14, 6662.

高性能金属锂负极用碳基材料的结构设计

叶欢[1*]，曹菲菲[1]，郭玉国[2]

[1]华中农业大学化学学院，湖北省武汉市狮子山街 1 号，430070

[2]中国科学院化学研究所，北京市海淀区中关村北一街 2 号，100190

*Email: yehuan@mail.hzau.edu.cn

摘要正文：金属锂二次电池，因金属锂具有较高的理论比容量，较低的还原电位和密度小等优点，其整个电池的理论能量密度是商业锂离子电池的2-3倍，而成为最具发展潜力的新型高比能电化学储能器件[1]。然而，在充放电过程中，金属锂的不均匀沉积，形成针状和须状枝晶。锂枝晶的不可控生长，会导致较差的界面稳定性、较低的库伦效率、巨大的体积变化和较差的电池安全性能[2]。研究表明，开发高能量密度的金属锂二次电池的关键在于构筑安全、稳定的金属锂负极。多孔碳材料具有物理化学性质稳定、机械强度大、比表面积高、孔容可调等优点，是比较理想的锂负极载体。因此，本研究主要集中在多孔碳材料的调控设计和构建复合的结构来抑制枝晶生长，制备高安全复合锂负极，主要创新性工作包括：（1）构筑高效稳定的金属锂储藏室实现高的锂利用率（>95%）[3]；（2）利用亲锂的锂铝合金介质诱导金属锂均匀成核和生长[4]；（3）设计抗疲劳保护界面层缓解动态体积变化[5]；（4）设计低体积变化的锂/碳负极[6,7]；（5）构建MXene基超薄锂负极[8,9]。

关键词：锂负极；锂枝晶；碳材料；稳定性

参考文献

1 X.-B. Cheng, R. Zhang, C.-Z. Zhao & Q. Zhang. Chemical Reviews 2017, 117, 10403.

2 H. Ye, Y. Zhang, Y.-X. Yin, F.-F. Cao & Y.-G. Guo. ACS Cent. Sci. 2020, 6, 661.

3 H. Ye, S. Xin, Y.-X. Yin, J.-Y. Li, Y.-G. Guo & L.-J. Wan. J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 5916.

4 H. Ye, Z.-J. Zheng, H.-R. Yao, S.-C. Liu, T.-T. Zuo, X.-W. Wu, Y.-X. Yin, N.-W. Li, J.-J. Gu, F.-F. Cao & Y.-G. Guo. Angewandte Chemie International Edition 2019, 58, 1094.

5 R.-M. Gao, H. Yang, C.-Y. Wang, H. Ye, F.-F. Cao & Z.-P. Guo. Angewandte Chemie International Edition 2021, 60, 25508.

6 Z.-J. Zheng, Q. Su, Q. Zhang, X.-C. Hu, Y.-X. Yin, R. Wen, H. Ye, Z.-B. Wang & Y.-G. Guo. Nano Energy 2019, 64, 103910.

7 Y.-S. Feng, Y.-N. Li, P. Wang, Z.-P. Guo, F.-F. Cao & H. Ye. Angewandte Chemie International Edition 2023, 62, e202310132.

8 C.-Y. Wang, Z.-J. Zheng, Y.-Q. Feng, H. Ye, F.-F. Cao & Z.-P. Guo. Nano Energy 2020, 74, 104817.

9 C.-Y. Wang, C.-P. Yang, Y.-H. Du, Z.-P. Guo & H. Ye. Advanced Functional Materials 2023, n/a, 2303427.

报告人/墙报展示人简介：

叶欢，华中农业大学化学学院教授，博士生导师。研究方向为锂金属二次电池关键材料的可控制备与研究。以第一或通讯作者（含共同）在 *J. Am. Chem. Soc.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*Adv. Mater.*、*ACS Cent. Sci.*、*Energy Environ. Sci.*等期刊累计发表学术论文 40 余篇，其中 ESI 高被引论文 6 篇。参编英文专著 1 部，申请 PCT 国际专利 3 件和中国发明专利 10 余件，在中国、美国等多个国家获得授权。主持国家自然科学基金面上项目、青年项目、湖北省自然科学基金青年项目。获湖北省自然科学奖二等奖（2023、第二完成人），被评选为 IEEE PES 储能技术 2024 年度杰出女性科技工作者、第二届新能源材料创新发展论坛青年菁英奖、华中农业大学“狮山硕彦计划”青年英才。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

高比能硫化物全固态电池关键材料及其安全性研究

任东生[1]，芮新宇[1]，朱高龙[2]，刘翔[3]，卢兰光[1]，欧阳明高[1*]

[1]清华大学车辆与运载学院，北京，100084

[2]欧阳明高院士工作站，四川新能源汽车创新中心，宜宾，四川，644000

[3]北京航空航天大学材料科学与工程学院，北京，100084

Email: rends@tsinghua.edu.cn

全固态电池具有高安全性、高能量密度、高温度适应性等优点，被公认为最有前景的下一代动力电池。随着超离子导体的快速发展，以硫化物为代表的固态电解质的离子电导率不断提升，赶上甚至超过液态电解液，全固态电池的科学研究与应用开发进入了高速发展阶段。然而，全固态电池的规模量产仍存在许多挑战亟待解决，包括材料不稳定性、界面失效、电极/电芯结构设计以及大规模生产工艺缺失等。本报告将聚焦高比能硫化物全固态电池的关键材料及其安全性，汇报团队在面向硫化物全固态电池的高镍正极微结构设计、高容量硅碳负极、超薄固态电解质膜、软包电芯制备等方面的研究进展，并探讨硫化物全固态电池关键材料及电芯的安全性，最后对未来研究与发展方向进行展望与讨论。

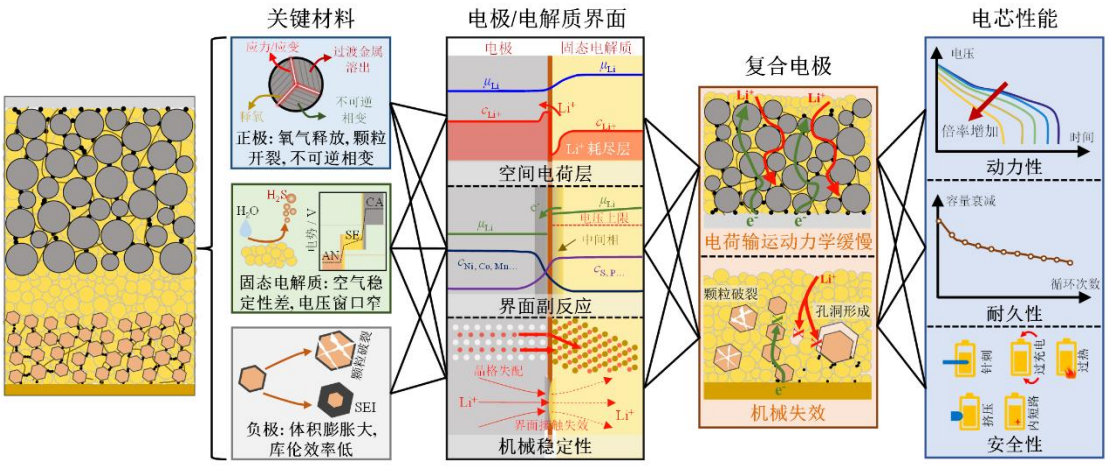


图 1. 硫化物全固态电池关键科学技术

[1] X. Rui, D. Ren*, X. Liu*, et al. Distinct thermal runaway mechanisms of sulfide-based all-solid-state batteries. Energy & Environmental Science, 2023, 16: 3552-3563.

[2] D. Ren*, L. Lu, R. Hua, et al. Challenges and opportunities of practical sulfide-based all-solid-state batteries. eTransportation, 2023, 8: 100272.

氧化还原媒介调控下的贫液锂硫电池反应动力学研究

叶华林[1]

[1]南京师范大学化学与材料科学学院，江苏南京，210023

*Email: hualin@njnu.edu.cn

摘要正文：锂硫电池在能量密度和成本上具有突出优势，被认为是下一代最具潜力的储能电池之一。然而，目前报道的锂硫电池的实际能量密度要显著低于其理论值，其中一个很重要的原因是需要使用大量的电解液 (>10 μl/mg)。在贫电解质条件下 (<5 μl/mg)，锂硫电池的动力学反应速度极其缓慢，而且充放电固体产物 (Li_2S/S沉积物) 会在电极内部不断积累，导致电极失活。针对这一挑战，本研究工作提出了一种氧化还原媒介辅助催化途径，其中固体正极催化剂与可溶性氧化还原媒介一起协同催化，极大的提高了硫的电化学反应动力学速度和转化率。这种媒介辅助催化策略能够在贫电解质 (~5.0 μl/mg) 条件下，将高负载锂硫电池 (~5.6 mg/cm^2) 的硫利用率从~44%提高~61%，可以作为一种锂硫催化转化的新途径，显著提高硫电极的动力学反应速度和硫利用率。

关键词：锂硫电池；多硫化物；氧化还原媒介；硫利用率

参考文献

[1] H. Ye, J. Sun, S. Zhang, H. Lin, T. Zhang, Q. Yao, J. Y. Lee, Stepwise electrocatalysis as a strategy against polysulfide shuttling in Li–S batteries. ACS Nano. 2019, 13, 14208.

[2] H. Ye, J. Sun, S. Zhang, H. Lin, T. Zhang, Q. Yao, J. Y. Lee, Mediator–assisted catalysis of polysulfide conversion for high–loading lithium–sulfur batteries operating under the lean electrolyte condition. Energy Storage Mater. 2021, 38, 338.

[3] H. Ye, L. Ma, Y. Zhou, L. Wang, N. Han, F. Zhao, J. Deng, T. Wu, Y. Li, J. Lu, Amorphous MoS_3 as the sulfur-equivalent cathode material for room-temperature Li–S and Na–S batteries. Proc. Natl. Acad. Sci. 2017 114 (50), 13091-13096.

[4] H. Ye, M. Li, T. Liu, Y. Li, J. Lu, Activating Li_2S as the Lithium-Containing Cathode in Lithium–Sulfur Batteries. ACS Energy Lett. 2020, 5, 2234-2245.

报告人/墙报展示人简介：

叶华林，南京师范大学特聘研究员。2021 年博士毕业于新加坡国立大学化工学院，获得 2021 年度国家优秀自费留学生奖学金。随后于新加坡国立大学材料学院从事博士后工作，开展锂硫电池和大规模储能液流电池研究。2023 年入职南京师范大学，入选南京师范大学青年领军人才和鱼跃学者计划，主持国家自然科学基金，国家重点研发计划子课题，江苏省高校自然科学基金面上项目各一项。迄今在国际核心期刊发表 SCI 论文 40 余篇，授权专利 1 项，英文专著 1 章。部分成果发表在 Proc. Natl. Acad. Sci. (PNAS)，Adv. Mater.，Adv. Energy Mater.，ACS Energy Lett.，ACS Nano 等国际知名杂志上。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

Particulate modeling for the next generation battery electrode manufacturing

Ruihuan Ge [1,2*]

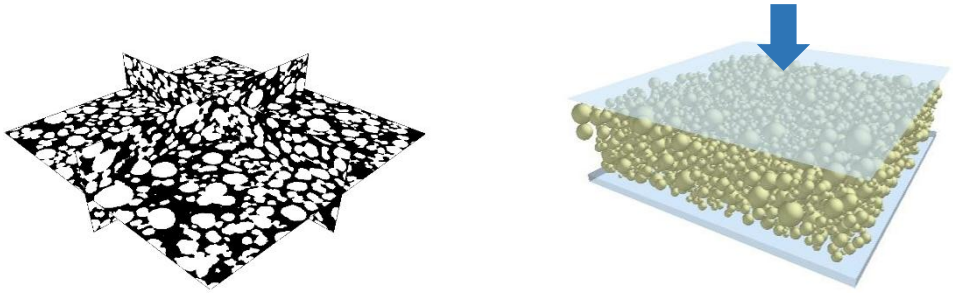
[1] School of Mechatronical Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081

[2]Department of Chemical and Biological Engineering, The University of Sheffield, Sheffield S10 2TN

*ruihuan.ge@bit.edu.cn

The ever increasing demand for renewable energy worldwide means that developing efficient energy storage techniques are of critical importance. Materials in particulate forms are commonly used in essential energy storage systems, e.g. lithium-ion battery electrodes. In this project, Discrete Element Method (DEM) simulation is used to investigate the calendering process of lithium-ion battery electrodes. By combining DEM, X-ray computed tomography and electrochemical analysis, a digital workflow was established to investigate electrode mechanical and structural properties. Detailed stress and structural evolutions at microscopic particle scale were analyzed. This work provides a highly promising way to digitalize the next generation battery electrode manufacturing and design.

Keywords: Particulate modelling, Discrete Element Method (DEM), Lithium-ion battery, Electrode microstructure



(a) Active material (AM) particle of an electrode from X-ray tomography

(b) DEM simulation setup for electrode calendering

Figure 1 DEM simulation of particulate battery electrodes.

报告人简介：

葛瑞环，现为北京理工大学副教授，特聘研究员。曾任职英国谢菲尔德大学法拉第研究所研究员（Faraday Institution Research Fellow）。2018 年获澳大利亚 Monash 大学博士学位，师从澳大利亚工程院院士 Karen Hapgood 教授，英国皇家工程院院士 Mojtaba Ghadiri 教授。研究领域包括多尺度颗粒动力学及其在热储能/电化学储能国防军工等领域应用。已发表 SCI 论文 40 余篇，其中第一/通讯作者 20 篇，申请并获授权专利及软件著作权 10 余项。

高安全锂电池隔膜

徐桂银

东华大学材料科学与工程学院，纤维材料改性国家重点实验室，上海，201620

***E-mail:** xuguiyin@dhu.edu.cn

锂电池在近几十年取得了重大进展，并对便携式电子产品、电动汽车和大规模能量存储做出了巨大贡献。鉴于电池事故频繁发生，电池安全问题严重而紧迫。作为电极之间的电子屏障和离子通道，隔膜是必不可少的关键材料[1-3]。尽管它不涉及电化学反应，但隔膜能够影响离子迁移能力、倍率性能等，尤其是锂电池安全性能。因此，迫切需要开发功能隔膜，保障锂电池能够持续、安全地工作。我们团队主要基于有机-无机复合功能隔膜改善锂电池、锂硫电池性能的研究，制备具有锂离子导通能力强、耐高温、机械性能优异、热传导速度快的高安全新型隔膜复合材料，借助原位/非原位表征方法深入阐明循环过程中隔膜的结构演变机制，揭示材料微结构、表界面性质与电化学性能之间的构效关系。本次会议交流主要围绕纤维隔膜材料在能源方面的应用展开，也将对锂电隔膜材料在该领域的应用前景、面临挑战和回收利用方向进行展望。

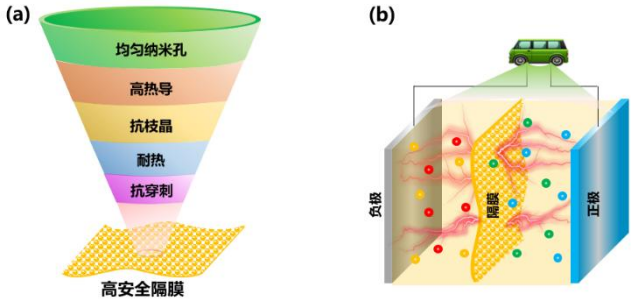


Fig.1 Design of High Safety Diaphragm for Lithium Battery

关键词：锂电池、锂硫电池、高安全隔膜

参考文献：

[1] Lagadec, M.; Zahn, R.; Wood, V. *Nat. Energy*, **2019**, **4**, 16-25.

[2] Zhu, D.; Xu, G.; Barnes, M.; Tseng, C.; Zhang, Z.; Zhang, J.; Li, Y.; Zhu, Y.; Khalil, S.; Rahman, M.; Verduzco, R.; Ajayan, P. *Adv. Funct. Mater.*, **2021**, **31**, 2100505.

[3] Xu, G.; Yan, Q.; Wang, S.; Kushima, A.; Bai, P.; Liu, K.; Zhang, X.; Tang, Z.; Li, J. *Chem. Sci.*, **2017**, **8**, 6619-6625.

Suppressing lithium voids in all-solid-state lithium metal batteries through ternary composite anodes

Chen-Zi Zhao[1,*]

[1]Tsinghua Center for Green Chemical Engineering Electrification (CCEE), Beijing Key Laboratory of Green Chemical Reaction Engineering and Technology, Department of Chemical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China

* zcz@mail.tsinghua.edu.cn

The application of all-solid-state lithium metal batteries (ASSLMBs) is hampered by the dynamic deterioration of solid−solid contacts. Anodic degradation is primarily attributed to the accumulation of lithium (Li) voids due to the limited Li diffusion abilities of the anodes. Here, a ternary composite lithium anode is introduced by comprising carbon materials embedded within the lithium−magnesium substrate. This design effectively suppresses the Li void-induced dynamic deterioration of interfacial contact during continuous cycling. The enhanced Li diffusion pathway with accelerated diffusion rate in bulk anode aids in maintaining contact post-Li stripping, thus mitigating interface damage caused by Li void formation. The ternary composite anode provides an areal capacity of 14.2 mAh cm^{-2} with Li utilization rate of 85%. Cooperated with $LiNi_{0.6}Co_{0.2}Mn_{0.2}O_2$ cathodes, the full cells exhibit long-term stability of >300 cycles under room temperature. These findings shed fresh lights to explore the Li atom diffusion within Li composite anodes and provides effective strategy to construct conformal interface for high-capacity and long-life ASSLMBs.

Keywords: all-solid-state lithium metal batteries, lithium voids, lithium composite anodes, lithium diffusion, solid electrolytes.

References

[5] Z.-X. Wang, Y. Lu, C.-Z. Zhao, et al. Joule 2024, DOI: 10.1016/j.joule.2024.07.007.
[6] S. Sun, C.-Z. Zhao, H. Yuan et al. Sci. Adv., 8 (2022) eadd5189.
[7] Y. Lu, C.-Z. Zhao, J.-Q. Huang et al. Joule, 6 (2022) 1172.
[8] Z.-Y. Wang, C.-Z. Zhao, S. Sun et al. Matter, 6 (2023) 1069.

报告人简介：

赵辰孜，清华大学化工系助理研究员。2011–2015 年、2015–2020 年分别在清华大学材料学院、化工系学习并取得学士、博士学位，2019 年在美国康奈尔大学访学。2020–2022 年在清华大学车辆学院开展博士后研究。面向双碳目标下可再生能源高效利用对新一代高能量密度和高安全性电池的需求，聚焦于固态金属锂电池开发。提出了固–固界面离子分布设计概念，通过固定阴离子、引入离子再分布器等方法，实现了界面锂离子均匀分布，研制出柔性固态电解质、复合锂负极、复合富锂锰基正极等新型能源材料，构筑了安时级高能量密度、高安全性的固态金属锂电池器件。相关成果在电化学储能领域得到推广，与多个国际、国内一流企业达成合作。相关成果以第一或通讯作者在 Sci. Adv.、PNAS、Adv. Mater.、Joule 等期刊发表，担任 Nature、Nat. Commun.、Angew. Chem. 等期刊的审稿人/仲裁人。共发表论文 70 余篇，他引 1.7 万余次，连续三年入选科睿唯安全球高被引学者（2021–2023）。曾获教育部自然科学奖一等奖（排五）等奖励。承担中国科协青年人才托举工程、国家自然科学基金、国家重点研发计划子课题等项目。

报告人为教师。

高容量水系锌碘电池设计制备

郑自建

湖北大学新能源与电气工程学院，湖北省武汉市武昌区友谊大道 368 号，430062

*Email: zhengzj@hubu.edu.cn

摘要正文：水系锌碘电池因其成本低、绿色环保、安全性高、元素储量丰富而成为最具发展潜力的新型电化学储能器件[1-4]。然而，在电池存放过程中，金属锌负极存在化学腐蚀问题[5,6]。在充放电过程中，存在锌负极不均匀沉积，碘正极存在多碘化物穿梭，反应动力学缓慢以及锌碘全电池能量密度低等问题[7,8]。研究表明，开发高容量锌碘二次电池的关键在于构筑安全、稳定、高利用率的金属锌负极以及厚碘正极。设计制备具有生物可降解特性的凝胶电解质[9]，开发具有离子-电子双通道的厚碘正极载体，是提升锌碘电池能量密度和循环寿命的关键。因此，本研究主要集中在凝胶电解质设计开发，锌负极表面涂层设计制备，以及厚碘正极的可控构筑上，以期构筑出能抗日历老化的高容量长寿命锌碘电池，助力电化学储能行业发展。

关键词：锌碘电池；锌负极；碘正极；高容量

参考文献

[1] C. Wang, G. Gao, Y. Su, J. Xie, D. He, X. Wang, Y. Wang, Y. Wang. *Nat. Commun.* **2024**, 15, 6234.

[2] D. Lin, Y. Li. *Adv. Mater.* **2022**, 34, 2108856.

[3] L. Zhang, H. Guo, W. Zong, Y. Huang, J. Huang, G. He, T. Liu, J. Hofkens, F. Lai. *Energy Environ. Sci.* **2023**, 16, 4872.

[4] T. Xiao, J.-L. Yang, B. Zhang, J. Wu, J. Li, W. Mai, H. J. Fan. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 63, e202318470.

[5] B. Liu, X. Yuan, Y. Li. *ACS Energy Letters* **2023**, 8, 3820.

[6] L. Wang, Z. Zhao, Y. Yao, Y. Zhang, Y. Meng, B. Hu, J. Kang, J. Guo, L. Zhang, H. Lu. *Energy Storage Materials* **2023**, 62, 102920.

[7] Z. Yi, G. Chen, F. Hou, L. Wang, J. Liang. *Adv. Energy Mater.* **2021**, 11, 2003065.

[8] G. Chen, Y. Kang, H. Yang, M. Zhang, J. Yang, Z. Lv, Q. Wu, P. Lin, Y. Yang, J. Zhao. *Adv. Funct. Mater.* **2023**, 33, 2300656.

[9] X. Yang, Z. Zhang, M. Wu, Z.-P. Guo, Z.-J. Zheng. *Adv. Mater.* **2023**, 35, 2303550.

报告人/墙报展示人简介：

（简介内容采用宋体五号字体）

郑自建，湖北大学新能源与电气工程学院副教授，博士生导师。研究工作聚焦于清洁高效电化学储能器件设计开发，重点围绕高比能锂金属二次电池，高安全水系锌离子电池开展研究。以第一或通讯作者（含共同）在 *Adv. Mater.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*Energy Environ. Sci.*、*Adv. Sci.*、*Nano energy* 等期刊累计发表学术论文 40 余篇，其中 ESI 高被引论文 3 篇。申请中国发明专利 10 余件，授权 4 件。主持国家自然科学基金面上项目、青年项目、湖北省青年拔尖创新人才项目。获湖北大学沙湖学者，湖北大学优秀工作者等荣誉称号。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

聚阴离子引导的复合电解质陶瓷电解质颗粒间跨界面传导机理

孟楠[1,*]，连芳[1]

[1]北京科技大学，材料科学与工程学院，中国北京，100083

*Email: mengnan@ustb.edu.cn

摘要正文：固态锂电池由于其的安全性，高能量密度与长循环寿命，被认为是极具发展潜力的能量存储与转换装置。在其发展中，通过将无机颗粒引入固态聚合物电解质而制备的复合聚合物电解质（CEP）在继承了固态聚合物电解质优点的同时，通过组分间的相互作用关系，提升了体系的离子电导率和机械强度[1]。不幸的是，锂离子通过SPE和SCE界面的传导被打断，因此阻碍了CPE电导率的提高。我们研究了由硼酸聚阴离子基单离子导电聚合物锂化聚乙烯醇缩甲醛（LiPVFM）和$Li_{1.3}Al_{0.3}Ti_{1.7}(PO_4)_3$ (LATP)颗粒共同组成的“Polymer-in-ceramic”型复合电解质（PiCCE）膜[2]，发现LiPVFM中的聚阴离子基团与LATP颗粒之间的强相互作用使得比例高达50 wt%陶瓷颗粒在电解质膜中分布均匀，电解质膜具有良好的鲁棒性，其杨氏模量为9.2 GPa。更重要的是，聚阴离子基聚合物诱导了锂离子跨SPE和SCE界面的传导。因此，PiCCE膜具有较高的离子电导率，在25 °C时达到6.60×10^{-4} S cm^{-1}，锂离子迁移数为0.84。此外，PiCCE膜具有较宽的电化学稳定性窗口和良好的电化学性能，保证了LFP和NCM811电池均具有良好的性能，Li/PiCCE/NCM811电池的初始放电容量为174.85 mAh g^{-1}，Li/PiCCE/LFP电池循环175次后，电池容量保持率为86.3%。聚阴离子诱导的锂离子跨聚合物电解质和陶瓷电解质界面的传导在解决固态电池的复合电解质界面问题方面具有很大的前景。

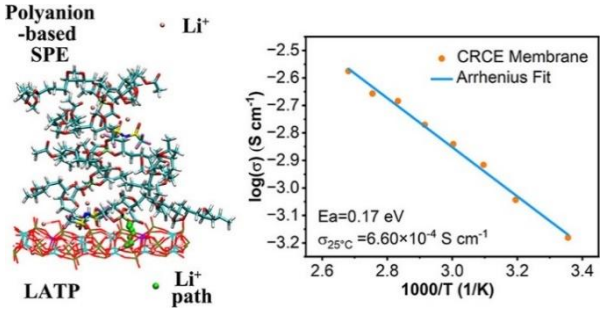


Fig. 1 The Li^+ migration trajectory across the interface during the simulation and the Arrhenius fitting of the ionic conductivity of the PiCCE membrane

关键词：复合电解质，聚阴离子，陶瓷颗粒，传导机理，界面

参考文献

[1] **Meng N.; Zhu X. G.; Lian F., Particles in composite polymer electrolyte for solid-state lithium batteries: A review. Particuology, 2022, 60, 14-36.**

[2] **Meng N.; Lian F.; Wu L.; Wang Y.; Qiu J., Across Interfacial Li^+ Conduction Accelerated by a Single-Ion Conducting Polymer in Ceramic-Rich Composite Electrolytes for Solid-State Batteries. ACS Applied Mater. Interfaces. 2024, 16(31), 41487-41494.**

报告人/墙报展示人简介：

孟楠，北京科技大学卓越工程师学院讲师，于 2022 年获得北京科技大工学博士学士学位，曾于 2021 年赴新加坡国立大学进行博士联合培养，目前工作主要集中于固态电解质体系及高能量密度电池体系关键材料的研究。

附：报告人不是学生

新型高比能离子电池材料设计

于彤[1]，肖茹[1]，李峰[1,*]，成会明[1,*]

[1]中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心，辽宁沈阳，110016

*Email: fli@imr.ac.cn, cheng@imr.ac.cn

摘要正文：碱金属离子电池兼具元素丰富、成本低和环境友好等特点，被认为是最有希望引领市场和加速低碳转型的新型电化学储能设备[1]。我们针对目前插层型离子电池的低容量和转化型离子电池的低反应动力学问题开展研究：1）结合过渡金属碳化物的结构和性质特点，率先提出了增加二维过渡金属碳化物中碳组分来提升电化学储能性能，发现了高性能二维TiC_3单层电极材料，引领了富碳组分二维过渡金属碳化物的理论研究[2-5]；2）提出了筛选转化型电池用催化剂的新理论判据，发现并验证了改变固相产物电子状态对沉积/解离动力学的加速作用，指导了高性能锂硫电池和锂氧电池的设计与组装[6]。

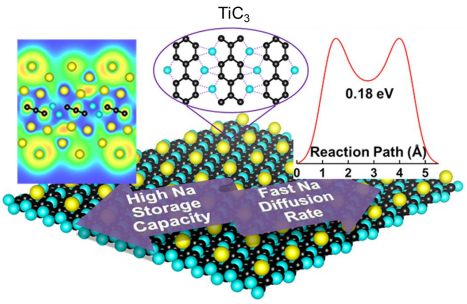


Fig. 1 TiC_3 monolayer for sodium-ion batteries

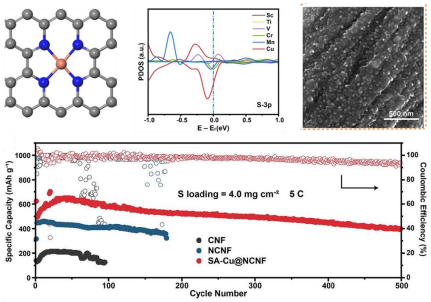


Fig. 2 Single-atom copper catalyst for lithium-sulfur batteries

关键词：插层型离子电池；转化型离子电池；过渡金属碳化物；电催化；产物电子状态调控

参考文献

[1] **T. Yu, H. C. Yang, H. M. Cheng, F. Li*, Theoretical progress of 2D six-membered-ring inorganic materials as anodes for non-lithium-ion batteries, Small. 2022, 18, 2107868.**

[2] **T. Yu, Z. Y. Zhao, L. L. Liu, S. T. Zhang, H. Y. Xu, G. C. Yang*, TiC_3 monolayer with high specific capacity for sodium-ion batteries. J. Am. Chem. Soc. 2018, 140, 5962**

[3] **T. Yu, S. T. Zhang, F. Li, Z. Y. Zhao, L. L. Liu, H. Y. Xu,* G. C. Yang*, Stable and Metallic Two-Dimensional TaC_2 as an Anode Material for Lithium-Ion Battery, J. Mater. Chem. A, 2017, 5, 18698.**

[4] **J. Rehman, T. Yu*, A. El-marghany, M. F. Shibl, and G.C. Yang*, Highly conductive and stable two-dimensional WC_4 acting as an efficient anode material for alkali-metal ion batteries: insight from DFT, J. Phys. Chem. C, 2023, 127, 23592-23600.**

[5] **J. Rehman#, J.Y. Gao#, T. Yu*, A. El-marghanyd, and G.C. Yang *, A novel 2D VC_4 as a promising Na-host material for Na-ion batteries: computational insights, J. Mater. Chem. A, 2024, 12, 6703-6711.**

[6] **R. Xiao#, T. Yu#, S. Yang#, K. Chen, Z. N. Li, Z. B. Liu, T. Z. Hu, G. J. Hu, J. Li, H. M. Cheng, Z. H. Sun*, F. Li*, Electronic structure adjustment of lithium sulfide by a single-atom copper catalyst toward high-rate lithium-sulfur batteries, Energy Storage Mater. 2022, 51, 890.**

报告人/墙报展示人简介：

于彤，中国科学院金属研究所助理研究员，主要从事新能源材料及新转化方式的设计研究，预测并验证了系列性能优异的新型无机能源材料和新反应机制。已发表 SCI 论文 39 篇，他引 1400 余次，H 因子 18。在 J. Am. Chem. Soc（2 篇）, Adv. Mater., Energy Storage Mater., Small, Adv. Funct. Mater., 等期刊发表第一（含共一）/通讯作者论文 20 篇，入选 ESI 高被引论文 1 篇，封面论文 1 篇。在新型电极材料方面的研究成果获得 2021 年吉林省自然科学奖二等奖（第三完成人），入选了 2021 年度博士后创新人才计划和 2021 年度未来女科学家计划（全国十人）。作为项目负责人，主持了国家自然科学基金等项目 5 项。

附：不是学生

锂硫电池中正极反应动力学的调控方法研究

赵梦[1]，李博权[2]，黄佳琦[2,*]

[1]清华大学化学工程系，北京市海淀区清华园，100084

[2]北京理工大学大学前沿交叉科学研究院，北京市海淀区北京理工大学，100081

*Email: jqhuang@bit.edu.cn

摘要正文：

锂硫电池具有2600 Wh kg^{-1}的超高理论能量密度，是极具前景的下一代二次电池体系之一。在充放电过程中，硫正极发生多相多电子转化反应，其反应动力学非常缓慢，使得反应中间体多硫化锂无法及时转化并产生穿梭效应，导致锂硫电池倍率性能受限、放电容量降低以及容量快速衰减等问题。因此，加速硫正极的反应动力学是提高锂硫电池性能并取得实际应用的关键所在。引入非均相电催化剂或均相氧化还原介体是提高硫正极反应动力学的有效策略，然而其在锂硫电池工况条件下的作用机理尚不明确，制约了高活性动力学促进剂的开发和高性能锂硫电池的构筑[1]。本文揭示了锂硫电池非均相电催化剂的电化学相演化机制，提出了电催化剂的原位活化新方法提升催化活性；提出了均相氧化还原辅介导的化学原理构建快动力学反应路径，开发了高性能的辅介体分子并构筑了高能量密度的软包电池器件，为深入理解锂硫电池能源化学反应机制并有效推进高能量密度锂硫电池实用化进程提供了新的原理机制与方法策略。

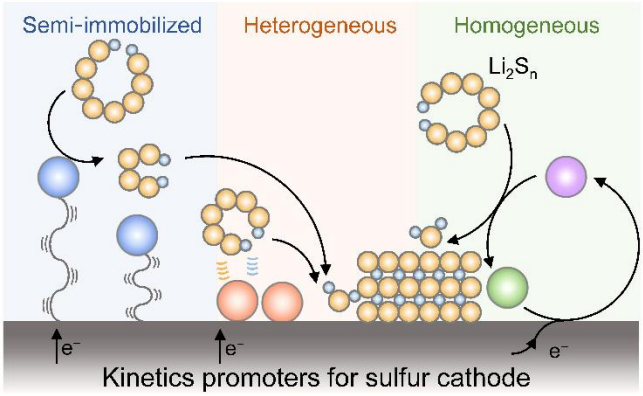


图1 硫正极反应动力学调控策略

关键词：锂硫电池；硫正极；反应动力学；电催化；氧化还原介体

参考文献

[1] **M. Zhao, H. J. Peng, B. Q. Li, and J. Q. Huang Kinetic Promoters for Sulfur Cathodes in Lithium–Sulfur Batteries.** ***Accounts of Chemical Research*** **2024, 57 (4), 545–557.**

低温域高比能锂电池电解液设计

朴楠，李峰*

中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心，辽宁沈阳，110016

*Email: fli@imr.ac.cn

摘要正文：新能源汽车、电网储能、极地科考、深空探测等领域的发展，对储能电池的能量密度和低温性能提出了更高的要求[1]。我们针对制约高能量密度和极端环境应用的锂电池的离子传输和界面稳定性等关键科学问题，通过电解液的组分和结构设计，实现电池的稳定性和温度适应性。针对商用酯基电解液中，锂离子与溶剂存在强相互作用引起的锂离子的迁移速度慢的问题，提出了氟化溶剂与非氟化溶剂复配策略的新型氟化电解液。通过引入氟化溶剂，调控电解液中“锂离子-阴离子-溶剂分子”溶剂化结构和交联度以降低电解液黏度，大幅提高低温下的锂离子液相扩散速度，并利用氟化溶剂的反溶剂作用，提高阴离子在溶剂化结构中的占比以形成稳定的界面层，实现高能量密度锂金属电池稳定循环[2]；利用氟化溶剂与非氟化溶剂分子间的氢键作用，削弱锂离子与非氟化溶剂分子中氧配体的相互作用，构建了低温稳定的电解液溶剂化结构，显著提高界面反应动力学和界面稳定性，实现了锂金属电池在室温、零下20°C和零下40°C环境下长循环稳定性，为低温锂电池用电解液设计提供了新思路[3]。

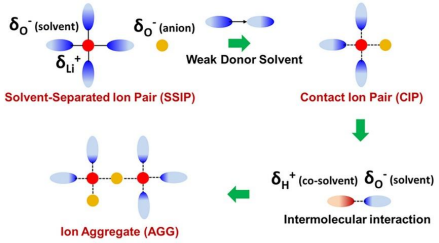


Fig. 1 Design principles of electrolyte solvation.

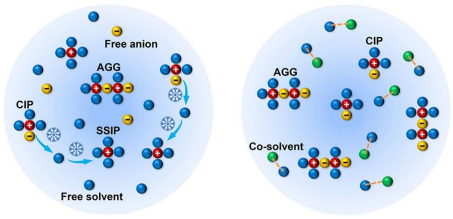


Fig. 2 Schematic illustration of the solvation transition.

关键词：锂电池；高比能；低温域；氟化电解液；溶剂化结构

参考文献

[1] N. Piao, X. N. Gao, H. C. Yang, Z. Q. Guo, G. J. Hu*, H. M. Cheng, F. Li*; Challenges and Development of Lithium-ion Batteries for Low Temperature Environments, *eTransportation*, 2022, 11, 100145.

[2] N. Piao, X. Ji, H. Xu, X. L. Fan, L. Chen, S. F. Liu, M. N. Garaga, S. C. Greenbaum, L. Wang*, C. S. Wang*, X. M. He*; Countersolvent Electrolytes for Lithium-Metal Batteries, *Advanced Energy Materials*, 2020, 10, 1903568.

[3] N. Piao#, J. Z. Wang#, X. N. Gao, R. H. Li, H. K. Zhang, G. J. Hu, Z. H. Sun, X. L. Fan, H. M. Cheng, F. Li*; *Journal of the American Chemical Society*, 2024, 146, 18281.

报告人/墙报展示人简介：

朴楠，中国科学院金属研究所副研究员，主要从事高能量密度和极端环境应用的锂电池电解液研究。已在能源与材料领域顶级期刊发表 SCI 论文 25 篇（9 篇 ESI 高被引文章），H 因子 20，SCI 引用 2700 余次（Google Scholar），已获授权专利 5 项。近 5 年作为第一/共一作者在 *Journal of the American Chemical Society*、*Angewandte Chemie International Edition* 等高水平期刊发表 SCI 论文 10 篇（4 篇 ESI 高被引文章，1 篇封面文章）。入选辽宁省“兴辽英才计划”优秀博士后，主持国家基金委、辽宁省科技局、中国科学院等多项项目。被聘为 *eScience* 和 *Energy Materials and Devices* 期刊青年编委。

附：不是学生

口头报告摘要

作者：白羽　单位：北京理工大学

锂硫电池由于具有极高的理论比容量、能量密度以及环境友好等特性被认为是最具有前景的下一代储能系统之一。然而，锂硫电池的发展一直受限于缓慢的氧化还原动力学和严重的穿梭效应等因素。过渡金属化合物具有强极性表面和良好的的催化性能，可以有效抑制电池中的穿梭效应并提升氧化还原动力学。我们通过对过渡金属化合物进行形貌、结构、缺陷调控等手段，来增强材料对多硫化物的吸附能力和催化活性，并将其应用于锂硫电池，以提高电池的电化学性能。同时，结合电化学表征和理论计算研究过渡金属化合物基催化剂增强硫物种吸附-催化活性的作用机制。

Insights into the mechanism of carbon nanotubes in silicon-based anodes

Ziying He[1], Chenxi Zhang, Fei Wei[1*]

[1]Department of Chemical Engineering and Technology, Tsinghua University, Beijing 100084

Email: hezy20@mails.tsinghua.edu.cn

*Email: wf-dce@tsinghua.edu.cn

Silicon-based anodes are considered ideal candidate materials for next generation lithium-ion batteries but suffer from poor electrical conductivity, large volume expansion and unstable SEI. The above issues can be effectively alleviated by adding carbon nanotubes (CNTs). However, the electrochemical performances vary significantly depending on the type of CNTs added, and the intrinsic mechanism remains unknown. Herein, we propose a non-destructive method to monitor the microscopic contact state and strain in silicon-based anodes based on in situ Raman spectroscopy. Then, we revealed that the large volume expansion of Si-based anodes leads to the acupuncture effect of short CNTs, with the compressive stress on the CNTs and the Li-ion (Li^+) diffusion energy barriers in the SEI exhibiting a linear correlation. Both the SEI and carbon-coating are penetrated by short, thick CNTs with gigapascal (GPa)-scale compressive stress, thereby accelerating electrolyte decomposition and leading to a LiF-rich SEI and an increased Li^+ diffusion barrier. Thus, long, slender CNTs are ideal for Si-based anodes. This work reveals the structure-property relationships among compressive stress, SEI components and Li^+ diffusion energy barriers, providing a novel perspective on the development of high-performance electrodes.

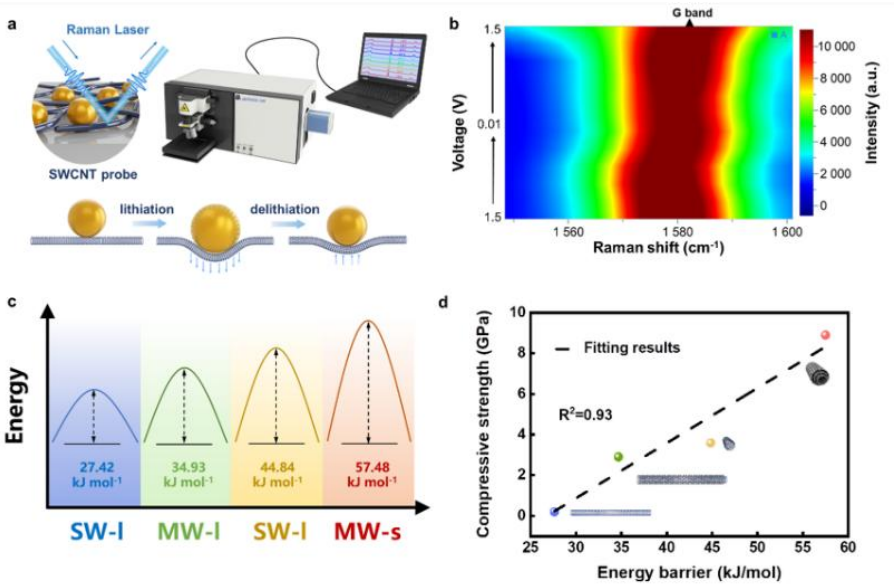


Fig. 1 The fabrication and characterization of the SiOx@C|SWCNT anode

Keywords: lithium-ion battery; silicon-based anodes; carbon nanotubes; carbon coatings

References

[9] Ziying He, Fei Wei* et al. Single-Walled Carbon Nanotube Film as an Efficient Conductive Network for Si-Based Anodes. Advanced Functional Materials 2023, 33, 2300094.

[10] Ziying He, Fei Wei* et al. The acupuncture effect of carbon nanotubes induced by the volume expansion of silicon-based anodes. Energy & Environmental Science 2024, 17, 3358.

[11] Ziying He, Fei Wei* et al. Advances in Carbon Nanotubes and Carbon Coatings as Conductive Networks in Silicon-Based Anodes. Advanced Functional Materials 2024, accepted.

报告人/墙报展示人简介：墙报展示人是学生

何姿颖，清华大学化学工程系 2020 级博士生，师从魏飞教授，研究方向为碳纳米管在硅基负极的作用机制。

高安全金属锂电池设计

郭嘉欣[1]，程新兵[1,2*]

[1]东南大学能源与环境学院，南京，211189

[2]天目湖先进储能技术研究院，溧阳，213300

*Email: Xin-Bing Cheng (chengxb@seu.edu.cn)

摘要正文：金属锂负极以其极高的容量和最低的电位被认为是极有潜力的下一代电化学储能材料，在无人机、电动飞机等场景中具有巨大的应用潜力。但是，金属锂负极的枝晶的生长及其高反应活性，导致金属锂电池利用率低、循环寿命短、安全性差，限制了其实际应用。关于枝晶问题，目前已经有大量的工作开展了相关研究，但是对于电池安全性的定量研究和调控策略，目前却很少研究。本报告基于绝热加速量热仪和差示扫描量热仪，结合电极材料的成分和结构分析工具，在电池的器件和材料尺度，定量分析金属锂电池的热失控机制。在此基础上，通过金属锂负极的结构设计、电解质的分子调控和界面优化等多个策略，提升了实际器件的安全性能，为设计高安全金属锂电池提供了定量的思考角度和解决方案。

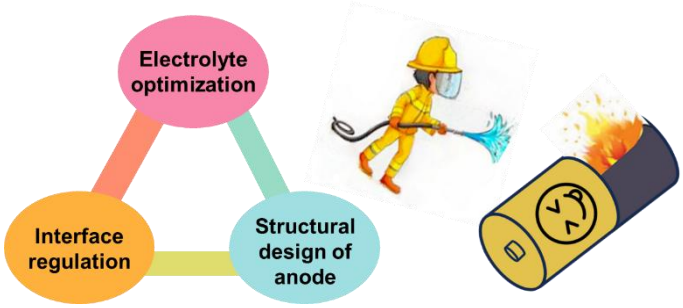


Fig. 1 Internal optimization strategies for high-safety lithium metal batteries.

关键词：金属锂电池；固体电解质界面；枝晶；安全；热失控

参考文献

[1] **Jia-Xin Guo, Feng Jiang, Nai-Lu Shen, Wen-Bo Tang, Tao Wang, Yuan Ma, Yiren Zhong, Jiarui He, Zhi Zhu, Faxing Wang, Xin-Bing Cheng,* and Yuping Wu. Host−Guest Interactions for Electrochemically Stable and Thermally Safe Lithium Metal Batteries. *ACS Energy Letters* 2024, 9, 4800-4809.**

[2] **Jia-Xin Guo, Chang Gao, He Liu*, Feng Jiang, Zaichun Liu, Tao Wang, Yuan Ma, Yiren Zhong, Jiarui He, Zhi Zhu, Yuping Wu*, Xin-Bing Cheng*. Inherent Thermal-responsive Strategies for Safe Lithium Batteries. *Journal of Energy Chemistry* 2023, 89, 519-534.**

[3] **Cheng XB, Yang SJ, Liu Z, Guo JX, Jiang FN, Jiang F, Xiong X, Tang WB, Yuan H, Huang JQ, Zhang Q.* Electrochemically and Thermally Stable Inorganics-rich Solid Electrolyte Interphase for Robust Lithium Metal Batteries. *Advanced Materials* 2023, 35, 2307370.**

[4] **Jiang FN, Cheng XB,* Yang SJ, Xie J, Yuan H, Liu L, Huang JQ, Zhang Q.* Thermoresponsive Electrolytes for Safe Lithium Metal Batteries. *Advanced Materials* 2023, 35, 2209114.**

[5] **Yang S-J, Yao N, Jiang F-N, Xie J, Sun S-Y, Chen X, Yuan H, Cheng X-B,* Huang J-Q,* Zhang Q.* Thermally Stable Polymer-Rich Solid Electrolyte Interphase for Safe Lithium Metal Pouch Cells, *Angewandte Chemie International Edition* 2022, 134, 2214545.**

报告人/墙报展示人简介：

郭嘉欣， 2019 年硕士毕业于东华大学化学化工与生物工程学院。目前在东南大学能源与环境学院攻读博士学位研究生，师从程新兵教授，主要从事金属锂电池的安全性研究。2023 年以来，以第一作者在 *ACS Energy Letters*、*Journal of Energy Chemistry*、*Chinese Chemical Letters* 及 *Frontiers of Chemical Science and Engineering* 共发表论文 4 篇 (1 篇入选 ESI 高被引论文)。

报告人/墙报展示人是否为学生：学生 (联系邮箱230229267@seu.edu.cn)

聚阴离子引导的复合电解质陶瓷电解质颗粒间跨界面传导机理

孟楠[1,*]，连芳[1]

[1]北京科技大学，材料科学与工程学院，中国北京，100083

*Email: mengnan@ustb.edu.cn

摘要正文：固态锂电池由于其的安全性，高能量密度与长循环寿命，被认为是极具发展潜力的能量存储与转换装置。在其发展中，通过将无机颗粒引入固态聚合物电解质而制备的复合聚合物电解质（CEP）在继承了固态聚合物电解质优点的同时，通过组分间的相互作用关系，提升了体系的离子电导率和机械强度[1]。不幸的是，锂离子通过SPE和SCE界面的传导被打断，因此阻碍了CPE电导率的提高。我们研究了由硼酸聚阴离子基单离子导电聚合物锂化聚乙烯醇缩甲醛（LiPVFM）和$Li_{1.3}Al_{0.3}Ti_{1.7}(PO_4)_3$ (LATP)颗粒共同组成的“Polymer-in-ceramic”型复合电解质（PiCCE）膜[2]，发现LiPVFM中的聚阴离子基团与LATP颗粒之间的强相互作用使得比例高达50 wt%陶瓷颗粒在电解质膜中分布均匀，电解质膜具有良好的鲁棒性，其杨氏模量为9.2 GPa。更重要的是，聚阴离子基聚合物诱导了锂离子跨SPE和SCE界面的传导。因此，PiCCE膜具有较高的离子电导率，在25 °C时达到6.60×10^{-4} S cm^{-1}，锂离子迁移数为0.84。此外，PiCCE膜具有较宽的电化学稳定性窗口和良好的电化学性能，保证了LFP和NCM811电池均具有良好的性能，Li/PiCCE/NCM811电池的初始放电容量为174.85 mAh g^{-1}，Li/PiCCE/LFP电池循环175次后，电池容量保持率为86.3%。聚阴离子诱导的锂离子跨聚合物电解质和陶瓷电解质界面的传导在解决固态电池的复合电解质界面问题方面具有很大的前景。

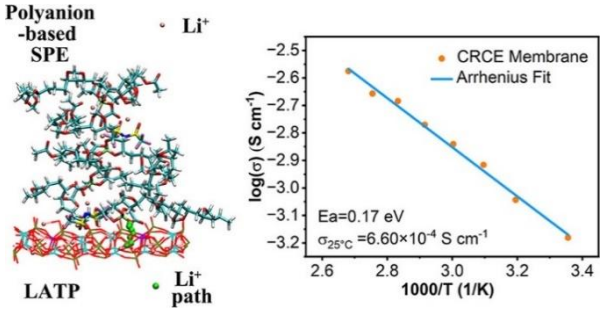


Fig. 1 The Li^+ migration trajectory across the interface during the simulation and the Arrhenius fitting of the ionic conductivity of the PiCCE membrane

关键词：复合电解质，聚阴离子，陶瓷颗粒，传导机理，界面

参考文献

[1] **Meng N.; Zhu X. G.; Lian F., Particles in composite polymer electrolyte for solid-state lithium batteries: A review. Particuology, 2022, 60, 14-36.**

[2] **Meng N.; Lian F.; Wu L.; Wang Y.; Qiu J., Across Interfacial Li^+ Conduction Accelerated by a Single-Ion Conducting Polymer in Ceramic-Rich Composite Electrolytes for Solid-State Batteries. ACS Applied Mater. Interfaces. 2024, 16(31), 41487-41494.**

报告人/墙报展示人简介：

孟楠，北京科技大学卓越工程师学院讲师，于 2022 年获得北京科技大工学博士学士学位，曾于 2021 年赴新加坡国立大学进行博士联合培养目前工作主要集中于固态电解质体系及高能量密度电池体系关键材料的研究。

附：报告人不是学生

新型高比能离子电池材料设计

于彤[1]，肖茹[1]，李峰[1,*]，成会明[1,*]

[1]中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心，辽宁沈阳，110016

*Email: fli@imr.ac.cn, cheng@imr.ac.cn

摘要正文：碱金属离子电池兼具元素丰富、成本低和环境友好等特点，被认为是最有希望引领市场和加速低碳转型的新型电化学储能设备[1]。我们针对目前插层型离子电池的低容量和转化型离子电池的低反应动力学问题开展研究：1）结合过渡金属碳化物的结构和性质特点，率先提出了增加二维过渡金属碳化物中碳组分来提升电化学储能性能，发现了高性能二维TiC_3单层电极材料，引领了富碳组分二维过渡金属碳化物的理论研究[2-5]；2）提出了筛选转化型电池用催化剂的新理论判据，发现并验证了改变固相产物电子状态对沉积/解离动力学的加速作用，指导了高性能锂硫电池和锂氧电池的设计与组装[6]。

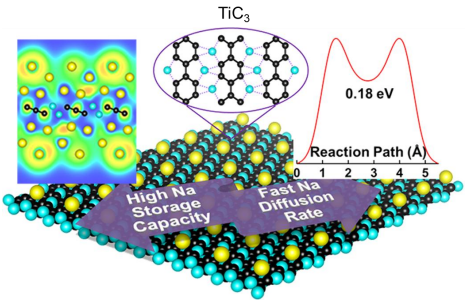


Fig. 1 TiC_3 monolayer for sodium-ion batteries

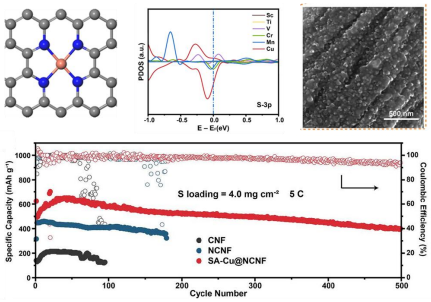


Fig. 2 Single-atom copper catalyst for lithium-sulfur batteries

关键词：插层型离子电池；转化型离子电池；过渡金属碳化物；电催化；产物电子状态调控

参考文献

[1] **T. Yu, H. C. Yang, H. M. Cheng, F. Li*, Theoretical progress of 2D six-membered-ring inorganic materials as anodes for non-lithium-ion batteries, Small. 2022, 18, 2107868.**

[2] **T. Yu, Z. Y. Zhao, L. L. Liu, S. T. Zhang, H. Y. Xu, G. C. Yang*, TiC_3 monolayer with high specific capacity for sodium-ion batteries. J. Am. Chem. Soc. 2018, 140, 5962**

[3] **T. Yu, S. T. Zhang, F. Li, Z. Y. Zhao, L. L. Liu, H. Y. Xu,* G. C. Yang*, Stable and Metallic Two-Dimensional TaC_2 as an Anode Material for Lithium-Ion Battery, J. Mater. Chem. A, 2017, 5, 18698.**

[4] **J. Rehman, T. Yu*, A. El-marghany, M. F. Shibl, and G.C. Yang*, Highly conductive and stable two-dimensional WC_4 acting as an efficient anode material for alkali-metal ion batteries: insight from DFT, J. Phys. Chem. C, 2023, 127, 23592-23600.**

[5] **J. Rehman#, J.Y. Gao#, T. Yu*, A. El-marghanyd, and G.C. Yang *, A novel 2D VC_4 as a promising Na-host material for Na-ion batteries: computational insights, J. Mater. Chem. A, 2024, 12, 6703-6711.**

[6] **R. Xiao#, T. Yu#, S. Yang#, K. Chen, Z. N. Li, Z. B. Liu, T. Z. Hu, G. J. Hu, J. Li, H. M. Cheng, Z. H. Sun*, F. Li*, Electronic structure adjustment of lithium sulfide by a single-atom copper catalyst toward high-rate lithium-sulfur batteries, Energy Storage Mater. 2022, 51, 890.**

报告人/墙报展示人简介：

于彤，中国科学院金属研究所助理研究员，主要从事新能源材料及新转化方式的设计研究，预测并验证了系列性能优异的新型无机能源材料和新反应机制。已发表 SCI 论文 39 篇，他引 1400 余次，H 因子 18。在 J. Am. Chem. Soc（2 篇）, Adv. Mater., Energy Storage Mater., Small, Adv. Funct. Mater., 等期刊发表第一（含共一）/通讯作者论文 20 篇，入选 ESI 高被引论文 1 篇，封面论文 1 篇。在新型电极材料方面的研究成果获得 2021 年吉林省自然科学奖二等奖（第三完成人），入选了 2021 年度博士后创新人才计划和 2021 年度未来女科学家计划（全国十人）。作为项目负责人，主持了国家自然科学基金等项目 5 项。

附：不是学生

锂硫电池中正极反应动力学的调控方法研究

赵梦[1]，李博权[2]，黄佳琦[2,*]

[1]清华大学化学工程系，北京市海淀区清华园，100084

[2]北京理工大学大学前沿交叉科学研究院，北京市海淀区北京理工大学，100081

*Email: jqhuang@bit.edu.cn

摘要正文：

锂硫电池具有2600 Wh kg^{-1}的超高理论能量密度，是极具前景的下一代二次电池体系之一。在充放电过程中，硫正极发生多相多电子转化反应，其反应动力学非常缓慢，使得反应中间体多硫化锂无法及时转化并产生穿梭效应，导致锂硫电池倍率性能受限、放电容量降低以及容量快速衰减等问题。因此，加速硫正极的反应动力学是提高锂硫电池性能并取得实际应用的关键所在。引入非均相电催化剂或均相氧化还原介体是提高硫正极反应动力学的有效策略，然而其在锂硫电池工况条件下的作用机理尚不明确，制约了高活性动力学促进剂的开发和高性能锂硫电池的构筑[1]。本文揭示了锂硫电池非均相电催化剂的电化学相演化机制，提出了电催化剂的原位活化新方法提升催化活性；提出了均相氧化还原辅介导的化学原理构建快动力学反应路径，开发了高性能的辅介体分子并构筑了高能量密度的软包电池器件，为深入理解锂硫电池能源化学反应机制并有效推进高能量密度锂硫电池实用化进程提供了新的原理机制与方法策略。

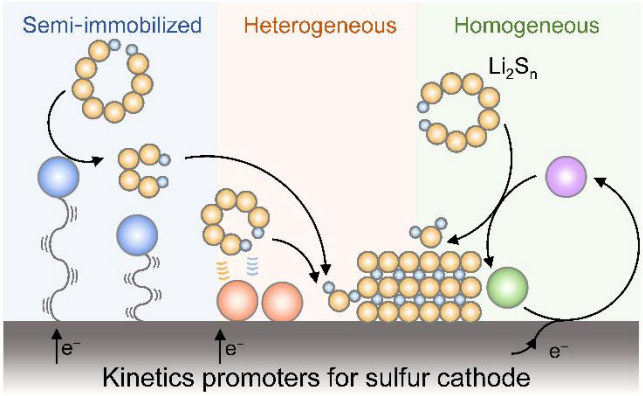


图1 硫正极反应动力学调控策略

关键词：锂硫电池；硫正极；反应动力学；电催化；氧化还原介体

参考文献

[1] **M. Zhao, H. J. Peng, B. Q. Li, and J. Q. Huang Kinetic Promoters for Sulfur Cathodes in Lithium–Sulfur Batteries.** ***Accounts of Chemical Research*** **2024, 57 (4), 545–557.**

低温域高比能锂电池电解液设计

朴楠，李峰*

中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心，辽宁沈阳，110016

*Email: fli@imr.ac.cn

摘要正文：新能源汽车、电网储能、极地科考、深空探测等领域的发展，对储能电池的能量密度和低温性能提出了更高的要求[1]。我们针对制约高能量密度和极端环境应用的锂电池的离子传输和界面稳定性等关键科学问题，通过电解液的组分和结构设计，实现电池的稳定性和温度适应性。针对商用酯基电解液中，锂离子与溶剂存在强相互作用引起的锂离子的迁移速度慢的问题，提出了氟化溶剂与非氟化溶剂复配策略的新型氟化电解液。通过引入氟化溶剂，调控电解液中“锂离子-阴离子-溶剂分子”溶剂化结构和交联度以降低电解液黏度，大幅提高低温下的锂离子液相扩散速度，并利用氟化溶剂的反溶剂作用，提高阴离子在溶剂化结构中的占比以形成稳定的界面层，实现高能量密度锂金属电池稳定循环[2]；利用氟化溶剂与非氟化溶剂分子间的氢键作用，削弱锂离子与非氟化溶剂分子中氧配体的相互作用，构建了低温稳定的电解液溶剂化结构，显著提高界面反应动力学和界面稳定性，实现了锂金属电池在室温、零下20°C和零下40°C环境下长循环稳定性，为低温锂电池用电解液设计提供了新思路[3]。

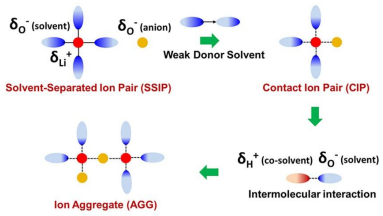


Fig. 1 Design principles of electrolyte solvation.

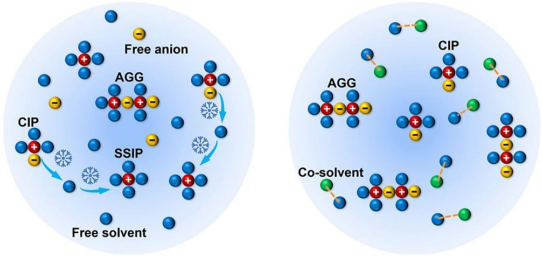


Fig. 2 Schematic illustration of the solvation transition.

关键词：锂电池；高比能；低温域；氟化电解液；溶剂化结构

参考文献

[1] N. Piao, X. N. Gao, H. C. Yang, Z. Q. Guo, G. J. Hu*, H. M. Cheng, F. Li*; Challenges and Development of Lithium-ion Batteries for Low Temperature Environments, *eTransportation*, 2022, 11, 100145.

[2] N. Piao, X. Ji, H. Xu, X. L. Fan, L. Chen, S. F. Liu, M. N. Garaga, S. C. Greenbaum, L. Wang*, C. S. Wang*, X. M. He*; Countersolvent Electrolytes for Lithium-Metal Batteries, *Advanced Energy Materials*, 2020, 10, 1903568.

[3] N. Piao#, J. Z. Wang#, X. N. Gao, R. H. Li, H. K. Zhang, G. J. Hu, Z. H. Sun, X. L. Fan, H. M. Cheng, F. Li*; *Journal of the American Chemical Society*, 2024, 146, 18281.

报告人/墙报展示人简介：

朴楠，中国科学院金属研究所副研究员，主要从事高能量密度和极端环境应用的锂电池电解液研究。已在能源与材料领域顶级期刊发表 SCI 论文 25 篇（9 篇 ESI 高被引文章），H 因子 20，SCI 引用 2700 余次（Google Scholar），已获授权专利 5 项。近 5 年作为第一/共一作者在 *Journal of the American Chemical Society*、*Angewandte Chemie International Edition* 等高水平期刊发表 SCI 论文 10 篇（4 篇 ESI 高被引文章，1 篇封面文章）。入选辽宁省“兴辽英才计划”优秀博士后，主持国家基金委、辽宁省科技局、中国科学院等多项项目。被聘为 *eScience* 和 *Energy Materials and Devices* 期刊青年编委。

附：不是学生

口头报告摘要

作者：白羽　单位：北京理工大学

锂硫电池由于具有极高的理论比容量、能量密度以及环境友好等特性被认为是最具有前景的下一代储能系统之一。然而，锂硫电池的发展一直受限于缓慢的氧化还原动力学和严重的穿梭效应等因素。过渡金属化合物具有强极性表面和良好的的催化性能，可以有效抑制电池中的穿梭效应并提升氧化还原动力学。我们通过对过渡金属化合物进行形貌、结构、缺陷调控等手段，来增强材料对多硫化物的吸附能力和催化活性，并将其应用于锂硫电池，以提高电池的电化学性能。同时，结合电化学表征和理论计算研究过渡金属化合物基催化剂增强硫物种吸附-催化活性的作用机制。

Insights into the mechanism of carbon nanotubes in silicon-based anodes

Ziying He[1], Chenxi Zhang, Fei Wei[1*]

[1]Department of Chemical Engineering and Technology, Tsinghua University, Beijing 100084

Email: hezy20@mails.tsinghua.edu.cn

*Email: wf-dce@tsinghua.edu.cn

Silicon-based anodes are considered ideal candidate materials for next generation lithium-ion batteries but suffer from poor electrical conductivity, large volume expansion and unstable SEI. The above issues can be effectively alleviated by adding carbon nanotubes (CNTs). However, the electrochemical performances vary significantly depending on the type of CNTs added, and the intrinsic mechanism remains unknown. Herein, we propose a non-destructive method to monitor the microscopic contact state and strain in silicon-based anodes based on in situ Raman spectroscopy. Then, we revealed that the large volume expansion of Si-based anodes leads to the acupuncture effect of short CNTs, with the compressive stress on the CNTs and the Li-ion (Li^+) diffusion energy barriers in the SEI exhibiting a linear correlation. Both the SEI and carbon-coating are penetrated by short, thick CNTs with gigapascal (GPa)-scale compressive stress, thereby accelerating electrolyte decomposition and leading to a LiF-rich SEI and an increased Li^+ diffusion barrier. Thus, long, slender CNTs are ideal for Si-based anodes. This work reveals the structure-property relationships among compressive stress, SEI components and Li^+ diffusion energy barriers, providing a novel perspective on the development of high-performance electrodes.

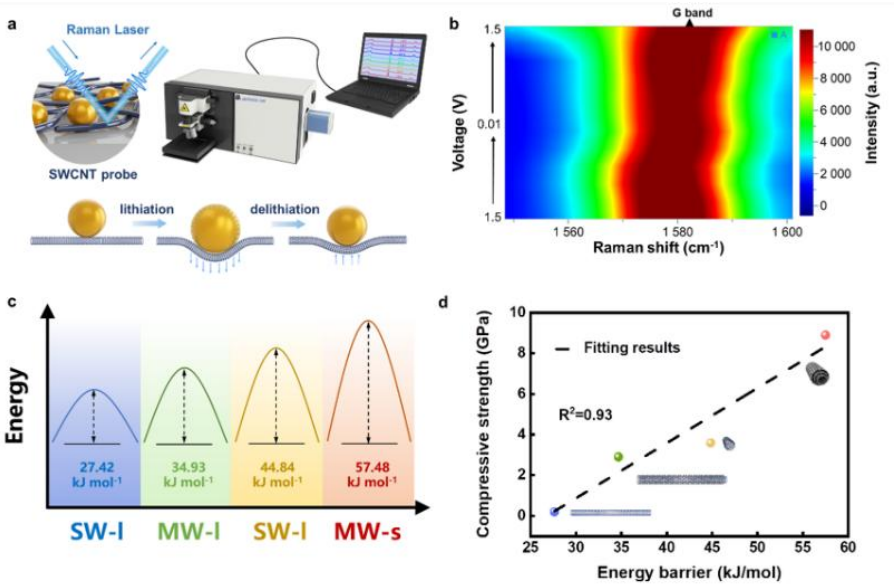


Fig. 1 The fabrication and characterization of the SiOx@C|SWCNT anode

Keywords: lithium-ion battery; silicon-based anodes; carbon nanotubes; carbon coatings

References

[12] Ziying He, Fei Wei* et al. Single-Walled Carbon Nanotube Film as an Efficient Conductive Network for Si-Based Anodes. Advanced Functional Materials 2023, 33, 2300094.

[13] Ziying He, Fei Wei* et al. The acupuncture effect of carbon nanotubes induced by the volume expansion of silicon-based anodes. Energy & Environmental Science 2024, 17, 3358.

[14] Ziying He, Fei Wei* et al. Advances in Carbon Nanotubes and Carbon Coatings as Conductive Networks in Silicon-Based Anodes. Advanced Functional Materials 2024, accepted.

报告人/墙报展示人简介：墙报展示人是学生

何姿颖，清华大学化学工程系 2020 级博士生，师从魏飞教授，研究方向为碳纳米管在硅基负极的作用机制。

高安全金属锂电池设计

郭嘉欣[1]，程新兵[1,2*]

[1]东南大学能源与环境学院，南京，211189

[2]天目湖先进储能技术研究院，溧阳，213300

*Email: Xin-Bing Cheng (chengxb@seu.edu.cn)

摘要正文：金属锂负极以其极高的容量和最低的电位被认为是极有潜力的下一代电化学储能材料，在无人机、电动飞机等场景中具有巨大的应用潜力。但是，金属锂负极的枝晶的生长及其高反应活性，导致金属锂电池利用率低、循环寿命短、安全性差，限制了其实际应用。关于枝晶问题，目前已经有大量的工作开展了相关研究，但是对于电池安全性的定量研究和调控策略，目前却很少研究。本报告基于绝热加速量热仪和差示扫描量热仪，结合电极材料的成分和结构分析工具，在电池的器件和材料尺度，定量分析金属锂电池的热失控机制。在此基础上，通过金属锂负极的结构设计、电解质的分子调控和界面优化等多个策略，提升了实际器件的安全性能，为设计高安全金属锂电池提供了定量的思考角度和解决方案。

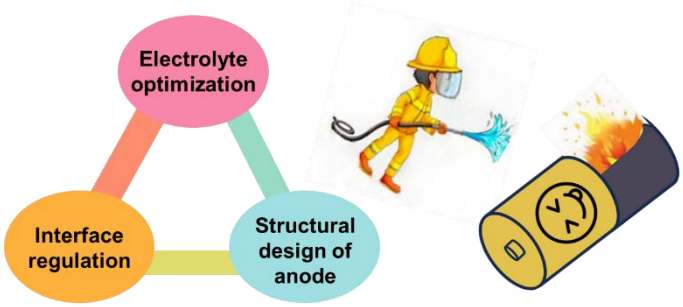


Fig. 1 Internal optimization strategies for high-safety lithium metal batteries.

关键词：金属锂电池；固体电解质界面；枝晶；安全；热失控

参考文献

[1] **Jia-Xin Guo, Feng Jiang, Nai-Lu Shen, Wen-Bo Tang, Tao Wang, Yuan Ma, Yiren Zhong, Jiarui He, Zhi Zhu, Faxing Wang, Xin-Bing Cheng,* and Yuping Wu. Host−Guest Interactions for Electrochemically Stable and Thermally Safe Lithium Metal Batteries.** ***ACS Energy Letters*** **2024, 9, 4800-4809.**

[2] **Jia-Xin Guo, Chang Gao, He Liu*, Feng Jiang, Zaichun Liu, Tao Wang, Yuan Ma, Yiren Zhong, Jiarui He, Zhi Zhu, Yuping Wu*, Xin-Bing Cheng*. Inherent Thermal-responsive Strategies for Safe Lithium Batteries.** ***Journal of Energy Chemistry*** **2023, 89, 519-534.**

[3] **Cheng XB, Yang SJ, Liu Z, Guo JX, Jiang FN, Jiang F, Xiong X, Tang WB, Yuan H, Huang JQ, Zhang Q.* Electrochemically and Thermally Stable Inorganics-rich Solid Electrolyte Interphase for Robust Lithium Metal Batteries.** ***Advanced Materials*** **2023, 35, 2307370.**

[4] **Jiang FN, Cheng XB,* Yang SJ, Xie J, Yuan H, Liu L, Huang JQ, Zhang Q.* Thermoresponsive Electrolytes for Safe Lithium Metal Batteries.** ***Advanced Materials*** **2023, 35, 2209114.**

[5] **Yang S-J, Yao N, Jiang F-N, Xie J, Sun S-Y, Chen X, Yuan H, Cheng X-B,* Huang J-Q,* Zhang Q.* Thermally Stable Polymer-Rich Solid Electrolyte Interphase for Safe Lithium Metal Pouch Cells,** ***Angewandte Chemie International Edition*** **2022, 134, 2214545.**

报告人/墙报展示人简介：

郭嘉欣， 2019 年硕士毕业于东华大学化学化工与生物工程学院。目前在东南大学能源与环境学院攻读博士学位研究生，师从程新兵教授，主要从事金属锂电池的安全性研究。2023 年以来，以第一作者在 *ACS Energy Letters*、*Journal of Energy Chemistry*、*Chinese Chemical Letters* 及 *Frontiers of Chemical Science and Engineering* 共发表论文 4 篇 (1 篇入选 ESI 高被引论文)。

报告人/墙报展示人是否为学生：学生 (联系邮箱230229267@seu.edu.cn)

报告人姓名：胡志伟，工作单位：华东理工大学，学生，联系邮箱：1838404226@qq.com

New morphology modifier enables the preparation of ultra-long platinum nanowires excluding Mo component for efficient oxygen reduction reaction performance

Zhiwei Hu[1], Jiajia Yang[1], Lei Tang[2], Haibo Jiang[1], Yihua Zhu[1], Jinhua Shen[1,*], Chunzhong Li[1,2,3*]

[1]Shanghai Engineering Research Centre of Hierarchical Nanomaterials, Key Laboratory for Ultrafine Materials of Ministry of Education, School of Materials Science and Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai, 200237

[2]School of Chemical Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai, 200237

[3]Department of Chemical Engineering, School of Chemistry and Chemical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai, 200240

* jianhuashen@ecust.edu.cn (Jianhua Shen); czli@ecust.edu.cn (Chunzhong Li).

The structural tailoring of Pt-based catalysts into one-dimensional nanowires for highly active and stable oxygen reduction reactions (ORR) has been a focus of research. $Mo(CO)_6$ is commonly used as a morphological modifier to form nanowires, but in this work, we found that it inevitably leads to Mo doping[1]. This doping introduces unique electrochemical signals not seen in other Pt-based catalysts, which can directly reflect the stability of the catalyst. We have demonstrated through experiments that Mo doping is detrimental to ORR performance, and theoretical calculations have shown that Mo sites that are inherently inactive also poison the ORR activity of the surrounding Pt. Therefore, a novel gas-assisted technique is proposed to replace $Mo(CO)_6$ with CO, which forms ultrafine nanowires with an order of magnitude increase in length, ruling out the effect of Mo (Fig. 1)[2]. The catalyst exhibits high ORR mass activity with a performance of 1.24 A mg_{Pt}^{-1}, which is 7.45 times higher than that of commercial Pt/C, and a substantial improvement in stability. The proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) using this catalyst provided higher power density (0.7 W cm^{-2}), which confirms that this ultra-long nanowire structure also exhibits excellent catalytic performance in real environments. This study presents a new method for the preparation of ultra-long nanowires, which opens up new avenues for future practical applications of low-Pt catalysts in PEMFC.

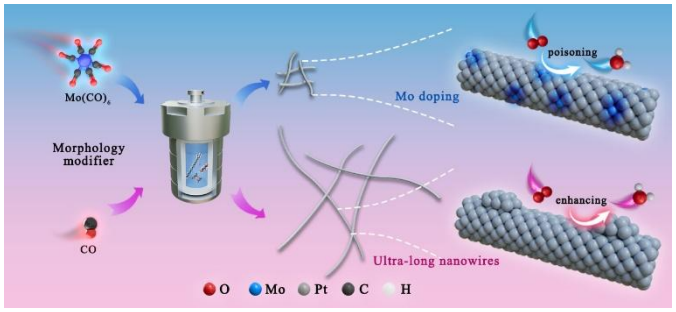


Fig. 1 CO replaces $Mo(CO)_6$ to achieve a tenfold increase in Pt nanowire length.

Keywords: oxygen reduction reaction, Pt catalyst, ultra-long nanowires, electrocatalysis, proton exchange membrane fuel cell

References

[15]K. Jiang, D. Zhao, S. Guo, X. Zhang, X. Zhu, J. Guo, G. Lu, X. Huang, Efficient oxygen reduction catalysis by subnanometer Pt alloy nanowires, Science Advances 2017, 3, e1601705.

[16]N. Cheng, L. Zhang, Y.J. Zhou, S.W. Yu, L.Y. Chen, H.B. Jiang, C.Z. Li, A general carbon monoxide-assisted strategy for synthesizing one-nanometer-thick Pt-based nanowires as effective electrocatalysts, Journal of Colloid and Interface Science 2020, 572, 170-178.

报告人/墙报展示人简介：

胡志伟
华东理工大学材料科学与工程学院
导师：沈建华
Email：y30210797@mail.ecust.edu.cn

2017-2021 年，在南京工业大学就读本科，2021-至今，在华东理工大学攻读博士。胡志伟博士主要从事能源纳米材料，结合实验与理论探索材料在电催化领域的基本机制，以设计高性能可再生催化体系，研究方向主要包括 ORR、HER、OER。以第一作者在 small、Materials Today Nano 期刊发表论文。

报告人/墙报展示人是否为学生：是

第 11 分会场：钠电池材料与技术

非计量比聚阴离子储钠正极材料及其体系研究

曹余良[1]

[1]武汉大学，湖北省武汉市珞珈山街道八一路 299 号，430072

*Email: ylcao@whu.edu.cn

摘要正文：

发展大规模储能的二次电池不仅需要具有适宜的电化学性能，更需考虑资源成本和环境效益等应用要求。而锂离子电池用于大规模储能可能受到锂资源的制约，因此，从资源与环境方面考虑，具有与锂离子电池相似电化学性能的钠离子电池体系作为储能电池更具应用优势。然而，从目前的技术现状来看，几类不同的嵌钠正负极材料虽显现出可观的容量与较好的循环性，但能量密度与功率密度尚待提高。过渡金属氧化物、氰基正极材料和聚阴离子体系，以及硬碳负极材料最有希望用于实用化钠离子电池体系，但这类材料的初始充放电效率和循环稳定性仍有待改善。本报告简要分析聚阴离子正极材料的一些问题，讨论非计量比结构化学，并结合本课题组的研究工作讨论聚阴离子型钠离子电池一些应用实践和挑战。

关键词：钠离子电池；非计量比；结构化学；聚阴离子正极

报告人简介：

曹余良，武汉大学化学与分子科学学院教授，教育部“长江学者奖励计划”特聘教授。近年来主要研究工作是电化学能量储能材料及新体系，研究重点为钠离子电池、锂离子电池和安全性电解液。近年来在 Nat. Energy、Nat. Nanotech.、Chem、Energy Environ. Sci.、Adv. Mater.、Angew. Chem. Int. Ed.等国际学术期刊上发表 SCI 论文 300 余篇，他引 22000 余次，h 指数为 80，ESI 高被引论文 23 篇，5 篇论文被选为 ESI 1‰热点论文，连续四年入选科睿唯安（Clarivate Analytics）年度“高被引科学家”。

附：报告人不是学生

高电压高倍率钠离子电池电解液研究

陈仕谋[1]

[1]北京化工大学，北京市朝阳区北三环东路 15 号，100029

*Email: chensm@mail.buct.edu.cn

摘要正文：

目前适用于宽温域、高功率等特殊应用场景的钠离子电池技术仍需进一步突破。电解质优化设计是提升钠离子电池性能的最重要策略之一，协同调控电解质体相和电极-电解质界面并明确其与电池电化学性能之间的构效关系是电解质研究的重点和难点。本课题组以设计宽温域高功率钠离子电池功能电解质为核心，从电解液溶剂化结构、体相离子传输、界面膜组分调控等角度，构建了弱溶剂化电解液、超分子弹性体固态电解质、高功率电极/电解质界面等新策略，获得了系列高性能钠离子电池新型电解质。从体相到界面揭示了电解质在提升离子电导率、迁移数、动力学传输、热力学稳定性以及电池电化学性能等方面的微观作用机制，为发展高性能钠离子电池技术提供重要支撑。

关键词：钠离子电池；电解液；溶剂化结构；体相离子传输；界面膜组分

报告人简介：

陈仕谋，北京化工大学教授，英国皇家化学会会士（2023），国家自然科学基金委杰青（2024），主要从事锂离子电池、钠离子电池、固态电池、锌离子电池等关键材料、储能器件及产业应用研究，在 J. Am. Chem. Soc.; Angew. Chem. Int. Ed.; Adv. Mater.等杂志发表 SCI 论文 160 余篇，授权国家发明专利 30 余项。

附：报告人不是学生

钠离子电池界面调控及机制研究

陈卫华[1]

[1]郑州大学，河南省郑州市高新区科学大道 100 号，450001

*Email: chenweih@zzu.edu.cn

摘要正文：

钠离子电池具有资源丰富、成本低等优势，被认为是最有吸引力的大规模储能系统之一，部分具有大规模应用潜力的重要正、负极材料正在走向产业化进程。钠离子电池材料及器件中的界面对其动力学和循环稳定性具有重要作用，然而，在过去这部分尚未得到充分的关注和研究。因此，如何提升较大半径的钠离子在电极材料及电池界面处反复脱嵌过程中的传输动力学和界面稳定性，成为该研究领域的重要科学问题。本课题组基于对多尺度界面形成机制动态演变过程的系统研究，联合电极材料结构设计（界面催化位点、Cu+调控双电层、粘结剂等）和电解液协同优化（组分优化、聚合物结构及极性等），实现了电池内多级界面的精准调控，全面提升了电池的库伦效率、循环寿命及倍率性能，为钠离子电池的应用提供有效的改性策略和关键候选材料。

关键词：钠离子电池；多尺度界面；结构设计；电解液

报告人简介：

陈卫华，郑州大学教授、博士生导师。面向国家战略需求，聚焦新能源领域，开展新型电池体系关键电极材料、隔膜的设计合成及电解液在电极和材料界面作用机制研究。以第一或通讯作者在 Nat. Commun、Angew. Chem. Int. Ed.、J. Am. Chem. Soc.、Chem、Adv. Mater.、Energy Environ. Sci.、Sci. China Mater.等期刊发表论文 100 余篇，SCI 他引 12000 余次，H 指数 60；授权中国发明专利 26 件、申请 PCT 专利 2 件。参与撰写 1 部英文专著。先后主持国家自然科学基金（5 项）、省重点研发专项、河南省高校科技创新团队及电极材料界面兼容及适配技术开发等纵向及横向课题，参与国家重点研发计划项目。入选国家重大人才工程青年项目，中国化学会高级会员，英国皇家化学会会士、全球前 2%顶尖科学家（2022、2023）；兼任中国化学会电化学委员会委员、中国化工学会储能技术专委会委员及多个期刊编委或青年编委。

个人主页链接：

http://www5.zzu.edu.cn/hxxy/info/1146/3239.htm

附：报告人不是学生

还原论下的储能材料科学

谷林[1]

[1]清华大学，北京市海淀区清华大学，100084

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

摘要正文：

还原论下的材料科学一定极大依赖人们对元素的认知，从完全可解的原子能级，到特定边界条件下基本可解的相的能带，最终到可能只有统计解的宏观材料物性。宏观的材料被分解成相、单胞、原子、电子，再从这些微观粒子的相互作用规律出发重构材料物性。由晶格、电荷、轨道和自旋四个自由度所描述的局域对称性决定了材料的功能特性。球差校正电子显微方法可以获取原子尺度结构与电子结构信息，有望摆脱周期性势场、单电子近似、绝热近似在固体材料构效关系讨论中的束缚。我们从晶格和电荷自由度揭示了电化学储能材料原子尺度结构和电子结构的关联，在此基础上，实现了轨道自由度电子占据态的直接观测。本次报告将从储能材料的电化学调控、物理机制、以及电子结构入手，从还原论的角度探讨其构效关系。

关键词：还原论；电化学调控；物理机制；电子结构；构效关系

报告人简介：

谷林，清华大学教授。2002 年清华大学本科毕业，启蒙于我国电子显微学专家朱静院士；2005 年获得美国亚利桑那州立大学博士学位；之后先后在德国马普金属所以及日本东北大学从事博士后研究工作。近年来的研究以电子显微学为主，从晶格和电荷自由度揭示功能氧化物材料、储能材料和催化材料原子尺度结构和电子结构的关联；在此基础上，实现轨道自由度电子占据态的直接观测，取得了系列成果。发表论文 900 余篇，其中包括 Science 及 Nature 正刊 15 篇，子刊 90 余篇，他引 75000 余次，H 因子>140。获得国际电子显微学联合会青年科学家奖(2006)；国际锂电池会议青年科学家奖（2012）；中国科学院“卢嘉锡”青年人才奖（2013）；中国科学院杰出科技成就奖（主要完成人）（2013）；基金委优秀青年科学基金和国家万人计划青年拔尖人才（2015）；教育部长江学者奖励计划青年学者（2016）；中国晶体学会青年科技奖（2018）；第十六届中国青年科技奖特别奖（2020）；基金委“国家杰出青年科学基金”(2020)；科睿唯安材料科学领域(2018-2022)和化学领域（2019-2022）全球高引科学家。https://www.mse.tsinghua.edu.cn/info/1024/2162.htm

附：报告人不是学生

钠电池负极界面调控

焦丽芳[1]

[1]南开大学，天津市南开区卫津路 94 号，300071

*Email: jiaolf@nankai.edu.cn

摘要正文：

钠金属电池因其资源丰富、高理论容量和高能量密度等优势备受关注，被视为下一代大规模储能领域的候选者。然而，由于金属钠负极的高化学反应活性和较低的电极电位，在与有机电解液接触过程中存在持续的副反应，导致不均匀的金属沉积/剥离行为以及不可控的枝晶生长问题，存在严重的性能衰退和安全隐患。研究工作致力于通过金属钠表面人工制备固态电解质界面、构建三维亲钠框架基底和调控电解液溶剂化结构等设计策略对金属钠负极进行改性研究。

关键词：钠金属电池；固态电解质界面；三维亲钠框架；电解液

报告人简介：

南开大学化学学院教授。国家杰出青年基金获得者，国家重点研发计划项目首席。在 Angew. Chem. Int. Ed.，Chem. Soc. Rev.，Adv. Mater.等期刊上发表论文 200 余篇。论文被他人引用 2.5 万余次，h-index 为 86。第一完成人获 2019 年天津市自然科学一等奖，获第十八届中国青年女科学家奖。担任 Battery Energy 副主编，eScience、Chinese Chemical Letters 期刊编委，中产协静电纺专委会副主任委员。

附：报告人不是学生

钠离子电池正负极材料结构调控及电化学性能研究

李福军 [1]

[1] 南开大学，天津市南开区卫津路 94 号，300071

*Email: fujunli@nankai.edu.cn

摘要正文：

由于钠资源丰富、分布广等突出优势，钠离子电池（SIBs）有望在大规模储能、低速电动车等领域替代锂离子电池。开发低成本、高容量、长循环寿命的正极材料是发展SIBs的关键。层状锰基氧化物（Na_xMnO_2）具有结构多样和制备简易等特点被用作SIBs正极材料，然而仍然面临以下关键科学问题：（1）Na^+脱出/嵌入对过渡金属氧化物层间局部应力分布的影响，诱发过渡金属层滑动，产生复杂相变，进而影响材料的循环稳定性；（2）Mn^{3+}的姜-泰勒效应引起晶胞参数和体积变化，导致层状结构坍塌和电极失活。针对上述问题，我们开展了如下研究：（1）在Na层掺入具有大离子半径的金属离子，调控过渡金属层间局部化学环境，增强层间静电作用力，抑制过渡金属层的滑移，消除相变，提升层状正极的循环寿命；（2）在过渡金属层中引入金属离子（Li^+、Ni^{2+}、Ti^{4+}等）调控Mn的电子结构及Mn-O键的化学环境，削弱Mn^{3+}的姜-泰勒效应引起的MnO_6八面体畸变，改善其循环稳定性。本报告将介绍课题组在层状锰基氧化物正极材料结构调控与表征方面的进展，并重点阐述不同掺杂元素的作用机制。

关键词：钠离子电池；层状锰基氧化物；姜泰勒效应

报告人简介：

李福军，南开大学教授、博士生导师，获国家杰青、国家优青、中国电化学青年奖，入选美国化学会 Energy & Fuels Rising Stars。主要从事低成本钠离子电池反应机理与关键材料研究，开发了基于过渡金属氧化物的低成本高比能正极材料和稳定高比容金属/碳负极材料，揭示了正、负极材料的电荷补偿、相组成及演变、离子迁移等规律，阐明了材料结构与电池性能的构效关系，构筑了高效、稳定大容量钠离子电池。在 PNAS、JACS、Angew. Chem.、Nat. Commun.、Adv. Mater.、Chem. Soc. Rev.等国际期刊发表论文 110 余篇，他引超过 11000 次；申请中国发明专利 20 余项，其中获授权 10 余项；主编了《二次电池科学与技术》。

附：报告人不是学生

构筑固态电池界面机械-化学-热稳定性的研究进展

连芳[1]

[1]北京科技大学，北京市海淀区学院路30号，100083

*Email: lianfang@mater.ustb.edu.cn

摘要正文：

单离子导体聚合物电解质（SICPE）中阳离子迁移数接近1，缓解了离子浓度梯度及其衍生问题，显著抑制了锂枝晶的生长，有望提高正极材料利用率和固态电池（SSB）倍率性能。在团队持续的研究工作中，设计开发了以硼为中心离子的LiPVFM系列单离子导体聚合物，表现出优异的热稳定性和高阳离子迁移数，并通过“双盐”和“盐中聚合物”电解质（PISE）等体系的构建，进一步提高了室温离子电导率和拓宽了电化学稳定窗口。进而，从头设计制备了新型三维框架硼基聚阴离子固态聚合物，在电极界面具有优异的应力松弛能力，引导金属阳离子均匀分布和沉积，在NCM全固态电池中呈现长循环稳定性和应用安全性。

关键词：单离子导体；聚合物电解质；双盐；盐中聚合物

报告人简介：

连芳，工学博士，教授，博士生导师。中国颗粒学会理事，英国皇家化学会会士。主要从事能源存储和转换材料设计和研究，近年来在高能量密度电极材料、固态电解质、固态电池体系的技术开发与产业化应用上获得重要进展。作为负责人先后主持了国家重点研发计划项目课题、国家科技支撑计划、国家863计划课题，北京市科技计划课题，陆军装备预研项目、国家自然科学基金，北京市自然科学基金，等；并开展了与理想汽车、德国宝马公司、美国江森自控的合作研发项目。主持制定行业标准1项，获得国家发明专利40余项，在AEM, AFM, EnSM, Nano Energy等期刊发表论文120余篇，编著《电化学储能器件及关键材料》1部。

个人主页：http://lianteam.cn；

https://faculty.ustb.edu.cn/FangLian/zh_CN/index/59267/list/

附：报告人不是学生

功能碳材料的合成与应用

邱介山[1]

[1]北京化工大学，北京市朝阳区北三环东路 15 号，100029

*Email: qiujs@mail.buct.edu.cn

报告人简介：

邱介山，北京化工大学化学工程学院教授，国家杰出青年基金获得者、教育部“长江学者奖励计划”特聘教授、国务院政府津贴专家、国家“有突出贡献中青年专家”及国家“百千万人才工程”人选、全国化工优秀科技工作者、全国百篇优秀博士论文指导教师、北京化工大学“十佳教师”、石油和化工行业新型碳基功能材料重点实验室主任。现任中国科协先进材料学会联合体主席团副主席、《化工学报》及 Battery Energy (Wiley)和 Chemical Engineering Science (Elsevier)副主编、Science China Materials、Energy Technology、Carbon Energy 等 20 余种学术刊物编委。主要从事功能碳材料的合成及应用、煤炭的高值精细化利用、能源化工等领域研究。多项技术实现产业化/规模化应用，提升了相关地区和行业的科技水平和实力，创造了良好的经济效益和社会效益。作为主要起草人之一，完成“煤焦化焦油加工工程设计标准”等多项国家标准的制定/修订。在 Nature Mater.、
Adv. Mater.、 Energy Environ. Sci.、Nature Commun.、Angew. Chem.、JACS 等刊物上发表论文 800 余篇，发表论文总被引 60000 余次，H 指数 122 (Google Scholar)；申请及授权发明专利 160 余件。连续入选科睿瑞安全球高引科学家榜单(2018-2023)和 Elsevier 中国高被引学者榜单(2019-2023)。荣获教育部自然科学一等奖、辽宁省自然科学一等奖、中国颗粒学会自然科学一等奖、中国化工学会科学技术奖一等奖、中国发明协会发明创业奖创新奖一等奖等奖励和表彰 30 余次。

附：报告人不是学生

钠离子电池高容量正负极材料开发

戚兴国[1]

[1]北京中科海钠科技有限责任公司，北京市海淀区知春路 68 号院，100080

*Email: qixingguo@hinabattery.com

摘要正文：

得益于上下游行业的关注和投入，钠离子电池产业化速度越来越快，但是其商业化进度不及预期，核心原因还是在于钠离子电池当前成本偏高。我们致力于开发高能量密度钠离子电池正极和负极材料，从而促使综合成本能够显著下降。当前正极和负极克容量已经取得了显著提升，电芯能量密度也突破180Wh/kg，进一步工作也正全力开展中。

关键词：钠离子电池；正极材料；负极材料；商业化

报告人简介：

戚兴国，男，1990 年生于浙江省德清县，2009-2013 年本科就读于中国科学技术大学，专业为凝聚态物理。2013-2018 年于中国科学院物理研究所攻读博士学位，专业为材料物理与化学，主要方向为钠离子电池材料及其产业化。2018 年毕业后进入中科海钠工作，负责正负极材料的开发和生产。

在钠离子电池正负极材料的基础研究和产业化上拥有多年的学习研究经历。期间共合作发表论文 40 余篇，H 因子 29。申请专利近百项，其中 30 余专利已获得授权。2015 年起负责钠离子电池正负极材料的研发和生产，并承担国家科技部项目子课题、山西科技厅项目、江苏科技厅项目子课题等项目。成功建设了百吨级和千吨级钠离子电池正负极材料生产线建设，并开发出多款正负极材料，应用于全球首辆钠离子电池低速车及全球首座 100KWh 及 1MWh 钠离子电池储能电站。

附：报告人不是学生

Publishing With Wiley in Materials Science Journals

沈睦贤[1]

[1] Wiley 出版社

*Email: afm@wiley.com

摘要正文：

报告将简要回顾Wiley出版社的历史、介绍旗下材料科学和化学领域的期刊，并剖析出版行业正面临的变革。内容将聚焦于最新的投稿趋势，并介绍Advanced Functional Materials期刊的广泛影响力。此外，报告还将从同行评审编辑的视角，为作者提供关于如何选择最合适的投稿期刊、论文准备与呈现的关键要素等方面的专业建议。同时，报告内容还将涉及Wiley材料科学期刊的常规编辑流程、出版伦理规范以及如何在论文发表后进一步提升其影响力的策略。

关键词： Wiley；Advanced Functional Materials；编辑流程；伦理规范

报告人简介：

沈睦贤，《先进功能材料》（Advanced Functional Materials）副主编。于华东理工大学先后获得化学工程学士学位与材料科学博士学位。2015 年加入自然出版集团（Nature Research Group），成为 Nature Communications、Nature Materials 和 Nature Energy 在亚洲的第一位编辑助理。在 Springer Nature 工作 3 年后，于 2018 年加入 Wiley，担任材料科学与物理部门 Advanced Energy Materials、Advanced Functional Materials 和 Small Methods 的助理编辑，并于 2019 年晋升为 Advanced Energy Materials、Advanced Functional Materials 和 Advanced Optical Materials 等期刊的副主编。2021 年至今，担任 Advanced Functional Materials 副主编。2024 年 4 月起，同时还担任 Advanced Energy Materials 副主编。常驻于 Wiley 出版集团上海办公室。

附：报告人不是学生

富锂锰正极材料机遇与挑战

尉海军 [1]

[1] 北京工业大学，北京市朝阳区平乐园 100 号，100124

*Email: hj-yu@bjut.edu.cn

摘要正文：

钠离子电池（SIBs）由于其与锂离子电池（LIBs）相似的化学储能机制，以及钠资源的丰富性和低成本，成为锂电池的有力替代品。然而，钠离子的较大半径在电极材料中的插入/脱出过程可能导致复杂的结构转变和电化学性能退化，因此，设计稳定的钠离子电池电极材料成为亟待解决的问题。报告人一直从事先进电池材料与器件方面的实验与理论研究，系统开展了钠离子层状氧化物正极材料的局域结构设计、复合结构材料设计与调控、电化学反应机制等方面的研究。通过开发钛基固溶体材料和“双晶畴”复合结构材料，提升材料综合电化学性能。

关键词：钠离子电池；层状氧化物正极；局域结构；复合结构

报告人简介：

尉海军，教授，博导。教育部“长江学者奖励计划”特聘教授、国家重点研发计划项目负责人，先后入选国家千人、北京杰青和青年北京学者等人才计划、获北京青年“五四奖章”。兼任国家科技部与工信部储能与氢能领域专家、北京市科协委员、欧美同学会成员、IEEE PES 储能技术委员会常务理事、国际电化学能源科学院（IAOEES）理事、中国化学学会电化学委员会委员等职。从事先进电池材料与器件研究工作 17 年，主持国家重点研发计划、国家自然基金委重大项目等 30 余项国家级项目，涉及先进电池材料、电池系统以及电动车应用等领域，组织并协调完成了北京 2008 年奥运会和北京市 2009 年为期一年的 2 辆燃料电池新能源客车运营项目，在锂/钠离子电池、固态电池及铝离子电池等方面取得系统创新性研究成果，提出“晶畴电池材料”学术思想，获全国先进储能技术挑战赛技术创意一等奖 1 项、北京市自然科学技术二等奖 1 项、中国材料研究学会科学技术二等奖 1 项，并实现了下一代高能锂离子电池用富锂锰基正极材料的产业化。

附：报告人不是学生

钠电池电极材料研究

温兆银[1]

[1]中国科学院硅酸盐研究所，地址，邮编

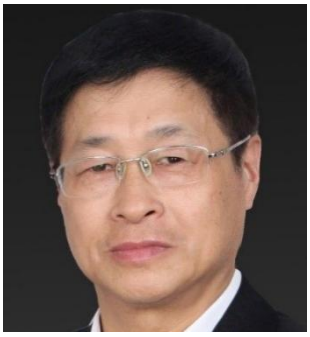
*Email: zywen@mail.sic.ac.cn

摘要正文：

钠电池是解决锂电池资源隐患的有效技术路线，本报告介绍钠（离子）电池电解质和电极材料及其界面问题的最新研究进展，通过电解质综合性能的提升、电极材料多体系复合以及界面修饰与润湿等策略，有效地改善了钠系电池的电化学性能，提升了性价比。

关键词：钠离子电池；界面修饰；电解质

报告人简介：



温兆银，中国科学院上海硅酸盐研究所研究员，上海科技大学特聘教授，博士生导师。开展各种离子导体及固态电池的研究。发表学术论文 450 余篇，被引用 20000 余次，授权发明专利 100 余项，研制的大容量钠硫电池和高安全性钠镍电池技术填补了两项我国的技术空白，研究成果入选“中国十大科技进展”，获上海市技术发明一等奖等省部级一等奖 3 项，获得“十二五”科技部国家计划执行突出贡献奖。获国务院政府特殊津贴，入选上海市领军人才，亚太材料科学院院士，现任亚洲固态离子学会主席，中国硅酸盐学会常务理事，固态离子学分会理事长等职。
https://www.sic.cas.cn/sourcedb_sic_cas/zw/rck/202312/t20231211_6911547.html

附：报告人不是学生

钠离子电池硬碳负极材料

徐斌[1]

[1]北京化工大学，北京市朝阳区北三环东路 15 号，100029

*Email: xubin@mail.buct.edu.cn

报告人简介：

徐斌，北京化工大学教授，教育部"长江学者奖励计划"特聘教授，博士生导师。长期从事先进化学电源与能源材料的研究与开发，兼任中国超级电容产业联盟副秘书长、材料电化学过程与技术北京市重点实验室副主任、Nano-Micro Letters 编委和 Chinese Chemical Letters 编委。主要研究领域：1. 先进化学电源与能源材料；2. 锂/钠/钾离子电池、锂-硫电池、超级电容器；3. 先进炭材料；4.新型二维 MXene 材料；5. 环境催化材料。发表 SCI 论文 130 余篇，其中在 Advanced Materials, Advanced Energy Materials, Advanced Functional Materials, ACS Energy Letters, Nano Energy 等影响因子大于 10 的期刊发表论文 30 余篇，总引用 9000 余次，H 因子 49。申请国家发明专利 30 余件，已授权 22 件，获全国优秀博士学位论文提名和省部级科技进步二等奖 2 项。作为课题负责人先后主持国家自然科学基金项目（5 项）、国家 863 课题（2 项）、国家重点研发计划子课题、北京市科技计划课题、北京化工大学高层次引进人才启动项目、横向课题等，作为骨干成员参加国家 973、国家 863 等课题多项。

附：报告人不是学生

钠离子电池中的碳：孔与非孔的思辨

杨全红 [1]

[1] 天津大学，天津市南开区卫津路 92 号，300072

*Email: qhyangcn@tju.edu.cn

摘要正文：无论对于过去、现在还是未来电池，碳材料都是重要的活性材料和关键组分。作为电化学储能器件中活性组分的碳材料，其储存电荷的能力主要取决于表面化学、晶体结构和孔隙织构。具体而言，对于超级电容器，其活性主要取决于表面；对于锂离子电池，晶态的层状结构是其决定因素；而对于钠离子电池，无定形碳所富含的孔隙则是其存储电荷的基本结构单元。对于非石墨化的的多孔碳结构，其结构特征表现在以下几方面：微晶、表面、缺陷（不规则结构）和孔隙；其中，孔隙是将其它三个特征包罗其中、决定储钠特性的基本结构特征；孔壁缺陷所决定的吸附和孔道结构所决定的成簇状态是调控储钠行为的关键。我们在本次报告中，将主要讨论与孔相关，决定储钠特性的几个关键问题：1，何为孔，何为储钠活性的孔？2，开孔和闭孔的边界与表征技术；3，闭孔中的储钠化学和界面演变；4，筛分型碳——孔与非孔思辨的产物；5，筛分型碳为什么是理想的储钠碳？

关键词：钠离子电池；碳；孔结构；筛分型碳；界面化学

报告人简介：

杨全红，天津大学化工学院北洋讲席教授、博士生导师。第十四届全国政协委员、天津市欧美同学会副会长。国家杰青、长江学者、万人领军，“工程科学和综合交叉”国家重点研发计划首席科学家，天津市有突出贡献专家、天津市科普大使，“科睿唯安”全球高被引学者和“爱思唯尔”中国高被引学者。从事碳功能材料、先进电池、储能技术和双碳战略研究，在碳纳米材料设计制备、致密储能、锂硫催化、钠电池筛分型碳负极方面取得系列进展。获国家技术发明二等奖、天津市自然科学一等奖等奖项。担任《Energy Storage Materials》等 3 份刊物副主编；出版 3 本专著；发表 SCI 论文 300 余篇，他人引用 45,000 余次，H 因子 112；拥有中国和国际授权发明专利 60 余件。担任多家电池头部企业技术委员会委员、中国超级电容器产业技术联盟副理事长等行业兼职。团队更多信息见 Nanoyang 团队课题组网站：http://nanoyang.tju.edu.cn

附：报告人不是学生

可充放钠电池电极-电解质界面化学研究

殷雅侠[1]

[1]新疆大学，地址，邮编

*Email: yxyin@xju.edu.cn

摘要正文：

可充放钠电池以其显著的可持续性、经济性成为极具应用前景的电化学储能技术。在电池循环过程中，电解液还原分解在负极表面生成的固体电解质膜（solid electrolyte interphase, SEI），对界面稳定性的影响非常关键，首圈充电过程负极表面形成SEI膜会消耗活性钠，另一方面，循环过程中SEI面临持续生长的问题，这些将大量消耗全电池中有限的活性钠离子，造成不可逆容量损失和内部阻抗增加。针对这些问题，我们开发了一种安全、实用的钠离子电池正极补钠添加剂，解决了硬炭负极在形成SEI膜过程导致首圈库伦效率低，造成全电池能量密度和循环稳定性降低的问题。提出抑制电子泄露稳定碳负极/电解质界面的设计策略，缓解了碳负极循环过程中SEI持续生长的问题。另外，提出了双单体原位共聚制备三维网络结构凝胶聚合物电解质的设计策略，稳定了碳负极和金属钠负极表界面，获得了本质安全的可充放钠电池。

关键词：钠离子电池；固体电解质膜；补钠添加剂；原位共聚

报告人简介：

殷雅侠，研究员，博士生导师，长江学者特聘教授。2012年获得北京化工大学材料科学与工程专业博士学位，同年加入中国科学院化学研究所分子纳米结构与纳米技术实验室工作，2024 年加入新疆大学化学学院。近年来一直从事高性能锂（钠）离子电池用电极材料的开发、电池材料储能机制与电池性能的构效关系研究，并探索体相和表界面稳定策略。迄今已在国内外学术刊物 Nat. Commun.、Sci. Adv.、Angew. Chem. Inter. Ed.、Adv. Mater.、J. Am. Chem. Soc.、Energy Environ. Sci.、Adv. Energy. Mater.等发表论文 220 余篇，被他人正面引用 32000 余次（ESI 高被引论文 43 篇），h-index 为 102，2019-2023 连续五年入选 Clarivate（科睿唯安）全球高被引科学家，2020-2023 年连续四年入选美国斯坦福大学全球前 2%顶尖科学家榜单（World’s Top 2% Scientists）。获美国、德国、英国、加拿大发明专利授权共 11 项，中国发明专利授权 96 项，成果转移转化 41 项。

附：报告人不是学生

钠电池电解液研究进展

张强[1]

[1]清华大学，北京市海淀区清华大学，100084

*Email: zhang-qiang@mails.tsinghua.edu.cn

摘要正文：

开发先进储能器件、高效利用可再生能源、构建可持续发展能源体系是实现“碳中和”目标的迫切需求。传统的锂离子电池技术由于能量密度等方面的限制，越来越难以满足未来社会发展的能源需求。发展基于钠离子电池技术成为了当前研究重点，但同时对电解液设计提出了更高的要求。深入理解电解液溶剂化结构和构效关系，探究其微观化学原理，是开发新型电解液体系的重要前提。针对常规有机电解液与负极界面不稳定机制不明的问题，建立了离子－溶剂化学模型，在分子和电子层面揭示了溶剂分子在金属负极表面还原分解的化学本质。电解液中阳离子与溶剂相互作用形成离子－溶剂复合结构，会显著降低溶剂的最低未占分子轨道（LUMO）能级，从而使溶剂分子在负极更容易得电子、发生还原分解，甚至产生可燃性气体。基于离子－化学模型，提出了阳离子添加剂、弱溶剂化电解液、锂离子溶剂化壳层阴离子设计、阴离子受体等电解液设计策略，构建了稳定的电解液－负极界面，为开发下一代高安全新体系电池体系提供重要的理论支撑。

关键词： 电解液；钠离子电池；钠金属负极；离子−溶剂复合结构；固态电解质界面膜

报告人简介：

张强，清华大学长聘教授。曾获得国家自然科学基金杰出青年基金、中国青年科技奖、科学探索奖、可持续发展青年科技奖。长期从事能源化学与能源材料的研究，提出了锂硫电池中的锂键化学、离子溶剂复合结构概念，并根据高能电池需求，研制出复合金属锂负极、碳硫复合正极等多种高性能能源材料，构筑了锂硫软包电池器件。发表论文 300 余篇，h 因子 163，授权发明专利 40 余项。担任国际期刊 Angew. Chem.首届顾问编辑、J Energy Chem, Energy Storage Mater 副主编， Joule, Matter， ChemSocRev, Adv Energy Mater, 化工学报等期刊编委。曾获得教育部自然科学一等奖、化工学会基础科学一等奖等学术奖励。

附：报告人不是学生

磷酸盐基钠离子电池储能关键技术

郑琼[1]

[1]中国科学院大连化学物理研究所，大连市中山路457号，116023

*Email: zhengqiong@dicp.ac.cn

摘要正文：

报告将主要介绍近年来大连化物所团队在磷酸盐基钠离子电池关键材料和电芯系统集成等核心技术方面的研究进展。主要包括提高电荷传导和钠扩散动力学的磷酸盐正极晶胞结构基元调控和低弯曲度电极结构设计，纳米尺寸效应改善储钠动力学的碳基负极设计，极性基团类添加剂优先吸附氧化构建稳定界面的高压电解液设计等研究工作，及基于上述材料研究，团队在关键材料放大、电芯系统集成与小型储能示范方面的进展。

关键词：钠离子电池；磷酸盐基材料；结构基元；纳米尺寸效应；添加剂

报告人简介：

郑琼，中国科学院大连化学物理研究所，研究员，博士生导师，研究组组长，中国科学院青促会会员，大连化学物理研究所“张大煜”青年学者，国际电工委员会液流电池标准化联合工作组（IEC/TC21/JWG7）技术专家和国家能源行业液流电池标委会（NEA/TC23）委员。主要致力于钠离子电池、宽温区锂离子电池和液流电池技术。作为负责人承担国家自然科学基金面上项目、中国科学院先导专项项目、企业合作等10余项项目，制定国际、国家和行业标准20余项。以第一/通讯作者在J.Am.Chem.Soc.、Angew. Chem. Int. Ed.、AIChE Journal等发表论文30余篇，授权发明专利40余件。作为主要完成人获得2021年“中国科学院科技促进发展奖”、2022年“中国石油和化学工业联合会技术发明一等奖”等。

（http://www.energystorage.dicp.ac.cn/）

附：报告人不是学生

基于调控电解液的溶剂化结构开发高性能钠离子电池

周豪慎[1]

[1]南京大学，江苏省南京市栖霞区仙林大道 163 号，210023

*Email: hszhou@nju.edu.cn

摘要正文：

钠离子电池中负极金属钠析出的安全问题阻碍了钠离子电池的发展，我们用MOF/分子筛调控电解液的溶剂化结构，获得的去溶剂化电解质/液用于钠离子电池的正极和负极，在一定范围内能有效的控制钠枝晶的生成问题，在正极也遏制正极材料和电解液的副反应，为开发高性能钠离子电池提供支撑。

关键词：钠离子电池；MOF；分子筛；电解液

报告人简介：

周豪慎，1985 年于南京大学半导体物理专业本科毕业，1994 年于日本国立东京大学化学工学专业博士毕业。中组部国家特聘专家，教育部长江学者，科技部 973 首席科学家。长期从事锂离子电池，钠离子电池，金属锂/钠二次电池，固态电池等动力电池和储能电池的研究和开发。曾担任日本国立产业技术综合研究所(AIST)首席研究员，兼任国立东京大学特聘教授，兼任国立筑波大学教授。作为通讯作者在 Nature, Nature Materials, Nature Energy, Nature catalysis, Nature Communications, Science Advance, Joule, Energy and Environmental Science, Angewandte Chemie International Edition, Advanced Materials, Journal of American Chemical Society, Science Bulletin 等学术期刊发表论文 500 余篇，他引 50000 余次，H 因子超 120。

附：报告人不是学生

钠电高熵氧化物正极材料研究

丁飞翔[1]

[1]郑州大学，河南省郑州市科学大道 100 号，450001

*Email: 18811308379@163.com

摘要正文：

研究表明高熵氧化物正极材料具有优异的电化学性能，并且其提高的热稳定性改善了电池技术中长期存在的安全问题。这主要归因于高熵氧化物正极中高构型熵、局部无序和多组元间的协同作用，大幅提高碱金属离子脱嵌过程中结构稳定性。尽管发现了这些优势，高熵氧化材料的研究仍处于初期阶段，没有系统地建立设计原则设计适合商业化应用的最佳组分。特别是，当构型熵从超高值降到中等值以平衡熵增和容量利用率时，由于离子尺寸、质量和价电子构型的显著不匹配，可能会发生严重的晶格应变。报告人提出全3d过渡金属组成的高熵正极材料因过渡金属优异的结构-电化学兼容性，促使原始材料具有原子尺度均匀分布的元素组成和较少的过渡金属层内应力。该材料循环过程中的结构稳定性显著提高，并有效减少电极材料晶格应力积聚、离子迁移和机械化学疲劳损伤。

关键词：高熵氧化物正极；高构型熵；局部无序；多组元协同

报告人简介：

丁飞翔，郑州大学材料科学与工程学院副研究员，博士毕业于中国科学院物理研究所，师从胡勇胜研究员。主要研究方向为锂电/钠电氧化物正极材料。以第一作者身份在 Nat. Energy, J. Am. Chem. Soc.、Angew. Chem. Int. Ed., Adv. Funct. Mater., ACS Energy Lett. 等国际期刊发表论文十余篇，H 因子 21，被引用超过 3000 次(google scholar)，获得国家发明专利 6 项，主持国家自然科学基金青年基金，博士后面上项目等。

附：报告人不是学

钠离子电池碳基材料及其储钠动力学

冯鑫[1,2]，吴锋[1,2]，吴川[1,2]，白莹[1,2*]

[1]北京理工大学，北京市海淀区中关村南大街5号，100081

[2]北京理工大学长三角研究院（嘉兴），浙江省嘉兴市秀洲区油车港镇东方北路1940号，314019

*Email: membrane@bit.edu.cn

摘要正文：钠离子电池作为大规模储能的最具潜力的候选者，作为其核心部件之一的负极一直是研究的热点。碳基材料由于资源丰富、价格低廉、环境友好被视为最具发展潜力的钠离子电池负极材料。硬碳材料复杂的微观结构和丰富的缺陷往往会阻碍钠离子传输，诱导大量不可逆容量损失以及界面不稳定性，进而导致较低的首周库伦效率、较差的循环稳定性和不佳的倍率性能等问题。针对上述问题，课题组在钠电电极材料及其储钠动力学等方面开展了相应的研究。在材料合成及优化方面，通过研究碳材料中不同掺杂氮构型对储钠性能的影响，探究了石墨氮、吡咯氮与吡啶氮等构型储钠行为的作用规律[1]。通过掺杂及封装硫原子的手段，提升钠离子的电池的倍率性能及容量，提出了异质原子修饰提升储钠性能的新见解[2]。通过分类总结杂原子掺杂碳在电池、超电等方面的发展历程，系统全面地分析碳元素中各种异质元素种类及掺杂方式与电池储能的性能构效关系，提出了异质原子掺杂碳的设计原则，为高性能钠离子电池电极材料设计提供理论指导[3]。在储钠动力学探索方面，受到非晶态合金的启发，在石墨微晶和非晶态之间提出了一种新的概念—“过渡区”，完善了现有的硬碳模型，过渡区更好地解释了钠离子在硬碳中的扩散行为。并且在精细有机合成与定向储能材料设计之间架起了一座桥梁，对未来其他有机合成反应在储能领域的应用起到了一定的指导作用[4]；同时，关注了SEI在负极上的演化，分析了电极催化电解质还原的直接（缺陷构型）和间接（孔结构）因素，详细讨论了电极设计对电解液还原分解的选择性催化效应，并指出了目前界面研究面临的挑战以及未来关于构建先进界面的发展方向[5]；提出了硬碳材料中钠离子的稳定状态为“准金属态”，并首次通过酚酞变色的简单化学法验证了准金属钠的存在，并将该方法扩展至其他碳负极材料和其他碱金属离子的研究中，为正确理解碱金属离子在碳材料中稳定存储状态提供了一种新的研究思路和方法[6]。

关键词：钠离子电池；聚合物；异质原子掺杂；扩散系数；准金属钠

致谢：本文受到中国博士后基金资助（编号：2023M740271、2024T171134）

参考文献

[1] X. Feng, Y. Bai, L. M. Zheng, M. Q. Liu, Y. Li, R. Zhao, Y. Li and C. Wu, Effect of different nitrogen configurations on sodium storage properties of carbon anodes for sodium ion batteries. ACS Appl. Mater. Interfaces 2021, 13, 47, 56285-56295.

[2] X. Feng, Y. Li, M. H. Zhang, Y. Li, Y. T. Gong, M. Q. Liu, Y. Bai and C. Wu, Sulfur encapsulation and sulfur doping synergistically enhance sodium ion storage in microporous carbon anodes. ACS Appl. Mater. Interfaces 2022, 14, 45, 50992-51000.

[3] X. Feng, Y. Bai, M. Q. Liu, Y. Li, H. Y. Yang, X. R. Wanga and C. Wu, Untangling the respective effects of heteroatom-doped carbon materials in batteries, supercapacitors and the ORR to design high performance materials. *Energy Environ. Sci.* 2021,14, 2036-2089.

[4] X. Feng, Y. Li, Y. Li, M. Q. Liu, L. M. Zheng, Y. T. Gong, R. P, Zhang, F. Wu, C. Wu and Y. Bai, Unlocking the local structure of hard carbon to grasp sodium-ion diffusion behavior for advanced sodium-ion batteries. *Energy Environ. Sci.* 2024,17, 1387-1396.

[5] Y. Li, M. Q. Liu, X. Feng, Y. Li, F. Wu, Y. Bai and C. Wu, How can the electrode influence the formation of the solid electrolyte interface? *ACS Energy Lett.* 2021, 6, 9, 3307-3320.

[6] Z. H. Wang, X. Feng, Y. Bai, H. Y. Yang, R. Q. Dong, X. R. Wang, H. J. Xu, Q. Y. Wang, H. Li, H. C. Gao and C. Wu, Probing the energy storage mechanism of quasi-metallic Na in hard carbon for sodium-ion batteries. *Adv. Energy Mater.* 2021, 11, 2003854.

报告人/墙报展示人简介：

冯鑫，北京理工大学长三角研究院（嘉兴）博士后，合作导师吴锋院士/吴川教授。博士毕业于北京理工大学材料科学与工程专业，师从白莹教授。作为主要完成人荣获 2023 中国商业联合会科学技术一等奖。长期专注于异质原子掺杂碳材料的研究工作，目前主要从事钠离子电池碳基负极材料的可控合成，在电极材料表观形貌的优化设计、反应机理分析、电化学表征技术等方面具备扎实的实验和理论基础。截止目前在国际知名学术期刊发表高水平论文 20 余篇，其中以第一作者和共同一作在国际顶级期刊 Energy& Environment Science, Angewandte Chemie International Edition，Advanced Energy Materials，ACS Energy Letters 上发表论文 10 余篇，高被引文章 4 篇。累积影响因子超过 170，文章引用 1000 余次，H 因子 15。申请发明专利 12 项，获授权 5 项，其中申请国际专利 1 项。主持省、市科研项目 3 项，博士后基金 2 项，参与国家项目 5 项。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

先进钠离子电池层状正极材料研究

郭少华[1]

[1]南京大学，江苏省南京市栖霞区仙林大道 163 号，210023

*Email: guo.shaohua@outlook.com

摘要正文：

传统二次电池正极通过过渡金属阳离子的氧化还原进行电荷补偿，其工作电压和能量密度受限于过渡金属离子的氧化还原电势和电荷转移数目。针对大尺寸钠离子嵌入反应所造成的反应活性不足的问题，报告人围绕钠离子电池层状正极的氧化还原机制和晶体结构演化规律开展了创新性研究。（1）基于电荷补偿机制，提出了阴阳离子协同氧化还原，提高了嵌钠反应活性，得到了高比能量的嵌钠反应体系；（2）基于晶体能带理论，研究了元素掺杂与阴离子氧化还原反应稳定性的构效关系，在兼顾阴离子氧化还原活性的同时，发展了高稳定性的嵌钠反应体系。通过表面增强原位拉曼光谱、软X射线吸收谱以及第一性原理计算等系列技术手段，发现了嵌钠反应中氧氧键的形成。该新机制丰富了氧化物材料的插层化学，为高比能钠离子电池的设计提供了新思路。

关键词：钠离子电池；阴离子氧化还原；电荷补偿；构效关系

报告人简介：

郭少华，南京大学教授、博士生导师。国家四青人才、国家重点研发计划青年首席科学家，兼任南京大学深圳研究院副院长。获中国材料研究学会科学技术一等奖（第三完成人）、江苏省颗粒学会科技创新一等奖（第一完成人）、中国化学会锂元素代言人等。代表性研究成果发表于 Nat. Commun.、Sci. Adv.、JACS、Angew. Chem.、Adv. Mater.、Joule、Chem. Soc. Rev.等国际权威期刊。主持国家重点研发计划“纳米前沿”专项青年科学家项目、国家自然科学基金面上项目、江苏省杰青项目以及与华为、小米等知名企业的合作项目多项课题，兼任中国材料研究学会青委会理事和江苏省动力及储能电池产业创新联盟常务理事，《物理化学学报》编委并连续三年被评为编委突出贡献奖。在中国化学会、中国材料大会、全国电化学大会等作主旨报告和邀请报告 20 余次。
https://eng.nju.edu.cn/gsh/main.htm

附：报告人不是学生

钠离子电池高比能正极材料构筑及储能机理

刘永畅[1]

[1]北京科技大学，北京市海淀区学院路30号，100083

*Email: liuyc@ustb.edu.cn

钠离子电池资源丰富、成本低廉，在大规模储能、低速电动车等领域具有重要应用前景，有助于推动“碳达峰，碳中和”战略目标实现。正极材料提供活性钠离子和高电位氧化还原电对，直接决定钠离子电池的能量密度。因此，开发高比能正极材料对促进钠离子电池的产业化发展至关重要。

近年来，我们课题组利用微纳米工程，离子掺杂，表界面改性，反应电对调控，缺陷工程等策略，设计并制备了几种具有应用前景的储钠正极材料：先后将尺寸仅≈1.6 nm的$NaFePO_4$和≈3.8 nm的Na_2FePO_4F纳米粒子均匀镶嵌在多孔氮掺杂碳纳米纤维中，设计了碳包覆的新型NASICON结构$Na_4MnCr(PO4)_3$，$Na_{3.5}Mn_{0.5}V_{1.5}(PO_4)_3$和$Na_{3.}5Fe_{0.5}VCr_{0.5}(PO_4)_3$系列正极材料，合成了P2相的$Na_{0.76}Cu_{0.22}Fe_{0.30}Mn_{0.48}O_2$与$Na_{2/3}Ni_{1/3}Mn_{2/3}O_2$纳米颗粒组装的多孔纳米纤维，以及阴阳离子电对协同电荷补偿的镍锰基和铁锰基层状氧化物正极材料。此外，我们发现氩气氛退火可以普适地提升锰基层状氧化物正极的综合性能，还原耦合机制能够有效改善层状氧化物阴离子反应的可逆性和动力学，并调控Na^+/空位有序有效提升了层状氧化物正极的工作电压。以上正极材料展现出高能量密度，大倍率容量，长循环寿命的优异储钠性能。我们对材料的构效关系作了合理分析，采用循环伏安、恒电流间歇滴定，交流阻抗、DFT理论计算等方法对反应动力学进行了深入研究，利用高时空分辨原位/非原位结构、成分、价态等谱学和成像手段对储钠机理作了详细阐述，并组装了软包钠离子全电池，在理论和技术两个层面取得了一些创新性研究结果。

关键词：钠离子电池；NASICON正极；层状氧化物；储钠机理；软包电池

报告人简介：

刘永畅，北京科技大学教授，博士生导师，国家级青年人才，北京市优秀青年人才。2011年和2016年分别获得北京交通大学理学学士和南开大学工学博士学位（师从陈军院士和焦丽芳教授），随后加入北科大，先后担任博士后、讲师、副教授、教授。长期致力于低成本、高安全新型金属离子电池关键材料与器件研究，已发表相关学术论文120余篇，引用1.5万余次，H因子63，以第一/通讯作者在J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem. Int. Ed., Adv. Mater.等期刊发表论文80余篇（影响因子15以上40余篇），获授权国家发明专利8项。主持国家自然科学基金（3项），国家重点研发计划子课题，中国科协“青年人才托举工程”，国家“博新计划”，北京市自然科学基金，“小米青年学者”项目等近20项。担任10余种学术期刊编委、青年编委或客座编辑，入选科睿唯安全球高被引学者，全球前2%顶尖学者“终身科学影响力”榜单，获天津市自然科学一等奖，国际先进材料协会Advanced Materials Award，IJMMM“鼎新青年科学家奖”等。

附：报告人不是学生

电极材料的电子结构调控及反应机理研究

潘慧霖[1]

[1]浙江大学，浙江省杭州市西湖区余杭塘路 866 号，310058

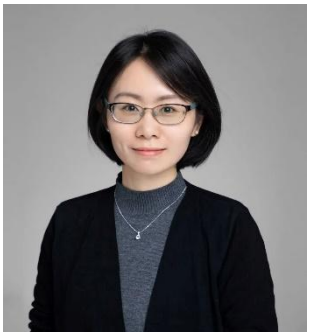
*Email: panhuilin@zju.edu.cn

摘要正文：

钠离子电池凭借其丰富的原材料资源储量，展现出显著的优势，成为一种极具潜力的低成本储能电池技术。近年来，该技术已在大规模储能领域实现了初步示范应用。然而，钠离子电池在能量密度、循环寿命以及安全性方面仍有待进一步提升。层状过渡金属氧化物和硬碳负极材料被广泛认为是最有望实现钠离子电池大规模商业化应用的关键正负极材料。但在实际应用中，氧化物正极材料仍然面临结构相变、不可逆的晶格氧氧化还原反应以及能量密度有待提升等诸多挑战，进而导致容量衰减、极化增大、循环寿命缩短以及倍率性能下降等问题。硬碳负极由于其复杂的储存机制及与金属钠电位接近的储钠平台，在循环过程中容易发生析钠等副反应，导致电解液的持续消耗，并使循环稳定性和安全性降低。本报告着重探讨新型高性能钠离子电池P2相层状氧化物正极材料的开发。通过对组成元素的调控，优化P2相层状氧化物正极材料的晶体结构和电子结构，深入研究氧化物正极材料的电子结构与电化学性能、电荷补偿机制及结构演化规律之间的内在联系，旨在提高层状氧化物正极的能量密度、扩散动力学性能及循环稳定性，为正极材料的设计与开发提供理论和实践参考。此外，报告还将介绍硬碳负极的反应机制调控，以及硬碳负极表面的竞争反应机制与析钠的原位检测方法。

关键词：钠离子电池；层状氧化物；硬碳负极

报告人简介：



潘慧霖，浙江大学化学系博士生导师，研究方向为储能材料及电池。曾任美国西北太平洋国家实验室高级科学家，2019 年入选国家海外高层次人才青年项目，主持国家重点研发青年项目、国家自然科学联合基金、浙江省杰出青年等课题。在国际顶级学术期刊发表 SCI 论文 70 余篇，授权美国专利 3 项，申请中国专利 9 件。担任中国化学会女化学工作者委员、浙江省化学会理事、浙江省能源研究会储能专委会委员、交叉材料学科期刊学术编辑、Nano Research 青年编委等。

附：报告人不是学生

全固态钠离子电池关键材料和界面研究

容晓晖[1]

[1]中国科学院物理研究所，北京市海淀区中关村南三街 8 号，100190

*Email: rong@iphy.ac.cn

摘要正文：

目前钠离子电池的能量密度已经可以满足低速电动交通工具和规模储能的基本需求。但是为了进一步拓展钠离子电池的应用场景并提高其未来市场竞争力，需要进一步开发高能量密度、长寿命、高安全的全固态钠离子电池。在本报告中将重点介绍新型高性能聚合物电解质和正极和电解质的界面相关工作。在聚合物固体电解质方面，设计并合成了新型21臂富氟拓扑结构聚合物，制成了耐高压、高阳离子迁移数、高机械强度的新型聚合物电解质；合成了新型三元杂臂共聚物，通过熵调控的方法，解决了高机械强度和高离子电导率相悖问题，并显著提升了阳离子迁移数、耐高压等性能。在界面方面，介绍正极材料空气稳定性的最新进展，以及几种改善钠离子电池正极材料和聚合物固体电解质界面稳定性材料包覆方法。

关键词：全固态钠离子电池；聚合物电解质；空位稳定性；界面稳定性；包覆

报告人简介：

容晓晖，1990 年生；2009 年加入中国共产党；2014 年在郑州大学获得学士学位；2019 年在中国科学院物理研究所获得博士学位（导师胡勇胜研究员）；2019 年至 2022 年在中国科学院物理研究所从事博士后研究（合作导师胡勇胜研究员）；2022 年 5 月至今担任中国科学院物理研究所特聘研究员，博士生导师，长三角研究部科学家工作室主任，钠离子电池公共技术平台副主任，党支部书记。主持国家优秀青年科学基金项目、北京市杰出青年科学基金项目。以第一/通讯作者在 *Science*、*Nature Energy*、*Nature Sustain.*、*Joule*、*Nature Commun.*、*Natl. Sci. Rev.*、*J. Am. Chem. Soc.*、*Energ. Environ. Sci.*、*Adv. Mater.*等国际重要学术期刊上发表论文 30 余篇，申请发明专利 30 余项（授权 9 项）。

附：报告人不是学生

钠离子电池电极材料的创新设计与性能优化

王宝 [1]

[1] 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: baowang@ipe.ac.cn

摘要正文：

本报告介绍关于钠离子电池电极材料的研究成果。采用纳米板前驱体制备的P2型$Na_{0.6}Li_{0.07}Mn_{0.66}Co_{0.17}Ni_{0.17}O_2$ 在5C的高电流下提供了87mAh g^{-1}的容量，并且在100次循环后的容量保留率为81%。在此基础上，将Cu、Ag、Au、 Sc、Ti、V、Cr、Fe、Cu和Zn元素掺杂到P2层状$Na_{0.5}Li_{0.07}Mn_{0.61}Co_{0.16}Ni_{0.16}O_2$材料中, 降低$Na^+$迁移的能垒从而提高了电极的容量、循环能力和倍率性能。此外，我们过静电纺丝结合原位喷涂技术制备了MnO_2纳米片涂覆的碳纳米纤维自由支撑薄膜，该材料表现出优异的循环稳定性和容量保持能力；通过受限迭代自组装策略合成了超厚自由支撑电极，厚度达1500 μm，具有垂直排列的通道结构和嵌入1T-MoS_2纳米片，实现了高面积容量的钠离子存储；研究了CO_2蚀刻对硬-软碳复合材料基自由支撑厚电极的影响，通过调整微晶结构改善了锂和钠的存储性能。这些研究为开发高性能储钠材料提供了思路。

关键词：钠离子电池；层状氧化物；静电纺丝；硬-软碳复合材料

报告人简介：

王宝，男，博士，中国科学院过程工程研究所、生化工程国家重点实验室研究员。2016 年入选中科院率先行动“百人计划”入所工作。已发表 SCI 论文 90 余篇。申请美国发明专利 2 项，授权 1 项；申请中国发明专利 20 项，授权 7 项。主持国家自然科学基金面上项目 2 项、中科院百人计划项目 1 项、企业横向项目 20 余项，参与自然基金委重点国际(地区)合作研究项目 1 项、国家重点研发计划-变革性技术关键科学问题重点专项 1 项、地区合作基金 1 项。国家重点研发计划“储能与智能电网技术”和“新能源汽车”项目会评专家。

附：报告人不是学生

无负极钠电池技术进展

王海燕 [1]

[1] 中南大学，湖南省长沙市麓山南路 932 号，410083

*Email: wanghy419@csu.edu.cn

摘要正文：

相比锂离子电池，钠离子电池在资源、成本、安全、功率性能、低温性能等方面都具有较大优势，且生产工艺兼容，可与锂离子电池形成互补，在两轮车、短程动力、混合动力、储能领域、工程装备领域应用前景广阔。但是钠离子电池能量密度偏低，为了开拓更广阔的应用空间，开发高比能钠电池是目前学术界和产业界关注的热点。因石墨和硅碳不能作为储钠负极，且主流硬碳材料仍面临成本较高，首次库伦效率和动力学性能较低，电芯胀气等问题，负极被认为是目前制约钠电产业发展的关键瓶颈。采用钠金属负极可构建高比能钠电池，但目前缺乏成熟的超薄钠箔生产工艺及相关电池制造技术，传统钠金属电池不具备商业前景。无负极钠电池直接使用改性的集流体，不需要负极活性材料，钠在集流体上直接沉积剥离，该技术可解决传统钠金属电池的痛点，能量密度更高，安全性更好，是非常有潜力的下一代电池技术[1]。然而，无负极钠电池负极界面存在严重的钠枝晶生长、死钠残留和不可逆 SEI 形成等问题，导致容量快速衰减。构建稳固的亲钠负极界面有望解决无负极电池存在的低沉积/剥离效率和钠枝晶等难题。我们团队近年来围绕集流体界面和电解液调控，致力于长寿命高比能无负极钠电池的开发。采用磁控溅射技术构建了亲钠且稳定的合金化界面，深入探究了亲钠界面的合金化程度、可逆性和体积变化等因素对钠沉积/剥离过程的影响规律，表征了合金化亲钠界面衍生的 SEI 膜的化学组分、微观结构和空间分布信息，建立了亲钠界面层结构-钠沉积行为及其衍生的 SEI 之间的相互关系，揭示了无负极钠电极集流体界面的稳定化机制[2]。

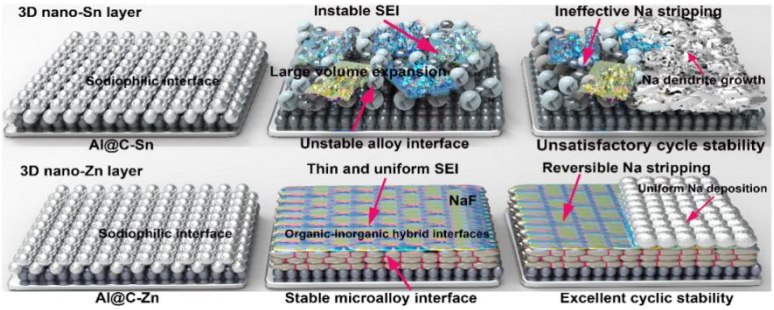


Fig. 1 The correlation between alloying behaviour and the evolution of interfacial structure

关键词：无负极钠电池；界面稳定性；固态电解质界面相；合金化反应；亲钠性

报告人简介：

王海燕，中南大学化学化工学院教授，博士生导师，国家级青年学者，国际先进材料协会会士，香江学者，湖南省科技创新领军人才。近年来一直从事新能源材料、电池器件及资源绿色循环研究。目前以第一或通讯作者在 Nat. Commun., Angew. Chem. Int. Ed., Adv. Mater.等国际知名期刊发表论文 180 余篇，论文已被他引 1.4 万余次，H 指数为 68。获授权国家发明专利 20 余项。获湖南省自然科学二等奖，重庆市科技进步一等奖等。曾获评 2023 中国高被引学者，中国化工学会侯德榜科技青年奖，全球华人化工学会“未来化工学者”奖，湖南省首届“我最喜爱的青年教师”等荣誉。

附：报告人不是学生

钠离子电池层状正极材料体相与界面稳定性研究

王鹏飞[1]

[1]西安交通大学，陕西省西安市咸宁西路 28 号，710049

*Email: pfwang@xjtu.edu.cn

摘要正文：

近年来钠离子电池由于丰富的钠资源和成本低廉的钠盐等显著优势，有望在低速电动车、新能源电站、通信基站等领域实现广泛应用。作为限制钠离子电池能量密度的关键组成部分，高性能正极材料的研发极为重要。层状氧化物正极材料比能量高、制备工艺简单、环境友好，是目前最有希望实现商业化的一类正极材料。高比能层状氧化物材料在电池深度充放电过程中往往存在复杂的相变行为、晶格氧不可逆反应以及界面不稳定问题。本报告主要围绕钠离子电池层状氧化物正极材料的体相结构与界面等基础科学问题展开，研究这类正极材料电化学反应过程中的储能机制，致力于实现高比能、高安全、高稳定的钠离子电池正极材料。

关键词：钠离子电池；层状氧化物；体相结构；界面

报告人简介：

王鹏飞，西安交通大学电气学院教授，博士生导师。近年来一直致力于钠离子电池关键材料领域研究，主持/参与过国家自然科学基金、国家重点研发计划、国家电网指南项目以及企业委托横向课题项目，迄今为止在 Science、Chem. Soc. Rev.、Nat. Energy、Sci. Adv.、Nat. Commun.、J. Am. Chem. Soc.、Adv. Mater.、Angew. Chem. In. Ed.等国际知名期刊上发表 SCI 论文 80 余篇，论文引用 10000 余次，h-index 为 50，出版电池材料方面英文专著章节，科技成果转化多项。http://ee.xjtu.edu.cn/info/1314/10353.htm

附：报告人不是学生

面向实用化的钠离子电池用复合磷酸铁钠正极材料的设计与优化

王亚平[1]

[1]江苏大学/湖州英钠新能源材料有限公司，江苏省苏州市姑苏区东环路 50 号，215021

*Email: wangyaping@ujs.edu.cn

摘要正文：

钠离子电池因其低成本、高安全性、良好的高低温性能而被认为是新型二次电池的重要发展方向之一，而正极材料则是其产业化应用不可或缺的一环。聚阴离子型复合磷酸铁钠正极材料因其低成本、长寿命、良好的结构稳定性和热稳定性，而成为当前钠离子电池正极材料主要选择。然而，其全面实用化还面临诸多的挑战。本次演讲就复合磷酸铁钠正极材料开发的进展进行汇报和探讨，重点介绍当前复合磷酸铁钠正极材料实用化的主要挑战及报告人的解决方案。

关键词：钠离子电池；复合磷酸铁钠；实用化挑战

报告人简介：

王亚平，江苏大学副教授、硕士生导师，湖州英钠新能源材料有限公司主要创始人、董事长、CEO，从事新型二次电池材料及其管理系统的开发与产业化工作 10 余年。承担或参与包括国家自然科学基金项目、江苏省工业支撑重点项目、江苏省成果转化项目、江苏省科技副总在内的国家、省部级项目 10 余项，发表 SCI 论文 30 余篇，授权国家发明专利 10 余项。2015 年入选江苏省“六大人才高峰”资助对象。

附：报告人不是学生

钠离子电池磷酸盐正极材料

吴兴隆[1]

[1]东北师范大学，吉林省长春市人民大街5268号，130024

*Email: xinglong@nenu.edu.cn

摘要正文：

在基于“摇椅式”储能机理的钠离子电池等碱金属离子电池中，电极材料（尤其是正极材料）对电池的存储特性起着关键性的作用。对于以共价性框架为主的磷酸盐正极材料，仍然面临着电子导电性差、工作电压偏低、实际循环寿命不够等挑战。本报告将讨论，针对钠离子电池中磷酸盐正极材料，通过晶格调控（高熵化、高电负性阴离子取代、同构阴离子掺杂、非等价态阳离子掺杂等）、精准碳网络构筑和阴阳离子接力复合材料设计等策略，实现的高电压和高能量密度、长循环寿命、优异倍率和宽温域工作等储能性能，并分析了其中涉及的提升机理。此外，针对磷酸盐正极基废旧锂离子电池，提出正/负极的同步再利用等新思路，实现了“变废为宝”的绿色回收与循环再利用。

关键词：钠离子电池；磷酸盐正极；晶格调控；碳网络构筑；复合材料

报告人简介：

（简介内容采用宋体五号字体）

吴兴隆，东北师范大学物理学院教授，教育部“青年长江学者”（2019年）、吉林省拔尖创新人才。主要从事先进二次电池材料、废旧锂电回收与再利用等研究工作。在化学、材料和环境等学科的国内外著名期刊发表了通讯作者论文＞220篇；论文被他人引用超过22000次，H指数为83；已获授权发明专利21项；主持了国家重点研发计划战略性科技创新合作重点专项、国家自然科学基金委重大研究计划和吉林省科技厅中青年科技创新人才团队等研究课题。获得吉林省自然科学奖二等奖（排名第一）、吉林省青年科技奖、中国化工学会侯德榜化工科学技术奖青年奖、中国颗粒学会青年颗粒奖等科技奖励和荣誉。

个人主页链接：

http://js.nenu.edu.cn/teacher/index.php?zgh=2013900130.

附：报告人不是学生

高比能钠离子电池层状氧化物正极关键材料研究

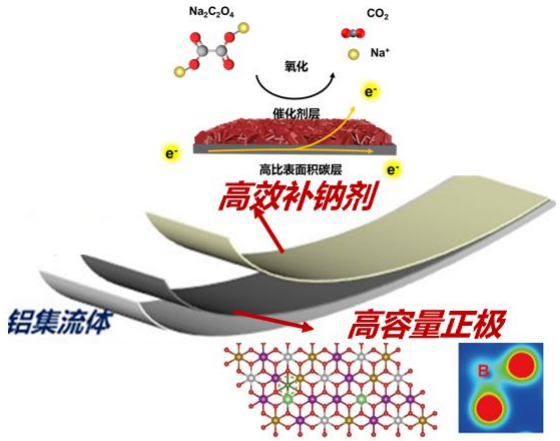
郭玉洁[1,*]，辛森[1,*]

[1]中国科学院化学研究所，北京市海淀区中关村北一街 2 号，100190

*Email: guoyujie@iccas.a.cn; xinsen08@iccas.ac.cn

摘要正文：

高效稳定的二次电池储能技术是实现碳达峰、碳中和国家发展战略规划目标的重要手段，是具有战略意义的关键支撑技术。钠离子电池因其低成本、高安全以及良好的低温适应性而备受关注。然而，较低的能量密度限制了其更广泛的应用。因此，开发高比能钠离子电池的关键电极材料对于推动其产业化和增强市场竞争力至关重要。在实际应用的过程中，高容量层状氧化物正极材料面临着不可逆相变以及界面失效等关键科学问题。同时，负极形成的SEI膜会消耗正极活性的钠离子，导致电池的能量密度降低。基于此，我们针对面向高比能钠离子电池应用的层状正极结构稳定性差以及全电池不可逆钠损耗等问题开展了系统研究。我们提出了轻质、高键强元素掺杂策略，设计合成了性能优异的高容量层状氧化物正极材料。进一步，从实验室克级出发，开展了公斤级、百公斤级放大制备工艺的持续优化，解决了放大制备过程的批次稳定性问题，实现了正极材料规模化稳定生产。此外，开发的高效正极补钠添加剂以及与全电池工艺匹配的补钠技术，解决了不可逆钠损耗的问题，大幅提升了钠离子电池能量密度。最终，实现了从材料到全电池能量密度的提升，以期推动钠离子电池的产业化发展。



高比能层状氧化物正极

关键词：钠离子电池；正极材料；补钠剂

报告人简介：

辛森，中国科学院化学研究所研究员，中国科学院大学岗位教授，博士生导师。主要研究方向为高比能金属二次电池储能电化学，界面化学以及同位素化学。发表专著论文 3 篇，SCI 论文 180 余篇，申请并获授权国内外发明专利共计 30 余件。2019-2023 年连续五年入选科睿唯安“高被引科学家”。兼职担任 Energy Materials 副主编，《中国科学：化

学》、eScience 等刊（青年）编委，中国电工技术学会储能系统与装备专委会委员、广西低碳能源材料重点实验室学术委员会委员等职务。获北京市自然科学奖一等奖（第二完成人），中国科学院引才计划终期评估优秀，中国化学会青年化学奖，中国电化学青年奖，中国化学会青委会菁青化学新锐奖，小米青年学者等学术奖项，承担项目包括国家引进青年人才计划项目，北京市杰青项目，国家重点研发计划课题等。

附：报告人不是学生

宽温区长寿命普鲁士白正极材料设计及发展趋势

尤雅 [1]

[1] 武汉理工大学，湖北省武汉市洪山区珞狮路 122 号，430070

*Email: youya@whut.edu.cn

摘要正文：

Prussian white (PW) is considered one of the most promising cathode materials for sodium-ion batteries because of its large ion diffusion channels, low lattice strain, facile preparation, non-toxicity, and low cost. At present, research on PW mainly focuses on optimizing the material structures for the ambient environment, yet less on its practical application under extreme temperatures. In this paper, we intend to offer a few progress we have made in developing PW cathode materials working over wide temperatures, in terms of intrinsic feasibility and development prospects. First, we will discuss the major challenge of PW cathodes in ambient temperatures and then extend the working scenarios to elevated and subzero temperatures. Then we will present a few design principles for PW cathodes and PW adaptive electrolytes and give our opinions on future development directions. These findings provide a direction to promote the practical viability of PW in a wide temperature range.

关键词： 钠离子电池；普鲁士白；宽温区；电解液

报告人简介：

尤雅，武汉理工大学教授，博士生导师。入选海外高层次青年人才项目，主持国家重点研发计划青年科学家项目、国家自然科学基金等多项课题。长期从事高性能普鲁士白正极材料设计及批量化制备，开发出“低缺陷无水”普鲁士白合成新方法，有效降低成本同时其循环稳定性也得到大幅提高。获 TR35 Asia Pacific 、 2024 Outstanding Early-Career Award of ACS Energy Lectureships 等奖项，以第一作者（包含共同一作）或通讯作者在 Nat. Commun.、Joule、Chem、Adv. Mater.、Angew. Chem. Int. Ed.期刊发表学术论文共计 70 余篇，总引用 10000 余次，H-index 为 44。共 12 篇文章入选 ESI 高被引论文，多篇论文入选封面论文、热点论文和 VIP 论文。获授权中国发明专利五项，合作撰写专著二部。个人主页链接 http://youbattery.cn/

附：报告人不是学生

钠金属负极界面改性设计策略

杨海[1]，余彦[1,*]

[1]中国科学技术大学，安徽省合肥市金寨路 96 号，230026

*Email: yanghai@ustc.edu.cn; yanyumse@ustc.edu.cn

摘要正文：钠金属电池具有理论比容量高和能量密度高等优点，是最具前景的储能技术之一。然而，钠金属负极材料在充放电过程中存在枝晶生长、电极界面固体电解质膜稳定性差以及体积膨胀大等问题，导致钠金属电池实际电化学性能和安全性能较差，限制了其商业化应用。针对上述问题，本报告将从三维导电骨架的设计、人工界面保护层的构筑以及电解液组分调控等角度讲述钠金属负极界面改性设计策略；进一步结合先进原位表征技术阐明钠金属离子在电极/电解质界面的传输机制以及钠金属负极表面的离子沉积行为，为发展高性能高安全的钠金属电池提供指导和借鉴。

关键词：钠金属电池；储能机理；钠枝晶；三维骨架设计；人工界面保护层

参考文献

[1] Yang, H.; He, F.; Li, M.; Huang, F.; Chen, Z.; Shi, P.; Liu, F.; Jiang, Y.; He, L.; Gu, M.; Yu, Y.* Design Principles of Sodium/Potassium Protection Layer for High-Power High-Energy Sodium/Potassium-Metal Batteries in Carbonate Electrolytes: a Case Study of Na2Te/K2Te. Adv. Mater. 2021, 33, (48), 2106353.

[2] Chen, Z.; Wang, L.; Zheng, J.; Huang, Y.; Huang, H.; Li, C.; Shao, Y.; Wu, X.; Rui, X.; Tao, X.; Yang, H.*; Yu, Y.* Unraveling the Nucleation and Growth Mechanism of Potassium Metal on 3D Skeletons for Dendrite-Free Potassium Metal Batteries. ACS Nano 2024, 18, (11), 8496-8510.

报告人/墙报展示人简介：

杨海，中国科学技术大学副研究员，近年来一直从事钠离子电池电极材料相关的研究工作。作为项目负责人，承担了国家自然科学基金青年科学基金项目、国家自然科学基金面上项目、博士后科学基金项目等项目，在 Adv. Mater., Adv. Funct. Mater.，Nano Lett.等期刊上发表 SCI 论文 10 余篇，授权发明专利 2 项

附：报告人不是学生

鹏辉能源钠离子电池在新型储能等等应用进展

张贵萍 [1]

[1]广州鹏辉能源科技股份有限公司，广州市番禺区沙湾镇市良路（西村段）912 号，511400

*Email: 13302989888@126.com

摘要正文：

1、前言--钠离子电池的前景与战略价值。2、鹏辉能源钠离子电池在储能应用的研究进展-首次报道：能量转换效率高，高低温性能好（不用液冷装置）3、现有钠离子材料及电池制作在锂离子电池生产线的适应性分析 (氧化物O3 /P2 、聚阴离子磷酸盐、硫酸盐等）。4、钠离子电池高能量转换效率的化学机理分析。5、钠离子电池硬炭负极材料应用测试情况。6、目前的钠离子电池具有竞争力的应用情况和发展方向。7、结论与发展方向。

关键词：钠离子电池；储能应用；适应性分析；机理分析；应用情况

报告人简介：

张贵萍，广州鹏辉能源科技股份公司研究院副院长， 教授级高工，清华大学深圳国际研究生院兼职指导教师，参与完成多项重大科技项目、多项国家标准制定，申请国内外专利 120 多项，发表论文二十多篇，研制了高能量密度锂离子电池（350Wh/kg）和高能效、低成本钠离子电池。

附：报告人不是学生

钠离子电池层状氧化物正极材料的设计及储钠机制

章根强[1]

[1]中国科学技术大学，安徽省合肥市金寨路 96 号，230026

*Email: gqzhangmse@ustc.edu.cn

摘要正文：

钠离子电池正极材料中，层状氧化物材料被寄予厚望。但这类材料也面临着一系列的科学问题，包括复杂的相结构相变、缓慢的钠离子扩散动力学、严重的界面副反应和界面重构、Mn3+的姜-泰勒效应等导致的电化学性能未能达到实用性要求。针对上述问题，课题组以形貌调控、离子掺杂、协同调控以及复合相构建等手段开展了一系列工作以改善层状氧化物正极材料的电化学性能。基于上述研究基础，我们创新性的开发了一种钠层和碱金属层双位点掺杂的层状氧化物正极材料，提升了该类正极在钠脱嵌过程中的结构稳定性，实现了其长循环寿命，达到了实用化要求。同时，基于该材料我们也进行了初步的产业化尝试。

关键词：钠离子电池；层状氧化物；正极材料；双位点掺杂；复合相构建

参考文献

[1] **B. Peng, G. Q. Zhang* et al. Unusual site-selective doping in layered cathode strengthens electrostatic cohesion of alkali-metal layer for practicable sodium-ion full cell. *Adv. Mater.* 2022, 34: 2103210.**

[2] **F. Wang+, B. Peng+, G. Q. Zhang* et al. Activating oxygen redox in layered Na_xMnO_2 to suppress intrinsic deficient behavior and enable phase-transition-free sodium ion cathode. *Adv. Funct. Mater.* 2022. 32: 2202665.**

[3] **B. Peng, G. Q. Zhang* et al. Dual-manipulation on P2-$Na_{0.67}Ni_{0.33}Mn_{0.67}O_2$ layered cathode toward sodium-ion full cell with record operating voltage beyond 3.5 V. *Energy Storage Mater.* 2021, 35: 620-9.**

[4] **L. Yu, G. Q. Zhang* et al. Nonmetal substitution in interstitial site of O3-$NaNi_{0.5}Mn_{0.5}O_2$ induces the generation of a nearly zero strain P2&O3 biphasic structure as ultrastable sodium-ion cathode. *Adv. Funct. Mater.* 2024, 2406771.**

[5] **S. Yin, G. Q. Zhang* et al. Constructing a size-controllable spherical P2-type layered oxides cathode that achieves practicable sodium-ion batteries. *ACS Appl. Mater. Interfaces.* 2024, 16: 26340-7.**

报告人简介：

章根强，中国科学技术大学教授，博士生导师，合肥微尺度国家科学研究中心双聘研究员，国家海外高层次人才，爱思唯尔中国高被引学者，中国材料学学会先进陶瓷分会委员，eScience，Infomat，SusMat 以及 Nano Research 青年编委。课题组致力于先进功能纳米材料的优化合成及其在能源器件中的应用研究，主要从事的研究方向包括能源存储器件电极材料的应用研究、高性能电催化剂的设计合成和新颖复合纳米结构在能源存储与转换领域中的应用研究。迄今为止，在 Nat. Commun.、Sci. Adv.、Adv. Mater.、Angew. Chem. Inter. Ed 等国际知名学术期刊发表 SCI 研究论文 150 余篇，论文他引超过 12000 次，H 因子 57。

附：报告人不是学生

钠离子固态电解质离子传导机制的研究

章志珍[1]

[1]中山大学，深圳市光明区新湖街道公常路66号，518107

*Email: zhangzhzh28@mail.sysu.edu.cn

摘要正文：

目前商业二次离子电池使用有机液态电解液而存在易燃易爆甚至起火等安全隐患。使用固态电解质替代液体电解液可以有效提升电池的安全性。固态电解质是固态电池最核心的组成部件，其性质从很大程度上决定了固态电池的循环稳定性和功率密度。

理解离子在固体材料中的输运行为及机制对于指导和设计新材料具有至关重要的意义。然而，目前对于影响离子传输性质的认识局限于晶体静态结构的特性，一般认为阴离子仅在平衡位置附近作热振动，阳离子在阴离子构成的静态骨架的间隙进行传导，而忽略了阳离子和阳离子之间的库伦排斥力以及阴离子骨架势能面的涨落对于阳离子传导的影响。本报告将着重讨论近年来利用第一性原理分子动力学结合键价理论、单晶X射线衍射、粉末中子衍射及最大熵法分析等来研究和探索晶体材料中阳离子输运的新机理，结合理论和实验理解固体材料中离子协同输运等关键科学问题，从而为设计新型快离子导体材料提供指导。

关键词：钠离子电池；固态电解质；阴离子骨架；离子协同输运

报告人简介：

章志珍，中山大学材料学院副教授，博士生导师，“百人计划”引进中青年学术骨干， 2022年入选广东省“珠江人才”计划, 2023年入选深圳市优青。主要研究方向涉及锂/钠离子电池关键材料、固态电池、第一性原理计算等。致力于离子在固体中输运机理的研究以及固-固界面扩散动力学的调控。结合原位和非原位实验技术和表征手段（包括单晶X射线衍射、中子衍射等）及密度泛函理论计算 (DFT)、从头算分子动力学 (AIMD) 模拟等理论方法，系统研究了不同类型固态电解质中离子的输运行为，从微观原子尺度理解固体材料中离子输运行为及跃迁机制，从而用来指导高性能快离子导体的设计。近5年来在国际重要学术期刊发表论文40多篇，其中一作/共同一作论文包括 Nat. Rev. Mater., J. Am. Chem. Soc., Energy Environ. Sci., Sci. Advance, Adv. Energy Mater., Matter 等。

个人主页：https://materials.sysu.edu.cn/teacher/295

附：报告人不是学生

钠离子电池动力学调控与抗衰减机制

赵玉峰[1]

[1]上海大学，上海市宝山区上大路 99 号，200444

*Email: yufengzhao@shu.edu.cn

摘要正文：

钠离子/金属钠电池因成本优势、低温性能优势等在大规模储能领域被寄予厚望，但其低温和高倍率性能低于预期。本文分别针对具有产业化前景的层状氧化物正极材料、硬碳负极材料、无负极钠电池界面调控等展开研究，实现了正负极材料的倍率性能和循环稳定性得到大幅提高。基于微量Nb掺杂的层状正极材料的半电池在室温下倍率性能高达50 C，在低温（-40 °C）容量保持率达室温的98%，可以稳定循环 1800 次。硬碳负极材料低温（-40°C）容量可达443 mAh/g，室温倍率可达117C。此外，构筑了高性能无负极钠电池，通过界面的自调节形成金属Mg亲钠层与热力学稳定NaF层的分层界面，实现了254.4 Wh/kg的能量密度（基于电极材料+电解液总质量计算）和良好的循环稳定性（100次循环后容量保持率达91.2 %）。

关键词：钠离子电池；层状氧化物；硬碳；无负极

报告人简介：

赵玉峰，上海大学可持续能源研究院教授、博士生导师，英国皇家化学会会士(FRSC)。研究领域：新能源材料与器件，包括钠离子电池、氢能的制备及应用、金属空气电池等。主持河北省杰出青年基金、国家自然科学基金、上海市科委“创新行动计划”高新技术领域专题、企业合作项目等多项科技项目等科技项目。获河北省自然科学一等奖、Nano Research 新锐青年科学家奖，入选上海市东方英才计划、河北省三三三人才工程等。迄今为止在 Nature Comm、Adv Mater、Angew Chem、PNAS、Energy Environ Sci 等期刊发表论文 190 余篇，申请国家发明专利 30 余项。
个人主页：http://www.polymer.cn/ss/yufengzhao/index.html

附：报告人不是学生

钠离子电池塑料类硬碳负极材料介绍和产业化进展

郑宏伟[1]

[1]珠海纳甘新能源技术有限公司，珠海市香洲区唐家湾镇金唐路 1 号，519085

*Email: 394929492@qq.com

摘要正文：

随着钠电产业的快速发展，国产化硬碳负极的产业化和规模化效应已经成为行业关注的核心问题。塑料类硬碳是以塑料为前驱的钠电硬碳负极材料，塑料原料纯度高、一致性好、来源广泛，塑料类硬碳成品价格低、一致性好、性能够用。塑料类硬碳是一类可以大规模产业化的硬碳，可以解决钠离子电池硬碳负极材料的瓶颈。本报告介绍塑料类硬碳的研发进展和产业化进展。

关键词：钠离子电池；硬碳负极；塑料

报告人简介：

郑宏伟，东北师范大学无机化学博士学位，清华大学化学系博士后，化工高级工程师。锂离子电池和钠离子电池材料专家，精通材料开发，生产线设计建造，工厂运营管理。曾在多家上市公司任职，现创办珠海纳甘新能源技术有限公司，从事钠离子电池塑料类硬碳负极材料的研发和产业化。

附：报告人不是学生

钠离子固态电解质的开发及应用研究

周龙捷[1]

[1]蓝固（常州）新能源有限公司，溧阳市昆仑街道创智路35号，213300

*Email: zhoulongjie@liongo.com.cn

摘要正文：

蓝固新能源针对商业化层状氧化物和聚阴离子钠离子电池体系，展开了电解液、原位固态化电解质和固态电解质的开发和应用研究。针对钠离子电池在二轮车、A00车、家庭储能、大规模储能等应用场景，蓝固新能源基于原有的液态电解液研究的基础上，针对钠离子电池的安全问题、产气问题、析钠问题，展开钠离子固态电解质的正负极掺混、隔膜涂覆、原位固态化的半固态钠离子电池研究。

关键词：钠离子电池；电解液；原位固态化电解质；固态电解质

报告人简介：

周龙捷，蓝固新能源研究院院长。清华大学博士，德国马普金属研究所和斯图加特大学访问学者；拥有20多年的行业经验，曾在德资博世集团、蜂巢能源科技有限公司和德资肖特玻璃集团等国内外知名公司担任要职。专注于锂离子电池和钠离子电池的电解质研究，涵盖固态电解质、混合固液电解质以及新型电解液的研发。发表了学术论文约40篇；已申请专利101项，获授权66项，其中发明专利53项。曾获中国国家技术发明二等奖，上海市长宁区专业技术拔尖人才，2023年度江苏省“双创”人才计划和常州市“龙城英才计划”领军型创新人才等荣誉，承担国家重点研发计划“战略性科技创新合作”重点专项任务负责人，国家技术攻关与产业化项目任务负责人。

附：报告人不是学生

聚合物基固态电池关键材料

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: zhouwd@mail.buct.edu.cn

摘要正文：

目前发展聚合物基固态锂电池的关键问题主要包括（1）如何提高聚合物电解质本身的导离子率，并拓宽其电化学窗口,（2）如何改善固态电解质与金属锂以及正极材料的界面稳定性。针对这两个挑战，报告人近年来致力于开发高电压稳定的聚合物电解质、“多层复合固态电解质”的结构设计、多层复合隔膜、单晶正极材料制备等方面的研究，揭示了聚合物结构和电化学性质之间的构效关系，提高了聚合物电解质的导离子率，并改善了与锂金属之间的界面接触，减小了界面电阻，抑制了锂枝晶，有助于兼容高电压的正极材料和低电势的锂金属负极，并对聚合物基固态锂电池的回收再利用进行了探索。

关键词：固态电池；聚合物基固态电解质；电池回收；单晶正极

报告人简介：

周伟东，北京化工大学教授，先后师从于中科院院士李玉良研究员、美国科学院院士 Hector Abruna 和 “锂电池之父”“诺贝尔奖”获得者 John Goodenough 教授。并先后任职于美国通用汽车研发中心和美国 A123 Systems 公司。目前主要从事于聚合物基高电压固态电解质和高镍单晶正极材料的研究。近 5 年来多项研究成果发表在 Nat. Sustain., JACS, Angew. Chem. Int. Ed., Adv. Mat., Acc. Chem. Res.等著名期刊,他引超过 12000 次。主持和参与国家自然科学基金重点项目、面上项目、国家重点研发计划、科技部国际合作项目、北京市科委项目等纵向项目，并与国际知名企业如 BASF、ATL 等展开多项横向合作。

附：报告人不是学生

碳材料的结构调控及其在碱金属离子电池中的应用

贾怡然[1]，张一波[1,2]，褚悦[1,2]，陶莹[1,*]，杨全红[1,2,3,*]

[1]天津市先进碳与电化学储能重点实验室，天津大学化工学院，天津，300072

[2]物质绿色创造与制造海河实验室，天津，300192

[3]天津大学-新加坡国立大学福州联合学院，福建 福州，350207

*Email: yingtao@tju.edu.cn；qhyangcn@tju.edu.cn

摘要正文：随着传统化石能源结构的安全和环保压力日益加重，迫切需要发展大规模可再生能源的存储技术。电化学储能是可再生能源存储的一种重要方式。碱金属离子电池是近几年发展最快的电化学储能技术，有效对接了新型电力系统的碳达峰、碳中和目标。碳材料作为关键负极，结构多样，可灵活适配各类碱金属离子电池的应用场景，但其微观结构的复杂性阻碍了对碱金属离子电荷存储机制的理解。由于碳分子筛独特的孔口尺寸可精确分离氮气和氧气，我们将商用碳分子筛（CMS）作为负极首次应用于钠离子电池中，筛分离子和溶剂，实现了高效的脱溶剂化。此外，我们团队发展了以孔口收紧、孔腹增大为特征的筛分型碳，作为超高容量碱金属离子存储的理想负极构型。通过对筛分型碳高度发达的纳米孔的调节设计，我们揭示了负极闭孔结构与低电位平台相关的储存机制，并指导设计出了可逆容量超过400 mAh/g、初始库仑效率接近80 %的创纪录高平台容量碳负极，对于加速钠离子电池的商业化至关重要。除了孔结构外，碳负极材料的微晶结构也会影响碱金属离子电池的动力学特性。在钾离子电池中，石墨有限的层间距（3.35 Å）抑制了钾离子的固态扩散动力学，导致石墨负极的循环稳定性和倍率性能较差。我们团队从微纳米结构角度，探究如何实现快速的固相离子传输。通过高温处理不同的非石墨碳材料，将石墨晶域的尺寸控制在合适的尺寸范围（L_a=70-165 nm, L_c=28-35 nm），最终发现中等尺寸的离散石墨域提供短程的固相传输通道和可及的离子插层位点，能快速生成KC_8，同时提高钾离子电池碳负极的平台容量和倍率性能。

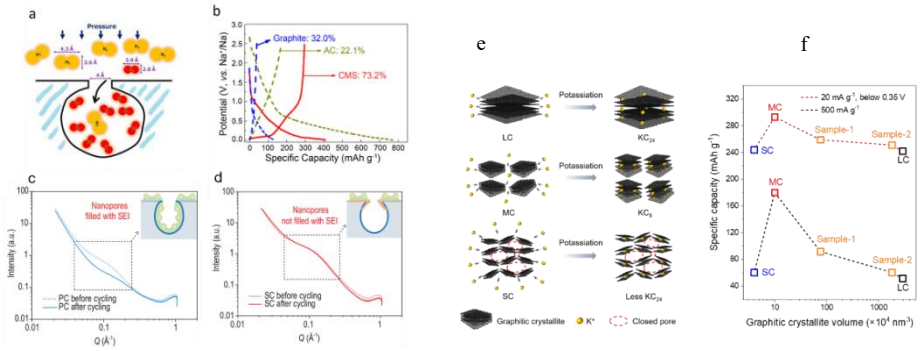


Fig. 1 Pore structure modulation and microcrystal of carbon anodes: a. Schematic diagram of commercially available carbon molecular sieves; b. Comparison of sodium storage properties of carbon molecular sieves with activated carbon and graphite [1]; c, d. Comparison of small-angle X-ray scattering spectra before and after cycling of porous and sieving carbons [2]; e. Microcrystalline structure of carbon anodes modulation [3]; f. Graphite domain discretization strategy to optimize solid-phase potassium ion transport [3].

关键词：钠离子电池；钾离子电池；筛分型碳；晶域结构；闭孔结构

参考文献

[1] **Zhang S, Lv W, Luo C, et al. Commercial carbon molecular sieves as a high performance anode for sodium-ion batteries. Energy Storage Materials, 2016, 3: 18-23.**

[2] **Li Q, Liu X, Tao Y, et al. Sieving carbons promise practical anodes with extensible low-potential plateaus for sodium batteries. National Science Review, 2022, 9(8): nwac084.**

[3] **Li Q, Zhang Y, Chen Z, et al. Discrete graphitic crystallites promise high-rate ion intercalation for KC8 formation in potassium ion batteries. Advanced Energy Materials, 2022, 12(35): 2201574.**

报告人简介：

贾怡然，本科毕业于天津大学，天津大学在读博士生，师从杨全红教授。主要研究领域为碳基材料的结构设计与可控制备。

报告人是学生：贾怡然

Electrolyte Design with Dual -C≡N Groups Containing Additives to Enable High-Voltage $Na_3V_2(PO_4)_2F_3$-based Sodium-ion Batteries

Mingqin Jiang[1,2] · Tianyu Li[1] · Yanling Qiu[1] · Xin Hou[1,2] · Hongzhen Lin[3,*] · Qiong Zheng[1,*] · Xianfeng Li[1,*]

[1] Division of Energy Storage, Dalian National Laboratory for Clean Energy, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, 457 Zhongshan Road, Dalian 116023, China

[2] School of Chemistry and Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

[3] i-Lab, CAS Center for Excellence in Nanoscience, Suzhou Institute of Nano-Tech and Nano-Bionics, Chinese Academy of Sciences, Suzhou 215123, China

*Email: hzlin2010@sinano.ac.cn; zhengqiong@dicp.ac.cn; lixianfeng@dicp.ac.cn

$Na_3V_2(PO_4)_2F_3$ is recognized as a promising cathode for high energy density sodium-ion batteries due to its high average potential of ~3.95 V (vs. Na/Na^+). High voltage resistant electrolyte is of highly importance due to the long duration of 4.2 V (vs. Na/Na^+) when improving cyclability. Herein, a targeted electrolyte containing additives with two -C≡N groups like succinonitrile has been designed. In this design, one -C≡N group is accessible to the solvation sheath and enable the other -C≡N in dinitrile being exposed and subsequently squeezed into the electric double layer. Then the squeezed -C≡N group is prone to a preferential adsorption on electrode surface prior to the exposed $-CH_2/-CH_3$ in Na^+-solvent and oxidized to construct a stable and electrically insulating interface enriched $CN^-/NCO^-/Na_3N$. The $Na_3V_2(PO_4)_2F_3$-based sodium-ion batteries within high-voltage of 2-4.3 V (vs. Na/Na^+) can accordingly achieve an excellent cycling stability (e.g., 95.07% reversible capacity at 1 C for 1,5-Dicyanopentane, and 98.4% at 2 C and 93.0% reversible capacity at 5 C for succinonitrile after 1000 cycles). This work proposes a new way to design high-voltage electrolyte for high energy density sodium-ion batteries.

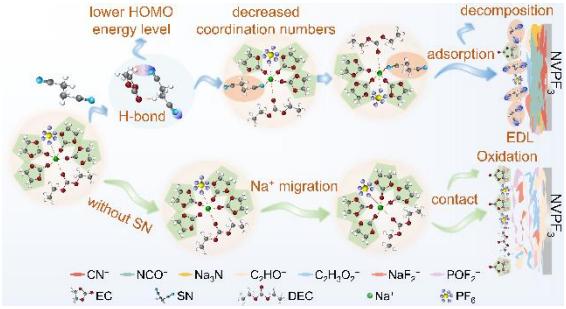


Fig. 1 Schematic illustration of achieving high-voltage stability of $NVPF_3$ by introducing dual -C≡N groups containing additives in electrolyte.

Keywords: sodium-ion battery, $Na_3V_2(PO_4)_2F_3$, high-voltage electrolytes, solvation structure, cathode-electrolyte interface

References

[17]Jiang, M.; Li, T.; Qiu, Y.; Hou, X.; Lin, H.; Zheng, Q.; Li, X. Electrolyte Design with Dual −C≡N Groups Containing Additives to Enable High-Voltage $Na_3V_2(PO_4)_2F_3$-Based Sodium-Ion Batteries, Journal of the American Chemical Society 2024, 146 (18), 12519-12529.

报告人简介：

江明琴，2016 年 9 月-2020 年 6 月就读于中国海洋大学化学工程与工艺专业，于 2020 年 6 月获工学学士学位。

2020 年 9 月至今，于中国科学院大连化学物理研究所攻读博士学位，在储能技术研究部（DNL17）进行学习，指导老师为李先锋研究员和郑琼研究员，主要研究方向为钠离子电池高电压电解液设计。

附：报告人为学生

新型电池材料的粒度表征方法开发

黎小宇[1*]，李蓓[2]

[1]马尔文帕纳科，上海市闵行区，邮编 201100

[2]马尔文帕纳科，上海市闵行区，邮编 201100

*Email: Sherry.li@malvernpanalytical.com

摘要正文：随着新能源电池技术的发展迅速推进，新型电池材料也不断地涌现，例如钠离子电池材料、新型负极材料和固态电解质等等。新型电池材料的研发往往伴随着对材料性能的高要求，这就要求有针对性地建立相应的质量标准和测试方法。而在商业化的过程中新型电池材料的质量控制也是极其关键的环节。粒度分布是电池正负极材料和各项原材料质量控制中一项非常重要的检测项目，粒度大小和配比会影响电池内部的颗粒的填充密度和孔隙度，影响电池反应活性、容量和循环耐久性[1] [2]。激光粒度仪是检测电池材料粒度分布普遍使用的设备，通过适当的方法获得电池生产中的各类原材料、中间体和正负极粉体浆料的粒度分布和粒度特征值，具有统计性好、效率高、结果稳定易于对标等优点。但是不同材料溶解性、分散性差别迥异，粒度表征设备和方法的选择必须根据材料性能选择和优化。本文以几种新型电池材料的粒径测试方法开发举例，说明粒度仪软硬件选择对不同物性材料粒度表征的关键影响。

关键词：钠电正极；固态电解质；硬碳；激光衍射法；粒度方法开发

参考文献

[1] Eva Schlautmann, Alexander weiβ, Oliver Maus, et al., Impact of the Solid Electrolyte Particle Size Distribution in Sulfide-Based Solid-State Battery Composites[J]. Advanced Energy Material, 2023, Volume 13, Issue 41.

[2] Jun Zhao, Chao Zhao, Jianping Zhu, et al., Size-Dependent Chemomechanical Failure of Sulfide Solid Electrolyte Particles during Electrochemical Reaction with Lithium[J]. Nano letters, 2021, Volume 22, Issue 1.

报告人简介：

黎小宇，马尔文帕纳科亚太卓越应用中心实验室主管，粒度及粒型分析高级应用专家。2008 年毕业于华东师范大学分析化学专业，同年进入马尔文应用实验室工作。拥有十五年粒度、粒形的售前测样、售后应用和技术支持经验。

附：报告人不是学生

钠离子电池正极材料空气稳定性研究

李心愉[1]，潘慧霖[1,*]

[1]浙江大学化学系，浙江省杭州市西湖区浙江大学紫金港校区海纳苑 5 幢，310058

*Email: 12237054

摘要正文：钠离子电池性能衰退和材料的失效过程是一个多尺度、多元系统的变化过程，合理又系统地认识正极材料的结构特点以及结构-性能构效关系是多样化完善钠离子电池电极的必要途径，也是促进钠离子电池产业化的重要环节。

基于上述了解，本次报告的主要内容围绕钠离子电池两大关键正极材料——O3相$NaNi_{1/3}Fe_{1/3}Mn_{1/3}O_2$和$Na_4Fe_3(PO_4)_2P_2O_7$（分别代表层状过渡金属氧化物和聚阴离子型化合物两类材料）展开，通过合理控制空气气氛下的湿度和样品暴露时间等条件，深入理解晶体结构在存储过程中的失效机制。对O3相$NaNi_{1/3}Fe_{1/3}Mn_{1/3}O_2$的研究结果发现，$CO_2$沿氧化物的（003）平面插入Na层，导致$Na_2CO_3$纳米片在过渡金属层之间初始生长，促使结构快速降解，表面出现裂纹。$NaNi_{1/3}Fe_{1/3}Mn_{1/3}O_2$的降解程度和途径可能与晶体取向、颗粒形态和环境湿度高度相关。对$Na_4Fe_3(PO_4)_2P_2O_7$空气稳定性的研究表明，Na^+、Fe^{2+}、PO_4^{3-}的脱出是由环境空气中的水分引起的，在空气暴露情况下颗粒表面形成复合非晶相和磷酸钠小晶体团簇。此外，在长时间的空气暴露期间，晶体磷酸钠逐渐富集。失效的正极材料表现出明显增大的充放电极化以及降低的可逆容量，通过合适的复烧条件可以恢复失效材料的晶体结构和电化学性能。

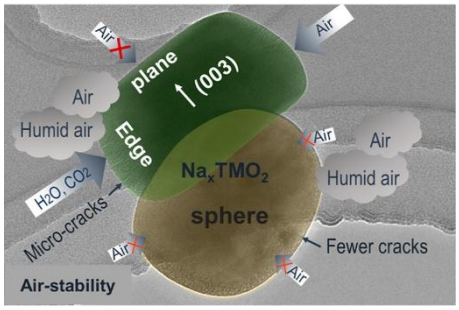


Fig. 1 Illustration of Na_xTMO_2 deterioration mechanism

关键词：钠离子电池；正极材料；空气稳定性

报告人简介：

姓名：李心愉 籍贯：浙江省温州市 电子邮箱：12237054@zju.edu.cn

2018.09-2022.06 浙江大学攻读化学学士学位

2022.09-至今 浙江大学攻读化学博士学位，主要研究方向为钠离子电池正极材料结构-性能构效关系及结构优化

附：报告人为学生

二维中空介孔碳纳米片的合成及其电化学储锂/钠性能研究

刘芝婷[1*]，蔡建钟[1]，梁嘉淇[1]，彭峰[1,*]

广州大学化学化工学院，广东省广州市大学城外环西路 230 号，510006

*Email: liuzt@gzhu.edu.cn；fpeng@gzhu.edu.cn

摘要正文：本课题组发展了一种具有二维片状结构的过渡金属羟基甲氧基化合物的可控制备方法[1-3]。在此基础上，我们以二维$Ni_{1/2}Co_{1/2}(OH)(OCH_3)$纳米片为模板，在表面包覆聚多巴胺后，进行焙烧碳化。在此过程中，$Ni_{1/2}Co_{1/2}(OH)(OCH_3)$拓扑转化为对应的氧化物纳米片，同时发生了局部碳热还原反应（）。酸洗模板后，得到了一种具有中空介孔结构的二维碳纳米片（HMCNPs），并且其孔结构可通过焙烧温度进行调控。通过考察不同孔结构和化学组成的HMCNPs的电化学储锂/钠性能，建立了结构组成与电化学性能间的构效关系，实现了高性能电化学储锂/钠（5A g^{-1}电流密度下循环4000/7000圈后，容量可达到300/210 mAh g^{-1}）。动力学研究表明，HMCNPs优异的储锂/钠性能缘于其独特的多级结构：①二维片状结构可增加材料与材料之间以及材料与电解液之间的接触面积，有利于电子和离子传递；②中空囊状结构的内外表面为电荷储存提供了较大的电极/电解液接触面积和丰富的活性位点并缓冲体积变化；③表面上大量的介孔有利于促进电解液渗透和离子扩散。利用引入硫原子制备硫氮共掺杂的S-HMCNPs。与HMCNPs相比，碳骨架中引入的硫原子不仅可以提升中空多孔碳的层间距和结构缺陷，还可为储锂/钠提供额外的活性位，因此S-HMCNPs的比容量和倍率性能均得到显著提高。在锂离子半电池测试中，S-HMCNPs在5 A g^{-1}下的可逆比容量从241.7 mAh g^{-1}提高至432.4 mAh g^{-1}，并且循环4000圈后可逆比容量仍高达356.9 mAh g^{-1}。尽管S-HMCNPs在钠离子半电池测试中的可逆容量在5.0 A g^{-1}时从186.3 mAh g^{-1}提升297.4 mAh g^{-1}，但S-HMCNPs在醚基电解液中循环时形成的多硫化钠会发生穿梭效应，导致电池失效。因此，如何减缓甚至抑制多硫化物的穿梭，是提供S-HMCNPs在醚基电解液中循环稳定性的关键。

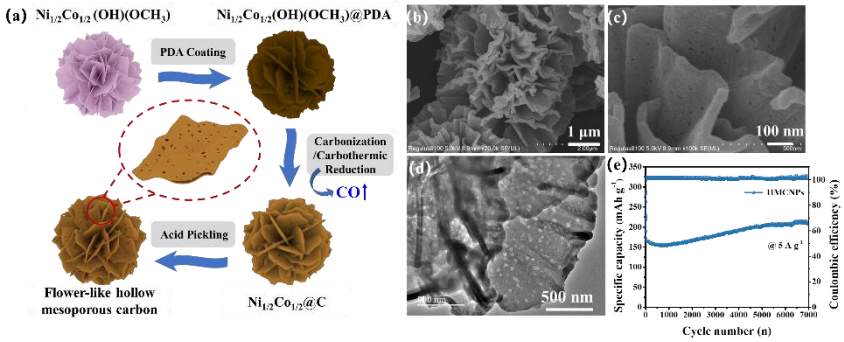


Fig. 1 (a) Scheme of the synthesis of HMCNPs; The (b, c) SEM and (d) TEM images of HMCNPs; (e) The cycling performance of HMCNPs

关键词：锂/钠离子电池；负极材料；多孔碳；二维纳米片

参考文献

[1] [1] Y.Y. Cui, X.J. Chen, J.Q. Liang, Z.T. Liu, G.X. Yang, Q. Zhang, H.S. Fan, F. Peng, X.Z. Duan, Boosting pseudocapacitive sodium storage while restraining the shuttle effect of polysulfides in holey nickel disulfide nanoplatelets by a polypyrrole-coating strategy, Appl Surf Sci 669 (2024) 160524.

[2] M.H. Zhang, H. Xie, H.S. Fan, T.C. Zeng, W. Yang, W.Z. Zheng, H. Liang, Z.T. Liu, Two-dimensional carbon-coated CoS2 nanoplatelets issued from a novel Co(OH)(OCH3) precursor as anode materials for lithium ion batteries, Appl Surf Sci 516 (2020) 146133.

[3] Z.T. Liu, P. Ma, J. Ulstrup, Q.J. Chi, K.K. Zhu, X.G. Zhou, New class of two-dimensional bimetallic nanoplatelets for high energy density and electrochemically stable hybrid supercapacitors, Nano Res 10(9) (2017) 3018-3034.

报告人简介：

刘芝婷，博士，硕士生导师，广州市高层次人才青年后备人才，广州大学化学化工学院化工系副系主任。硕博连读期间，在袁渭康院士和周兴贵教授的共同指导下，在华东理工大学化学工程联合国家重点实验室主要从事石墨烯及其氧化物表面结构和性质调控方面的研究工作。博士后期间主要从事电化学储能和催化方向的研究，在此期间前往丹麦技术大学 Jens Ulstrup 院士带领的电化学课题组交流学习，受邀参与了“欧盟框架 FP7—居里夫人行动计划”及丹麦科技创新署国际框架项目，研发国际领先水平的便携设备用高能量密度超级电容器。现在广州大学化学化工学院主要从事电化学储能材料研究，主持国家及省部级以上项目 4 项，市级项目 2 项。相关工作发表于 Energy & Environmental Science、Nano Research、Carbon 等 SCI 收录的国际刊物，获授权专利 7 项。

附：报告人不是学生

锰基 NASICON 型正极材料中的反占位缺陷

刘 渊

中国科学院物理研究所

联系方式：liuyuan192@mails.ucas.ac.cn

摘要——聚阴离子型钠离子电池正极材料由于其好的稳定性、高的安全性和可持续性，以及钠元素的储量丰富且成本低廉，有望满足大规模储能的应用需求。令人遗憾的是，受制于差的动力学，材料显示出有限的电化学活性。我们通过光谱、结构表征和理论计算，在富锰 NASICON 型材料中捕捉到本征反占位缺陷（IASD）。进而揭示了电压滞后的起因：Mn 阻断了 Na^+离子扩散通道，导致了滞后的 $Mn^{2+/3+/4+}$氧化还原反应，因此出现电压极化和容量损失。同时，探索了一种实用的策略来克服这种电压滞后现象，即通过在过渡金属位点掺杂 Mo 来调控缺陷形成能，从而降低缺陷浓度。这些结果对于理解更广泛的 NASICON 型阴极的失效机制具有重要意义，并为开发低成本和高能量密度电池提供了途径。

关键词：钠离子电池，聚阴离子型正极材料，电压滞后，反占位缺陷

刘渊，中国科学院物理研究所工学博士，师从胡勇胜研究员。主要从事低成本、高电压聚阴离子型正极材料及全固态电池体系的研究，曾以第一作者在 Nat. Energy, Energy Environ. Sci., Energy Storage Mater.等著名期刊上发表文章。

参考文献:

[1] **Liu, Y.**, Rong, X., Bai, R., Xiao, R., Xu, C., Zhang, C., ... & Hu, Y. S. Identifying the intrinsic anti-site defect in manganese-rich NASICON-type cathodes. **Nature Energy**, **2023**, 8(10), 1088-1096.

附：报告人不是学生。

超晶格结构调控实现高电压稳定的钠离子电池正极材料

冒黔江[1]，于洋[1]，张天然[1]，刘向峰[1,*]

[1]中国科学院大学材料科学与光电技术学院，北京市怀柔区雁栖湖东路1号，101408

*Email: liuxf@ucas.ac.cn

摘要正文：提高层状氧化物正极材料的能量密度对实现高性能的钠离子电池和促进其商业化应用具有重要意义。在高电压下晶格氧氧化还原通常可以提供更高的容量和能量密度。但是由于不可逆氧释放导致的结构退化、严重的电压衰减以及差的循环性能，严重制约了其实际应用。在该报告中，我们报道了具有Ribbon和Fence构型超晶格结构的两种O3型层状氧化物正极材料。相比于Li/TM无序构型及常见的Honeycomb（$\sqrt{3}a \times \sqrt{3}a$的晶胞）构型，由于其较宽的Li间距（Ribbon中为$\sqrt{3}a \times \sqrt{7}a$的晶胞，Fence中为$2a \times 3a$的晶胞），可以有效抑制高电压下过渡金属面内迁移产生的空位簇，进而显著减少晶格氧的不可逆释放，稳定了晶体结构。所报道的两种材料可以在4.4 V的高电压下实现正极材料的稳定循环。具有Fence构型超晶格结构的正极材料具有545 Wh kg^{-1}的高能量密度，5C电流密度下高达112.8 mAh g^{-1}的倍率性能和高的循环稳定性（1C时初始容量为148.6 mAh g^{-1}，200次循环后容量保持率为85.8%）以及可忽略的电压衰减（200次循环后的电压保持率为98.5%）。该报告为实现稳定的高电压层状氧化物正极材料提供了一种超晶格结构设计及调控的新策略。

关键词：钠离子电池；高电压；超晶格结构；O3型正极；晶格氧氧化还原

参考文献

[1] **R. A. House, U. Maitra, M. A. Pérez-Osorio *et al.* Superstructure control of first-cycle voltage hysteresis in oxygen-redox cathodes. *Nature* 2020, 577: 502-8.**

[2] **Q. J. Mao, J. C. Zhang, D. Wong *et al.* A Unique Wide-Spacing Fence-Type Superstructure for Robust High-Voltage O3-Type Sodium Layered Cathode. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, e202404330.**

报告人简介：

冒黔江，中国科学院大学材料科学与光电技术学院2022级博士研究生，研究方向为钠离子电池层状氧化物正极材料。

附：报告人是学生。

创新干法粒度分析技术在钠电与固态电池材料研究中的应用

耿建芳[1]，何梦春[1,*]

1．德国新帕泰克有限公司苏州代表处（SYMSINO），苏州，215123

*Email: Ghe@sympatec.com.cn

摘要

在电池材料的粒度分析领域，传统湿法分析技术不仅效率低，还涉及到复杂的样品准备和废液处理。随着钠离子电池与固态电池等新型电池技术的深入研究，对于硫酸盐、硫化物、卤化物等一类对水和空气湿度高度敏感的材料而言，湿法检测的局限性愈发显著。因此，迫切需要一种稳定、高效且具备高度可重复性的干法粒度分析技术。

德国新帕泰克公司凭借其粉体研究的技术背景，设计了独特的RODOS干法分散系统。该系统能够使干粉样品迅速分散成气溶胶形式的样品流，瞬时通过开放式的粒度分析测量区，从而快速获得材料的粒度大小与分布信息。本文将详细阐述该RODOS系统的技术原理，并提供实际应用案例，直观展示该系统相较于普通干法分散系统在解决钠离子电池与固态电池中特定材料分析难题上的具体表现。

在湿法粒度分析占主导的背景下，本文还深入探讨了干法与湿法粒度分析在方法开发、操作简便性、数据分析精度及环境友好性等方面的差异，全面、客观地评估两种分析技术在电池材料粒度分析中的适用性与局限性，为电池材料的粒度分析提供了新的思路与启示。

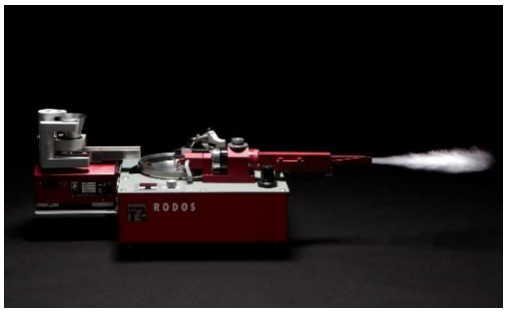


Fig. 1 RODOS classic with aerosol free jet

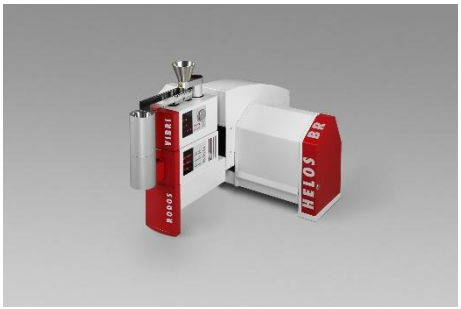


Fig. 2 RODOS/L disperser with HELOS laser diffraction

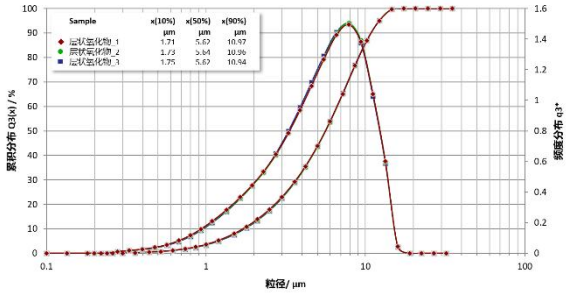


Fig. 3 Particle size distribution of layered oxide for sodium-ion battery

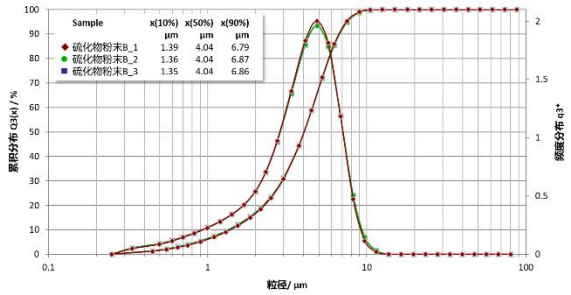


Fig. 4 Particle size distribution of sulfide electrolyte for solid-state battery

关键词： 钠离子电池；固态电解质；干法粒度分析；RODOS分散系统

参考文献

[1] ISO 13320:2020 - Particle size analysis - Laser diffraction methods

[2] Chinmay Ghoroi; Xi Han; Daniel To; Laila Jallo; Lakxmi Gurumurthy; Rajesh N. Davé; Dispersion of fine and ultrafine powders through surface modification and rapid expansion. Chemical Engineering Science 2013, 85: 11-24

[3]周静颖,胡晨吉,郜一蓉,等.全固态电池的研究进展与挑战——以表征技术和理论机制的突破推动全固态电池的原始创新[J].中国科学基金, 2023, 37(2):199-208.

报告人简介：

耿建芳，博士，1998 年于华东理工大学获工学博士学位，研究方向为新型陶瓷复合材料。2004 年加入德国新帕泰克公司，担任新帕泰克在中国代表处的首席代表，致力于激光光谱及超声检测在粒度、粒形与浓度等方面的综合应用。对于能源领域不同粉体、不同材料的粒度表征解决方案，具有丰富的技术背景和市场应用经验。

联系方式：18662608012

邮箱：Jgeng@sympatec.com.cn

附：报告人不是学生。

高压锰基正极材料及其宽温域储钠特性研究

沈杏 [1,2*]，王敬丰 [1,2]，潘复生 [1,2]

[1] 重庆大学材料科学与工程学院，重庆，400044

[2] 重庆新型储能材料与装备研究院，重庆，401135

*shenxing@bit.edu.cn

摘要正文：

P2-Na_xMnO_2 由于其良好的离子传输能力和较强的结构稳定性，在大规模储能领域得到了广泛关注。然而，由于 Mn^{3+}的 Jahn-Teller 效应和 4.1 V 以上有限的阴离子活度，在高能量密度和循环稳定性之间实现平衡仍然是较大的挑战。本文通过采用金属氟化物原位掺杂的方案，有效地促进了 Ni^{2+}/Ni^{4+}转化和氧氧化活性的提高，从而表现出较高的放电容量和结构稳定性，并将锰基氧化物的工作电位提高到 3.5 V。此外，材料在 0-55 ºC 宽温域内展现出优异的循环稳定性。同时，利用原位交流阻抗谱、原位 XRD 和非原位 XPS 技术研究了不同掺杂位点储钠机理的差异，证实了金属离子稳定结构和氟化提升工作电压的内在机制。这一工作对于同步提升 P2 型锰基材料的电化学/空气稳定性和宽温域离子传输具有一定的借鉴作用。

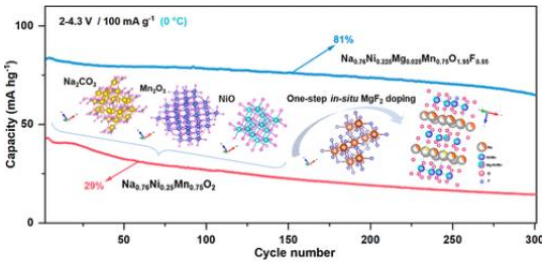


Fig. 1 The cycling stability of MgF_2-introduced P2 Mn-based cathode at low temperature

关键词： 锰基氧化物，阴阳离子协同效应，宽温域储钠性能

参考文献:

[1] Shunli He, Xing Shen, Yuefeng Su et al. High-voltage $Na_{0.76}Ni_{0.25-x/2}Mg_{x/2}Mn_{0.75}O_{2-x}F_x$ Cathode Improved by One-step In situ MgF_2 Doping with Superior Low-temperature Performance and Extra-stable Air Stability. ACS Nano, 2024, 18, 17, 11375-11388.

报告人简介：

沈杏，重庆大学/重庆新型储能材料与装备研究院副研究员。主要从事二次电池关键材料结构调控与性能强化研究。近年来，在 Nature Communications、Nano Energy、Advanced Science 等国内外高水平期刊发表 SCI 论文 20 余篇，申请发明专利 10 余项。主持国家自然科学基金、重庆市自然科学基金面上项目等 4 项，参与国家重点研发计划、重庆市科技攻关“揭榜挂帅”等项目 3 项。担任 Journal of energy storage 等期刊审稿人。研究成果获第一届中国博士后创新创业大赛创新赛优胜奖等奖项。

附：报告人不是学生

低成本高性能钠离子电池磷酸盐正极材料研究

徐春柳[1,2,3,*]，杨维清[1]，赵君梅[2]，胡勇胜[3]

[1]西南交通大学，四川省成都市二环路北一段 111 号，610031

[2]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

[3]中国科学院物理研究所，北京海淀区中关村南三街 8 号，100190

*邮箱: chunliuxuscu@163.com

摘要正文：铁基$Na_4Fe_3(PO_4)_2P_2O_7$（NFPP-4）磷酸盐是一种低成本且结构稳定的钠离子电池正极材料。然而，由于能量密度有限，它们的实际应用受到很大阻碍。为此，我们报道了一种新的铁基磷酸盐正极$Na_{4.5}Fe_{3.5}(PO_4)_{2.5}P_2O_7$（NFPP-4.5），它由水镁石型$NaFePO_4$（NFP）和正交晶系的$Na_4Fe_3(PO_4)_2P_2O_7$按照摩尔比为0.5:1异质共生而成。由于实现水镁石型NFP相的电化学激活，制备的NFPP-4.5复合材料的可逆容量超过130 mA h g^{-1}，能量密度达400 W h kg^{-1}，远远超单相NFPP-4约120 mA h g^{-1}的容量和350 W h kg^{-1}能量密度。此外，我们证实公斤级NFPP-4.5软包电池中在3 C下可获得超过2000次的稳定循环性能。

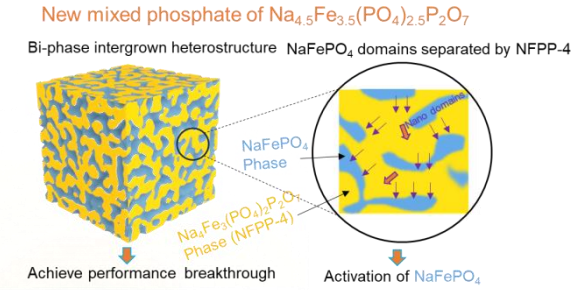


Fig. 1 Schematic illustration diagram of the NFPP-4.5 cathode with a two-phase intergrown heterostructure of NFP and NFPP-4.

关键词：钠离子电池；磷酸盐正极材料；$NaFePO_4$电化学激活；$Na_4Fe_3(PO_4)_2P_2O_7$

参考文献

[1] C. Xu, L. Zhou, T. Gao, Z. Chen, X. Hou, J. Zhang, Y. Bai, L. Yang, H. Liu, C. Yang, J. Zhao*, Y.-S. Hu; Development of High-Performance Iron-Based Phosphate Cathodes toward Practical Na-Ion Batteries. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146 (14): 9819–9827.

报告人简介：

徐春柳，西南交通大学特聘副研究员，独立 PI。主要从事化工新材料和电源化学的相关研究，包括钠离子电池聚阴离子化合物和普鲁士蓝类似物等正极材料的结构设计、可控合成、小试实验和工艺放大等内容。目前以第一/通讯作者身份在 Journal of the American Chemical Society, Angewandte Chemie International Edition 等期刊发表 SCI 论文 15 篇，引用 2900 余次，H 因子 28。主持/参与国家自然科学基金青年项目、中国博士后科学基金面上项目、科技部国家重点研发计划和中国科学院战略性先导科技专项等项目。担任 ACS Energy Letters，Inorganic Chemistry，ACS Applied Energy Materials 等杂志审稿人。

附：报告人不是学生

低阶煤灰分对其衍生硬碳结构及储钠性能的影响

陈佳宁[1]，郝健[1,*]

[1]宁夏大学，宁夏回族自治区银川市西夏区贺兰山西路489号宁夏大学贺兰山校区科技楼，邮编750021

*Email: haojian2017@126.com

摘要正文：

煤基硬碳材料具有短程碳微晶和较大层间距被认为是理想的钠离子电池负极材料之一。在传统碳化法中灰分作为杂质被首先去除，这不仅增加了制备步骤，还造成了一定的环境污染，煤灰分中的碱土金属氧化物可降低煤气化能垒，同时过渡金属氧化物具有催化石墨化作用。本文研究了宁夏不粘煤灰分对其衍射硬碳结构及性能的影响。模拟灰分添加实验显示，添加质量比为3：1的$CaO:Fe_2O_3$灰分后，经1300℃碳化2h样品在电流密度0.02 $A\cdot g^{-1}$时，可逆比容量为144 mAh g^{-1}。仅添加单一组分灰分$CaCO_3$和Fe_2O_3的样品，可逆比容量分别为201mAh g^{-1}和241mAh g^{-1}。可见灰分组分对石墨的形成具有显著影响。材料结构表征显示，Fe_2O_3样品富含大量的长程无序碳微晶结构，其中经$FeCl_3$ 催化辅助碳化的除灰煤样品石墨层间距为0.384nm，在电流密度0.02 $A\cdot g^{-1}$时，可逆比容量为283 mAh g^{-1}是除灰煤可逆比容量的1.2倍，原煤的1.1倍。首次库伦效率为66.58%相较于除灰煤提升1.2倍。可见， 煤中灰分可协同促进其衍射硬碳储钠性能提升，其中过渡金属氧化的影响最为显著。

关键词：低级煤　灰分　硬碳　催化碳化 钠离子电池

参考文献

[1] Liu Y, Tai Z, Rozen I, et al. Ion Flux Regulation through PTFE Nanospheres Impregnated in Glass Fiber Separators for Long-Lived Lithium and Sodium Metal Batteries[J]. Advanced Energy Materials, 2023, 13(24), 2204420.

[2] Zhu L, Xu K, Fang Y, et al. Se-Induced Fibrous Nano Red P with Superior Conductivity for Sodium Batteries[J]. Advanced Functional Materials, 2023, 33(33), 2302444.

报告人/墙报展示人简介：

学生：陈佳宁

学校：宁夏大学

年级：2023 级（硕士）

专业：化学工程与技术

课题方向：钠离子电池储能，负极材料

附：墙报展示人是学生

天然富含氮/磷生物细菌制备硬碳负极用于稳定长循环的钠离子电池研究

冯桂林[1,*]，刘小红[2]，徐春柳[1]，杨维清[1]

[1]西南交通大学，四川省成都市二环路北一段 111 号，610031

[2]成都理工大学，成都市成华区二仙桥东三路 1 号 ，610059

*邮箱: guilinf1993@outlook.com

摘要：硬碳由于原料来源广泛、活性位点多、储钠比容量高、安全性好等优势成为钠离子电池商业化中最有潜力的负极材料。然而，由于储钠机理不明、循环稳定性差和首圈库伦效率低等问题，硬碳的实际市场应用受到很大的阻碍。[1] 为此，我们研究了一种以生物细菌作为碳源制备硬碳材料。由于生物细菌天然富含氮、磷等元素，在硬碳煅烧过程中能均匀分布在材料表面或内部，有利于提高制备的硬碳材料的亲钠性。我们制备的氮/磷共掺的硬碳在0.1C下可逆容量能达到309 mAh g^{-1}（1C=300 mA g^{-1}），并在大电流密度下（10C）循环10000圈后仍有75%的保持率。此外，我们利用不同的煅烧温度，探究了硬碳的储钠机理。

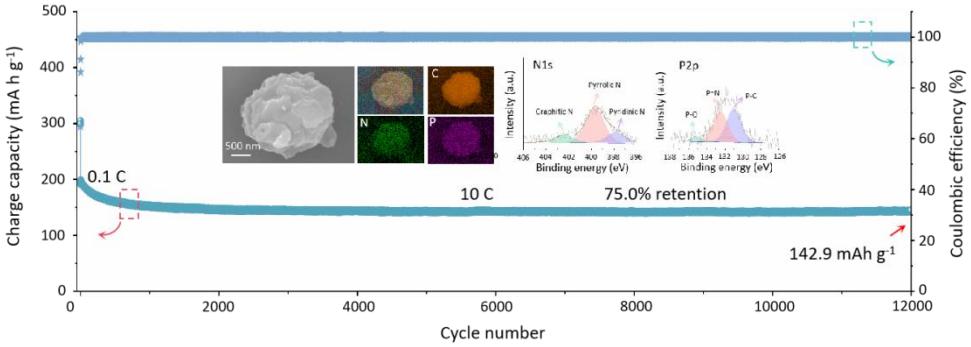


Figure 1 天然富含N/P生物细菌制备硬碳负极用于钠离子电池

关键词：生物细菌；氮/磷共掺；硬碳；循环性能；钠离子电池

参考文献

[1] Chu, Y.; Zhang, J.; Zhang, Y.; et al. Reconfiguring Hard Carbons with Emerging Sodium-ion Batteries: A Perspective. *Adv. Mater.* 2023, 2212186

墙报展示人简介：

冯桂林，西南交通大学前沿科学院博士后，博士毕业于日本北海道大学。主要从事拉曼技术对碳材料的物理/化学性质研究，包括石墨烯在激光照射下的光化学反应及能带工程、表面增强拉曼对碳材料表面小分子的监测，新材料用于硬碳负极等。目前以第一作者身份在 Nanoscale, Chemical Communications 等期刊发表多篇 SCI 论文。主持中国博士后面上基金项目。

附：墙报展示人不是学生

超稳定钠离子半/全电池的钴钼硒化物异质结构的构建

李军辉[1]，李宸宇[1]，何妍妍[1,*]，徐立强[2,*]，周国伟[1,*]

[1]齐鲁工业大学化学与化学工程学院，山东省济南市长清区大学路3501号，250353

[2]山东大学化学与化工学院，山东省济南市山大南路27号，250100

*Email: ljhyjs2022@163.com

摘要正文：过渡金属硒化物（TMSes）因相对高的理论容量被认为是钠离子电池（SIBs）负极的理想候选材料。然而，由于Na^+的扩散动力学缓慢而且充放电过程中体积变化剧烈，导致TMSes循环寿命较短。构建异质结构有利于促进Na^+的快速传输，提升结构稳定性[1]。并且引入碳质材料还有助于增强导电性和结构稳定性[2]。因此，我们构建了$CoSe/MoSe_2$双金属硒化物异质结构并与碳材料结合（$CoSe/MoSe_2$-C）。通过动力学分析和理论计算验证了由异质界面引起的内建电场效应有利于促进Na^+的扩散[3, 4]。通过电化学测试，$CoSe/MoSe_2$-C在2.0 A g^{-1}的电流密度下，经过10000次循环后可达320.9 mAh g^{-1}，平均容量衰减仅为0.01781 mAh g^{-1}。并且，该材料即使在10 A g^{-1}高倍率下仍能保持230 mAh g^{-1}。此外，还通过*in-situ* XRD、*in-situ* XPS和*in-situ* HRTEM探索Na^+的存储机制。此外，成功组装$Na_3V_2(PO_4)_3$@rGO//$CoSe/MoSe_2$-C软包全电池，可以安全有效点亮灯泡。这项研究为有针对性地设计TMSes提出了一种可行的策略，旨在提高SIBs的功效。

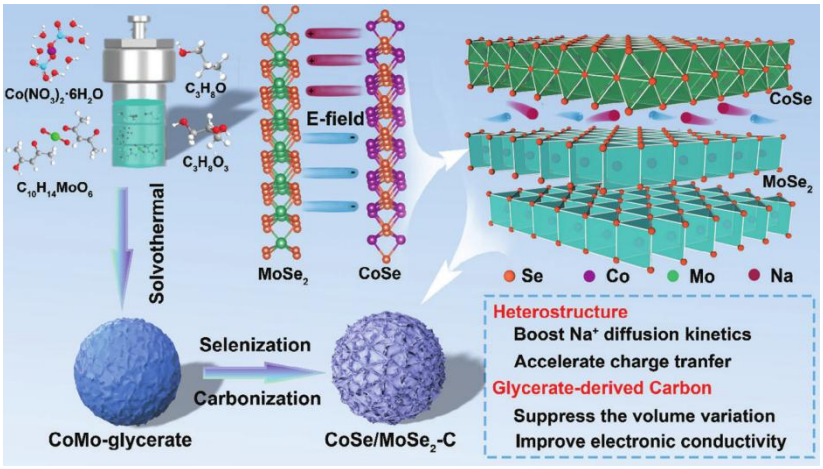


Fig. 1 The manufacture schematic illustration of the $CoSe/MoSe_2$-C heterostructure.

关键词：钠离子电池；双金属硒化物；异质结构；软包电池

参考文献

[1] **J. Li, Y. He, Y. Dai, H. Zhang, Y. Zhang, S. Gu, X. Wang, T. Gao, G. Zhou, L. Xu, Heterostructure interface construction of cobalt/molybdenum selenides toward ultra-stable sodium-ion half/full batteries. Adv. Funct. Mater. 2024, 2406915. https://doi.org/10.1002/adfm.202406915**

[2] **J. Yu, Y. He, J. Li, C. Dong, Y. Dai, T. Gao, X. Wang, K. Yue, G. Zhou, In-situ rooting biconical-nanorods-like Co-doped FeP@carbon architectures toward enhanced lithium storage performance, Chem. Eng. J, 2023, 477, 146996.**

[3] **H. Li, Y. He, X. Li, J. Yu, X. Sun, T. Gao, G. Zhou, Pomegranate-like Sn-Ni nanoalloys@N-doped carbon nanocomposites as high-performance anode materials for Li-ion and Na-ion batteries, Appl. Surf. Sci, 2023, 611, 155672.**

[4] **H. Li, Y. He, Q. Wang, S. Gu, L. Wang, J. Yu, G. Zhou, L. Xu, $SnSe_2/NiSe_2$@N-doped carbon yolk-shell**

heterostructure construction and selenium vacancies engineering for ultrastable sodium-ion storage. Adv. Energy Mater. 2023, 13, 2302901.

墙报展示人简介：

李军辉，齐鲁工业大学化学专业硕士研究生，以第一作者在 Advanced Functional Materials 期刊发表论文。申报专利两件。获得挑战杯校赛铜奖，中国国际大学生创新大赛省赛银奖。

附：墙报展示人是学生

PCM结晶监测系统在新能源（锂电）行业的应用简介

唐远旺[1]

[1] 北京海菲尔格科技有限公司，北京，100022

*thomas.tang@hiferg.com

新能源汽车的蓬勃发展带动锂电产业进入前所未有的大发展机遇期。随着需求的升温，无论是技术的快速创新，还是应用的迅速落地，锂电产业全链条展开了多技术路线、多应用模式、多组合方式的快速发展与探索。

在“双碳”愿景的推动之下，未来中国动力电池市场仍将出现快速增长，锂电相关产业对经济发展的提振效应会进一步释放。六氟磷酸锂、双氟磺酰亚胺锂、碳酸乙烯酯等的结晶过程中的成核、控温、搅拌等工艺参数的不同对产品的粒度分布、堆积密度、溶解速率等都具有重大影响，进而影响产品的应用范围、成本控制、能耗评估、出售价格等。PCM 结晶监测系统能够实现对六氟磷酸锂、双氟磺酰亚胺锂、碳酸乙烯酯等的结晶过程的实时监控并可根据监控结果实时调整过程工艺。PCM 可以实时记录结晶过程中的颗粒图像并实时分析晶体的颗粒度，同时给出晶体颗粒数量、晶体径长比、晶体生长速率等数据。不管是研发规格的还是工业规格的 PCM 结晶监测系统，都避免了取样后进行离线测试的不便和误差，可以真实反映结晶过程中晶体的变化情况，包括晶核形成、晶核数量、晶体生长、二次成核监控、过程颗粒度监控等。PCM 结晶监测系统已经成为获得高质量晶体产品、快速实现定制指定颗粒度晶体产品的有效手段。

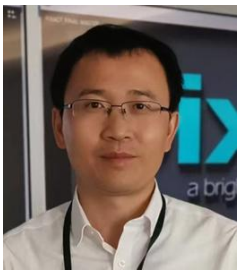
Fig 1. Process Crystallization Monitoring in R&D

Fig 2. Process Crystallization Monitoring in pipeline

Fig 3. Process Crystallization Monitoring in large crystallizer

关键词：结晶监测；六氟磷酸锂；双氟磺酰亚胺锂；碳酸乙烯酯；晶体颗粒度

墙报展示人简介：



唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器行业的技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

附：墙报展示人不是学生

天然气制乙炔副产炭黑结构改性及储钠性能研究

赵羽[1]，郝健[1,*]

[1]宁夏大学，宁夏回族自治区银川市西夏区贺兰山西路489号宁夏大学贺兰山校区科技楼，邮编750021

*Email: zy341326@163.com

摘要正文：

天然气裂解制备乙炔过程中会产生大量的炭黑，目前通常将其直接填埋或燃烧，造成资源浪费及环境污染。炭黑具有无定型碳结构且导电性良好，是一种潜在的钠离子储存材料，但副产炭黑石墨层间距较小且与溶剂的浸润性差，导致其储钠性能不佳。本文结合水热法及氧化改性法将副产炭黑改性为硬碳包覆类炭黑材料（CB@HB）。结果表明，氧化改性提升副产炭黑表面的含氧官能团数量，提升其在蔗糖水溶液中的分散性，在水热过程中蔗糖衍生碳可有效包覆于副产炭黑表面，同时含氧交联键在碳化过程中可抑制石墨微畴的形成，使得材料的石墨层间距从0.353 nm增大到0.384 nm。鉴于蔗糖衍生硬碳层的致密无序的碳结构减少了材料表面的缺陷位点，降低了Na^+的不可逆吸附，包覆后的材料初始库伦效率可以达到58 %（原始材料为15 %）。同时，材料扩大的石墨层间距降低了钠离子传输阻力，在0.03 A/g的电流密度下，材料的可逆容量可以达到211 mAh/g，且其平台容量高达105 mAh/g，比原始炭黑提高了57 %。本研究将副产炭黑应用拓展至储能领域，为副产炭黑回收资源化提供了新思路，可有效助力天然气化工及电化学储能的可持续发展。

关键词：副产炭黑；储钠性能；水热；硬碳层；固废资源化利用

参考文献

[1]徐莉华, 黄政, 张星, 等. 天然气制乙炔副产炭黑/白炭黑复合材料的制备与性能研究[J]. 无机盐工业, 2022, 54(5): 121-125.

[2]**ao L, Lu H, Fang Y, et al. Low-defect and low-porosity hard carbon with high coulombic efficiency and high capacity for practical sodium ion battery anode[J]. Advanced Energy Materials, 2018, 8(20): 1703238.

墙报展示人简介：

学生：赵羽
学校：宁夏大学
年级：2023级（硕士）
专业：材料与化工
课题方向：钠离子电池储能，负极材料
附：墙报展示人是学生

同步辐射软 X 射线散射方法在能源材料学科研究中的应用

周利民，陈振华，李海涛，邹鹰

zhoulm@sari.ac.cn

上海同步辐射光源

中国科学院上海高等研究院

摘要正文：

上海光源能源材料线站(E-line)软分支（BL20U2）是上海光源(二期)线站工程建设的线站之一，于 2023 年完成验收并正式对用户开放，为目前国内首个包含“两站三谱仪”的软 X 射线散射系统。线站所搭建的三台散射谱仪分别提供软 X 射线共振发射谱学（RXES），软 X 射线弹性散射(REXS)和有机材料软 X 射线共振散射(RSoXS)方法。其中软 X 射线共振发射谱站主要面向能源材料和催化方向，能量分辨率优于 0.1eV（65 meV@445eV），达到国际先进水平，能够对包括轻元素 C，N，O 等的 K 边和金属元素的 L 边和大部分过渡金属的 M 边进行共振吸收和发射谱研究，是探究能源材料尤其是锂/纳离子电池材料中的元素价态和电子结构变化的利器。

锂/纳离子电池的正极材料在充放电过程中，氧元素参与的氧化还原过程是研究热点之一，该过程若不可逆并伴随氧气析出，将会导致电池电压下降、层状结构失活及电池容量的快速衰减，软 X 射线共振发射谱学能够为该过程提供直接的元素价态变化等关键信息，为提高材料稳定性带来启发。目前本线站对于电池材料的软 X 射线散射表征技术已发展成熟，包括手套箱快速传样、样品自动化扫描、CCD 图像算法处理和高效率的元素二维能量 mapping 等。截止 2024 年本线站已经完成用户 26 个课题，提供用户机时 1368 小时，用户群体研究内容主要为电池材料和催化相关方向，目前已发表文章 2 篇一区文章(Angew. Chem. Int. Ed. 63, e202403521 (2024), Energy Storage Mater. 71, 103587 (2024))。线站欢迎具有电池材料领域重要研究价值体系的课题申请和合作研究，并积极为产业应用研究的企业用户提供高质量检测服务。

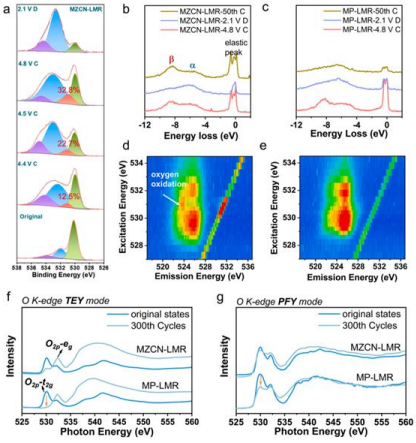


图 1 通过表面高熵策略提高富锂锰基氧化物正极的稳定性

参考文献

[1] **Gel’mukhanov, F., Odelius, M., Polyutov, S. P., Föhlisch, A. & Kimberg, V. Dynamics of resonant x-ray and Auger scattering. *Rev. Mod. Phys.* 93, 035001 (2021).**

[2] **Ament, L. J. P., van Veenendaal, M., Devereaux, T. P., Hill, J. P. & van den Brink, J. Resonant inelastic x-ray scattering studies of elementary excitations. *Rev. Mod. Phys.* 83, 705–767 (2011).**

[3] **Yang, W. Oxygen release and oxygen redox. *Nat. Energy* 3, 619–620 (2018).**

[4] **Yang, Y. *et al.* Enhancing the stability of Li-Rich Mn-based oxide cathodes through surface high-entropy strategy. *Energy Storage Mater.* 71, 103587 (2024).**

[5] **Li, Q. *et al.* Improving the oxygen redox reversibility of Li-rich battery cathode materials via Coulombic repulsive interactions strategy. *Nat. Commun.* 13, 1123 (2022).**

NASICON型磷酸盐正极材料的结构调控与性能优化

张旭升[1]，赵君梅[1*]

[1]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

*邮箱: jmzhao@ipe.ac.cn

摘要正文：

NASICON型磷酸盐$Na_3V_2(PO_4)_3$因其优越的电化学可逆性被认为是钠离子电池有前景的正极材料之一。然而，$Na_3V_2(PO_4)_3$中的高电压V^{4+}/V^{5+}氧化还原电对（4.0 V）难以被激活，导致其能量密度有限。为此，我们通过双金属（Al^{3+}和Fe^{3+}）取代策略成功地实现了$Na_3V_2(PO_4)_3$能量密度的显著提高，其中，Al^{3+}可以有效激活V^{4+}/V^{5+}氧化还原电对，Fe^{3+}的引入可以降低V^{4+}/V^{5+}激活过程中所需的能量来增加V^{4+}/V^{5+}平台的可逆容量。此外，Fe^{3+}通过降低带隙和Na离子扩散势垒来进一步优化材料的动力学特征和电化学性能。最终，设计的$Na_3V_{1.5}Al_{0.3}Fe_{0.2}(PO_4)_3$展现出399.7 Wh/kg的能量密度，高倍率性能（20 C下的比容量为106.8 mAh/g）以及优异的循环稳定性（10 C下循环8000次后的容量保持率为90%）。此外，我们实现了$Na_3V_{1.5}Al_{0.3}Fe_{0.2}(PO_4)_3$正极材料的公斤级制备，组装的18650型圆柱电池在0.5 C下循环400次后的容量保持率高达93%，表现出良好的应用前景。

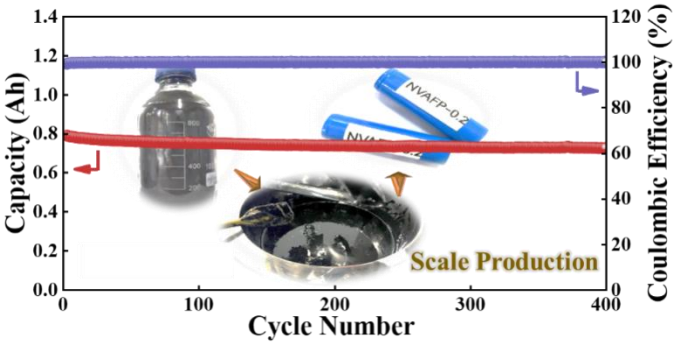


图1. $Na_3V_{1.5}Al_{0.3}Fe_{0.2}(PO_4)_3$的公斤级制备展示以及18650型圆柱电池的循环性能

关键词：磷酸盐正极材料；$Na_3V_{1.5}Al_{0.3}Fe_{0.2}(PO_4)_3$；高能量密度；长循环稳定性；Ah级钠离子电池

参考文献

[1] **Xusheng Zhang, Liwei Jiang, Chunliu Xu, Zhao Chen, Lin Zhou, Rongbin Dang, Junmei Zhao*, Yong-Sheng Hu; Designing high-performance phosphate cathode toward Ah-level Na-ion batteries.** ***Energy Storage Mater.*** **2024, 72: 103764.**

报告人/墙报展示人简介：

张旭升：中国科学院过程工程研究所在读博士研究生，研究方向为钠离子电池聚阴离子型正极材料的结构设计和性能优化，目前以第一作者身份发表SCI论文两篇。

附：墙报展示人是学生

表面残碱转变为固态电解质提升钠离子性能

许伟良， 胡勇胜*

天津工业大学，中国科学院物理研究所联合培养

Email：weiliang.xu@iphy.ac.cn

界面稳定一直是钠离子电池正极研究的重点，其中表面残碱（$NaOH/Na_2CO_3/NaHCO_3$）对其影响尤为严重。为了减少因表面残碱带来的严重副反应，我们提出了将表面残碱转变为固态电解质 $NaMgPO_4$ 的解决方案。此方法能将易与空气和电解液反应的残碱，转变为更稳定的 $NaMgPO_4$ 包覆层。$NaMgPO_4$ 界面层有效的改善了材料的电压滞后的问题，提升表面 Mn^{4+}的占比，减少了因 Mn^{3+}导致的 Jahn–Teller (J–T)效应的影响，减少过渡金属层的溶解，提升正极循环稳定性。改性后的材料与硬碳匹配，装配全电池 NMP@NCMT-2//HC，获得了 157.3 mAh/g 高放电比容量，316 Wh/Kg 高放电比能量密度，在 120 mA/g 的电流密度下，进行 300 次循环容量保持率为 70%。该工作为钠离子电池层状正极材料的界面问题提供了新的解决方案，为解决层状正极材料在高电压阶段结构不稳定提供了新的思路，将助力高能量密度钠离子电池的发展。

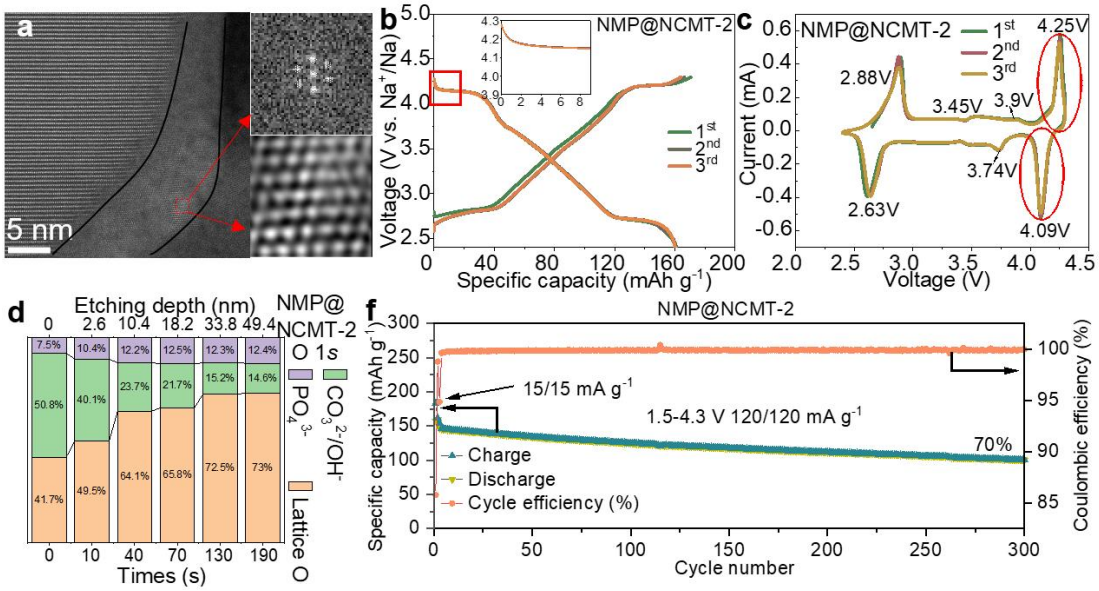


图 1 a. NMP@NCMT-2 的 STEM 图像，b. NMP@NCMT-2 的前三周恒电流充放电曲线图，c. NMP@NCMT-2 的前三周 CV 曲线图，d. NMP@NCMT-2 表面晶格氧和表面残碱随刻蚀时间的变化图，f. NMP@NCMT-2//HC 全电池循环点图

关键词：钠离子电池，层状氧化物正极，表面残碱，固态电解质

参考文献:

[1] **Xu, W.**, Dang, R., Zhou, L., Yang, Y., Lin, T., Guo, Q., et al. Conversion of Surface Residual Alkali to Solid Electrolyte to Enable Na-Ion Full Cells with Robust Interfaces. *Advanced Materials*, *35*(42), 2301314.

墙报展示人简介：

许伟良，天津工业大学在读博士生，与中国科学院物理研究所胡勇胜老师联合培养。主要针对“钠离子电池正极材料性能提升与界面改善”进行研究，并以第一作者在“Advanced Materials”和“物理学报”等期刊发表论文。

“四合一”策略全面提升 $Na_x[Ni,Mn]O_2$ 正极材料性能

张世光，胡勇胜

中国科学院物理研究所

Email：sgzhang@iphy.ac.cn Tel: 13784385903

摘要——层状氧化物通常易于可逆嵌入，近年来由于其作为阴极材料的商业化而引起了人们的兴趣。然而，这些材料需要克服的主要缺点是缓慢的动力学、复杂的结构畸变和较差的循环稳定性。为了解决这些问题我们提出了一种四合一修饰策略全面提升 $Na_x[Ni,Mn]O_2$ 材料的整体性能，结合钠空位调控、氧化还原电对取代、结构强化和形貌优化四个方面对 $Na_x[Ni,Mn]O_2$ 材料的电化学性能、能量密度和成本效益进行了全面提升。通过共沉淀法合成了 $Na_{0.86}Ni_{0.4}Mn_{0.4}Ti_{0.2}O_2$ 颗粒均匀的多晶，提升了材料的压实密度。钠空位拓宽了 Na^+扩散通道，实现快速的钠离子扩散动力学。原位 XRD 结果表明，在 Na^+脱嵌过程中，Ti^{4+}的引入改变了 TM 局部配位环境并抑制了 P'3-O3'的不可逆相变。XAS 结果表明，原始材料中部分 Mn^{3+}的存在，其氧化还原过程参与了电荷补偿并弥补了全电池阳极侧固体电解质界面（SEI）形成导致的钠损失。这种四合一策略具有操作简单和扩展性强的特点，为全面提高性能和改进钠离子电池正极材料提供了新的见解。

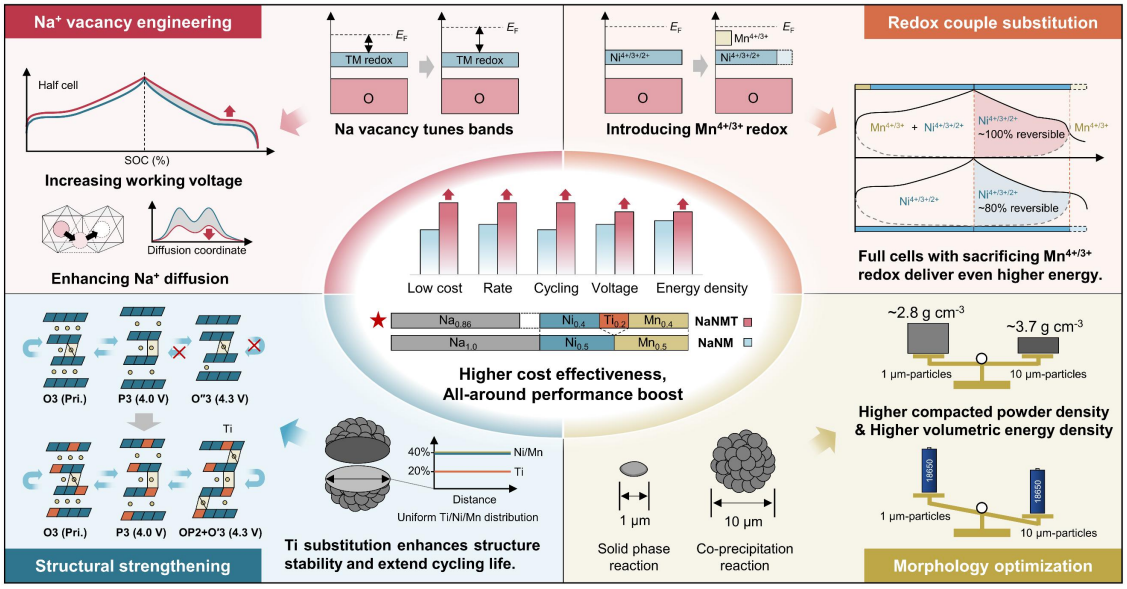


图 1 四合一策略及其机制。在 O3-$Na_{0.86}[Ni^{2+}_{0.4}Mn^{3+}_{0.06}Mn^{4+}_{0.34}Ti^{4+}_{0.2}]O_2$ 的材料组成和合成路径设计过程中，考虑了 Na+空位调控、氧化还原电对共取代、结构强化和形态优化策略，这导致了全面的改进（成本、动力学、热力学和形态）

关键词：钠离子电池，层状氧化物正极材料，共沉淀

参考文献:

[1] **Zhang, S.**, Li, X., Su, Y., et al. Four-In-One Strategy to Boost the Performance of Nax[Ni,Mn]O2. Advanced Functional Materials. *Adv. Funct. Mater.* 2023,33,2301568

墙报展示人简介：

张世光，中国科学院物理研究所容晓晖老师学生。主要针对钠离子电池正极材料，全固态钠离子电池等方向进行研究，在 Advanced Functional Materials 发表论文和发明专利四项。

高能量密度钠离子电池单晶正极材料设计制备与改性研究

王海波[1,2]，丁飞翔[3]，陈钊[1]，廉政[4]，容晓晖[1,2*]，赵君梅[4*]，胡勇胜[1,2*]

[1]中国科学院物理研究所，北京市海淀区中关村南三街 8 号，邮编 100190

[2]长三角物理研究中心，江苏省溧阳市中关村大道 1 号，邮编 213376

[3]郑州大学，河南省郑州市高新区科学大道 100 号，邮编 450001

[4]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，邮编 100190

*Email: yshu@iphy.ac.cn;

rong@iphy.ac.cn;

hbwang@iphy.ac.cn

摘要正文：镍铁锰基(NFM)层状氧化物正极材料凭借其简单的制备工艺，低廉的成本，高能量密度成为学术和产业界关注的热点。然而其也存在空气稳定性差，循环寿命短等问题，特别是高电压(>4V)下的快速衰减，限制了其实际的能量密度发挥。正极材料的宏观性能与微观结构具有重要联系，其组成以及微观形貌扮演者重要额角色。体相与表界面的结构稳定是实现高电压长循环寿命的基础，我们首先提出了采用塑晶-转子相快离子导体修饰表界面，降低了残留碱，稳固了界面，同时改善了动力学性能。进一步，通过前驱体的设计以及烧结工艺的组合，制备出结晶度高缺陷少的单晶正极材料。独特的晶面择优取向降低了活性晶面的比例，提高了其在高压和潮湿环境中的结构稳定性。最后我们将塑晶包覆在高稳定性的单晶正极材料上，极大提升了材料的空气稳定性以及高电压的循环稳定性。搭配高容量硬碳负极材料，在18650小圆柱电池中实现了172 Wh/kg的高能量密度以及长循环寿命。我们的工作为低成本、高能量密度钠离子电池的开发提供了思路。

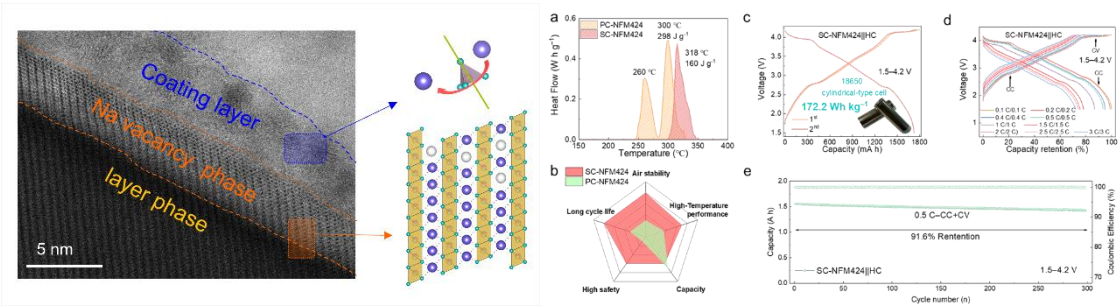


Fig. 1. Mechanism diagram of plastic crystal coating. **2.** (a) DSC profiles of PC-NFM424 and SC-NFM424 cathode materials charged to 4.2 V at a heating rate of 5 °C min^{-1}. (b) Radar maps of the two cathode materials. (c) Initial charge/discharge curves of 18650 cylindrical-type SC-NFM424||HC cells at 0.1 C. (d) Rate capabilities of 18650 cylindrical-type cells from 0.1 to 3 C. (e) Cycling performance of the 18650 cylindrical-type cells at 0.5 C.

关键词：钠离子电池；层状氧化物；高电压；单晶；塑晶

参考文献

[1] **HB. Wang, FX. Ding. XH. Rong, and YS. Hu *In Situ* Plastic-Crystal-Coated Cathode toward High-Performance Na-Ion Batteries. ACS Energy Lett. 2023, 8, 3, 1434–1444**

报告人/墙报展示人简介：

王海波，中科院物理所、长三角物理研究中心在读博士研究生，指导教师为容晓晖特聘研究员。研究方向为高能量密度钠离子电池正极材料设计与制备，工程化探索等，目前已申请发明专利 7 篇，

获得授权 2 篇，以第一作者在 ACS Energy Letter 发表论文一篇，以共同作者在 JACS，EES，AFM 等期刊发表论文数篇。在工信部举办的第一届能源电子产业创新大赛创新产品赛道获得一等奖，并在随后的总决赛中获得大赛金奖，在工信部举办的第五届金砖国家工业创新大赛中获得优秀项目奖以及在总决赛中获得一等奖。

解耦钠离子层状氧化物正极材料空气稳定性

杨佳[1]，王在发[2]，容晓晖[3,*]，陆雅翔[1,*]，黄建宇[2,*]，胡勇胜[1,*]

[1]中国科学院物理研究所，北京，100190

[2]燕山大学，秦皇岛，066000

[3]长三角物理研究中心，溧阳，213300

*Email: rongxiaohui@ioply.cn; yxlu@iphy.ac.cn; jyhuang8@hotmail.com; yshu@iphy.ac.cn

层状氧化物因比能量高和易于规模化制备成为钠离子电池正极材料的首要选择。然而，层状氧化物的空气稳定性问题严重制约着材料性能的充分发挥和规模生产、存储环节的应用，困扰该领域近四十年。由于反应过程复杂、杂质干扰，以及缺乏有效观测和评估方法，劣化机理与改性原则尚未完全清晰[1,2]。为突破这一瓶颈，研究团队[3]以广泛研究的 $NaNi_{1/3}Fe_{1/3}Mn_{1/3}O_2$（NFM111）作为模型材料，并扩展至其同系物，运用原位环境气氛透射电镜等先进表征方法，系统解耦不同气体组分与层状氧化物的相互作用，发现水蒸气、二氧化碳或者氧气单独存在时并不会引发材料显著的劣化反应；水蒸气在劣化过程中起到关键性的桥梁作用，通过与二氧化碳或氧气共存，分别引发酸性劣化和氧化劣化过程，并详细阐释了体相与界面的结构与化学态演变。研究团队还开发了一种基于滴定气相色谱技术的标准化空气稳定性测试方法，对 30 余种氧化物材料劣化后的钠损失量进行了定量分析，并定义了一个新的参数——阳离子竞争系数η以反应 Na^+/H^+交换的难易程度。研究发现，酸性降解是主导整体劣化过程的关键因素；降低阳离子竞争系数和增加颗粒尺寸可以有效地提升材料抵抗酸性劣化的能力；选择高电位的氧化还原对可以有效地增强材料的抗氧化劣化的能力。基于此，团队将新设计材料的钠损失量从模型材料的 0.489 降至 0.019。该工作揭示了材料界面和体相的劣化演变过程，明确了影响材料空气稳定性的本征因素，并提出了相应改善策略，为设计更稳定、更耐用的层状氧化物正极材料提供了技术方法和指导原则。

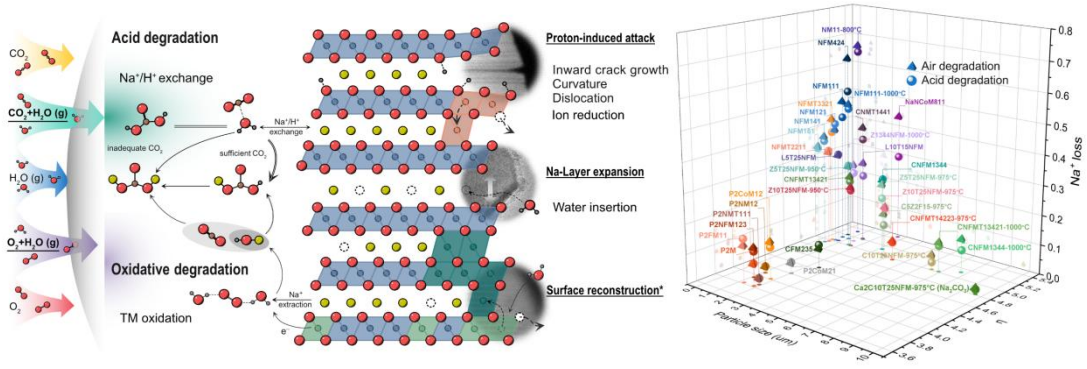


Fig. 1 Degradation mechanisms of Na-layered oxides and the impact of cation competition coefficient (η) and particle size on their air stability

关键词：钠离子电池；层状氧化物；空气稳定性；

参考文献

[1] Zuo W, Qiu J, Liu X, et al. The stability of P2-layered sodium transition metal oxides in ambient atmospheres[J]. *Nature Communications*, 2020, 11(1): 1-12.

[2] Jia S, Kumakura S, McCalla E. Unravelling air/moisture stability of cathode materials in sodium ion batteries: characterization, rational design, and perspectives[J]. *Energy & Environmental Science*, 2024, 17(13): 4343-4389.

[3] Yang Y, Wang Z, Du C, et al. Decoupling the air sensitivity of Na-layered oxides[J]. *Science*, 2024, 385(6710): 744-752.

报告人/墙报展示人简介：

杨佯，中国科学院物理研究所在读博士生。主要研究方向为钠离子电池层状氧化物正极材料及其界面，目前以一作/共一作身份在 Science 和 ACS Energy Letters 发表文章 2 篇，授权专利 1 项。

报告人/墙报展示人是否为学生：学生

第 12 分会场：含能颗粒

一、主题报告

粉末燃料连续旋转爆轰发动机技术

翁春生*

南京理工大学瞬态物理国家重点实验室，江苏 南京，210094

*Email: weng@njust.edu.cn

摘要：粉末燃料连续爆轰发动机采用爆轰循环模式，从工作原理上颠覆了原有定压燃烧模式，兼备了爆轰发动机热循环效率高和粉末燃料能量密度高的技术优势，具有比冲高、多次启动、推力可调、马赫数高、勤务简便等优点。本报告主要介绍粉末燃料连续爆轰发动机的工作原理、技术特点、国外研究现状、国内研究现状等内容。

关键词：粉末燃料；连续旋转爆轰发动机；爆轰循环

报告人简介：

翁春生，南京理工大学二级教授，博士生导师，长期从事爆轰发动机研究；173 计划首席专家，军科委等相关专业组专家；中国兵工学会弹道专委会副主任委员以及其它多个专委会委员，《兵工学报》等学术期刊编委；先后承担了重点/重大、863 计划、国家自然科学基金等项目；发表学术论文 300 余篇，合作出版专著 3 部、教材 2 部；曾获国家科技进步三等奖 1 项、国家教学成果二等奖 1 项、省部级科技进步二等奖 8 项，申报/授权国防发明专利 60 多项。

金属基燃料跨介质冲压发动机燃烧特性研究

黄利亚*，张家瑞*，杨和，薛鸿涵

国防科技大学空天科学学院，湖南 长沙，410073

*Email: huangliya05@nudt.edu.cn

摘要：跨介质飞行器将先进的超声速导弹动力和超高速鱼雷动力技术相结合，在空中采用火箭、冲压或燃气涡轮发动机，在水下采用水冲压发动机，可以实现跨介质高速航行。其中，水冲压发动机是跨介质飞行器动力装置的核心关键。本文建立并验证了水蒸气氛围下金属颗粒点火燃烧模型，并将其应用到水冲压发动机中，对不同工况和结构条件下的发动机燃烧室内金属颗粒燃烧过程进行了数值模拟，得到了金属基燃料水冲压发动机的燃烧特性和不同因素的影响规律。另一方面，搭建了水蒸气环境金属颗粒着火燃烧试验系统，观测了金属颗粒水反应着火燃烧现象，获得了水蒸气环境下颗粒着火燃烧特性；设计了金属基粉末燃料跨介质冲压发动机样机，分别采用不同金属粉末燃料开展水冲压条件下地面直连试验，获得了发动机内部燃烧流动特性与规律；采用金属基固体药柱燃料开展了水冲压发动机燃烧特性试验，实现了金属基药柱水冲压发动机的稳定燃烧，获得了初始工况条件对发动机燃烧性能的影响规律。研究结果为金属基燃料跨介质冲压发动机的应用与发展提供了理论基础和技术支撑。

关键词：跨介质飞行器；水冲压发动机；燃烧特性；地面试验

报告人简介：

黄利亚，国防科技大学教授、博导，湖南省科技创新领军人才。研究方向为固体冲压与组合发动机技术，主持国家自然科学基金、装备预先研究、国防科技创新特区、基础加强计划等项目 10 余项，发表论文 30 余篇，出版专著/教材 4 部，授权专利 20 余项，获军队级一等奖 1 项，学会科技进步一等奖 1 项，省级教学成果奖 1 项。

金属基粉末燃料点火燃烧特性研究

胡春波*

西北工业大学燃烧热结构和内流场重点实验室，陕西 西安，710072

*Email: huchunbo@nwpu.edu.cn

摘要：本报告主要介绍硼基粉末燃料、镁基粉末燃料、铝基粉末推进剂点火燃烧特性，阐述粉末推进剂反应热力学与反应动力学特性、火焰结构及其演化规律，分析粉末推进剂的点火燃烧机理，建立相应的点火燃烧预测模型。最后介绍其在粉末燃料冲压发动机、火星探测用镁二氧化碳发动机中的应用。

关键词：粉末燃料；粉末推进剂；点火燃烧特性；冲压发动机

报告人简介：

胡春波，男，西北工业大学教授，博士生指导教师，从事航空宇航推进理论与工程学科教学和科研工作。主要研究方向为：粉末发动机设计；发动机内两相流动；发动机内颗粒燃烧特性研究。出版学术专著：《粉末火箭发动机原理》和《粉末推进剂燃烧理论》。获国家技术发明二等奖 1 项，省部级科技奖 4 项。指导学生获得陕西省优秀博士学位论文 1 篇。《兵器装备工程学报》编委。

氟聚物改性铝粉促进其点火燃烧研究

孙运兰*

常州大学石油与天然气工程学院，江苏 常州，213164

*Email: ylsun@cczu.edu.cn

摘要：针对铝粉在固体推进剂燃面易发生熔融团聚，导致推进剂燃烧效率降低的瓶颈问题，本报告以氟聚物改性铝粉为研究对象，采用实验测试和分子模拟的方法，调控其界面微观结构和微环境；从氟聚物影响铝粉氧化、点火、燃烧、颗粒团聚等方面，深入探究改性铝粉界面微观结构和微环境等界面特性变化与其释能特性关联机制。本报告将重点围绕氟聚物种类、改性方式、铝粒度对改性铝粉点火燃烧及铝粉团聚的影响进行介绍；阐明改性铝粉点火燃烧过程中，氟聚物与铝颗粒的传热传质、分子扩散、化学反应等过程；明确改善铝粉点火燃烧和抑制铝粉团聚的关键因素，提出氟聚物改性铝粉的最佳方法，以促进其快速点火和高效燃烧。

关键词：固体推进剂；氟聚物；改性铝粉；点火燃烧；铝粉团聚

报告人简介：

孙运兰，教授，博士生导师，常州大学低碳清洁能源与安全高效燃烧团队负责人，江苏省工程热物理学会常务理事，先后入选江苏省六大人才高峰、安徽省学术技术带头人、安徽省高校优秀青年人才等。研究方向包括金属粉表面改性、含能材料点火燃烧、燃烧污染物减排与控制等。主持国家自然科学基金项目 5 项，省部级及产学研课题 10 余项，主研完成国家科技部国家重点研发计划子课题和国家安全重大基础研究 973 子课题 2 项。在燃烧领域顶级期刊《Combustion & Flame》、《Energy》、《Fuel》、《Journal of Hazardous Materials》、《Chinese Journal of Aeronautics》、《Propellants, Explosives, Pyrotechnics》等国内外知名刊物，合计发表期刊论文 140 余篇，被 SCI 收录 110 余篇，授权专利 30 余项。

高能固体燃料原子级精准表面修饰：安全性、稳定性提升与能量输出结构调控

冯昊*

中国兵器工业集团西安近代化学研究所，陕西 西安，710065

*Email: fenghao98@hotmail.com

摘要：高能固体燃料具有很高的燃烧热值和密度，将其用于新型推进剂或添加剂，有望显著提升武器装备性能。然而，以微小颗粒状态存在的高能固体燃料表面效应突出，其特殊的表面理化性质极大限制了其在装备中的实际应用。原子层沉积（Atomic layer deposition, 简称ALD）是一种先进的薄膜沉积与纳米结构制造技术，利用该技术可对物质表面组成及结构进行原子层面的精确操纵，在材料表面引入特定的物理或化学性质，实现多种材料的原子级精度可控合成。借助ALD技术对高能固体燃料颗粒实施精准表面修饰，可在几乎不影响材料本体能量性能的前提下有效改变材料表面性质，起到显著提升燃料安全性、稳定性的作用；通过在燃料颗粒表面持续沉积氧化物修饰层，可形成结构可控的核-壳纳米复合含能材料，并通过改变壳层组成、结构控制其能量输出过程。本报告将简要介绍ALD技术在典型高能固体燃料（Al、Zr、B、AlH3等）表面性质与能量输出结构调控中的应用效果及未来展望。

关键词：高能固体燃料；原子层沉积ALD；颗粒表面修饰；能量输出结构调控

报告人简介：

冯昊，1979 年生，本科毕业于北京大学，美国西北大学博士，美国阿贡国家实验室博士后。现任中国兵器工业第 204 研究所研究员，博士生导师，中国兵器工业集团科技带头人。研究方向主要围绕原子层沉积（ALD）技术开展，具体包括先进 ALD 装置研发、纳米含能材料、纳米催化、功能薄膜材料等。先后入选国家“万人计划”青年拔尖人才、科技创新领军人才项目，国防卓越青年人才计划，获得国务院政府特殊津贴；研究团队入选首批国防科技领域基础创新团队、陕西省科技厅基础创新团队。

改性CL-20基球形钝感化共颗粒的制备及性能研究

严启龙*

西北工业大学固体推进全国重点实验室，陕西 西安，710072

*Email: qilongyan@nwpu.edu.cn

摘要：众所周知CL-20是高能炸药代表，而TATB则是钝感炸药的典型，它们均具有优异的综合性能，但仍面临着能量/安全的矛盾。为了解决该问题，将少量nTATB@PDA与CL-20进行界面组装制备获得新型致密共颗粒结构是实现CL-20高能钝感化的有效途径。首先将TATB进行纳米化和表面PDA功能化处理，再在CL-20溶液中进行异质结晶便可得到钝感化共颗粒（C-T@P）。研究结果表明，C-T@P共颗粒更加致密饱满，表面板块界面呈足球状。分步溶壳法发现其内部由多个片状nTATB@PDA颗粒组成，并与CL-20存在界面接触结构，证明CL-20与nTATB@PDA之间存在较强的界面相互作用，该共颗粒表现出均质固体结构。XRD分析证实C-T@P共颗粒具有独特的晶型，与CL-20和TATB晶体差异较大。晶系不随nTATB@PDA含量增加而变化，晶粒尺寸在25.3到36.6nm间。红外光谱和拉曼光谱分析表明CL-20和TATB分子之间存在强氢键相互作用。C-T@P共颗粒的热分解一步失重和DSC单放热峰进一步表明C-T@P共颗粒是一种新物相，而不是CL-20与nTATB机械混合物。与CL-20相比，共颗粒的机械感度大幅降低，其中nTATB含量10%时，共颗粒的撞击感度和摩擦感度分别为16cm和80%，原材料为4cm和100%，但是能量密度如爆热几乎没有发生变化。

关键词：CL-20；TATB；钝感化共颗粒（C-T@P）；分步溶壳法

报告人简介：

严启龙，男，博士，湖南华容人，中共党员，现任西北工业大学航天学院教授、博士生导师。主要从事含能材料安全性与分子结构之间的关系、推进剂配方设计与制备、推进剂热分解动力学和催化燃烧机理等方面的研究。兼任中国工程物理研究院 903 所客座教授、火工品安全技术国防科技重点实验室客座教授、“航天化学动力技术”和“火炸药燃烧技术”两个国家级重点实验室学术委员、JKW 创新特区某主题专家等。还担任《含能材料》副主编，《火炸药学报》、《固体火箭技术》、《火工品》、《Energet Mater Frontier》和《FirePhysChem》等期刊编委；在军口重点项目和自然基金重点项目等 10 多项课题的支持下，取得多项应用基础研究成果。主要包括学术著作 3 部：《Nanomaterials for Rocket Propulsion System》、《含能材料前沿导论》和《高聚物粘结炸药及其性能》，后者获得国防工业出版基金资助；在 Adv Mater、Fuel 和 Combust Flame 等期刊发表论文 180 余篇，并获得专利授权 16 项；论文他引 5500 余次，含 ESI 高被引论文 6 篇，荣获 2021-2024 年连续三年荣获 Elesevier 中国高被引学者，H 因子 41。

纳米铝粉反应性烧结现象解析与复合含能材料性能调控

王海洋*

北京大学航空航天系，北京，100871

*Email: haiyangw@pku.edu.cn

摘要：纳米复合含能材料如纳米铝热剂等由于其高反应热等优点，常作为高能添加剂加入到火炸药中以增加其能量密度。然而，由于这类物质反应迅速，反应温度高，还涉及到复杂多相过程，我们对其反应过程和机理的认知还比较有限，这限制了我们进一步利用这类物质提高火炸药能量密度水平和能量释放速率的能力，限制了纳米复合含能材料在火炸药中的实际应用。在含纳米铝粉的复合含能材料的反应过程中，一个最引人注目的特点之一，就是纳米铝粉的反应性烧结 - 纳米铝粉在被点燃之前发生的、快速失去其纳米特性、快速融合变大的现象，在纳米铝热剂及其他铝基的火炸药反应过程中普遍存在。在这里，我们展示了一种高速显微测温系统，能够以微秒的时间尺度、微米的空间尺度，对纳米复合含能材料的火焰端面和纳米铝粉的反应性烧结现象进行了直接地原位高速观测，得到了反应端面厚度、热梯度、烧结体大小、宏观和微观燃速等一系列前所未见的参数。基于上述我们对纳米铝粉反应性烧结的观测和理解，通过一系列的配方调整，我们可方便地调节反应性烧结体的大小和停留时间，从而方便地调整纳米复合含能材料的燃烧性能。

关键词：纳米铝粉；反应性烧结；燃烧机制；复合含能材料；性能调控

报告人简介：

王海洋，北京大学工学院航空航天系研究员，从事复合含能材料的先进制造与反应机理等相关研究工作，研究兴趣包括太空制造与组装、资源原位回收与利用、先进推进技术等。2010 年和 2015 年在南京理工大学化工学院安全工程系分别获工学学士和力学博士学位。博士期间获留学基金委资助于 2012-2014 年在马里兰大学帕克分校机械工程系联合培养。2016-2021 年分别在马里兰大学帕克分校和加州大学河滨分校进行博士后研究。2022-2024 年在美国应用材料公司从事薄膜沉积工艺开发与缺陷控制工作。在专业期刊发表论文 70 余篇，被引用 3000 余次，曾获 AIAA Best Paper Award，连续入选 2022、2023 全球前 2%顶尖科学家榜单。

固体发动机燃烧调控新概念技术探索

敖文*

西北工业大学固体推进全国重点实验室，陕西 西安，710072

*Email: aw@nwpu.edu.cn

摘要：现代固体火箭发动机用固体推进剂普遍使用微米铝粉作为金属添加剂，以提高推进剂能量，抑制不稳定燃烧。但另一方面，铝粉燃烧形成的凝相燃烧产物会导致比冲损失，同时大大增加发动机燃烧室内物理化学过程的复杂性。本报告介绍固体推进剂燃烧工程问题导向，分析先进测试技术需求。重点介绍西工大近年来在燃烧测试、评估方面开发的一些新型技术条件，包括单颗粒点火系统、推进剂热分解显微测试、低压推进剂点火温度测定系统、超高压可视化燃烧系统、凝相产物恒压定淬距收集系统、发动机粒子收集系统、高压气相色谱系统、中断燃烧实验系统、凝胶燃料精细化燃烧诊断系统、新概念电控固体发动机系统等。最后提出展望，为认识发动机内燃烧与流动规律奠定基础。

关键词：固体推进剂；不稳定燃烧；燃烧调控；先进测试系统

报告人简介：

敖文，西北工业大学副教授、博士研究生导师，陕西省青年科技新星，入选 Elsevier“全球前 2%顶尖科学家榜单”。主要从事火箭发动机先进燃烧技术研究。担任中国空天动力联合会固体推进技术专委会委员，《航空动力学报》、《固体火箭技术》青年编委，《Aerospace》客座编辑。在燃烧与航天领域知名期刊发表学术论文 110 篇，其中第一/通信作者 SCI/EI 论文 60 余篇；获授权国家发明专利 8 项、已公开发明专利 13 项；承担国家级项目 10 余项，其中主持国家级重点项目 1 项、国家自然科学基金项目 2 项；获省部级奖励 2 项。

面向新型空天动力的超声速气固横向射流实验与仿真研究

马立坤*，杨鹏年，徐路淅，段一凡，赵康淳，冯运超，陈斌斌，张家瑞

国防科技大学高超声速技术实验室，湖南 长沙，410073

*Email: malikun@nudt.edu.cn

摘要：粉末超燃冲压发动机等新型空天动力系统的发展对超声速气固横向射流流动燃烧机理和高效高精度数值仿真能力提出了迫切需求。本报告梳理分析超声速气固两相实验与仿真研究的最新进展，着重介绍课题组在超声速气固横向射流实验及仿真方面的最新研究成果。基于所搭建的首个超声速气固两相流动燃烧机理研究实验系统，发展了多种两相参数测量方法和数据处理方法，首次清晰获得了凹腔等构型的超声速流道中的气固两相横向射流发展演化机理；开展了系列数值仿真研究工作，初步构建了可实验较宽工况范围的气固两相仿真模型，较好复现了实验现象和测量数据。

关键词：气固两相；超声速；数值仿真；实验研究

报告人简介：

马立坤，国防科技大学空天科学学院教学科研处副处长兼副教授，长期从事固体火箭超燃冲压发动机技术和多相湍流燃烧基础理论研究。担任《航空动力学报》、《固体火箭技术》、《航空兵器》青年编委，领域内 10 余个顶级期刊审稿人。主持国家自然科学基金、武器装备预研项目等科研项目 11 项，在 CNF、POF、CEJ 等领域顶级期刊发表 SCI 论文 40 余篇，获授权发明专利 40 余项，出版中、英文专著各 1 部，获军队科技进步一等奖 2 项，获国防科技大学青年创新一等奖，入选长沙市杰出创新青年培养计划，湖南省“荷尖”人才计划。连续入选斯坦福大学和 Elsevier 联合发布的 2023 年度、2024 年度“全球前 2%顶尖科学家”榜单。

动力装置金属颗粒燃烧释能特性研究

石保禄*

北京理工大学宇航学院，北京，100081

*Email: shibaolu@bit.edu.cn

摘要：高热值的铝、硼等含能颗粒是提升固体火箭发动机与冲压发动机能量水平的重要燃料。然而，由于表面氧化层包覆，金属颗粒难以在有效滞留时间内快速点火燃烧，同时易出现颗粒聚并为更大尺度的团聚现象，导致颗粒能量未能充分释放。本报告将在介绍金属颗粒点火燃烧实验与建模的基础上，探讨固体发动机内铝颗粒燃烧、烧蚀绝热层及壁面沉积的动态特性，分析冲压发动机内硼颗粒的流动燃烧特性，为高性能发动机设计提供理论指导。

关键词：固体发动机；金属颗粒；点火燃烧；燃烧特性

报告人简介：

石保禄，北京理工大学宇航学院长聘教授，博士生导师。长期从事发动机燃烧流动研究，主持完成或在研国家自然科学基金、装发预研重点基金、军科委基础加强重大项目课题等项目 20 余项。相关研究成果已应用于多项型号发动机研制，牵头获批国防技术发明二等奖。近五年以第一或通讯作者在 AIAA J., Combust. Flame 等学科领域顶级期刊发表学术论文 40 余篇，出版专著一部；担任空天动力燃烧与传热专委会执行委员、燃烧空气动力学专委会委员、全国青年燃烧会议程序委员会委员、北京热物理与能源工程学会理事等。

金属颗粒湍流燃烧的高精度数值模拟与机理研究

王海鸥[1,*]，周凡[1]，余欣雨[1]，张家瑞[2,*]，罗坤[1]，樊建人[1]

[1]浙江大学能源高效清洁利用全国重点实验室，浙江 杭州，310027

[2]国防科技大学空天科学学院，湖南 长沙，410073

*Email: wanghaiou@zju.edu.cn; zhangjiarui@nudt.edu.cn

摘要：金属燃料是新型的无碳燃料，具有高能量密度、低污染、易储运、可循环利用等特点，然而金属燃料的燃烧目前仍处于研究阶段。为实现“双碳”目标的重大战略，我们亟需提金属等燃料的基础燃烧理论和清洁高效利用技术水平。本报告将介绍高精度的金属燃料燃烧的高精度模拟方法，对实验室尺度的金属燃料燃烧开展直接数值模拟研究，揭示湍流、颗粒、传热传质和化学反应之间复杂的耦合作用。

关键词：金属燃料；数值模拟；耦合作用

报告人简介：

王海鸥，浙江大学研究员、博士生导师，获得国家优秀青年科学基金资助，入选浙江省“钱江人才”计划、浙江大学“百人计划”。长期致力于多相湍流燃烧的理论与数值模拟研究。在复杂多相湍流燃烧的直接数值模拟方法、多场多尺度耦合作用机理及高精度建模等领域取得了丰硕的研究成果。获国家超算“天河之星”优秀应用奖、中国工程热物理学会燃烧学学术年会优秀论文奖等。担任中国工程热物理学会多相流专业委员会委员，任多届中国工程热物理学会燃烧学学术年会程序委员会委员38 届国际燃烧大会分会主席、第 16 届国际预混湍流火焰研讨会分会主席。任《工程热物理学报》青年编委、《内燃机学报》特邀编委和国际期刊《Frontiers in Thermal Engineering》编委。主持国家自然科学基金面上项目、重点项目课题和重大研究计划集成项目课题等。

大型复杂颗粒-流体系统CFD-DEM数值模拟及应用

褚开维*

山东大学齐鲁交通学院，山东 济南，250100

*Email: k.chu@sdu.edu.cn

摘要：复杂颗粒-流体系统（如固体火箭发动机、人体干粉药物输送、血液流动、金属粉末 3D 打印、地下工程、工业逸尘、循环流化床和旋流器等）在自然界和工业界无处不在，其中“颗粒动力学”是《科学》杂志 2005 年提出的 125 个最具挑战性的科学问题之一。近年来，耦合的计算流体动力学和离散元素方法（CFD-DEM）被证明是研究颗粒-流体系统内在运行机理的有效方法。不过，传统 CFD-DEM 方法有计算量巨大的致命缺点，该缺点可以采用粗粒化 CFD-DEM 方法来克服。本工作介绍一种 CFD-DEM 模型在不同三维复杂大型颗粒-流体系统的应用。重点介绍使用粗粒化（CG）CFD-DEM 方法来显着降低 DEM 仿真的计算成本，和运用颗粒平行粘结模型（PBM）来替代有限元（FEM）研究流-固耦合问题。同时重点介绍 CFD-DEM 在固体火箭发动机两相流、液滴凝并、药柱燃烧和喷管烧蚀等方面的潜在应用。该工作包括模型开发（包括颗粒固结模型），模型验证，模型应用和过程创新等方面。

关键词：颗粒-流体系统；CFD-DEM；粗粒化；颗粒平行粘结模型（PBM）

报告人简介：

褚开维，男，山东大学特聘教授，博士生导师。具有 20 多年的耦合的计算流体动力学和离散单元法模型（CFD-DEM）开发经验。开发的 CFD-DEM 模型被通用地用来研究不同颗粒-流体系统的内在运行机理，并用于解决 10 多个实际工业问题。研究成果被同行在 SCI 顶级期刊评价为“重大进展”、“跃升”和“更先进的策略”等。开发的突涌水软件获 2023 年山东省十大科技成果。SCI 核心合集他引数 2947 次，H 指数 27。以 CFD-DEM 为主题在 web of science 搜索到的 2997 篇论文中：引用排名前十的论文中有四篇（三篇一作）褚开维的论文（数据取自 2023 年 3 月 1 日）。在 CFD-DEM 领域的 SCI 论文数在 2019 年之前曾长期排名世界第二。

金属燃烧多维光学诊断技术

蔡伟伟*

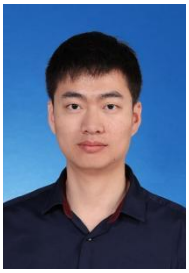
上海交通大学，上海，200240

*Email: cweiwei@sjtu.edu.cn

摘要：本次报告聚焦于含能颗粒燃烧过程中关键参数的精确测量技术，旨在探索多维光学方法在表征该复杂燃烧现象中的应用潜力。随着含能颗粒在能源动力领域的广泛应用，其燃烧特性的深入理解成为技术发展的关键。我们开发了基于全息成像与层析成像技术的先进光学测量技术，实现对燃烧过程中温度、颗粒粒径、速度及浓度等关键参数的实时、非接触式监测。这些技术不仅提升了测量的精度与维度，还克服了传统方法难以捕捉瞬态、多维燃烧特性的局限。报告将详细阐述这些创新方法的原理、实验设置、数据处理流程及其在含能颗粒燃烧研究中的具体应用案例。通过此次交流，期望能与国内外同行共同探讨含能颗粒技术的前沿挑战与机遇，推动该技术领域的持续进步与跨越式发展。

关键词：金属燃烧；燃烧诊断；光学诊断；全息成像

报告人简介：



蔡伟伟，上海交通大学机械与动力工程学院教授，2016 年入选海外高层次人才引进计划。长期致力于发展基于计算光学的燃烧测试技术及仪器，形成了具有特色的交叉研究方向。近年来，相继在 Science（3 篇）、Progress in Energy and Combustion Science（2 篇）、Nature Communications、Combustion and Flame 等期刊发表论文百余篇。获得多项重要学术奖励和荣誉称号，包括国际分析仪器奖 Masao Horiba Award 唯一提名奖、德国埃尔朗根高等光学研究院青年科学家奖和中国工程热物理学会吴仲华优秀青年学者奖。担任测量领域百年期刊 Measurement Science and Technology 编委，《工程热物理学报》、《光学学报》、仪器仪表学会 Instrumentation 期刊、The Innovation 等期刊青年编委。同时，还担任国际传热传质中心（ICHMT）科学理事会专家委员、中国光学学会激光光谱学专委会委员、中国光学工程学会激光光谱技术及应用专委会委员、中国光学工程学会计算成像专委会委员等。

二、邀请报告

团聚硼微爆燃烧特性及其在冲压发动机中的应用

陈斌斌*

国防科技大学空天科学学院，湖南 长沙，410073

*Email: Chenbinbin11@nudt.edu.cn

摘要：硼具有高体积热值（138 kJ/cm^{-3}）和质量热值（58 kJ/g），是发动机的理想燃料，已被广泛用于高能贫氧推进剂、粉末燃料等领域。硼的点火燃烧过程直接影响固体超燃冲压发动机燃烧性能，但发动机实际燃烧效率低，成为限制固体超燃冲压发动机性能提升和工程应用的关键问题之一。研究发现固体超燃冲压发动机内硼颗粒以及原始硼颗粒主要为团聚形态，存在大量的孔隙结构，燃烧过程容易发生微爆等现象，显著区别与单个硼颗粒点火燃烧过程，有望提供新的发动机燃烧组织思路，解决当前技术发展亟需。课题组以团聚硼为研究对象，主要采用试验研究，辅以数值仿真方法，通过激光静态点火燃烧试验系统和火焰炉动态点火燃烧试验系统，开展了团聚硼点火燃烧过程结构演化特性、微爆燃烧特性等研究，初步获得了团聚硼微爆燃烧特性及颗粒结构演化特性。研究发现微爆可以显著减小团聚硼尺寸，降低颗粒点火燃烧时间，对于提升发动机燃烧效率提供了一种新思路。进一步开展了硼基粉末超燃冲压发动机燃烧组织试验，发现团聚硼的引入，一方面解决了原始无定形硼结团供应难的问题，另一方面通过微爆强化技术可以有效提高发动机燃烧性能，发动机推力增益比冲提高至 7104Ns/kg。研究结果对于加深理解团聚硼点火燃烧机理、提升固体超燃冲压发动机性能具有重要的科学意义和工程价值。

关键词：团聚硼；微爆燃烧；冲压发动机；燃烧组织

报告人简介：

陈斌斌，国防科技大学副教授，博士。长期从事固体动力及其组合推进技术。主持与参与国家重大演示验证项目、国家自然科学基金、武器装备预研、军委科技委创新特区等项目 10 余项，成果获评“XX 科技十大进展”。在《Combustion and Flame》、《Aerospace Science and Technology》等期刊发表 SCI 论文 10 余篇，授权专利 20 余项。

微单元颗粒的设计制备及应用进展

杜芳[1,2]，夏文韬[1,2]，晏嘉伟[1,2]，何健明[1,2]，屈炜宸[1,2]，李毅恒[1,2]，林励云[1,2]，陶博文[1,2,*]

[1]航天化学能源全国重点实验室，湖北 襄阳，441003

[2]湖北航天化学技术研究所，湖北 襄阳，441003

*Email: dufang@casc42.cn

摘要：微单元燃料是指由氧化剂（HMX、AP）-燃料（Al、B、合金）在纳米尺度均匀复合、精确组装构筑的有精确氧、燃配比的新型材料。在固体推进剂中引入微单元燃料，既利用了材料的纳米效应，又解决了纳米材料在应用过程中易团聚，带来工艺、安全性能恶化等难题，是提高固体推进剂能量性能的新途径。基于固体推进剂研制的实际需求，本团队分别设计制备了以 Al 粉为“核”层，以炸药为包覆层和以 AP 为包覆层的两种微单元燃料。采用高速摄像仪研究了微单元燃料的点火燃烧性能，结果表明：微单元燃料的燃烧火焰比物理混合样更加明亮，点火延迟时间也更短；微单元燃料燃烧残渣中铝的含量明显低于物理混合样，这表明微单元燃料具有更高的能量释放效率。对含微单元的固体推进剂性能进行了表征，结果表明：①从燃烧现象上看，使用微单元燃料后，推进剂的火焰更加连续；②从燃烧凝聚相产物上分析，微单元燃料可以抑制固体推进剂燃烧过程中出现的的铝粉团聚现象。同时对含微单元的高能固体推进剂进行了 BSFΦ165 发动机试车，试车录像表明：不含微单元燃料的发动机工作末期有大量火星从喷管喷出，含微单元燃料的发动机试车过程中没有出现火星喷出的现象。在组份相同的情况下，微单元燃料使推进剂的比冲提升 1.5s，体现出微单元能够提高固体推进剂能量释放效率的效果。

关键词：微单元燃料，燃烧性能，Al 粉团聚，能量释放效率

报告人简介：

杜芳，女，湖北航天化学技术研究所，高级工程师。

含能材料多级结构的构筑及性能研究

李敏[1]，韩丹丹[1,*]，龚俊波[1]

[1]天津大学化工学院，天津，300072

*Email: handandan@tju.edu.cn

摘要：纳微结构含能材料不仅具有能量释放速率大、燃烧(能量转化)效率高，而且在低敏感性等方面具有潜在的性能优势，对于提高含能材料存放和使用安全性以及改善武器的作战性能具有重要意义。本报告主要围绕多级结构含能材料的构筑及性能研究主题，从以下三个方面展开：

1. 基于添加剂诱导非晶体学分支的方法制备多级结构球形含能材料HNS降低感度；
2. 基于表面溶剂化设计自核壳多级结构降低含能材料DATNBI感度；
3. 基于溶剂化-添加剂耦合制备多孔多级结构含能材料CL-20球晶以增强燃烧性能。

关键词：含能材料；多级结构；燃烧性能；感度；结晶

报告人简介：

韩丹丹，天津大学，副研究员。目前在国家工业结晶工程技术研究中心从事晶体生长机理与晶习调控、含能材料多级结构的设计与应用以及精细化学品(维生素、氨基酸等)结晶工艺开发工作。以第一作者/通讯作者在 Small, CEJ，CES，SPT 等期刊发表论文 50 余篇；授权和申请发明专利 14 件；作为项目负责人主持国家自然科学基金青年项目、天津市自然科学基金青年项目、河北省重大专项（天大课题）、天津市合成生物技术创新能力提升行动项目（天大课题）、产学研合作项目等 20 余项；曾获得天津市专利金奖、中国专利优秀奖、河北省医药行业科学技术进步奖一等奖、中国商业联合会科学技术奖三等奖、第七届中国创新挑战赛(东营)“优秀挑战者奖”等荣誉。

铝基粉尘燃爆机理与防护技术研究

姜海鹏*

大连理工大学，辽宁 大连，116081

*Email: jhp@dlut.edu.cn

摘要：介绍团队近年来在铝基燃料爆炸机理与防护技术等方面的研究工作，包括铝基燃料颗粒的燃爆机理，以及着火敏感性、爆炸行为等特性；围绕高爆炸指数铝基粉尘，建立爆炸抑制反应动力学机理，研制精准捕获燃爆自由基的靶向抑爆材料与装备，提出高精度爆炸超压泄放安全设计方法，开发兼顾火焰淬熄与泄压效率的无焰泄放技术，旨在保障铝基燃料与工业金属粉尘的安全利用。

关键词：铝基粉尘；爆炸机理；爆炸防护

报告人简介：

姜海鹏，面向国家安全生产重大需求，主要从事铝基燃料/粉尘燃爆机理、安全防护技术及装备等研究。主持国家自然科学基金面上项目、国家重点研发计划子课题等纵向项目 6 项，近五年发表学术论文 60 余篇，以第一/通讯作者在 Combust. Flame、Chem. Eng. SCI.、J. Hazard. Mater.、Chem. Eng. J.、Energy 等领域知名期刊发表 SCI 论文 22 篇，申请发明专利 13 项（已授权 7 项），登记软件著作权 1 项。受邀在 2023 年中国公共安全大会作分会场主持，并作主题报告。担任 International Journal of Coal Science & Technology、Journal of Safety and Sustainability、安全科学与工程学报等编委/青年编委/科学编辑。获辽宁省科技进步一等奖、公共安全科学技术进步一等奖、中国职业安全健康协会科学技术奖一等奖、中国消防协会优秀博士学位论文、大连理工大学优秀博士学位论文等奖励与荣誉。

超声悬浮态硼/铝基含氧纳米浆体燃料点火燃烧特性研究

梁导伦*

东南大学能源与环境学院，江苏 南京，211189

*Email: ldl@seu.edu.cn

摘要：硼、铝等金属燃料能量密度高，但点火燃烧需氧量大，将其与液体含氧燃料组合成含氧纳米浆体燃料，既可提升燃料的燃烧热值，又能改善燃料的燃烧特性。报告主要介绍研究团队在硼/铝基含氧纳米浆体燃料悬浮液滴点火燃烧方面的研究进展，包括液滴的固液两相燃烧细观行为，能量释放特性和化学反应机理等。

关键词：浆体燃料；金属燃料；超声悬浮

报告人简介：

梁导伦，东南大学能源与环境学院副教授、博导，江苏省高层次创新创业人才引进“双创博士”，东南大学“至善青年学者”。2013 年获浙江大学能源与环境系统工程专业学士学位；2018 年获浙江大学能源清洁利用国家重点实验室热能工程专业博士学位。2016-2017 年赴意大利米兰理工大学（Politecnico di Milano）进行交流访学。2024 年 7-9 月受邀担任瑞士洛桑联邦理工学院（EPFL）客座教授。主持国家自然科学基金面上、青年项目，国家重点研发项目子课题，航空科学基金项目，参与 GF973、173 项目等多项国家级课题的研究。近年来在 Combustion and Flame、Aerospace Science and Technology、Applied Energy 等国内外知名期刊发表论文 40 余篇，其中第一/通讯作者 SCI 论文 20 篇，申请/授权发明专利 10 余项，软件著作权 1 项，并担任《含能材料》、《火炸药学报》、《火箭推进》、《兵器装备工程学报》等期刊青年编委。

真空环境下Al/PTFE复合反应材料建模与仿真研究

欧阳*，孙鸣阳，刘心宇，吴建军

国防科技大学空天科学学院，湖南 长沙，410073

*Email: ouyang16@nudt.edu.cn; jjwu@nudt.edu.cn

摘要：作为一种典型的反应性材料，Al-PTFE复合反应材料由于使用铝颗粒作为金属燃料而表现出高能量密度（~21 kJ/cm^3）和足够的不敏感性，PTFE中具有很强的C-F键能（431~515 kJ/mol），常态下保持稳定。当Al-PTFE复合材料被外界能量激活后，PTFE的热分解产物能与铝反应产生气化点较低的AlF_3（1550 K），AlF_3的升华可以对体系内部加压，抑制铝颗粒的团聚，从而提高反应速率，释放更多能量，因此目前已成为炸药、推进剂、烟火剂和等离子体源的良好选择之一，在化工、航天和爆破中均有广泛应用。尽管目前针对Al-PTFE复合反应材料在空气环境下的反应机理研究较多，但是鲜有关于真空环境下相关反应机理的研究。本文从理论上分析了真空环境下Al-PTFE复合反应材料被激光点火后的多物理过程，确定了初始响应、主要化学反应路径和气相产物流动机制，随后建立了考虑材料运动边界退缩、化学反应、气相产物动力学和热物理性质变化的动态反应模型。实验验证了模型的正确性，并基于数值模型分析了外界点火能量和材料温度变化及烧蚀深度之间的关系，背景环境压强对动力学参数的影响，结果表明：在0.001 Pa的2000 K至30000 K温度范围内，属于气相反应的早期阶段，离解反应的平衡常数超过了电离反应的平衡常量；烧蚀羽流的最高温度最初出现在烧蚀表面附近，但羽流的绝热膨胀，形成椭圆形激波，在羽流内形成空腔，而较低的环境压力会增加羽流膨胀速度、温度和尺寸。

关键词：Al/PTFE复合反应材料；数值模拟；烧蚀羽流

报告人简介：

欧阳，国防科技大学空天科学学院讲师（2022 年至今），主要研究方向为先进空间推进技术，主持国家级、省部级项目共 5 项，以第一作者及通讯作者发表 SCI 论文 16 篇，第一发明人授权专利和软著共 10 项，获中国宇航学会高水平博士学位论文，湖南省优秀硕士学位论文，入选湖南省小荷科技人才，获军队科技进步一等奖 1 项，湖南省自然科学论文二等奖 2 项，全国发明展览会金奖和银奖 2 项。

固体推进剂异常动载下响应过程研究

武毅[1,*]，杨钧森[1]，张益铭[1]，文俊杰[1]，王冉[1]，金丰凯[1]

[1]北京理工大学，北京，100086

*Email: yi.wu@bit.edu.cn

摘要：高能固体推进剂含有大量高感度固体颗粒组分，给安全性使用带来巨大挑战。固体推进剂在跌落、碰撞等异常动态载荷下，可能发生意外点火甚至爆炸等事故，深入理解高能固体推进剂在异常动载下的响应机理，获得推进剂受载变形、细观颗粒破碎、热点形成、燃烧与爆炸释能增长过程等基础数据，对于构建准确的响应预示模型、预判响应烈度，以及支撑推进剂配方和发动机设计等具有重要意义。报告团队近期在高能固体推进剂在加热、机械撞击等动载下推进剂宏细观尺度响应过程的研究进展。

关键词：固体推进剂；异常动态；损伤与点火；光学诊断技术

报告人简介：

武毅，北京理工大学 宇航学院，副教授，博士生导师。主要从事固体推进剂及发动机技术基础研究，研究方向主要为固体发动机燃烧、爆炸释能过程基础研究。主持国家自然科学基金重点项目，科工局重大基础科研项目，军科委基础加强项目、装发共性基础等纵项项目 10 余项，在 Combustion and Flame，Physics of Fluids 等发表论文 40 余篇。中国科协/军科委《青年人才托举工程》人才项目获得者，任《固体火箭技术》《推进技术》等期刊青年编委。

燃料形态对连续旋转爆轰冲压发动机能量转换效率及性能的影响机制研究

续晗*，张正鑫，翁春生

南京理工大学瞬态物理全国重点实验室，江苏 南京，210094

*Email: xuhan@njust.edu.cn

摘要：连续旋转爆轰冲压发动机(Continuously Rotating Detonation Ramjet Engine，CRDRE)的燃料形态包含气态、液态和固态，不同形态燃料性质差异巨大，性能和适宜飞行马赫数各不相同。为探究不同形态燃料CRDRE的性能和适宜飞行马赫数，本文建立了不同形态燃料CRDRE的理论分析模型并验证了该模型的可靠性。选用氢气、煤油和硼粉分别代表气态、液态和固态燃料，在其各自可工作范围内（氢气Ma_0=3~5、煤油Ma_0=3~6、硼粉Ma_0=3~7），研究了不同飞行马赫数下不同形态燃料的能量转化效率（热效率、推进效率、总效率）和性能，确定了不同形态燃料的适宜飞行马赫数。结果表明，飞行马赫数增加时，能量转化效率表现如下：对于热效率，氢气和煤油的热效率单调减小，而硼粉的热效率先增加后减小；对于推进效率，三种燃料均单调增加；对于总效率，氢气和硼粉的总效率单调增加，而煤油的总效率先增加后减小。飞行马赫数增加时，不同形态燃料CRDRE的性能变化如下：单位推力均单调减小，且满足$F_s(B) > F_s(H_2) > F_s(C_{12}H_{23})$；比冲均单调减小，在低马赫数下($Ma_0$ =3~5)，$I(H_2) > I(C_{12}H_{23}) > I(B)$，在高马赫数下（$Ma_0$ =5~6），$I(B) > I(C_{12}H_{23})$。结合不同形态燃料的性质、性能及工作范围，发现氢气和煤油等气态和液态燃料适用于低马赫数飞行工况($Ma_0 \leq 5$)，而硼粉等固态燃料适用于高马赫数飞行工况($Ma_0 > 5$)。

关键词：连续旋转爆轰冲压发动机；燃料形态；理论模型；能量转换效率；发动机性能

报告人简介：

续晗，南京理工大学瞬态物理全国重点实验室，副教授，硕士生导师。从事新型粉末爆轰发动机理论及技术研究工作。创新性地结合了固体燃料能量密度高和爆轰释能循环效率高的优点，并致力于新型粉末燃料连续旋转爆轰发动机的应用基础研究及关键技术攻关。提出了气固两相爆轰发动机新方案，研制了粉末爆轰发动机新构型，突破了粉末可控流化输送及短距离高效喷射掺混技术、气固两相爆轰波点火起爆技术及可控自持传播技术，热试车实现了粉末爆轰发动机的稳定工作，可大幅提高发动机热循环效率。以第一作者在 Applied Energy 等期刊发表一区 SCI（top）期刊论文 8 篇，在 Proceedings of the Combustion Institute 等期刊发表二区 SCI（top）期刊论文 4 篇，以通讯作者发表论文若干篇，累积影响因子过百；以第一发明人申请发明专利 11 项，其中授权 4 项发明专利，1 项软件著作权；出版著作 1 本。近几年作为项目负责人主持国家自然科学基金、军科委创新特区项目、装发 “慧眼行动”、南京市优秀留学回国人员等项目共 8 项，参与军科委基础加强重点项目等 4 项；获省部级科技进步二等奖 3 项。

铝颗粒点火燃烧：从单颗粒到颗粒群

张家瑞*，黄利亚，马立坤，夏智勋

国防科技大学空天科学学院，长沙 410073

*Email: zhangjiarui@nudt.edu.cn

摘要：铝颗粒作为一种高能、零碳的金属燃料广泛应用于各种能源和动力系统，对其燃烧过程的高保真数值模拟和精细化实验观测具有重要意义。本文介绍了拉格朗日点源假设下的铝颗粒点火和双膜燃烧模型及其验证，随后对McGill大学铝颗粒本生灯火焰及对冲火焰进行了考虑详细化学反应机理的数值模拟；位加速气相化学反应机理的求解速度，建立了四变量的铝颗粒燃烧小火焰模型，并进行了验证。另一方面，搭建了铝颗粒射流火焰实验系统，分别利用发生光谱和吸收光谱得到了铝颗粒群燃烧过程的凝相和气相温度，结合大涡模拟进一步揭示了热伴流条件下铝颗粒射流火焰燃烧特性。

关键词：铝颗粒、粉尘火焰、点火燃烧、小火焰模型

报告人简介：

长期从事含能颗粒点火燃烧、固体组合动力等方面的研究。2022 年 6 月毕业于国防科技大学，期间赴德国斯图加特大学访学一年。曾获全军优秀硕士、博士学位论文奖、湖南省首届自然科学优秀学术论文一等奖（1）、空气动力学会科学技术一等奖（11）。主持国家自然科学基金青年基金、湖南省自然科学基金面上项目等 4 项。以第一作者/通讯作者身份在 CNF、CEJ、CJA、JPP 等期刊发表 SCI 论文 10 余篇。

硼的合金化构筑及其燃烧机理研究

张兴高，彭文联，何金燕，张鹏程，徐菡卿，周亮*

军事科学院防化研究院，北京 102205

*Email: 965749996@qq.com

摘要：硼燃料是公认的最有潜力的新一代含能燃料，但硼的局限性包括其较低的密度、长时间的点火延迟和相对较低的燃烧速率。提出了高密度高热值硼合金的构筑思路，制备了Mg-Al-B新型硼合金材料，利用复合材料的协同效应，实现硼合金材料比单独硼材料更高的密度、更短的点火延迟，更快的燃烧速度和更完全的燃烧。采用热分析仪DSC-TG，研究程序升温过程中硼合金燃料的热分解特性和在空气中的热氧化特性，采用基于激光点火的点火燃烧机理实验系统开展点火研究，分析并揭示揭示硼合金粉末的点火机理。采用高速摄影、红外测温仪、氧弹量热仪等实验技术，深入研究硼合金的燃烧机理，计算燃烧效率，揭示合金化对硼燃烧过程的影响机制，揭示合金化对硼燃烧能量释放效能的影响机制，对于提高推进剂、炸药和烟火药性能具有重要意义。

关键词：含能材料；硼；合金；点火；燃烧

报告人简介：

张兴高，军事科学院防化研究院研究员，博士生导师，《兵器装备工程学报》副主编、《含能材料》编委、《火工品》青年编委、中国兵工学会火工烟火专业委员会委员，全国燃烧节能标准化委员会委员、作为项目负责人主持完成国家自然科学基金等项目十余项，获得省部级科技进步二等奖两项，三等奖两项，发表论文五十余篇，授权专利二十余项，合作编写出版教材两部。

空天动力系统高温非接触测量技术

郑树*

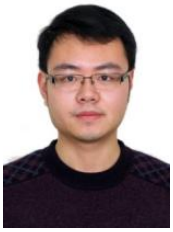
华北电力大学，北京，100096

*Email: shuzheng@ncepu.edu.cn

摘要：空天动力发动机燃烧过程的监测对于实时掌握发动机工作过程中的真实状态十分重要，然而，现在实际用到火箭发动机和冲压发动机中的测量技术比较单一，存在测不了、测不准、测不全的问题，制约了发动机的智能化发展，报告将针对发动机高温非接触测量问题展开汇报。

关键词：温度测量；非接触测量；发动机燃烧诊断

报告人简介：



郑树，华北电力大学教授。以第一/通讯在 Combustion and Flame、Fuel、International Journal of Heat and Mass Transfer 等发表 SCI 论文 65 篇，ESI 高被引论文 2 篇，他引 700 余次。作为负责人主持了国家自然科学基金面上项目 2 项、青年项目（结题优+）、军科委 XXX 工程项目 2 项、国家重点研发计划项目子课题 2 项，参与了国家重大科研仪器研制项目、国防科技 XXX 项目。担任《中南大学学报自然科学版》青年编委，International Journal of Coal Science & Technology 科学编辑，获 2023 年中国发明协会发明创新一等奖（第 1 完成人），入选江苏省 333 高层次人才。

三、口头报告

基于镁粉燃料的冲压式气固两相旋转爆震发动机实验研究

刘佳迅[1]，王旭[1,3]，刘永祺[1]，杨庆春[1,2]，徐旭[1,2*]

[1]北京航空航天大学宇航学院高超声速推进实验室，北京，102206

[2]航天液体动力全国重点实验室，北京，102206

[3]北京航空航天大学沈元学院，北京，102206

*Email: xuxu_1521@126.com

摘要：旋转爆震发动机（RDEs）因其具有结构简单，热循环效率高等优点，成为最具潜力的新型航空航天动力装置之一[1]。相较于气体和液体燃料，粉末燃料具有体积热值高，储存安全性强等优点。针对兼具循环优势和燃料优势的粉末燃料的气固两相旋转爆震发动机得到广泛研究，主要涉及到的粉末种类包括煤粉[2][3]和铝粉[4]。以气相反应为主的镁粉具有更快的反应速度，使得其应用于爆震领域更有前景。为了探索镁粉燃料爆震燃烧的可行性，本文进行了镁粉/氢气/空气燃料旋转爆震发动机的地面直连试验。试验选用中位径23μm的球形镁粉，空气温度为300K，空气流量为400g/s，选用空桶型燃烧室。通过高速摄影、高频光电信号和高频噪声信号对发动机燃烧特性进行了评估。以氢气作为流化气携带镁粉进入燃烧室（氢气当量比0.7~0.9，镁粉当量比0.1~0.3），两者均为非预混状态，试验结果表明，镁粉未在爆震波反应区内发生爆震燃烧，而是在波后发生了缓燃燃烧。少量镁粉的加入，并不会引起高当量比的氢气波速的下降。将当量比0.4的氢气与来流空气充分预混并在燃烧室内喷注当量比0.2的镁粉，发动机工作模态为振荡单波模态，具体体现在发动机中有且只有一个爆震波，但爆震波的传播速度是规律变化的，传播速度分别为1122m/s，1471m/s，1819m/s，2167m/s。对比于相同工况下的氢气/空气爆震燃烧情况来看，镁粉的加入未对发动机工作模态产生影响，主要导致了燃烧室压力的小幅增加，爆震波波速的小幅下降，爆震波反应区径向厚度的增加以及爆震波亮度的显著增加。

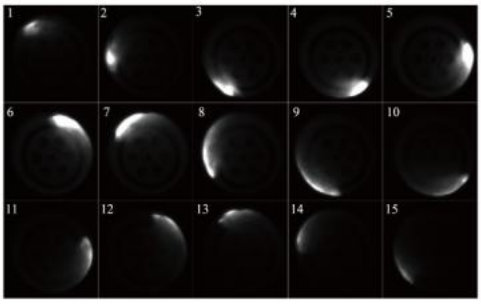


Fig. 1 Oscillating single wave mode in H_2/Air RDE

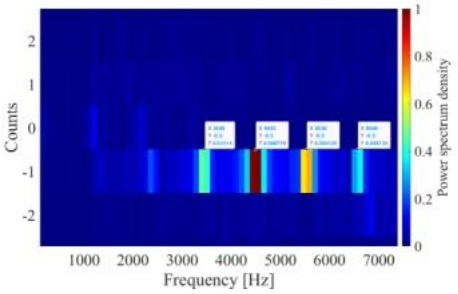


Fig. 2 Operating mode in H_2/Air RDE

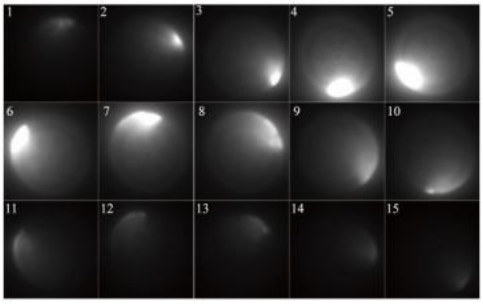


Fig. 3 Oscillating single wave mode in Mg/H_2/Air RDE

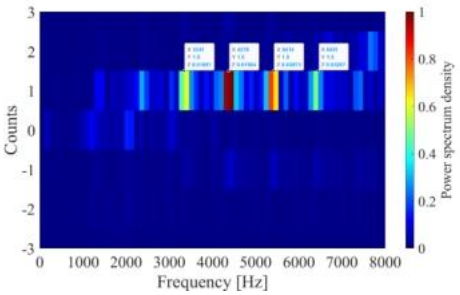


Fig. 4 Operating mode in Mg/H_2/Air RDE

关键词：旋转爆震发动机；镁粉；爆震波

参考文献

[1] Z. Xia, X. Tang, M. Luan, et al., Numerical investigation of two wave collision and wave structure evolution of rotating detonation engine with hollow combustor. Int. J. Hydrog. Energy 2018, 43: 21582-21591.

[2] I. Dunn, W. Flores, A. Morales, et al., Carbon-Based Multi-Phase Rotating Detonation Engine. J. Energy Resour. Technol. 2022, 144:042101.

[3] X. Ni, H. Xu, X. Su, et al., Effects of different physical properties of anthracite powder fuel on detonation characteristics of a rotating detonation engine. Phys. Fluids 2023, 35(5).

[4] J. Jing, H. Ma, An experimental study on gas-solid two-phase rotating detonation ramjet engine based on aluminum powder fuel. Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing, 2024, 2764(1): 012032.

报告人简介：

刘佳迅，北京航空航天大学在读博士研究生。

附：报告人是否为学生：是

铝基粉末燃料冲压发动机沉积特性试验研究

薛鸿涵，黄利亚*，张家瑞，刘子豪，杨和

国防科技大学空天科学学院，湖南 长沙，410073

*Email: huangliya05@nudt.edu.cn

摘要：粉末燃料冲压发动机兼具了液体燃料冲压发动机和固体火箭冲压发动机的优势，具有能量密度高且推力可调等优点，但燃烧产物易沉积，会加剧热防护材料烧蚀，降低发动机性能。然而目前针对粉末燃料冲压发动机燃烧产物沉积的相关研究较少，其沉积特性还不明确。本文设计了一种铝基粉末燃料冲压发动机原理样机并开展了地面试验。分析了发动机的燃烧与沉积特性。结果表明，燃烧室压力存在一定波动；沉积主要分布于喷管收缩段和二次进气口位置；二次进气口处的热防护材料烧蚀最为严重；增大空燃比对沉积分布几乎没有影响，但能有效减少燃烧室内沉积速率。同时探究了不同位置和不同深度的沉积物形貌与组分。在燃烧室头部，沉积物表面呈颗粒状，主要成分为铝，二次进气口下游的沉积物表面呈块状或条状，主要成分为氧化铝。发动机工作初期，沉积呈现为颗粒的聚合体，存在间隙，且铝元素含量较高，后期呈现为紧密块状，氧元素含量较高。

关键词：铝粉；沉积；试验；燃烧；冲压发动机

报告人简介：

薛鸿涵，国防科技大学空天科学学院硕士研究生，主要研究方向为固体冲压及动力技术。

附：报告人是否为学生：是

镁粉二次燃烧增强碳氢燃料冲压发动机推力研究

王旭 [1,2]，徐旭 [1,3]，刘永祺 [1]，刘佳迅 [1]，杨庆春 [1,3*]

[1] 北京航空航天大学宇航学院高超声速推进实验室，北京，102206

[2] 北京航空航天大学沈元学院，北京，102206

[2] 航天液体动力全国重点实验室，北京，102206

*Email: yangqc@buaa.edu.cn

摘要：更强的发动机推力和更高的飞行马赫数意味着更高的战场生存率，因此未来空天动力飞行器对燃料的能量密度和能量利用率提出了越来越高的要求[1-3]，特别是以碳氢燃料冲压发动机为代表的研究。在较高的飞行马赫数下，由于碳氢燃料燃烧温度与来流滞止温度相当，燃料释热严重不足，无法产生有效的净推力[4]。如何提高发动机能量利用率从而提升净推力，对此至关重要。为了探索解决该问题的新方案，本研究设计了一种新型粉末增强型冲压发动机(Powder-enhanced scramjet,PES)，其核心原理在于利用镁粉与碳氢燃料燃烧产物（二氧化碳、水蒸气和氮气）进一步燃烧释热以达到增强推力的目的[5]。在直连式冲压发动机原理性试验中，进气道出口马赫数 2.0，模拟来流总温度 1600 K，燃油 RP-3 当量比为 1.0。在发动机主燃烧室后一定距离，向一次燃烧产物中喷注镁粉进行二次燃烧，并通过测量沿程壁面压力来评估发动机推力性能。本研究详细探讨了不同构型和粉气比（粉末/燃气）对 PES 推力性能的影响。试验结果证实了 PES 概念的可行性，燃烧产物中添加镁粉后推力性能显著提升。当添加 7.5%镁粉时，最高比推力增益可达 28.8%。通过凝相产物成分分析，镁粉主要是与燃烧产物中的二氧化碳和水蒸气发生反应。在所设计的构型中，考虑到基础比推力、比推力增益和凝聚相产物沉积情况，结果显示采用中心支板喷注的方案在促进镁粉与燃气混合及促进燃烧方面表现出更佳的综合性能。粉气比 5~10%的范围内，提升粉气比可以显著提高发动机的推力性能。然而，当粉气比超过 9%后，受燃烧产物凝相损失影响，比推力增益增长速率开始下降。

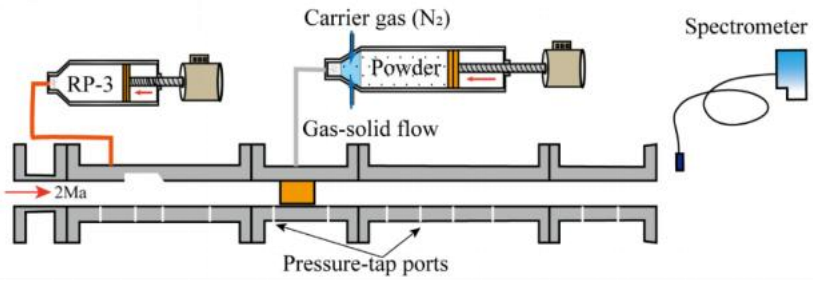


Fig.1 Schematic diagram of the PES experimental system

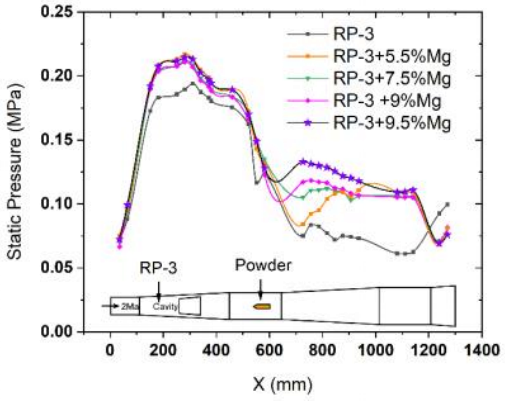


Fig.2 Effect of powder-gas ratio on engine wall pressure

关键词：高马赫数；粉末燃料；水蒸气；二氧化碳；推力性能

参考文献

[1] J. J. Bertin, R. M. Cummings. "Fifty Years of Hypersonics: Where We've Been, Where We're Going," Progress in Aerospace Sciences, 39(2003) 511–536.

[2] D. Sun, W. Cai, C. Li, J. Lu. "Experimental Study on Atomization Characteristics of High-Energy-Density Fuels Using a Fuel Slinger," Energy, 234 (2021) 121222.

[3] G. D. Roy. "Utilization of High-Density Strained Hydrocarbon Fuels for Propulsion," Journal of Propulsion and Power, 16 (2000) 546–551.

[4] T. Kokan, J. R. Olds. "Characterizing High-Energy-Density Propellants for Space Propulsion Applications," presented at the 57th International Astronautical Congress, Valencia, Spain, 2006.

[5] X. Wang, Y.X. Yang, Y.Q. Liu, et al. "Thermodynamic analysis of a high Mach number scramjet engine with secondary combustion for thrust enhancement," Therm. Sci. Eng. Prog.47(2024) 102275.

报告人简介：

王旭，北京航空航天大学在读博士研究生。

附：报告人是否为学生：是

基于贫氧固体推进剂的固体火箭旋转爆震发动机实验研究

刘延东[1]，夏智勋[1]，冯运超[1,*]，马立坤[1]，陈斌斌[1]

[1]国防科技大学 高超声速技术实验室，湖南 长沙，410073

*Email: yunchaofeng@nudt.edu.cn

摘要：经过多年的发展，基于爆燃燃烧的喷气推进系统性能接近理论上的极限，难以大幅提升，围绕未来飞行器对小体积、高性能的迫切需求，基于爆震燃烧的发动机有望得到进一步发展。为深入了解固体推进剂燃料在旋转爆震发动机领域的应用能力，本文对基于贫氧固体推进剂的燃气发生器式固体火箭旋转爆震发动机开展了实验研究。本研究搭建了一套燃气发生器式固体火箭旋转爆震发动机地面直连系统，解决了贫氧固体推进剂一次稳定燃烧供气和周向喷注的问题，并利用扫描电镜（SEM）和激光粒度分析仪（LPSM）确定一次富燃燃气中碳颗粒的平均粒径（D_{50}）为 1.73。研究中将一次富燃燃气与氢气在集气腔内进行混合，利用常温空气作为氧化剂，进行了点火实验，实现了气固两相连续旋转爆震波持续 2.1s 时长的稳定传播。实验结果表明，气固两相燃气爆震波传播速度为 1167m/s，理论 CJ 速度约为 2093m/s，速度亏损为 44.2%，主要原因是来流温度低，凝相颗粒反应速率慢。同时，通过对比多种内柱构型，发现采用凹腔结构能够促进气固两相爆震波的建立和持续稳定传播。所得研究成果可为下一步固体火箭旋转爆震冲压发动机的设计和实验提供一定指导。

关键词：贫氧固体推进剂；燃气发生器；气固两相；固体火箭旋转爆震发动机

报告人简介：

刘延东，国防科技大学空天科学学院博士研究生，研究方向为高超声速及组合推进技术，主持项目 1 项。

附：报告人是否为学生：是

高能电控固体推进剂制备及点火性能研究

李洋[1]，严启龙[1]，王毅[1]，宋思维[1]，张庆华[1,*]

[1]西北工业大学航天学院，陕西 西安，710072

*Email: qinghuazhang@nwpu.edu.cn

摘要：为实现固体火箭发动机多次启动和推力可调，新型点/熄火可控、燃速可调的电能控制固体推进剂（Electrically Controlled Solid Propellant，ECSP）及其发动机装药技术被研制[1-3]。本文主要为了解决高氯酸盐基ECSP能量低的问题，采用添加高能氧化剂二硝酰胺铵（Ammonium Dinitramide，ADN）的方法，通过配方筛选和优化确定高能电控固体推进剂配方，在此基础上，探索高能电控固体推进剂热分解特性，开展高能电控固体推进剂点火特性研究。采用能量性能计算程序和等性能三角图，计算满足能量要求所需的高能电控固体推进剂的主要成分。基于优化形成的高能固体推进剂配方，以ADN和高氯酸锂（Lithium Perchlorate，LP）为氧化剂、聚乙烯醇为粘合剂获得高能电控固体推进剂。通过优选制备的ECSP的爆热最高可达5 KJ/g，最大密度可达1.722 g/cm^3，摩擦感度均大于360 J，撞击感度大于20 J，最大的离子电导率为8×10^{-4} S/cm。ADN/LP基ECSP的热分解一个热分解过程。ADN/LP基ECSP点火发生在正极；增加电压、初始温度和ADN含量可以降低推进剂点火延迟时间。

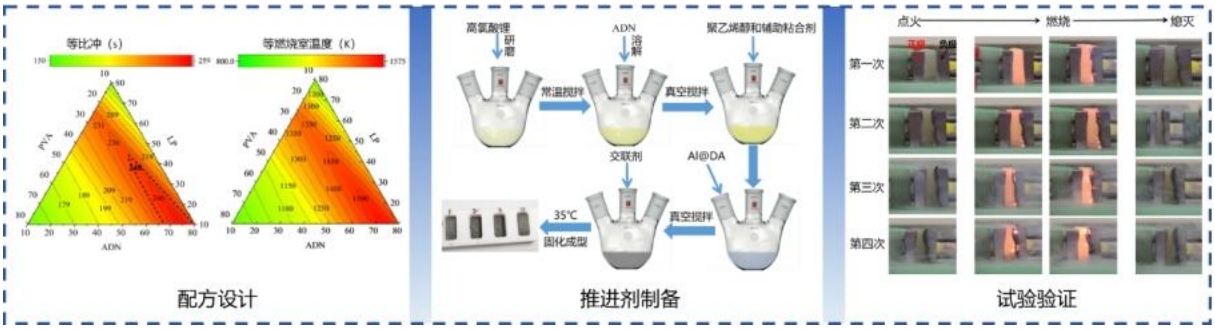


Fig. 1 Schematic of formulation, preparation and performance of high-energy ECSPs

关键词：ADN；电控固体推进剂；能量特性；热分解特性；点火特性。

参考文献

[1] Sawka W N, Mcpherso M. Electrical Solid Propellants: A Safe, Micro to Macro Propulsion Technology[C]. 49th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference, 2013.

[2] Gnanaprakash K, Yoh J J. Understanding the Pyroelectric Combustion Behaviour of Metallized Electrically Controlled Solid Propellants[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2022: 1540.

[3] Wang S Z, Lyu J Y, He W, et al. Thermal decomposition and combustion behavior of ion conductive PEO-PAN based energetic composites[J]. Combustion and Flame, 2021, 230: 111421.

报告人简介：

李洋，西北工业大学航天学院博士后。

附：报告人是否为学生：否

含硼推进剂近燃面燃烧产物特性分析

屈影[1]，夏智勋[1]，马立坤[1,*]，冯运超[1]，陈斌斌[1]

[1]国防科技大学 高超声速技术实验室，湖南 长沙，410073

*Email: malikun@nudt.edu.cn

摘要：含硼推进剂在固冲发动机内燃烧可分为燃气发生器内的一次燃烧和燃烧室内的二次燃烧两个阶段，它们共同决定推进剂的能量释放效率。近年来，随着固冲发动机燃烧室燃烧组织的深入研究，对含硼推进剂在燃气发生器内气固两相流的生成及演化过程研究提出了新需求。本文以含硼推进剂近燃面燃烧产物为研究对象，旨在为阐明气固两相流生成过程提供指导。基于搭建的高压激光点火系统，采用高速相机记录了含硼推进剂在0.1MPa和0.5MPa压强下的燃烧图像，利用图像测量方法获得了从燃烧表面逸出的较大砾岩的尺寸，并给出了相应的尺寸分布，研究发现，近燃面颗粒广泛分布在亚微米到毫米的尺寸范围内，这与从燃气发生器喷嘴出口获得的燃烧产物的尺寸分布明显不同。实验结束时，收集散落在燃烧器底部附近的燃烧产物。利用扫描电镜(SEM)和x射线能谱(EDS)对砾岩进行了初步分析，获得了燃烧产物的形态和成分信息。燃烧产物以珊瑚状团聚体形式存在，其由硼化合物、Al和Mg燃烧产物、未燃烧的金属颗粒(B、Mg、Al)和覆盖在每个颗粒表面的纳米级碳颗粒组成。

关键词：含硼推进剂；近燃面；一次燃烧；产物分析

报告人简介：

屈影，国防科技大学空天科学学院博士研究生，研究方向为推进系统燃烧理论与燃烧诊断技术，主持项目 1 项。

附：报告人是否为学生：是

超声速气流中气固两相射流颗粒分布试验研究

杨鹏年[1]，夏智勋[1]，马立坤[1,*]，段一凡[1]，冯运超[1]，陈斌斌[1]，陈兴元[1]，黄纲顺[1]

[1]国防科技大学 高超声速技术实验室，湖南 长沙，410073

*Email: malikun@nudt.edu.cn

摘要：超声速气流中气固两相射流（Particle-laden Jet into Supersonic Crossflow, PJSC）是化学工程领域的一个重要应用，如喷涂工艺和火箭推进等。颗粒分布特性对这些应用的成功至关重要，然而，关于颗粒在超声速气流中分布特性的试验研究鲜有报道。为深入理解 PJSC 中颗粒分布特性，本文设计并搭建了一套超声速气固两相射流试验系统，能够产生 Ma 2.6 的超声速来流和气固两相射流（出口直径为 D）。利用高速平面激光颗粒散射技术，实现超声速流场中微米级颗粒的可视化，并通过校准试验，获得了具有空间分辨率的颗粒浓度数据。分析了动量通量比（J）对颗粒分布的影响，发现颗粒在超音速气流中表现出明显的优先聚集行为，导致其在进入超音速气流后无法迅速弥散。颗粒的弥散过程可以概括为“聚集-拉伸-分解”。试验结果揭示了两种颗粒相干分布模式：拉丝分布和环状分布，前者在超音速气流中心区域形成，而后者位于射流尾迹区域。动量通量比显著促进了颗粒的穿透深度和弥散速率。颗粒的穿透边界具有自相似性，自相似参数为$DJ^{0.577}$。同时，建立了描述颗粒穿透边界自相似性的幂律函数。这项研究首次通过试验方法获得了 PJSC 中颗粒分布的典型特征，并提出了颗粒弥散模式和颗粒穿透深度的自相似参数，这些发现对于预测颗粒分布和优化设备性能具有重要意义。

关键词：颗粒分布；超声速气流；气固两相射流；自相似性；试验

报告人简介：

杨鹏年，国防科技大学大学空天科学学院博士研究生，研究方向为高超声速及组合推进技术。主持项目 1 项，一作/学生一作发表期刊论文 4 篇，其中 SCI 论文 3 篇；授权发明专利 2 项。

附：报告人是否为学生：是

海量粒子规模的铝颗粒分布式燃烧精细化建模研究

陈贺[1]，杨文婧[1,*]，褚开维[2]，刘佩进[1]

[1]西北工业大学固体推进全国重点实验室,陕西 西安,710072

[2]山东大学齐鲁交通学院,山东 济南，250100

*Email:yangwj@nwpu.edu.cn

摘要：含铝复合推进剂具有能量密度高的优点，在固体火箭发动机中应用广泛，但其中海量粒子的精细化建模是目前仍需解决的难题。本文基于 CFD-DEM 方法开展了固体火箭发动机内铝颗粒分布式燃烧的建模研究，成功耦合了微米尺度的铝颗粒分布式燃烧模块。模型通过粗粒化方法实现了海量粒子规模的计算模型，能够满足发动机颗粒数≥10^{13}的大规模多相流计算需求，通过与经典算例及实验数据对比，表明该模型同时具有微米级颗粒分布式燃烧模型的精确性。基于所建模型对典型发动机工况下的海量铝颗粒分布式燃烧流动过程展开数值分析，铝颗粒的分布式燃烧在充分考虑了粒子规模效应时，由于周围环境温度及浓度场的明显改变，与单颗粒的燃烧有着显著的不同，同时颗粒间的团聚及聚合效应也使得铝颗粒的燃烧时空效应发生改变。这些由于颗粒规模效应而产生的铝颗粒燃烧过程的变化，会进一步影响发动机内多相反应流场，能够提高发动机性能预测的精确性。

关键词：CFD-DEM 方法；铝颗粒燃烧；两相反应流；粗粒化模型；海量粒子

报告人简介：

西北工业大学航天学院在读硕士研究生，研究方向为固体火箭发动机内铝颗粒燃烧与流动数值模拟，发动机内两相流动数值模拟。

附：报告人是否为学生：是

高浓度铝颗粒在旋流燃烧器中长时自持燃烧的实验研究

董维[1]，唐勇[1]，赵马杰[1]，石保禄[1,*]

[1]北京理工大学宇航学院，北京，100081

*Email: shibaolu@bit.edu.cn

摘要：铝因为其成本低廉、储量丰富、高反应性和高能量密度的特点，被认为是向零碳社会转型过程中最有前途的绿色能源载体之一。本研究设计了一种实验室规模的创新的轴向-切向旋流燃烧器，用于实现高密度粉末流的长时间稳定自持燃烧。点火之前在冷流条件下对流场开展了粒子图像测速（PIV）测量，绘制了影响颗粒与氧化剂掺混的轴向-切向旋流流场运动云图。通过精心设计的点火程序，在O2/N2流中实现了高浓度铝颗粒的长期稳定燃烧，氧气摩尔分数范围为16%到100%，输出功率约为1-5 kW。通过对比不同质量流率的铝颗粒气溶胶（30-148 mg/s）在不同氧浓度的燃烧室环境中的燃烧工况，发现氧气浓度和颗粒质量流率的改变都会显著影响铝颗粒扩散火焰的燃烧速率，氧含量的降低还会在火焰根部引起振荡。

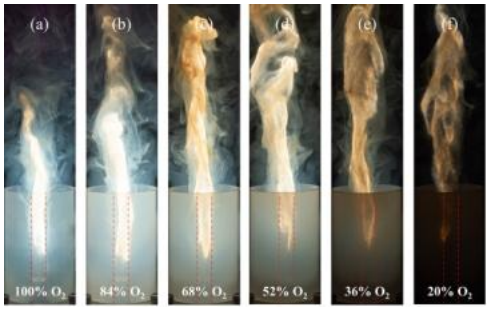


Fig. 1 Images of self-sustained flame of aluminum particles at different oxygen concentrations.

关键词：零碳燃烧；铝粉燃料；旋流燃烧器；自持燃烧；绿色能源。

报告人简介：

董维，北京理工大学宇航学院博士研究生，研究方向为含能颗粒燃烧的实验研究。

附：报告人是否为学生：是

自模板法制备含能中空球晶

李敏[1]，韩丹丹[1,*]，龚俊波[1]，李洪珍[2,*]，

[1]天津大学化工学院，天津，300072；

[2]中国工程物理研究院化学材料研究所，四川绵阳，621900

*Email: handandan@tju.edu.cn (D. Han); hongzhenli@caep.cn (H. Li)

摘要：具有空心结构的功能晶体具备特殊的性能，其制备策略尚有待探索[1]。本文提出了一种制备球形化中空含能晶体的新方法——自模板法。该方法利用自发的定向的相转化过程，在保留原始相形态的同时形貌演化为中空结构。首先，制备了β型六硝基六氮杂异伍兹烷（CL-20）的球形聚集体，该颗粒具有径向分布的子晶，定义为球晶（spherulites）[2]，并且在交叉偏振片下具有十字消光现象。接着，β-CL-20 球晶作为自模板，在微溶溶剂中室温浸泡后演变为 CL-20 新相的中空球晶。本工作展示了两个成功案例，分别是 CL-20-甲酸溶剂化物的核心中空球晶和 CL-20-CO_2 主客体包合物的子晶中空球晶（Fig. 1）；二者均表现出特殊的偏光现象，由此验证了原始相球晶结构的保留。对两个案例的相变动力学进行了详细分析，发现自模板策略的关键在于平衡 CL-20 的扩散动力学和新相的形成动力学。并从热力学和动力学角度讨论了两种案例的多级中空结构不同的原因。此外，CL-20-甲酸溶剂化物的核心中空球晶实现了可变的撞击感度，由此验证中空结构的引入使得含能晶体能够一定程度实现安全可控性。CL-20-CO_2 主客体包合物的中空球晶具备高达 14.40 m^2/g 的高比表面积，基于此，本工作开发出其作为复合物载体的优越性。通过简单的浸渍法得到了 CL-20-CO_2 负载氧化剂的球形复合颗粒，表现出增强的燃烧性能。本工作促进安全可控、燃烧增强的含能材料设计，并为功能晶体多级化中空结构的构筑提供新思路。

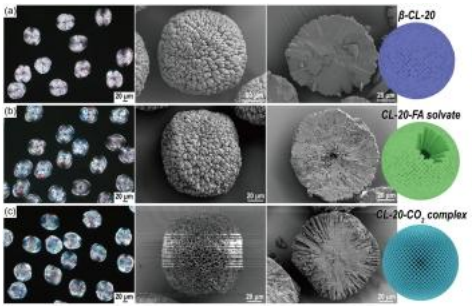


Fig. 1 Morphology of spherulitic particles of (a) β-CL-20, (b) CL-20-formic acid (CL-20-FA) solvate, and (c) CL-20-CO2 complex.

关键词：含能晶体；多级结构；中空结构；球晶；CL-20

参考文献

[1] T. Qiu, S. Gao, Z. Liang, D. G. Wang, H. Tabassum, R. Zhong, R. Zou. Pristine Hollow Metal–Organic Frameworks: Design, Synthesis and Application *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 17314-17336.

[2] A. G. Shtukenberg, Y. O. Punin, E. Gunn, and B.Kahr. Spherulites. *Chem. Rev.* 2012, 112 (3): 1805-1838.

报告人简介：

李敏，本科毕业于大连理工大学，现为天津大学化工学院化学工程专业硕博连读研究生，导师为龚俊波教授，研究方向是晶体生长、晶体工程，已于 *Small*，*Chem. Eng. J.*，*Ultrason. Sonochem.*，*Cryst. Growth. Des.*以第一作者发表论文 5 篇，荣获 2021 年硕士国家奖学金、天津大学一等学业奖学金（2021 及 2022）、中国化学会第 33 届学术年会优秀墙报奖。

附：报告人是否为学生：是

CuO改性微米级镁颗粒在CO_2氛围中的点火和燃烧特性研究

刘永祺[1]，王旭[1,2]，李孟雄[1]，杨庆春[1,3]，徐旭[1,3*]

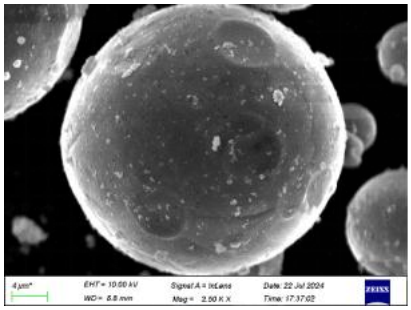
[1]北京航空航天大学宇航学院高超声速推进实验室，北京，102206

[2]北京航空航天大学沈元学院，北京，102206

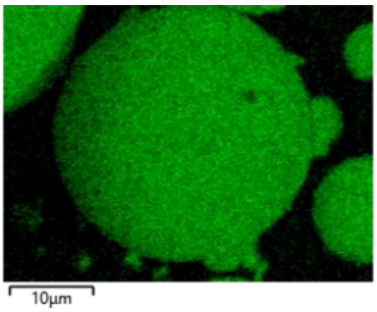
[3]航天液体动力全国重点实验室，北京，102206

*Email: xuxu_1521@126.com

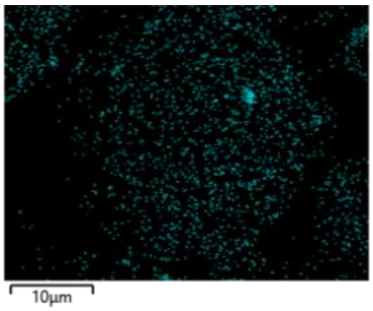
摘要：由于金属镁热值较高，点火温度低，可与空气、二氧化碳和水等多种物质燃烧释热的特性，研究人员在火星探测和碳氢燃料冲压发动机二次燃烧等领域对镁颗粒进行了大量研究[1,2]。然而， Mg在CO_2氛围中燃烧时在较低温度下进行的非均相反应速率较低，实际Mg/CO_2冲压发动机仍然存在颗粒点火延迟较高、燃烧效率低和积碳严重等问题[3,4]。使用CuO等金属氧化物对镁颗粒表面进行改性处理可以有效抑制燃烧过程中的低温氧化反应，降低点火温度[5]。为更加深入理解CuO对Mg/ CO_2燃烧过程的促进作用，本研究使用机械混合和超声分散的方法将纳米级CuO覆盖到微米级镁颗粒表面，制备了改性镁粉，并使用SEM和EDS对CuO纳米颗粒在镁颗粒表面的包覆情况进行了评估；基于氛围组分、温度和流速均可控的层流燃烧试验装置对改性镁颗粒群在CO_2氛围中进行了激光点火燃烧试验，并通过彩色工业相机和光谱仪进行了光学诊断。结果表明，改性镁粉颗粒表面有明显的CuO颗粒沾附；在温度600 K、流速8 m/s的纯CO_2氛围中，CuO与Mg质量比为1：100时，改性镁粉点火延迟低于纯镁粉，且燃烧过程火焰较为稳定。热重试验结果表明，升温速率为20 ℃/min时，添加CuO包覆后镁粉开始氧化的温度基本不变（约660℃），但氧化结束的温度由约850℃提前至约800℃，释热速率大幅上升，且释热峰释热量由4452.60 J/g提升至6384.68 J/g。表明CuO与Mg发生的镁热反应大量释热，疏松了镁颗粒表面原有的氧化壳，加速了内部镁芯的熔化和向外扩散，缩短了较低温下非均相反应阶段，使得镁颗粒可以快速过渡到较高反应速率的均相燃烧阶段，整体促进了镁颗粒的点火和燃烧过程。



(a) SEM image of modified magnesium powder



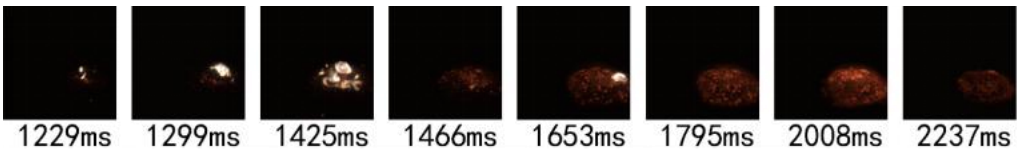
(b) Magnesium distribution(EDS)



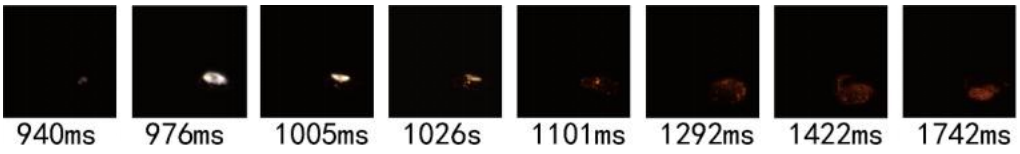
(c) Copper distribution(EDS)

Fig. 1 Micromorphology of modified magnesium powder

(mass of CuO : mass of Mg = 1:100)



(a)Mg



(b)CuO:Mg=1:100

Fig. 2 Combustion process of magnesium-based particles in CO_2

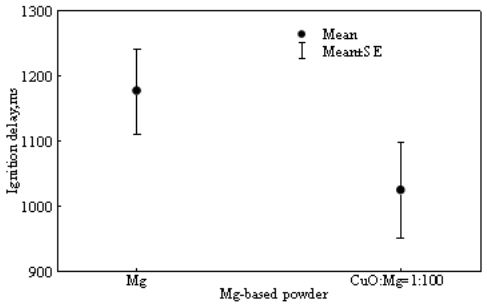


Fig. 3 Ignition delay time of of magnesium-based particles in CO_2

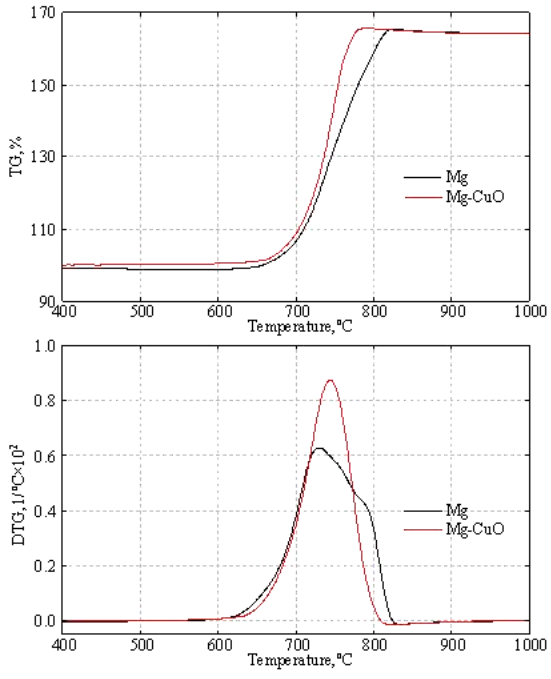


Fig. 4 TG/DTG results of Mg-based powder in CO_2 environment.

关键词：金属氧化物；改性颗粒；镁粉；点火延迟；燃烧机理

参考文献

[1] 王旭,卜彦鹏,徐旭,等.镁-二氧化碳冲压发动机粉末燃料供应特性研究[J].推进技术,2024,45(01):139-148.

[2] Wang X, Yang Y, Liu Y, et al. Thermodynamic analysis of a high Mach number scramjet engine with secondary combustion for thrust enhancement[J]. Thermal Science and Engineering Progress, 2024, 47: 102275.

[3] Li M, Wang Z, Xu R, et al. Advances in plasma-assisted ignition and combustion for combustors of aerospace engines[J]. Aerospace Science and Technology, 2021, 117: 106952.

[4] Xu W, Yanpeng B U, Xu X U, et al. Effect of mixing section configurations on combustion efficiency of Mg-CO2 Martian ramjet[J]. Chinese Journal of Aeronautics, 2023, 36(4): 165-173.

[5] Li M, Hu C, Li J, et al. Experimental study on the ignition and combustion of Mg particles enhanced by metal oxides in CO2[J]. Acta Astronautica, 2023, 203: 157-168.

报告人简介：

刘永祺，北京航空航天大学在读博士研究生。

附：报告人是否为学生：是

改性硼及其点火燃烧特性研究进展

黄纲顺[1]，冯运超[1,*]，夏智勋[1]，马立坤[1]，陈斌斌[1]，张家瑞[1]

[1]国防科技大学高超声速技术实验室，湖南 长沙，410073

*Email: yunchaofeng@nudt.edu.cn

摘要：本文以含硼贫氧推进剂与硼基粉末燃料为研究背景，综述了国内外有关硼颗粒的改性及其点火燃烧特性的研究进展，重点归纳总结了金属改性硼的三种形式（机械混合、表面包覆和合金化）、非金属改性硼以及其点火燃烧特性试验研究现状，总结了各改性方式的促进机理、改性硼的研究规划路线。提出了未来改性硼的研究方向：（1）试验研究：实现不同气氛条件下单颗粒从静态转向运动态的研究、颗粒群的点火燃烧研究以及如点火燃烧过程中微爆等特殊现象的进一步观测研究；（2）仿真研究：利用分子动力学等方法，结合改性硼点火燃烧过程试验研究结论进行深入分析，从而获深入阐明改性硼燃烧释热机理。

关键词：改性硼；点火燃烧特性；点火燃烧机理

参考文献

[1] 夏智勋，冯运超，马立坤，陈斌斌，李潮隆，杨鹏年，刘延东，屈影，赵康淳，赵李北，任鹏浩. 固体火箭超燃冲压发动机燃烧技术研究进展[J]. 航空学报, 2023, 44(15) :82-96.

[2]李锐霄，庞维强，蔚红建. 硼基金属复合物的点火和燃烧特性研究进展[J]. 火炸药学报, 2024, 47(3): 197-208.

[3]席剑飞，刘建忠，李和平，汪洋，张彦威，周俊虎，岑可法. 促进硼颗粒点火和燃烧的方法的研究进展[J]. 含能材料, 2013, (4): 533-538.

[4]于丹，卓建坤，姚强. 硼颗粒点火与燃烧性能的研究进展[J]. 燃烧科学与技术, 2014, 20(1): 44-50.

报告人简介：

黄纲顺,国防科技大学空天科学学院在读硕士研究生，2023 年获哈尔滨工程大学能源与动力工程学士学位，主要从事于固体金属颗粒的点火燃烧试验研究。

附：报告人是否为学生：是

金属氧化物掺杂纳米模板碳促进高氯酸铵分解机理研究

王佳欣，戴金宇，陈可道，朱宝忠，孙运兰*

常州大学石油与天然气工程学院，江苏 常州，213164

*Email: ylsun@cczu.edu.cn

摘要：降低高氯酸铵(AP)的分解温度对固体推进剂燃料的燃烧效率和能量输出至关重要。目前促进 AP 分解的金属氧化物催化剂存在比表面积较低、易团聚的缺点。本文采用气相沉积法制备三维微孔模板碳(ZTC)材料，通过沉淀法负载 Fe_2O_3、ZnO 和 Cu_2O 纳米颗粒合成了复合催化剂。通过热分析实验对比了 ZTC 载体及不同金属氧化物负载类型对 AP 分解性能的影响。发现加入 5%含量的 ZTC、Fe_2O_3@ZTC 和 ZnO@ZTC 催化剂后，AP 的高温分解峰分别降低了 30℃、35℃和 67℃。而 1%Cu_2O@ZTC 催化剂即可将 AP 的高温分解峰降低 102℃。尤其，5%Cu_2O@ZTC 样品可将 AP 的初始分解温度降低为 201℃。ZTC 的原始缺陷碳结构有助于 AP 分解，并且在 Cu_2O@ZTC 制备过程中，ZTC 缺陷碳结构可原位还原 Cu^{2+}为 $Cu_2O(Cu^{+})$和 Cu，对提升 AP 热分解性能起到协同作用。结合第一性原理分析，发现相比于 Cu，Cu_2O 在晶格氧的作用下，对 AP 的吸附能更大，吸附构型电子得失数量更多，AP 更容易发生 H-N 键发生断裂，促进 AP 脱氢分解。本研究成果可为 AP 分解催化剂的设计和应用提供理论和技术支持。

关键词：高氯酸铵；金属氧化物；沸石模板碳；掺杂；催化热分解

报告人简介：

王佳欣，常州大学石油与天然气工程学院，讲师，专业为动力工程及工程热物理，研究方向为含能材料高效燃烧。

附：报告人是否为学生：否

含能硼化物颗粒的氧化、点火及燃烧特性研究

许敦辉[1]，张思懿[1]，李敬轩[1,2,3]，姜岳[1,2,3,*]，杨立军[1,2,3]

[1]北京航空航天大学宇航学院，北京，100094；

[2]航天液体动力全国重点实验室，陕西 西安，710100；

[3]北京航空航天大学宁波创新研究院 先进飞行器与空天动力创新研究中心，浙江 宁波，315800

*Email: yuejiang@buaa.edu.cn

摘要：硼（B）具有极高的能量密度（58 MJ/kg），其颗粒被广泛用于固体推进剂和凝胶推进剂，以提高火箭发动机的比冲。但由于硼具有极高的熔沸点，且表面氧化硼易熔融团聚，导致硼颗粒点火性能差、燃烧效率低。近年来，硼化物被认为是解决硼颗粒燃烧问题的最具前景的替代燃料之一。为了进一步评估不同硼化物替代硼颗粒作为含能颗粒的可行性，我们考虑了多种由自蔓延高温合成法制备的硼化物颗粒：AlB_2、MgB_2、TiB_2和SiB_6。首先通过微观结构和成分表征确定了所制备硼化物颗粒的形貌特征与组分，进而通过热重分析和差示扫描量热法分析其热化学特性。结果发现，除SiB_6外其他硼化物均降低了硼的初始氧化温度。同时，金属（Al、Mg和Ti）有助于增加硼在高温下的氧化程度，而Si则严重降低了硼的热反应性。在激光点火实验中， MgB_2有着最短的点火延迟时间和自维持燃烧时间，而AlB_2的燃烧速率明显高于TiB_2和SiB_6。在所有燃烧过程中，高速相机均捕捉到了AlB_2、MgB_2、TiB_2的黄绿色锥形火焰，这与光谱仪所捕获的B的中间产物（BO和BO_2）生成有关。AlB_2的自维持燃烧时间最长且燃烧强度较大，而MgB_2在燃烧后期火焰中喷出了大量的火花，导致了燃烧强度的剧烈波动。通过对冷凝产物的收集发现，SiB_6燃烧所形成的团聚体最大而MgB_2最小，这与燃烧过程中气相反应程度及所生成的金属硼酸盐息息相关。对于金属硼化物来说，燃烧过程中金属硼酸盐的形成对B_2O_3的去除有着巨大帮助，这些硼酸盐将液态B_2O_3转化为固体氧化物化合物从而减少了熔融B_2O_3在硼颗粒表面的团聚，进而促进了硼与氧的相互扩散。但是，SiB_6燃烧产生的硼硅酸盐反而会抑制硼的反应性。本研究积累了多种硼化物颗粒的燃烧特性数据，将有助于推动硼化物颗粒在含能推进剂中的应用。

关键词：含能颗粒；硼；硼化物；热氧化性；点火；燃烧

报告人简介：

许敦辉，第一作者，男，北京航空航天大学宇航学院推进系 2024 级博士研究生，主要研究方向为**固体推进系统燃烧理论及燃烧诊断**。

附：报告人是否为学生：是

氟化石墨烯增强微米级铝颗粒燃烧特性研究

张思懿[1]，姜岳[1,2,3,*]，李超[1]，李敬轩[1,2,3]，杨立军[1,2,3]

[1]北京航空航天大学宇航学院，北京，100094；

[2]航天液体动力全国重点实验室，陕西 西安，710100；

[3]北京航空航天大学宁波创新研究院 先进飞行器与空天动力创新研究中心，浙江 宁波，315800

*Email: yuejiang@buaa.edu.cn

摘要：氟化石墨烯（GF）具有二维结构和表面氟含量高的优点，可用于增强微米级铝（μAl）颗粒的燃烧特性。然而，GF对μAl燃烧的促进机制尚不完全清楚。本文采用激光点火以及光学诊断实验的方法，研究了GF对μAl颗粒燃烧温度、火焰发射光谱、点火延迟时间和凝聚燃烧产物尺寸（CCPs）的影响。并比较了GF和聚四氟乙烯（PTFE）改性μAl复合颗粒的燃烧特性，阐明了不同氟化物对μAl着火和燃烧机理的影响。结果表明，GF和PTFE的热分解行为及其对激发态Al原子能量分布的影响有显著差异。与PTFE相比，GF及其分解产物对高能激发态Al原子具有更强的激发能力，有利于提高颗粒火焰的燃烧温度。此外，Al/GF的点火延迟时间和CCPs尺寸分别比Al/PTFE降低约49%~66%和10%。这些结果为功能化石墨烯在金属燃料和固体推进剂中的应用提供了基本的理解和数据支持。

关键词：铝颗粒；氟化石墨烯；固体推进剂；点火延迟；燃烧机制

报告人简介：

张思懿，第一作者，女，北京航空航天大学宇航学院推进系 2022 级博士研究生，主要研究方向为高能燃料配方及燃烧不稳定性。

附：报告人是否为学生：是

团聚硼的点火模型研究

冯滢[1]，李广燚[1]，唐勇[1]，赵马杰[1,2]，石保禄[1,2*]

[1]北京理工大学宇航学院，北京，100081

[2]北京理工大学重庆创新中心，重庆，404100

*Email: shibaolu@bit.edu.cn

摘要：随着战争手段的不断创新，对武器装备的先进水平提出了更高的要求，固冲发动机是高超声速飞行的有效动力装置。冲压发动机根据类型可以分为固体火箭冲压发动机、粉末燃料冲压发动机和固体燃料冲压发动机，硼由于其较高的质量能量密度（58.86 kJ/g）和体积能量密度（137.73 kJ/cm^3），在前两种类型的固冲发动机燃料中扮演了重要的角色。然而，硼颗粒在发动机中的实际应用中并非以单颗粒的形式存在，实际情况下，细小硼颗粒形成的团聚体在一定的尺寸范围内表现出自相似的分形结构，提供了丰富的反应区域。因此，硼颗粒团聚体的点火过程相比单个颗粒更为复杂。为准确预测团聚硼的点火时间，基于多孔介质理论，综合考虑了微小孔隙中氧化剂克努森扩散以及团聚体内的氧化剂浓度分布，建立了硼颗粒团聚体的点火模型，并与实验数据进行了对比，结果吻合较好。通过分析比表面积、平均孔直径和氧化剂浓度对点火时间的影响规律，发现点火时间随着比表面积的增大而缓慢增加；随着平均孔径的增大而逐渐减小，但减小趋势逐渐变缓；随着环境中氧化剂浓度的升高而减小。

关键词：硼颗粒；团聚体；点火模型；点火时间

报告人简介：

冯滢，博士研究生，主要研究方向为硼颗粒点火和燃烧机理以及固体火箭冲压发动机两相流燃烧模拟方法研究。

附：报告人是否为学生：是

活性炭负载金属氧化物燃烧催化剂的精准构建及催化高氯酸铵热分解机理研究

李丹[1]，李建国[1]，秦利军[1]，胡逸云[1]，冯昊[1,2,*]

[1]西安近代化学研究所，含能材料全国重点实验室，陕西省西安市丈八东路168号，710065

[2]西安近代化学研究所，氟氮化工资源高效开发与利用国家重点实验室，陕西省西安市丈八东路168号，710065

*Email: fenghao98@hotmail.com

摘要：高氯酸铵（AP）作为复合固体推进剂中最常用的氧化剂，其质量占比可达60%～80%，其热分解性能对于推进剂燃烧性能有着至关重要的影响。降低AP的高温分解峰温（T_{HTD}）能够有效地缩短推进剂的点火延迟时间，并提升推进剂的燃速。而添加燃烧催化剂被认为是降低AP T_{HTD}的一种有效策略[1,2]。碳材料作为一种高比表面积的载体，除可燃烧外还能有效防止表面所负载物种的团聚，将碳材料与氧化物相结合，燃烧催化性能有望进一步提升。基于此，课题组借助先进的原子层沉积（ALD）技术，在活性炭（AC）载体表面构筑了系列纳米复合燃烧催化剂（AC@TiO_2、AC@Fe_2O_3和AC@TiO_2@Fe_2O_3），并系统研究了上述燃烧催化剂对AP热分解反应作用。研究结果表明，AC在分散活性位点，降低惰性物质的负载量的同时本身又具有催化作用，并可能参与了AP热分解反应。复合催化剂中的TiO_2物种能够显著提高AP热分解过程的放热量，Fe_2O_3物种能够大幅度降低AP的T_{HTP}，而采用ALD技术构建的Fe_2O_3-TiO_2界面物种在大幅度降低AP的T_{HTP}的同时又能显著增加其分解过程的放热量。热力学和动力学研究结果证实，Fe_2O_3-TiO_2界面是催化AP分解的活性中心[3]，精确调控界面活性中心含量可实现AP分解温度在249℃至438℃范围内可调；此外，采用ALD技术构建的Fe_2O_3-TiO_2界面活性中心在显著提升AP分解过程的放热量和极大提升其反应速率的同时还能大幅度降低反应活化能（放热量提升7倍，反应速率常数*k*提升3个数量级以上，活化能Ea降低一半）。本研究结果表明采用ALD技术精准构建的纳米复合燃烧催化剂在催化AP热分解反应中性能卓越，具有广阔的应用前景。

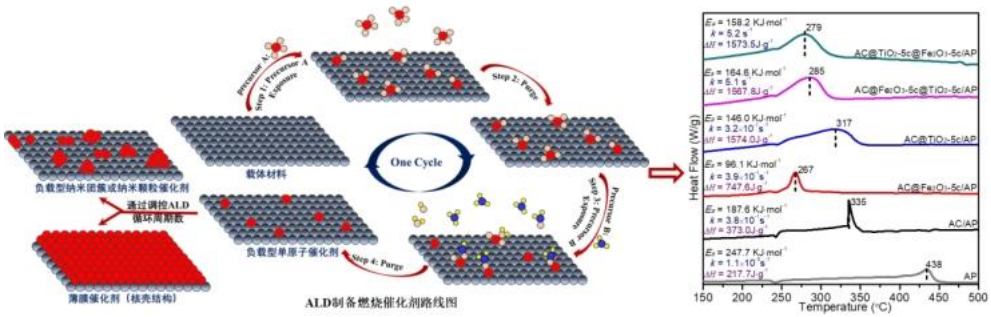


Fig. 1 Graphic depiction of fabrication of combustion catalysts via ALD; DSC curves and kinetic values of pure AP, AC/AP, AC@Fe_2O_3-5c/AP, AC@TiO_2-5c/AP, AC@Fe_2O_3-5c@TiO_2-5c/AP, and AC@TiO_2-5c@Fe_2O_3-5c/AP under Ar atmosphere.

关键词：高氯酸铵；热分解；燃烧催化剂；原子层沉积技术

参考文献

[1] Yan, N.; Qin, L.; Li, J.; Zhao, F.; Feng, H. Atomic layer deposition of iron oxide on reduced graphene oxide and its catalytic activity in the thermal decomposition of ammonium perchlorate. *Applied Surface Science* 2018, *451*, 155-161.

[2] Zhang, M.; Zhao, F.; Li, H.; Yang, Y.; An, T.; Jiang, Y.; Li, N. Morphology-dependent catalytic activity of Fe2O3 and its graphene-based nanocomposites on the thermal decomposition of AP. *FirePhysChem* 2021, *1*, 46-53.

[3] Li, D.; Li, J.; Qin, L.; Hu, Y.; Gong, T.; Zhang, W.; Hui, L.; Feng, H. H-titanate Nanotube Supported Fe2O3 Nanoparticles for Enhancing the Thermal Decomposition of Ammonium Perchlorate: the Superb Catalytic Activity of Interface Sites.

Applied Surface Science **2021, 150207.**

报告人简介：

李丹，女，西安近代化学研究所，含能材料全国重点实验室副研究员，2014年本科毕业于西北农林科技大学应用化学系，2019年博士毕业于中国科学技术大学化学物理系，研究方向为表面化学与纳米催化，2019年7月加入西安近代化学研究所含能材料全国重点实验室冯昊研究员的原子层沉积技术团队，主要从事燃烧催化剂合成、燃料表面改性和复合含能材料的制备工作，发表文章十余篇，授权专利十余项。

附：报告人是否为学生：否

超高时间/空间分辨下的微米级铝锂单颗粒悬浮燃烧

王旭 [1,2]，徐旭 [1,3]，刘永祺 [1]，刘佳迅 [1]，杨庆春 [1,3*]

[1] 北京航空航天大学宇航学院高超声速推进实验室，北京，102206

[2] 北京航空航天大学沈元学院，北京，102206

[3] 航天液体动力全国重点实验室，北京，102206

*Email: yangqc@buaa.edu.cn

摘要：Al-Li合金粉末由于其中Li的低熔点/沸点和高反应活性使得其相比Al粉具有更高的活性和反应速率，因此在近年来引起了研究者们极大的兴趣[1-3]。然而受限于粒子的尺度（通常数微米到数十微米），对颗粒燃烧过程的高精度观测极为困难。为了获得高分辨率的成像，研究者们采用颗粒群[4]、数百微米级单颗粒[5]或将粒子直接固定于显微镜下的载玻片上[6]开展试验，然而效果依旧不理想。为了更加深入理解颗粒的燃烧机理，如氧化铝帽形成机制及模型，本研究展示了一种超高时间（us）/空间（nm/pix）分辨下的无接触原位成像和测量方案。通过电动悬浮装置将微米级单颗粒悬浮定位后，可在不同组分、压力和温度环境下开展激光点火燃烧试验，并通过高速和高分辨率成像等设备获取精细化的颗粒燃烧过程的详细定量化参数。利用显微悬浮装置对Al-Li（5%）单颗粒燃烧过程的研究表明，粒子燃烧过程中表面氧化铝扩散速率远高于气相冷凝速率，氧化铝帽由表面熔融氧化铝扩散堆积而成，其与熔融颗粒球之间的夹角在40~50°之间，初始表面覆盖率接近15%。氧化铝帽会减少颗粒活性反应面积，降低铝液滴的蒸发量，这也是导致前期数值模拟得到的燃烧时间低于实际燃烧时间的主要原因。在燃烧过程中，通常氧化铝帽只有一个，但也会由于氧化铝液滴飞溅和气相冷凝等方式形成一些小的氧化铝帽。在燃烧的后期，氧化铝帽会逐渐覆盖整个颗粒，从而导致粒子的燃烧速率减缓，开始偏离D^2定律。此外，随着环境压力的提升，燃烧速率在逐渐增加，除氧化剂分子数密度增加外，还发现另一主要原因在于表面液态氧化铝帽会随着颗粒高速自转（通常可达到2000转/秒）产生飞溅和破裂，从而增加了氧化剂反应接触面积。

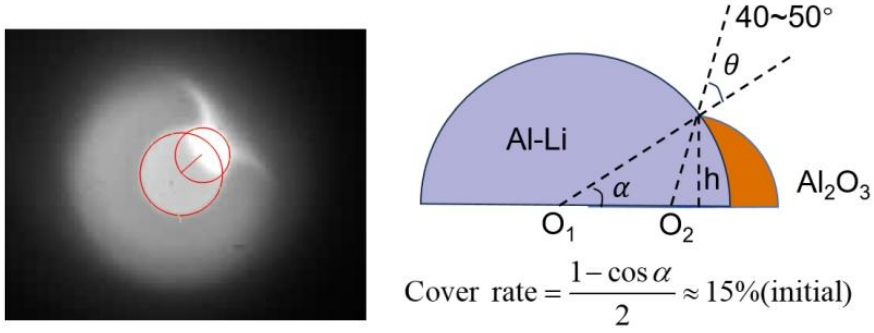


Fig. 1 The image of the oxide caps during particle combustion and model

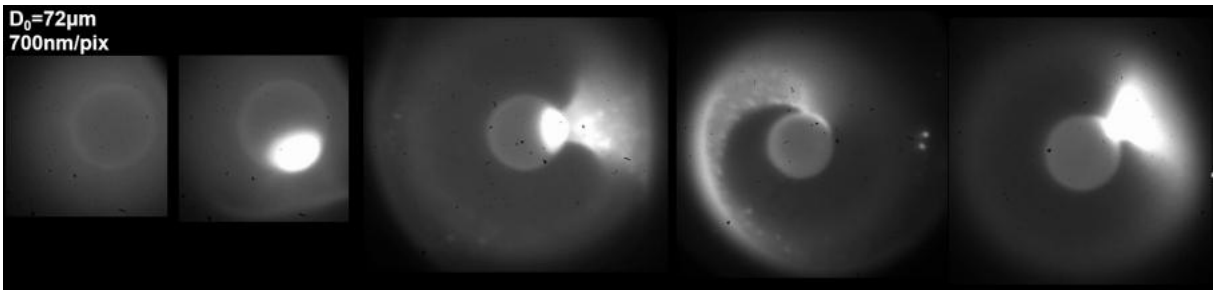


Fig. 2 Typical combustion sequence in air (p=3 atm)

关键词：铝锂合金；悬浮燃烧；氧化铝帽；燃烧机理

参考文献

[1] B.C. Terry, I.E. Gunduz, M.A. Pfeil, et al., A mechanism for shattering microexplosions and dispersive boiling phenomena in aluminum–lithium alloy based solid propellant, Proc. Combust. Inst. 36 (2) (2017) 2309–2316.

[2] X. Zhu, M. Schoenitz, E.L. Dreizin, Mechanically alloyed Al–Li powders, J. Alloy Compd. 432 (1–2) (2007) 111–115.

[3] M. Ruesch, S.F. Son, C.S. Goldenstein, Characterization of aluminum-lithium composite-propellant flames via laser absorption spectroscopy, AIAA Scitech 2021 Forum (2021).

[4] L. Wei, W.J. Zhao, Y.L. Zhu, et al., In-situ assembly of Al-Li-Si alloy powders with enhanced thermal stability and tailored combustion, J. Alloy Compd. 968 (2023) 172270.

[5] Y. Wang, H. Zhang, Z. Zhu, et al., Aluminum droplet, oxide cap and flame segmentation in burning Al/AP propellants by combining YOLOv7 and two-stage cluster, Measurement. 227 (2024) 114264.

[6] H.Y. Wang, D.J. Kline, M.R. Zachariah, et al., In-operando high-speed microscopy and thermometry of reaction propagation and sintering in a nanocomposite, Nat. Commun.10(2019) 3032.

报告人简介：

王旭，北京航空航天大学在读博士研究生。

附：报告人是否为学生：是

高活性铝镁合金热氧化特性及其应用研究

陈涛[1,2]，杨伯涵[1,2,*]，范玉琪[1,2]，李建华[1]，张宏毅[1]，罗俊波[1]

[1]湖北航天化学技术研究所，湖北 襄阳 441003

[2]航天化学能源全国重点实验室，湖北 襄阳 441003

*Email: yangbohan@casc42.cn

摘要：针对含硼推进剂中无定形硼粉低压燃烧不充分的问题，采用DSC-TG联用仪测试了AM合金室温至1200℃的热氧化特性，筛选了活性较高、氧化反应程度较大的AM-4合金，系统考察其对含硼富燃料推进剂燃速、压强指数等一次燃烧性能的影响。结果表明：AM合金在升温范围分2个阶段发生热氧化反应，分别与纯金属Mg、Al热氧化反应历程基本吻合，合金化可以降低其氧化反应峰温、提高热氧化反应程度，且体系中Al粉的热氧化程度随Mg含量增加而显著增大。以AM-4合金取代辅助燃料Mg+Al，相应推进剂的燃速增大，压强指数及低压下一次喷射效率略有提高。

关键词：铝镁合金；热氧化；含硼推进剂；一次燃烧性能

报告人简介：

陈涛，湖北航天化学技术研究所工程师。

附：报告人是否为学生：否

微波水分仪用于快速测试聚合物粉体中的极微量水分

唐远旺*

北京海菲尔格科技有限公司，北京，100022

* Email：thomas.tang@hiferg.com

摘要：随着新能源行业及电子材料的快速发展，高性能粉体产品的微量水分的测试越来越凸显其重要性。精准、快速、在线、自动化控制成为行业对于水分测试的主要关注点之一。传统水分测试方法测试时间长、操作繁琐、人工取样、效率低，无法实现在工业大生产中快速测试粉体水分。微波水分仪是一种超快速、高灵敏度的水分测定方法，得到的是聚合物粉体的内部水分而非表面水分，测试下限可达20ppm量级的含水量。微波水分仪可以在1秒内完成微量水分测定，可以更好地服务于苛刻条件、极低水分含量的聚合物粉体颗粒的测试。微波水分仪可以安装于工业生产线，用于对聚合物粉体水分进行实时监控。本文以聚四氟乙烯粉体的极微量水分测试为例，阐述了微波水分仪对于20-100ppm量级水分测试的解决方案。数据表明，微波水分仪可以很好地表征PTFE粉体的极微量水分含量同时能给出粉体的堆密度值。

Table 1　Moisture content of different PTFE powders

样品	PTFE-A	PTFE-B	PTFE-C	PTFE-D
1	0.0037%	0.0038%	0.0032%	0.0032%
2	0.0037%	0.0039%	0.0030%	0.0029%
3	0.0036%	0.0036%	0.0031%	0.0030%
4	0.0036%	0.0038%	0.0030%	0.0029%
5	0.0036%	0.0037%	0.0029%	0.003%
平均值	0.00364%	0.00376%	0.00304%	0.00300%
标准偏差	0.00005%	0.00011%	0.00010%	0.00011%

关键词：粉体水分；微波水分仪；在线监控；PTFE；堆密度

报告人简介：

唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器分析行业技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

附：报告人是否为学生：否

高氯酸铵粒度对静电火花感度影响研究

张虎生[1]，姚二岗[2]，郝海霞[2]，徐司雨[1,*]

[1]南京理工大学，江苏 南京 210094

[2]西安近代化学研究所含能材料全国重点实验室，陕西 西安 710065

*Email: 342323079@qq.com

摘要：高氯酸铵(AP)是固体推进剂中最常用的氧化剂，具有相容性好、氧含量和生成焓高、热安定性良好及性能稳定、价格低等优点[1,2]。目前国内外学者对 AP 的机械感度做了很多工作，研究表明随着粒度减小 AP 的机械感度急剧升高[3,4]，从而使其在使用过程中的危险程度也随之急剧升高。但是对于 AP 的静电火花感度研究报道较少，本文探讨了粒度和温度对静电火花感度的影响，通过对六种不同粒度 AP 的试验，研究结果表明随着颗粒粒径的减小，需要的 50%静电发火能 E_{50} 也随之减小，因此 AP 的静电火花感度会随着粒径的减小而增大。AP 颗粒越小，比表面积就越大，所接受电场击穿时所承受的能量也就越大，容易引起爆炸反应，所以随着 AP 粒度的减小，AP 的静电火花感度增加。除此之外还研究了 25℃、60℃、90℃温度梯度下的静电火花感度，结果表明 AP 的静电火花感度会随着温度升高而升高，这是由于环境温度升高并保持恒定，当少量药品进入发火室后温度也会随之升高，温度升高致使 AP 颗粒本身所蕴含的能量增大，同时温度升高也使得湿度降低，试样所带电荷不易导出，所以在静电火花感度试验过程中药粒吸收能量的开始值增高，则距离发火的所需的能量就会变少，导致感度升高。所以颗粒粒度和环境温度都会严重影响 A 的 P 静电火花感度，该变化规律的提出为提高 AP 在制备及应用过程中的安全性提供了充要依据。

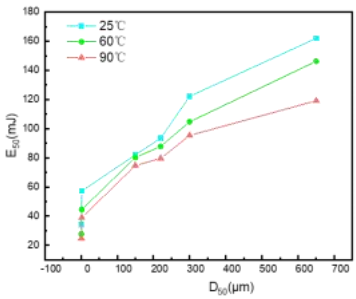


Fig. 1 AP electrostatic spark sensitivity law diagram

关键词：静电火花感度；高氯酸铵；粒度梯度；温度梯度

参考文献

[1] 林大泽, 徐天瑞. 工业粉尘防爆与治理[M]. 北京:科学技术出版社,1990.

[2] MALLICK L, KUMAR S, CHOWDHURY A. Thermal decomposition of ammonium perchlorate a TGA-FT.IR-MS study: Part I [J]. Thermochimica Acta, 2015. 610: 57-68

[3] 李凤生. 特种超细粉体制备技术及应用[M]. 北京:.国防工业出版社，2002: 63-64.

[4] 王彩玲, 赵省向. 不同粒度 AP 的机械感度[J]. 火 炸药学报, 2006, 29(6): 27-29.

报告人简介：

张虎生，男，26 岁，汉族，南京理工大学硕士在读研究生。

附：报告人是否为学生：是

活性MgAl合金颗粒燃料性能研究

徐司雨[1,*]，黄太仲[2]，姜菡雨[1]，姚二岗[1]，李　恒[1]，赵凤起[1]

[1]西安近代化学研究所含能材料全国重点实验室，陕西 西安，710065

[2]济南大学化学与化工学院，山东 济南，250022

*Email: xusy99@163.com

摘要：活性金属颗粒是固体火箭推进剂的重要成分，其燃烧焓高、密度大，有利于提高推进剂的密度比冲和爆热。目前推进剂中应用的微米Al粉颗粒存在一定问题，如点活性能差、燃烧效率较低、燃烧团聚严重等。因此，开发活性含量高、点火温度低、燃烧效能高的Al基金属颗粒越发受关注。研究设计典型比例Al和Mg合金加入水冷铜坩埚，开启高频加热装置氩气环境熔炼，经冷却破碎得到组分均匀合金。采用SEM、XRD、金相分析和点火燃烧技术进行了合金结构性能表征。图1显示了典型合金$Al_{3.5}Mg_2$、Al_3Mg_2和$Al_3Mg_{2.5}$的XRD结果。虽各合金颗粒衍射峰有一定差别，但主要衍射峰对应的衍射角基本相同，经Jade软件检索后，发现在三种合金中均存在Al_3Mg_2相，并且占据合金相组成的主要组分，其中$Al_{3.5}Mg_2$相的衍射峰相对于Al_3Mg_2合金的衍射峰略向左偏移，根据Shirrely公式推测合金的晶胞参数有可能会有所增加，可能是由于合金中Al元素和Mg元素的原子半径不同所造成的。图2可以看出，几种AlMg合金颗粒的点火性能优于常用5 μm铝粉，这证明Al、Mg合金有降低Al粉的点火延滞时间作用，分析原因一方面是于由AlMg形成合金后，两者之间形成了电子重新分配，提升了颗粒化学反应活性；另一方面，AlMg合金颗粒也易于打破Al表面致密氧化膜，促进了氧在合金表面和晶粒界面中的扩散，提高了合金的点燃性能，降低了点火延滞时间。采用氧弹量热装置测试得到的$Al_{3.5}Mg_2$、Al_3Mg_2、$Al_3Mg_{2.5}$合金的燃烧热分别为28.3 MJ/kg、27.4 MJ/kg和25.8 MJ/kg，同时还发现其点火温度基本不受合金组分变化的影响。由合金的燃烧热变化规律可以看出，随着合金中Mg含量的增加，合金的燃烧热逐渐降低，这与Mg的燃烧热低于Al的燃烧热的变化规律是一致的。

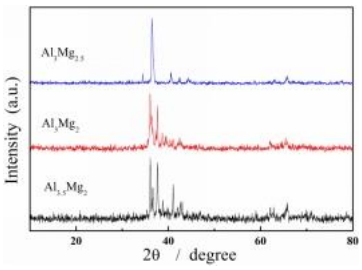


Fig. 1　XRD curves of AlMg alloy particles

图 1　典型 AlMg 合金颗粒的 XRD 曲线

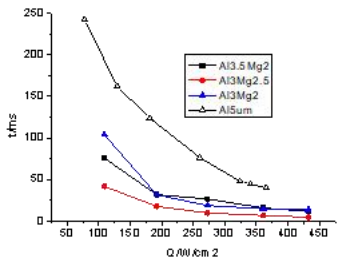


Fig. 2　Ignition of AlMg alloy particles

图 2　典型 AlMg 合金颗粒的点燃性能

关键词：AlMg合金颗粒；颗粒表征；点燃性能

报告人简介：

徐司雨，西安近代化学研究所研究员。

附：报告人是否为学生：否

水蒸气氛围下硼颗粒点火燃烧实验研究

杨干，陈斌斌*，夏智勋，段炼，冯运超，马立坤，张家瑞

国防科技大学高超声速技术实验室，长沙，410073

*Email: chenbinbin11@nudt.edu.cn

摘要：硼颗粒是最具应用前景的含能颗粒之一，硼/水燃烧有望成为水下推进系统的优质动力来源。为明晰硼颗粒在纯水蒸气或高浓度水蒸气氛围下的点火燃烧过程和影响规律，本文利用激光点火实验系统开展实验，通过高速摄影观察了纯水蒸气和 50% H2O + 50%O2 气氛下硼颗粒的点火燃烧过程，通过光纤光谱仪获得了光谱数据和颗粒表面温度，分析了水蒸气浓度和激光加热功率对硼颗粒点火燃烧过程的影响。结果表明硼颗粒在纯水蒸气氛围下燃烧时没有 BO 和 BO2 发射光谱，水蒸气浓度越大（氧浓度越小），点火延迟越短，自维持燃烧时间也越短，光谱强度较弱，颗粒表面温度也较低，但仍高于氮气、二氧化碳等环境。分析认为氧化层厚度也是控制硼水燃烧速率的关键因素之一。

关键词：硼颗粒；水蒸气；点火燃烧；金属燃料

报告人简介：

杨干，国防科技大学空天科学学院博士研究生。

附：报告人是否为学生：是

四、墙报

热伴流下含硼煤油凝胶雾化燃烧特性研究

龚名荃，黄利亚*，张家瑞*，杨大力

国防科技大学空天科学学院，湖南 长沙，410073

*Email: huangliya05@nudt.edu.cn

摘要：凝胶推进剂具有能量密度高、储存安全和流量可调节等优势，对于航空航天动力系统极具吸引力。然而，含硼煤油凝胶存在固液两相耦合燃烧的复杂性，对于其雾化燃烧过程作用机理认识不足。对此，本文设计搭建了凝胶雾化燃烧实验系统，结合观测测量及后处理方法，分析不同氧气浓度对雾化燃烧火焰及气态污染物排放的影响规律。结果表明，含硼煤油凝胶雾化燃烧火焰沿轴向主要分为煤油主燃区、硼/煤油耦合燃烧区和硼颗粒单相燃烧区。随着氧气浓度的增加，含硼煤油凝胶雾化火焰的托举高度逐渐降低，火焰宽度逐渐增大。同时硼颗粒反应提前，燃烧更加剧烈。与纯煤油相比，含硼煤油凝胶 CO 排放量降低，然而 NOx 排放增加。相关研究结果为含硼煤油凝胶高效燃烧提供理论依据。

关键词： 含硼煤油凝胶；雾化燃烧；火焰结构；气态污染物

墙报展示人简介：

龚名荃，国防科技大学在读硕士研究生。

附：墙报展示人是否为学生：是

铝基粉末燃料水冲压发动机旋流燃烧性能研究

刘子豪，黄利亚*，张家瑞

国防科技大学空天科学学院，湖南 长沙，410073

*Email: huangliya05@nudt.edu.cn

摘要：铝水冲压发动机利用粉末燃料与水反应产生高温燃气，通过将其排出产生动力，具有能量密度大、稳定性高、经济性好，推力可调等优点，在水下航行器和水陆两用动力系统等领域具有广阔的运用前景。本文利用热力计算分析了不同工况对发动机理论性能的影响，优化了铝颗粒点火燃烧模型，建立铝颗粒水冲发动机内部燃烧流动数值模拟方法，利用地面直连试验数据对该方法进行验证，结果表明：数值模拟结果与仿真结果误差在5%以内；提出了一次进水、二次进水两种构型方案，利用数值仿真分析了水燃比、水蒸气初温、二次进水等参数对发动机燃烧规律的影响规律，结果表明：存在一个最佳水燃比使得发动机具有最大燃烧效率，水蒸气初温的提高对发动机内部的燃烧流动具有促进作用，增加二次进水可以提高发动机推力；设计并搭建了铝水冲压发动机燃烧试验系统，开展不同水燃比、不同燃烧室压力的地面直连试验，验证了发动机燃烧流动特性与规律，其中试验中发动机最大燃烧效率高达95.71%。研究结果可为今后颗粒水冲压发动机系统设计提供参考。

关键词：颗粒燃烧；铝水反应；旋流燃烧；数值仿真；直连试验

墙报展示人简介：

刘子豪，国防科技大学在读硕士研究生。

附：墙报展示人是否为学生：是

超声速来流条件下可燃气固两相流燃烧流场特性分析

赵翔*，王联红，潘毅，高文亮，李煊

海军航空大学，山东 烟台，264000

*Email:zx_sean@163.com

摘要：目前，针对气固两相流的求解器主要适用于亚声速[1, 2]，本文基于开源 CFD 平台，开发一款求解器，用于求解超声速来流条件下可燃气固两相流的燃烧过程。假设理想气体、气相可压和固相体积分数可忽略，采用欧拉法求解气相场，采用标准 k-ε湍流模型封闭雷诺时均方程，采用 PaSR 燃烧模型和详细化学反应模拟燃烧过程。采用拉格朗日法追踪固体颗粒，固相考虑碳颗粒和硼颗粒。碳颗粒的燃烧考虑三步表面反应[3]，表面燃烧速率由扩散过程和化学动力共同控制[4]，硼颗粒采用改进 PSU 模型[5]。气固两相双向耦合，通过有限体积法离散。采用文献试验结果[6]，验证了求解器对求解超声速来流条件下可燃气固两相流燃烧过程的适用性，结果如下：

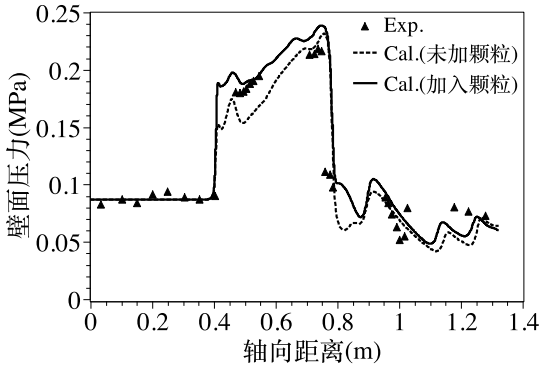


Fig. 1 Verification

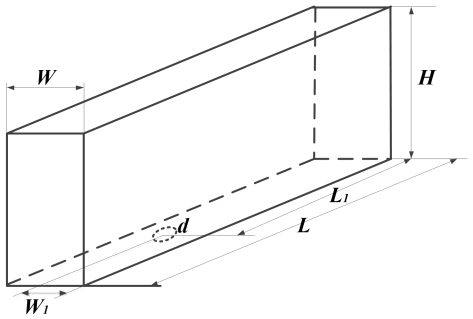


Fig. 2 Schematic of pipe for calculation

采用上述求解器对超声速来流条件下可燃气固两相燃烧流场特性进行研究。计算采用的物理模型见 Fig. 2，超声速来流从左侧进入管道与从下侧喷孔喷出的可燃气固两相流掺混燃烧，L 取 700mm、L_1 取 500mm、W 取 50mm、W_1 取 25mm、H 取 100mm、d 取 10mm。可燃气固两相颗粒组份包括 CO、H_2 和 $MgCl_2$，质量占比分别为 47%、11%和 42%；固相考虑碳颗粒和硼颗粒，质量占比分别为 29%和 71%，粒径分别为 10 μm 和 3 μm。

超声速来流的静压、静温和速度分别为 93 kPa、930K 和 1350 m/s，可燃气固两相流的静压、静温和速度分别为 500 kPa、1881 K 和 976 m/s。由于在计算过程中，先进行气相流场的计算，待其稳定后，再加入颗粒，直至算例稳定，得到最终仿真结果，因此，此处列出了未加入颗粒的中间结果与加入颗粒的最终结果，对比分析其差异。

Fig. 3 Density contours at symmetry plane

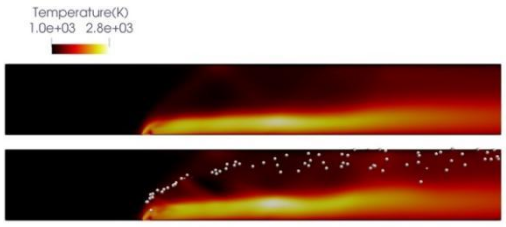


Fig. 4 Temperature contours at symmetry plane

Fig. 3 为密度场云图，Fig. 4 为温度场云图。尚未加入颗粒时，可燃气相在喷射点同侧贴着壁面燃烧，形成高温低密度的区域。喷射点的加质与燃料的燃烧导致了超声速来流的减速，在管道中形成了激波串；当加入颗粒时，颗粒的运动在流场中产生了局部的扰动，密度场中的激波受到了扰动，局部出现了“锯齿”，此外，颗粒的燃烧也会形成局部的高温区，导致温度场中颗粒途经的区域及其下游形成“带状”的火焰，并进一步影响到密度场的分布。

根据颗粒表面燃烧的模型，碳颗粒表面燃烧的主要产物为 CO，硼颗粒表面燃烧的主要产物为 B_2O_2，颗粒分

布及主要产物分布见 Fig. 5 和 Fig. 6。Fig. 5 所示为对称面碳颗粒的运动轨迹及 CO 的分布，由于可燃气固两相流中含有 CO，因此，下壁面燃气喷射点及其下游存在大量的 CO，在超声速来流剪切力的作用下呈现“带状”的特点。通常，在速度相同的情况下，固相由于密度较大，其动量一般比气相大。因此，碳颗粒在进入燃烧室后，具有更大的垂直穿透深度，在运动过程中，其与超声速来流存在轴向速度差，在气流的粘性作用下，颗粒运动受到了拖曳力的影响，这也是颗粒受到的最主要的力。所以，在横向喷射的情况下，颗粒运动轨迹呈现“类抛物线”的形式，并在碰触到壁面后发生反弹。碳颗粒在运动过程中会与 O_2、H_2O、CO_2 发生化学反应，并生成 CO，在来流的粘性力作用下，生成的 CO 也被牵拉成“带状”。结合颗粒温度，可以发现，碳颗粒温度越高，生成的 CO 质量分数占比越多。Fig. 6 所示为燃烧室对称面 B_2O_2 的分布及硼颗粒的运动轨迹，与碳颗粒不同，硼颗粒由于粒径更小，在三维方向上受到的拖曳力更小，在相同垂直初速度的情况下，相比于碳颗粒，垂直方向的速度衰减较小，在撞击到壁面后，会以相应的垂直速度反弹，随后这些颗粒依旧以“类抛物线”的方式向下游运动，因此硼颗粒的扰动范围较大。

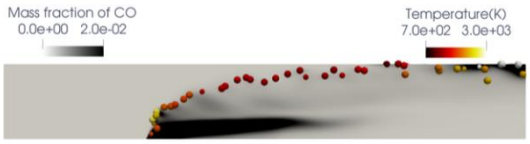


Fig. 5 Mass fraction of CO and carbon particle distribution at symmetry plane

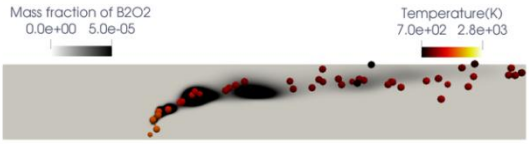


Fig. 6 Mass fraction of B_2O_2 and boron particle distribution at symmetry plane

关键词：超声速气流；气固两相流；数值仿真

墙报展示人简介：

赵翔，海军航空大学教员。

附：墙报展示人是否为学生：否

Zr/ZrB2复合颗粒的制备及性能研究

伍唯炜，黄蕾，于海洋，周星*

国防科技大学空天科学学院材料科学与工程系，湖南 长沙，410000

*Email:xingzhou_nudt@nudt.edu.cn

摘要：锆粉（Zr）具有密度大，热值高，能量释放率较高等优势，可用于制备高能量固体推进剂[1]。但其静电感度高，存在较大安全性问题，限制了其在固体推进剂中的应用[2]。为降低 Zr 的静电感度，需要对其进行表面改性[3]。本研究通过 Zr 与 B 高温反应生成陶瓷相 ZrB_2，制备表面陶瓷化的 Zr/ZrB_2 复合颗粒来对锆粉进行表面改性，对改性前后的 Zr 进行了燃烧热、热氧化特性和静电感度进行了测试，同时研究了 Zr 粒径对 Zr、B 反应程度及复合颗粒热氧化性能的影响。

研究发现，在 900°C 下高温原位反应制备的 Zr/ZrB_2 复合颗粒提升了 Zr 的相关性能。Zr/ZrB_2 复合颗粒的燃烧热为 10480.0 $J•g^{-1}$，相比于 Zr，提高了 7.3%；热力学计算结果表明，改性后的 20 μm Zr，其表观活化能从 131.54 kJ/mol 增加到 323.41 kJ/mol (见图 1)，Zr/ZrB_2 颗粒的热氧化反应率与 ZrB_2 含量呈正相关(见图 2)，即 ZrB_2 的存在，增大了反应能垒，有利于提高颗粒稳定性；静电最小点火能从 6.25 mJ 提升至 36 mJ，表明陶瓷相 ZrB_2 包覆在 Zr 颗粒表面，降低了复合颗粒的表面电阻率，增强了材料的抗静电性能。

此外，Zr/ZrB_2 颗粒的低温反应活性随粒径的增加而增加。与 Zr 颗粒相比较，10 μm 和 45 μm Zr 的制备的 Zr/ZrB_2 颗粒反应活性增加，而 20 μm Zr 制备的 Zr/ZrB_2 颗粒钝化，热稳定性增加。

关键词：原位生成；Zr/ZrB_2 颗粒；热氧化特性；静电最小点火能；粒径

墙报展示人简介：

伍唯炜，来自国防科技大学空天科学学院材料科学与工程系。

附：墙报展示人是否为学生：是

DATNBI炸药结构形态调控及其机理研究

王影[1]，韩丹丹[2]，龚俊波[2]，张祺[3]，李洪珍[3]，张庆华[1,*]

[1]西北工业大学航天学院，陕西西安，710072

[2]天津大学化工学院，天津，300072

[3]中国工程物理研究院化工材料研究所，四川绵阳，621900

*Email: wangying333@tju.edu.cn

摘要：含能材料是武器系统、航空航天以及国民经济发展的关键基础。含能材料的安全、能量、机械等性能受到多尺度因素的共同影响，其中晶型和晶体形貌是其关键影响因素，目前大多数含能晶体调控依赖于经验，缺乏对分子组装规律、晶体性质与性能三者联系的认知。本文以低感高能炸药，4,4'，5,5'-四硝基-1H,1'H-[2,2'-联咪唑]-1,1'-二胺（DATNBI）为模型物质，通过结合结晶过程研究和计算机模拟技术，对其晶型、晶习及表面形貌进行了调控，并深入探讨了其控制机理。

首先，针对难以从分子组装行为理解炸药溶液多晶型的问题，本文建立了一组顺序参数，用于预测其不同体系中多晶型的变化趋势，并通过能量计算，分析了不同单体和二聚体在气相与溶剂环境中的稳定性及其转化关系。研究结果揭示，DATNBI的多晶型主要由溶液中的二聚体形态决定，同时也受到结晶速率和晶型转化能垒的影响。

其次，针对大多数通过溶剂化物获取特定无溶剂晶型的工艺需要两步完成的现状，应用原位溶剂化物介导转晶策略，一步制备高纯α-DATNBI晶型，解决了晶型不纯引发的炸药安定性问题。通过实验设计、光谱技术与密度泛函计算，探究了溶剂化物介导的相变过程，并且揭示了溶液、溶剂化物和目标晶型三相之间的转化机制。再次，针对低感高能材料结构中特殊的氢键模式与其晶习之间的规律尚不清晰的问题，通过分析电荷分布及氢键分布，揭示了分子和晶体结构中氢键位点的分布特征，发现高氢键密度的晶面与极性溶剂的相互作用最为显著。通过分子动力学模拟、晶习预测和蒸发实验，证实了在不同溶剂中晶面的附着能和晶习是由氢键位点决定的，最终导致晶体的长径比与溶剂极性之间存在正相关关系，与其炸药安全性呈负相关关系。

最后，针对有机晶体难以在保持原有形貌的前提下，直接在溶液中进行表面改性的现状，通过基于晶体工程策略分别制备了表面形貌与功能不同的core@self-shell炸药晶体与表面缺陷炸药晶体，分别实现了能量与感度的平衡，以及提升聚合物粘结炸药的机械性能。通过一系列表面性质与炸药性能表征阐明了晶体表面形貌特征，如孔隙率，比表面积，粗糙度与性能的构-效关系。该研究表明通过控制浓度、悬浮时间等条件可以有效控制晶体表面溶剂化物的量，从而实现特定功能的表面定制。

关键词：含能材料；晶型；晶体形貌；表面改性；分子模拟

墙报展示人简介：

西北工业大学航天学院博士后，合作导师为国家杰出青年基金获得者张庆华教授，目前研究方向为含能材料结晶过程调控。2024 年博士毕业于天津大学化工学院国家工业结晶工程技术研究中心，师从工业结晶专家龚俊波教授，2021 年于中国工程物理研究院化工材料研究所进行联合培养，导师为炸药结晶专家李洪珍研究员。主要研究方向为结晶热力学，结晶工艺及过程控制，含能材料的晶体形貌的调控与预测技术，晶体多态性及其微观机理研究，多组分晶体研究，以及计算化学在结晶中的应用。以第一作者在 Chem. Eng. J., Food Chem., Cryst. Growth Des., Ind. Eng. Chem. Res. 发表论文 8 篇，多次参加国内外学术汇报，获得优秀报告奖两次，优秀墙报一次。

附：墙报展示人是否为学生：否

不同类型氟聚物影响纳米铝颗粒点火燃烧的微观反应机理研究

倪博[1]，戴金宇[1]，李宏伟[1]，张明龙[1]，杨天宇[1]，王佳欣[1]，朱宝忠[1]，孙运兰[1,*]

[1]常州大学，江苏 常州，213164

[*]Email: ylsun@cczu.edu.cn

摘要：铝（Al）粉因其高的能量密度和热值在固体推进剂中应用广泛。然而，在推进剂燃烧过程中 Al 粉易发生团聚，导致其燃烧效率降低，从而影响推进剂比冲。氟电负性强，利用氟聚物改性 Al 粉可以提高其燃烧效率，但不同氟聚物发挥作用的效果不同，此差别产生的原因尚且未知。因此，本文利用 ReaxFF-MD 方法结合点火实验研究了不同氟含量的 PTFE（聚四氟乙烯）、PVDF（偏二氟乙烯）和 THV（四氟乙烯、六氟丙烯和偏二氟乙烯三元共聚物）与纳米 Al 颗粒（Al NPs）相互作用的过程。研究发现，不同氟聚物与 Al NPs 的预点火反应机理不同。不含 H 的 PTFE，其 F 原子从分子链主链上脱离后，直接与 Al 表面氧化层反应生成 Al_xF_y 或 $Al_xO_yF_z$，即发生预点火反应（PIR1）。含 H 的 PVDF 和 THV，F 原子和 H 原子与氧化层发生协同反应，生成 $Al_xF_yH_z$ 或 $Al_xO_yF_zH_n$，也发生预点火反应（PIR2），但两种预点火反应机理明显不同。在燃烧过程中，高氟聚物质量比和高氟含量能够有效降低 Al NPs 反应的能垒，促进其燃烧放热，抑制其在燃烧过程中的团聚。这些结果从原子水平上揭示了不同氟含量的氟聚物促进 Al NPs 点火燃烧的差别，为氟聚物改善 Al NPs 点火燃烧提供了理论支撑。

关键词：铝粉；氟聚物；点火燃烧；ReaxFF；分子动力学

墙报展示人简介：

倪博，常州大学石油与天然气工程学院硕士研究生，专业为动力工程及工程热物理，研究方向为含氟聚合物改性 Al 粉燃烧，师从孙运兰教授。

附：墙报展示人是否为学生：是

不同温度下氧浓度对硼颗粒点火燃烧特性的影响研究

孙特[1]，焦思洋[2]，张罡陌[1]，唐勇[1]，石保禄[1]，赵马杰[1,*]

[1]北京理工大学宇航学院，北京，100081

[2]西安航天动力技术研究所，陕西 西安，710025

*Email: zhaomj@bit.edu.cn

摘要： 粉末燃料冲压发动机是以高能金属或硼等粉末为燃料、以冲压空气作为氧化剂和工质的一种新型冲压发动机[1]。粉末燃料（铝、镁、硼）具有高的能量热值和体积热值，与其它粉末燃料相比，硼由于自身较高的能量特性以及两相流损失小等优异性能，被认为是具有很大应用潜力的粉末燃料[2,3]。马里兰大学的Young等[4]基于平面燃烧器研究了纳米硼在不同氧浓度和温度条件下的点火燃烧特性，结果表明纳米硼颗粒的点火延迟时间仅与环境温度密切相关，对氧浓度变化并不敏感；而燃烧时间则同时受到氧浓度和温度的影响。Jan Veith[5]研究发现微米级颗粒的总燃烧时间主要受到环境温度的影响，环境温度影响硼颗粒点火，氧浓度影响点火后的燃烧阶段。Foelsche[6,7]实验研究了硼颗粒在氢氧燃烧产物环境中的点火燃烧过程，未观察到硼的分阶段燃烧现象，结果表明颗粒点火延迟时间和燃烧时间随着压力和温度的升高而缩短；而随着环境中氧浓度的提高，点火延迟时间和燃烧时间会先缩短后增加。目前国内外学者针对硼在氧氛围下燃烧已开展了部分实验研究，但针对宽范围温度下氧浓度对硼颗粒点火燃烧过程的影响研究较少，环境温度和氧浓度会耦合影响硼颗粒的热氧化特性，对硼颗粒点火燃烧特性的影响尚需进一步探究。

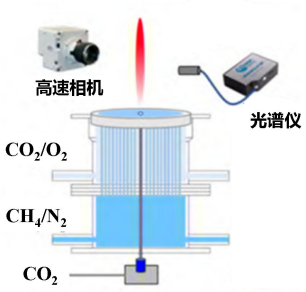
本文采用平焰燃烧器测试系统（如Fig. 1 所示），开展不同环境温度、氧浓度氛围下纯硼颗粒的动态点火燃烧特性的研究。利用马尔文粒度分析仪对颗粒的粒度分布进行表征（如Fig. 2 所示），平均粒径约为1 μm；同时利用扫描电子显微镜（SEM）对硼颗粒的微观形貌进行分析（如Fig. 3 所示）。采用稀释甲烷作为燃料气，使用氧气作为氧化气，在燃烧器表面形成直径约为70 mm的准一维平面火焰。采用高速相机记录硼颗粒的点火和燃烧过程，设定高速相机帧率为1000 fps，曝光时间为400 μs。基于甲烷与氧气一步完全燃烧反应假设，获得理论温度下等压绝热完全燃烧情况时CH_4、O_2、N_2的配比[8]。本文针对硼粉燃烧使用的Φ75 mm型燃烧器主要设计4个温度工况参数点，理论绝热火焰温度分别为1500 K、1800 K、2100 K、2400 K，而在不同温度下氧浓度设计5个工况参数点，分别为0.10、0.15、0.20、0.25、0.30，分析环境温度、氧浓度等参数对硼颗粒点火燃烧过程火焰形貌、点火时间和燃烧时间等参数的影响，揭示硼颗粒的点火燃烧机理。

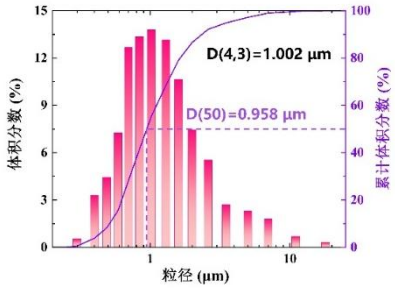
本文通过对不同环境温度、氧浓度氛围下纯硼颗粒的动态点火燃烧特性研究，得到的主要结论如下：

（1）单颗粒硼的燃烧过程主要分为两个阶段（如Fig. 4 所示），0~6 ms为点火阶段，颗粒吸收热量达到着火温度被点燃，在此阶段硼颗粒的燃烧火焰呈现暗黄色，并随着时间推移颗粒火焰变亮变大，直至颗粒燃烧呈现绿色火焰，此时认为点火阶段结束。在点火阶段由于颗粒被氧化层包覆，燃烧火焰亮度相对较暗。6 ms后为燃烧阶段，这一阶段硼颗粒开始剧烈燃烧，燃烧强度逐渐增强，火焰呈椭球型，呈现出明亮的白光并且火焰外围包裹着一层绿色火焰，火焰持续一段时间后开始变小变暗，颗粒燃烧火焰由绿色转变为暗黄色，最终熄灭。

（2）在不同环境温度下，硼颗粒的点火时间随着氧浓度的增加而降低（如Fig. 5 所示）。这是由于氧浓度增加导致硼颗粒表面与氧气接触面积增大，促进硼颗粒的氧化反应，加快反应速度，使得点火时间降低。环境温度较低时（1500 K、1800 K），点火时间变化与环境温度密切相关，对氧浓度变化敏感性较弱；但当环境温度达到2100 K、2400 K时，点火时间变化将同时受到环境温度和氧浓度的影响，当氧浓度为0.10、0.15、0.20时点火时间大幅度增加，当氧浓度为0.25、0.30时，点火时间对温度、氧浓度的敏感性急剧下降。XiaoCheng Mi[9]认为硼颗粒表面存在孔隙，有助于颗粒与氧气的反应；B_2O_3氧化层增厚会堵塞孔隙导致颗粒内部氧浓度不足。在高温环境、低氧浓度条件下，B_2O_3生成速率加快，导致B_2O_3氧化层增厚，使得颗粒的孔隙率降低，颗粒内部氧浓度大幅度降低，导致在高温低氧条件下点火时间增加甚至点火失败。同时冷态颗粒在高温环境下由于对流加热和辐射加热的作用，颗粒温度迅速升高导致氧化层呈现液态，由于液体的表面张力以及颗粒的粘性，导致部分颗粒会形成团聚效应。而Young等[4]认为团聚体内部邻近颗粒生成的B_2O_3氧化层会互相凝结，阻碍氧气与硼颗粒的互换，抑制了硼颗粒的燃烧，这与上述现象基本一致。

（3）在不同环境温度下，硼颗粒的燃烧时间随着氧浓度的增加而降低（如Fig. 6 所示），这与Fig. 7 光谱测量结果完全吻合，温度、氧浓度增加会导致颗粒的燃烧强度增加，同样氧浓度增加导致硼颗粒的氧化反应速度增加，降低燃烧时间。环境温度低于1800 K时（1500 K、1800 K），燃烧时间变化同时受到环境温度和氧浓度的影响，硼颗粒的燃烧由环境温度和氧浓度耦合机制控制；当环境温度高于1800 K时（2100 K、2400 K），燃烧时间变化主要由氧浓度控制，对环境温度变化敏感性较弱。这是由于硼颗粒在高温环境下燃烧时，化学反应速率较快，氧气扩散速率相对较慢，燃烧反应速率主要受氧气扩散过程控制。





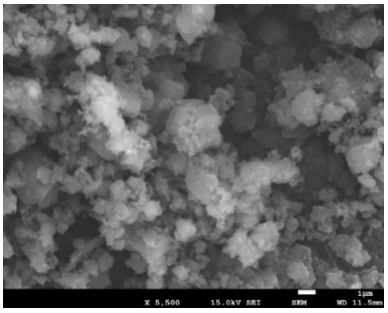
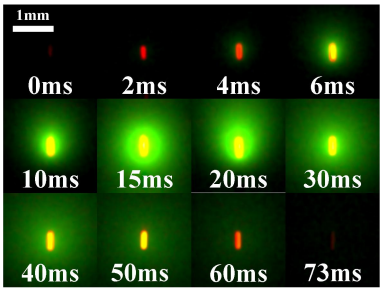


Fig. 1 Flat flame burner testing system [10] **Fig. 2** Boron particle size distribution map **Fig. 3** SEM image of boron particles



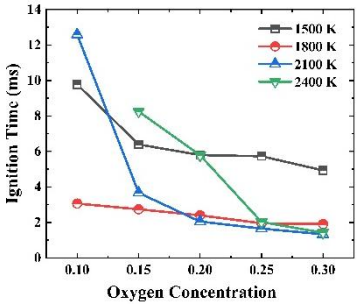
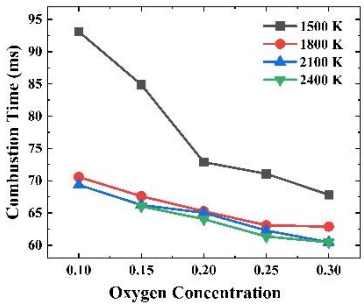


Fig. 4 The ignition and combustion process of single particle boron **Fig. 5** Ignition time versus oxygen concentration curve



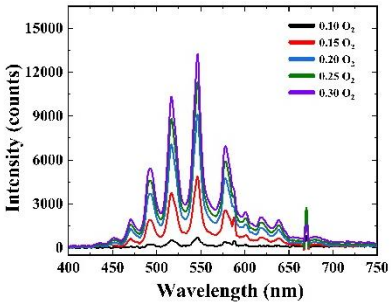


Fig. 6 Combustion time versus oxygen concentration curve **Fig. 7** Maximum emission spectrum data at 1800

K

ambient temperature

关键词：氧浓度；环境温度；硼颗粒；点火燃烧特性

墙报展示人简介：

孙特，男，北京理工大学在读博士生，师从北京理工大学赵马杰老师，主要研究方向为粉末燃料冲压发动机，粉末颗粒的点火燃烧特性实验研究。

附：墙报展示人是否为学生：是

基于从头算分子动力学的铝基复合燃料微观反应机理研究

夏文韬[1,2]，晏嘉伟[1,2]，李毅恒[1,2]，林励云[1,2]，屈炜宸[1,2]，杜芳[1,2,*]

[1]航天化学能源全国重点实验室，襄阳，441003

[2]湖北航天化学技术研究所，襄阳，441003

*Email：xiawentao@casc42.cn

摘要：为探索铝基氧化还原型复合微单元燃料结构对其微观反应机理的影响，利用从头算分子动力学（AIMD）模拟方法研究了 Al@AP（AP 包覆 Al 粉）、AP@Al（Al 粉包覆 AP）以及 AP-Al（AP 与 Al 粉物理混合）三种结构的铝基复合燃料体系的微观反应过程。结果表明：Al 对 AP 有着显著的催化分解作用，与 Al 接触时，AP 分解会加剧，Al@AP 和 AP@Al 两种包覆体系反应过程中 AP 分解反应速率远高于 AP 与 Al 物理掺混体系中 AP 的分解速率；包覆和掺混使得 Al 团簇的氧化方式和氧化速度有明显差异，包覆体系下呈现出 O 原子和 Al 原子快速双向扩散趋势，而物理掺混的 AP-Al 体系则为 O 原子由近端向远端的缓慢扩散过程；三种结构铝基复合燃料燃烧反应释能速率和释能效率存在较大差异，释能大小和释能速率排序均为 Al@AP>AP@Al>AP-Al。

关键词：从头算分子动力学（AIMD）；铝基复合燃料；微观反应机理

墙报展示人简介：

夏文韬，来自湖北航天化学技术研究所。

附：墙报展示人是否为学生：否

基于微流控技术对CL-20粒度调控研究

张子浩，徐司雨*，姜菡雨，于瑾，邵玉保

西安近代化学研究所，陕西 西安，710065

*Email：xusy99@163.com

摘要：为提升 CL-20 的应用性能，采用微流控技术，通过改变溶剂体系以及工艺参数制备了不同粒度窄粒度分布的 CL-20。本研究研究了溶液浓度、流量比、温度以及溶剂的挥发速率对 CL-20 晶体粒度的影响，并通过优化工艺参数，制备出了 d_{50} 为 3 μm、17 μm 以及 50 μm 三种粒度级别的ε-CL-20，表面形貌好且粒径分布窄。研究发现，随着溶液浓度、流量比、温度以及溶剂挥发速率的增大，重结晶得到的 CL-20 产品的粒径明显减小，溶液采用乙酸乙酯，非溶剂采用正辛烷，在浓度为 0.3 g/mL，流量比为 1：20，溶液温度为 50 ℃的条件下，将重结晶得到的悬浮液处理后收集得到 d_{50} 为 3 μm 的ε-CL-20，当选择较低浓度，低流量比、溶液温度较低以及较低的溶剂挥发速率时得到的 CL-20 产品粒径较大。

关键词：CL-20；微流控；粒径

墙报展示人简介：

张子浩，来自西安近代化学研究所。

附：墙报展示人是否为学生：否

Effect of nitrogen-rich compound THHT on the thermal decomposition of Al/AP composites

Ruixuan Xu, Zhihua Xue, Qi-Long Yan*

School of Astronautics, Northwestern Polytechnical University, No. 127 Youyi West Road, Beilin District, Xi'an, Shaanxi Province, 710072

*E-mail: ruixuanxu@mail.nwpu.edu.cn (Ruixuan Xu); qilongyan@nwpu.edu.cn (Qi-Long Yan)

Abstract: Ammonium perchlorate (AP) and aluminum powders (Al) are commonly used as oxidizers and metal fuels in solid propellants, respectively. The energy release efficiency of propellants can be directly influenced by the thermal decomposition of AP and the combustion process of Al powders. The Al/oxidizer integration design [1-3] was proposed by scholars to improve the combustion process of Al, increase combustion efficiency and control the burning rate as well as pressure exponent of propellant. The catalyst can be introduced based on the core-shell structure of Al/oxidizer composites, realizing the precise catalytic effect on the target objects and significantly improving the catalytic efficiency. In this paper, mechanical mixture (Al+AP) and core-shell composites (Al@AP) between Al and AP were prepared. The effects of nitrogen-rich compounds 4,4,-6,6-tetra(hydrazine)hydrazine-1,3,5-triazine (THHT) on their thermal decomposition behavior were investigated. The results showed that for Al+AP, THHT significantly delays the low temperature decomposition peak of AP, and the main decomposition peak temperature is delayed to 342.4℃, and the thermogravimetric process was transformed into three stages. For Al@AP, THHT makes the high temperature decomposition stage of AP the main exothermic process, and its thermal weight loss increases from 67.6% to 71.5%. In addition, the addition of THHT slightly slows down the rate of mass loss during the high temperature decomposition stage of AP. This design based on Al@AP/THHT is expected to be applied to the inhibition on the high-pressure burning rate and pressure exponent of solid propellants.

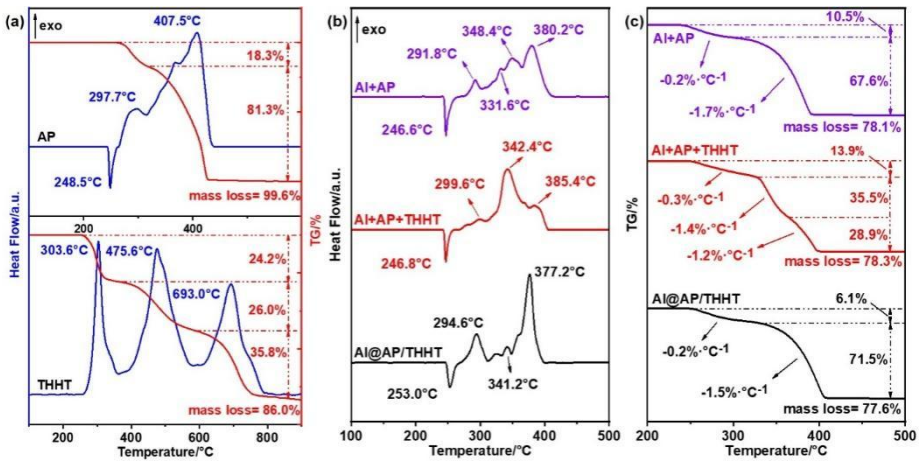


Fig. 1 DSC/TG curves of (a) AP and THHT, (b-c) prepared Al/AP composites with different interfacial contact (heating rate: 5 K min^{-1}).

Keywords: Al/oxidizer integration design; nitrogen-rich compounds; precise catalysis; thermal decomposition.

墙报展示人简介：

许睿轩，西北工业大学博士生，航空宇航科学与技术专业。师从严启龙教授，研究方向为铝基含能复合材料的制备及固体推进剂燃烧性能调控。已在 Combustion and Flame, Fuel, ACS Applied Materials & Interfaces，《兵工学报》等期刊发表 SCI、EI 论文 10 余篇，申请发明专利 3 项，主持西北工业大学博士论文创新基金 1 项。

附：墙报展示人是否为学生：是

高纯硼粉理化性能分析及在富燃料推进剂中的应用

范玉琪[1,2]，杨伯涵[1,2,*]，胡婧宇[1]，张宏毅[1]，马斌[1]，徐君[1]

[1]湖北航天化学技术研究所，襄阳，441003

[2]航天化学能源全国重点实验室，襄阳，441003

*E-mail:yangbohan@casc42.cn

摘要：采用 SEM、能谱分析、TG-DSC 等技术表征，对高纯硼粉的理化性能进行了分析。将高纯硼粉用于含硼富燃料推进剂配方中，与常规无定形硼粉推进剂对照，结果表明，高纯硼粉的加入，推进剂药浆工艺性能基本符合工程化研制的要求，力学性能基本一致，但高纯硼粉的加入导致推进剂低压段的一次喷射效率有所降低，通过提升氧化剂配比、加入燃烧催化剂等配方调控技术可有效解决该问题。

关键词：高纯硼粉；理化性能；含硼富燃料推进剂；燃烧性能

墙报展示人简介：

范玉琪，来自湖北航天化学技术研究所。

附：墙报展示人是否为学生：否

Effect of boron-based composite particles containing aluminum diboride on burning rates of three-component HTPB propellants

Danfeng Yang[1], Qi-Long Yan[1,*]

[1]National Key Laboratory of Solid Rocket Propulsion, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China

*Email: qilongyan@nwpu.edu.cn

Abstract: This study investigates the impact of boron-based composite particles containing AlB_2 on the burn rate and pressure exponent of solid propellants, crucial for the advancement of military and aerospace technology. Five propellant formulations were tested under nitrogen pressure using the acoustic emission method (GJB 770B-2005, Method 706.2), revealing a positive correlation between burn rate and pressure within 1-15 MPa. The control SP-1 showed a burn rate of 4.74-18.16 mm/s and a pressure exponent of 0.46. Formulations SP-2 to SP-5, incorporating Al and B, demonstrated varied performance, with SP-3 to SP-5 showing enhanced high-pressure burn rates and pressure exponents, attributed to the addition of AlB_2. Notably, the ball-milled AlB_2/B in SP-5 exhibited superior combustion performance, suggesting a pathway to more efficient propulsion systems. The study concludes that AlB_2 significantly influences the combustion dynamics of solid propellants, with implications for developing next-generation propellants.

Keywords: boron; aluminum diboride; solid propellants; burning rate

墙报展示人简介：

杨丹锋，西北工业大学在读博士研究生。

附：墙报展示人是否为学生：是

基于碳化硼的硼颗粒表面改性及燃烧机理研究

胡旭*

华东理工大学 化学与分子工程学院，上海，200237

*Email: hux@ecust.edu.cn

摘要：针对高理论比冲性能的硼基粉末冲压发动机中颗粒燃烧效率低的问题，采用碳化硼对硼颗粒进行包覆，通过碳化硼的高表面燃烧热值和低点火温度，提升颗粒点火燃烧性能。利用气相反应沉积法制备获得B@$B_{13}C_2$，颗粒表面均匀包裹碳化硼包覆层。随后基于分子动力学模拟与颗粒随流点火燃烧实验对B@$B_{13}C_2$颗粒点火燃烧机制开展研究。结果表明，随着碳化硼的加入可以显著降低硼颗粒的点火温度，可在1200 K温度下完成颗粒的动态点火燃烧过程；通过分子动力学模拟表明，在燃烧过程中硼与碳化硼的相互作用较弱，仅在3000 K及以上的温度条件下才会出现明显的反应，即碳化硼内的碳原子向核心硼扩散；颗粒燃烧以表面异相反应为主，碳化硼表面燃烧主要产物为BO和BCO_2，并通过反应过程势能面变化曲线获得颗粒表面异相反应$2B_{13}C_2(s)+15O_2 \rightarrow 22BO+4BCO_2$速率表达式，并利用过渡态理论计算方法，以BO和$BCO_2$为反应路径起点，构建适用于B@$B_{13}C_2$颗粒燃烧的B/C/O体系化学反应动力学模型。

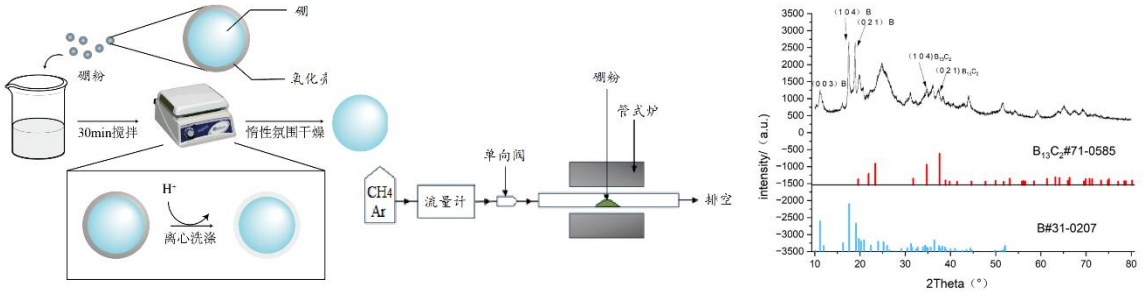


Fig. 1 Figure title in English

关键词：硼基粉末冲压发动机；碳化硼；分子动力学模拟；点火燃烧

墙报展示人简介：

胡旭，华东理工大学化学与分子工程学院讲师，2020 年博士毕业于西北工业大学航天学院。长期从事火箭及冲压发动机相关研究工作，重点关注发动机内推进剂燃烧机理及燃烧流动特性的研究。主持参与包括国家自然科学基金、上海市科技英才杨帆计划、航空科学基金以及企事业单位外协项目等多项相关领域研究项目，主要围绕金属燃料改性预处理、燃料燃烧动力学、颗粒燃烧模型、发动机内流场仿真开展研究工作，在 Proceedings of the Combustion Institute、Acta Astronautica、Journal of Aerospace Engineering、Computational and Theoretical Chemistry 等高水平期刊上发表论文十余篇，申请国家发明专利 4 项，授权 1 项。

附：墙报展示人是否为学生：否

溶剂化-生长耦合制备多孔含能球晶以增强燃烧性能

李敏[1]，周鑫[2,*]，韩丹丹[1,*]，张祺[2]，李洪珍[2]，龚俊波[1]

[1]天津大学化工学院，天津，300072

[2]中国工程物理研究院化学材料研究所，四川绵阳，621900

*Email: handandan@tju.edu.cn (D. Han); zhouxin19510@caep.cn (X. Zhou)

摘要：多级结构因其增强材料特定性能的潜力而受到广泛关注[1]。本文采用分子溶剂化和晶体生长相结合的方法，制备了六硝基六氮杂异伍兹烷（CL-20）的多孔球晶，为多级结构的构筑方法提供新见解，同时揭示多级结构对燃烧的增强作用。具体而言，我们采用常规添加剂聚乙烯吡咯烷酮（PVP）辅助反溶剂结晶，过滤后便得到β-CL-20的多孔球晶，其子晶表面及内部出现孔洞（Fig. 1a,b）。在此过程中，亚稳状态的CL-20溶剂化物形成并呈球晶生长（spherulitic growth），过滤时自发脱溶剂得到*β*-CL-20；可观测到过滤前晶体出现典型的球晶十字消光现象[2]，过滤后十字消光现象消失，球形颗粒的内部出现深色（Fig. 1c,d）。使用自下而上的方法一步得到有机小分子晶体内部及表面形成孔洞是较为少见的[3]；而本工作利用有机分子结构的柔性，将分子溶剂化作用与球晶生长相结合，形成多孔球晶结构，为有机晶体的形貌结构设计提供了新思路。此外，CL-20的四氢呋喃或乙酸乙酯溶剂化物均尚未见报道，但本工作通过原位共聚焦拉曼实验证实了其形成，并采用密度泛函理论揭示了PVP对CL-20的溶剂化作用。另一方面，与普通CL-20晶体相比，多孔球晶的燃烧性能明显得到增强（Fig. 1e），峰值压力提高了6.24%，加压速率提高了40.21%，压力持续效应提高了9.63%，证实了多级结构对含能晶体释能的促进作用。接着，本工作从火焰结构和热分解的角度讨论了结构对燃烧的增强效应（Fig. 1f）。我们认为，多级球晶的内部孔洞存在的少量空气作为氧化剂促进其加速燃烧；其次，由于燃烧分解产生的气体在孔洞内快速扩散，CL-20颗粒发生喷溅，进一步促进充分燃烧。本工作不仅致力于构筑多级结构的方法学探讨，而且为材料设计提供了结构-性能关系的新见解。

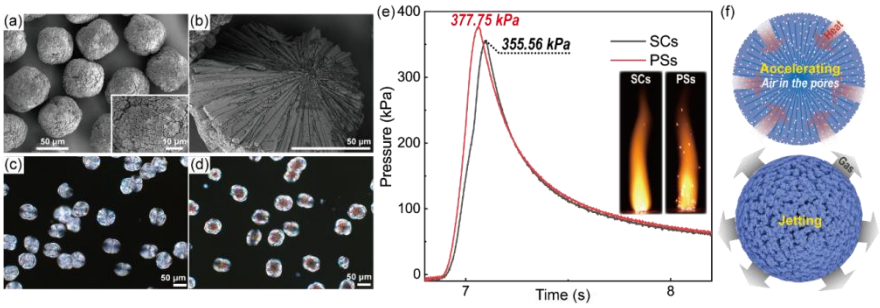


Fig. 1 SEM images of a) CL-20 porous spherulites and b) the section. Polar optical images of particles c) before and d) after filtration. (e) The pressure-time curve of combustion in a closed bomb, in which SCs refer to common CL-20 crystals and PSs are porous spherulites. (f) Schematic illustrations of the enhanced combustion of porous spherulites.

关键词：含能晶体；多级结构；球晶；燃烧；CL-20

墙报展示人简介：

李敏，本科毕业于大连理工大学，现为天津大学化工学院化学工程专业硕博连读研究生，导师为龚俊波教授，研究方向是晶体生长、晶体工程，已于 *Small*，*Chem. Eng. J.*，*Ultrason. Sonochem.*，*Cryst. Growth. Des.* 以第一作者发表论文 5 篇，荣获 2021 年硕士国家奖学金、天津大学一等学业奖学金（2021 及 2022）、中国化学会第 33 届学术年会优秀墙报奖。

附：墙报展示人是否为学生：是

基于迁移学习的C/H/N/O含能材料通用力场开发

文明杰，李雯娟，韩嘉禾，陈东平*，初庆钊*
北京理工大学，爆炸科学与安全防护全国重点实验室，北京　100081
dc516@bit.edu.cn

摘要：本工作旨在开发、验证并记录一种高精度且高效率的 C/H/N/O 类含能材料（HEMs）通用深度迁移学习模型，以解决传统材料设计方法中试错成本高、周期长的问题。通过使用 DPGEN 过程并引入少量新训练数据，显著提升了模型的泛化能力和预测精度，同时降低了计算成本。利用密度泛函理论（DFT）计算数据库对神经网络势（NNP）模型的整体性能进行评估，发现所有 HEMs 在宽温度范围（300-4000K）内的原子能量和受力预测误差分别低于 65.2 meV/atom 和 0.684 eV/Å。在力学性质方面，NNP 模型对晶胞参数和状态方程的预测与 DFT 结果高度一致，并显著优于传统 ReaxFF 力场。此外，20 种 HEMs 的热分解过程分子动力学（MD）模拟结果表明，NNP 模型能够准确预测在升温条件下 HEMs 主要分解产物分布，与实验结果高度吻合。与传统力场相比，通用 NNP 模型在微观和宏观性质上均表现出更高的 DFT 级精度和泛化能力，有效减少了传统实验和计算成本。本研究为 HEMs 的设计和开发提供了一种快速策略，并为 DFT 计算、机器学习和实验方法的无缝衔接提供了一种可行框架。

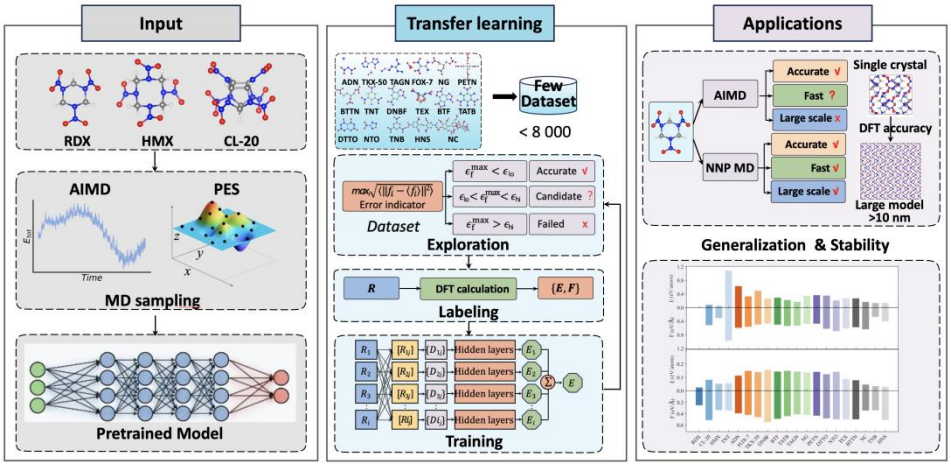


图1 NNP 模型的迁移学习策略

关键词：机器学习（ML）；迁移学习；神经网络势（NNP）；含能材料（HEMs）；微观特性

五、仅提交论文

RDX/PDA的微流控制备及点火燃烧行为研究

于瑾，徐司雨*，姜菡雨

含能材料全国重点实验室，西安近代化学研究所，陕西 西安，710061

*Email: xusy99@163.com

摘要：通过微流控法一步实现晶体品质改善和钝感材料包覆，制备了RDX/PDA复合材料。样品的形貌如Fig. 1所示，D_{50}由87.3μm减小至2.7μm。通过XPS对其表面化学成分进行了表征，证明了PDA包覆的效性。通过DSC-IR-MS对RDX/PDA研究了RDX/PDA的热分解性能，DSC结果表明RDX/PDA峰温较RDX原料升高了4.643K。IR结果显示，PDA对RDX热分解的气体产物种类没有明显影响。MS结果显示，加入PDA后，CO、N_2和CHN的含量增多，同时释放少量CHCH和<CN^+，说明PDA可以促进一些含氧反应，产生稳定的CO和N_2产物。利用激光点火装置研究了RDX/PDA的点火燃烧行为，结果显示，在低功率密度下，PDA能够显著降低RDX的点火延迟时间，使火焰持续存在明亮的燃烧核心，说明燃烧的更加完全。高功率密度下，对点火延迟时间影响不大，火焰的气相区面积更大。燃烧残渣中能明显观察到的熔融表面及部分未燃烧颗粒。

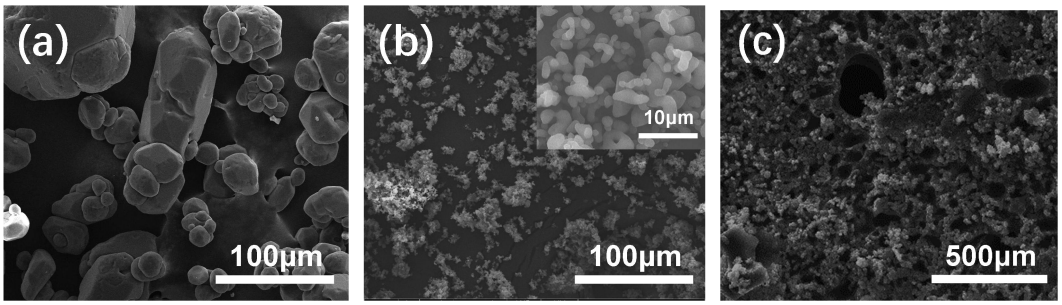


Fig. 1 SEM images of RDX (a), RDX/PDA (b) and combustion residue (c).

关键词：RDX/PDA；激光点火；微流控

参考文献

[1]李恒，赵凤起，徐司雨等. 四种混合不同碳材料的FOX-7粉末激光点火：点火延迟实验与简化计算（英文）[J].火炸药学报,2023,46(02):-171.

[2]姜菡雨，王煊军，于瑾等. 微流控法制备超细HMX/FOX-7复合物及其性能测试[J]. 火炸药学报, 2022, 45(06): 821-826.

[3]于瑾. 一种聚多巴胺原位包覆奥克托今的制备方法及系统：202210898345.8[P]. 2022-11-15

报告人/墙报展示人简介：

于瑾，在读博士研究生，研究方向为高品质含能材料制备技术。

附：报告人/墙报展示人是否为学生：是

微通道反应器高效制备微纳米含能材料

姜菡雨[1,2], 于谨[1]，姚二岗[1]，徐司雨[1]，王煊军[2,*]

[1]西安近代化学研究所 含能材料全国重点实验室，陕西 西安 710065；

[2]火箭军工程大学 智剑实验室，陕西 西安 710025

*Email: npecc@163.com

摘要：微反应器是一种借助于特殊微加工技术以固体基质制造的可用于进行化学反应的三维结构元件。微小的通道尺寸和通道多样性，使得微反应器具有结构简单、无放大效应、易于操作、安全性高等优点，极好的传热和传质能力，可有效改善现有火炸药原材料产品质量不均匀、批次稳定性差等问题，非常适合微纳米含能材料的连续化高效制备。本文设计了一种高通量并联多腔室涡流微反应器，基于溶剂-非溶剂法高效制备了不同粒度的三种典型微纳米含能材料，并通过FTIR、XRD、SEM、激光粒度等分析手段对其结构进行表征。研究表明，采用多层组合与并联分流的方式，使流体逐步均匀进入多路微混合流道，反应器各路混合效率差异小，产品处理量大、均一性好；该方法不仅可实现微纳米含能材料的批量高效制备，且获得的样品颗粒形貌均匀、粒径分布窄，晶体质量高；通过调节工艺参数，还可获得不同粒径、形貌的产品。本研究为多粒度范围、窄粒径分布微纳米含能材料的高效可控制备提供技术支撑。

关键词：微通道反应器；含能材料；高效制备；粒径及分布

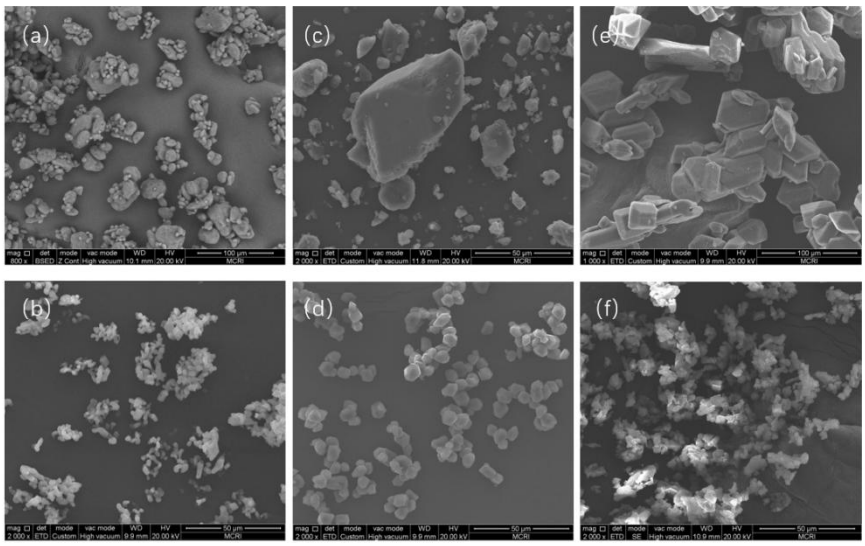


Fig. 1 Sem images of raw materials and samples prepared by microreactor. (a, b) RDX; (c, d) HMX; (e, f) FOX-7

参考文献

[1] Wang, Q.; Steinbock, O. Materials synthesis and catalysis in microfluidic devices: Prebiotic chemistry in mineral membranes. ChemCatChem 2020, 12, 63−74.

[2] 于瑾, 徐司雨, 姜菡雨, 等. 微流控技术在含能材料制备中的应用及其发展趋势[J]. 火炸药学报, 2022, 45(4): 439-451.

[3] 骆广生, 王凯, 徐建鸿, 等. 微化工过程研究进展[J]. 中国科学, 2014, 44(9): 1404-1412.

第 13 分会场：面向新一轮科技革命的气溶胶研究现状和展望

纳米催化剂活性位点调控及VOCs催化氧化机制

黄宇 [1,*]

[1] 中国科学院地球环境研究所，西安，710061

*Email: huangyu@ieecas.cn

摘要正文：挥发性有机物（VOCs）是大气中二次有机气溶胶及臭氧的重要前体物，且危害人体健康。发展低温条件下高效的VOCs热催化氧化控制技术是当前研究热点。尖晶石结氧化物纳米催化剂具有低温还原性、高氧迁移率良好和易于生成反应活性物种等优势，构建高效、高利用率的催化剂活性中心是提升其低温活性以降低降解VOCs能耗的关键。本研究构筑了反尖晶石Fe^{3+}–O– Cu^{2+}界面[1]或及富含阳离子空位的$CoMnO_x$[2]，提升晶格氧反应活性，加速甲苯（一种典型的VOCs）中间体的定向转化，使得甲苯T_{90}（转化率90%时的温度）低至238℃，金属−氧键强度的调控对晶格氧的活化作用是降低甲苯转化温度的关键所在。此外，通过铜和锌元素定向掺杂，模块串联设计实现了二维Co_3O_4表面吸附氧和晶格氧的协同反应，在较宽温度范围内展现出良好的甲苯催化氧化性能，甲苯T_{90}降至185℃，两种掺杂的金属位点在特定温度区间不同作用机制引起中间体加速消耗是反应温度进一步降低的原因[3]。进一步的，提出了一种新颖的原位熔融盐负载策略，同步实现了二维Co_3O_4的构建及其在Fe泡沫上的生长，制备可实际应用的整体式催化剂，其具有丰富的二维Co_3O_4/Fe_3O_4复合界面，促进活性位点的构建与氧活化和甲苯的化学吸附及催化氧化[4]。上述研究为增强低温下氧活化和VOCs催化氧化提供了新的理论见解和技术支撑。

关键词：尖晶石氧化物；活性位点调控；VOCs催化氧化；反应机制

参考文献

[1] D. Zhu, Y Huang*, R. Li, S. Peng, P. Wang, and J. Cao Constructing Active Cu^{2+}–O–Fe^{3+} Sites at the CuO–Fe_3O_4 Interface to Promote Activation of Surface Lattice Oxygen. *Environ. Sci. Technol.* 2023, 57: 17598–17609.

[2] W. Wang, Y. Huang*, Y. Rao, R. Li, S. Lee, C. Wang, and J. Cao The role of cationic defects in boosted lattice oxygen activation during toluene total oxidation over nano-structured $CoMnO_x$ spinel. *Environ. Sci.: Nano* 2023, 10: 812-823.

[3] R. Li, Y Huang*, X. Shi, L. Wang, Z. Li, D. Zhu, X. Liang, J. Cao and Y. Xiong Dopant Site Engineering on 2D Co3O4 Enables Enhanced Toluene Oxidation in a Wide Temperature Range. *Environ. Sci. Technol.* 2023, 57: 13236–13246.

[4] R. Li, Y Huang*, Y. Zhu, M. Guo, W. Peng, Y. Zhi, L. Wang, J. Cao and S. Lee Enhancing Oxygen Activation Ability by Composite Interface Construction over a 2D Co_3O_4-Based Monolithic Catalyst for Toluene Oxidation. *Environ. Sci. Technol*. 2024, 58: 14906–14917.

报告人简介：

黄宇研究员聚焦人居环境空气污染物迁移转化机制和催化材料构效关系，结合量子化学计算、外场观测与实验手段，基于纳米催化技术在环境大气污染控制理论研究和应用示范等方向做出创新贡献。发表 SCI 论文 220 余篇，SCI 他引 10000 余次，H 指数 59，12 篇入选 ESI 高被引论文。获国家发明专利 30 余项。主持国家重点研发计划“纳米科技”重点专项等科研项目 10 余项。入选中国科学院“百人计划”，“国家万人计划”青年拔尖人才。

室内空气污染对呼吸系统的损伤作用及干预效果评估

牛馨祎[1]，曹军骥[2*]

[1] 西安交通大学医学部公共卫生学院，陕西省西安市雁塔西路 76 号，710061

[2] 中国科学院大气物理研究所，北京市北辰西路 81 号，100029

*Email: jjcao@mail.iap.ac.cn

摘要正文：$PM_{2.5}$是室内空气污染的重要污染物之一，其主要污染源包括室内抽烟、做饭、烧香、生物质和煤炭燃烧等。这些污染源排放的$PM_{2.5}$会对人体健康引起不同程度的影响，其中呼吸系统是颗粒物的首要攻击对象，已有大量流行病学证明室内污染源会引发各类呼吸道疾病。烧香在室内污染中产生的有机污染物明显高于抽烟，但其多环芳烃和羰基物质的组成规律较为相似。不同室内污染源对细胞毒性及 DNA 损伤的影响具有一定差别，并主要归因于有机物质在室内环境中的叠加效应，其中高分子量多环芳烃对 DNA 氧化损伤以及炎症反应贡献较大。在不同种类生物质燃烧和不同形态煤的燃烧的模拟实验中发现，生物质、煤球和木炭燃烧产生的$PM_{2.5}$在排放规律和引发的细胞反应均存在一定差异。半焦型煤、相较原煤产生的排放因子有明显降低，并且半焦型煤、无烟煤和烟煤型煤燃烧后产生的$PM_{2.5}$的细胞毒性相较原煤均有明显降低。其中有机碳和关键金属元素均与细胞毒性和氧化应激显著相关。结合短期暴露干预实验，在有/无净化器干预的情况下的不同污染地区居民短期健康监测研究中发现，在污染天室内净化器的使用可以明显改善血压变化，并且净化器干预与尿液中重要炎症生物标志物的水平显著相关。

关键词：$PM_{2.5}$，室内空气污染，肺部损伤

吸入月尘健康危害的交叉研究

崔新光[1,*]，王锦涛[1]，刘张裕[1]，蒋磊[1]

[1]华中科技大学航空航天学院，湖北省武汉市洪山区珞喻路 1037 号，430037

*Email: xinguang_cui@mail.hust.edu.cn

摘要正文：为助力我国载人登月计划，针对月尘毒性威胁，本研究团队深入探索吸入月尘对人体的健康危害，涵盖呼吸道流动机理、颗粒输运沉积及生物毒性等领域。研究通过构建口腔/鼻腔呼吸作用下颗粒物的耦合动力学模型，揭示地外环境下吸入月尘颗粒物的输运沉积特性，阐明了颗粒粒径、吸气流速、温度和压力等不同因素对呼吸道内颗粒物耦合运动行为的竞争机制。此外，通过动物口鼻暴露实验探讨了月尘模拟物导致大鼠肺部炎症和细胞损伤的模式和机制。揭示了月尘模拟物诱导肺部损伤的毒理效应和基因作用机制。这些研究成果不仅夯实了月尘呼吸道健康研究基础，提升了对月尘危害的认知，也为我国探月任务提供了科学保障，兼具科学突破与工程应用价值。

关键词：月尘；计算流体力学；毒代动力学；生物毒理

报告人简介：

崔新光副研究员长期从事呼吸多相流及其交叉方面的研究。其先后分别在北京航空航天大学、清华大学和德国海德堡大学获得了流体力学专业方向的学士、硕士和博士学位，并先后在新加坡南洋理工大学和美国伯克利国家实验室从事科研工作，现任华中科技大学航空航天学院呼吸多相流课题组组长。申请人现任中国生物医学工程学会高级会员、世界华人生物医学工程学会终身会员、中国颗粒学会青年理事和中国颗粒协会气溶胶专委会常务委员、中国颗粒学会吸入颗粒专业委员会委员、中国解剖学会智慧解剖学分会委员。任由北航主办的卓越期刊 Medicine in Novel Technology and Devices 杂志的 section editor、Journal of Modern Industry and Manufacturing 杂志的 associate editor 以及其它数个杂志的编委和审稿人。曾主持/参与 10 余个世界前沿项目，已发表 50 余篇 SCI 文章，获得专利 7 项，出版译著一本，多次受邀在国际国内会议做大会报告和主题报告等。

Using nitrogen and oxygen isotopes to quantify the contributions of transportation of aerosol nitrate to Haikou

Li Luo [1*]

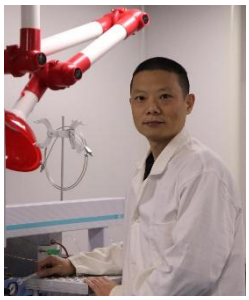
[1] University of Hainan, Haikou, 570228

* L.Luo@hainanu.edu.cn

NO3−is an important contributor of acidic ions in PM2.5 in Haikou, but systematic observation of the formation mechanism and sources of NO3− in PM2.5 has not been reported. In this study, PM2.5 samples were collected from September 2021 to August 2022 in Haikou City, and the dual isotopic compositions (δ18O and δ15N) of NO3− were determined, and the backward trajectories of air masses and Bayesian mixing models were analyzed. It was found that there were significant seasonal and sub-seasonal differences in nitrate concentrations, which indicated the contribution of cross-sea transport of exogenous NO3−. However, there is no seasonal difference in the air masses originating from the South China Sea, suggesting that external transport plays an important role in autumn, winter and spring. By comparing the δ18O-NO3−- values with those of Wuhan, Nanchang, and Hangzhou, we estimated the relative contribution of external transport to particulate nitrate pollution in Haikou City in different seasons. The relative contributions of different local nitrate formation pathways in Haikou City were investigated by using Bayesian isotope mixing model, and the 15N partition coefficients of nitrate in Haikou City were re-estimated by theoretical calculations under the combined effect of local generation and external transport, and the relative contributions of different NOx emission sources were estimated by Bayesian mixing model, and the results of the Bayesian mixing model showed that the NO2+OH pathway played an important role in Haikou City occupies a major position in nitrate formation, and the main sources of NOx emissions are still anthropogenic sources, with natural gas and traffic playing an important role, which is closely related to the direct transport of foreign nitrate particles. In this study, the contribution of cross-sea transport from South China to NO3− in PM2.5 in Haikou was investigated, which provides a theoretical basis for synergistic prevention and control of air pollution.

Keywords: nitrogen and oxygen isotopes; nitrate; transportation; contribution; Haikou

报告人简介：



罗笠，男，博士生导师，海南大学高聘教授，海南大学海气界面大气化学培育团队负责人。长期从事主要从事同位素环境地球化学，海气界面元素循环及大气气溶胶颗粒来源和形成机制研究。主持国家自然科学基金 2 项，海南省重点研发项目 1 项，海南大学协同创新中心培育团队项目 1 项，参与 973 项目、国家重大研究项目等 5 项。在 Atmospheric Chemistry and Physics，Gondwana Research，Environmental Pollution，Science of the Total Environment，Chemosphere，Atmospheric environment 和 Marine Pollution Bulletin 等发表学术论文 50 余篇，其中 H-index18 篇。担任国家自然科学基金评审专家，中国颗粒学会气溶胶专业委员会青年理事会理事。目前主要针对海南和南海的大气污染物来源及其形成机制展开研究

基于MTEA2.0的我国颗粒物组分特征及变化趋势分析

李楠[1]

[1]南京信息工程大学，南京，210044

$PM_{2.5}$, generated via both direct emission and secondary formation, can have varying environmental impacts due to different physical and chemical properties of its components. However, traditional methods to quantify different $PM_{2.5}$ components are often based on online or offline observations and numerical models, which are generally high economic cost- or labor-intensive. In previous study, we have developed the Multi-Tracer Estimation Algorithm (MTEA) to identify the primary and secondary components from routine observation of $PM_{2.5}$. In this study, we further update the MTEA model to version 2.0, which can identify special $PM_{2.5}$ compositions, including sulfate, nitrate, ammonium, element carbon, organic matter and dust. By comparing with long-term and short-term measurements of aerosol chemical components in China, it is proven that MTEA2.0 can successfully capture the magnitude and variation of different $PM_{2.5}$ compositions. Applying MTEA2.0 to the China National Air Quality Network, we find that (1) secondary $PM_{2.5}$ accounted for 56.79% ~ 61.84% of the $PM_{2.5}$ averaged for 367 cities in China during 2014-2023, among which NO_3^- is major composition (33.47%) followed by SO_4^{2-} (29.65%) and NH_4^+ (22.68%). (2) Almost all $PM_{2.5}$ compositions decreased continuously during 2014-2023, with NO_3^- decreasing most significantly (-0.656 μg m^{-3} yr^{-1}), while OM evolved relatively weakly (-0.650 μg m^{-3} yr^{-1}). (3) In almost all regions of the country, organic matter replaced sulfate and nitrate as the most important secondary aerosol component, indicating that the control of VOCs will become the key measure in future air quality management. In general, MTEA2.0 is a promising tool for efficiently estimating different $PM_{2.5}$ compositions, and has huge potential for future $PM_{2.5}$ mitigation.

Understanding Sulfate Formation on a Single Particle Level with an Aerosol Optical Tweezer

Chenxi Li[1*], Kaiqi Zhang[2]

[1]School of Environmental Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, 800 Dongchuan Road, Shanghai, 200240

* chenxi20@sjtu.edu.cn

Sulfate is one of the major components of atmospheric particulate matter, which exerts strong negative impacts on both the atmospheric environment and human health. In recent years, extensive research has been conducted on the mechanisms of sulfate formation. However, significant controversies still exist regarding the primary pathways of sulfate formation under different atmospheric conditions. Additionally, the role of light irradiation on the reaction rate is still unclear. In this study, we employ a counter-propagating aerosol optical tweezer to stably levitate individual particles in an atmosphere. By collecting and analyzing the Raman scattering signals of the particles, we measure the growth rate and particle composition to understand the mechanism of important sulfate formation pathways including the SO_2-NO_2 reaction and the SO_2-O_2-Mn^{2+}/Fe^{3+} reaction. We find that due to resonant absorption of the trapping laser and sulfate formation, particle growth occurs in discrete steps (known as thermal locking). Within each step, the particle size slightly decreases, but the salt concentration gradually increases, accompanied by a slight increase in particle temperature compared with the room temperature. A newly developed model quantifies the extent of both particle temperature and salt concentration within each thermally-locked step. Importantly, we also find that once the particles are thermally locked, the effective sulfate formation rates increase by a factor of 1-4 which is dependent on reaction conditions. This that increased light intensity within the particle has an effect on these reactions. Lastly ,based the measured particle growth rate, we derived reaction rate constants of the SO_2-NO_2 heterogenous reaction. We discovered that sulfate generation reactions mainly occur in the vicinity of the particle surface, but at rates lower than those reported in existing literature. One potential cause for such discrepancies may be the different particle sizes used in previous research (nanometer particles) and the current study (micrometer particles), which influences on the contribution interfacial reactions to the sulfate formation rates.

Keywords: Sulfate, aerosol optical tweezer, transition metal ions, photocatalysis, heterogeneous reaction

报告人简介：

上海交通大学环境科学与工程学院副教授，本科毕业于清华大学，于美国明尼苏达大学取得博士学位，在瑞士苏黎世联邦理式学院开展博士后研究工作。长期从事气溶胶颗粒的数值模拟、模拟实验及相关仪器与分析方法的研究，目前已在国际知名期刊上发表 SCI 论文 30 余篇，以第一或通讯作者在 Sci. Adv., Anal. Chem., Atmos. Chem. Phys.等综合性或学科顶尖期刊发表文章 10 余篇。围绕颗粒物的生成、增长机制及表征方法，申请人主持了国家基金委与上海市科委自然科学基金，获得了上海市扬帆计划与海外高层次人才计划的资助。现任学科主要期刊 Journal of Aerosol Science 的青年编委。

同位素示踪上海气溶胶硝酸盐来源及氧化过程

肖红伟，肖化云

上海交通大学，上海市闵行区东川路 800 号，200240

*Email: xiaohw@sjtu.edu.cn

摘要正文：灰霾一直以来都是我国公众广泛关注的环境问题之一，特别是人口密集的经济发达地区。从2013年开始，我国出台了多项“清洁空气行动计划”，严格控制SO2和NOx等的排放，以期减少PM2.5污染，并取得了明显成效。2013年至2018年期间，全国PM2.5浓度年均值下降30%~50%，全国SO2、NOx排放量分别下降了59%和21%；尽管如此，近年来我国灰霾事件也时有发生，即使在新冠疫情(COVID-19)封城，人类和工业活动减少到基本或最低水平时，华北平原、东部地区等多地仍然发生了严重的灰霾事件。硝酸盐(NO3-)作为PM2.5的主成分之一，近年来，NO3-浓度并没有明显的下降，甚至在冬季和灰霾期出现上升的情况，致使NO3-对PM2.5的贡献呈现明显的上升趋势。本研究拟以我国经济中心超大城市上海市为研究区域，连续采集PM2.5样品，分析其硝酸盐的氮氧同位素。研究结果表明，上海大气硝硝酸浓度持续下降，氧化剂浓度发生改变，来源也发生变化。

关键词：氮同位素；氧同位素；硝酸盐

报告人简介：

肖红伟，男，现任职于上海交通大学农业与生物学院资源与环境系。曾任江西省大气污染成因与控制重点实验常务副主任、研究员。近年主要从事陆地和海洋大气系统碳氮来源、化学过程和传输机制，以及海洋、陆地流域系统碳氮生物地球化学等研究工作。先后主持国家自然科学基金项目 4 项，江西省重点项目 1 项，省部厅级等项目多项；参与国家重点基础研究计划“973”项目、中国科学院战略性先导科技专项等 10 余项。

关中地区不同环境大气中有机硫化合物的普遍性

韩月梅[1]，张新[1,2]，李丽娟[1],蔺悦[1],王瑞[1],朱崇抒[1],曹军骥[1,3]

[1]中国科学院地球环境研究所 黄土与第四纪地质国家重点实验室，中国科学院气溶胶化学与物理重点实验室，西安，710061

[2]西安交通大学人居环境与建筑工程学院，西安，710049

[3]中国科学院大气物理研究所，北京，100029

*Email: yuemei.han@ieecas.cn

摘要正文：有机硫化合物是大气有机气溶胶的重要组分，也是自然界中硫元素存在的主要形态之一。有机硫化合物除了由化石燃料和生物质燃烧等过程直接排放外，很大一部分是由二氧化硫气体和无机硫酸盐等人为污染物与有机前体物发生多相化学反应二次生成。有机硫化合物的存在，可能会显著改变大气气溶胶颗粒物的吸湿性、酸度、挥发性和反应性等物理和化学性质，从而影响气溶胶作为云凝聚核的能力以及气候环境效应。有机硫化合物的成分复杂且种类繁多，在不同时间和空间尺度存在明显的差异性。目前对于大气中有机硫化合物的理化性质、来源和形成途径等方面的认识还非常有限，需要开展深入探究。本研究以我国西北部的关中平原地区不同环境（包括城市、农村、森林和高山）大气中的有机硫化合物为研究对象，使用超高效液相色谱串联静电场轨道阱质谱手段，对有机气溶胶组分和有机硫化合物的化学特征、来源、形成机制和影响因素等进行了分子层面的认识和理解。研究结果显示，有机硫化合物在关中地区不同环境大气中普遍存在，主要包括 CHOS 和 CHONS 物种，平均占有机气溶胶物种总数量的 41–45%。与我国其它地区及全球范围内（约 12–37%）相比，关中地区有机硫化合物的数量份额均处于较高水平，可能与该地区较高的人为污染物浓度有关。大部分有机硫化合物（65–89%）是具有脂肪族结构的有机硫酸盐和硝基有机硫酸盐，可能主要来自人为源长链烷烃和生物源前体物的贡献。芳香族结构的有机硫酸盐数量在非城市地区 CHONS 物种中占比较高，表明人为污染在不同环境中的重要影响。有机硫化合物分子中碳原子个数的分布特征显示，其在城市地区来源较为复杂，而在其它非城市地区主要来自于生物源。与各种大气环境参数的相关性分析表明，不同环境中有机硫化合物的形成是多种因素协同作用的结果，其中不同因素在特定环境中占主导地位。本研究强调了人为污染对大气有机气溶胶化学组分及种类的重要影响，控制人为源排放是减少不同环境大气中有机硫化合物载荷的有效措施。

关键词：物种组成；分子结构；来源；形成途径；超高分辨率质谱

四川盆地高湿度条件下大气气溶胶的演化和健康效应

陈阳[1]*，包职贰[1]，韩燕[1]，祁心[1]，刘益良[1]，龙鑫[1]，黄大胜，彭超，张蜀敏

[1]中国科学院重庆绿色智能技术研究院，重庆 400714

* Email: chenyang@cigit.ac.cn

摘要正文：四川盆地终年高湿，夏季高温，全年辐照较弱，风速较低，冬季逆温严重，扩散条件差。在此背景下，大气二次气溶胶的形成和演化呈现独特特征和影响。本系统研究以在线/离线观测为基本手段，研究四川盆地二次有机/无机气溶胶的演化特征和规律。四川盆地大气寿命相对较长，老化程度较高，且不存在显著的“积累-发展-清除”过程。二次组分的液相生成和气相过程形成竞争关系，一次排放颗粒物的老化过程是二次有机气溶胶的主要来源之一。本系列工作可提升对高湿弱辐照条件下二次生成和演化的大气化学过程及健康效应的认识。

Measurements of particulate methanesulfonic acid above the remote Arctic Ocean using a High Resolution Aerosol Mass Spectrometer

Yangmei Zhang[1,*], Junying Sun[1], Xiaojing Shen[1], Vipul Lal Chandani[2], Mao Du[2], Congbo Song[2,a],Yuqing Dai[2], Guoyuan Hu[3], Mingxi Yang[4], Gavin H. Tilstone[4], Tom Jordan[4], Giorgio Dall'Olmo[5], Quan Liu[1], Eiko Nemitz[6], Anna Callaghan[7], James Brean[2], Roberto Sommariva[2], David Beddows[2], Ben Langford[6], William Bloss[2], William Acton[2], Roy Harrison[2], Manuel Dall'Osto[8], Zongbo Shi[2,9,*]

[1]State Key Laboratory of Severe Weather/Key Laboratory of Atmospheric Chemistry of China Meteorological Administration, Chinese Academy of Meteorological Sciences, Beijing, 100081, China

[2]School of Geography Earth and Environmental Sciences, University of Birmingham, Birmingham, B15 2TT, UK

[3]School of Electronic Information, Wuhan University, Wuhan 430070, Hubei Province, PR China

[4]Plymouth Marine Laboratory, Prospect Place, Plymouth, Devon, PL1 3DH, UK

[5]Istituto Nazionale di Oceanografia e di Geofisica Sperimentale – OGS, Sezione di Oceanografia, Borgo Grotta Gigante 42/c 34010, SgonicoTrieste, Italy

[6]UK Centre for Ecology & Hydrology, Bush Estate, Penicuik, EH26 0QB, UK

[7]Wolfson Atmospheric Chemistry Observatory (WACL), University of York, York, UK

[8]Departament de Biologia Marina i Oceanografia Institut de Ciències del Mar, CSIC Pg. Marítim de la Barceloneta, 37-49, 08003 Barcelona, Catalonia, Spain

[9]Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, 231137, Hefei China

[a]. Now at: National Centre for Atmospheric Science (NCAS), University of Manchester, Manchester M13 9PL, UK

Methanesulfonic acid (MSA) is an important product from the oxidation of dimethyl sulfide (DMS), and thus is often used as a tracer for marine biogenic sources and secondary organic aerosol. MSA also contributes to aerosol mass and potentially to the formation of cloud condensation nuclei and new particles. However, measurements of MSA at high temporal resolution in the remote Arctic are scarce, which limits our understanding of its formation, climate change impact and regional transport. Here, we applied a validated quantification method to determine the mass concentration of MSA and non-sea salt sulfate (nss-SO4) in PM2.5 in the marine boundary layer, using a high resolution time-of-flight aerosol mass spectrometer (HR-ToF-AMS) during a research cruise to the Arctic and North Atlantic Ocean, between 55 ◦N and 68 ◦N (26th May to June 23, 2022). With this method, the concen trations of MSA in the remote Arctic marine boundary layer were determined for the first time. Results show that the average MSA concentration was 0.025 ±0.03 μg m3, ranging from <0.01 to 0.32 μg m^{-3}. The lowest MSA level was found towards the northern leg of the cruise (near Sisimut (67 °N)) with air masses from sea ice over the northern polar region, and the highest MSA concentrations were observed over the Atlantic open ocean. The diurnal cycles of gas MSA, particulate MSA and nss-SO_4 peaked in the afternoon, about one hour later than that of peak of solar radiation, which suggests that photochemical process is an important mechanism for the conversion of DMS into MSA above the remote ocean. The mass ratio of MSA to nss-SO_4 (MSA/nss-SO_4) presents a temperature dependence, which indicates that the addition branching pathway favors MSA formation, while thermal decay of intermediate radicals could be a possible pathway for sulfate formation. Finally, we found that the MSA/nss-SO_4 ratio is around 0.22-0.25 in the remote northern marine atmosphere.

Keywords: MSA; marine aerosol; oxidation path; reference MSA/nss-SO_4 value; HR-ToF-AMS

城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

二氧化碳（CO_2）和甲烷（CH_4）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 CO_2 和 CH_4 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 CO_2 和 CH_4 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.

报告人简介：

魏崇，博士，中国科学院上海高等研究院副研究员。现主要从事碳排放监测核算评估、大气成分监测等生态环境领域研究，负责建设上海高研院天地一体化碳排放监测系统，开展卫星和地基遥感监测、固定站长期监测、车辆/无人机走航监测、含氟温室气体监测、碳同位素监测等碳排放立体监测与评估工作。主持基金委、中国科学院、上海市科委双碳专项、浦东科技发展基金等项目 10 多项，发表 SCI 论文 30 多篇。

利用多角度偏振遥感约束气溶胶直接辐射强迫

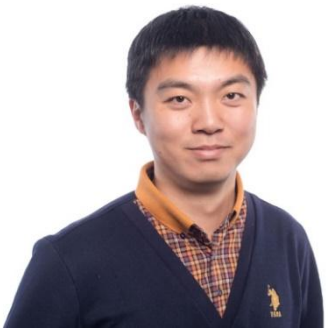
陈澄 [1, 2]

[1] 中国科学院合肥物质科学研究院安徽光学精密机械研究所，合肥　230031
[2] 中国科学技术大学，合肥　230036

*Email: cheng.chen@aiofm.ac.cn

在过去二十年中，卫星遥感数据集提供了连续且有价值的信息，来约束气候模型对全球气溶胶消光效应的模拟（散射 +吸收），即气溶胶光学厚度（AOD）。 然而，气候模型模拟缺乏对诸如气溶胶吸收等重要特性的观测约束，因为常用的单角度多光谱卫星传感器对气溶胶吸收的敏感性较弱。 科学界计划通过使用多角偏振（MAP）遥感来解决这个难题，MAP遥感探测具有表征详细的气溶胶特性（包括吸收和粒子尺寸）的较高潜力。 在报告中，将介绍我们最近在多角度偏振遥感探测和模式多元参数同化方面的进展，来改进对气溶胶直接辐射强迫的估计。

报告人简介：



陈澄，中国科学院合肥物质科学研究院，研究员，博导，国家优秀青年科学基金（海外）获得者，中国科学院“BR计划”。2011年中南大学学士，2014年中国科学院遥感与数字地球研究所硕士，2018年1月博士毕业于法国里尔大学，2018-2024在里尔大学大气光学实验室（LOA）和GRASP-SAS公司担任固定职位研究员。研究方向为大气气溶胶遥感，反演理论和卫星资料同化。主持和作为核心成员参与欧盟，ESA，EUMETSAT多项研究计划，包括Sentinel-3，Sentinel-5p，CO2M和3MI气溶胶和地表产品官方算法开发，主导建立了GRASP气溶胶多元参数同化系统。在Nat. Commun., Sci. Adv., Remote Sens. Environ., Earth Syst. Sci. Data, Atmos. Chem. Phys.等领域主流期刊发表论文50余篇。

基于遥感观测的新粒子生成事件识别研究

张莹[1,*]，王绮羽[1,2]，李正强[1]

[1]中国科学院空天信息创新研究院 国家环境保护卫星遥感重点实验室，北京 100101；
[2]中国科学院大学，北京 100049

摘要正文：新粒子形成（NPF）是大气中二次气溶胶产生的一个重要过程，对地球的辐射平衡、空气质量和气候变化有重大影响。在本研究中，我们发展了一种基于地面遥感的方法来识别 NPF 事件。继早先的卫星遥感研究之后，我们提出了一种基于地基遥感气态前体和气溶胶光学厚度的替代方法描述 NPF 事件。我们将该遥感指标用于识别 2022 年冬季北京的 NPF 事件，并通过与气溶胶粒径分布的地基观测数据进行对比校准。将使用地基遥感指标的结果与在附近站点进行的独立地基原位测量结果进行比较，结果显示 84% 的 NPF 事件得到了正确的识别。与基于卫星观测的遥感指标相比，地基遥感指标的一致性更好，这是因为地面遥感仪器的时间分辨率较高，而太阳同步卫星观测一天只有一次。进一步分析表明，北京冬季的 NPF 多发生在西北风向、高风速和低相对湿度的天气条件下。本方法的发展有望在未来应用于地球同步轨道卫星观测，捕捉观测稀缺区域或遥远地区的新粒子生成事件。

关键词：新粒子生成；遥感；气态前体物；气溶胶

空气动力学透镜-产生高质量颗粒束的新技术

李磊[1,2]，黄君宏[2]，苏展民[2]，黄正旭[1]

[1.] 暨南大学质谱仪器与大气环境研究所，广东 广州 510632；

[2.] 广东省麦思科学仪器创新研究院，广东 广州 510530

摘要正文：高质量的颗粒束在纳米颗粒物分析中有着广泛需求。空气动力学透镜是一种产生高质量颗粒束的高效方式，广泛应用于气溶胶质谱分析领域。近年来，空气动力学透镜还被应用于颗粒衍射成像、超高质量蛋白质测量分析以及气溶胶打印等方面，展现了该技术的优异性。研究学者们通过增加透镜的级数、改变临界孔结构及增大缓冲腔的方式不段地提升可聚焦颗粒的粒径范围和传输性能，但目前空气动力学透镜仍存在诸如粒径范围较窄、体积较大、传输效率不高等问题。本团队通过多年的研究，掌握了透镜设计的核心关键点，开发了可满足不同粒径范围、不同尺寸需求的高水平的空气动力学透镜系统。这些透镜系统在气溶胶质谱、气溶胶采样器、新型光学粒子计数器以及其他颗粒分析仪器的研制方面具有极高的应用潜力。

关键词：空气动力学透镜；颗粒束；发散角；

非织造滤材高精度粉尘气溶胶过滤模拟及颗粒动力学机制

宋宇 [1,*]

[1] 东华大学纺织学院教育部产业用纺织品工程研究中心，上海，201620

*Email: songyu@dhu.edu.cn

摘要正文：

纤维基滤材的过滤寿命对于空气过滤器的节能应用和洁净空气的高效输送非常重要。滤材孔隙结构的堵塞会严重影响纤维滤材的粉尘过滤特性。因此，需要一种有效的方法来明确粉尘颗粒在滤材结构内部的堆积行为。近年来，作者利用X射线计算机断层扫描（μ-CT）技术对蓬松结构非织造过滤材料内部的颗粒动态堆积行为进行了无损定量表征[1]，并对致密结构非织造过滤材料内部的颗粒堆积和聚集行为进行了定量表征[2]。然而，μ-CT技术的使用存在样品差异、成本昂贵和图像处理耗时等问题。

近期，作者成功实现了对非织造过滤材料粉尘加载行为的高精度数值模拟[3]。其中，利用 X 射线μ-CT技术（德国Zeiss公司）获得了蓬松结构非织造过滤材料的真实三维模型，借助GeoDict软件（德国Math2Market公司）进行图像处理与数值模拟，使用MFP 3000滤材过滤性能测试台（德国Palas公司）测试粉尘加载行为。由此，作者基于滤材三维模型以及粉尘过滤中实时监测的滤阻与分级过滤效率建立了颗粒碰撞动力学模型，明确了衡量粘附能的Hamaker常数、表示颗粒动能的恢复系数和颗粒碰撞滑移行为，并进一步实现了粉尘过滤特性的高精度模拟。结果显示模拟值与实验值在压降变化（图 1a）和过滤效率变化（图 1b）方面非常吻合。值得注意的是，模拟和实验的容尘量之间的偏差小于1%（图 1c）。借助这种高精度模拟方法，作者目前正在就非织造滤材的粉尘气溶胶过滤特性及其颗粒动力学机制开展进一步的理论、数值和实验研究。

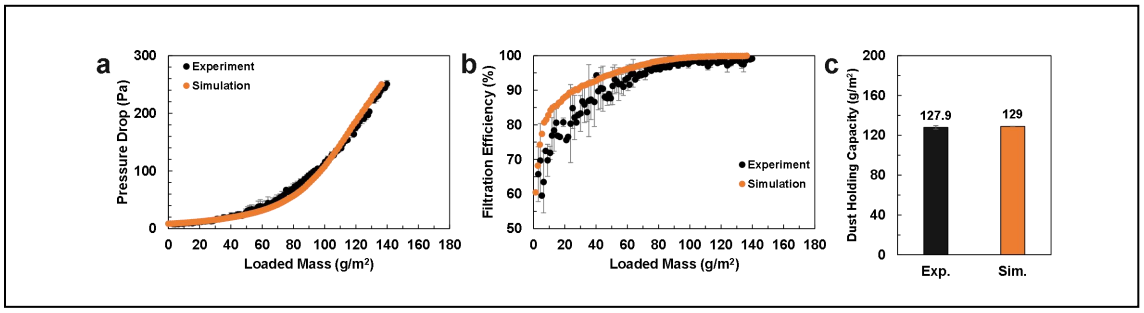


Fig. 1 High-fidelity simulation of (a) pressure drop evolution, (b) filtration efficiency evolution, and (c) dust holding capacity at 250 Pa pressure drop.

关键词：粉尘气溶胶过滤；非织造滤材；颗粒动力学；数值模拟；粒径谱仪

参考文献

[1] Y. Song, E. Shim, Structure characterization of the clogging process of coarse fibrous filter media during solid particle loading with X-ray micro-computed tomography, Separation and Purification Technology, 2021, 273, 118980.

[2] Y. Song, E. Shim, 3D X-ray tomographic microstructure analysis of dust-clogging inside nonwoven fibrous filter media, Journal of Membrane Science, 2022, 664, 121067.

[3] Y. Song, E. Shim, High-fidelity 3D simulation of dust-loading behavior and clogging process of coarse nonwoven filter media considering collision effect, Separation and Purification Technology, 2024, 344, 127046.

报告人简介：

宋宇，东华大学纺织学院非织造材料与工程系教师，东华大学纺织学院讲师/硕士生导师。2015 年获东华大学非织造材料与工程专业学士学位，2020 年获美国北卡罗莱纳州立大学纤维与高分子科学专业博士学位。长期从事非织造空气过滤材料领域的理论、模拟与实验研究，主持上海市扬帆计划项目、产业用纺织品教育部工程研究中心项目、上海光源开放课题等纵向项目 6 项；以第一作者在中科院一区期刊发表论文 4 篇，包括过滤分离领域权威期刊 Separation and Purification Technology、Journal of Membrane Science 等；研究成果获 2023 年度中国纺织工业联合会科技进步二等奖（3/10）。

西北太平洋海洋源气溶胶的时空特征和辐射效应

李嘉伟[1]，韩志伟[1*]，梁明洁[1]

[1]中国科学院大气物理研究所东亚区域气候—环境重点实验室，北京，100029

*Email：hzw@mail.iap.ac.cn

摘要正文：本文利用大气化学/气溶胶-区域气候耦合模式系统 RIEMS-Chem 模拟研究了 2014 年东亚西北太平洋海区海盐气溶胶(sea salt aerosols, SSA)的直接和间接辐射效应，模式中通过考虑海表面气温(sea surface temperature, SST)和相对湿度(relative humidity, RH)对海盐产生机制的影响改进了海盐排放方案(试验记为 G03SSTRH)。模拟结果与航测和海岛观测资料的对比检验表明，模式可以合理模拟西北太平洋海区 SSA 的时空演变。与未考虑 SST 和 RH 影响的海盐排放方案(试验记为 G03)相比，G03SSTRH 显著提高海洋地区 PM_{10} 浓度的模拟能力，且改变海洋地区 SSA 浓度和辐射效应的空间分布特征。在西北太平洋地区，SSA 在大气顶(top of atmosphere, TOA)的总辐射效应(TRE)为负，其中直接辐射效应(DRE)强于间接辐射效应(IRE)。对于海洋和全年平均，G03SSTRH 试验估算的 DRE、IRE 和 TRE 分别为-1.22 W/m^2、-0.46 W/m^2、-1.65 W/m^2，比 G03 试验的估算结果分别高 16%、5%、12%。TRE 的季节变化显著，在夏季和秋季高于春季和冬季。

关键词：西北太平洋；海盐；海洋有机碳；辐射效应

Molecular insights into the formation of Criegee intermediates from peroxy radicals

Long Chen[1], Yu Huang [1,*], Yonggang Xue[1], Zhihui Jia[2]

[1] State Key Lab of Loess and Quaternary Geology (SKLLQG), Institute of Earth Environment, Chinese Academy of Sciences (CAS), Xi'an, 710061, China

[2] School of Materials Science and Engineering, Shaanxi Normal University, Xi'an, Shaanxi, 710119, China

* huangyu@ieecas.cn

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 ($HO\text{-}RO_2$) 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 $HO\text{-}RO_2$ radicals, are studied by using quantum chemical methods. The results show that the unimolecular decomposition of $HO\text{-}RO_2$ radicals undergoes through the direct cleavage of C-C bond to produce carbonyl oxides, but they are strongly endothermic. For the reactions of $HO\text{-}RO_2$ 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 $–CH_x$ group is favorable for the unsubstituted and a methyl substituted $HO\text{-}RO_2$ radicals. For the reactions of $HO\text{-}RO_2$ 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 $HO\text{-}RO_2$ radicals significantly decrease with increasing the number of methyl substituents. The self-reaction of dimethyl substituted $HO\text{-}RO_2$ radicals forming $(CH_3)_2COO$ is able to compete effectively with the bimolecular reactions with HO_2 radicals. These findings enhance our understanding of the formation of carbonyl oxides from the photochemical oxidation of alkenes.

Keywords: Peroxy radicals; Criegee intermediates; Potential energy surface; Reaction mechanism; Rate coefficien

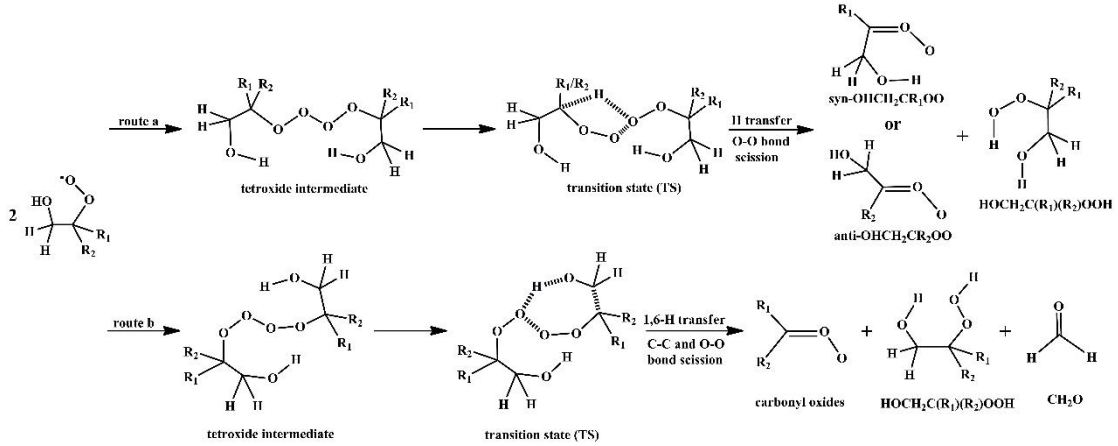


Figure 1 Possible formation pathways of carbonyl oxides from the self-reactions of RO_2 radicals

References

[18] L. Chen, Y. Huang, Y. Xue, Z. Jia, W. Wang, Kinetic and mechanistic investigations of OH-initiated atmospheric degradation of methyl butyl ketone, J. Phys. Chem. A 2022, 126, 2976-2988.

关中地区近地表臭氧形成机制

薛永刚[1]，王丽琴 1，黄宇[1,*]，…

[1] 中国科学院地球环境研究所，西安市雁塔区雁翔路 97 号，710061

*Email:huangyu@ieecas.cn

摘要正文：2014以来，关中城市群近地表臭氧浓度升高趋势显著，其中2014-2017年，各城市臭氧最大八小时均值上升速度在8.5-12.3 μg m^{-3} yr^{-1}之间. 本研究于2018年夏季开展关中地区大气VOCs观测，从而分析臭氧污染成因。关中地区VOCs浓度高值出现于城市人居区及工业区，VOCs表现出显著的早晚高峰日变化趋势，此外，观测期出现多次午夜时段VOCs与臭氧峰值。通过风场分析，发现北向与西向的气团在传输过程中经过关中东部重型工业区及秦岭山区，从而引起关中腹地夜间VOCs及臭氧峰值。VOCs源解析中，交通源、燃料挥发源、试剂挥发源是非甲烷烃主要贡献源，而溶剂挥发源与二次形成源是OVOCs主要来源。本研究证实关中地区臭氧污染过程可受到区域传输的显著影响，因此在臭氧污染控制过程中因在重点管控本地关键排放源的同时加强省内各区域及周边省区域重点VOCs排放源的协同控制。

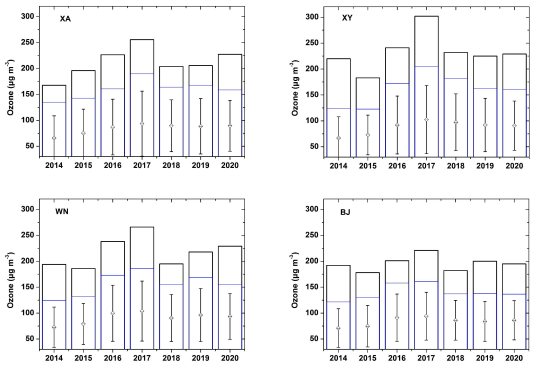


Fig. 1 Trend of surface ozone in Guanzhong Basin.

关键词：臭氧；挥发性有机物；区域输送；关中地区

参考文献

[1]Xue, Y., Wang, L., Liu, S., Huang, Y*., Chen, L., Cui, L., and Cao, J.: Upward trend and formation of surface ozone in the Guanzhong Basin, Northwest China, Journal of Hazardous Materials, 427, 128175, 2022.

[2] Xue, Y.; Wang, L.; Jing, Y.; Zhang, T.; He, S.; Ho, K. F.; Huang, Y.; Chen, L.; Cui, L.; Cao, J., Asian Monsoon and Local Valley Wind Caused Transport of Volatile Organic Compounds Episode Across Qinling Mountain in China. Journal of Geophysical Research: Atmospheres 2023, 128, (24), e2022JD038256.

报告人简介：

薛永刚，男，中国科学院地球环境研究所副研究员，中国科学院青年创新促进会会员。从事大气挥发性有机物（VOCs）的来源、转化过程，及臭氧与颗粒物复合污染形成机制研究工作。

Oxidative Potential of $PM_{2.5}$ at a suburban site in Guangzhou: Source Apportionment and Associations with Aerosol PH and Microbial Components

Yuxin Huang[1], Yingyi Zhang[1], Chenglei Pei[2], Dachi Hong[2], Pujin Zhang[2], Baoling Liang[2], Senchao Lai[1,*]

[1] School of Environment and Energy, South China University of Technology, Guangzhou, China, 510006

[2] Guangzhou Sub-branch of Guangdong Ecological and Environmental Monitoring Center, Guangzhou, China, 510006

*Email:sclai@scut.edu.cn

Oxidative potential (OP) has been proposed as a possible integrated metric for particles smaller than 2.5 μm in diameter ($PM_{2.5}$) to evaluate adverse health outcomes associated with particulate air pollution exposure. Here, we investigate how OP depends on sources and chemical composition and how OP varies under the influence of aerosol pH and microbial components in winter and spring at a site in suburban Guangzhou. The positive matrix factorization (PMF) source apportionment model was used to identify the sources contributing to the observed OP of $PM_{2.5}$. The resolved sources were secondary aerosols, heavy oil combustion, a mixture of fossil fuel and biomass burning, soil and road dust, and vehicle emissions. Secondary sources contributed the most to OP in spring (47%), while fossil fuel and biomass burning were the primary contributors in winter (43%). Furthermore, we found that aerosol pH was negatively correlated with OP during the pollution episodes. The study also explored the relationship between OP and the microbial fractions in $PM_{2.5}$, revealing a stronger association with dead bacteria, likely due to the release of oxidative substances upon cell lysis. Although the correlation between OP and live bacteria is only modest ($r=0.293$, $p<0.05$), the interaction between live bacteria and specific chemical species, namely nitrate (NO_3^-) and organic carbon/elemental carbon (OC/EC), exhibits a highly significant correlation ($r>0.700$, $p<0.01$). This suggests that aerosol microbial components may also interact with other chemical components to produce synergistic toxicity. This study highlights the importance of chemical and microbial contribution to OP of $PM_{2.5}$ in the ambient environment.

Keywords: oxidative potential; $PM_{2.5}$, source apportionment; aerosol pH; microbial components

References

[1] Bates, J.T., Fang, T., Verma, V., Zeng, L., Weber, R.J., Tolbert, P.E., Abrams, J.Y., Sarnat, S.E., Klein, M., Mulholland, J.A., Russell, A.G., Review of Acellular Assays of Ambient Particulate Matter Oxidative Potential: Methods and Relationships with Composition, Sources, and Health Effects. Environ. Sci. Technol. 2019, 53, 4003–4019.

[2] Chen, Q., Wang, M., Wang, Y., Zhang, L., Li, Y., Han, Y., Oxidative Potential of Water-Soluble Matter Associated with Chromophoric Substances in PM 2.5 over Xi'an, China. Environ. Sci. Technol. 2019, 53, 8574–8584.

[3] Fang, T., Guo, H., Zeng, L., Verma, V., Nenes, A., Weber, R.J., Highly Acidic Ambient Particles, Soluble Metals, and Oxidative Potential: A Link between Sulfate and Aerosol Toxicity. Environ. Sci. Technol. 2017, 51, 2611–2620.

室内、室外与室内外耦合环境中飞沫扩散的CFD模拟质量控制研究

张雪琳[1]，范潇丹[1,*]，A. U. Weerasuriya[2]

[1] 中山大学大气科学学院，南方海洋科学与工程广东实验室，珠海，中国，519082

[2] 香港都会大学理工学院建筑与品质管理系，何文田，香港，BSocScHKU

*Email: fanxd3@mail2.sysu.edu.cn

摘要正文：呼吸道疾病患者呼出飞沫已被证实可在室内、室外、室内外耦合环境内传播[1]。CFD 模拟被广泛用于研究不同环境下飞沫扩散路径及感染风险评估。CFD 模拟准确性受数值参数显著影响，然而以往研究仅评估了数值参数对室内流场、温度场、污染场的影响[2-3]。本研究基于近年来新发表的飞沫浓度实验数据，分析了网格类型、近人体表面网格精度、 人体几何模型、飞沫粒径分布与人体表面热边界条件对室内、室外与室内外耦合环境下飞沫扩散的影响，为优化飞沫扩散模拟的参数设置提供了科学依据，有助于提升不同环境中飞沫传播路径和感染风险评估的精度。研究表明，采用 Polyhexcore 网格与近壁面 1mm 高度的边界层网格（y+<5）进行模拟时，流场和飞沫浓度分布的误差较小，同时使用的网格数量较少，显著节省了计算资源。相较于 3D 扫描的真实人体模型，简化的人体模型将改变人体周围飞沫扩散路径，使三种环境下易感者吸入与沉积在体表的飞沫比例均偏高。本文还对比了说话产生的真实粒径分布和同时释放五种粒径飞沫的情况。结果表明，由于第二种情况增加了呼出飞沫中大飞沫比例，导致室内与室内外耦合环境中，飞沫在易感者体表沉积比例增加，而室外环境中该比例降低。温度和热通量两种热边界条件设置下，室内环境中飞沫扩散路径显著改变。而由于室内外与室外环境风速较高，热边界条件对飞沫扩散影响较小。

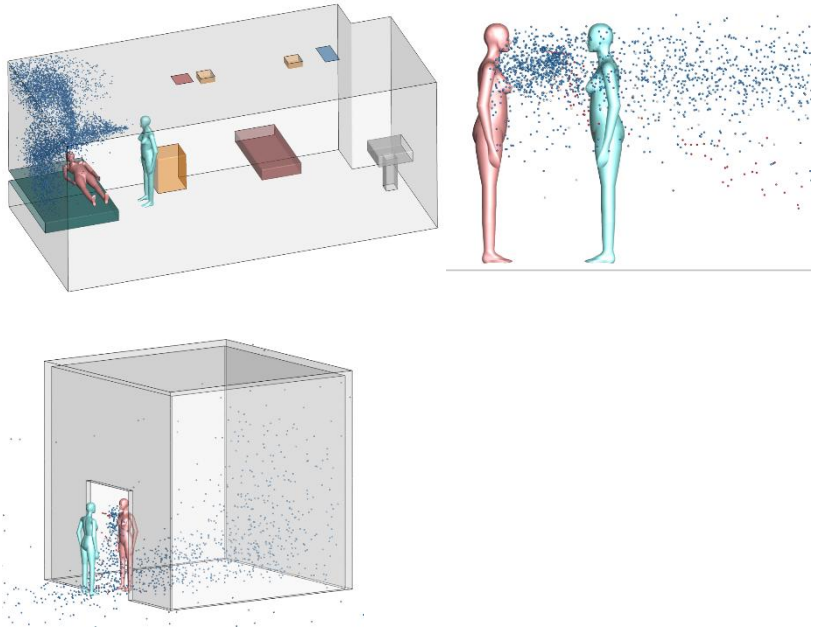


Fig. 1 Droplet dispersion in indoor, outdoor, and indoor-outdoor environments

关键词：飞沫扩散；CFD模拟；室内外耦合；质量控制

参考文献

[1] Q.J. Leclerc, N.M. Fuller, L.E. Knight, CMMID COVID-19 Working Group, S. Funk, G.M. Knight, What settings have been linked to SARS-CoV-2 transmission clusters? Wellcome open research 5 (2020) 83.

[2] Pei, Gen, and Donghyun Rim. "Quality control of computational fluid dynamics (CFD) model of ozone reaction with human surface: Effects of mesh size and turbulence model." Building and Environment 189 (2021): 107513.

[3] Yan, Yihuan, Xiangdong Li, and Jiyuan Tu. "Effects of manikin model simplification on CFD predictions of thermal flow field around human bodies." Indoor and built environment 26.9 (2017): 1185-1197.

报告人简介：

报告人为张雪琳副教授，附属中山大学大气科学学院，为国家优秀青年基金（海外）人才，“百人计划”青年研究员。主要从事未来城市环境中“健康舒适-节能降耗-城市与环境参数”之间的多尺度与多参数耦合影响机制相关研究。近 5 年来发表 SCI 论文 51 篇（其中，中科院大类一区 27 篇，小类一区 9 篇），其中以第一或通讯作者发表 26 篇。

先后负责、参与香港科技大学自主项目 3 项、香港基金委支持的香港四校联合项目 1 项和香港环境及自然保育基金 1 项；主持国家基金 2 项（海外优青和面上基金各 1 项），省部级项目 2 项（广东省区域联合基金与人才类基金），广州市应用基础研究基金 1 项，校级项目 2 项。担任国家环境保护大气物理模拟与污染控制重点实验室学术委员会委员，《Physics of Fluid》（中科院 2 区 Top）副主编，多本领域内顶刊审稿人,三本国际 SCI 期刊客座主编。申请人自主建设直流式大气边界层风洞实验室，组建 Future City-BEUP 未来城市-建筑环境与城市物理（Built Environment and Urban Physics）研究团队。团队有博士后 1 人，博士生 5 人，硕士生 5 人，团队以实现未来城市能源、健康与舒适为主体目标，围绕未来城市环境中的可持续问题开展城市气候全方位立体研究。

Reconstruction of historical site-scale dust optical depth (DOD) time series from surface dust records and satellite retrievals in northern China: application to the evaluation of DOD in CMIP6 historical simulations

Wenrui Yao [2, 1], Ke Gui [2, *], Hengheng Zhao [2], Linchang An[3], Nanxuan Shang [2], Xutao Zhang[2], Lei Li[2], Yu Zheng[2], Hong Wang[2], Zhili Wang[2], Junying Sun[2], Hong-Li Ren[2], Jian Li[4], Huizheng Che[2, *], Xiaoye Zhang[2]

1 Department of Atmospheric and Oceanic Sciences & Institute of Atmospheric Sciences, Fudan University, Shanghai 200438, China

2 State Key Laboratory of Severe Weather & Key Laboratory of Atmospheric Chemistry of CMA, Chinese Academy of Meteorological Sciences, Beijing, 100081, China

3. National Meteorological Center, CMA, Beijing 100081, China

4. State Key Laboratory of Severe Weather & Institute of Tibetan Plateau Meteorology, Chinese Academy of Meteorological Sciences, Beijing, 100081, China

*Ke Gui, guik@cma.gov.cn; **Huizheng Che, chehz@cma.gov.cn

The biases generated by state-of-the-art climate models in simulating dust optical depth (DOD) remain to be detailed. Here a site-scale DOD dataset in March–August over northern China (NC) during 1980–2001 was reconstructed using the empirical relationship between MODIS-retrieved DOD and dust-event frequencies during 2001–2021. Then, through the combined use of MODIS-based and reconstructed DOD, we evaluated the reproducibility of DOD from 10 models participating in phase 6 of the Coupled Model Intercomparison Project (CMIP6) for the historical period (1980–2001 and 2002–2014) and under different Shared Socioeconomic Pathways (SSPs) during 2015–2021. The results demonstrate that CMIP6 models and multi-model ensemble mean (MEM) are capable of capturing the spatial pattern of DOD, but with considerable uncertainty and inter-model variability in magnitude. Regionally-averaged DOD is underestimated by 56.09% during 1980–2001 and overestimated by 30.97% during 2002–2014 in MEM over NC. Simultaneously, the inter-model standard deviations are greater than MEM during 2002–2014, suggesting large discrepancies among individual models. Very few models accurately capture the trends in DOD, which can mainly be attributed to the different trends in simulated wind speed (WS), soil moisture, and vegetation cover, and their contributions to dust evolution. Under 4 SSPs, despite the best correlation between SSP1-2.6-modeled and MODIS DOD over Gobi Desert (GD), overestimation of DOD is still observed. More models under SSP1-2.6 capture the positive DOD trend, mainly attributable to positive changes in simulated WS over GD.

Keywords: DOD, CMIP6, northern China, evaluation

References

[19]W. Yao, K. Gui, H. Zhao, L. An, N. Shang, X. Zhang, H. Che, X. Zhang, Reconstruction of historical site-scale dust optical depth (DOD) time series from surface dust records and satellite retrievals in northern China: application to the evaluation of DOD in CMIP6 historical simulations, J. Clim. 2024.

报告人简介：

要文瑞，复旦大学-中国气象科学研究院联合培养在读博士研究生，研究方向为大气气溶胶及其气候环境效应。

Characterization analysis of $PM_{2.5}$ influencing factors in Sanya City based on machine learning

Jiaxin Du[1,2,5]，Ping Wang[1,2,3,4*]，Guangshui Na[1,2,5*]，Ding Huang[1,2,5]，Yukai Shen[1,2,4]，Jun Shi[1,2,4]

[1]Yazhou Bay Innovation Institute, Hainan Tropical Ocean University, Sanya Hainan 572025，China；

[2] Key Laboratory for Coastal Marine Eco-Environment Process and Carbon Sink of Hainan, Hainan Tropical Ocean University, Sanya Hainan 572022, China；

[3] Hainan Key Laboratory of Herpetological Research, Hainan Tropical Ocean University, Sanya Hainan 572022, China；

[4] College of Marine Science and Technology, Hainan Tropical Ocean University, Sanya Hainan 572022, China；

[5] College of Ecology and Environment, Hainan Tropical Ocean University, Sanya Hainan 572022, China；

Selecting routine meteorological data (daily temperature, daily pressure, daily wind speed, daily wind direction, daily cloud cover, daily dew point temperature) and precursor monitoring data ($PM_{2.5}$, SO_2, NO_2, O_3, CO) from 2014 to 2020 as variable parameters, this study investigates the influencing factors of the seasonal distribution of online $PM_{2.5}$ concentration in Sanya. The results indicate that: ① Using a frequency ratio model, further explore the impact of natural layers of principal component influencing factors on $PM_{2.5}$. The main influencing factors of seasonal meteorology and precursors, as well as their corresponding natural faults and frequency ratios, are: dew point temperature in spring (19.11-19.41 ° C, FR spring=1.0060) and ozone (74.96-78.34 μ g/m^3, FR spring=1.0025); The temperature in summer (21.90-22.45 ° C, FR summer=1.0060) and ozone (66.57-69.8 μ g/m^3, FR summer=1.0030); Wind speed in autumn (4.71-5.1m/s, FR autumn=1.0005) and ozone (67.53-69.14, FR autumn=1.0001); The winter wind direction (90.21-92.57 μ g/m^3, FR winter=1.0001) and NO_2 (6.90-7.46 μ g/m^3, FR winter=1.0060) Based on grid search parameter tuning, three models (RE, AdaBoost, and SGD) for optimizing machine learning algorithms were validated and compared using root mean square error (RMSE), mean absolute error (MAE), and goodness of fit (R^2). It was found that the seasonal optimal models for spring, summer, autumn, and winter are all random forests (RE) Based on the predicted $PM_{2.5}$ values using the random forest model, draw a $PM_{2.5}$ risk map in ArcGIS and overlay the inverse distance spatial interpolation maps of the natural layers corresponding to the main meteorological and precursor factors. Visualize and analyze the reasons for the formation of $PM_{2.5}$ hotspot patches.

Keywords: Sanya, $PM_{2.5}$, frequency ratio, random forest, influencing factors

南海-东印度洋海域气溶胶中手性氨基酸的特征与来源

邓乐琳[1]，张颖仪[1]，赖森潮[1,*]

[1]华南理工大学 环境与能源学院，广东广州，510006

*Email:sclai@scut.edu.cn

摘要正文：氨基酸是自然界中重要的蛋白类物质，也是大气气溶胶中有机氮的重要组成部分，对人体健康有一定的影响，也会对云凝结核产生影响，从而间接影响全球气候。除了甘氨酸（Gly）以外，根据构型不同，氨基酸可分为 L 型氨基酸和 D 型氨基酸，而手性氨基酸对指示气溶胶来源和大气过程具有重要意义。针对目前对海洋气溶胶中手性氨基酸的空间分布特征研究缺乏的现状，本研究利用南海-东印度洋走航观测，开展海洋气溶胶手性氨基酸的空间分布和来源特征研究。

通过东印度洋走航观测，获得不同海域手性氨基酸的浓度水平和组成特征。结果显示，在不同海域共能测出 23 种手性氨基酸，其中包括 7 对手性氨基酸，总游离态氨基酸（TFAAs）的浓度水平范围呈现出明显的空间分布特征，受海洋来源影响的气溶胶中手性氨基酸的浓度水平明显低于受陆地来源影响的气溶胶中的手性氨基酸浓度水平。在检出的手性氨基酸中，中性氨基酸所占比例最大，Gly 是走航样品中的优势氨基酸。同时，发现不同的海域、不同的离陆距离对亲水性和疏水性氨基酸的分布有一定的影响。此外，通过将 TFAAs、D 型氨基酸以及 D/L 比值与有机物、水溶性离子等物质进行相关性分析，发现在不同的海域中，海洋气溶胶受不同来源的影响程度不同，揭示了海洋环境要素、人为源远距离传输等因素对于开放海域中手性氨基酸的空间分布的影响。

关键词：海洋气溶胶；手性氨基酸；空间变化；开放海域

参考文献

[1] Li, Y., Li, X., Wu, L., Shi, L., Wang, S., Fu, P., Zhang, Y., Lai, S. Analysis of amino acid enantiomers in ambient aerosols: Effects and removal of coexistent aerosol matrix. Journal of Environmental Sciences. 2024, 137: 732-740.

[2] Yao, Y., Zhang, Y., Song, J., Yuan, Q., Wang, S., Li, X., Zhang, Y., Ding, X., Xu, W., Su, X., Lai, S. Chemical characterization of marine aerosols from two cruises over the South China Sea: Importance of biomass burning and secondary formation. Science of the To tal Environment. 2023, 867: 161551.

[3] Li, X., Zhang, Y., Shi, L., Kawamura, K., Kunwar, B., Takami, A., Arakaki, T., Lai, S. Aerosol Proteinaceous Matter in Coastal Oki nawa, Japan: Influence of Long-Range Transport and Photochemical Degradation. Environmental Science & Technology. 2022, 56: 5256-5265.

水蒸气在气溶胶颗粒表面成核行为的分子动力学研究

申奥[1,2]，殷林豪[1]，段家亮[1]，凡凤仙[1,2,*]，苏明旭[1,2]

[1]上海理工大学能源与动力工程学院，上海，200093；

[2]上海市动力工程多相流动与传热重点实验室，上海，200093

*Email：fanfengxian@usst.edu.cn

摘要正文：水蒸气在气溶胶颗粒表面的异质核化现象广泛存在于自然和工业过程，探索该异质核化动力学行为对于理解气溶胶的演化过程至关重要。采用分子动力学模拟方法开展水蒸气在球形二氧化硅纳米气溶胶颗粒表面的成核动力学行为研究，基于 SPC/E 模型描述水分子，基于 YM 阈值法计算模拟得到的临界晶核尺寸和成核速率，在此基础上，探究了水蒸气饱和度和纳米颗粒半径对成核过程和特性的影响规律。结果表明，高过饱和度条件下均质与异质成核同时发生，水蒸气以颗粒为依托的异质成核过程可划分为成核、增长、凝并三个阶段；随着水蒸气饱和度的增加，颗粒表面水分子的吸附数量与吸附速率增加，均质与异质成核速率升高，而临界晶核尺寸逐渐减小；随着气溶胶颗粒半径的增大，颗粒能够提供更多的成核位点，因而颗粒表面吸附的水分子总数与小尺寸团簇数量明显增多，但随着颗粒半径的增大，单位表面积吸附的水分子数量减少，导致异质成核速率下降。研究还发现临界晶核尺寸随着颗粒的增大有所增加，表明其受颗粒半径的影响程度有限。

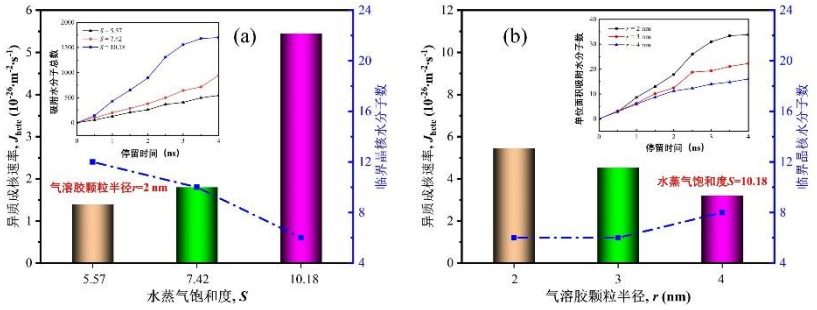


Fig. 1 Heterogeneous nucleation of water vapor on nanoparticles under (a) different vapor saturation ratio and (b) different aerosol particle radius.

关键词：异质成核；气溶胶颗粒；过饱和水蒸气；分子动力学；数值模拟

参考文献

[1] Xu J, Zhang Y, Zhang J, Liu H, Shao Q, Chu H. Progress in the heterogeneous condensation of water vapor for $PM_{2.5}$ removal[J]. Powder Technology, 2023, 427: 118701.

[2] Yin L, Fan F, Zhang C, Bu L. Heterogeneous nucleation of vapor on insoluble particles predicted by an improved classical nucleation theory[J]. Aerosol Science and Engineering, 2024, 8(2): 133-45.

[3] Angélil R, Diemand J, Tanaka KK, Tanaka H. Homogeneous SPC/E water nucleation in large molecular dynamics simulations[J]. The Journal of Chemical Physics, 2015, 143(6): 064507.

报告人简介：

申奥（1994-），男，上海理工大学能源与动力工程学院，讲师，Email：shenao@usst.edu.cn

基于尺度分析方法判别硫酸盐气溶胶形成路径重要性

刘明旭 [1,*]

[1] 北京大学环境科学与工程学院，北京市海淀区，100871

*Email: liumingxu@pku.edu.cn

摘要正文：大气中的硫酸盐气溶胶影响空气质量和气候变化。近年来中国冬季污染事件中二次硫酸盐的生成机制一直备受关注。但已有的研究从外场观测、室内实验、和数值模拟方面得出的结论无法达成一致。本研究提出一种基于物理过程的简易方法，以澄清过往研究存在的一些争议。首先，考虑到霾污染事件在天气尺度中的演变周期，采用观测驱动的欧拉质量平衡方程计算了硫酸盐的特征生成速率（Fig. 1）。进而，以该特征值为依据，评估化学模型估算得到的不同生成路径的重要性，从而帮助识别其主导生成机制。因此，该方法有助于建立不同研究手段之间的联系，形成对二次气溶胶形成途径的统一认知。

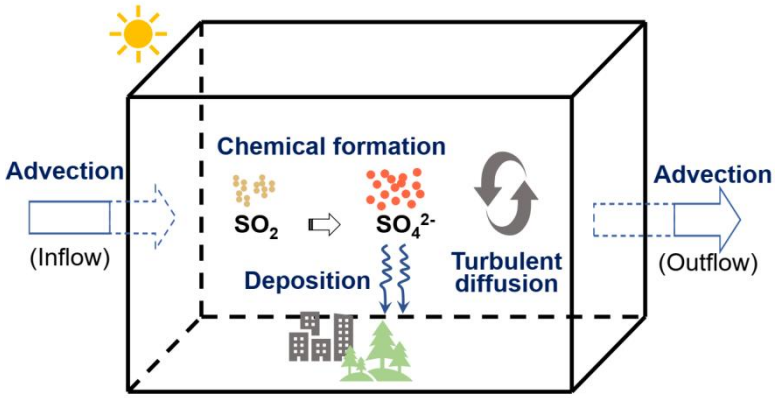


Fig. 1 Schematic plot of Eulerian method

关键词：二次硫酸盐；尺度分析；欧拉方法；生成机制

报告人简介：

刘明旭，北京大学环境科学与工程学院研究员、助理教授。主要从事气溶胶理化性质及其环境效应研究。

多角度偏振相机DPC/GF-5B对京津冀地区气溶胶光学-微物理参数的反演方法和对一次沙尘天气的追踪

曹雨佳[1,2]，陈澄[1,2,*]，余海啸[1,2]，刘晓[1]，孙晓兵[1,2]，顾浩然[3]，谢一凇[3]，李正强[3]，洪津[1,2]

1 中国科学院合肥物质科学研究院安徽光学精密机械研究所，合肥 230031

2 中国科学技术大学，合肥 230036

3 中国科学院空天信息创新研究院国家环境保护卫星遥感重点实验室，北京 100101

* Email: cheng.chen@aiofm.ac.cn

摘要正文：大气气溶胶是大气成分中的重要组成部分，在大气中拥有不可忽视的辐射强迫效应，影响着自然界中的辐射传输、能量循环、气候变化和地气耦合等过程，与环境保护和人体健康有着密不可分的关系。中国北方地区是全球大气沙尘气溶胶的第二源区，每年春季受大尺度大气环流影响，向东输送大量沙尘气溶胶，造成中国重要经济发展区域京津冀的频繁沙尘天气，影响着陆-气辐射能量平衡和下游地区的大气结构。研究基于多角度偏振传感器 DPC/GF-5B，结合最优化反演算法 GRASP（Generalized Retrieval of Atmosphere and Surface Properties），建立了针对 DPC 的 GRASP 气溶胶光学微物理反演方案，在 2023 年春季 4 月~6 月进行了京津冀地区的气溶胶光学微物理特性的反演测试，并追踪了一次沙尘天气。结果表明，DPC/GRASP 方法能够对京津冀地区的气溶胶光学-微物理特性进行高精度反演，与 AERONET 气溶胶产品和 MODIS 气溶胶产品的数据相关性高，并且多元的光学微物理参数能够识别京津冀地区沙尘天气的演化过程。为未来综合各类气溶胶观测平台数据，高效准确获取大区域气溶胶光学微物理特性提供了一套新的方法和处理流程，为研究沙尘天气的演变和沙尘气溶胶的扩散提供了新的参考。

关键词：气溶胶；光学微物理特性；DPC；GRASP；沙尘气溶胶

报告人简介：

曹雨佳，1025036882@qq.com，本科毕业于南京信息工程大学，硕士就读于中国科学技术大学，现于中国科学院合肥物质科学研究院进行硕博连读。目前的研究方向为大气气溶胶遥感，工作重点为遥感数据预处理，遥感数据反演与数据同化。

利用碳同位素和有机分子示踪物解析长三角地区背景大气有机气溶胶来源

吴长流[1, 2]，曹芳[1, 2, *]，贾小芳[3]，章炎麟[1,2]

[1]南京信息工程大学生态与应用气象学院，南京，210044

[2]耶鲁大学-南京信息工程大学大气环境中心 气候与环境变化国际合作联合实验室，南京，210044

[3]中国气象局气象探测中心，北京，100081

*Email: caofangle@163.com

摘要正文：人为源和自然源以及两者的交互影响在气溶胶形成过程中发挥着重要作用[1]，但国内关于区域背景大气的研究仍较匮乏。为明确人为或自然因素对背景大气的影响，本研究利用有机分子标记物和碳同位素技术定量解析了长三角背景大气$PM_{2.5}$中有机气溶胶的化石和非化石源的相对贡献，并进一步探讨了有机气溶胶的生成机制。结果表明：夏季大气有机碳（OC）和元素碳（EC）浓度低于其他季节，其主要代表海洋气团，气团主要在华东沿海及临近大陆区活动。化石源对EC贡献为79±8%（0.37~1.1 μgC·m^{-3}），剩余的21±8%（0.05~0.77 μgC·m^{-3}）归因于生物质燃烧排放。相反，OC以非化石源为主，贡献率约为57±4%。非化石源OC（OC_{nf}）的组成具有明显的季节差异：（1）生物质燃烧排放物衍生的二次有机碳（SOC_{bb}）是冬季OC_{nf}的主要贡献者（62%）。（2）生物源有机碳（BioOC）对OC_{nf}的贡献在春季和夏季分别约为74%和87%，其中约一半源于二次生成（47%～56%）。春季以α-蒎烯衍生途径为主（35%），夏季以异戊二烯衍生途径为主（49%）。（3）在秋季，不同来源对OC_{nf}的贡献率较为接近，依次为BioSOC（33%）＞SOCbb（28%）＞POCbb（21%）＞BioPOC（19%），表明该时期非化石源污染更为复杂。各季节化石源有机碳（OC_f）（3.11±0.79 μgC·m^{-3}）主要源于二次生成，SOC_f平均占OC_f约76±9%，突出了人为源区域输送对本底气溶胶的影响。总的来看，包括区域排放输送在内的人为源对临安本底大气气溶胶的贡献十分突出，尤其是在冬季（93%）和秋季（73%），远高于夏季（48%）。

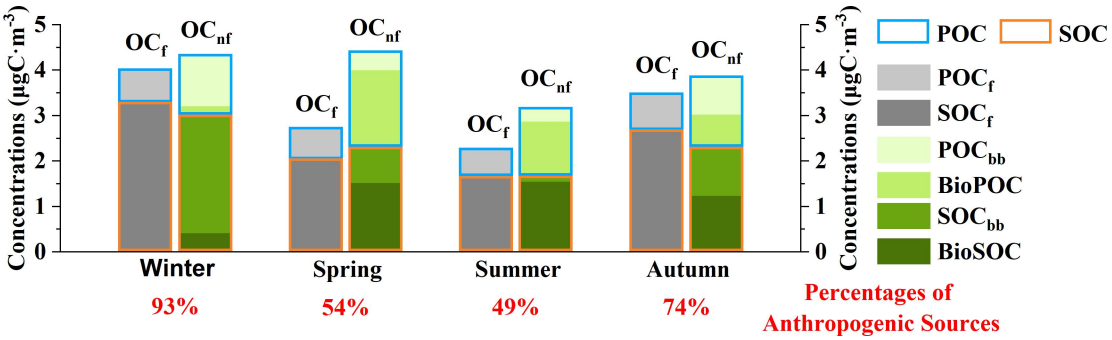


Fig. 1 Source apportionment of organic aerosols by combining ^{14}C and organic tracers.

关键词：背景大气；有机气溶胶；碳同位素；有机分子示踪物；源解析

参考文献

[1] **Qi Chen, Ruqian Miao, Guannan Geng, Manish Shrivastava, Xu Dao, Bingye Xu, Jiaqi Sun, Xian Zhang, Mingyuan Liu, Guigang Tang, Qian Tang, Hanwen Hu, Ru-Jin Huang, Hao Wang, Yan Zheng, Yue Qin, Song Guo, Min Hu, Tong Zhu. Widespread 2013-2020 decreases and reduction challenges of organic aerosol in China.** ***Nature Communications.*** **2024, 15:4465.**

报告人简介：

吴长流，男，1998 年出生于安徽怀宁，目前就于南京信息工程大学攻读应用气象学专业博士学位，主要研究方向为含碳气溶胶和同位素示踪。Email: charliawu@outlook.com

关中平原典型观测点棕碳气溶胶光学性质、来源及意义

高飞[1]，李小飞[1*]，余峰[1]，郭景宁[1]，曹军骥[2]

[1]陕西科技大学，陕西西安，710021

[2]中国科学院大气物理研究所，北京 100029

*Email:lixiaofei@ieecas.cn

摘要正文：棕碳（BrC）是 OC 中存在的一种在紫外-近可见光波段进行有效光吸收的化合物复合体，对全球地气系统辐射平衡、人体健康和区域空气质量等产生重要影响。本研究通过采集的气溶胶样品（$PM_{2.5}$），分析了秦岭北麓、汤峪、翠华山、和西安 $PM_{2.5}$ 化学组分，BrC 的吸光特性，通过轨迹模型和源解析模型对 BrC 的来源进行了讨论。在夏季西安中 $PM_{2.5}$、有机碳（OC）和元素碳（53.40 ± 17.42、4.61 ± 2.41 和 0.78 ± 0.60 μg m^{-3}）的浓度均高于秦岭（27.57 ± 8.27、4.23 ± 1.37 和 0.67 ± 0.53 μg m^{-3}）。此外，在秦岭和西安中获得的水溶性有机碳 365nm 的质量吸收效率分别为 0.18±0.03 m^2 g^{-1} 和 0.78±0.96 m^2 g^{-1}。汤峪的 WS-BrC 比翠华山具有较强的光吸收能力。在紫外范围内，WS-BrC 相对于元素碳的直接辐射效应为 6.67 ± 1.36%，翠华山为 24.13 ± 10.84%。正矩阵分解（PMF）模型确定了西安和秦岭中的三个主要来源，包括煤燃烧源、二次气溶胶和粉尘源。该研究对评价关中平原与秦岭北麓的相互作用和影响，对提高关中盆地大气污染防治能力具有重要意义。

关键词：棕碳；化学组分；光学特性；来源；关中平原

报告人简介：

高飞，目前就读于陕西科技大学资源与环境专业，研究方向为城市气溶胶、棕碳。

Recent developments in the measurement of airborne UFP for higher data availability: Examples from Europe

Maximilian Uebach, Jun Deng
Palas Asia, Hong Kong, China
*Corresponding author: maximilian.uebach@palas.com.cn

Airborne particles adversely affect human health, depending on their size. With decreasing size of particles deeper penetration of the respiratory tract is observed, and ultrafine particles (UFP) smaller than 100 nm can pass into the blood vessel. Furthermore, the specific surface area of particles, available for adsorption of potentially harmful substances, increases inversely proportionate with diameter. While mass related limits for the PM_{10} and $PM_{2.5}$ fine dust fractions are in place, and dust levels are monitored, the potentially more harmful PM_1 fraction and the number concentration of nanoparticles are not under regulation today.

Many research driven UFP measurements have been conducted throughout the last years, including studies in hotspots like airports London-Heathrow (Stacey et al, 2023) or Paris-Charles de Gaulle and Orly, source apportionment (Li et al., 2023) or for epidemiological studies (Schwarz et al., 2023) and continuous background level monitoring (Hofman et al., 2016).

While ambient air UFP-monitoring is part of research globally, a lack of technologic and methodologic standardization and data harmonization makes long term studies and comparison of results challenging. In recent years awareness for the need of a more standardized UFP monitoring approach as well as harmonized data has been growing. Improvements, such as the introduction of CEN/TS 16976:2016 and CEN/TS 17434:2020, targeting the determination of particle number concentration and size distribution for UFP in atmospheric aerosol, respectively, have been put forward.

The EU funded RI-URBANS project aims to enhance urban air quality monitoring by integrating advanced scientific methods with existing air quality networks. Its objectives include improving public health through better air quality data, providing new insights into urban air pollution sources, improving the measurement of UFP and assessing their health impacts, and developing actionable strategies for pollution mitigation. Key service tools developed in the project are mobile and stationary monitoring units, citizen science initiatives, and data analysis platforms to provide real-time air quality information and foster public awareness. Moreover, the research project resulted in a feedback and recommendation paper on the “Proposal for a Directive of the European parliament and of the council on ambient air quality and cleaner air for Europe”, published in 2022.

The new directives preliminary final text was published in March 2024 and emphasizes the reduction of air pollution and its harmful effects on human health and the environment. Key measures include stricter standards for pollutants like $PM_{2.5}$, PM_{10}, NO_2, and O_3. The guidelines aim to align EU air quality standards more closely with the 2021 World Health Organization (WHO) recommendations by setting lower threshold levels for these pollutants, while particularly targeting mandatory monitoring of UFP concentrations to protect public health. Therefore, the new European air quality guideline introduces stricter limits for air pollutants, for the first time requires continuous UFP measurements, and enhances public information on air quality as well as reporting mechanisms to ensure compliance and more rigorous action plans for areas failing to meet these standards. It also highlights the need for increased public awareness and engagement, promoting measures like low-emission zones and cleaner transportation options to reduce urban pollution levels.

In this swiftly improving environment for the future of tackling air pollution, and UFP in

particular, there are several technical solutions improving the users long term data availability, while following international standards, reducing downtime to a minimum by providing comprehensive local service, maintenance and support on a high level.

Keywords: Ambient UFP measurement, data availability, data harmonization

非能动核电厂事故后安全壳内气溶胶自然去除分析及关键技术研究

付亚茹

上海核工程研究设计院股份有限公司

摘要正文：对于非能动核电站，事故发生后，安全壳中的放射性气溶胶通过自然过程被去除。这些过程具有高可靠性。然而，分析气溶胶在自然过程中的行为是非常复杂的。主要的过程包括凝结、重力沉降、扩散泳和热泳。本文的主要工作总结如下：（1）确定安全壳内放射性气溶胶自然去除系数的分析方法。（2） 完成了非能动核电厂事故后安全壳内热工水力参数及自然去除系数的分析。（3） 对安全壳自由体积、沉降面积、气溶胶尺寸、填充份额、放射性和非放射性气溶胶的质量比以及蒸汽冷凝率等参数进行了全面的敏感性分析。（4）完成 LOCA 后堆芯熔化和非熔化事故序列的自然去除过程进行对比分析。结果表明，（1）对于非能动核电厂来说，扩散泳导致的去除效果最显著。（2） 一般来说，在其他参数不变的情况下，安全壳的自由容积越大，气溶胶的自然去除系数越小，气溶胶尺寸越大，通过沉降去除的气溶胶量就越多。（3） 堆芯熔化事故和非熔化事故后的气溶胶自然去除系数差别不大。

关键词：非能动核电厂；气溶胶；自然去除；重力沉降；扩散泳；热泳

基于智能扫描电镜(IntelliSEM-EPAS)的单颗粒精细化来源解析

赵鹏[1-3]，赵普生[2,4*]，李江[4]，贺艳云[4]，佟梦晗[2]，杨亚韬[2]，冯银厂[1,3*]

[1]南开大学环境科学与工程学院，天津，300350

[2]大气颗粒物电镜分析联合实验室，北京，100012

[3]中国气象局-南开大学大气环境与健康研究联合实验室，天津，300350

[4]北京迈特高科技术有限公司，北京，102200

[*]Email: zhaopusheng@bmet.cn, fengyc@nankai.edu.cn

摘要正文：扫描电镜（SEM）技术目前已被广泛应用于大气颗粒物的形貌表征、成分分析和来源识别。与人工操作的 SEM 相比，智能扫描电镜(IntelliSEM-EPAS)技术的发展实现了大量环境单颗粒信息的快速获取，为建立基于单颗粒形貌和化学元素信息的颗粒物来源解析方法提供了技术基础。然而，目前应用该技术进行大气颗粒物溯源的主要困难在于充分挖掘和融合大量不同类型数据，包括颗粒图像（形态）、粒径和化学成分数据的特征。因此，本研究拟结合计算机视觉技术与机器学习模型的优势，构建一种新的单颗粒源解析方法。

本研究首先应用 IntelliSEM-EPAS 技术对六类常规污染源（包括土壤尘、道路尘、建筑尘、煤烟尘、生物质燃烧和钢铁冶炼）排放的颗粒物进行表征，建立了包含超过 60000 个单颗粒的污染源多维特征数据集。基于该数据集，我们构建了一个先进的机器学习管道（RX 模型）来识别颗粒物来源。RX 模型主要包含残差网络（RseNet）和极限梯度提升（XGBoost）算法两个模块，RseNet 用于提取单颗粒图像特征，XGBoost 模型用于挖掘不同源排放单颗粒形貌、粒径和化学成份特征并预测颗粒来源。最后，应用虚拟环境样本数据集（其真实源贡献已知）对 RX 模型源解析结果进行验证。结果表明，RX 模型可以准确预测六个污染源的贡献，颗粒质量贡献的平均误差为 0.11%，数量贡献的平均误差为 0.15%（Fig. 1）。

本研究首次将 IntelliSEM-EPAS 技术与机器学习方法融合用于大气颗粒物源解析，证明了形貌可以作为识别颗粒来源的重要特征。同时本研究开发的 RX 模型在挖掘不同污染源排放颗粒特征方面呈现出显著的优势，该模型不仅可用于大气颗粒物来源解析，还可进一步作为探究不同类型或来源的大气颗粒物与其健康风险关联的工具。

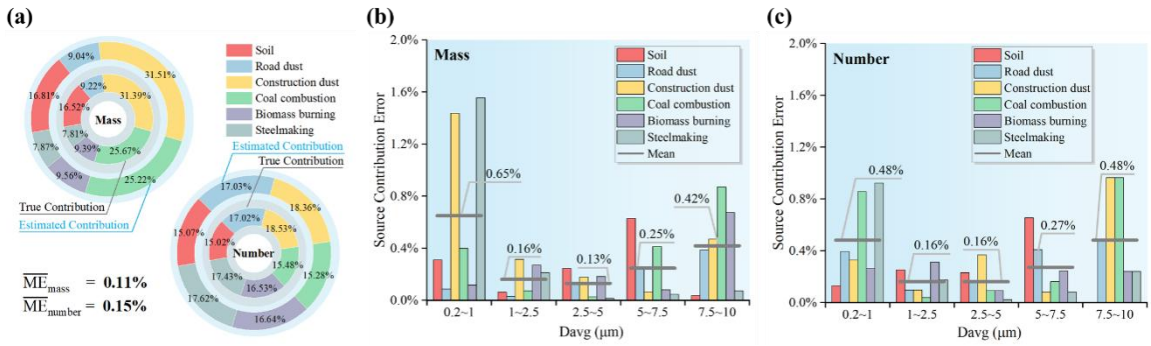


Fig.1 Source apportionment of virtual environment sample dataset using RX model. (a) Comparison of true source contributions and model-estimated source contributions. Errors in mass (b) and number (c) contributions for different size bins.

关键词：智能扫描电镜；源解析；单颗粒；机器学习；图像识别

报告人简介：

赵鹏，男，南开大学在读博士研究生。主要研究方向为应用大气单颗粒多维度（图像、粒径和化学组成）大数据实现大气颗粒物溯源。目前已发表 SCI 论文 6 篇，其中以第一作者/共同一作发表论文 2 篇。

碳封装铁镍合金耦合贵金属纳米粒子室温净化甲醛机制

朱丹丹[1]，石先进[1]，黄宇[1,*]，付莉娟[2]

[1]中国科学院地球环境研究所，陕西省西安市雁塔区雁翔路 97 号，710061

[2]西安交通大学，陕西省西安市咸宁西路 28 号，710049

*Email: huangyu@ieecas.cn

摘要正文：挥发性有机物（VOC）是臭氧和二次有机气溶胶的重要前体物，对大气环境和人体健康造成严重危害。甲醛（HCHO）作为室内环境中一种典型的VOC，具有致畸、致癌作用。采取有效的措施净化室内甲醛，对改善室内空气质量意义重大。常温催化氧化技术是室内甲醛污染控制的有效途径，催化剂表面的活性氧物种是实现甲醛高效去除的关键。负载型贵金属因其较强的分子氧（O_2）活化能力，是目前最理想的常温催化材料。但贵金属的稀有性及高成本严重制约其大规模应用。因此，精细调控催化剂的电子结构以促进O_2的活化，对实现Pt的高效利用至关重要。研究表明，通过电子金属-载体相互作用（EMSI）可显著调节贵金属的电子结构。然而，当前对EMSI增强活性机制的研究主要局限在以金属氧化物作为载体，尤其在VOC催化降解方面。本研究采用高温热解-震荡还原策略，合成了一种以碳封装FeNi合金为载体的新型Pt催化剂（FeNi@NC/Pt），Pt纳米粒子尺寸仅2−4 nm。该催化剂在室温净化甲醛方面表现出优异的催化活性（92%）、稳定性和抗水性，并且在超低的铂负载量下，仍具有较高的甲醛去除效率（>80%）。结构分析和理论计算表明，即使FeNi合金与Pt颗粒没有直接接触，二者间仍存在定向的电子转移。这种由碳介导的电子穿透效应赋予Pt富电子的特性，通过延长O−O键（1.405 Å）使得O_2有效活化。本研究为非氧化物载体与贵金属之间EMSI效应的构建及精细调控Pt电子结构提供了新的思路，在室内空气净化方面具有重要的科学意义和应用价值。

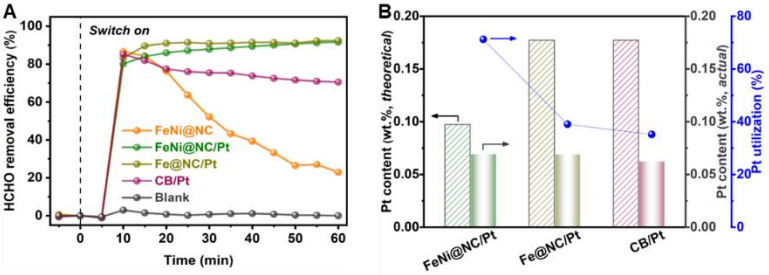


Fig. 1 A) HCHO removal efficiency over different catalysts. Reaction conditions: 100 ppm of HCHO in air, ~30% RH, and a gas hourly space velocity (GHSV) of 60,000 mL g^{-1} h^{-1}. B) The theoretical and actual contents, and utilization of Pt over FeNi@NC/Pt, Fe@NC/Pt, and CB/Pt.

关键词：铁镍合金；超低铂负载量；电子金属−载体相互作用；分子氧活化；甲醛净化

参考文献

[1] L. H. Sun, et al., Heterojunction-based electron donators to stabilize and activate ultrafine Pt nanoparticles for efficient hydrogen atom dissociation and gas evolution. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60: 25766–25770.

[2] Y. Wang, et al., Electron penetration triggering interface activity of Pt-graphene for CO oxidation at room temperature. *Nat. Commun.* 2021, 12: 5814.

报告人简介：

中国科学院地球环境研究所博士后，毕业于西安交通大学。研究方向为大气污染控制技术及纳米催化材料开发，主要围绕环境空气中典型挥发性有机物开展常温/热催化基础研究。已在国内外学术期刊发表论文 20 余篇，其中以第一作者在 Environmental Science & Technology、Applied Catalysis B: Environmental、Journal of Hazardous Materials、Carbon 等期刊发表论文 7 篇。主持国家自然科学基金青年项目、中国博士后面上资助和中国科学院特别研究助理资助项目。

基于卫星遥感的城市高分辨率AOD反演研究及存在的问题

刘佳鑫[1]，薛勇[2,*]

[1]中国矿业大学环境与测绘学院，江苏徐州市，221116

[2]南京信息工程大学应急管理学院，江苏南京市，210044

*yxue@cumt.edu.cn

摘要正文：由于缺乏合适的检索算法，城市地区高空间分辨率 AOD 的检索仍然具有挑战性。在以往单角度城市高分辨气溶胶光学厚度（AOD）检索研究中，主要将高分辨影像分为三种土地覆盖类型来获取地表反射率，一般为： NDVI>0.55 的高植被覆盖度区域、0.25<=NDVI<=0.55 的稀疏植被覆盖度区域、NDVI<0.25 的裸露土地或者明亮地表区域。需要注意的是：在高植被覆盖度区域内使用 DT 算法获取地表反射率已经成为了该领域的共识。单角度气溶胶反演算法本质上是地气解耦的过程，该过程的实现依赖于求解大气辐射传输方程。由于大气辐射方程是关于地表反射率、太阳和卫星几何视图参数、气溶胶相函数、气溶胶散射和吸收系数的综合函数，不能直接求解，所以实际检索 AOD 是通过卫星实测 TOA 和实际的 LSR 代入大气辐射传输方程模拟的 TOA 进行查找表的比对来进行反演的[1-4]。

大气辐射传输方程中的地表反射率准确估计是 AOD 检索的非常重要的步骤，而明亮地表的 LSR 估计一直是该领域主要难题。Hsu 等(2004)提出的深蓝算法（DB）在明亮地表的气溶胶检索取得了突破[5]。随后，他们在增强型深蓝算法中鉴于明亮地表的 LSR 长时间稳定不变的假设，增加了受 BRDF 影响的考虑，利用最小值 15%与散射角拟合二阶多项式构建表面反射率库[6]。接下来，一些学者诸如 Wei 等(2017)、Lin 等(2021,2021)、Yang 等(2021)将深蓝算法拓展至 Landsat 8 OLI 和 Sentinel-2A\ B 卫星传感器的 AOD 检索上[7-10]。然而，这些学者对 LSR 数据库的操作方法并不一致，这意味着从反射率数据库中获取准确的 LSR 变成了值得深入的问题。Su 等（2021）使用直方图中位数(HISM) 并考虑了 BRDF 效应，使用滑动窗口均值和 Savitzky-Golay (S-G)滤波方法来平滑月基准反射率库从而剔除了大量的异常值，最后使用月比值函数来检索反射率[11]。Lin 等（2021）使用 BRDF Ross-Li 核函数对 LSR 数据进行拟合，来模拟地表方向反射特征并获得了不错的检索效果[8]；Yang 等系统地论证了方向反射对 AOD 检索的误差影响，在明亮地表检索时，这种影响会增大[12-13]；Choi 等（2016，2018）也考虑了地表方向反射，建立月尺度的地表反射率数据来耦合方向反射特征[14-15]，这些都说明了考虑方向反射对于获取可靠的 LSR 至关重要。Tian 等（2018）利用 MODIS BRDF 产品提供的三个 Ross-Li 核系数重采样为 30m 分辨率可以检索到 Landsat 8 OLI 各观测方向的 LSR[16]。不过该产品由于分辨率的缘故，且受云阴影、噪声等影响，产品存在数据缺失、质量低等问题导致地表 BRDF 形状拟合的精度低难以推广至高分辨率传感器上[17-18]。

为了研究城市地表方向散射，我们利用百余幅 Landsat 8 历史 L2 SR 数据构建了 LSR 数据库。设 6s 大气校正得到的反射率是无云表面的真实反射率，选取 LSR 数据库的月中位数和第二最小值来拟合散射角。Fig 1.a 和 b 分别显示了北京市四个 AERONET 站点的红蓝波段拟合值与真实反射率的关系（Offset= the fitted value - the true LSR），这说明了，选取月尺度 LSR 数据库中的中位数和第二最小值也会出现高估或低估的误差。Fig 1.a 和 b 的上图是选择中位数进行拟合，下面则是第二个最小值拟合，与 TOA 具有良好的相关性。TOA 数据来自 2014 年和 2019 年拍摄的 35 张影像，测试影像来自 2022 年至 2023 年。LSR 由散射角检索，公式为：$LSR_{retrieved} = LSR_{database} + P_1 TOA + P_2$， P_1和P_2 在[0,3]和[-0.3,0]的间隔通过迭代进行搜索，使得 LSR 和 TOA 之间的平均斜率误差小于阈值，并且还必须建立 LSR 低于临界反射率的条件小于 TOA，反之亦然。最后，通过线性插值得到每天的 LSR。 Fig 1.c 和 d 显示了这种方法在蓝色波段的效果，当然这在多云天气中是无效的。Fig 1.e 显示了 2021 年北京四个季节的 LSR 分布。

Fig 1.c 显示了这种方法的可行性，这是在北京市 RADI 站点上在 LSR 数据库进行 LSR 检索的结果。值得注意的是：高分辨影像中 LSR 各向异性非常明显，这是城市高分辨 LSR 估计误差的主要来源，而且利用散射角对 LSR 拟合并不能良好地表征高分辨率下地表地方向反射特征。在 Fig 1.c 中，黑色多段线是大气校正得到的 LSR，

绿色的为当时的 TOA，这表明检索的 LSR 与大气校正得到的 LSR（黑色多段线）具有较高的一致性。三条多段线形状较为一致说明了 TOA 能够很好的表示地表的方向反射，当然这在有云的条件下是无效的。红色曲线是对检索的 LSR 与散射角进行的拟合，这与 Marshak 等（2021）研究研究结论一致，地表的 LSR 与散射角总体呈正相关[16]。Fig 1.d 展示了检索值与 6S 大气校正得到的真实 LSR 的总体相关性，基本所有的采样点都落在了 EE 线内（预期误差）。最后 Fig 1.e 展示了 2022 年北京市各季节的 LSR 分布，可以看出，受方向散射的影响下夏季的平均 LSR 高于冬季的 LSR。

从以上论述可以发现，城市高分辨率 AOD 检索的难题主要来自明亮地表地气解耦的复杂性，即地表各向异性难以被准确描述。由于 Landsat 系列卫星重返周期、数据质量及 AERONET 站点数据缺失等问题，我们未能获取足够多的数据来测试 AOD 检索质量。在未来，我们会对上述方法进一步优化并在城市的高分辨率 AOD 检索中进行实验。

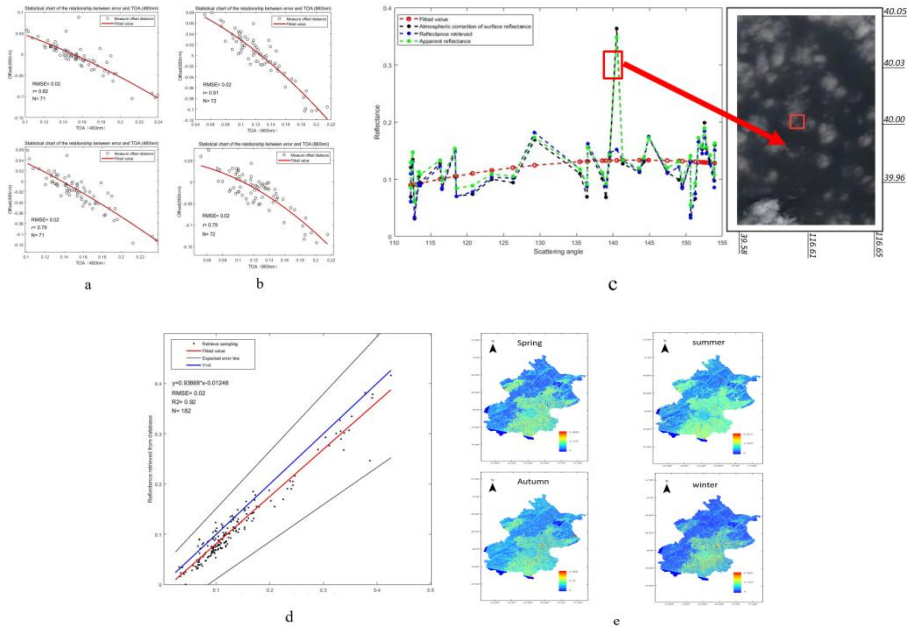


Fig 1 Some results

关键词： AOD；明亮地表；方向反射；散射角。

报告人简介：

刘佳鑫中国矿业大学环境与测绘学院遥感专业的硕士生。他目前的研究重点是基于卫星遥感的气溶胶的定量遥感反演。

固体燃料燃烧源排放的含EC颗粒的化学组成和混合态

孔亚静[1,3]，王启元[1,2,*]，李丽[1,5]，张扬[1]，田杰[1,2]，马楠[4]，周雅清[4]，刘卉昆[1]，刘佳文[1,6]，冉伟康[1,3]，刘佳睿[1,3]，朱崇抒[1,2]，韩永明[1,2]，曹军骥[7]，王启元[1,2,*]

[1]中国科学院地球环境研究所黄土与第四纪地质国家重点实验室，陕西西安，710061

[2]关中平原生态环境变化与综合治理国家观测研究站，陕西西安，710061

[3]中国科学院大学，北京，100049

[4]暨南大学环境与气候研究所，广东广州，511443

[5]西安地球环境创新研究所，陕西西安，710061

[6]西安建筑科技大学环境与市政工程学院，陕西西安，710055

[7]中国科学院大气物理研究所，北京，100029

*Email: wangqy@ieecas.cn

摘要正文：固体燃料燃烧是全球大气元素碳（EC）的主要来源，对环境质量和公众健康具有重大影响。目前含EC颗粒的影响已经引起了社会各界的广泛关注[1-3]，但对燃烧源直接排放的含EC颗粒的化学成分和尺寸分布的研究仍然有限。本研究采用在线单颗粒分析方法，分析了五种常用固体燃料中含EC颗粒的化学组成、粒径分布和混合状态。结果表明，小麦、水稻和玉米的质谱特征具有相似性，质谱特征主要为$^{39}K^+$、碳簇离子（$C_n^{\pm}$）、有机碳（OC）、$^{26}CN^-$、$^{42}CNO^-$、$^{113/115}K_2Cl^+$、$^{46}NO_2^-$、$^{62}NO_3^-$、$^{97}HSO_4^-$和左旋葡聚糖离子（包括$^{45}CHO_2^-$、$^{59}C_2H_3O_2^-$、$^{71}C_3H_3O_2^-$和$^{73}C_3H_5O_2^-$）。对于烟煤和无烟煤，质谱显示出明显的$^{39}K^+$、$^{23}Na^+$、$C_n^{\pm}$、OC、$^{97}HSO_4^-$、$^{46}NO_2^-$和$^{62}NO_3^-$信号。在小麦、玉米和水稻中观察到明显的$^{113/115}K_2Cl^+$信号，而在烟煤和无烟煤中未观察到，这表明$^{113/115}K_2Cl^+$可以作为生物质和煤的质谱区分标志[4]。小麦、玉米和水稻燃烧产生的含EC颗粒的粒径分布集中在0.3 ~ 0.8 μm范围内，峰值出现在0.4 ~ 0.5 μm，这可以归因于该粒径范围内颗粒的通过效率较高[5]。烟煤产生的含EC颗粒主要集中在0 ~ 0.4 μm的小粒径范围内。无烟煤产生的含EC颗粒的粒径集中在0.4 ~ 0.8 μm范围内，在0.5 μm处出现峰值。通过对5种燃料中不同类型含EC颗粒的粒径分布的分析，发现小麦、玉米和水稻中EC-OC和EC-CN颗粒为主要成分，粒径集中在0.4 ~ 0.8 μm范围内，在0.5 μm处达到峰值。烟煤中EC-Na主要集中在0.2 ~ 0.4 μm的小粒径范围内，而无烟煤中的EC-Na颗粒主要分布在0.4 ~ 0.8 μm范围内。此外，EC-NS颗粒在无烟煤中的贡献最为明显，粒径集中在0.4 ~ 0.8 μm范围内。利用自适应共振网络（ART-2a）算法，将含EC颗粒分为7种类型：EC-OC、Pure-EC、EC-NS、EC-CN、EC-Ca、EC-K和EC-Na颗粒。其中，小麦、水稻和玉米燃烧主要由EC-OC和EC-CN颗粒组成，共占总的含EC颗粒的85%。烟煤和无烟煤主要产生EC-Na和EC-NS颗粒，分别占总的含EC颗粒的72.7%和45.4%。不同类型含EC颗粒的混合状态差异很大。$^{97}HSO_4^-$与EC-OC和EC-Na颗粒的混合程度大于其他基团，表明硫酸盐对这些含化学组分种类丰富的颗粒具有明显的亲和力[6, 7]。此外，五种燃料中都明显混合了左旋葡聚糖，这表明仅将左旋葡聚糖信号用作生物质燃烧的标记物并不完全可靠[8, 9]。这些发现增强了对燃烧源颗粒物化学性质的认识，为分析大气颗粒物和研究燃烧源排放特性提供了有价值的参考。

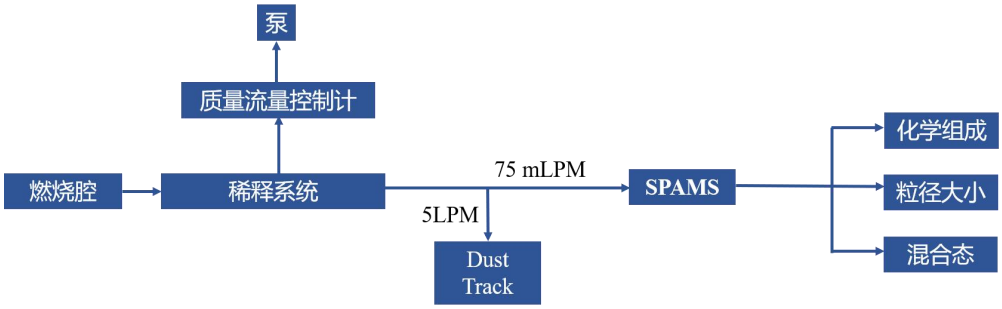


Fig. 1 Flow chart of source emission experiment

关键词： 含EC颗粒；质谱；混合态；源排放；粒径分布

参考文献

[1] SUN J, SUN Y, XIE C, et al. The chemical composition and mixing state of BC-containing particles and the implications on light absorption enhancement [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2022, 22(11): 7619-30.

[2] SPRACKLEN D V, CARSLAW K S, PöSCHL U, et al. Global cloud condensation nuclei influenced by carbonaceous combustion aerosol [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2011, 11(17): 9067-87.

[3] KASPARI S, SKILES S M, DELANEY I, et al. Accelerated glacier melt on Snow Dome, Mount Olympus, Washington, USA, due to deposition of black carbon and mineral dust from wildfire [J]. JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH-ATMOSPHERES, 2015, 120(7): 2793-807.

[4] HUO J, LU X, WANG X, et al. Online single particle analysis of chemical composition and mixing state of crop straw burning particles: from laboratory study to field measurement [J]. Frontiers of Environmental Science & Engineering, 2015, 10(2): 244-52.

[5] XU J, LI M, SHI G, et al. Mass spectra features of biomass burning boiler and coal burning boiler emitted particles by single particle aerosol mass spectrometer [J]. Science of The Total Environment, 2017, 598(341-52.

[6] BI X, ZHANG G, LI L, et al. Mixing state of biomass burning particles by single particle aerosol mass spectrometer in the urban area of PRD, China [J]. Atmospheric Environment, 2011, 45(20): 3447-53.

[7] ZHANG S, WANG Z, ZHANG J, et al. Inhalable cigarette-burning particles: Size-resolved chemical composition and mixing state [J]. Environmental Research, 2021, 202(

[8] SILVA P J, LIU D-Y, NOBLE C A, et al. Size and Chemical Characterization of Individual Particles Resulting from Biomass Burning of Local Southern California Species [J]. Environmental Science & Technology, 1999, 33(18): 3068-76.

[9] SIMONEIT B R T, SCHAUER J J, NOLTE C G, et al. Levoglucosan, a tracer for cellulose in biomass burning and atmospheric particles [J]. Atmospheric Environment, 1999, 33(2): 173-82.

报告人简介：

孔亚静，中国科学院地球环境研究所 2023 级硕士研究生

所属机构：中国科学院地球环境研究所

教育背景：硕士研究生，中国科学院地球环境研究所资源与环境专业，研究方向：源排放黑碳的化学特征。

联系方式：kongyajing@ieecas.cn；

聚合氮化碳限域双金属合金催化剂构筑及光催化 CO_2 甲烷化研究

袁紫瑶[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：二氧化碳排放量增加对地球上的整体气候造成了严重破坏，威胁人类社会的可持续发展。同时，我国经济对能源的依赖程度还很高。亟待利用光催化效应将温室气体二氧化碳还原为有价值的化工原料，将同时解决人类面临的能源短缺问题和 CO_2 大量积聚带来的环境问题。关键在于研发高效、稳定且经济的半导体光催化材料，厘清催化材料上复合迁移转化机制与构效关系。本文以廉价的二维碳为载体，拟从提高 CN 光吸收和光生电荷分离的目的出发，采用水热法的方式引入空位，在缩小带隙和产生活性位点方面具有较高的效率。后续采用煅烧进行双金属合金掺杂，优化电子传递位点的密度和电子结构，作为表面反应的活性位点，提高电荷分离和电荷利用。铂金属的沉积可以在界面上形成肖特基势垒，金属纳米粒子可以成为电子陷阱，促进光生电荷的分离。在空位和双金属引入的双重作用下，PtCo-CN 的催化性能中 CO 的产率 9.20 μ $molg^{-1}h^{-1}$，是 CN 的 7.6 倍。CH_4 的产率为 5.12 μ $molg^{-1}h^{-1}$，是 CN 的 38 倍。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，揭示催化材料反应路径之间的内在关联。本文为高效且选择性的将 CO_2 还原为有价值的化学品提供了有效的调制策略和原位探索电子动力学方法以实现高效光催化二氧化碳还原。

关键词：光催化；CO_2 还原；限域双金属；原位表征；密度泛函理论

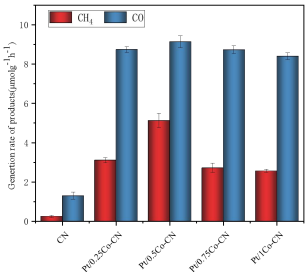


Fig. 1 Photocatalytic CO_2 reduction activities of the samples.

参考文献

[1] Peng, S, Rao, Y., Li, T., Zhang, Y., Cao, J., Lee, S., Huang, Y.. Chinese. Chem. Lett. 2023, DOI：10.1016/j.cclet.2023.109219.

[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] 焦阳, 吉硕, 于欣, 王赫, 党小庆, 张宇飞. 中国环境科学, **2024**, DOI: 10.19674/j.cnki.issn1000-6923.20240221.006.

[4]Peng J ,Zhang Q ,Zhou Y , et al.Cold plasma-activated Cu-Co catalysts with CN vacancies for enhancing CO_2 electroreduction to low-carbon alcohol[J].Journal of Energy Chemistry,2023,85(10):108-115.

[5]Hu S ,Qiao P ,Liu Z , et al.Porous C3N4 nanosheet supported Au single atoms as an efficient catalyst for enhanced photoreduction of CO2 to CO[J].Journal of Catalysis,2024,432115405.

[6]Wu Q ,Jiang H ,Ren H , et al.Surface CN bonds mediate photocatalytic COsub2/sub reduction into efficient CHsub4/sub production in TiOsub2/sub-decorated g-Csub3/subNsub4/sub nanosheets.[J].Journal of colloid and interface science,2024,663825-833.

[7]Q. Wang, T. Hisatomi, Q. Jia, H. Tokudome, M. Zhong, C. Wang, Z. Pan, T. Takata, M. Nakabayashi, N. Shibata, Y. Li, I. Sharp, A. Kudo, T. Yamada, K. Domen,Nat.mater.2016,15,611.

报告人简介：

袁紫瑶，女，2000 年生，2022 年毕业于太原科技大学获学士学位。现就读于西安建筑科技大学环境与市政工程学院环境工程专业，导师张宇飞教授。硕士期间主要研究二氧化碳的光催化转化还原和资源化利用，大气臭氧关键前体物的光热催化控制技术、大气污染物非均相反应机制的量子化学 DFT 模拟等内容，参与了国家自然科学基金面上项目与企业的横向课题。

锆基异相结限域双金属合金催化剂构筑及催化氧化VOCs研究

杨思琪[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：VOCs 是工业生产过程和人类日常生活中的一种空气污染物，具有毒性、致癌性和恶臭，也是通过光化学过程形成二次有机气溶胶（SOA）和臭氧（O_3）的重要前体物之一。针对 VOCs 排放来源复杂、排放形式多样、物质种类繁多的问题，VOCs 终端控制技术应运而生。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的优点，被认为是去除 VOCs 的有效途径之一。本研究定向设计高效高选择性的长效纳米 ZrO_2 异相结限域双金属合金催化材料，结合密度泛函理论（DFT）和先进原位动态表征等手段，解析 ZrO_2 异相结限域双金属合金催化材料的组成、形貌结构以及表界面性质与催化降解典型 VOCs 甲苯性能之间的内在联系，建立 ZrO_2 异相结限域双金属合金催化材料对典型 VOCs 甲苯的热催化反应路径，揭示催化材料的组成-结构-表/界面性质-催化性能之间的构效关系，为环境大气污染控制做贡献。

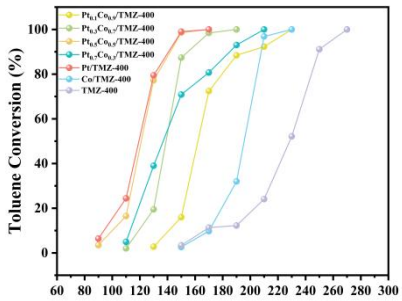


Fig. 1 Catalytic activities

关键词：VOCs；异相结；双金属催化剂；催化氧化

参考文献

[1] 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 O3 elimination. J Ind. Eng. Chem. 2022, 105: 393.S.

[2] Li, X. Yu, X. Dang, X. Men, Y. Zhang, C. Qin, Non-thermal plasma coupled with MOx/ γ -Al_2O_3 (M: Fe, Co, Mn, Ce) for chlorobenzene degradation: Analysis of byproducts and the reaction mechanism. J Environ. Chem. Eng. 2021, 9: 106562.[1]

[3] Wang W , Huang Y , Rao Y ,et al.The role of cationic defects in boosted lattice oxygen activation during toluene total oxidation over nano-structured CoMnOx spinel[J].Environmental Science: Nano, 2023.DOI:10.1039/d2en01066f.

[4] Shao M , Lu S , Liu Y ,et al.Volatile organic compounds measured in summer in Beijing and their role in ground-level ozone formation[J].[2023-11-28].

[5] Yang T , Huo Y , Liu Y ,et al.Efficient formaldehyde oxidation over nickel hydroxide promoted Pt/γ-Al_2O_3 with a low Pt content[J].Applied Catalysis B Environmental, 2017, 200:543-551.DOI:10.1016/j.apcatb.2016.07.041.

[6] Yang Y , Wang G , Zheng P ,et al.Carbon deposits during catalytic combustion of toluene on Pd-Pt-based catalysts[J].Catalysis Science & Technology, 2020, 10.DOI:10.1039/D0CY00101E.

报告人简介：

杨思琪，女，2000 年生，2022 年毕业于西安建筑科技大学获学士学位。现就读于西安建筑科技大学环境与市政工程学院环境工程专业，导师张宇飞教授。硕士期间主要研究锆基异相结限域双金属合金催化剂的构筑以及催化氧化典型 VOCs 甲苯，构筑高效催化氧化甲苯的锆基异相结限域双金属合金催化剂，揭示催化材料的组成-结构-表/界面性质-催化性能之间的构效关系。参与导师国家自然科学基金面上项目和青年项目。

纳米异质/异相结限域单/双金属光热催化臭氧关键前体物

燕维文[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：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。

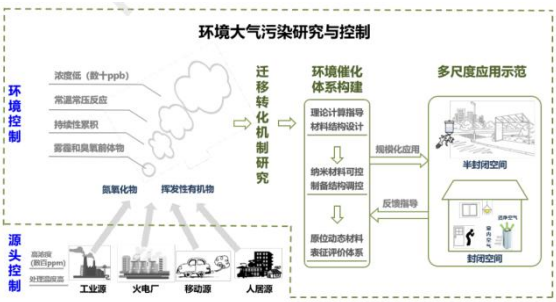


Fig. 1 Nanocatalytic strategies in the field of environmental air pollution research and control

关键词：臭氧关键前体物；纳米光热催化；密度泛函理论；限域单/双金属；原位表征

参考文献

[1] S. Peng, Y. Rao, T. Li, Y. Zhang, J. Cao, S. Lee, Y. Huang, Regulating the electronic structure of Ir single atoms by ZrO_2 nanoparticles for enhanced catalytic oxidation of formaldehyde at room temperature. Chinese. Chem. Lett. 2024, **35(7)**: 109219.

[2] J. Wang, D. Wang, Z. Song, N. Jiang, S. Li, Y. Zhang, B. Huang, H. Zhou, Z. Cui, L. Wang, Efficient solar energy conversion via bionic sunlight-driven ion transport boosted by synergistic photo-electric/thermal effects. Energy Environ. Sci. 2023, **16**: 3146.

[3] S. Peng, R. Li, Y. Huang, Y. Zhang, J. Cao, S. Lee, Interfacial dependent reactive oxygen species generation over Pt-ZrO_2 nanoparticles for catalytic oxidation of formaldehyde at room temperature. Appl. Surf. Sci. 2022, **600**: 154056.

[4] 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.

[5] S. Li, X. Yu, X. Dang, X. Men, Y. Zhang, C. Qin, Non-thermal plasma coupled with MO_x/γ-Al_2O_3 (M: Fe, Co, Mn, Ce) for chlorobenzene degradation: Analysis of byproducts and the reaction mechanism. J Environ. Chem. Eng. 2021, **9**: 106562.

[6] 焦阳, 吉硕, 于欣, 王赫, 党小庆, 张宇飞, 低温等离子体灭活细菌气溶胶的效能及机制[J]. 中国环境科学, 2024, **44(7)**: 3615.

[7] Y. Zhang, Y. Huang, S. Lee, J. Cao, The mechanism of room temperature catalytic C–H dissociation and oxygenation of formaldehyde over nano-zirconia phase-junction. Chem. Eng. J. 2020, **380**: 122498.

[8] Y. Rao, Y. Zhang, F. Han, H. Gu, Y. Huan, R. Li, F. Qi, J. Ma, Heterogeneous activation of peroxymonosulfate by $LaFeO_3$ for diclofenac degradation: DFT-assisted mechanistic study and degradation pathways. Chem. Eng. J. 2018, **352**: 601.

报告人简介：燕维文，西安建筑科技大学环境与市政工程学院

环境科学与工程专业，博士研究生（在读），yanww888@163.com。

气溶胶液滴声凝并的直接模拟蒙特卡洛方法

苏俊旭[1]，凡凤仙[1,2,*]，赵豪[1]，苏明旭[1,2]

[1]上海理工大学能源与动力工程学院，上海，200093；

[2] 上海市动力工程多相流动与传热重点实验室，上海，200093.

*Email: fanfengxian@usst.edu.cn

摘要正文：通过声波促进云滴与雾滴发生碰撞进而凝并长大为粒径更大的颗粒，在人工降雨和人工消雾中具有应用潜力，已成为云雾物理、多相流体力学等领域关注的问题。构建二元气溶胶液滴声凝并数学模型，充分考虑声凝并过程中液滴的受力与运动，液滴间碰撞的同向相互作用、重力沉降作用、声尾流效应、互辐射效应及布朗扩散作用机制，以及气溶胶液滴凝并、反弹、拉伸分离和反溅分离等碰撞后果。在直接模拟蒙特卡洛（DSMC）方法的框架下，提出通过调整取样液滴的权重、速度、体积以体现液滴碰撞后果，而保持取样液滴数目不变的计算方法。通过将数值模拟结果与实验结果进行对比，验证模型和算法的可靠性。在此基础上，探究了气溶胶液滴声凝并动力学行为，考察了液滴凝并效果受声压级、声场频率、停留时间的影响规律。研究结果对于理解液滴气溶胶声凝并动力学过程和规律具有重要价值，并可为声凝并在人工降雨和人工消雾中的应用提供科学依据和方法指导。

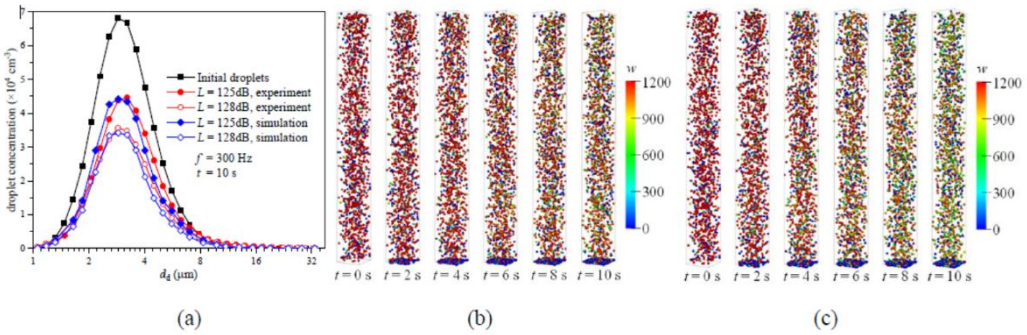


Fig. 1 Model validation and numerical prediction. (a) Comparison of simulation results with experimental data from Ref. [1]; (b)Snapshots of acoustic agglomeration at 125 dB; (c) Snapshots of acoustic agglomeration at 128 dB.

关键词：气溶胶液滴；声凝并；直接模拟蒙特卡洛（DSMC）方法；数值模拟

参考文献

[1] M. Zhang, F.Y. He, C. Li, J.W. Li, Z. Zeng, K.X. Yu, P. Yuan. Experimental study on coalescence of fog droplets in cloud chamberunder low-frequency sound waves. J. Phys. D: Appl. Phys. 2021, 54: 395301.

[2] H. Zhao, F. Fan, J. Su, X. Hu, M. Su. An improved DSMC method for acoustic agglomeration of solid particles assisted by spraydroplets. Int. J. Multiphase Flow, 2024, 176: 104829.

[3] Z. H. Wu, F. X. Fan, J. P. Yan, H. T. Chen, X. H. Hu, M. X. Su. An adaptable direct simulation Monte Carlo method for simulatingacoustic agglomeration of solid particles. Chem. Eng. Sci. 2022, 249: 117298.

[4] K.H. Al-Dirawi, K.H.A. Al-Ghaithi, T.C. Sykes, J.R. Castrejón-Pita, A.E. Bayly. Inertial stretching separation in binary dropletcollisions. J. Fluid Mech. 2021, 927: A9.

报告人简介：

苏俊旭（2000-），男，博士研究生，Email: 3104015453@qq.com

不同形态黑碳气溶胶的来源解析

杨笑影[1]，曹芳[1]，林煜棋[1]，范美益[1]，吴长流[1]，于鸣媛[1]，宋文怀[1]，章炎麟[1,*]

[1]大气环境中心，教育部气候与环境变化国际合作联合实验室，生态与应用气象学院，南京信息工程大学，南京市浦口区宁六路219号，210044

*Email: dryanlinzhang@outlook.com

摘要正文：黑碳（BC）气溶胶对气候、环境和人体健康均有不利影响，其不同形态的亚类焦炭（char）和烟炱（soot）在物理结构、光学性质和潜在生物毒性等方面存在差异。对BC气溶胶的准确来源解析，尤其是区分char和soot的研究有限。为深入解析BC气溶胶的来源，以更好地控制BC排放，并减少北京及周边地区重污染事件的发生，基于2018年冬季重污染过程中北京及周边农村（固城）站点同步采集的细颗粒物（$PM_{2.5}$）中BC的双碳同位素（f_{nf}和$\delta^{13}C$）特征，使用马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）-贝叶斯混合模型确定生物质燃烧（BB）、燃煤（CC）和液体化石燃料燃烧（LF）对BC的贡献，并在双碳同位素分析结果的约束下使用PMF模型进一步定量char和soot的来源。固城的BC浓度（13.1 ± 5.6，char：11.9 ± 5.5，soot：1.2 ± 0.5 μg m^{-3}）显著高于北京（6.6 ± 3.2，char：5.9 ± 3.1，soot：0.6 ± 0.3 μg m^{-3}），两地BC均以char为主导，而固城的char/soot值（11.2 ± 6.8）仅略高于北京（10.3 ± 6.1）。两地的BC浓度及char/soot值均在夜间高于白天，并随$PM_{2.5}$污染程度的增加而升高，BC与CO的强相关性也证明两地BC具有明显的本地排放特征，BC，尤其是char是$PM_{2.5}$污染的驱动因素。液体化石燃料燃烧（或交通排放）是北京BC的主要来源（60.4%）和造成重污染（62.9%）的原因之一。相比于北京，固城BC受到更多生物质燃烧（25.6%）和燃煤（36.7%）的贡献。化石燃料燃烧贡献了两地一半以上的char和大部分soot。提高民用燃煤质量和炉具质量，控制重型柴油的排放有助于缓解北京及周边地区冬季重污染，进而利于人体健康和气候。

关键词：黑碳；焦炭（char）；烟炱（soot）；碳同位素

报告人简介：

杨笑影（1995~），女，江苏省南京市人；在读博士研究生，就读于南京信息工程大学，生态与应用气象学院，大气环境中心，教育部气候与环境变化国际合作联合实验室；主要研究方向为大气环境和大气气溶胶化学。

人为污染对秦岭地区大气有机气溶胶化学物种组成的影响

张新[1,2], 李丽娟[2], 李建军[2], 蔺悦[2], 王瑞[2], 曹军骥[2,3], 韩月梅[2,*]

[1] 西安交通大学人居环境与建筑工程学院，西安，710049

[2] 中国科学院地球环境研究所 黄土与第四纪地质国家重点实验室，中国科学院气溶胶化学与物理重点实验室，西安，710061

[3] 中国科学院大气物理研究所，北京，100029

*Email: yuemei.han@ieecas.cn

摘要正文：生物源有机气溶胶（BOA）是大气气溶胶的重要组成部分，对区域和全球气候变化、环境空气质量和人类健康具有重要影响。BOA与人为污染物的相互作用随着空间、时间和环境条件的变化存在很大差异，是造成气溶胶产量和气候环境效应不确定性的一个重要因素。迄今为止在我国植被覆盖广阔的秦岭地区关于BOA的研究相对较少，对BOA与人为污染物的作用机制缺乏足够的认识，亟需开展深入系统的研究。本研究旨在对秦岭地区不同季节大气中有机气溶胶的分子组成特性及其变化规律进行探究，揭示有机气溶胶的物种分子组成和结构特征，阐明该地区人为污染物对生物源有机气溶胶形成的影响和作用机制。

本研究采集了秦岭地区2021/2022年夏季和冬季的大气细颗粒物$PM_{2.5}$样品，使用乙腈和水的混合液作为溶剂，萃取了样品中的有机组分。运用超高效液相色谱−静电场轨道阱超高分辨率质谱技术，对有机物的化学组成进行了分子层面的表征。研究结果显示，在正、负离子模式下分别检测出1684−3648和879−2873种有机化合物，冬季鉴别出的物种数量是夏季的1.3−1.4倍，主要以CHONS和CHON等含氮化合物为主，可能与冬季较高浓度的NO_2有关。冬、夏两季样品在正、负离子模式下分别检测出277和286种共同的有机物种，仅占总物种数量的8−16%和10−33%，表明有机气溶胶的化学分子组成在两个季节中存在很大差异。有机物种的H/C和O/C比值在夏季较高，表明其经历了更多的氧化或老化过程，从而导致了更高的分子饱和度和氧化水平。有机硫酸盐（包括硝基有机硫酸盐）的数量在夏季占有机硫物种（即CHOS和CHONS）总和的67−78%，在冬季占68−84%，并且主要以脂肪族化合物为主。冬季人为有机示踪物的峰面积信号强度较高，表明受人为源影响（如燃煤和生物质燃烧）较大，而夏季生物源影响（如异戊二烯和单萜烯前体物）显著增加导致生物源有机示踪物信号较高。冬季芳香族化合物的信号强度和数量均显著高于夏季，而脂肪族化合物（主要来源于长链烷烃或生物源前体物）在夏季较多。因此，尽管该地区有机气溶胶在两个季节均受到人为源和生物源的影响，但生物源和人为源分别在夏季和冬季占主导作用。此外，不同气象条件及人为污染物之间的协同作用，造成夏季和冬季有机物种的形成途径存在较大的差异。

关键词：化学分子组成；生物源有机气溶胶；人为污染物；有机硫和有机氮物种；秦岭地区

A positive response to the shipping emission control policy in the busiest Shanghai port in China

Meng Wang[1], Qingyan Fu[2,3,*], Shun-cheng Lee[4,*]

[1]Department of Civil and Environmental Engineering, The Hong Kong Polytechnic University, Hung Hom, Hong Kong SAR, China

[2]Shanghai Environmental Monitoring Center, Shanghai, 200235, China

[3]Shanghai Academy of Environmental Sciences, Shanghai, 200233, China

[4]Thrust of Earth, Ocean and Atmospheric Sciences, and Thrust of Sustainable Energy and Environment, The Hong Kong University of Science and Technology (Guangzhou), 511400 Guangzhou, China

*Corresponding email: Shun-cheng Lee (shunchenglee@hkust-gz.edu.cn) and Qingyan Fu (qingyanf@139.com).

Shanghai is home to 25 million people and is China's major shipping traffic hub with the world's largest container port (Yu et al., 2021; Zou et al., 2020). Shipping emission is a major source of air pollution in coastal cities (Mueller et al., 2023; Duan et al., 2023). It has been suggested to be responsible for some of the negative health effects and premature deaths due to exposure to particulate pollution (Duan et al., 2023; Lin et al., 2018). Globally, ~265,000 premature deaths (~0.5% of global mortality) in a year were due to exposure to shipping emissions (Sofiev et al., 2018). Using Vanadium (V) and Nickel (Ni) as a tracer of ship emissions, an increased risk of cardiovascular mortality was associated with shipping emissions in Guangzhou (Lin et al., 2018). Certain chemical component in $PM_{2.5}$ (e.g., Ni) from shipping emissions has been reported to be particularly harmful to the cardiovascular system in New York (Lippmann et al., 2006). In Hong Kong, a significant reduction in mortality was associated with the reduction in ambient sulfur dioxide (SO2), V, and Ni (Lippmann et al., 2006). To reduce shipping emissions, several regulatory initiatives were implemented in China e.g., China I/II standards (Liu et al., 2023). To evaluate the effectiveness of these regulatory measures in reducing shipping emissions, long-term measurements of shipping emission tracers (i.e., vanadium) that cover before and after the implementation are necessary. However, such a long-term dataset is rare (Aksoyoglu et al., 2016). Without dedicated long-term measurement, an accurate evaluation of the effectiveness is not possible and our ability to predict future air quality improvement upon the implementation of future air quality policies will be limited (Zhao et al., 2020).

Shipping emission is a major source of air pollution in coastal cities and has been suggested to be responsible for an increased risk of cardiovascular mortality. Shanghai port is the world's busiest port, handing over 40 million TEU every year. To reduce shipping emissions, China has implemented the domestic emission control area (DECA) policy in different phases (i.e., DE-CA 1.0 in 2016 and DECA 2.0 in 2019). We presented a 4-year (2016-2019) measurement of heavy metals in PM2.5 at an inland sampling which is approximately 50 km from the Shanghai waters. We focused on the analysis of the trend in long-term Vanadium measurement and evaluated the changes in the emission patterns upon air quality policy implementation. We evaluated the effectiveness of the DCEA measures using a machine learning model (i.e., random forest (RF)) (Grange et al., 2018; Grange et al., 2021) and the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) (Appel et al., 2021).

In this study, a long-term online field measurement (from 2016 to 2019) of shipping emission tracers, i.e., vanadium (V) and nickel (Ni), was car-ried out at a downwind sampling site (i.e., the Dian Shan Lake (DSL) supersite) which is ap-proximately 50 km from the Shanghai waters. Despite the long distance, the decreasing trend in V concentrations from the phase of DECA 1.0 (5.1 ng m-3) to DECA 2.0 (2.4 ng m-3) re-flected a positive response due to the strengthened emission control.

Keywords: Ship emissions; $PM_{2.5}$; Random Forest; Air pollution

References

Aksoyoglu, S., Baltensperger, U., and Prévôt, A. S. H.: Contribution of ship emissions to the concentration and deposition of air pollutants in Europe, Atmos. Chem. Phys., 16, 1895-1906, 10.5194/acp-16-1895-2016, 2016.

Appel, K. W., Bash, J. O., Fahey, K. M., Foley, K. M., Gilliam, R. C., Hogrefe, C., Hutzell, W. T., Kang, D., Mathur, R., Murphy, B. N., Napelenok, S. L., Nolte, C. G., Pleim, J. E., Pouliot, G. A., Pye, H. O. T., Ran, L., Roselle, S. J., Sarwar, G., Schwede, D. B., Sidi, F. I., Spero, T. L., and Wong, D. C.: The Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model versions 5.3 and 5.3.1: system updates and evaluation, Geosci. Model Dev., 14, 2867-2897, 2021.

Duan, Y., Wang, M., Shen, Y., Yi, M., Fu, Q., Chen, J., and Xiu, G.: Influence of ship emissions on PM2.5 in Shanghai: From COVID19 to OMICRON22 lockdown episodes, Atmos. Environ., 315, 120112, 2023.

Grange, S. K., Carslaw, D. C., Lewis, A. C., Boleti, E., and Hueglin, C.: Random Forest meteorological normalisation models for Swiss PM10 trend analysis, Atmos. Chem. Phys., 18, 6223-6239, 2018.

Grange, S. K., Lee, J. D., Drysdale, W. S., Lewis, A. C., Hueglin, C., Emmenegger, L., and Carslaw, D. C.: COVID-19 lockdowns highlight a risk of increasing ozone pollution in European urban areas, Atmos. Chem. Phys., 21, 4169-4185, 2021.

Lin, H., Tao, J., Qian, Z., Ruan, Z., Xu, Y., Hang, J., Xu, X., Liu, T., Guo, Y., Zeng, W., Xiao, J., Guo, L., Li, X., and Ma, W.: Shipping pollution emission associated with increased cardiovascular mortality: A time series study in Guangzhou, China, Environ. Pollut., 241, 862-868, 2018.

Lippmann, M., Ito, K., Hwang, J.-S., Maciejczyk, P., and Chen, L.-C.: Cardiovascular Effects of Nickel in Ambient Air, Environ. Health Perspect., 114, 1662-1669, 2006.

Liu, H., Mao, Z., and Li, X.: Analysis of international shipping emissions reduction policy and China's participation, Frontiers in Marine Science, 10, 1093533, 2023.

Mueller, N., Westerby, M., and Nieuwenhuijsen, M.: Health impact assessments of shipping and port-sourced air pollution on a global scale: A scoping literature review, Environ. Res., 216, 114460, 2023.

Sofiev, M., Winebrake, J. J., Johansson, L., Carr, E. W., Prank, M., Soares, J., Vira, J., Kouznetsov, R., Jalkanen, J.-P., and Corbett, J. J.: Cleaner fuels for ships provide public health benefits with climate tradeoffs, Nature Communications, 9, 406, 2018.

Yu, G., Zhang, Y., Yang, F., He, B., Zhang, C., Zou, Z., Yang, X., Li, N., and Chen, J.: Dynamic Ni/V Ratio in the Ship-Emitted Particles Driven by Multiphase Fuel Oil Regulations in Coastal China, Environ. Sci. Technol., 55, 15031-15039, 2021.

Zhao, J., Zhang, Y., Patton, A. P., Ma, W., Kan, H., Wu, L., Fung, F., Wang, S., Ding, D., and Walker, K.: Projection of ship emissions and their impact on air quality in 2030 in Yangtze River delta, China, Environ. Pollut., 263, 114643, 2020.

Zou, Z., Zhao, J., Zhang, C., Zhang, Y., Yang, X., Chen, J., Xu, J., Xue, R., and Zhou, B.: Effects of cleaner ship fuels on air quality and implications for future policy: A case study of Chongming Ecological Island in China, Journal of Cleaner Production, 267, 122088, 2020.

墙报展示人简介：

香港理工大学土木与环境工程学系研究助理教授。博士毕业于中国科学院地球环境研究所，曾于 2016 至 2018 年获得国家公派资格前往瑞士保罗谢勒研究所进行博士联合培养。重点研究有机气溶胶的理化性质表征和来源解析，近年来利用机器学习大数据分析手段，在城市气溶胶交通源排放控制方面取得了重要成果。已在大气相关研究领域发表 SCI 论文 30 余篇，其中在 Environmental Science & Technology, Atmospheric Chemistry and Physics Atmospheric Measurement Techniques， Science of Total Environment，Environmental Pollution 等国际知名期刊上发表第一及通讯作者 SCI 论文 7 篇，累计总引用 700 余次，H-index 16。主持和参与了包括国家自然科学基金，科技部重点专项，香港研究资助局研究专项，香港环境保护署环保专项等多项国家级科研项目。曾获第九届中国颗粒学会气溶胶青年科学家奖，任第四届中国颗粒学会青年理事。

西安市沙尘天气过程颗粒物粒径谱与荷电分布演化规律

钟佳浩[1]，王妍[1]，顾兆林[2]，张力元[1,*]

[1]长安大学水利与环境学院，陕西省西安市雁塔区雁塔北路南段126号，710000

[2]西安交通大学人居环境与建筑工程学院，陕西省咸阳市秦都区西咸新区沣西新城沣西大道2399号中国西部科技创新港，710000

*Email: zly2017@chd.edu.cn

摘要正文：

大气颗粒物是全球气候变化、城市空气质量和公众健康的重要影响因素。近年来，随着快速的经济增长和工业化、城市化进程，细颗粒物污染已成为我国大中型城市普遍面临的大气环境问题。颗粒表面荷电直接影响大气颗粒物间的物理作用和颗粒表面的二次非均相化学反应，是大气颗粒物污染发展过程的重要影响因素[1]。目前，大气环境颗粒自然荷电特性的研究尚不充分，真实大气颗粒荷电量及分布的实时监测方法已成为深入研究颗粒荷电性质与物理-化学作用的关键瓶颈。本论文基于团队开发的多粒径通道的大气颗粒荷电量分布在线监测方法[2]，获得西安市春季沙尘期间大气颗粒多粒径段荷电分布观测数据，解析不同污染状态下颗粒物的荷电规律，为颗粒间物理作用机制、沙尘传输与及沉降过程的研究提供新的理论认识和数据基础。

本文以西安市为研究区域，监测2024年春季沙尘天气过程中气态污染物浓度、颗粒物污染物浓度与粒径分布、颗粒荷电分布和多种气象因子，获得沙尘过程污染演化高分辨时间序列，解析轻、中、严重污染状态下的多粒径段颗粒粒径谱与荷电分布规律，得出主要结论有：1）西安市沙尘过境可分为4个阶段，分别为过境前期、首次过境、二次过境、沙尘消退，不同阶段颗粒物质量浓度、粒径分布与荷电状态均呈不同特征；2）沙尘首次过境，小粒径颗粒（0.30~0.679μm）率先抵达西安，引起轻度污染（PM_{10}峰值为90.6μg·m^{-3}）；约8小时后，沙尘二次过境，大粒径颗粒（0.679~9.430μm）抵达，引起质量浓度快速上升，形成严重空气污染（PM_{10}峰值为1417.6μg·m^{-3}）；3）沙尘天颗粒物荷电量显著高于洁净天（空气质量优良），沙尘天颗粒总荷电量与平均荷电量分别高于洁净天40%和138%；4）沙尘天气过程中，颗粒总荷电量增长主要来自首次过境的小粒径颗粒数浓度快速增长阶段，颗粒平均荷电量增长则与二次过境的大粒径颗粒数浓度同步增长。

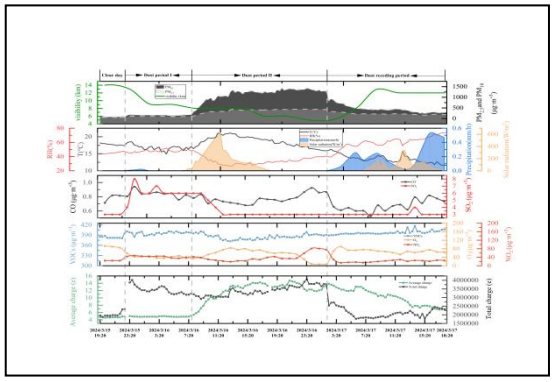


Fig. 1 Time series of observed concentrations of PM_{10}, $PM_{2.5}$, gaseous pollutants (i.e., VOCs, SO_2, NO_2, CO, and O_3), meteorological parameters (i.e., T, RH, precipitation, solar radiation and visibility) , the average charge and total charge of particles from March 15 to March 17, 2024.

关键词：沙尘；大气颗粒物；粒径分布；荷电分布

参考文献

[1] Zhang L, Gu Z, Yu C, et al. Surface charges on aerosol particles–accelerating particle growth rate and atmospheric pollution[J]. Indoor and Built Environment, 2016, 25(3): 437-440.

[2] He Y, Gu Z, Lu W, et al. Atmospheric humidity and particle charging state on agglomeration of aerosol particles[J]. Atmospheric

Environment, 2019, 197: 141-149.

墙报展示人简介：

钟佳浩，男，汉族，出生于 2000 年 3 月 10 日
长安大学/水利与环境学院，环境科学与工程专业在读研究生
研究方向：大气颗粒物的起电、荷电演变规律
联系电话：15529223637
邮箱：806103213@qq.com

可控双极性电喷雾凝结合成超细颗粒技术及应用

余同柱[1,2*]，薛海昂[1]，桂华侨[1,2]，杨义新[1,2]，刘建国[1]，刘文清[1,2]

[1]中国科学院合肥物质科学研究院，安徽省合肥市蜀山湖路350号，230031

[2]合肥综合性科学中心环境研究院，安徽省合肥市蜀山经济技术开发区电商园四期E栋，230071

*Email: tzyu@aiofm.ac.cn

摘要正文：电喷雾在锥形射流模式下能够产生直径从纳米到微米级未团聚的单分散颗粒而受到广泛关注，电喷雾技术已经被用于颗粒/薄膜涂层、材料合成、药物制造等多个工业领域。研究表明带正电荷和负电荷的前体液滴的凝结在微观尺度上产生了良好的化学化合物混合，双极凝结形成的液滴可以作为微反应器，形成具有所需成分的粉末。目前国内外先进研究使用双极性电喷雾技术将布地奈德和表没食子儿茶素没食子酸酯（EGCG）凝结合成固定粒径颗粒用于在癌症治疗中抑制免疫反应和抗体合成;使用双针电喷雾法制备具有双室结构和类红细胞形态的多功能JMPs（Fe3O4和PLGA）等。针对特殊Janus材料及药物的无副产物合成需求，自主研制搭建双极性电喷雾凝结合成超细颗粒平台，可生成粒径范围10-200 nm、数浓度范围≥10^6 #/cm^3的聚合物颗粒，合成过程利用带相反电荷颗粒物在库仑力的作用下相互吸引凝结原理，过程不产生其它副产物，其粒径谱主要能够显示出初始粒径和合成产物粒径，并无需任何中和源装置。自主研制平台颗粒发生稳定性优于5%，能够满足不同材料的凝结合成，实现合成粒径可控。

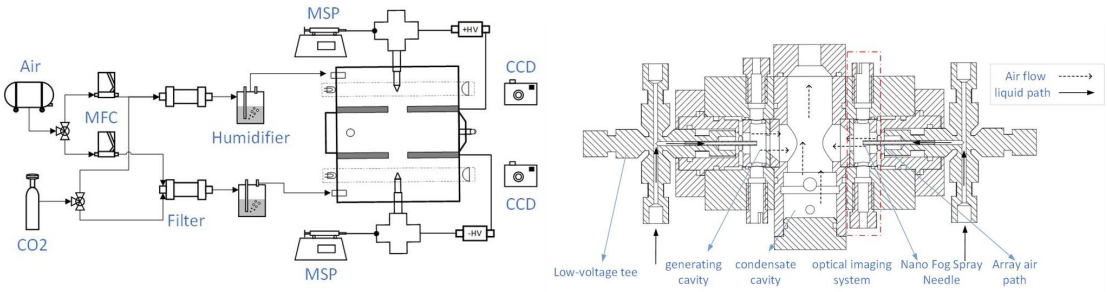


Fig. 1 Controlled Bipolar Electrospray Experimental Platform and Core Structure

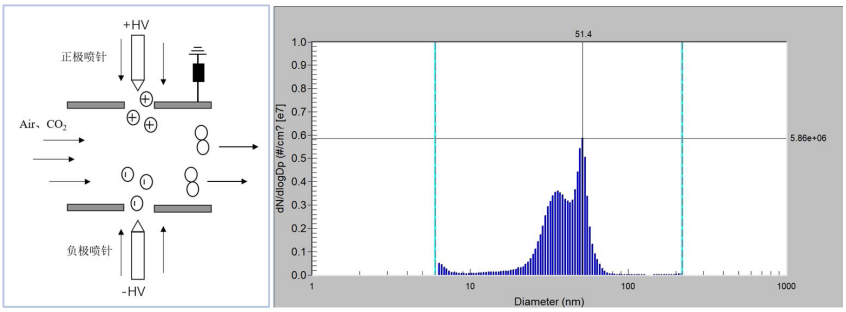


Fig. 2 Ultrafine particle coagulation synthesis principle and sucrose results demonstration

关键词：双极性；电喷雾；聚合物；超细颗粒物

参考文献

[1] Fu, H., Q. Liu and D. Chen, Performance study of a twin-head electrospray system. Journal of Aerosol Science, 2012. 52: p. 33-44.

[2] Mou, F., et al., Oppositely charged twin-head electrospray: a general strategy for building Janus particles with controlled structures. Nanoscale, 2013. 5(5): p. 2055.

[3] Tang, J., et al., High Performance Metal Oxide–Graphene Hybrid Nanomaterials Synthesized via Opposite-Polarity Electrosprays. Advanced Materials, 2016. 28(46): p. 10298-10303.

[4] Xu, J., et al., Fabrication of Red Blood Cell-Mimicking Janus Microparticles with Enhanced Upconversion Luminescence and Drug Delivery Performance Using Double-Needle Electrospray. ACS Applied Polymer Materials, 2023. 5(8): p. 5906-5916.

墙报展示人简介：

余同柱，博士，副研究员，2018 年博士毕业于中国科学技术大学，主要从事大气及移动源排放超细颗粒监测技术研究，目前主持项目 10 余项（国家自然青年基金 1 项、国家重点研发计划子课题等），发表学术论文 10 篇（第一/通讯作者），申请发明专利 15 项（授权 6 项，PCT 专利 1 项），研发的机动车排放超细颗粒物数浓度(PN)监测仪应用于天津、唐山柴油车改造项目评估，并针对不同的应用需求，开发了不同类型的系列化机动车排放超细颗粒物数浓度监测仪产品，实现小批量应用。

A Novel Apportionment Method Utilizing Particle Mass Size Distribution across Multiple Particle Size Ranges

Author (Peizhi Wang)[1], Second Author (Qingsong Wang) [1], Corresponding Author (Hui Chen)[1,2*]

[1] Department of Environmental Science and Engineering, Shanghai University, No. 99 Shangda Road, Baoshan District, 200444

[2] State Environmental Protection Key Laboratory of Formation and Prevention of Urban Air Pollution Complex, Shanghai Academy of Environmental Sciences, No. 508, Qinzhou Road, Xuhui District ,200233

* huichen@shu.edu.cn

Many cities in China are facing the dual challenge of $PM_{2.5}$ and PM_{10} pollution. There is an urgent need to develop a cost-effective method that can apportion both with high-time resolution. A novel and practical apportionment method is presented in this study. It combines the measurement of particle mass size distribution (PMSD) by an optical particle counter (OPC) and the algorithm of normalized non-negative matrix factorization (N-NMF). Applied in the city center of Baoding, Hebei, this method separates four distinct pollution factors. Their sizes (ordered from the smallest to largest) range 0.16–0.6 μm, 0.16–1.0 μm, 0.5–17.0 μm, 2.0–20.0 μm, respectively. They correspondingly contribute to $PM_{2.5}$ (PM_{10}) with portions of 26% (17%), 37% (26%), 33% (41%) and 4% (16%) on average. The smaller three factors are identified as combustion, secondary and industrial aerosols, because of their high correlation with carbonaceous aerosols, nitrate aerosols and trace elements of Fe/Mn/Ca in $PM_{2.5}$, respectively. The largest-sized factor is linked to dust aerosols. The primary origin regions, oxidation degrees, and formation mechanisms of each source are further discussed. This provides a scientific basis for the comprehensive management of $PM_{2.5}$ and PM_{10} pollution.

Keywords: particulate matter; source apportionment; particle mass size distribution; optical particle counter; non-negative matrix factorization

墙报展示人简介：

姓名：王培知

学校：上海大学

学院：环境与化学工程学院

专业：环境工程专业

年级：大三

研究方向：颗粒物源解析、大气化学

研究成果：本科期间分别以第一作者、共同一作、第三作者身份撰写大气颗粒物相关 SCI 论文，授权一项实用新型专利“一种大气监测样本收集装置”。

1980-2020年青藏高原黑碳增长引起的辐射和水文效应

张梅心[1]，朱崇抒[2]，李国辉[2]、汤韬[1]，吴成来[1]，曹军骥[1,*]

[1] 中国科学院大气物理研究所，北京市朝阳区北辰西路 81 号，100029

[2] 中国科学院地球环境研究所，西安市雁塔区雁翔路 97 号，710061

*Email: jjcao@mail.iap.ac.cn

摘要正文：青藏高原平均海拔在4千米以上，被称为“世界屋脊”。青藏高原上的冰川是东亚、南亚和东南亚的储水塔，冰川积雪融水通过发源于青藏高原的主要河流为数十亿人提供了淡水资源[1]。自1980年以来，由于工业化和城市化进程加快，南亚和东亚两大污染源的黑碳排放显著增长，多重研究都表明传输到高原地区的黑碳浓度也呈现增加趋势[2-4]。尽管2015年之后污染控制措施有所改善，黑碳排放记录有所减少，但当黑碳气溶胶沉积在冰雪表面，可强烈吸收太阳辐射，加速冰雪融化，这不仅改变了局部地区的水文循环，还可能影响整个亚洲的气候格局[5-6]。以往研究工作多着眼于高原局地以及黑碳的存在和沉积对短波辐射、雪水当量等要素的影响，对于80年代至今青藏高原整体的黑碳增长带来的长期效应的研究较为缺乏。因此，我们采用CESM地球系统模型设计并执行了两组对照实验：一组为基准控制实验，输入实际黑碳排放量；另一组将人为源及生物质燃烧源产生的黑碳排放量固定在1980年水平。通过对比两组实验数据，本研究揭示了青藏高原大气和积雪中黑碳气溶胶增量对辐射和积雪融化的影响，并对其进行了定量评估。模拟研究表明，在过去40年中由于黑碳气溶胶的变化，积雪表面反照率改变导致地表平均温度上升了约0.14℃；同时，黑碳在积雪中的辐射强迫增强了0.2-0.5W/m²，总变化率约13.51%，导致年均融雪量增加5.15mm，该结果为理解该区域及全球气候变化的驱动因素提供了科学依据，并为制定有效的气候适应策略提供了重要参考。

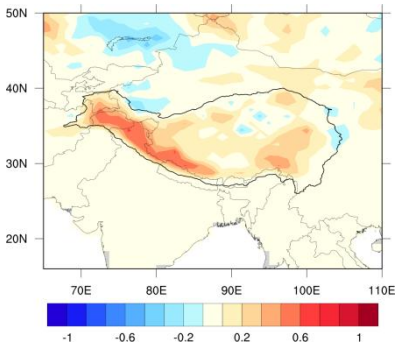


Fig.1 Distribution of annual mean surface forcing induced by BC in snow from 1980 to 2020 (Unit: W/m^2).

关键词：青藏高原；黑碳；辐射；水文效应；CESM

参考文献

[1] Lutz A F, Immerzeel W W, Shrestha A B, et al. Consistent increase in High Asia's runoff due to increasing glacier melt and precipitation[J]. Nature Climate Change, 2014, 4(7): 587-592.

[2] Kang S, Zhang Y, Qian Y, et al. A review of black carbon in snow and ice and its impact on the cryosphere[J]. Earth-science reviews, 2020, 210.

[3] Han H, Wu Y, Liu J, et al. Impacts of atmospheric transport and biomass burning on the interannual variation in black carbon aerosols over the Tibetan Plateau[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2020, 20(21): 13591–13610.

[4] Liu K, Wang C, Hou S, et al. A high-resolution refractory black carbon (rBC) record since 1932 deduced from the Chongce ice core, Tibetan plateau[J]. Atmospheric Environment, 2023, 294.

[5] Qian Y, Flanner M G, Leung L R, et al. Sensitivity studies on the impacts of Tibetan Plateau snowpack pollution on the Asian hydrological cycle and monsoon climate[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2011, 11(5): 1929-1948.

[6] Skiles S M K, Flanner M, Cook J M, et al. Radiative forcing by light-absorbing particles in snow[J]. Nature Climate Change, 2018,

8(11): 964-971.

墙报展示人简介：

张梅心，中国科学院大气物理研究所在读博士研究生。
研究方向为气溶胶的气候效应、气溶胶污染传输等。

基于 POSP 载荷的气溶胶光学厚度产品综合验证及分析

冀哲[a,b]，史正[a]，李正强[a,b*]，伽丽丽[a]，马龑[a]

[a]中国科学院空天信息创新研究院国家环境保护卫星遥感重点实验室和遥感科学国家重点实验室，北京 100101
[b]中国科学院大学，北京 100049
* lizq@radi.ac.cn

摘要正文：大气颗粒物作为空气污染的主要原因，对气候环境和人类健康产生直接影响其不仅造成空气质量的下降，更威胁到人类的健康。气溶胶卫星遥感反演是定量监测大气状态的重要手段，具备成本低、周期短、空间覆盖范围大等优点。近年来，国产卫星载荷发展迅速，已对不同场景下的大气气溶胶监测提供保障，其中高精度偏振扫描仪（Particulate Observing Scanning Polarimeter，POSP）作为新一代国产光学传感器，可以实现紫外到短波红外偏振和强度的可靠观测，具备气溶胶多参数高精度反演的潜力。为了对基于 POSP 载荷的高精度气溶胶光学厚度反演算法进行快速、准确的评价，本研究结合经时空匹配得到的气溶胶地基观测网络（AERONET）实测数据，系统验证了 2022-2023 年的气溶胶光学厚度（Aerosol Optical Depth，AOD）产品在全球范围内的反演精度，明确了该算法全球范围应用的可靠性，并分析了 AOD 产品精度与不同地表类型下的相关性。结果表明，该产品在全球范围内达到较高的精度及稳定性，相关系数、均方根误差、平均相对误差和期望误差范围分别为 0.798、0.108、44.56%和 68.36%。该研究可为气溶胶特性研究、空气质量监测等方面的工作提供一定的参考。

关键词：气溶胶监测；POSP；气溶胶；偏振；遥感反演

参考文献

[1] Shi, Z., Xie, Y., Li, Z., Zhang, Y., Chen, C., Mei, L., Xu, H., Wang, H., Zheng, Y., Liu, Z. and Hong, J. A generalized land surface reflectance reconstruction method for aerosol retrieval: Application to the Particulate Observing Scanning Polarimeter (POSP) onboard GaoFen-5 (02) satellite. Remote Sensing of Environment, 2023, 295, p.113683

[2] 李忠宾,王楠,张自力,王甜甜,陶金花,王萍,马双良,徐奔奔,范萌.中国地区MODIS气溶胶光学厚度产品综合验证及分析[J].中国环境科学,2020,40(10):4190-4204

[3] Kaufman Y J, Tanré D, Gordon H R, et al. Passive remote sensing of tropospheric aerosol and atmospheric correction for the aerosol effect[J]. Journal of Geophysical Research Atmospheres, 1997, 102(14): 16815-16830.

[4] Dubovik O, Herman M, Holdak A, et al. Statistically optimized inversion algorithm for enhanced retrieval of aerosol properties from spectral multi-angle polarimetric satellite observations[J]. Atmospheric Measurement Techniques, 2011, 4(5): 975-1018.

墙报展示人简介：

冀哲，2018 年于太原理工大学获学士学位，目前正在中国科学院空天创新研究院遥感科学国家重点实验室攻读博士学位，主要研究兴趣包括卫星气溶胶参数反演和机器学习。

Research on Size Distribution and Trends of Micro-nano Bubble using Pixact Online Bubble Monitoring System

Yuanwang Tang[1]
[1]Beijing Hiferg Technology Co., Ltd., Beijing, 100022
*thomas.tang@hifer.com

The size distributions and trends of micro-nano bubbles that prepared with different parameters were investigated using Pixact online bubble monitoring system(CCPT12) and micro-nano bubble generator. The probe of Pixact online bubble monitoring system was inserted into the liquid mixture of bubble and water to record the images of bubbles that is generated from micro-nano bubble generator in time. Statistical parameters of bubbles such as: size distribution, bubble counts number and their trends with time were analyzed based on the images recorded. The results of different parameters was compared and the reason of generating different bubble size was discussed.

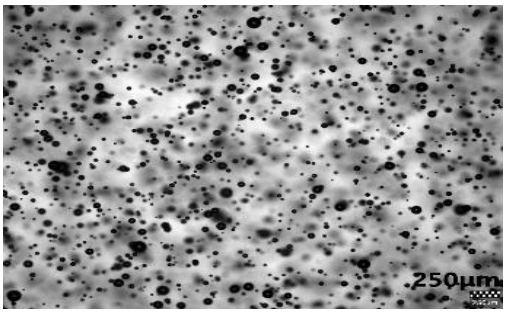


Fig 1. Image of micro bubbles

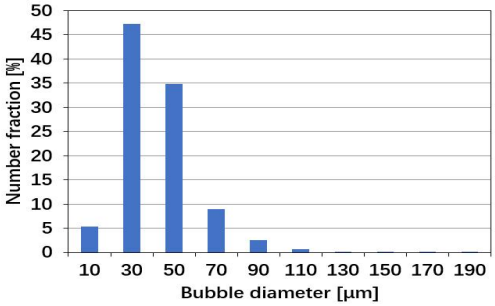


Fig 2. Size distribution of micro bubbles

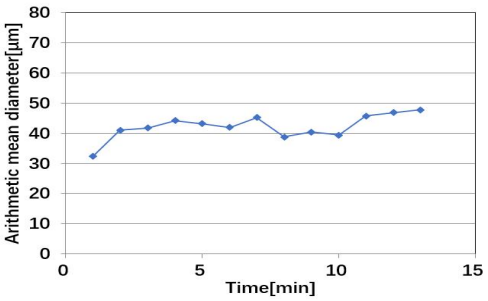


Fig 3. Trend of bubble size with time

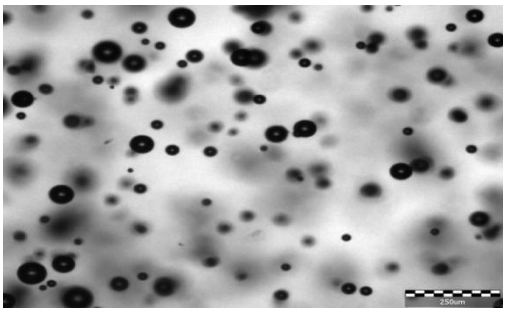
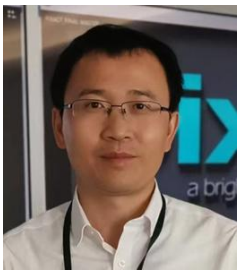


Fig 4. Zoomed Image of micro bubbles

Keywords: PBM; micro-nano bubbles; bubble size; bubble counts

墙报展示人简介：



唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器分析行业技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

$PM_{2.5}$浓度对华北地区降水的影响

熊娜[1]，臧增亮[1*]

国防科技大学 气象海洋学院，长沙 410073

摘要正文：通过近 10 年 $PM_{2.5}$浓度和降水数据研究气溶胶对华北地区降水的影响，结果表明，$PM_{2.5}$浓度影响华北地区冬季小雨的频次和降水量。在太行山-燕山山脉北侧，$PM_{2.5}$浓度的变化与小雨频次的变化呈现明显的正相关，而在太行山-燕山山脉南侧呈现明显的负相关。这种特征受到背景气溶胶的影响，冬季 $PM_{2.5}$浓度的分布特征为南高北低且东部大于西部，太行山-燕山山脉以南 $PM_{2.5}$浓度较大。太行山-燕山山脉北侧 $PM_{2.5}$浓度较低，$PM_{2.5}$浓度增加，有利于云凝结核的形成，促进降水。太行山-燕山以南 $PM_{2.5}$浓度较高，当 PM2.5 浓度增加反而抑制了降水。另外 $PM_{2.5}$浓度变化将影响太行山-燕山两侧地面风速，从而影响降水。

关键字：$PM_{2.5}$，气溶胶，华北地区

Effects of $PM_{2.5}$ concentration on precipitation in North China

Xiong na[1], Zang zengliang[1*]

[1]College of Meteorology and Oceanography, National University of Defense Technology, Changhsa, 410073

Using PM2.5 concentration and precipitation data in the past 10 years to study the impact of aerosols on precipitation in North China. The results show that PM2.5 concentration affects the frequency and precipitation of winter light rain in North China. In the north of the Taihang Mountain-Yanshan Mountains, the changes of PM2.5 concentration were positively correlated with the frequency of light rainfall, while there was a significant negative correlation in the south of the Taihang Mountains-Yanshan Mountains. This characteristic is affected by background aerosols, and the distribution of PM2.5 concentration in winter is high in the south and low in the north, and the eastern part is larger than the western part, and the PM2.5 concentration is larger in the south of the Taihang Mountain-Yanshan Mountains. The PM2.5 concentration on the northern side of the Taihang Mountain-Yanshan Mountains was low, and the PM2.5 concentration increased, which was conducive to the formation of cloud condensation nuclei and promoted precipitation. PM2.5 concentrations were higher in the south of Taihang Mountain-Yanshan Mountain, and when PM2.5 concentration increased, precipitation was suppressed. In addition, the change of PM2.5 concentration will affect the surface wind speed on both sides of Taihang Mountain-Yanshan Mountain, which will affect the precipitation.

Key words:PM2.5,Aerosol,North China

关中平原大气颗粒物中水溶性无机离子的研究进展

苏慧[1,2]，李焕[1,2]，张婷[1*]

[1]中国科学院地球环境研究所，西安，710061

[2]西安地球环境创新研究院，西安，710061

Email:zhangting@ieecas.cn

摘要正文：近年来，关中平原大气细颗粒物($PM_{2.5}$)污染严重，雾霾天气时有发生，是我国大气污染防治的重点区域。水溶性离子(WSIIs)是 $PM_{2.5}$ 中的重要化学组分，具有较强的亲水性、吸湿性，能促进云凝结核的形成，从而改变气溶胶的形成过程，对大气能见度及人体健康等产生重要影响。因此，本研究选取关中平原典型城市西安为例，综述了近年来 WSIIs 的年际及季节性变化特征、污染成因及来源解析等，旨在为我国西北部城市大气污染防控提供重要的数据支撑和科学的理论指导。结果表明：二次无机离子 SNA（SO_4^{2-}、NO_3^-和 NH_4^+）是 $PM_{2.5}$ 中的主要离子组分，占总 WSIIs 的 75%~84%，主要以$(NH_4)_2SO_4$、NH_4HSO_4 和 NH_4NO_3 的形式存在；其次为 Cl^-及 K^+，占比分别为 5%~7%和 2%~3%。从年际变化来看，除 Ca^{2+}外，西安市大气 $PM_{2.5}$ 中其他离子组分均呈现出明显的下降趋势，尤其是 SO_4^{2-}浓度下降最明显，这主要归因于燃煤排放的控制。从季节变化来看，秋冬季 SNA 浓度明显高于夏季，这可能与采暖期燃煤和生物质燃烧有关，并受到不利气象条件的共同影响。同时受典型污染事件如沙尘天气、烟花爆竹及农业活动等排放的影响，Ca^{2+}、Mg^{2+}和 K^+等会出现一些事件性的高值。源解析结果表明 SO_2 的工业减排对大气硫酸盐的浓度水平下降效果显著，但高增速的机动车保有量和能源消费结构对西安市大气污染有重要影响；同时，应考虑控制城市建设(工业企业、交通运输等)快速发展产生的扬尘排放。因此，要降低该地区的颗粒物污染水平，需进一步严格落实燃煤、生物质燃烧、机动车尾气和扬尘等污染源排放的管控措施以及二次气溶胶气态前体物的排放(包括 SO_2、NO_x 和 NH_3），并加强整个关中平原以及周边地区大气细颗粒物的联防联控综合治理。

关键词： 关中平原；$PM_{2.5}$；水溶性无机离子；SNA

参考文献

Cao, J.J., Cui, L. Current Status, Characteristics and Causes of Particulate Air Pollution in the Fenwei Plain, China: A Review. Journal of Geophysical Research: Atmospheres. 2021,126(11).

Li, X., Bei, N.F., Tie, X.X., et al. Local and transboundary transport contributions to the wintertime particulate pollution in the Guanzhong Basin (GZB), China: A case study. Science of The Total Environment. 2021, 797, 148876.

Niu, X.Y., Cao, J.J., Shen, Z.X., et al. $PM_{2.5}$ from the Guanzhong Plain: Chemical composition and implications for emission reductions. Atmospheric Environment. 2016, 147, 458-469.

Wu, C., Wang, G.H., Cao, C., et al. Chemical characteristics of airborne particles in Xi'an, inland China during dust storm episodes: Implications for heterogeneous formation of ammonium nitrate and enhancement of N-deposition. Environmental Pollution. 2019, 244, 877-884.

Wu, C., Wang, G.H., Wang, J.Y., et al. Chemical characteristics of haze particles in Xi'an during Chinese Spring Festival: Impact of fireworks burning. Journal of Environmental Sciences. 2018, 71, 179-187.

Xu, H.M., Cao, J.J., Chow, J.C., et al. Inter-annual variability of wintertime $PM_{2.5}$ chemical composition in Xi'an, China: Evidences of changing source emissions. Science of The Total Environment. 2016, 546-555.

Su, H., Zhang, T., Liu, S.X., et al. Growth of nitrate contribution to aerosol pollution during wintertime in Xi'an, northwest China: Formation mechanism and effects of NH_3.2024, 87:303-315.

Zhang, T., Cao, J.J., Tie, X.X., et, al. Water-soluble ions in atmospheric aerosols measured in Xi'an, China: Seasonal variations and sources. Atmospheric Research. 2011, 102, 110-119.

基于机器学习的汾渭平原$PM_{2.5}$和O_3变化特征及影响因素

李焕[1234]，苏慧[1234]，张婷[123]，赵竹子[5]，王璐瑶[1234]

[1]中国科学院地球环境研究所，黄土与第四纪地址国家重点实验室，中国科学院气溶胶化学与物理重点实验室，西安，710061

[2]西安地球环境创新研究院，西安，710061

[3]陕西省大气污染与雾霾防治重点实验室，西安，710061

[4]陕西关中平原区与生态环境变化与综合治理国家野外科学观测研究站，西安，710061

[5]江苏理工学院，资源与环境工程学院，常州，213001

*Email: lihuan189112@163.com

摘要正文：本文以2017—2021年汾渭平原典型城市西安大气$PM_{2.5}$和O_3浓度数据为基础，运用机器学习方法分析了 $PM_{2.5}$和O_3的变化特征和趋势，讨论了污染气体（NO_2、SO_2、CO和HCHO）与气象因素（温度、相对湿度、风速、大气压力、边界层高度和太阳辐射）对$PM_{2.5}$和O_3浓度变化的交互影响。Theil-Sen 趋势分析发现2017—2021年西安市 $PM_{2.5}$和O_3分别以每年6.03%和2.06%的速度下降。单因素广义加性模型（GAM）中，NO_2、SO_2和CO对$PM_{2.5}$浓度变化影响的模型解释率较高，温度、太阳辐射和大气压对O_3浓度变化影响的模型解释率较高。多因素GAM模型中，$PM_{2.5}$和O_3均呈现非线性变化，模型的解释方差分别为84.9%和75.0%，拟合程度较高。通过等高线图分析了多个气象因素和多种污染气体两两交互作用分别对$PM_{2.5}$和O_3浓度的影响，其中温度和污染气体（NO_2、SO_2、CO和O_3）对$PM_{2.5}$浓度的影响更大；温度和太阳辐射对O_3的影响更大。NO_2和CO分别与气象条件两两相互作用时，$PM_{2.5}$ 浓度随 NO_2和CO的增高而增高，O_3浓度则与NO_2和CO的变化趋势相反。结合本地污染物源清单，建议加强控制工业源和移动源排放，有助于降低$PM_{2.5}$和O_3的浓度。

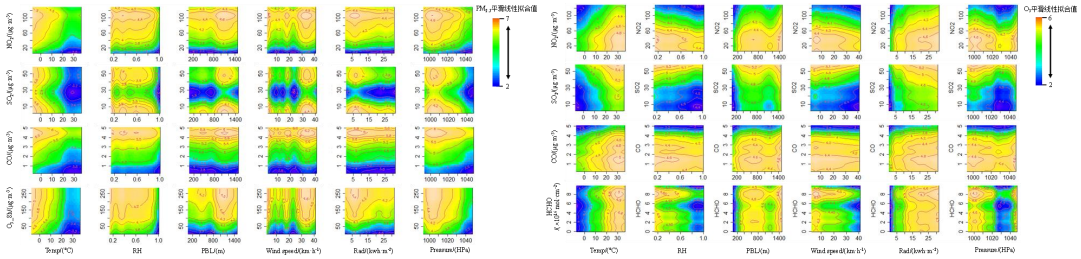


Fig. 1 Interaction influence of influencing factors on $PM_{2.5}$ Fig. 2 Interaction influence of influencing factors on O_3

关键词：$PM_{2.5}$；O_3；机器学习；变化趋势；影响因素

墙报展示人简介：

李焕，毕业于西安电子科技大学，先后从事通信计算机相关工作，有较强的代码开发能力；2019 年进入西安地球环境创新研究院从事大气气溶胶化学分析研究工作，对汾渭平原地区大气气溶胶中主要成分的特征、变化规律及贡献等有深入的研究。

Modeling Estimation of Brown Carbon in the Polluted Atmosphere over North China Plain: Implications for Emissions, Absorption and Direct Radiative Effect

Jiamao Zhou[1,2], Jiarui Wu[1], Xiaoli Su[1], Ruonan Wang[1], Xia Li[1], Qian Jiang[1], Ting Zhang[1], Wenting Dai[1], Junji Cao[3], Xuexi Tie[1], Guohui Li[1,*]

[1] Key Laboratory of Aerosol Chemistry and Physics, State Key Laboratory of Loess and Quaternary Geology, Institute of Earth Environment, Chinese Academy of Sciences, Xi'an 710061, China
[2] Guanzhong Plain Ecological Environment Change and Comprehensive Treatment National Observation and Research Station, Xi'an 710061, China
[3] Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China

Brown Carbon (BrC) has been recognized as a considerable factor in altering the atmospheric radiation balance which led to warming of atmosphere. While primary biomass burning (BB) and biofuels are commonly considered as the main sources of BrC, recent field observations and laboratory research suggest that low-efficiency fossil-fuel combustion is an important contributor like coal combustion and vehicle exhaust. This indicates a critical gap on the treatment of BrC in climate models which typically categorize organic aerosols (OA) from fossil fuels as non-absorbing or simplistically assumed all OA only scatter light. Here we present a monthly regional simulation of BrC during winter in China by using WRF-Chem model which incorporates emissions from primary coal combustion, biomass and biofuel combustion, vehicle exhaust and secondary formation sources with explicit absorption properties. The North China Plain (NCP) is selected as the focus area for this study due to its significant coal consumption, large residential biofuel usage and the increasing number of vehicles. We evaluate the model by comparing the results with observed aerosol components and radiation data, as well as comparison with the observation of aerosol optical depth and single scattering albedo. The model generally successfully reproduces the temporal variations and spatial distribution of observations. Our simulations show that the average surface mass concentrations of BrC in NCP is of 4.8 μg m^{-3} and its contribution to the aerosol absorption optical depth at 365 nm is 11.2%. A diagnostic adjoint method was used to estimate the overall direct radiative effect (DRE) of BrC and contributions from different sources. We find that the DRE of BrC is predominantly negative with an average of -0.10 W m^{-2} at the top of the atmosphere (TOA) in NCP, and consequently decreases the direct radiative cooling effect of OC by 24 % with a TOA warming of up to +0.34 W m^{-2}. The contribution of each source of BrC is evaluated in this study. It shows that the overall largest source contributor of BrC in NCP is coal combustion, but the radiation impact of secondary BrC is non-negligible.
Key words: Brown Carbon, emission sources, absorption, direct radiative effect

Variational assimilation combined with deep learning for SO_2 emission inversion and application

He Xinyu[1], Zang Zengliang[1,2,*], Pan Xiaobin[1,2], Liu Ning[1,2], Hu Yiwen[1,2], Liu Lang[1,2]

[1]College of Meteorology and Oceanography, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China
[2]High Impact Weather Key Laboratory of CMA, Changsha, China

* *Correspondence to*: Zengliang Zang (zzlqxxy@163.com)

Sulfur dioxide (SO_2) is a major atmospheric pollutant that poses serious threats to human health, the environment, and ecosystems globally. To reduce uncertainties in SO_2 emissions and improve the accuracy of SO_2 simulations in chemical transport models (CTMs), there is a growing need for high temporal resolution emission inventories. In this study, we propose a novel method that combines deep learning with three-dimensional variational (3D-Var) assimilation to estimate hourly SO_2 emissions. Applying this method to the hourly emissions from January 20-23, 2023, we demonstrate its high reliability in calibrating high-emission areas. Compared to simulations using prior SO_2 emissions, the root mean square error (RMSE) of SO_2 simulations with the DL inversion emissions from our method decreased by 75.6%, with a correlation coefficient of 0.92. Furthermore, our method demonstrates greater computational efficiency than the 4DVar approach, while achieving comparable improvements in SO_2 concentration simulations. This approach provides accurate and up-to-date emissions, making it a valuable tool for both scientific research and policy-making in SO_2 pollution control.

第 14 分会场：源排放颗粒物特征及其环境健康效应

$PM_{2.5}$中氨基酸氮同位素地球化学及源示踪

肖化云

上海交通大学

*Email: xiaohuayun@sjtu.edu.cn

摘要正文：初级生物气溶胶颗粒（包括毛皮纤维、头皮屑、皮肤碎片、植物碎片、花粉、孢子、细菌、藻类、真菌、病毒、蛋白质晶体等）已被证明是重要的气溶胶组分。氨基酸作为肽类和蛋白质的基本组成单位，被认为是研究气溶胶蛋白质物质来源，转化和降解过程最好的分子水平示踪剂。通过对比分析气溶胶中游离氨基酸和结合态氨基酸的百分占比特征和单体氮同位素值，发现气溶胶中结合态氨基酸的组成反映的是主要释放源的贡献，而游离氨基酸的百分占比特征可以示踪蛋白质的大气降解过程。气溶胶中高分子蛋白质物质会在大气中通过生物和非生物过程降解形成大量的小分子游离氨基酸和有机胺。游离氨基酸作为生物可直接利用的氮源，会对所沉降生态系统中的氮循环产生重要影响。同时，生成的游离氨基酸还可以在大气中进一步通过脱羧作用形成有机胺类化合物，在大气新粒子生成和亚微米颗粒的生长中发挥着重要作用。此外，有机胺形成的吸湿性粒子可以作为云凝结核（CCN），影响云的形成和气候变化。因此，研究大气蛋白质的降解和转化机制对生态系统的氮素循环、大气新粒子生成与增长和气候变化都非常重要。

关键词：$PM_{2.5}$；氨基酸；氮同位素；蛋白质

滨海城市大气颗粒物组分和氧化潜势分析：生物质燃烧和船舶排放的影响

杨新

南方科技大学

*Email: yangx@sustech.edu.cn

摘要正文： Ambient fine particulate matter ($PM_{2.5}$) can catalyze the generation of reactive oxygen species (ROS) in vivo, causing hazardous effects on human health. Molecular-level analysis of major oxidative potential (OP) active species is still limited. In this work, we used non-targeted high-resolution mass spectrometry (HRMS) to analyze the water-soluble organic components of ambient $PM_{2.5}$ samples in winter and summer. Chemical components and back trajectory analysis revealed significant impacts of biomass burning and ship emissions on $PM_{2.5}$ in winter and summer, respectively. Significance Analysis of the Microarray (SAM) method and correlation analyses were combined to identify OP (OP^{DTT} and OP^{OH}) active species in characteristic organic compounds emitted from ship and biomass combustion emissions and to explore possible mechanisms. The high toxicity of summer $PM_{2.5}$ might derive from reduced organic nitrogen compounds ($C_6H_{14}N_2O_3S$, $C_6H_{12}N_2O_3S$, $C_{10}H_9N_3O$, $C_6H_9N_5O_3S$, and $C_6H_{14}N_4O$) emission from ship sources. Phenolic hydroxyl compounds were the main contributors to the $PM_{2.5}$ OP from biomass burning in winter. Our studies based on ambient $PM_{2.5}$ samples further deepened the understanding of molecular level of organic compounds emitted from ships and biomass burning, and their association with OP.

关键词： $PM_{2.5}$；ROS；non-targeted high-resolution mass spectrometry (HRMS)；OP

港口城市的航运减排与人群健康负担变化

刘欢

清华大学

*Email：liu_env@tsinghua.edu.cn

摘要正文：港口城市作为国家的“海上门户”，因其便捷的交通促进了国家经济与文化的繁荣，但船舶活动及其污染排放也使这些城市面临空气污染和人群健康风险。2016 至 2020 年来，中国的港口城市经历了系列因素的或快或慢的变化：船舶硫氧化物排放的陡然下降，陆地人为源排放的持续降低，港口城市的人口持续增加，以及普遍存在的人口老龄化加剧。然而在这些此消彼长的变革中，船舶活动与人群福利的关系发生了怎样的变化？这种关系会随着城市区位和特征而发生变化么？港口城市在继续改善公众福利道路上应该更重视船舶排放还是其他？基于此，研究通过构建“排放-浓度-健康”的评估框架，考虑了多因素不断演变的情景，评估了 2016 年至 2020 年间由于船舶排放引发的中国港口城市 $PM_{2.5}$ 污染及其健康影响。研究通过剖析影响污染物浓度和人群早逝的多因素作用，理解了港口城市空气污染、人群健康与航运业发展之间的内在联结，为未来船舶排放控制战略提供了决策参考，也为城市可持续发展目标提供了科学依据。

关键词：船舶排放；$PM_{2.5}$ 污染；多因素影响；污染与健康的关系

典型燃烧源排放的粒径分级的成分谱特征

陈颖军

复旦大学

*Email: yjchenfd@fudan.edu.cn

摘要正文：自“大气十条”实施以来，我国大气颗粒物污染水平显著下降，主要归因于日趋严格的污染源控制减排措施。然而，为了进一步提升空气质量和人群健康收益，亟须掌握各种排放源的颗粒物粒径谱特征以及粒径分级的化学成分谱特征。目前学界已积累主要排放源的颗粒物成分谱数据以及部分排放源的粒径谱信息，但整体缺乏各排放源颗粒物的粒径分级的化学成分信息。本研究结合便携式烟气稀释系统和 ELPI 分级采样器，对典型燃烧源（包括民用燃煤、生物质燃烧、汽油车与柴油车、非道路机械及船舶）开展了粒径分级采样和离线化学分析，探讨燃料组成和燃烧体系对颗粒物的粒径谱以及粒径分级成分谱的影响，详细比较碳质组分（OC/EC）和多环芳烃（母体、烷基化和含氧 PAHs）的粒径分布特征，为深入研究各燃烧源排放颗粒物的环境和健康效应提供基础数据。

关键词：颗粒物成分谱；BrC；粒径分级；碳质组分；多环芳烃

居民能源结构转型影响碳和污染物排放的时空过程

沈国锋

北京大学

*Email: gfshen12@pku.edu.cn

摘要正文：能源利用是居民生存生活的根本。居民用能清洁化水平直接影响区域生态环境质量、健康福祉、气候变化和社会平等，是实现可持续发展的重要核心。本研究基于数次在全国开展的入户调查和实地测试，分析了居民能源利用结构特征及时空演变规律，测算了细颗粒物等主要大气污染物的排放量及其格局，定量评估了居民能源转型的环境质量、健康和气候协同影响。

关键词：居民燃烧源；区域生态；能源转型；环境健康气候协同效应

生物质和煤燃烧排放棕碳的化学、光学与分子特征

宋建中

中国科学院广州地球化学研究所

*Email: songjzh@gig.ac.cn

摘要正文：棕碳（BrC）是一类在紫外-可见光波段具有较强光吸收的有机混合物，不但可以直接吸收太阳光，影响光辐射强迫，还可以参与大气化学反应和改变气溶胶性质，对气候、环境和人体健康等具有重要影响。生物质和民用煤的燃烧被认为是大气 BrC 的重要来源，但燃料类型的多样性和燃烧条件的复杂性导致产生的 BrC 具有高度的复杂性。针对这些问题，我们利用元素分析、核磁共振以及超高分辨率质谱等技术，系统研究了不同燃烧源 BrC 的化学、光学与分子特征，揭示了主要影响因素，探讨了其对大气环境、气候和健康的影响。

关键词：生物质和煤炭燃烧；BrC；理化特征；多重影响

民用蜂窝煤燃烧：一个被忽视的大气纳米铅颗粒的来源

李卫军

浙江大学

*Email: liweijun@zju.edu.cn

摘要正文：铅是一种有毒重金属，其会损坏人体神经系统、心血管系统、肾脏和免疫系统等，从而对人体健康产生不利影响。在我国，大气铅污染问题仍然比较严重。为解决铅污染问题，准确识别出大气铅的来源是关键。在民用固体燃料燃烧实验中，我们意外发现民用蜂窝煤燃烧会排放大量的纳米铅颗粒，而该现象在之前的研究中被完全忽视。研究发现在蜂窝煤所排放的颗粒物中，有 33.7±19.9 %的颗粒物含有富铅颗粒。这些富铅颗粒的平均粒径只有 117 nm，表现为纳米级尺寸。该研究表明，与块煤燃烧相比，蜂窝煤燃烧会排放更少的碳质颗粒物，但是会排放更多的纳米铅颗粒。该差异与蜂窝煤中更高的铅含量和蜂窝煤燃烧过程中更高的铅释放率密切相关。该研究揭示了蜂窝煤燃烧这一被忽略的铅来源，为未来铅的源解析、铅的排放清单构建及其健康影响等工作提供帮助。

关键词：纳米铅颗粒；粒径；煤燃烧排放

大气有机硫气溶胶：总量与来源

丁翔

中国科学院广州地球化学研究所

*Email: xiangd@gig.ac.cn

摘要正文：大气有机硫气溶胶（Os）通常被认为是人类源酸性硫酸盐颗粒与生物源有机化合物通过多相反应生成。然而，最近的研究显示大气颗粒物中 OSs 的来源多样化，除了硫酸盐，气相 SO2 也可能作为 OS 形成的直接硫源。水相和非均相 OS 形成机理研究表明，除气溶胶酸性外，液态水含量也是 OS 形成过程中的关键因素。目前，在实验室模拟产生的和在农村、城市、海洋、森林以及北极地区采集的大气颗粒物中都可以观测到 OSs 的存在。因此，OSs 被认为是在大气颗粒物中普遍存在并且在很多外场研究中被作为二次有机气溶胶（SOA）标志物。考虑到 OSs 在大气颗粒物中普遍存在，因此很有必要了解大气中 OS 物种的组成、浓度水平和来源等。

关键词：来源多样化；影响因素；SOA

报告人姓名： 李兴华
工作单位：北京航空航天大学
是否为学生：否
联系邮箱： lixinghua@buaa.edu.cn

典型源黑碳气溶胶的形貌特征与光学特性模拟

郭太伦 [1]，莫达纪 [1]，刘嘉盟 [1]，李兴华 [1,*]

[1] 北京航空航天大学，北京市昌平区沙河高教园南三街 9 号，100191

*Email: lixinghua@buaa.edu.cn

摘要正文：本研究采集黑碳气溶胶发生器、民用生物质燃烧、民用燃煤、柴油车排放的颗粒物样品，采用SEM/TEM获得样品形貌（图1），提取出黑碳气溶胶的的微物理性质参数（图2），利用分形聚集体生成环境程序（FLAGE）生成黑碳气溶胶聚合体，采用多球矩阵模型(MSTM)和离散偶极近似模型(DDA)计算黑碳气溶胶的吸收效率、吸光截面、质量吸光截面、吸收埃指数等吸光特性参数，并分析了黑碳气溶胶的主要光学特性与黑碳形貌参数与之间的关系。

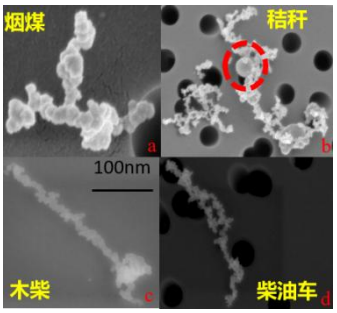


图 1. 典型源排放 BC 单颗粒形貌

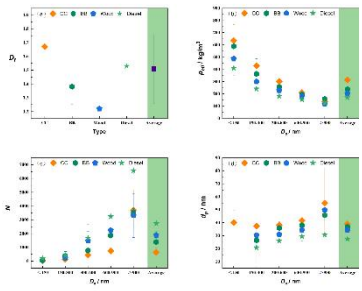


图 2. 典型黑碳气溶胶的微物理性质（a）典型源排放 BC 颗粒的分形维数 （b—d）直径与有效密度、球形单体个数和球形单体直径的关系

关键词：黑碳气溶胶；源排放；形貌特征；光学特性；数值模拟

参考文献

[1] 郭太伦, 肖茂栋, 张卓, 阮兵, 李兴华. 黑碳气溶胶发生器的设计与性能测试. 环境科学学报, 2021, 41(10): 4280-4287.

[2] **Mackowski D W, Mishchenko M I. A multiple sphere T-matrix Fortran code for use on parallel computer clusters. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2011, 112(13): 2182-92.**

报告人/墙报展示人简介：

李兴华，北京航空航天大学能源与动力工程学院，教授/博士生导师
研究领域：排放测量与排放特征、气溶胶的理化/光学特性与气候效应

附：报告人/墙报展示人是李兴华教授

海洋甲醛排放及其对二次气溶胶的影响

薛丽坤

山东大学

*Email: xuelikun@sdu.edu.cn

摘要正文：甲醛是大气自由基的重要前体物，对二次污染物的形成具有重要影响。最新研究报道了甲醛通过作用于颗粒相硫化学可显著促进二次气溶胶的形成，但其在沿海大气中的来源和影响尚未完全阐明。本研究在青岛沿海地区开展了两次实地外场观测，通过结合烟雾箱实验和多相化学模拟，揭示了甲醛的潜在海洋来源，量化了甲醛对颗粒相硫形成的影响。结果表明，甲醛在沿海大气中展现出较高的浓度水平，在海岸站点（距海 15 m）和崂山站点（距海 1 km）观测到的平均浓度分别为 2.4±0.9 ppbv 和 2.7±1.1 ppbv。观测到的甲醛与海洋示踪剂（如甲基乙基酮和 1-丁烯）密切相关。室外烟雾箱实验证实浮游植物的光分解会显著增加甲醛及相关海洋示踪剂的含量，表明海洋排放是甲醛的潜在重要来源。基于观测的多相化学盒子模型模拟发现，甲醛对沿海大气颗粒相硫的贡献高达 30%，考虑甲醛相关机制可解释三分之一以上的硫酸盐模拟低估值。基于排放的模型模拟表明，即使在偏远海洋大气中，甲醛对颗粒相硫也有 20%的贡献。上述结果强调了海洋排放是沿海大气甲醛的潜在重要来源，突出了甲醛在海洋大气硫化学和二次气溶胶形成中的重要作用。

关键词：甲醛；海洋来源；烟雾箱实验；颗粒相硫；多相化学盒子模型

附：请在此处注明报告人非学生。

东北寒区含碳气溶胶的观测与模拟比对研究

程远 [1,*]

[1] 哈尔滨工业大学，黑龙江省哈尔滨市南岗区黄河路 73 号，150090

*Email: ycheng@hit.edu.cn

摘要正文：生物质燃烧排放是一次含碳气溶胶以及二次有机气溶胶的重要来源，在不同地域尺度上对个体污染暴露、区域空气质量、全球气候变化均有复杂影响。本研究通过长期连续外场观测，从多个角度刻画了生物质燃烧在东北寒区城市雾霾污染中的独特作用。综合气溶胶化学组成信息以及卫星遥感与数值模拟结果，发现来自秸秆开放燃烧的有机气溶胶是哈尔滨采暖季$PM_{2.5}$重污染事件的主要驱动因素，并归纳出东北地区的秸秆焚烧具有燃烧效率低、黑碳排放少、卫星探测难等特点。应用耦合了有机示踪物种的受体模型量化了生物质燃烧这一重点源对$PM_{2.5}$核心化学组分的贡献，揭示了高强度生物质燃烧排放影响下棕色碳的污染特征与潜在气候效应，探讨了我国粮食主产区秸秆综合利用中所面临的困难与挑战。本研究还辨识了零下二十度乃至更极端天气条件下的二次有机、无机气溶胶污染特征，捕捉到了非均相大气化学反应促进二次组分生成的证据，构建了二次有机气溶胶相对贡献、硫氧化率等关键指标对气溶胶含水率以及相对湿度的响应关系。相关结果有助于深化对东北严寒地区城市群大气复合污染及其环境影响的科学认知，也有助于推进双碳目标下的寒区雾霾防治。

关键词：颗粒物；源解析；生物质燃烧；二次气溶胶；棕色碳

报告人/墙报展示人简介：

（简介内容采用宋体五号字体）

程远，1984 年出生于河北玉田，国家优秀青年科学基金获得者，哈尔滨工业大学教授、博士生导师、青年拔尖人才选聘计划入选者、青年科学家工作室学术带头人、环境学院寒区大气复合污染研究所所长，兼任国际全球大气化学计划（IGAC）中国青年工作组成员、中国环境科学学会青年科学家分会和污染源排放与管控专委会委员、龙凤山大气成分本底站学术委员会委员、Fundamental Research 和《地球化学》青年编委。主要从事大气复合污染特别是颗粒物的外场观测研究，重点关注生物质燃烧、吸光性碳质组分（即棕色碳与黑碳）、二次气溶胶。已发表包括 ESI 高被引论文、ES&T Letters 封面论文、FESE 年度优秀论文在内的唯一第一或通讯作者 SCI 论文 40 余篇。主持国家自然科学基金、黑龙江省人才计划（"头雁"计划课题、优秀青年科学基金、留学回国人员择优资助）、哈尔滨工业大学基础研究杰出人才"跃升"培育计划等 10 余项不同类型的科研项目。曾获全国优秀博士学位论文提名奖、中国环境科学学会青年科学家奖（优秀奖）。

农村污染源排放及其对大气 $PM_{2.5}$ 影响研究

周颖

北京工业大学

*Email: y.zhou@bjut.edu.cn

摘要正文：农村污染源具有排放随机、分散的特点，对空气质量和人体健康有重要影响。报告针对排放情况复杂、估算不确定性大的中国农村地区典型污染源，构建了大气污染物排放估算方法体系，补充了排放估算中缺失的关键数据，建立了源类精细化、高时空分辨率的中国农村污染源排放清单，并针对典型排放源开展其对大气 $PM_{2.5}$ 影响的定量评估，为农业及农村地区污染源排放控制提供科学决策支撑。

关键词：污染源；排放清单；影响评估

大气污染源排放测量与表征

孔少飞

中国地质大学（武汉）

*Email: kongshaofei@cug.edu.cn

摘要正文：大气成分排放是支撑大气成分来源、组成和效应研究的基础，是大气污染防治和气候变化应对的落脚点。大气污染源类型多样，影响排放和老化的因素众多。针对复杂大气污染源排放的气态和颗粒态污染物开展精准测量，建立源解析和物种清单所需的中国本土关键参数—标识组分、源成分谱和排放因子，是提升大气污染物溯源和大气化学数值模拟准确性的基础。该报告系统梳理报告人在大气污染源排放测量与表征领域的多年研究成果，从源排放监测设备研发、排放因子和源谱测量、物种清单构建、效应模拟等角度展开汇报，并提出对该领域有待突破的科学问题的一些思考。

关键词：大气污染源；检测设备研发；排放因子测量；清单构建；效应模型

大气老化过程对生物质燃烧源气溶胶化学组成和氧化潜势的影响

李建军

中国科学院地球环境研究所

*Email: lijj@ieecas.cn

摘要正文：采用燃烧舱和PAM反应器收集了水稻、玉米、小麦秸秆燃烧排放的新鲜及老化细颗粒物样品，分析其中碳组分、无机离子与有机组分等的浓度水平，并进行$PM_{2.5}$对BEAS-2B细胞诱导细胞产生活性氧（ROS）水平的测定。结果表明水稻、玉米、小麦秸秆燃烧排放的$PM_{2.5}$、WSOC和WSON的老化排放因子均高于新鲜粒子，证实在氧化过程中有大量生物质燃烧排放的气态污染物经过反应形成二次气溶胶。OM在新鲜和老化$PM_{2.5}$中的占比均为最高。新鲜$PM_{2.5}$中Cl^-和K^+是无机离子中占比最高的组分，经过氧化后SNA的贡献升高118.2~236.0%。发现vanillic acid和p-hydroxybenzoic acid在生物质燃烧源颗粒物中的含量较高，且随着气溶胶的老化两者的浓度分别上升了1.94-3.71和6.40-14.7倍，可见vanillic acid/levoglucosan和p-hydroxybenzoic acid/levoglucosan的比值可用来指示生物质燃烧颗粒物在大气中的老化程度。多环芳烃的老化排放因子均低于新鲜粒子，表明PAHs在大气光化学氧化过程中会进一步氧化。新鲜$PM_{2.5}$诱导BEAS-2B细胞产生的ROS水平显著低于二次，证明生物质燃烧排放的污染物氧化后会进一步加重细颗粒物的毒性，可能与可溶性过渡金属及二次有害有机物的生成有关。

关键词：生物质燃烧；ROS；老化过程；细胞毒性

民用燃烧源含氮有机物的环境健康效应

徐红梅[1*]，沈振兴[1*]，顾芸瑄[1]，张越[1]，曹军骥[2]

[1]西安交通大学，西安市碑林区咸宁西路28号，710049

[2]中国科学院大气物理研究所，北京市朝阳区北辰西路81号院，100029

*Email: xuhongmei@xjtu.edu.cn; zxshen@mail.xjtu.edu.cn

摘要正文：汾渭平原2018年被生态环境部指定为空气污染重点控制区。该地区关中农村大多数农村居民冬季取暖仍依赖固体燃料，造成当地农村家庭室内外空气质量恶化，尤其是颗粒态污染物。研究发现，生物质和煤炭等固体燃料是$PM_{2.5}$中含氮有机物的主要一次来源，且多种含氮有机物会造成气候变暖，还能引发居民呼吸道疾病等健康问题。亟待开展深入研究来评估民用燃烧源排放大气颗粒物中含氮有机物对环境和人体健康的负面效应。

不论是煤炭还是生物质，在燃烧排放的老化前后，母体p-PAHs、羟基取代的a-PAHs在老化中被消耗，含氧的o-PAHs与含氮的n-PAHs则增加，且增加率与消耗率随老化时间增加而增加；经过七天老化后，o-PAHs与n-PAHs增加率最高均超过90%，是因为含氧与硝基PAHs具有更高的饱和蒸汽压，更易存在于固相，更易通过吸入过程造成健康危害。可见，含氮多环芳烃主要来自于二次老化的贡献。

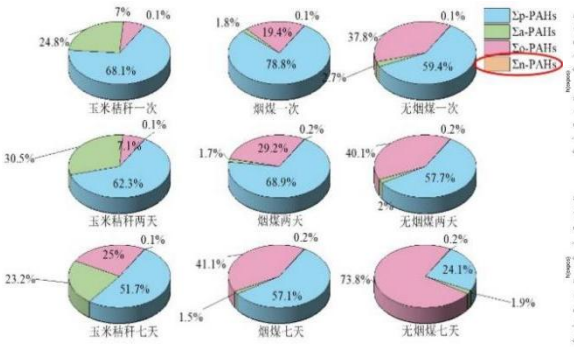


图1 不同固体燃料燃烧排放PAHs的老化程度

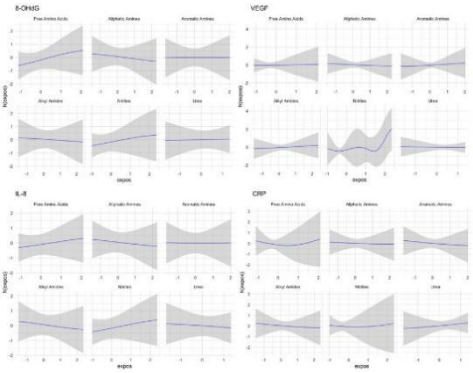


图2 含氮有机物与生物指标之间的暴露反应曲线

从人体暴露的健康效应来说，人体暴露$PM_{2.5}$中含氮有机物（NOCs）在95-100分位时，与VEGF有显著的正相关效应；80-100分位时，NOCs与CRP有显著的正相关。NOCs和四种生物标志物的单变量暴露反应函数结果发现，人体暴露$PM_{2.5}$中，游离氨基酸（FAA）和腈类与8-OHdG的升高呈现正相关关系，腈类与VEGF的升高呈正相关关系；FAA、芳香胺和腈类与IL-8的升高呈现不显著的正相关关系。可见，这两类有机物对健康的显著危害。双变量暴露-反应函数发现，$PM_{2.5}$中的NOCs对各种生物标志物的影响展示了复杂的浓度依赖性和交互作用，特别是在高浓度的FAA情况下，能增强特定NOCs，如脂肪胺和睛类对生物标志物的影响，呈现出健康危害的协同效应。

关键词：民用燃烧源；含氮有机物；老化过程；生物指标；人体暴露

参考文献

[1] Zhang Y, Shen Z, Sun J, et al. Parent, alkylated, oxygenated and nitro polycyclic aromatic hydrocarbons from raw coal chunks and clean coal combustion: Emission factors, source profiles, and health risks[J]. Science of The Total Environment, 2020, 721: 137696.

[2] Zhang Y, Shen Z, Sun J, et al. Parent, alkylated, oxygenated and nitrated polycyclic aromatic hydrocarbons in PM2.5 emitted from residential biomass burning and coal combustion: A novel database of 14 heating scenarios[J]. Environmental Pollution, 2021, 268: 115881.

我国典型亚热带森林大气边界层昼夜特征及其对大气痕量气体迁移转化的影响

黄向鹏[1,2]，郑炜[1]，姜少杰[1,3]，苏维峰[1]，马永敬[4]，王启元[5]，任鑫冰[4]，魏一铭[4]，刘兰忠[6]，戴源[3]，盖鑫磊[3]，张宏亮[2]，辛金元[4]，王自发[4]，叶建淮[1,*]

[1] 南方科技大学 环境科学与工程学院，深圳，518055

[2] 复旦大学 环境科学与工程系，上海，200438

3 南京信息工程大学 环境科学与工程学院，南京，210044

4 中国科学院大气物理研究所，北京，100029

5 中国科学院地球环境研究所，西安，710061

6 中国科学院大气边界层顶生态环境上黄观测站，金华，321203

*Email: yejh@sustech.edu.cn

摘要正文：本研究聚焦于大气边界层内挥发性有机化合物（VOCs）垂直分布特征及其在典型亚热带森林背景下的传输与转化机制。VOCs是大气细颗粒物和臭氧的重要前体物，现有关于VOCs垂直分布与演变过程的研究较为匮乏，观测数据主要局限于近地表测量。本研究在中国科学院大气边界层顶生态环境上黄观测站开展了VOCs及相关污染物垂直分布综合观测。通过分析污染物垂直分布特征及大气氧化作用，阐明了边界层变化对大气痕量气体传输扩散和迁移转化的影响。研究结果显示，上黄观测站大气边界层昼夜平均高度在150至300米，日间边界层略高于夜间。边界层上下VOCs组分分布较为一致，主要由低反应性的含氧挥发性有机物、烷烃和卤代烃构成。随着高度的增加，VOCs浓度呈递减趋势。所有VOCs中，烯烃、芳香烃和含氧挥发性有机物对该地区臭氧生成贡献最大。模型模拟发现该地区OH及臭氧净生成速率远低于其他背景区域，结合异戊二烯氧化产物与其前体物低比值，共同表明了上黄站相对较弱的大气氧化性。在大气氧化性的垂直分布上，昼夜边界层上方大气氧化性均高于边界层内。本研究成果揭示了上黄观测站大气边界层内外VOCs的时空分布特性，深化了对边界层内污染物传输与氧化过程的理解，为深入理解我国典型亚热带森林背景区大气痕量气体的传输演变提供了科学依据。

关键词：挥发性有机物；大气边界层；垂直分布；亚热带森林

报告人/墙报展示人简介：

叶建淮，南方科技大学环境科学与工程学院副教授（研究员、博士生导师），国家级青年人才。2017 年博士毕业于多伦多大学，随后于哈佛大学从事大气化学博士后研究工作。主要研究方向包括大气污染物排放特征表征、大气污染形成机制及其环境气候效应、大气污染物化学传感器的开发与应用等。发表论文 70 余篇，其中第一/通讯作者论文发表在 PNAS、Nature Communications、Environmental Science & Technology、Geophysical Research Letters、Atmospheric Chemistry and Physics 等大气环境领域知名期刊。主持国家自然科学基金青年、面上、深圳市自然科学基金面上等多项国家级和省市级项目。曾获得 The Atmosphere 2022 Young Investigator Award（2022）、NSERC Postdoctoral Fellow（US & Canada, 2020）、大气化学学术研讨会新兴科学家（ACCESS XV，2019）、Camille & Henry Dreyfus Postdoctoral Fellow（US, 2019）、University of Toronto Student Discovery Award（2017）等。担任 ACS ES&T Air 和《地球化学》青年编委、以及 Frontiers in Forests and Global Change、Air Quality, Atmosphere & Health 副主编。任中国环境科学学会挥发性有机物污染防治专业委员会委员、中国颗粒学会第四届青年理事。

典型沿海郊区大气颗粒物的氧化潜势水平及其影响因素

闫才青
山东大学环境研究院

摘要正文：大气颗粒物对环境、气候和人类健康具有重要影响。氧化潜势（OP）是评估大气颗粒物健康效应的重要指标。本研究于 2021-2022 年四季，在青岛沿海郊区采集了不同粒径大气颗粒物样品，采用二硫苏糖醇（DTT）法测量了 OP，探讨了该地区不同天气情景（清洁、雾、霾、沙尘和火灾事件）颗粒物的氧化潜势水平；采用可解释机器学习算法，评估了组分与源对 OP 的重要性，通过分粒径采集和呼吸道暴露沉积模型，探讨了不同粒径 PM OP 在人体呼吸道的沉积情况。本研究将为制定以健康为目标的大气污染防治提供重要科学依据。

摘要：颗粒物；氧化潜势；粒径分布；机器学习；暴露沉积

工业锅炉源排放$PM_{2.5}$颗粒的化学组分与吸光特性

尹鑫，黄虹*

南昌大学资源与环境学院

* Email: honghuang@ncu.edu.cn

摘要正文：以不同类型工业锅炉（生物质锅炉、燃煤锅炉、垃圾焚烧炉、天然气锅炉）排放的 $PM_{2.5}$ 颗粒及周围环境空气中 $PM_{2.5}$ 为研究对象，研究工业锅炉排放 $PM_{2.5}$ 颗粒及其化学组分（有机碳、元素碳、水溶性离子、矿物元素）的特征，对比分析源排放 $PM_{2.5}$ 颗粒与环境空气 $PM_{2.5}$ 中化学组分的关联，定量探讨工业锅炉源排放 $PM_{2.5}$ 与周围环境中 $PM_{2.5}$ 的吸光特性，主要研究结论：（1）获得不同类型工业锅炉排放 $PM_{2.5}$ 颗粒及其化学组分的特征：垃圾焚烧炉(2 台)、天然气锅炉(2 台)、煤锅炉(2 台) 、生物质锅炉(4 台)排放 $PM_{2.5}$ 的 OC/EC 比值分别为（22.9、14.3），（10.0、7.5），（10.4、10.8），（4.3、4.5、4.4、4.2）；垃圾焚烧炉(2 台)、生物质锅炉(4 台) 、天然气锅炉(2 台)、煤锅炉(2 台)排放 $PM_{2.5}$ 的 Char/Soot 比值分别为（12.7、16.8），（4.3、12.0、3.9、8.9），（1.8、4.0），（1.5、1.4）；（2）工业锅炉源排放 $PM_{2.5}$ 颗粒与周围环境空气中 $PM_{2.5}$ 有关联：环境空气 $PM_{2.5}$ 中 OC/EC（15.8）与多种工业锅炉源的颗粒物 OC/EC 比值范围有重合；Char/Soot（1.1）和 Cl^- 占比高（41%）指示燃煤源的贡献较大；OC_2、OC_3、OC_4、EC_1 占比（27%、39%、12%、10%）表明环境空气中 $PM_{2.5}$ 受煤锅炉、天然气锅炉源及机动车源影响较大；（3）工业锅炉源排放 $PM_{2.5}$ 颗粒具有吸光特性：生物质锅炉、垃圾焚烧炉、燃煤锅炉、天然气锅炉排放 $PM_{2.5}$ 颗粒的 $b_{abs,MSOC,365}$、$b_{abs,WSOC,365}$ 均值分别为 4.8、2.1 Mm^{-1}，3.4、1.5 Mm^{-1}， 5.5、1.8 Mm^{-1}，3.4、1.7 Mm^{-1}；环境空气中 $PM_{2.5}$ 的 $b_{abs,MSOC,365}$、$b_{abs,WSOC,365}$ 分别为 2.1、1.3 Mm^{-1}。生物质锅炉、垃圾焚烧炉、燃煤锅炉、天然气锅炉排放 $PM_{2.5}$ 颗粒的 AAE_{MSOC}、AAE_{WSOC} 均值分别为 3.8、5.6，2.0、5.8，2.3、6.7，2.7、4.1，环境空气 $PM_{2.5}$ 的 AAE_{MSOC}、AAE_{WSOC} 分别为 4.4、8.3；生物质锅炉、垃圾焚烧炉、燃煤锅炉、天然气锅炉排放 $PM_{2.5}$ 颗粒的 MAE_{MSOC}、MAE_{WSOC} 均值分别为 3.2、1.3 m^2/g，4.5、0.7 m^2/g，2.5、1.0 m^2/g，8.9、1.1 m^2/g；环境空气 $PM_{2.5}$ 的 MAE_{MSOC}、MAE_{WSOC} 分别为 1.3、0.8 m^2/g。

关键词：工业锅炉源；颗粒物；$PM_{2.5}$；化学组分；吸光特性

报告人简介：

黄虹 教授

黄虹（1975-），女，南昌大学资源与环境学院博导、三级教授，2005 年 7 月中山大学博士毕业至今，从事环境科学与工程教学科研工作 20 年，主要在大气环境、环境与健康、地球环境化学领域开展科研工作，以第一/通讯作者发表学术论文 50 多篇，其中 SCI 收录 20 多篇；主持国家自然科学基金 3 项（42265011、41765009、41265009）；主持完成省级教改课题 1 项并获校级教学成果奖 2 项；主持完成省教育厅基金项目 1 项；主持国家重点实验室开放基金项目 5 项；主持横向科研课题 50 余项/经费 400 余万；已培养 13 届 40 多名研究生毕业，指导在读博/硕士生每个年级 3-6 人。

不同氧气含量下生物质源排放特征及其环境意义

杜伟[1*]，冯耀兴[1]，孙杰[1]

[1]昆明理工大学环境科学与工程学院，云南省土壤固碳与污染控制重点实验室，昆明 650500

* wdu@geo.ecnu.edu.cn, duwpku@gmail.com

摘要正文：本研究通过向家用炉灶的一次送风中注入氧气或氮气，调整燃烧环境的单位体积空气中氧气含量，探讨了不同氧气含量对生物质（薪柴、玉米秸秆和玉米芯）燃烧排放的气态污染物、细颗粒物（$PM_{2.5}$）和碳组分（OC、EC）排放因子（EFs）的影响，以及对 $PM_{2.5}$ 氧化潜势（OP）的作用。实验数据显示，不同氧气含量下生物质燃烧产生的 CO 和 $PM_{2.5}$ 的 EFs 分别在 35.8 g/kg 至 244 g/kg 和 2.22 g/kg 至 48.8 g/kg 之间，较低的氧气含量会导致不完全燃烧导致排放更多的 CO 和 $PM_{2.5}$，提高燃烧环境氧气含量可显著降低 CO 和 $PM_{2.5}$ 排放。研究还发现，生物质燃烧排放的 OC 和 TC 与氧气含量之间存在显著的二次趋势（薪柴、玉米秸秆和玉米芯 OC 排放的 R^2 分别为 0.968、0.995 和 0.955，TC 排放的 R^2 分别为 0.969、0.996 和 0.955），较低氧气含量（18.2%、20.4%和 22.3% O_2）情境下氧气含量的变化对 OC 和 TC 的排放影响较大，而较高氧气含量（24.4%和 26.6% O_2）情境下对其影响较小。此外，在 18.2% O_2 情境下薪柴和玉米秸秆 EC 的 EFs 值最高（分别为 0.40 ± 0.35 g/kg 和 0.40 ± 0.14 g/kg），分别在 22.3%和 24.4% O_2 情境下最低（分别为 0.08 ± 0.03 g/kg 和 0.10 ± 0.01 g/kg），而在更高的测量氧气含量情境下 EC 的 EFs 逐渐增高，这可归因于不同氧气含量下燃料燃烧的完全性，以及富氧情景下受持续强烈火焰燃烧促进的烟灰形成。还发现生物质燃料的 EC 和 OC 的 EFs 之比（EC/OC）均呈显著的二次函数关系（薪柴、玉米秸秆和玉米芯的 R^2 分别为 0.977、0.995 和 0.961），在 26.6% O_2 情境下生物质的 EC/OC 显著大于 18.2% O_2 情境下的（0.51 ± 0.24 vs 0.15 ± 0.11）。由于薪柴具有相对高的木质素和相对致密的纤维，EC 的排放增高，OC 的排放减少，以及挥发物质释放相对缓慢，燃烧更彻底，导致薪柴燃烧具有较高的 EC/OC。$PM_{2.5}$ 的 OP 测量结果发现，$PM_{2.5}$ 的 OP 与氧气含量之间也呈显著的二次曲线趋势（薪柴、玉米秸秆和玉米芯的 R^2 分别为 0.996、0.994 和 0.993），在 26.6% O_2 情境下的 OP 显著低于 18.2% O_2 情境下的（10.6 ± 4.16 μmol/min/kg vs 66.4 ± 26.6 μmol/min/kg）。玉米秸秆燃烧排放的 $PM_{2.5}$ 中 OP 较高（39.93 ± 33.82 μmol/min/kg），且在不同氧气含量下的变化较为明显。这说明氧气含量和燃料类型对颗粒物中的活性氧（ROS）生成具有重要影响。本研究结果强调了燃烧环境中氧气含量对不同生物质燃烧污染物排放的关键影响，为制定减轻生物质燃烧对人类健康和大气环境影响的策略提供了科学依据，对不同海拔地区居民生物质燃烧排放制定污染防治策略具有重要意义。

关键词：生物质燃烧；氧气含量；气态污染物；细颗粒物；碳组分；氧化潜势；排放因子

报告人/墙报展示人简介：

杜伟，男，1991 年生，博士，昆明理工大学高层次引进人才，硕士研究生导师。2018 年 9 月，赴加拿大麦吉尔大学进行为期三个月的国外访学；2019 年 6 月，获得北京大学环境地理学博士学位。围绕生物质利用的环境和健康效应展开了一系列研究。截止目前，在 Nat. Energy, Sci. Adv., Environ. Sci. Technol., Renew Sustain. Energy. Rev., Environ. Int.等环境领域权威期刊上发表 SCI 论文 110 余篇，其中以第一/通讯作者在 Environ. Sci. Technol., Renew. Sustain. Energy. Rev., Environ. Int.，Environ. Sci. Technol. Lett., Sci. Total Environ.等期刊上发表 SCI 论文 38 篇，其中 JCR 一区论文 31 篇。此外还以第一/通讯作者发表中文核心论文 3 篇，教改论文 2 篇。论文总引用 3300 余次，H 指数 33；以第一申请人申请专利 15 项，授权 3 项；主持自然科学基金委青年基金、云南省优秀青年基金，云南省“兴滇英才”青年人才配套项目、云南省基础研究计划面上项目、博士后科学基金面上项目等国家级/省部级项目 7 项,作为技术骨干参与自然科学基金委重点项目等十余项。担任 ES&T、JHM 等三十余个 SCI 期刊审稿人及 Hygiene and Environmental Health Advances 等 6 个英文期刊编委/青年编委，兼任颗粒学会青年理事。入选云南省“兴滇英才”、上海市“超级博士后”等荣誉性人才计划。

汾渭平原农村取暖期固体燃料燃烧生物气溶胶浓度及潜在致病菌分布特征

杨柳[1,2]，沈振兴[1,*]，杨一鸣[1]，胡小燕[1]

[1]西安交通大学能源与动力工程学院环境工程系，西安，710049

[2]中科院地球环境研究所，西安，邮编，710061

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

摘要正文：与城市生物气溶胶研究相比，农村区域相关研究较少。但作为室内空气颗粒物的重要组成部分，生物气溶胶对居民健康会造成不良影响。本研究选取陕西西安蓝田县农村两户农家作为现场观测地点，评估了生物质和煤燃烧生物气溶胶分布特征、细菌群落室内外分布特征，并且筛选了潜在致病细菌。结果表明，农村地区冬季燃煤家庭室内总微生物（$2.32◊10^5$ cells·m^{-3}）、活菌（$15.0◊10^5$ cells·m^{-3}）和死菌（$460◊10^5$ cells·m^{-3}）浓度显著高于燃烧生物质家庭和室外环境，燃烧生物质家庭细菌活性和蛋白质（3.91±0.82 μg·m^{-3}）浓度高于燃煤家庭及室外环境。厨房总微生物、死菌浓度、细菌活性和蛋白质浓度均高于大厅、烟囱口和室外，而大厅活菌浓度最高。室内外细菌群落具有较强的异质性，烟囱口和环境细菌群落丰富度和多样性更高。厨房和大厅细菌群落较为相似，门水平相对丰度最高的3种菌群分别为放线菌门、变形菌门、厚壁菌门，属水平相对丰度最高的菌群为弧菌。烟囱口（62.7%）和大厅（18.3%）分别检测到最高和最低相对丰度的潜在致病菌，三类固体燃料（生物质、烟煤、无烟煤）燃烧排放共同潜在致病菌在烟囱口是拟杆菌属、链球菌属，在室外环境是普雷沃菌属、拟杆菌属、大肠埃希菌属，在厨房和大厅为弧菌属。

关键词：固体燃料燃烧；生物气溶胶；细菌群落结构

参考文献

[1] Akila M, Earappa R, Qureshi A. Ambient concentration of airborne microbes and endotoxins in rural households of southern India[J]. Building and Environment, 2020, 179: 106970.

[2] Crounse JD, DeCarlo PF, Blake DR, et al. Biomass burning and urban air pollution over the Central Mexican Plateau[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2009, 9(14): 4929-4944.

报告人简介：

杨柳，女，西安交通大学能源与动力工程学院环境工程系高级工程师，主要从事生物气溶胶分布规律及其健康效应研究工作。主持省部级项目 3 项，横向课题 5 项。参与国家重点研发项目课题、国家自然基金项目及省部级项目 8 项，第一作者发表 SCI 论文 3 篇，中文核心期刊文章 1 篇，合作发表 SCI 论文 20 余篇，参编著作 2 部，担任中国颗粒学会第四届青年理事。

加热卷烟烟气气溶胶释放规律及影响因素分析

张越，张柯*，付丽丽，王爽，李斌*

中国烟草总公司郑州烟草研究院，河南省郑州市枫杨街 2 号，450001

*Email: zhangyue00324@163.com

摘要正文：为了表征加热烟草制品（HTPs）抽吸过程决定气溶胶形成的动态热转化过程，采用亚秒级分辨率进行实时化学检测和定量分析具有重要意义。本文利用一种新型的真空紫外（VUV）光电离飞行时间质谱仪（PI-TOFMS）对两种颗粒型HTPs抽吸过程中烟气气/粒相物实时释放情况进行了表征。这两种HTPs均采用电阻式加热方式，但具有两种不同的气流路径，一种允许冷空气流经烟草段（open-ended），另一种则将烟草段密闭（close-ended）[1]。烟气在线分析结果表明PI-TOFMS系统可以有效对烟气中的化学成分进行检测，包括尼古丁、甘油、丙二醇等主要成分，2,3-丁二酮、柠檬酸三乙酯等风味成分。得益于高灵敏度和时间分辨率的分析手段，诸如乙烯醇（ethenol）和丙烯-2-醇（propen-2-ol）等烟气中短寿命的中间体也能被成功检测到[2]。在此基础上，本研究进一步对尼古丁、甘油、丙二醇这三种主要成分在0.5s的时间分辨率下进行了定量分析，近实时的获取了抽吸过程中这三种物质的排放规律。基于此，本研究结果清晰的展示出气流路径的改变显著的影响了尼古丁的递送方式，当抽吸容量固定，较长的抽吸持续时间不会改变open-ended路径下的尼古丁释放量，但会显著降低close-ended路径下的尼古丁释放量。以上研究结果将为人们认识加热卷烟这一新型产品的烟气递送规律提供依据。

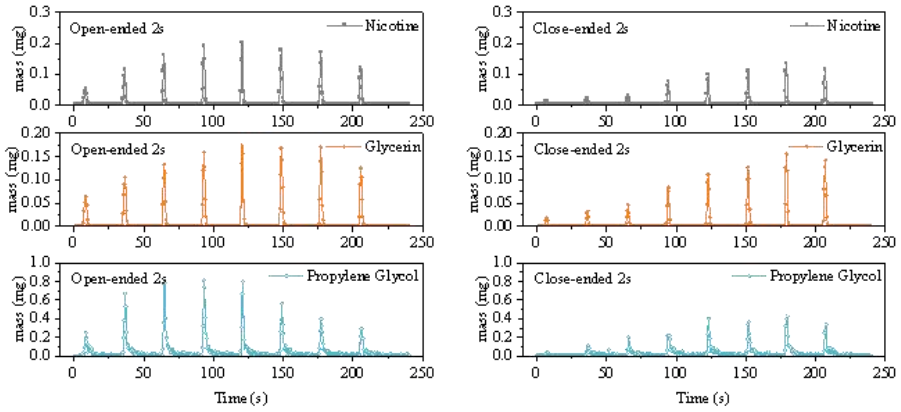


Fig. 1 Online aerosol emission profiles for nicotine, glycerin and propylene glycol mass under HCI puffing mode for the open-ended and close-ended HTPs.

关键词：加热卷烟；在线表征；光电离质谱；定量分析；气溶胶

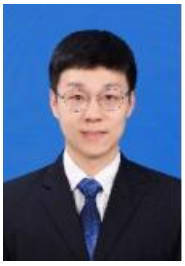
参考文献

[1] ***B. Li, Y. Sun, L. Fu, L. Feng, P. Lei, C. Liu, J. Han, S. Shang, S. Wang, L. Wang, Aerosol Formation and Transfer in Open-and Closed-Ended Heated Tobacco Products, Beitr. Tabakforsch. Int. 31(3) (2022) 162-174.***

[2] ***Y. Pan, Y. Hu, J. Wang, L. Ye, C. Liu, Z. Zhu, Online characterization of isomeric/isobaric components in the gas phase of mainstream cigarette smoke by tunable synchrotron radiation vacuum ultraviolet photoionization time-of-flight mass spectrometry and photoionization efficiency curve simulation, Anal. Chem. 85(24) (2013) 11993-12001.***

报告人简介：

2021 毕业于西安交通大学，获工学博士学位。现为烟草行业烟草工艺重点实验室助理研究员，主要研究方向为烟草工艺、烟气气溶胶理化特性分析。近五年在 Atmospheric Research, Environmental Pollution, Microchemical Journal 等期刊发表 SCI 论文 29 篇，申请发明专利 4 项，主持国家自然科学基金青年基金一项。



住宅固体燃料燃烧释放的棕碳分子的光氧化演化机制研究

王帝伟[1],沈振兴[1*],白鸽子[1],张雷鸣[2],黄沙沙[1],孙健[1],徐红梅[1],曹军骥[3]

1 西安交通大学环境科学与工程系，西安 710049

2 加拿大环境与气候变化部，多伦多，M3H5T4 加拿大

3 中国科学院大气物理研究所，北京 100029

*E-mail: zxshen@mail.xjtu.edu.cn

摘要正文：固体燃料是大气棕碳（BrC）的重要排放源之一。本研究利用氧化流动反应器研究了五种住宅典型固体燃料（木柴、玉米芯、烟煤、无烟煤和生物质型煤）燃烧排放的 BrC 分子组成及其光氧化演化机制。结果表明，含氮和含硫有机化合物是这些燃料排放的甲醇溶性有机化合物（MSOC）的主要成分，在不同燃料中的丰度占比分别为 33%~43%和 23%~56%。经过光氧化后，MSOC 中类碳水化合物和不饱和烃的丰度降低，而高含氧化合物和富羧酸脂环分子化合物的丰度增加，表明由 NO_3 自由基介导的光氧化反应的存在。典型含氮 BrC 发色团（如硝基芳香族化合物）的形成进一步证明了 NO_3 自由基在光氧化过程中的作用。然而，光氧化过程破坏了 BrC 分子的不饱和度和芳香性，并导致其光吸收能力显著降低。相比于新鲜排放，老化 12 天后的 BrC 在 365 nm 处的质量吸收系数降低了 47.0%~55.8%。该研究结果为理解从固体燃料排放的 BrC 在真实环境大气中的分子演化过程和氧化机制提供了见解。

关键词：棕碳；固体燃料；光氧化；分子演化；光吸收特性

Multi-organ toxicity caused by $PM_{2.5}$ in elderly with cardiovascular diseases: the role of PAHs played in the most polluted episodes in China

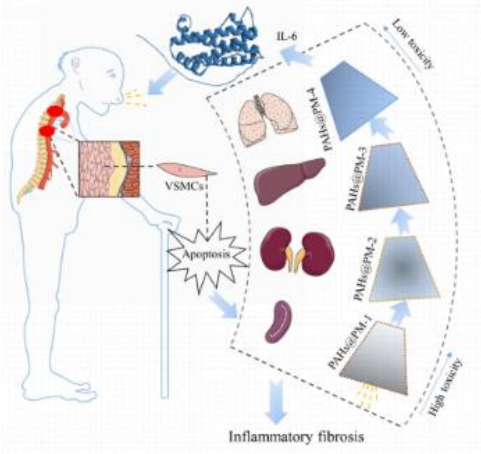
Jian Sun[1], Zhenxing Shen [1*]

[1]Department of Environmental Engineering, Xi'an Jiaotong University, 28 West Xianning Road, Xi'an China, 710049

* zxshen@mail.xjtu.edu.cn

PAHs pollutants, as one of the key toxic components in $PM_{2.5}$, have been proved to be closely related to the morbidity and mortality of cardiovascular diseases in middle-aged and elderly people, however, their effects on organs and tissues other than cardiovascular/lung systems have not been deeply discussed. Here we collected $PM_{2.5}$ samples from 2017 to 2020 in Xi'an, the city with the highest $PM_{2.5}$ level in China, invesgated the effects of PM2.5-bound PAHs on lung, spleen, liver and kidney by using the elderly ApoE-/- mice model with high-fat diet. Firstly, six key toxic components in PAHs were screened to determine their relative importance in pollutants. By determining the effects of PAHs on apoptosis of VSMCs and inflammatory fibrosis of different tissues, it was revealed that PAHs pollutants caused biological reactions of cardiovascular toxicity in other organs and tissues through intermolecular forces such as Van der Waals force between IL-6 and PAHs, and the toxicity of these biological reactions decreased by about 25% with the environmental management. The results of this study deepened the understanding of comprehensive impacts of PAHs on the elderly with cardiovascular basis, and provided important scientific basis for the prevention and treatment of environmental pollution-related diseases.

Keywords： $PM_{2.5}$, PAHs, Cardiovascular disease, Inflammatory fibrosis



报告人/墙报展示人简介：

孙健，博士，西安交通大学环境工程系副教授。主要从事大气污染物理化特征及其人体健康效应研究。主持了国家基金委青年基金、中国博士后基金和陕西省自然科学基金、陕西省自然科学基金重点项目/重点研发等多个项目。目前已在 ES&T、Environmental International、Atmospheric Environment、Environmental Pollution、Science of The Total Environment 和 Chemosphere 等国内外相关领域高水平期刊上发表 SCI 论文 120 余篇，其中第一/通讯作者论文 32 篇，累积引用 2900 余次，H 因子 32。

基于组学及生物信息学探索成渝大气 $PM_{2.5}$ 诱发人体多系统疾病的机制

张蜀敏

川北医学院，四川省南充市高坪区东顺路 55 号， 邮编 637000

Email: zhangshumin@nsmc.edu.cn

摘要正文：成渝地区是中国四大经济圈和五大城市群之一。近些年来，成渝地区经济快速增长，人口高度密集，同时也伴随严重的 $PM_{2.5}$ 污染。$PM_{2.5}$ 可导致人体多系统疾病。然而，$PM_{2.5}$ 对人体各系统疾病的诱导效应及致病分子机制取决于细颗粒物的大小、组成和来源，上述因素都随时间、地区和季节的变化而变化。因此，成渝大气 $PM_{2.5}$ 也可通过其特有的分子机制诱发各系统疾病。本研究以成渝地区代表性城市重庆大气 $PM_{2.5}$ 为研究对象，分析了 $PM_{2.5}$ 在呼吸、循环、内分泌以及女性和男性泌尿生殖系统中引发的疾病类型，并探索了致病分子机制。结果表明，$PM_{2.5}$ 可能显著诱发肺气肿（呼吸）、再灌注损伤（循环）、恶性甲状腺肿瘤（内分泌）、卵巢子宫内膜异位症（女性）和肾炎（男性）。$PM_{2.5}$ 作用于这五个系统最重要的共有基因、共有细胞组分、共有生物过程、共有分子功能和共有途径分别是 Fos 原癌基因、细胞外基质、泌尿生殖系统发育、赋予拉力的细胞外基质结构成分和铁死亡。在每个系统中，$PM_{2.5}$ 主要特异性靶向的基因分别是 BTG2（呼吸系统）、BIRC5（循环系统）、NFE2L2（内分泌系统）、TBK1（女性泌尿生殖系统）和 STAT1（男性泌尿生殖系统）。此外，$PM_{2.5}$ 特异地诱导了与疾病相关的细胞组分、生物过程和分子功能。例如，对创伤的反应（呼吸）、血管形成（循环）、腺体发育（内分泌）、负调控内质网应激反应（女性）和对 I 型干扰素的反应（男性）。$PM_{2.5}$ 主要作用于与疾病相关的关键信号通路，如 PD-L1 表达和 PD-1 检查点途径（呼吸系统）、细胞周期（循环系统）、凋亡（内分泌系统）、抗原处理和呈递（女性）以及神经活性配体-受体相互作用（男性）。

关键词：成渝；PM2.5；致病机制

报告人/墙报展示人简介：

张蜀敏，理学博士，教授，硕士研究生导师，中共党员。中国颗粒学会气溶胶专业委员会委员；四川省生物化学与分子生物学学会青年委员会委员；四川省“卫生健康英才计划”中青年骨干。主要从事大气污染物的致病分子机制研究。基于生物化学、分子生物学、组学及生物学信息的研究手段，围绕大气污染物对人体主要系统的致病分子机制展开研究。以第一及通讯作者发表 SCI 论文共 11 篇，包括《Environment international》、《Journal of Pineal Research》、《Science of the Total Environment》、《Environmental Research》、《Frontiers in Microbiology》及《Chemosphere》等。作为负责人主持国家自然科学基金青年项目、南充市校战略合作项目两项、川北医学院校级项目一项。授权发明专利 2 项。参与编写专著 1 本。在对外学术交流方面，与中科院重庆绿色智能技术研究院大气环境中心合作密切，已共同在《Environment international》、《Science of the Total Environment》及《Environment Pollution》等国际权威期刊发表多篇论文。

典型居民燃烧源水溶性有机气溶胶的分子组成与光学特性

李丽娟[1]，徐红梅[2]，丁佳乐[3]，沈振兴[2]，韩月梅[1,4,*]

[1] 中国科学院地球环境研究所气溶胶化学与物理重点实验室，黄土与第四纪地质国家重点实验室，西安 710061

[2] 西安交通大学能源与动力工程学院 西安 710049

[3] 陕西科技大学环境科学与工程学院 西安 710021

[4] 中国科学院第四纪科学与全球变化卓越创新中心，西安 710061

*Email: lilijuan@ieecas,cn

摘要正文：居民燃烧源是大气中一次有机气溶胶（POA）的重要来源，对区域环境空气质量及公众健康具有非常不利的影响[1,2]。居民燃烧源有机气溶胶的分子组分与燃料种类、燃烧条件。本研究利用高效液相色谱结合高分辨率Q-Exactive Orbitrap质谱(UHPLC-HRMS)对苹果木、杨槐木、玉米秸秆、无烟煤与清洁煤燃烧排放的水溶性有机气溶胶的分子组成进行了表征。研究结果表明，不同燃料种类和燃烧条件显著影响其排放的水溶性有机气溶胶的化学组成。清洁煤与无烟煤相比于生物质燃料排放的水溶性化合物种类明显减少，尤其是在焖烧条件下。焖烧过程中，清洁煤和无烟煤排放的水溶性化合物中非脂肪族结构的比例较高，并且这些化合物含有更多的碳原子数（C > 20），这可能与低温焖烧过程中的不完全燃烧有关。相较于明燃条件，焖烧还导致了更多含硫化合物的生成，特别是在清洁煤的燃烧中，这表明提高燃烧效率能够有效减少含硫化合物的生成。此外，DAD光谱分析结果显示，大多数棕碳类物质（brown carbon, BrC）主要为CHO和CHON化合物，且主要源自焖烧过程。此研究揭示了居民燃烧源中不同燃料及燃烧条件对水溶性有机气溶胶分子组成的影响，强调了燃烧条件在控制大气污染物排放中的关键作用，特别是在减少含硫化合物和棕碳类物质方面的潜力。研究结果为制定更加科学的燃烧管理策略提供了重要的科学依据，有助于减少燃烧源对环境空气质量的负面影响。

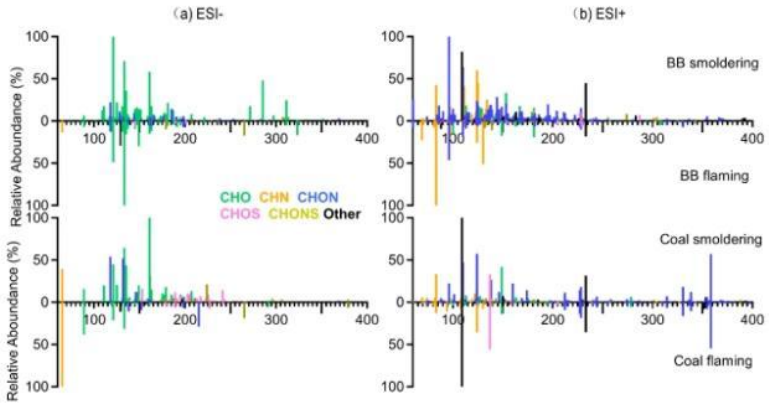


Fig. 1 Reconstructed mass spectra for detected ions with assigned formulas detected in the (a) negative (ESI-) and (b) positive (ESI+) electrospray ionization mode for BB and coal burning aerosol samples.

关键词：燃烧源；水溶性有机气溶胶；高分辨率质谱仪

参考文献

[1] Zhang, Q., et al., Drivers of improved $PM_{2.5}$ air quality in China from 2013 to 2017. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2019, 116(49): 24463-24469.

[2] Geng, G., et al., Drivers of $PM_{2.5}$ air pollution deaths in China 2002–2017. *Nature Geoscience*. 2021, 14(9): 645-650.

高架路大气颗粒物垂直分布特征及暴露风险研究

王占永*，曹如晖

福建农林大学 交通与土木工程学院，福州 350108

摘要正文：高架路的存在不仅抬高了交通排放源，加剧了交通污染范围和强度，其特有的“盖状“结构还会改变路边大气流动，势必重塑道路空气污染的时空分布格局。就目前来看，有关高架路交通排放及其对路边环境影响的研究尚显不足，尤其缺乏对高架路大气污染垂直分布规律及其过程机理的深入探究，同时也不清楚高架路交通排放对临路居民产生怎样的健康风险。因此，厘清上述疑问对于人口密集区域高架路设计、沿路居住风险评价以及高架路交通污染防控决策有着重要的理论价值和现实意义。本研究以福州市西三环快速路北段和福建农林大学旗山校区校园为实验靶区，搭建基于旋翼无人机的大气环境垂直监测平台，采集局部不同位置上 $PM_{2.5}$、$PM_{1.0}$、BC、O_3 等与交通相关的大气污染物的质量浓度垂直分布数据，同步收集实验区域气象、道路交通等指标变量的高时空分辨率样本数据。基于实测数据，利用数理统计方法直观解析有无高架路各测量位置上大气污染物的垂直分布特征，然后建立机器学习和 SHAP 方法，揭示有无高架和有无交通源情景下大气污染物分布的异同规律及原因，并运用多重分形理论方法分别探讨垂直空间上 BC 与 $PM_{1.0}/PM_{2.5}$ 比值的非线性特征，以揭示道路交通颗粒物一次排放和二次生成的垂直动力学机理；最后，组合利用机器学习和健康暴露风险评估模型，估算和评价路侧不同高度层大气颗粒物的健康暴露风险。主要的研究结果如下：(1)高架路大气污染物时空分布规律：冬季污染物浓度高于夏季，一天中 $PM_{1.0}$ 和 $PM_{2.5}$ 的浓度呈现早上高傍晚低的趋势，BC 和 O_3 则相反。无论冬夏，气象均是影响污染物浓度垂直变化的主要因素。冬季，建筑密集的小区侧颗粒物浓度会高于空间开阔的沿江侧，且小区侧路段会加剧交通排放对路边颗粒物的直接贡献。高架路对 $PM_{1.0}$ 和 $PM_{2.5}$ 的影响小，但是容易导致 BC 和 O_3 在 0~40m 高度内堆积。与冬季相比，夏季高架路旁 $PM_{1.0}$、$PM_{2.5}$ 和 BC 浓度的垂直分布受交 通活动的影响更明显。无论冬夏，高架路对交通源的抬高作用会增加 交通活动对路边颗粒物垂直变化的影响强度。机器学习模型的微观释表明，高架路还会通过阻碍大气流动以及影响桥面高度以下空间的相对湿度、温度和大气压强等，进一步改变大气污染的垂直分布格局。(2)表征颗粒物一次排放和二次生成强度的 BC 和 $PM_{1.0}/PM_{2.5}$ 比值的垂直变化特征：集成经验模态分解表明，高频因素是交通颗粒物一次排放和二次生成强度空间演化共有的关键因素，但对二者影响 的权重有较大差异：交通颗粒物一次排放与二次生成强度在垂直方向上的总体变化趋势无明显关联。消除趋势波动分析表明，相对封闭的小区侧道路环境会增强一次和二次颗粒物各自在垂直方向上的空间关系，高架路环境中各自的垂直关联性会高于非高架路，沿江侧高架路旁尤为明显;季节变化还会改变道路结构和路侧环境对颗粒物一次排放与二次生成各自垂直关联性的影响强度，如夏季道路结构的影响更明显，冬季道路环境通透性的影响更突出。多重分形去趋势波动分析表明，不同时段和测量点位，交通颗粒物一次排放和二次生成强度均呈现多重分形特征；一次排放颗粒物的浓度受前一高度颗粒物浓度影响大，二次生成颗粒物更受其他高度上强烈的二次生成反应的影响。(3)高架路旁不同高度层大气颗粒物的健康暴露风险：夏季路边颗粒物健康暴露风险会低于冬季，冬夏两季高架路旁颗粒物暴露风险会显著高于非高架路段。夏季仅 0~20m 的路边高度面临较大的颗粒物暴露风险，冬季路边居民面临颗粒物暴露高风险的高度上升至 80~100m。与只考虑污染物浓度估算暴露风险相比，考虑垂直环境温度变化后，路边居民冬夏两季的颗粒物暴露风险均有所升高但暴露风险值的差距趋于减小，而不同高度层居民暴露风险的差异增大。

关键词：交通污染物，垂直结构，分形理论，机器学习，无人机监测

报告人/墙报展示人简介：

王占永（1983—），男，副教授，研究方向：交通污染与暴露统计学、交通减污降碳的绿地响应策略、基于无人机的大气污染智能监测技术等研究. E-mail：wangzy1026@fafu.edu.cn。基金项目：福建省自然科学基金资助项目(2021J01105)；国家自然科学基金资助项目(41701552)

粒子计数器粒径通道自动调节及其测量方法

黄志煌
(1.福建省计量科学研究院，福建 福州 350003)

摘要正文：粒子计数器根据应场景有不同粒径通道数，测量范围从 0.1μm 至 10μm，甚至扩展到 25μm，根据不同应用场景，要求不同的粒径通道测量值，造成成本高昂。本文提出一种粒径通道可调的粒子计数器及其测量方法，满足一台设备覆盖测量所有粒径测量，减少设备成本，同时降低不同仪器之间精度差带来的计算问题。

关键词：计量学;校准方法；粒子计数器；

固体燃料燃烧排放含氮有机物的人体暴露及健康暗示

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：冬季分别汾渭平原运城市和铜川市采集了使用不同家用固体燃料的100多户农村居民的人体暴露在线监测数据（PM_{10}、$PM_{2.5}$、PM_1、NO_2、CO和O_3）以及不同粒径的离线颗粒物（PM）滤膜样品。按照冬季家庭供暖燃料类型和取暖方式，将参与者分为生物质燃料组（玉米芯、硬柴等）、块煤组以及清洁组（电取暖或不取暖）。针对离线滤膜，本研究分析了其中多种含氮有机物（NOCs）的浓度变化，并同时采集了受试者的尿液样品，分析其中代表人体炎症因子和氧化应激水平的四种生物标志物。

发现三种燃料组的六种污染物的实时暴露浓度模式相似。电组受试者的三个粒径颗粒物的个人暴露水平比煤组低5.1%-12%，CO和O_3的分别比其他两种燃料组低25%-40%和11%-20%。NO2在组间没有明显差异。$PM_{2.5}$和$PM_{0.25}$中的各类NOCs均表现为生物质组>煤组>电组，$PM_{2.5}$中浓度是$PM_{0.25}$中的3-13倍。

采用贝叶斯核机回归模型分析发现人体暴露$PM_{2.5}$中NOCs在95-100分位时，与VEGF有显著的正相关效应；80-100分位时，NOCs与CRP有显著的正相关。这一现象在人体暴露$PM_{0.25}$中也被发现。NOCs和四种生物标志物的单变量暴露反应函数结果发现，人体暴露$PM_{2.5}$中，游离氨基酸（FAA）和腈类与8-OHdG的升高呈现正相关关系，腈类与VEGF的升高呈正相关关系；FAA、芳香胺和腈类与IL-8的升高呈现不显著的正相关关系。在人体暴露$PM_{0.25}$中，FAA和腈类与四种生物标志物都呈现正相关关系，可见这两类有机物对健康的显著危害。双变量暴露-反应函数发现，$PM_{2.5}$和$PM_{0.25}$中的NOCs对各种生物标志物的影响展示了复杂的浓度依赖性和交互作用，特别是在高浓度的FAA情况下，能增强特定NOCs，如脂肪胺和睛类对生物标志物的影响，呈现出健康危害的协同效应。对于VEGF，PM2.5中有机物之间的交互作用更为显著，而在$PM_{0.25}$中未观察到明显的交互作用。

本研究为探索民用固体燃料燃烧源排放不同粒径大气颗粒物中含氮有机物的毒性健康效应提供前沿认知，还可为我国西北地区传统燃料的替代政策提供科学支撑。

关键词：固体燃料；颗粒物；含氮有机物；生物标志物

报告人/墙报展示人简介：

顾芸瑄，西安交通大学环境工程系博士在读，主要研究方向为大气颗粒物来源、空气污染的人体暴露及健康效应。

基于底盘测功机的机动车 Char-EC 和 Soot-EC 排放因子及光学特性研究

谢锋[1, 2]，林煜棋[1, 2]，于鸣媛[1, 2]，戈畅[1, 2]，章炎麟[1, 2, *]

[1]南京信息工程大学 生态与应用气象学院，江苏 南京 210044

[2]南京信息工程大学 教育部气候与环境变化国际合作联合实验室大气环境中心，江苏 南京 210044；

*Email: dryanlinzhang@outlook.com

摘要正文：黑碳气溶胶，是具有正辐射强迫效应并对大气辐射产生重要影响的一类气溶胶，其重要来源之一是机动车排放[1]。针对机动车排放中黑碳气溶胶（特别是其细分组分 Char-EC 和 Soot-EC，两者具有不同的物理化学性质）的排放因子，目前常用的发动机台架测量方法无法充分反映实际使用中的排放水平，而隧道实验又存在较高的不确定度[2]，导致缺乏机动车在实际使用中 Char-EC 和 Soot-EC 的排放统计数据以及他们质量吸光效率（MAE）的特征。所以本研究基于底盘测功机对 4 种车型：轻型汽油车（LDGV）、混合天然气车（CNGV）、轻型柴油车（LDDV）和重型柴油车（HDDV）在不同工况下的 Char-EC 和 Soot-EC 的排放特征极其 MAE 进行了研究。研究表明：（1）重型柴油车（HDDV）是 Char-EC 的一个重要排放源，其 Char-EC 排放因子高达 118.98 ± 91.55 mg km^{-1}，远高于其他车型。各车型 Soot-EC 排放因子也呈现显著差异，主要排放源以柴油车为主，LDDV 和 HDDV 排放因子分别为 31.13 ± 24.08 和 23.09 ± 56.33 mg km^{-1}。（2）柴油车型的 Char-EC 表现出较低的 MAE 值，而 Soot-EC 的 MAE 则相对较高，这与汽油车和天然气车的情况相反，表明不同类型 EC 的辐射吸收能力存在差异。（3）重型柴油车与天然气车的 Char-EC/Soot-EC 比值远高于 1，而且该比值存在较大不确定性，需在溯源分析时充分考虑。（4）不同运行工况下，Char-EC 与 Soot-EC 的排放量均有所变化。多数车型在热启动或郊区时速条件下，Char-EC 排放量减少，但 Soot-EC 减少更为显著，导致 Char-EC/Soot-EC 比值增大。值得注意的是，LDDV 的 EC 总排放量虽不受冷热启动或运行情景影响，但其 Char-EC 与 Soot-EC 的配比在特定条件下（如热启动或高时速）会发生变化，呈现更小的 Char-EC/Soot-EC 比值。总体看来，Char-EC 和 Soot-EC 排放因子以及 MAE 在不同类型车辆、不同运行条件下存在显著差异。这为排放清单的精细化处理以及 EC 辐射吸收的精细化评估提供了数据支持。

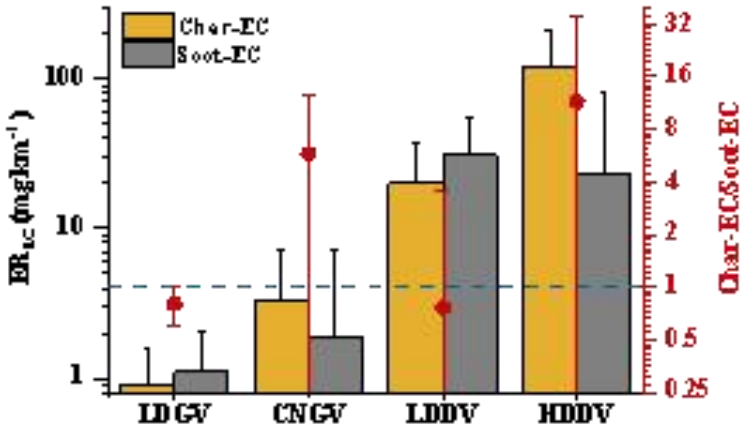


Figure 1 Emission factor and the ratio of Char-EC and Soot-EC of LDGV, CNGV, LDDV and HDDV

关键词：黑碳气溶胶；机动车；底盘测功机；质量吸光效率；Char-EC/Soot-EC；

参考文献

[1] J. Peng, M Hu, S. Guo, Z. Du, J. Zheng, D. Shang, M.L. Zamora, et al. Markedly Enhanced Absorption and Direct Radiative Forcing of Black Carbon under Polluted Urban Environments. *PNAS* 113, no. 16 (2016): 4266-71.

[2] W. Hugo, L. Pirjola, P. Karjalainen, E. Saukko et al. Particulate Emissions of a Modern Diesel Passenger Car under Laboratory and Real-World Transient Driving Conditions. Environmental Pollution 265 (2020): 114948.

报告人简介：

谢锋，男，1995 年出生于甘肃省嘉峪关市，目前就于南京信息工程大学攻读应用气象学专业博士学位，主要研究方向为大气稳定碳同位素同位素研究。

附：报告人目前为在读博士生

Development and application of methods for assessing the contribution of activity patterns to resident exposure inequity

Zhanpeng Cui[1], Wei Du[1,*], Jinze Wang[2], Yuqiong Wang[3], Yungui Li[3], Xiaoan Li[4], Yan Zhou[4], Tao Jiang[4], Kang Mao[5], Xianbiao Lin[6], Jianwu Shi[1], Dengzhou Gao[7], Yiming Qin[8]

1. Yunnan Provincial Key Laboratory of Soil Carbon Sequestration and Pollution Control, Faculty of Environmental Science & Engineering, Kunming University of Science & Technology, Kunming 650500, China

2. Laboratory of Earth Surface Processes, College of Urban and Environmental Sciences, Peking University, Beijing 100871, China

3. Department of Environmental Engineering, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China

4. NHC Key Laboratory of Nuclear Technology Medical Transformation, Mianyang Central Hospital, School of Medicine, University of Electronic Science and Technology of China, Mianyang 621000, China

5. State Key Laboratory of Environmental Geochemistry, Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, Guiyang 550081, China

6. Key Laboratory of Marine Chemistry Theory and Technology, Ministry of Education, Ocean University of China, Qingdao 266100, China

7. Key Laboratory for Humid Subtropical Eco-Geographical Processes of the Ministry of Education, School of Geographical Sciences, Fujian Normal University, Fuzhou 350117, China

8. School of Energy and Environment, City University of Hong Kong, Hong Kong SAR 999077, China

* wdu@geo.ecnu.edu.cn, duwpku@gmail.com

Pollution variations from pollutants (black carbon, $PM_{2.5}$, etc.) in different microenvironments would result in exposure inequity between rural and urban residents. Thus, it is crucial to use the exposure concentration based on different microenvironments and/or activity patterns to accurately characterize the inequity of air pollution exposure. In this study, the real-time $PM_{2.5}$ exposure of urban and rural residents in China was examined based on portable $PM_{2.5}$ sensors together with activity patterns derived from questionnaire surveys, with a focus on students and senior citizens who are sensitive to air pollution. The results showed that $PM_{2.5}$ exposure varied significantly among different resident groups, with higher $PM_{2.5}$ exposure of rural residents than those of urban residents. $PM_{2.5}$ exposure peaks mostly occurred during (Accompanied) cooking activities owing to strong emissions. Sleeping and resting were the main activities that affected $PM_{2.5}$ exposures of different resident groups, accounting for 60.7%–94.5% of total daily exposures. Furthermore, the long duration of sleeping makes it the predominant activity contributing to $PM_{2.5}$ exposure inequity. It is necessary to obtain point-to-point respiratory volume (respiratory rate) data when measuring real-time $PM_{2.5}$ exposure data and incorporate respiratory volume (respiratory rate) into the analysis of $PM_{2.5}$ exposure. For the first time, this study quantified the $PM_{2.5}$ exposure inequality based on a novel method and can provide useful information for further studies on the exposure inequity.

Fig.1 Contribution of activity patterns to $PM_{2.5}$ exposure between urban and rural residents

Keywords: Exposure; Activity patterns; Environmental inequity

报告人/墙报展示人简介：

崔占朋，男，2001 年生，共青团员，昆明理工大学环境科学与工程学院硕士研究生，主要研究方向为高原地区室内降尘的污染特征及其健康风险、不同活动模式对人群暴露的不公平贡献。曾获第九届云南省“互联网＋”大学生创新创业大赛铜奖、云南省中国国际大学生创新大赛银奖、深圳市城市环境健康风险精准测量与预警技术重点实验室开放基金项目等。发表学术论文 8 篇，其中以第一/第二作者在 The Science of the total environment、Building Simulation 等期刊发表 SCI 论文 3 篇。

附：报告人为学生

利用血清白蛋白加合物组分析 $PM_{2.5}$ 内暴露有机物的源特异性健康效应

曾娅玲[1]，杨新[1,*]

[1] 南方科技大学环境科学与工程学院，广东省深圳市南山区学苑大道 1088 号，518055

E-mail: zengyaling@hotmail.com

摘要正文：环境中的$PM_{2.5}$吸入肺部之后有机化合物会渗透入血液，导致内暴露。内暴露有机分子的复杂组成使得源归因和毒性评估过程充满挑战，目前尚无系统框架来评估不同来源的水溶性有机分子（WSOMs）对健康的影响。本研究旨在通过分析人血清白蛋白（HSA）与WSOMs的非共价加合物组，全面探讨城市$PM_{2.5}$中内暴露有机物的源特异性健康效应。利用高分辨率质谱、表面等离子体共振和机器学习技术，建立HSA-WSOM相互作用全谱，揭示了WSOM与HSA加合物组的内暴露潜能。本研究识别了内暴露WSOMs的八个不同来源，主要是生物排放、汽油废气和生物质燃烧。这些来源的WSOMs主要与HSA残基ARG257、LEU238和TRP150相互作用，通过氢键和疏水相互作用显著改变了脂肪酸结合位点二和疏水腔的功能动态。内暴露WSOMs的主要健康影响为神经毒性和呼吸毒性。生物源和海洋排放源的WSOMs主要负责神经毒性作用，而生物质燃烧和汽油废气的WSOMs则主要引起呼吸毒性。通过HSA加合物组，本研究识别了城市$PM_{2.5}$中内暴露WSOMs的源特异性特征和健康效益，强调了针对性源排放控制的重要性。

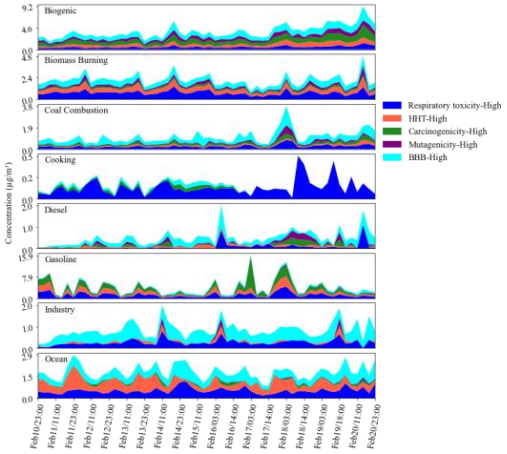


Fig.1 Health Impact Variability of Internalized WSOM by Source. The differential health effects of internally exposed WSOM from eight sources on BBB penetration, hepatotoxicity, mutagenicity, carcinogenicity, and respiratory toxicity.

关键词：$PM_{2.5}$；内暴露；人血清白蛋白；非共价加合物组；非靶向分析

参考文献

[1] Zeng, Yaling, et al. "Internal exposure potential of water-soluble organic molecules in urban $PM_{2.5}$ evaluated by non-covalent adductome of human serum albumin." Environment International 184 (2024): 108492.

报告人简介：

曾娅玲，南方科技大学环境科学与工程学院副研究员，鹏程孔雀特聘人才。主要研究领域包括大气气溶胶有机组成、气溶胶光学特性、内暴露以及神经毒性。在EI、GRL、JGR等国际刊物发表学术论文40余篇。研究工作获博士后面上基金、国家自然科学基金青年项目支持。

Emission of VOCs/IVOCs from Animal Dung and Coal Combustion and Its Contribution to Secondary Organic Aerosol Formation in Qinghai-Tibet Plateau, China

Kun He[1,2], Zhenxing Shen[1,2*], Leiming Zhang[3], Xin Wang[4,] Bin Zhang[1], Jian Sun[1], Hongmei Xu[1], Steven Sai Hang Ho[5], Jun-ji Cao[6]

[1]Xi'an Key Laboratory of Solid Waste Recycling and Resource Recovery, Department of Environmental Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049, China

[2]Shaanxi Key Laboratory of Environmental Monitoring and Forewarning of Trace Pollutions, Shaanxi Environmental Monitoring Center station, Xi'an, 710054, China

[3]Air Quality Research Division, Science and Technology Branch, Environment and Climate Change Canada, Toronto, M3H5T4, Canada

[4]School of Chemistry, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049, China

[5]Division of Atmospheric Sciences, Desert Research Institute, Reno, NV89512, United States

[6]Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100029, China

* zxshen@mail.xjtu.edu.cn

Incomplete combustion of solid fuels (animal dung and bituminous coal) is a common phenomenon during residential cooking and heating in the Qinghai-Tibetan Plateau (QTP), resulting in large amounts of pollutants emitted into the atmosphere. Intermediate volatility organic compounds (IVOCs) are important precursors to secondary organic aerosols (SOAs), but are often neglected in studies concerning SOA formation. This study addresses the significant issue of IVOCs emissions in the QTP, and then evaluates its contribution to SOA formation. Our field measurement data revealed emission factor of the total IVOCs (EF_{IVOCs}) ranging from 1.56±0.03 to 9.97±3.22 g/kg from various combustion scenarios in QTP. The markedly higher EF_{IVOCs} in QTP than plain regions can be attributed to oxygen-deficient conditions. IVOCs were dominated by gaseous phase emissions, and the primary contributors of gaseous and particulate phases IVOCs are the unresolved complex mixture and alkanes, respectively. Gas-particle partitioning of individual polycyclic aromatic hydrocarbon species depends on its aromatic ring number, while that of alkanes depends on its carbon number. Total IVOCs emissions during the heating and non-heating season in QTP were estimated to be 31.7±13.8 and 6.87±0.45 Gg, respectively. The estimated SOA production resulted from combined emissions of IVOCs and VOCs is nearly five times higher than that derived from VOCs alone. Results from this study emphasized the pivotal role of IVOCs emissions in air pollution and provided a foundation for compiling emission inventories related to solid fuel combustion, which has important implications for developing pollution prevention strategies in this and other similar plateau regions.

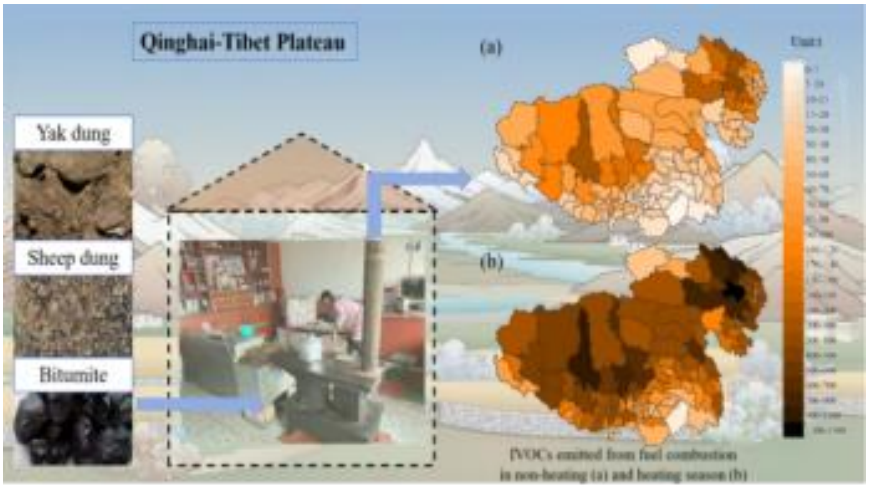


Fig.1 IVOCs emitted from animal dung and coal combustion in QTP

Keywords: IVOCs; Solid fuel combustion; Secondary organic aerosols; Emission inventory.

报告人/墙报展示人简介：

何昆，男，1997 年，中共党员，西安交通大学环境科学与工程系博士研究生，曾在香港理工大学进行研学交流，主要研究方向为民用固体燃料 VOCs/IVOCs 源排放特征和转化机理、大气 VOCs/IVOCs 污染特征和清洁固体燃料的开发等，曾获西安交通大学“优秀研究生”、“优秀毕业生”、“优秀硕士学位论文”、“优秀研究生干部”、“杭氧行业奖学金”和“陕西省高等学校科学技术研究优秀成果奖一等奖”第 5 完成人等，发表学术论文 20 余篇，其中以第一作者在 *Environmental Science &Technology*、*Chemosphere* 和 *Atmospheric Research* 等期刊发表 SCI 论文 5 篇。

附：报告人为学生

我国秦岭地区游离氨基酸的化学组成特征及来源解析

王瑞[1]，张新[1,2]，李丽娟[1]，李建军[1]，韩月梅[1,*]

[1]中国科学院地球环境研究所，黄土与第四纪地质国家重点实验室，中国科学院气溶胶化学与物理重点实验室，西安，710061

[2]西安交通大学人居环境与建筑工程学院，西安，710049

*Email: yuemei.han@ieecas.cn

摘要正文：氨基酸是大气气溶胶中含氮有机物和蛋白质类物质的重要组成部分，它们不仅影响大气物理和化学过程，而且对生物营养物质的循环起着关键作用。迄今为止国内外学者已经对不同环境大气中氨基酸的浓度和组成开展了不少研究，但对大气细颗粒物$PM_{2.5}$中游离氨基酸的化学特征及来源的认识仍然十分有限。本研究旨在对我国中部秦岭地区大气$PM_{2.5}$中游离氨基酸进行深入系统探讨，明确不同类型游离氨基酸的浓度水平和物种组成特征及其季节变化规律，阐明气象因素以及其它环境条件对其化学特征的影响，并进一步揭示该地区游离氨基酸的潜在来源和环境影响。

本研究于2021–2022年的春、夏、秋、冬四个季节在秦岭地区采集了大气$PM_{2.5}$样品，采用乙腈和水混合液作为溶剂，萃取了样品中的游离氨基酸，并使用超高效液相色谱结合电喷雾电离源及静电场轨道阱超高分辨率质谱手段（UHPLC–ESI–Orbitrap MS），对其中14种游离氨基酸进行了定量分析。研究结果显示，秦岭地区四个季节大气$PM_{2.5}$中总游离氨基酸的浓度范围在6.4–48.5 ng m^{-3}，平均值为23 ± 11 ng m^{-3}。游离氨基酸的浓度水平总体上呈现春、夏季节高于秋、冬季节的变化趋势。其中缬氨酸、丙氨酸和甘氨酸为该地区游离氨基酸的主要组分，三者占比之和高达总游离氨基酸的75%。对不同季节的氨基酸种类分析发现，缬氨酸在四个季节中最为富集，其次甘氨酸和丙氨酸在夏、冬季占比较高，而苯丙氨酸和丙氨酸在春、秋季占比较高。此外，四个季节的疏水性氨基酸浓度均高于亲水性氨基酸，表明疏水性游离氨基酸在该地区更为富集。进一步分析了大气氧化剂（O_x）及气象因素(温度和相对湿度)对游离氨基酸形成的影响。结果发现O_x与游离氨基酸总浓度具有较好的正相关性（相关系数r = 0.60，$p<0.01$），表明大气氧化过程可能对游离氨基酸的形成具有一定的贡献。温度与多种游离氨基酸的浓度均呈正相关性（r 在0.07–0.59，$p<0.01$），表明较高温度有利于游离氨基酸的形成。相对湿度与游离氨基酸总浓度呈负相关（r = −0.13，$p<0.01$），可能是在较高相对湿度下部分氨基酸发生水解或其他反应所致。利用正交矩阵因子分析法对研究期间游离氨基酸的来源进行了解析，其主要来源包括农业活动和燃煤燃烧后的化学产物。

关键词：游离氨基酸；化学种类；浓度水平；季节特征；来源；秦岭地区

Spatio-temporal characteristics of PM2.5 and O3 synergic pollutions and influence factors in the Yangtze River Delta

Haixing Gong[1], Qing Zhu [1], Tiantao Cheng[1,*]

[1]Department of Atmospheric and Oceanic Sciences and Institute of Atmospheric Sciences, Fudan University, Shanghai, 200438

* ttcheng@fudan.edu.cn

Since the implementation of pollution prevention and control action in China in 2013, particulate pollution has been greatly reduced, while ozone pollution has become gradually severe, especially in the economically developed eastern region. Recently, a new situation of air pollution has emerged, namely, enhanced atmospheric oxidation, ascending regional ozone pollution, and increasing particle and ozone synergic pollution (i.e., double-high pollution). Based on the long-term observation data from 2015 to 2021, we examined the spatio-temporal characteristics of urban PM2.5 and O3 pollution in the Yangtze River Delta and quantified the effects of meteorological and non-meteorological factors on pollution in four city clusters using stepwise multiple linear regression models. Temporally, PM2.5 decreased gradually year by year while, O3 increased in city clusters. Spatially, PM2.5 declined from northwest to southeast, while O3 decreased from northeast to southwest. Except for southern Zhejiang, other city clusters suffer from complex air pollution at different levels. In general, pollution intensity and frequency vary with city location and time. Single PM2.5 pollution mostly occurred in northern Anhui. Single O3 pollution occurred in central and southern Jiangsu and northern Zhejiang. Synergic pollutions of PM2.5 and O3 mainly occurred in central Jiangsu. The contributions (90%) of non-meteorological factors (e.g., anthropogenic emission) to PM2.5 decrease and O3 increase are far larger than that of meteorological factors (5%). Relative humidity, sea level pressure, and planetary boundary layer height are the most important meteorological factors to drive PM2.5 changes during pollution. Downward solar radiation, total cloud cover, and precipitation are the most important meteorological factors that affect O3 changes during pollution. The results provide insights into particulate and ozone pollution in the Yangtze River Delta and can help policymakers to formulate accurate air pollution prevention and control strategies at urban and city cluster scales in the future.

Keywords: PM2.5, ozone, pollution, meteorology, Yangtze River Delta

住宅固体燃料燃烧中硝基芳香族化合物的一次排放和光化学老化:·OH 和 NO_x 在二次有机气溶胶形成中的作用

黄沙沙[1]，沈振兴[1,*]

[1]西安交通大学环境科学与工程系，陕西西安，710049

*Email：zxshen@mail.xjtu.edu.cn

摘要正文：硝基芳香族化合物（Nitroaromatic compounds, NACs）是 $PM_{2.5}$ 中重要的含氮有机物，在自然环境和气候中起着重要作用。本研究选择了中国北方地区广泛使用的 11 种煤和生物质燃料，通过潜在气溶胶质量氧化流动反应器研究了这些燃料中 NACs 的一次排放和光化学老化过程。采用量子化学和随机森林模型定量分析了 NACs 对老化前后棕碳（BrC）光吸收和氧化潜势（OP）的贡献。结果表明：生物质燃烧和煤炭燃烧中，新鲜∑NACs 的排放因子（EFs）分别为 3.6±2.0 和 0.2±0.2 $mg·kg^{-1}$；光化学老化 12 d 后，生物质和煤燃烧的∑NAC 的 EFs 分别增加了 9.2 倍和 8.0 倍，显著增加的 EFs 主要是 4NC、4NP、2M4NP 和 3M4NP。4NC、4M5NC 和 4NG 对初生和老化∑NACs 的光吸收均起主导作用。4NC、4NP、2M4NP 和 3M4NP 在老化过程中提供 NOx 和·OH，NOx 和·OH 促进 4NC、3NSA 和 5NSA 的生成。在生物质燃烧中，4M5NC 和 4NG 的增加和增强了老化气溶胶的光吸收和 OP。在老化过程中，4M5NC 和 4NG 的 EFs 虽然在煤的燃烧过程中有所下降，但它们与·OH 发生光解反应，生成更多吸光的氮中间体，最终分解为醌类，增强了老化气溶胶的 OP。

关键词：生物质和煤燃烧；光化学老化；NACs；光吸收；氧化电位

报告人/墙报展示人简介：

黄沙沙，西安交通大学能源与动力工程学院，2022 级博士研究生。研究方向：大气棕碳气溶胶理化性质、来源解析及其环境健康效应。以第一作者身份在《Science of The Total Environment》《Atmospheric Environment》、发表论文三篇；并在《Atmospheric Chemistryand Physics》、《Environmental Science & Technology》、《Environmental Science & Technology letters》、《Environment International》、《Environmental Pollution》发表多篇论文。

Chemical Composition and Source Characteristics of Nitrophenolics Aerosols in $PM_{2.5}$ during Winter Heavy Pollution Periods in Guanzhong Area

Jiaxue Zhao[1], Qian Zhang[1,*]

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

*zhangqian2018@xauat.edu.cn

In recent years, the air pollution in winter in Guanzhong area is serious and haze occurs frequently. The pollution characteristics and main sources of nitrated aromatic compounds (NACs) in the atmosphere are still unclear. This study employs high-performance liquid chromatography-mass spectrometry (HPLC-MS) to quantify 10 NACs types. By integrating data on inorganic water-soluble ions, gaseous precursors, and meteorological parameters, we analyzed the sources and causes of NACs during heavy pollution periods in winter. Results show average NACs concentrations of 87.1±71.8 ng/m³ in Xi'an, 282.7±162.4 ng/m³ in Baoji, and 146.1±120.3 ng/m³ in Weinan. In $PM_{2.5}$ samples, 4-nitrocatechol was majority of NACs, accounting for 33.6% (Xi'an), 37.4% (Baoji) and 33.4% (Weinan), respectively. This was followed by 4-methyl-5-nitrocatechol. According to the hourly concentration gradient of $PM_{2.5}$, the pollution period was divided. Under different pollution levels, the concentration of NACs in Xi'an, Weinan and Baoji all increased with the increase of $PM_{2.5}$ concentration, and showed different daily variation trends. Source apportionment, utilizing the eigenratio method, identified coal combustion and biomass burning as major NACs sources in $PM_{2.5}$ during the winter of 2019. The results of positive definite matrix decomposition show that in different pollution periods, biomass combustion source and traffic emission source are the main contributors to NACs, followed by secondary oxidation reaction and secondary inorganic salt reaction. This study analyzed and compared the concentration levels and source characteristics of $PM_{2.5}$ NACs under different pollution conditions in Guanzhong region (Xi'an, Baoji and Weinan) in winter, offering scientific insights for developing effective pollution control strategies.

Keywords: Guanzhong area; Nitrophenolic compounds; Composition characteristics; Source analysis

中国西南典型城市 $PM_{2.5}$ 氧化潜势图谱：季节变化，影响因素与来源解析

王金一涛[1]，赵鑫泉[2]，田密[2]，杨复沫，王舜瑶[1*]

[1]上海大学环境与化学工程学院，上海，200444

[2]重庆大学环境与生态学院，重庆，400044

Email: syw@shu.edu.cn

摘要正文：暴露于空气中的细颗粒物会对人体健康产生不利影响。为了确定中国西南地区细颗粒物对该地区脱细胞健康的影响，本研究系统性测定了西南典型特大城市重庆 2015-2016 年 $PM_{2.5}$ 的详细化学成分和不同脱细胞方法(包括 OP^{DTT}、OP^{EPR}、OP^{GSH}、OP^{AA})的氧化潜势(OP)，并分析了不同 OP 与 PM 化学成分之间关系以及来源贡献。在重庆测得的体积归一化氧化潜势(OP_V)高于杭州、厦门、广州、伦敦、米兰和亚特兰大等许多其他城市的报告值。OP_V 在冬季显著高于其他季节。同时，质量归一化氧化潜势(OP_m)的季节变化相对较小。根据解释性机器学习模型(SHAP)分析，过渡金属、多环芳烃(PAHs)等成分是重庆细颗粒物中对产生氧化应激影响的重要组成部分。根据正定矩阵因子分解(PMF)的结果，工业排放是 OP 的最大贡献因子，而燃煤与生物质燃烧对 OP^{DTT}、扬尘源对 OP^{EPR}、二次源对 OP^{GSH} 和 OP^{AA} 也分别有比较高的贡献。根据后向轨迹分析，当地短距离输送气团是该地区 OP 的主要贡献来源，而西南方向的输送气团是工业排放的主要空间来源。本研究为保护公众健康提供了机制见解，并为西南地区未来的城市空气质量调控政策制定提供了理论依据。

关键词：细颗粒物，氧化潜势，过渡金属，多环芳烃，后向轨迹，源解析

报告人简介：

王金一涛，男，2000 年 2 月出生，中共党员，上海大学环境与化学工程学院 2022 级在读硕士研究生。硕士期间主要研究方向为大气气溶胶及其健康效应，曾获全国大学生创新创业大赛铜奖等奖项。

Health benefits and scenario projections of $PM_{2.5}$ and O_3 pollution in Beijing-Tianjin-Hebei, China

Yucong Wang[1],Ruiguang Xu[1 2,*],Boni Pei[1],Yingfan Zhao[1],Hongyu Wang[1],Yifei Zhao[1],Pu Wang[1],Litao Wang[1,2],Qing Wang[1 2],Jingyun Liu[1,2]

(1 School of Energy and Environmental Engineering, Hebei University of Engineering, Handan 056038, China

2 Hebei Key Laboratory of Air Pollution Cause and Impact, Handan 056038, China)

* xuruiguang@hebeu.edu.cn

Abstract: Fine particulate matter ($PM_{2.5}$) and ozone (O_3) have become major air pollutants in China, which are harmful to human health. In this paper, Beijing-Tianjin-Hebei, a key region for air pollution prevention and control in China, was selected as the study area to analyze the characteristics of $PM_{2.5}$ and O_3 concentration changes and their health effects from 2014 to 2023, and to estimate the potential health benefits of realizing different emission reduction standards in 2030. The results showed that: ① The annual average $PM_{2.5}$ concentration in Beijing-Tianjin-Hebei showed a decreasing trend from 2014 to 2023, while the daily maximum 8-h sliding average of O_3 (O_3-8h concentration) showed a fluctuating increasing trend. ② The number of premature deaths and economic losses attributed to $PM_{2.5}$ pollution showed a decreasing trend, while the changes in the number of premature deaths and economic losses attributed to O_3 pollution showed an opposite trend, in which the health risks and economic losses in Beijing and Tianjin were relatively prominent. (iii) If the annual average concentrations of $PM_{2.5}$ and O_3 in 2030 reach the limits of the secondary standards of Ambient Air Quality Standards (GB 3095-2012), the number of premature deaths attributed to $PM_{2.5}$ and O_3 in Beijing, Tianjin and Hebei will decrease by 23.08% and 20.45%, respectively, compared with that in 2023, and with the increase of per capita disposable income year by year, the health and economic losses will be reduced by 41.23×10^8 CNY (95% CI:33.71×10^8 ~48.72×10^8 CNY) and 98.89×10^8 CNY (95% CI:54.14×10^8~142.67×10^8 CNY), respectively; the increase in the number of premature deaths can be further avoided and significant economic benefits can be realized if the concentrations of $PM_{2.5}$ and O_3 are further reduced to higher standards. The study shows that the $PM_{2.5}$ control in Beijing-Tianjin-Hebei has been effective, but the O_3 pollution problem is emphasized, and the number of health deaths and economic losses caused by it are on the rise, and higher target air quality standards should be set in order to effectively improve the health of residents and bring significant economic benefits.

References

[20] Yucong Wang, Ruiguang Xu, Boni Pei, Yingfan Zhao, Hongyu Wang ,Yifei Zhao ,Pu Wang, Litao Wang, Qing Wang, Jingyun Liu, Health benefits and scenario projections of $PM_{2.5}$ and O_3 pollution in Beijing-Tianjin-Hebei, China, Chinese Geographical Science(under review).

墙报展示人简介：（简介内容采用宋体五号字体）

许瑞广，男，河北沧州黄骅人，中国党员，1982 年 4 月出生，博士/博士后，副教授，硕士生导师。长期从事环境观测及环境管理方面的研究工作，先后开展过大气臭氧及灰霾生成机制、大气颗粒物源解析，大气气溶胶数值模拟、城市空气质量管理等领域的研究。近年来主持和作为主要研究人员参与国家自然科学基金及河北省教育厅专项等课题 10 余项，发表学术论文 20 余篇，其中 10 余篇被 SCI 收录。目前担任中国颗粒物学会青年理事，同时是《Science of the Total Environment》、《Journal of the Air & Waste Management Association》、《Aerosol and Air Quality Research》、《Aerosol Science and Engineering》等国际著名期刊审稿人。

航空排放碳烟颗粒微观表面特性及异质凝结增长机理研究

章振中[1,2]，李光泽[2*]，罗伟贤[2],常刘勇[1,2],陈龙飞[1,2]

[1]北京航空航天大学能源与动力学院，北京市昌平区沙河高教园南三街 9 号，102206

[2]杭州市北京航空航天大学国家创新研究院，浙江省杭州市余杭区瓶窑镇双红桥街 166 号，311115

*Email: liguangze@buaa.edu.cn

摘要正文： 航空排放碳烟颗粒影响全球辐射平衡和环境气候变化，航空业的蓬勃发展使得对航空排放碳烟颗粒的研究愈发得到重视[1,2]。碳烟颗粒表面特性复杂，颗粒有机物包覆程度[3]等均会对其异质凝结增长过程产生影响，使得碳烟颗粒的异质凝结增长机理尚不清晰。本文通过环境扫描电子显微镜（ESEM）[4]、拉曼光谱仪（Raman）[5]、透射电子显微镜（TEM）[6]等多种微观表征技术对航空排放碳烟颗粒进行了分析，结合卷积神经网络[7,8]和边缘检测算法[9]自动提取碳烟颗粒形状、大小和纹理及表面特性等，采用主成分分析法[10]选取最能代表其表面特性的参数，构建描述碳烟颗粒微观表面特征的多元特征函数，进一步建立颗粒异质成核模型，并利用 ESEM 对颗粒的异质成核模型进行验证及优化。在此基础上，进一步建立符合真实物理过程的颗粒异质凝结全过程动力学模型，并结合生长管[11,12]实验进行模型的验证与优化。本研究工作可以准确刻画航空排放碳烟颗粒的微观特性，揭示其异质凝结增长机理，为碳烟颗粒的控制及环境影响评估提供科学依据及数据支撑。

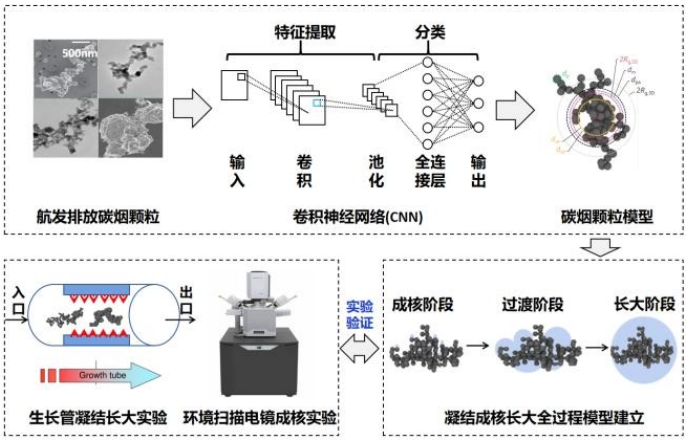


图 1. 航空碳烟颗粒表征与凝结长大特性研究总体思路图

关键词： 航空排放；碳烟颗粒；微观表征；颗粒形貌；异质凝结

参考文献：

[1] Stettler M E, Boies A M, Petzold A, et al. Global civil aviation black carbon emissions[J]. Environmental science & technology, 2013, 47(18): 10397-10404.

[2] Liu X, Elbaz A M, Gong C, et al. Effect of burner geometry on swirl stabilized methane/air flames: A joint LES/OH-PLIF/PIV study[J]. Fuel, 2017, 207: 533-546.

[3] Ess M N, Bertò M, Keller A, et al. Coated soot particles with tunable, well-controlled properties generated in the laboratory with a miniCAST BC and a micro smog chamber[J]. Journal of Aerosol Science, 2021, 157.

[4] Persiantseva N, Popovicheva O, Starik A, et al. Hydrophilicity of soot particles formed in the combustion chamber of a jet engine[J]. Technical Physics Letters, 2000, 26: 829-831.

[5] Beyssac O, Goffé B, Petitet J-P, et al. On the characterization of disordered and heterogeneous carbonaceous materials by Raman spectroscopy[J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2003, 59(10): 2267-2276.

[6] Yehliu K, Vander Wal R L, Boehman A L. Development of an HRTEM image analysis method to quantify carbon nanostructure[J]. Combustion and flame, 2011, 158(9): 1837-1851.

[7] Sipkens T A, Frei M, Baldelli A, et al. Characterizing soot in TEM images using a convolutional neural network[J].

Powder Technology, 2021, 387: 313-324.

[8] Sipkens T A, Boies A, Corbin J C, et al. Overview of methods to characterize the mass, size, and morphology of soot[J]. Journal of Aerosol Science, 2023, 173: 106211.

[9] 周阳, 王凤, 马逢清, 等 基于改进边缘检测算法的图像处理技术应用[J]. 工业控制计算机, 2013(3): 3.

[10] 白雪梅, 赵松山. 对主成分分析综合评价方法若干问题的探讨[J]. 统计研究, 1995.

[11] Tammaro M, Di Natale F, Salluzzo A, et al. Heterogeneous condensation of submicron particles in a growth tube[J]. Chemical Engineering Science, 2012, 74: 124-134.

[12] Yu Y, Lu Y, Sang C, et al. Growth characteristics of submicron particles by water vapor condensation in the multi-section growth tube[J]. Powder Technology, 2024, 440: 119797.

报告人简介：

北京航空航天大学，博士。目前主要从事研究碳烟颗粒类型对颗粒凝结长大全过程的影响，并建立符合真实物理过程的动力学模型。

中国北方典型城市 PM2.5 中重金属的特征及健康风险评估

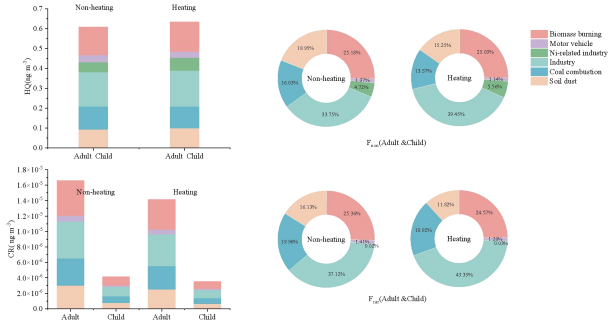
邓心[1]（报告作者），韩燕[1]，车汉雄[1]，周佳维[1]，包职贰[1]，孟令硕[1]，龙鑫[1]，张蜀敏，杨复沫，陈阳[1]*

中国科学院重庆绿色智能技术研究院，重庆，400714

*陈阳，chenyang@cigit.ac.cn，18623092682

摘要正文：大气 $PM_{2.5}$ 中的重金属元素对人体的健康受到越来越广泛的关注。本研究选取中原城市群的核心城市开封，采集了非采暖期和采暖期的 $PM_{2.5}$ 样品，并测量了其中 26 种元素。通过元素浓度分析及富集因子（EF）分析非采暖期和采暖期结果表明开封城市大气中的 As、Cr 污染需要引起重视，随着污染程度的加重，Mn、Cu、Zn、As、Pb 的富集因子逐渐增加，表明其受人为源的贡献进一步加强。利用正定因子矩阵（PMF）模型结合相关分析进行了重金属的来源解析，并运用健康风险模型进行风险评价。分析结果显示，非采暖期和采暖期的非致癌影响（HQ＜1）不会对人体造成累积的非致癌健康效应；在致癌影响方面，As 和 Cr 对儿童和成人的致癌影响（ELCR＞1×10^{-6}），说明开封市 $PM_{2.5}$ 暴露下 As 和 Cr 的致癌风险不容忽视。工业源是开封市主要的致癌风险来源，从非采暖期进入采暖期，工业源致癌风险由 37.12%上升至 43.39%。这一结果可能是工业源中 As、Mn、Pb、Ni 等重金属元素占比高有关。本研究结果对大气治理中精准管控污染源降低人体健康风险提供了参考依据。

关键词：$PM_{2.5}$ 、重金属、源解析、健康风险



参考文献

[1] Xie, J., L. D. Jin, J. D. Cui, X. D. Luo, J. D. Li, G. D. Zhang & X. P. Li. Health risk-oriented source apportionment of PM2.5-associated trace metals. Environmental Pollution,2020, 262, 114655.

[2] Chen, Z., D. Chen, W. Wen, Y. Zhuang, M.-P. Kwan, B. Chen, B. Zhao, L. Yang, B. Gao, R. Li & B. Xu . Evaluating the "2+26" regional strategy for air quality improvement during two air pollution alerts in Beijing: variations in PM2.5 concentrations, source apportionment, and the relative contribution of local emission and regional transport. Atmospheric Chemistry and Physics, 2019, 19, 6879-6891.

[3] Gao, J., K. Wang, Y. Wang, S. Liu, C. Zhu, J. Hao, H. Liu, S. Hua & H. Tian. Temporal-spatial characteristics and source apportionment of PM2.5 as well as its associated chemical species in the Beijing-Tianjin-Hebei region of China. Environmental Pollution, 2018 , 233, 714-724.

[4] Tao, J., L. Zhang, J. Cao & R. Zhang . A review of current knowledge concerning PM2.5 chemical composition, aerosol optical properties and their relationships across China. Atmospheric Chemistry and Physics, 2017, 17, 9485-9518.

[5] Yang, L. X., S. H. Cheng, X. F. Wang, W. Nie, P. J. Xu, X. M. Gao, C. Yuan & W. X. Wang . Source identification and health impact of PM2.5 in a heavily polluted urban atmosphere in China. Atmospheric Environment, 2013, 75, 265-269.

西安市大气$PM_{2.5}$氧化潜势的变化特征及健康效应

张李静[1]，刘萍萍[1,*]，杨小桃[2]，闫宏宇[1]

[1]西安交通大学能动学院环境工程系，陕西西安，710049

[2]中南安全环境技术研究院，湖北武汉，430061

*Email: liupingping@xjtu.edu.cn

摘要正文：大气细颗粒物$PM_{2.5}$氧化潜势（OP），已被认为是$PM_{2.5}$的潜在健康风险指标之一，代表其诱导氧化应激和造成不良健康影响的能力。本研究采集了2016年6月至2017年5月、2018年6月至2019年5月、2020年6月至2021年5月3个时段西安市大气$PM_{2.5}$样品，采用2', 7'-二氯二氢荧光素（DCFH）法测定了$PM_{2.5}$样品活性氧（ROS）水平，研究了西安市大气$PM_{2.5}$ OP的变化特征，并分析了可溶性金属和气象因素对大气氧化性质的影响。结果表明，研究时段西安市$PM_{2.5}$的ROS水平逐年下降，年均值分别为16.28±2.43、14.41±2.59、13.77±2.62 nM $H_2O_2 \cdot m^{-3}$，表明西安大气$PM_{2.5}$诱导氧化应激的能力下降。年内$PM_{2.5}$ ROS活性在冬夏季较高，春秋季较低，其变化规律可归因于西安夏季金属溶解度较高、冬季大气$PM_{2.5}$严重污染。$PM_{2.5}$ OP与水溶态Fe、Cu和Mn含量呈显著正相关（$p<0.01$），表明水溶性金属的溶解度对大气$PM_{2.5}$ OP有重要影响。此外，NO_3^-、SO_4^{2-}、O_3浓度、湿度和风速也会影响大气$PM_{2.5}$ OP（$R=0.20\sim0.72$，$p<0.05$）。呼吸系统沉积剂量模型显示，西安大气$PM_{2.5}$ OP在呼吸系统的沉积量依次为头部气道>气管支气管>肺泡，呈现出冬夏高、春秋低的季节变化特征。

关键词：$PM_{2.5}$；氧化潜势；影响因素；健康效应

参考文献

[1] **Shao L, Hu Y, Shen R, et al. Seasonal variation of particle-induced oxidative potential of airborne particulate matter in Beijing [J]. Science of the Total Environment, 2017, 579: 1152-1160.**

[2] **Fang T, Guo H, Zeng L, et al. Highly Acidic Ambient Particles, Soluble Metals, and Oxidative Potential: A Link between Sulfate and Aerosol Toxicity [J]. Environmental Science & Technology, 2017, 51(5): 2611-2620.**

[3] **Pietrogrande M C, Dalpiaz C, Dell'Anna R, et al. Chemical composition and oxidative potential of atmospheric coarse particles at an industrial and urban background site in the alpine region of northern Italy [J]. Atmospheric Environment, 2018, 191: 340-350.**

[4] **See S W, Wang Y, Balasubramanian R. Contrasting reactive oxygen species and transition metal concentrations in combustion aerosols [J]. Environmental Research, 2007, 103(3): 317-324.**

[1] 报告人/墙报展示人简介：

张李静，女，2000 年 2 月 13 日生，西安交通大学能源与动力工程学院环境工程专业硕士一年级。

关中平原大气颗粒态汞特征、来源、健康风险评价及沙尘暴对其影响

李昂[1]，李小飞[1*]，张蕊[1]，曹军骥[2]

[1]陕西科技大学，陕西西安，710021

[2]中国科学院大气物理研究所，北京，100029

*Email:lixiaofei@ieecas.cn

摘要正文：关中平原在陕西省工业和经济发展中处于关键地位，为了解关中平原 PBM 的浓度水平、空间分布和季节变化及沙尘暴对其影响，我们在西安（XN）、太白（TB）和秦岭（QL）三个地点采集 $PM_{2.5}$ 样品，分别代表城市、农村和偏远地区。研究结果表明，冬季 PBM 平均浓度高于夏季，粉尘的输入导致气溶胶中 PBM、Ca^{2+}、Na^{+}、Mg^{+}、SO_4^{2-}和金属元素的浓度显著增加，扬尘对西安市大气 PBM 具有较强的富集作用，人为汞排放和长距离迁移促进了 PBM 浓度的上升。正矩阵分解源分析结果表明，沙尘期矿物粉尘对 PBM 的贡献率明显高于非沙尘期。煤炭燃烧、交通排放和生物质燃烧是 PBM 的重要来源。我们计算了金属的风险指数 Er（572.78~1653.33）和积累指数 I（2.47~ 4.78），表明大气中 PBM 对生态环境具有较强的污染程度，大气 PBM 对儿童（8.48×10^{-2}）的非致癌性健康风险大于成人（1.01×10^{-2}）。在大气汞污染治理过程中，我们需要更加关注儿童健康。

关键词：颗粒态汞（PBM）；干沉降；潜在来源；健康风险；关中平原

报告人简介：

李昂，目前就读于陕西科技大学环境科学与工程专业，研究方向为大气环境中的微塑料。

广东沿海地区棕碳气溶胶的光学特性、化学成分和潜在来源

薛亚未[1]，高媛[1,*]

[1]北京师范大学珠海校区，珠海，519000

[*]北京师范大学珠海校区，珠海，519000

*Email: yuan.gao@mail.bnu.edu.cn

摘要正文：大气中的棕碳气溶胶在紫外-可见光范围内具有明显的吸光性，对光化学和气候具有重要影响。本研究的大气滤膜样品采样自中山大学珠海校区（近郊区）和珠海市万山岛（典型海岛），通过检测紫外-可见光吸光度以及三维荧光光谱（EEM），对该地区大气PM2.5中的水溶性和甲醇溶性有机物的吸光性、潜在来源以及主要棕碳化学成分的含量进行分析，发现在365nm处的吸光度在0.08-4.36Mm^{-1}，中山大学珠海校区AAE的平均值为6.29，万山岛地区为5.10。 通过EEM分析发现该地区含有芳香族蛋白（如色氨酸、酪氨酸）、富里酸及类腐殖质类物质。

关键词：吸光度；棕碳；荧光成分；源解析

报告人/墙报展示人简介：

薛亚未，北京师范大学珠海校区硕士研究生，主要研究方向为沿海地区气溶胶中的棕碳（BrC）。我的研究重点在于分析棕碳的吸光特性及相关物质在大气中的演化，尤其关注其在沿海地区气候和环境中的作用。

沈阳工业区夏季 VOCs 组成特征及其对二次污染形成的贡献

关璐[1]，苏枞枞[2]，库盈盈[3]，胡建林[4]，于兴娜[3,*]

1. 国防科技大学气象海洋学院，中国气象局高影响天气重点开放实验室，长沙，410000

2. 辽宁省沈阳生态环境监测中心，沈阳，110013

3. 南京信息工程大学中国气象局气溶胶-云-降水重点开放实验室，南京，210044

4. 南京信息工程大学环境科学与工程学院，江苏省大气环境监测与污染控制高技术研究重点实验室，南京，210044

*Email: xnyu@nuist.edu.cn

摘要正文：利用 2019 年和 2020 年夏季沈阳市工业区大气挥发性有机物(VOCs)的观测数据，研究沈阳市夏季工业区大气 VOCs 的组成特征并初步判断其来源，并利用最大增量反应活性(MIR)和气溶胶生成系数(FAC)法分别估算该地大气 VOCs 的臭氧生成潜势(OFP)及二次有机气溶胶生成潜势(AFP)。结果表明，观测期间沈阳市工业区ρ(总 VOCs)平均值为 41. 66 μg·m^{-3}，烷烃、烯烃、芳香烃和乙炔分别占总 VOCs 浓度的 48. 50%、14. 08%、15. 37%和 22. 05%。浓度排名前 10 的物种累计占总 VOCs 浓度的 69.25%，其中大部分为 C2～C5 的烷烃，还包括乙炔、乙烯和部分芳香烃。总 VOCs 整体上呈现出早晚浓度高、中午浓度低的日变化特征，峰值分别出现在 06: 00 和 22: 00，11: 00～16: 00 处于较低水平。由甲苯/苯(T/B)和异戊烷/正戊烷的比值判断工业区主要受机动车尾气排放、溶剂使用、燃烧源和 LPG/NG 的影响。工业区大气 VOCs 的总 AFP 为 41. 43×10^{-2} μg·m^{-3}，其中芳香烃的贡献最大; 总 OFP 贡献值为 117. 59 μg·m^{-3}，其中烯烃对 OFP 的贡献最大。

关键词：沈阳；挥发性有机物(VOCs)；工业区；臭氧生成潜势(OFP)；二次有机气溶胶生成潜势(AFP)

参考文献

[1] Zhou M M, Jiang W, Gao W D, *et al*. A high spatiotemporal resolution anthropogenic VOC emission inventory for Qingdao City in 2016 and its ozone formation potential analysis[J]. Process Safety and Environmental Protection, 2020, **139**: 147-160.

[2] 牛月圆, 刘倬诚, 李如梅, 等. 阳泉市区夏季挥发性有机物污染特征、来源解析及其环境影响[J]. 环境科学, 2020, **41**(7): 3066-3075.

[3] Hui L R, Liu X G, Tan Q W, *et al*. VOC characteristics, sources and contributions to SOA formation during haze events in Wuhan, Central China[J]. Science of the Total Environment, 2019, **650**(2): 2624-2639.

[4] Liu Y, Shao M, Fu L L, *et al*. Source profiles of volatile organic compounds (VOCs) measured in China: Part I[J]. Atmospheric Environment, 2008, **42**(25): 6247-6260.

[5] 刘齐, 卢星林, 曾鹏, 等. 柳州市春季大气挥发性有机物污染特征及源解析[J]. 环境科学, 2021, **42**(1): 65-74.

[6] 孙瑞, 邓国庆. 徐州市城区大气挥发性有机物的污染特征和臭氧生成潜势研究[J]. 环境科学与管理, 2022, **47**(3): 130-134.

[7] 景盛翱, 高雅琴, 沈建东, 等. 杭州市城区挥发性有机物污染特征及反应活性[J]. 环境科学, 2020, **41**(12): 5306-5315.

[8] 高亢, 章慧, 刘梦迪, 等. 芜湖市大气挥发性有机物污染特征、大气反应活性及源解析[J]. 环境科学, 2020, **41**(11): 4885-4894.

[9] 乔月珍, 陈凤, 李慧鹏, 等. 连云港不同功能区挥发性有机物污染特征及臭氧生成潜势[J]. 环境科学, 2020, **41**(2): 630-637.

[10] 于广河, 林理量, 夏士勇, 等. 深圳市工业区 VOCs 污染特征与臭氧生成敏感性[J]. 中国环境科学, 2022, **42**(5): 1994-2001.

[11] 冯云霞. 石化工业区 VOCs 排放特征及其对二次污染形成的贡献[J]. 石油炼制与化工, 2022, **53**(6): 120-127.

[12] 王男. 沈阳市某化工园区环境空气中挥发性有机物污染特征及来源分析[J]. 辽宁化工, 2022, **51**(2): 239-243.

[13] 曹梦瑶, 林煜棋, 章炎麟. 南京工业区秋季大气挥发性有机物污染特征及来源解析[J]. 环境科学, 2020, **41**(6): 2565-2576.

[14] 金丹. 上海城郊夏季大气 VOCs 在臭氧生成中的作用[J]. 环境科学, 2022, **43**(1): 132-139.

[15] 武彩虹. 广州城市地区大气挥发性有机物(VOCs)反应活性贡献研究[D]. 广州: 暨南大学, 2021.

[16] 颜敏, 黄晓波, 张文忠, 等. 深圳大气挥发性有机物污染特征及臭氧生成潜势[J]. 环境科学与技术, 2021, **44**(2): 57-65.

[17] 宋锴, 俞颖, 陆思华, 等. 珠海市秋季大气挥发性有机物变化趋势和大气化学反应活性[J]. 环境科学学报, 2020, **40**(7): 2323-2332.

[18] 罗瑞雪, 刘保双, 梁丹妮, 等. 天津市郊夏季的臭氧变化特征及其前体物 VOCs 的来源解析[J]. 环境科学, 2021, **42**(1): 75-87.

[19] 梁思远, 王帅, 高松, 等. 北京市城区挥发性有机物污染特征及其对臭氧影响分析[J]. 中国环境监测, 2021, **37**(6): 21-30.

[20] 杜寒冰, 王男, 任万辉, 等. 沈阳市挥发性有机物污染特征及反应活性[J]. 环境科学, 2021, **42**(12): 5656-5662.

[21] 刘雅婷, 彭跃, 白志鹏, 等. 沈阳市大气挥发性有机物(VOCs)污染特征[J]. 环境科学, 2011, **32**(9): 2777-2785.

[22] 王男, 刘闽, 林宏, 等. 沈阳市环境空气中挥发性有机物污染特征及来源解析[J]. 中国环境监测, 2021, **37**(5): 41-52.

[23] Hallquist M, Wenger J C, Baltensperger U, *et al*. The formation, properties and impact of secondary organic aerosol: current and emerging issues[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2009, **9**(14): 5155-5236.

[24] Carlton A G, Wiedinmyer C, Kroll J H. A review of secondary organic aerosol(SOA) formation from isoprene[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2009, **9**(14): 4987-5005.

[25] Grosjean D. In situ organic aerosol formation during a smog episode: estimated production and chemical functionality[J]. Atmospheric Environment, Part A, General Topics, 1992, **26**(6): 953-963.

[26] Grosjean D, Seinfeld J H. Parameterization of the formation potential of secondary organic aerosols[J]. Atmospheric Environment (1967), 1989, **23**(8): 1733-1747.

[27] Carter W P L. Updated maximum incremental reactivity scale and hydrocarbon bin reactivities for regulatory applications[M]. California: California Air Resources Board Contract, 2010.

[28] 徐晨曦, 陈军辉, 姜涛, 等. 成都市区夏季大气挥发性有机物污染特征及来源解析[J]. 环境科学, 2020, **41**(12): 5316-5324.

[29] 库盈盈, 任万辉, 苏枞枞, 等. 沈阳市不同功能区挥发性有机物分布特征及臭氧生成潜势[J]. 环境科学, 2021, **42**(11): 5201-5209.

[30] 甘浩, 徐勃, 张向炎, 等. 淄博市化工园区夏季环境 VOCs 污染特征及健康风险评价[J]. 环境科学研究, 2022, **35**(1): 20-29.

[31] 盛涛, 陈筱佳, 高松, 等. 上海某石化园区周边区域 VOCs 污染特征及健康风险[J]. 环境科学, 2018, **39**(11): 4901-4908.

[32] 徐慧, 邓君俊, 邢振雨, 等. 厦门不同功能区 VOCs 的污染特征及健康风险评价[J]. 环境科学学报, 2015, **35**(9): 2701-2709.

[33] Song Y, Shao M, Liu Y, *et al.* Source apportionment of ambient volatile organic compounds in Beijing[J]. Environmental Science and Technology, 2007, **41**(12): 4348-4353.

[34] 李凯, 潘宁, 梅如波, 等. 泰安市大气挥发性有机物污染特征及来源解析[J]. 环境化学, 2022, **41**(2): 482-490.

[35] 盛涛, 陈筱佳, 高松, 等. VOCs 比值法的应用研究进展[J]. 环境科学与技术, 2018, **41**(12): 122-130.

[36] 高千卓. 运城市大气挥发性有机物特征及来源研究[D]. 北京: 华北电力大学, 2021.

[37] 叶露, 邰菁菁, 俞华明. 汽车工业区大气挥发性有机物(VOCs)变化特征及来源解析[J]. 环境科学, 2021, **42**(2): 624-633.

[38] 段玉森. 基于 SOA 和 O_3 生成潜势的上海市 VOCs 优控物种研究[J]. 中国环境监测, 2020, **36**(2): 138-147.

[39] Ling Z H, Guo H. Contribution of VOC sources to photochemical ozone formation and its control policy implication in Hong Kong[J]. Environmental Science and Policy, 2014, **38**: 180-191.

[40] Guo H, Wang T, Louie P K K. Source apportionment of ambient non-methane hydrocarbons in Hong Kong: application of a principal component analysis/absolute principal component scores (PCA/APCS) receptor model[J]. Environmental Pollution, 2004, **129**(3): 489-498.

[41] 马陈煜, 王章玮, 刘建军, 等. 银川都市圈大气挥发性有机物的污染特征及臭氧生成潜势初步分析[J]. 环境化学, 2022, **41**(3): 801-812.

Composition Characteristics of Volatile Organic Compounds and Associated Contributions to Secondary Pollution in Shenyang Industrial Area in Summer

Lu Guan[1], Cong-cong Su[2], Ying-ying Ku[3], Jian-lin Hu[4], Xing-na Yu[3,*]

1 High Impact Weather Key Laboratory of China Meteorological Administration，College of Meteorology and Oceanography，National University of Defense Technology, Changsha 410000,China

2 Shenyang Ecological and Environmental Monitoring Center of Liaoning Province, Shenyang 110013, China

3 Key Laboratory for Aerosol-Cloud-Precipitation of China Meteorological Administration, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China

4 Jiangsu Key Laboratory of High Technology for Atmospheric Environment Monitoring and Pollution Control, School of Environmental Science and Engineering, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China

* xnyu@nuist.edu.cn

Based on the observation data of volatile organic compounds (VOCs) in the industrial area of Shenyang during summer of 2019 and 2020, the composition characteristics and sources of VOCs were preliminarily studied. The ozone formation potential (OFP) and aerosol formation potential (AFP) of VOCs were also estimated by max incremental reactivity (MIR) and aerosol formation coefficient (FAC) methods, respectively. The results showed that the average concentration of VOCs was 41.66 $\mu g \cdot m^{-3}$, and the proportions of alkanes, olefins, aromatics and acetylene were 48.50%, 14.08%, 15.37%, and 22.05%, respectively. The top ten species of VOCs were primarily C2-C5 alkanes, also included acetylene, ethylene and some aromatics, accounting for 69.25% of the total VOCs. VOCs showed the obvious diurnal variation characteristics with high concentration in the morning and evening (at 06:00 and 22:00) and low concentration in the noon (11:00-16:00). According to the value of toluene/benzene (T/B) and isopentane/n-pentane, the atmosphere of industrial area was mainly affected by vehicle exhaust emissions, solvent use, combustion sources and LPG/NG. The total AFP of VOCs was up to 41.43×10^{-2} $\mu g \cdot m^{-3}$, and the aromatics was the largest contributor. The total OFP of VOCs reached 117.59 $\mu g \cdot m^{-3}$, in which the alkene contributed the highest.

Keywords: Shenyang; volatile organic compounds (VOCs); industrial area; ozone formation potential (OFP); aerosol formation potential (AFP)

References

[1] Zhou M M, Jiang W, Gao W D, *et al*. A high spatiotemporal resolution anthropogenic VOC emission inventory for Qingdao City in 2016 and its ozone formation potential analysis[J]. Process Safety and Environmental Protection, 2020, **139**: 147-160.

[2] Niu Y Y, Liu Z C, Li R M, *et al*. Characteristics, source apportionment, and environmental impact of volatile organic compounds in summer in Yangquan[J]. Environmental Science, 2020, **41**(7): 3066-3075.

[3] Hui L R, Liu X G, Tan Q W, *et al*. VOC characteristics, sources and contributions to SOA formation during haze events in Wuhan, Central China[J]. Science of the Total Environment, 2019, **650**(2): 2624-2639.

[4] Liu Y, Shao M, Fu L L, *et al*. Source profiles of volatile organic compounds (VOCs) measured in China: Part I[J]. Atmospheric Environment, 2008, **42**(25): 6247-6260.

[5] Liu Q, Lu X L, Zeng P, *et al*. Characteristics and source apportionment of ambient VOCs in spring in Liuzhou[J]. Environmental Science, 2021, **42**(1): 65-74.

[6] Sun R, Deng G Q. Pollution characteristics of atmospheric volatile organic compounds and ozone formation potential in Xuzhou city[J]. Environmental Science and management, 2022, **47**(3): 130-134.

[7] Jing S A, Gao Y Q, Shen J D, *et al*. Characteristics and reactivity of ambient VOCs in urban Hangzhou, China[J]. Environmental Science, 2020, **41**(12): 5306-5315.

[8] Gao K, Zhang H, Liu M D, *et al*. Characteristics, atmospheric reactivity， and source apportionment of ambient volatile organic compounds in Wuhu[J]. Environmental Science, 2020, **41**(11): 4885-4894.

[9] Qiao Y Z, Chen F, Li H P, *et al*. Pollution characteristics and ozone formation potential of ambient volatile organic compounds in summer and autumn in different functional zones of Lianyungang, China[J]. Environmental Science, 2020, **41**(2): 630-637.

[10] Yu G H, Lin L L, Xia S Y, *et al*. The characteristics of VOCs and ozone formation sensitivity in a typical industrial area in Shenzhen[J]. China Environmental Science, 2022, **42**(5): 1994-2001.

[11] Feng Y X. Characteristics of VOCs emission from a petrochemical industry area and associated contributions to secondary pollution[J]. Petroleum Processing and Petrochemicals, 2022, **53**(6): 120-127.

[12] Wang N. Pollution characteristics and source analysis of volatile organic compounds in ambient air of a chemical industrial park in Shenyang city[J]. Liaoning Chemical Industry, 2022, **51**(2): 239-243.

[13] Cao M Y, Lin Y Q, Zhang Y L. Characteristics and source apportionment of atmospheric VOCs in the Nanjing industrial area in autumn[J]. Environmental Science, 2020, **41**(6): 2565-2576.

[14] Jin D. Role of atmospheric VOCs in ozone formation in summer in Shanghai suburb[J]. Environmental Science, 2022, **43**(1): 132-139.

[15] Wu C H. Study on the contribution of atmospheric volatile organic compounds (VOCs) to the reactive activity of urban areas in Guangzhou[D]. Jinan University, 2021.

[16] Yan M, Huang X B, Zhang W Z, *et al*. Pollution characteristics and ozone formation potential of ambient volatile organic compounds in Shenzhen[J]. Environmental Science and Technology, 2021, **44**(2): 57-65.

[17] Song K, Yu Y, Lu S H, *et al*. Variation and reactivity of ambient volatile organic compounds (VOCs) in autumn of Zhuhai[J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2020, **40**(7): 2323-2332.

[18] Luo R X, Liu B S, Liang D N, *et al*. Characteristics of ozone and source apportionment of the precursor VOCs in Tianjin suburbs in summer[J]. Environmental Science, 2021, **42**(1): 75-87.

[19] Liang S Y, Wang S, Gao S, *et al*. Characteristics of volatile organic compounds and its impact on O_3 formation in Beijing urban area[J]. Environmental Monitoring in China, 2021, **37**(6): 21-30.

[20] Du H B, Wang N, Ren W H, *et al*. Pollution characteristics and reactivity of volatile organic compounds in Shenyang[J]. Environmental Science, 2021, **42**(12): 5656-5662.

[21] Liu Y T, Peng Yue, Bai Z P, *et al*. Characterization of atmospheric volatile organic compounds in Shenyang, China[J]. Environmental Science, 2011, **32**(9): 2777-2785.

[22] Wang N, Liu M, Lin H, *et al*. Pollution characteristic and source apportionment of VOCs in Shenyang[J]. Environmental Monitoring in China, 2021, **37**(5): 41-52.

[23] Hallquist M, Wenger J C, Baltensperger U, *et al*. The formation, properties and impact of secondary organic aerosol: current and emerging issues[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2009, **9**(14): 5155-5236.

[24] Carlton A G, Wiedinmyer C, Kroll J H. A review of secondary organic aerosol(SOA) formation from isoprene[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2009, **9**(14): 4987-5005.

[25] Grosjean D. In situ organic aerosol formation during a smog episode: estimated production and chemical functionality[J]. Atmospheric Environment, Part A, General Topics, 1992, **26**(6): 953-963.

[26] Grosjean D, Seinfeld J H. Parameterization of the formation potential of secondary organic aerosols[J]. Atmospheric Environment (1967), 1989, **23**(8): 1733-1747.

[27] Carter W P L. Updated maximum incremental reactivity scale and hydrocarbon bin reactivities for regulatory applications[M]. California: California Air Resources Board Contract, 2010.

[28] Xu C X, Chen J H, Jiang T, *et al*. Characteristics and sources of atmospheric volatile organic compounds pollution in summer in Chengdu[J]. Environmental Science, 2020, **41**(12): 5316-5324.

[29] Ku Y Y, Ren W H, Su C C, *et al*. Pollution characteristics and ozone formation potential of ambient VOCs in different functional zones of Shenyang, China[J]. Environmental Science, 2021, **42**(11): 5201-5209.

[30] Gan H, Xu B, Zhang X Y, *et al*. Characteristics and health risk assessment of atmospheric VOCs in a chemical industrial park of Zibo in summer[J]. Research of Environmental Sciences, 2022, **35**(1): 20-29.

[31] Sheng T, Chen X J, Gao S, *et al.* Pollution characteristics and health risk assessment of VOCs in areas surrounding a petrochemical park in Shanghai[J]. Environmental Science, 2018, **39**(11): 4901-4908.

[32] Xu H, Deng J J, Xing Z Y, *et al.* Pollution characteristics and health risk assessment of VOCs in different functional zones of Xiamen[J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2015, **35**(9): 2701-2709.

[33] Song Y, Shao M, Liu Y, *et al.* Source apportionment of ambient volatile organic compounds in Beijing[J]. Environmental Science and Technology, 2007, **41**(12): 4348-4353.

[34] Li K, Pan N, Mei R B, *et al.* Characteristics and source apportionment of ambient volatile organic compounds in Taian[J]. Environmental Chemistry, 2022, **41**(2): 482-490.

[35] Sheng T, Chen X J, Gao S, *et al*. Progress in the research of application of VOCs ratio method[J]. Environmental Science and Technology, 2018, **41**(12): 122-130.

[36] Gao Q Z. Characteristics and sources of atmospheric volatile organic compounds in Yuncheng City[D]. North China Electric Power University, 2021.

[37] Ye L, Tai J J, Yu H M. Characteristics and source apportionment of volatile organic compounds (VOCs) in the automobile industrial park of Shanghai[J]. Environmental Science, 2021, **42**(2): 624-633.

[38] Duan Y S. Study on the priority species of VOCs based on SOA and O_3 formation potential[J]. Environmental Monitoring in China, 2020, **36**(2): 138-147.

[39] Ling Z H, Guo H. Contribution of VOC sources to photochemical ozone formation and its control policy implication in Hong Kong[J]. Environmental Science and Policy, 2014, **38**: 180-191.

[40] Guo H, Wang T, Louie P K K. Source apportionment of ambient non-methane hydrocarbons in Hong Kong: application of a principal component analysis/absolute principal component scores (PCA/APCS) receptor model[J]. Environmental Pollution, 2004, **129**(3): 489-498.

[41] Ma C H, Wang Z W, Liu J J, *et al*. Preliminary analysis of pollution characteristics of ambient volatile organic compounds and ozone formation potential in Yinchuan[J]. Environmental Chemistry, 2022, **41**(3): 801-812.

燃烧状态与光老化对 VOCs 排放及其人体健康风险的影响

陈智文[1]，孙健[1,*]

[1]西安交通大学能动学院环境工程系，陕西西安，710049

*Email: sunjian0306@xjtu.edu.cn

摘要正文：挥发性有机物（Volatile Organic Compounds, VOCs）是大气污染物的重要组成部分，对大气环境危害较大，人体暴露于毒性 VOCs 中也会对健康产生潜在危害。其排放源广泛，包括自然过程和人为活动。燃烧过程，尤其是不完全燃烧，是 VOCs 排放的主要人为排放源之一。此外，光老化作用也会影响 VOCs 的生成和排放。本研究旨在探讨燃烧状态与光老化下 VOCs 的排放特性，并评估其人体健康风险。本研究使用烟煤、生物质、20%型煤作为燃料，在相同燃烧条件下采集烟气，测定了 38 种 VOCs 的浓度，采用美国 EPA 健康风险评价模型进行健康风险评估。结果表明，烟煤与 20%型煤在燃烧过程中 TVOC 浓度呈下降趋势，生物质在燃烧过程中 TVOC 浓度呈上升趋势。TVOC 浓度与其人体健康风险的变化趋势大致相同，但存在差异。光老化可以降低 TVOC 浓度和其人体健康风险。健康风险评估显示，所有燃烧过程均存在较大非致癌风险（HQ＞30），1,2,4-三氯苯、四氯乙烯、三氯乙烯、萘和苯为主要贡献者。同时均存在明显的癌症威胁（ILCR＞10^{-4}），四氯乙烯、三氯乙烯、氯乙烯、乙苯和苯为主要贡献者。

关键词：VOCs；燃烧状态；光老化；健康风险；

参考文献

[1] **Yurdakul S, Civan M, Kuntasal Z, et al. Temporal variations of VOC concentrations in Bursa atmosphere[J]. Atmospheric Pollution Research, 2018, 9(2): 189-206.**

[2] **Li C, Li Q, Tong D, et al. Environmental impact and health risk assessment of volatile organic compound emissions during different seasons in Beijing[J]. Journal of Environmental Sciences, 2020, 93(07): 1-12.**

[3] **Pinthong N, Thepanondh S, Kondo A. Source identification of VOCs and their environmental health risk in a petrochemical industrial area[J]. Aerosol and Air Quality Research, 2022, 22(2): 210064.**

[4] **Hui L, Liu X, Tan Q, et al. Characteristics, source apportionment and contribution of VOCs to ozone formation in Wuhan, Central China[J]. Atmospheric Environment, 2018, 192: 55-71.**

[5] **Huang XF, Zhang B, Xia SY, et al. Sources of oxygenated volatile organic compounds (OVOCs) in urban atmospheres in North and South China. Environment Pollution. 2020; 261: 114152.**

报告人/墙报展示人简介：

陈智文，男，2000 年 10 月 12 日生，西安交通大学能源与动力工程学院环境工程专业硕士二年级。

TAPS 燃烧室慢车工况排放碳烟颗粒的微观形貌与纳米结构特性

纪杰 [1,2]，陈龙飞 [1,2]，李光泽 [2]，武海泉 [1,2]，王新宇 [1,2]，常刘勇 [2,*]

[1] 北京航空航天大学能源与动力工程学院，北京市昌平区沙河高教园南三街 9 号，102206

[2] 北京航空航天大学中法航空学院，浙江省杭州市余杭区瓶窑镇双红桥街 166 号，311115

*Email: changliuyong@buaa.edu.cn

摘要正文：飞机起降过程中地面滑行时间最长，达26分钟，该过程是机场主要人为颗粒污染排放源，影响着机场附近的环境与人类健康。双环预混（TAPS）燃烧室由于极低的污染物排放水平在当前民航飞机中广泛应用[1]。飞机在地面滑行过程中，燃烧室处于慢车工况，主燃级关闭，仅预燃级工作，此时为富燃扩散燃烧方式，会产生较多的碳烟颗粒，进而严重影响机场区域环境[2]。为揭示慢车工况下TAPS燃烧室的碳烟排放特性，本文采用扫描电子显微镜（SEM）、高分辨透射电子显微镜（HRTEM）对慢车工况下的碳烟颗粒微观形貌进行了研究，与巡航工况下碳烟形貌进行了对比，分析了预燃级当量比对碳烟颗粒结构特性的影响。SEM结果表明：排放的碳烟颗粒中90%以上的碳烟颗粒被非碳成分包覆，慢车工况下颗粒数目、颗粒被非碳成分包覆程度远高于巡航工况，而石墨化程度远低于巡航工况；此外，当量比对慢车工况下碳烟形貌有显著影响，具体为：包覆程度随着当量比接近1而逐渐减少。HRTEM结果表明：随着预燃级接近当量燃烧，基元颗粒直径逐渐减小，内部微晶长度增大，条纹弯曲程度减小，表明碳烟颗粒的纳米结构变得更加有序和石墨化，导致较低的氧化活性。因此，通过改变TAPS燃烧室预燃级的当量比对于减少慢车工况下的碳烟排放、降低碳烟活性，进而减少对环境的影响具有重要意义。

关键词：双环预混燃烧室；碳烟颗粒纳米结构；电子显微镜；当量比

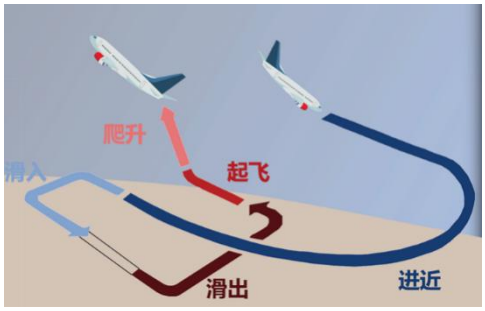


Fig. 1 Landing Take-off cycle

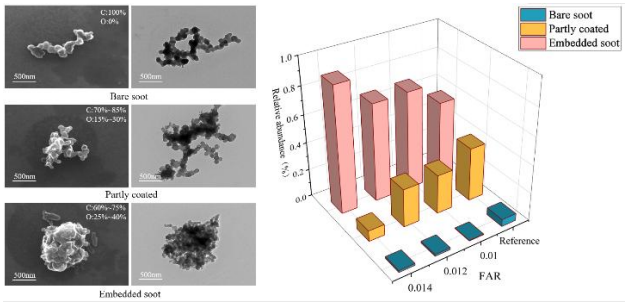


Fig. 2 Morphology of carbonaceous particles under SEM and TEM, and Percentage distribution of the three particle types

参考文献

[1] 于婷婷,朱宇,杜成,等.双环预混旋流燃烧室点熄火性能试验研究[J].航空发动机,2020,46(05):97-102.

[2] 曲春刚,匡家骏,晏嘉伟.不同航班季节下民航飞机LTO循环颗粒物排放特性——以北京首都国际机场为例[J].环境工程学报,2022,16(08):2640-2652.

报告人/墙报展示人简介：

北京航空航天大学能源与动力工程系在读研究生

Insight into the environment implication of primary and photochemical aging processes of nitrogen-containing organic chromophores from residential fuels combustion over Qinghai-Tibet Plateau

Qian Zhang[1,2], Ziqi Meng[1], Zhenxing Shen[2*], Jiaxue Zhao[1], Bin Zhang[2], Yaling Zeng[3], Hongmei Xu[2], Qiyuan Wang[4], Steven Sai Hang Ho[5], Zhihua Li[1]

[1] Key Laboratory of Northwest Resource, Environment and Ecology, MOE, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China

[2] Department of Environmental Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China

[3] School of Environmental Science and Engineering, Southern University of Science and Technology, Shenzhen, 518055, China

[4] Key Lab of Aerosol Chemistry & Physics, SKLLQG, Institute of Earth Environment, Chinese Academy of Sciences, Xi'an 710061, China

[5] Division of Atmospheric Sciences, Desert Research Institute, Reno, NV89512, United States

* zxshen@mail.xjtu.edu.cn

The Qinghai-Tibet Plateau (TPL), crucial for the global climate, lacks a comprehensive understanding of nitrogen-containing organic compounds (NOCs) emissions and their impact on light absorption and radiative forcing through atmospheric oxidation. This study examined NOCs from dung and bitumite combustion in the TPL and their atmospheric oxidation by hydroxyl (·OH) and nitrate ($\cdot NO_3$) radicals using an integrated experimental and theoretical approach. Dung produced higher NOC emissions, mainly methyl types, while bitumite emitted more fused-ring NOCs. Under intense solar radiation, methyl NOCs experienced significant photobleaching with ·OH, while $\cdot NO_3$ preserved spectral shapes with slight absorption reduction. Fused-ring NOCs showed varied responses, including photobleaching and photo-enhancement. Oxidation generally reduced radiative forcing for methyl NOCs but enhanced it for fused-ring NOCs, particularly through ·OH reactions. This study provides crucial insights into NOCs' effects on regional climate and air quality, emphasizing the need for source-specific considerations in atmospheric models for TPL's unique high-altitude environment.

Keywords: nitrogen-containing organic compounds; emission factor; radical attack; emissions; radiative forcing.

Characteristics and Causes of Three-Year Monitoring of Atmospheric Mercury in Different Forms in Xi'an, China

Yuqi Pang, Hongmei Xu, Rong, Feng, Yunxuan Gu, Zhenxing Shen

Department of Environmental Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an , 710049, China

pangyuqi@stu.xjtu.edu.cn

The gaseous element mercury (GEM) and gaseous oxidized mercury (GOM) in the atmosphere were continuously observed with the 2537X-1130 atmospheric form mercury analyzer (Tekran, Canada) from January 1, 2018 to December 31, 2020 in Xi'an, the largest central city in Northwestern China. The average annual concentration of GEM and GOM shows a decreasing trend year by year, with the average annual concentration of GEM decreasing from 32.7 ± 57.2 ng/m^3 in 2018 to 4.67 ± 2.56 ng/m^3 in 2020; and GOM from 57.8 ± 47.9 pg/m^3 to 12.1 ± 17.0 pg/m^3. During the three-year monitoring, GEM and GOM concentrations decreased at 0.611 ng/m^3 and 1.095 pg/m^3 per month, respectively. The significant downward trend is mainly controlled by anthropogenic sources, especially the reduction of coal-fired emissions in Xi'an. The atmospheric mercury concentrations in both forms of Xi'an were the highest in spring, and GEM level in the other three seasons was summer < autumn < winter, while GOM was the opposite trend. The correlation between GEM, GOM, and the six atmospheric pollutants and meteorological data under conventional monitoring could explain the above seasonal variation patterns. The daily variation pattern of atmospheric mercury was similar during the monitoring period, showing the higher concentration in nighttime than daytime for GEM, and M-shaped trend during the day for GOM.

Keywords: gaseous element mercury (GEM); gaseous oxidized mercury (GOM); long time series online observation; seasonal variation; diurnal variation

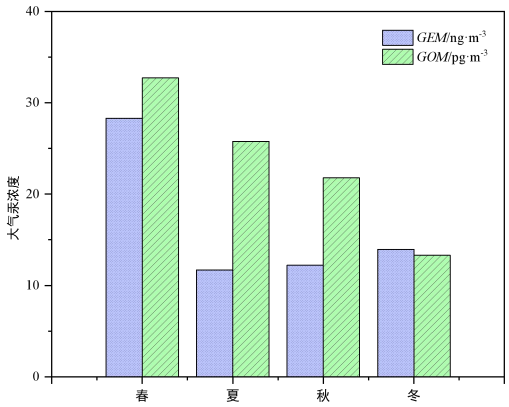


Fig. 1 Seasonal variation of GEM and GOM concentrations from 2018 to 2020

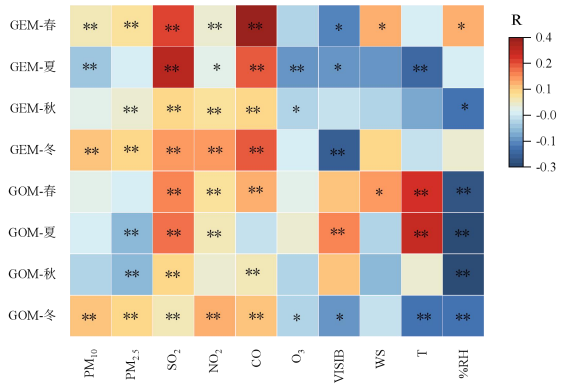


Fig. 2 Correlation between GEM, GOM and atmospheric pollutants and meteorological factors in each season from 2018 to 2020

References

[1] Wang S , Zhang L , Wang L, et al. A review of atmospheric mercury emissions, pollution and control i-n China[J]. Frontiers of Environmental Science & Engineering, 2014, 8(5).

[2] YIN X F , ZHOU W T , KANG S C, et al. Latest observations of total gaseous mercury in a megacity (Lanzhou) in northwest China[J]. Science of the Total Environment,2019,720.

[3] FU X W , FENG X B , QIU G L , et al. Speciated atmospheric mercury and its potential source in Gu-iyang, China[J]. Atmospheric Environment,2011,45(25).

[4] DUAN L , WANG X H , WANG D F , et al. Atmospheric mercury speciation in Shanghai, China[J]. Science of the Total Environment,2017,578.

[5] CHEN X J , BALASUBRAMANIAN R , ZHU Q Y , et al. Characteristics of atmospheric particulate mercury in size-fractionated particles during haze days in Shanghai[J]. Atmospheric Environment,2016,131.

墙报展示人简介：

庞雨琪，西安交通大学能源与动力工程学院环境工程专业 2023 级硕士研究生主要研究方向为大气气溶胶的排放特征、来源解析、人体暴露特征、毒性损伤和健康效益等。

西安市大气$PM_{2.5}$中水溶性金属元素污染特征及健康风险评价

闫宏宇[1]，刘萍萍[1,*]，杨小桃[2]，张李静[1]

[1]西安交通大学能动学院环境工程系，陕西西安，710049

[2]中南安全环境技术研究院，湖北武汉，430061

*Email: liupingping@xjtu.edu.cn

摘要正文：大气$PM_{2.5}$中的重金属会对生态环境和人体健康造成潜在威胁，因此了解其特征来源及健康风险十分必要。本研究采集2016年6月—2017年5月、2018年6月—2019年5月、2020年6月—2021年5月期间西安大气$PM_{2.5}$样品，测定了14种金属元素（Al、As、Cd、Co、Cr、Cu、Fe、K、Mn、Ni、Pb、Ti、V、Zn）的全量、水溶态含量及水溶性金属的溶解度。利用正定因子矩阵（PMF）模型和相关性分析对金属元素进行溯源，采用美国EPA健康风险评价模型进行健康风险评估。结果表明，研究期间大气$PM_{2.5}$金属含量依次为K（4573.5 ng·m^{-3}）＞Fe（3687.1 ng·m^{-3}）＞Zn（998.74 ng·m^{-3}）＞Al（414.95 ng·m^{-3}）＞Ti（222.71 ng·m^{-3}）＞Cu（161.5 ng·m^{-3}）＞Mn（136.4 ng·m^{-3}）＞As（98.4 ng·m^{-3}）＞Pb（53.0 ng·m^{-3}）＞Cr（27.2 ng·m^{-3}）＞Co（20.0 ng·m^{-3}）＞Cd（18.3 ng·m^{-3}）＞Ni（14.5 ng·m^{-3}）＞V（5.1 ng·m^{-3}），年内金属浓度在春冬季普遍高于夏秋季，水溶性金属含量变化趋势与金属全量变化趋势基本一致。Cu、Mn、Zn、V的溶解度较高，分别为42.44%、34.19%、33.02%和29.68%，Fe、Ti的溶解度较低，分别为0.68%和0.56%。PMF模型解析表明，大气$PM_{2.5}$重金属主要来源于燃煤（22.3%）、生物质燃烧（22%）和扬尘（21%）。健康风险评估显示，Mn具有非致癌风险（HQ＞1），Co、Cd和Cr存在潜在非致癌风险，As存在潜在致癌风险（ILCR＞10^{-6}）。

关键词：$PM_{2.5}$；金属；污染特征；来源解析；健康风险；

参考文献

[1] **Li Y, Zhao B, Duan K, et al. Contamination characteristics, mass concentration, and source analysis of metal elements in $PM_{2.5}$ in Lanzhou, China[J]. Elem Sci Anth, 2021, 9(1): 00125.**

[2] **Hsu C Y, Chi K H, Wu C D, et al. Integrated analysis of source-specific risks for $PM_{2.5}$-bound metals in urban, suburban, rural, and industrial areas[J]. Environmental Pollution, 2021, 275: 116652.**

[3] **Liu J, Chen Y, Chao S, et al. Emission control priority of $PM_{2.5}$-bound heavy metals in different seasons: A comprehensive analysis from health risk perspective[J]. Science of the total environment, 2018, 644: 20-30.**

[4] **Zhang J, Zhou X, Wang Z, et al. Trace elements in $PM_{2.5}$ in Shandong Province: Source identification and health risk assessment[J]. Science of the Total Environment, 2018, 621: 558-577.**

[5] **Guo F, Tang M, Wang X, et al. Characteristics, sources, and health risks of trace metals in $PM_{2.5}$[J]. Atmospheric Environment, 2022, 289: 119314.**

报告人/墙报展示人简介：

闫宏宇，男，2001年3月18日生，西安交通大学能源与动力工程学院环境工程专业硕士一年级。

第 15 分会场：二次颗粒物生成与老化及其对大气辐射的影响机制

主题报告：

北京大气中含 BC 颗粒物来源和性质的显著变化

胡敏，胡淑雅，谢宇，曾凌寒，赵罡，陈仕意，陆思华，郭松

北京大学环境科学与工程学院

摘要正文：近十年来，在《大气污染防治行动计划》（2013~ 2017）、《打赢蓝天保卫战》（2018~ 2020）等严格的大气污染物管控措施下，我国环境空气质量得到了显著改善。黑碳（BC）作为一种短寿命气候强迫因子，深刻地影响了空气质量和气候变化。有必要了解北京大气污染防治过程中含 BC 颗粒物来源和性质的变化。本研究基于七波长黑碳仪 Aethalometer （AE31, Magee Scientific）的测量，分析了北京大气中 BC 浓度水平和来源的长期变化趋势（2013-2022 年）。结果表明，BC 浓度从 2013 年的 2.23 ± 1.94 μg m^{-3} 下降到 2022 年的 0.84 ± 0.71 μg m^{-3}，大幅下降 62%。从生物质燃烧和化石燃料来源中都观察到 BC 的减少，分别从 0.50 ± 0.60 μg m^{-3} 和 1.73 ± 1.62 μg m^{-3} 下降到 0.11 ± 0.15 μg m^{-3} 和 0.74 ± 0.64 μg m^{-3}。生物质燃烧导致的 BC 减少幅度更大，下降了 78%。 我们还对北京 2022 年寒冷季节含 BC 颗粒物的化学组成和粒径分布进行了表征。基于 Mie 理论进一步计算了含 BC 颗粒物的光学性质，并与以往的研究结果进行了比较。BC 核的直径增大，BC 颗粒物的包裹层厚度变薄，硝酸盐的质量分数明显增加，甚至取代有机物成为主要成分。化学成分和粒径分布的变化导致 BC 颗粒物的质量吸收截面（MAC）降低。我们的研究结果证明了空气污染控制在改善空气质量和减缓气候变化方面的协同效益。

报告人/墙报展示人简介：

胡敏，北京大学环境科学与工程学院教授、北京大学环境模拟与污染控制国家重点联合实验室主任。国家杰出青年基金获得者、教育部“长江学者”特聘教授。美国地球物理学会（AGU）会士，中国环境科学学会会士，环境保护部“国家环境保护专业技术领军人才”。荣获“中国青年女科学家”奖。

大气低分子量多环芳烃氧化过程及对二次有机气溶胶的贡献

项往[1]，王炜罡[1]，葛茂发[1]

[1]中国科学院化学研究所，北京市海淀区中关村北一街 2 号，邮编 100190

*Email: wangwg@iccas.ac.cn

摘要正文：多环芳烃中萘、甲基萘等分子量较低的物质属于中等挥发性有机物，并且是其重要组成部分。由于这些低分子量多环芳烃主要存在于气相，具有较强的大气反应活性，它们与苯并芘等主要分布在颗粒相中的PAHs有很大差异，需要特别关注。本研究对由OH自由基和Cl原子等氧化剂引发的低分子量多环芳烃生成的SOA进行了全面的研究，包括SOA的产率、化学组成和挥发性等。为了更好地理解低分子量多环芳烃在大气中的氧化反应，对低分子量多环芳烃与Cl原子和OH自由基在不同氮氧化物(NOx)条件下的反应机理进行了比较研究。针对烷基萘体系，在高NOx条件下，Cl引发和OH引发反应生成的SOA产率相当。但在低NOx条件下，Cl引发反应生成的SOA产率最高。含有十个碳的化合物在Cl引发的SOA中更丰富，而九个碳的化合物强度更高。不同氧化剂生成的SOA都具有非常低的挥发性，其中由Cl氧化形成的SOA略高于OH氧化形成的SOA。这些结果表明，OH自由基和Cl原子氧化低分子量多环芳烃的机制具有一定的差异，并且SOA具有不同的物理化学性质，需要对其在空气质量和健康影响中的作用开展更多的研究。

关键词：大气氧化；多环芳烃；二次有机气溶胶

参考文献

[1] Xiang, W., et al. Secondary organic aerosols from oxidation of 1-methylnaphthalene: Yield, composition, and volatility. Science of the Total Environment 2024, 918: 170379.

报告人/墙报展示人简介：

王炜罡，现任中国科学院化学研究所研究员。主持国家自然科学基金委杰出青年基金、科技部重点研发计划、基金委重点、优秀青年基金等项目。在 Nature Commum.、EST、ACP 等大气环境期刊发表论文 100 余篇，研究成果入选《国家自然科学基金资助项目优秀成果选编》和 2021 年度中国生态环境十大科技进展。研发系列痕量气体及气溶胶在线检测设备，授权国家发明专利十余项，登记软件著作权两项，三项设备入选《中国科学院自主研发仪器目录》。担任 Scientific Reports 期刊编委、《分析仪器》编委、《环境化学》青年编委。获中国化学会青年环境化学奖和中国颗粒学会气溶胶青年科学家奖。

气溶胶与天气的交互作用及其对中国天气预报的影响

龚山陵 [1]

[1] 中国气象科学研究院，北京 100081

*Email: gongsl@cma.gov.cn

摘要正文：本报告总结凝练气溶胶模拟中的关键科学问题以及在中国天气预报系统中的应用。通过分析气溶胶直接和间接效应，探讨天气预报模式在线气溶胶的嵌入，对天气预报的影响，包括对温度，降水等要素。

关键词：气溶胶模拟；气溶胶-天气交互作用

报告人/墙报展示人简介：

龚山陵，中国气象局中国气象科学研究院研究员，博士生导师，中国气象局雾-霾创新团队首席科学家。龚山陵教授于 1994 年获多伦多大学化工及应用化学系博士学位，1994 年至 2014 年在加拿大环境部科研司空气质量研究处工作，2008 年被评为高级研究员。国家级人才，主持过科技部“973”项目、国家发改委项目、国家自然基金项目等项目。长期从事大气气溶胶及其对空气质量和气候影响方面的研究。在空气质量预报、气溶胶模式开发、微物理过程研究、及其在与天气气候模式耦合方面，取得了一系列原创性和有国际高影响力的研究成果。2008 年获加拿大政府颁发的诺贝尔奖 IPCC 的特别贡献奖； 2008 年获加拿大环境部团队合作奖。2006 年获中国气象局气象科学和技术工作研究开发一等奖，排名第二。

地球系统模式中的气溶胶模式研发及气溶胶气候效应评估研究进展

廖宏 [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: hongliao@nuist.edu.cn

摘要正文：本报告总结国家重点研发计划项目地球系统模式中气溶胶模式研发的进展，估算我国气溶胶自工业化以来产生的有效辐射强迫，并在年际和年代际尺度评估我国气溶胶历史和未来变化对气候平均态和极端气候事件的影响，总结在过程机制认识方面取得的主要结论，并提出未来需要重点突破的方向。

关键词：气溶胶模拟；气溶胶辐射强迫；气溶胶气候效应

报告人/墙报展示人简介：

廖宏，南京信息工程大学环境科学与工程学院院长。加州理工学院博士（2001）。973项目首席科学家。“百人计划”引进国外杰出人才入选者（2007）、国家杰出青年基金获得者（2008）、新世纪百千万人才工程国家级人选（2009)、全国杰出科技人才（2016）。现任国际世界气候研究计划联合科学委员会委员、国际世界气候研究计划中国委员会副主席。

Investigating the Impacts of Emission Reductions on Black Carbon Aging Using Machine Learning-based Hybrid Climate Model

Wenxiang Shen[1,2], Minghuai Wang[1,2,*], Nicole Riemer[3], Zhonghua Zheng[4], Yawen Liu[1,2], Xinyi Dong[1,2]

[1]School of Atmospheric Sciences, Nanjing University, Nanjing, China.

[2]Joint International Research Laboratory of Atmospheric and Earth System Sciences and Institute for Climate and Global Change Research, Nanjing University, Nanjing, China.

[3]Department of Atmospheric Sciences, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, IL, US.

[4]Department of Earth and Environmental Sciences, University of Manchester, Manchester, UK.

* Minghuai.Wang@nju.edu.cn

Representing mixing state of black carbon (BC) is challenging for global climate models (GCMs). The Community Atmosphere Model version 6 (CAM6) with the four-mode version of the Modal Aerosol Module (MAM4) represents aerosols as fully internal mixtures with uniform composition within each aerosol mode, resulting in high degree of internal mixing of BC with non-BC species and large mass ratio of coating to BC (R_{BC}, the mass ratio of non-BC species to BC in BC-containing particles). To improve BC mixing state representation, we couple a machine learning (ML) model of BC mixing state index into CAM6 to develop a ML-based BC mixing state parameterization (MAM4-ML). In MAM4-ML, we use R_{BC} to partition accumulation mode particles into two new modes, BC-free particles and BC-containing particles. We adjust R_{BC} to make the modeled BC mixing state index (χ_{mode}) match the one predicted by the ML model (χ_{ML}). On a global average, the χ_{mode} decreases from 78% (MAM4-default) to 63% (MAM4-ML, 19% reduction) and agrees well with χ_{ML} (66%). The R_{BC} decreases by 52% for accumulation mode and better agrees with observations. The decrease in R_{BC} leads to a 9% decrease in BC-containing particles in accumulation mode and a 20% decrease in BC activation, globally. Moreover, the global mean BC mass absorption cross section (MAC) decreases by 16% and better agrees with observations, leading to a 16% decrease in global BC direct radiative effect (DRE).

China has implemented strict emission control measures, but it's unclear how they affect BC aging and light absorption capacity. We then use the hybrid CAM6 with MAM4-ML to simulate BC aging under China's recent clean air actions (2011-2018) and the future carbon neutrality scenario (2050/2100, SSP1-2.6). During 2011-2018, the R_{BC} widely increased (5.4% yr^{-1}) over the east of China. The increased secondary organic aerosol (SOA) coatings dominate (88%) the increased R_{BC}, while sulfate coatings decrease. The drivers of BC coating changes come from the different magnitudes of emission reductions in secondary aerosol precursors (i.e., VOCs and SO_2) and BC. During 2011-2018, the increased R_{BC} enhances BC mass absorption cross section (MAC, 0.7% yr^{-1}). In 2050/2100 for SSP1-2.6, emission control leads to further increased R_{BC} (95%/145%) and BC MAC (12%/17%). For both 2011-2018 and 2050/2100, the enhanced BC MAC partly offsets the declining direct radiative effect (DRE) of BC due to direct emission reduction. As a result, the full impact of direct emission reductions of BC on BC DRE is only 75% for 2011-2018 and 90%/94% for 2050/2100.

We highlight that coupling ML into GCMs is an advanced approach for improving key aerosol process modeling and for assessing the implications of emission control policies for BC climate effects.

Keywords: Black carbon; Mixing state; Machine learning-based parameterization; Emission reduction

报告人/墙报展示人简介：

汪名怀南京大学大气科学学院教授，博士毕业于美国密西根大学，曾任职美国能源部太平洋西北国家实验室。主要从事云和气溶胶模拟及气溶胶-云相互作用方面的研究，在国际权威学术期刊发表论

文 100 余篇。近年主持和参与多项国家级科研项目，包括主持国家自然科学基金重点项目和杰出青年基金项目等。目前担任大气与地球系统科学（教育部）国际合作联合实验室主任，国际气溶胶-云-降雨-气候（ACPC）工作组共同主席, SCI 期刊 Atmospheric Chemistry and Physics 和 Advance in Atmospheric Sciences 编辑，及 Journal of Geophysical Research-Atmosphere 副编辑。

附：报告人：汪名怀 教授

我国空气污染气象反馈及其人群健康-可再生能源协同效应研究

黄昕[1]，郝月婷[1]

[1]南京大学大气科学学院，210023

*Email: xinhuang@nju.edu.cn

摘要正文：我国2060年前实现碳中和目标需要深刻的能源结构转型，尤其是大幅增加风光等可再生能源在我国一次能源结构中的比重。由于大气污染物和温室气体的同根同源性，风光资源对化石能源的替代在减缓碳排放的同时，还能显著地改善空气质量及其健康影响；与此同时，污染物减排所带来的气溶胶气象反馈作用的削弱可进一步增加地表太阳辐射并形成更好的空气污染扩散条件，提升我国东部地区风光的资源潜力及其稳定性（可再生能源-空气污染-气象反馈机制）。值得强调的是，风光资源潜力和稳定性的提升，可进一步推进可再生能源的利用，为我国的能源结构转型形成正反馈（人类社会-气候系统反馈放大机制）。准确解析我国碳中和目标实现下的双重反馈机制，并深化其空气质量-人体健康-清洁能源的交互机制和综合协同效益的认知，对我国科学规划碳达峰碳中和路径具有重要的实际意义。

研究发现，相较于2060年基线情景，由于污染物排放量的减少以及气溶胶气象反馈效应的加成，到2060年实现中国碳中和目标将使全国人口加权的PM2.5浓度降低约39μg/m3，并避免57%过早死亡人数（113万人；95%置信区间：0.97-1.29百万人）。老龄化人口往往会抵消中国碳中和目标的健康效益，但基线死亡率的降低则会充分补偿老龄化带来的健康效益损失。其中，降低的气溶胶气象反馈效应在京津冀地区能分别带来7.1（6.5%）,5.6（6.9%）,4.3（6.6%）μg/m3的人口加权PM2.5浓度降低，并相应减少23,000（21,000-26,000）由于PM2.5导致的过早死亡人数。同时，大气中气溶胶负荷的减少将增加到达地表的太阳辐射，并加强垂直方向的动量交换，导致太阳能和风能的容量因子提升且变异性减少。省级太阳能（风能）潜力最多提升约10%（~6%），且资源稳定性普遍提高。

中国碳中和目标带来的空气质量、人类健康和可再生能源协同效应主要集中在中部、北部和东部电网，这些地区的省级空气污染和人口暴露度普遍减少约80%（>40μg/m3），相应的省级避免过早死亡人数大多超过60%（~50,000），太阳能和风能容量因子的增加可达到10%和6%，并降低了小时变异性。实现碳中和后，人口加权PM2.5浓度的降低程度尤为显著，并且最显著的可再生能源增加发生在能源需求最高的东部省份，有助于缓解能源供需之间的地理不匹配。总体而言，中国碳中和目标带来的空气质量、人类健康和可再生能源协同效应主要集中在空气质量亟须改善和能源需求较大的地域。与2060年基线相比，中国碳中和情景下省级PM2.5浓度的变化、相关的过早死亡和可再生能源表现，以及实现2060年碳中和目标后剩余的多方面空气污染和健康影响。碳中和的实现无法完全解决各种环境问题；多方面的协同效应和自我强化的可再生能源可能为进一步改善空气质量和人类健康提供额外的本地激励。

报告人简介：

黄昕，安徽宣城人，南京大学大气科学学院教授、博士生导师，主要从事大气环境数值模拟相关研究，在 Science、National Science Review、Science Bulletin、Nature Geoscience、Nature Communications、Science Advances、PNAS 等国际期刊发表学术论文百余篇，引用一万余次。研究成果被列为 ESI 热点和高被引论文，入选中国百篇最具影响国际学术论文、国家自然科学基金委员会优秀成果巡礼、中国生态环境十大科技进展等。先后担任 Meteorological Applications 副编辑、Science Bulletin 特邀编委、Journal of Geophysical Research: Atmospheres 副编辑等多个学术兼职。获国家杰出青年和优秀青年科学基金资助，2022 和 2023 年入选全球“高被引科学家”。

邀请报告：

基于自主开发的多层动力学模型探究颗粒粘度和非均相反应对二次有机气溶胶生成的影响

赵岳*，骆泽坤，臧寒，李子悦，李晨曦

上海交通大学环境科学与工程学院，上海，200240

*Email: yuezhao20@sjtu.edu.cn

摘要正文：二次有机气溶胶（SOA）是大气细颗粒物的重要组成部分，对区域空气质量、气候变化和公众健康均具有深远的影响。颗粒粘度和颗粒相化学反应在SOA的生成与演化中起着至关重要的作用。然而，目前人们对这两个因素如何共同影响SOA生消演变的定量理解仍然十分有限。本研究自主开发了耦合详细气相化学机制、气-粒传质和颗粒相化学过程的气溶胶多层动力学模型（F0AM-KMM），并运用该模型探究了大气单萜烯+OH氧化体系中，颗粒粘度和颗粒相化学反应对SOA生成的影响。结果发现，颗粒粘度对SOA产率无明显影响，但它强烈地改变了颗粒中有机物的化学组成和浓度。颗粒粘度对SOA生成的复杂影响是颗粒相扩散变慢而减缓有机物冷凝或蒸发的综合结果。醛酮化合物、有机过氧化物等含氧有机物的颗粒相反应明显增大了SOA产率，在低粘度和高粘度颗粒条件下，增幅分别为19%和12%。同时，颗粒相反应显著改变了有机物的挥发性和浓度，并加剧了它们在高粘度颗粒中的不均匀分布。本研究揭示了颗粒粘度和颗粒相化学对SOA生成的复杂影响，并验证了F0AM-KMM模型是模拟量化这些复杂因素影响下SOA生消演变的有力手段，为下一步定量探究大气有机物复杂氧化体系中，非均相反应对SOA的贡献奠定了基础。

关键词：二次有机气溶胶；非均相反应；颗粒粘度；气溶胶多层动力学模型

烟雾箱系统及其在二次有机气溶胶(SOA)生成研究中的应用

陈天增[1]，马庆鑫[1]，楚碧武[1]，张鹏[1]，贺泓[1,*]

中国科学院生态环境研究中心，北京，100085

*Email: honghe@rcees.ac.cn

摘要正文：降低大气细颗粒物（$PM_{2.5}$）浓度仍是我国空气质量持续改善的重大挑战[1]。二次有机气溶胶（SOA）作为 $PM_{2.5}$ 的的重要组分[2]，对复合污染条件下 SOA 生成机制和影响因素的深入认识是进一步降低 $PM_{2.5}$ 的重要理论依据，是改善现有空气质量模型对 SOA 生成显著低估现状的重要前提条件。实验室烟雾箱模拟是深入认识 SOA 生成机制的关键手段，也是模式模拟参数化方案的可靠来源。本研究利用中国科学院生态环境研究中心（RCEES-CAS）30 m^3 室内烟雾箱系统，系统研究了近实际大气条件下典型人为源挥发性有机物（VOCs）形成 SOA 过程中，前体物浓 度、无机气体、种子气溶胶、相对湿度（RH）等不同影响因素对 SOA 生成的影响。研究发现，1）在低前体物浓度和长时间氧化条件下 SOA 产率显著提高，阐明了多级氧化促进高含氧含氮低挥发性产物和 SOA 形成的机制；2）发现共存 NO_x、SO_2 和 NH_3 对 SOA 生成的协同促进效应，揭示了促进 SOA 生成的无机-有机耦合作用机制；3）种子气溶胶可以促进高氧化态有机物的分配和摄取，进而促进 SOA 的生成，并使 SOA 的氧化程度增加；4）高相对湿度会促进液相氧化过程来协同促进 SOA 的生成和氧化程度的提高。通过复合污染条件下 SOA 形成的研究，初步揭示了不同环境因素对 SOA 形成的影响机制（图 1），有助于对 SOA 来源贡献及其环境气候效应的深入认识，有利于进一步缓解我国 $PM_{2.5}$ 污染的现状。

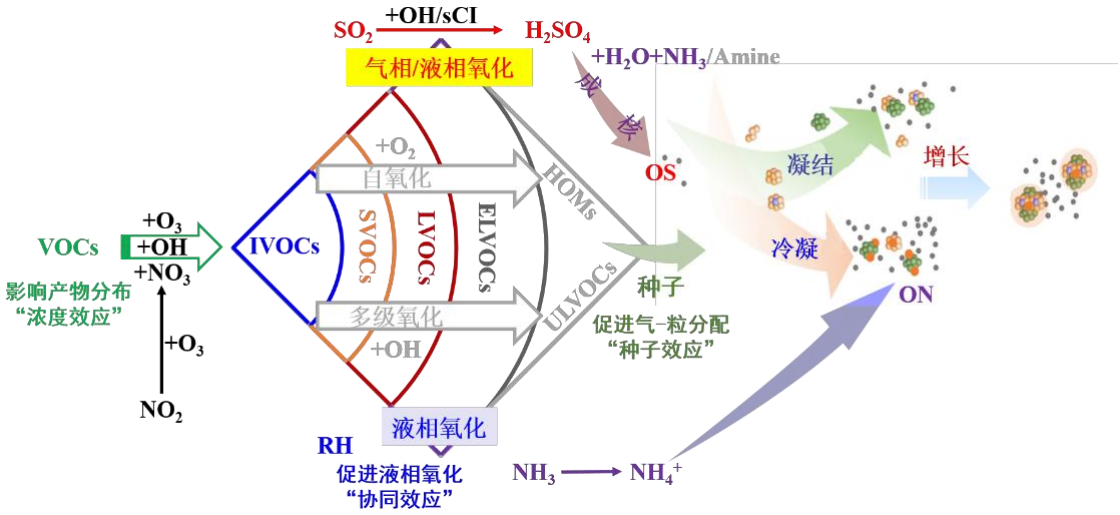


Fig. 1 Conceptual diagram of the influence mechanism of various factors on SOA formation

关键词：复合污染；烟雾箱；二次有机气溶胶；挥发性有机物；细颗粒物

参考文献

[1] Q. Zhang, et al. Drivers of improved $PM_{2.5}$ air quality in China from 2013 to 2017. Proc Natl AcadSci USA, 2019, **116(49)**, 24463-24469.

[2] R. J. Huang, et al. High secondary aerosol contribution to particulate pollution during haze events in China. Nature, 2014, **514**, 218-222.

报告人简介：

陈天增，理学博士，中国科学院生态环境研究中心副研究员。长期以来一直围绕复合污染条件下二次气溶胶的生成机制和关键影响因素开展系统研究，在复合污染条件下二次气溶胶生成新机制及其环境效应等方面取得了重要进展，发表学术论文 40 余篇，其中以第一/共一在 *Natl.Sci.Rev.*，*TrACTrendsAnal.Chem.*，*Environ.*，*Sci.Technol.*（4 篇），*npjClim.Atmos.Sci.*，*Atmos.Chem.Phys.*（4 篇）等 1 区 Top 期刊发表学术论文 20 篇。主持国家自然科学基金委面上项目（1 项）、青年基金项目（1 项）等，作为研究骨干参与国家自然科学基金基础科学中心项目、科技部国家重点研发计划项目、中国科学院 B 类先导科技专项项目等多项科研项目。

联系邮箱：tzchen@rcees.ac.cn

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

结合机器学习和高时间分辨率分子数据研究城市地区棕色碳吸光来源及其分子贡献

胡伟伟[1,*]，蔡义宇[1]，叶晨朔[2]，陈卫[1]，宋伟[1]，彭钰雯[2]，黄山[2]，齐吉朋[2]，王超敏[2]，武彩虹[2]，王泽龙[2]，王宝琳[3]，黄晓峰[4]，何凌燕[4]，赵卫雄[5]，张国华[1]，毕新慧[1]，袁斌[2]，邵敏[2]，王新明[1]

[1]中国科学院广州地球化学研究所，广州 510640；

[2]暨南大学环境与气候研究学院，广州 510640；

[3]齐鲁工业大学环境科学与工程学院，济南 250353；

[4]北京大学深圳研究生院环境与能源学院，深圳，518055；

[5]中国科学院安徽光学精密机械研究所，合肥，230031

*Email: weiweihu@gig.ac.cn

摘要正文：棕色碳（BrC）是环境大气中具有吸光性的一类有机物，是影响大气辐射强迫的重要组分之一。在气候模型中，BrC拥有复杂的来源、化学成分和吸光特性以及经历各种化学转化过程，给辐射强迫的估算带来了巨大的不确定性。随着测量技术的发展，现已可以实现对BrC的总吸光系数以及高时间分辨率（秒到分钟）的有机气溶胶（OA）分子的在线检测。而在总体和分子水平上的动态变化的联合研究有助于厘清BrC的不同来源贡献和光学性质，目前这方面的研究还有所欠缺。因此，联合颗粒物光学特征的测量和OA分子的在线观测，并利用数据分析的手段探讨分子水平上的BrC吸光来源研究还需要进一步研究。

本研究利用基于气体和气溶胶的过滤器进样口的化学电离质谱仪（FIGAERO-CIMS）、高分辨率飞行时间气溶胶质谱仪（HR-Tof-AMS）和七波段黑碳仪（AE33）等高分辨率在线测量仪器在中国典型城市广州地区的秋季进行综合的外场观测，研究气溶胶化学成分和光学特征。结果发现BrC贡献总颗粒物吸光的3.6-22.5%，具有明显的昼夜差异。为了研究BrC的来源，本研究使用了多元线性回归模型进行总体上的分析，发现BrC吸光主要由生物质燃烧混合的类烃类OA（51%）和氧化性OA（49%）贡献。前者是机动车排放源，受到生物质燃烧的影响，在夜间贡献更多，且具有更强的吸光能力；后者属于二次来源，吸光能力较弱，与先前研究中观察到的二次OA（SOA）相当。除了从总体上进行分析，本研究还基于非靶向的机器学习模型识别出了关键的BrC分子。通过分子水平上的分析发现光化学形成和老化过程与白天的BrC分子有更强的关联性，而夜间的BrC与一次排放源有关。通过应用层次聚类分析方法对识别到的BrC分子进行进一步分析，发现了两类具有明显不同的结构和吸光能力的BrC分子。一类是经过多步反应形成的高度氧化的BrC分子，对BrC吸光的贡献较弱；另一类是一次排放和新鲜形成的低氧化的BrC分子，在BrC吸光中起主导作用，主要来自生物质燃烧和车辆排放。总体来讲，基于分子水平分析得到的与基于OA组分的BrC来源解析相吻合，进一步验证了研究方法和结论的可靠性。

关键词：棕色碳；FIGAERO；机器学习.

关于碳质气溶胶对云微物理效应的一些研究发现

刘丹彤

浙江大学地球科学学院，中国，杭州，310058

摘要正文：碳质气溶胶，包括黑碳和有机碳，能够有效吸收短波辐射，在一定程度上抵消了气溶胶的冷却辐射效应。气溶胶与云的相互作用可能引发比单独气溶胶更强的辐射效应。与其他类型的气溶胶相比，碳质气溶胶与云的相互作用方式存在差异，因此需要在大气中对其进行单独识别和表征。本文基于观测数据，介绍了碳质气溶胶对云微物理影响的最新研究成果。这些成果包括：采用新方法估算黑碳作为云凝结核的活性，并结合其在大气中的演变过程；提供有机气溶胶作为有效冰核颗粒的实地证据；以及通过卫星云雷达观测揭示人为污染对混合相云冻结温度的影响。

关键词：碳质气溶胶；气溶胶-云相互作用；云凝结核；冰核颗粒

报告人简介：

刘丹彤，浙江大学研究员，博士生导师，国家海外引才计划青年学者，浙江省杰青。研究领域为大气化学、大气气溶胶和云微物理。在碳质气溶胶光学性质、云粒子活化及其在大气中演化和移除过程等方面做出独创性研究。在国际主流期刊发表 SCI 论文 160 余篇（一作/通讯 60 余篇包括 Nature Geoscience, GRL, JGR, ES&T, ACP 等），总引用 7000+，H 指数 46。研究成果曾被 AGU 和 EGU 亮点报道。曾主持多项国家自然科学基金项目和国家重点研发计划课题。担任期刊 Atmospheric Chemistry and Physics 编辑、Aerosol Science and Engineering 编辑和 Environmental Research 专刊编辑。担任中国颗粒学会理事、云降水物理研究和云水资源开发北京市重点实验室学术委员、IGAC 国际大气化学中国青年工作组成员。曾获中国颗粒学会青年颗粒学奖（2022）、谢义炳青年气象科技奖（2019）。

基于SP-AMS测量的珠三角大气颗粒态有机硝酸酯来源及生成转化机制研究

黄山[1,2*]，伍莉娜[1,2]，刘袁[1,2]，王小月[1,2]，李伟[1,2]，陈小敏[1,2]，胡伟伟[3]，陈卫[3]，旷烨[1,2]，彭钰雯[1,2]，袁斌[1,2]，陈多宏[4]，岳玎利[4]，宋伟[3]，王新明[3]，邵敏[1,2]

[1]暨南大学环境与气候学院，广州，511443

[2]粤港澳环境质量协同创新联合实验室，广州，511443

[3]中国科学院广州地球化学研究所，广州，510640

[4]广东省生态环境监测中心，广州，510310

*Email:shanhuang_eci@jnu.edu.cn

摘要正文：大气颗粒物中的有机硝酸酯（pON）是亚微米级颗粒物中的关键有机成分，pON可在夜间对二次有机气溶胶（SOA）的形成有显著贡献，还可作为活性氮的临时储存库，间接影响臭氧的产生；包括pON在内的有机含氮化合物还可能是黑碳（BC）包裹层及棕碳中的生色团及毒性成分，影响其吸光特性并产生不利的气候和健康效应。本研究使用黑碳粒子飞行时间气溶胶质谱仪（SP-AMS）在中国珠江三角洲（PRD）地区的城市和农村站点进行了秋季观测，基于高时间和质量分辨率测量数据，使用正交矩阵因子分析法（PMF）定量了pON的质量浓度，并与其他方法或仪器结果进行比对验证。农村站点的pON质量浓度略高于城市站点，两个站点有机硝酸酯对总硝酸盐贡献相近（城市为19%，农村为17%）。城市站点的pON主要来自日间形成，包括光氧化过程（占总pON质量浓度的16%）和区域传输老化（33%），而在农村地区，pON的夜间生成（29%）更为显著，且夜间生成的有机气溶胶（OA）因子（Night-OA）被证明也与生物质燃烧过程高度相关。生物质燃烧（BB）相关因子（BB直接排放、老化的BB及BBSOA）在两个站点都是有机硝酸酯的重要来源（城市25%、农村34%）。基于挥发性有机化合物（VOCs）估算了有机硝酸酯生成潜力，发现生物源VOCs在城市和乡村都是主要的有机硝酸酯前体物，而人为源VOCs如苯乙烯和甲酚在农村夜间的有机硝酸酯形成中尤为重要。而且，夜间的pON与第二天早上的大气氧化剂O_x（O_3+NO_2）显示出显著的正相关（R = 0.62~0.76），表明pON可能对次日的大气氧化性有所贡献。根据SP-AMS的激光开启模式（即双汽化器）测量数据，本研究通过PMF方法估算了pON在难熔颗粒物中的质量浓度，结合激光关闭模式数据可以量化pON在不同来源OA中的差异，发现在难熔颗粒物（BC包裹层）中pON主要来自生物质燃烧排放和夜间生成（乡村），来自区域传输的pON则不存在于BC包裹层中。

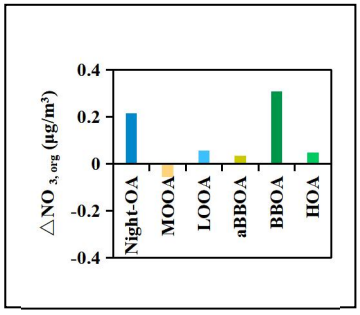


Fig. 1 Refractory pON estimated as differential between pON from Laser-on mode and Laser-off mode associated with the identified sources

关键词：有机硝酸酯；生物质燃烧；夜间SOA生成；黑碳包裹层；SP-AMS

报告人/墙报展示人简介：

黄山，暨南大学环境与气候学院副研究员、硕士生导师。从事大气气溶胶研究，在大气二次有机气溶胶来源解析及转化机制方向、气溶胶质谱开发应用等方面取得重要成果。主持各类项目 12 项，包括国家自然科学基金面上项目、青年项目，国家重点研发计划子课题（2 项）、省部级项目（1 项）及地方科技支撑项目（7 项）。在 Environmental Science & Technology、 Atmospheric Chemistry and Physics、Science of the Total Environment 等国际一流 SCI 期刊及国内高影响力期刊发表论文 30 余篇，其中第一及通讯作者 15 篇。担任 Atmosphere 客座编辑、ACP、AMT、STOTEN 审稿人等学术兼职。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Strong light scattering of highly oxygenated organic aerosols impacts significantly on visibility degradation

Ye Kuang[1],Li Liu [2], Miaomiao Zhai

[1] Institute for Environmental and Climate Research, Jinan University, Guangzhou, 511443, China.

[2]Institute of Tropical and Marine Meteorology, China Meteorological Administration, Guangzhou, 510640，China

* kuangye@jnu.edu.cn

Secondary organic aerosols (SOA) account for a large fraction of atmospheric aerosol mass and play significant roles in visibility impairment by scattering solar radiation. However, comprehensive evaluations of SOA scattering abilities under ambient relative humidity (RH) conditions on the basis of field measurements are still lacking due to the difficulty of simultaneously direct quantifications of SOA scattering efficiency in dry state and SOA water uptake abilities. In this study, field measurements of aerosol chemical and physical properties were conducted in Guangzhou winter (lasted about three months) using a humidified nephelometer system and aerosol chemical speciation monitor. A modified multilinear regression model was proposed to retrieve dry state mass scattering efficiencies (MSE, defined as scattering coefficient per unit aerosol mass) of aerosol components. The more oxidized oxygenated organic aerosol (MOOA) with O/C ratio of 1.17 was identified as the most efficient light scattering aerosol component. On average, 34% mass contribution of MOOA to total submicron organic aerosol mass contributed 51% of dry state organic aerosol scattering. Overall organic aerosol hygroscopicity parameter κ_OA was quantified directly through hygroscopicity closure, and hygroscopicity parameters of SOA components were further retrieved using multilinear regression model by assuming hydrophobic properties of primary organic aerosols. The highest water uptake ability of MOOA among organic aerosol factors was revealed with κ_MOOA reaching 0.23, thus further enhanced the fractional contribution of MOOA in ambient organic aerosol scattering. Especially, scattering abilities of MOOA was found to be even higher than that of ammonium nitrate under RH of <70% which was identified as the most efficient inorganic scattering aerosol component, demonstrating that MOOA had the strongest scattering abilities in ambient air (average RH of 57%) during Guangzhou winter. During the observation period, secondary aerosols contributed dominantly to visibility degradation (~70%) with substantial contributions from MOOA (16% on average), demonstrating significant impacts of MOOA on visibility degradations. Findings of this study demonstrate that more attentions need to be paid to SOA property changes in future visibility improvement investigations. Also, more comprehensive studies on MOOA physical properties and chemical formation are needed to better parameterize its radiative effects in models and implement targeted control strategies on MOOA precursors for visibility improvement.

Keywords: secondary organic aerosols, scattering efficiency, refractive index, aqueous reactions.

References

[1]Zhai, M.; Kuang, Y.; Liu, L.; He, Y.; Luo, B.; Xu, W.; Tao, J.; Zou, Y.; Li, F.; Yin, C.; Li, C.; Xu, H.; Deng, X., Insights into characteristics and formation mechanisms of secondary organic aerosols in the Guangzhou urban area. Atmos. Chem. Phys. 2023, 23, (9), 5119-5133.

[2]Liu, L.; Kuang, Y.; Zhai, M.; Xue, B.; He, Y.; Tao, J.; Luo, B.; Xu, W.; Tao, J.; Yin, C.; Li, F.; Xu, H.; Deng, T.; Deng, X.; Tan, H.; Shao, M., Strong light scattering of highly oxygenated organic aerosols impacts significantly on visibility degradation. Atmos. Chem. Phys. 2022, 22, (11), 7713-7726.

[3]Shen, J; Kuang, Y; et al, Direct Observational Evidences of Distinguishing Refractive Indices Between Primary and Secondary Organic Aerosols, in preparation, 2024.

Microphysical complexity of black carbon particles restricts their warming potential

Xiao-Feng Huang[1]†, Yan Peng[1]†, Jing Wei[1]†, Jianfei Peng[2]*, Xiao-Yu Lin[1], Meng-Xue Tang[1], Yong Cheng[1], Zhengyu Men[2], Tiange Fang[2], Jinsheng Zhang[2], Ling-Yan He[1]*, Li-Ming Cao[1], Chao Liu[3], Hongjun Mao[2], John H. Seinfeld[4], Yuan Wang[5]*

[1] Laboratory of Atmospheric Observation Supersite, School of Environment and Energy, Peking University Shenzhen Graduate School; Shenzhen 518055, China.

[2] Tianjin 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.

[3] Collaborative Innovation Center on Forecast and Evaluation of Meteorological Disasters, Nanjing University of Information Science & Technology; Nanjing 210044, China.

[4] Divisions of Chemistry and Chemical Engineering and Engineering and Applied Science, California Institute of Technology; Pasadena, CA, USA.

[5] Department of Earth System Science, Stanford University, Stanford, California 94305, USA.

* Corresponding author. Email: pengjianfei@nankai.edu.cn; hely@pku.edu.cn; yzwang@stanford.edu.

† These authors contributed equally to this work

Black carbon (BC) in the atmosphere strongly absorbs solar radiation, while its warming effect on climate is poorly quantified. A key challenge is to accurately assess BC light absorption after being mixed with non-BC components in the atmosphere. However, field observations constantly stand in contrast to laboratory and modeling studies in BC light absorption estimation, reflecting the insufficient understanding of realistic BC complexity. Our comprehensive in-situ measurements of BC single-particle microphysics, e.g., size, coating amounts, density, and shape reveal that the large observation-modeling gap in light absorption of BC-containing particles cannot be fully explained by any previous hypothesis alone. Specifically, the observed particle-to-particle heterogeneities in size and coating, and the non-spherical BC shape only explain the lower observed BC absorption by ~20% and ~30%, respectively. A remaining absorption gap for fully aged spherical BC-containing particles is related to the nonideal BC core position. Our global climate model assessment shows that fully accounting for the observed BC complexity in the aerosol microphysical representation reduces the global BC direct radiative forcing by up to 23%. Our study highlights that accurately assessing BC environmental and climate effects requires adequate representation of the real-world complexity of BC-containing particles in measurements and models.

Keywords: Black carbon (BC), microphysics, light absorption, radiative forcing

References

[21] Huang X., Peng Y., Wei J., **Peng J.***, Lin X., Tang M., Cheng Y., Men Z., Fang T., Zhang J., He L.*, Cao L., Liu C.,Zhang C., Mao H., Seinfeld, J. H.; Wang Y.*, Microphysical complexity of black carbon particles restricts their warming potential. ***One Earth.***2024, 7, (1).

报告人/墙报展示人简介：

彭剑飞，南开大学教授，中组部青年千人，天津市杰青。长期致力于大气污染形成机制的研究，在黑碳老化与效应、机动车排放与控制等领域研究。第一或通讯作者在 Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.、One Earth、Environ. Sci. Technol. 等期刊发表论文 30 篇；论文 SCI 总引用 5200 次（web of science 数据）。主持国家重点研发计划项目等国家级项目 6 项。获中国化学会青年环境化学奖、世界气象组织 Mariolopoulos 教授青年学者奖、美国地球物理联合会 James R. Holton 青年学者奖、美华大气与海洋协会 Yuxiang 青年学者奖。

南海近海大气有机硫酸酯的组成特征、形成机制及来源分析

黄侃 [1,*]

[1] 复旦大学环境科学与工程系，上海淞沪路 2005 号，200433

*Email: huangkan@fudan.edu.cn

摘要正文：本研究在中国南海沿岸站点进行了为期约一个月的连续观测，采用 UHPLC- Orbitrap MS 技术，定量分析了 $PM_{2.5}$ 中 33 种有机硫酸酯 OSs 单体，并将其分为 4 类：iOSs、C2/C3 OSs、mOSs 和 aOSs。结果显示，iOSs 平均浓度最高（65.78 ± 65.56 ng m^{-3}, 占比 42%），其次是 C2/C3 OSs（53.07 ± 34.17 ng m^{-3}, 占比 34%）、mOSs（28.35 ± 28.95 ng m^{-3}, 占比 18%）和 aOSs（9.82 ± 9.19 ng m^{-3}, 占比 6%）。研究表明，iOSs 的形成受 pH 和异戊二烯浓度的影响，并且在污染阶段，光化学过程对 iOSs 的显著贡献。在海洋边界层，较低 NO 和 HO_2 浓度及高温环境有利于 MVK 的形成，提高了 iOSs 中 C4 化合物的比例。当海洋气团主导时，伴随高的 RH/O_3 比值，2-MAS/2-MTS 比值随 SO_2 增加而升高，表明液相自由基氧化过程主导了该阶段 iOSs 的生成。此外，$C_5H_7O_7S^-$与 2-MTS 的高比值及二者间的不相关性进一步说明了液相过程在海洋气团主导时的重要性。C2/C3 OSs 的各个单体相关性高，表明它们具有相似的来源或形成途径。在各阶段，GAS 单体浓度均最高。从 E1 至 E3 阶段，C2/C3 OSs 与 iOSs 比值呈降低趋势，且二者之间表现高度相关性，暗示它们可能有相同的来源，即异戊二烯或者 C2/C3 OSs 为 iOSs 的氧化产物。相比于 iOSs，海洋生源对 C2/C3 OSs 的贡献更大，尤其是在海洋气团主导时，其浓度超过了 iOSs。此外，C2/C3 OSs 的形成途径与 $C_5H_7O_7S^-$、2-MAS 单体相似，液相自由基氧化过程是其在海洋气团主导时的主要形成机制。mOSs 主要以 non_N mOSs 为主，柠檬烯、α-蒎烯是其重要来源，当陆源气团主导时，mOSs 的比例有所增加。在 E1、E2 阶段，mNOSs 占比均为 15%，不同的 NO_x 水平导致了 mNOSs 形成机制的差异。随 NO_x 浓度的升高，NO_3•自由基引发的萜烯氧化途径生成 mNOSs 生成的主要途径。最后，aOSs 的浓度最低，主要来源于交通排放相关的柴油燃烧活动，海洋气团主导时，其浓度受源排放强度的影响。

关键词：有机硫酸酯；形成过程；海洋源

报告人/墙报展示人简介：

黄侃，现为复旦大学环境科学与工程系研究员和博士生导师。一直从事关于大气科学，主要是大气气溶胶化学及其在生物地球化学循环中作用的研究，在本领域的主流杂志共发表论文百余篇，第一和通讯作者文章五十余篇。主持了包括国家自然科学基金重大研究计划培育项目、面上项目、国际(地区)合作与交流项目、国家重点研发计划政府间国际科技创新合作项目、科技部重点研发计划课题、上海市科委项目在内的多项国家和省部级项目。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

口头报告：

Spatial Inhomogeneity of New Particle Formation in the Urban and Mountainous Atmospheres of the North China Plain during the 2022 Winter Olympics

Dongjie Shang [1,2] , Min Hu [1,*], Xiaoyan Wang [3], Lizi Tang [1], Petri S. Clusius [4], Yanting Qiu[1] , Xuena Yu[1], Zheng Chen[1], Zirui Zhang[1], Jiaqi Sun[3], Xu Dao[3], Limin Zeng[1], Song Guo[1] , Zhijun Wu[1] and Michael Boy[4,5]

[1]State Key Joint Laboratory of Environmental Simulation and Pollution Control, International Joint Laboratoryfor Regional Pollution Control, Ministry of Education (IJRC), College of Environmental Sciences and Engineering, Peking University, Beijing 100871, China

2 State Key Laboratory of Organic Geochemistry, Guangzhou Institute of Geochemistry, Chinese Academy ofSciences, Guangzhou 510640, China

3 China National Environmental Monitoring Centre, Beijing 100012, China

4 Institute for Atmospheric and Earth System Research/Physics, Helsinki University, 00014 Helsinki, Finland;

5 School of Engineering Sciences, Lappeenranta-Lahti University of Technology, 53851 Lappeenranta, Finland

* Correspondence: minhu@pku.edu.cn

The new particle formation (NPF) process is a significant source of atmospheric secondary particles, which has remarkable impacts on the regional air quality and global radiative forcing. Most NPF studies conduct their measurements at a single site, which can hardly provide information about the regionality of NPF events at large scales (>100 km). During the 2022 Winter Olympic and Paralympic Games, simultaneous measurements of particle number size distributions and NPF-associated precursors were conducted at a mountainous site close to the Winter Olympic Village in Chongli (CL), Zhangjiakou, and an urban site in Beijing (BJ) located 150 km southeast of the CL site. High NPF frequencies were observed at the CL (50%) and BJ (52%) sites; however, the fraction of concurrent NPF events was smaller than the results in other regions. In addition, the wind distributions exhibited distinct air mass origins at the two sites during the concurrent NPF events. Compared with the BJ site, the NPF growth rates were higher at the CL site due to higher levels of volatile organic compounds (VOCs) and radiation. Surprisingly, the formation rates at the CL site were lower than at the BJ site, even with a higher sulfuric acid concentration and lower CS, which may be attributed to lower dimethylamine concentrations in the mountainous area. This study reveals that, although NPF events are commonly thought to occur on regional scales, their intensity and mechanisms may have significant spatial inhomogeneity. Further studies are required to reduce the uncertainty when expanding the mechanisms based on the urban conditions to regional or global scales in the models.

Keywords: new particle formation; formation rate; urban atmosphere; spatial distribution

报告人/墙报展示人简介：

尚冬杰，北京大学环境科学工程学院，环境模拟与污染控制国家重点联合实验室助理研究员。于 2013 年、2020 年从北京大学环境科学与工程学院毕业，先后获学士和博士学位；入选北京大学博雅博士后项目，并于 2023 年出站。以第一作者（或共同一作）身份在 Atmos. Chem. Phys., Geophys. Res. Lett. 等高水平学术期刊发表文章 8 篇，其他共同作者文章 40 余篇，总被引 4000 以上，H 因子 23。曾获北京大学优秀博士论文，美国地球物理学会年会（AGU）、世界清洁空气大会（IUAPPA）优秀报告奖。担任中国颗粒学会青年理事。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Secondary Organic Aerosol Formation from Mixed Anthropogenic and Biogenic Precursor Systems

Song Guo[1,*], Ying Yu[1], Rui Tan[1], Shengrong Lou[2], Wenfei Zhu[3]

[1] State Key Joint Laboratory of Environmental Simulation and Pollution Control, International Joint Laboratory for Regional Pollution Control, Ministry of Education (IJRC), College of Environmental Sciences and Engineering, Peking University, Beijing 100871, China

[2] State Environmental Protection Key Laboratory of Formation and Prevention of Urban Air Pollution Complex, Shanghai Academy of Environmental Sciences, Shanghai, 200233, China

3 School of Energy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China

* songguo@pku.edu.cn

The mixing of precursors has been demonstrated to alter the secondary organic aerosol (SOA) yield and composition. Here, we measure the SOA yield and composition from photo-oxidation of two polycyclic aromatic hydrocarbons (naphthalene, 2-methylnaphthalene), two terpenes (isoprene, alpha-pinene), and their binary mixtures, representative anthropogenic and biogenic precursors, under both low and high NOx condition in an indoor chamber. The SOA composition is measured by the Filter Inlet for Gases and Aerosols coupled to a high-resolution time-of-flight chemical ionization mass spectrometer (FIGAERO-CIMS). Our results show that the SOA yield of naphthalene and 2-methylnaphthalene under high NOx is lower than that under low NOx, consistent with previous studies. The suppression of SOA formation is observed in the mixture. This might be resulted from the difference of particle volatility between individual precursor system and mixed system, indicating different oxidation process between them. Our study provides new insights into SOA formation from mixed anthropogenic and biogenic precursor systems.

Keywords: Secondary Organic Aerosols, Biogenic Volatile Organic Compounds, PAHs, SOA Yield, Interaction

报告人/墙报展示人简介：

北京大学环境科学与工程学院，研究员，环境科学系系主任。2005 年和 2011 年分别获得北京大学学士和博士学位，2012 年 5 月至 2015 年 1 月在 Texas A&M University 从事博士后研究工作，2015 年 2 月晋升为助理研究员，2015 年 7 月起在北大环境科学与工程学院任职，2021 年晋升长聘副教授。主要研究方向为二次有机气溶胶的生成机制及其对全球气候和区域重霾的影响，重点关注半挥发/中等挥发有机物分子组成、来源及其对二次有机气溶胶和臭氧的贡献，研究内容涵盖烟雾箱模拟和外场观测。发表一作和通讯 SCI 文章 40 余篇，包括 4 篇 PNAS（3 篇一作）、Chemical Reviews、JACS、ES&T 和 ACP 等，总引用 8500 余次，H-index 45。入选 Elsevier 2020 和 2023 年世界排名前 2%科学家排行榜“年度影响力”榜单。曾获国家自然科学奖二等奖、教育部自然科学奖一等奖、中国颗粒学会青年颗粒家奖等，入选国家环境保护专业技术青年拔尖人才。

现任国际期刊 Atmospheric Environment 副主编，中国颗粒学会青年理事，中国环境科学学会大气环境分会委员会委员、臭氧污染控制专业委员会委员、污染源排放与管控专业委员。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

典型挥发性化学品大气转化生成二次有机气溶胶的分子机制

付自豪[1]，郭松[1,*]，胡敏[1]

[1] 北京大学环境科学与工程学院 北京 100871

*Email: songguo@pku.edu.cn

摘要正文：挥发性有机化合物(VOCs)是导致大气污染的重要元凶之一。随着对源自化石燃料相关的交通和工业污染源的监管更加严格，近年来，城市大气中的VOCs排放源正在发生重大转变。挥发性化学品(VCPs)，特别是年产量超过1000吨的高产量VCPs的广泛使用，包括个人护理品、化妆品、清洁剂、涂料和黏合剂等，已成为城市大气VOCs新的重要来源。这些VCPs具有较高的大气浓度，在大气氧化过程中会贡献颗粒物和毒性产物的生成，导致严重的大气二次污染问题。然而，目前对于VCPs氧化导致大气二次污染的机制了解甚少。VCPs大气氧化机制的研究仍局限于引发反应，对于VCPs衍生的过氧自由基(RO_2·)的大气反应机制尚不清楚。一般认为传统RO_2·的后续转化以RO_2·与NO/HO_2·的双分子反应为主，显著抑制RO2·单分子反应的发生。然而，一些VCPs包含不同于传统VOCs的杂原子和官能团，导致VCPs相关RO2·具有区别于传统RO_2·的新型大气氧化机制。VCPs的大气转化难以根据传统VOCs的大气转化机制进行推测，阻碍了对于VCPs大气二次污染成因和环境影响的全面理解。因此，从大气二次污染源解析及化学品环境风险评价角度来看，亟待关注高产量VCPs衍生RO_2·的大气反应机制。

近年来，我们采用量子化学计算和动力学模拟方法，研究了三类高产量VCPs，甲基硅氧烷(图1A)、有机磷酸酯(图1B)和柠檬烯大气氧化形成的RO2·的反应机制[1-3]。揭示了三类新型的大气自氧化机制，研究发现甲基硅氧烷通过新型自氧化机制，高产率生成甲醛，增加室内甲醛污染，造成环境风险。而磷酸酯和柠檬烯的大气氧化则通过自氧化反应，生成贡献二次颗粒物的新型前驱体，贡献二次颗粒物的形成。研究结果不仅拓展了对于大气过氧自由基化学的认识，也为挥发性化学品的环境行为模拟和风险评估提供了分子水平的科学依据。

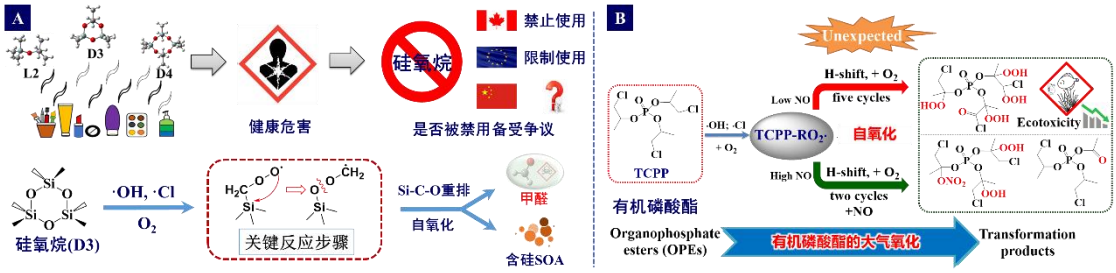


Fig. 1 Atmospheric oxidation mechanism of methylsiloxane (A) and organophosphate (B)

关键词：大气计算化学；挥发性化学品；硅氧烷；有机磷酸酯；转化机制

参考文献

[1] **Fu Zihao, et al., A Near-Explicit Reaction Mechanism of Chlorine-Initiated Limonene: Implications for Health Risks Associated with the Concurrent Use of Cleaning Agents and Disinfectants. *Environmental Science & Technology*, 2024, https://doi.org/10.1021/ acs.est.4c04388**

[2] **Fu Zihao, et al., Atmospheric Autoxidation of Organophosphate Esters. *Environmental Science & Technology*, 2022, 56(11): 6944-6955.**

[2] **Fu Zihao, et al., Formation of Low-Volatile Products and Unexpected High Formaldehyde Yield from the Atmospheric Oxidation of Methylsiloxanes. *Environmental Science & Technology*, 2020, 54(12): 7136-7145.**

报告人/墙报展示人简介：

付自豪，北京大学博雅博士后，合作导师是北京大学环境科学与工程学院郭松研究员。主要从事挥发性有机物大气转化机制及环境影响方面的理论研究。采用计算模拟方法，围绕挥发性化学品的大气氧化机制、芳香类污染物的界面吸附转化行为以及苯系物新型反应机制对 SOA 生成贡献等关键大气化学过程，开展了持续的分子机制揭示工作。已发表高质量 SCI 论文 10 篇(第一作者 7 篇)，包括环境领域权威期刊 Environmental Science & Technology 三篇和化学领域权威期刊 Chemical Science 一篇等。目前获得国家自然科学基金青年科学基金项目和博士后面上项目资助各一项。

Gas-to-particle partitioning of atmospheric water-soluble organic aerosols: Indications from high-resolution observations of stable carbon isotope

Yu Hao-Ran[1,2], Zhang Yan-Lin[1,2,*]

[1]School of Ecology and Applied Meteorology, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing, 210044

[2]Atmospheric Environment Center, Joint Laboratory for International Cooperation on Climate and Environmental Change, Ministry of Education, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing, 210044

* 002632@nuist.edu.cn

One-hour resolution observations of stable carbon isotopes in both gaseous water-soluble organic carbon (WSOCg) and particulate water-soluble organic carbon (WSOCp) were conducted at a city site in the Yangtze River Delta. WSOCg exhibited significantly higher concentrations and lower 13C compared to WSOCp. The presence of radiation emerged as a crucial factor influencing the gas-particle partitioning mechanism of WSOC. There appeared to be distinct formation processes for WSOCp and WSOCg during nighttime, except on hazy days with elevated particulate matter concentrations. Gas-particle partitioning of WSOC may become inactive in environments with high temperatures and ozone concentrations, while it may become active in environments characterized by high relative humidity (RH) and elevated WSOCg concentrations. When addressing WSOC pollution, it's essential to focus not only on its sources but also on the suitable environmental conditions for gas-particle partitioning. Active gas-particle partitioning of WSOC may coincide with the formation of secondary inorganic ions (NH_4^+, NO_3^- and SO_4^{2-}). Thus, in targeting WSOC sources, it's imperative to implement coordinated strategies to control the sources of secondary inorganic ions.

Keywords: $\delta^{13}C$; WSOC; Gas-particle partitioning; Secondary inorganic ion

报告人简介：

俞浩然，1997 年生，南京信息工程大学博士研究生。主要研究领域为大气含氮、含碳气溶胶的同位素示踪，现有研究方向为大气硝酸盐气溶胶气-粒转化机制、大气硝酸盐气溶胶及其气态前体的来源解析，已发表 SCI(E)文章 3 篇。

附：报告人为学生

成核增长和老化过程对粒子成云潜力的影响研究

任静烨[1,2]，张芳[3]

[1]中国科学院地球环境研究所，陕西西安，710061

[2]西安地球环境创新研究院，陕西西安，710061

[3]哈尔滨工业大学（深圳），广东深圳，518055

*Email: renjingye@ieecas.cn

摘要正文：云凝结核（Cloud Condensation Nuclei，CCN）是气溶胶气候效应评估的关键中间变量，认识污染区域气溶胶粒子的成核增长和老化过程是如何影响其活化特性的，将有助于提高对 CCN 数浓度预测的准确性。基于文献调研（全球 35 个站点观测和模式模拟）和外场实测，研究表明成核增长事件对 CCN 数浓度的增长因子与新形成粒子生长到 CCN 尺寸大小的时间尺度呈反相关，与颗粒物质量浓度呈现出良好的相关性。表明新粒子增长到 CCN 尺寸大小所需的时间越少，CCN 数浓度的增长倍数越大。颗粒物质量浓度越高，CCN 数浓度的增长倍数越大。污染条件下，高浓度的人为气态前体物（如 SO_2、VOCs）有利于促进新形成粒子的凝结增长。而在偏远和清洁的条件，较低的气态前体物和预先存在的气溶胶颗粒物浓度可能会抑制新形成粒子的凝结增长。进一步结合外场实测的粒子吸湿特性，以黑碳（Black Carbon，BC）为例，结合κ-Köhler 理论，反演了老化过程中黑碳粒子混合状态和有效密度的演变，及其对 CCN 数浓度预测的影响。结果表明 BC 颗粒以老化的内部混合态为主，平均质量分数约占 80±20%。总 BC 和内混 BC 密度的变化范围在~0.1~2.5 g cm^{-3}之间，均值分别为 0.7±0.5 g cm^{-3}和 1.1±0.6 g cm^{-3}，表明受局地排放源和老化过程的复杂影响，真实大气条件中环境 BC 颗粒的形貌（密度）、老化程度和组成呈现显著差异。BC 混合态和密度对 CCN 活性的敏感性测试表明，在云中典型过饱和度 S 为 0.23%和 0.40%时，通过变化环境 BC 颗粒的混合态和密度值（下限值：0.14 g cm^{-3}，上限值 2.1 g cm^{-3}），N_{CCN} 预测的不确定性为-28%~+11%。此外，当 BC 密度<1.0 g cm^{-3}时，CCN 浓度的估算对 BC 密度的变化更为敏感，表明当环境 BC 颗粒老化程度较低时，考虑 BC 密度对评估其气候效应具有重要意义。

关键词：大气气溶胶；吸湿活化；成核增长；老化过程；云凝结核；

参考文献

[1] **Ren, J., Chen, L., Liu, J., and Zhang, F*. The density of ambient black carbon retrieved by a new method: implications for cloud condensation nuclei prediction.** ***Atmospheric Chemistry and Physics*****, 23, 4327–4342, 2023.**

[2] **Ren, J., Chen, L., Fan, T., Liu, J., Jiang, S., Zhang, F*. The NPF effect on CCN number concentrations: A review and re-evaluation of observations from 35 sites worldwide.** ***Geophysical Research Letters*****, 48, e2021GL095190, 2021.**

报告人/墙报展示人简介：

任静烨，博士，研究方向为气溶胶的微物理特性，吸湿增长和云凝结核活性及其环境气候效应。主要基于多种手段和方法（外场观测、区域模式 WRF-Chem 模拟和机器学习模型等），针对污染区域大气气溶胶（细颗粒物）理化特性对云凝结核预测的影响因素，及其时空尺度的预测开展研究。已发表 SCI 收录论文 22 篇，（一作 6 篇），主要发表在 *EST, GRL, ACP, JGR-atmosphere* 等领域内一区或 Top 期刊。先后主持青年人才支持计划、市局创新项目 2 项，参与国家自然科学基金面上项目 2 项，973 计划子课题 1 项。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Direct measurement of the effective density of black carbon aerosol with a DMA-CPMA-SP2 system and implications for black carbon shape variation and dry deposition

刘航 [1]，潘小乐 [1]，王自发 [1]

[1] 中国科学院大气物理研究所，北京，100029

*Email：liuhang@mail.iap.ac.cn

The effective density (ρ_{eff}) is a key parameter of black carbon-containing (BCc) particles and is related to their morphologies, deposition processes, and optical properties. In this study, a tandem system was established and used to determine the ρ_{eff} of ambient BCc particles. The results showed that the ρ_{eff} distribution of ambient BCc particles exhibited a bimodal pattern with a left peak located at 0.69 g/cm^3 and a right peak located at 1.45 g/cm^3. The average ρ_{eff} of BCc particles over the entire observation period was 1.38 g/cm^3. The ρ_{eff} of BCc particles showed a clear diurnal pattern with a relatively stable distribution at night and large variations during the daytime. The ρ_{eff} value was demonstrated to be a good indicator of BCc particle morphology. BCc particles became more regular with increasing ρ_{eff} related to the increasing coating thickness. More coating led to morphological restructuring of BCc particles. The restructuring could be more efficient under high relative humidity conditions. The observed data was further used in a dry deposition scheme, it's found the dry deposition velocity of fresh emitted BCc could be largely influenced by its irregular shape. This study would be helpful for BCc's physical property analyses and health risk evaluation.

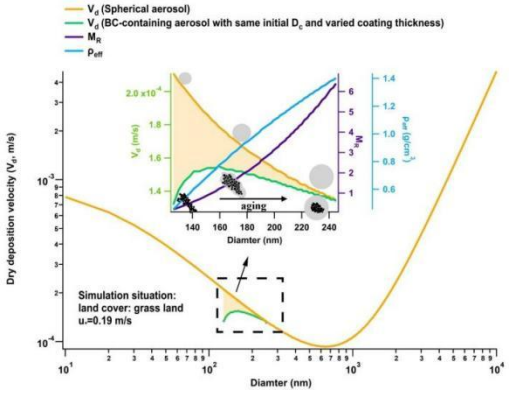


Figure 1. The simulated dry deposition velocity of BC-containing aerosol and spherical aerosol. The simulated BCc aerosols are with same diameter of BC core (the average diameter of BC core during the observation) and different coating thickness. The shaded area denotes the dry deposition velocity difference between BC-containing aerosols and spherical aerosols.

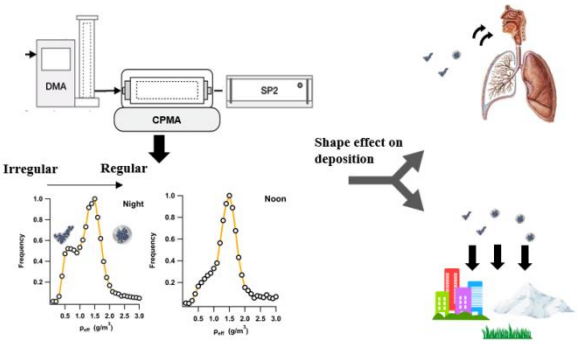


Figure 2. Abstract figure

羰基化合物与铵/胺液相反应生成棕碳的实验室模拟研究

杨露[1]，黄汝锦[1,*]，袁伟[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，陕西省西安市雁塔区雁翔路 97 号，710061

*Email: rujin.huang@ieecas.cn

摘要正文：棕碳气溶胶对全球气候和空气质量有重要影响，实验室研究表明羰基化合物与铵盐/有机胺液相反应可以有效生成棕碳[1, 2]，但是目前对这类反应生成棕碳的反应动力学、发色团化学组成及反应通道、以及影响因素的认识还非常有限。本研究针对上述问题在实验室开展大气中最重要的羰基化合物乙二醛及甲基乙二醛分别与 2 类铵盐和 4 类有机胺的液相反应研究，基于反应过程中吸光系数（300-500 nm）的变化规律求得了各反应体系生成棕碳的反应速率常数，通过对比分析讨论了影响这类反应中棕碳生成动力学的关键因素，建立了这类反应 pH 参数化的棕碳生成速率常数，乙二醛和甲基乙二醛反应体系分别为 $\log_{10}(k^{1,1}_{BrC}) = (1.0 \pm 0.1)\times pH - (7.4 \pm 1.0)$和 $\log_{10}(k^{1,1}_{BrC}) = (1.0 \pm 0.1)\times pH - (6.3 \pm 0.9)$，这一结果为模式中液相途径生成棕碳的模拟提供了数据输入参数。对反应体系中发色团表征结果表明，反应中总共识别了 180 种发色团组分，按其类别分为咪唑、吡咯、吡嗪、吡啶和咪唑-吡咯五大类，其中超过 80%为本研究新识别的组分，额外解释了棕碳 9%-69%的吸光，进一步根据前体物、中间体及终产物的关系推断了新识别发色团的可能生成路径。pH 对发色团的生成和转化有重要影响，增加 pH 可以促进铵盐反应体系中吡嗪类发色团的生成，但是会抑制甲基乙二醛与有机胺反应中吡咯类发色团的生成，增加 pH 还会促进小分子氮杂环类发色团转化为具有更高分子量的氮杂环与羰基化合物的低聚物。本研究新识别的发色团组分可用于示踪实际大气液相过程中二次棕碳气的生成与演化。

关键词：棕碳；羰基化合物；发色团组成；液相反应机制

参考文献

[1] **M. H. Powelson, B. M. Espelien, L. N. Hawkins, M. M. Galloway, and D. O. De Haan Brown Carbon Formation by Aqueous-Phase Carbonyl Compound Reactions with Amines and Ammonium Sulfate.** ***Environ. Sci. Technol.*** **2014, 48:985–993.**

[2] **C. J. Kampf, A. Filippi, C. Zuth, T. Hoffmann, and T. Opatz Secondary brown carbon formation via the dicarbonyl imine pathway: nitrogen heterocycle formation and synergistic effects.** ***Phys. Chem. Chem. Phys.*** **2016, 18, 18353–18364.**

报告人/墙报展示人简介：

报告人杨露，助理研究员，博士毕业于中国科学院地球环境研究所，专业为环境科学，研究方向为棕碳气溶胶分子组成、来源和生成机制。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

“煤改气”工程后大气棕碳气溶胶中含有更多水溶性组分

袁伟[1]，黄汝锦[1, 2*],沈金灿[3]，王锴[4]，杨露[1]，王婷[1]，龚玉权[1]，曹文娟[1]，郭洁[1]，倪海燕[1]，段静[1]，Thorsten Hoffmann[5]

[1]中国科学院地球环境研究所，西安，710061

[2]中国科学院大学，北京，100049

[3]深圳海关检疫技术中心，深圳，518045

[4]中国农业大学，北京，100193

[5]德国美因茨约翰内斯古腾堡大学，美因茨，55128

*Email: rujin.huang@ieecas.cn

摘要正文：大气减排措施的实施有效减少了北京大气细颗粒物（$PM_{2.5}$）浓度，其中“煤改气”工程效果显著。然而，减排措施对大气棕碳（BrC）气溶胶的影响还不是很清楚。我们测量了 2015（“煤改气”工程前）和 2019 年（“煤改气”工程后）北京供暖期 BrC 的吸光特征和化学组成。与 2015 年（23.0 ± 14.2 M m^{-1}）相比，2019 年北京 BrC 的吸光显著下降（10.0 ± 6.2 M m^{-1}），其中水不溶性 BrC（WI-BrC）组分吸光下降较多（~80%），水溶性 BrC（WS-BrC）组分吸光下降较少（~30%）。WS-BrC 对 365 nm 处总 BrC 的吸光贡献在 2015 年约为 50%，而在 2019 年超过 70%，且超过 70%的 WS-BrC 吸光来自其中的类腐殖质棕碳（HULIS-BrC）组分。这些结果表明，“煤改气”工程后，北京大气 BrC 的减少主要是由于不完全燃烧（如燃煤燃烧）产生的 WI-BrC 物质的排放减少引起的，且 2019 年北京 BrC 的化学组成不同于 2015 年。采用高效液相色谱（HPLC）-光电二极管阵列（PDA）光谱-高分辨率 Orbitrap 质谱（HRMS）联用仪（HPLC-PDA-HRMS），检测了 HULIS-BrC 和 WI-BrC 组分中的棕碳化学组成特征，并定量了其中的主要发色团。“煤改气”工程后，HULIS-BrC 组分发色团的数量增加了约 14%，而 WI-BrC 组分发色团的数量减少了约 8%。相对于“煤改气”工程前，“煤改气”工程后超过 90%的 HULIS-BrC 发色团的质谱峰强度是增加的，且其中 CHO 和 CHON 发色团的 O/C 比值大体上随着“煤改气”工程后/“煤改气”工程前相应强度比的增加而增加，表明“煤改气”工程后 BrC 组分中含有更多的水溶性高氧化发色团。与 HULIS-BrC 组分情况相反，与“煤改气”工程前相比，“煤改气”工程后超过 80%的 WI-BrC 发色团的质谱峰强度是减少的，且其中 CHO 和 CHON 发色团的 O/C 比值大体上随着“煤改气”工程后/“煤改气”工程前相应强度比的减少而减少，表明“煤改气”工程后 BrC 组分中水不溶性低氧化发色团减少。2015 年 BrC 的吸光中 WI-BrC 贡献显著，其主要发色团组成为多环芳烃及其衍生物（PAHs），因不同 PAHs 发色团的吸收光谱差异较大而呈现多个吸收峰。2019 年 BrC 的吸光以 HULIS-BrC 为主，其主要发色团组成为硝化芳族化合物（NAC），其在约 325 nm 的波长处显示出一个吸收峰。

关键词：“煤改气”工程；棕碳气溶胶；吸光性质；化学组成

参考文献

[1] **W. Yuan, R.-J. Huang, J. Shen, K. Wang, L. Yang, T. Wang, Y. Gong, W. Cao, J. Guo, H. Ni, J. Duan, and T. Hoffmann More water-soluble brown carbon after the residential “coal-to-gas” conversion measure in urban Beijing.*npj Clim. Atmos. sci.* 2023, 6, 20.**

[2] **W. Yuan, R.-J. Huang, J. Shen, L. Yang, T. Wang, W. Cao, J. Guo, H. Ni, J. Duan, and T. Hoffmann The effects of “coal-to-gas” project on brown carbon aerosol in urban Beijing.*in prep.* 2024.**

华东地区秸秆燃烧对空气质量和大气辐射的影响

郑元媛[1,2]，韩志伟[2,*]，吴涧[1]，李嘉伟[2]

[1]云南大学，昆明，650091

[2]中国科学院大气物理研究所东亚区域气候—环境重点实验室，北京，100029

*Email：hzw@mail.iap.ac.cn

摘要正文：利用空气质量模式 RAQMS（Regional Air Quality Model System）与 GFED4.1s 清单逐日数据相结合，模拟研究了 2015 年 6 月 19-22 日华东地区（安徽北部地区）一次秸秆燃烧事件发生时气象要素和气溶胶化学组分特征，讨论了秸秆燃烧对空气质量、$PM_{2.5}$ 及其化学组分、短波辐射的影响和贡献。考虑了逐日的秸秆燃烧排放源之后，RAQMS 模拟的秸秆燃烧事件中 $PM_{2.5}$ 及其化学组分质量浓度与观测值更接近，体现了在空气质量模式中考虑秸秆燃烧源的必要性。秸秆燃烧对黑碳的浓度影响最大，使蚌埠和淮南黑碳分别增加 34.0%和 31.3%，使 $PM_{2.5}$ 和其他组分（有机碳、硫酸盐、硝酸盐、铵盐）浓度也增加，在蚌埠为 19.8%、15.9%、5.6%、17.8%、19.7%，在淮南为 17.6%、17.5%、5.2%、14.7%、18.8%。秸秆燃烧排放最强 20 日时，蚌埠和淮南受秸秆燃烧影响日均 AOD 增加 0.27、0.23，白天平均短波辐射减少 18.2W/m^2、14.1W/m^2，其中白天短波辐射最大减少 44.3W/m^2、33.4W/m^2。

关键词：秸秆燃烧；空气质量；短波辐射；$PM_{2.5}$

报告人(学生)：

郑元媛，女，博士研究生。本科毕业于云南大学大气科学系，硕士毕业于云南大学大气物理学与大气环境，主要从事生物质燃烧气溶胶数值模拟研究，Email：zyy@tea.ac.cn。

城市大气棕色碳光漂白分子水平的直接观测证据

裘彦挺[1]，邱涛[2]，吴志军[1,*]，刘艳娜[3]，房文旭[1]，满睿琪[1]，刘玥晨[1]，王均睿[1]，孟祥馨悦[1]，陈景川[1]，梁大鹏[2]，郭松[1]，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]吉林大学新能源与环境学院，吉林省长春市前进大街 2699 号，130012

[3] 中国科学院生态环境研究中心，北京市海淀区双清路 18 号，100085

*Email: zhijunwu@pku.edu.cn

摘要正文：作为大气中重要的吸光性碳质气溶胶，棕色碳（BrC）在全球辐射平衡中具有重要作用[1]。BrC在化学上具有不稳定性，因此很容易在大气中发生以光化学老化为代表的老化过程。光老化过程导致BrC的吸光性和分子组成发生变化，这是造成评估其全球辐射强迫效应时存在不确定性的重要原因[2]。本研究在北京采集了冬季和夏季的大气BrC样品，使用超高效液相色谱-串联质谱法对其分子组成进行了分析。在两个季节的BrC样品中，共检测到了896种有机物，占总有机气溶胶质量浓度的2.5%-26.1%。从吸光性的角度上来看，随着采样期间光照强度的升高，BrC在375 nm处的质量吸收系数（MAC_{375}）降低，这说明BrC在大气中发生了光漂白。从分子组成变化的角度上来看，光照强度的升高伴随着强生色团（包括硝基酚、有机硝酸酯、有机硫酸酯）的浓度占比降低，而羧酸的浓度占比升高。实验室实验和外场观测结果都表明，在BrC光老化过程中，硝基羧酸在羧酸中的质量浓度占比明显升高，这一现象伴随着MAC_{375}最多83.3%的降低。结合分子组成分析和理论化学计算结果，硝基羧酸可能是由硝基酚类转化而来，硝基羧酸的吸光性明显弱于硝基酚。总结来看，本研究从分子水平的角度提供了BrC光漂白的直接外场观测证据，阐明了城市大气中潜在的BrC光漂白途径。（图1）

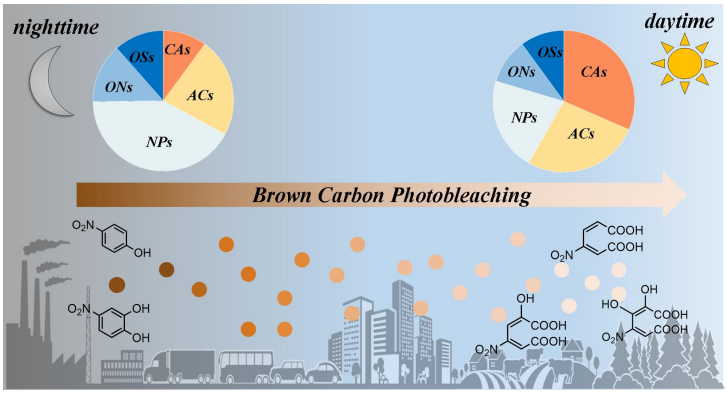


Fig. 1 The evolution in the light-absorption properties and molecular composition of BrC in urban atmospher

关键词：棕色碳；光漂白；分子组成

参考文献

[1] **Pösch U. Atmospheric Aerosols: Composition, Transformation, Climate and Health Effects. *Angew. Chem. Int. Ed.*. 2005, 44: 7520-7540.**

[2] **Liu D., He C., Schwarz J., and Wang X. Lifecycle of light-absorbing carbonaceous aerosols in the atmosphere. *npj Clim. Atmos. Sci.*, 2020, 3: 40.**

报告人/墙报展示人简介：

裘彦挺，北京大学博士后、助理研究员。研究方向为棕色碳的大气光化学老化机制及其影响因素、大气环境大数据分析。以第一/共同第一作者身份发表 SCI 论文 4 篇。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Aromatic nitration enhances absorption of biomass burning brown carbon in an oxidizing urban environment

Jing Duan[1] , Ru-Jin Huang[1,2,3*], Chunshui Lin[1 *], Jincan Shen[4] , Lu yang[1] , Wei Yuan[1] , Ying Wang[1] , Yi Liu[1] , Wei Xu[5]

[1] State Key Laboratory of Loess Science, Institute of Earth Environment, Chinese Academy of Sciences, Xi'an 710061, China

[2] Institute of Global Environmental Change, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China

[3] University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

[4] Key Laboratory of Detection Technology R & D on Food Safety, Food Inspection and Quarantine Technology Center of Shenzhen Customs District, Shenzhen 518045, China

[5] Center for Excellence in Regional Atmospheric Environment, Institute of Urban Environment, Chinese Academy of Sciences, Xiamen, China

* rujin.huang@ieecas.cn; linchunshui@ieecas.cn

Brown carbon (BrC) from biomass burning constitutes a significant portion of light-absorbing components in the atmosphere. Although the aging of BrC surrogates from biomass burning has been studied in many laboratory settings, BrC aging behavior in real-world urban environments is not well understood. In this study, through a combination of online dynamic monitoring and offline molecular characterization, the ambient optical aging of BrC was linked to its dynamic changes in molecular composition. Enhanced light absorption by BrC was consistently observed during the periods dominated by oxygenated biomass burning organic aerosol (BBOA), in contrast to periods dominated by primary emissions or secondary formation in aqueous-phase. This enhancement was linked to the formation of nitrogen-containing compounds during the ambient aging of BBOA. Detailed molecular characterization, alongside analysis of environmental parameters, revealed that an increased atmospheric oxidizing capacity, marked by elevated levels of ozone and nighttime NO_3 radicals, facilitated the formation of nitrated aromatic BrC chromophores. These chromophores were primarily responsible for the enhanced light absorption during the ambient aging of BBOA. This study elucidates the nitration processes that enhance BrC light absorption for ambient BBOA, and highlights the crucial role of meteorological conditions. Furthermore, our findings shed light on the chemical and optical aging processes of biomass burning BrC in ambient air, offering insights into its environmental behavior and effects.

Keywords: brown carbon, biomass burning, atmospheric aging, molecular composition, nitrogen-containing chromophores

References

[1] J. Duan, R. J. Huang, Y. F. Gu, C. S. Lin, H. B. Zhong, W. Xu, Q. Liu, Y. You, J. Ovadnevaite, D. Ceburnis, T. Hoffmann, C. O'Dowd, Measurement report: Large contribution of biomass burning and aqueous-phase processes to the wintertime secondary organic aerosol formation in Xi'an, Northwest China, Atmos. Chem. Phys. 2022, 22 (15), 10139−10153.

[2] J. Duan, R. J. Huang, Y. F. Gu, C. S. Lin, H. B. Zhong, Y. Wang, W. Yuan, H. Y. Ni, L. Yang, Y. Chen, D. R. Worsnop, C. O'Dowd, The formation and evolution of secondary organic aerosol during summer in Xi'an: Aqueous phase processing in fog-rain days, Sci. Total. Environ. 2021, 756, 144077.

是否为学生：否

Redox Conversion of Elemental Carbon in Soot Remarkably Promotes HONO and Sulfate Formation

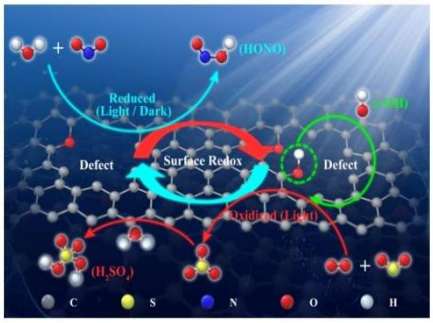
Peng Zhang[1]，Hao Li[1]，Hong He[1,2*]

[1] Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences，18 Shuangqing Road, Haidian District, Beijing, 100085

[2] Institute of Urban Environment, Chinese Academy of Sciences，1799 jimei Road ,Xiamen China，361021

*honghe@rcees.ac.cn

Heterogeneous catalytic processes on soot have attracted great attention in recent years due to their accelerating role to the exacerbation of urban haze pollution. However, the surface catalytic mechanism remains largely ambiguous. Here we provide an in-depth exploration of the heterogeneous conversion of NO_2 and SO_2 on soot. By combining *in-situ* experiments with density functional theory (DFT) calculations, we demonstrate that the redox conversion of graphene-like elemental carbon (EC) on hole defects in soot can induce the heterogeneous conversion of SO_2 and NO_2. In particular, SO_2 oxidation and NO_2 reduction can be mutually promoted with the redox conversion of EC. Through splitting H_2O molecules, EC can be oxidized to form hydroxyl-functionalized EC (EC-OH) while simultaneously reducing NO_2 to form HONO. Conversely, EC-OH can be re-reduced to EC when photoinduced OH radicals oxidize SO_2 to produce sulfate or H_2SO_4. Our finding highlights the significance of the redox conversion of EC on hole defects in driving the production of HONO and sulfate, which has a significant effect on elevating the atmospheric oxidation capacity and causing fine particle growth.



Keywords: Soot；Graphene；Heterogeneous reaction; Photochemistry

References

[1] Zhang P, Hong He*l. Insight into the Mechanism and Kinetics of the Heterogeneous Reaction between SO2 and NO2 on Diesel Black Carbon under Light Irradiation. Environmental Science & Technology, 2023, 57(46): 17718-17726.

[2] Zhang P, Li H, Hong He*. SO2 Photoaging Enhances the Surface Conversion of NO2-to-HONO on Elemental Carbon. Environmental Science & Technology Letters, 2024, 11(2): 143-149.

报告人简介：

张鹏　副研究员

大气气溶胶化学

中国科学院生态环境研究中心

控制臭氧生成对缓解深圳冬季$PM_{2.5}$污染的决定性作用

唐梦雪[1]，黄晓锋[1,*]，程勇[1]，陈政[2]，曹礼明[1]，何凌燕[1]

[1]北京大学深圳研究生院环境与能源学院，大气观测超级站点实验室，广东 深圳，518055

[2]北京大学环境科学与工程学院，环境模拟与污染控制国家重点联合实验室，北京，100871

*Email: huangxf@pku.edu.cn

摘要正文：近年来，深圳$PM_{2.5}$浓度显著下降，2023年$PM_{2.5}$年均浓度低至18 μg/m³，但在冬季仍有颗粒物污染事件发生，二次组分在其中贡献突出。二次气溶胶的生成受到大气氧化性、气象条件、前体物排放等影响，其间存在复杂的相互作用且尚未厘清。本研究利用深圳密集的空气质量监测网和大学城大气观测超级站，对2020年因疫情爆发导致的区域范围的封控以及2022年3月因疫情导致的深圳“停摆”期间的空气质量变化进行了分析，以探索区域减排和本地减排情境下大气污染物对减排的响应。研究发现，在2020年初因新冠疫情爆发导致的区域大幅减排期间，当深圳大气中O_x（总氧化剂）水平与非疫情正常时期接近时，虽然SO_2、NO_x和挥发性有机物（VOCs）等气态前体物降幅显著（-76–-53%），但是硝酸盐、硫酸盐和SOA仅下降1–14%，说明深圳冬季二次气溶胶下降的直接驱动因素并非前体物浓度；SOA与O_x的良好相关性说明冬季降低大气氧化性才是削减SOA的有效途径。此外，通过2022年3月深圳因新冠疫情“停摆”形成的本地减排案例进一步证明了控制O_x对削减SOA的重要性。本地减排案例中O_x的降幅（-8%）低于区域减排的案例（-31%），说明了大范围和高强度减排对调控O_x的重要性，进而在区域尺度上降低O_x促使城市$PM_{2.5}$持续下降。深圳作为空气质量较好的城市，探究其$PM_{2.5}$改善的原因对未来中国$PM_{2.5}$防治向更高标准迈进更有指导意义。

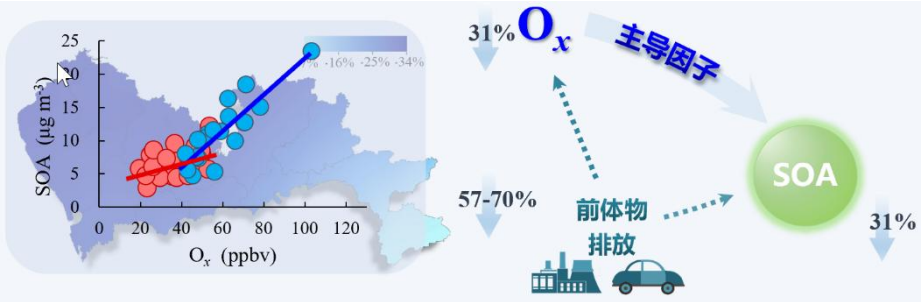


Fig. 1 The relationships of secondary aerosols and O_x, precursors in Shenzhen during the COVID-19 lockdown

关键词：疫情减排；大气氧化性；二次气溶胶；前体物；$PM_{2.5}$

报告人/墙报展示人简介：

唐梦雪，博士毕业于北京大学环境科学与工程学院。从事大气环境化学研究，主要领域为大气氮循环和污染物垂直变化等方面。作为科研骨干参与了多项国家级和地方大气污染研究项目，主要有：国家科技部重点研发计划课题“人为源和生物源有机前体物气相生成二次有机气溶胶机制”，深圳市科技创新委员会基础研究重点项目“深圳大气臭氧污染中自由基关键前体物研究”。发表学术论文 20 余篇，其中 17 篇发表在 SCI 收录期刊上。获广东省环境保护科学技术奖一等奖 1 项。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

城市气团对下风向地区二次有机气溶胶生成的促进作用

蔡明甫[1]，叶晨朔[2]，袁斌[1,*]

[1]生态环境部华南环境科学研究所，广州 510655

[2]广东省环境科学研究院，广州 510045

[3]暨南大学环境与气候学院，广州，51143

*Email: byuan@jnu.edu.cn

摘要正文：相关研究发现城市地区人为排放能够显著促进下风向地区二次有机气溶胶（SOA）的生成，而其作用机制尚不明确。为了探究城市气团中污染物对有机气溶胶（OA）的影响，本研究在珠三角地区典型下风向站点展开秋季外场观测实验，基于气粒双通道进样器的化学电离质谱（FIGAERO-CIMS）分析气相与颗粒相含氧有机分子组分。发现在城市气团影响下，日间出现了由气粒分配过程主导的显著二次有机气溶胶生成，同时有机气溶胶挥发性上升。进一步分析发现，高挥发性有机蒸气（SVOC+IVOC+VOC，$C^* \geq 10^{0.5}$ μg m^{-3}）的气粒分配过程对于日间SOA的生成有重要贡献。采用气粒平衡假设计算高挥发性有机蒸气对SOA的贡献，发现其贡献被严重低估，这可能是因为这些物种在颗粒相与气相的挥发性差异。另外，发现城市气团中高浓度NO_x可能对于低挥发性有机蒸气的生成存在一定的抑制作用。结合盒子模式分析显示，城市气团中高浓度的NO_x与挥发性有机物（VOCs）能够提高下风向地区的大气氧化性。而RO_2生成率处于VOCs敏感区，表明VOCs浓度增加可能是导致SOA生成过程增强的主要原因。

关键词：二次有机气溶胶；外场观测；气溶胶挥发性；化学电离质谱

报告人/墙报展示人简介：

蔡明甫，生态环境部华南环境科学研究所副研究员，中山大学大气物理学与大气环境博士。长期从事大气颗粒物理化性质的外场观测研究工作，重点关注气溶胶吸湿性/挥发性、云凝结核活化特性、二次有机气溶胶生成以及海洋气溶胶，在相关领域发表 SCI 论文 30 余篇，以第一或通讯作者发表文章 7 篇，包括 ACP（4 篇 1 作）、JGR-A（1 作通讯各一）等，主持国家自然科学基金、广东省自然科学基金以及广州市科技计划等科研项目 7 项。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Nitrate-photolysis shortens the lifetimes of Brown Carbon from biomass burning

Yi Liu[1], Ru-Jin Huang[1,2,3*], Chunshui Lin[1*], Wei Yuan[1], Yongjie Li[4], Haobin Zhong[5], Lu Yang[1], Ting Wang[1], Wei Huang[1], Wei Xu[6], Dan Dan Huang[7], Cheng Huang[8]

[1]State Key Laboratory of Loess and Quaternary Geology, Center for Excellence in Quaternary Science and Global Change, Institute of Earth Environment, Chinese Academy of Sciences, Xi'an, 710061

[2]Institute of Global Environmental Change, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049,

[3]University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100049

[4]Department of Civil and Environmental Engineering, Faculty of Science and Technology, University of Macau, Taipa, Macau SAR, 999078

[5]School of Advanced Materials Engineering, Jiaxing Nanhu University, Jiaxing, 314001

[6]Center for Excellence in Regional Atmospheric Environment, Institute of Urban Environment, Chinese Academy of Sciences, Xiamen, 361021

[7]State Environmental Protection Key Laboratory of Formation and Prevention of Urban Air Pollution Complex, Shanghai Academy of Environment Sciences, Shanghai, 200233

[8]State Ecology and Environment Scientific Observation and Research Station for the Yangtze River Delta at Dianshan Lake, Shanghai Environmental Monitoring Center, Shanghai, 200030,

*Email: rujin.huang@ieecas.cn; linchunshui@ieecas.cn

Biomass burning is an important source of brown carbon (BrC) aerosols, which influence climate by affecting the Earth's radiative balance. However, the transformation pathways of BrC chromophores, especially in the presence of photochemically active species such as nitrate, are not well understood. In this study, the nitrate-mediated aqueous-phase photooxidation of three typical BrC chromophores from biomass burning was investigated, including 4-nitrocatechol, 3-nitrosalicylic acid, and 3,4-dinitrophenol. Variations in nitrate concentrations, pH, and temperatures were systematically examined to assess their impacts on the photolysis rates of these BrC chromophores. The results show that increasing nitrate concentrations significantly enhance photolysis rates to 3-3.5 times compared to nitrate-free conditions. Also, a temperature rise from 0 ℃ to 30 ℃ increases photolysis rates by a factor of 1.3-2.5 for these chromophores. However, the effect of pH varies among these chromophores, depending on the substituents and their positions on the benzene ring. High resolution mass spectrometric analysis suggests that the photooxidation of these chromophores initiates with the addition of nitro and/or hydroxyl groups to the benzene ring, followed by ring-opening reaction and the formation of smaller, highly oxygenated molecules including formic acid, glyoxylic acid, malonic acid, and nitropropanoic acid. This study highlights the key role of nitrate in the aqueous-phase photooxidation of BrC, altering the aging pathways and shortening the atmospheric lifetimes of BrC. These results are of particular importance for a better understanding of BrC aging and its radiative forcing, given the increase of nitrate mass fraction in aerosols of China in recent years.

Keywords: brown carbon, nitroaromatic compounds, nitrate photolysis, photo-bleaching, aqueous-phase photooxidation

References

[1] Y. Liu, R. Huang1, C. Lin, W. Yuan, Y. Li, H. Zhong, L. Yang, T. Wan, W. Huang, W. Xu, D. Huang, Cheng Huang, Nitrate-photolysis shortens the lifetimes of Brown Carbon from biomass burning, in preparation.

报告人/墙报展示人简介：

刘依，中国科学院大学地球环境研究所博士研究生在读，主要研究方向为棕碳发色团的液相光化学老化。

附：报告人：学生（博士研究生）

α-酰氧基有机过氧化物和亚铁离子的快速类芬顿反应及其大气意义

常崇轩[1]，臧寒[1]，姚敏[1]，李晨曦[1]，李子悦[1]，王舜瑶[2]，黄汝锦[3]，赵岳[1*]

1 环境科学与工程学院，上海交通大学，上海，200240

2 环境与化学工程学院，上海大学，上海，200444

3 黄土与第四纪地址国家重点实验室，地球环境研究所，中国科学院，西安

通讯地址：yuezhao20@sjtu.edu.cn

摘要正文：二次有机气溶胶（SOA）是大气细颗粒物的重要组分，对空气质量、人体健康和气候产生深远影响。[1-4]有机过氧化物（POs）作为其中重要的活性中间体，能够显著影响气溶胶的生成和演化。[5,6]然而，目前人们对于 POs 在大气中生成转化过程的详细动力学和机制尚不清楚。因此，本研究旨在探讨在不同 pH、水含量和温度条件下，α-酰氧基有机过氧化物（AAHPs）和亚铁离子（Fe^{2+}）的反应，测定其反应速率常数，厘清该反应的反应机理，并评估这些反应在大气中的重要性及其对气溶胶化学和健康影响的意义。

首先，我们通过液相臭氧氧化合成了七种以α-蒎烯和不同羧酸为前体物的 AAHPs，然后使用超高效液相色谱-质谱测定了 AAHPs 的衰减速率及其反应产物。此外，我们还使用对苯二甲酸作为荧光探针，测定了反应中羟基自由基产率的上限。

实验结果表明，AAHPs 类芬顿反应速率相比其水解速率快两个数量级，而之前的研究普遍认为水解是 AAHPs 在大气中转化的主要途径。[7,8]此外，其反应速率常数与 pH、水含量和温度都呈现正相关关系。我们发现不同 AAHPs 的反应活性差异显著，O/C 比越高的 AAHPs 类芬顿反应的速率越快，并且二者之间存在良好的相关关系（相关系数超过 0.99），因此可以用 O/C 来预测其他结构 AAHPs 类芬顿反应的活性。研究中我们检测到 AAHPs 类芬顿反应的主要产物是一系列酸酐，其来自于烷氧自由基的分解，与之相对的是我们没有检测到产生羟基自由基的相关产物。因此，我们进一步使用对苯二甲酸作为荧光探针，测定得到反应中羟基自由基的产率上限约为 16%，印证了 AAHPs 的主要反应途径是产生烷氧自由基而不是羟基自由基。

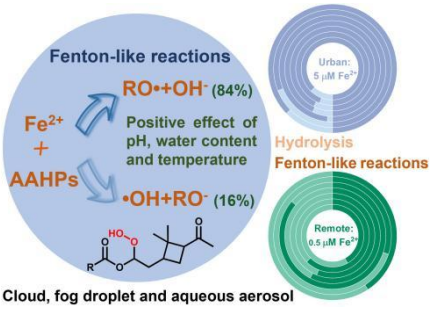


Fig1. The Fenton-like reaction of AAHPs mainly produces alkoxy radicals, and its reaction rate constant is positively correlated with pH, temperature, and water content. The Fenton-like reaction is an important pathway for AAHPs decomposition in both urban and remote atmosphere.

本研究首次系统量化了 AAHPs 与 Fe^{2+}之间类芬顿反应速率，揭示了其主要反应路径和产物，并建立了 AAHPs 的 O/C 比与类芬顿反应活性之间的经验关系。结果表明，在城市大气和偏远地区，类芬顿反应可能是 AAHPs 主要的降解途径，这对气溶胶的老化和健康影响具有重要意义，为理解 AAHPs 在大气中的归趋及其对气溶胶化学和健康影响提供了新的见解。

关键词：有机过氧化物、过渡金属离子、类芬顿反应、α-酰氧基有机过氧化物、自由基

参考文献

[1] Jimenez, J. L.; Canagaratna, M. R.; Donahue, N. M.; Prevot, A. S. H.; Zhang, Q.; Kroll, J. H.; DeCarlo, P. F.; Allan, J. D.; Coe, H.; Ng,

N. L.; Aiken, A. C.; Docherty, K. S.; Ulbrich, I. M.; Grieshop, A. P.; Robinson, A. L.; Duplissy, J.; Smith, J. D.; Wilson, K. R.; Lanz, V. A.; Hueglin, C.; Sun, Y. L.; Tian, J.; Laaksonen, A.; Raatikainen, T.; Rautiainen, J.; Vaattovaara, P.; Ehn, M.; Kulmala, M.; Tomlinson, J. M.; Collins, D. R.; Cubison, M. J.; E.; Dunlea, J.; Huffman, J. A.; Onasch, T. B.; Alfarra, M. R.; Williams, P. I.; Bower, K.; Kondo, Y.; Schneider, J.; Drewnick, F.; Borrmann, S.; Weimer, S.; Demerjian, K.; Salcedo, D.; Cottrell, L.; Griffin, R.; Takami, A.; Miyoshi, T.; Hatakeyama, S.; Shimono, A.; Sun, J. Y.; Zhang, Y. M.; Dzepina, K.; Kimmel, J. R.; Sueper, D.; Jayne, J. T.; Herndon, S. C.; Trimborn, A. M.; Williams, L. R.; Wood, E. C.; Middlebrook, A. M.; Kolb, C. E.; Baltensperger, U.; Worsnop, D. R. Evolution of Organic Aerosols in the Atmosphere. *Science* **2009**, *326* (5959), 1525–1529. https://doi.org/10.1126/science.1180353.

[2] Huang, R.-J.; Zhang, Y.; Bozzetti, C.; Ho, K.-F.; Cao, J.-J.; Han, Y.; Daellenbach, K. R.; Slowik, J. G.; Platt, S. M.; Canonaco, F.; Zotter, P.; Wolf, R.; Pieber, S. M.; Bruns, E. A.; Crippa, M.; Ciarelli, G.; Piazzalunga, A.; Schwikowski, M.; Abbaszade, G.; Schnelle-Kreis, J.; Zimmermann, R.; An, Z.; Szidat, S.; Baltensperger, U.; Haddad, I. E.; Prévôt, A. S. H. High Secondary Aerosol Contribution to Particulate Pollution during Haze Events in China. *Nature* **2014**, *514* (7521), 218–222. https://doi.org/10.1038/nature13774.

[3] Cohen, A. J.; Brauer, M.; Burnett, R.; Anderson, H. R.; Frostad, J.; Estep, K.; Balakrishnan, K.; Brunekreef, B.; Dandona, L.; Dandona, R.; Feigin, V.; Freedman, G.; Hubbell, B.; Jobling, A.; Kan, H.; Knibbs, L.; Liu, Y.; Martin, R.; Morawska, L.; Pope, C. A., III; Shin, H.; Straif, K.; Shaddick, G.; Thomas, M.; van Dingenen, R.; van Donkelaar, A.; Vos, T.; Murray, C. J. L.; Forouzanfar, M. H. Estimates and 25-Year Trends of the Global Burden of Disease Attributable to Ambient Air Pollution: An Analysis of Data from the Global Burden of Diseases Study 2015. *The Lancet* **2017**, *389* (10082), 1907–1918. https://doi.org/10.1016/S0140-6736(17)30505-6.

[4] Shrivastava, M.; Cappa, C. D.; Fan, J.; Goldstein, A. H.; Guenther, A. B.; Jimenez, J. L.; Kuang, C.; Laskin, A.; Martin, S. T.; Ng, N. L.; Petaja, T.; Pierce, J. R.; Rasch, P. J.; Roldin, P.; Seinfeld, J. H.; Shilling, J.; Smith, J. N.; Thornton, J. A.; Volkamer, R.; Wang, J.; Worsnop, D. R.; Zaveri, R. A.; Zelenyuk, A.; Zhang, Q. Recent Advances in Understanding Secondary Organic Aerosol: Implications for Global Climate Forcing. *Reviews of Geophysics* **2017**, *55* (2), 509–559. https://doi.org/10.1002/2016RG000540.

[5] Wang, S.; Zhao, Y.; Chan, A. W. H.; Yao, M.; Chen, Z.; Abbatt, J. P. D. Organic Peroxides in Aerosol: Key Reactive Intermediates for Multiphase Processes in the Atmosphere. *Chem. Rev.* **2023**, *123* (4), 1635–1679. https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00430.

[6] Yao, M.; Li, Z.; Li, C.; Xiao, H.; Wang, S.; Chan, A. W. H.; Zhao, Y. Isomer-Resolved Reactivity of Organic Peroxides in Monoterpene-Derived Secondary Organic Aerosol. *Environ. Sci. Technol.* **2022**, *56* (8), 4882–4893. https://doi.org/10.1021/acs.est.2c01297.

[8] Zhao, R.; Kenseth, C. M.; Huang, Y.; Dalleska, N. F.; Kuang, X. M.; Chen, J.; Paulson, S. E.; Seinfeld, J. H. Rapid Aqueous-Phase Hydrolysis of Ester Hydroperoxides Arising from Criegee Intermediates and Organic Acids. J. Phys. Chem. A .**2018**, 122 (23), 5190–5201. https://doi.org/10.1021/acs.jpca.8b02195.

[9] Li, K.; Resch, J.; Kalberer, M. Synthesis and Characterization of Organic Peroxides from Monoterpene-Derived Criegee Intermediates in Secondary Organic Aerosol. *Environ. Sci. Technol.* **2024**, *58* (7), 3322–3331. https://doi.org/10.1021/acs.est.3c07048.

报告人/墙报展示人简介：

常崇轩，现为上海交通大学环境科学与工程学院在读硕士研究生，主要研究方向为大气二次有机气溶胶中有机过氧化物的类芬顿反应。

口头报告：

深圳市秋冬季不同粒径气溶胶消光特征研究

林玲玲[1]，魏凤华，彭杏，符楠，曹礼明，黄晓锋*，何凌燕*

[1]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：大气气溶胶的粒径是其最重要的性质之一，是决定气溶胶光学性质的重要因素。全面认识不同粒径气溶胶的光学特性对于量化其气候辐射强迫至关重要。为评价不同粒径的大气气溶胶的消光能力及其对大气能见度的影响，针对棕色碳和细颗粒物的消光特征，于2023年10月-2024年1月在深圳市进行PM_1和$PM_{2.5}$在405nm波长下气溶胶光学特性的同时测量。采样期间，秋季（2023年10月-11月）PM_1和$PM_{2.5}$的平均浓度分别为 15.1 和 23.0 $\mu g \cdot m^{-3}$，冬季（2023年12月-2024年1月）PM_1和$PM_{2.5}$的平均浓度分别为 18.7 和 27.4 $\mu g \cdot m^{-3}$，较秋季分别上升23.8%和19.3%，$PM_1/PM_{2.5}$均值为0.7，表明深圳市亚微米级颗粒物污染较严重。秋季PM_1和$PM_{2.5}$在405nm处的气溶胶消光系数均值为133.2和167.6 Mm^{-1}，冬季PM_1和$PM_{2.5}$在405nm处的气溶胶消光系数均值为172.6和226.1 Mm^{-1}，较秋季分别上升29.6%和34.9%，可能的原因是冬季受到冷空气影响温度降低，扩散条件一般，使得污染物持续积累，颗粒物污染浓度升高，消光系数增大。从2023年10月到次年1月，PM_1和$PM_{2.5}$的单散射反照率（SSA）均值为0.88和0.89，表明在不同粒径下，散射型气溶胶占比整体相比于吸收型气溶胶占比较大。PM_1冬季的吸收指数（AAE）较秋季上升了24.6%，这意味着棕色碳对光吸收的贡献增加，可能与生物质燃烧的排放有关。$PM_1/PM_{2.5}$的质量浓度比值为0.7，而消光系数比值则升到了0.8，进一步说明亚微米颗粒物的消光能力更强，对能见度的影响更大。通过对PM_1和$PM_{2.5}$的持续同步观测，可以进一步明确两个粒径下的气溶胶对消光水平的贡献，有助于评估不同粒径的气溶胶对大气能见度的影响。

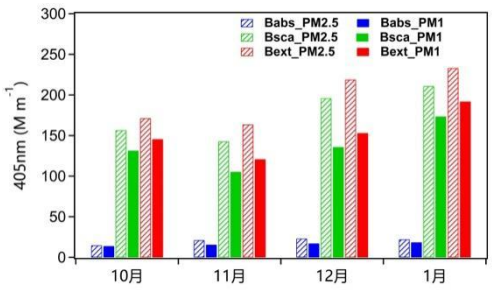


Fig. 1 Comparison of Babs, Bsca,and Bext of $PM_{2.5}$ and PM_1 at 405nm

关键词：气溶胶；粒径分布；消光特征；同步测量

参考文献

[1] Liao W, Zhou J, Zhu S, 等. Characterization of aerosol chemical composition and the reconstruction of light extinction coefficients during winter in Wuhan, China[J]. Chemosphere, 2020, 241: 125033.

[2] Xu W, Kuang Y, Bian Y, 等. Current Challenges in Visibility Improvement in Southern China[J]. Environmental Science & Technology Letters, 2020, 7(6): 395–401.

[3] Hu X, Sun J, Xia C, 等. Measurement report: Rapid decline of aerosol absorption coefficient and aerosol optical property effects on radiative forcing in an urban area of Beijing from 2018 to 2021[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2023, 23(9): 5517–5531.

[4] Li L, Li M, Zhang S, 等. Seasonal variation of aerosol optical properties in a coastal city of southeast China: Based on one year of measurements[J]. Atmospheric Environment, 2023, 305: 119804.

报告人/墙报展示人简介：

林玲玲，北京大学环境与能源学院硕士研究生，大气观测超级站实验室成员

研究方向：不同粒径气溶胶消光特征研究

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

2014-2022年深圳市大气 PM2.5化学组成及来源解析

唐可津，彭杏，孙逸飞，黄晓锋*，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：为推动空气质量改善，我国自2013年先后实施《大气污染防治行动计划》、《打赢蓝天保卫战三年行动计划》[1]等一系列减排政策，减排成效显著，$PM_{2.5}$浓度和重污染天数大幅下降。进一步评估$PM_{2.5}$污染改善成因、研判未来$PM_{2.5}$防控重点对于进一步降低$PM_{2.5}$浓度水平具有重要意义。深圳空气质量水平走在全国前列，2019年$PM_{2.5}$浓度水平已经达到世界卫生组织第二阶段标准（25 μg/m^3）[2-3]，但$PM_{2.5}$进一步降低仍存在巨大挑战。本研究基于2014-2022年在深圳市大学城点位采集的$PM_{2.5}$样品，分析了深圳市$PM_{2.5}$的化学组成并进行来源解析，评估以往措施的有效性并明确未来减排方向和精细化管理措施。结果表明，深圳市$PM_{2.5}$浓度从2014年37.7 μg/m^{3}逐步下降至2022年15.9 μg/m^3。从组分构成来看，有机物（OM）是$PM_{2.5}$最主要组分，且其占比呈现上升趋势，从2014年37.5%升高到2022年43.4%；其次是硫酸盐，占比变化趋势不明显，基本维持在20%。二次无机组分（SO_4^{2-}、NO_3^-、NH_4^+）在$PM_{2.5}$中占比一直较为突出，占比达到40%，表明二次颗粒物的生成和贡献有重要作用。正定矩阵因子分解模型（PMF）模型[4]识别出深圳市2014-2022年$PM_{2.5}$的11个污染来源。结果表明，最突出的污染源为二次硫酸盐和机动车排放，贡献比例分别为26.9%和24.8%，二次有机气溶胶（SOA）、二次硝酸盐、生物质燃烧、扬尘源贡献了5.0%-12.7%，老化海盐、燃煤、建筑尘、远洋船舶、工业排放源贡献了1.4%-2.8%。SOA、二次硫酸盐和二次硝酸盐等二次源[5]对$PM_{2.5}$总贡献超过50%，进一步说明二次颗粒物对$PM_{2.5}$有显著影响。从2014-2022年，绝大部分$PM_{2.5}$污染源呈现不同程度下降趋势，其中工业排放、生物质燃烧及远洋船舶排放下降明显，分别为87.7%、84.7%、80.0%，扬尘、二次硫酸盐、SOA、二次硝酸盐、老化海盐分别下降66.8%、62.7%、61.0%、58.3、57.1%；建筑尘和机动车源分别下降了47.6%和46.8%，表明深圳市对机动车排放、工业排放、远洋船舶、扬尘等一次源及二次源前体物的管控和减排成效显著。二次硫酸盐、SOA、二次硝酸盐、机动车排放以及生物质燃烧源排放降低是深圳市$PM_{2.5}$浓度水平降低主要因素。机动车排放和二次源仍然是深圳市$PM_{2.5}$的主要贡献者，未来要持续加强机动车源控制，同时通过与周边城市联防联控加强VOCs、NO_x、SO_2等二次前体物的控制。

关键词：$PM_{2.5}$；正矩阵因子分解法（PMF）；源解析；长期演变

参考文献

[1] Li, Y., et al., Significant Reductions in Secondary Aerosols after the Three-Year Action Plan in Beijing Summer[J]. Environmental Science & Technology. 2023, 57(42): 15945-15955.

[2] 和金梅,王宗爽,郭敏,顾闫悦,江梅,胡京南,武雪芳,柴发合.全球环境空气质量标准研究及未来我国标准展望[J]. 环境科学研究, 1-19.

[3] 江家豪,彭杏,朱波,黄晓锋,何凌燕.深圳大气 PM_(2.5)化学组成的长期变化特征[J]. 中国环境科学, 2021, 41 (02): 574-579.

[4] Paatero P, Tapper U. Analysis of different modes of factor analysis as least squares fit problems [J]. Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems, 1993,18(2):183-194.

[5] 林楚雄, 姚沛廷, 彭杏, 古添发, 孙天乐, 云龙, 何凌燕, 黄晓锋. 深圳市城区冬季大气 PM2.5 在线来源解析[J]. 中国环境科学, 2023, 43 (02): 506-513.

报告人/墙报展示人简介：

唐可津，北京大学环境与能源学院 2023 级硕士研究生，大气观测超级站实验室成员

研究方向：$PM_{2.5}$ 化学组分及来源解析研究

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

量化棕色碳吸收性质时消除沙尘影响的新方法

汤晨光[1,2,3]，田鹏飞[2]，张兴华[3]，邓涛[1]，张镭[2*]，徐建中[3*]

1. 中国气象局 广州热带海洋气象研究所，广州 510640；
2. 兰州大学 大气科学学院 半干旱气候变化教育部重点实验室，兰州 730000；
3. 中国科学院 西北生态环境资源研究院 冰冻圈科学国家重点实验室，兰州 730000.

摘要正文：棕色碳（BrC）气溶胶的吸收性质对于评估其地球-大气辐射影响至关重要。然而，在外场观测中，由于未能充分考虑沙尘的吸收作用，往往导致对 BrC 吸收性质的误估。本研究通过将沙尘浓度计算方法与传统的 BrC 吸收定量模型相结合，消除了传统定量模型中沙尘的负面影响。结果表明，在中国西北地区，沙尘的吸收贡献占 BrC 与沙尘总吸收量的 16.8%。在亚洲地区的研究中，沙尘对 BrC 和沙尘总吸收量的潜在贡献为 0.4%–16.8%，明显高于美洲（<1.2%）和欧洲地区（<2.3%）的研究。这一发现强调了在 BrC 定量模型中考虑并消除沙尘负面影响的必要性，也促使学界重新审视以往研究解析的 BrC 吸收性质，特别是在亚洲等受沙尘影响的地区。

基金项目：第二次青藏高原综合科学考察研究（批准号：2019QZKK0602）；国家自然科学基金面上项目（批准号：42175093, 41977189）；国家自然科学基金青年科学基金项目（批准号：41805106）

第一作者简介：汤晨光（1995—），男，助理研究员，研究方向：大气物理与大气环境，E-mail: tangcg@gd121.cn

*通讯作者简介：张镭（1960—），男，教授，研究方向：大气物理与大气环境，E-mail：zhanglei@lzu.edu.cn；徐建中（1980—），男，研究员，研究方向：大气环境化学，E-mail：jzxu@lzb.ac.cn

杭州湾区域点大气半/中等挥发性有机物分子组成特征

王诺婷[1]，胡崑[1]，万子超[1]，陆思华[1]，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重点联合实验室，中国 北京，100871

*Email: songguo@pku.edu.cn

摘要正文：随着我国经济的快速发展能源的大量消耗，大气环境污染特别是细颗粒物（$PM_{2.5}$）和臭氧（O_3）问题日益受到重视。二次有机气溶胶（SOA）是 $PM_{2.5}$ 的重要组成部分，但是由于其组成和生成机制复杂，因此是目前大气化学研究的难点，其生成机制的不清楚也限制了大气污染防治政策的制定。目前 SOA 的模式模拟与实测存在重大差异，其中一个重要原因是前体物的缺失。有研究表明半/中等挥发性有机物（S/IVOCs）是一类重要的缺失前体物。本研究是杭州湾大气复合污染综合观测的一部分，旨在分析杭州湾区域大气中 S/IVOCs 的分子组成特征，探讨它们对 SOA 生成的贡献，并评估其潜在来源。

本研究于 2023 年 9 月 16 日至 2023 年 10 月 17 日在浙江省嘉兴市海盐站开展为期 32 天的观测，利用 Tenax TA 吸附管，对大气 24 小时 S/IVOCs 样品进行采集，共获得样品 32 个。利用大气挥发性有机物快速在线监测系统（TH-PKU 300B）的气相色谱-质谱联用（GCMS）技术对大气中挥发性有机物（VOCs）进行在线测量，利用热脱附-全二维气相色谱-质谱（TD-GC×GC-MS）技术和对离线 S/IVOCs 样品进行靶向和非靶向识别和定量分析，研究共识别出 225 种化合物，包括 124 种 VOCs 和 101 种 S/IVOCs。研究结果表明，S/IVOCs 在总体已测量物种质量浓度占比 13.3%，总浓度为 105.36 ± 29.85 μg m^{-3}，正构烷烃贡献最大，占总体浓度 37.8%，其次酸类、酮类和芳香烃分别占比 15.8%、10.8%和 6.5%，S/IVOCs 物种则主要集中在半挥发性区间。研究利用光氧化龄估算方法进一步揭示了 S/IVOCs 和 VOCs 对 SOA 生成的贡献。其中 VOCs 贡献的平均质量浓度为 80.84 ± 26.41 μg m^{-3}，而 S/IVOCs 的贡献为 24.52 ± 0.05 μg m^{-3}。正构烷烃、烯烃、酸类和酮类是化合物的主要组分，占总体浓度的 70%以上。通过后向轨迹聚类分析和潜在源因子分析，确定了杭州湾区域主要潜在源区。主要潜在源位于西北和东南两个方向，结合卫星地图分析潜在源污染情况，发现潜在源可能受工业源、交通源和生活源影响。

研究结论指出，S/IVOCs 在 SOA 生成过程中的作用不容忽视，尤其在空气质量管理中。研究结果为制定有效的污染防治策略提供了科学依据，对改善杭州湾区域的空气质量具有重要意义，并为长三角地区的可持续发展和环境保护做出贡献。

关键词：半/中等挥发性有机物；二次有机气溶胶；潜在源分析；杭州湾

民用燃煤排放经光化学氧化生成二次气溶胶特征的研究

倪心湜[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

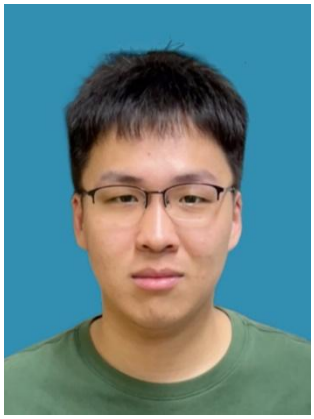
*Email: songguo@pku.edu.cn

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_1 的 72.50±55.86%，其次为铵盐，占比为 22.34±13.36%，有机物占比为 2.94±1.77%，有机气溶胶的排放因子为 2.57±1.58 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±0.62 μg 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

报告人/墙报展示人简介：

倪心湜，北京大学环境科学与工程学院 2024 级在读博士生，导师为郭松研究员。



附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：博士研究生

杭州湾地区大气挥发性有机物(VOCs)污染特征及其对O_3生成的影响

胡崑[1]，万子超[1]，于雪娜[1]，王鸣[2]，曾立民[1]，陆思华[1,*]，郭松[1,*]

[1] State Key Joint Laboratory of Environmental Simulation and Pollution Control, International Joint Laboratory for Regional Pollution Control, Ministry of Education (IJRC), College of Environmental Sciences and Engineering, Beijing 100871, China

[2] Collaborative Innovation Center of Atmospheric Environment and Equipment Technology, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044, China

*Email: : lshua@pku.edu.cn; songguo@pku.edu.cn

摘要正文：作为长江三角洲地区的重要组成部分，近年来杭州湾地区大气臭氧（O_3）污染问题逐渐突出。本研究于2024年4~5月在作为杭州湾区域背景点的嘉兴市海盐县观测站开展了大气O_3、氮氧化物（NOx）和挥发性有机物（Volatile Organic Compounds, VOCs）等污染物的在线观测。在此基础上分析了VOCs的浓度水平和化学组成。从浓度水平来看，杭州湾大气VOCs浓度变化较大，浓度范围为6.8 ppb~209.7 ppb，浓度平均值为24.6±16.8 ppb，浓度第50%分位数为19.95 ppb。从VOCs总浓度频数分布来看，整体呈正态分布，但存在显著的右拖尾现象，表明VOCs存在浓度异常高值。从化学组成来看，烷烃是VOCs的主要贡献者，相对贡献率为30.3%，其次为含氧VOCs（28.3%）、卤代烃（20.3%）、芳香烃（9.1%）、烯烃（8.1%）和炔烃（2.5%），浓度贡献排名前十的VOCs组分为乙烷、丙酮、丙烷、乙醛、二氯甲烷、氯甲烷、乙烯、乙酸乙酯、甲苯和异丁烷，需要重点注意和优先控制。为了定量评估前体物VOCs和NOx的变化对O3生成的影响，本研究利用基于观测的模型（Observation-Based Model, OBM）分析了O_3浓度与VOCs和NOx之间的关系。基于OBM所模拟的O_3前体物相对增量反应性（Relative Incremental Reactivity, RIR）和EKMA曲线结果显示，杭州湾大气整体上处于VOCs控制区，对O_3生成的关键VOCs组分为间/对二甲苯、乙烯、丙烯等。此外，进一步比较发现，即使在相同的气象条件下，不同天的O_3敏感性和对O_3生成的关键VOCs组分也具有差异，猜测可能是因为VOCs/NOx比值的变化导致了敏感性的差异。综合来看，杭州湾大气O_3生成机制较为复杂，需要进一步深入研究。

关键词：臭氧（O_3）；挥发性有机物（VOCs）；敏感性分析；杭州湾

第 16 分会场：核设施气溶胶行为研究

乳化法制备分散纳米颗粒及核石墨

艾德生

清华大学

*Email: ai_desh@tsinghua.edu.cn

摘要正文：通过设计液相有机网络，选择水相、油相成分，定量确定其比例，结合胶囊化分散方法，制备一系列的 ZrO2、Al2O3、ZnO、TiO2、Ni、Co、NiO、CoO 等纳米粉体。与此同时，采用乳化法思想，对反应堆广泛应用的核石墨，利用乳化技术，制备的乳化沥青直径为 15 微米，固态含量 60%，静置 20 天没有沉降、分层，残炭值 55% （市场商品残炭值小于 40%）

聚变堆氦冷固态包层颗粒堆积产氚区中氚输运研究

周志伟

清华大学

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

摘要正文：通过 DEM+CFD 分析方法，开展正硅酸锂球床传质传热特性研究，获得了用于多孔介质模型氚输运分析的宏观等效参数。通过 CFD 计算获得吹扫气体流动阻力特性，流动压降可由 Blake-Kozeny 方程计算，拟合得到 Blake-Kozeny 方程中粘性阻力系数。受球床结构影响，氚在吹扫气体内的等效扩散系数减小。内热源工况下球床等效导热系数低于外加热流工况下的球床等效导热系数。通过流动传热计算获得了吹扫气体与正硅酸锂球床间换热量极低，由多孔介质模型开展包层氚输运分析时可采用局部热平衡模型。针对典型聚变堆氦冷包层模块产氚区的结构，开展了包层氚输运行为分析，获得了氚在包层结构材料内的滞留量与向冷却剂的渗透量，并开发了中子、热工、氚输运计算框架，可用于极向各包层模块的氚输运行为分析。

新型金属纤维过滤器研制及过滤性能研究

孙中宁

哈尔滨工程大学

*Email: sunzhongning@hrbeu.edu.cn

摘要正文：针对核设施放射性气溶胶的过滤需求，基于多孔介质模型开发了金属纤维滤材结构的正向设计方法，研制了新型金属纤维滤材及过滤器，通过仿真评估了过滤器的流动特性、过滤性能以及容尘能力评估。在此基础上，开展了过滤器结构设计及性能评价研究，研究结果为实际工程应用提供了重要技术支撑。

超临界二氧化碳介质中细颗粒物运动沉积特性研究

周涛

东南大学

*Email: 101012636@seu.edu.cn

摘要正文：基于板状燃料组件，建立窄矩形通道模型，明确数值计算的参数，明确了不同压力下 SCO2 的热物性参数和颗粒的物性参数；建立了流动传热模型和颗粒沉积模型，搭建可视化的实验台架对计算进行实验验证，提出适用于窄矩形通道的传热关联式和颗粒沉积关联式，明确了 SCO2 细颗粒沉积机理。

XJTU-NuTHeL 核电厂气溶胶行为特性研究综述

苏光辉

西安交通大学

*Email: ghsu@xjtu.edu.cn

摘要正文：系统介绍西安交通大学核反应堆热工水力研究团队（XJTU-NuTHeL）在压水堆核电厂、新型核动力系统及四代堆事故下裂变产物释放及气溶胶行为特性方面开展的基础实验、理论分析及数值模拟工作。

中核工程辐射安全与气溶胶研究的思考

元一单

中国核电工程有限公司

*Email: yuanyd@cnpe.cc

摘要正文：中核工程核电工程项目辐射安全的需求、策划与气溶胶研究的进展和思考

安全壳内气溶胶自然去除机制在安全分析中应用时面临的若干问题

庞宗柱[1]，石生春[1,*]，杨志义[1]，李明[1]，杨鹏[1]

[1]生态环境部核与辐射安全中心，北京市房山区长阳镇知兴东路 9 号国家核与辐射安全监管技术研发基地，102442

*Email: shishengchun@chinansc.cn

摘要正文：根据设计特点，新型反应堆在分析各类事故的放射性后果时可能需要考虑安全壳内气溶胶自然去除机制的作用。报告调研了国内外法规标准中对应用自然去除机制的相关要求，根据国内研究现状提出当前面临的若干问题，包括分析计算原则要求、试验验证和数据分享、软件开发和验证等内容。

安全壳超压排放乏池水洗技术研究

梅其良

上海核工程研究设计院股份有限公司

*Email: mql@snerdi,com.cn

摘要正文：非能动核电厂在严重事故后，当安全壳的压力收到威胁情况下，开启排向乏燃料池的阀门进行泄压，同时利用乏燃料池中水层厚度对来自安全壳内的混合气体进行净化，去除其中的放射性，减少严重事故后由于执行超压排放措施造成对环境的影响。

原子能院安全壳内气溶胶行为试验研究简介

季松涛

中国原子能科学研究院

*Email: songtaoji@139.com

摘要正文：气溶胶是能够长时间悬浮在气体中的液态或固态颗粒，气溶胶特性、严重事故现象、专设安全设施等都会影响安全壳内气溶胶的迁移，研究气溶胶行为对于澄清安全壳内源项是非常重要的。参考三代压水堆非能动安全壳冷却系统的特点，采用缩比法设计了夹层水套容器模拟非能动能钢制安全壳，采用模块化方式设计了气溶胶迁移行为试验平台，系统性的开展了气溶胶沉积、再悬浮、再夹带等试验研究，掌握了先进的气溶胶行为模拟和测量等试验技术，建立了试验数据库以及气溶胶行为分析模型，可以为核电厂事故应急、设计改进等提供技术支持。

管道内气溶胶沉积与再悬浮研究

曹学武

上海交通大学

*Email: caoxuewu@sjtu.edu.cn

摘要正文：针对事故条件下核电厂管道中气溶胶沉积与迁移过程，研究了宽雷诺数范围湍流管道中气溶胶沉积行为、强湍流作用下气溶胶热泳沉积行为以及管道中气溶胶再悬浮行为，揭示了管内气溶胶沉积与迁移机制，建立了基于实验验证的气溶胶沉积与再悬浮模型，形成了一套核电厂事故条件下管道中气溶胶沉积与迁移过程分析方法。

安全壳内亚微米气溶胶喷淋去除特性的实验及数值模拟研究

潘良明

重庆大学

*Email: cneng@cqu.edu.cn

摘要正文：核反应堆事故工况发生后，大量放射性裂变产物以气体、蒸汽以及气溶胶颗粒的形式从一回路释放到安全壳内。气溶胶作为放射性裂变产物的重要载体以及关键源项，安全壳内气溶胶的去除成为了核反应堆安全分析的重点关注对象。安全壳喷淋系统是去除悬浮在气相空间中放射性气溶胶最有效的方法之一，但对于直径在 0.1-1 μm 范围内的亚微米颗粒，喷淋去除机制表现出明显较低的收集效率，尤其在严重事故条件下安全壳内形成的高温高湿环境中，吸湿性亚微米气溶胶颗粒密度、粒径将发生改变，从而极大地影响亚微米气溶胶的喷淋去除规律与群体演化行为。因此以多种类亚微米气溶胶为研究对象，通过模拟典型事故工况下的热工水力条件，进行不同喷淋特性耦合安全壳温度湿度控制的实验和数值模拟研究。明确安全壳内温度、压力和水蒸汽环境中气溶胶群体演化规律及影响因素，分析各种喷淋特性对多种类多分散亚微米气溶胶的最低去除粒径的影响，开发事故条件下的安全壳内的亚微米气溶胶的高效去除技术，为严重事故的管理以及喷淋去除气溶胶模型的优化提高可靠的数据支持。

环形气幕排风罩用于激光切割污染物的控制研究

谢东[1]，张玉贵[1]

[1]南华大学，湖南省衡阳市常胜西路 28 号，邮编 421000

*Email: nhxiedong@126.com

摘要正文：激光切割因其具备远距离切割和切割速度快的特点，是核设施退役拆除时的重要切割工具。针对核设施在激光切割过程会产生大量放射性污染物的问题，且受切割环境所限，排风罩无法近距离靠近污染物，本文设计了一种环形气幕排风罩，通过CFD仿真模拟与实验相结合的方法，建立了该排风罩的物理模型和实验平台。数值模拟研究发现在排风罩直径与切割点最远处距离的比值为1的情况下，采用环形气幕可提高排风罩动态捕集效率约：7.1%。实验研究证明新设计的环形气幕有助于增加烟尘产生区域整体风速，可提升原本较难以收集的非轴心区域烟尘的捕集效率，但气幕射流速度过高容易导致烟尘被吹离排风罩，降低排风罩工作效率；将气幕送风射流与排风罩吸入气流的动量比为设置为 0.12 以下时，可以明显降低周边区域污染物浓度，降低范围在 3.4%-14.8%之间。研究结果为激光切割污染物控制提供了一种有效方法，可为后续核设施退役切割方案提供重要理论依据。

关键词：激光切割烟尘；环形气幕；排风罩；除尘效率。

基于四维变分同化的放射性核素排放源反演及在日本福岛核事故的应用研究

臧增亮[1]，杨雪梅[1]，方晟[2]，胡译文[1*]

[1] 国防科技大学气象海洋学院，长沙，zzlqxxy@163.com

[2]清华大学核能与新能源技术研究院，北京，fangsheng@tsinghua.edu.cn

摘要正文：本文基于 WRF-Chem（Weather Research and Forecasting model coupled to Chemistry）核素参数化模式，利用核素比活度浓度观测资料，以放射性核素 Cs-137 为控制变量，发展了核素的四维变分同化的排放源反演方法，并用于改进核素的污染扩散预报，并选取 2011 年 3 月日本福岛地区的核污染扩散事件开展同化和预报试验研究。设计了 6 小时同化窗口的四维变分同化系统，利用日本地区共 32 个站点的 Cs-137 浓度观测资料，改进了福岛地区的 Cs-137 排放清单，结果表明，改进后的排放清单能够有效提高对 Cs-137 污染扩散的预报水平。

关键词：放射性核素；Wrf-Chem 模式；四维变分同化

事故条件下安全壳内气溶胶迁移行为试验研究

费立凯

国家电投集团科学技术研究院有限公司

*Email: feilikai1@163.com

摘要正文：对于大型先进压水堆，建立了一套模拟事故条件下的安全壳内气溶胶试验系统，并开展事故条件下安全壳内气溶胶迁移行为试验研究。研究过程中，获得气溶胶在重力沉积、热泳、扩散泳等因素作用下的行为变化规律，为自主化安全壳气溶胶类软件提供技术支持，也为安全壳优化设计，保证安全壳完整性提供技术支持。

大气放射性气溶胶的产生与监测

刘龙波[1,*]

[1]西北核技术研究所，陕西西安，710024

*Email: liulongbo@nint.ac.cn

摘要正文：人类核活动往往会在大气释放放射性核素，其中大部分核素在大气中以气溶胶形态存在。放射性气溶胶的浓度或核素特征会受到核事件的剧烈影响，在健康、环境、能源和安全等众多领域都受到关注。相关研究主要有两个方向：一个是从产生的角度，研究放射性气溶胶的产生机理、泄漏或释放过程、以及在大气中的扩散过程；另一个方向是从监测的角度，如何快速高效地发现大气中异常的气溶胶态核素或核素的异常浓度，并用大气输运工具或核素特征分析溯源。本报告讨论这些研究和技术的最新进展。

关键词：大气气溶胶；放射性气溶胶；气溶胶泄漏；气溶胶监测

湍流边界层内微细颗粒再悬浮机理研究

彭威[1,*]

[1]清华大学

*Email: pengwei@tsinghua.edu.cn

摘要正文：研究湍流边界层内石研究微细粉尘颗粒的再悬浮行为，对先进反应堆放射性源项分析和安全评估具有重要意义。本研究基于湍流边界层和颗粒动力学理论，通过颗粒再悬浮的可视化实验，并结合计算流体力学、固体力学有限元等数值模拟技术，对湍流边界层内颗粒再悬浮特性开展研究，最终建立颗粒再悬浮的机理模型。

安全壳内气溶胶自然沉积特性研究

谷海峰[1,*]

[1]哈尔滨工程大学

*Email: guhaifeng@hrbeu.edu.cn

摘要正文：核反应堆严重事故时，华龙一号采用先进安全壳热量导出系统来降低安全壳内温度和压力。该系统运行

对安全壳内气溶胶浓度和粒径分布也有较大影响。基于哈尔滨工程大学COSTTHES（COntainment Source Term and Thermal Hydraulics Experiment System）实验系统开展了大尺度、宽参数范围的气溶胶自然沉积实验，获取相应实验数据库；并建立了气溶胶自然沉积行为的计算模型，该模型能够对安全壳内气溶胶浓度场的时序演变进行计算模拟。借助实验数据与模型的计算结果，对严重事故条件下安全壳内气溶胶行为的主要影响机制开展分析研究，从而为核电厂严重事故后源项分析及应急策略的制定提供理论支撑。

气体羽流作用下空间内流场对气溶胶分布特性影响研究

张亚培[1, *]

[1] 西安交通大学

*Email: zhangyapei@xjtu.edu.cn

摘要正文：严重事故工况下放射性物质以气体、蒸汽、气溶胶形式由一回路释放到安全壳内。随着事故的发展，在压水堆堆芯中，包壳会发生锆水反应并产生大量氢气，会夹带出大量气溶胶，使得安全壳气空间内气溶胶浓度再次上升，对气溶胶分布特性产生严重影响，故而影响安全壳内及释放到环境中的放射性源项。因此，为了确定气体羽流作用对气溶胶分布特性影响，拟基于气体浮力羽流夹带效应的实验台搭建气体羽流作用对气溶胶分布特性影响的实验台，通过气溶胶取样/在线测量设备测量出在空间不同位置气溶胶进行取样测量，基于实验数据利用Fluent，结合Eulerian－Eulerian/Eulerian－Lagrangian方法和UDF/PBM模型，模拟气体羽流对气溶胶的夹带扩散，得到气溶胶在空间中的分布特性并得到相应模型。

基于偏振成像的碳烟颗粒形貌参数测量方法研究

张彪[1, *]

[1] 东南大学

*Email: zhangbiao@seu.edu.cn

摘要正文：碳烟颗粒是化石燃料燃烧的主要污染物，其生成和演化特性在人体健康、环境污染、无线通信等领域具有显著的应用价值。碳烟颗粒形貌影响其结构特征和氧化特性，是研究燃烧过程中碳烟生成的重要参数。发展碳烟诊断技术，准确测出碳烟颗粒形貌参数对燃烧过程中碳烟的生成和抑制机理非常重要。本文基于偏振成像基本原理，研究碳烟颗粒的散射模型、偏振成像过程以及重建过程，提出一种碳烟颗粒形貌参数的非接触式测量方法。

严重事故下安全壳内气溶胶行为的三维数值模拟

王辉[1, *]

[1] 中国核电工程有限公司

*Email: mengyue1@126.com

摘要正文：新型反应堆的研发设计愈来愈强调非能动安全特征，在安全壳非能动冷却系统作用下，事故后的气溶胶的沉积以以热泳、扩散泳、重力沉降为主，这些机制取决于安全壳热工水力状态。非能动安全系统作用的安全壳热工水力环境呈现三维效应，因此使得气溶胶的输运与沉积也呈三维现象，本报告结合具体实例，介绍了基于欧拉-拉格朗日体系和欧拉-欧拉体系的含不可凝气体水蒸气环境中气溶胶三维数值模拟技术。

气溶胶在取样管道内损失规律及穿透率实验研究

顾卫国[1, *]

[1] 上海交通大学

*Email: guweiguo@sjtu.edu.cn

摘要正文：针对核设施气态流出物取样，开展了取样管道内微米级气溶胶颗粒的穿透率实验，与国内外现有的经验公式和公开发表的数据进行了对比。本研究在考虑管道有效粗糙度、湍流扩散、重力沉降的共同影响下，获得了气溶胶在取样管道内的沉积沉降及穿透率规律，提出了适用于扩散区与扩散-碰撞区的沉积速度预测模型及经验公式。

铅铋快堆放射性源项及其迁移特性研究

倪木一[1, *]

[1] 中山大学

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

摘要正文：铅铋快堆以其优异的中子经济性、良好的热效率和安全性被选为第四代反应堆国际论坛（GIF）未开发的堆型之一。报告总结了铅铋快堆的主要放射源项及其迁移机理，以及中山大学在铅铋堆源项迁移问题的最新研究进展。

反应堆燃料破损后裂变产物释放迁移行为及破损诊断分析技术发展及展望

田超[1, *]

[1] 中国核动力研究设计院

*Email: tc007808com@163.com

摘要正文：报告主要介绍反应堆燃料元件破损后的裂变产物释放迁移行为分析技术的研究以及燃料破损诊断分析技术和方法的未来发展展望。

核电厂气溶胶在迁移及沉积过程中的若干研究实践与思考

陈鹏[1, *]

[1] 中广核研究院

*Email: chphd@163.com

摘要正文：无

压水堆核电厂事故工况安全壳内释放源项输运行为精细化仿真研究进展

杨亚鹏*，刘哲，喻豪，王宁，冯宗洋，李国强

中国辐射防护研究院，山西太原，030006

*Email: yangyapeng@cirp.org.cn

摘要正文：核动力厂在采取种种预防性措施后，因失误或事故进入核事故应急状态的可能性虽然很小，但仍不能完全排除，核事故可能导致放射性物质大量释放，对工作人员、公众和环境造成危害。为了制定防护策略，以便在核应急中有效采取防护行动和其他响应行动，需要开展事故工况应急评价，评价和预测设施的异常工况，并分析计算放射性物质释放情况。释放源项估算是核电厂事故工况应急评价的重要内容之一，对于安全壳内源项的输运过程，具有应急快速评价和精细化评估分析两种方法。对于应急快速评价方法，采用安全壳内各种减弱机制的去除因子评价放射性气溶胶源项的输运过程，对于精细化评估分析方法，建立了一个用于模拟放射性气溶胶源项等多种组分在安全壳内输运行为的空间精细化输运模型。本文介绍了用于压水堆核电厂事故工况安全壳内释放源项输运行为精细化仿真研究进展，精细化模型主要采用计算流体力学的有限体积法，基于瞬态Navier-Stokes方程、质能守恒方程、基于壁面函数的湍流模型和多组分输运方程，自主开发了耦合安全壳环境条件变化的重力沉降、扩散泳、热泳的自然壁面沉积去除行为模型，此外还开发了喷淋能动去除条件对多粒径气溶胶捕集机制的多相流去除行为模型，对于惰性气体等气态组分采用组分输运模型进行研究，所开发模型在精细化网格上进行求解，完成适用于华龙一号安全壳的受限自由气空间内放射性气溶胶源项行为精细化输运模型开发研究。对于安全壳内氢气的输运及燃烧过程，具有集总参数仿真分析方法和基于CFD的精细化仿真分析方法。对于集总参数仿真分析方法，采用专业的系统性严重事故分析软件，精确建模，分析严重事故下氢气在安全壳内的输运行为及燃烧特性；对于精细化仿真分析方法，建立了一个用于模拟安全壳内氢气-空气-水蒸气混合气体输运及燃烧行为的精细化仿真分析程序，基于有限体积法，结合

标准$k-\varepsilon$湍流模型、VOF两相流模型、湍流火焰速度封闭模型、单步化学反应模型，自主开发了包络自然对流、分层效应、冷凝相变、快速燃烧和慢速氧化等氢气安全分析中的主要现象的安全壳氢气风险分析模型。本文所介绍的模型，已经应用在针对M310、华龙一号等压水堆核电厂事故工况评价所开发的堆芯损伤评价和释放源项估算系统。

关键词：核电厂；事故工况；释放源项；精细化仿真；

气溶胶自然去除在华龙一号典型事故源项中的应用研究

陶俊 [1, *]

[1] 华龙国际核电技术有限公司

*Email: taojun@hpr.com.cn

摘要正文：在华龙一号 2.0 方案中拟采用非能动安全系统应对 DBC 工况，在大 LOCA、弹棒事故等放射性经安全壳释放的事故过程中，安全壳内放射性核素既无安全级的安全壳喷淋去除，又无安全级的过滤去除，若不考虑放射性核素在安全壳内的自然去除则其放射性后果极有可能超过相关安全限值，对非居住区和规划限制区厂址边界的划分造成重大挑战。在华龙一号 2.0 方案设计基准事故源项分析和评估中考虑核素自然去除是非常重要和必要的。

本文以华龙一号典型的设计基准大 LOCA 事故源项为研究对象，研究重力沉降、热泳、扩散泳等气溶胶自然去除机理对事故源项的影响，识别出事故后安全壳内的热工状态、安全壳的几何尺寸、放射性气溶胶颗粒的尺寸分布/密度/含湿率/热导率、蒸汽在安全壳内的冷凝行为等众多影响气溶胶自然去除的关键因素，为开展相关工程验证试验和自主软件开发提供参考和必要输入，为确定厂址边界、评估设计基准事故厂外放射性后果等提供技术支撑。

核电厂安全壳内气溶胶再悬浮特性实验研究

张卢腾 [1, *]

[1] 重庆大学

*Email: ltzhang@cqu.edu.cn

摘要正文：当反应堆发生严重事故后，会释放大量具有放射性的物质，它们大多以气溶胶的形态分布在安全壳内。这些气溶胶在只自然沉积和喷淋去除等去除手段的作用下会沉积到安全壳的内表面上，使得安全壳大气内气溶胶浓度降低。但安全壳内的氢气爆燃、蒸汽爆炸以及不同隔间之间的气体流动等现象时，由于扰动气流对气溶胶的作用，会使已经沉积的气溶胶发生再悬浮，安全壳气空间内放射性物质浓度增大，最终可能导致释放到环境的源项增加，对环境造成严重的污染。扰动气流的速度以及沉积环境都会对气溶胶的再悬浮造成影响。本研究在安全壳内不同湿度、沉积面角度、沉积时间条件下进行气溶胶自然沉积，制备气溶胶沉积样品。并针对安全壳内存在的低速连续气流以及高速瞬态气流分别进行气溶胶的再悬浮实验，获得不同参数对气溶胶再悬浮份额以及再悬浮气溶胶粒径分布的影响趋势，为构建适用于严重事故条件下的气溶胶再悬浮模型、评估再悬浮气溶胶对安全壳放射性物质源项的影响和优化放射性气溶胶去除技术提供数据支持。

大空间内气溶胶粒子动力学特性研究

王明军 [1, *]

[1] 西安交通大学

*Email: wangmingjun@xjtu.edu.cn

摘要正文：（1）基于开源CFD平台的气溶胶动力学特性求解器开发；（2）大空间气溶胶粒子在大气中浓度分布的模拟计算；（3）不同大气条件下气溶胶粒子扩散、沉降及动力学行为模拟。

铅铋堆燃料包壳破口事故液池内气溶胶滞留特性研究

周艳民 [1, *]

[1] 哈尔滨工程大学

*Email: zhouyanmin@hrbeu.edu.cn

摘要正文：针对铅铋堆燃料包壳破口事故下的裂变产物释放过程，通过实验开展气溶胶在铅铋液池中的滞留特性研究，实验中通过可视化方法获得气液两相流动特征参数，提出了定量描述流动特征的计算模型。在此基础上测试了液池淹没深度、破口尺寸、包壳内压等参数对气溶胶滞留效率的影响规律，建立了描述气溶胶滞留效率的计算模型，模型计算结果与实验值直接获得了较好的一致性。

先进堆型的气溶胶迁移特性研究

江娉婷 [1, *]

[1] 中广核研究院有限公司

*Email: 27827590@qq.com

摘要正文：核能作为安全、可大规模应用的清洁能源，是填补能源缺口的重要利器。2022年九部门联合印发《科技支撑碳达峰碳中和实施方案（2022—2030年）》中明确指出，新型核能发电技术应作为前沿颠覆性低碳技术创新行动的重要研究组成部分。报告针对新堆型研发中的裂变产物产生及释放开展研究，从新堆适用场景、机理现象差异出发，提出精细模拟方向和解决方案。

从传统燃烧源气溶胶生成控制到核设施气溶胶行为的延伸探索

王学斌 [1, *]

[1] 西安交通大学

*Email: wxb005@mail.xjtu.edu.cn

摘要正文：在传统燃烧过程中，燃料内的无机和有机物可通过"气-粒转化"生成无机/有机细模态颗粒物，粒径小于1um，常规除尘设备对其脱除效率较低，是燃烧源颗粒物控制的重点和难点。本报告首先以传统燃烧为例，介绍典型燃料（高碱煤、生物质、垃圾）有机/无机细模态颗粒的生成特性与机理、燃烧前/燃烧中/燃烧后控制技术和所在团队研发的湿式相变多污染物协同脱除技术及其工业应用。针对核电事故气溶胶，本报告将结合国内外研究现状，汇报报告人在压水堆和钠冷快堆事故气溶胶研究方面的一些思考，展望核设施气溶胶行为研究的未来方向和潜在挑战。

大型厂房内气溶胶通风净化过程仿真研究

韩希强 [1, *]

[1] 北京海基嘉盛科技有限公司

*Email: hanxq@hikeytech.com

摘要正文：气溶胶是一种微米级的细小颗粒，大型厂房在进行通风设计时，通风气流组织应根据室内气溶胶扩散特性区别设计，以达到较小风量下有效排除气溶胶，净化厂房内环境的目的。本文是利用CFD仿真方法，分析不同通风条件下，气溶胶的净化效率，为实际厂房通风系统的涉及提供理论依据

高温高压混合气射流条件下气溶胶水洗模型研究

马钎朝 [1,*]，高志超 [1]，幸奠川 [1]，袁德文 [1]，周艳民 [2]，谷海峰 [2]，孙中宁 [2]

1 中国核动力研究设计院中核核反应堆热工水力技术重点实验室，四川，成都，610000

2 哈尔滨工程大学核科学与技术学院，黑龙江，哈尔滨，150000

*Email: 871457587@qq.com

摘要正文：反应堆严重事故发生后，放射性气溶胶随气体穿过液相时被相界面捕获的过程，被称为池式水洗现象， 此过程是影响源项迁移释放的重要热工水力现象之一。在高速流动条作下，气体在液相内会形成浸没射流现象，凭借 于高速气流的剪切作用而产生的夹带液滴将气溶胶大量滞留在液相中[1]，而在混合气体射流条件下由于温度梯度场及界面相变的存在，会使得水洗效率得到进一步地提高，合理地预测气溶胶水洗效率对于严重事故后安全壳内的源项评估具有重要意义。本文基于界面-气溶胶、液滴-气溶胶去除假设[2-6]，考虑热泳、扩散泳等泳动效应[7-8]，惯性、拦 截及布朗扩散等流动效应，开发高温高压混合气射流条件下的气溶胶水洗模型，与已公开的射流水洗实验结果的偏 差在10%以内[9]（Fig.1）。基于模型进一步开展了热工参数敏感性分析，辅助阐明气溶胶水洗机理（Fig.2）。研究表明，气体速度是影响射流区域内水洗效率的关键变量。夹带液滴数量与气体速度、射流边界面积相关，随着喷嘴入口压力 的增加，气体速度增加，液滴直径在降低，气液接触面积增加，穿透长度的增加也会导致射流区域延长，夹带液滴作 用域增加，上述机制均会大大提高水洗效率。在射流轴向方向上，随着气体的不断膨胀，射流边界面积增加，夹带率 逐渐降低，所以水洗效率沿轴向方向逐渐趋于平缓。此外，液体温度的提高虽然会降低热泳效应，但是液体粘度的降 低导致了夹带液滴数量增加，最终也会提高水洗效率。

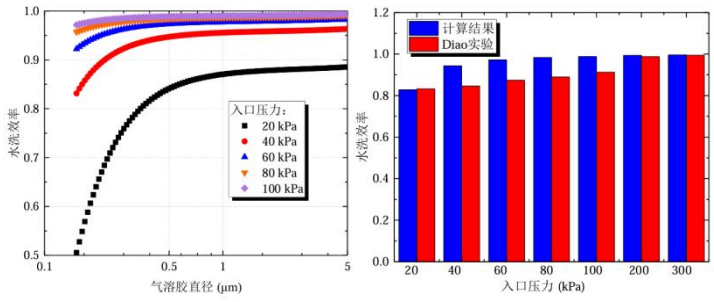


Fig.1 Calculation results of scrubbing efficiency under jet conditions

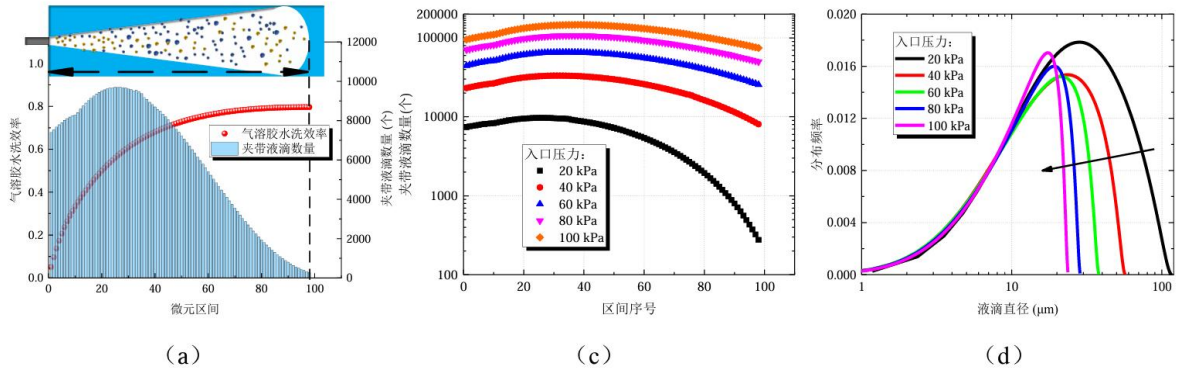


Fig.2 Analysis of jet scrubbing process

关键词：严重事故；气溶胶；射流；水洗效率；水洗机理

参考文献

[1] Abd-Alaal, K.H.M. Experimental and Theoretical Study of the Characteristics of Submerged Horizontal Gas Jets and Vertical Plunging Water Jets in Water Ambient [D]. Doctoral Thesis at the Polytechnic University of Valencia Institute for Energy Engineering Department of Chemical and Nuclear Engineering, 2012.

[2] Berna, C., Escrivá, A., Mu˜noz-Coboa, J.L., et al. Enhancement of the SPARC90 code to pool scrubbing events under jet injection regime[J]. Nuclear Engineering and Design, 2016, 300: 563–577.

[3] Berna, C., Escrivá, A., Muñoz-Cobo, J.L. Review of droplet entrainment in annular flow: interfacial waves and onset of entrainment[J]. Progress in Nuclear Energy, 2014, 74:14-43.

[4] Berna, C., Escrivá, A., Munoz-Cobo, J.L. Review of droplet entrainment in annular flow: characterization of the entrained droplets[J]. Progress in Nuclear Energy, 2015, 79:64–86.

[5] Yan, X. Development of mathematical model for aerosol deposition under jet condition[J]. Annals of Nuclear Energy, 2020, 142: 107394.
[6] Sugimoto, T., Kaneko, A., Abe, Y. Droplet entrainment by high-speed gas jet into a liquid pool[J]. Nuclear Engineering and Design, 2021, 380(859):111306.
[7] Herranz, L.E., Peyrés, V., Polo, J. Experimental and analytical study on pool scrubbing under JET injection regime[J]. Nuclear Technology. 1997, 120 (2): 95–109.
[8] Herranz, L.E., Aguado, C., S´ anchez, F. Uncertainty quantification of in-pool fission product retention during BWR station Black Out sequences[J]. Annals of Nuclear Energy, 2020.141: 107290.
[9] Diao, H., Zhou, Y., Gu, H., et al. Experimental study on the scrubbing efficiency of aerosols contained in horizontal and vertically downward submerged gas jet[J]. Progress in Nuclear Energy, 2020, 126: 103406.

空气浸没射流水洗特性研究

王钟远[1]，李伟超[1,*]，侯延栋[1]，陈博文[1]，高春天[1]
[1]东北电力大学 能动学院，吉林省吉林市，邮编 132012
*2202200424@neepu.edu.cn

摘要正文：气溶胶作为核电站事故后重要放射性源项的物质之一，人们在核电站安全分析评估事故的放射性后果时格外关注[1]。本研究使用商业CFD软件FLUENT对整个水洗过程进行三维数值模拟。基于双欧拉模型对空气浸没射流的流动特性进行研究。使用VOF模型对相间界面进行追踪，分析水下射流发展过程的形态变化。同时引入DPM模型[2]对分析液相对气相携带的离散相的水洗能力，并编写UDF将与体积分数为0.5的液相接触的颗粒进行筛选删除，之后进行统计计数方便计算水洗效率。本研究以水下射流实验数据验证了流动模型的准确性，并以相同条件模拟气溶胶水洗实验验证了水洗模型的准确性。对去除模型进行敏感性分析，通过模拟不同载气流量、不同淹没深度、不同气溶胶入口浓度下气溶胶的水洗去除效率，分析不同影响因素对于气溶胶水洗净化因子的影响。通过研究能够为放射性物质的捕集和过滤排放系统优化提供参考，对核电站的安全运行具有重要意义。

关键词：浸没射流；气溶胶；池式水洗；数值模拟

参考文献

[1] Sharma A K, Liang H, Xu R, et al. Radioactive aerosol control and decontamination in the decommissioning of the Fukushima Daiichi nuclear power station[J]. Nuclear Technology, 2023, 209(12): 2030-2043.
[2] Yang X, Xi T, Qin Y, et al. Computational Fluid Dynamics–Discrete Phase Method Simulations in Process Engineering: A Review of Recent Progress[J]. Applied Sciences, 2024, 14(9): 3856.

1400堆型下安全壳内气溶胶重力沉降迁移行为影响研究

苑皓伟[1,*]，费立凯[1]，范普成[1]，彭旻扬[1]，梅其良[2]，付亚茹[2]，高圣钦[2]

[1]国家电投集团科学技术研究院有限公司，北京市昌平区，100029

[2]上海核工程研究设计院股份有限公司，上海市徐汇区，200030

*Email: yuanhaowei@spic.com.cn

摘要正文：核电厂严重事故情况下，堆芯区域温度通常显著高于堆芯上方腔室的温度，而后者也高于一回路温度。在从堆芯经由一回路向安全壳迁移的过程中，汽化的堆芯材料经历连续的降温瞬态，可凝结在已存在的气溶胶颗粒上（异相成核作用）或形成新的气溶胶颗粒（均相成核作用），安全壳作为核安全的最后一道屏障，在发生严重事故时，有必要对其大气环境中气溶胶浓度、粒径分布进行测量。本试验基于 CERT 台架，试验本体为 CAP1400 安全壳原型 1：8 尺寸缩比模拟体，对其进行适应性改造后开展大空间内气溶胶重力沉降迁移行为试验，基于试验数据分析气溶胶重力沉降迁移规律及不同粒径大小对气溶胶迁移行为的影响。

关键词：CAP1400；安全壳；气溶胶；重力沉降

4608船用堆严重事故放射性核素扩散的不确定分析及辐射剂量的快速评估

赵芳[1,2]，邹树梁[1,2] 徐守龙[1,2]

[1]南华大学资源环境与安全工程学院，湖南 衡阳 421001

[2]核设施应急安全技术与装备湖南省重点实验室，湖南 衡阳 421001

*Email:zhaofang28@usc.edu.cn

摘要正文：当船用反应堆发生严重事故时，放射性核素在整个舱室迅速扩散，辐射后果严重而深远。在做出紧急决策之前，快速估计不同隔间的辐射剂量对于评估事故后果至关重要。目前还没有船用反应堆严重事故时快速估计辐射剂量的方法。放射性核素在封闭环境中的扩散与源项估计、通风速度、扩散速度和空间布局等不确定性密切相关。本研究提出了一种源项释放与耦合放射性核素扩散模型来快速评估辐射剂量的新方法。采用严重事故分析程序确定源项释放份额，计算事故环境的温度和压力，减少了源项估计中的许多不确定性。研究了通风速度、通风模式、扩散速度、释放口位置等不确定性因素对不同区域放射性核素扩散和辐射剂量的影响。在 12 组释放高度的扩散实验中，确定了 5 m 和 12 m 两种特征释放高度。特征高度减少了辐射剂量的增加，增加了设备区域、推进系统区域和反应堆邻近区域超过辐射剂量率限制的时间，使应急救援时间分别增加了 83 s、87 s 和 95 s。最好的应急措施是确定通风速度的范围为[6 m/s，7 m/s]。这对海上反应堆严重事故后的应急决策具有重要的指导意义。

关键词：放射性核素；大气扩散；辐射剂量；不确定分析

报告人：孙庆洋

工作单位：哈尔滨工程大学

是否为学生：是

联系邮箱：sunqingyang@hrbeu.edu.cn

水平壁面流动液膜内颗粒迁移行为研究

孙庆洋，谷海峰*，周艳民，鄂鑫诺

哈尔滨工程大学，黑龙江省哈尔滨市，150001

*Email: guhaifeng@hrbeu.edu.cn

摘要正文：

反应堆严重事故后，安全壳内壁面上凝结水膜对沉积放射性气溶胶颗粒的冲刷和携带，是放射性源项的重要迁移行为之一[1]。相较于其它冲刷表面，水平表面上液膜覆盖率最大、气溶胶颗粒受重力作用沉积最为显著，因此易出现较大质量的气溶胶沉积及冲刷迁移，是放射性冲刷迁移的重要组成部分，掌握水平表面冷凝液膜冲刷下的气溶胶颗粒迁移规律对于严重事故后安全壳的精准评估具有重要意义。本研究针对 0° 水平壁面的流动液膜铺展行为和沉积颗粒冲刷行为开展实验研究和模型研究，探究水平表面液膜铺展规律和流动液膜内的颗粒迁移规律，评估壁面液膜厚度、流速分布，以及不同气溶胶沉积质量、不同冷凝速率下液膜内气溶胶颗粒的运动规律，结合实验结果简要分析水平壁面流动液膜内颗粒迁移特性，并建立相应预测模型。

目前国内外已开展气溶胶冲刷行为的相关实验研究主要集中在德国 THAI 系列实验[2-4]，其中 THAI-AW3-LAB 实验针对 2° 情况的微倾斜壁面开展了冷态冲刷实验[4]，实验结果显示气溶胶近似呈指数冲刷，然而实验在冷态环境开展且并未关注壁面液膜厚和流速的变化，不足以揭示液膜内的颗粒迁移行为。相比之下本研究的创新点在于：开展了热态环境实验，可以获取热态冷凝条件下的水平表面气溶胶冲刷特性数据；实验搭建了气溶胶沉积平台，可以制备均匀沉积表面并探究不同气溶胶沉积质量下的冲刷规律（Fig.1）；搭建了壁面液膜厚度分布测量装置，开展了水平壁面流动液膜厚度分布特性研究（Fig.2）。实验研究结果表明热态冷凝条件下的水平壁面气溶胶冲刷特性受沉积质量及冷凝速率等因素影响，高沉积质量及高冷凝速率下的气溶胶冲刷速率更快；水平壁面液膜厚度在重力驱动下沿流动方向呈现逐渐减小趋势，流动速度随之逐渐增加。结合热态冷凝冲刷实验的颗粒冲刷规律，基于水平液膜分布特性和颗粒运动受力特征建立了水平壁面流动液膜内的颗粒迁移份额计算模型（Fig.3），相比于现有的 AULA 模型预测精度更高。

关键词：气溶胶颗粒；冲刷；水平表面；液膜

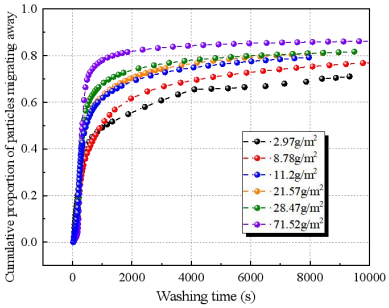


Fig.1 Cumulative proportion of particles migrating away

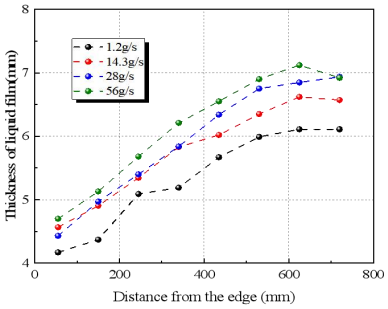


Fig.2 Liquid film thickness at different locations

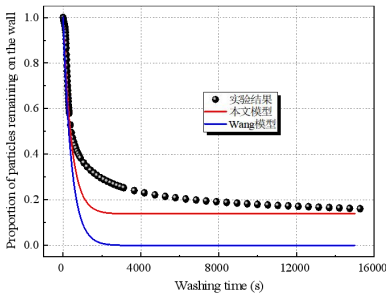


Fig.3 Comparison of proportion between experiments and models

参考文献

[1] Weber G, Funke F, Klein-Hessling W, et al. Iodine and silver wash-down modelling in COCOSYS-AIM by use of THAI results[C]//Proc. Int. OECD-NEA/NUGENIA-SARNET Workshop on the Progress in Iodine Behaviour for NPP Accident Analysis and Management. 2015.

[2] Weber G, Bosland L, Funke F, et al. ASTEC, COCOSYS, and LIRIC interpretation of the iodine behavior in the large-scale THAI test Iod-9[J]. Journal of engineering for gas turbines and power, 2010, 132(11).

[3] Gupta S, Funke F, Langrock G, et al. THAI experiments on volatility, distribution and transport behaviour of iodine and fission products in the containment[C]//International Iodine Workshop Summary Report Nuclear Safety: NEA/CSNI. 2016.

[4] Freitag M, Gupta S, Beck S, et al. Experimental and analytical investigations of aerosol processes—wash-out and wash-down[J]. Nuclear Science and Engineering, 2019, 193(1-2): 198-210.

某核化工放射性气溶胶颗粒动力状态下的扩散行为研究

摘要正文：反应堆、铀矿开采、乏燃料后处理等核设施在运行期间，将不可避免产生裂变产物、衰变子体及活化产物。其中裂变及衰变输运过程中产生的可能以固体粒子形态存在的有 90Sr、83Br、137Cs、212−218Po、212Pb、212Bi 等，具有很强附着力及α或β放射性，能与空气微粒形成结合态；此外，以气体形态存在如 131I、41Ar、85Kr、133Xe 等也能与空气微粒相结合，由此产生放射性气溶胶。放射性气溶胶具有多形、多孔和吸附性，能较长时间悬浮于空气中。工作人员吸入后可引起呼吸系统、免疫功能、内分泌系统损伤，增加心脏疾病、慢性阻塞性肺病、肺肿瘤发病率等一系列健康危害。放射性气溶胶粒子在实际的测量过程中将发生一定的损失，主要是因为气溶胶颗粒在输运过程中发生沉积作用。如何提高放射性气溶胶颗粒测量的有效性，需对相关监测仪的气溶胶颗粒运动及穿透率进行模拟分析，并结合实验，给出较好的测量途径及指导意见。关于气溶胶监测仪内相关的颗粒输运沉积模拟国内开展较少，主要集中在如圆管、弯管、立方体管内及普通室内等。如采用 fluent-滑移通量模型进行室内 220Rn 及其子体输运的计算流体力学(Computational Fluid Dynamics, CFD)模拟等；采用 Fluent-DPM 模型进行文丘里管气固模拟等。结果表明：Fluent 对于气固两相流模拟具有一定的适用性。

本研究使用流体力学仿真软件Fluent，对计算模型离散相模型(Discrete Phase Model, DPM)进行验证，证明该模型的可行性。然后以一种放射性气体气溶胶连续监测仪的测量腔室作为研究对象，对空气动力学直径为0.1~5 μm的气溶胶颗粒沉积特性进行模拟研究，为放射性气溶胶连续监测仪的探测效率提供参考。

报告人：鄂鑫诺
工作单位：哈尔滨工程大学
是否为学生：是
联系邮箱：exinnuo@hrbeu.edu.cn

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事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。实验过程中还针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%。

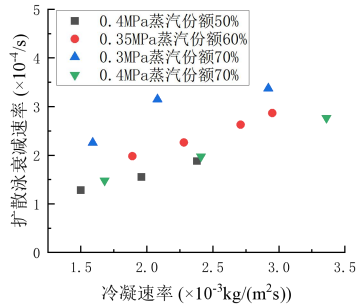


Fig. 1 Decay Rate of Diffusiophoresis

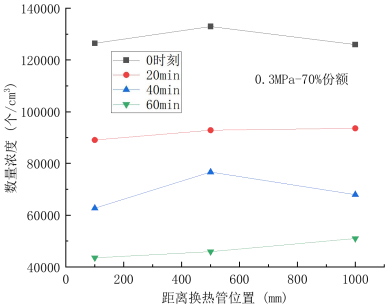


Fig. 2 Distribution Diagram of Aerosol Concentration Along the Radial Direction

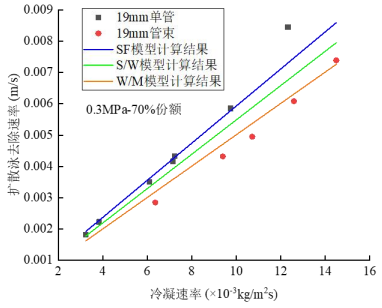


Fig. 3 Comparison of Experimental Values with Model-Calculated Values

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] 孙雪霆,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.

沿海气象条件对核电站气溶胶污染物扩散的数值模拟研究

姚梦玉[1]，刘志祥[1]，谢东[1,*]

[1]南华大学土木工程学院，湖南衡阳，421001

*Email: xiedong@usc.edu.cn

摘要正文：核电站事故中，气溶胶作为放射性物质的重要载体，其沉降行为对环境和人类健康产生重要影响。我国核电站多位于沿海地区，这些地区不仅湿度大，风速大，还具有显著的温度变化。多种因素共同作用，对气溶胶法的沉降和扩散行为产生复杂影响。本文通过 CFD 数值模拟与风洞试验相结合的方法，分析不同湿度、温度和风速对放射性气溶胶的粒径分布、沉降速度及扩散路径的影响。结果显示，湿度、温度和风速三个因素对气溶胶行为的影响具有复杂的交互作用。高湿高温条件下，气溶胶粒子易聚集成较大颗粒，沉降速度加快，但是高风速可能会增加其扩散范围；低温低湿条件下，气溶胶粒子保持较小粒径，悬浮时间较长。本研究为沿海地区合理调节事故应急响应环境湿度提供了科学依据。

关键词：核电厂；气溶胶；沿海地区；数值模拟

大空间内气溶胶自然去除速率及空间分布规律实验研究

李韬，王辉，谷海峰*

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

*Email:guhaifeng@hrbeu.edu.cn

摘要正文：与非核工业设备事故相比，核反应堆严重事故的特殊性在于放射性物质的潜在释放和引起的辐射后果[1]，如何避免放射性物质释放至外界环境中是极为重要的研究方向。典型的压水堆发生严重事故时，无论是堆芯熔化事故和堆芯解体事故，都会有大量的放射性裂变产物以气溶胶的形式从堆芯释放出来。除此之外，堆芯熔融物与混凝土反应、高压熔体喷射及再悬浮过程等二次源也会产生放射性气溶胶[2,3]。另一方面，由于气体冷却和化学反应，大部分气空间物质也会迅速转化为气溶胶颗粒的形式，只有惰性气体和一些碘能以气体形式存在[4]。

由于安全壳本身体积巨大，含有蒸汽、空气等的混合气体及产生的裂变产物在其内部气空间可能会形成较为复杂的热工水力环境。因此安全壳大空间内的气溶胶演化行为特性需进行深入研究。由此本文采用实验的方式对大尺度安全壳模拟体（体积127m^3）内气溶胶的沉降行为进行了研究。借助粒径谱变化分析了大尺度空间环境中不同位置的气溶胶沉降行为，获取如衰减指数、粒径变化等关键实验数据。探究了不同气溶胶浓度、位置下的空间气溶胶沉降速率分布变化规律及空间分布规律，如不均匀的气溶胶浓度空间分布可能会影响气溶胶的衰减速率；各粒径下的气溶胶粒子的衰减常数成如图所示的“V型分布”；且大尺度空间内的气溶胶浓度存在浓度分层现象；初步分析了压力、蒸汽份额等关键变量对于空间气溶胶沉降速率分布规律的影响。本实验的结果可用于气溶胶沉降模型的验证。

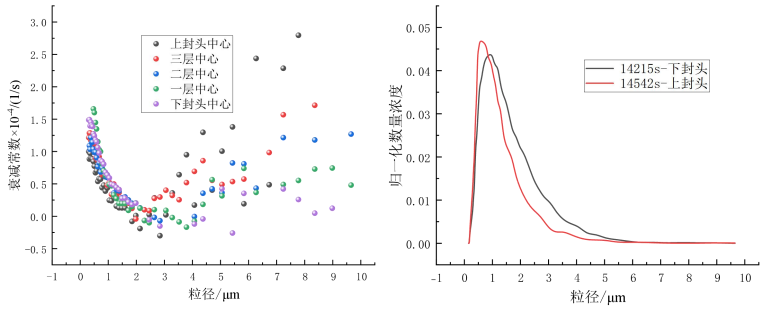


Fig.1 The attenuation law of aerosol quantity concentration and particle size spectrum distribution under different particle sizes in the experiment (0.2MPa,40% vapour fraction,100℃)

关键词：气溶胶；自然沉降；衰减指数；大空间；严重事故；

参考文献

[1] Sehgal B R. Chapter 5–fission product release and transport[J]. Nuclear Safety in Light Water Reactors, Severe Accident Phenomenology, 2012: 425-517.

[2] Yu X, Gu H, Yin W, 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: 109109.

[3] Yu X, Gu H, Gupta S, et al. Bubble floatation, burst, drainage, and droplet release characteristics on a free surface: A review[J]. Physics of Fluids, 2023, 35(4).

[4] 苏光辉,田文喜,张亚培,秋穗正,陈义学,季松涛,余红星著.轻水堆核电厂严重事故现象学[M].北京:国防工业出版社.2016.

以多孔金属泡沫为收集介质的撞击采样器性能模拟研究

石依妍[1]，谷海峰[1,*]，马耸[1]，陈斌[1]

[1]哈尔滨工程大学核科学与技术学院，哈尔滨市南岗区南通大街145号哈尔滨工程大学31号楼，150001

*Email: guhaifeng@hrbeu.edu.cn

摘要正文：撞击式采样器可实现通过颗粒物的粒径进行分级切割采样，目前广泛应用于大气环境监测。现有市售采样器大多采用冲击板或涂抹润滑脂作为收集介质，但在长时间采样时，颗粒过载会导致捕集效率下降，且在高温环境下，润滑脂对颗粒的收集性能也会下降。相比之下，多孔金属泡沫具有良好的容尘特性和耐高温特性。本文研究了一种以金属泡沫为收集介质的惯性撞击采样器，在采样流量为30L/min的条件下，利用计算流体力学分析软件进行数值模拟。通过建立采样器模型，分别以孔隙率为0.97、孔密度为10PPI、20PPI和40PPI的泡沫铜为收集介质，按照均匀面积法投放单一粒径颗粒，得到不同孔密度时采样器的颗粒捕集效率曲线。同时，通过改变结构参数，对不同金属泡沫半径、喷嘴宽度、喷嘴长度以及喷嘴到收集介质距离的采样器进行模拟研究，评估不同结构对采样器性能的影响。此外，在入口的不同位置投放颗粒，分析多孔金属泡沫中的颗粒物沉积分布情况，以研究不同位置的颗粒在惯性撞击采样器内的捕集性能。

关键词：撞击采样器；捕集性能；数值模拟；多孔介质

参考文献

[1]陈魁,白志鹏,朱坦等.冲击采样器设计参数分析[J].环境污染治理技术与设备，2004,5（8）:79-82.

[2]Huang C, Tsai C. Influence of Impaction Plate Diameter and Particle Density on the Collection Efficiency of Round-Nozzle Inertial Impactors[J].Aerosol Science and Technology,2002,36(6):714-720.

[3]谭至宇,陈凌,程卫亚,等.氡子体气溶胶多孔撞击式采样器的设计与实现[J].核技术，2023,46（5）:51-59.

[4] Kim Y ,Yook S .Enhancement of collection efficiency of inertial impactors using elliptical concave impaction plates[J].Journal of Aerosol Science,2011,42(12):898-908.

[5]Tsai C J , Cheng Y H .Solid Particle Collection Characteristics on Impaction Surfaces of Different Designs[J].Aerosol Science & Technology, 1995, 23(1):96-106.

[6]Dunbar C ,Kataya A ,Tiangbe T .Reducing bounce effects in the Andersen cascade impactor[J].International Journal of Pharmaceutics,2005,301(1-2):25-32.

[7]Kim M ,Kim W ,Lee K , et al.Collection efficiency of round-nozzle impactors with horizontal annular inlet[J].Journal of Aerosol Science,2014,7463-69.

[8]F.P. J C ,Julien B ,Svend B .Influence of the dynamic behaviour of impactor surfaces on particulate matter emission measurements with electrical low pressure impactors[J].Powder Technology,2023,419.

[9]Mohammad A ,Jalali V F ,Ramin T , et al.Development and performance evaluation of a two-stage cascade impactor equipped with gelatin filter substrates for the collection of multi-sized particulate matter[J].Atmospheric Environment,2023,294.

[10] Mao Z ,Niu S ,Guo Z , et al.A study of filtering performance of a new microfluidic inertial impactor for small-scale nuclear reactors[J].Nuclear Engineering and Design,2024,427113358-113358.

[11]孙晋洲,聂政威,陈晔.高孔隙率泡沫金属内空气流动与换热特性[J].新能源进展，2023,11（5）:411-416.

局地空间负压抽吸捕集气溶胶技术研究

刘浩玮[1]，周艳民[1,*]，谷海峰[1]，蹇赵超[1]

[1]哈尔滨工程大学，哈尔滨市南岗区南通大街145号，150001

*Email: zhouyanmin@hrbeu.edu.cn

摘要正文：核设施的退役环节中，需要使用激光对设备进行切割和拆除，在此过程中会有大量放射性气溶胶释放，为确保工作人员安全以及避免环境污染需要针对这部分气溶胶污染物进行通风去除。在部分核设施拆除和切割设备过程中，需要通过局部负压抽吸的方式捕集气溶胶，防止其向空间的不可控逸散，合理的负压抽吸方案不但能够提高捕集效率，而且可以降低载气流量，提高工程经济性。因此，需要开展局部负压抽吸条件下放射性气溶胶去除效率的影响因素研究。

本文首先基于Fluent软件，使用离散相模型（DPM模型）对激光切割作业过程产生的气溶胶流动行为开展仿真模拟，探究局部通风条件下通风流量和通风角度对气溶胶收集效率的影响；得到初步规律后根据相应模化准则搭建了缩小化的实验台开展实际实验以验证仿真计算结果。最终为实际作业场景下的气溶胶有效去除提供参考。

在仿真计算中，针对连续相流体在Euler坐标系下求解N-S方程以得到流场参数，对于离散相流体（颗粒相）则在流场计算完成后注入流场，依靠流场参数求解单个颗粒运动方程得到结果，汇总统计后得到离散相整体的轨道、浓度等结果。在以往针对该领域的仿真研究大都假设颗粒一旦与壁面发生接触就被捕获或无损耗反弹，然而在实际情况中，由于入射颗粒的速度、角度、粒径等不同，颗粒与壁面碰撞后将发生有损耗反弹或被壁面吸附。因此，本研究将使用Fluent软件的用户自定义函数功能（UDF）对壁面边界条件进行修正以提高仿真计算准确性。在实验中，以阿基米德数为依据搭建了缩小化的实验平台，使用实验结果验证了仿真计算结果的准确性。

研究结果表明通风流量和通风角度对气溶胶收集效率影响较大，通风角度越小、通风风量越大对气溶胶的去除效果越好，在实际作业中要选择风量较大和集气罩布置角度较小的方案进行布置。

关键词：核设施退役；放射性气溶胶；DPM模型；颗粒与壁面碰撞；局部通风

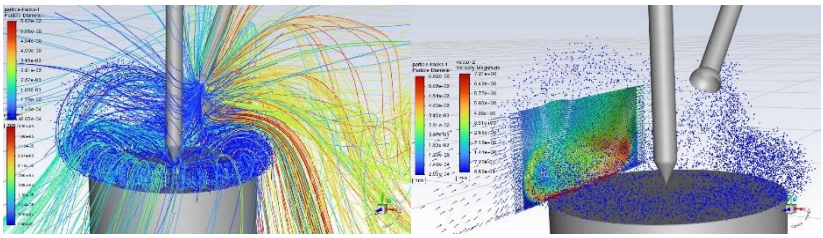


Fig. 1 Particle trajectory

参考文献

[1]章航洲,曹俊杰,张永领,等.反应堆退役技术现状及展望[J/OL].核动力工程,1-13[2024-07-27]

[2]田家铭,王跃社,李彪,等.安全壳内放射性气溶胶输运特性模拟研究[J].核动力工程,2024,45(02):88-95.

[3]彭红花,涂传火,王帅,等.放射性气溶胶测量腔室内颗粒输运沉积模拟研究[J].核技术,2018,41(11):5-11.

[4]江桦锐,肖海兵,张松岭.激光切割设备的吸尘罩流场仿真及除尘研究[J].新技术新工艺,2021,(01):70-74.

[5]Guanqing Liu, Shuiqing Li, Qiang Yao,A JKR-based dynamic model for the impact of micro-particle with a flat surface,Powder Technology,Volume 207, Issues 1 – 3,2011,Pages 215-223,

[6]Safaeifar, H., Farshidianfar, A. A new model of the contact force for the collision between two solid bodies. Multibody Syst Dyn 50, 233–257 (2020).

[7]朱正仁.基于粘附接触模型的细颗粒与壁面碰撞行为研究[D].沈阳航空航天大学,2021.

生物质基气溶胶雾化固定剂的研制及性能研究

蒋林纹[1]，谢东[1,*]，颜招军[1]

[1]南华大学土木工程学院，湖南衡阳，421001

*Email: xiedong@usc.edu.cn

摘要正文：核燃料循环、核工业废物处理、核武器试验和核事故中不可避免地会产生高浓度的放射性气溶胶。这些长期悬浮在空气中放射性气溶胶粉尘颗粒不仅会造成环境污染，还对作业人员的人体健康产生严重的危害。本文制备合成了一种用于放射性气溶胶去除的生物质基雾化固定剂溶液，同时对固定剂的耐热性，黏度和固化效率等进行分析。结果表明：在耐热性方面，固定剂在250℃内不会发生分解，具有良好的热稳定性；在粘度方面，实验结果表面溶液的黏度与反应温度、引发剂用量成反比，与改性基体羧甲基纤维素用量成正比；在沉降效率方面，通过气溶胶沉降实验测试雾化固定剂溶液对粉尘的沉降效率。当喷洒量为200mL/m³时，五组溶液对气溶胶沉降效率均在80%以上。其中黏度为450mPa·s的雾化固定剂压制效果最好，对普通气溶胶沉降效率为87.7%，对含放射性气溶胶沉降效率可达90.8%，该黏度的喷洒雾化固定剂3分钟内就能将被处理区域内的气溶胶浓度降至初始气溶胶浓度的一半，能够快速对气溶胶进行沉降。

关键词：气溶胶雾化固定剂；气溶胶；黏度；沉降效率

基于模化方法的密闭空间通风去除气溶胶行为研究

塞赵超[1]，周艳民[1*]，谷海峰[1]，孙中宁[1]，刘浩玮[1]，李子龙[1]

[1]哈尔滨工程大学，哈尔滨市南岗区南通大街145号，150001

*Email: zhouyanmin@hrbeu.edu.cn

摘要正文：核动力海洋浮动平台动力舱内的放射性气溶胶浓度控制是确保系统安全运行的首要任务之一，通风去除则是抑制空间气溶胶浓度的有效手段，采取优化的气流组织方案对于提高气溶胶浓度抑制效果具有重要意义。由于动力舱空间较大，设计等比模型开展试验研究不仅建造周期长，且成本巨大。因此本文基于三大相似理论推导得到“模型化方法”，并得到相关物理量的比例关系，包括流场速度、计算域温度、气溶胶扩散及分布规律等，然后基于缩比模型研究气溶胶颗粒在模型流场中的迁移行为，进而对其在大空间的迁移行为进行预测。

本文主要有以下成果：

1.结合连续性方程、N-S方程、能量方程对其进行的无量纲化处理，得到无量纲方程组。发现在低速条件下，流场相似由准则数阿基米德数Ar、雷诺数Re决定。两个流动现象是相似的，其无量纲方程组就是相同的，两个相似准则数就是相等的，由此得到速度比例尺、热量比例尺、换气次数比例尺等重要比例尺。并对其模化失真现象进行了优化处理。

2.气溶胶颗粒在流场中主要受到曳力和重力影响，根据相似理论，推导得出关于曳力和重力的相似准则数，并由此得到气溶胶颗粒物的粒径比例尺、速度比例尺关系。

3.采用CFD仿真软件，并根据1和2中对流场和气溶胶颗粒的模化设计，分别得到了原型、模型在密闭舱室中“上送下回”“下送上回”“中送上下回”对气溶胶去除作用的仿真结果。结果显示，模型与原型流场中气溶胶颗粒物的扩散规律相似，模化方法正确。

关键词：相似理论；阿基米德数Ar；气溶胶；通风

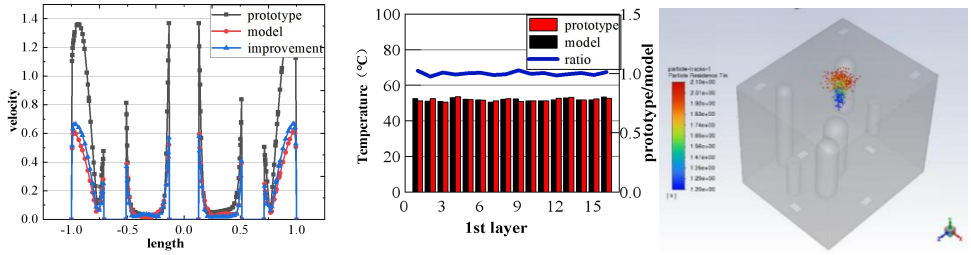


Fig. 1 Modeling speed and temperature

参考文献

[1] Christine Walker, Gang Tana, Reduced-scale building model and numerical investigations to buoyancy-driven natural ventilation, Energy and Buildings[J], 2011, 43: 2404–2413.

[2] Zhang Z, Chen Q. Experimental measurements and numerical simulations of particle transport and distribution in ventilated rooms. Atmospheric Environment, 2006, 40(18): 3396-3408

[3] Zhang Z, Chen Q. Prediction of particle deposition onto indoor surfaces by CFD with a modified Lagrangian method [J]. Atmospheric Environment, 2009, 43(2): 319-328

[4] 蔡增基, 流体力学泵与风机[M]. 中国建筑工业出版社, 1999.

[5] 安朴艳, 室内气流组织及颗粒物分布的数值模拟研究[D]. 湖南大学, 2016.

[6] 施孝增, 吴家正, 室内颗粒浓度分布规律与PSI-C法适用特征的研究[J]. 建筑热能通风空调, 2010,29(03):44-47+30.

放射性气溶胶在室内环境中的浓度分布及其扩散参数研究

贺金鹏[1]，吴思远[1]，顾卫国[1,*]，聂保杰[1]

[1]上海交通大学，上海市闵行区东川路 800 号，邮编 200240

*Email: guweiguo@sjtu.edu.cn

摘要正文：在核爆炸、放射性物质泄漏等特殊情况下，放射性核素会吸附在空气中的细小颗粒上，形成放射性气溶胶，并进入舱室、隔间等室内环境中。室内环境作为人类长期生活、工作和学习的场景，其放射性物质的浓度分布会严重影响场所中人员的健康和安全。因此，准确得到舱室中放射性气溶胶的浓度分布具有重要意义。传统的计算流体动力学（CFD）方法虽然可以详细模拟气溶胶的扩散过程，但由于其计算复杂度高、时间长，难以在紧急情况下快速提供结果。而扩散参数的研究可以提供一种简化但有效的方法来估算气溶胶在室内环境中的分布情况。这不仅能大大缩短计算时间，提高应对突发事件的效率，还能为制定防护措施和优化室内通风设计提供重要参考。因此，深入研究扩散参数对放射性气溶胶浓度分布的影响，不仅具有理论价值，更有实际应用的迫切需求。实验研究发现，放射性气溶胶的浓度分布具有明显的空间特性。在不考虑壁面影响的条件下，不同位置的气溶胶扩散参数随空气流速的增加而增大。具体实验表明，在矩形舱室中，当空气流速从 0.4 m/s 增加到 0.9 m/s 时，扩散参数由$1e^{-6}+0.005\cdot x^{3}$减小至 $1e^{-6}+0.005\cdot x^{2}$。这些结果表明，空气流速对放射性气溶胶的扩散参数有显著影响，从而影响其在室内的浓度分布。本研究为放射性气溶胶在室内环境中的行为提供了新的认识，并为进一步控制和减少室内放射性污染提供了理论依据。

Fig.1 V=0.4m/s,Aerosol dispersion distribution

Fig.2 V=0.6m/s, Aerosol dispersion distribution

Fig.3 V=0.9m/s, Aerosol dispersion distribution

关键词：放射性气溶胶；扩散参数；室内环境浓度分布

参考文献

[1]Din, T. M. H. U., Byrne, M. A., & McGrath, J. A. (2023). Modelling the ingress and charge enhanced deposition behaviour of radioactive aerosols in dwellings. Atmospheric Environment.

[2]With, G. de, & Jong, P. de. (2011). Simulation of thoron and thoron progeny concentrations in the indoor environment. Journal of Building Physics.

[3]Mostafa, M. Y. A., Khalaf, H. N. B., & Zhukovsky, M. (2021). Attachment rate characteristics of different wide used aerosol sources in indoor air. Journal of Environmental Health.

[4]Yu, K. N., Wong, B. T. Y., Law, J. Y. P., & Lau, B. M. F. (2001). Indoor dose conversion coefficients for radon progeny for different ambient environments. Environmental Science.

[5]Chih-Shan, L., & Hopke, P. K. (1991). Characterization of radon decay products in a domestic environment. Indoor Air.

[6]Chou, C., Weng, Y., & Chen, K. (2018). Numerical simulation of aerosol particle dispersion in an indoor environment. Atmospheric Environment, 181, 244-253.

[7]Zhang, Y., Chen, Q., & Jiang, L. (2019). Study on the behavior of radioactive aerosols in confined spaces. Journal of Environmental Radioactivity, 205, 1-8.
[8] Gu W, Wu S, He J, et al. Method for solving atmospheric dispersion parameters of radioactive aerosols based on wind-tunnel laser measurement experiments[J]. Annals of Nuclear Energy, 2023, 194: 110086.

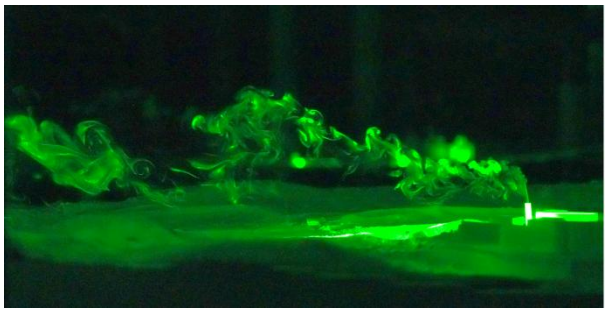
核电站放射性气溶胶在大气边界层相干湍流结构中扩散特性研究

吴思远[1]，王德忠[1]，贺金鹏[1]，聂保杰[1]，顾卫国[1,*]

[1]上海交通大学 核科学与工程学院，上海市闵行区东川路 800 号，200240

*Email: guweiguo@sjtu.edu.cn

摘要正文：核电站运行过程中会排放少量放射性核素。为了评估放射性流出物对环境的影响，目前的研究中通常采用高斯模型，并考虑标准大气扩散参数，如 P-G 参数。然而，在现实条件下，核电站厂址周围往往有如冷却塔、建筑物、山脉以及起伏的地形等复杂的下垫面，导致大气扩散参数在经验值和现实值之间会产生不确定性[1]。同时，大气边界层往往具有准有序性的相干湍流结构对质量和热量的输送都有很大的影响[2,3]，不能简单地进行统计平均。鉴于此，通过对复杂下垫面厂址进行气溶胶扩散风洞激光测量实验，获得了浓度分布。采用遗传算法对大气扩散参数进行了预测[4]。将实验结果与标准 P-G 参数进行比较，发现存在显著差异，复杂下垫面上大气扩散参数相比标准值有显著的增加。此外，还加入了随高度变化的风速时间序列来描述大气边界层的相干湍流结构[5]，并结合风洞实验和烟团模型比较与恒定风速情景的差异。结果表明，与恒定风速相比，相干湍流结构会导致气溶胶产生更强烈的扩散。这项研究可以为更准确地预测放射性流出物大气扩散特性提供方法和结果。



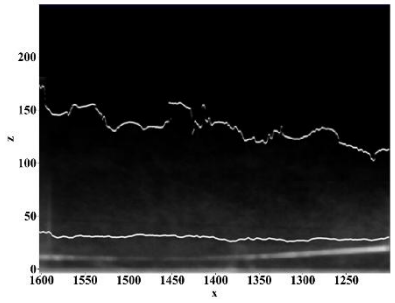


Fig. 1 Particle distribution with large-scale structure **Fig. 2** Concentration distribution boundary and centerline in x-z plane (y=0)

关键词：核电厂；气溶胶；风洞实验；大气扩散参数；烟团模型。

参考文献

[1] Leelőssy Á, Molnár F, Izsák F, et al. Dispersion modeling of air pollutants in the atmosphere: a review[J]. Open Geosciences, 2014, 6(3): 257-278.8.

[2] Zeng Q, Cheng X, Hu F, et al. Gustiness and coherent structure of strong winds and their role in dust emission and entrainment[J]. Advances in Atmospheric Sciences, 2010, 27(1): 1.

[3] Wang G, Zheng X. Very large scale motions in the atmospheric surface layer: a field investigation[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2016, 802: 464-489.

[4] Gu W, Wu S, He J, et al. Method for solving atmospheric dispersion parameters of radioactive aerosols based on wind-tunnel laser measurement experiments[J]. Annals of Nuclear Energy, 2023, 194: 110086.

[5] Han G W, Liu L, Bo T L, et al. A Predictive Model for the Streamwise Velocity in the Near‐Neutral Atmospheric Surface Layer[J]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 2019, 124(1): 238-251.

PISAA软件中气溶胶自然去除模型的研究和分析

郭祎然[1,*]，朱柏霖[1]，杨小明[1]，冯雨[1]，王晨[1]，马如冰[1]，元一单[1]

[1]中国核电工程有限公司，北京海淀区主语国际一号楼中核工程大厦，100048

*Email:guoyr@cnpe.cc

摘要正文：当发生严重事故时，安全壳内会汇聚大量源项放射性物质，放射性物质会以气体、蒸汽和气溶胶的形式存在，特别是其中的气溶胶行为对最终释放到环境中的放射性源项具有重要影响。本文介绍了自主化严重事故一体化分析软件PISAA（Program Integrated for Severe Accident Analysis）中建立的气溶胶自然去除模型，包括自然沉降、布朗扩散、热泳扩散和扩散泳扩散的计算模型，并利用AHMED实验台架进行验证。在相对湿度分别为34%和82%时，软件计算值与实验误差均在20%以内，且计算结果准确的模拟了实验过程，可用于核电厂裂变产物气溶胶自然去除现象的计算研究。

关键词：严重事故；气溶胶；自然去除；严重事故软件；验证. 唐远旺、北京海菲尔格科技有限公司、非学生、thomas.tang@hiferg.com

Research on Size Distribution and Trends of Micro-nano Bubble using Pixact Online Bubble Monitoring System

Yuanwang Tang[1]

[1]Beijing Hiferg Technology Co., Ltd., Beijing, 100022

*thomas.tang@hifer.com

The size distributions and trends of micro-nano bubbles that prepared with different parameters were investigated using Pixact online bubble monitoring system(CCPT12) and micro-nano bubble generator. The probe of Pixact online bubble monitoring system was inserted into the liquid mixture of bubble and water to record the images of bubbles that is generated from micro-nano bubble generator in time. Statistical parameters of bubbles such as: size distribution, bubble counts number and their trends with time were analyzed based on the images recorded. The results of different parameters was compared and the reason of generating different bubble size was discussed.

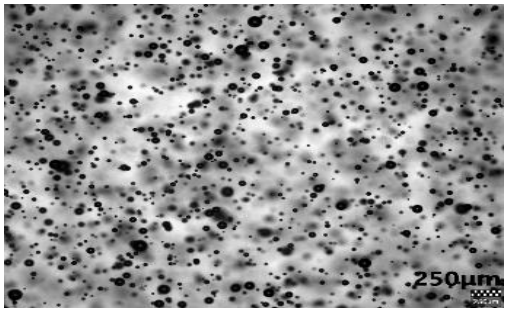


Fig 1. Image of micro bubbles

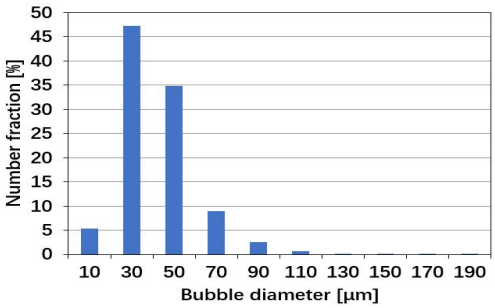


Fig 2. Size distribution of micro bubbles

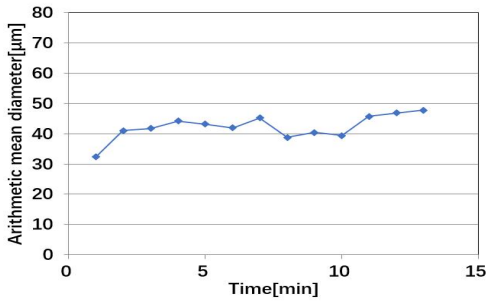


Fig 3. Trend of bubble size with time

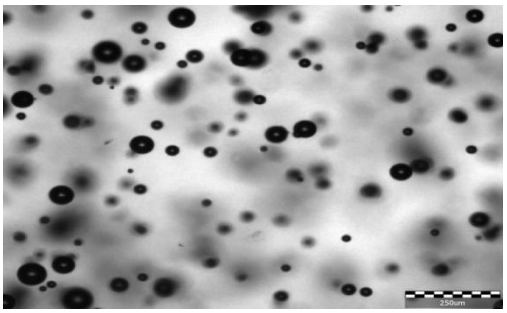


Fig 4. Zoomed Image of micro bubbles

Keywords: PBM; micro-nano bubbles; bubble size; bubble counts

高温液态铅铋中的碘蒸发与吸附行为初步研究

刘辰宇[1]，周江[2]，武杰伟[1]，王雨晴[1]，林鹏[2]，倪木一[1,*]

[1]中山大学中法核工程与技术学院，广东珠海，519082

[2]中广核研究院有限公司，广东深圳，518048

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

摘要正文：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。因此研究事故工况下高温 LBE 环境中关键裂变产物碘的蒸发与吸附特性，对铅铋快堆核安全特性至关重要。本研究采用热色谱法，针对铅铋快堆可能发生的事故工况，系统地考察了不同气氛条件下从 LBE 中蒸发的含碘蒸汽在不同材料壁面上的吸附特性。利用蒙特卡罗方法模拟了含碘蒸汽在不同表面上的理论吸附焓，并结合含碘蒸汽热色谱实验给出惰性气体环境下的测量吸附焓，从而基于经验相关性推测了吸附物的潜在化学组成。在此基础上，进一步通过吹扫气体成分的调节，研究了水蒸气、氧气等不同气体杂质对含碘蒸汽吸附行为的影响。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

机理型气溶胶喷淋去除模型在 PISAA 软件中的应用

朱柏霖*，郭祎然，杨小明，王晨，马如冰，元一单，张卢腾

（中国核电工程有限公司，北京市海淀区主语国际一号楼中核工程大厦，100840）

*zhubl@cnpe.cc

摘要正文：针对核电厂严重事故中裂变产物气溶胶的喷淋去除问题，本文首先建立了气溶胶喷淋去除机理模型，包括惯性碰撞模型、拦截模型和布朗扩散模型，并将该模型应用于严重事故一体化分析软件PISAA（Program Integrated for Severe Accident Analysis）中，并利用FABCS实验系统进行了验证。结果表明：本文所建立并应用在PISAA软件中的喷淋去除机理模型针对FABCS实验在喷淋流量分别为84 L/h及180 L/h下的计算结果与实验测量值基本一致，误差均在20%以内，能够准确模拟实验过程，满足了严重事故下气溶胶喷淋去除的计算需求。

关键词：气溶胶；喷淋去除；严重事故；软件

严重事故下安全壳气溶胶喷淋去除效率实验研究

丁弘，胡培政，佟立丽*，曹学武

[1] 上海交通大学机械与动力工程学院，上海市东川路 800 号，邮编 200240

*Email: lltong@sjtu.edu.cn

摘要正文：严重事故期间存在放射性物质释放的风险，可以通过喷淋系统除去除悬浮在安全壳中的气溶胶以缓解事故后果[1-3]。为了分析喷淋液滴的机械效应和蒸汽冷凝效应对气溶胶的去除效果，开展了不同热工水力条件下的气溶胶喷淋去除实验研究。实验模拟严重事故的热工水力条件为压力 5 bar，温度 20~145 ℃，蒸汽摩尔份额为 40%的空气或含蒸汽混合物，在相同的喷淋流量下采用液滴体积平均直径为 370 μm 的空心锥喷嘴进行喷淋。本文开展了逐步堆叠法开展了累积效应实验，对机械机制、热泳、扩散泳的去除效率进行了逐步分离。分析严重事故条件下气溶胶的全局综合去除效果及与气溶胶粒径相关的去除效率，量化蒸汽冷凝对气溶胶去除效率的影响。结果表明，气溶胶颗粒粒径大于 3μm 时去除效果较好，而粒径在 0.3~3μm 的气溶胶去除效果较差且非单调。喷淋机械效应对气溶胶去除的效率与热泳相似，在 40%的蒸汽份额下扩散泳去除效率约为机械效应的三倍。

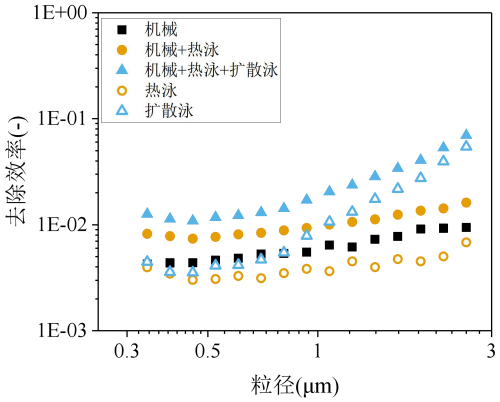


图 1 不同机制对气溶胶的去除效率

Fig.1 Separation of the aerosol removal efficiency

关键词：喷淋；气溶胶去除效率；机械效应；电泳效应

参考文献

[1] del Corno A., Morandi S., Parozzi F., et al., 2017. Experiments on aerosol removal by high-pressure water spray. J. Nuclear Engineering and Design, 311: 28-34.

[2] Sun H., Leblois Y., Gelain T., et al., 2020. Experimental study on aerosol collection by spray droplets: Application to fission products removal in containment. C. International Conference on Nuclear Engineering. American Society of Mechanical Engineers, 83785: V003T13A050.

[3] Hu P., Xu Z., Wang J., et al., 2023. Experimental study on aerosol removal effected by spray characterization. C. Proceedings of the 23rd Pacific Basin Nuclear Conference, Volume 3: PBNC 2022, 1-4 November, Beijing & Chengdu, China. Singapore: Springer Nature Singapore, 473-487.

钋气溶胶行为与测量技术研究进展

报告人：陈佳鹏[1]，通信作者：曹骐[2,*]，

[1] 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，610213

[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，610213

*Email: 404450346@qq.com

摘要正文：核能是一种安全系数高的清洁能源，应用核能的反应堆在服役时可能伴随着放射性气态核素的产生。针对这一现象，需要进行环境辐射监测，以检验核设施运行期间对周围环境造成的辐射和放射性水平是否符合国家和地方的有关规定。

本文进行了国内外气溶胶研究的调研论证，通过铀钚气溶胶行为和测量技术的相关研究方法，引出不同环境介质中钋气溶胶物种形态和行为机制的研究思路，重点关注极毒核素钋-210，其半衰期138天，发射α粒子能量为5.3MeV，比活度为1.66×10^{14}Bq/g。结合实验和测量技术，建立钋-210气溶胶粒径分布特征和浓度分布特征的数谱测量方法，探索钋-210气溶胶形成机制，评估钋气溶胶对环境和人体健康的影响。

关键词：钋-210；气溶胶行为；气溶胶测量技术；

环形气流对气溶胶颗粒沉降影响的模拟研究

张冰芝[1]，李园园[2]，张冰芝[1,*]

工作单位：中国核电工程有限公司，地址：海淀区首体南路 9 号主语国际 7 座 中核工程办公楼

邮编:100037，Email：zhangbz@cnpe.cc

摘要正文：对于长期运行的通风系统而言，风管内气溶胶的沉降更易滋生病菌，从而影响通风质量，尤其在核设施通风领域，沉降的气溶胶会附着放射性元素，成为后期退役处理的重点问题。为了减少气溶胶的沉降，本文通过 CFD 模拟的方法研究了圆形风管内环形气流对气溶胶沉降的影响。

为了确定合适的湍流模型和边界层划分方法，本研究对 Liu and Agarwal[ ]的部分实验进行了模拟。选取有实验数据的直径 0.0127m 的圆管进行方法验证，建立二维模型。因为雷诺应力模型（RSM）能较好模拟壁面射流的湍流模型，本研究初步选用 fluent19.2 中的 RSM 湍流模型进行模拟研究。

将 RSM 模型模拟结果与实验值进行对比， RMS 模拟可以很好的模拟流程时均速度，但是对脉动速度的模拟稍有偏差。为了进一步研究湍流脉动偏差对颗粒沉降模拟造成的影响，研究了不同湍流模型及壁面修正对沉降结果的影响。由文献调研发现，采用不同的壁面修正后对颗粒的沉降结果有很大影响，因此本研究分别采用 RSM、RSM+自带壁面修正、RSM+udf 壁面修正(Tian 文献[2])和 RKE 进行了流场模拟，待计算收敛后，采用 DPM 模型进行了颗粒沉降模拟。

结果表明，RSM 模型在结合软件自带壁面修正后，穿过率偏高，需要调整密度后才能得到与实验值接近，RSM 模型结合文献常用的湍流脉动速度修正后，得到的穿过率偏低。管径 0.0127m 的垂直管道内，Fluent19.2 对不同粒径颗粒的沉积模拟的可靠性不同，粒径 dp=2.5 μ m（ τ +=0.64）的沉积结果与实验值最接近，无需修正的情况下 RKE 模型得到的模拟结果与实验值更接近。

为了与实际工程相结合，本研究建立了直径 0.3m，长 6m 的二维轴对称管道模型，按照以上验证过的方法，对不同网格尺寸进行了模拟。在 DPM 模拟中颗粒粒径的选取与小管道模拟所用颗粒的 τ +（ τ + = 0.64）保持一致，计算出对应的颗粒粒径为 6.8 μ m，密度采用了小管道模拟获得的修正密度。经过不同网格流场模拟结果对比，和不同网格颗粒沉降结果对比，最终选取主流区网格 0.5mm 作为后期环形气流管道模拟的网格尺寸。

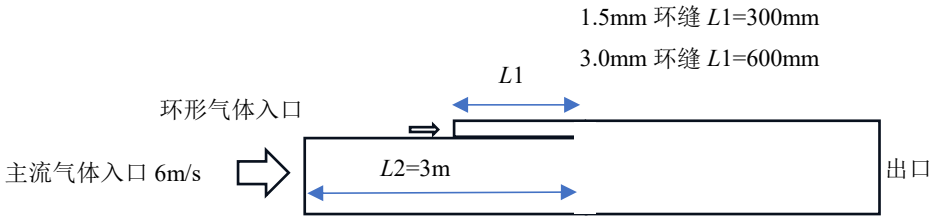


图 1 管道加环缝尺寸环形气流模型示意图

针对直径 0.3m 管道分别建立了环缝尺寸为 1.5mm 和 3mmm 的模型（示意图见图 1）并进行模拟分析。（1）分析了环形气流入口流速的影响：在不同环缝尺寸下，当环形射流入口速度分别为 1m/s，3m/s，6m/s 和 12m/s 时，流速 u 和湍动能 k 的变化。（2）分析了缝隙尺寸对流场的影响：对比分析无环形气流管道、环缝尺寸为 1.5mm 的环形气流管道，环缝尺寸为 3mm 环形气流管道，在入口速度分别为 1m/s，3m/s，6m/s 和 12m/s 时，出口截面速度 u 和湍动能 k 的变化。

管径 0.3m 添加两种缝隙宽度（1.5mm 和 3mm）的管道内，粒径 dp=6.8 μ m（ τ +=0.64）的沉积结果表明，在低的环形气流入口流速下（1、3 和 6m/s），,环形气流均能降低颗粒的沉积，且三种低流速的速度和湍动能曲线比较接近，在近壁面区域两种曲线随环形气流入口速度增大而增大，在主流区相反；但在高环形气流入口流速下（12m/s），由于环形气流与主流气流相互扰动增强，壁面附近速度和湍动能都增大，所以会加速颗粒沉积。

本研究选取 RSM 和 RKE 湍流模型结合 DPM 模型进行了模拟，通过模拟结果与实验流场的对比和颗粒沉积结果对比，找到了 fluent19.2 模拟结果与实验值接近的颗粒粒径及湍流模型。

关键词：环形气流；气溶胶；沉降

参考文献

[1] Liu B Y H , Agarwal J K .Experimental observation of aerosol deposition in turbulent flow[J].Journal of Aerosol Science, 1974, 5(2):145,IN1,149-148,IN2,155.DOI:10.1016/0021-8502(74)90046-9.

[2]Parker S , Foat T , Preston S .Towards quantitative prediction of aerosol deposition from turbulent flows[J].Journal of Aerosol Science, 2008, 39(2):99-112.DOI:10.1016/j.jaerosci.2007.10.002.

烟囱内气溶胶代表性取样数值模拟研究

黄奕欣[1]，佟立丽[1,*]，曹学武

[1] 上海交通大学机械与动力工程学院，上海市东川路 800 号，邮编 200240

*Email: lltong@sjtu.edu.cn

摘要正文：在核电厂运行过程中会不可避免地会产生气溶胶等放射性流出物，这些物质通过烟囱管道排入大气中，对周边环境产生一定的危害。为了评估气溶胶排入大气对周边环境的影响，需设置取样点来真实反映烟囱管道内的放射性活度情况，依照 ISO 2889-2023 对代表性取样的要求，取样点应满足“混合均匀”判定准则[1]。由于实际的烟囱管道尺寸庞大，试验成本较高，在现场试验之前可先进行比例试验，当比例试验烟囱满足几何尺寸、流动条件和雷诺数的要求，即可为现场试验的取样位置提供参考[2]。而在实验前可以对比例试验烟囱流场进行数值模拟，通过模拟不同试验工况，并精确输出任意点的所需参数，为选择取样位置提供重要参考。本文采用计算流体力学方法对一比例试验进行数值模拟，分析现有取样位置的平均气旋角、气流速度变异系数、示踪气体浓度偏差、示踪气体浓度变异系数和气溶胶颗粒浓度变异系数这 5 个参数是否满足“混合均匀”判定准则的规定要求，不仅能够给出建议采样位置从而简化比例试验的流程，也为现场试验提供了数据支撑[3-5]。

关键词：气溶胶；气载流出物；计算流体力学；代表性取样

参考文献

[1] International Organization for Standardization. ISO 2889-2023 Sampling airborne radioactive materials from the stacks and ducts of nuclear facilities [S]. 2023.

[2] American National Standards Institute. ANSI N13.1-1999 Sampling and monitoring releases of airborne radioactive substances from the stacks and ducts of nuclear facilities [S]. 1999.

[3]董信芳, 李航, 丁世海, 等. “华龙一号”核电厂烟囱气态流出物取样系统验证的试验与分析[J]. 中国辐射卫生, 2018, 27(01): 52-57.

[4]王勰, 任忠国, 熊忠华. 基于CFD方法的核设施气载流出物取样代表性研究[J]. 辐射防护, 2018, 38(06): 471-479.

[5] International Organization for Standardization. ISO 10780-1994 Stationary source emissions - Measurement of velocity and volume flowrate of gas streams in ducts [S]. 1994.

铅铋堆燃料包壳破损气溶胶释放特性研究

李昱辰[1]，周艳民[1*]，谷海峰[1]，张奕宸[1]，江娉婷[2]，王政辉[2]

[1]哈尔滨工程大学，哈尔滨市南岗区南通大街 145 号，150001

[2]中广核研究院有限公司，深圳市福田区上步中路 1001 号，518000

*Email: zhouyanmin@hrbeu.edu.cn

摘要正文：铅铋堆是第四代反应堆反应堆中最具发展潜力的堆型，反应堆长期运行时燃料棒会受到高温等因素发生微小破口，导致放射性裂变产物释放到冷却剂中，增加一回路的放射性。开展铅铋堆燃料包壳破损裂变产物释 放行为的研究，其成果能为铅铋快堆严重事故下源项评估和安全系统设计提供理论支撑和模型基础，具有十分 重要的意义。本文通过实验的方法，开展铅铋反应堆燃料包壳破损裂变气体以及气溶胶释放实验研究，探究不同热工参数以及破口尺寸等参数对裂变气体以及气溶胶的释放特性造成的影响，得到了不同燃料包壳压力下气溶胶瞬态 释放以及稳态释放规律；通过对气溶胶的瞬态释放份额的计算，评估不同参数对气溶胶释放特性的影响；通过对气溶胶总释放份额的计算，评估破口尺寸对气溶胶的去除造成的影响。实验数据能够为铅铋堆严重事故下源项评估提供数据支撑。研究结果表明，燃料包壳发生微小破口后裂变气体释放呈现指数衰减规律，且能够用一级动力学方程进行表征，有无铅铋合金淹没破口对气体释放无明显影响，且释放速率随破口尺寸增大而增大；破口对气溶胶具有一定的去除效应，这意味着燃料包壳间隙中的放射性气溶胶并不能完全释放出来，且累计释放份额随破口尺寸的增大而增大；气溶胶的瞬态释放份额和气体释放规律类似，近似呈现出指数衰减形式，随破口尺寸增大而增加。

关键词：铅铋堆；气溶胶；释放特性；源项

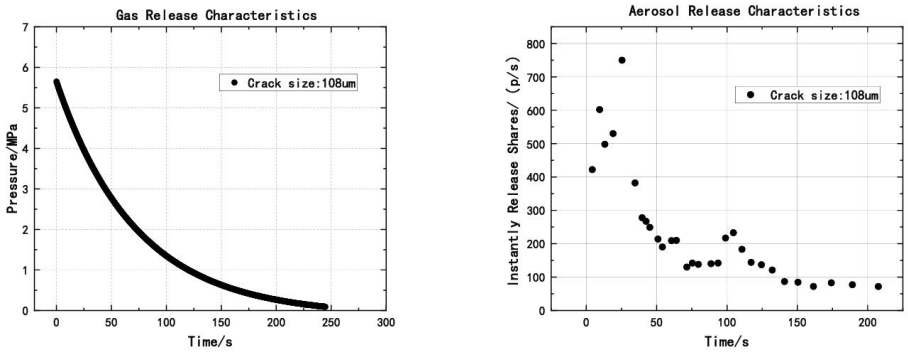


Fig. 1 Gas and aerosol release characteristics

参考文献

[1]李雪峰,雷梅芳.第四代核能系统的产生与发展[J].中国核工业,2018,(02):29-32

[2] Karlsson, E., Neuhausen, J., Eichler, R., Aerts, A., Danilov, I. I., Vögele, A., & Türler, A. Thermochromatographic behavior of iodine in fused silica columns when evaporated from lead–bismuth eutectic. Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, (2020). 326(2), 1249–1258.

[3] CASTLEMAN, A. W., Jr., TANG, I. N., MUNKELWITZ, H. R., Chemical reactions and transport behavior of fission product iodine," Proc. Intern. Symp. Fission Product Release and Transport Under Accident Conditions, CONF-6504071, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tenn. (Apr. 1965) 325.

[4] Dehbi A, Suckow D, Guentay S. Aerosol retention in low-subcooling pools under realistic accident conditions[J]. Nuclear Engineering & Design, 2001, 203(2/3): 229-241.

[5] Lewis B J，Thompson WT. Fission product chemistry in oxide fuels[J].Comprehensive Nuclear Materials,2012:515-546.

报告人姓名：杨国瑞，工作单位：西安交通大学，是否为学生：是，联系邮箱：yangguorui@stu.xjtu.edu.cn

不同气泡数量下的气溶胶洗涤特性研究

杨国瑞[1]，吴梓杰[2]，章静[3,*]，巫英伟[4]，贺亚男[5]，秋穗正[6]，苏光辉[7]，田文喜[8]，陈鹏[9]，陈勇征[10]

[1]西安交通大学，陕西省西安市碑林区咸宁西路 28 号，710049

[2]中广核研究院有限公司，广东省深圳市福田上步中路 1001 号科技大厦，518031

*Email: zhangjingxjtu@xjtu.edu.cn

摘要正文：

1．介绍

多相流是流体力学研究中的重点，比较典型的是气液多相流，近年许多学者已经对气液两相流开展了相应的研究，获得了许多相应的结果[1-3]。但当气体中存在微小颗粒形成气溶胶时，便形成了气液固多相流，其内在机理变得更加复杂。目前，也有许多学者对气溶胶的水洗展开了相应的研究，并取得了一些进展[4,5]，然而关于气溶胶水洗外部影响因素、内在影响机理等多方面问题，还未取得比较全面理想的结果，对其机理的认识仍然是一个比较漫长的课题，还有待进一步研究。为进一步认识气溶胶水洗机理，本研究通过实验开展了不同气泡数量下的气溶胶水洗研究，分析了不同气泡数量下的气溶胶洗涤效率的变化。实验结果表明，不同粒径颗粒气溶胶的沉积机制不相同，在较小粒径下随着粒径增大沉积效率减小，在较大粒径下随着粒径增大沉积效率增大。同时，实验容器内气泡数量的增多，会导致洗涤效率在整体上有所增大。

2.实验研究

本研究的实验装置如图 1 所示，实验在一个三维可视化容器中进行，底面均匀地布置了 49 个 3mm 的通气孔，气体通过气溶胶混合装置与二氧化钛粉末混合产生气溶胶通入实验容器，通过粒径谱仪测量其初始浓度和洗涤后浓度。同时采用高速摄像机进行拍摄气泡行为。选择氦气作为气相、质量浓度为 25%的甘油水溶液作为液相，液体物性如表 1 所示。

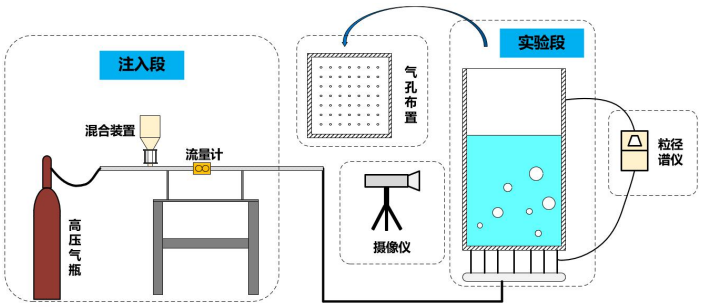


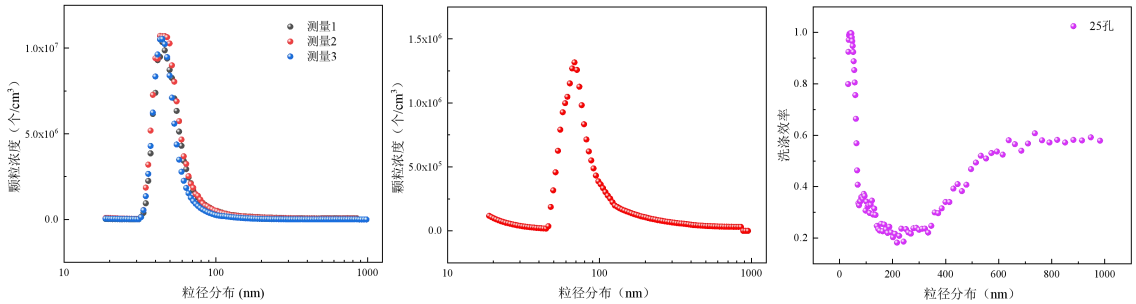
Fig. 1 Experimental device

Tab 1 Experimental liquid properties

甘油水溶液			
质量浓度	25%	粘度（mPa·s）	2.673
密度（kg/m^3）	1056	表面张力（N/m）	0.068

3.结果和讨论

图 2 为 25 孔工况下的气溶胶初始和洗涤后浓度及洗涤效率，从图 1(c)中看出，随着粒径从小到大的增长，气溶胶的沉积效率先减小后增大，最后逐步达到稳定，在最小粒径下沉积效率接近 100%，沉积效率最小处在 200nm 左右，沉积效率降低至 20%左右，最后沉积效率可以基本稳定在 60%。出现上述现象的原因是不同粒径的气溶胶颗粒的沉积机制不同[4]，小粒径的气溶胶颗粒沉积主要受布朗扩散的影响，因此粒径越小其沉积的概率越大，随着粒径的增加其沉积效率自然降低；大粒径颗粒的沉积主要受离心沉降和重力沉降这两种机制影响，因此颗粒粒径越大，沉积效率越大。

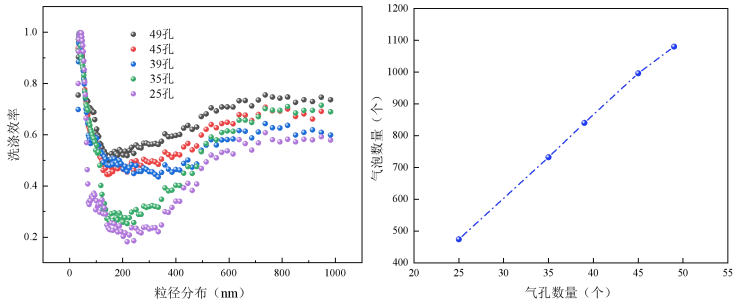


(a)Pre-wash concentration (b)Post-washing concentration (c)Washing efficiency

Fig. 2 25 ventholes washing data

图 3 为不同气孔数量下的洗涤效率对比和气泡数量变化，从图 3(a)中可以看出，每个工况的洗涤效率随粒径的变化都是先减小后增加最后逐渐稳定，在图中所示的最小粒径下洗涤效率基本都能接近 100%，洗涤效率从减小到增大的转折粒径基本都处于 200-300nm 之间，稳定后效率处于 60%-75%之间，与之前所述规律相符。

从图 3(b)中可以看出，气泡数量与气孔数量几乎呈现正相关的关系。同时，在图中，气溶胶洗涤的整体效率随着气孔数量的变多有增大的趋势，即气溶胶洗涤效率随着气泡数量的变多而增大。相同尺寸的液体区域，运动的气泡数量变多，会对流场的扰动变得强烈，流场的变化再作用于气泡，使得颗粒沉积得更多。



(a) Washing efficiency (b) Number of bubbles

Fig. 3 Washing efficiency and number of bubbles vary with the number of ventholes

关键词：气泡；气溶胶；洗涤效率

参考文献

[1] Böhm L, Kurita T, Kimura K, et al. Rising behaviour of single bubbles in narrow rectangular channels in Newtonian and non-Newtonian liquids[J]. International Journal of Multiphase Flow, 2014, 65: 11-23.

[2] Böhm L, Brehmer M, Kraume M. Comparison of the single bubble ascent in a Newtonian and a non-Newtonian liquid: A phenomenological PIV study[J]. Chemie Ingenieur Technik, 2016, 88(1-2): 93-106.

[3] Talaia M A R. Terminal velocity of a bubble rise in a liquid column[J]. World Academy of Science, Engineering and Technology, 2007, 28: 264-268.

[4] Qianchao Ma, Yanmin Zhou, Haifeng Gu, et al. Experimental research on aerosol deposition phenomenon in single-sized rising bubble[J]. Progress in Nuclear Energy, 2022, 154:104456.

[5] Yingzhi Li, Zhongning Sun, Haifeng Gu, et al. Deposition characteristic of micro-nano soluble aerosol under bubble scrubbing condition[J]. Annals of Nuclear Energy, 2019, 133: 881-888.

核电厂安全壳气溶胶去除因子不确定性分析

欧平文[1,*]，陈鹏[1]，郭超[1]

[1]中广核研究院有限公司，深圳，518000

*oupingwen@cgnpc.com.cn

摘要正文：在核电厂发生事故后，大量裂变产物会以气溶胶的形式释放到安全壳内，并在安全壳热工水力条件以及工程设计措施的影响下发生沉降、凝聚等气溶胶现象，使安全壳中悬浮气溶胶的质量持续变化，并最终影响场外裂变产物源项的释放以及场外放射性后果。本报告采用严重事故一体化程序 ASTEC 和不确定性分析工具 SUNSET，以代表性严重事故序列为热工水力基础，选取气溶胶行为的关键参数，对具备非能动安全壳冷却系统的三代压水堆事故中安全壳气溶胶去除因子进行不确定性量化研究。研究结果指出了释放关键阶段内气溶胶去除因子的分布范围以及影响场外气溶胶释放的关键参数，为事故后源项分析以及放射性后果评价提供参考。

关键词：气溶胶；去除因子；不确定性

姓名：王雨晴

工作单位：中山大学

学生：博士生

邮箱：wangyq289@mail2.sysu.edu.cn

紧凑型聚变能实验装置真空室内钨粉尘爆炸行为研究

王雨晴[1]，武杰伟[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

摘要正文：在能源消费低碳化趋势下，核能作为清洁能源在我国能源消费比重稳步提升，可控核聚变是核能中最理想的清洁能源，磁约束等离子体放电更是可控核聚变中最具潜力的实现方式。在进行长脉冲、高功率注入的等离子体放电实验时，反应温度高达上亿摄氏度，面向等离子体材料需承受极高的热负荷，目前，仅有水冷钨铜结构材料可承受该热负荷。钨具有高熔点、较高热导率以及较好的机械强度等特性，是公认最佳发展前景的面向等离子体材料。然而，钨材料受到高温等离子体烧蚀会产生大量的钨粉尘，并夹杂氘氚。当真空室内出现破口时，可能发生钨粉尘爆炸，造成严重事故。

本文从聚变能实验装置安全角度出发，以紧凑型聚变能实验装置为例，针对真空室内钨粉尘爆炸典型事故进行后果评估。基于有限体法，模拟验证真空室内流动传热场，开展室内钨粉尘爆炸分析，涵盖室内破口泄漏、扬尘、点火及爆炸全过程。研究得到了钨粉尘爆炸火焰燃烧特点，真空室内压力变化以及压力波的传播路径，分析了粉尘浓度和粒径对最大爆炸压力（Pmax）和最大压力上升速率（dp/dt）max 的变化规律。

本工作通过对紧凑型聚变能实验装置真空室内钨粉尘爆炸现象开展数值模拟和后果评估，可为聚变实验装置内钨粉尘去除和防爆安全提供参考。

关键词：核聚变；钨；粉尘爆炸

核燃料循环设施溶剂火灾气溶胶释放行为研究

连一仁[1]，孙洪超[1]，孙树堂[1]，朱业明[1]，牛江宇[1]，闫津[1]，荣誉[1]

[1]中国辐射防护研究院，山西省太原市学府街102号，030006

*Email: yirenlian2010@126.com

摘要正文：为评估核燃料循环设施火灾事故，美国西北太平实验室早期开发了一种用于预测核燃料循环设施火灾期间各种类可燃物料的燃烧与传热行为、放射性物质的释放及传输行为的计算机代码FIRIN[1]。对于典型惰性核素铀的释放，假设整个燃烧过程中铀的释放是均匀的，则根据Halverson等（1987）[2]提供了的实验数据，得到经验公式。

日本原子力研究所也开发了计算代码FACE[3]，FACE的主要内容与FIRIN相似，而FACE对于烟颗粒的释放分数，定义为范围0.05至0.1的经验值。FACE对有机溶剂燃烧释放的放射性核素，除了挥发性核素以外，按一定的气溶胶化率，成为气溶胶，均匀地附着在煤烟上，并给出了烟颗粒在燃烧过程中对数正态分布的模型。

2015年，桑迪亚实验室Brown等[4]将相关实验数据与计算流体动力学代码的耦合方法能够计算给出有机溶剂燃烧气溶胶的释放分数（ARF），研究表明改变初始油池的高度会导致模型中ARF的增加。Brown等对有机溶剂火灾事故ARF的算法是基于Kataoka等[5]给出的池面夹带模型，该模型虽没有很好地解决液滴从液体表面演变的问题，但对于该模型地改进，未来有望更为精确的预测有机溶剂燃烧气溶胶的释放。

有机溶剂火灾事故分析从最开始的实验数据和经验判断到经验模型算法，以及到现在的数值模拟，对于有机溶剂火灾事故的后果预测越趋于精细化和高精准度。以气溶胶形成的物理模型和原理为基础，建立高保真的数值模拟方法，可以提供具有自定义条件的自定义域的气载核素释放和传输，可以预测无限制的范围和场景，这种分析方法是未来发展的必然趋势。基于现代高保真的数值模拟方法将成为核素释放分数确定最具潜力的技术之一。通过仿真分析技术，学者能够更好地模拟流体动力学和热力学现象，并能够更好地理解与本项目有机溶剂火灾事故场景有关的现象和机理。相比于早期的小规模实验结果和经验判断，其能够提高气溶胶产生释放行为的置信度，而且能够为负责风险评估的分析师提供更具代表性的值。

对于溶剂火灾可能有效的气载核素释放机制主要为蒸发诱导的夹带、沸腾气泡夹带及气液界面风的扰动。

蒸发诱导的夹带：在早期的液体蒸发测试中已经观察到它们的逃逸现象[6]，测试涵盖了加热、熬煮和沸腾的蒸发情景，ARF值在10-4和10-7之间，但对释放颗粒大小的参数敏感性没有详细研究。

沸腾气泡夹带：存在的两种基本状态，第一种为气泡膜破裂的情况，液滴是在气泡顶部破裂时形成的，对于水和盐水，将形成1-100μm 直径范围的液滴；第二种情况为气泡膜在气液界面破裂后空隙区域的快速填充和挤压引起的，直径范围介于100μm和300 μm之间[7]。

气液界面风的扰动：气液界面风扰动导致的气溶胶释放，其高度依赖于风速或气液界面的表面速度，这种机制通常是风速和流体特性的函数，可能与岸和水体相互作用的行为有关[8]。该机制适用于较高的风速和大面积范围的火灾情景。

对于蒸发和冒泡过程中气溶胶的释放，参考DOE手册中Kataoka的溶液表面夹带模型，早期研究人员已经通过实验测量证明了夹带量（Efg）为液滴向上质量通量与气体质量流的比率[9-12]。 在NUREG/CR-3304报告中对蒸发和冒泡过程中气溶胶的释放进行了详细的推导，该模型分为三个不同区域的方程包括近表面区、动量控制区、沉积控制区，这三个区域由特征高度分隔。然而，该模型未考虑气溶胶/小液滴受到热作用的蒸发行为，直接用于溶剂火灾将导致该模型给出的气溶胶粒径可能偏大。鉴于此，对于有机溶剂燃烧气溶胶的形成，可以以池面夹带模型的为基础，通过引入气溶胶的多组分蒸发模型，将有望建立有机溶剂火灾事故更为准确的仿真模型，为核燃料循环设施建立物理合理的安全界限提供技术支持。

关键词：溶剂火灾；气溶胶；释放分数

参考文献

[1] Chan M K, Ballinger M Y, Owczarski P C, et al. User's Manual for FIRIN: A Computer Code to Estimate Accidental Fire and Radioactive Source Term Release in Nuclear Fuel Cycle Facilities[R]. NUREG/CR-3037, PNL-4532, Pacific Northwest Laboratories, 1987.

[2]M. Halverson, M. Ballinger, G. Dennis, 1987. Combustion aerosols formed during burning of radioactively contaminated materials: Experimental results, NUREG/CR-4736, PNL-5999.

[3] G. Nishio, N. Yamazaki. Safety analysis of solvent fire accidents in a fuel reprocessing plant, JAERI, No.JAERI-M-91-144, 1991.

[4]Brown A L, Louie D L Y. Contaminant Entrainment in a Liquid Fuel Fire[C]//First Thermal and Fluids Engineering Summer Conference. Begel House Inc., 2015.

[51]Kataoka I, Ishii M. Mechanistic modeling and correlations for pool-entrainment phenomenon[R]. Argonne National Lab.(ANL), Argonne, IL (United States), 1983.

[6]Mishima, J., Schwendiman, L.C., and Radasch, C.A., Plutonium Release Studies IV. Fractional Release from Heating Plutonium Nitrate Solutions in a Flowing Air Stream, BNWL-931, UC-41 Health & Safety, November 1968.

[7]Borkowski R, Bunz H, Schöck W. Resuspension of fission products during severe accidents in light-water reactors[R]. Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH (Germany), 1986.

[8]Derakhti M, Kirby J T. Bubble entrainment and liquid-bubble interaction under unsteady breaking waves[J]. Journal of fluid mechanics, 2014, 761: 464-506.

[9]Rozen A M, Golub S I, Votintseva T I. Calculating droplet carryover with bubbling[J]. Teploenergetika, 1976, 23(11): 59.

[10]Rozen A M, Golub S I, Davydov P F. Entrainment of moisture at small distances from a bubbling surface[C]//Soviet Physics Doklady. 1974, 19: 338.

[11]Petukhov V I, Kolokol'Tsev V A. Effect of liquid viscosity on droplet entrainment and volumetric air content[J]. Teploenergetika, 1965, 12(9): 30.

[12]Petukhov V I, Kolokol'Tsev V A. Effect of liquid viscosity on droplet entrainment and volumetric air content[J]. Teploenergetika, 1965, 12(9): 30.

气溶胶动力学方程的径向基函数求解方法

王开元 [1,*]

[1]深圳大学物理与光电工程学院，深圳市南山区，518060

*Email: xiaoliebest@163.com

摘要正文：当核电站发生严重事故时，放射性裂变产物有可能释放到周围环境中，给生态环境和人类健康造成巨大影响。气溶胶作为放射性物质的主要载体之一，在辐射防护中充当着十分关键的角色，研究放射性气溶胶的粒径分布以及动力学行为有着重要的意义。气溶胶粒径分布的演变遵循气溶胶通用动力学方程，由于方程的高度非线性，迄今为止，学者们提出了多种数值求解方法，包括分区方法、离散-分区方法、矩方法以及蒙特卡洛方法等。本研究基于径向基函数 (radial basis function)的概念，提出了一种全新的的求解方法，该方法采用对数正态分布函数作为基函数来表示气溶胶粒径分布，然后将控制方程转换为常微分方程组进行数值求解，适用于各种形式的凝并核。为了验证方法的准确性，将径向基函数方法与解析解、分区方法进行对比，结果表明，径向基函数方法能够准确预测多种凝并核的粒径分布演变，对长时间达到的自保持分布和各阶矩的时间演变均能提供可靠的计算结果，并且对于复杂的双峰分布问题，径向基函数方法也能准确预测双峰分布随时间的演变。除了计算精度外，径向基函数方法的计算时间通常为秒级，因此兼具计算速度和精度，具有较大的应用潜力。

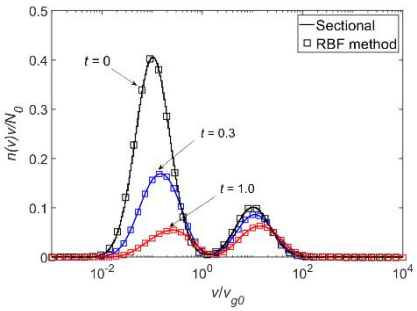


Fig. 1 Time evolution of an initial bimodal distribution predicted using the RBF and the sectional methods for Brownian coagulation under the continuum regime.

关键词：径向基函数；凝并；气溶胶动力学；粒径分布

参考文献

[1] K. Wang, R. Hu, Y. Xiong, F. Xie and S. Yu Radial basis function method for predicting the evolution of aerosol size distributions for coagulation problems. Atmosphere 2022, 13: 1895.

刘哲、中国辐射防护研究院、不是学生、1784241259@qq.com

浮动式反应堆事故喷淋控制措施下的气溶胶输运模拟

刘哲[1]，杨亚鹏[1]，王宁[1]，李国强[1]

([1]中国辐射防护研究院，山西 太原 030000；)

1784241259@qq.com

摘要正文：采用计算流体力学方法对浮式反应堆发生大型断裂事故后气溶胶的喷雾去除进行了三维精确模拟。采用Euler Euler Lagrange方法对气固液体进行模拟，并开展了网格独立性工作，验证了网格模型的可靠性。所采用的物理模型考虑了液滴对气溶胶颗粒的惯性碰撞、拦截和扩散效应。仿真结果可以准确提供舱内流场和液滴运动路径分布。同时，比较了不同机理对气溶胶的去除效果，以及单液滴和液滴群对气溶胶的去除效果。

模拟结果表明：（1）在模拟过程中，当粒径为1μm时，气溶胶颗粒的St（Stokes）数近似保持在0.3（小于1），表明气溶胶具有良好的流体跟随性能，满足气溶胶颗粒是气体成分之一的假设。（2）在反应器隔室内喷洒将隔室分为直喷区A区和夹带区B。A区喷洒的液滴会直接去除气溶胶颗粒，而夹带区B区会在舱内形成气流逆时针旋转，将空气中的放射性从舱室上部带入液滴群，实现去除;（3）气溶胶浓度衰减呈指数趋势，在喷雾去除气溶胶的机理中，惯性俘获占比最大。单个液滴的惯性捕获效率直接受液滴与气溶胶之间的相对气流速度的影响。对于扩散捕获效应，无量纲 Sc 数与 Reimp 数之间存在反比关系，其中雷诺数与气体速度直接相关。在较高的速度下，Reimp 变大，导致单个液滴的惯性捕获效率与扩散捕获效率的分布相反。截留捕获效率仅与气溶胶直径与液滴直径之比有关。（4）液滴组整体捕获效率的三维分布与液滴组的液滴密度呈正相关，影响远大于单个液滴捕获效率。因此，在喷嘴位置附近，整体捕获效率最高。

关键词：船用堆破口事故；计算流体力学；喷淋；气溶胶输运

参考文献

[1] 林晓玲, 牛文亮, 陈迎锋. 应急排风对缓解核事故辐射后果的试验研究 [J]. 核动力工程, 2013, 34(3): 3.

[3] 林晓玲, 孙培铨, 张贵文, 等. 核舰船核事故舱室辐射后果评价研究 [J]. 辐射防护, 2002, 02): 18-23.

[4] 王伟, 陈力生, 张帆, 等. 船用堆大破口失水事故放射性后果分析 [J]. 原子能科学技术, 2015, 49(4): 6.

[5] 万永鑫. 安全壳内气体与气溶胶输运模型开发与分析 [J]. 科学技术创新, 2022, 14): 4.

[6] 王珂, 宋英韵, 张泽寰, 等. 放射性气溶胶的扩散迁移规律与控制措施的模拟 [J]. 中国科技论文, 2017, 12(5): 581-8.

[7] 周爱民, 余涛, 沈旭东. 船舶舱室污染物传播研究进展 [J]. 舰船科学技术, 2014, 1): 10-5.

[8] 谭冰, 唐耀阳, 吴荣俊, 等. 核动力船舶主控室气载放射性浓度场分析 [J]. 舰船科学技术, 2015, 6): 4.

[9] 赵芳, 邹树梁, 徐守龙, 等. 船用反应堆大破口失水事故封闭环境核素扩散研究 [J]. 核动力工程, 2022, 43(2): 5.

[10] 谭美, 郭健, 陈刚, 等. 海洋核动力平台大破口事故下安全壳压力控制与影响 [J]. 船舶工程, 2019, 41(11): 5.

Simulation of Aerosol Transport under Spray Control Measures for Floating Reactor Accidents

LIU Zhe[1], YANG Ya-Peng[1], WANG Ning[1], LI Guo-Qiang[1]
(1 China Institute for radiation protection, Shanxi, Taiyuan 030000;)
1784241259@qq.com

Abstract: A three-dimensional accurate simulation was conducted using computational fluid dynamics methods for the spray removal of aerosols after a large break accident in a floating reactor. The Euler Euler Lagrange method was used to simulate gas solid liquid, and grid independence work was carried out to verify the reliability of the grid model. The physical model adopted takes into account the inertial collision, interception, and diffusion effects of droplets on aerosol particles. The simulation results can accurately provide the flow field and droplet motion path distribution in the cabin. At the same time, the removal effects of different mechanisms on aerosols, as well as the removal effects of single droplets and droplet groups on aerosols, are compared. The simulation results indicate that: (1) For a particle size of 1 μ m during the simulation process, the St (Stokes) number of aerosol particles is approximately maintained at 0.3 (less than 1), indicating good fluid following properties of the aerosol, satisfying the assumption that aerosol particles are one of the gas components. (2) The spraying in the reactor compartment will divide the compartment into direct spraying area A and entrainment area B. The droplets sprayed in area A will directly remove aerosol particles, while entrainment area B will form a counterclockwise rotation of the airflow in the compartment, carrying airborne radioactivity from the upper part of the compartment into the droplet group to achieve removal; (3) The concentration attenuation trend of aerosols is exponential, and in the mechanism of spray removal of aerosols, inertial capture accounts for the largest proportion. The inertial capture efficiency of a single droplet is directly affected by the relative airflow velocity between the droplet and aerosol. For the diffusion capture effect, there is an inverse relationship between the dimensionless Sc number and the Reimp number, where the Reynolds number is directly related to the gas velocity. At higher velocities, the Reimp becomes larger, resulting in the opposite distribution of inertial capture efficiency for a single droplet and that of diffusion capture. The interception capture efficiency is only related to the ratio of aerosol diameter to droplet diameter. (4) The three- dimensional distribution of the overall capture efficiency of a droplet group is positively correlated with the droplet density of the droplet group, and the impact is much greater than that of a single droplet capture efficiency. Therefore, the overall capture efficiency is highest near the spray nozzle position.

Keywords: LOCA of marine reactor; computational fluid dynamics; spray; aerosol transport

References

[1] LIN X L, NIU W L, CHEN Y F. Experimental study on emergency exhausting for alleviating radiation consequences of nuclear accident[J]. Nuclear Power Engineering, 2013, 34(3): 3. (in Chinese)

[2] LIN X L, YANG Y X. Theoretical Calculation of Emergency Exhaust to Mitigate Radiation Consequences of Nuclear Accident[J]. Nuclear Power Engineering, 2013, 2): 3. (in Chinese)

[3] LIN X L, SUN P Q, ZHANG G W, et al. Research on Radiation Consequences Evaluation of Nuclear Accident Compartments of Nuclear Ships[J]. Radiation Protection, 2002, 02): 18-23. (in Chinese)

[4] WANG W, CHEN L S, ZHANG F, et al. Radioactive Consequence Analysis on Large - break LOCA of Marine Reactor[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2015, 49(4): 6. (in Chinese)

[5] WAN Y X. Development and Analysis of Gas and Aerosol Transport Models in Containment Vessels[J]. Scientific and Technological innovation, 2022, 14): 4. (in Chinese)

[6] WANG K , SONG Y Y, ZHANG Z H, et al. Simulation of radioactive aerosol diffusion, migration and control measures[J]. China Science Paper, 2017, 12(5): 581-8. (in Chinese)

[7] ZHOU A M, YU T, SHEN X D. Research advances on air contaminant transport in ship cabin[J]. Ship Science and Technology, 2014, 1): 10-5. (in Chinese)
[8] TAN B, TANG Y Y, WU R J, et al. Analysis of airborne radionuclide concentration distribution in nuclear ship master control room[J]. Ship Science and Technology, 2015, 6): 4. (in Chinese)
[9] ZHAO F, ZOU S L, XU S L, et al. Study on Nuclide diffusion of nuclides in closed environment of marine reactor large break water loss of coolant accident[J]. Nuclear Power Engineering, 2022, 43(2): 5. (in Chinese)
[10] TAN M, GUO J, CHEN G, et al. Containment Pressure Control and Influence under Reaching of Floating Nuclear Power Plant[J]. Ship Engineering, 2019, 41(11): 5. (in Chinese)
报告人：常博康
工作单位：东南大学能源与环境学院核科学与技术系
学生
联系邮箱：changbokangcasper@163.com；101012636@seu.edu.cn

超临界CO_2在不同肋片结构直管中颗粒物沉积特性

常博康[1,2,3]，周涛[1,2,3*]，刘晓芳[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：超临界二氧化碳具有黏性小、流动性强、化学稳定性良好等优点，超临界二氧化碳反应堆是目前国内外的研究热点，其在提高发电效率，实现反应堆小型化等多个方面具有良好的发展前景。但是反应堆在运行过程中，管路内会产生细颗粒物杂质，超临界CO_2夹带着颗粒物在回路中流动并发生沉积现象，颗粒物的沉积现象会导致管路的传热恶化和管路腐蚀，造成重大安全隐患。为了研究以超临界二氧化碳为工质的回路管道中肋片结构如肋高、肋间距、肋片的顺排和叉排对于颗粒物沉积特性的影响，基于Fluent软件，搭建了不同肋片结构的带肋直管的几何模型；采用AKN k-ε模型，分析超临界二氧化碳的流动特性；采用离散型模型，模拟管道中颗粒物的沉积特性；并以沉积率为指标，衡量不同肋结构对于颗粒物沉积特性的影响。研究结果表明：肋高越高、肋间距越小、肋片叉排的肋管在壁面附近具有较高的湍流动能，因此颗粒物更易在壁面上沉积。研究结果可为超临界CO_2反应堆管路设计提供参考，对于确保反应堆的安全运行具有重要意义。

关键词：超临界CO_2；颗粒物；肋片结构；沉积率

参考文献

[1] 毛赏,周涛,卢怀畅,等.超临界CO_2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] Wang J Y, Guan Z Q, Gurgenci H, et al. Computational investigations of heat transfer to supercritical CO_2 in a large horizontal tube [J]. Energy Conversion and Management, 2018, 157: 536-548.

[6] Wang J Y, Guan Z Q, Gurgenci H, et al. Numerical study on cooling heat transfer of turbulent supercritical CO_2 in large horizontal tubes [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 126:1002-1019.

[7] 王磊,曹雄金,罗凯,等.不同流动方向上微型加热管内超临界 CO_2 的换热特性[J]. 化工学报,2023,74(11):4535-4547.

报告人：顿世雷

工作单位：东南大学能源与环境学院核科学与技术系学生

联系邮箱：2531473543@qq.com；101012636@seu.edu.cn

基于相场-流场耦合的相分离组织演变模拟技术

顿世雷[1,2,3]，周涛[1,2,3*]，刘晓芳[1,2,3]，白宗艳[1,2,3]，何书宇[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，中国

2.核热工安全与标准化研究团队，南京，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，中国

*Email: 101012636@seu.edu.cn；

摘要：核能可持续发展的前提是核安全，制约其发展的核心因素 X 是对反应堆严重事故的应对程度。正因如此，反应堆严重事故的预防缓解措施已成为核电研发中最重要的攻关内容。在反应堆堆芯大面积燃料包壳失效，威胁或破坏压力容器或安全壳的完整性，并引发放射性物质泄漏的背景下，基于多元系堆芯熔融物热力学模型，耦合流动传热方程，构建可描述相分离、两液相间自然对流、马兰格尼对流、非等温的 Cahn-Hilliard 相场-流场-温度场耦合计算模型和本构方程，假设堆芯整体熔化迁移至下封头、堆芯燃料组件与堆芯支撑板分步熔化迁移至下封头等多种不同的事故情景，研究堆芯熔融物相分离和分层演化过程，以及其间的气溶胶迁移沉积特性。重点分析分层演化的时间尺度，以及演化过程中热聚焦的强弱和持续时间，通过软件二次开发获得一套适用于宏观尺寸的相场-流场耦合分析工具。

关键词：堆芯熔融物滞留；堆芯熔融；气溶胶；反应堆严重事故

蒸汽发生器二次侧复杂管束对气溶胶惯性碰撞机理研究

吕强[1]，佟立丽[1,*]，曹学武[1]

[1] 上海交通大学机械与动力工程学院，上海市东川路 800 号，200240

*Email: lltong@sjtu.edu.cn

摘要正文：

蒸汽发生器传热管破裂事故（Steam Generator Tube Rupture, SGTR）可能导致放射性气溶胶直接释放到环境中[1]。由于蒸汽发生器二次侧存在传热管束及支撑板等复杂结构件，气溶胶可通过惯性碰撞等机制滞留在其表面，以减少放射性的释放。现有的事故分析程序对于二次侧气溶胶滞留现象考虑较少，例如，MAAP5分析程序假设在SG二次侧干燥时气溶胶去除净化因子DF（Decontamination Factor, DF）为1，认为SG二次侧对气溶胶没有滞留效果[2]。而ARTIST等实验研究发现在蒸汽发生器二次侧干式条件下，当管束以正方形排布、支撑板为四眼梅花孔时，气溶胶去除效率可达50%以上[3]。不同蒸汽发生器二次侧的复杂结构设计不同，如管束分为正方形排布、三角形排布，支撑板分为四眼梅花孔、栅格状等类型，其几何特征的不同可能导致气溶胶去除效果存在较大差异。为了研究SGTR时二次侧的复杂结构对气溶胶的惯性碰撞去除机理，本文基于蒸汽发生器二次侧传热管束为三角形排布、支撑板为栅格状的几何特征，开展了在不凝性气体注入射流条件下的SG二次侧可视化流场测量及气溶胶去除实验研究，获得二次侧复杂管束下的气体流场及开发气溶胶与管束外壁面惯性碰撞去除模型，为事故后果分析提供支持。

关键词：蒸汽发生器；传热管破裂；二次侧；气溶胶；惯性碰撞

参考文献

[1] Güntay S, Birchley J, Suckow D, et al. Aerosol Trapping in Steam Generator (ARTIST): an investigation of aerosol and iodine behaviour in the secondary side of a steam generator[R]. 2000. Switzerland. Paul Scherrer Institute. INIS-CH—022.

[2] Ahn K I, Lee K, Lee S, et al. Estimation of fission product source terms for the SGTR accident of a reference PWR plant using MELCOR and MAAP5[J]. Nuclear Engineering and Design, 2021, 371: 110967.

[3] Dehbi A, Suckow D, Lind T, et al. Key findings from the artist project on aerosol retention in a dry steam generator[J]. Nuclear Engineering and Technology, 2016, 48(4): 870-880.

管道内非球形石墨粉尘颗粒沉积行为试验研究

宋煜[1,*]，邱志欣[1]，吕明华[1]，黄淑龙[1]

[1]中国辐射防护研究院，山西太原，030006

*Email: cirp_syu@yeah.net

摘要正文：高温气冷堆燃料球产生的石墨粉尘颗粒在一回路管道内的沉积会影响堆芯的换热效率，从而影响反应堆的安全稳定运行。同时，若发生事故，则会导致石墨粉尘颗粒泄露造成放射性危害，因此需要对石墨粉尘颗粒在一回路管道内的输运和沉积规律进行研究。本文针对非球形石墨粉尘颗粒在不同形式的管道内的沉积行为进行了试验研究，包括直管段、向上弯头段及水平弯头段。首先，通过微观电镜获取了石墨粉尘颗粒的球形度、粒径、长宽比等微观统计数据，分析了石墨粉尘颗粒的形貌特征。其次，分析了不同的流速（1.5m/s、3m/s、6m/s、9m/s、12m/s）对石墨粉尘颗粒的沉积特性的影响：在直管段，低流速下的石墨粉尘颗粒沉积量较高，随着流速增加沉积量显著减少，表明高流速有助于减少粉尘沉积。向上弯头段与水平弯头段由于旋涡和低速区的存在，导致其石墨粉尘颗粒的沉积量在低流速时显著增加；同时又由于重力的影响，导致向上弯头段沉积量略高于水平弯头段。最后，分析了不同的温度(低温：20℃、高温：300℃)对石墨粉尘颗粒的沉积特性的影响；总体来说，在低温条件下粉尘沉积量比高温条件下要高，主要是由于低温下流体粘度增加导致粉尘惯性力减小，而高温下流体粘度会降低。综上所述，本文主要揭示了非球形石墨粉尘在不同形式管道中的沉积规律，未来研究可进一步优化实验条件以获取更全面的数据支持。

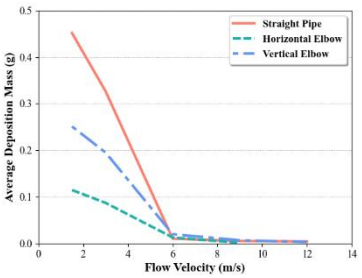


Fig. 1 Average deposition mass at 20°C

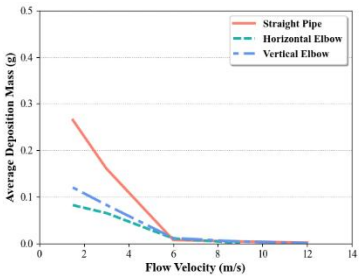


Fig. 2 Average deposition mass at 300°C

关键词：非球形颗粒；石墨粉尘颗粒；管道沉积；高温气冷堆

参考文献

[1] 孙琦, 王晓钟, 王竞弘, 等.高温气冷堆不规则颗粒气动曳力研究[J]. 原子能科学技术, 2022(S01):056.

[2] 章钰灵, 岳煜斐, 赵小虎, 等.颗粒阻力系数的风洞实验模拟研究[J]. 干旱区地理, 2016(5):7.

[3] 贺征, 刘丛林, 顾璇, 等. 形状及旋转角度对非球铝颗粒受力的影响分析[J]. 固体火箭技术, 2013, 36(1):45-49.

[4] Sun Q, Peng W, Yu S, et al. A review of HTGR graphite dust transport research[J]. Nuclear Engineering and Design, 2020, 360:110477.

[5] Sun Q, Zhao G, Peng W, et al. Numerical predictions of the drag coefficients of irregular particles in an HTGR[J]. Annals of Nuclear Energy, 2018, 115(MAY):195-208.

[6] Dioguardi F, Mele D. A new shape dependent drag correlation formula for non-spherical rough particles. Experiments and results[J]. Powder Technology, 2015, 277:222-230.

报告人：于建群

工作单位：哈尔滨工程大学

是否为学生：是

联系邮箱：2017151225@hrbeu.edu.cn

沸腾液池中液滴夹带及气溶胶释放特性

于建群[1]，谷海峰[1,*]，虞想[1]，周艳民[1]，鄂鑫诺[1]，程林海[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: guhaifeng@hrbeu.edu.cn

摘要正文：第三代核电发生破口或堆芯熔毁等严重事故时，在非能动安全设施与自然沉积作用下，泄露至安全壳内的放射性气溶胶最终会沉积到压水堆的堆坑水池[1]。裂变产物的衰变热或卸压等特定场景下液池沸腾产生气泡，气泡破碎致使含放射性气溶胶的液滴被蒸气夹带至气相空间，可能导致最终向环境释放的源项增加。同理地，当蒸气发生器（SGTR）传热管破裂时[2]，含放射性气溶胶的一回路冷却剂可能在破口处闪蒸进入蒸汽发生器二次侧并发生夹带现象。类似地，在过滤排放系统[3]中（FCVS），气体排入湿式过滤液池过程也伴随着夹带现象。那么除了受损的反应堆堆芯可直接产生放射性源项之外，还可能出现气溶胶材料的二次放射性源项。因此开展液滴夹带及气溶胶释放特性行为研究，对澄清严重事故最终的释放源项具有重要意义。国内外有关液滴夹带的相关研究很少，因此有必要对这一现象及其后果进行深入分析。

本文自主设计搭建了实验装置平台，开展了沸腾条件下液滴夹带与气溶胶释放特性实验研究，以碘化钾作为实验用可溶性气溶胶，主要开展了不同液池浓度、不同热工条件以及不同表观气速条件下的沸腾液池中液滴夹带与气溶胶释放特性实验，并对所获得实验数据进行了处理与分析。如图1所示，液池中不同碘离子浓度条件下液滴夹带因子的变化趋势，从图1中可以看出，液池碘浓度对夹带因子没有明显影响。实验过程中还针对不同压力热工条件下的夹带特性展开研究，如图2所示，不同压力条件下液滴夹带因子的变化趋势，在试验压力范围内，碘的夹带因子与压力没有明显关系。参考半经验模型，初步进行不同压力对夹带因子的敏感性分析。可发现在0.4MPa-1MPa压力范围内，碘的夹带因子对于相应影响参数的敏感性不高。从图3可以看出，在控制表观气速单一变量条件下，夹带因子随着表观速度的增大而增大。这是因为随着气相表观速度的增大，气泡的产生速率增加且搅浑流动增强。因此，气空间夹带出来的液滴数量就增加，从而致使夹带因子变大，进而致使夹带至气空间的气溶胶释放量增加。

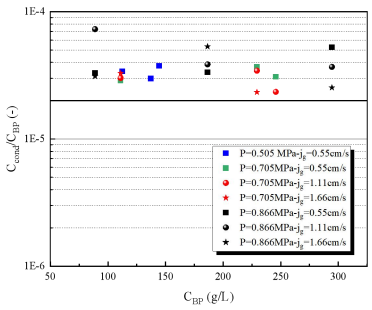


Fig. 1 Effect of the tracer material concentration in the boiling pool on the entrainment factor

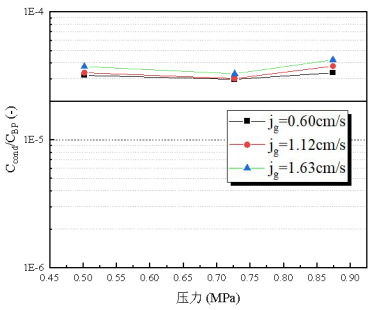


Fig. 2 Effect of pressure on the entrainment factor

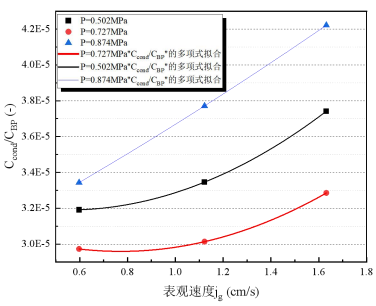


Fig. 3 Effect of superficial velocity on the entrainment factor

关键词：严重事故；液滴夹带；沸腾液池；可溶性气溶胶

参考文献

[1] M. K. Koch, A. Voßnacke, J. Starflinger, W. Schütz, and H. Unger, “Radionuclide re-entrainment at bubbling water pool surfaces,” J. Aerosol Sci., vol. 31, no. 9, pp. 1015–1028, 2000, doi: 10.1016/S0021-8502(00)00025-2.

[2] A. Dehbi, D. Suckow, T. Lind, S. Guentay, S. Danner, and R. Mukin, “Key Findings from the Artist Project on Aerosol Retention in a Dry Steam Generator,” Nucl. Eng. Technol., vol. 48, no. 4, pp. 870–880, 2016, doi: 10.1016/j.net.2016.06.001.

[3] 周夏峰, 谷海峰,李富,“安全壳过滤排放系统实验用气溶胶的确定及相关参数的选取,” 核动力工程, vol. 35, no. 5, pp. 124–127, 2014.

平板气膜冷却对石墨粉尘颗粒运动行为的影响

王晓钟，张梓璇，孙琦，彭威*

清华大学 核能与新能源技术研究院，北京 100084；

*Email: pengwei@tsinghua.edu.cn

摘要：氦气透平直接循环有利于提高高温堆发电系统的发电效率，是未来高温堆发展的重要方向。高温堆氦气透平由于叶片温度较高，往往需要再壁面上采取冷却措施。这些冷却措施会对源自堆芯的放射性石墨粉尘颗粒的运动行为产生一定的影响。本文基于数值模拟的方法，将DPM方法与雷诺平均方法相结合，并建立颗粒与壁面相互作用的临界速度模型。在平板模型上研究了圆柱孔、向前扩散孔、左右扩散孔以及槽孔对与氦气透平冷却效果和石墨粉尘颗粒行为的影响。其结果表明：不同的孔形具有不同的气膜冷却效率，并且对气膜的覆盖面积有较为显著的影响。随着吹风比的增加，圆柱孔和向前扩展孔形的沉积率在不断增加，左右扩展孔形的颗粒沉积率反而在不断下降。槽孔由于槽孔深度的不同，沉积率呈现出多种趋势。总体而言，小颗粒由于惯性较小，更容易受到气膜的影响，其沉积率主要受到碰撞率的限制。而大颗粒的惯性较大，受气膜的影响较小，其沉积率主要受到粘附率的显著。本文还研究了颗粒对透平叶片的碰撞侵蚀，其结果表明颗粒在左右扩展孔的情况下，其侵蚀程度有限。本文的研究为氦气透平在高温堆直接循环发电系统中的设计和应用提供了一定参考。

关键词：高温气冷堆；氦气透平；颗粒；沉积；气膜冷却；

The effects of plate film cooling on the motion behavior of graphite dust particles

Xiaozhong Wang, Zixuan Zhang, Qi Sun Wei Peng*

Institute of Nuclear and New Energy Technology, Tsinghua University, 100084, Beijing

* pengwei@tsinghua.edu.cn

Helium turbine direct cycle is beneficial for improving the power generation efficiency of high-temperature gas-cooled reactor power systems and is an important direction for the future development of high-temperature gas-cooled reactor. Due to the high temperature of helium turbines, cooling measures are often required on the wall surface. These cooling measures will have some effects on the motion behaviors of radioactive graphite dust particles originating from the reactor core. Based on the numerical simulation method, this paper combines the DPM method with the Reynolds-averaged method and establishes a critical velocity model for the interaction between particles and the wall surface. On the plate model, the effects of cylindrical holes, forward expansion holes, left-right expansion holes, and slot holes on the cooling effect of helium turbines and the behavior of graphite dust particles were studied. The results show that different hole shapes have different film cooling effectiveness and have a significant influence on the coverage area of the cooling film area. With the increase of the blowing ratio, the deposition rates of cylindrical holes and forward expansion hole are continuously increasing, while the particle deposition rate of the left-right expansion hole is continuously decreasing. Due to the different depths of the slot holes, the deposition rates of slot holes show multiple trends. Overall, small particles, due to their smaller inertia, are more easily affected by the cooling film, and the deposition rate is mainly limited by the collision rate. Large particles, with greater inertia, are less affected by the cooling film, and their deposition rate is mainly significantly affected by the adhesion rate. This paper also studied the collision erosion of particles on turbine blades, and the results show that the degree of erosion is limited under the condition of left-right expansion holes. The research in this paper provides some reference for the design and application of helium turbines in the direct cycle power generation system of high-temperature reactors.

Keywords: high-temperature gas-cooled reactor (HTGR); helium turbine; particle; deposition; film cooling;

References

[1] KUNITOMI K, SHIOZAWA S. Safety design [J]. Nuclear Engineering and Design, 2004, 233(1): 45-58.

[2] LABAR M P. The gas turbine–modular helium reactor: a promising option for near term deployment [J]. Intl Cong on Advanced Nuclear Power Plants, 2002.

[3] GOLOVKO V F, DMITRIEVA I V, KODOCHIGOV N G, et al. Features of adapting gas turbine cycle and heat exchangers for HTGRs [R]. International Atomic Energy Agency (IAEA), 2001.

[4] WOOD N. The mass transfer of particles and acid vapor to cooled surfaces [J]. J the Institute of Energy, 1981, 76: 76-93.

[5] PAPAVERGOS P, HEDLEY A. Particle deposition behaviour from turbulent flows [J]. Chemical engineering research & design, 1984, 62(5): 275-95.

[6] CHEN Z, YU S. Development of modeling deposition of graphite particles in high temperature gas-cooled reactor [J]. Chin J Process Eng, 2010, 10(1): 12-215.

[7] PENG W, ZHEN Y-N, YANG X-Y, YE P. Analysis of graphite dust deposition in hot gas duct of HTGR [J]. Atomic Energy Science and Technology, 2013, 47(5): 816.

[8] SUN Q, CHEN T, PENG W, et al. A numerical study of particle deposition in HTGR steam generators [J]. Nuclear Engineering and Design, 2018, 332: 70-8.

[9] CAI Y, TAY K, ZHENG Z, et al. Modeling of ash formation and deposition processes in coal and biomass fired boilers: A comprehensive review [J]. Applied Energy, 2018, 230: 1447-544.

[10] SMITH C, BARKER B, CLUM C, BONS J. Deposition in a turbine cascade with combusting flow; proceedings of the

Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air, F, 2010 [C].
[11] BONILLA C, WEBB J, CLUM C, et al. The effect of particle size and film cooling on nozzle guide vane deposition [J]. 2012.
[12] LAWSON S A, THOLE K A. Effects of Simulated Particle Deposition on Film Cooling [J]. Journal of Turbomachinery, 2010, 133(2).
[13] LAWSON S A, THOLE K A. Simulations of Multiphase Particle Deposition on Endwall Film-Cooling [J]. Journal of Turbomachinery, 2011, 134(1).
[14] SINHA A K, BOGARD D G, CRAWFORD M E. Film-Cooling Effectiveness Downstream of a Single Row of Holes With Variable Density Ratio [J]. Journal of Turbomachinery, 1991, 113(3): 442-9.
[15] EL-BATSH H, HASELBACHER H. Numerical investigation of the effect of ash particle deposition on the flow field through turbine cascades [M]. 2002.

气溶胶再悬浮研究综述

孙晓晖*，王辉
[1] 中国核电工程有限公司，北京市海淀区首体南路 9 号，100037
*Email: sunxha@cnpe.cc

摘要正文：气溶胶再悬浮现象在高速流体条件下，或者瞬时的气流波动过程中表现的尤为明显，如在核电领域，两端存在较大压差的安全壳缝隙中，或者安全壳内氢气爆炸过程引起的气体剧烈波动过程中。这些现象是核电厂事故工况下源项评估过程中的不保守项，在近些年的源项评估过程中受到了广泛的关注。

本文对气溶胶再悬浮现象从实验和理论研究两个方面进行了广泛的调研与综述。具体来看，实验方面调研的方向包括气溶胶材料的选取、再悬浮试验件的制备、实验场景及实验条件假设、再悬浮过程的测量方法、实验结论等方面；理论研究涉及的方面有再悬浮过程中粒子与流体、粒子与沉积表面、粒子和粒子之间的相互作用，气溶胶再悬浮过程分析模型，单层及多层沉积模拟方法等。

经分析可以发现，1）高倍显微镜结合气溶胶粒径谱仪等仪器测量是目前气溶胶再悬浮实验主流的测量方法；2）实验主要针对几何尺度较大的实验件进行，并未针对微小空间内的再悬浮进行实验；3）多层沉积实验的不确定性控制仍是一个难题；4）理论研究遵循经验模型-机理模型-机理模型与CFD程序耦合求解的过程；5）多层沉积模型是接下来的研究重点；6）沉积-再悬浮-沉积过程的模拟是接下来的研究重点。

关键词：气溶胶；再悬浮；源项

基于NUREG-1465分析方法的海上小型堆事故源项研究

摘要正文：反应堆事故源项是核电厂反射性后果评价的重要设计输入，可用于安全分析，环境影响评价，设备鉴定要求，厂址安全评价，主控室和应急设施可居留性评价等，是核电安全审评中重点关注的对象。针对严重事故设备鉴定、LOCA 事故源项等分析需求，业内普遍采用美国核管会 NUREG-1465 中约定的裂变产物释放份额和释放持续时间开展分析。NUREG-1465 由美国核管会于 1995 年发布，选取部分美国在运的二代轻水反应堆，分析不同电厂的代表性事故序列，提出了事故情况下不同释放阶段的源项释放持续时间和堆芯释放份额。随着核电小型化方案的提出和非能动系统的引入，源项的释放特征将随着电厂的设计特征改变而改变，有必要针对基于大型二代压水堆的 NUREG-1465 开展适用性分析评价。本研究首先综合评估了 NUREG-1465 及相关文献所使用的分析方法；在此基础上，针对小型堆开展典型严重事故序列分析，获得小型堆的裂变产物源项释放特征，与 NUREG-1465 进行对比，评价其适用性；然后开展不确定性分析，提出适用于小型堆的不同阶段的裂变产物释放份额和持续时间，为小型堆的事故源项分析提供参考。

液态铅铋合金内氧化铅颗粒产生与沉积研究

信亭宇[1]，佟立丽[1,*]，曹学武[1]

[1]上海交通大学机械与动力工程学院，上海市东川路 800 号，200240

*Email: lltong@sjtu.edu.cn

摘要正文：铅铋共晶合金（Lead-bismuth eutectic, LBE）具有优良的物理性能、化学性能及中子学性能，是未来第四代核能系统中铅冷快堆（Lead-cooled Fast Reactor, LFR）和加速器驱动次临界核能系统（Accelerator driven sub-critical reactor, ADS）的冷却剂的重要候选材料[1]。使用LBE作为冷却剂需要考虑氧气进入系统导致冷却剂氧化，从而堵塞狭窄通道危害安全运行[2-3]。因此，有必要对氧化铅（PbO）颗粒在LBE中的产生与沉积的机理与动力学进行研究。建立了模拟PbO颗粒产生与沉积的池式实验装置，可以通过对氧饱和状态LBE的降温模拟氧气引入造成的PbO颗粒的大量产生与沉积；装置内设有不锈钢沉积样品，用以模拟回路中的等温与非等温的沉积壁面；使用电位氧传感器监测实验过程中LBE中的氧电位，并通过能斯特公式与质量守恒获得LBE内PbO颗粒的产生与沉积速率。在LBE温度400℃，LBE与非等温沉积壁面温差20℃条件下进行实验，基于经典成核理论与传热传质方程，对LBE中PbO颗粒的产生和其在壁面上的沉积过程进行定量描述，提出了相关动力学模型，模型对PbO颗粒产生和沉积速率预测与实验结果一致。

关键词：铅铋共晶合金；成核生长；沉积；氧化铅；

参考文献

[1] Gromov B F, Belomitcev Y S, Yefimov E I, et al. Use of lead-bismuth coolant in nuclear reactors and accelerator-driven systems[J]. Nuclear Engineering and Design, 1997, 173 (1-3): 207-217.

[2] Zrodnikov A V, Chitaykin V I, Gromov B F, et al. Use of Russian Technology of ship reactors with lead-bismuth coolant in nuclear power[R]. 2000.

[3] Gladinez K , Rosseel K ,Lim J , et al. Determination of the lead oxide fouling mechanisms in lead bismuth eutectic coolant[J].Nuclear Engineering and Design, 2020, 357(C): 110382-110382.

报告人：刘晓芳

工作单位：东南大学能源与环境学院核科学与技术系

学生

联系邮箱：2926492913@qq.com；101012636@seu.edu.cn

大破口事故下先进压水堆安全壳内气溶胶迁移行为研究

刘晓芳[1,2,3]，周涛[1,2,3*]，刘鹏[1,2,3]，顿世雷[1,2,3]，常博康[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，中国

2.核热工安全与标准化研究团队，南京，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，中国

*Email: 101012636@seu.edu.cn；

摘要：先进压水堆安全壳大量采用自然循环、重力驱动等非能动特性来执行安全功能，有效地增强了反应堆的安全性和可靠性。大破口事故作为核电站设计基准事故之一，处理不及时将造成堆芯熔毁等严重事故，而且破口处射流携带的气溶胶会迁移到安全壳上部大空间，造成放射性物质泄漏、传热恶化等安全隐患，对先进压水堆的安全造成严重威胁。采用数值计算的方法，对大破口失水事故喷放阶段先进压水堆安全壳内的气溶胶迁移沉积特性进行研究。计算结果表明：水蒸气从破口位置喷出，将由反应堆压力容器隔间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间中释放后将全部扩散至上部大空间，多数沉积在安全壳顶部靠左侧位置，少数沉积在安全壳侧壁面，底部颗粒沉积最少；当颗粒直径增大时，反应堆压力容器隔间出口处的颗粒速度减小，在安全壳上部大空间中的沉积速率减小。研究成果可以为先进压水堆核电站严重事故下的气溶胶预防与脱除奠定相应的理论基础。

关键词：先进压水堆，安全壳，非能动冷却系统，气溶胶，迁移沉积

参考文献

[1]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

[2]于汇宇,谷海峰,孙中宁等.喷淋去除气溶胶的模型及实验研究[J].哈尔滨工程大学学报,2023,44(05):815-822.

[3]ADROGUER B, BERTRAND F, CHATELARD P, et al. Core loss during a severe accident (COLOSS)[J]. Nuclear Engineering and Design, 2005, 235(2): 55–76.

[4]Jishen L ,Bin Z ,Fan M , et al.Improvement and validation of containment spray removal aerosol models based on single droplet collection particle mechanism[J].Journal of Aerosol Science,2023,174.

[5]Hao L , Yq C .A CFD study of particle deposition in three-dimensional heat exchange channel based on an improved deposition model[J] International Journal of Heat and Mass Transfer, 178

[6]B. Zhao，J. Wu，Modeling particle deposition onto rough walls in ventilation duct，Atmos. Environ. 40 (2006) 6918-6927.

[7]张晗, 周涛, 田晓瑞等. 蒸汽传热管破裂事故中颗粒物喷射的数值模拟[J]. 核技术, 2018, (2).

核电厂安全系统对安全壳完好释放类放射性源项影响研究

孙婧[1]，石雪垚[1]，孙晓晖[1]

[1]中国核电工程有限公司，孙婧，

*Email: sunjing@cnpe.cc, shixy@cnpe.cc

摘要正文：

严重事故后放射性源项是二级PSA的重要组成部分，是进行场外后果分析、计算大量放射性释放频率的重要输入条件。IAEA在2024年安全标准《核电厂二级PSA进展和应用》中要求，对于每个放射性释放类应选择代表性序列并充分论证。由于每个核电厂特征不同，严重事故始发事件发生后，事故预防和缓解措施也大不一样，其可能对放射性源项造成很大影响。本文采用一体化事故分析程序MAAP，针对典型中国两环路核电厂完好释放类严重事故后安全系统不同动作工况开展计算分析，给出不同工况下72小时内12组放射性核素随时间的变化曲线并对比分析。计算分析结果表明，完好释放类应采取措施保证压力容器完好，低压安注注入延迟时间、安全壳喷淋的开启及其延迟时间均对放射性释放份额有较大影响，应结合事件概率选择合理的代表序列。

关键词：放射性源项；完好释放类；MAAP；低压安注；安全壳喷淋

参考文献

[1] IAEA. Development and Application of Level 2 Probabilistic Safety Assessment for Nuclear Power Plants, IAEA SAFETY STANDARDS, 03 April 2024.

[2] IAEA. Specific Safety Guide No. SSG-4—Development and Application of Level 2 Probabilistic Safety Assessment for Nuclear Power Plant. Vienna, 2010.

[3] 陈巧艳，杨志义等. 百万千瓦级压水堆核电厂二级PSA源项分析与研究. 核动力工程，2016年4月，37(2)：97-101.

基于背景纹影和激光诱导荧光的气溶胶温度场-速度场同步测量研究

刘碧帆，庄丹玲，王倩，宋煜晨，王德忠，尹俊连*

上海交通大学，上海 200240

*Email: jlyin@sjtu.edu.cn

摘要正文：气溶胶是核反应堆放射性产物的重要载体。正常运行时，一回路设备和管道的表面会向安全壳大气释放热量，形成复杂的温度环境[1]。严重事故工况下，核反应堆内的高温高压冷却剂喷放、安全壳喷淋会导致安全壳大气温度分布变得更为复杂[2]。复杂温度场影响气溶胶的热泳输运、蒸发、冷凝、聚并[3]。目前，已经有许多研究者使用粒子图像测速对气溶胶的输运过程进行研究[4, 5]，然而对于气溶胶的温度场测量罕有报道。目前的温度场-速度场测量方法主要应用于水等单相流体的测量[6, 7]。因此，研究放射性气溶胶输运过程中的温度场测量方法，分析复杂温度分布下放射性气溶胶行为，对核反应堆的安全评估具有重要意义。

本文基于背景纹影测量和激光诱导荧光建立了气溶胶温度场和速度场的同时测量方法。本文建立了一套温度梯度可控的气溶胶可视化装置，气溶胶粒子流经可视化测量段，通过改变其上下表面的水浴温度可以控制测量段内的温度场分布。通过分光镜和滤波片，分别采集背景图像信号和粒子图像信号，经过图像矫正后，由 BOS 算法和 PIV 算法处理得到同一时刻测量段内的温度场和气溶胶运动的速度场。水气溶胶中的 RhB–SR101 染料在激光激发下会发出对温度敏感的荧光信号[8]。对粒子信号进行进一步处理，分离两种荧光信号，经由双色激光诱导荧光方法可以获得气溶胶液滴的温度。通过溶于实验结果表明，该方法可以准确的获得气溶胶粒子运动的速度场和测量域中的温度场，其中速度场的不确定度小于 1%，温度场的不确定度小于 5%。

关键词：气溶胶, 背景纹影，激光诱导荧光，温度场,速度场

参考文献

[1] 李钰, 顾卫国, 王德忠. 考虑聚并及热泳的微米级气溶胶粒子沉积数值模拟研究 [J]. 原子能科学技术, 2019, 53(01): 180-6.

[2] 于汇宇. 安全壳喷淋去除气溶胶特性研究 [D], 2023.

[3] 王竞弘, 彭威, 于溯源. 核反应堆严重事故中气溶胶的吸湿增长研究进展 [J]. 核动力工程, 2022, 43(02): 138-51.

[4] BERENDT A, MIZERACZYK J. Transition of the electrohydrodynamic two-phase flow into the single-phase flow in a needle-to-plate negative corona discharge in the finite-volume chamber [J]. Journal of Electrostatics, 2016, 84(90-6.

[5] 吴思远, 贺金鹏, 顾卫国, et al. 基于风洞实验的丘陵下垫面气溶胶大气扩散特性研究 [J]. 原子能科学技术, 2023, 57(11): 2086-93.

[6] BHARTI O S, SAHA A K, DAS M K, et al. Simultaneous measurement of velocity and temperature fields during natural convection in a water-filled cubical cavity [J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 2018, 99(272-86.

[7] TOKGOZ S, GEISLER R, VAN BOKHOVEN L J A, et al. Temperature and velocity measurements in a fluid layer using background-oriented schlieren and PIV methods [J]. Measurement Science and Technology, 2012, 23(11): 115302.

[8] FUNATANI S, FUJISAWA N, IKEDA H. Simultaneous measurement of temperature and velocity using two-colour LIF combined with PIV with a colour CCD camera and its application to the turbulent buoyant plume [J]. Measurement Science and Technology, 2004, 15(5): 983.

严重事故下气溶胶动力学行为的无量纲分析

王竞弘[1]，孙琦[2]，彭威[2,*]，于溯源[1]

[1]清华大学能源与动力工程系 热科学与动力工程教育部重点实验室，北京，100084

[2]清华大学核能与新能源技术研究院 先进反应堆工程与安全教育部重点实验室，北京，100084

*Email: pengwei@tsinghua.edu.cn

摘要正文：现代先进压水堆发生堆芯熔毁的严重事故时，堆芯内部的核燃料和裂变产物会以放射性固体颗粒物的形式泄漏，并弥散在安全壳空间形成气溶胶。这些气溶胶是放射性产物的重要载体，是影响事故情况下反应堆中放射性产物释放到环境中的关键源项。同时在严重事故进程中，安全壳空间内同时伴随着蒸汽冷凝、壁面降温等过程。在这样的环境下，气溶胶会同时发生多种气溶胶动力学行为，包括对流迁移、布朗扩散、重力沉降、热泳、扩散泳等。严重事故后多种气溶胶动力学机理同时发生，且相互竞争。明确特定严重事故工况下各气溶胶行为的相对显著性，进而确定特定工况下占主导的气溶胶行为机理，对于了解严重事故后气溶胶的时空演化，以及制定严重事故中放射性物质控制与去除策略具有重要意义。为了研究严重事故后气溶胶对流迁移、重力沉降、热泳、扩散泳、布朗凝并等多种行为机理在不同工况下的相对显著性规律，本工作构建了严重事故后气溶胶动力学行为群平衡方程，对群平衡方程进行了无量纲分析，引入Peclet数和Damköhler数两个重要无量纲参数描述各个气溶胶行为之间的相对显著性，得到了在不同温度、压力、粒径及数浓度的等多种工况下无量纲参数的变化规律，对于了解严重事故后特定工况下气溶胶行为的主导机制以及理解严重事故后气溶胶的时空演化规律具有借鉴意义。

关键词：严重事故；气溶胶迁移演化；无量纲分析；Peclet数；Damköhler数

报告人：白宗艳

工作单位：东南大学能源与环境学院核科学与技术系学生

联系邮箱：1690685433@qq.com；101012636@seu.edu.cn

基于多物理场耦合的核反应堆熔融池分层结构动态演化研究

白宗艳[1,2,3]，周涛[1,2,3*]，顿世雷[1,2,3]，刘晓芳[1,2,3]，常博康[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，中国

2.核热工安全与标准化研究团队，南京，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，中国

*Email: 101012636@seu.edu.cn；

摘要：在核反应堆严重事故条件下，熔融池的行为及其分层结构的演化过程是影响反应堆安全的重要因素之一。以“华龙一号”反应堆事故条件下的熔融池为研究对象，研究扩散相变、对流及温度梯度等多物理场耦合效应对熔融池分层结构动态演化的影响。基于 U-Zr-Fe-O 四元系材料体系，构建了扩散相变相场-流场-温度场耦合计算模型，并通过 COMSOL 软件的二次开发进行数值求解，研究不同元素及颗粒扩散系数、界面厚度及表面张力系数等参数对相分离演化过程的影响规律，重点分析多重物理效应下熔融池内部的热-流-物质传递的耦合过程。研究成果将有助于揭示复杂物理场作用下熔融池分层结构的动态演化机制，为核反应堆严重事故条件下熔融池行为的模拟与安全评估提供理论支持和参考。

关键词：堆芯熔融物，扩散相变，耦合模型，颗粒物，核反应堆安全

严重事故下放射性气溶胶衰变荷电与凝并间的相互影响研究

齐志超[1]，王辉[1]，陈巧艳[1,*]

[1]中国核电工程有限公司，北京，100840

*Email: thu2017qzc@163.com

摘要正文：核电厂发生严重事故后，大量放射性裂变产物以气溶胶的形式悬浮在安全壳气空间内。放射性气溶胶粒子在发生衰变和与周围气体分子的作用过程中会积累电荷，从而引起粒子间的静电相互作用，并进一步地影响气溶胶在壳空间内的输运过程和放射性去除过程。

然而，目前主流的气溶胶输运模型通常忽略了放射性荷电的影响，学术界对于忽略放射性荷电对气溶胶行为预测是否有显著影响尚无定论。为了更好地评估事故工况下安全壳内放射性气溶胶的荷电情况及其对粒子间凝并行为产生的影响，本研究建立了一套完整的方法论，并对特定工况下的放射性气溶胶荷电和凝并行为开展研究。

首先，本研究从放射性荷电机理出发，建立了完整的放射性衰变荷电模型，通过求解荷电平衡方程对颗粒电荷分布的演化开展研究，并深入分析了颗粒电荷的演化规律和影响颗粒电荷的因素。

然后，本研究建立了全体系的颗粒间布朗凝并模型，并引入修正因子来考虑电荷对凝并速率的影响。为了进一步描述颗粒荷电和颗粒凝并间的相互作用，建立了以电荷和尺寸为变量的二维群平衡方程，方程的结果即表征了颗粒尺寸-电荷分布的演化。

随后，基于分区方法和矩方法建立二维群平衡方程数值求解模型，模型经过典型实验数据和数值模拟结果验证，能够支持全尺寸、全电荷、全体系下的颗粒荷电-凝并问题的求解。

最后，利用二维数值模型对典型电厂严重事故后放射性气溶胶行为进行预测，结果发现在不同的气溶胶参数下，放射性荷电对颗粒布朗凝并会产生不同的影响。在较为广泛的参数取值范围内，放射性荷电对颗粒布朗凝并有抑制效应，这预示着在仅考虑静止气空间内布朗凝并机制下，忽略气溶胶荷电的假设在预测放射性气溶胶的凝并生长和自然沉积速率等方面是不够保守的。

关键词：放射性气溶胶；衰变荷电；布朗凝并；二维群平衡方程；数值模拟

陈勇征　中广核研究院有限公司　非学生　yongzhengchen1127@163.com

基于换热管束外表面气溶胶沉积实验的严重事故程序验证

陈勇征[1,*]，陈鹏[1]，郭超[1]

[1]中广核研究院有限公司，广东省深圳市福田区上步中路西深圳科技大厦，518000

*Email: yongzhengchen1127@163.com

1．引言

水冷反应堆发生严重事故时，冷却剂从一回路喷放到安全壳内，使得安全壳内的温度和压力迅速升高。同时，大量放射性物质会从破损的燃料棒中释放出来，并以气溶胶颗粒的形式进入到安全壳。国内第三代核电技术 “华龙一号”采用管束式非能动安全壳冷却系统（PCCS）导出事故后的安全壳热量。悬浮在气空间的气溶胶除了固有的重力沉降和布朗扩散沉积之外，水蒸汽在PCCS换热管外壁冷凝时将推动安全壳内的气溶胶向换热管壁面沉积，即热泳-扩散泳沉积，从而加速气溶胶的去除过程。本研究基于小型安全壳模拟体开展了含换热管束外表面泳动和不含泳动的气溶胶沉积实验。为了验证一体化严重事故程序中气溶胶沉积模型在以上场景中的适用性，本研究采用一体化严重事故软件对气溶胶沉积实验进行模拟，分别对重力沉降与布朗沉积、热泳-扩散泳沉积模型进行验证。

2．研究方法

气溶胶沉积实验装置为体积12.5m^{3}的安全壳模拟体，容器内部布置单根或6根换热管用以模拟PCCS换热器。实验采用高温高压蒸汽-空气混合物来模拟安全壳事故环境[1]。为了避免气溶胶在安全壳模拟体的内壁发生热泳-扩散泳沉积，通过壳体壁面加热并保温的方式保证内壁温度略高于环境气体温度。由于气溶胶重力沉降和布朗扩散沉积是固有现象，所开展的各组实验都含有这两种沉积机制。换热管束外表面的热泳-扩散泳机制通过引入气体-管壁温差得以实现，实验过程中通过持续注入高温蒸汽的方式维持安全壳模拟体的气体温度、压力和蒸汽冷凝率恒定。

本研究利用实验数据对一体化严重事故程序的气溶胶沉积模块进行验证，该模块包括了气溶胶重力沉降、布朗沉积、热泳、扩散泳模型。其中重力沉降模型采用Cunningham滑移修正因子的Stokes方程[2]，布朗沉积模型采用经典的布朗沉积公式[3]，热泳沉积模型采用Talbot公式[4]，扩散泳沉积模型采用Schmitt-Waldmann公式[5]。

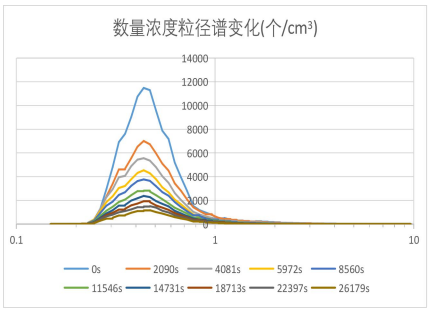
利用一体化严重事故程序对部分实验工况进行模拟验证，验证的实验工况参数如Table-1所示。安全壳模拟体采用单个控制体建模，换热管束采用多个圆柱热构件并给定蒸汽冷凝率的方式进行模拟。工况1为无换热管束的气溶胶重力沉降/布朗沉积实验，工况2~4为引入换热管且冷凝率逐渐增大的热泳-扩散泳实验。不同工况的热工水力参数在整个实验过程中保持恒定，气溶胶停止注入后浓度随着沉积过程逐渐减小。实验测得的气溶胶粒度谱与对数正态分布存在一定差异，计算时仍然采用对数正态分布作为输入，通过计算调试确保计算输入的几何平均直径、质量平均直径、初始总质量与实验中气溶胶沉积初始时刻的测量值一致。

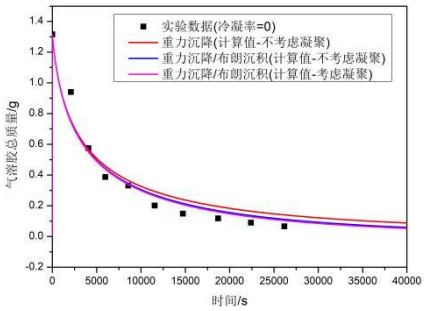
Table-1 Test condition of different tests

序号	气体温度(℃)	压力(MPa)	蒸汽摩尔份额(%)	管束数量(根)	冷凝速率(g/s)	GMD(μm)	MMD	气溶胶初始浓度(个/cm^3)	气溶胶初始质量(g)
1	125.4	0.405	58.0	0	0	0.440	2.06	111218	1.316
2	124.1	0.304	55.8	1	0.92	0.445	2.18	64880	1.366
3	122.8	0.252	61	6	3.69	0.475	0.82	86443	0.658
4	122.0	0.203	70	6	6.30	0.440	1.72	57889	0.685

3．结果与讨论

Fig. 1a) 给出了重力沉降/布朗沉积实验工况1的数量浓度粒径谱随时间的变化，气溶胶几何直径中位值一直维持在0.44μm附近。Fig. 1 b) 是该工况下气溶胶总质量衰减的实验值与计算值对比，程序计算还对比了有/无布朗沉积和有/无气溶胶凝聚的差异。通过对比可以看出布朗沉积和气溶胶凝聚在该工况下的作用较小，这表明气溶胶浓度为10万个/cm^{3}时可以忽略气溶胶凝聚的影响，质量平均直径为2μm左右时可以忽略布朗沉积的影响。三组计算结果与实验数据的偏差都很小，表明该严重事故程序可以准确计算蒸汽-空气混合物中的气溶胶重力沉降/布朗沉积现象。

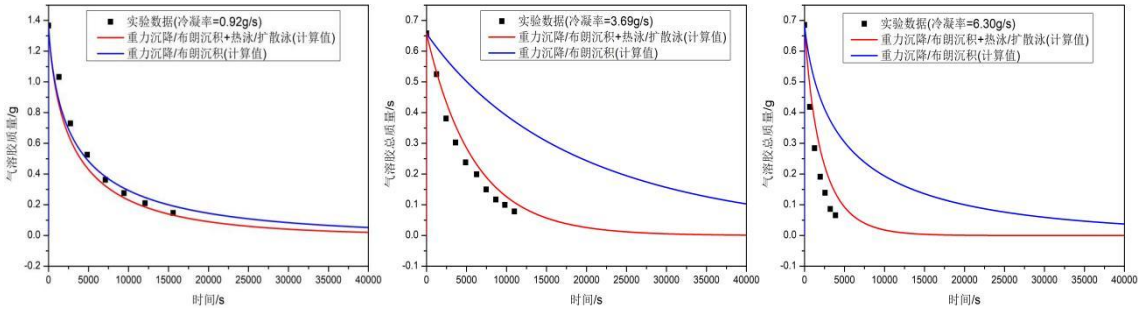




a) measured variation of aerosol size distribution **b) comparison of measured and predicted decay of aerosol mass**

Fig. 1 measured and predicted aerosol parameter in case 1 without PCCS

Fig. 2 给出了含有PCCS换热管束且冷凝率不同（实验工况2~4）时气溶胶质量衰减的实验值与计算值对比，每个工况的程序计算还对比了有/无换热管束外表面热泳/扩散泳沉积机制的差异。通过对比可以发现，随着冷凝率增大，热泳/扩散泳沉积机制的作用逐渐凸显。考虑热管束外表面热泳/扩散泳沉积机制后的计算值与实验数据吻合较好，这表明严重事故程序可以合理预测换热管束外表面的气溶胶热泳/扩散泳沉积。同时也能看到，随着冷凝率增大，计算值与实验值的偏差逐渐增大。这可能是两个原因导致的：高冷凝率下气空间通过异相成核方式析出雾滴从而加剧气溶胶去除；高冷凝率下气体流动加强，从而导致气溶胶在壁面发生惯性沉积。



a) case 2 with condensation rates=0.92 g/s; b) case 3 with condensation rates=3.69 g/s; c) case 4 with condensation rates=6.3 g/s

Fig. 2 comparison of measured and predicted mass decay of aerosol with PCCS

关键词：气溶胶；热泳；扩散泳；重力沉降；气溶胶凝聚

参考文献

[1] Chen, J., Gao, P., Gu, H., Chen, Y., Xinnuo, E. and Yu, J., 2024. Experimental study of the natural deposition of submicron aerosols on the surface of a vertical circular tube with non-condensable gases. Nuclear Engineering and Design, 417, p.112863.

[2] Brenner H. The Stokes resistance of an arbitrary particle. Chemical Engineering Science. 1963, 18(1):1-25.

[3] Fuchs, Nikolaj A., R. E. Daisley, Marina Fuchs, C. N. Davies, and M. E. Straumanis. The mechanics of aerosols.1965, 73-73.

[4] Talbot L, Cheng RK, Schefer RW, Willis DR. Thermophoresis of particles in a heated boundary layer. Journal of Fluid Mechanics. 1980;101(4):737-758.

[5] Waldmann L, Schmitt KH. Thermophoresis and diffusiophoresis of aerosols. Aerosol science. 1966, 148.

基于GOTHIC程序的相变储能原理安全壳热量导出计算分析

孙婧[1]，王辉[1]

[1]中国核电工程有限公司

*Email: sunjing@cnpe.cc, wanghuia@cnpe.cc

摘要正文：

目前广泛应用的非能动安全壳热量导出系统（PCS）是基于自然循环的原理，以外部大气作为最终热阱，使用换热器将壳内热量排出。在我国先进压水堆中，事故后排热功率需求增加，为减轻PCS系统排热负担以及事故早期由于释热太多可能出现的安全壳内峰值温度和压力，提出了基于相变储能原理的新型安全壳热量吸收系统方案。本文采用安全壳专用热工水力程序GOTHIC，为先进压水堆大LOCA设计基准事故后若干相变储能材料安全壳热量导出系统方案开展计算分析，为课题后续实验和数值模拟分析研究提供参考。计算结果表明，基于相变储能材料原理的安全壳热量导出方案，可以有效控制大LOCA事故后安全壳温度和压力，其材料选择、换热器设计有待进一步通过实验和数值模拟分析开展设计和验证。

关键词：GOTHIC；相变储能材料；控温控压；安全壳；核电厂

参考文献

[1] GOTHIC Thermal Hydraulic Analysis Package User Manual Version 8.3(QA), Nov 2018

[2] Jai Oan Cho, Areum Ko, Sung Gil Shin, et. al. Preliminary feasibility study of PCM condenser for PCCS of APR1400[J]. Annals of Nuclear Energy, 152 (2021) 107959. https://doi.org/10.1016/j.anucene.2020.107959

第 18 分会场：微塑料论坛

微纳塑料生成和降解研究

季荣*，苏宇，田莉莉，马旖旎，李慧敏

南京大学环境学院，南京市仙林大道163号，210023 南京

*Email: Ji@nju.edu.cn

摘要正文：环境中微纳塑料的来源及其归趋对微纳塑料环境风险控制非常重要。非传统塑料有机大分子材料的降解是环境微纳塑料生成的一个重要途径，然而相关研究较少；本报告拟介绍两种非传统大分子材料降解过程对环境微塑料的贡献：婴儿硅胶奶嘴水热高湿消毒过程[1]和密胺海绵磨损过程[2]。微纳塑料在环境中会发生降解转化，其可溶解性转化产物的生物可利用性对塑料源碳在环境中的稳定性及碳循环具有重要影响；本报告拟介绍C-14放射性同位素示踪技术在聚苯乙烯微纳塑料降解及降解产物稳定性方面的应用研究[3–4]。

关键词：微纳塑料、同位素示踪、降解转化

参考文献

[1] Su, Y; Hu, X; Tang, HJ; Lu, K; Li, HM; Liu, SJ; Xing, BS; Ji, R. Steam disinfection releases micro(nano)plastics from silicone-rubber baby teats as examined by optical photothermal infrared microspectroscopy. Nature Nanotechnology 2022, 17: 76-85.

[2] Su, Y; Yang, CQ; Wang, SF; Li, HM; Wu, YY; Xing, BS; Ji, R. Mechanochemical formation of poly(melamine-formaldehyde) microplastic fibers during abrasion of cleaning sponges. Environmental Science & Technology 2024, 58: 10764-10775.

[3] Tian, LL; Kolvenbach, B; Corvini, N; Wang, SF; Tavanaie, N; Wang, LH; Ma, YN; Scheu, S; Corvini, PFX; Ji, R. Mineralization of ^{14}C-labelled polystyrene plastics by *Penicillium variabile* after ozonation pre-treatment. New Biotechnology 2017, 38: 101-105.

[4] Tian, LL; Chen, QQ; Jiang, W; Wang, LH; Xie, HX; Kalogerakis, N; Ma, YN; Ji, R. A carbon-14 radiotracer-based study on the photo-transformation of polystyrene nanoplastics in water versus in air. Environmental Science: Nano 2019, 6: 2907-2917.

报告人/墙报展示人简介：

季荣，南京大学环境学院教授、博导，国家有机毒物污染控制与资源化工程技术研究中心副主任。中国海洋大学化学系本科（1988）和硕士（1991），德国康斯坦茨（Konstanz）大学微生物生态学博士（2000），亚深工业大学和马普研究所博士后（2000-2006）；曾任泉州南京大学环保产业研究院院长（2018-2023）。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

热裂解质谱的微塑料检测技术开发与应用

姜杰[1, 2, *]，张洪[1, 2]，姜延晓[1, 2]

[1]哈尔滨工业大学（威海），山东省威海市 264209

[2]哈尔滨工业大学，城市水资源与水环境国家重点实验室，黑龙江省哈尔滨市 150000

*Email: jiejiang@hitwh.edu.cn

摘要正文：微/纳米塑料污染已成为一项全球性环境问题，已被证实在人体、环境、食品中广泛赋存；纳米塑料易进入生物体内循环，危害更大。然而，微/纳米塑料分离检测效率低，难以满足当前对其传输、危害评价等迫切需求。鉴于此，团队突破国际上纳米塑料准确表征技术瓶颈，开发了快速热裂解技术，研制基于热裂解-质谱技术的微/纳米塑料检测仪，具有不受尺寸限制、快速分析等优点。在此基础上，进一步开发了磁性吸附、膜过滤、离子液体混凝沉淀等纳米塑料分离富集技术，实现了复杂基质中纳米塑料的快速分离检测。目前，已实现了PP、PE、PS、PET等多种纳米塑料的分析检测；聚焦真实环境、食品摄入、医疗接触等微/纳米塑料典型暴露途径，已用于成功用于蔬菜、牡蛎、海水、污水、输液袋、口罩、地膜等复杂基质样本中纳米塑料的分析检测。研制的微/纳米塑料快速检测仪微为环境、食品、医疗等领域生物安全风险评价提供解决方案。

Fig. 1 微/纳米塑料快速检测仪

关键词：纳米塑料；复杂基质；；分离；检测

参考文献

[1] K. Shi, H. Zhang and J. Jiang, Anal. Chem. 2024, 96, 4514−4520

[2] X. Zhang, H. Zhang, K. Yu, N. Li, Y. Liu, X. Liu, H. Zhang, B. Yang, W. Wu, J. Gao, and J. Jiang, Anal. Chem., 2020, 92, 4656−4662.

[3] X. Zhang, K. Shi, Y. Liu, Y Chen, K Yu, Y. Wang, H. Zhang and J. Jiang, J. Hazard. Mater., 2021, 419, 126506

报告人/墙报展示人简介：

姜杰，教授/博士生导师/院长，哈尔滨工业大学城市水资源与水环境国家重点实验室、海洋科学与技术学院。本、硕博士毕业于吉林大学化学学院，Carnegie Mellon 大学博士后，Stanford 大学访问学者。长期从事质谱、光谱等分析仪器开发与应用研究，在 Nat. Ecol. & Evol.、Angew. Chem. Int. Ed.、Chem. Sci.、Anal. Chem.等期刊发表论文 100 余篇；主持十四五国家重点研发计划项目、十三五国家重点研发计划课题及子课题、十二五国家科技支撑项目、国家自然科学基金等项目 20 余项；获国家教学成果二等奖、省部级教学成果二等奖各 1 项。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

塑料寿命测试技术发展方向及国际标准化

者东梅

中石化（北京）化工研究院有限公司，北京市朝阳区北三环东路 14 号，100013

摘要正文：报告简要介绍了塑料及其制品产业结构调整方向。较为详细的介绍了塑料测试技术发展方向，特别是材料破坏及寿命预测评价技术、快速评价技术、模拟计算、环境因素评估等。与此同时还介绍了上述评价技术目前国际标准化研究现状。报告还指出了在研究评价技术的同时，还应该注重塑料“微观结构—加工性能—宏观性能—应用”的关联研究，从而促进新材料的开发与推广应用。

关键词：塑料；寿命预测评价；模拟计算；国际标准化

报告人/墙报展示人简介：

者东梅，中国石化北京化工研究院 教授级高级工程师
1995.06~1998.05 塑料研发中心 助理工程师
1998.06~2002.12 塑料研发中心 工程师，专题组长
2003.12~2006.07 塑料研发中心 高级工程师，专题组长
2006.08~2007.11 标准研究室 高级工程师，专题组长
2007.11~2008.11 美国国家标准技术研究院（NIST）访问学者
2008.12~2010.10 标准研究室 高级工程师，专题组长
2010.11~2013.12 标准研究室 教授级高工，副主任
2014.01~今 标准研究室 教授级高工，主任

报告人/墙报展示人是否为学生：否

基于拉曼光谱检测饮用水中微塑料

王赛[1]、张岚[1*](通讯作者)、陈永艳[1]、邢方潇[1]

[1]中国疾病预防控制中心环境与健康相关产品安全所，北京市西城区南纬路 27 号，100050

*Email: zhanglan@nieh.chinacdc.cn

摘要正文：本研究的主要目标是基于显微拉曼光谱技术探索建立饮用水中微塑料检测的定性定量分析方法，对样品的前处理过程，如抽滤方式、消解条件、适用滤膜类型以及显微拉曼光谱仪的仪器参数等进行了条件试验，力求对较小粒径的微塑料完成有效检测，且操作简单，消耗时间适宜，检测结果准确有效。

方法建立过程中首先对过滤滤膜从三个维度进行了测试和选择:(1)滤膜表面平整光滑，滤膜材质在使用显微拉曼仪检测微塑料时不会对其产生干扰；(2)滤膜材质的拉曼光谱平稳，没有明显的可见基底峰，以保证样品中微塑料的特征峰不会被滤膜基底峰遮盖；(3)价格合适，便于获得。最终选择氧化铝膜作为二级过滤滤膜，不锈钢膜作为一级过滤滤膜[1]。其次对消解条件进行了测试，探究了0、10%、15%、20%、25%、30%浓度的H_2O_2对饮用水的消解效果，结果显示20%浓度的H_2O_2对饮用水中的天然腐殖质消解效果最佳。再次对拉曼检测模式和参数进行了测试和选择，在拉曼检测的三种模式（点扫描、面扫描、自动化面扫面）中，自动化面扫描根据窗口显示的白光图像，可以设定软件自动确定背景强度或手动调节背景强度，调节合适的背景强度可以更好地突出空白背景与样品的差异。另外，还可以设置粒径范围，程序会自动根据参数设定对样品区域进行布点和采集。相比而言，自动化面扫描是最优选择。最后，对于定性定量方法的选择上，综合微塑料的滤膜边缘聚集效应和定量微塑料颗粒的时间成本考量，选择三点取样法进行检测，详见图1。最终方法流程是将饮用水经不锈钢膜一级过滤，使用20% H_2O_2对滤膜上的物质消解24h，经超声洗脱后使用氧化铝膜进行二级过滤，然后采用三点取样法对二级滤膜进行定性和定量分析。详见图2。

最终本研究以低、中、高浓度的聚苯乙烯微塑料模拟水样对方法的准确度和精确度进行了测试，方法的回收率为75.64%~121.53%，低浓度组RSD(相对标准偏差)为22.65%，中浓度组RSD为14.74%，高浓度组RSD为11.21%。该方法操作便捷、回收率较高、时间成本适宜,可适用于检测生活饮用水中的微塑料。

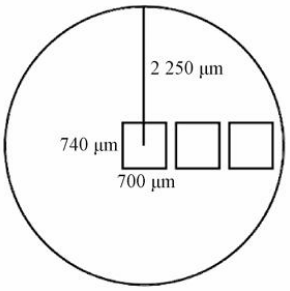


Fig.1 Schematic Diagram of Three-Points Sampling Method

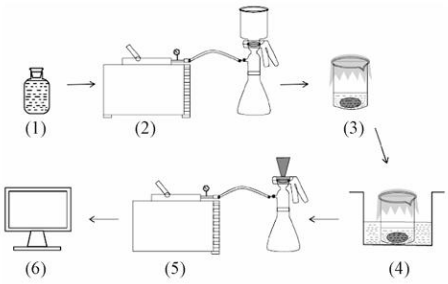


Fig.2 Schematic Diagram of Pre-Processing and Detection Process

关键词：饮用水；微塑料；拉曼光谱；检测方法；定量方法

参考文献

[1] 李珊, 邢方潇, 王瑜, 等. 饮用水微塑料检测中滤膜的适用性[J]. 净水技术, 2020,39(5): 14-20.

报告人/墙报展示人简介：

张岚，中国疾病预防控制中心 研究员。第八届国家学校卫生标准专业委员会委员、第二届全国饮料标准化技术委员会委员、中国地理学会医学地理专业委员会副主任委员、中国营养学会饮水与健康分会副主任委员、中国学生营养与健康促进会学校饮水与环境健康分会副主任委员、中华预防医学会卫生检验专业委员会副主任委员、中华医学会地方病专业委员会常务委员、涉水产品评审专家。主持/参与《饮用天然矿泉水标准检验方法》《生活饮用水卫生标准》《生活饮用水标准检验方

法》

《污水中新型冠状病毒富集浓缩与核酸检测方法标准》等多项国家标准或行业标准，主持/参与国家科技重大专项、重点研发计划项目、科技支撑项目等 20 余项；负责《全国饮用水中新污染物风险监测与健康风险评估》《国家城市饮用水卫生监测》《全国城市供水水质普查》等全国性项目的运行及技术支撑；参与《全国城市饮用水卫生安全保障规划》等国家规划的编制。获得国家科技进步二等奖等各类科技奖项 7 项；发表论文 200 余篇，参编书籍 10 余本。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

双壳贝类中微塑料的赋存特征及其暴露评估研究

隋海霞[1]，黄翎华[1]，李景喜[2]，杨道远[1]，吴永宁[1,*]

1 国家食品安全风险评估中心，北京，100022

2 自然资源部第一海洋研究所，青岛，266061

*Email: suihaixia@cfsa.net.cn

摘要正文：微塑料是一种备受关注的新型环境污染物。虽然目前有很多关于双壳贝类中微塑料丰度的研究，但是很多结果是基于微塑料的数量而非质量表示的。在风险评估中，危害评估是基于单位体重的质量表示的，暴露评估也需基于单位体重的质量表示，以便进行后续的风险表征。本研究调查了中国青岛两个地区双壳贝类中MP的丰度和特征（聚合物类型、大小、形状和颜色）；研究了MP丰度和特征的区域、季节和物种差异；在此基础上，评估了不同人群通过食用双壳类对MP的膳食暴露。本研究表明，MP的平均丰度为1.17±1.07个/个体或0.17±0.22个/克湿重。纤维是主要形状（91.5%）。MP的平均粒径为995.63±796.59μm。人造丝、PE和PET对MP的组成贡献最大。MP的丰度没有显著的区域或季节性差异（$p>0.05$），而用湿重描述丰度时存在显著的物种差异（$p<0.05$）。中国一般人群、消费人群和沿海居民通过双壳类消费估算的MP每日摄入量分别为3.32×10^{-3}、0.08和0.16 μg/kg BW。通过将MP的数量转换为质量的暴露评估方法可能有助于未来的风险表征。此外，本研究引入了一种新的定量计算MP暴露量的方法，计算以纤维为主要聚合物形状时的膳食中MP的暴露量，在遵循保守原则的同时提高了暴露评估结果的精度。

关键词：微塑料；双壳贝类；丰度；暴露评估

参考文献

[1] Abidli, S., Lahbib, Y., Trigui El Menif, N. Microplastics in commercial molluscs from the lagoon of Bizerte (Northern Tunisia). *Marine Pollution Bulletin* 2019, 142: 243-252.

[2] Bom, F.C., Sá, F. Concentration of microplastics in bivalves of the environment: a systematic review. *Environmental Monitoring and Assessment* 2021,193:846.

[3] Ding, J., Li, J., Sun, C., et al. Detection of microplastics in local marine organisms using a multi-technology system. Analytical Methods 2019,11: 78-87.

报告人/墙报展示人简介：

隋海霞，博士，研究员，国家食品安全风险评估中心评估三室副主任。FAO 微塑料食品安全技术洞见工作组专家、食品中化学物质风险评估方法的国际联络小组 (ILMERAC) 专家、国家食品安全风险评估专家委员会委员、食品安全国家标准审评委员会委员、农业转基因生物安全委员会委员。长期从事食品化学物风险评估技术研发和食品毒理学机制研究，负责我国食品相关产品的风险评估，主持建立多项食品安全风险评估技术指南，包括 TTC、QSAR、交叉参照等。目前，负责组织建立我国下一代风险评估技术方法。先后获得广东省科技进步奖二等奖、中国包装联合会包装行业科学技术奖二等奖等多项奖励。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

我国水库中微塑料的赋存特征及其环境归趋

徐东昱[1]，高博[1,*]

[1]中国水利水电科学研究院，北京，100038

*Email: gaobo@iwhr.com

摘要正文：水库是筑坝拦水而形成的人工湖泊，因蓄水防洪引起的污染物富集已然成为全球面临的重大生态问题。微塑料通过大气沉降、污水排放和地表径流等途径进入水库并持续积累，不仅对水库生态系统产生重要影响，甚至通过饮水和食物链威胁人类健康。为全面了解中国水库微塑料赋存特征，本文基于2013-2024年中国水库微塑料污染的研究文章进行了分析。结果显示我国水库表层水中微塑料平均丰度为11542±15325 n/m^3，沉积物中为1408.45±2659.03 n/kg；微塑料主要类型是聚乙烯、聚丙烯和聚苯乙烯；其粒径分布呈现出粒径越小，丰度越高的趋势。水库建设改变了河流自然水文情势，蓄水期和泄洪期两个阶段的河流水动力条件和水环境不同，对微塑料的水平输移和垂向迁移行为产生了重要影响。此外，微塑料在水库封闭水体中容易形成生物膜，并吸附各种污染物和有机质，不仅对水库系统营养元素循环产生影响，其被动植物吞食后还会造成毒性作用。最后，本文还提出了水库微塑料污染研究中需要进一步解决的问题，并且对水库微塑料污染未来的研究方向及重点进行了展望，以期为中国水库微塑料污染的生态风险评估和污染防控提供科学参考。

关键词：微塑料；水库；赋存特征；环境行为；生态效应

报告人/墙报展示人简介：

高博，中国水利水电科学研究院正高级工程师，博士生导师，水环境监测与标准化研究室主任，流域水循环模拟与调控国家重点实验室研究团队带头人。长期从事大型水库关键元素环境地球化学循环及生态效应、新污染物检测方法研发及标准化等领域研究，主持国家/省部级项目 10 余项，发表学术论文 150 余篇，以第一/通讯作者在 Environmental Science & Technology、Nature 旗下期刊 Communications Earth & Environment 和 npj Clean Water、Water Research 等一区 Top 期刊发表 SCI 文章 80 余篇。主编专著 5 部、主/参编标准及规范 20 余部，授权发明专利 10 余项，第一完成人获省部级奖 2 项。目前担任 Science of the Total Environment 副主编、中国科协科技人才奖项评审专家、中国质检协会水环境工程技术与装备专委会副秘书长、国际水文科学协会中国委员会水质专委会委员、中国土壤学会环境微塑料工作组委员、中国环境科学学会沉积物环境专业委员会委员等。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

设施农业土壤中微塑料的赋存特征与效应研究

徐笠

北京市农林科学院，北京市海淀区曙光花园中路 9 号，100097

Email: xuliforever@163.com

摘要正文：设施农业一般是棚膜和地膜同时使用,且具有高化学品投入,复种指数高以及高温等特点。近几年的相关研究来看,关于设施农业土壤微塑料的关注度越来越高。本研究首先构建了基于光谱解混技术和机器学习的拉曼成像分析方法，用于可视化快速识别土壤中的微塑料[1]；其次以不同类型和不同棚龄的设施农业为研究对象，发现土壤中微塑料的含量与棚龄呈极显著正相关关系，暖棚中微塑料的含量要显著高于春秋棚中微塑料的含量水平，有机肥、地下水和农膜是土壤微塑料的重要来源[2]；最后以设施农业中经常种植的西红柿为代表性作物，发现聚苯乙烯微塑料可以影响种子萌发、幼苗生长以及抗氧化酶系统，影响植物激素信号传递、氨基酸的生物合成、糖胺聚糖降解等通路，还可以影响植物细胞生物膜的正常功能。

关键词：微塑料；设施农业；赋存特征；生态效应

参考文献

[22]Li, F., Liu, D., Guo, X., Zhang, Z., Martin, F. L., Lu, A., & Xu, L. (2024). Identification and visualization of environmental microplastics by Raman imaging based on hyperspectral unmixing coupled machine learning. *Journal of Hazardous Materials*, *465*, 133336.

[23]Wang, K., Chen, W., Tian, J., Niu, F., Xing, Y., Wu, Y., ... & Xu, L. (2022). Accumulation of microplastics in greenhouse soil after long-term plastic film mulching in Beijing, China. *Science of the Total Environment*, *828*, 154544

报告人/墙报展示人简介：

徐笠，北京市农林科学研究院副研究员。中国土壤学会微塑料工作组委员。主要研究方向为新污染物（如微塑料等）的环境行为与效应。主持国家面上基金、国家重点研发子课题、北京市优秀人才青年骨干等课题 10 余项。此外，以第一/通讯作者身份发表了 40 余篇论文，其中在 Environmental Science & Technology、Journal of Hazardous Materials 等期刊上发表 SCI 论文 30 余篇。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

日常刷牙行为促进微纳塑料转移到血液系统

王丰邦，宋茂勇*

中国科学院生态环境研究中心，环境纳米技术与健康效应实验室，北京 100085

Email：mysong@rcees.ac.cn

摘要正文：尽管已在人类肝脏、胎盘、血液等多种组织样本中鉴定出不同尺寸微塑料，但它们进入人体的传输途径尚不清楚。牙刷作为日常直接接触的塑料产品，并且对于牙周炎患者刷牙过程往往会产生牙龈伤口。因此，探究刷牙过程中产生的微塑料能否通过伤口直接进入人体中，将有助于揭示微塑料的传输途径。本研究发现常用的聚对苯二甲酸丁二酯（PBT）和尼龙-6（PA-6）牙刷在两周的刷牙模拟过程中平均一次可以释放上百万个微纳塑料（MNPs），且前者释放的颗粒数量是后者的两倍左右。通过大鼠表皮伤口模型，我们发现这些MNPs能够通过诱发炎症阻碍伤口愈合。进一步，通过对比不同暴露方式，我们发现通过伤口暴露的纳米级塑料（NPs，100 nm）和微米级塑料（MPs，20 μm）都能转移到大鼠的血液系统（血液、肝脏和其他器官）。不同的是，通过经口暴露只有NPs能够通过肠道转移到大鼠血液系统，而MPs主要停留在肠道中。以上研究表明刷牙过程中产生的MNPs能够通过伤口直接传输到血液和其他组织器官（如图1所示），特别是对牙周炎患者可能会产生更高的健康风险。

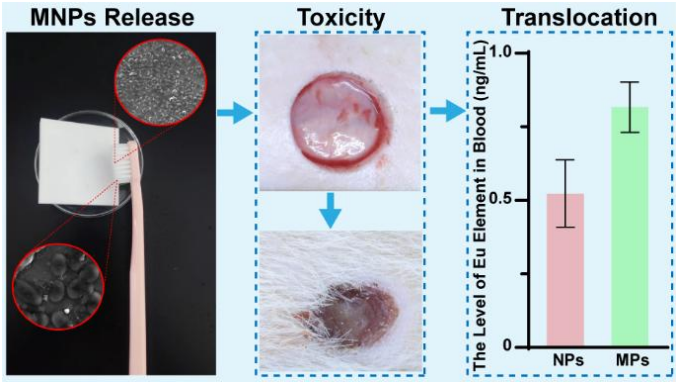


图1. 刷牙过程MNPs的释放、毒性效应和转移过程。

关键词： 牙刷，微纳塑料，毒性效应，传输过程，血液系统

致谢：感谢国家重点研发计划（No. 2023YFF0614200）、国家自然科学基金（NO. 22241604、22376212、22106156和22176195）和中科院先导专项B（No. XPDB0750300）的支持.

报告人/墙报展示人简介：

宋茂勇，国家杰出青年科学基金获得者，中国科学院生态环境研究中心研究员，国家自然科学基金委优秀青年基金获得者。2006 年进入生态环境研究中心环境化学与生态毒理学国家重点实验室工作。近年来在环境污染物与生物大分子的相互作用、环境污染物的生物学检测方法及毒性 评价、环境生物标志物的识别、新型污染物的毒性及生物效应等方面开展了相关研究，并取得了若干原创性的科研成果。在国内外学术刊物上发表研究论文 40 余篇，其中在 Chem. Commun.、Anal. Chem.、Environ. Sci. Technol.、JCA 等 SCI 收录的国际核心期刊上发表论文 35 篇。2014 年获国家自然科学基金优秀青年科学基金。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

草莓中微塑料的吸收与迁移行为研究

金芬*，张琛

中国农业科学院农业质量标准与检测技术研究所，北京市海淀区中关村南大街十二号，100081

*Email: jinfen@caas.cn

摘要正文：微塑料作为一种新型污染物在食品中广泛存在，已成为全球食品产业关注的热点和焦点[1, 2]。微塑料可通过种植链传输进入农作物，具有潜在的健康风险[3, 4]。草莓栽培主要是以地面起垄覆膜栽培为主，由于地膜长期使用，残留的地膜可能形成微米或纳米级别的塑料颗粒积累在土壤中，草莓在一定程度上可能更容易受到微塑料的污染；此外，由于草莓是典型的无性繁殖植物，主要通过匍匐茎繁殖，母株一旦遭受微塑料污染，则很可能转移至子株。聚焦以上关键科学问题，以草莓主要品种“章姬”为研究对象，通过开展草莓幼苗中不同粒径、不同浓度微塑料的水培模拟暴露实验，采用显微成像及质谱分析技术，研究了聚苯乙烯微塑料（PS-MPs）在草莓幼苗中的吸收情况，并对PS-MPs的吸收和迁移对草莓幼苗的生物效应进行了探索。结果表明，PS-MPs的粒径、浓度是影响草莓幼苗根部吸收、迁移PS-MPs的主要因素；草莓根部对微塑料的吸收途径与微塑料的粒径有关；结合显微成像及质谱分析结果发现微塑料主要在根部积累，迁移至叶柄处的量较少；通过对草莓幼苗生理生化指标的测定，发现PS-MPs的吸收和积累对草莓幼苗的抗氧化防御系统、叶绿素的合成、渗透调节均产生了影响，且大粒径的PS-MPs（0.2 μm）引发的生物效应更显著，微塑料的浓度也是其影响因素。本研究首次揭示了微塑料可被草莓幼苗的根部吸收，并在草莓幼苗植株体内进行迁移，为评估新型污染物微塑料对人体可能的健康风险提供了基础数据，对保障草莓的质量安全及产业的健康发展具有重要意义。

关键词：微塑料；草莓幼苗；农产品；吸收；迁移行为

参考文献

［1］WHO. Dietary and inhalation exposure to nano- and microplastic particles and potential implications for human health [R], 2022.
[2] FAO. Microplastics in food commodities [R], 2022.
[3] LI L, LUO Y, LI R, et al. Effective uptake of submicrometre plastics by crop plants via a crack-entry mode [J]. Nature Sustainability, 2020a, 3(11): 929-937
[4] LI Z, LI Q, LI R, et al. The distribution and impact of polystyrene nanoplastics on cucumber plants [J]. Environ Sci Pollut Res Int, 2021, 28(13): 16042-16053

报告人/墙报展示人简介：

金芬，中国农业科学院农业质量标准与检测技术研究所农产品质量安全创新团队首席，“国家高层次人才特殊支持计划”领军人才，中国农业科学院领军人才，从事农产品质量安全的检测技术、污染物迁移转化及潜在机制研究，承担国家重点研发计划项目“果蔬产品质量安全保障技术应用示范”（2019YFC1605600）、国家自然基金项目、农业行业标准项目、国家科技支撑计划、农业农村部农产品质量安全风险评估项目等多项课题，相关研究成果已在《Journal of Hazardous Materials》、《Journal of Agriculture and Food Chemistry》、《Science of the Total Environment》、等农业和食品领域重要期刊发表论文 100 余篇。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

基于机器学习分析微塑料影响藻类生长的关键因素

李文昊，赵旭，许旭东，汪磊，孙红文，刘春光*

南开大学环境科学与工程学院，天津，300350

*Email: liuchunguang@nankai.edu.cn

摘要：本研究旨在利用机器学习模型预测微塑料对藻类生长的影响，并通过模型可解释性分析评估不同特征（微塑料特性、藻类特征和实验条件）的重要性排名。在文献检索的基础上，收集了 408 个样本作为模型的输入。采用RF、CatBoost和LightGBM三种综合机器学习算法构建了藻类生长分类预测模型。结果表明，LightGBM 模型性能最佳，总准确率为 0.8305，Kappa 值为 0.7165。模型可解释性分析表明，“暴露时间”、“微塑料浓度 ”和 “微塑料尺寸”是对藻类生长影响最大的特征因素。介于72-216 h 暴露时间的微塑料对藻类生长的影响最大。在 0 至 300 mg/L 的微塑料浓度范围内，微塑料对藻类生长的影响随着 MPs 浓度的增加而增大。较小的微塑料颗粒对藻类生长的影响更大，当藻类细胞大小与微塑料尺寸之比更大时，微塑料更有可能抑制藻类生长。本研究成功地建立了预测模型，用于评估各种微塑料特性对藻类生长的影响。

关键词：微塑料；藻类生长；机器学习；特征重要性；可解释性分析

报告人/墙报展示人简介：

汪磊，南开大学教授，博士生导师。国家优秀青年科学基金、天津市杰出青年基金获得者，入选天津市中青年创新领军人才、131 创新人才第一层次、南开大学百名青年学科带头人。2016 年起任环境过程与基准教育部重点实验室副主任，2019 年起任环境科学系主任。从事新污染物环境行为与风险的应用基础研究。先后主持基金委优青、联合重点基金和面上项目、天津杰青基金，以及国家重点研发计划课题（2 项）和亚太气候组织国际合作计划等科研项目，发表 SCI 论文 129 篇，获得教育部自然科学二等奖、海洋科技二等奖等科研奖励，现担任 B. Environ. Contam. Tox. 亚洲副主编、Ecotoxicol. Environ. Saf.编委、环境科学学会环境地学分会、环境化学分会委员、中国土壤学会环境微塑料工作组委员。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

微纳塑料颗粒的分析测试技术进展

高峡*，王佳敏，刘艳，邹文奇，史迎杰，汤庆峰，张裕祥

北京市科学技术研究院分析测试研究所（北京市理化分析测试中心），北京，100094

*Email: gaoxia@bcpca.ac.cn

摘要正文：

微塑料通常被定义为尺寸小于5毫米的塑料颗粒，在自然环境下经过老化降解[1,2]形成越来越小的纳米颗粒。这些微小颗粒通过不同途径进入环境，包括废水排放、塑料废弃物降解及大气沉降等，对海洋、土壤及空气等环境介质造成广泛污染，成为影响全球生态环境和人类健康的重要议题[3,4]。本文综述了当前微纳塑料颗粒分析测试技术的最新进展，旨在探讨其在环境监测、污染评估及风险预测中的应用前景。

微纳塑料颗粒的全面表征是深入研究其环境归趋、环境健康风险、污染治理等的重要基础，但是现有检测技术受灵敏度等限制，难以检测和确定微纳塑料颗粒在天然环境中的实际浓度和特征信息[5]。目前，常见表征方法主要有两种：数量浓度法和质量浓度法[6]。利用光谱检测方法可以得到数量浓度，实现微塑料的成分、尺寸、形状、数量的检测；利用质谱检测方法可以得到质量浓度，但无法获得尺寸、形状等物理特征信息。

常见的光谱检测方法有显微红外光谱法、显微拉曼光谱法、荧光光谱法等[7-10]。显微红外光谱法是微塑料检测中应用最多的，它具有无损鉴定、操作简便、图谱库丰富的优势，可实现多种成分微塑料的检测；然而，由于空间分辨率的限制，只能检测到20 μm以上的微米塑料[11]而不能实现纳米塑料的检测。显微拉曼法与显微红外法互补，能实现更小尺寸（1 μm）的微塑料的测量，且不受水分干扰，可实现细胞等生物组织中微塑料的原位测试[12]；但是受荧光干扰严重，对于环境介质中提取的微塑料和有颜色的微塑料检测困难。而且，受空间分辨率的限制，该方法很难实现纳塑料的检测。若用这两种常规光谱法实现纳米塑料的检测，需要与其他技术联用。如，基于原子力显微镜的红外光谱（AFM-IR），利用AFM探针的尖端来局部检测样品中因吸收红外辐射而产生的热膨胀，获得了空间分辨率（约20-50 nm）远低于传统光学衍射极限的化学成分图谱，进而实现了纳米塑料的检测[13-15]；还有通过独特的收缩表面气泡沉积技术，并利用Marangoni流将悬浮的纳米塑料浓缩到表面，利用扫描电子显微镜进行可视化表征，再通过表面增强拉曼光谱来实现纳米塑料的化学成分鉴定[16]。荧光光谱法[17-18]具有直观、快速、简单、经济等特点，可以实现活体动物中微塑料的可视化检测。荧光探针标记法，是指采取包覆或溶胀等手段，通过吸附、化学反应或物理嵌入的方式，将荧光探针/染料包裹在微纳塑料颗粒颗粒的表面（包覆法）或内部（溶胀法），以赋予其荧光性能，进而便于对其进行可视化监测、识别和/或定量分析。这种荧光标记法已普遍用于水、粉尘等环境样品以及细胞等生物样品中微纳塑料颗粒的排放、分布、转运、毒性等示踪研究。

随着塑料颗粒研究的持续深入和研究者对环境健康风险的日益关注，研究对象从微塑料逐渐扩展至纳塑料颗粒，且多个研究团队尝试使用质谱方法检测微纳塑料颗粒的质量浓度或丰度（如，热裂解-气相色谱-质谱[19]，热萃取/热脱附-气相色谱-质谱法[20]）。此外，还有金属元素标记-原子光谱/质谱法（如，激光诱导击穿光谱法、电感耦合等离子体质谱法和飞行时间二次离子质谱法等），利用金属元素修饰或标记微纳塑料颗粒颗粒，进而实现实际样品中微纳塑料颗粒的定量[21,22]。基于基质辅助激光解吸电离（MALDI）质谱法也用于微纳塑料颗粒在复杂环境及生命系统中的降解、迁移等研究[23]。质谱法无最小尺寸限制，可以实现微纳塑料颗粒的聚合物成分种类的检测，获得微纳塑料颗粒质量浓度信息，但无法获取微纳塑料颗粒尺寸、形状、数量等信息。

近几年，微塑料研究热度和成果迅速增长，但研究中不同的采集、分离、鉴别分析方法，以及不同的统计单位，导致不同研究结果之间缺乏可比性，缺乏微塑料在天然环境中的实际浓度和特性信息，实际环境浓度下的微塑料污染效应研究正面临挑战。所以，亟需建立微塑料收集、分离、表征和定量的标准化方法。多个课题组对基于傅里叶变换显微红外光谱法[24]、显微拉曼光谱法[25]、质谱方法等微塑料检测标准化方法进行了开发，发明了一些提高样品前处理效率的装置并获批专利，如水或土壤环境中微塑料样品的分离方法、非塑料有机质的去除方法以及采集/提取及净化分级装置等[26-31]基于傅里叶变换显微红外光谱法，对饮用水[32]、地下水、景观环境用水、污水、土壤[33,34]、沉积物[35]、生物体[36]等环境介质中微塑料的测定方法[37]进行标准化研究，形成系列团体标准 [38-43]。并成立了中国材料

与试验标准化委员会基础与共性技术标准化领域委员会微塑料及其环保试验标准化技术委员会（CSTM/FC00/TC03），进行微塑料及其环保试验技术相关标准化相关工作。参与了2022年12月新材料与标准凡尔赛科研计划(VAMAS)国际组织的微/纳米塑料在环境技术工作领域委员会（TWA45）发起“用显微镜和光谱学方法表征微塑料的标准化方法”的实验室间比对项目，验证了显微镜和光谱法（μ-IR、μRaman）在测量微塑料颗粒（MPs）的粒径分布、形状、粒数浓度等参数时适用性，国际内各单位测试数据比对结果如图1所示。其中编号82A和82B分别代表本单位显微红外和显微拉曼验证实验的结果。

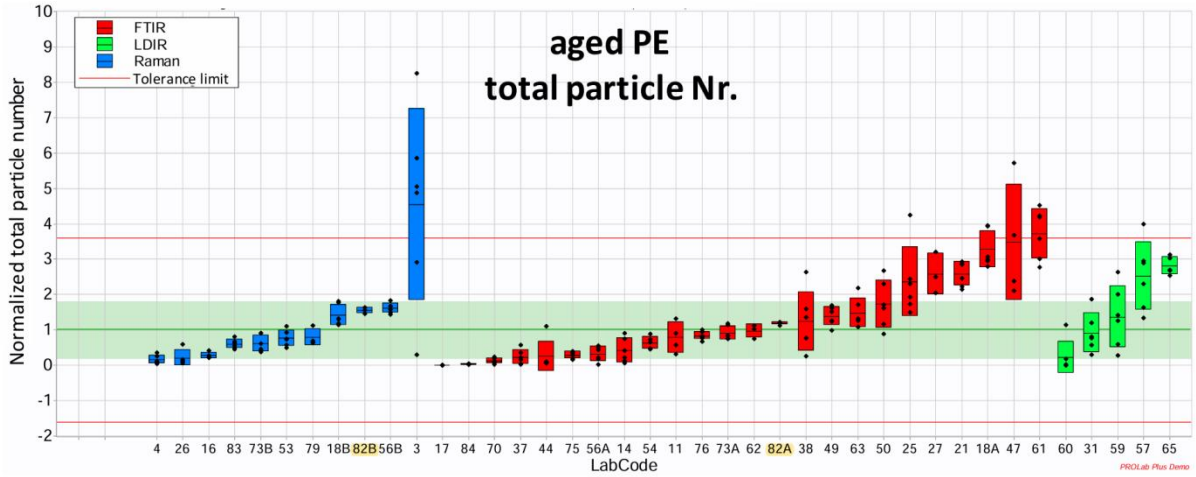


Fig. 1 Comparison results of test data from various international units

环境中的微塑料很大比例来源于高分子材料的老化降解。为了探索塑料等高分子材料及其制品在生态环境中老化降解或崩解，形成微塑料直至完全降解成小分子化合物的老化降解路径和机理，张裕祥等[44]设计制造了高分子材料力学加速老化及老化产物捕获装置，对高分子材料进行人工加速老化试验，能够针对高分子材料相关的有机污染物的进行鉴定及分析测试，模拟在机械磨损、光照、湿、热、氧气等自然条件下高分子材料及粉体的加速老化过程，收集老化后的样品以及老化过程中产生的微塑料、气体、水溶性产物，并进行测试分析，是研究塑料老化降解机制的得力工具。高分子材料老化及捕获老化产物的装置是集成的多功能一体化设备，由微型环境舱、微纳塑料颗粒制备单元、挥发性老化过程中产物收集单元、老化颗粒与水溶性老化产物收集单元、信息采集与控制单元等五部分组成，工作原理如图2所示。其核心部件是微纳塑料颗粒制备单元，集成在微型环境舱内部，用以模拟大型塑料在环境中形成塑料微粒或碎片的过程。设备的核心功能是微纳塑料制备、老化降解过程中产物的捕获与收集。可以模拟塑料在自然界中由物理作用力下破碎，以及塑料及微纳塑料在光、氧化和水等降解作用而碎化产生微塑料，力学加速塑料老化，能够获得颗粒粒径为200 nm-100 μm的微纳塑料，这为微塑料标准物质的制备提供了一种途径。

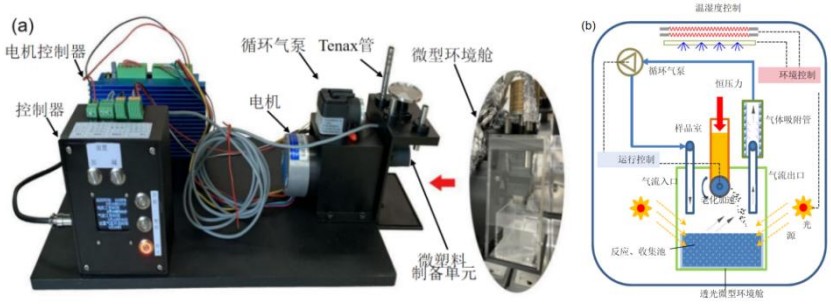


Fig. 2 Structure (a) and working principle schematic diagram (b) of polymer material aging and degradation trap

当前市场上可购买到的有证书的微塑料标准物质，仅限于聚苯乙烯（PS）单一材质类型，其局限性在于无法充分满足科研领域的广泛需求，亦无法全面涵盖环境中实际存在的多种微塑料种类，进而制约了针对这些微塑料对动植物毒性影响的深入研究。本课题组利用高分子材料力学加速老化及老化产物捕获装置制备了的PLA、PBAT、PP、PE、PET等多种材质、多种粒径的微塑料标准物质候选物，并形成了成熟的制备工艺，这为微塑料标准物质候选物的产品化奠定了基础。并利用制备的微纳米塑料，进行了微/纳塑料对巨噬细胞毒性异质性、动植物毒性（小麦、蚯蚓）相关研究。

关键词：微纳塑料颗粒；分析测试技术；微纳塑料制备

参考文献

[1] Zhao J, Lan R, Wang Z, et al. Microplastic fragmentation by rotifers in aquatic ecosystems contributes to global nanoplastic pollution[J]. Nature Nanotechnology, 2023.https://doi.org/10.1038/s41565-023-01534-9

[2] Dawson A L, Kawaguchi S, King C K, et al. Turning microplastics into nanoplastics through digestive fragmentation by antarctickrill[J]. Nature Communications, 2018, 9(1): 1001.

[3] AbdolahpurMonikh F, Baun A, Hartmann N B, et al. Exposure protocol for ecotoxicity testing of microplastics and nanoplastics[J]. Nature Protocols, 2023, 18(11): 3534-3564.

[4] Liu Z, Sokratian A, Duda A M, et al. Anionic nanoplastic contaminants promote Parkinson's disease-associated α-synuclein aggregation[J]. Science Advances, 2023, 9(46): eadi8716.

[5] Huvet A, Paul-Pont I, Fabioux C, et al. Reply to Lenz et al.: Quantifying the smallest microplastics is the challenge for a comprehensive view of their environmental impacts[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2016, 113(29): E4123-E4124.

[6] Ivleva N P. Chemical analysis of microplastics and nanoplastics: challenges, advanced methods, and perspectives[J]. Chemical Reviews, 2021, 121(19): 11886-11936.

[7] Chen Q, Shi G, Revell L E, et al. Long-range atmospheric transport of microplastics across the southern hemisphere[J]. Nature Communications, 2023, 14(1): 7898.

[8] Curtis T, Taylor A K, Alden S E, et al. Synthesis and characterization of tunable, pH-responsive nanoparticle-microgel composites for surface-enhanced ramanscattering detection[J]. Acs Omega, 2018, 3(9): 10572-10588.

[9] Stanton T, Johnson M, Nathanail P, et al. Exploring the efficacy of nilered in microplastic quantification: Acostaining approach[J]. Environmental Science & Technology Letters, 2019, 6(10): 606-611.

[10] Tian L, Chen Q, Jiang W, et al. A carbon-14 radiotracer-based study on the phototransformation of polystyrene nanoplastics in water versus in air[J]. Environmental Science: Nano, 2019, 6(9): 2907-2917.

[11] Kim S K, Kim J S, Kim S Y, et al. Arctic Ocean sediments as important current and future sinks for marine microplastics missing in the global microplastic budget[J]. Science Advances, 2023, 9(27): eadd2348.

[12] Ramsperger A, Narayana V K B, Gross W, et al. Environmental exposure enhances the internalization of microplastic particles into cells[J]. Science Advances, 2020, 6(50): eabd1211.

[13] Dazzi A, Prater C B. AFM-IR: Technology and applications in nanoscale infrared spectroscopy and chemical imaging[J]. Chemical Reviews, 2017, 117(7): 5146-5173.

[14] Felts J R, Kjoller K, Lo M, et al. Nanometer-scale infrared spectroscopy of heterogeneous polymer nanostructures fabricated by tip-based nanofabrication[J]. ACS Nano, 2012, 6(9): 8015-8021.

[15] Pancani E, Mathurin J, Bilent S, et al. High-resolution label-free detection of biocompatible polymeric nanoparticles in cells[J]. Particle & Particle Systems Characterization, 2018, 35(3): 1700457.

[16] Moon S, Martin L M A, Kim S, et al. Direct observation and identification of nanoplastics in ocean water[J]. Science Advances, 2024, 10(4): eadh1675.

[17] Erni-Cassola G, Gibson M I, Thompson R C, et al. Lost, but found with nile red: a novel method for detecting and quantifying small microplastics (1 mm to 20 μm) in environmental samples[J]. Environmental Science &Technology, 2017, 51(23): 13641-13648.

[18] Desforges J P W, Galbraith M, Dangerfield N, et al. Widespread distribution of microplastics in subsurface seawater in the NE Pacific Ocean[J]. Marine Pollution Bulletin, 2014, 79(1-2): 94-99.

[19] Pico Y, Barcelo D. Pyrolysis gas chromatography-mass spectrometry in environmental analysis: Focus on organic matter and microplastics[J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2020, 130: 115964.

[20] Gardon T, Huvet A, Paul-Pont I, et al. Toxic effects of leachates from plastic pearl-farming gear on embryo-larval development in the

pearl oyster Pinctada margaritifera[J]. Water Research, 2020, 179: 115890.
[21] Wu X, Wu Z, Amde M, et al. A progress review on characterization, environmental behaviors and toxicity effects of micro (nano) plastics using atomic spectrometry[J]. Atomic Spectroscopy, 2024, 44(5): 282-297.
[22] Luo Y, Li L, Feng Y, et al. Quantitative tracing of uptake and transport of submicrometre plastics in crop plants using lanthanide chelates as a dual-functional tracer[J]. Nature Nanotechnology, 2022, 17(4): 424-431.
[23] Wu P, Tang Y, Cao G, et al. Determination of environmental micro (nano) plastics by matrix-assisted laser desorption/ionization-time-of-flight mass spectrometry[J]. Analytical Chemistry, 2020, 92(21): 14346-14356.
[24] 汤庆峰,李琴梅,王佳敏等. 显微-傅里叶变换红外光谱鉴别分析微塑料[J].中国塑料, 2021.
[25] Chen Q, Wang J, Yao F, et al. A review of recent progress in the application of Raman spectroscopy and SERS detection of microplastics and derivatives[J]. Microchimica Acta, 2023, 190(12): 465.
[26] 汤庆峰,高峡,邵鹏,等.一种区域水环境中的微塑料样品采集装置:202320103223[P]
[27] 汤庆峰,高峡,张裕祥,等.一种土壤中微塑料的提取分离及净化分级系统:202120343997[P]
[28] 汤庆峰,高峡,邵鹏,等.一种土壤或沉积物中微塑料的提取装置及提取分离装置:202222371628[P]
[29] 汤庆峰,高峡.一种土壤微塑料提取中非塑料有机杂质的去除方法.CN202211078198.6
[30] 汤庆峰,高峡.一种微塑料分级分离过滤套装及装置:CN202222372555.1[P].CN218865626U
[31] 汤庆峰,高峡.一种土壤中微塑料的提取分离及净化方法:CN202110162041.0[P].CN113155558A
[32] 李珊,张岚,邢方潇,等.红外显微光谱法测定生活饮用水中微塑料[J].净水技术, 2021.
[33] 汤庆峰,高峡,李琴梅,等.农田土壤微塑料污染研究现状与问题思考[J].安徽农业科学, 2021, 49(15):8.
[34] 汤庆峰, 王佳敏, 李琴梅等. 农田土壤中微塑料测试方法比较及应用研究[J].中国测试, 2022, 48(10):145-151.
[35] Yu K, Chai B, Zhuo T, et al. Hydrostatic pressure drives microbe-mediated biodegradation of microplastics in surface sediments of deep reservoirs: Novel findings from hydrostatic pressure simulation experiments[J]. Water Research, 2023, 242: 120185.
[36] 贺雨田,杨颉,隋海霞,等.基于显微光谱法的双壳类海洋生物中微塑料的检测方法研究[J].分析测试学报, 2021, 40(7):7.
[37] 汤庆峰,李琴梅,魏晓晓,等.环境样品中微塑料分析技术研究进展[J].分析测试学报, 2019, 38(8):11.
[38] 《景观环境用水中微塑料的测定 傅里叶变换显微红外光谱法》（TCSTM 00563—2022）
[39] 《污水中微塑料的测试 傅里叶变换显微红外光谱法》（TCSTM 00884—2024）
[40] 《饮用水中微塑料的测试 傅里叶变换显微红外光谱法》（标准立项编号CSTM LX 0003 00911—2022）
[41] 《海产品中微塑料的测试 傅里叶变换显微红外光谱法》（标准立项编号CSTM LX 0003 00887—2022）
[42] 《土壤中微塑料的的测试 傅里叶变换显微红外光谱法》（TCSTM 00885—2024）
[43] 《地下水中微塑料的测试 傅里叶变换显微红外光谱法》（TCSTM 00886—2024）
[44] 张裕祥,高峡.一种力学加速高分子材料老化及捕获老化产物的装置:ZL202010077024.2[P]. ZL202010077025.7[P].

报告人/墙报展示人简介：

高峡，博士，研究员，毕业于复旦大学材料科学系，工作于中国科学院化学研究所，现任北京市科学技术研究院分析测试研究所（北京市理化分析测试中心）副所长。以有机材料检测技术与质量评价为主要研究方向，围绕“材料分析测试技术”研发与服务，承担国家、省部级科研课题 20 余项，发表学术论文 60 余篇，获发明专利 5 项、主持或参与国家标准 7 项，主编或参编著作 4 部，获省、部级科学技术奖二等奖 2 项、三等奖 3 项。现担任全国塑料制品标准化技术委员会委员、北京粉体技术协会副理事长、中国材料与试验团体标准委员会/基础与共性技术领域委员会副主任委员微塑料检测与环保试验技术标准委员会秘书长等。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

微塑料化学计量进展及标准物质研制

宋善军[1*]，巢静波[1]，董丽洁[1]，张雨竹[1]

[1]中国计量科学研究院，北京市朝阳区北三环东路18号，100029

*Email: songsj@nim.ac.cn

摘要正文：随着对微塑料环境赋存及毒理学效应的深入研究，微塑料污染已经成为世界范围内广泛关注的环境问题且呈现日趋严峻的趋势。实现检测数据的一致性和可比性是开展微塑料环境行为研究的基础。目前，有关微塑料的检测技术丰富多样，但不同方法产生的数据之间可比性非常有限。为了实现测量数据的一致可比，标准物质作为计量器具在实际检测中发挥重要作用。国际计量局物质的量咨询委员会成立CCQM Task Group关注微塑料测量标准及标准物质相关问题，针对当前各国亟需解决的微塑料计量及标准物质研制方面开展调研，结果表明，超过60%的国家计量机构已经开展微塑料计量能力建设，扫描电镜和显微红外是应用最广的测量技术。仅有17%的机构开展了标准物质的研制，关键参数聚焦尺寸、化学组成以及质量浓度。其中基于质谱技术的质量浓度检测是获得等效一致潜在的技术方案。中国计量科学研究院在该领域开展了系列工作，基于TGA-GC-MS建立的标准数据库和定值技术，并基于冷冻研磨技术建立了常见塑料种类的标准物质候选物，并应用到环境基质样品的分析中，为我国微塑料计量技术发展提供了研究基础。

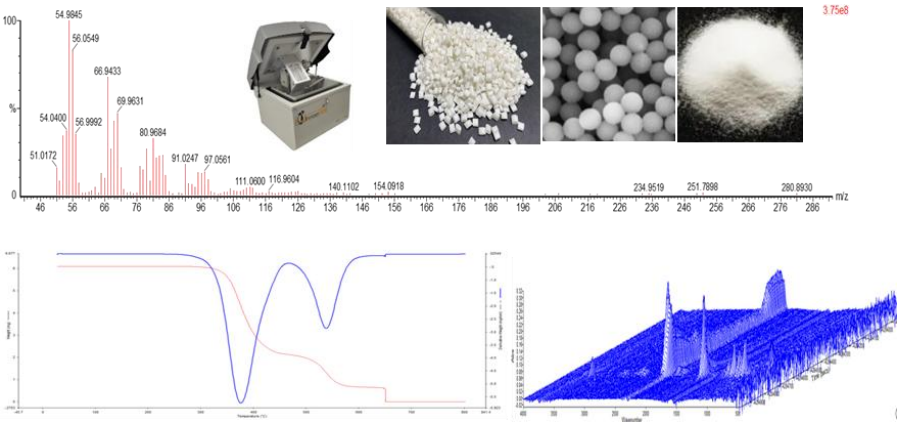


Figure 1 TGA-GC-MS for microplastic measurement and CRM production

关键词：微塑料；计量；标准物质

参考文献

[1] S. Song, L. Cai, and Y. Liu Development of a solubility parameter calculation-based method as a complementary tool to traditional techniques for indoor dust microplastic determination and risk assessment. Journal of hazardous materials. 2023, 132-189

[2] 刘禹慧,韩卓,巢静波等 热分析质谱技术在微塑料检测领域的应用[J].中国无机分析化学，2024, 14（8）:1166-1176.

[3] 韩卓，刘禹慧，魏晓菲等 热重分析/红外光谱-气相色谱-质谱联用技术测定松针中6种常见微塑料 [J].分析测试学报，2024, 43（8）:1249-1256.

报告人/墙报展示人简介：

宋善军，中国计量科学研究院 副研究员。主要从事环境健康化学计量与标准物质研制工作，开展环境中痕量/超痕量新污染物的高准确度测量技术及健康风险评估研究。参与完成国际计量环境领域国际比对，为我国环境基体中有机污染物测量能力提升和国际互认提供支撑。主持和参加多项国家自然科学基金、市场监管总局科技计划项目、国家质量基础专项等科研项目。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

微塑料老化对土壤-蚯蚓中阻燃剂积累与毒性影响机制

彭程[1,*]，韩艳娜[1]，傅梦茹[1]，张卫[1]

[1]华东理工大学资源与环境工程学院，上海，200237

*Email: cpeng@ecust.edu.cn

摘要正文：微塑料（MPs）及其与有机物复合污染的环境风险已成为近期研究热点。我们前期针对微塑料与新型溴代阻燃剂十溴二苯乙烷（DBDPE）复合污染对土壤-蚯蚓中阻燃剂的积累特征与毒性效应影响机制开展了研究。主要结论如下：1）比较了不同种类MPs介导下蚯蚓体内十溴二苯乙烷（DBDPE）的累积特征与毒性效应，发现三种MPs对蚯蚓累积DBDPE的促进效果为：聚乳酸（PLA）-MPs > PE-MPs > 聚丙烯（PP）-MPs；MPs介导（尤其是PLA-MPs）显著加剧DBDPE对蚯蚓的神经毒性，乙酰胆碱酯酶与钙离子为敏感生物标志物；基于转录组学发现可生物降解MPs对蚯蚓的毒性高于传统石油基MPs。2）探究了丙烯腈-丁二烯-苯乙烯（ABS）-MPs对蚯蚓中十溴二苯乙烷（DBDPE）吸收累积的影响机制，发现MPs共存显著促进蚯蚓组织与表皮富集DBDPE；MPs对DBDPE的载体效应直接增强其在土壤-蚯蚓系统中的生物利用率，同时MPs通过影响蚯蚓的组织形貌、生理活动、基因表达间接促进蚯蚓对DBDPE的累积。3）揭示了生物基PLA-MPs和石油基PE-MPs老化对土壤-蚯蚓系统中DBDPE生物积累的影响及其机制。原始MPs与DBDPE的共同暴露促进了DBDPE在蚯蚓整个组织中的生物积累，然而老化后的 MPs 在28 天内减少了DBDPE 的生物积累。老化的PLA在蚯蚓肠道中表现出更大的DBDPE生物富集潜力，而老化的PE更可能在土壤中形成稳定的生物膜，从而提高DBDPE的体外载量和迁移风险。此外，利用同步辐射傅里叶显微红外（SR-FTIR）检测到组织中MPs上可能存在DBDPE，间接验证了MPs的载体效应。该研究为科学评估微塑料及其复合污染的生态环境风险提供理论依据。

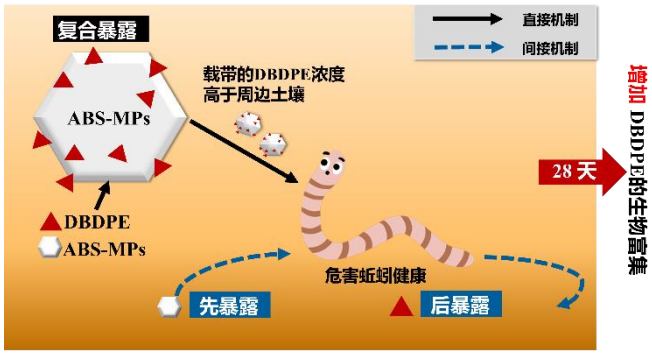


Fig. 1 Effect of microplastics on the bioaccumulation of decabromodiphenyl ethane in *Eisenia fetida*

关键词：微塑料；溴代阻燃剂；蚯蚓；生物积累；毒性效应

参考文献

[1] M. Fu, J. Tan, S. Zhou, S. Ling, S. Hu, Z. Qiao, Y. Han, W. Zhang*, C. Peng*. Insight into bioaccumulation of decabromodiphenyl ethane in Eisenia fetida increased by microplastics. Environmental Science & Technology, 2023, 57 (37): 13980-13990.

[2] M. Fu, J. Tan, S. Zhou, P. Liu, Z. Qiao, Y. Han, W. Zhang*, C. Peng*. Acrylonitrile butadiene styrene microplastics aggravate the threat of decabromodiphenyl ethane to Eisenia fetida: Bioaccumulation, tissue damage, and transcriptional responses. Science of the Total Environment, 2023, 889: 164303.

[3] Y. Han, M. Fu, J. Wu, S. Zhou, Z. Qiao, C. Peng, W. Zhang*, F. Liu, C. Ye, J. Yang*. Polylactic acid microplastics induce higher biotoxicity of decabromodiphenyl ethane on earthworms (Eisenia fetida) compared to polyethylene and polypropylene microplastics. Science of the Total Environment, 2023, 862:160909.

报告人简介：

彭程，华东理工大学副教授，博士生导师，生态环境部重点实验室成员，EEH 期刊青年编委，中国土壤学会环境微塑料工作组青年委员。博士毕业于浙江大学。入选上海市青年科技英才扬帆计

划。长期从事新污染物生态风险评估、土壤污染修复研究。主持国家自然科学基金、重点研发计划等 10 余项省部级以上课题。以第一和通讯作者在 Environ. Sci. & Technol.等国内外环境领域权威期刊上发表 SCI 论文 40 余篇，授权专利 6 项，研究成果多次入选北京同步辐射装置和上海光源年度亮点工作，并被国际权威学术新闻媒体 Chemistry Views 作为亮点报道。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

ParticleScout 颗粒-拉曼自动分析仪：微塑料研究的得力帮手

苏虹羊[1]，胡海龙[1,*]

[1] 牛津仪器科技（上海）有限公司，上海市徐汇区虹漕路 461 号 60 号楼，200030

*Email: hailong.hu@oxinst.com

摘要正文：研究表明，全球人均每周摄入将近 5 克的微塑料，这等同于一张信用卡所用的微塑料。微塑料对生态环境破坏及对人类健康的威胁已引起了人们的高度重视，被列入环境与生态科学研究领域的第二大科学问题，成为与全球气候变化、臭氧耗竭等并列的重大全球环境问题。　　WITec 的 ParticleScout 颗粒-拉曼自动分析仪完美集成了高端光学显微镜和共聚焦拉曼光谱技术，从微塑料形貌、尺寸和化学信息等全方位鉴定和归类，并逐渐发展成为微塑料快速准确分析的必备利器。快速获取大范围微塑料分布，准确标定微塑料颗粒几何形貌与尺寸，多参量数据统计分析；无缝衔接高灵敏度共聚焦拉曼系统，快速光谱采集，与拉曼数据库的直接对接分析和归类；此外，原位拉曼光谱及成像技术可应用于分析微塑料氧化的老化及裂解，在微生物、细胞及组织器官的危害作用及其对生态系统的作用机制。颗粒-拉曼自动分析仪对单个微塑料的快速精准的形貌和化学分析对建立更加完善科学的微塑料采样和快速鉴定标准有非常重要的意义。

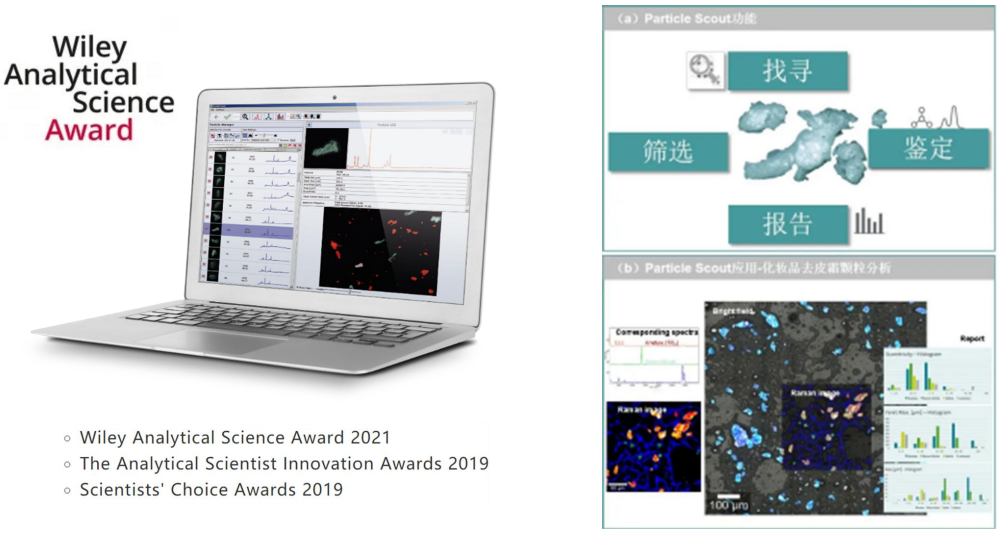


Fig. 1 Left：Awards for particleScout；Right： a）Fully automated particle analysis process；b）Cosmetic Peeling Cream Measurement；

关键词：微塑料；ParticleScout，颗粒，拉曼，自动分析

参考文献

[1] Thompson, R.C., et al., Lost at Sea: Where Is All the Plastic? Science, 2004. 304(5672): p. 838-838.3.
[2] Elert, et al., Comparison of different methods for MP detection: What can we learn from them, and why asking the right question before measurements matters? Environmental Pollution, 2017. 231.
[3] Dieing, T. and O. Hollricher, High-resolution, high-speed confocal Raman imaging. Vibrational Spectroscopy, 2008. 48: p. 22-27.

报告人/墙报展示人简介：

苏虹羊，毕业于吉林大学化学学院，现任牛津仪器 WITec 技术销售工程师，拥有多年拉曼光谱系统操作经验和丰富的拉曼光谱分析经验，为众多领域的客户提供个性化的应用解决方案。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

PET醇解产物制备离子凝胶材料研究

吕兴梅*，介星博，郝盼盼

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: xmlu@ipe.ac.cn

摘要正文：聚对苯二甲酸乙二醇酯（PET），已成为合成塑料中的第五大品种。其大量使用以及固废的巨量积累，PET的化学循环回收已成为研究者们关注的焦点。得益于PET分子链中具有的刚性芳环、酯基氢键位点等多种潜在活性组分，学界利用其降解产物的制备出一系列诸如聚氨酯、不饱和树脂以及水凝胶等各种高性能材料。基于此，我们利用PET的糖酵解过程，采用一锅法的策略制备了PET基离子凝胶电子皮肤。PET的丰富苯环以及离子凝胶的双网络结构有效地增强了其力学性能。形成的双网络离子通道将PET基离子凝胶的电导率提升至数倍，获得了优异的人体传感性能。此外，丰富的内部相互作用使得断裂的样品在室温处理后即可自愈。本研究为制备高性能柔性导电设备领域提供了简便低成本的解决方案，同时也为PET的高值化利用开辟了全新的视角。

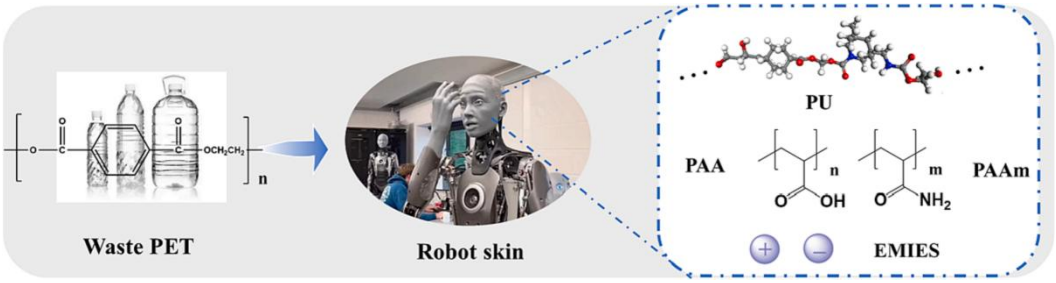


Fig. 1 Schematic diagram of PET conversion into ionicgels

关键词：PET；高值化回收；一锅法；离子凝胶

参考文献

[1] Y C Liu, X Q Yao, H Y Yao, Q Zhou, J Y Xin, X M Lu and S J Zhang. Degradation of poly(ethylene terephthalate) catalyzed by metal-free choline-based ionic liquids. Green Chemistry, 2020, 22, 3122-31.

[2] R Q Zhang, X Zheng, X Q Yao, K T Song, Q Zhou, C Y Shi, J L Xu, Y Li, J Y Xin, E E Sayed and X M Lu. Light-Colored rPET Obtained by Nonmetallic TPA-Based Ionic Liquids Efficiently Recycle Waste PET. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2023, 62, 11851-61.

[3] R Q P P Hao, R Q Zhang, K X Xu, X M Lu, Q Zhou, J Y Xin, J L Xu and Y Li. Valorization of waste plastics to prepare tough, stretchable and highly conductive ionicgels. Chemical Engineering Journal, 2024, 481, 148605.

报告人/墙报展示人简介：

吕兴梅，中国科学院过程工程研究所研究员，博士生导师，享受国务院政府津贴专家。长期致力于基于离子液体介质的资源/能源高效利用过程研究，包括离子液体数据库及物性研究、塑料循环回收及生物质分离转化等。获国家自然科学二等奖 1 项、省部级奖 5 项。Journal of Ionic Liquids 副主编及多个学术委员会委员等。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

Transport of Tire Wear Particles in Saturated Porous Media

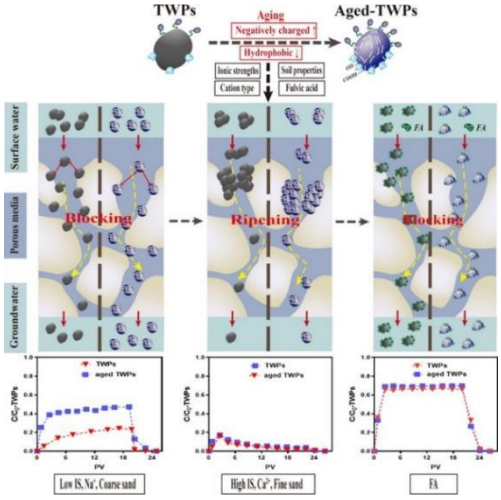
Jin Liu[1,*], Shaoxin Zi[1,2], Xiangtao Jiang[3]

[1] College of Marine and Environmental Sciences, Ministry of Education Key Laboratory of Marine Resource Chemistry and Food Technology, Tianjin University of Science & Technology, Tianjin, 300457 [2] State Key Laboratory of Pollution Control and Resource Reuse, School of the Environment, Nanjing University, Nanjing 210023 [3] Marine Science Institute, The University of Texas at Austin, Port Aransas, TX 78373, USA

*liujin@tust.edu.cn

The widespread distribution and potential adverse effects of tire wear particles (TWPs) on soil and groundwater quality pose a growing environmental concern. This study investigated the transport behavior of TWPs in saturated porous media and elucidated the underlying mechanisms influenced by environmental factors. Additionally, the effects of key environmental factors, such as aging, ionic strength, cation species, medium type, and natural organic matter (NOM), on the transport of TWPs were evaluated. The results showed that aging processes simulated through O_3 and UV irradiation altered the physicochemical properties of TWPs, increased the mobility of TWPs at low ionic strengths. However, the high ionic strengths and the presence of Ca^{2+} significantly inhibited the mobility of TWPs due to enhanced aggregation. The transport mechanism of the original and aged TWPs shifted from blocking to ripening under favorable retention conditions (i.e., high ionic strengths, divalent cations, and fine sands). Interestingly, the presence of fulvic acid (FA) inhibited the ripening of the three TWPs, significantly promoting their transport through a spatial site resistance mechanism. The two-site kinetic attachment model (TSKAM), extended Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek (XDLVO) theory, and colloid filtration theory (CFT) were applied to describe the transport behavior of the TWPs. The study provided a comprehensive understanding of the transport behavior of TWPs in groundwater environments, highlighting the environmental risks associated with their widespread distribution.[1]

Keywords：Transport; Tire wear particles; XDLVO theory



References

[1] S. Zi, D. Wu, Y. Zhang, X. Jiang, J. Liu, Insights into the controlling factors of the transport of tire wear particles in saturated porous media: The facilitative role of aging and fulvic acid, Sci. Total Environ. 2024, 951, 179665.

报告人/墙报展示人简介：

刘金，博士，天津科技大学海洋与环境学院，硕士生导师。主要从事纳米颗粒环境行为、土壤和地下水污染修复等方面的研究。主持国家级和省部级自然基金 4 项，参与国家自然科学基金项目多项。发表高水平 SCI 论文 10 余篇。天津市滨海新区海洋经济高质量发展智库专家，Carbon Research 期刊青年编委， Science of The Total Environment，Environment International，环境工程等期刊审稿人。获第二届全国博士后创新创业大赛铜奖等奖项。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

基于密度分离-氧化消解法前处理的土壤微塑料分析方法开发

姜晓旭[1] 谢福武[2] 封雪[1] 何书海[2] 田毓婷[2] 吴思怡[2*] 李名升[1*]

1. 中国环境监测总站，北京 100012

2. 海南省生态环境监测中心，海口 571126

*Email: 邮箱：lims@cnemc.cn）

摘要正文：目前，土壤环境中的微塑料已成为当前环保领域关注的焦点。作为一种固态有机聚合物，微塑料能在土壤中与土壤颗粒发生团聚现象，使之分布更加不均匀，加上土壤质地、有机质等影响，从土壤中分离和净化微塑料相较于其他环境介质更具挑战性[1,2]。当前，国内外关于土壤中微塑料检测技术的研究仍处于探索阶段，大多采用密度分离-氧化消解相结合的方法进行实验前处理[3]。该方法利用土壤与微塑料之间的密度差异，将干燥后的土壤通过加入高密度的饱和盐溶液，充分搅拌混匀，随后静置沉淀直至轻组分微塑料与重组分土壤杂质充分分层，最后收集上层溶液中的微塑料，再通过氧化剂消解进一步去除附着的有机质。在显微镜下或扫描电镜中分析微塑料颗粒的物理特征，并通过光谱、色谱和质谱等手段对微塑料进行定性分析，以确定其微塑料成分[4]。因此，本研究采用密度分离-氧化消解法对土壤中微塑料进行测定分析，主要包括了干燥温度、取样量、浮选剂、搅拌时长、沉降和离心条件以及消解时间等关键因素进行条件优化。本研究通过选用密度浮选法对土壤中的微塑料样品进行提取分离，再通过芬顿反应（0.05 mol/L的硫酸亚铁溶液和30 %过氧化氢溶液）对微塑料样品进行纯化分离，消解掉植物碎屑等有机杂质，得到疑似微塑料的目标物质，最后使用红外光谱对微塑料样品进行定性检测。本研究重点优化了密度分离-氧化消解法实验过程中影响土壤微塑料检测的多个关键因素，包括干燥温度、取样量、浮选剂、搅拌时长、沉降和离心条件及消解时间。

研究结果表明：

（1）为了防止微塑料样品在干燥处理过程中发生高温变性，并确保获得最佳的干燥效果，选择55 ℃作为干燥温度。

（2）鉴于微塑料在土壤中的分布具有不均匀性，取样量对于微塑料丰度检测结果具有较大影响。综合考虑，取样量在30～50 g之间更能代表土壤中微塑料的实际分布水平。

（3）碘化钠、氯化钠、氯化锌三种溶液的浮选效果存在差异。在本次试验中，碘化钠溶液（NaI）在大、小粒径的浮选效果方面，均表现得较为理想，且不影响后期的成分鉴定。

（4）搅拌时长、沉降时间、离心速率、消解时间都是影响微塑料从土壤中分离出来的重要因素。根据相应的实验结果，搅拌时长在4～6 min范围时最为理想，加标回收率整体趋于稳定；沉降时间24 h及以上（≥24 h），或以转速6000~8000 r/min范围离心10 min，能使土壤杂质与微塑料达到最佳分离效果；通过消解放置24 h可去除大多数有机杂质。

全过程具有简单、可操作性强、分离效果好的特点，且不易对微塑料造成二次破碎，可为今后制定土壤微塑料监测技术方法及规范、评估土壤中微塑料丰度分布提供可靠的依据。

关键词：土壤；微塑料；密度分离；氧化消解；检测方法；方法优化

参考文献

[1] THOMPSON R C, OLSEN Y, MITCHELL R P, et al. Lost at sea: where is all the plastic?[J]. Science, 2004, 304(5672): 838. DOI: 10.1126/science.1094559.

[2] WRIGHT S L, KELLY F J. Plastic and human health: a micro issue?[J]. Environmental Science and Technology, 2017, 51(12): 6634-6647.

[3] 苗令占,邓肖雅,杨铮等.微塑料的老化过程、产物及其环境效应研究进展[J].中国环境科学, 2023,43(11):6156-6171. DOI:10.19674/j.cnki.issn1000-6923.2023.0199.

[4] 姜晓旭,封雪,周笑白等.土壤中微塑料污染现状与检测技术研究进展[J].环境化学, 2023, 42(1): 163-175.

报告人/墙报展示人简介：

姜晓旭，从事土壤环境监测与新污染物监测等业务和科研工作。全国土壤污染状况详查国家级质控专家，全国典型行业企业周边土壤污染状况调查技术指导专家，主持/参与国家重点研发项目、国家自然科学基金等项目，主持制定多项国家生态环境监测标准和标准预研究项目，发表科技论文 30 余篇,发布 5 项标准规范，授权专利 4 项,出版专著 6 部。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

微塑料检测流程的关键点与光谱方法的应用

郑伟

岛津企业管理（中国）有限公司，北京市朝阳区朝阳门外大街 16 号，100020

bszw@shimadzu.com.cn

摘要正文：“微塑料”日益成为社会和学术研究的热门话题，从环境中的水、土壤、大气颗粒物，到日常生活饮用水、食物、药品，生物乃至人体代谢物和活体组织中，都陆续发现有尺寸、成分和来源各异的微塑料存在。对这些微塑料的有效检测，特别是对其成分的有效分析和鉴别，是后续来源确认和追溯，乃至污染控制和风险评估的重要依据。红外光谱仪、红外显微镜和拉曼显微镜等光谱技术，可以快速对各种尺寸微塑料样品进行定性鉴别，并为接下来可能需要的全面多技术手段分析提供关键的指导依据和方向。结合塑料热老化和光老化谱库，水和食品中常见异物谱库等岛津特色谱库的实战效果，分享对各类微塑料样品成分进行直接指认和溯源的案例。

关键词：微塑料;光谱;红外;拉曼

报告人/墙报展示人简介：

郑伟，2006 年毕业于天津大学生物医学工程与科学仪器系，2011 年加入岛津。现为岛津分析计测事业部市场部光谱产品经理，负责岛津中国光谱产品线的市场工作。具有十五年以上的分析仪器行业主流仪器厂家市场工作经历，在光谱领域有多年的理论结合实践的经验积累，对各类光谱技术的发展脉络和市场现状具有较为全面立体的认识。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

基于数字全息偏振成像技术的水体微塑料原位检测与识别

陆柔[1]，李香排[2]，李清毅[3]，董佳耀[1]，林志明[1]，吴学成[1*]

[1]浙江大学能源高效清洁利用全国重点实验室，浙江省，杭州市，310027

[2]浙江省天正设计工程有限公司，浙江省，杭州市，310000

[3]浙江省能源集团有限公司，浙江省，杭州市，310007

*Email: wuxch@zju.edu.cn

摘要：随着工业生产能力及人类消费水平的提高，塑料垃圾与日俱增，严重威胁全球水体、土壤、大气生态系统。微塑料粒径小、难降解，可通过食物链转移，极易成为有害污染物的载体，如重金属、持久性有机污染物[1,2]，对环境、野生动物以及人类健康构成极大威胁。近年来关于微塑料的研究和检测技术有所进展，目前尚无统一的标准检测方法[3]。数字全息技术以其高通量、无标记、高相干性和非侵入性等优势，在微塑料的检测和识别方面得到了有效应用[4]。然而，全息成像在微塑料识别上缺乏特异性，难以揭示其内在光学特性，因此有必要结合其他方法提高测量的准确性。微塑料的组织微结构差异导致其光学各向异性随成分变化，可通过分析光与微塑料颗粒相互作用时偏振态的变化对其组成成分进行区分，因此偏振成像技术在微塑料检测方面展现出巨大潜力[5]。

本研究采用数字全息显微与偏振成像技术，基于马赫曾德尔配置的独立参考光的同轴全息光路，通过分焦平面偏振相机采集偏振全息图像，同时提取微塑料的形态、纹理、偏振和全息特征。采用一种基于偏振参数，即线偏振度和偏振角的计算方法，用于量化各种聚合物成分的偏振特性。在此基础上，搭建了数字全息偏振成像实验系统，结合 UNet 神经网络模型检测水体中微塑料颗粒，采用 ResNet 神经网络模型对聚乙烯（PE）、聚丙烯（PP）、聚苯乙烯（PS）、聚对苯二甲酸乙二醇酯（PET）等聚合物成分进行识别，并区分微塑料与其他天然环境颗粒成分。实验结果表明，该数字全息偏振成像系统在微塑料的检测与识别方面具有多参数、高精度、快速识别等一系列技术优势，能够实现微塑料的形态测量、实时计数与识别分类，有助于明确水体中微塑料的来源和组成，为水体污染治理提供科学依据。

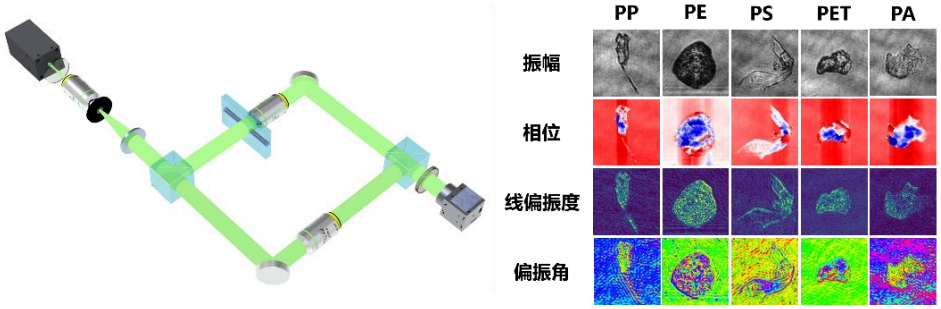


Fig 1 Schematic of the optical configuration and multi-parameter distribution of microplastics. (**Left**: Polarization-sensitive digital holographic microscope optical configuration, **Right**: Multi-parameter distribution of different microplastics)

关键词：微塑料、数字全息显微、偏振成像、检测与识别、神经网络模型

参考文献

[1] Koelmans A A, Redondo-Hasselerharm P E, Nor N H M, et al. Risk assessment of microplastic particles[J]. Nature Reviews Materials, 2022, **7(2)**: 138-152.

[2] Wang C, Zhao J, Xing B. Environmental source, fate, and toxicity of microplastics[J]. Journal of Hazardous Materials, 2021, **407**: 124357.

[3] Li J, Liu H, Paul Chen J. Microplastics in freshwater systems: A review on occurrence, environmental effects, and methods for

microplastics detection[J]. Water Research, 2018, **137**: 362-374.

[4] Běhal J, Valentino M, Miccio L, et al. Toward an All-Optical Fingerprint of Synthetic and Natural Microplastic Fibers by Polarization-Sensitive Holographic Microscopy[J]. ACS Photonics, 2022, **9(2)**: 694-705.

[5] Zhu Y, Li Y, Huang J, et al. Smart polarization and spectroscopic holography for real-time microplastics identification[J]. Communications Engineering, 2024, **3(1)**: 1-8.

报告人/墙报展示人简介：

陆柔，浙江大学能源工程学院，动力工程及工程热物理专业，硕士研究生，主要从事颗粒物的全息测量与分类识别研究。

报告人/墙报展示人是否为学生：是

焦平面阵列检测器成像结合人工智能算法快速识别微塑料

徐媛

布鲁克（北京）科技有限公司，北京市海淀区西小口路 66 号中关村东升科技园 B-6 号楼 C 座，100192

Email: yuan.xu@bruker.com

摘要正文：近年来，显微红外成像技术由于其高速、高灵敏度、分子指纹等特性已经成为了分析微塑料颗粒的最好方法之一。颗粒物可以被迅速识别、计数和分类，还可以给出面积，尺寸，长宽比的柱状分布图。布鲁克公司推出FPA焦平面阵列检测器成像结合机器人智能（AI）学习算法，打破了传统显微成像和分析的概念，在速度、空间分辨率、回收率上有明显突破，对红外光谱信噪比要求也大大降低。通过FPA显微红外成像可达到900张/s的速度，整张滤膜（10mm直径）全扫描分析只需要一个小时，可以识别小至5微米的微塑料颗粒。机器人智能（AI）学习算法对微塑料样本前处理要求更低，抗干扰性更强，准确率更高。

该方案采用样本全自动扫描的测试方法，相对视觉寻找颗粒的方法，不会丢失衬度较低或者透明颗粒，而且不需要进行复杂的环境样本前处理工作。解决了传统视觉寻找颗粒，手动检测颗粒对检测数量的限制，并且提高了显微红外检测微塑料样品的精度、尺度和速度。

关键词：微塑料全自动检测；显微红外成像；FPA检测器；机器学习算法

Fig.1 LUMOS II infrared microscope（left）； Results of infrared imaging of soil samples（Right）

报告人/墙报展示人简介：

徐媛，2012 年毕业于华东理工大学有机化学专业，获得硕士学位，从事分子光谱分析工作十年，曾于中国科学院化学研究所工作六年（非学生），现任布鲁克光谱部门应用工程师，此次带来了布鲁克公司全自动的超快速的微塑料分析方案。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

安捷伦8700 LDIR激光红外成像光谱仪微塑料自动定性定量测试解决方案

王晶晶

安捷伦科技（中国）有限公司，上海市虹口区四川北路 1350 号，200200

*Email: jing-jing.wang@agilent.com

摘要正文：安捷伦8700 LDIR激光红外成像系统，是一种新的红外成像方法。8700 LDIR使用采用QCL量子级联激光器，能量比传统的高个数量级以上，可以对大多数的样品得到高质量的反射成像结果，激光光源本身可以发射单色光，不需要单色器或者干涉仪等分光系统，光源直接到样品，可以达到高分辨率的效果。搭配MCT探测器和快速扫描光学器件，这种组合模式不仅可获得高质量的谱图，还可以大大加快检测速度，主要用于环境、材料、生命科学、化学化工等领域的定性定量的成像分析。红外成像可以对聚合物进行定性定量分析，因此极其适合微塑料的研究。安捷伦为微塑料测试开发的全自动化分析流程，可在测试的同时获得微塑料的定性匹配结果、尺寸信息及数量等统计信息。将传统红外几天分析的工作量缩短到几小时，大大提高了测试效率。

Fig. 1 Agilent 8700 LDIR Chemical Imaging System

关键词：量子级联激光器；红外成像系统；自动定性定量测试

参考文献

[1] Jia, W. et al. Automated Identification and Quantification of Invisible Microplastics in Agricultural Soils. Science of The Total Environment 2022, 844, 156853.

[2] Samandra, S. et al. Microplastic Contamination of an Unconfined Groundwater Aquifer in Victoria, Australia. Science of The Total Environment 2022, 802, 149727. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.149727

报告人/墙报展示人简介：

王晶晶，安捷伦分子光谱资深应用工程师，负责安捷伦红外、紫外、拉曼、荧光等产品的技术支持，
包括应用开发、培训等工作。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

利用热分析法TED-GC-MS和PY-GC-MS测定环境样品中微塑料

Jackie Whitecavage, John R. Stuff, Janet Liu, Yandengxia

哲斯泰（上海）贸易有限公司，乘峰（北京）科学仪器有限公司

*Email:yandengxia0903@163.com

摘要正文：海洋、湖泊和其他水源中的塑料、微塑料和纳米塑料污染是一个有据可查的问题。贝类和鱼类吸收这些颗粒是污染物进入食物链并可能造成不利影响的途径之一。微塑料和纳米塑料通常用作市售产品的磨料。它们最终通过排水处理进入环境，因为它们在废水处理过程中并不总是能被有效去除。拉曼光谱和红外光谱通常用于识别，但塑料材料中使用的染料有时会妨碍使用这些技术进行识别。这项工作展示了使用热分析法包括热裂解-气相色谱-质谱法（PY-GC-MS）以及热萃取解吸-气相色谱-质谱法（TED-GC-MS）用于识别环境中微塑料。符合环境中微塑料分析标注 ISO 24178：2023中的热分析法。

关键词：微塑料；热分析；热裂解-气相色谱-质谱法；热萃取解吸-气相色谱-质谱法

微塑料的可视化方法、装置、电子设备、存储介质和程序产品

汤博崇*，姜菲菲，岛圭介，李晓东

岛津企业管理（中国）有限公司，北京市朝阳区朝阳门外大街 16 号，100020

spktangbc@shimadzu.com.cn

摘要正文：微塑料是指直径小于5mm的塑料碎片和颗粒。近年来，以微塑料为代表的新型污染物受到的国际社会关注度持续提升，《环境署2014年年鉴》和《评估塑料的价值》报告指出，塑料污染威胁到了海洋生物的生存以及旅游业、渔业和商业的发展，引起了人们对微塑料的广泛关注，已经有大量研究报道表明，微塑料对海洋生态以及生物和人类健康存在持久的、确定和不确定的危害。随着微塑料污染关注度的提升和其生态效应研究的深入，也对其研究手段也提出了更高的需求。

化学成像是将具有空间分辨能力的谱学信息与位置信息分析进行有机结合的表征技术，通过获取来自被测样品形貌、表面等信息进而表征其相关的物理和化学性质。化学成像主要包括光谱成像、质谱成像、核磁共振成像等，其中光谱成像是通过使用不同波长的入射光照射样品表面空间位点，收集所产生的反馈信号，构建反映样品表面化学和物理特性的图像，以用于样本的成分组成及浓度、晶型、空间排布、颗粒形态与尺寸大小等性质的分析等。拉曼光谱是通过入射光（通常为激光）照射样品表面，进而收集与入射光频率不同的散射光谱进行分析以得到分子振动、转动方面信息，并应用于分子结构研究的一种分析方法。拉曼光谱作为一种散射光谱，具有很多优点和特点，例如：1.相比较于荧光光谱，其谱带更窄，光谱分辨率更高；2.相比较于荧光光谱，其抗光漂白稳定性更强；3.相比较于红外光谱，水对其干扰十分微弱等等。但由于拉曼散射信号产生过程中，极易受到同样来自实际样本中所产生的荧光信号干扰（荧光干扰强度较拉曼信号通常高几个数量级），因而极大限制了其在环境及生物等实际体系中的检测及成像应用。

本工作以富含浮游生物的天然湖泊水、水产食品以及动物细胞等实际环境、食品与生物体系中的微塑料为重点研究对象，通过使用显微拉曼光谱成像技术对这些实际体系中的微塑料进行化学成像分析，同时借助图像处理软件算法对微塑料图像信号进行抗荧光干扰处理，从而获得实际体系中的微塑料高特异性、高分辨率的可视化成像图像。

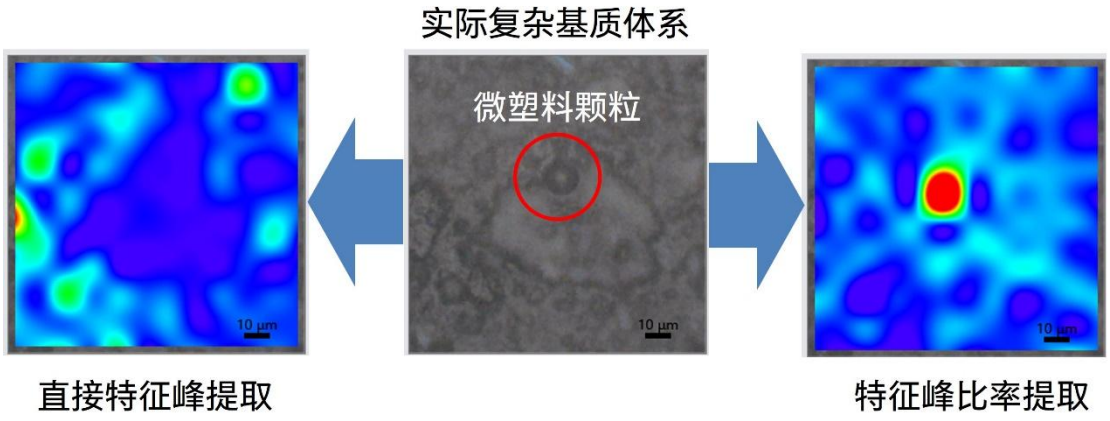


图1 实际复杂基质体系中的微塑料化学成像——通过特征峰比率提取过滤高干扰荧光背景

关键词：微塑料；拉曼光谱；可视化；图像处理软件算法

第 19 分会场：药物制剂与粒子设计

多功能纳米系统调控髓系来源抑制细胞增强肿瘤放射免疫治疗

王琼微[1]，邹雯[1]，赵秀[1,*]，刘军杰[1,*]

[1]郑州大学药学院，河南省郑州市科学大道 100 号，450001

*Email: 2041899460@qq.com

摘要：

恶性肿瘤严重威胁人类生命健康，传统疗法无法完全根除肿瘤，并具有毒副作用。放射治疗作为一种肿瘤治疗手段，在临床治疗中已被广泛应用，它利用高能X射线直接或间接诱导DNA损伤，导致肿瘤细胞死亡[1-3]。研究表明，放疗可以激活$CD8^+$T细胞介导的适应性免疫，也可激活cGAS-STING通路介导的先天性免疫清除未辐照的远端转移灶[4]。然而，放疗介导的远端肿瘤消退在临床中并不常见。放疗会引发大量肿瘤细胞凋亡，巨噬细胞对凋亡肿瘤细胞的识别触发免疫抑制细胞因子的释放，从而抑制炎症并阻止抗原呈递树突状细胞的成熟[5]。焦亡作为一种免疫原性细胞死亡模式，肿瘤抗原和促炎细胞因子会迅速释放到细胞外环境，触发炎症性肿瘤微环境[6-7]，增强肿瘤免疫治疗的疗效。除了细胞凋亡介导的放疗免疫抑制，研究表明，放疗会招募大量髓系来源抑制细胞（MDSCs）进入肿瘤组织，MDSCs通过分泌抗炎细胞因子，如转化生长因子-β使T细胞失活，从而抑制放疗免疫。目前常用的治疗策略是利用吉西他滨或5型磷酸二酯酶抑制剂直接消除MDSCs[8]，然而，直接消除MDSCs具有自身免疫性疾病的风险[9]，从而阻碍了这些治疗方法的广泛应用。

基于上述研究背景，本课题针对细胞凋亡免疫沉默及放疗招募大量MDSCs抑制免疫疗效这一难题，基于铁蛋白独特的空腔结构和可逆性的解离与重组装等优良特性，利用铁蛋白包载DNA甲基转移酶抑制剂地西他滨（DAC），通过乏氧键将装载DAC的铁蛋白纳米粒（Ft@DAC）自组装，在组装的过程中顺势包封全反式维甲酸（ATRA），构建Ft@DAC@ATRA纳米系统（简称FD@ATRA）。FD@ATRA纳米系统可通过铁蛋白的肿瘤靶向特性在肿瘤组织高效蓄积，随后响应肿瘤乏氧环境降解，释放ATRA和Ft@DAC。Ft@DAC可借助铁蛋白的肿瘤靶向功能进入肿瘤细胞，在微酸的肿瘤微环境中释放的DAC可上调焦亡相关蛋白GSDME的表达，将放疗诱导的细胞凋亡转变为焦亡，有效释放肿瘤抗原和促炎因子；同时ATRA可以促进MDSCs分化，重塑肿瘤免疫抑制微环境，高效激活放疗免疫。

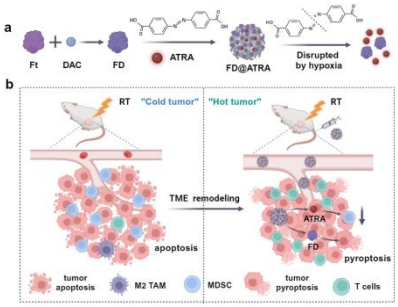


Fig. 1 Schematic of FD@ATRA enhancing tumor radioimmunotherapy by regulating myeloid derived suppressor cells

关键词：放射治疗；肿瘤微环境；髓系来源抑制细胞；纳米系统；免疫抑制

参考文献

[1] M. A. D'ANDREA , G. K. REDDY . The systemic immunostimulatory effects of radiation therapy producing overall tumor control through the abscopal effect. Journal of Radiation Oncology, 2019, 8(2): 143-156

[2] P A. D. GARG , P. AGOSTINIS . ER stress, autophagy and immunogenic cell death in photodynamic therapy-induced anti-cancer immune responses. Photochemical & Photobiological Sciences, 2014, 13(3): 474-487

[3] H. F. LUO, W. MA, Q. CHEN, et al. Radiotherapy-activated tumor immune microenvironment: Realizing radiotherapy-immunity combination therapy strategies. Nano Today, 2023, 53:102042

[4] S. C. FORMENTI , S. DEMARIA. Systemic eff ects of local radiotherapy . The Lancet ,2009,7(10):718-726

[5] Weichselbaum R R, Liang H, Deng L R. R. WEICHSELBAUM ,H. LIANG , L. F. DENG , et al. Radiotherapy and immunotherapy: a beneficial liaison?. Nature Reviews Clinical Oncology, 2017, 14(6): 365-379

[6] W. NGWA , O. C. IRABOR O, J. D. SCHOENFELD , et al. Using immunotherapy to boost the abscopal effect. Nature Reviews Cancer, 2018, 18(5): 313-322

[7] E. B. GOLDEN, D. FRANCES,I. PELLICCIOTTA, et al. Radiation fosters dose-dependent and chemotherapy-induced immunogenic cell death. OncoImmunology, 2014, 3(4):e258518

[8] E. A. REITS , J. W. HODGE , C. A. HERBERTS , et al. Radiation modulates the peptide repertoire, enhances MHC class I expression, and induces successful antitumor immunotherapy. The Journal of Experimental Medicine, 2006, 203(5): 1259-1271

[9] J. M. HU , C. BERNATCHEZ , L. F. ZHANG , et al. Induction of NKG2D Ligands on Solid Tumors Requires Tumor-Specific CD8+ T Cells and Histone Acetyltransferases. Cancer Immunology Research, 2017, 5(4): 300-311

报告人/墙报展示人简介：

王琼微，女，1999 年 9 月出生，郑州大学药学院 2023 级博士研究生。2021 年在郑州大学药学院获学士学位后继续攻读硕士学位。于 2023 年硕博连读，继续在郑州大学药学院攻读博士学位，任郑州大学药学院博士研究生党支部组织委员，在读期间每年均获得河南省研究生一等学业奖学金。2023 年 9 月入选第三届全国研究生学术研讨会优秀论文，并做大会报告，荣获优秀口头报告奖。

附：报告人：王琼微　郑州大学药学院　学生　2041899460@qq.com

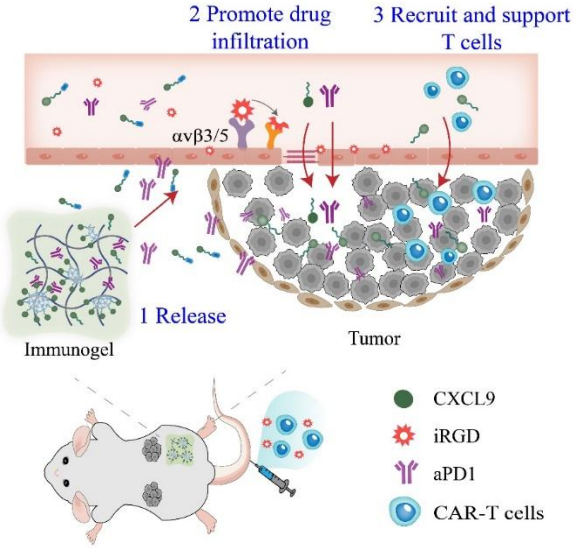
Chemokine-based Injectable Navigation System for Enhancing CAR-T Cell Therapy Against Solid Tumors

Wenjun Wan[1], Jin Chen[1], Yiran Zheng[1,*]

[1]College of Pharmaceutical Sciences, Soochow University, 199 Ren Ai Road, Suzhou, 215123

* yrzheng@suda.edu.cn

Chimeric antigen receptor (CAR)-T cell therapy has demonstrated poor efficacy for solid tumors. Low number and poor functional persistence of CAR-T cells in tumor are the main limiting factors[1]. Here we developed a Chemokine-based Injectable platform for enhancing adoptive T cells' Efficacy (CITE) to boost the function of CAR-T cells[2]. CITE consists of peritumorally-injected immunogel co-loading chemotactic CXCL9 particles with PD-1 antibody (aPD1) and intravenously-infused tumor-penetrating peptide iRGD. Immunogel formed drug depots and allowed sustained release of cargo peritumorally while iRGD facilitated tumor infiltration of gel-released drugs, thus remarkably increasing the amount of CXCL9 and aPD1 in tumor. CITE induced effective chemotactic gradient to promote the tumor-specific migration of CAR-T cells and boosted the function of infiltrated T cells by blocking immunosuppresion via a two-in-one approach. Consequently, CITE yielded a 218-fold increase in the intratumoral number of transferred T cells and substantially improved the efficacies of transferred T cell receptor (TCR)-T cells and CAR-T cells in multiple syngeneic tumor models, including immunologically "cold" tumor, in immunocompetent mice. More importantly, CITE enhanced systemic anti-tumor immunity and elicited immune memory, enabling CITE to treat multimodal, metastatic and recurrent tumors. CITE provides a new platform to enhance adoptive T cell's tumor homing and function. CITE is broadly applicable to adoptive cell therapies involving CAR-T or TCR-T cell.



Keywords: CAR-T cell therapy, solid tumor, controlled release, submicro-particles, hydrogel

References

[24]D.J. Irvine, M.V. Maus, D.J. Mooney, W.W. Wong. The future of engineered immune cell therapies. Science 378:6622 (2022), 853-858.

[25]W.J. Wan, W.Q. Han, J. Chen, Y.J. Li, L. Zhao, M.Q. Gao, C. Shen, N. Liu, W.H. Deng, S.Q. Ma, L.F. Cheng, Y.R. Zheng, Chemokine-based injectable navigation system for enhancing CAR-T cell therapy against solid tumors, Adv. Funct. Mater. (2024) 2401161

报告人简介：

郑毅然教授先后从美国约翰霍普金斯大学和美国麻省理工学院获得本科和博士学位。在新加坡科技

研究局（A*STAR）从事科研工作后加盟苏州大学药学院。郑教授曾荣获多个国家级和省市级人才项目，主持国家自然科学基金、国家生物药技术创新中心细胞疗法“揭榜挂帅”项目等。多年来结合免疫、材料工程、肿瘤生物和生物科技研发了用于增强 CAR-T 细胞疗效的多个智能药物颗粒递送平台、癌症纳米疫苗等。成果以第一或通讯作者发表于 Nat Biotechnol、Adv Mater、Adv Funct Mater、ACS Nano、J Control Release 等国际期刊，他引 3000 余次（google scholar）。3 项专利转让中美癌症免疫疗法公司，基于相关技术的公司旗舰产品在美国开展 I 期临床试验。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

报告人：刘贵金，海南大学药学院，副教授（非学生），liugj@hainanu.edu.cn

右旋布洛芬 pH 响应肠溶微球的连续构建及其儿童干混悬剂的研究

刘贵金*，吕水燕，李捷，安东羽，刘妤欣，邓世明

海南大学 药学院，热带生物资源教育部重点实验室，海南 海口 570228

*Email: liugj@hainanu.edu.cn

摘要正文：随着我国三孩放开和顶层政策的支持，儿童适宜改良型新药的研发成为热点，具有极大的市场空间。感冒发烧是儿童常见疾病，尤其是在后疫情时代。布洛芬作为儿童退烧的首选药物，其右旋体（dexibuprofen, DXI）具有更强的药效，在安全性和药动学特性方面更具优势。然而，DXI存在口感差、溶解度低、易引起胃部不适和儿童适宜剂型不足等问题。本研究以应用前景广阔的玉米醇溶蛋白（zein）为基材，复合聚丙烯酸树脂（Eudragit L100）作为pH响应肠溶开关，对DXI进行微封装；在常规透析法的基础上，建立反溶剂膜渗析新技术，实现了DXI微球的连续构建；结合先进的体内外实验方法和现代表征技术，对载材-方法-结构-性能间的关系进行了探讨。结果显示，优化后样品为1～3μm的光滑微球，DXI以无定形态被很好的包封于载材内，在模拟胃液2 h内溶出< 10%，而在模拟肠液中可快速响应释放。在此基础上，通过配方优化，制得儿童适宜的DXI干混悬剂。DXI干混悬剂口感佳，粒度分布均匀，ζ电位在-40 mV左右，具有较好的稳定性，沉降体积比和再分散性符合药典要求。此外，以某市售DXI口服混悬液为参比，对自制干缓悬剂大鼠灌胃给药后的体内药物动力学进行了研究，数据显示自制DXI干混悬剂T_{max}（0.25 h）小于市售制剂（0.5 h），半衰期$t_{1/2}$由0.298 h延长至0.345 h，且C_{max}有所提高，表明相较于市售制剂，自制的DXI干混悬剂起效快，生物利用度更高。本研究基于创新性制剂技术初步实现了DXI的掩味、增溶和肠道快速响应释药，为DXI改良型新药的开发奠定了基础，同时为其他儿童药物的研发提供参考，具有重要的理论意义和应用价值。

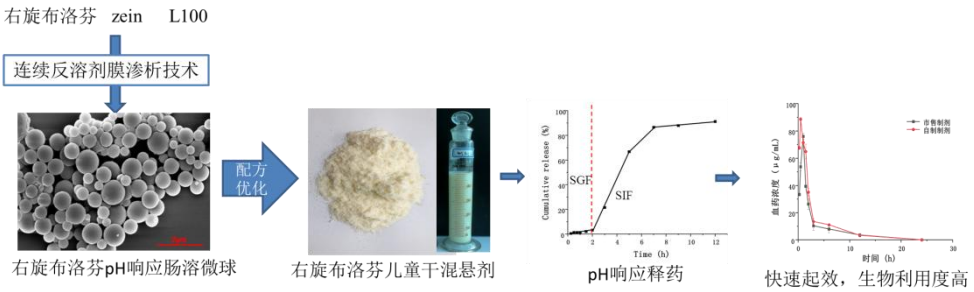


Fig. 1 Dexibuprofen loaded zein microspheres with Eudragit® L100 as fast-onset switch for pediatric antipyretic

关键词：右旋布洛芬；肠溶微球；干混悬剂；连续制备

参考文献

[1] Gliszczynska A, Sanchez-Lopez E. Dexibuprofen Therapeutic Advances: Prodrugs and Nanotechnological Formulations [J]. Pharmaceutics, 2021, 13(3): 414.

[2] Xia YN, Li XH, Xu JH, et al. Optimization and characterization of novel sustained release supermicro-pellet based dry suspensions that load dexibuprofen [J]. J. Drug Deliv. Sci. Technol., 2020, 55: 101420.

[3] Liu G, An D, Li J, et al. Zein-based nanoparticles: Preparation, characterization, and pharmaceutical application [J]. Front. Pharmacol., 2023, 14: 1120251.

[4] Liu G, Wei D, Wang H, et al. Self-assembly of zein microspheres with controllable particle size and narrow distribution using a novel built-in ultrasonic dialysis process [J]. Chem. Eng. J., 2016, 284: 1094-1105.

[5] Du Y, Zhai Y, Zhang J, et al. Development and evaluation of taste-masked dry suspension of cefuroxime axetil for enhancement of oral bioavailability [J]. Asian J. Pharm. Sci., 2013, 8(5): 287-294.

[6] Chen Y, Liu Y, Wu C, et al. Dry Suspension Containing Coated Pellets with pH-Dependent Drug Release Behavior for the Taste-masking of Azithromycin [J]. AAPS PharmSciTech, 2022, 24(1): 21.

报告人简介：

刘贵金（1989—），海南大学药学院，副教授，博/硕士生导师，海南省高层次人才。主要从事药物优势制剂的研发，通过多年的努力，建立了实验、表征和模拟分析相结合的研究手段和方法，围绕载药微纳米粒子的功能化设计、可控构建和体内命运分析等展开研究。目前，已基于超临界流体技术和自研喷雾反溶剂自组装技术等，实现了药物纳米晶体、脂质体、固体分散体和 zein 基微纳米粒子等多种制剂的制备；并结合现代分析技术对操作参数的影响机制、颗粒的形成机理、载体材料的改性机理、药物控释放及靶向机制等进行了深入研究。相关研究获国家自然科学基金、海南省自然科学基金等项目支持。近年来，在 *Chem. Eng. J.*、*Chem. Eng. Sci.*、*Food Funct.*、*Ind. Crop. Prod.*、*Ind. Eng. Chem. Res.*、*J. CO_2 Util.*、*Pharmaceutics*、*Particuology* 等国际期刊发表论文 20 余篇，申请发明专利多项。

附：报告人为海南大学药学院教师，非学生：

Polydopamine-Coated Multifunctional Calcium Carbonate Nanoparticles for Image-Guided Tumor Therapy

Guihao Hu [1], Zhike Li [2], Jiang Zhu [1*]

[1]Sichuan Key Laboratory of Medical Imaging, North Sichuan Medical College, Sichuan

[2]Department of Oncology, Affiliated Hospital of North Sichuan Medical College, Sichuan

Email:15678923081@163.com

In the field of oncology, nanoparticles have emerged as a vital drug delivery vehicle due to their distinctive physicochemical properties[1]. This research is dedicated to the development of a multifunctional nano-platform that integrates diagnostic and therapeutic capabilities, aiming to enhance the precision of cancer treatment and minimize side effects. Hollow calcium carbonate nanoparticles with a hollow structure, fabricated through a gas diffusion method [2], have been utilized for efficient drug encapsulation and delivery. These nanoparticles, featuring a hollow architecture, exhibit pH-responsive degradation characteristics[3]. Specifically, at a pH of 5.6, the nanoparticles rapidly release the hypoxia-activated prodrug Tirapazamine (TPZ), with an 80% release within 30 minutes, thus potentiating the efficacy of a single drug administration.

Furthermore, the nanoparticles are coated with polydopamine (PDA), which endows the platform with superior photothermal conversion capabilities. Under conditions of low concentration (150 μg/mL) and low power density (1.25 W/cm²), the nanoparticles are capable of locally increasing the temperature to 53°C, effectively enhancing the thermotherapy impact on tumor cells. Concurrently, the phenolic hydroxyl groups present on PDA offer binding sites for the Mn-DOPA-EDTA[4] magnetic resonance imaging (MRI) contrast agent. Leveraging MRI technology, we can dynamically track the in vivo distribution of the nanoparticles and ascertain the optimal tumor enrichment period, which is 6 hours for these nanoparticles, facilitating precise image-guided photothermal therapy.

In conclusion, the polydopamine-coated hollow calcium carbonate nanoparticles developed in this study enable rapid drug release within the acidic tumor microenvironment and, when combined with dual-modality image-guided photothermal therapy, present a novel strategy for the precise treatment of cancer.

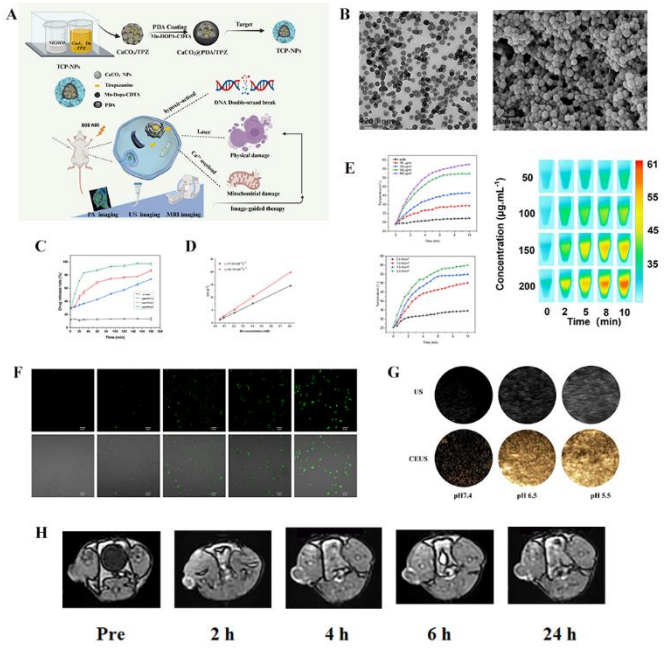


Figure 1. (A) Schematic illustration of the synthesis and therapeutic application of the nano system; (B) TEM and SEM images of the nanoparticles; (C) Release profile of TPZ under different pH conditions; (D) In vitro imaging capability of the nanoparticles (relativity measurement); (E) In vitro photothermal ability assessment of the nanoparticles; (F) Cellular uptake experiment (calcium ion concentration measurement at different time points); (G) In vitro ultrasound imaging (ultrasound signal comparison at three different pH levels); (H) In vivo MR imaging in mice.

Keywords: Polydopamine, Hollow Calcium Carbonate, Photothermal Therapy, Ultrasound Imaging, Magnetic Resonance Imaging

References

1. Boedtkjer E, Pedersen SF. The Acidic Tumor Microenvironment as a Driver of Cancer. *Annu Rev Physiol*. **2020**;82:103-126.
2. Min KH, Min HS, Lee HJ, et al. pH-controlled gas-generating mineralized nanoparticles: a theranostic agent for ultrasound imaging and therapy of cancers. *ACS Nano*. **2015**;9(1):134-145.
3. Dong Z, Feng L, Hao Y, et al. Synthesis of Hollow Biomineralized CaCO3-Polydopamine Nanoparticles for Multimodal Imaging-Guided Cancer Photodynamic Therapy with Reduced Skin Photosensitivity. *J Am Chem Soc*. **2018**;140(6):2165-2178.
4. Cao W, Yang J, Zhu C, et al. Carbonic Anhydrase IX Targeting Mn(II)-Based Magnetic Resonance Molecular Imaging Probe for Hypoxia Tumors. *Bioconjug Chem*. **2023**;34(6):1166-1175.

报告人简介：胡桂豪，硕士在读，现就读于川北医学院放射医学专业，主要研究方向为诊疗一体化纳米药物的研发，SCI 两篇在投，参与自然科学青年基金一项。

Biomimetic Nanovaccine for Antitumor Therapy

Man Li [1], Jiao He[1], Dong Chen[1], Xiaoli Ling[1], Qin He [1,*]

[1]Key Laboratory of Drug-Targeting and Drug Delivery System of the Education Ministry and Sichuan Province, West China School of Pharmacy, Sichuan University, Chengdu, 610041

* manli@scu.edu.cn

Outer membrane vesicles (OMVs) secreted by Gram-negative bacteria are considered to be natural immune adjuvants carrying abundant pathogen-associated molecular patterns. OMVs have the advantages of nanoscale size, favorable safety profile, and more importantly the adjuvanticity which activates immune responses. Photothermal therapy not only eliminates tumor but also releases tumor associate antigens (TAA) and serves as potent in situ tumor vaccine. To target tumor and maximize tumor-specific immune responses, we contemplated immunotherapy combined with photothermal agent in an attempt to amplify the immune stimulation efficacy and tumor inhibition. To address the lack of targeting, platelets were innovatively introduced as "couriers".

Here we constructed OMVs-based in situ nanovaccine (IR780-SLN@O-P) encapsulating the photothermal agents IR780. And P-selectin-targeting peptide PSN which binds to activated platelets was inserted into the lipid layer of the OMVs. Platelets in tumor-bearing mice acted as the "couriers" backpacking the IR780-SLN@O-P nanoparticles, which tend to the tumor site. External laser irradiation turned on photothermal immunotherapy, resulting in a notable increase in the maturation level of dendritic cells, infiltration of CD8+ T cells and secretion of anti-tumor cytokines, which ultimately markedly slowed down the growth of the tumors and prolonged the survival of the mice. We applied IR780-SLN@O-P in situ nanovaccine to triple-negative breast cancer model and expect to alter the therapeutic dilemma of "cold" tumors. R780-SLN@O-P nanoparticles bind to activated platelets in the bloodstream and subsequently reach the tumor site. The photothermal agents produce TAA under laser irradiation and synergize with the natural adjuvant component OMVs, to generate a high level of anti-tumor immunity. For "cold" tumors such as triple-negative breast cancer (TNBC), IR780-SLN@O-P in situ nanovaccine successfully prolonged the survival of 4T1 bearing mice, significantly suppressed the tumor growth, and facilitated the maturation of dendritic cells and the infiltration of intra-tumoral CD8+ T cells. We hope that the exploration of OMVs as adjuvant and the combination of TAA induction can be some references for the development of in situ vaccine against TNBC.

Keywords: bacterial outer membrane vesicles, photothermal therapy, immunotherapy, platelets

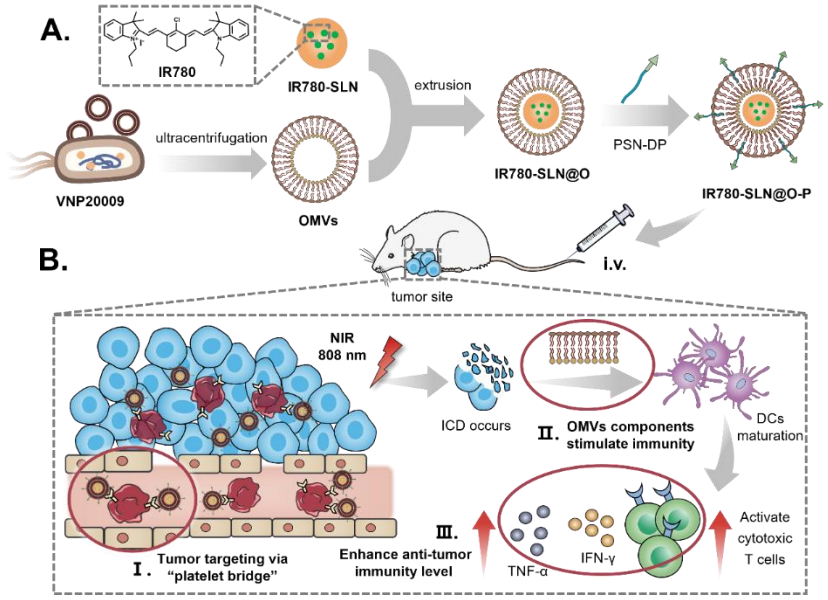


Fig. 1. Construction and mechanisms of IR780-SLN@O-P in situ nanovaccine.

References

[1] X.S. Li, J.F. Lovell, J. Yoon, X.Y. Chen, Clinical development and potential of photothermal and photodynamic therapies for cancer, Nature Reviews Clinical Oncology, 2020, 17, 657-674.

[2] C. Schwechheimer, M.J. Kuehn, Outer-membrane vesicles from Gram-negative bacteria: biogenesis and functions, Nature Reviews Microbiology, 2015, 13, 605-619.

[3] C.M.J. Hu, R.H. Fang, K.C. Wang, B.T. Luk, S. Thamphiwatana, D. Dehaini, P. Nguyen, P. Angsantikul, C.H. Wen, A.V. Kroll, C. Carpenter, M. Ramesh, V. Qu, S.H. Patel, J. Zhu, W. Shi, F.M. Hofman, T.C. Chen, W.W. Gao, K. Zhang, S. Chien, L.F. Zhang, Nanoparticle biointerfacing by platelet membrane cloaking, Nature, 2015, 526, 118-121.

报告人/墙报展示人简介：

李曼，四川大学华西药学院副教授，入选四川省卫生健康中青年骨干人才计划，近五年以第一作者或通讯作者身份发表 SCI 论文 20 篇，主持国家自然科学基金 2 项，四川省科技厅项目 2 项，中国博士后基金 2 项，校级项目 2 项，作为骨干参与自然基金重大项目 1 项。主要从事基于新型递送系统的肿瘤免疫微环境调控研究以及核酸递药系统设计。

报告人非学生

报告人：姚雨琪；工作单位：郑州大学；学生；联系邮箱：3440838352@qq.com

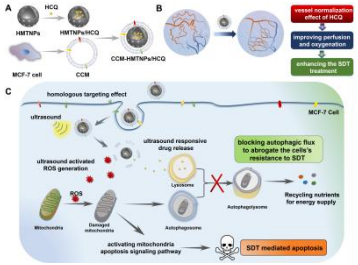
Cancer cell membrane-biomimetic nanoplatform for enhanced sonodynamic therapy on breast cancer via autophagy regulation strategy

Yuqi Yao [1], X.W. Z. [1], J. Z. [1], Q.H. F. [1,*]

[1]School of Pharmaceutical Sciences, Zhengzhou University, 100 Kexue Avenue, Zhengzhou 450001, China

*3440838352@qq.com

Autophagy was considered as a double-edged sword that might cooperate, aggravate or antagonize apoptosis. We found that the sonodynamic therapy (SDT) in low dosage induced autophagy might function as a survival pathway for breast cancer and exhibited resistance to SDT mediated apoptosis. In this sense, it was highly desired to enhance SDT via autophagy regulation strategy. Herein, we reported a biomimetic nanoplatform based on hollow mesoporous titanium dioxide nanoparticles (HMTNPs) by autophagy inhibitor (hydroxychloroquine sulphate, HCQ) loading and cancer cell membrane (CCM) coating. Owing to the biomimetic surface functionalization, the CCM-HMTNPs/HCQ could escape from macrophage phagocytosis, actively recognize and “home” to tumor by homologous targeting ability. Afterwards, the released HCQ in response to ultrasound stimulus was capable of blocking autophagic flux and cutting off the nutrients supply derived from the damaged organelles, which was anticipated to abrogate the cells’s resistance to SDT. Meanwhile, the vessel normalization effect of HCQ alleviated the tumor hypoxia, which was bound to enhance the oxygen-dependent HMTNPs mediated SDT treatment. Based on the above findings, it was undoubtedly logical that CCM-HMTNPs/HCQ would sensitize breast cancer cells to SDT via autophagy regulation strategy, which held a great promise in cancer treatment.



Scheme 1 Schematic of the cancer cell membrane biomimetic nanoplatform.

Keywords: sonodynamic therapy; hollow mesoporous titanium dioxide; autophagy regulation; biomimetic; homologous targeting

References

[1] W. Yue, L. Chen, L. Yu, B. Zhou, H. Yin, W. Ren, C. Liu, L. Guo, Y. Zhang, L. Sun, K. Zhang, H. Xu, Y. Chen, Checkpoint blockade and nanosonosensitizer-augmented noninvasive sonodynamic therapy combination reduces tumour growth and metastases in mice, Nat. Commun. 2019, 10, 2025.

[2] L. Wang; Y. Hu; Y. Hao; L. Li; C. Zheng; H. Zhao; M. Niu; Y. Yin; Z. Zhang; Y. Zhang. Tumor-targeting core-shell structured nanoparticles for drug procedural controlled release and cancer sonodynamic combined therapy, JJ. Control. Release 2018, 286, 74-84.

[3] Q. Feng; Y. Li; X. Yang; W. Zhang; Y. Hao; H. Zhang; L. Hou; Z. Zhang. Hypoxia-specific therapeutic agents delivery nanotheranostics: A sequential strategy for ultrasound mediated on-demand tritherapies and imaging of cancer, J. Control. Release 2018, 275, 192-200.

报告人：刘佳；工作单位：郑州大学；学生；联系邮箱：2726427158@qq.com

PPy nanoneedles based nanoplatform capable of overcoming biological barriers for synergistic chemo-photothermal therapy

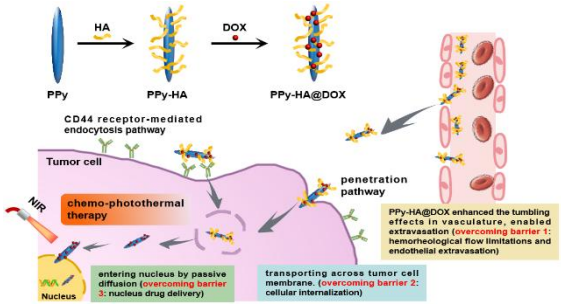
Jia Liu[1], Q. W.[1], Y.Q.Y.[1],C.F. Z.[1,*]

[1] School of Pharmaceutical Sciences, Zhengzhou University, Zhengzhou, Henan, 450001, China

*Email: 2726427158@qq.com

Abstract

The biological barriers in vivo limited the site-specific bioavailability and impeded therapeutic efficacy. To tackle these issues, the nonspherical particles with the shape effect have drawn wide attention to affect the in vivo translocation of drug delivery system. Herein, we constructed a nanoplatform based on polypyrrole (PPy) nanoneedles by hyaluronic acid (HA) modification and doxorubicin (DOX) loading. The PPy-HA@DOX nanoneedles with high aspect ratios could enhance the extravasation through the fenestrated vasculature of tumors, transport across tumor cell membrane via endocytosis mechanism or even penetrated the membrane directly, and ultimately enter nucleus easily via the nuclear pore complex by passive diffusion. With the ability of overcoming biological barriers, the PPy nanoneedles based nanoplatform would deliver drugs into the organelles more effectively. Under near infrared (NIR) laser irradiation, PPy as the photothermal agent could lead to tumor cellular structure damage for photothermal therapy (PTT). Therefore, PPy-HA@DOX developed here would exploit the merits of synergistic combination of chemo-photothermal therapy, which would pave the way toward more effective nanotherapeutics.



Scheme 1. Schematic illustration of PPy-HA@DOX capable of overcoming biological barriers for synergistic chemo-photothermal therapy.

Keywords: polypyrrole nanoneedles; shape effect; biological barriers.

References

[1] J. Zhou, P. Luo, C. Sun, et al., A “win–win” nanoplatform: TiO_2:Yb,Ho,F for NIR light-induced synergistic therapy and imaging, Nanoscale 2017,9, 4244-4254..

[2] Y.J. Liu, P. Bhattarai, Z.F. Dai and X.Y. Chen, Photothermal therapy and photoacoustic imaging via nanotheranostics in fighting cance,Chem. Soc. Rev 2019, 48, 2053-2108.

报告人：王晴；工作单位：郑州大学；学生；联系邮箱：1944192429@qq.com

Cascade catalytic nanoplatform based on “butterfly effect” for enhanced immunotherapy

Qing Wang[1], Y.Q. Y [1], X.W. Z[1], Q.H. F[1*]

[1]School of Pharmaceutical Sciences, Zhengzhou University, 100 Kexue Avenue, Zhengzhou 450001, P. R. China

*E-mail: 1944192429@qq.com

Abstract: The unique tumor microenvironment (TME) characteristics such as immunosuppression impeded traditional cancer treatments. In contrast, developing cascade catalytic nanoplatforms by fully making use of substances in TME for cancer therapy might deserve full credit. Herein, we developed a cascade catalytic nanoplatform based on glucose oxidase (GOD) modified mesoporous iron oxide nanoparticles (IONP) loaded with Artemisinin (ART), which was designed as IONP-GOD@ART. GOD could catalyze the oxidization of glucose into gluconic acid and H2O2, which not only realized tumor starvation therapy, but also provided H2O2 for IONP mediated Fenton reaction. Simultaneously, mesoporous IONP would release Fe2+ and Fe3+ ions in acidic TME. On one hand, iron ions underwent Fenton reaction to generate hydroxyl radicals for chemodynamic therapy. On the other hand, the endoperoxide bridge in ART was broken in presence of Fe2+ and further generated reactive oxygen species (ROS) to achieve therapeutic purpose. In this sense, IONP-GOD@ART manipulated TME characteristics and led to “butterfly effect”, which brought out a large amount of ROS for eliciting immunogenic cell death, inducing M1-TAMs polarization, and further reprogramming immunosuppressive TME for enhanced immunotherapy. By this delicate design, the cascade catalytic nanoplatform of IONP-GOD@ART would realize potent cancer immunotherapy for tumor regression and metastasis prevention.hese instructions give you guidelines for preparing a one-page abstract for The 12th China Congress on Particle Technology (CCPT12) will be held both online and offline (Haikou, China), August 19-22, 2022. This event is hosted by Chinese Society of Particuology.

Keywords: cascade catalysis; immunotherapy; glucose oxidase; Fenton reaction

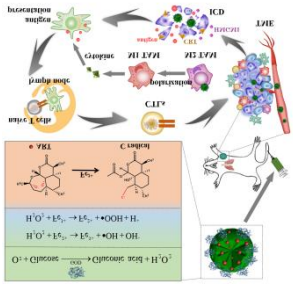


Fig. 1 Schematic mechanism of IONP-GOD@ART for enhanced immunotherapy.

References

[1] Y.F. Zhang, Y.C. Yang, S.S. Jiang, F. Li, J. Lin, T.F. Wang, P. Huang, Degradable silver-based nanoplatform for synergistic cancer starving-like/metal ion therapy, Mater. Horiz. 2019, 6, 169.

[2] H. Ranji-Burachaloo, P.A. Gurr, D.E. Dunstan, G.G. Qiao, Cancer Treatment through Nanoparticle-Facilitated Fenton Reaction, ACS Nano 2018, 12, 11819.

[3] H.J. Zhang, L. Hou, X.J. Jiao, Y.D. Ji, X.L. Zhu, Z.Z. Zhang, Transferrin-mediated fullerenes nanoparticles as Fe2+-dependent drug vehicles for synergistic anti-tumor efficacy, Biomaterials 2015, 37, 353.

报告人：司冰茜；工作单位：郑州大学；学生；联系邮箱：18898125580@163.com

The Dissolution, Reassembly and Further Clearance of Amyloid-β Fibrils by Tailor-designed Dissociable Nanosystem for Alzheimer's Disease Therapy

bingqian Si[1]，H.M.Z[1]，J.L[1]，*Q.H.F*[1,*]

[1]School of Pharmaceutical Sciences, Zhengzhou University, 100 Kexue Avenue, Zhengzhou 450001, China

*Email: 18898125580@163.com

Abstract： The fibrillation of amyloid-β (Aβ) is the critical causal factor in Alzheimer's disease (AD), the dissolution and clearance of which are promising for AD therapy. Inspired by molecular chaperone that disassembles Aβ fibrils, artificial chaperone is an attractive alternative, however, its design is challenging due to the demand for high Aβ-binding selectivity/affinity. Here, clustered nanochaperone is tailor-designed with controllable size and surface chemistry. In response to AD microenviroment, clustered nanochaperone decomposes into ultra-small nanochaperones, exposing more binding sites available for interaction with Aβ. Based on point-to-point matching with Aβ strategy, nanochaperone captures Aβ with multiple interactions, including convelent linkage formed by nucleophilic substitution reaction. Such high Aβ-binding selectivity/affinity allows the reduction of Aβ-Aβ interactions to disassemble Aβ fibrils. More than that, monomeric Aβ after fibrils dissolution and nanochaperones reassemble into Aβ&nanochaperone composite. The in situ reassembly pattern achieves Aβ receptor-mediated drug delivery into microglia, and further Aβ clearance by normalizing microglial dysfunction. Overall, clustered nanochaperone realizes cascaded targeted Aβ and microglia for dissolution/reassembly/clearance of Aβ fibrils. After treatment, the Aβ burden, neuroinflammation, and cognitive impairments are relieved in mice. The point-to-point matching strategy provides a clue to nanochaperone design in amyloid diseases, showing meaningful insight in biomedicine.

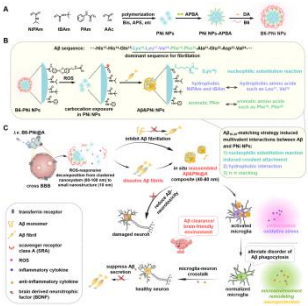


Fig. 1. Schematic showing the preparation and therapeutic effect of tailor-designed dissociable nanosystem.

Keywords: Alzheimer's disease, amyloid-β, dissociable nanosystem, neuroinflammation.

References

[1] a) M. Willem, M. Fandrich, Science 2022, 375, 147; b) H. Hampel, J. Hardy, K. Blennow, C. Chen, G. Perry, S.H. Kim, V.L. Villemagne, P. Aisen, M. Vendruscolo, T. Iwatsubo, C.L. Masters, M. Cho, L. Lannfelt, J.L. Cummings, A. Vergallo, Mol. Psychiatr. 2021, 26, 5481.

[2] a) J. E. Gestwicki, G. R. Crabtree, I. A. Graef, Science 2004, 306, 869; b) R. Freilich, T. Arhar, J.L. Abrams, J.E. Gestwicki, Acc. Chem. Res. 2018, 51, 940.

[3] a) I. Javed, G. Peng, Y. Xing, T. Yu, M. Zhao, A. Kakinen, A. Faridi, C.L. Parish, F. Ding, T.P. Davis, P.C. Ke, S. Lin, Nat. Commun. 2019, 10, 3780; b) Y.J. Chung, C.H. Lee, J. Lim, J. Jang, H. Kang, C.B. Park, ACS Nano 2020, 14, 16973.

报告人：赵晓雯；工作单位：郑州大学；学生；联系邮箱：1913331031@qq.com

Cascade catalytic nanoplatform for ions interference therapy

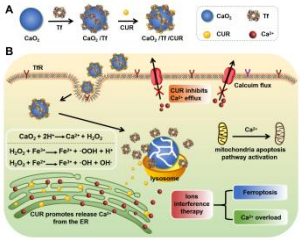
Xiaowen Zhao[1], Jia Zhang[1], Liying Sun[1], Qianhua Feng[1,*]

[1]School of Pharmaceutical Sciences, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001

[*]E-mail: 19133331031@qq.com

Abstract

Intracellular ions played prominent part in cell function and behavior. Disrupting intracellular ions homeostasis might switch ions signal from "regulating" to "destroying". Inspired by this, we introduced the ions interference strategy for tumor therapy. Herein, curcumin (CUR) and transferrin (Tf) co-loaded calcium peroxide nanoparticles (CaO_2 NPs) were formulated. With tumor targeting ability of Tf-receptor-positive, CaO_2/Tf/CUR pinpointed tumor cells and then instantaneously decomposed in acidic lysosomes, concurrently accompanying with the release of Ca^{2+} and CUR, as well as the production of H_2O_2. Then H_2O_2 not only damaged structure of Tf to release Fe^{3+}, but also converted to hydroxyl radicals via ferric ions mediated Fenton reaction for ferroptosis. In addition, the released Ca^{2+} and CUR induced Ca^{2+} overload via exogenous and endogenous calcium ions accumulation, respectively, further activating mitochondria apoptosis signaling pathway for cell injury. Notably, normal cells were unaffected due to their neutral environment to prevent calcium and ferric ions release. Therefore, based on calcium and ferric ions interference strategy, the cascade catalytic CaO_2/Tf/CUR offered synergistic combination of ferroptosis, Ca^{2+} overload therapy and chemotherapy, which held a great promise in cancer treatment.



Scheme 1. A) Formulation of CaO_2/Tf/CUR. B) Schematic mechanism of cascade catalytic nanoplatform for ions interference therapy via Ca^{2+} overload and ferroptosis.

Keywords: ions interference; cascade catalytic; calcium overload; ferroptosis; calcium peroxide

References

[1] S.T. Gao, Y. Jin, K. Ge, et al, Link of impaired metal ion homeostasis to mitochondrial dysfunction in neurons, Adv. Sci. 2019 , 6 , 1902137.

[2] T. Lopez-Hernandez, D. Puchkov, E. Krause, et al, Endocytic regulation of cellular ion homeostasis controls lysosome biogenesis, Nat. Cell. Biol. 2020 , 22 , 815-827.

[3] K.E. Dineley, T.V. Votyakova, I.J. Reynolds, et al, Zinc inhibition of cellular energy production: implications for mitochondria and neurodegeneration, Neurochem. 2003 , 85 , 563-570.

[4] M. Zhang, R.X. Song, Y.Y. Liu, et al, Calcium-Overload-Mediated Tumor Therapy by Calcium Peroxide Nanoparticles, Chem-Us. 2019, 5 , 2171-2182.

报告人：张佳；工作单位：郑州大学；学生；联系邮箱：1041535711@qq.com

A Metabolic Intervention Strategy to Break Evolutionary Adaptability of Tumor for Reinforced Immunotherapy

Jia Zhang[1], Liying Sun[2], Bingqian Si[3], Qianhua Feng[1,*]

[1]School of Pharmaceutical Sciences, Zhengzhou University, 100 Kexue Avenue, Zhengzhou ,450001

Emal*: 1041535711@qq.com

Abstract

The typical hallmark of tumor evolution is metabolic dysregulation. In addition to secreting immunoregulatory metabolites, tumor cells and various immune cells display different metabolic pathways and plasticity. Harnessing the metabolic differences to reduce tumor and immunosuppressive cells while enhance the activity of positive immunoregulatory cells is a promising strategy. We develop a nanoplatform (CLCeMOF) based on cerium metal-organic framework (CeMOF) by lactate oxidase (LOX) modification and glutaminase inhibitor (CB839) loading. The cascade catalytic reactions induced by CLCeMOF generate reactive oxygen species “storm” to elicit immune responses. Meanwhile, LOX mediated metabolite lactate exhaustion relieves the immunosuppressive tumor microenvironment, preparing the ground for intracellular regulation. Most noticeably, the immunometabolic checkpoint blockade therapy as a result of glutamine antagonism is exploited for overall cells mobilization. It is found that CLCeMOF inhibits glutamine metabolism dependent tumor cells and immunosuppressive cells, increases infiltration of dendritic cells, and especially, reprograms $CD8^+$ T lymphocytes with considerable metabolic flexibility toward a highly activated, long lived and memory-like phenotype. Such idea intervenes both metabolite (lactate) and cellular metabolic pathway, which essentially alters overall cell fates toward the desired situation. Collectively, the metabolic intervention strategy is bound to break evolutionary adaptability of tumor for reinforced immunotherapy.

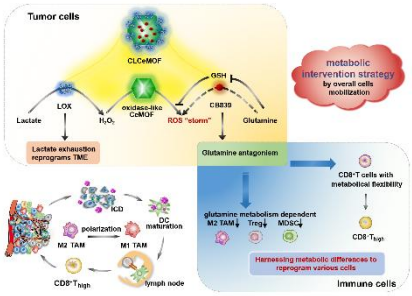


Fig. 1 Schematic mechanism of CLCeMOF to break evolutionary adaptability of tumor. Metabolically intervention strategy hererin reinforced immunotherapy by overall tumoral cells mobilization.

Keywords: metabolic intervention, immunotherapy, glutamine metabolism

References

[1]I. Kaymak, K. S. Williams, J. R. Cantor, R. G. Jones, Immunometabolic Interplay in the Tumor Microenvironment. Cancer Cell 2021, 39, 28-37.

[2]D. Kolb, N. Kolishetti, B. Surnar, S. Sarkar, S. Guin, A. S. Shah, S. Dhar, Metabolic Modulation of the Tumor Microenvironment Leads to Multiple Checkpoint Inhibition and Immune Cell Infiltration.ACS Nano 2020, 14, 11055-11066.

报告人：周慧敏；工作单位：郑州大学；学生；联系邮箱：2979552946@qq,com

Nanoparticle cluster depolymerizes and removes amyloid fibrils for Alzheimer's disease treatment

HuiMin Zhou[1], J. L[1] ,Q. W[1,*]

[1]School of Pharmaceutical Sciences, Zhengzhou University, 100 Kexue Avenue, Zhengzhou 450001, China

*Email:2979552946@qq.com

ABSTRACT: Aberrant amyloid-β (Aβ) fibrillation is the key event in Alzheimer's disease (AD), the depolymerization and removal of which are being pursued with enthusiasm. Herein, a nanoparticle cluster is designed for amyloid-matching based on point-to-point strategy to prevent amyloid fibrillation. After reaching AD nidus, this cluster decomposes into ultra-small nanoparticles, and exposes more binding sites in different types to match with Aβ sequence via multivalent binding. Notably, AD microenvironment sensitive nucleophilic substitution reaction generates strong covalent linkage between nanoparticle and amyloid, which ensures high binding specificity/affinity. The strong binding event competitively reduces amyloid-amyloid interactions thereby disintegrating amyloid fibrils. Not only that, monomeric Aβ after fibrils depolymerization and nanoparticles reassemble into nanoparticle&Aβ composite. Such composite realizes Aβ receptor mediated precise rapamycin delivery into microglia, further normalizing microglial immunologic dysfunction for Aβ removal and brain-friendly environment. This system interferes with amyloid fate, rescues memory deficits in AD.

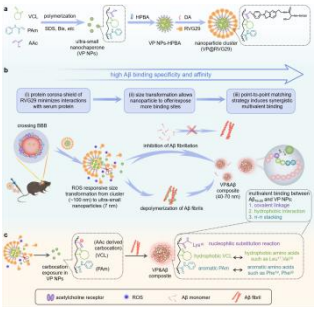


Fig. 1. Design and mechanism of nanoparticle cluster (VP@RVG29). A) Construction of VP@RVG29. The surface conjugation with HPBA induces nanoparticle (VP NPs) to aggregate into nanocluster, and then facilitates DA and RVG29 modification to form nanoparticle cluster (VP@RVG29). B) Schematic showing that VP@RVG29 depolymerizes Aβ fibrils with high Aβ binding specificity and affinity. (i) VP@RVG29 is *i.v.* injected into mice, the RVG29 modification on VP NPs protects binding sites on VP NPs from serum protein, while ensuring BBB crossing via acetylcholine receptor mediated transcytosis. (ii) High level of ROS in AD microenvironment triggers cleavage of HPBA structure, allowing VP@RVG29 (~100 nm) to decompose into ultra-small VP NPs (~7 nm). Such size transformation controllably offers/exposes more binding sites for Aβ. (iii) VP NPs capture Aβ via point-to-point matching strategy induced multivalent interactions, disassemble Aβ fibrils into monomer, and finally generate VP&Aβ composite. C) Schematic illustration of binding mechanism between Aβ and VP NPs. Along with ROS responsive cleavage of HPBA structure, VP@RVG29 throws off RVG29 protein and exposes multiple binding sites, including AAc derived electrophilic carbocation (purple), hydrophobic VCL and tBAm side chains (green) and aromatic PAm side chain (blue). These segments realize $A\beta_{16\text{-}20}$-matching based on physicochemical characteristics. In detail, AAc derived electrophilic carbocation allows the attack of amine nucleophile (lysine, Lys^{16}) by nucleophilic substitution reaction in biological condition. Hydrophobic VCL and tBAm side chains recognize hydrophobic amino acids such as leucine (Leu^{17}), valine (Val^{18}) through hydrophobic interactions. Aromatic PAm side chain captures amino acids such as phenylalanine (Phe^{20}) through π-π stacking.

Keywords: Alzheimer's disease, amyloid fibrils, microglia, reassembly

References

[1] P. Scheltens, B. De Strooper, M. Kivipelto, H. Holstege, G. Chételat, C.E. Teunissen, J. Cummings, W.M. van der Flier, Alzheimer's

disease, Lancet 2021, 397 , 1577-1590.

[2] M. Willem, M. Fandrich, A molecular view of human amyloid-β folds, Science 2022, 375, 147-148.

[3] D. Li, C. Liu, Conformational strains of pathogenic amyloid proteins in neurodegenerative diseases, Nat. Rev. Neurosci. 2022, 23, 523–534.

[4] H. Wu, M. Fuxreiter, The structure and dynamics of higher-order assemblies: amyloids, signalosomes, and granules. Cell 2016, 165, 1055-1066.

报告人：孙丽英；工作单位：郑州大学；学生；联系邮箱：2056249649@qq.com

Immunosuppressive triangle depletion through the combination punches strategy for enhanced immunotherapy

Liying Sun[1], B.Q. S.[1], H.M. Z.[1],Q.H. F.[1,*]

[1]School of Pharmaceutical Sciences, Zhengzhou University, 100 Kexue Avenue, Zhengzhou 450001, China

*Email: 2056249649@qq.com

Abstract: Tumor immunotherapy non-responders often have high levels of tumor-associated macrophages (TAMs), circulating myeloid-derived suppressor cells (MDSCs), and regulatory T cells (Tregs), which forms a vicious "immunosuppressive triangle" to promote tumor growth and metastasis.To overall deplete the immunosuppressive triangle, a pH/matrix metalloproteinase-2 (MMP2) dual responsive nanoplatform was constructed. The acidic sensitive poly β-amino esters-polyethylene glycol nanoparticles (PAE-PEG NPs) loaded with liver-X-receptor agonist GW3965 were prepared, and then were decorated with MMP2 sensitive M2-TAMs targeted apoptotic peptides (PEP) to obtain GW3965@PAE-PEG-PEP (GW@PPP). As one punch, the MMP2 cleaved PEP segments induced M2-TAMs apoptosis specifically. As another punch, the acidic responsive GW3965 release promoted immunoregulatory apolipoprotein E (ApoE) transcription, further inhibiting the survival of MDSCs, tumor cells and endothelial recruitment. In addition, Tregs, the formation and recruitment of which was related to MDSC and TAMs, were suppressed subsequently. Overall, the GW@PPP directly drove immunosuppressive triangle depletion and effectively prevented tumor growth and metastasis.

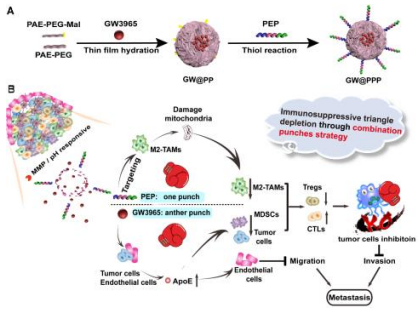


Fig. 1. Design and mechanism ofdual responsive nanoplatform (GW@PPP).

Keywords: Liver-X-receptor agonist, apolipoprotein E, immunosuppressive triangle, immunotherapy

References

[1]Y.R. Murciano-Goroff, A.B. Warner, J.D. Wolchok The future of cancer immunotherapy: Microenvironment-targeting combinations. *Cell Res*.2020,30: 507-519.

[2]D. Chen, J. Xie, R. Fiskesund, W. Dong, X. Liang, J. Lv, X. Jin, J. Liu, S. Mo, T. Zhang, F. Cheng, Y. Zhou, H. Zhang, K. Tang, J. Ma, Y. Liu Chloroquine modulates antitumor immune response by resetting tumor-associated macrophages toward M1 phenotype. *Nat. Commun*.2018,9: 873.

[3]C.C. Lee, J.C. Lin, W.L. Hwang, Y.J. Kuo, H.K. Chen, S.K. Tai, C.C. Lin, M.H. Yang Macrophage-secreted interleukin-35 regulates cancer cell plasticity to facilitate metastatic colonization. *Nat. Commun*.2018,9: 3763.

[4]I. Vitale, G. Manic, L.M. Coussens, G. Kroemer, L. Galluzzi Macrophages and metabolism in the tumor microenvironment. *Cell Metab*.2019,30:36-50.

吸气装粉过程中颗粒密度及形状对粉末流动影响的实验分析

李润梓[1],钟文镇[1,*],冯天豪[1],吴国庆[1]

[1]济南大学机械工程学院，山东 济南，250022

*Email: me_zhongwz@ujn.edu.cn

摘要：装粉工艺是制药片剂生产中的一个关键环节，片剂的重量和含量均匀性以及生产效率受粉体特性以及工艺条件的影响。本研究聚焦于阐明颗粒密度及形状对装粉效率的影响作用，明确吸气装粉模式对装粉效果的具体影响。为此，我们设计了吸气式直线充装粉系统，该系统主要由控制模块、装粉模块、吸气模块组成。基于吸气式直线充装粉系统实施了针对 5 种（不同形状与密度）粉体的对比试验，分别考察其在吸气与未吸气条件下的填充行为。装粉效率通过临界填充速度的概念进行评估。研究发现，相较于非吸气条件，吸气装粉模式显著提高了粉体的临界填充速度。进一步分析发现，材料密度越低，临界填充速度的提升幅度越大，特别是对于 PP 粉、玻璃粉及白刚玉粉等低密度材料，其提升率可达 90%至 100%。而针对不同形状的铁粉，吸气与否对装粉过程形态影响有限，特别是在送料靴速度超过 200 mm/s 后，两者的填充率提升趋势趋于一致。

关键词：吸气式直线充装粉系统，装粉，粉体特性，临界填充速度，装粉效率

参考文献

[1] 宋玉萍, 李芳, 郭菁. 粉末成型技术创新及其发展现状[J]. 中国有色金属, 2015(19): 66-67.

[2] Y. Guo, C.Y. Wu, K.D. Kafui, et al. 3D DEM/CFD analysis of size-induced segregation during die filling. Powder Technology. 2011;206 (1-2):177-188.

[3] Y. Guo, K. D. Kafui,C. Y. Wu, et al. A coupled DEM/CFD analysis of the effect of air on powder flow during die filling. AIChE Journal. 2008;55 (1):49-62.

[4] O. Coube, A. C. F. Cocks, C. Y. Wu. Experimental and numerical study of die filling, powder transfer and die compaction[J]. Powder Metallurgy, 2005, 48(1): 68-76.

[5] R. Cabiscol, H. Shi, I. Wünsch, et al. Effect of particle size on powder compaction and tablet strength using limestone[J]. Advanced Powder Technology, 2020, 31(3): 1280-1289.

[6] R. C. Rowe, P. York, E. A. Colbourn, et al. The influence of pellet shape, size and distribution on capsule filling—A preliminary evaluation of three-dimensional computer simulation using a Monte-Carlo technique[J]. International Journal of Pharmaceutics, 2005, 300(1): 32-37.

[7] P. Lindskog. The future of ferrous PM In Europe[J]. Powder Metallurgy, 2004, 47(1): 6-9.

[8] C. Bierwisch, T. Kraft, H. Riedel, et al. Die filling optimization using three-dimensional discrete element modeling[J]. Powder Technology, 2009, 196(2): 169-179.

[9] A. Zakhvatayeva, W. Zhong, H. A Makroo, et al. An experimental study of die filling of pharmaceutical powders using a rotary die filling system[J]. International Journal of Pharmaceutics, 2018, 553(1): 84-96.

[10] R. Mendez, F. Muzzio, C. Velazquez. Study of the effects of feed frames on powder blend properties during the filling of tablet press dies[J]. Powder Technology, 2010, 200(3): 105-116.

[11] C. Y. Wu, A. Cocks, O. T. Gillia. Die filling and powder transfer[J]. int.j.powder metallugy, 2003.

[12] C. Y. Wu, L. Dihoru, A. C. F. Cocks. The flow of powder into simple and stepped dies[J]. Powder Technology, 2003, 134(1): 24-39.

[13] C. Y. Wu, A. C. F. Cocks. Flow behaviour of powders during die filling[J]. Powder Metallurgy, 2004, 47(2): 127-136.

[14] D. Tong, G. Vivek, S. Hamid, et al. Correlations between segregation intensity and material properties such as particle sizes and adhesions and novel methods for assessment[J]. Powder Technology. 2021;387 (0):215-226.

[15] Y. Wu,Q. Zheng,H. Zhu, et al. A micro-macro constitutive relationship for the pressure of solid phase in dense fluid-particle flows in hopper[J]. Powder Technology. 2024;434 (0):119268-119268.

[16] A. Zakhvatayeva, C. Hare, C. Y. Wu. Size-induced segregation during die filling[J]. International Journal of Pharmaceutics: X. 2019;1

(0):100032-100032.

[17] L. R. Lawrence, J. K. Beddow. Powder segregation during die filling[J]. Powder Technology, 1968, 2: 253-259.

[18] J. A. Drahun, J. Bridgewater. The mechanisms of free surface segregation[J]. Powder Technology, 1983, 36:39-53.

[19] 吴晶晶, 蔡杰, 高亚东, 等. 基于 CFD-DEM 模腔填充过程中颗粒分离行为分析[J]. 中国粉体技术, 2022, 28(04): 90-99.

[20] Y. Guo, C. Y. Wu, C. Thornton. The effects of air and particle density difference on segregation of powder mixtures during die filling[J]. Chemical Engineering Science, 2011, 66(4): 661-673.

[21] W. Bian, X. Chen, J. Wang. A critical comparison of two-fluid model, discrete particle method and direct numerical simulation for modeling dense gas-solid flow of rough spheres[J]. Chemical Engineering Science, 2019, 210: 115233.

[22] 石欣琳. 吸气式装粉的 CFD-DEM 曳力模型优化及耦合模拟研究[D].济南大学,2024.

[23] J. Doucet, F. Bertrand, J. Chaouki. A measure of mixing from lagrangian tracking and its application to granular and fluid flow systems[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2008, 86(12), 1313–1321.

[24] S. Oka, A. Sahay, W. Meng, et al. Diminished segregation in continuous powder mixing[J]. Powder Technology. 2017;309 (0):79-88.

[25] T. F. Zhang, J. Gan, D. Pinson, et al. Size-induced segregation of granular materials during filling a conical hopper[J]. Powder Technology. 2018;340 (0):331-343.

[26] J. Zhang, Y. Tan, X. Xiao, et al. Comparison of roller-spreading and blade-spreading processes in powder-bed additive manufacturing by DEM simulations[J]. Particuology. 2022;66 (0):48-58.

[27] 钟文镇, 何克晶, 周照耀, 等. 粉末材料堆积的物理模型与仿真系统[J].物理学报,2009,58(S1):21-28.

[28] 钟文镇, 昃向博, 李国平, 等.球形玻璃珠填充模腔的流动特性试验[J].中国粉体技术,2019,25(06):32-37.

第一作者简介：

姓名：李润梓

学历：硕士研究生(学生)

研究方向：气固两相流的 CFD－DEM 分析

通讯作者简介：

姓名：钟文镇

学历：博士

职称：副教授

研究方向：气固两相流的 CFD－DEM 分析

国家自然科学基金青年基金，51605192

中国博士后科学基金第 57 批面上资助项目，

基金项目：2015M571635

山东省中青年科学家科研奖励基金，

BS2015NJ009

抗阿尔茨海默病系列纳米药物研发

常津 1* 窦妍 2 杨帆 1 刘逸宁 1

1 天津大学生命科学学院纳米生物医学研究所

2 天津医科大学总医院

摘要正文：

阿尔茨海默病（AD）是最常见的神经退行性疾病，然而目前尚无有效的治疗方法。本团队结合纳米药物在 AD 治疗中的独特优势，通过精准设计和组装有效提高抗 AD 治疗效果。其系列研究聚焦于：（1）类酶催化活性的纳米颗粒：通过构建抗氧化多靶点普鲁士蓝纳米酶，根据不同病程差异化的氧化应激水平调节给药策略，实现 AD 发病的延缓和治疗。（2）特异性靶向的纳米颗粒：通过纳米药物表面修饰特异性的靶向分子，实现对 AD 脑内不同区域和细胞的精准靶向，显著提高药物的入脑效率和治疗效果。（3）免疫代谢调控的纳米颗粒：通过制备抗炎抗氧化特性金纳米笼，开发一种新型免疫代谢重编程纳米药物，实现对能量匮乏诱导小胶质细胞极化的灵敏切换，改善 AD 认知障碍。（4）特异性治疗的纳米颗粒：针对铁死亡驱动的 AD，研发了原位自组装植物多酚智能纳米药物，实现对脑内铁沉积的多尺度调控，显著抑制大脑铁死亡驱动的 AD 进展。 此外，针对女性 AD 患者的高发病率和快速进展，研发了基于植物雌激素的多功能纳米药物，实现对绝经后女性 AD 的特异性治疗。本团队在抗 AD 系列纳米药物研究方面取得了系列创新成果，不仅为未来纳米药物的临床应用奠定了坚实基础，也有望为 AD 患者带来更好的治疗选择和希望。

关键词：阿尔茨海默病，纳米药物

报告人简介：

常津教授，享受国务院政府特殊津贴专家，天津大学英才教授和博士生导师。现任天津大学生科院纳米生物医学研究所所长，天津市微纳生物材料与检疗工程技术中心主任，中国颗粒学会第七届副理事长，中国生物医学工程学会纳米医学与工程分会第二届主任委员，中国抗癌协会纳米肿瘤学专委会副主任委员，天津市生物医学工程学会理事长，天津市神经科学学会副理事长。曾任天津大学健康科学平台（生科院和药学院）副院长。多年来主要从事纳米生物医学材料和技术在肿瘤和老年痴呆等重大疾病诊疗方面的基础和应用研究。已承担国家重点研发计划、863 重点项目、国家自然科学基金等项目 **60** 余项。已在 Sci. Adv.、Adv. Mater.、Adv. Funct. Mater.、Adv. Sci.、ACS. Nano、Biomaterials 等国内外杂志发表学术论文 **380** 余篇， 其中 SCI 论文 **260** 余篇，JCR 一区论文 **160** 余篇，IF>10 的论文 **65** 篇，累计 SCI 影响因子（IF）**>2000**。申请美国、PCT 国际和中国发明专利 **100** 余项，获得授权发明专利近 **40** 余项，转让专利 **12** 项；主编和参编国内外学术专著 **3** 部；荣获天津市自然科学一等奖 **1** 项， 天津市科技进步一等奖 **3** 项，黄家驷生物医学工程科技进步二等奖 **1** 项，天津市教学成果二等奖 **1** 项，被中国科协授予“全国优秀科技工作者”称号。

粒度粒形分析技术在不同药物剂型研发中的应用

报告人简介：

耿建芳 博士

1998 年于华东理工大学获工学博士学位，研究方向为新型陶瓷复合材料。2004 年加入德国新帕泰克公司，担任新帕泰克在中国代表处的首席代表，致力于激光光谱及超声检测在粒度、粒形与浓度等方面的综合应用。对于药物制剂领域不同粉体、不同材料的粒度表征解决方案，具有丰富的技术背景和市场应用经验。

联系方式：18662608012
邮箱：Jgeng@sympatec.com.cn

非学生

鼻喷剂粒度分析的两种互补技术及FDA相关法规解读

陈丽[1,*]，Paul Kippax[2]

[1] 马尔文帕纳科公司，上海市徐汇区田州路 99 号新安大楼 13 号楼 101 室，邮编 200000

[2] Malvern Panalytical，Grovewood Road, Malvern, Worcestershire, WR14 1XZ, United Kingdom

[*]Email: li.chen@malvernpanalytical.com

摘要正文：鼻腔喷雾剂通常由喷雾溶液或混悬液和鼻喷装置两部分组成，通过鼻喷泵装置将包含药物的液滴递送到鼻腔内进行局部或全身治疗， 所以经装置雾化递送出的液滴粒径分布是一项关键质量指标，对药物的吸收动力学过程和治疗效果有很大影响。鼻喷剂定量喷雾泵触发形成的雾滴粒径大小由处方、鼻喷泵以及两者之间的复杂相互作用共同决定，典型的粒径范围为 20μm – 200μm。如果雾滴粒径过大，液滴会滞留在鼻孔内被快速清除，而太小的雾粒 (< 10μm)会有被吸入肺部的风险，所以需要控制喷雾泵形成的雾滴粒径分布，以确保雾滴能有效沉积在鼻腔发挥药效。

在局部给药局部起效的确证性临床试验中，基于试验数据对研究药物的局部及系统安全性，以及药物的有效性进行全面的药效和风险评估。 FDA 指南文件《局部用药鼻腔喷雾剂和鼻腔气雾剂的生物等效性(BE) 和生物利用度(BA)研究》阐述了新药和改良型新药申报时的测试要求，强调对临床批次的体外测试研究的优势及制定相应对比方法。开展全面而系统的临床试验或桥接研究，通过 BE/BA 演示研究，证实与已上市药品用于拟定适应症的治疗等效性。

关键词：鼻喷制剂；粒径分布；图像分析法；激光衍射法

随着对鼻喷给药的不断关注，加速表征药物/器械系统的分析方法需求也越来越大。在这里，我们研究两个独立但互补的提供相关分析解决方案的技术。第一个，图像分析技术，可表征悬浮于鼻喷剂制剂中的 API(活性药物成分)。第二种，激光衍射技术，测量液滴大小和雾滴动力学研究粒径表征。马尔文帕纳科公司的 Morphologi M4-ID 和 Spraytec 仪器，可提供满足监管要求的高质量数据，同时尽量减少操作员的工作量。

FDA 指南指出鼻喷雾产品一些关键变量，比如液滴和混悬 API 的粒径指标。 对于悬浮液，法规规定“药物粒径大小对溶解速率和鼻内作用位置至关重要”。建议喷雾启动前和启动后都表征 API 粒径分布。确保药物递送前，测试品和对照品的粒度大小参数一致，并且受分散过程的影响相似。指南中也提出需要在开发分析方法时关注不溶性悬浮剂/赋型剂等其他复杂因素。光学显微镜检测是很好的辅助手段。

FDA 指南指出“液滴粒径分布是影响气溶胶或喷雾在鼻腔沉积的重要影响因素。 ”控制液滴的大小是为了确保药物作用于鼻部，而不是沉积到肺部，直径小于 9 微米的液滴会被吸进肺部，而大的液滴会从鼻部快速流出。所以液滴大小影响药物在鼻内的停留时间。法规强调了激光衍射法在测试液滴小大的适用性。

图像分析法分析药物粒径分布

混悬鼻喷剂需要控制药物粒径的上限和下限范围。在质量控制 QC 流程中，需要作为其限度值规范。使用光学显微镜用于验证，但手动显微镜需要技术熟练的操作人员，可能有人为偏差，并且非常耗时。全自动图像分析仪（Morphologi M4-ID）操作简单，分析速度快，可以扫描分散的产品样本并捕获单个颗粒的图像，以了解颗粒的形状和大小分布。其拉曼光谱功能鉴别和量化化学成分，并将单个光谱与参考光谱库进行比较，从而在化学上识别它们。

案例分析

针对特定鼻喷雾剂的光学显微镜方法要求分析人员识别 500 个 API 颗粒，每个颗粒都与悬浮液中存在的不溶性赋形剂不同。QC 规范规定，测量的颗粒中，CE(圆形等效直径)大于 10 微米的颗粒数不得超过 10% ，并且 55-70%的颗粒必须在 1-7 微米的粒径范围内。每批产品做两个样品， 总分析时间超过 2 小时，非常费时。

使用 Morphologi M4-ID 全自动分析，测试时间缩减到 20 分钟，共记录 3800 个颗粒数据，远超 500 个。样品制备方式与显微镜法相同：鼻喷泵驱动悬浮液滴，制备在载玻片上，盖上盖玻片；使用 SOPs(标准操作程序)测量样品。对原始数据分类，识别得到目标粒径范围内的 API，不包括含辅料的图片。确保与指南规定的手动检测方法步骤一致。下例是利用形貌参数长宽比对辅料和 API 进行形貌区分。一旦确定分类方法，设置在 SOP 程序方法中，每次自动分析测试都会统计分析关注的颗粒类型。

图 1 显示使用自动图像分析仪获得的结果。 这些结果表明，喷雾后颗粒粒径分布向更小的方向变化。这是鼻喷泵驱动过程中剪切作用的结果。此外 API 颗粒粒径尺寸在喷雾前后皆满足规范要求（图 2），因此喷雾过程对药物的生物利用度几乎没有影响。除了统计粒径数据，图像分析还可以通过目视检查捕获的图像来进一步研究不同颗粒群的性质。 图 3 显示剂型中的超大颗粒，等效圆形直径大于 10 微米的颗粒，这可能是由于不同颗粒组分之间的团聚所形成的。

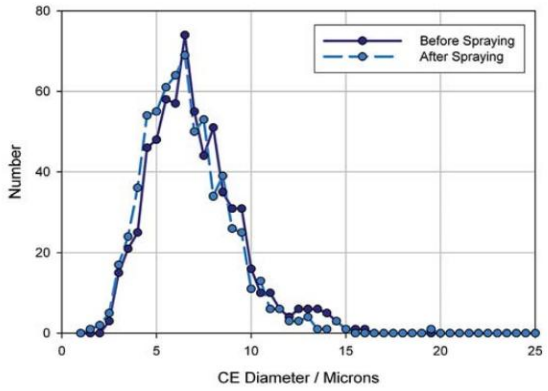


Fig.1 QC data for a nasal spray formulation collected by image analysis.

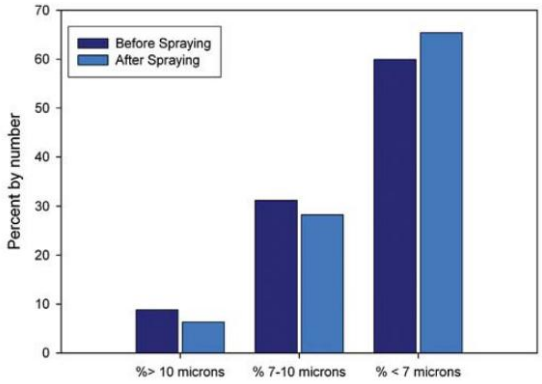


Fig. 2 QC data generated derived from size distributions reported using image analysis.

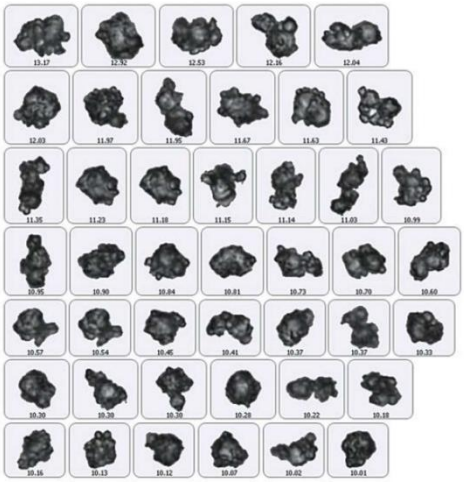


Fig. 3 Images of particles with a CE diameter in excess of 10 microns.

FDA 相关法规解读

近年来，FDA 关于局部作用鼻喷剂的生物利用度和生物等效性研究的指导文件中明确指出，在满足定性一致（Q1），定量一致（Q2）以及给药装置可比的前提下，可以通过一系列理化指标（Q3）的体外试验对照来确定仿制药的生物等效性。FDA 指导原则指出通过 Morphologi M4-ID 分析，证明仿制药鼻喷剂在体外的 API 粒度与粒形分布与原研制

剂一致，从而获得临床终点观察研究豁免。FDA 在 2020 和 2023 年先后推出 2 篇指导原则文件说明和阐述图像导向拉曼光谱技术（MDRS，马尔文帕纳科 Morphologi M4-ID）在复杂制剂，局部给药，尤其是鼻喷剂成分研究和体外 BE 的要求和应用。

图 4 是 FDA 指导原则推荐的利用 M4-ID 技术研究分析鼻喷给药剂型的 API 粒度粒性分析流程，通过筛选分析出 API 形貌和粒径分布情况与参比化合物对比，为体外 BE 研究提供强有力的数据支持依据。

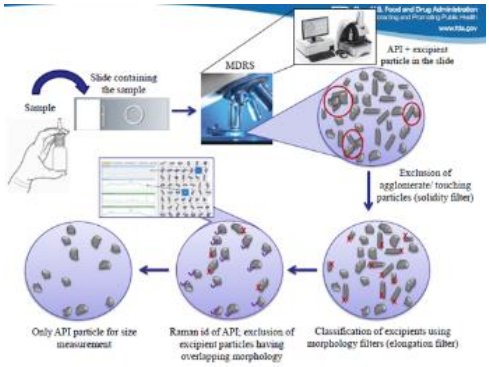


Fig. 4 MDRS application on Nasal Spray Suspensions is used as an example for developing and validating advanced microscopy methods for complex drug products. (Source: GDUFA Regulatory Science Public Meeting, May 20 2016 , Dr. Robert Lionberger, Center for Drug Evaluation and Research, FDA)

对于图像导向拉曼光谱（MDRS）分析复杂制剂（鼻喷剂型）的技术，FDA 指导原则详细阐述了需要着重关注的粒径大小和形貌参数（图 5），方法开发和验证的协议起草的要求（图 6）：涵盖样品制备、颗粒的图像和化学鉴定分析、形貌分类筛选原则，以及最少测量颗粒数量等等。同时列出了 9 种在药代动力学(PK)研究敏感差异的鼻喷剂药物使用 MDRS 技术做相应的 IVBE 研究（图 7）。

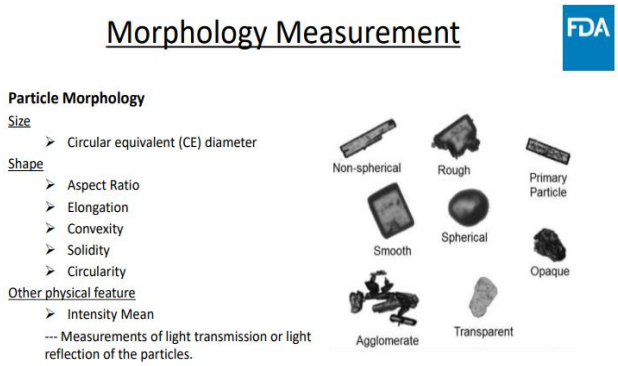


Fig. 5 FDA outlines particle morphology parameters.

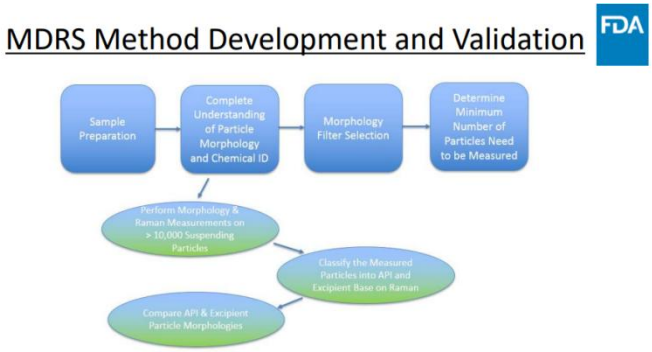


Fig. 6 FDA guidelines on MDRS Method Development and Validation protocols.

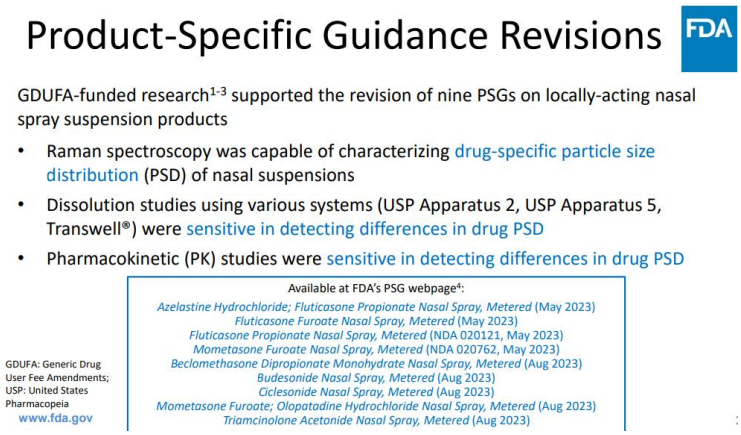


Fig. 7 FDA 9 PSG nasal spray products utilizing MDRS for IVBE.

激光衍射法表征雾滴粒径分布

尽管图像分析法非常适合表征鼻喷雾剂中的 API 颗粒，但在鼻喷剂使用中研究悬浮液或溶液如何雾化则需要另一种粒径表征方式。获取喷雾过程中液滴大小变化的细节，需要能够极快测量颗粒粒径的原位分析技术。马尔文帕纳科的喷雾粒度仪 Spraytec，基于激光衍射技术，数据采集速率高达 10000 赫兹，在鼻泵喷射过程中可实时测量液滴大小。其测量范围 0.1-2000 微米也非常适合鼻腔喷雾应用。 图 8 显示了使用 Spraytec 测量鼻腔喷雾驱动的典型粒径曲线。鼻腔定量喷雾泵的一次触发可分为 3 个阶 段：形成期、稳定期和消退期，三个阶段的雾滴粒径分布有显著差别。形成期(Formation Phase)是一个触发周期的开始阶 段，因为雾化压力较低，通过喷嘴的液体流速度低，所以形成的雾滴粒径较大；之后，雾滴粒径急剧变小进入稳定期(Fully Developed Phase)，此时雾化压力和流速处于最优化状 态，形成的雾滴粒径较小并且最稳定；触发周期的结束阶段为消退期(Dissipation Phase)， 因为定量室变空，压力和流量降低，所以观察到雾滴粒径变大。整个触发过程是瞬时的，整个喷雾过程约在 160 ms 完成。通过观察形成期和消退期可以帮助优化药物雾化过程，鼻喷雾剂使用前的试喷就是为了将这两个阶段的时间降至最低。稳定期持续的时间最长，形成的雾滴粒径大小均一且稳定， 与药物的治疗效果密切相关，所以 FDA 建议对稳定期的粒径分布进行测定和分析，并给出 Dv10, Dv50, Dv90 和径距 Span 等特征值。

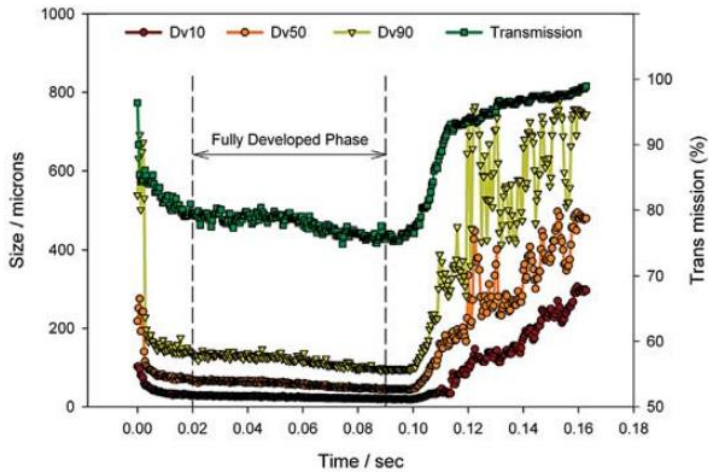


Fig.8 Typical particle size profile for a nasal spray actuation

从图 8 可以清楚地看出，在喷雾过程中，液滴大小变化很大，那如何确定代表性液滴大小以进行比较研究呢？FDA 指南建议使用完全发展阶段的数据，以确保不同产品之间的统计有效比较。图 9 中通过相同泵型设备，递送不同粘度的制剂，对鼻喷雾滴粒径大小的影响。从稳定期的粒径分布趋势可以看出，随着粘度的增加， 液滴的大小变得更大，更不稳定。这与高粘度液体具有更强的抗破裂能力相关。 粘度影响制剂配方的性能，高粘度有利于产

品稳定性和在鼻腔中的停留，但正如这些数据所示，高粘度的配方不易分散成细小液滴。因此粘度随剪切速率增加而降低的配方通常是比较合适的。这样的配方在低剪切条件下（储存或保持在鼻腔中）表现出高粘度，但在泵送或喷雾时粘度降低。

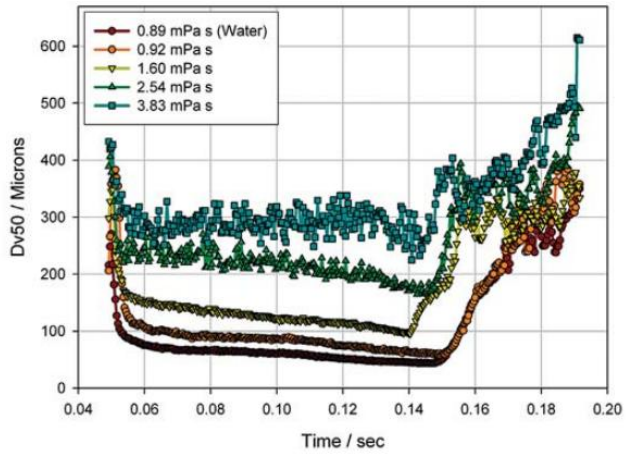


Fig. 9 The impact of viscosity on the droplet size for a nasal spray formulation

结论

FDA 关于局部给药鼻喷雾剂的 BA/BE 研究的指南建议关键参数，如 API 颗粒粒径和液滴大小，以评估产品性能。 图像分析法和激光衍射法是非常成熟且互补的技术，可快速提供符合监管要求的高质量数据。全自动图像分析系统减少了分析负担， 提高测量结果的可重复性，缩短测量时间。激光衍射喷雾粒度仪可以对鼻喷雾剂的雾滴粒径分布测定，快速进行处方筛选和给药装置性能评价。

参考文献

[1] www.fda.gov/cder/guidance/5383DFT.pdf
[2] Changning Guo, PhD Research Chemist, Division of Complex Drug Analysis Office of Testing and Research, Office of Pharmaceutical Quality. Developing and Validating Advanced Microscopy Methods for Supporting Complex Product Equivalence.2020
[3] Susan,Boc Pharmacokineticist Division of Therapeutic Performance-1, Office of Research and Standards, Office of Generic Drugs CDER | U.S. FDA. Complex Nasal Suspension PSGs: Utilization of Newly Recommended In Vitro Only Bioequivalence Option,2023
[4] Lawrence X. Yu，Bing V. Li. FDA Bioequivalence Standards. Jul 2014.
[5] H. Kinnunen , J. Shur , D. Huck , L. Makein 2Drug-excipient fines agglomerate formation, as quantified by Raman spectroscopy, improves dry powder inhaler formulation performance

报告人/墙报展示人简介：

陈丽，马尔文帕纳科高级业务发展专家，拥有十多年的小分子原料药研发分析服务经验，负责医药与食品行业马尔文帕纳科产品的技术支持和市场拓展，以及客户问题的支持解决等。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：报告人不是学生

基于探针调制型原子力显微镜的脂质颗粒与细胞的相互作用表征

李海林[1]，龚湘君[1,*]

[1]华南理工大学材料科学与工程学院，广州，510641

*Email: msxjgong@scut.edu.cn

脂质颗粒是目前应用最为成功的药物递送系统之一。它由双亲性磷脂形成表面双分子层，可通过物理或者化学手段与配体或者其他功能基团进行结构修饰。这赋予其灵活的表面性质，从而调控其在体内的靶向性、滞留时间和递送有效率。由于组分种类繁多，设计合适的脂质颗粒载体需要快速、低成本和定量的评估方法。目前评估脂质颗粒有效性的常见方法是小鼠或其他动物实验，存在时间长、成本高、重复性和难以定量的问题。原子力显微镜(Atomic Force Microscopy, AFM)是一种定量测量探针与表面微弱相互作用力的力谱工具。基于 AFM，我们发展了一种基于脂质颗粒的探针调制技术，即将多个数百纳米的脂质颗粒修饰到原子力显微镜探针上，随后通过控制下针次数和位置，测量该探针与细胞之间的靠近-远离过程的相互作用，测得大量反映脂质颗粒与细胞膜的相互作用的力谱曲线，从中对脂质颗粒与细胞膜的膜融合和脱附事件、强度和范围进行定量分析。该技术可为以脂质颗粒为代表的药物载体的配方设计、筛选和药物-细胞互作机理研究提供了一种全新方法。

关键词：脂质颗粒；原子力显微镜；调制型探针

报告人/墙报展示人简介：

李海林，硕士研究生，华南理工大学材料科学与工程学院

mslihailin@mail.scut.edu.cn

导师： 龚湘君， 博导、教授，华南理工大学材料科学与工程学院，

msxjgong@scut.edu.cn

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

超重力反溶剂沉淀法制备阿维菌素纳米农药

董彦君[1, 2]，王洁欣[1,2, *]

[1]北京化工大学有机无机复合材料国家重点实验室，北京，100029

[2]北京化工大学超重力工程技术研究中心，北京，100029

*Email: wangjx@mail.buct.edu.cn

传统农药在制备过程中涉及大量的有机溶剂和表面活性剂，会对环境造成一定的破坏。与传统农药相比，纳米农药具有粒径小、比表面积大等特性，能有效改善难溶性农药的分散性和稳定性，提高农药的有效利用率与生物活性，减少农药用量和有效成分流失，降低农药残留和环境污染。

本工作针对传统农药存在的问题，探索在旋转填充床（RPB）中，以生物友好的聚乙烯吡咯烷酮（PVP）为表面活性剂，采用超重力反溶剂沉淀法瞬时连续化制备尺寸小且性能增强的阿维菌素（Av）纳米农药。重点探究了表面活性剂种类、溶剂反溶剂体积比、溶剂中Av浓度、农药与改性剂PVP的质量比、超重力转速和进料流率等因素对纳米农药形貌和粒径的影响。与传统釜式法（STR）相比，超重力法所得产物粒径明显减小，由166 nm缩减为66 nm，且制备时间由60 min缩短到1 s。载药能力、抗紫外性能和粘附性能测试表明，超重力法产物具有更优的性能，如更高的农药包覆量，更好的紫外线防护性能，以及在叶片上更稳定地沉积，以减少其在实际应用中的使用量。此外，与原药相比，超重力法产物被紫外光照射72 h之后的残留量对小菜蛾仍具有良好的杀灭效果，其半致死浓度（35.699 μg mL^{-1}）远低于原药（82.134 μg mL^{-1}）。不同浓度的PVP处理后的非靶标生物和空白对照具有相近的生长态势，PVP对大肠杆菌的生长、扁豌豆种子的萌发和油菜植株的生长均没有影响，证明其良好的生物相容性。因此，超重力技术有望为难溶性农药的纳米化提供新策略。

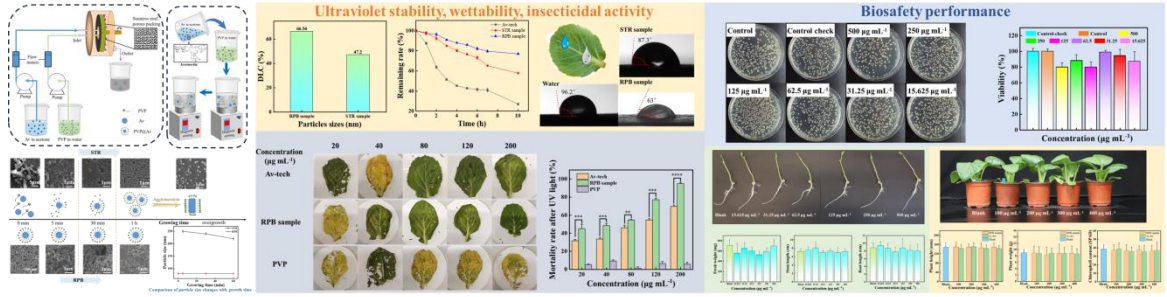


Fig. 1 The schematic diagram of the synthesis of avermectin nanoparticles and the corresponding data representation by using rotating packed bed (RPB) and stirred tank reactor (STR), and the drug loading capacity, ultraviolet stability, wettability, insecticidal activity and biological safety of RPB products and the reference substance.

关键词：阿维菌素纳米农药；旋转填充床；反溶剂沉淀；瞬时连续制备；生物安全

参考文献

[1] **Y. J. Dong, J. Lu, M. Qiao, K. Wang, Y. Le, J. X. Wang, J. F. Chen, Instantaneous and continuous preparation of avermectin nanoparticles with high gravity anti-solvent precipitation technology, *Ind. Eng. Chem. Res.* 2024, 63: 1729-1739.**

[2] **X. Yin, Q. Sun, D. Wang, A. F. Routh, Y. Le, J. X. Wang, J. F. Chen, High-gravity-assisted synthesis of aqueous nanodispersions of organic fluorescent dyes for counterfeit labeling. *AIChE J.* 2019, 65: e16714-e16725.**

报告人/墙报展示人简介：

董彦君，女，北京化工大学化学工程学院在读博士生。主要研究领域：阿维菌素纳米颗粒、智能响应型纳米农药。2021 年获北京化工大学化学工程与工艺学士学位，而后硕博连读本校化学工程与技术博士学位，所在课题组为教育部超重力工程研究中心。至今，以第一作者已在 Ind. Eng. Chem. Res.期刊上发表 SCI 论文 1 篇；申请中国发明专利 1 件。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

冷冻干燥对甘露醇晶型与形貌的影响

谢培，刘慧军，尹宗宁[1*]
[1]四川大学华西药学院，610041
*Email/zongningyin@163.com

摘要：甘露醇为高溶解度、低药物-辅料相互作用、低吸湿性和高稳定性的冻干产品支架剂。因其容易形成结晶饼，同 时与冰的高共晶熔融温度可在相对较高的温度下进行初级干燥。结晶甘露醇在冷冻干燥过程中可提供坚固的支架，承受无定形固体物导致的冻干产品“微塌陷”。由于甘露醇的不同晶型会对药物制剂产生明显的影响，对甘露醇的晶型与形貌改变进行界定，利于对冻干制剂处方工艺的优化。研究不同来源甘露醇冷冻干燥前后晶型和形貌变化，考察冻干处方工艺对甘露醇晶型的影响。光学显微镜（OM）、扫描电镜（SEM）、X 射线衍射法（XRD）等研究结果显示，酸性 pH 环境、预冻时间以及快速的预冻速率等可诱导甘露醇半水合物的出现，改变甘露醇的α型、β型和δ型等三种晶型的比例，影响冻干产品的质量及其药效。而甘露醇的浓度对其冷冻干燥过程中的转晶没有影响。对冷冻干燥产品中甘露醇晶型的研究，可指导冻干制剂生产中选择适宜晶型的甘露醇，并限制或避免可能会释放晶格水、降低药物的活性和稳定性甘露醇半水合物的形成，保证药物的活性和稳定性。

关键词：甘露醇；晶型；冷冻干燥

Illustration

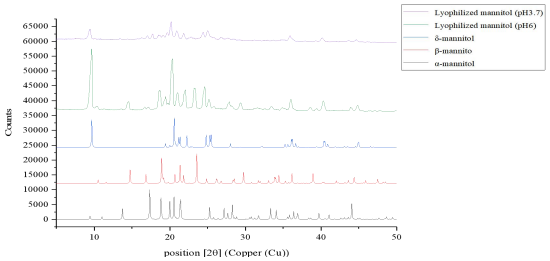


Fig. 1 XRD of freeze-dried mannitol at different pHs

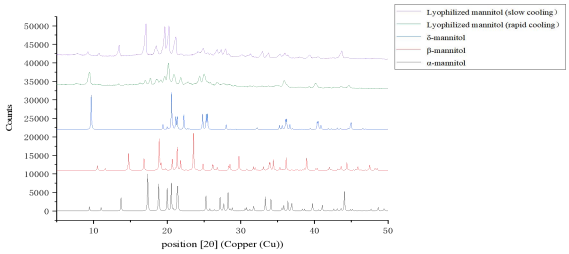


Fig. 2 XRD of freeze-dried mannitol at different pre-freezing time

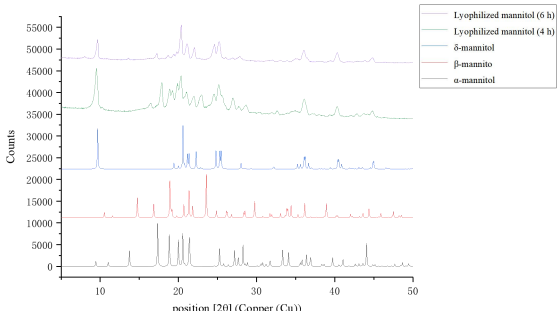


Fig. 3 XRD of freeze-dried mannitol at different

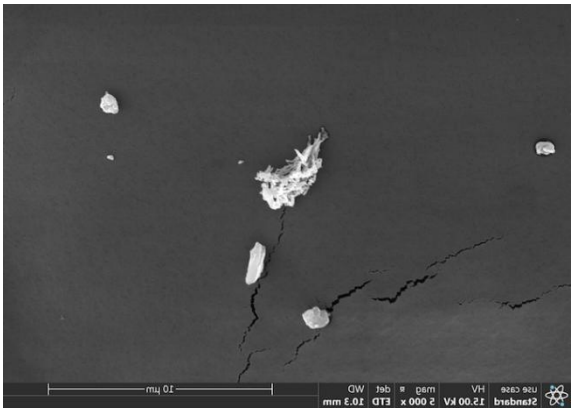


Fig. 4 SEM image of Sample powder before freeze-drying (5000X)

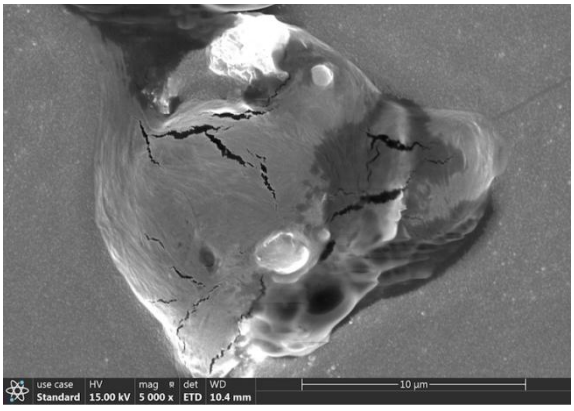


Fig. 5 SEM image of Sample powder after freeze-drying (5000X)

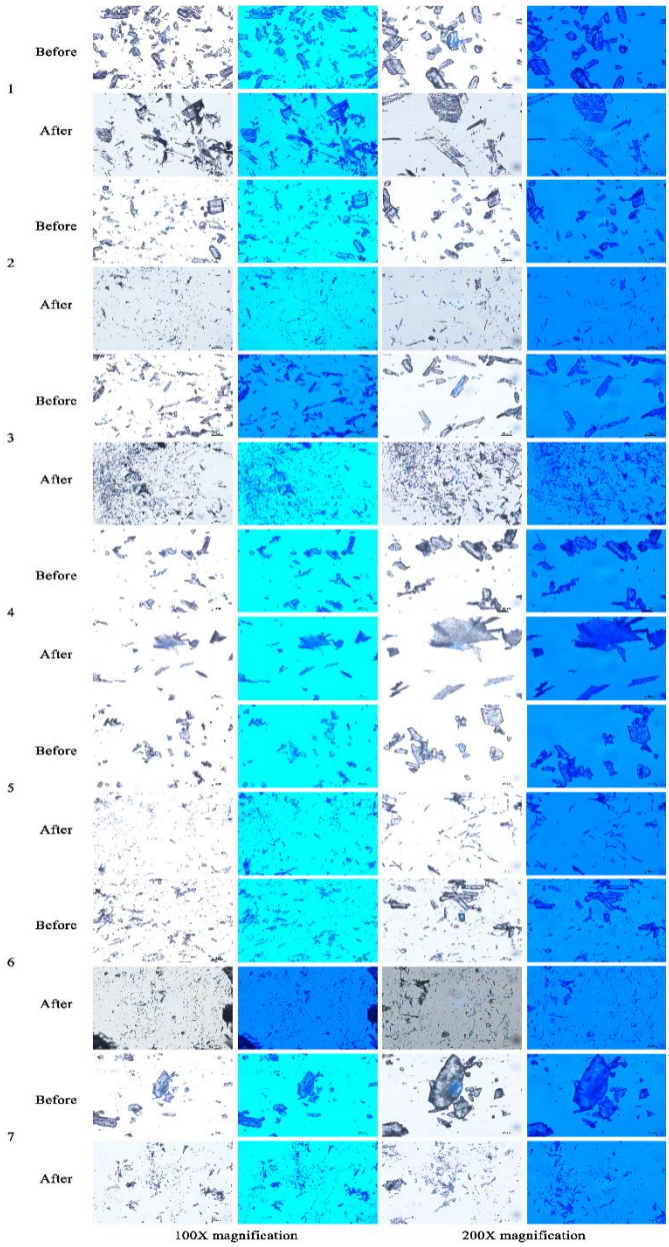


Fig. 6 OM images of samples from different sources before and after lyophilization

参考文献

[1]Har, Chen LoonFu, NanChan, Eng SengTey, Beng TiChen, Xiao Dong.In situ crystallization kinetics and behavior of mannitol during droplet drying[J]. Chemical engineering journal, 2018, 354:314-326.

[2] Thakral S , Sonje J , Munjal B ,et al.Mannitol as an Excipient for Lyophilized Injectable Formulations[J].Journal of pharmaceutical sciences, 2023, 112(1):19-35.

中性粒细胞输送脂质纳米靶向消除瘤内菌与 PD-L1 阻断剂协同增强三阴性乳腺癌免疫治疗

关键词：中性粒细胞输送，肿瘤共生菌，肿瘤免疫微环境，光热-免疫治疗，PD-L1 阻断，乳腺癌

摘要：免疫检查点阻断疗法（ICB）已显示出对三阴乳腺癌（TNBC）患者的临床疗效。然而，ICB 的临床反应率受到肿瘤微环境免疫抑制性质的制约。肿瘤共生菌被发现广泛定植于 TNBC 中，并与肿瘤免疫抑制微环境和肿瘤进程有关。在此，我们构建了一种基于中性粒细胞输送的脂质体递送系统，用于精准靶向肿瘤组织并杀死肿瘤细胞和消耗肿瘤共生菌，以增强肿瘤的免疫治疗。在 TNBC 免疫治疗中，制备的脂质体（PD/GA-LPs）在体内通过补体受体参与促进了中性粒细胞的靶向吞噬，并在炎症信号的作用下有效地富集在肿瘤部位。到达肿瘤部位后，释放出的 PD 被肿瘤共生菌还原后表现出卓越的光热效应，与 GA 结合使用时，能高效杀死肿瘤细胞和消耗肿瘤共生菌，改善肿瘤免疫抑制微环境并诱导肿瘤免疫原性死亡。同时，死亡的肿瘤共细菌和肿瘤细胞可导致病原体相关分子模式和分子损伤相关分子模式的释放，进一步促进肿瘤部位树突状细胞成熟和随后的 T 细胞浸润。这种治疗策略能最大限度地改善肿瘤免疫抑制微环境，提高肿瘤免疫原性，从而有效治疗 TNBC 并防止转移。总之，这种方法以肿瘤和正常组织不同的微生态学为基础，为开发精确、有效的免疫疗法提供了新的见解。

姜虎林，中国药科大学兴药领军教授、博士生导师，江苏特聘教授，成均馆大学客座教授，江苏省杰出青年基金获得者。2002 年大学毕业后留学韩国，在韩国首尔大学学习、工作十年。2012 年作为江苏特聘教授引进，于中国药科大学药学院工作。主要从事高端制剂、新剂型以及小分子药物和生物药物的研发及成药性研究，在药物、基因、细胞载体领域取得了一些成绩。在国际刊物发表 SCI 论文 170 多篇，包括 Nat Commun；Sci Adv；Adv Mater 等杂志，他引次数 8400 多次，H 指数 51；共申请专利 52 项，其中 PCT 专利 6 项，获得发明专利授权 23 项，其中一项已转化；参编著作 24 部。主持科技部重大专项，国家自然科学基金重点国际(地区)合作与交流项目、面上项目等科研项目 10 余项。获得江苏省科学技术一等奖，教育部高等学校科学研究优秀成果奖（科学技术）二等奖等。担任中国颗粒学会青年理事会理事及中国颗粒学会生物颗粒专业委员会委员，长白山天然药物研究教育部重点实验室学术委员；中国生物医学工程学会纳米医学与工程分会、中国化学快报、亚洲药剂学等杂志的编委/青年编委。

◆ **联系方式：**南京市江宁区龙眠大道 639 号 学院实验楼 404 中国药科大学（211198）

◆ **Tel**: 025-83271027; **E-mail**: jianghulin3@163.com

题目：组织纤维化治疗研究

摘要：

组织纤维化是由器官受损引发的过度自愈反应，是组织内细胞外基质异常增多和过度沉积的病理过程。纤维结缔组织增生会导致实质细胞的减少，持续进展会导致器官坏死和功能衰竭，严重危害人类生命健康。现有的口服药物主要通过抑制炎症反应和成纤维细胞的激活发挥疗效，但存在靶点单一、生物利用度低，特别是纤维化组织中过度沉积的病理胶原基质严重阻碍药物在靶部位的有效蓄积等问题。本报告将聚焦于成纤维细胞的过度活化、大量沉积的胶原基质阻碍药物蓄积、受损实质细胞加剧纤维化病情等三个重要因素之间的内在联系，探讨如何开发多层次、全方位的抗纤维化高端制剂，在肺、肝和胰腺等多脏器纤维化中实现有效治疗。

制剂生产过程中工艺参数对美拉德反应的影响

谭淞文[1, 2*]，张志彬[2]，向佳[2]

[1]苏州工业园区蒙纳士科学技术研究院，江苏省苏州市，21500

[2]江苏道宁药业有限公司，江苏省常州市，213100

*Email: songwen.tan@monash.edu

摘要正文：美拉德反应（MR）于1912年由法国化学家Louis Camille Maillard首次发现，是羰基化合物（如还原性糖、维生素C、醛、酮、多酚以及醌等）和氨基化合物（如氨基酸、胺、多肽以及蛋白质等）之间的一系列缩聚反应[1]。在食品领域，MR被广泛应用，但在药物制剂中，这类反应常导致还原性辅料（如乳糖、葡萄糖、麦芽糖等）与含氨基药物发生反应，引发一系列制剂质量问题，如颜色变化、药物生物利用度改变以及毒副作用化合物的产生[2]。口服制剂是临床应用最多的一种制剂形式，其中约80%的剂型为片剂，而市售片剂中约70%使用乳糖作为主要辅料[3]。乳糖是一种常用药用辅料，由一分子葡萄糖和一分子半乳糖通过β-1,4-糖苷键连接而成，属于还原性糖，会与含氨基的药物发生MR，导致药物降解变质。一个典型例子是市售普瑞巴林胶囊，研究发现其在长期稳定性研究中产生了七种杂质，均为普瑞巴林与辅料乳糖发生MR生成的产物，严重影响其质量[4]。研究表明，乳糖不仅会与药物中的伯胺发生MR，还会与仲胺和叔胺反应[5]。

本研究通过探讨固体制剂（以乳糖-赖氨酸片剂为反应模型）生产过程中各工艺参数对MR的影响，如剂型、赖氨酸-乳糖的用量比例、乳糖种类、乳糖添加方式、片剂制备方法、制片压力、片剂直径大小及常用辅料的影响，指导制剂生产中各工艺参数的选择，从而有效降低MR的发生，保持制剂稳定性。研究结果表明，MR在药物制剂中的发生受到多种工艺参数的显著影响。乳糖含量越高，反应越快；无水乳糖的MR速度最快，其次为喷雾干燥乳糖，而筛分乳糖、粉碎乳糖、颗粒乳糖的反应速度较低；乳糖的α/β比例对反应影响不大。片剂比胶囊剂反应更快，湿法制粒比直接压片反应更快，增加压片压力和减小片剂直径都会加速反应。辅料乳糖与药物一起混合时接触面积最大，反应最快；硬脂酸镁促进反应，亚硫酸氢钠抑制反应。通过优化这些参数，可以在一定程度上控制MR的发生，保持制剂的稳定性。这些发现不仅对制药企业在生产过程中选择合适的工艺参数具有重要指导意义，还为开发新型药物制剂提供了理论依据和实践参考。未来的研究应进一步探讨其他辅料和制剂形式对MR的影响，并开发更有效的抑制MR的方法，以提高药物的稳定性和安全性，从而提升药物的临床应用效果和患者的用药体验。这将有助于减少药物降解和杂质产生，提高药品质量，确保药物在保质期内保持有效和安全。

关键词：美拉德反应；乳糖；赖氨酸；药物制剂；参数

参考文献

[1] Hodge JE. Chemistry of browning reactions in model systems. 1953.

[2] Kumar V, Banker GS. Maillard reaction and drug stability. Maillard Reactions in Chemistry, Food and Health: Elsevier; 2005. p. 20-7.

[3] Illanes A, Guerrero C, Vera C, Wilson L, Conejeros R, Scott F. Lactose-derived prebiotics: a process perspective: Academic Press; 2016.

[4] Lovdahl MJ, Hurley TR, Tobias B, Priebe SR. Synthesis and characterization of pregabalin lactose conjugate degradation products. Journal of pharmaceutical and biomedical analysis. 2002;28(5):917-24.

[5] Ghaderi F, Nemati M, Reza siahi-shadbad M, Monajjemzadeh F. Evaluation the effect of amine type on the non-isothermally derived activation energy for the interaction of 3 antidepressant drugs with lactose. Advanced Pharmaceutical Bulletin. 2019;9(2):289.

报告人/墙报展示人简介：

谭淞文博士毕业于悉尼大学化学与生物分子工程专业，曾任中南大学特聘教授，现任苏州工业园区蒙纳士科学技术研究院高级研究员、博导。系致公党湖南省委青年委员会副主任、中国颗粒学会青年理事、中国医学装备协会转化医学分会委员、湖南省青年联合会委员、长沙市侨联青年委员会副会长、湖南省医药行业协会细胞产业分会秘书长、江苏道宁药业（药用乳糖龙头）首席科学家等。主要从事药物制剂、细胞治疗、低温冻存等。发表高水平 SCI 论文 100 余篇（含 JCR1 区 30 余篇），专利十余篇。具有丰富的创新创业经验，获评湖南省互联网+、挑战杯优秀创新创业导师，曾获得 2017 年 “春晖杯”优胜奖（教育部、科技部）、2020 年“创青春”国赛优秀奖（团中央）、2020 年“挑战杯”国赛铜奖 （团中央）、2020 年湖南创新创业大赛“优秀企业”（科技厅）、2020 年“中国创翼”优秀创业创新项目（人社厅）、2021 年第六届全国临床创新与发明大赛一等奖等多项创新创业大赛殊荣、2022 年全湖南省唯一入选 2022 年中国留学人员回国创业启动支持计划的负责人。2023 年加入英国皇家学会工艺院（RSA）终身会士、乌克兰国家工程院外籍院士。相关药物制剂新技术，成果已成功工业转化，被《光明日报》、悉尼领馆教育组网、四川省人民政府网、湖南卫视、天津卫视、人民网、新浪、搜狐、凤凰网等多家媒体报道。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

唐远旺、北京海菲尔格科技有限公司、非学生、thomas.tang@hiferg.com

PCM结晶监测系统在功能性糖醇和甜味剂结晶过程的颗粒度控制

唐远旺[1]

[1] 北京海菲尔格科技有限公司，北京，100022

*thomas.tang@hiferg.com

PCM 结晶监测系统能够实现对功能性糖醇和甜味剂结晶过程的实时监控并可根据监控结果实时调整过程工艺。PCM 可以实时记录结晶过程中的颗粒图像并实时分析晶体的颗粒度，同时给出晶体颗粒数量、晶体径长比、晶体生长速率等数据。PCM 探头直接插入具有一定真空度的结晶器中分析晶体颗粒度，避免了取样后进行离线测试的不便和误差，可以真实反映结晶过程中晶体的变化情况，包括晶核形成、晶核数量、晶体生长、二次成核监控、过程颗粒度监控等。PCM 结晶监测系统已经成为获得高质量晶体产品、快速实现定制指定颗粒度晶体产品的有效手段。

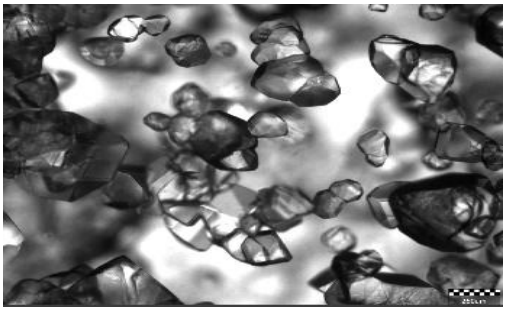


Fig 1. Particle image of xylitol

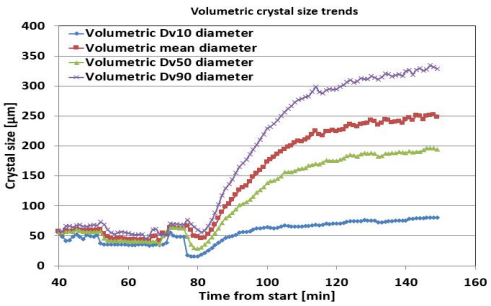


Fig 2. Particle size trends of xylitol crystallization

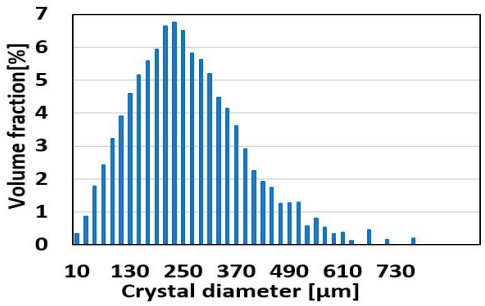


Fig 3. Particle size distribution of xylitol crystals

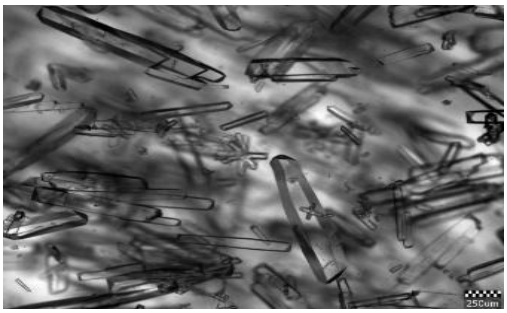
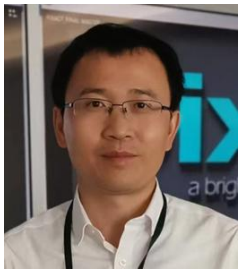


Fig 4. Particle image of xylose

关键词：PCM；结晶监测；实时在线监控；晶体颗粒度；功能性糖醇

墙报展示人简介：



唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器行业的技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

附：墙报展示人非学生

报告人：李楠，天津大学药物科学与技术学院，是否为学生：否，邮箱：linan1985@tju.edu.cn

Orally administrable H2S-scavenging metal-organic framework prepared by co-flow microfluidics for comprehensive restoration of intestinal milieu

Yunsheng Dou[1], Nan Li[1,*]

[1]Tianjin Key Laboratory of Drug Delivery & High-Efficiency, School of Pharmaceutical Science and Technology, Tianjin University, 92 Weijin Road Nankai District, Tianjin, 300072,

* linan1985@tju.edu.cn

Intestinal milieu disorders are strongly related to the occurrence of inflammatory bowel diseases (IBDs), which results from mucosa destruction, epithelium disruption and tight junction (TJ) proteins loss1. Excess of H2S in the intestinal milieu produced by sulfate-reducing bacteria metabolism contributes to IBDs development via epithelial barrier breakdown. Conventional interventions, such as surgery and anti-inflammatory medications, are considered not completely effective because of frequent recurrence and other complications2. Herein, a novel oral delivery system, a hydroxypropyl methylcellulose acetate succinate (HPMCAS)-based polymer-coated Zr-based metal-organic framework (UiO-66) with a Cux-rhodamine B (CR) probe (hereinafter referred to as HUR), was produced via co-flow microfluidic assistance with ability to reduce H2S levels, thus restoring the intestinal lumen milieu. HPMCAS serves as an enteric coating that exposes UiO-66@CR at the pH of the intestine but not the acidic pH of the stomach. The synthesized HUR exhibits notable therapeutic efficacy, including mucosa recovery, epithelium integrity restoration and TJ proteins up-regulation via H2S scavenging to protect against intestinal barrier damage and microbiome dysbiosis. Thus, HUR has been verified to be a promising theranostic platform able to decrease the H2S content for intestinal milieu disorder treatment. The presented study therefore opens the door for further exploitation for IBDs therapy.

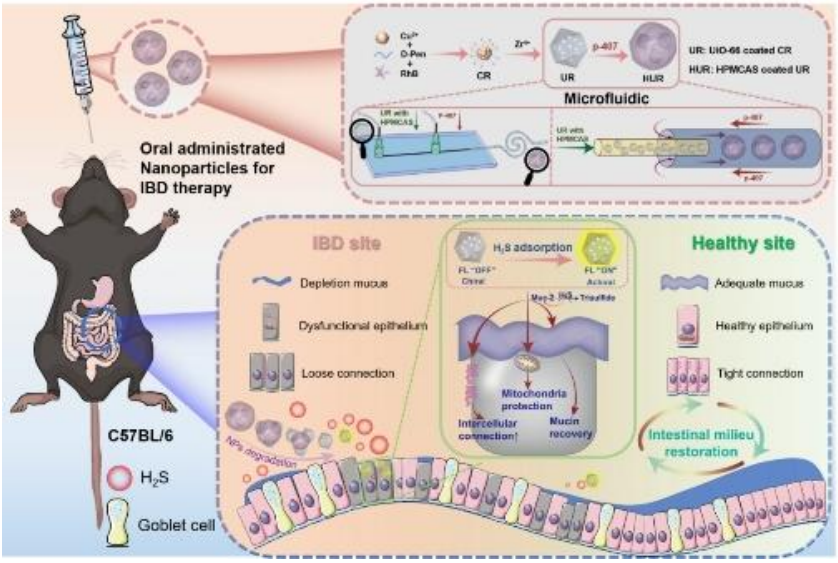


Figure. 1 Schematic illustration of the preparation of HUR and mechanisms of its activity in the treatment of IBDs.

Keywords: intestinal milieu restoration, hydrogen sulfide scavenging, Zr-MOF, microfluidic technology, inflammatory bowel disease

References

[1] Dou, Y., Liu, P., Ding, Z., Zhou, Y., Jing, H., Ren, Y., Heger, Z., Adam, V. & Li, N. 2023. Orally Administrable H2S-Scavenging Metal Organic Framework Prepared by Co-Flow Microfluidics for Comprehensive Restoration of Intestinal Milieu, Advanced Materials 20233, 35, 2370101.

[2] Chang, J. T., Pathophysiology of Inflammatory Bowel Diseases, N Engl J Med 2020, 383, 2652-2664.

[3] Shhimizu, H., Arai, K., Tang, J., Hosoi, K. & Funayama, R., 5-Aminosalicylate intolerance causing exacerbation in pediatric ulcerative colitis, Pediatr Int 2017, 59, 583-587.

报告人/墙报展示人简介：

李楠，天津大学药学院党委副书记，教授，博士生导师。先后入选“全球前 10 万顶尖科学家”，王宽诚教育基金资助青年学者，天津市“青年人才托举工程”，天津市创新人才推进计划青年科技优秀人才。主持国家自然科学基金面上及青年项目、天津市自然基金面上及青年项目、军委科技委重大专项、天津市军民融合重大专项、中英合作项目等多项科研项目，获天津市高等教育（研究生）教学成果特等奖；近年来，以唯一或最后通讯作者发表 SCI 论文 70 余篇，影响因子超过 400，他引共计 2600 余次，h-index 为 33，其中 40 余篇一区文章，包括 Adv Mater, Adv Func Mater, ACS Nano, Nano Today, Small, Biomaterials, Acta Pharm Sin B, J Control Release, Chem Eng J 等。参编英文论著 7 部，获得国家授权专利 4 项。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

唐远旺、北京海菲尔格科技有限公司、非学生、thomas.tang@hiferg.com

微波水分仪用于快速测试聚合物粉体中的极微量水分

唐远旺[1]

[1] 北京海菲尔格科技有限公司，北京，100022

*thomas.tang@hiferg.com

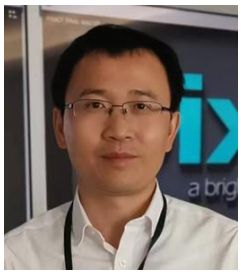
随着新能源行业及电子材料的快速发展，高性能粉体产品的微量水分的测试越来越凸显其重要性。精准、快速、在线、自动化控制成为行业对于水分测试的主要关注点之一。传统水分测试方法测试时间长、操作繁琐、人工取样、效率低，无法实现在工业大生产中快速测试粉体水分。微波水分仪是一种超快速、高灵敏度的水分测定方法，得到的是聚合物粉体的内部水分而非表面水分，测试下限可达20ppm量级的含水量。微波水分仪可以在1秒内完成微量水分测定，可以更好地服务于苛刻条件、极低水分含量的聚合物粉体颗粒的测试。微波水分仪可以安装于工业生产线，用于对聚合物粉体水分进行实时监控。本文以聚四氟乙烯粉体的极微量水分测试为例，阐述了微波水分仪对于20-100ppm量级水分测试的解决方案。数据表明，微波水分仪可以很好地表征PTFE粉体的极微量水分含量同时能给出粉体的堆密度值。

Table 1　Moisture content of different PTFE powders

样品	PTFE-A	PTFE-B	PTFE-C	PTFE-D
1	0.0037%	0.0038%	0.0032%	0.0032%
2	0.0037%	0.0039%	0.0030%	0.0029%
3	0.0036%	0.0036%	0.0031%	0.0030%
4	0.0036%	0.0038%	0.0030%	0.0029%
5	0.0036%	0.0037%	0.0029%	0.003%
平均值	0.00364%	0.00376%	0.00304%	0.00300%
标准偏差	0.00005%	0.00011%	0.00010%	0.00011%

关键词：粉体水分；微波水分仪；在线监控；PTFE；堆密度

报展示人简介：



唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器分析行业技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

附：墙报展示人非学生

核酸药物用于出血性脑卒中治疗初步探索

史进进

郑州大学，河南省高新区科学大道 100 号，450001

*Email: shijinyxy@zzu.edu.cn

出血性脑卒中（hemorrhagic stroke）是由于脑血管破裂导致血液泄漏到脑组织中，引发脑组织损伤、炎症反应和血脑屏障破坏的一类严重脑血管疾病。其主要病因包括高血压、脑动脉瘤、脑动静脉畸形和外伤。传统治疗手段主要集中在对症处理，如降低颅内压、止血、保持血液动力学稳定以及预防再出血，但这些方法主要是应急措施，缺乏有效的病因治疗。因此，迫切需要探索新的治疗策略。核酸药物（nucleic acid therapeutics）作为一种新兴的治疗手段，具有独特的优势和广阔的应用前景。核酸药物通过基因调控、RNA干扰等机制来调节疾病相关基因的表达，可以针对特定的病理机制进行精确干预。例如，siRNA、miRNA和反义寡核苷酸（ASO）可以特异性地沉默或调节与出血性脑卒中相关的基因表达，从而减轻炎症反应、保护血脑屏障并促进脑组织修复。此外，核酸药物还可以设计成表达特定蛋白质或功能性RNA分子，从而在细胞层面提供多重保护。核酸药物的优势还在于其高度特异性和多样性，可以根据患者的具体病情进行个性化设计，最大限度地提高治疗效果并减少副作用。核酸药物有望成为治疗出血性脑卒中的一种有效策略，为患者带来新的希望。

关键词： 出血性脑梗；核酸药物递送；炎症反应；血肿

参考文献

[1] Puy, L., Parry-Jones, A.R., Sandset, E.C. et al. Intracerebral haemorrhage[J]. Nat Rev Dis Primers.2023, 9, 14.

[2] Kandel A , Arjyal A , Karmacharya B ,et al.Pragmatic solutions for the global burden of stroke[J].The Lancet Neurology, 2024, 23(4):334-334.

报告人简介：

个人简介

史进进，郑州大学药学院教授，博士生导师，河南省肿瘤重大疾病靶向治疗与诊断重点实验室副主任、药学院药物创新与转化研究所主任、河南省生物工程研究中心副主任。国家优青，河南省杰青获得者，河南省高校创新团队负责人，中原青年拔尖人才，河南省高层次人才，河南省高校科技创新人才，河南省药品监督管理局、市场管理局外聘专家。一直从事药剂学领域研究。主持国家、省部级项目 16 项。获河南省科学技术进步奖一等奖（排名 2）、河南省教育厅科技成果一等奖等。以第一作者或通讯作者在 *Sci. Adv.*、*Nature. Commun.*、*Adv. Mater.*等高质量期刊发表 SCI 论文 80 余篇，授权国家发明专利 10 项，合作开发转化 1 项。任中国颗粒学会青年理事、河南省药学会常务理事、河南省药学会药剂专委会主任委员等。

附：报告人不是学生

仿生药物递送与脑卒中治疗

于文艳

郑州大学，河南省高新区科学大道 100 号，450001

*Email: ywyyxy@zzu.edu.cn

脑卒中是威胁人类健康和生存的重大疾病之一，具有较高的发病率和致残率，给患者及其家庭带来了巨大的负担。现有的治疗方法，如静脉溶栓和机械取栓，虽然能够在一定程度上恢复血供，但其应用受限于治疗窗口期短和出血风险高。此外，脑卒中后过度激活的脑部免疫反应也会加重神经损伤，进一步影响预后。因此，如何安全高效地溶栓恢复血供并抑制过度激活的脑部免疫反应是脑卒中治疗的关键。

受体内天然的细胞转运机制及胞外囊泡分泌启发，我们发展了一系列仿生药物递送系统，旨在克服血脑屏障，向脑卒中病灶精准递送小分子、核酸及蛋白药物。这些仿生递送系统能够模拟细胞和胞外囊泡的特性，通过特异性配体与受体的相互作用，实现靶向识别和高效内吞。此外，这些递送系统还具有良好的生物相容性和可降解性，能够显著减少系统性副作用。我们在动物模型中的研究表明，这些仿生药物递送系统不仅能够有效恢复血供，减少梗死面积，还能够显著抑制炎症反应和神经损伤。

综上所述，仿生药物递送系统为脑卒中的治疗提供了一种全新的思路和手段，具有良好的临床应用前景。我们相信，随着这一技术的不断发展和完善，将会为脑卒中患者带来更加安全有效的治疗选择。

关键词：脑卒中治疗；胞外囊泡；药物递送；免疫抑制

参考文献

[3] Kandel A , Arjyal A , Karmacharya B ,et al.Pragmatic solutions for the global burden of stroke[J].The Lancet Neurology, 2024, 23(4):334-334.

[4] Zhang Z G , Buller B , Chopp M .Exosomes — beyond stem cells for restorative therapy in stroke and neurological injury[J].Nature Reviews Neurology, 2019.

报告人简介：

个人简介

于文艳，2024 年 6 月毕业于郑州大学药学院，入职郑州大学药学院副研究员，主要从事脑靶向药物研究，以第一或通讯作者在 Sci Adv, J Control Release 等期刊发表 SCI 论文 10 余篇，申请国家发明专利 3 项。

附：报告人是副研究员

国产天然磷脂及配套辅料质量性能及应用技术开发

唐星[1]

[1]沈阳药科大学，辽宁省沈阳市沈河区文化路 103 号，110016

*Email: tangpharm@sina.com

摘要正文：磷脂是制药行业中的重要辅料之一，其两亲性结构赋予其包括乳化、增溶、自组装等在内的多种功能，进而应用于包括乳剂、脂质体、多囊脂质体、磷脂凝胶、磷脂胶束等在内的多种剂型中。本文首先对磷脂及相关脂质类辅料的产业与应用概况进行分析，发现脂质类辅料的生产与应用主要集中在欧洲、北美、与亚太地区，相关分布于医药强国的分布高度重合，这与磷脂等脂质辅料在新型高端制剂，如静脉用乳剂、脂质体、多囊脂质体、固体脂质纳米粒、脂质纳米颗粒等中的广泛应用有关。除磷脂外，包括油酸、油酸钠、胆固醇及其衍生物等脂质辅料在相关剂型的成型与疗效发挥中也具有重要作用。研究发现，油酸可作为乳化剂、增溶剂和分散剂应用于上述剂型，但在与脂质体联用时，过量油酸的加入可促进形成片层六角相，造成脂质体膜破裂；油酸钠的引入可调节磷脂的HLB值，降低粒径，增大ζ电位绝对值，进而提升乳剂稳定性，但因其具有一定毒性和刺激性，需控制用量；胆固醇可通过嵌入磷脂双分子层内以起到调节膜柔韧性，现已广泛应用于脂质体的生产；胆固醇琥珀酸单酯（CHEMS）为胆固醇的酸性衍生物，拥有一个可离子化的羧基，可与磷脂亲水端借助氢键结合，还与磷脂季铵盐之间存在静电相互作用，起到界面膜稳定作用，此外，CHEMS还可与拥有碱性基团的药物形成离子对，提高药物在油性介质中的担载效率[1,2]。基于上述关键辅料，本研究团队展开应用技术开发，主要开展了以下工作：（1）针对克拉霉素注射用的注射疼痛问题，制备注射用克拉霉素脂质体，显著降低注射刺激性的同时，有效提高了抗菌效果，并降低了耐药性；（2）针对晚期癌痛用药选择不足的问题，以具有镇痛、抗炎效果的大麻二酚为API，开发磷脂凝胶型肌肉注射剂以解决其口服首过代谢率高的问题，并避免中枢CB1受体激活带来的副作用与成瘾性问题；（3）针对双氯芬酸钠口服制剂生物利用度低、起效慢，注射液刺激性强的问题，研发了稳定性良好的双氯芬酸钠磷脂胶束注射液，有效改善了其刺激性与生物利用度问题；（4）原人参三醇（PPT）具有良好的抗皮肤光老化作用，但亲脂性差，皮肤渗透效率低。制备PPT脂质体以提升其对皮肤的渗透，并与氨甲环酸、水杨酸联合制备外用凝胶（PPT/TA/SA脂质体外用凝胶），为新型美白产品提供新的思路；（5）在禽类养殖业中，常将盐酸大观霉素-盐酸林可霉素与马立克疫苗联用以防治支原体感染和马立克氏病，但药物溶液与疫苗直接混合会造成疫苗效价下降。针对上述问题，联合主动载药法和静电吸附载药法，制备担载两种抗生素的脂质体，可有效防止疫苗失活，并提高支原体感染治疗效果；（6）针对艾塞那肽需频繁注射，而市售微球制剂存在制备工艺复杂、释药持续性差的问题，开展艾塞那肽多囊脂质体研究，首先通过制备艾塞那肽棕榈酸酯提高其亲脂性与血浆蛋白结合率，提高药物半衰期，随后制备多囊脂质体，通过药物入血速率调控显著提高了艾塞那肽的释药持续时间，进而将给药频率降低至每月2次。综上，磷脂及相关脂质辅料在新型高端制剂的研发中起到了不可替代的作用，目前，相关辅料品种已实现国产化，为我国制药行业发展提供了新的推动力。

关键词：药用辅料；天然磷脂；药物递送系统；

参考文献

[1] **S. C. Geng, X. L. Liu, and X. Hang Clarithromycin ion pair in a liposomal membrane to improve its stability and reduce its irritation caused by intravenous administration. *Expert Opin Drug Deliv.* 2016, 13(3): 337-48.**

[2] **L. F. Luo, Q. Y. Chen and H. Y. Gong Capacity of cholesteryl hemisuccinate in ion pair/phospholipid complex to improve drug-loading, stability and antibacterial activity of clarithromycin intravenous lipid microsphere. *Colloids Surf B Biointerfaces.* 2018, 172: 262-71.**

报告人/墙报展示人简介：

唐星，沈阳药科大学教授，博士生导师。中国颗粒学会第八届理事会副理事长，中国颗粒学会药物制剂与粒子设计专业委员会主任委员。唐星教授在化学药及小分子天然产物的口服缓控释制剂、长效注射剂、静脉特种制剂等尖端制剂研发领域建树颇丰，开创了包括纳米乳剂界面膜载药在内的一系列制剂新技术，并阐明了尖端制剂研发与产业化转化中的一系列科学问题。唐星教授共发表 SCI 论文近三百篇，并获新药临床批件 25 项，新药证书 11 项。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Evaluating the surface hydrophilicity of pharmaceutical powders via inverse gas chromatography

Shen Yan [1], Shengyu Zhang [1], Eric Brendle [2,*], Xiao Dong Chen [1], Winston Duo Wu[1,*]

[1]Engineering Research Centre of Advanced Powder Technology (ERCAPT), College of Chemistry, Chemical Engineering and Materials Science, Soochow University, 215123, Suzhou, PR China

[2]Adscientis, F-68310, Wittelsheim, France

* duo.wu@suda.edu.cn (W. D. Wu), e.brendle@adscientis.com (E. Brendle)

The wettability of a pharmaceutical formulation directly affects its absorption performance, which depends on the surface hydrophilicity of the API and excipient. Existing studies predict the hydrophilicity of APIs and excipients by calculating the logP or polar surface area (PSA) through commercially available software. However, the complex surface composition of pharmaceutical microparticles obtained after processing by particle technology makes it difficult to evaluate their hydrophilic properties directly through theoretical calculations. Traditionally, the surface hydrophilicity can be evaluated using the contact angle, which can be determined by the sessile drop or liquid penetration method. However, these approaches remain inherent challenges and limitations. For example, materials with highly hydrophilic surfaces may undergo rapid erosion, thereby rendering precise measurements of contact angles unattainable. Hence, it becomes imperative to explore the advancement of a non-invasive technique capable of directly characterizing the surface properties of pharmaceutical powders. Inverse gas chromatography (IGC) provides a comprehensive evaluation of the surface properties of microparticles without causing any damage to the sample. In the case of finite concentration analysis (IGC-FC), probe liquid is injected. The specific details within the chromatograms can be utilized to derive desorption isotherms through elution at the characteristic point (ECP) procedure. Ultimately, this procedure enables the determination of the Brunauer–Emmett–Teller (BET) specific surface area and adsorption energy distribution functions (AEDF). In this work, mannitol was selected as the hydrophilic model API, while leucine was chosen as the hydrophobic excipient. The model microparticles were fabricated by co-spray drying pure mannitol or mannitol/leucine feed solutions with different mass ratios (19:1, 9:1 and 8:2) at a fixed total solid content of 10 w/w%. The specific surface area and AEDF of specific sites of disperse force, polar force and hydrogen bonding were evaluated by the IGC-FC method using octane/cyclooctane, ethyl acetate and isopropanol, respectively. Moreover, the specific hydrophilic surface area and its associated AEDF were also determined using water as the probe. This work provides new insight for evaluating the surface hydrophilicity of pharmaceutical powders.

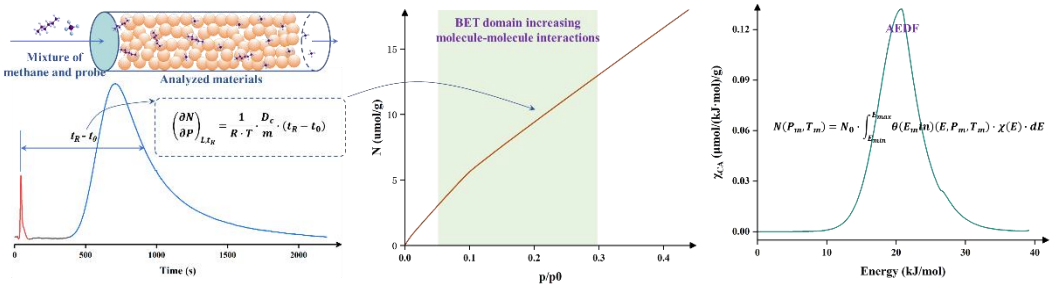


Fig. 1 Schematic graph of inverse gas chromatography at finite concentration.

Keywords: pharmaceutical powders, spray drying, surface hydrophilic, inverse gas chromatography, *in vitro* release profiles.

References

[1] H. Balard, Estimation of the Surface Energetic Heterogeneity of a Solid by Inverse Gas Chromatography. *Langmuir* 1997, 13 (5), 1260-1269.

报告人/墙报展示人简介：

严珅，苏州大学材料与化学化工学部博士研究生，主要课题方向为反气相色谱技术在生物医药、吸附分离和新能源材料领域的应用探索。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

肺血管靶向性细胞外囊泡的构建及其在急性肺损伤治疗中的作用研究

鲁莹[1]，顾铮岩[1,2]，肖凯[1,*]，鲁莹[1,*]

[1]海军军医大学药学系药剂学教研室，上海，200433

[2]海军军医大学海医系防化医学教研室，上海，200433

*Email: acuace@163.com

摘要正文：

急性肺损伤（Acute lung injury, ALI）是一种严重的呼吸系统疾病，早期未及时干预治疗可发展为急性呼吸窘迫综合征，具有较高的死亡率[1]。肺微血管内皮屏障的完整性参与ALI的发展和愈后。因此，修复内皮屏障完整性成为治疗ALI的重要手段。细胞外囊泡（Extracellular Vesicles,EVs）是一类由细胞释放，具有独特生物活性的纳米囊泡，是一种有前景的ALI的治疗药物[2]。本课题设计了一种内皮细胞来源的工程化细胞外囊泡（eEVs），通过将microRNA-125b-5p（miRNA-125b）靶向递送至损伤肺组织，发挥对内皮屏障的修复作用。利用基因融合技术将一段肺微血管内皮细胞靶向肽（LET）修饰于EVs表面，延长其在肺组织中的滞留能力并靶向作用于损伤的内皮细胞。将一段具有抗炎、血管修复作用的miRNA-125b通过试剂盒转染技术负载于EVs，最终构建LET-EVs-miRNA-125b。相较于EVs、miRNA-125b和EVs-miRNA-125b治疗组，LET-EVs-miRNA-125b对ALI发挥显著的治疗效果，有效减轻肺损伤，抑制炎性细胞浸润，保护肺气血屏障完整性。研究显示，LET-EVs-miRNA-125b对肺微血管内皮屏障具有显著的保护作用，有效地抑制细胞凋亡，促进细胞增殖，保护细胞间连接。通过对ALI小鼠肺组织和LET-EVs-miRNA-125b治疗组小鼠肺组织进行转录组测序分析，大量炎症、内皮屏障相关的通路在此富集。早期生长反应因子（EGR1）是显著变化的差异基因，LET-EVs-miRNA-125b通过递送miRNA-125b，抑制EGR1的表达，发挥抗炎和内皮屏障保护作用。综上所述，该研究设计构建了一种内皮细胞来源的工程化细胞外囊泡，通过保护损伤的内皮屏障发挥对ALI显著的治疗作用。

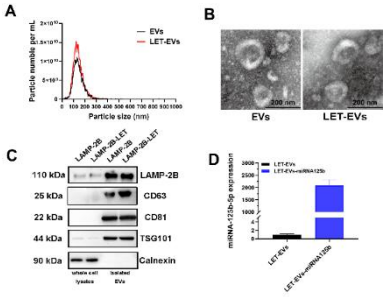


Fig. 1 Characterization of Engineered EVs

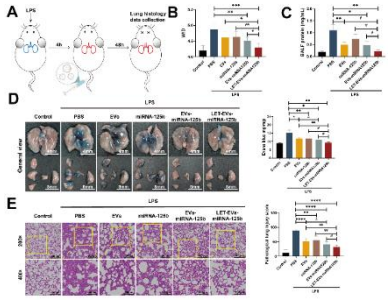


Fig. 2 Engineered EVs ameliorates ALI in mice

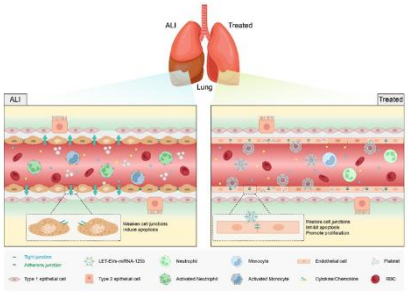


Fig. 3 Mechanism diagram

键词：急性肺损伤；内皮屏障；工程化细胞外囊泡；早期生长反应因子

参考文献

[1] Hu Q, Zhang S, Yang Y, Yao JQ, Tang WF, Lyon CJ, Hu TY, Wan MH: Extracellular vesicles in the pathogenesis and treatment of acute lung injury. *Military Medical Research.* 2022, 9:61.

[2] van Niel G, D'Angelo G, Raposo G: Shedding light on the cell biology of extracellular vesicles. *Nature reviews Molecular cell biology.* 2018, 19:213-28.

报告人/墙报展示个人简介：

鲁莹 （1974-），女，博士，教授，博士生导师。中国人民解放军军用特需药品制剂中试基地生产负责人。中国药学会药剂专业委员会委员，上海市药学会药剂学专业委员会副主任委员，中国生物颗粒专业委员会委员，全军药学会军事药学委员会副主任委员及药剂专业委员会委员，校 A 级教员。从事《药剂学》、《中药药剂学》、《生物药剂学》及《药物动力学》的教学和科研工作。科研方向为纳微米载药系统、靶向递药系统和新药研发。近三年研究工作聚焦在脑卒中靶向递送系统研究和外泌体递送方向。承担国家科技重大专项、国家自然科学基金、上海市自然基金等课题多项，在 APSB，Biomaterials，Journal of Controlled Release，等期刊发表研究论文 80 余篇，国家发明专利授权 34 项。长期从事军用特需药品研发工作，作为主要技术人员参与高原防晒霜、高原多维元素片等军特药品种的研制和生产工艺改进工作，获军用特需药品生产批文 3 个。

附：报告人/墙报展示人为教授

核酸纳米结构调控细胞膜蛋白用于肿瘤治疗

刘珍宝 [1,*]

[1] 中南大学湘雅药学院，长沙，410013

*Email: zhenbaoliu@csu.edu.cn

摘要正文：通过功能核酸纳米结构调控肿瘤细胞膜蛋白为肿瘤治疗开辟新的途径。首先，调控对细胞膜受体靶向能力：设计激活式的靶向策略可以降低非特异性结合，提高靶向特异性，我们通过设计肿瘤微环境酸激活的响应性DNA纳米结构，实现更加精准的肿瘤靶向和治疗。其次，调控细胞膜聚集：采用双适配体，对三阴性乳腺癌的CD44受体和核仁素受体进行聚集，从而对其下游信号通路进行抑制，抑制肿瘤细胞转移。再次，调控细胞膜受体二聚化：肿瘤细胞膜蛋白的二聚化可激活下游信号传导，促进癌细胞的抗凋亡和促进细胞增殖。因此，精准抑制肿瘤细胞细胞膜受体的同源或异源二聚化，进而抑制肿瘤恶性增殖和存活，是治疗HER2阳性乳腺癌的重要策略。由此，我们开发酸激活的核酸胶束，实现对HER2阳性乳腺癌细胞的靶向，通过抑制HER2二聚化和诱导癌细胞凋亡对HER2阳性乳腺癌细胞产生显著抗肿瘤效果。最后，调控细胞膜受体降解：溶酶体靶向降解嵌合体（LYTAC）最新提出的蛋白质降解技术，通过将蛋白质募集到位于细胞表面的溶酶体靶向受体（LTRs）来利用溶酶体降解途径。我们通过设计并构建溶酶体靶向能力的DNA四面体，实现对PTK-7受体的靶向降解，有效抑制了肿瘤细胞的生长和发展。这些创新性方法不仅扩展了功能核酸在肿瘤治疗中的应用，还为开发更精准、高效的靶向治疗策略提供了理论基础和实验支持。

关键词：功能核酸；核酸纳米结构；细胞膜调控；肿瘤治疗

参考文献

[26] Y. Liu, Y. Hu, Y. Tan, Q. Chen, Z. Liu*, Tumor acidic microenvironment activatable DNA nanostructure for precise cancer cell targeting and inhibition, Chinese Chemical Letters, 2024, 110289.

[2] 授权专利：一种用于抑制核酸适配体靶向能力的DNA链、纳米递药系统及制备方法，ZL 2021 1 0051368.0

[3] 授权专利：用于检测和/或治疗三阴性乳腺癌的DNA 核酸链靶向系统及其制备和应用，ZL 2022 1 0228648.9

Nucleic Acid Nanostructures Regulating Cell Membrane Proteins for Tumor Therapy

Zhenbao Liu[1,*]

[1]Xiangya School of Pharmaceutical Sciences, Central South University, Changsha, 410013

*Email: zhenbaoliu@csu.edu.cn

Abstract: Regulating tumor cell membrane proteins through functional nucleic acid nanostructures opens new avenues for tumor treatment. First, regulate the targeting ability to cell membrane receptors: designing activation-based targeting strategies can reduce nonspecific binding and improve targeting specificity. We achieve more precise tumor targeting and treatment by designing pH-responsive DNA nanostructures activated by the acidic tumor microenvironment. Second, regulate cell membrane aggregation: using dual aptamers, we aggregate the CD44 receptor and nucleolin receptor in triple-negative breast cancer, thereby inhibiting their downstream signaling pathways and suppressing tumor cell metastasis. Third, regulate the receptor dimerization on the cell membrane: dimerization of tumor cell membrane proteins can activate downstream signaling, promoting cancer cell survival and proliferation. Therefore, precisely inhibiting the homodimerization or heterodimerization of tumor cell membrane receptors is an important strategy for treating HER2-positive breast cancer. We develop pH-activated nucleic acid micelles that specifically target

HER2-positive breast cancer cells, significantly exerting antitumor effects by inhibiting HER2 dimerization and inducing cancer cell apoptosis. Finally, regulate the degradation of cell membrane receptors: the recently proposed lysosome-targeted degradation technology (LYTAC) utilizes lysosomal degradation pathways by recruiting proteins to lysosome-targeting receptors (LTRs) on the cell surface. We design and construct DNA tetrahedra with lysosome-targeting capabilities to achieve targeted degradation of the PTK-7 receptor, effectively inhibiting tumor cell growth and development. These innovative methods not only expand the application of functional nucleic acids in tumor therapy but also provide a theoretical foundation and experimental support for developing more precise and efficient targeted therapeutic strategies.

Keywords: Functional nucleic acids; Nucleic acid nanostructures; Cell membrane regulation; Tumor therapy.

References

[1] Y. Liu, Y. Hu, Y. Tan, Q. Chen, Z. Liu*, Tumor acidic microenvironment activatable DNA nanostructure for precise cancer cell targeting and inhibition, Chinese Chemical Letters, 2024, 110289.

[2] 授权专利：一种用于抑制核酸适配体靶向能力的DNA链、纳米递药系统及制备方法，ZL 2021 1 0051368.0

[3] 授权专利：用于检测和/或治疗三阴性乳腺癌的DNA 核酸链靶向系统及其制备和应用，ZL 2022 1 0228648.9

报告人/墙报展示人简介：

刘珍宝，中南大学湘雅药学院药剂学系，教授，博士生导师，湖南省杰出青年基金获得者，湖南省卫健委高层次人才-青年骨干人才，湖湘青年英才，湖南省第二届优秀研究生导师。致力于分子药剂学，功能核酸及纳米材料在药物传递系统和分子诊断中的研究。发表多篇高水平论文，在 Advanced Science、Biomaterials、Biosensor and Bioelectronics、Journal of Controlled Release、TrAC-Trends in Analytical Chemistry Materials Horizons 等期刊发表第一作者或通讯作者国际英文期刊 SCI 论文 39 篇（10 篇 IF＞10，高被引论文 3 篇）。参编 Springer 专著 1 部，ACS publication 专著 1 部，Elsevier 专著 1 部，参编《药学概论》教材 1 部，授权专利 5 项。主持国家自然科学基金面上项目，国家自然科学基金青年基金，湖南省杰出青年科学基金，湖湘青年英才项目等科研项目。曾担任湖南省长沙市科学技术局青年科技特派员。现为中国颗粒学会药物制剂与粒子设计专业委员会委员，中国抗癌协会纳米肿瘤学专业委员会委员，中国生物医学工程学会纳米医学与工程学会青年委员，担任期刊 Asian Journal of Pharmaceutics Sciences，Chinese Chemical Letters，Exploration，VIEW，MedMat，Acta Materia Medica 杂志青年编委。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

A Chem-Stimulated Antibacterial Photodynamic Therapy System Enhancing MRSA Biofilm Penetration and Disrupting Bacterial H_2S Self-Defense Barrier

WeiYe Ren [a,1], WeiYi Cheng [a], Li He [a], JingQuan Chen [a], Dandan Bao[c,*], Yinghui Wei [a,*], Ji-Gang Piao [a,*]

[a] College of Pharmaceutical Sciences, Zhejiang Chinese Medical University, Hangzhou, 310053, China.

[b] Department of Oncology, Affiliated Zhejiang Hospital, Zhejiang University School of Medicine, Hangzhou 310013, China

[c] Department of Dermatology & Cosmetology, The First Affiliated Hospital of Zhejiang Chinese Medical University, Hangzhou 310006, China

[*] Corresponding Author:

E-mail address: baodandan1990@163.com (D. Bao), yhw_nn@zcmu.edu.cn (Y Wei), jgpiao@zcmu.edu.cn (J-G Piao).

The escalating crisis of antibiotic resistance severely constrains the efficacy of traditional antimicrobial therapies, highlighting the urgent need for the development of novel and efficient antibacterial strategies. This study proposes an innovative dual-action antibacterial approach that circumvents the need for antibiotics, aiming to eradicate stubborn MRSA biofilm-associated infections. Building upon conventional antimicrobial photodynamic therapy (APDT), we introduce a novel chemical luminescence system to achieve in-situ activation of APDT, overcoming the limitation of limited tissue penetration depth associated with external light sources. The byproduct CO_2 gas not only disrupts the biofilm structure but also provides physical propulsion to drug-loaded nanocarriers, facilitating the deep and uniform penetration of antimicrobial agents into the biofilm. Furthermore, hypericin acts not only as a photosensitizer to induce reactive oxygen species and oxidative stress in MRSA but also inhibits CBS enzyme activity, thereby disrupting MRSA's self-defense mechanism of H_2S production. In summary, utilizing chemical luminescence for in-situ activation of photosensitizers represents an innovative antibacterial strategy. It not only overcomes the limitations of light penetration depth but also precisely activates multiple antibacterial mechanisms, offering a novel solution for the treatment of recalcitrant MRSA infections and related diseases, with promising prospects for clinical translation.

Keywords: Anti-bioflm、Chem-stimulated APDT、MRSA、H_2S self-defense mechanism

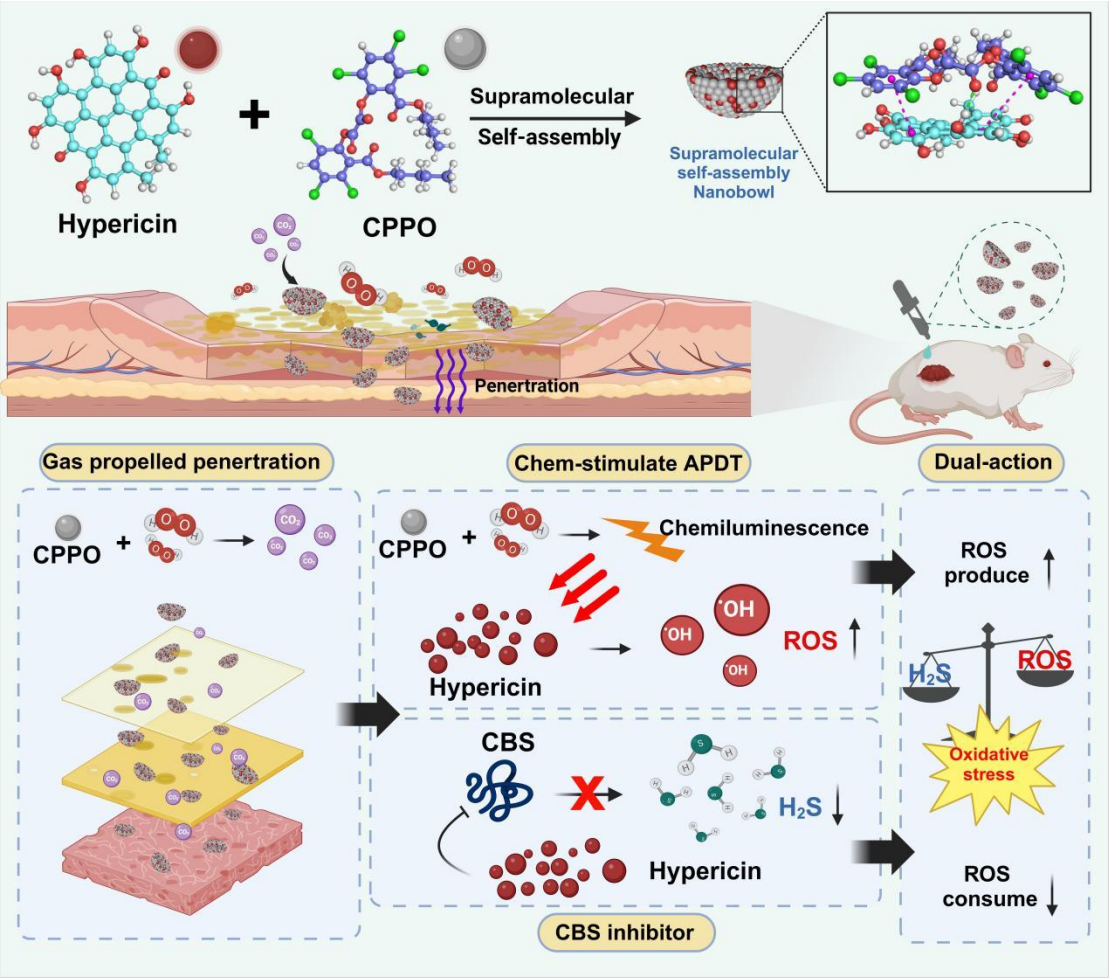


Figure 1: This system activates antibacterial photodynamic therapy through chemiluminescence while simultaneously generating CO_2, which facilitates the deep penetration of SSA NBs into the biofilm. Additionally, the intrinsic CBS enzyme inhibition by hypericin successfully inhibits H_2S production, overcoming the self-protection mechanism of the bacterial biofilm.

Reference

[1] X. Qu, C. Gao, L. Fu, Y. Chu, J.H. Wang, H. Qiu, J. Chen, Positively Charged Carbon Dots with Antibacterial and Antioxidant Dual Activities for Promoting Infected Wound Healing, ACS Appl Mater Interfaces 15(15) (2023) 18608-18619.

[2] J. Yan, B.L. Bassler, Surviving as a Community: Antibiotic Tolerance and Persistence in Bacterial Biofilms, Cell Host Microbe 26(1) (2019) 15-21.

[3] C.H. Li, R.F. Landis, J.M. Makabenta, A. Nabawy, T. Tronchet, D. Archambault, Y. Liu, R. Huang, M. Golan, W. Cui, J. Mager, A. Gupta, S. Schmidt-Malan, R. Patel, V.M. Rotello, Nanotherapeutics using all-natural materials. Effective treatment of wound biofilm infections using crosslinked nanoemulsions, Mater Horiz 8(6) (2021) 1776-1782.

[4] Y. Xia, A Tribute to Professor Buddy Ratner, Adv Healthc Mater 11(9) (2022) e2200701.

[5] Z.K. Wang, P. Zhang, C.Y. Yin, Y.Q. Li, Z.Y. Liao, C.H. Yang, H. Liu, W.Y. Wang, C.D. Fan, D.D. Sun, L. Cheng, Antibiotic-Derived Carbon-Nanodot-Decorated Hydrogel for Reactive Oxygen Species-Enhanced Anti-Infection Through Biofilm Damage, Adv Funct Mater 33(29) (2023).

[6] X. Fu, Y. Ni, G. Wang, R. Nie, Y. Wang, R. Yao, D. Yan, M. Guo, N. Li, Synergistic and Long-Lasting Wound Dressings Promote Multidrug-Resistant Staphylococcus Aureus-Infected Wound Healing, Int J Nanomedicine 18 (2023) 4663-4679.

[7] M. Villegas, C. Alonso-Cantu, S. Rahmani, D. Wilson, Z. Hosseinidoust, T.F. Didar, Antibiotic-Impregnated Liquid-Infused Coatings Suppress the Formation of Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus Biofilms, ACS Appl Mater Interfaces 13(24) (2021) 27774-27783.

[8] M. Awad, N. Thomas, T.J. Barnes, C.A. Prestidge, Nanomaterials enabling clinical translation of antimicrobial photodynamic therapy, J Control Release 346 (2022) 300-316.

[9] B. Huang, C. Zhang, J. Tian, Q. Tian, G. Huang, W. Zhang, A Cascade BIME-Triggered Near-IR Cyanine Nanoplatform for Enhanced Antibacterial Photodynamic Therapy, ACS Appl Mater Interfaces 15(8) (2023) 10520-10528.

[10] C.N. He, P.P. Feng, M.M. Hao, Y. Tang, X. Wu, W.G. Cui, J.Y. Ma, C.H. Ke, Nanomaterials in Antibacterial Photodynamic Therapy and Antibacterial Sonodynamic Therapy, Adv Funct Mater (2024).

[11] R.J. Yan, M.J. Zhan, J.C. Xu, Q. Peng, Functional nanomaterials as photosensitizers or delivery systems for antibacterial photodynamic therapy,

Biomater Adv 159 (2024).
[12] M. Piksa, C. Lian, I.C. Samuel, K.J. Pawlik, I.D.W. Samuel, K. Matczyszyn, The role of the light source in antimicrobial photodynamic therapy, Chem Soc Rev 52(5) (2023) 1697-1722.
[13] W.T. Fan, L. Li, J.J. Yuan, X.J. Ma, J. Jia, X.F. Zhang, Aggregation-Induced Emission Effect within Peroxyoxalate-Loaded Mesoporous Silica Nanoparticles for Efficient Harvest of Chemiluminescence Energy in Aqueous Solutions, Analytical Chemistry 93(51) (2021) 17043-17050.
[14] M. Ritter, L. Stricker, I. Burgert, G. Panzarasa, Chemiluminescent wood, Carbohydrate Polymers 339 (2024).
[15] J. Ye, L. Zhu, M. Yan, T. Xiao, L. Fan, Y. Xue, J. Huang, X. Yang, An intensive and glow-type chemiluminescence of luminol-embedded, guanosine-derived hydrogel, Talanta 230 (2021) 122351.
[16] L.C.D. Oliveira, I. Gaubeur, P. Dantoni, Hydrazone as a new fluorophore in the peroxyoxalate chemiluminescence reaction, J Lumin 183 (2017) 418-423.
[17] P.T. Dong, H. Mohammad, J. Hui, L.G. Leanse, J. Li, L. Liang, T. Dai, M.N. Seleem, J.X. Cheng, Photolysis of Staphyloxanthin in Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus Potentiates Killing by Reactive Oxygen Species, Adv Sci (Weinh) 6(11) (2019) 1900030.
[18] J. Wang, G. Li, H. Yin, T. An, Bacterial response mechanism during biofilm growth on different metal material substrates: EPS characteristics, oxidative stress and molecular regulatory network analysis, Environ Res 185 (2020) 109451.
[19] In situ generating CO gas for destroying bacterial biofilms.
[20] K. Shatalin, E. Shatalina, A. Mironov, E. Nudler, H2S: a universal defense against antibiotics in bacteria, Science 334(6058) (2011) 986-90.
[21] K. Shatalin, A. Nuthanakanti, A. Kaushik, D. Shishov, A. Peselis, I. Shamovsky, B. Pani, M. Lechpammer, N. Vasilyev, E. Shatalina, D. Rebatchouk, A. Mironov, P. Fedichev, A. Serganov, E. Nudler, Inhibitors of bacterial H(2)S biogenesis targeting antibiotic resistance and tolerance, Science 372(6547) (2021) 1169-1175.
[22] G. Croppi, Y.Y. Zhou, R. Yang, Y.F. Bian, M.T. Zhao, Y.T. Hu, B.H. Ruan, J. Yu, F. Wu, Discovery of an Inhibitor for Bacterial 3-Mercaptopyruvate Sulfurtransferase that Synergistically Controls Bacterial Survival, Cell Chem Biol 27(12) (2020) 1483-+.
[23] X. Huang, C. Lu, W. Zhang, L. Liu, Z. Zha, Z. Miao, Chiral Sulfur Nanosheets for Dual-Selective Inhibition of Gram-Positive Bacteria, ACS Nano 17(15) (2023) 14893-14903.
[24] E. Ramond, A. Jamet, X. Ding, D. Euphrasie, C. Bouvier, L. Lallemant, X. He, L. Arbibe, M. Coureuil, A. Charbit, Reactive Oxygen Species-Dependent Innate Immune Mechanisms Control Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus Virulence in the Drosophila Larval Model, mBio 12(3) (2021) e0027621.
[25] Fur-mediated regulation of hydrogen sulfide synthesis, stress response, and virulence in Edwardsiella piscicida.
[26] T.F. Mah, Giving antibiotics an assist, Science 372(6547) (2021) 1153.
[27] X.Y. Jia, Y.M. Wu, C. Lei, Y.Y. Yu, J.Q. Li, J.Y. Li, A.J. Hou, Hyperinoids A and B, two polycyclic meroterpenoids from, Chinese Chem Lett 31(5) (2020) 1263-1266.
[28] M. Semelakova, R. Jendzelovsky, P. Fedorocko, Drug membrane transporters and CYP3A4 are affected by hypericin, hyperforin or aristoforin in colon adenocarcinoma cells, Biomed Pharmacother 81 (2016) 38-47.
[29] T. Xu, S.J. Zhao, C.W. Lin, X.L. Zheng, M.H. Lan, Recent advances in nanomaterials for sonodynamic therapy, Nano Res 13(11) (2020) 2898-2908.
[30] N. Plenagl, B.S. Seitz, L. Duse, S.R. Pinnapireddy, J. Jedelska, J. Brussler, U. Bakowsky, Hypericin inclusion complexes encapsulated in liposomes for antimicrobial photodynamic therapy, Int J Pharm 570 (2019) 118666.
[31] Y. Liu, Self-assembly: Supramolecular basketry, Nat Chem 9(11) (2017) 1037-1038.
[32] R. Qi, Y. Cui, J. Liu, X. Wang, H. Yuan, Recent Advances of Composite Nanomaterials for Antibiofilm Application, Nanomaterials (Basel) 13(19) (2023).
[33] B. Vaid, B.S. Chopra, S. Raut, A. Sagar, M.D. Badmalia, Ashish, N. Khatri, Antioxidant and Wound Healing Property of Gelsolin in 3T3-L1 Cells, Oxid Med Cell Longev 2020 (2020) 4045365.

墙报展示人简介：

姓名：任玮晔

专业：药剂学（学术型）

当前研究聚焦于纳米递送系统的构建与优化。通过调控载体的尺寸、形貌及表面修饰，赋予其主动靶向、缓释等特性，实现对药物的精准递送与控制释放。目前成果在 **Biomaterials**、**Nano Letters**、**Biomedicine & Pharmacotherapy**、**Nano TransMed**、**pharmaceutics** 等期刊上发表。

成果：

1. Cheng W, Ren W, Ye P, He L, Bao D, Yue T, Lai J, Wu Y, Wei Y, Wu Z, Piao JG. Camouflaging nanoreactor traverse the blood-brain barrier to catalyze redox cascade for synergistic therapy of glioblastoma. ***Biomaterials***. 2024 Jul 14;311:122702.
2. Lai J, Luo Z, Liu J, Hu H, Jiang H, Liu P, He L, Cheng W, Ren W, Wu Y, Piao JG, Wu Z. Charged Gold Nanoparticles for Target Identification-Alignment and Automatic Segmentation of CT Image-Guided Adaptive Radiotherapy in Small Hepatocellular Carcinoma. ***Nano Lett***. 2024 Jul 24.
3. Wang Y, Cheng W, Zhu J, He L, Ren W, Bao D, Piao JG. Programmed Co-delivery of tamoxifen and docetaxel using lipid-coated mesoporous silica nanoparticles for overcoming CYP3A4-mediated resistance in triple-negative breast cancer treatment. ***Biomed Pharmacother.*** 2024 Jan;170:116084.
4. Xie X, Yue T, Gu W, Cheng W, He L, Ren W, Li F, Piao JG. Recent Advances in Mesoporous Silica Nanoparticles Delivering siRNA for Cancer Treatment. ***Pharmaceutics.*** 2023 Oct 17;15(10):2483.

附：墙报展示人是否为学生：是

NO 供体与光敏剂偶联自组装纳米粒的制备及其体外评价

报告人[1]，第二作者[2]，…，王梅[1,*]，…

[1]新疆医科大学药学院，新疆乌鲁木齐水磨沟区尚德北路 567 号，830017

[2]工作单位，地址，邮编

*Email: meiwang@xjmu.edu.cn

摘要正文：光动力疗法（Photodynamic therapy，PDT）与其他治疗方法的结合正在成为提高癌症的治疗效果并将副作用降至最低的最合适的策略之一。光动力影响一氧化氮（Nitric oxide，NO）水平，因为被激活的光敏剂可以诱导NO的产生，反过来肿瘤和微环境中的NO水平也会直接影响肿瘤细胞对PDT的反应。因此，为了发挥NO与光敏剂硅酞菁（Silicon Phthalocyanine，SiPc）的协同抗肿瘤效果，本文设计了3-苯磺酰基-4-(1-羟基醚)-1，2，5-噁二唑-2-氧化物NO供体-硅酞菁偶联物（SiPc-NO），并通过纳米沉淀法制备成自组装纳米粒（SiPc-NO @ NPs）。通过在纳米粒子表面进一步引入精氨酰-甘氨酰-天冬氨酸（Arg-Gly-Asp, RGD）三肽，最终制备出具有双重响应性和肿瘤靶向性的NO-光敏剂递送系统（SiPc-NO@RGD NPs），并对其制剂学特性、NO释放量以及光敏效应进行初步评价。此外，SiPc-NO@RGD NPs在红外光照射下，在4T1和MCF-7乳腺癌细胞中的ROS产生效率和PDT效率也很高。新型SiPc-NO@RGD NPs在NO递送和双光子生物成像引导的光动力学肿瘤治疗中显示出巨大的应用潜力。

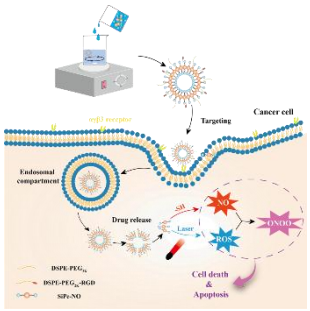


Fig. 1 Synthesis and action mechanism of SiPc-NO @ NPs RGD

关键词：光动力疗法；NO供体；自组装纳米粒；NO供体-酞菁硅偶联物；抗肿瘤

参考文献

[1] Zhang, Y.; Ng, D.K.P.; Fong, W.-P. Antitumor Immunity Induced by the Photodynamic Action of BAM-SiPc, a Silicon (IV) Phthalocyanine Photosensitizer. Cell Mol Immunol 2019, 16, 676–678.

[2] Li, X.; Lovell, J.F.; Yoon, J.; Chen, X. Clinical Development and Potential of Photothermal and Photodynamic Therapies for Cancer. Nat Rev Clin Oncol 2020, 17, 657–674.

[3] Dougherty, T.J.; Kaufman, J.E.; Goldfarb, A.; Weishaupt, K.R.; Boyle, D.; Mittleman, A. Photoradiation Therapy for the Treatment of Malignant Tumors. CANCER RESEARCH, 1978, 38, 2628-2635.

[4] Zheng, Y.; Ye, J.; Li, Z.; Chen, H.; Gao, Y. Recent Progress in Sono-Photodynamic Cancer Therapy: From Developed New Sensitizers to Nanotechnology-Based Efficacy-Enhancing Strategies. Acta Pharmaceutica Sinica B 2021, 11, 2197–2219.

[5] Lesar, A.; Mušković, M.; Begić, G.; Lončarić, M.; Tomić Linšak, D.; Malatesti, N.; Gobin, I. Cationic Porphyrins as Effective Agents in Photodynamic Inactivation of Opportunistic Plumbing Pathogen Legionella Pneumophila. IJMS 2020, 21, 5367.

[6] Novaes, G.; Blank, M.; Yoshimura, T.; Ribeiro, M.; Pereira, R. Methylene Blue-Mediated Antimicrobial Photodynamic Therapy on Chicken Semen. Photodiagnosis and Photodynamic Therapy 2023, 41, 103290.

[7] Yang, F.; Xu, M.; Chen, X.; Luo, Y. Spotlight on Porphyrins: Classifications, Mechanisms and Medical Applications. Biomedicine & Pharmacotherapy 2023, 164, 114933.

[8] Zheng, B.-Y.; Yang, X.-Q.; Zhao, Y.; Zheng, Q.-F.; Ke, M.-R.; Lin, T.; Chen, R.-X.; Ho, K.K.K.; Kumar, N.; Huang, J.-D. Synthesis and Photodynamic Activities of Integrin-Targeting Silicon(IV) Phthalocyanine-cRGD Conjugates. European Journal of Medicinal Chemistry 2018, 155, 24–33.

[9] LI, Z.; LlAO, X.; Xu, N.; XU, Z.; CHEN, Y.; ZHONG, Q.; CHANG, J. Preparation and Photodynamic Antimicrobial Activity of Tetra(4-Carboxyphenoxy)-Phthalocyaninatozinc(II) Loaded Gelatin Microspheres. Leather Science and Engineering 2023, 33, 24–30.

[10] Negi, M.; Dixit, T.; Venkatesh, V. Ligand Dictated Photosensitization of Iridium(III) Dithiocarbamate Complexes for Photodynamic Therapy. Inorg. Chem. 2023, 62, 20080–20095.

[11] LI, M.J.; Chen, Q.W.; Zhang, X.Z. Biomimetic Biological Self-Luminous Nanosystem for Photodynamic Therapy. Chinese Science Bulletin 2023, 68, 4055–4062.

[12] TONG, Q. li; CHEN, M. ting; LIN, H. zheng; CHENG, Q. xian; LU, W.X. Recent Progress in Delivery Systems for Photosensitizers and Anti-Cancerphotodynamic Therapy. Acta Pharmaceutica Sinica 2023, 58, 2320–2333.

[13] Huang, W.; Zhang, J.; Luo, L.; Yu, Y.; Sun, T. Nitric Oxide and Tumors: From Small-Molecule Donor to Combination Therapy. ACS Biomater. Sci. Eng. 2023, 9, 139–152.

[14] Ciccone, V.; Filippelli, A.; Bacchella, C.; Monzani, E.; Morbidelli, L. The Nitric Oxide Donor [Zn(PipNONO)Cl] Exhibits Antitumor Activity through Inhibition of Epithelial and Endothelial Mesenchymal Transitions. Cancers 2022, 14, 4240.

[15] Fan, Y.; Wu, W.; Luo, T.; Hu, Y.; Zhang, Q.; Zhang, J.; Xia, X. Cross-Linking of S -Nitrosothiolated AIEgens inside Cancer Cells to Monitor NO Release and Reverse Chemo-Resistance. Chem. Commun. 2021, 57, 12520–12523.

[16] Hu, X.; Gao, X.; Gao, G.; Wang, Y.; Cao, H.; Li, D.; Hua, H. Discovery of β-Carboline-(Phenylsulfonyl)Furoxan Hybrids as Potential Anti-Breast Cancer Agents. Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters 2021, 40, 127952.

[17] Zhao, Z.; Shan, X.; Zhang, H.; Shi, X.; Huang, P.; Sun, J.; He, Z.; Luo, C.; Zhang, S. Nitric Oxide-Driven Nanotherapeutics for Cancer Treatment. Journal of Controlled Release 2023, 362, 151–169.

[18] Krishnan, N.; Fang, R.H.; Zhang, L. Engineering of Stimuli-Responsive Self-Assembled Biomimetic Nanoparticles. Advanced Drug Delivery Reviews 2021, 179, 114006.

氨基酸表面功能化磁性纳米颗粒对环丙沙星的吸附行为研究

刘岐[1,*]，傅玄[1]，沈新宇[2]

[1]扬州大学医学院，扬州大学转化医学研究院，江苏省扬州市江阳中路 136 号，225009

[2]扬州大学附属医院，江苏省扬州市邗江中路 368 号，225012

*Email: liuqi@yzu.edu.cn

摘要正文：纳米粒子对药物的吸附行为是颗粒研究的重要方向之一。本研究采用一锅法成功合成了一种苯丙氨酸(Phe)修饰的磁性氧化铁纳米颗粒(Fe_3O_4@Phe NPs)，使用扫描电镜(SEM)、透射电镜(TEM)、傅里叶变换红外(FTIR)、X 射线衍射(XRD)、Brunauer-Emmett-Teller (BET)、Turbiscan 分析和振动样品磁强计(VSM)等技术对 Fe_3O_4 和 Fe_3O_4@Phe NPs 进行了表征，并对其在水溶液中吸附环丙沙星(CIP)的行为进行了研究。结果表明，所制备的 Fe_3O_4 NPs 被 Phe 完全包裹，平均直径 200 nm 左右，具有较高的比表面积(35.79 $m^2 \cdot g^{-1}$)，良好的分散性和超顺磁性。同时考察了苯丙氨酸含量、初始 pH 和离子强度对 CIP 在 Fe_3O_4 和 Fe_3O_4@Phe NPs 上吸附的影响。测定了 CIP 对 Fe_3O_4@Phe NPs 的最大吸附量为 49.27 $mg \cdot g^{-1}$。动力学实验和等温实验表明，吸附过程分别符合拟二级动力学模型和 Langmuir 等温模型，吸附机理包括静电相互作用、氢键作用、疏水性和π-π相互作用。研究结果为氨基酸表面功能化纳米颗粒的制备和吸附应用奠定了基础。

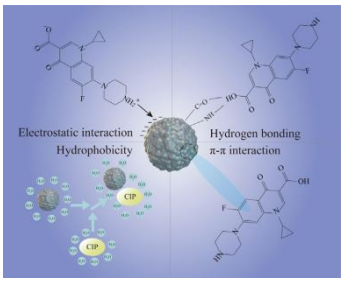


Fig. 1 Graphical abstract

关键词：磁性纳米颗粒；表面功能化；氨基酸；环丙沙星；吸附

参考文献

[1] X. Wang, B. Cheng, L. Zhang, et al. Normatov, Adsorption performance of tetracycline on NiFe layered double hyd roxide hollow microspheres synthesized with silica as the template, *J. Colloid Interface Sci.* 627 (2022) 793-803.
[2] C. Yu, Z. Xiong, H. Zhou, et al. Marriage of membrane filtration and sulfate radical-advanced oxidation processes (SR-AOPs) for water purification: Current developments, challenges and prospects, *Chem. Eng. J.* 433 (2022) 133802.
[3] M. Wang, Y. Li, M. Cui, et al. Barium alginate as a skeleton coating graphene oxide and bentonite-derived composites: Excellent adsorbent based on predictive design for the enhanced adsorption of methylene blue, *J. Colloid Interface Sci.* 611 (2022) 629-643.

报告人/墙报展示人简介：

刘岐，扬州大学医学院硕士研究生导师，主要从事口服缓控释制剂、外用制剂的研究与开发。主持各级科研项目 6 项，以第一作者和通讯作者发表论文 20 篇，其中 SCI 论文 15 篇，授权发明专利 3 项，参编著作 1 部，获得“中国商业联合会科学技术奖”等各级奖励 10 项。

基于计算流体力学与定制化微流控芯片的纳米药物合成递送研究

陈登岳[1]

[1] 厦门大学药学院，福建省厦门市翔安区翔安南路 4221 号药学院，361102

*Email: dchen@xmu.edu.cn

纳米药物近年来在治疗肿瘤、心脑血管疾病和免疫性疾病等重大疾病中展现出巨大的潜力。特别是 mRNA 疗法的兴起，然而纳米药物在体内外的稳定性差、免疫原性高，以及难以跨越生物屏障等问题，仍然是阻碍其临床转化的关键挑战。为了应对这些挑战，药学工作者致力于开发靶向性强、副作用小、生物利用度高的纳米药物递送系统。

本研究结合计算流体力学（CFD）模拟与实验，开发了一种基于微流控芯片的定制化纳米药物递送平台。通过精确设计和优化微流道结构，我们研究了纳米药物在微通道内的流场分布、传热与传质规律，成功构建了用于不同分子药物的纳米药物包覆递送系统。该平台具有操作简便、成本低廉、可控性高和重复性强的特点，显著提升了纳米药物的制备效率和靶向递送效果。

关键词：计算流体力学，纳米药物，微流控芯片，剪切力，药物递送

Research on the synthesis and delivery of nanomedicines based on computational fluid dynamics and customized microfluidic chips

Author

Dengyue Chen[1]

[1]School of Pharmaceutical Sciences, Xiamen University, Xiamen, Fujian, China, 361102

* dchen@xmu.edu.cn

In recent years, nanomedicine has demonstrated immense potential in the treatment of major diseases such as cancer, cardiovascular, and immune disorders. The rise of mRNA therapies has further propelled the application of nanomedicine in the biomedical field. However, key challenges hindering its clinical translation remain, including poor stability both in vitro and in vivo, high immunogenicity, and difficulties in crossing biological barriers. To address these challenges, pharmaceutical researchers have been dedicated to developing nanomedicine delivery systems with high targeting specificity, minimal side effects, and enhanced bioavailability.

This study integrates computational fluid dynamics (CFD) simulations with experimental approaches to develop a customized nanomedicine delivery platform based on microfluidic chips. By precisely designing and optimizing the microchannel structures, we investigated the flow field distribution, heat, and mass transfer laws of nanomedicines within the microchannels, successfully constructing a nanomedicine encapsulation and delivery system for various macromolecular drugs. The platform boasts features such as simplicity of operation, low cost, high controllability, and strong reproducibility, significantly improving the efficiency of nanomedicine preparation and targeted delivery.

Keywords: Computational Fluid Dynamics, Nanomedicine, Microfluidic Chips, Shear Stress, Drug Delivery

报告人/墙报展示人简介：

陈登岳博士毕业于美国新泽西理工大学，师从膜中心主任 Kamalesh K. Sirkar。2010 年以来长期从事纳米药物的制备方法设计与理论创新研究，对纳米药物合成与药物递送有着扎实的研究基础和背景，并且一直以来积极关注参与该领域内 LNP 制备以及模拟技术的研究工作。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

报告人姓名：张欣　　工作单位：沈阳药科大学

是否为学生：否

联系邮箱：zhangxinspu@foxmail.com

摘要：

仿生乳糜微粒定向驱动生物大分子跨肠黏膜屏障机制

张欣[1,*]，崔舒曼[1]，毛世瑞[1,*]

[1]，沈阳药科大学，药学院，辽宁，沈阳，110016

*Email: zhangxinspu@foxmail.com

maoshirui@syphu.edu.cn

摘要正文：

口服递送生物大分子药物具有用药安全、患者依从性高、模拟体内降糖相关激素分泌节律等独特优势，但其面临诸多胃肠道吸收屏障，口服生物利用度极低。本研究受脂质营养物质经乳糜微粒途径高效吸收的启发，探索基于透明质酸接枝甘油酯衍生物构建的功能化乳糜微粒仿生纳米载体改善生物大分子药物口服递送效率的可行性。首先，以艾塞那肽为模型药物，应用L-精氨酸构建纳米内核，进一步基于透明质酸接枝油酸甘油酯衍生物纳米包衣，构建仿生核壳纳米粒，评价仿生纳米粒的胃肠道稳定性、黏液渗透性、肠黏膜渗透性，探讨仿生纳米粒表面纳米包衣结构的油酸甘油酯接枝度对其肠黏膜渗透效率的影响。结果表明，经 HA-DOG 纳米包衣，纳米内核的胰蛋白酶稳定性、黏液透过性与黏膜渗透性均显著改善，其改善效果具有油酸甘油酯接枝度依赖性。高接枝度 HA-DOG40%/EAZ NPs 能够增强纳米粒在十二指肠、空肠、回肠的黏膜渗透性，并主要以长链脂肪酸转运蛋白和小窝蛋白介导其内吞。与纳米内核相比，HA-DOG 包衣结构显著增加了载体在小肠绒毛与派尔集合淋巴结处吸收。药动学结果表明 HA-DOG40%/EAZ NPs 的口服相对生物利用度为 9.67%，可发挥缓慢持久的降血糖效果。此外，连续口服一个月后能够改善胰岛细胞的功能。综上所述，构建功能化仿生乳糜微粒纳米粒能够改善艾塞那肽的胃肠道稳定性，增强其在黏液层与肠黏膜的渗透性，进而提高艾塞那肽的口服递送效率，发挥其调控体内胰岛素控制血糖水平的生理作用。

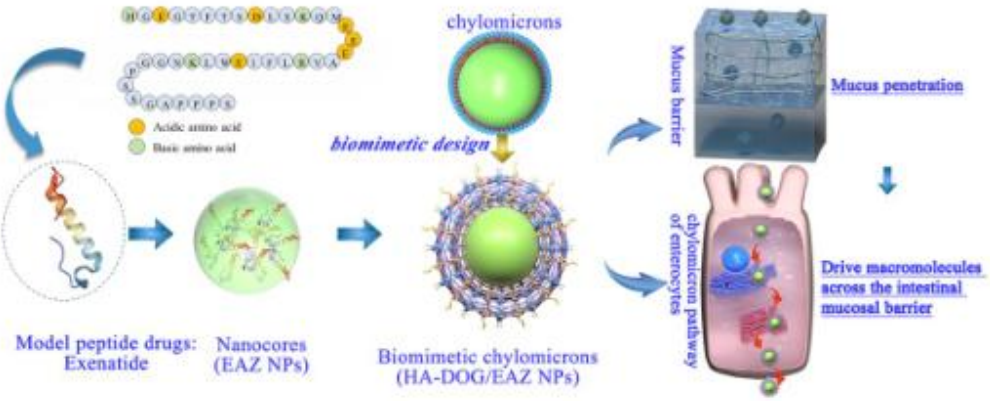


Fig. 1 Schematic diagrams of the designed biomimetic nanoparticles and their oral delivery fate

关键词：透明质酸油酸甘油酯衍生物；仿生乳糜微粒纳米载体；口服递送；艾塞那肽

报告人/墙报展示人简介：

张欣，理学博士，副教授，硕士生导师，任职于沈阳药科大学-药物制剂教研室。主要研究方向为仿生黏膜递药系统设计与评价与固体制剂粉体学研究，研究针对目前黏膜递药系统设计中存在的盲目性和低效性问题，基于人体生理微环境，仿生设计智能生物可降解高分子载体，构建可有效突破药物递送障碍的高效递药系统，学术 H 指数（h-index）：23。作为课题负责人主持国家自然科学基金、博士后面上项目、药典委辅料标准提高项目、辽宁省教育厅面上项目、辽宁省青年育苗项目等。相关研究获得辽宁省自然科学奖二等奖（第二完成人）、辽宁省自然科学学术成果奖二等奖（第一完成人）。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Email: zhangxinspu@foxmail.com

Phone:18041376168

报告人姓名：周珊珊
工作单位：浙江中医药大学药学院
是否为学生：是
联系邮箱：2957147632@qq.com

Photothermal driven nanomotor microneedles loaded with triptolide: an effective treatment for rheumatoid arthritis

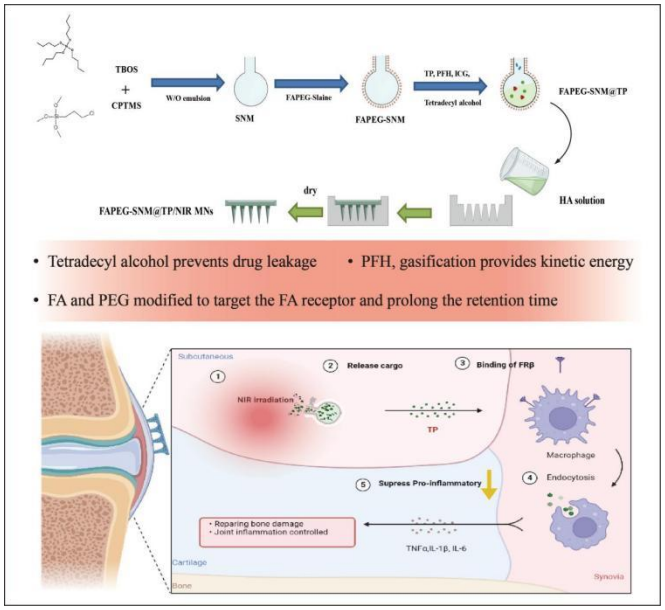
Shanshan Zhou[1], Bixin Cheng[1], Yujie Lu[1], Yujun Shan[1], Le Wen[1], Yanxia Guo[1],Hangsheng ZHENG [1,*]

[1]School of Pharmaceutical Sciences, Zhejiang Chinese Medical University, Hangzhou 311402

*2957147632@qq.com

Abstract: Rheumatoid arthritis (RA) is a chronic autoimmune inflammatory disease of the autoimmune system manifested by persistent synovitis, cartilage destruction and even deformities. The main limiting factors in clinical treatment of RA are the low efficiency of joint cavity drug delivery and the high rate of joint clearance[1]. Triptolide (TP) is the main active ingredient of *Tripterygium wilfordii Hook. F.*, which has anti-tumor, immune regulating, anti-inflammatory and other effects[2]. In this work, a drug delivery system (FAPEG-SNM@TP/NIR MNs) of soluble microneedles (MNs) encapsulating TP loaded photothermally driven nano-motors modified by folic acid-PEG (FAPEG-SNM@TP/NIR) was constructed. The characterization experiments indicated that FAPEG-SNM@TP/NIR was uniform in particle size and capable of photothermal transformation in vitro. FAPEG-SNM@TP MNs could effectively penetrate the stratum corneum and release drug, with stable drug content, increasing the amount of penetration and retention in isolated skin. After microneedle dissolution, the FAPEG-SNM@TP/NIR can accumulate at the inflammatory sites and prolong the retention time. Furthermore, FAPEG-SNM@TP/NIR showed reduced cytotoxicity, increased cellular uptake and significant anti-inflammatory effects in vitro, compared with the crude drug of TP. In addition, topical administration of FAPEG-SNM@TP/NIR MNs to the joint skin of collagen-induced arthritis rats (CIA rats) effectively alleviated joint hypoxia and had good anti-cartilage erosion and anti-synovial hyperplasia effects. Mechanism research experiments have shown that the FAPEG-SNM@TP/NIR MNs, after being applied on the skin, dissolves and delivers the nano-motors loaded with TP targeting macrophages under NIR irradiation. This innovative drug delivery system achieved high efficacy in RA treatment through efficient skin penetration, joint targeting and retention.

Keywords: Rheumatoid arthritis, Triptolide, Photothermal-driving, Motors encapsulated microneedles.



Scheme 1 Schematic diagram of dissolvable MNs carried TP-loaded photothermally driven nanomotors (FAPEG-SNM@TP/NIR MNs) for treatment of RA.

References

[27]Conigliaro, P., Triggianese, P., De Martino, E., Fonti, G.L., Chimenti, M.S., Sunzini, F., Viola, A., Canofari, C., Perricone, R., Challenges in the treatment of Rheumatoid Arthritis, *Autoimmun Rev* 2019, 18, 706-713.

[28]Luo, D., Zuo, Z., Zhao, H., Tan, Y., Xiao, C., Immunoregulatory effects of *Tripterygium wilfordii Hook F* and its extracts in clinical practice, *Front Med* 2019, 13, 556-563.

个人简介：

周珊珊，女，浙江温州人，浙江中医药大学药学院 2022 级药剂学研究生，导师为郑杭生副教授，研究方向为中药经皮吸收新剂型及其体内过程，涉及中药学、高分子材料、生物药剂学等多领域。目前在药物经皮递送系统应用研究方面取得了一定的成果，相关研究成果已在《International Journal of Pharmaceutics》、《Journal of Drug Delivery Science and Technology》、《中草药》等期刊上发表。本人在学术研究方面表现出了高度的热情和才能，期待通过中国颗粒大会这个平台，与更多的专家学者交流合作，共同推进颗粒学及其相关领域的发展。

研究成果：

[1] 徐莹莹,**周珊珊**,温乐,等. 中华眼镜蛇神经毒素可溶性微针的制备、表征及其离体皮肤渗透研究[J]. *中草药*,2024,55(12):3966-3976.

[2] Lu Y, Cheng B, Shan Y, **Zhou S**, Xu C, Fei Y, Pan J, Piao J, Li F, Zhu Z, Zheng H. Lyophilization enhances the stability of Panax notoginseng total saponins-loaded transfersomes without adverse effects on ex vivo/in vivo skin permeation[J]. *Int J Pharm*. 2024 5;649:123668.

[3] Yan X, **Zhou S,** Xie X, Wu R, Wen K, Zheng H, Shi Z, Yao W. Painless transdermal delivery of neurotoxin by using dissolving microneedles: Preparation, evaluation and analgesic effect study[J]. *J Drug Deliv Sci Tec*. 2024,97:105824.

[4] 卢玉洁,**周珊珊**,单钰君,等. 全缘千里光碱脂质体及其凝胶剂的皮肤渗透研究与机制探讨[J]. *中草药*,2023,54(11):3459-3467.

附：报告人展示人为学生。

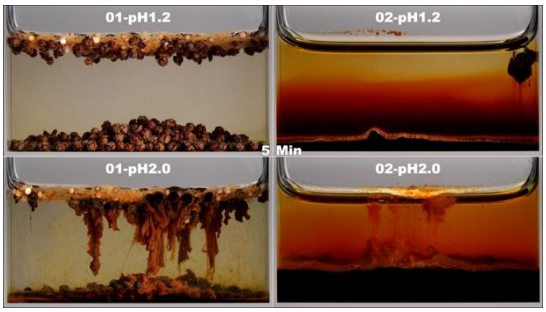
可视化技术用于微丸类制剂释药行为的探索

邓黎

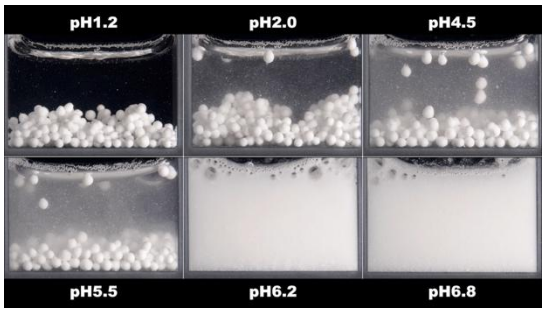
四川大学，成都市人民南路三段 17 号，610041

Email: denglisunny@163.com

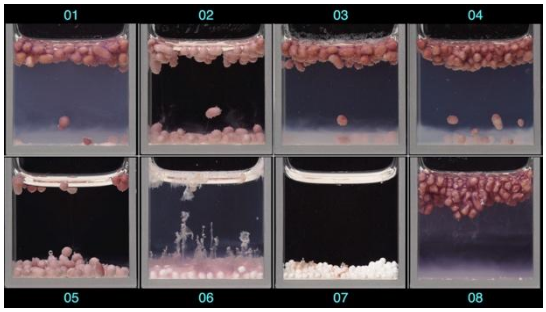
摘要正文：本文采用可视化技术对多糖铁复合物胶囊、萘普生肠溶微丸胶囊、奥美拉唑肠溶胶囊、艾司奥美拉唑镁肠溶胶囊、兰索拉唑肠溶胶囊等多种微丸类胶囊制剂进行了释药过程可视化记录，并比较了不同厂家相同品种在多种释放介质中释药行为的可视化特征异同。本研究为微丸类制剂的体外释药行为表征提供了一种全新的思路和方法，旨在更准确、全面地评估其释药行为。



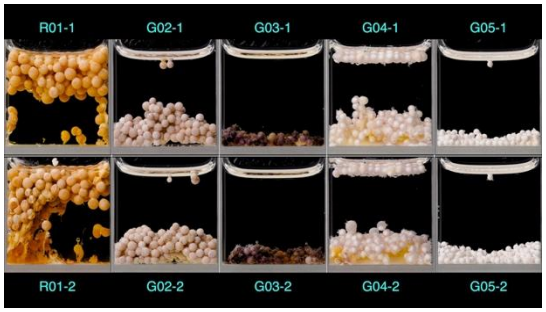
lron Polysaccharide Complex Capsules



Naproxen Enteric-coated micro Granules Capsules



Omeprazole Enteric-coated Capsules



Lansoprazole Enteric-coated Capsules

关键词：可视化技术；微丸；释药行为

参考文献

[1] Deng L, Fu Y. Seeing Is Believing: Time-lapse macro-imaging of morphological changes of solid dosages as a teaching and research tool [J]. Pharm Res, 2022, 39(5): 1019-24.

[2] Jiajia Gengji, Tao Gong, Zhirong Zhang, et al. Imaging techniques for studying solid dosage formulation: Principles and applications [J]. J Control Release, 2023, 361: 659-670.

[3] Yichen Yang, Jiajia Gengji, Tao Gong, et al. Time-Lapse Macro Imaging with Dissolution Tests for Exploring the Interrelationship Between Disintegration and Dissolution Behaviors of Solid Dosages [J]. Pharm Res, 2024: doi.org/10.1007/s11095-024-03655-9

报告人简介：

邓黎，博士，四川大学华西药学院副教授。主讲药剂学、药物制剂工程、药剂学试验等课程。四川省要学会药剂学专委会、药学科普与社区用药副主任委员。从事影像药剂学、药学可视化和透皮递药系统研究。

初步构建了固体制剂崩解释药可视化资源库（https://space.bilibili.com/238299060），并基于此资源库进行药学教学、科研和科普活动，视频总播放量超 1200 万。可视化数据库被中央电视台、中国青年报、科学网等权威媒体采用，用于公众教育与科普。参与制作视频“极度舒适！拿来救命的药，原来是这样在身体里释放的”获首届“格致科学传播奖”年度影响力视频。

附：报告人/墙报展示人非学生

利托那韦多晶型对热熔挤出技术制备过饱和药物递送系统的影响

吴恒乾[1]，韩军[1,*]

[1]聊城大学生物制药研究院，山东聊城，252000

*Email: junhanmail@163.com

摘要正文：热熔挤出技术（Hot-Melt Extrusion, HME）在制药界愈发受到青睐，尤其适用于生产难溶性药物的无定形固体分散体（Amorphous Solid Dispersion, ASD）。然而，为了确保 ASD 带来的药物过饱和状态，我们必须防止药物活性成分（Active Pharmaceutical Ingredient, API）在溶解时再次结晶。但是，在 HME 生产环节中，无定形制剂有时会受到晶种的污染，进而影响溶解过程中的晶体正常生长。本研究深入探讨了采用亚稳态的 Form I 和稳态的 Form II 晶型生产的利托那韦 ASD 片剂的溶出特性，并进一步研究了植入不同晶种对过饱和溶液中晶体生长速度的影响，旨在揭示晶种如何干扰利托那韦的溶出，并为 ASD 生产确定最佳的多晶型和晶种条件。本研究首先分别以利托那韦 Form I 和 Form II 为 API 通过 HME 技术制备了利托那韦 ASD 片剂，并与 Norvir® 利托那韦片剂分别在漏槽和非漏槽条件下的溶出曲线对比证明其体外等效性。然后，在非漏槽条件下，通过加入 Form I 和 Form II 晶种的方式模拟生产过程中可能出现的晶种残留或污染，考察了用不同晶型制备的制剂与晶种引起的晶体生长速率之间的相关性。最后，通过对过饱和溶液中的沉淀物进行了固态表征。研究结果显示，无论是 Form I 还是Form II 制备的利托那韦片剂，其溶出曲线均相似，且与市场上的参比制剂一致。值得注意的是，相较于 Form II 晶种，Form I 晶种明显导致更多的沉淀物。从过饱和溶液中析出的 Form I 晶体在溶液中更易分散，从而成为新的晶种，加速晶体的生长。相反，Form II 晶体生长较为缓慢，且多以聚集体形态出现。此外，添加Form I 和 Form II 晶种均会对其沉淀行为产生影响，而晶种的数量和形态对 RLD 片剂及采用不同多晶型制备的片剂的沉淀过程具有显著影响。本研究强调了在 ASD 开发中严格控制制造工艺和选择合适 API 的必要性，为确保开发出稳定和有效的药物产品，需要进行全面的分析和制造策略。

关键词：无定形固体分散体；热熔挤出；利托那韦；晶种；过饱和溶液

参考文献

[1] **Li, N., Taylor, L.S., Tailoring supersaturation from amorphous solid dispersions. *J. Control. Release* 2018, 279: 114–125.**

[2] **Moseson, D.E., Corum, I.D., Lust, A., Altman, K.J., Hiew, T.N., Eren, A., Nagy, Z.K., Taylor, L.S., Amorphous solid dispersions containing residual crystallinity: competition between dissolution and matrix crystallization. *AAPS J.* 2021, 23: 1–18.**

[3] **Xu, H., Vela, S., Shi, Y., Marroum, P., Gao, P., In vitro characterization of ritonavir drug products and correlation to human in vivo performance. *Mol. Pharmaceutics* 2017, 14: 3801–3814.**

[4] **Sun, D.D., Wen, H., Taylor, L.S., Non-sink dissolution conditions for predicting product quality and in vivo performance of supersaturating drug delivery systems. *J. Pharm. Sci.* 2016, 105: 2477–2488.**

[5] **Bauer, J., Spanton, S., Henry, R., Quick, J., Dziki, W., Porter, W., Morris, J., Ritonavir: an extraordinary example of conformational polymorphism. *Pharm. Res.* 2001, 18: 859–866.**

报告人/墙报展示人简介：

吴恒乾，博士，讲师。主要研究方向：难溶性药物制剂；固体分散体；热熔挤出技术。曾参与多项国家级、省部级项目，发表多篇 SCI 论文。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：报告人为聊城大学生物制药研究院讲师，不是学生。

应用喷雾干燥与喷雾冷冻干燥调控活性乳酸菌制剂的颗粒性质与功能特性

傅楠[1,*]，闵娜[1]，郝凡[1]，吴铎[1]，陈晓东[1]

[1]苏州大学 材料与化学化工学部 化工与环境工程学院，江苏省苏州市工业园区仁爱路199号，邮编215123

*Email: nan.fu@suda.edu.cn

摘要正文：将益生菌、酵母等活性微生物脱水保存，可显著延长产品保质期，是制备胶囊、片剂的关键加工步骤。传统冷冻干燥技术常需将冻干得到的块状固体破碎制粉，既增加染杂菌风险，所得菌粉颗粒也呈粒径各不相同的不规则片状结构，不利后续加工。喷雾干燥和喷雾冷冻干燥技术将含菌料液雾化为大量小液滴，再通过热风或冷冻干燥除水，小液滴的高表面积体积比显著增加传热传质效率，减少干燥时间和加工成本，且菌粉颗粒多呈粒径近似的球形，具有良好流动性和可加工性。本课题将含有鼠李糖乳杆菌GG（LGG）的料液通过相同的雾化器，分别经喷雾干燥和喷雾冷冻干燥制粉。以10%或30%的海藻糖为保护剂，喷雾冷冻干燥制得疏松多孔的球形颗粒，平均粒径（139-152微米）显著大于喷雾干燥制得的光滑密实球形颗粒（75-110微米）。30%的海藻糖载体在两种干燥方式中均较好地保护LGG的活性与功能特性，但喷雾干燥菌粉的贮藏与消化稳定性显著更差，而10%海藻糖的喷冷菌粉中LGG的活性与功能特性均弱于其他干燥条件，但稳定性优于喷雾干燥菌粉。通过优化保护载体组成与干燥方式，成功使用两种技术制得了高活性、高稳定性的LGG菌粉。喷雾干燥菌粉的活菌数大于10^{10} cfu/g、存活率为75-100%，在4 °C储藏三个月后的活性损失小于0.2数量级；喷雾冷冻干燥的除水能力更强，菌粉在−20 °C储藏18个月，未出现显著活性下降。

关键词：活性益生菌粉；喷雾干燥；喷雾冷冻干燥；储藏稳定性；粉体性质

报告人/墙报展示人简介：

傅楠，苏州大学材料与化学化工学部教授，化工与环境工程学院副院长。主要研究功能食品粉体及其他生物活性颗粒的制备、功能性调控和应用，侧重多组分多相复杂液滴的干燥动力学与颗粒形成过程，探究液滴干燥过程中的物理化学及生物变化机理。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Impact of diverse cellulose derivatives on the crystallinity and polymorphic transitions of acemetacin during wet media milling process

Lili Wang[1,2], Zhuang Ding[1], Zhengping Wang[1,2], Yanna Zhao[1], Jun Han[1,2,*]

[1] Institute of Biopharmaceutical Research, Liaocheng University, Liaocheng, 252059

[2] Liaocheng High-Tech Biotechnology Co., Ltd., Liaocheng, 252059

* junhanmail@163.com

Nanocrystal technology is considered one of the most promising techniques for increasing the solubility of insoluble active pharmaceutical ingredients (APIs)[1]. However, polycrystalline transformation induced by wet media milling has become a significant factor in destabilizing nanosuspensions (NSs)[2]. In this study, acemetacin (ACM) was used as a model drug to prepare NSs by wet media milling to assess the impact of diverse stabilizer types on key quality attributes. Nonionic polymer stabilizers, including PVP, PVA, HPC, HPMC, and Soluplus®, were utilized in combination with the ionic surfactant SDS. The influence of these stabilizers on the particle size, polydispersity index (PDI), zeta potential, crystal form, and crystallinity of ACM NSs was evalu-ated using dynamic light scattering, powder X-ray diffraction (PXRD), Hot stage microscope (HSM) characterization and stability studies performed. According to the results, HPMC was identified as a suitable stabilizer for the ACM NSs, which contained uniformly dispersed nanosized particles. Furthermore, no polymorphic changes were observed in the crystalline state of ACM during the production and storage of NSs. Therefore, the HPMC/SDS combination could be recommended as effective stabilizer for preparing stable NSs loaded with poorly soluble and polycrystalline APIs. In addition, this study could provide guidance for the preparation of stable nanosuspension formulations.

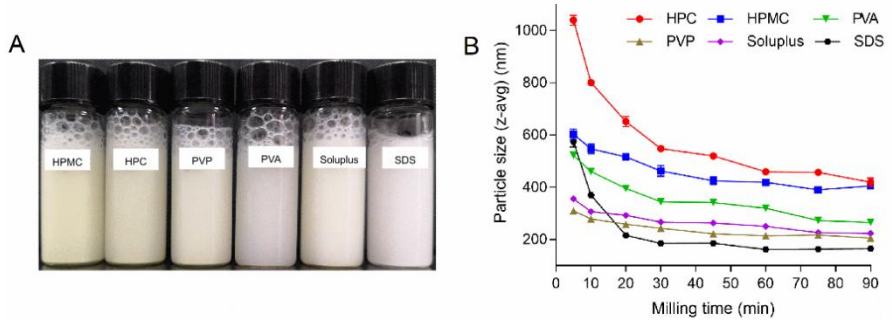


Figure 1. The optical image (A) and particle size distribution (milling process) (B) of ACM nanosuspensions containing different stabilizers (mean ± SD, n = 3).

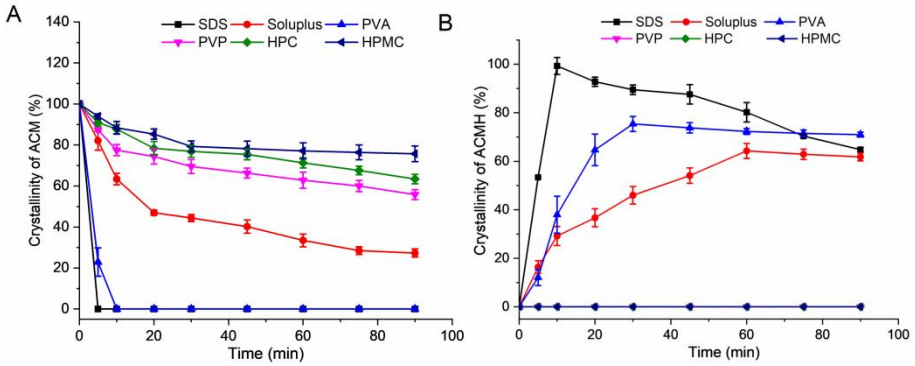


Figure 2. The degree of crystallinity (%) of ACM (A) and ACMH (B) for samples prepared with different stabilizers.

Keywords： nanocrystal; crystallinity; acemetacin; wet media milling; hydroxypropyl methylcellulose

References
[29]V. Verma, K. Ryan, M. L. Padrela, Production and Isolation of Pharmaceutical Drug Nanoparticles, Int. J. Pharm. 2021, 603, 120708.
[30]C. Bartos, O. Jójárt-Laczkovich, G. Regdon, P. Szabó-Révész, Robustness Testing of Milling Process, Analyzing the Particle Size Distribution and Crystallinity of the Milled Samples. J. Therm. Anal. Calorim. 2020, 139, 393–398.

报告人/墙报展示人简介：

王利利，博士，就职于聊城大学，并任聊城高新生物技术有限公司注册部负责人，聊城市高新区“3111”人才，执业药师，工程师。主要研究方向是难溶性药物制剂技术研究、物理药学及参比制剂反向工程研究。包括处方成分的反向研究、处方成分定量研究，特别是活性成分分析（晶型、粒度等），关键辅料型号用量剖析，及工艺解析等。发表 SCI 论文 8 篇，授权发明专利 4 项，参与省级以上纵向科研项目 5 项，参与成果转化项目约 12 项。

多糖基水凝胶口服胰岛素制剂研究

刘杨[1,*]，陈胜勤，苗清雅，容秀媛

[1]汕头大学理学院，广东省汕头市金平区大学路 243 号，515063

*Email: liuyanglft@stu.edu.cn

摘要正文：口服胰岛素具有激活肝脏代谢和避免高胰岛素血症等优势，已成为糖尿病药物研究的一个热点方向，但存在生物利用度低和结构稳定性差等问题。针对这些关键问题，本论文设计合成多糖基水凝胶口服胰岛素制剂并探索其释药机理和药效。主要研究内容有：(1)利用两种多糖分子壳聚糖和海藻酸钠构建口服胰岛素水凝胶制剂，通过化学法对多糖分子进行接枝改性，以提高胰岛素生物利用度及制剂结构的稳定性；(2)在分子和细胞水平，阐释载药水凝胶制剂结构的稳定性对释药过程的影响，探索口服胰岛素制剂在模拟肠上皮细胞屏障中的转运机制和效果；(3)通过动物实验研究载药水凝胶制剂的药效和药代动力学，评价制剂结构稳定性在体内对提高胰岛素生物利用度和降血糖的作用效果。本论文从口服胰岛素制剂的结构设计出发，在分子、细胞和动物体内三个层面揭示新型多糖基水凝胶口服胰岛素制剂的释药机理并评估其药效，预期结果将为口服胰岛素制剂的开发应用提供设计思想和理论依据。

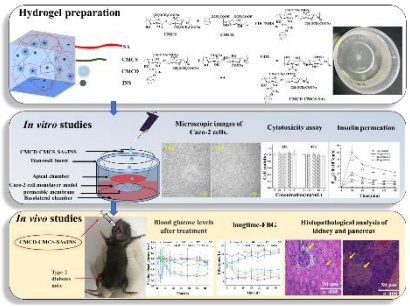


Fig. 1 Construction and Function Evaluation of Oral Insulin Hydrogel

关键词：口服胰岛素；水凝胶制剂；生物利用度

参考文献

[1] **Y. Yang, Y. Liu*, S. Chen, K.L. Cheong, B. Teng, Carboxymethyl Beta-cyclodextrin Grafted Carboxymethyl Chitosan Hydrogel-Based Microparticles for Oral Insulin Delivery, *Carbohydr. Polym.* 2020, 246: 116617.**

[2] **S. Chen, Q. Miao, Y. Liu*, Q. Xiao, Y. Lin, Y. Yang, F. Guo. Construction and Functional Evaluation of Oral Long-acting Insulin Hydrogel Microparticles Based on Physical and Chemical Double Crosslinking, *Int. J. of Biol. Macromol.* 2023, 253: 126915.**

报告人/墙报展示人简介：

刘杨，女，博士，汕头大学理学院生物系，教授，博士研究生导师，汕头大学海洋生物高值化利用与生物医药平台负责人。华南生物化学与分子生物学学会理事。主持完成国家级项目 2 项，省级项目 8 项，以主要参加人参与完成国家级、省部级项目 8 项。以第一作者或通讯作者在国内外主流学术期刊上发表学术论文 70 余篇，其中 SCI/EI 检索 50 余篇次；第一发明人申请国家发明专利 20 件，已获授权 17 件，转让国家发明专利 1 项，获软件著作权 1 项。担任国际期刊《Biochemical Engineering Journal》的编委，《Frontiers in Nutrition》和《Polymers》的客座编辑，以及多家国际和国内学术期刊的审稿人。2010 年入选广东省高等学校“千百十工程”第六批校级培养对象。2013 年获得广东省高等学校优秀青年教师培养计划资助。2021 年入选汕头大学卓越人才计划。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

In-situ activated arsenic-molybdenum dual-prodrug nanocomplexes for glutathione-depletion enhanced photothermal/chemotherapy against triple-negative breast cancer

Li He[1], WeiYi Cheng [1], WeiYe Ren[1], JingQuan Chen [1], Zhibing Wu [2,3,], Yinghui Wei [1,*], Ji-Gang Piao [1,*]*

[1] College of Pharmaceutical Sciences, Zhejiang Chinese Medical University, Hangzhou, 310053, China.

[2] Department of Oncology, Affiliated Zhejiang Hospital, Zhejiang University School of Medicine, Hangzhou 310013, China

[3] Department of Radiation Oncology, Affiliated Zhejiang Hospital, Zhejiang University School of Medicine, Hangzhou 310013, China

[*] Corresponding Author:

E-mail address: wuzhibing@zju.edu.cn (Z Wu), yhw_nn@zcmu.edu.cn (Y Wei), jgpiao@zcmu.edu.cn (J-G Piao).

[1] These authors equally contributed to this work.

Abstract: Arsenic trioxide, a traditional chemotherapeutic agent, has limitations in clinical application due to its nonspecific delivery and severe systemic toxicity. To address this challenge, we have capitalized on the promising potential of molybdenum-based materials for tumor diagnosis and treatment. We developed a novel multifunctional arsenic-molybdenum dual-prodrug nanocomposite delivery system (AsMo-NCM) by integrating arsenic compounds with molybdenum compounds. This system leverages elevated glutathione (GSH) levels within tumors for specific activation. Within the tumor microenvironment, the system converts Mo(VI) to the more active Mo(V), enabling combined photothermal therapy and photoacoustic imaging for comprehensive diagnosis and treatment. Furthermore, low-toxicity arsenic(V) is converted into highly toxic trivalent arsenic within the high-GSH tumor microenvironment, thereby enhancing tumor cell apoptosis, reducing toxicity to normal tissues, and synergistically improving treatment outcomes. In addition, AsMo-NCM can be biodegraded and rapidly excreted, reducing concerns about their long-term presence and possible toxic effects. The combination of these approaches maximizes GSH depletion, thereby enhancing the synergistic photothermal/chemotherapy effect of AsMo-NCM for precise and effective tumor treatment, thus offering promising prospects for cancer therapy.

Keywords: Dual-prodrug system, Arsenic prodrug, Synergistic photothermal/chemotherapy, Glutathione depletion, Biodegradable

References

[1] H. Sung, J. Ferlay, R.L. Siegel, M. Laversanne, I. Soerjomataram, A. Jemal, F. Bray, Global Cancer Statistics 2020: GLOBOCAN Estimates of Incidence and Mortality Worldwide for 36 Cancers in 185 Countries, CA Cancer J Clin 71(3) (2021) 209-249. https://doi.org/10.3322/caac.21660.

[2] M. Liu, Y. Peng, Y. Nie, P. Liu, S. Hu, J. Ding, W. Zhou, Co-delivery of doxorubicin and DNAzyme using ZnO@polydopamine core-shell nanocomposites for chemo/gene/photothermal therapy, Acta Biomater 110 (2020) 242-253. https://doi.org/10.1016/j.actbio.2020.04.041.

[3] F. Gao, C. Xue, J. Dong, X. Lu, N. Yang, C. Ou, X. Mou, Y.Z. Zhang, X. Dong, Tumor Microenvironment-Induced Drug Depository for Persistent Antitumor Chemotherapy and Immune Activation, Small 20(15) (2024) e2307736. https://doi.org/10.1002/smll.202307736.

[4] H. Zhang, F. Song, C. Dong, L. Yu, C. Chang, Y. Chen, Co-delivery of nanoparticle and molecular drug by hollow mesoporous organosilica for tumor-activated and photothermal-augmented chemotherapy of breast cancer, J Nanobiotechnology 19(1) (2021) 290. https://doi.org/10.1186/s12951-021-01025-w.

[5] D.Y. Wang, Y. Cao, G. Yang, S. Zhang, H.C. van der Mei, Y. Ren, T.G. van Kooten, D.J.A. de Groot, J.J. de Haan, L. Shi, H.J. Busscher, Self-Targeted Co-Delivery of an Antibiotic and a Cancer-Chemotherapeutic from Synthetic Liposomes for the Treatment of Infected Tumors, Advanced Functional Materials 33(32) (2023). https://doi.org/10.1002/adfm.202215153.

[6] V. Mulens-Arias, A. Nicolas-Boluda, A. Pinto, A. Balfourier, F. Carn, A.K.A. Silva, M. Pocard, F. Gazeau, Tumor-Selective Immune-Active Mild Hyperthermia Associated with Chemotherapy in Colon Peritoneal Metastasis by Photoactivation of Fluorouracil-Gold Nanoparticle Complexes, ACS Nano 15(2) (2021) 3330-3348. https://doi.org/10.1021/acsnano.0c10276.

[7] Y. Huang, S. Wu, L. Zhang, Q. Deng, J. Ren, X. Qu, A Metabolic Multistage Glutathione Depletion Used for Tumor-Specific Chemodynamic Therapy, ACS Nano 16(3) (2022) 4228-4238. https://doi.org/10.1021/acsnano.1c10231.

[8] J. Bonet-Aleta, M. Sancho-Albero, J. Calzada-Funes, S. Irusta, P. Martin-Duque, J.L. Hueso, J. Santamaria, Glutathione-Triggered catalytic response of Copper-Iron mixed oxide Nanoparticles. Leveraging tumor microenvironment conditions for chemodynamic therapy, J Colloid Interface Sci 617 (2022) 704-717. https://doi.org/10.1016/j.jcis.2022.03.036.

[9] G. Asantewaa, I.S. Harris, Glutathione and its precursors in cancer, Curr Opin Biotechnol 68 (2021) 292-299. https://doi.org/10.1016/j.copbio.2021.03.001.

[10] P. Zhu, Y. Pu, M. Wang, W. Wu, H. Qin, J. Shi, MnOOH-Catalyzed Autoxidation of Glutathione for Reactive Oxygen Species Production and Nanocatalytic Tumor Innate Immunotherapy, J Am Chem Soc 145(10) (2023) 5803-5815. https://doi.org/10.1021/jacs.2c12942.

[11] S. Wu, P. Wang, J. Qin, Y. Pei, Y. Wang, GSH-Depleted Nanozymes with Dual-Radicals Enzyme Activities for Tumor Synergic Therapy, Advanced Functional Materials 31(31) (2021). https://doi.org/10.1002/adfm.202102160.

[12] L. Ran, J. Xiao, W. Zhang, M. Wang, H. Xin, H. Li, H. Hao, M. Wang, X. Wang, G. Tian, G. Zhang, Tumor microenvironment-activated hollow vanadium-based nanoplatform for precise therapy of lung cancer through synergistically reversing cisplatin resistance, Chemical Engineering Journal 484 (2024). https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.149448.

[13] J. Chen, S. Guo, L. Wang, S. Liu, H. Wang, Q. Zhao, Atomic Molybdenum Nanomaterials for Electrocatalysis, Small (2024) e2401019. https://doi.org/10.1002/smll.202401019.

[14] H. Li, M. Gong, J. Xiao, L. Hai, Y. Luo, L. He, Z. Wang, L. Deng, D. He, Photothermally activated multifunctional MoS2 bactericidal nanoplatform for combined chemo/photothermal/photodynamic triple-mode therapy of bacterial and biofilm infections, Chemical Engineering Journal 429 (2022). https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.132600.

[15] D. Bian, Z. Tong, G. Gong, H. Huang, L. Fang, H. Yang, W. Gu, H. Yu, Y. Zheng, Additive Manufacturing of Biodegradable Molybdenum - From Powder to Vascular Stent, Adv Mater (2024) e2401614. https://doi.org/10.1002/adma.202401614.

[16] N. Qiu, X. Yang, Y. Zhang, J. Zhang, J. Ji, Y. Zhang, X. Kong, Y. Xi, D. Liu, L. Ye, G. Zhai, A molybdenum oxide-based degradable nanosheet for combined chemo-photothermal therapy to improve tumor immunosuppression and suppress distant tumors and lung metastases, J Nanobiotechnology 19(1) (2021) 428. https://doi.org/10.1186/s12951-021-01162-2.

[17] C. Wang, G. Nie, F. Yang, J. Chen, Y. Zhuang, X. Dai, Z. Liao, Z. Yang, H. Cao, C. Xing, G. Hu, C. Zhang, Molybdenum and cadmium co-induce oxidative stress and apoptosis through mitochondria-mediated pathway in duck renal tubular epithelial cells, J Hazard Mater 383 (2020) 121157. https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2019.121157.

[18] Y. Lu, C. Jia, C. Gong, H. Wang, Q. Xiao, J. Guo, D. Ni, N. Xu, A hydrogel system containing molybdenum-based nanomaterials for wound healing, Nano Research 16(4) (2023) 5368-5375. https://doi.org/10.1007/s12274-022-5255-9.

[19] Z. Chen, L. Chen, Y. Ma, Y. Liu, Q. Zhang, H. Qin, Y. Chen, B. Tian, J. Dong, Peptide-Appended Nanosonosensitizers Targeting Tumor Glycolysis for Synergistic Sonodynamic-Immunometabolic Therapy of Spinal-Metastasized Tumors, Adv Mater 35(42) (2023) e2304246. https://doi.org/10.1002/adma.202304246.

[20] W. Sun, H.M. Selim, Molybdenum-phosphate retention and transport in soils, Geoderma 308 (2017) 60-68. https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2017.08.031.

[21] Y. Shan, L. Li, X. Chen, S. Fan, H. Yang, Y. Jiang, Gentle Haulers of Lithium-Ion–Nanomolybdenum Carbide Fillers in Solid Polymer Electrolyte, ACS Energy Letters 7(7) (2022) 2289-2296. https://doi.org/10.1021/acsenergylett.2c00849.

[22] F. Gong, L. Cheng, N. Yang, Q. Jin, L. Tian, M. Wang, Y. Li, Z. Liu, Bimetallic Oxide MnMoO(X) Nanorods for in Vivo Photoacoustic Imaging of GSH and Tumor-Specific Photothermal Therapy, Nano Lett 18(9) (2018) 6037-6044.

https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b02933.
[23] C. Wu, Z. Liu, Z. Chen, D. Xu, L. Chen, H. Lin, J. Shi, A nonferrous ferroptosis-like strategy for antioxidant inhibition-synergized nanocatalytic tumor therapeutics, Sci Adv 7(39) (2021) eabj8833. https://doi.org/10.1126/sciadv.abj8833.
[24] L. Dong, W. Li, Y. Luo, C. Liu, K. Li, Y. Chen, G. Hong, Engineering Molybdenum-Assisted Tellurium Nanosonosensitizers for Enhanced Sonodynamic Tumor Nanotherapy, Advanced Functional Materials 33(31) (2023). https://doi.org/10.1002/adfm.202302541.
[25] W. Hu, T. Xiao, D. Li, Y. Fan, L. Xing, X. Wang, Y. Li, X. Shi, M. Shen, Intelligent Molybdenum Disulfide Complexes as a Platform for Cooperative Imaging-Guided Tri-Mode Chemo-Photothermo-Immunotherapy, Adv Sci (Weinh) 8(14) (2021) e2100165. https://doi.org/10.1002/advs.202100165.

报告人/墙报展示人简介：

作为浙江中医药大学 2022 级中药学专业的学生，我积极参与前沿科研工作，主要研究方向包括中药学、纳米材料与生物医学及药物递送系统。我在 **Biomaterials、Biomedicine & Pharmacotherapy、Nano Letters、Nano TransMed 和 Pharmaceutics** 等国际知名期刊上发表过多篇研究论文，探讨纳米技术在药物递送及癌症治疗中的创新应用，尤其是纳米生物仿生递送系统克服血脑屏障的研究。此外，我具备扎实的实验设计与执行、科学研究与数据分析、学术写作能力。我希望通过不断参与高水平科研项目，推动中药学与现代科技的结合，为医疗健康事业的发展贡献力量。

相关研究成果：

1、Cheng W, Ren W, Ye P, **He L**, Bao D, Yue T, Lai J, Wu Y, Wei Y, Wu Z, Piao JG. Camouflaging nanoreactor traverse the blood-brain barrier to catalyze redox cascade for synergistic therapy of glioblastoma. Biomaterials. 2024 Jul 14;311:122702

2、Wang Y, Cheng W, Zhu J, **He L**, Ren W, Bao D, Piao JG. Programmed Co-delivery of tamoxifen and docetaxel using lipid-coated mesoporous silica nanoparticles for overcoming CYP3A4-mediated resistance in triple-negative breast cancer treatment. Biomed Pharmacother. 2024 Jan;170:116084.

3、Lai J, Luo Z, Liu J, Hu H, Jiang H, Liu P, **He L**, Cheng W, Ren W, Wu Y, Piao JG, Wu Z. Charged Gold Nanoparticles for Target Identification-Alignment and Automatic Segmentation of CT Image-Guided Adaptive Radiotherapy in Small Hepatocellular Carcinoma. Nano Lett. 2024 Jul 24.

4、Cheng W, **He L**, Ren W, Yue T, Xie X, Sun J, Piao J-G..Bacteria-nanodrug cancer treatment system: The combination of dual swords and the confrontation of needle tips.Nano TransMed(2-3),

5、Xie X, Yue T, Gu W, Cheng W, **He L**, Ren W, Li F, Piao JG. Recent Advances in Mesoporous Silica Nanoparticles Delivering siRNA for Cancer Treatment. Pharmaceutics. 2023 Oct 17;15(10):2483.

附：请在此处注明墙报展示人学生

Biological chemotaxis-guided self-thermophoretic nanoplatform augments colorectal cancer therapy through autonomous mucus penetration

Xuejiao Zeng, Zhenzhong Zhang*, Jinjin Shi* Zhi-Hao Wang*,

School of Pharmaceutical Sciences, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China.

Email: shijinyxy@zzu.edu.cn, zzuzhangzhenzhong@163.com, wangzhihao@zzu.edu.cn

Oral drug delivery systems have great potential to treat colorectal cancer (CRC). However, the drug delivery efficiency is restricted by limited CRC-related intestine positioning and dense mucus barrier. Here, we present a biological chemotaxis-guided self-thermophoretic nanoplatform that facilitates precise intestinal positioning and autonomous mucus penetration. The nanoplatform introduces asymmetric platinum-sprayed mesoporous silica to achieve autonomous movement in intestinal mucus. Furthermore, inspired by the intense interaction between pathogenic microbes and CRC, the nanoplatform is camouflaged by Staphylococcus aureus membrane to precisely anchor in CRC-related intestine. Owing to 4.3-fold higher biological chemotactic anchoring of CRC-related intestine and 14.6-fold higher autonomous mucus penetration performance, the nanoplatform vastly improves the oral bioavailability of cisplatin, leading to a tumor inhibition rate of 99.1% on orthotopic CRC–bearing mice. Together, the exquisitely designed nanoplatform to overcome multiple physiological barriers provides a new horizon for the development of oral drug delivery systems.

Keywords: Colorectal cancer; Oral administration; Drug delivery system; Nanomotors; Intestinal mucus.

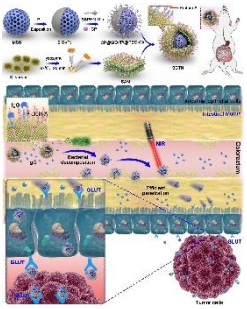


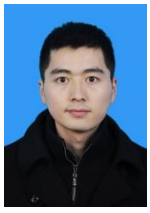
Fig. 1 A schematic of the synthetic procedure and CRC therapy of BCTN.

References

[1] Z.-H. Wang, M. Chu, N. Yin, W. Huang, W. Liu, Z. Zhang, J. Liu, J. Shi, Sci. Adv.2022, 8, eabn3917.

报告人/墙报展示人简介：

王志豪，郑州大学药学院直聘研究员。近年来致力于自驱动药物递送系统研究，解决口服与吸入等递送系统面临的复杂胃肠道与肺部屏障等关键难题。以第一和通讯作者在国际高水平期刊 Science Advances，Journal of Controlled Release，Advanced Functional Materials 和 Advanced Science 等发表论文 10 余篇。主持国家自然科学基金青年项目一项、国家资助博士后研究人员计划 B 档一项、中国博士后面上项目两项、河南省科技攻关项目一项。申请中国发明专利五项，授权两项。中国纳米肿瘤学专业委员会青年委员，中国微米纳米技术学会高级会员，河南省药学会药物制剂专委会秘书，河南省生物物理学会会员。



附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

药用辅料聚维酮 K30 功能性指标对比试验

张美娜[1]，何希文[2]，曲云霞[1,*]

[1]博爱新开源制药有限公司，河南省焦作市博爱县文化东路段 1888 号，454450

[2]博爱新开源制药有限公司，河南省焦作市博爱县文化东路段 1888 号，454450

*zhang.mn@boai-nky.com

根据 2020 版中华人民共和国药典第四部，药用辅料功能性相关指标指导原则[1]，根据药用辅料粘合剂聚乙烯吡咯烷酮的本身特性可能对制剂性能影响的相关功能性指标，进行系统评价及对比。包括表面张力，粒度和粒度分布，黏度，水分，比表面积，粉体流动性，堆密度与振实密度等功能性相关指标的对比评价。

关键词：表面张力；粒径；粘度；粉体性能

聚维酮也叫做聚乙烯吡唑烷酮，英文缩写是 PVP。随着药物制剂工艺的的不断发展，聚维酮（PVP）作为非离子型水溶性高分子化合物作为药用辅料得到越来越广泛的应用。聚维酮根据 K 值的不同可分为多种型号，其中应用最广泛的为 K15、K30 及 K90。聚维酮 K30 主要是由 N-乙烯基-2 吡咯烷酮催化聚合生成的，白色或乳白色粉末状物体，易溶于水和多种有机溶剂，如乙醇，丙二醇，甲醇，甘油及有机酸等[2]。聚维酮 K30 具有助溶，成膜，增稠，粘合等作用与特色，在口服固体制剂中作为粘合剂被广泛应用，作为固体粉末性质的辅料，其功能性相关指标受到广泛重视。以下通过聚维酮 K30 的功能性研究，探索不同厂家产品的性质差别。

1.表面张力对比研究，分别采用静态法和动态法进行对比测试。

（1）静态法（依据 GB/T 22237-2008）使用 Du Nouy 表面张力仪采用白金环法的测量原理，测得各种物质 15%的水溶液的表面张力结果见图（1）。

（2）动态法，使用动态表面张力仪德国 SITA 公司的 ProLine t15，气泡寿命 4.99 s 的条件下进行表面张力的测量，测得各种物质 15%的水溶液的表面张力结果见图（2）。

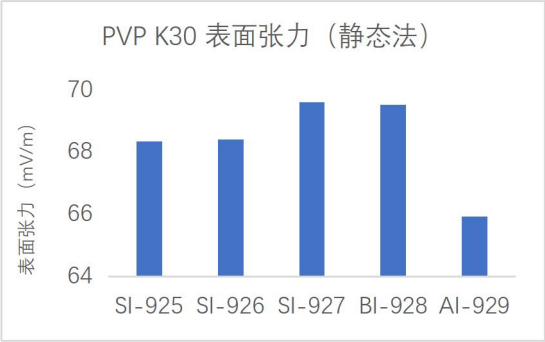


图 1

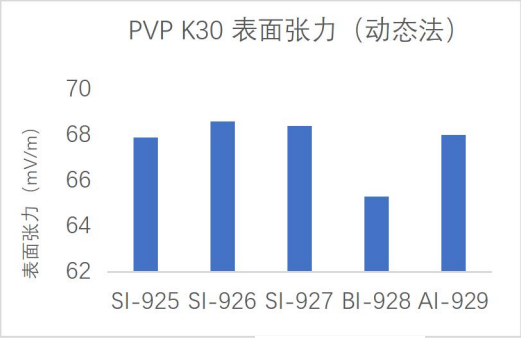


图 2

从面张力测试结果表明，依据 GB/T 22237-2008 中环状物法，5 个不同生产厂家来源的样品表面张力略有区别，但相差不大。这与气泡法动态测表面张力测得的结果类似。

2.聚维酮 K30 水溶液旋转粘度对比。

采用桨搅拌器搅拌，在 20℃相同条件下分别配制三个厂家来源聚维酮 K30 溶液浓度为 5%，10%和 15%。用美国 BROOKFIELD 旋转粘度计，ULVT 小量样品适配器测试。粘度对比结果见图 3.

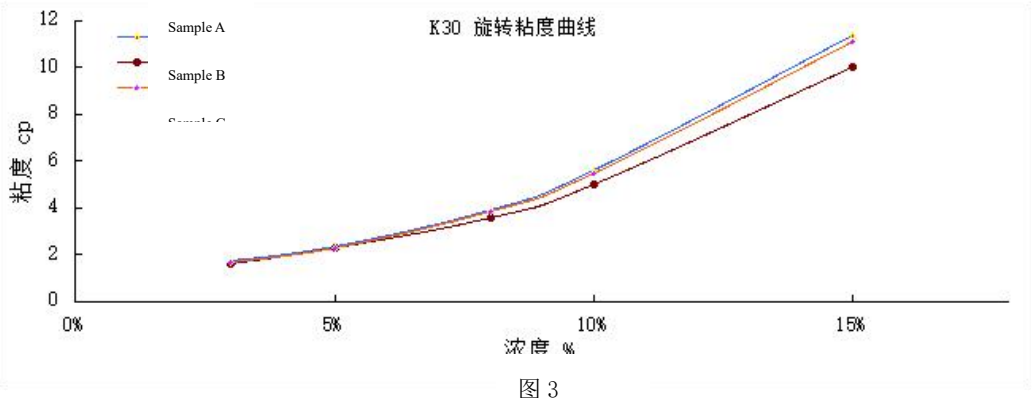


图 3

搅拌过程选用机械桨搅拌器，由于搅拌强度大，溶解速度加快，在配制不同厂家聚维酮 K30 时，相同浓度的 K30 液配制时间基本相同，差距不明显；在相同浓度下，不同来源样品的粘度曲线变化无显著差别。

3. 粉体学性质的研究

通过对堆密度，振实密度，休止角，卡尔指数，堆积密度的对比测试，比较不同厂家不同工艺方法生产的聚维酮 K30 性质差别。

采用 Micromeritics 密度仪进行骨架堆密度测试，选用成都精新粉体测试设备有限公司的振实密度仪和粉体综合测试仪，对样品平行对比测试。结果见表 1。

表 1. 聚维酮 K30 粉体性质对比测试结果

检测项目	**Sample A**	**Sample B**	**Sample C**
堆密度 g/ml	0.385	0.429	0.384
振实密度 g/ml	0.481	0.52	0.504
真密度 g/ml	1.249	1.212	1.31
堆积密度 g/cm^3	0.524	0.507	0.527
压缩率 %	20.66	19.05	30.82
休止角	31.2^0	28.7^0	26.6^0

通过粉体学测试结果可以看出，不同厂家的聚维酮 K30 粉体学性质，包括流动性，可压性均无显著差别，且随着国内生产企业的技术革新及产品升级，国产辅料的性质在大部分性能上均可以媲美进口辅料。

4. 比表面积的对比测试

由 Micromeritics ASAP2020 以及 Micromeritics TriStar3000 进行 BET 比表面积的测试，采用氮气做吸附质，在液氮温度（77.35K）下进行吸附，采用容量法计算吸附量，根据 BET 方程计算其 BET 比表面积，结果如图 4 所示。

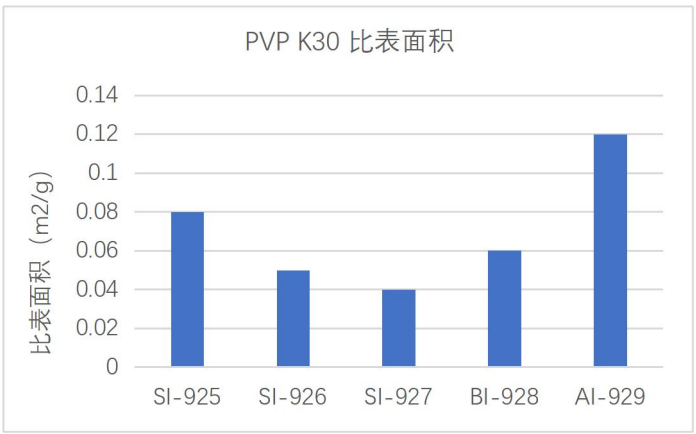
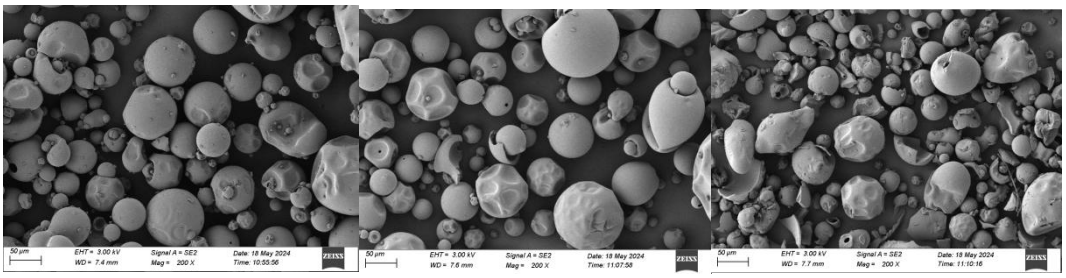


图 4

从上图结果可以看出，5 种样品的比表面积均较小，在液氮温度下呈吸附惰性。样品 AI-929 比表面积略大，需多批次测试已证明其真实趋势。

5. 粉体粒度及形态，扫描电子显微镜照片对比。

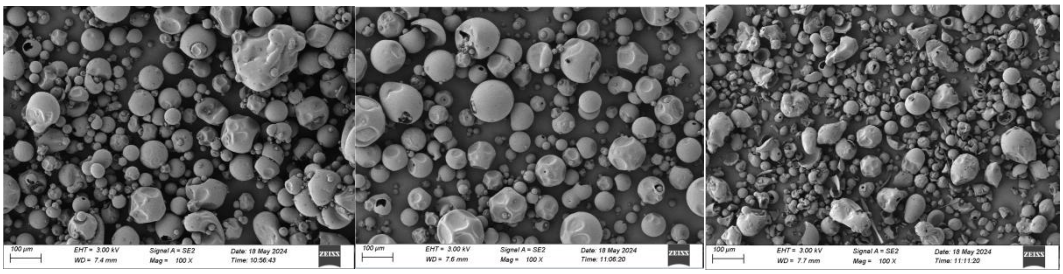
图 5. A. B，C 三家公司 PVP K30 放大 200 倍的电镜形态照片。



Sample A　　Sample B　　Sample C

图 5

图 6. A. B，C 三家公司 PVP K30 放大 100 倍的电镜形态照片。



Sample A　　Sample A　　Sample A

图 6

SEM 结果显示，三个厂家样品均为球形颗粒，外观形态基本一致。球形颗粒形貌上，表面均有大小不同的凹陷。样品 A 和 B 的粒径分布均匀，粒径大小相近，样品 C 颗粒度较小，细颗粒较多。

6.动态水分吸附检测对比。

使用 DVS-1000 进行室温（25℃）下动态水蒸气吸附，分别对进口 K30 和国产 K30 的样品进行检测。动态水蒸气吸附以及脱附等温线见图 7。

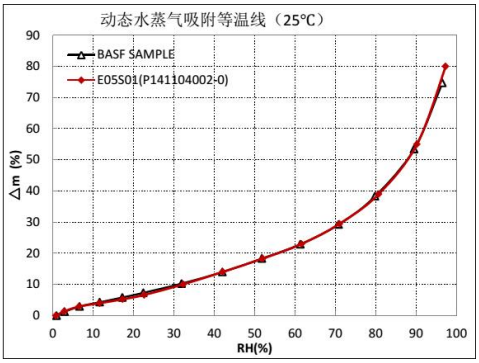


图 7

从动态水吸附性质上看，两个 PVP K30 样品的吸湿或亲水性性质一致，在 RH=50%时，饱和吸水增重低于 20%，而在高相对湿度下，吸水增重率呈指数增长。说明国产与进口辅料在这一性质上无差别。

结论及讨论。药用辅料是生产药物制剂的必备材料，它对药物在人体中的崩解、溶出、扩散与吸收起着重要的作用，直接影响制剂的质量。随着我内辅料生产企业技术的提高，国产辅料的质量显著提高。我国一些大型制药企业长期以往依赖高价进口辅料的格局将被打破。通过对 PVP K30 的对比，加大制药企业对本土生产的药用辅料产品更有信心，也希望在未来国内辅料行业的发展中，企业可以做到质量优，价格合理，更有竞争力。

参考文献

[1] 国家药典委员会.中华人民共和国药典：四部[S]. 北京：中国医药科技出版社，2020：524-525

[2] 毛世瑞，杨宏图，陈建明，毕殿洲，聚维酮在药剂学中的应用[J]，沈阳药科大学学报，2016（03）：71-77

Sodium glycocholate liposome encapsulated semaglutide increases oral bioavailability by promoting intestinal absorption

A. Haibing He[1], B. Yehan Li[1]

[1] Shenyang Pharmaceutical University, Shenyang, 110016, PR China
A. hhb_emily@126.com B. liyehan37@gmail.com

ABSTRACT SUMMARY

The aim of this study was to prepare sodium glycocholate liposomes (SGC-Lip) encapsulating semaglutide (Sml) to improve oral bioavailability and better exert hypoglycemic effect. In this paper, SGC-Lip was prepared by reverse-phase evaporation method. The hypoglycemic and intestinal uptake effects of SGC-Lip and cholesterol-containing normal liposomes (CH-Lip) were comparatively investigated in rats. SGC-Lip can achieve a hypoglycemic effect of 40% of the initial value within 12 hours, and the $AAC_{0\text{-}12h}$ was approximately six times that of CH-Lip without sodium glycocholate.

INTRODUCTION

Bile salt liposomes are formed by incorporating a certain amount of bile salts into the liposomal membrane, which imparts them with excellent deformability, allowing them to pass through pores as small as one-tenth of their own size. These are referred to as flexible liposomes[1][2]. Inserting a certain amount of bile salts into the liposome membrane structure in advance can resist the destruction of physiological bile salts, make the lipid bilayer more stable, and reduce drug leakage[3]. In addition, it can also reduce the viscosity and elasticity of the mucus layer, increase the permeability of the phospholipid bilayer membrane, increase cellular bypass transport to improve the absorption of drugs[4][5]. After entering the intestinal lumen, more than 95% of bile salts can be reabsorbed back into the liver through the portal vein. Sodium glycocholate liposomes exhibit enhanced resistance to liposomal leakage caused by gastric acid and to the degradation of liposomes and peptides induced by proteases. Therefore, sodium glycocholate was used for the preparation and study of liposomes to improve the encapsulation rate while maximizing their stability in the gastrointestinal tract.

EXPERIMENTAL METHODS

The SGC-Lip was prepared by reverse-phase evaporation. The formulation was characterized utilizing techniques such as X-ray diffraction (XRD), Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), circular dichroism (CD), and transmission electron microscopy (TEM). Subsequently, the in vitro stability, and in vivo pharmacodynamics of SGC-Lip were investigated.

RESULTS AND DISCUSSION

As shown in Fig 1 A, within 0.5 hours of incubation in SGF, the Sml solution rapidly degraded and became inactive, the Sml content in CH-Lip decreased to about 30%, whereas the remaining amount in SGC-Lip was above 70%, and after 2 hours of incubation, the content still maintained above 40%. This could be due to the inability of gastric proteases to diffuse through the liposomal membrane[6], which to some extent protects the encapsulated Sml from degradation. Moreover, the insertion of SGC into the lipid bilayer can inhibit protease activity[7], thereby SGC-Lip exhibits a better protective effect. As shown in Fig 1 B, compared to the good protective effect in SGF, the stability of SGC-Lip in SIF decreased within 0.5 hours, which may be related to the enzymatic degradation of the lipid bilayer by pancreatic proteases[8]. In the subsequent 1 to 6 hours, SGC-Lip was able to maintain a relatively stable protective effect.

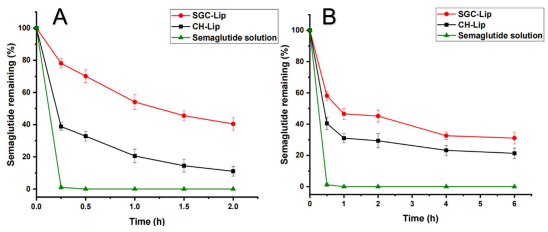


Fig 1 The changes of SGC-Lip and CH-Lip in SGF and SIF. (A) The remaining of semaglutide after incubating in SGF. (B) The remaining of semaglutide after incubating in SIF.

Fig 2 presents the blood glucose levels over time in type II diabetic model rats after administration of different formulations. The oral SGC-Lip group had a slightly slower onset compared to the subcutaneous Sml solution group but also maintained a continuous hypoglycemic effect, reducing blood glucose to about 40% of the initial level at 12 hours. The $AUC_{0\text{-}12h}$ and PA (%) are shown in Tab.1, with the $AUC_{0\text{-}12h}$ of the SGC-Lip group being approximately 6 times that of the CH-Lip group. Compared to the subcutaneous Sml solution group, the PA for the

oral CH-Lip and SGC-Lip groups were 1.22% and 6.84%, respectively.

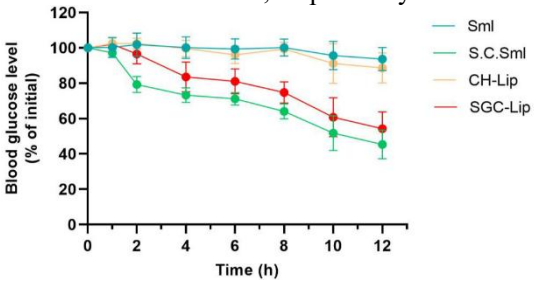


Fig 2 Blood glucose level vs. time profiles of the diabetic rats following the administration of different semaglutide formulations (n=6).

Tab.1 $AAC_{0\text{-}12h}$ of blood glucose concentration in different groups (mmol*min/L)

	Sml	S.C. Sml	CH-Lip	SGC-Lip
$AAC_{0\text{-}12\,h}$	19.38	368.1	44.8	251.7
PA（%）	0.5	100	1.22	6.84

CONCLUSION

This study demonstrated that encapsulating Sml in SGC-Lip liposomes can improve the stability of the drug in SGIF and exhibit better hypoglycemic effects than CH-Lip. In addition, the relevant technical methods mentioned in this paper can also be applied to the oral delivery of other peptide drugs.

REFERENCES

[1] E. T, H. O, K. A, et al. Hypoglycemic effect of surfactant-coated insulin solubilized in a novel solid-inoil-in-water (S/O/W) emulsion [J]. International Journal of Pharmaceutics, 2003, 252(1-2): 271-4.
[2] V. A, I.K. R, M.A. K. Polymethyacrylate based microparticulates of insulin for oral delivery: Preparation and in vitro dissolution stability in the presence of enzyme inhibitors [J]. International Journal of Pharmaceutics, 2001, 225(1-2): 31-9.
[3] Hu S, Niu M, Hu F, et al. Integrity and stability of oral liposomes containing bile salts studied in simulated and ex vivo gastrointestinal media [J]. International Journal of Pharmaceutics, 2013, 441(1-2): 693-700.
[4] Jin S, Fu S, Han J, et al. Improvement of oral bioavailability of glycyrrhizin by sodium deoxycholate/phospholipid-mixed nanomicelles [J]. J Drug Target, 2012, 20(7): 615-22.
[5] Gordon G S, Moses A C, Silver R D, et al. Nasal absorption of insulin: enhancement by hydrophobic bile salts [J]. Proc Natl Acad Sci U S A, 1985, 82(21): 7419-23.
[6] Hu S, Niu M, Hu F, et al. Integrity and stability of oral liposomes containing bile salts studied in simulated and ex vivo gastrointestinal media [J]. International Journal of Pharmaceutics, 2013, 441(1-2): 693-700.
[7] Yamamoto A, Taniguchi T, Rikyuu K, et al. Effects of various protease inhibitors on the intestinal absorption and degradation of insulin in rats [J]. Pharm Res, 1994, 11(10): 1496-500.
[8] Taira M C, Chiaramoni N S, Pecuch K M, et al. Stability of Liposomal Formulations in Physiological Conditions for Oral Drug Delivery [J]. Drug Delivery, 2004, 11(2): 123-8.

报告人：高媛；**工作单位：**中国科学院过程工程研究所；
是否为学生：否；**联系邮箱：**gaoyuan@ipe.ac.cn

载QS-21复合纳米佐剂构建与免疫效应研究

高媛 [1]，王连艳 [1,*]

[1] 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: wanglianyan@ipe.ac.cn

摘要正文：南美皂皮树作为 QS-21 成分的唯一植物来源，目前全球仅足以生产 6 万剂疫苗[1]。然而，已经报道的 QS-21 提取方法提取时间长、提取率低，浪费植物材料，因此，开发有效的提取方法来提升 QS-21 的提取率是十分必要的；其次，由于 QS-21 会导致溶血，为使其在安全的情况下有效发挥佐剂效应，递送载体的构建极为重要[2]；目前已经开发了含 QS-21 的脂质体复合佐剂 AS01b 用于预防带状疱疹病毒的传播，然而，该疫苗的副作用显著，包括：注射部位的疼痛和全身不适，如肌肉酸痛、疲劳、低热和胃肠道症状等[3]，因此，亟需通过构建新型佐剂系来提升疫苗的安全性与免疫效应。本研究以南美皂皮树为研究对象，采用酶辅助超声法从树皮中提取 QS-21，系统优化提取工艺，优化后 QS-21 的提取率高达 5.778 mg/g。同时，在比较羧封端和酯封端的 PLA 材料纳米粒免疫效应的基础上，发现羧封端纳米粒有利于形成持久的中央记忆，对脾细胞增殖和细胞因子分泌也有显著促进作用。因此，本研究以带状疱疹为抗原，选取羧封端 PLA 材料进行载 QS-21 纳米复合佐剂的构建与评价，并结合 QS-21、MPLA 和纳米颗粒的佐剂优势，获得高效的复合纳米佐剂疫苗，结果表明，所构建的复合纳米佐剂体系可同时提升 $CD4^+$和 $CD8^+$T 细胞的活化水平，不仅有效诱导了体液与细胞免疫应答，且具有良好的生物安全性，是有潜力的新型疫苗佐剂系统。

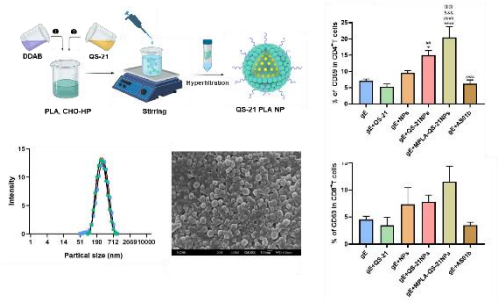


Fig. 1 Characterization and evaluation of immune effects of DDAB/PLA nanovaccine loaded with QS-21

关键词：QS-21；佐剂；纳米粒；带状疱疹；免疫效应

参考文献

[1] **F. Guerra and S. Sepúlveda Saponin production from *Quillaja* genus species. An insight into its applications and biology [J]. *Sci. Agr.* 2021, 78(5): e20190305.**

[2] **R. Govind, G. Jeffrey, L. Philip and G. David Natural and synthetic saponin adjuvant QS-21 for vaccines against cancer [J]. *Expert Rev. of Vaccines*, 2011, 10(4): 463-470.**

[3] **C. Andrea, B. Wivine, H. Caroline, K. Joon Hyung, L. Myron, Z. Toufik, C. Anthony and D. Arnaud Association between immunogenicity and reactogenicity: a post hoc analysis of 2 phase 3 studies with the adjuvanted recombinant zoster vaccine [J]. *J. Infect. Dis.* 2022, 226(11): 1943-1948.**

报告人/墙报展示人简介：

高媛，中国科学院过程工程研究所特别研究助理，主要从事纳米疫苗佐剂递送系统领域的研究，特别针对可生物降解聚合物纳米颗粒和新型复合纳米佐剂系统构建及免疫效应评价研究。目前已发表期刊论文 16 篇，其中 SCI 论文 14 篇、中文核心论文 2 篇，以第一作者身份在 *ACS Nano*、*Int. J. Biol. Macromol*、*Ind. Crops Prod.*等国内外期刊发表 SCI 论文 7 篇，中文论文 2 篇，他引超 150 余次；申请中国发明专利 2 项；主持北京市自然科学基金-昌平创新联合基金、国家兽用生物制品工程技术研究中心开放课题、中央高校博士研究生自主创新基金、大学生创新创业项目各 1 项，并参与了多项国家自然科学基金、中央高校基本科研项目的研究。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

On-line monitoring of particle size and water content in fluidized bed granulation-drying process

Tao Wu*, Xue Zhong Wang

Beijing Key Laboratory of Enze Biomass Fine Chemicals, College of New Materials and Chemical Engineering, Beijing Institute of Petrochemical Technology, Beijing 102617.

*Correspondence authors: wutao@bipt.edu.cn

Granulation – drying is a key step in solid dosage drug manufacturing for improving powder flowability, bulk density, etc. The moisture content and particle size distribution are critical quality attributes of granulation products, and they are measured by offline method in pharmaceutical industry, which cause considerable difficulties for judging endpoint and adjusting process parameters in time. In this work, on-line microscopic imaging and near infrared spectroscopy (NIR) were used to real-time and on-line detect particle size and moisture of the corn starch granulation - drying process in an industrial – scale fluidized granulator[1]. Based on the real-time image processing techniques (image contrast improvement and thresholding method), edge of particles was clearly segmented, and particle size was obtained. By count the particle size results of 5 images in a second, particle size distribution was acquired real-time. A chemometrics model was built by combining genetic algorithm and partial least square (PLS) to correlate the NIR spectra and offline water content results. The prediction root-mean-square error of PLS model is 0.0051, and the prediction determination coefficient R_P^2 is 0.974. These results showed that the above method can be used to real-time and on-line monitor the moisture content and particle size distribution of granulation – drying process accurately. This work not only gives a comprehensive process understanding of granulation, but also provides a research basis for process optimization and control.

Keywords: Fluidized bed granulation-drying process; Image processing; Genetic Algorithm; PLS

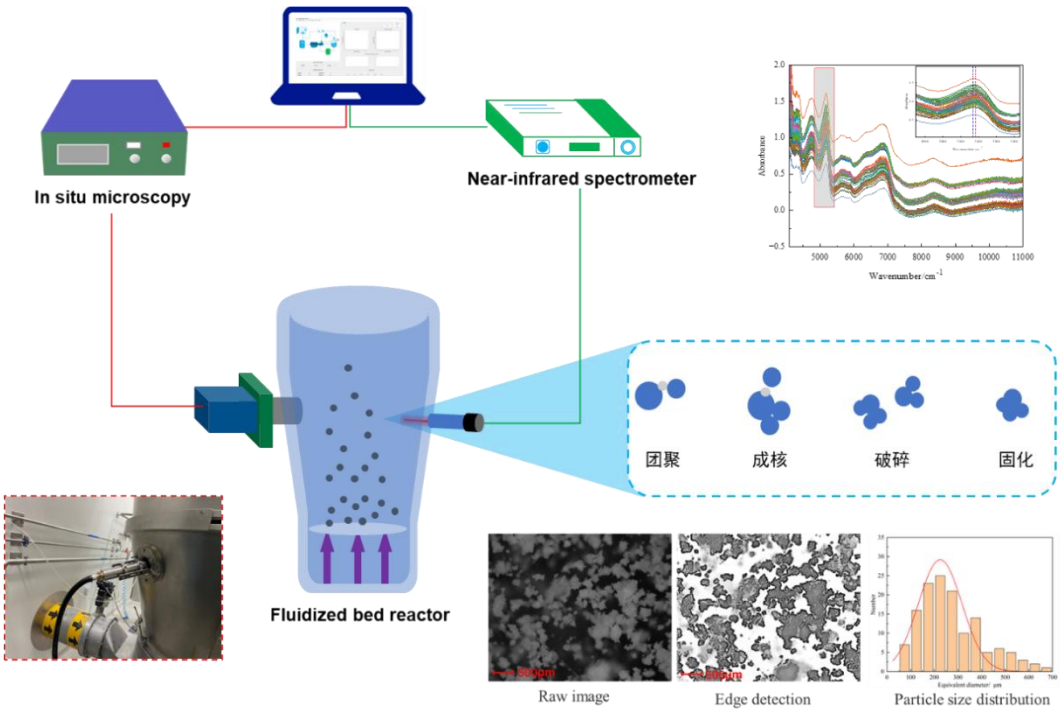


Fig.1 Experimental process overview diagram

References

[34] [1] GOSAVI A A, NANDGUDE T D, MISHRA R K, PURI D B.. *AAPS PharmSciTech*, 2024, 25(5): 111.

报告人/墙报展示人简介：

吴韬，男，北京市科技新星，北京石油化工学院助理研究员，硕士生导师。主要研究领域为基于过程分析技术的药物制剂过程的实时在线检测与智能控制。

附：报告人不是学生。

纳米酶武装益生菌的构建及其疾病治疗研究

毛峥伟*

浙江大学高分子科学与工程学系，杭州市余杭塘路 866 号，310058

*Email: zwmao@zju.edu.cn

益生菌疗法通过正向调节益生菌群的组成和功能、积极调控宿主免疫与代谢，在多种疾病中展现出优异的治疗效果。基因编辑技术的应用极大程度丰富了益生菌的功能、增强了益生菌的疗效。近期，纳米材料与技术的快速发展为益生菌疗效的提升开辟了一条新途径。益生菌和功能性纳米材料形成的“益生菌纳米杂化材料”可兼具益生菌的生物活性以及纳米材料特殊的理化性质，实现双方优势互补或产生协同效应，以更便捷的方式提高了益生菌的疗效与转化潜力。

益生菌的疗效主要依赖于生物酶系统的作用。纳米酶是一类具有类似于天然酶催化功能的纳米材料，比天然酶更具稳定性。其中，氧化还原纳米酶可模拟过氧化物酶（POD）、过氧化氢酶（CAT）、超氧化物歧化酶（SOD）等活性，调控氧化还原反应相关的能量代谢和信号传导等。

我们以优化益生菌疗效为目标，基于氧化还原纳米酶对益生菌的代谢调控性质，制备了两种益生菌/纳米酶复合活性材料以补充益生菌缺乏的酶系统或强化其已有的酶系统。

体系一：采用具有 CAT、SOD 活性的 Fe 基单原子纳米酶补充厌氧长双歧杆菌缺乏的抗氧化酶系统。纳米酶可持续、稳健、高效地帮助益生菌抵御炎性肠道高浓度 ROS 的攻击，延长其在炎性肠道中的定植时间，使其发挥更高效的菌群调控作用。该益生菌-抗氧化纳米酶杂化材料在小鼠和大型犬的炎症性肠病（IBD）模型中均具有良好的治疗效果，有望成为代替传统 IBD 药物的新制剂。该体系为开发高效安全的益生菌制剂提供了新思路。

体系二：采用具有 POD 活性的超小 Au 掺杂 Fe 基单原子纳米酶强化长双歧杆菌已有的氧化酶系统。纳米酶的活性具有酸响应性，可在肿瘤区域特异性提高益生菌抗肿瘤短链脂肪酸的代谢与产量，优化其抗肿瘤作用。该益生菌-氧化纳米酶杂化材料在多种肠癌模型中均具有优异的肿瘤杀伤效果，在正常组织中保持良好的生物安全性。该研究为益生菌代谢调节提供了新方法。

关键词：益生菌；纳米酶；复合活性材料；纳米药物；代谢调控

参考文献

[1] Fangfang Cao, Lulu Jin, Yong Gao, Yuan Ding, Hongyang Wen, Zhefeng Qian, Chenyin Zhang, Liangjie Hong, Huang Yang, Jiaojiao Zhang, Zongrui Tong, Weilin Wang*, Xiaoyuan Chen*, **Zhengwei Mao***. Artificial Enzymes-Armed Bifidobacterium Longum Probiotics for Alleviating Intestinal Inflammation and Microbiota Dysbiosis. *Nature Nanotechnology* **2023**, 18, 617-627.

[2] Fangfang Cao, Lulu Jin, Chenyin Zhang, Yong Gao, Zhefeng Qian, Hongyang Wen, Sisi Yang, Ziqiang Ye, Liangjie Hong, Huang Yang, Zongrui Tong, Liang Cheng, Yuan Ding, Weilin Wang, Guocan Yu,* Zhengwei Mao,* and Xiaoyuan Chen*. *Advanced Material* **2024**, 36, 2304257.

报告人/墙报展示人简介：

主持国家自然科学基金杰出青年项目。近 5 年作为通讯作者发表论文 68 篇，其中影响因子大于 10 的论文 38 篇、ESI 高被引论文 6 篇、Nature Nanotechnology 1 篇、Adv Mater/Nat Commun/Sci Adv 共 14 篇。论文被 SCI 他引超过 1 万次，H 因子 62。2019 年获得中国生物材料学会生物医用高分子材料分会颁发的“青年学者优秀奖”获得浙江省自然科学一等奖（2018、排二）1 项、浙江省科技进步一等奖 2 项（2020、排三，和 2022、排二）。担任期刊 Acta Biomaterialia 副主编。

第 20 分会场：第三届天然和仿生颗粒论坛：向自然学习，造智能颗粒

The Therapeutic Effect Of Gold Clusters In An EAE Model Of Multiple Sclerosis By Regulating T Cell Differentiation

Xueyun Gao[1,*]

[1]College of Chemistry and Life Science, Beijing University of Technology, Beijing, 100124

* gaoxy@ihep.ac.cn

Multiple sclerosis (MS) is caused by an aberrant autoimmune response in the central nervous system (CNS), which results in progressive demyelination. Current therapies, mostly disease-modifying therapies, have limited wide use due to their higher costs, low patient's compliance, and serious side effects. Here, we firstly show that nano-sized gold clusters (GA, molecular formula $Au_{29}SG_{27}$) can significantly attenuate or reverse clinical symptoms and prevent neuronal demyelination in an experimental autoimmune encephalomyelitis (EAE) mouse model of MS when administered prophylactically or therapeutically. GA reduces the infiltration of Th1 and Th17 cells, and the secretion of associated pro-inflammatory cytokines in the CNS. Notably, GA shows potent direct inhibitory activity on the differentiation of CD4+T cells into Th1 and Th 17 in vitro with no effect on apoptosis and activation of T cells. Mechanistic studies show that GA inhibit JAK/STAT signaling, which is critical for Th-cell differentiation, through specific Au-binding with JAK protein in cells. Collectively, our results sheds light on GA as a novel nano-drug for MS treatment with low toxicity and high efficiency.

Keywords: Au clusters; Experimental autoimmune encephalomyelitis; Inflammation; Multiple sclerosis

References

[1] Z. He, J. Lai, H. Wang, Y. He, C. Zhang, L. Gao, H. Huang, L. Zheng, J. Hao, X. Gao, F. Gao. The therapeutic effect of gold clusters in an EAE model of multiple sclerosis by regulating T cell differentiation. Nano Today 2024, 54, 102128.

报告人/墙报展示人简介：

高学云，教授，国家杰出青年科学基金获得者、中国科学院百人计划。聚焦于新的生物分析成像方法与新型免疫疾病药物筛选，为疾病早期诊断和免疫疾病治疗提供新的技术方案。在生物分析方向，聚焦于核放射技术和大科学光源装置技术，发展前沿的生物分析方法，为生物基础研究和临床疾病诊断提供新的分析方法学。近 10 年，在 JACS 和 Adv. Mater.等期刊上发表 SCI 论文百余篇；应邀为 Acc. Chem. Res 和 Adv. Mater.等期刊撰写综述，为 CRC Handbook 学术工具书撰写纳米技术专题。应邀在 ACS National Meeting、China NANO、MRS、中国分析化学年会等学术会议做邀请报告。获 1 项省自然科学一等奖，获 5 项美国发明专利授权。获 1 项中国发明专利授权（ZL97107038.5），完成该专利技术的工业化生产放大和定型生产，完成卫生部产品申报并获得批文 1998（134 号；功能：提高免疫），并于 2000 年实现该产品的市场化。

附：报告人非学生

形状仿生纳米颗粒的设计及高效递药机制的研究

甘勇[1,*]，俞淼荣[1]，聂迪[1]

[1]中国科学院上海药物研究所，上海市浦东新区海科路 501 号，201203

*Email: ygan@simm.ac.cn

纳米颗粒可有效改善药物的安全性和有效性，但体内复杂的生理屏障严重限制了其递药效率。纳米颗粒的形状属性是决定其与生物屏障相互作用的关键因素[1]，本团队设计了一系列杆状纳米颗粒并利用超高分辨率显微成像和分子模拟技术探究了其递药机制，包括：①仿生肠道杆菌形状制备了介孔二氧化硅杆状颗粒，发现其在肠道黏液中具有特殊的“旋转-跳跃”运动方式，扩散速率显著高于球状颗粒[2]。表面修饰不同构象的聚乙二醇分子后，可进一步促进其克服“黏液-细胞”双重屏障，将沙奎那韦的口服生物利用度提高21.9倍[3]；②相比于传统杆状，尖锐的梭状纳米颗粒具有高曲率特点，有助于减少肿瘤高间质压环境中流体阻力，增加“旋转-跳跃”频率，从而展现出良好的肿瘤穿透和递药能力，抑瘤率达90%[4]；③除刚性颗粒外，我们还制备了适中刚度的脂质颗粒，其在黏液、细胞外基质等屏障中发生类杆状形变，显著提高了胰岛素的口服生物利用度（13.7%）[5-7]；④此外，杆状纳米颗粒还可借助小窝蛋白入胞，避免大量进入溶酶体降解，高效克服胞内转运屏障递送至内质网附近，提高了美呋哌瑞的靶位递送效率，显著改善抗肿瘤效果[8-9]。研究工作为未来新型高效递药纳米颗粒的设计与应用提供了新的思路和理论指导。

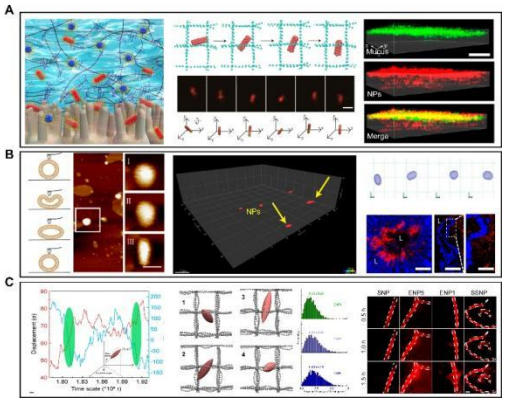


Fig. 1 Rotation-facilitated rapid transport of nanorods in mucosal (A-B) and tumor tissues (C) for improved drug delivery.

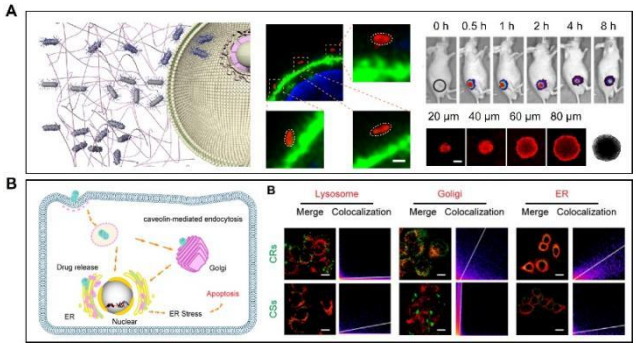


Fig. 2 Nanorods with enhanced cellular uptake (A) and intracellular transport (B) improved drug delivery.

关键词：纳米颗粒；形状仿生；药物递送；克服屏障；体内输运

参考文献

[1] **D. Nie, C. Liu, M. Yu, X. Jiang, N. Wang, and Y. Gan Elasticity regulates nanomaterial transport as delivery vehicles: Design, characterization, mechanisms and state of the art. *Biomaterials*. 2022, 291:121879.**

[2] **M. Yu, J. Wang, Y. Yang, C. Zhu, Q Su, S. Guo, J. Sun, Y. Gan, X. Shi, and H. Gao Rotation-Facilitated Rapid Transport of Nanorods in Mucosal Tissues. *Nano Lett.* 2016, 16: 7176-7182.**

[3] **Y. Yang, F. Tian, D. Nie, Y. Liu, K. Qian, M. Yu, A. Wang, Y. Zhang, X. Shi and Y. Gan Rapid transport of germ-mimetic nanoparticles with dual conformational polyethylene glycol chains in biological tissues. *Sci. Adv.* 2020, 6: eaay9937.**

[4] **X. Jiang, S. Xu, Y. Qiu, K. Huang, B. Wang, B. Ding, Z. Zhang, Z. Zhao, X. Zhang, M. Yu, F. Lin, X. Shi, and Y. Gan Curvature-mediated rapid extravasation and penetration of nanoparticles against interstitial fluid pressure for improved drug delivery. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A*. 2024, 121:e2319880121.**

[5] **M. Yu, X. Lu, F. Tian, Q. Su, N. Zheng, Y. Yang, J. Wang, A. Wang, C. Zhu, S. Guo, X. Zhang, Y. Gan, X. Shi, and H. Gao Rapid transport of deformation-tuned nanoparticles across biological hydrogels and cellular barriers. *Nat. Commun.* 2018, 9: 2607.**

[6] **Z. Dai, M. Yu, X. Yi, Z. Wu, F. Tian, Y. Miao, W. Song, S. He, Ejaj. Ahmad, S. Guo, C. Zhu, X. Zhang, Y. Li, X. Shi, R. Wang, and H. Gao Chain-Length- and Saturation-Tuned Mechanics of Fluid Nanovesicles Direct Tumor Delivery. *ACS Nano.* 2019, 13: 7676-7689.**

[7] **M, Yu, W. Song, F. Tian, Z. Dai, Q. Zhu, Ejaj. Ahmad, S. Guo, C. Zhu, H. Zhong, Y. Yuan, T. Zhang, X. Yi, X. Shi, Y. Gan, and H. Gao Curvature-mediated rapid extravasation and penetration of nanoparticles against interstitial fluid pressure for improved drug delivery. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A*. 2019, 116:5362-5369.**

[8] **W. Zhang, M. Yu, Z. Xi, D. Nie, Z. Dai, J. Wang, K. Qian, H. Weng, Y. Gan, and L. Xu Cell Membrane-Camouflaged Nanorods with Endoplasmic Reticulum Targeting for Improved Antitumor Therapy. *ACS Appl. Mater. Interfaces.* 2019, 11: 46614-46625.**

[9] **J. Wang, H. Pan, J. Li, D. Nie, Y. Zhuo, Y. Lv, N. Wang, H. Chen, S. Guo, Y. Gan, X. Yang, and M. Yu Cell membrane-coated mesoporous silica nanorods overcome sequential drug delivery barriers against colorectal cancer. *Chin. Chem. Lett.* 2023, 107828.**

报告人/墙报展示人简介：

甘勇，中国科学院上海药物研究所研究员，博士生导师。国家杰出青年科学基金获得者，中国药学会工业药剂专业委员会及药用辅料专业委员会委员、国家食品药品监督管理局药品审评中心评审专家、药典委委员。任 Chinese Chemical Letters、Acta Pharmaceutica Sinica B、Asian Journal of Pharmaceutical Sciences 等期刊编委。

主要围绕新型药物载体制剂的设计及其克服复杂生理屏障机制开展研究，先后在 Nature Nanotechnology、Science Advances、Nature Communications、PNAS 等国内外期刊上发表研究论文 100 余篇。在高端制剂转化及产业化方面，理性化设计制备多个创新制剂。已获授权专利 40 项，获得新药临床批件 17 项，药品注册批件 9 项，研发上市创新制剂 7 项。曾获科技部中青年创新领军人才、中国药学会-以岭生物医药青年奖等荣誉。

附：报告人为研究员，非学生

基于半导体纳米颗粒的SERS方法检测循环肿瘤细胞研究

吴爱国

中国科学院宁波材料技术与工程研究所 宁波，315201

宁波慈溪生物医学工程研究所 慈溪，315300

表面拉曼增强光谱（SERS）技术已经广泛应用于生物医学分析与成像检测等领域，通常基于贵金属纳米颗粒材料的SERS技术，能够获得很高的拉曼增强因子，然而其检测稳定性不过。经常是不同的SERS热点区域的拉曼增强因子相差几个数量级，导致传感检测的一致性难以保证。通常的半导体纳米颗粒材料，虽然拉曼稳定性较好，重复性有保障但是其不高的拉曼增强因子，使得其难以应用于临床传感检测领域。中科院宁波材料所的团队，经过多年的攻关，通过调节颗粒材料的性能，实现了基于半导体微纳米颗粒材料的增强因子的提升，使得其可与通常的贵金属纳米颗粒材料相当。进一步，结合各种肿瘤标志物可以实现对各种肿瘤的有效检测，对临床血液样本的有效检测率超过90%，实现了有效应用。在本报告中，将详细阐释相关的拉曼增强机制，检测的稳定性和特异性方面的最新工作进展。

脑靶向药物递释系统

蒋晨

复旦大学

摘要正文脑部重大疾病相关药物递送策略研发，提高了中枢药物的疗效。根据神经退行性疾病、脑部血管疾病、脑肿瘤等的病理、生理特征，设计、选用克服血脑屏障并靶向神经病变组织的功能分子修饰功能高分子材料，构建脑靶向递药系统。在研究递药系统的脑组织靶向药物输运的过程及作用机制的基础上，开展多个模型药物的脑内递送效率、疗效及其作用机制的评价。

关键词：脑靶向、药物递释

数据驱动仿生纳米药物设计

黄兴禄

南开大学生命科学学院、药物化学生物学国家重点实验室

*Email: huangxinglu@nankai.edu.cn

传统纳米药物的设计和开发主要存在两方面弊端：一是往往基于纳米材料的性质寻找特定的生物医学应用场景；二是主要依赖试错法（trial and error）或基于直觉和经验。因此，如何理性设计纳米药物是目前重要的挑战。数据驱动是利用各种数据结合计算技术来研究纳米材料的一种新兴策略，数据类型包括各种数据库、高通量虚拟筛选、生物信息学分析和机器学习辅助数据挖掘等。近年来，我们利用机器学习、生信分析等技术挖掘的数据，驱动设计多种仿生纳米药物用于疾病的治疗。具体包括以下几方面：1）利用机器学习驱动设计跨血管内皮细胞的铁蛋白纳米药物，提高其在肿瘤的递送效率；2）利用机器学习驱动设计铁蛋白探针靶向转移至淋巴结的肿瘤细胞，辅助临床上肿瘤转移淋巴结的切除；3）利用生信分析驱动细胞膜仿生纳米疫苗的设计，提高其对肿瘤内T细胞的激活能力，用于肿瘤的治疗；4）利用单细胞测序分析驱动仿生巨噬细胞的设计，促进其靶向递送至心脏缺血组织，缓解缺血导致的组织损伤。这些研究进展不仅展示了数据驱动在纳米药物设计上的应用，而且还开发了一系列基于数据驱动仿生纳米药物的新技术。

微生物表面修饰与功能调控

刘尽尧 [1,*]

[1] 上海交通大学分子医学研究院，上海，200127

*Email: jyliu@sjtu.edu.cn

摘要正文：肠道菌群是人体最庞大且最复杂的微生物群落，也是人体重要的代谢器官，在免疫调节和维持体内稳态中发挥关键作用 [1]。菌群紊乱与人体许多重大疾病的发生发展息息相关，通过调控肠道菌群来防治相关疾病已成为一种独特的治疗方式。粪菌移植是一种调控肠道菌群的有效方法，但其在实施过程中需要采用浸入式的给药方式，同时移植的细菌组分不明确，从而降低了患者的依从性并产生潜在的安全风险。通过口服方式将益生菌递送至肠道是一种有效避免上述问题的简易方法，然而胃肠道中存在的胃酸和胆汁酸等成分容易导致益生菌的失活，并且胃肠道的蠕动及其内部存在的流体剪切应力使益生菌难以定植在肠道。基于此，我们通过表面纳米涂层技术，提出一种“单细菌包裹”策略 [2]，在不影响细菌活性的前提下使细菌产生具有抵抗体内复杂环境、延长肠道停留时间、选择性定植不同肠段以及靶向病灶部位和特定细胞的能力。与传统疗法相比，涂层细菌在治疗炎症性肠病、肠屏障损伤、肿瘤等相关疾病方面展示出巨大优势 [3]。

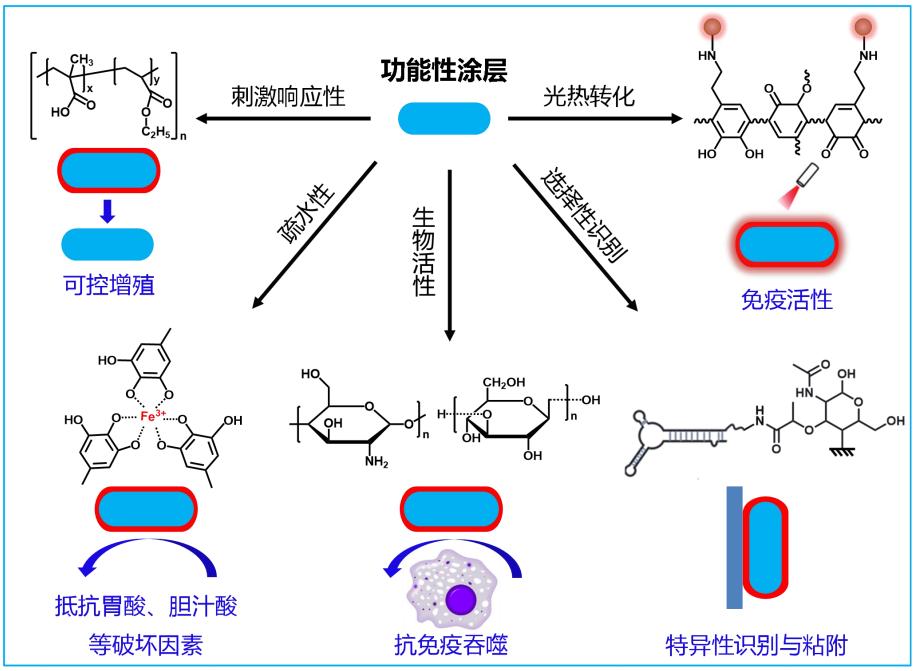


Fig. 1 Coating-mediated manipulation of bacterial behavior.

关键词：活体药物；细菌；化学涂层；口服；肠道菌群

参考文献

[1] **L Wang, J Liu*, *Nature Biomedical Engineering* 2023, *7*, 3.**

[2] **Z Cao, J Liu*, *Nature Protocols* 2024, 10.1038/s41596-024-01019-6.**

[3] **Y Chen, S Lin, L Wang, Y Zhang, H Chen, Z Fu, M Zhang, H Luo, J Liu*, *Nature Biomedical Engineering* 2024, *8*, 823.**

报告人/墙报展示人简介：

刘尽尧，博士，国家杰出青年基金、国家海外高层次人才引进青年项目获得者，上海交通大学分子医学研究院/医学院附属仁济医院、上海市肿瘤研究所肿瘤系统医学全国重点实验室课题组长，研究员，博士生导师。2013 年博士毕业于上海交通大学，随后于美国杜克大学及麻省理工学院从事博士后研究。2018 年初回国独立开展研究工作，担任中科院一区 J Nanobiotechnology（Springer Nature, IF=10.6）执行主编，Biotechnology J（Wiley, IF=3.2）副主编，J Controlled Release 编委，中国药学会药剂专业委员会青年委员，中国生物材料学会青年委员会委员，中国生物材料学会智能仿生生物材料分会委员，中国生物材料学会表界面工程分会委员，中国抗癌协会纳米肿瘤专业委员会青年委员会委员等。曾获 2022 年 JNB Rising Star 奖等。以独立通讯作者发表 Nat Biomed Eng、Nat Protoc、Nat Commun、Sci Adv、JACS、Angew Chem Int Ed、Adv Mater 等代表性论文。申请国际、美国、中国发明专利三十余项。主持国家重点研发计划课题、上海市探索者计划等课题。研究兴趣主要包括生物医用高分子材料、微生物药物、纳米药物与纳米医学，尤其在活体细菌药物及口服微生态制剂方面取得极具临床应用前景的转化成果。相关工作被 MIT News、湖南卫视、肠•道等媒体报道。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

智能核酸功能化颗粒设计及生物应用

叶邦策 [1, 2,*]

[1] 华东理工大学微分析与生物系统工程实验室，生物反应器工程国家重点实验室，上海，200237

[2] 浙江工业大学工程生物学与健康研究中心，长三角绿色制药协同创新中心，药学院，浙江 杭州 310014

*Email: bcye@ecust.edu.cn

摘要正文：纳米颗粒的生物靶向性与可设计性使其成为构建智能装置应用于生物医药的理想基底，也是近十年研究热点。本文利用纳米及天然颗粒配合核酸纳米技术，构建在活细胞和活体内自运行的核酸功能化纳米颗粒用于重大疾病诊断和治疗。主要包括：

1.以纳米颗粒为基底，针对活细胞和活体内生物相容性及生理稳定性及探针智能化自运行等系列问题，利用纳米金球的生物相容性及自主穿透细胞能力，设计构建了智能化的核酸负载金球颗粒，用于活细胞内的microRNA 特异性成像，通过一体化设计，初步解决了纳米颗粒在生物体环境中由于组件的时空间差异分布而导致的效率低下的问题[1,2]；进一步，通过组件的模块化设计，快速构建了多类型颗粒交流网络（MMCN），实现了对机体适应性免疫应答的智能化模拟，推动核酸功能化颗粒向更加智能化方向的发展[3]；此外，针对 T 细胞治疗的安全性和有效性问题，构建了基于纳米磁珠颗粒的智能 T 细胞纳米结合器[4]，用以理性改造细胞，编程细胞多样功能，提高特异性和安全性，为细胞工程化改造提供新思路。

2. 以外泌体为基底，外泌体是一类来自于多囊泡体的细胞外囊泡（直径为 30-150 nm），其本身可作为癌症监测和诊断的非侵入性生物标志物，同时外泌体作为具有多效功能的细胞间转运系统，与免疫反应的平衡以及免疫调节有关，从而引发了基于外泌体的治疗药物的设计和应用。本文对外泌体的分析检测方法以及其免疫治疗应用开展研究：基于胆固醇标记的 DNA 锚定探针和信号放大策略，建立了两种外泌体定量方法，实现了外泌体的灵敏检测[5,6]；基于胆固醇修饰的核酸探针和胞内信号响应，构建了外泌体示踪颗粒，实现了细胞摄取外泌体途径的可视化追踪[7]；通过外泌体工程化界面展示和 DNA 介导的自组装，构建了一种多功能外泌体组装体，增强了外泌体的免疫调节作用。

关键词：外泌体、DNA纳米技术、疾病诊疗

参考文献

[1] Cheng-Pin Liang, Pei-Qiang Ma, Hui Liu, Xinggang Guo, Bin-Cheng Yin, Bang-Ce Ye. Rational engineering of dynamic, entropy-driven DNA nanomachine for intracellular microrna imaging. ***Angew. Chem. Int. Ed.***, 2017, 56, 9077-9081.

[2] Pei-Qiang Ma, Cheng-Pin Liang, He-Hua Zhang, Bin-Cheng Yin, Bang-Ce Ye. A highly integrated DNA nanomachine operating in living cells powered by an endogenous stimulus. ***Chem. sci.***, 2018, 9, 3299-3304.

[3] Pei-Qiang Ma, Qing Huang, Hua-Dong Li, Bin-Cheng Yin, Bang-Ce Ye. Multimachine communication network that mimics the adaptive immune response. ***J. Am. Chem. Soc.***, 2020, 142, 3851-3861.

[4] Pei-Qiang Ma, Tian-Xian Liu, Hua-Dong Li, Bin-Cheng Yin, and Bang-Ce Ye. Nano-biohybrid DNA engager that reprograms the t-cell receptor. ***J. Am. Chem. Soc.***, 2022, 144, 22458–22469.

[5] Fang He, Ze-Yu Ye, Li-Dong Zhao, Bin-Cheng Yin, Bang-Ce Ye. Probing exosome internalization pathways through confocal microscopy imaging. ***Chemical Communications***, 2019, 55, 14015-14018.

[6] Fang He, Jing Wang, Bin-Cheng Yin, Bang-Ce Ye. Quantification of exosome based on a copper-mediated signal amplification strategy. ***Analytical Chemistry***, 2018, 90, 8072-8079.

[7] Fang He, Hui Liu, Xinggang Guo, Bin-Cheng Yin, Bang-Ce Ye. Direct exosome quantification via bivalent-cholesterol-labeled DNA anchor for signal amplification. ***Analytical Chemistry***, 2017, 89, 12968-12975.

[8] Pei-Qiang Ma, Fu-Wen Huang, Ya-Qi Xie, Hong-Rui Li, Hua-Dong Li, Bang-Ce Ye, and Bin-Cheng Yin*. A Universal

DNA-based Sensing Toolbox for Programming Cell Functions. ***Journal of the American Chemical Society.*** 145(51), 28224-28232, 2023.

[9] Zhen-Ping Zou, Yue Du, Ting-Ting Fang, Ying Zhou*, Bang-Ce Ye. Biomarker-responsive engineered probiotics for the diagnosis, recording, and amelioration of inflammatory bowel disease in mice. ***Cell Host and Microbe***. 31(2), 199-212, 2023.

[10] Jing Wo, Zhao-Yong Lv, Jia-Nan Sun, Hao Tang, Nan Qi, Bang-Ce Ye. Engineering probiotic-derived outer membrane vesicles as functional vaccine carriers to enhance immunity against SARS-CoV-2. ***iScience***. 26(1), 105772, 2023.

[11] Shi-Fu Liang, Fang-Fang Zuo, Bin-Cheng Yin and Bang-Ce Ye. Delivery of siRNA based on engineered exosomes for glioblastoma therapy by targeting STAT3. ***Biomaterials Science***. 10, 1582, 2022.

[12] Shifu Liang, Huiying Xu, Bang-Ce Ye. Membrane Decorated Exosomes for Combination Drug Delivery and Improved Glioma Therapy. ***Langmuir*** 38(1), 299-308, 2022.

报告人展示人简介：

叶邦策教授，华东理工大学生物工程学院院长，教育部“长江学者”特聘教授，教育部新世纪优秀人才支持计划学者，上海市教委曙光学者，上海市科委优秀学科带头人。*Biotechnology & Applied Biochemistry* 副主编，*Journal of Bacteriology* 编委（2024-2026），*Biotechnology Journal* 编委，“合成生物学”期刊编委，华东理工大学学报编委。浙江省药学会常务理事，中国生物医药协会生物芯片委员会委员。2016 年教育部自然科学二等奖，2008 年获上海市技术发明二等奖。近年来在 *Cell Host & Microbe, Proc Natl Acad Sci USA, Cell reports, Cell Chemical Biology, J Am Chem Soc, Angew Chem Int Ed* 等期刊发表 SCI 论文 350 多篇。主要研究方向：合成生物学及智能生物诊疗系统设计、分子机器与生物传感研究。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

蛋白质胞内递送技术及应用

程义云*

华东师范大学生命科学学院，上海市，200241

*Email: yycheng@mail.ustc.edu.cn

摘要正文：蛋白质胞内递送技术对生命科学的基础研究，生物技术的发展以及蛋白质类药物的研发具有重要的意义。我们通过理性设计的策略制备了一类高效的大分子载体用于天然蛋白质胞内递送。一方面，通过在高分子链上引入能够高效结合蛋白质的功能基团来帮助高分子载体与蛋白质形成稳定复合物；另一方面，借助超分子组装的策略稳定高分子载体与蛋白质形成的复合物，进而实现高效的细胞内吞、内涵体逃逸和胞内释放。通过在功能基团与载体之间引入刺激响应的化学键来触发蛋白质药物在特定环境下释放，所设计的载体可将不同分子量、等电点的蛋白质高效递送到胞浆内，并维持其生物学活性。为了满足载体在体内蛋白质药物递送方面的应用，我们发展了一系列具有抗血清性能的蛋白质胞内递送技术，并初步探索了这些高分子载体的潜在生物医学应用。。

关键词：蛋白质药物；蛋白质递送；高分子载体

参考文献

[1] Lv J, Wang H, Rong G, Cheng Y, Fluorination promotes the cytosolic delivery of genes, proteins, and peptides. *Acc. Chem. Res.*, **2022**, **55**, 722.

[2] Lv J, Liu X, Yin L, Cheng Y, Rational Engineering of Cytosolic Delivery Systems for Protein Therapeutics. *Acc. Mater. Res.*, 2024, accountsmr.4c00149.

[3] Su H, Rong G, Li L, Cheng Y, Subcellular targeting strategies for protein and peptide delivery. *Adv Drug Deliv Rev.*, **2024**, 115387.

报告人/墙报展示人简介：

2004 年本科毕业于中国科学技术大学高分子系，2008 年博士毕业于中国科学技术大学生物系，随后在圣路易斯华盛顿大学从事博士后研究，2010 年起在华东师范大学生命科学学院工作，任教授、博士生导师。2017 年入选国家自然科学基金杰出青年基金。主要研究方向为高分子药物递送系统，包括基因、蛋白质、多肽等生物分子的体内外递送；生物医用材料及转化研究。承担国家自然科学基金重点项目、国家重点研发计划等项目 20 余项。相关研究在 Nat. Mater., Nat. Nanotechnol., Nat. Commun., Sci. Adv., JACS, Adv. Mater.等刊物发表论文 200 余篇，他引 18000 余次，入选中国高被引学者榜单。获中国化学会青年化学奖、中国化学会高分子青年学者奖、中国化学会青年化学家元素周期表“氟元素代言人”、中华医学科技一等奖、上海市科技进步一等奖等。

报告人/墙报展示人是否为学生：

智能纳米药物的可视化药物递释研究

陈斌龙，汪贻广*

北京大学药学院，天然药物及仿生药物国家重点实验室，北京市海淀区学院路 38 号，100191

*Email: wangyiguang1980@bjmu.edu.cn

摘要正文：恶性肿瘤基因型和表型的高度异质性以及复杂的肿瘤微环境递送屏障，导致抗癌纳米药物较其小分子制剂并未取得显著疗效优势。传统纳米药物的设计与评价较多关注载体在肿瘤组织的宏观分布，对于肿瘤微环境中的药物递送缺乏响应释药策略和药物动力学评价方法，因而对组织层级以下药物递释机制缺乏科学认识，难以指导高效纳米药物的合理设计。近期，基于可离子化嵌段共聚物的协同自组装原理，我们课题组发展了一种新型pH超敏感（UPS）纳米技术，用于智能纳米药物的定向设计与构建。基于该项技术，我们发展了pH超敏感纳米药物组合库递送技术平台，该类聚合物-药物偶联物由信号响应模块、药物模块和控释模块三部分构成，可在水中一步自组装形成结构简单的程序响应性智能纳米药物。实现了程序响应肿瘤细胞内外酸性微环境的精准药物递释；开创了内吞细胞器（早期/晚期内吞体、溶酶体）超精准靶向递送策略，每个区段pH差异仅为0.2 pH，高效操控肿瘤细胞的焦亡效应。此外，我们发展了多维度、多尺度可视化纳米药物递释及亚细胞药动学的创新评价技术体系，揭示了纳米药物结构-微观转运与亚细胞药动学-药效学三者间的科学规律，阐明了抗肿瘤纳米药物载体的设计原则。该项技术的研发将有助于智能纳米药物递送系统的基础研究及临床转化。

关键词：pH敏感纳米技术；肿瘤微环境；细胞内吞；亚细胞药动学；可视化转运

参考文献

[1] Chen, B.; Yan, Y.; Cao, G.; Yang, Y.; Wang, X.; Wang, Y.Q.; Wang, Z.; Yin, Q.; Wang, F.; Li, Y.; Xu, B.; Chen, W.; You, F.*; Zhang, Q.*; Wang, Y.G.* A pyroptosis nanotuner for cancer therapy. *Nat. Nanotechnol.* 2022, 17, 788-798.

[2] Tang, M.; Chen, B.; Xia, H.; Pan, M.; Zhao, R.; Zhou, J.; Yin, Q.; Wan, F.; Yan, Y.; Fu, C.; Zhong, L.; Zhang, Q.; Wang, Y.G.* pH-gated nanoparticles selectively regulate lysosomal function of tumour-associated macrophages for cancer immunotherapy. *Nat. Commun.* 2023, 14, 5888.

[3] Yan, Y.; Chen, B.; Yin, Q.; Wang, Z.; Yang, Y.; Wan, F.; Wang, Y.Q.; Tang, M.; Wang, S.; Zhang, Q.; Wang, Y.G.* Dissecting extracellular and intracellular distribution of nanoparticles and their contribution to therapeutic response by monochromatic ratiometric imaging. *Nat. Commun.* 2022, 13, 2004.

[4] Yin, Q.; Pan, A.; Chen, B.; Wang, Z.; Tang, M.; Yan, Y.; Wang, Y.Q.; Xia, H.; Chen, W.; Du, H.; Chen, M.; Fu, C.; Wang, Y.N.; Yuan, X.; Lu, Z.; Zhang, Q.; Wang, Y.G.* Quantitative imaging of intracellular nanoparticle exposure enables prediction of nanotherapeutic efficacy. *Nat. Commun.* 2021, 12, 2385.

Image-guided drug delivery of smart cancer nanomedicines

Binlong Chen, Yiguang Wang*

State Key Laboratory of Natural and Biomimetic Drugs, School of Pharmaceutical Sciences, Peking University, #38 Xueyuan Road, Haidian District, Beijing 100191, China.

Cancer is a diverse set of diseases with highly heterogeneous genotypes and phenotypes. The complexed tumor microenvironment (TME) compromises the antitumor efficacy of nanomedicines, resulting in a slightly improved therapeutic response as compared with their parent free drug, although most mitigate the adverse effect in clinic. It has been demonstrated that the design and evaluation of traditional nanomedicines focused on their macroscopic distribution in tumor tissues, lacking responsive drug delivery strategies and suitable pharmacokinetics methods. Thus, there is a lack of deep understanding of drug delivery mechanism at sub-tissue level, making it difficult to guide the rational design of efficient nanomedicines. Recently, we developed a novel ultra-pH-sensitive (UPS) nanotechnology based on the cooperative self-assembly of ionizable block copolymers. We further expanded this nanotechnology to a combinatorial library of UPS nanomedicines that composed of three modules: (i) a stimuli-responsive module for the sensing and remodeling of the complex tumor microenvironment; (ii) on-demand release module for precise delivery of therapeutics in vivo; (iii) multi-drug module for the synergistic efficacy of combined therapy. The UPS drug delivery nanotechnology has been exploited for binary reporting of endosome maturation, amplification of tumor microenvironment signals, precise drug delivery, immunotherapy, and nano-biology, etc. We also developed an innovative imaging technology to quantitatively evaluate the transportation and microdistribution of cancer nanomediciens at the tumor tissues, cell, organelle, and target levels. Based on this technology, we revealed the correlation between nanomedicine structure, microscopic pharmacokinetics, and antitumor efficacy, which elucidating the design principles of cancer nanomedicine. This cooperative nanotechnology provides a potential pharmaceutical platform to advance the fundamental research and clinical translation of nanomedicines.

Keywords: pH-sensitive nanotechnology； tumor microenvironment； cellular internalization； subcellular pharmacokinetics；image-guided cell trafficking

References

[1] Chen, B.; Yan, Y.; Cao, G.; Yang, Y.; Wang, X.; Wang, Y.Q.; Wang, Z.; Yin, Q.; Wang, F.; Li, Y.; Xu, B.; Chen, W.; You, F.*; Zhang, Q.*; Wang, Y.G.* A pyroptosis nanotuner for cancer therapy. *Nat. Nanotechnol.* 2022, 17, 788-798.

[2] Tang, M.; Chen, B.; Xia, H.; Pan, M.; Zhao, R.; Zhou, J.; Yin, Q.; Wan, F.; Yan, Y.; Fu, C.; Zhong, L.; Zhang, Q.; Wang, Y.G.* pH-gated nanoparticles selectively regulate lysosomal function of tumour-associated macrophages for cancer immunotherapy. *Nat. Commun.* 2023, 14, 5888.

[3] Yan, Y.; Chen, B.; Yin, Q.; Wang, Z.; Yang, Y.; Wan, F.; Wang, Y.Q.; Tang, M.; Wang, S.; Zhang, Q.; Wang, Y.G.* Dissecting extracellular and intracellular distribution of nanoparticles and their contribution to therapeutic response by monochromatic ratiometric imaging. *Nat. Commun.* 2022, 13, 2004.

[4] Yin, Q.; Pan, A.; Chen, B.; Wang, Z.; Tang, M.; Yan, Y.; Wang, Y.Q.; Xia, H.; Chen, W.; Du, H.; Chen, M.; Fu, C.; Wang, Y.N.; Yuan, X.; Lu, Z.; Zhang, Q.; Wang, Y.G.* Quantitative imaging of intracellular nanoparticle exposure enables prediction of nanotherapeutic efficacy. *Nat. Commun.* 2021, 12, 2385.

报告人/墙报展示人简介：

汪贻广 北京大学药学院教授，北京大学博雅特聘教授，药学院副院长。长期从事智能纳米药物递送与疾病诊疗研究，以第一作者或通讯作者在 Nat. Mater.、Nat. Nanotechnol.、Nat. Commun.、J. Am. Chem. Soc.、Angew. Chem. Int. Ed.等国际学术刊物发表论文 60 余篇。研究成果推动了荧光纳米探针 pegsitacianine 的临床转化，并被 FDA 认定为突破性疗法，正在美国和欧盟申请 III 期临床试验，用于多种肿瘤的荧光导航手术。入选国家海外高层次青年人才，先后获得国家杰出青年科学基金、国家优秀青年科学基金、北京杰出青年科学基金。获得屠呦呦青年学者奖、Bayer 学者奖、中国药学会-中恒青年药剂学奖和中国药学会-赛洛菲青年生物药物奖。担任智能仿生生物材料专委会副主任委员、中国药学会药剂学专委会委员、纳米生物技术委员会委员等。

硒纳米药物的肿瘤精准增敏与临床转化探索

陈填烽

暨南大学，广州市天河区黄埔大道西 601 号，510632

*Email: tchentf@jnu.edu.cn

本次汇报主题将围绕肿瘤放疗中的关键科学问题，以及如何解决放疗毒性、放疗耐受和免疫抑制三大瓶颈，开展创新型硒纳米药物(SeNPs)的研究。我们根据肿瘤的生化特点，设计具有靶向性的SeNPs，实现精准给药，减少毒副作用。同时构建了具有肿瘤微环境响应特性的精确控释SeNPs用于克服肿瘤抑制瓶颈，提高肿瘤放疗敏感性和逆转放疗耐受。此外，我们还探索了通过SeNPs调节硒蛋白活性来激活自然/过继免疫系统的放射/免疫协同治疗策略与临床转化应用，并揭示其逆转放疗诱导的免疫抑制的分子机制。

关键词：纳米硒；免疫治疗；放射治疗

参考文献

[1] He, L., Huang, G., Liu, H., Sang, C., Liu, X., Chen, T. **Sci Adv**, 2020; 6: eaay9751.

[2] Ouyang, J., Deng., Zou, B., Li, Y., Bu, Q., Tian, Y., Chen, M., Chen, W., Kong, N., Chen, T., Tao. W. **J. Am. Chem. Soc.** 2023, 145, 22, 12193-12205.

[3] Chen, M., Cao, W., Wang, J., Cai, F., Zhu, L., Ma, L., Chen, T. **J. Am. Chem. Soc**. 2022, 144, 45, 20825–20833.

[4] Chang, Y., Huang, J., Shi, S., Xu, L., Lin, H., Chen, T. **Adv Mater.** 2023, 2212178.

[5] Lai, H., Xu, L., Liu, C., Shi, S., Jiang, Y., Yu, Y., Deng, B., Chen, T. **Signal Transduct Target Ther.** 2023, 8, 88.

Tumor precision sensitization and clinical transformation of selenium nanomedicine

Chen Tianfeng

Jinan University, Guangzhou, 510632, China

tchentf@jnu.edu.cn

This talk will center on the key scientific issues in tumor radiotherapy and the ways to solve the three bottlenecks of radiotherapy toxicity, radiotherapy resistance and immunosuppression to research innovative selenium nanomedicine (SeNPs). Based on the biochemical characteristics of tumors, the applicant designed targeted SeNPs to achieve precise drug delivery and reduce toxic side effects. Precise controlled-release SeNPs with tumor microenvironment-responsive properties have also been constructed to overcome inhibitory bottlenecks, improve radiosensitivity, and reverse radioresistance. The applicant also explored radio-/immune- synergistic therapy strategy and clinical translational application through activation of natural/adoptive immune systems through regulating selenoprotein activities by SeNPs and revealed the molecular mechanisms for reverse radiotherapy-induced immunosuppression.

Keywords: Selenium, Immunotherapy, Radiotherapy

References

[1] He, L., Huang, G., Liu, H., Sang, C., Liu, X., Chen, T. **Sci Adv**, 2020; 6: eaay9751.

[2] Ouyang, J., Deng., Zou, B., Li, Y., Bu, Q., Tian, Y., Chen, M., Chen, W., Kong, N., Chen, T., Tao. W. **J. Am. Chem. Soc**. 2023, 145, 22, 12193-12205.

[3] Chen, M., Cao, W., Wang, J., Cai, F., Zhu, L., Ma, L., Chen, T. **J. Am. Chem. Soc**. 2022, 144, 45, 20825–20833.

[4] Chang, Y., Huang, J., Shi, S., Xu, L., Lin, H., Chen, T. **Adv Mater**. 2023, 2212178.

[5] Lai, H., Xu, L., Liu, C., Shi, S., Jiang, Y., Yu, Y., Deng, B., Chen, T. **Signal Transduct Target Ther**. 2023, 8, 88.

报告人/墙报展示人简介：

陈填烽，暨南大学教授，国家杰出青年基金获得者、万人计划专家、国家863青年科学家、教育部新世纪优秀人才，广东省五一劳动奖章获得者。现任化学与材料学院院长、广东省纳米化学创新药物工程技术研究中心主任。研究方向为硒纳米医学与疾病精准诊疗应用，在 Nat Comm、Signal Transduct Target Ther、Matter、Sci Adv、J Am Chem Soc、Angew Chem Int Ed、Adv Mater 等本领域重要期刊发表论文超过 300 篇，IF>10 论文 90 篇，封面论文 40 篇，h-index 81，连续四年入选“中国高被引学者”榜单、全球顶尖 10 万科学家榜单。申报中国专利 92 项，授权国家发明专利 42 项，实现技术成果转化 13 项，实现了纳米硒 GMP 吨级生产，并开展多中心临床研究。以第一完成人获得 2023 年广东医学科技奖二等奖、2020 年高等学校科学研究优秀成果奖技术发明二等奖、2020 年中国抗癌协会科技二等奖、2018 年中华医学科技奖青年科技奖、2018 年广东省自然科学二等奖等科技奖励。并以第一完成人获得 2023 年全国高校混合式教学设计创新大赛一等奖、设计之星，以及广东省高校教师教学创新大赛二等奖等教学奖励。

报告人：甘璐，教师，lugan@hust.edu.cn

调控肿瘤微环境的细胞外囊泡纳米药物

甘璐，雍土莹，杨祥良

华中科技大学生命科学与技术学院，武汉，430074

lugan@hust.edu.cn

纳米药物为肿瘤治疗提供重大机遇，但临床应用结果表明，现有上市纳米药物的抗肿瘤疗效仍然有限。肿瘤组织复杂的微环境，如基质细胞和免疫抑制细胞相互作用，使药物肿瘤富集效率低、瘤内 $CD8^+$ T 细胞浸润少、免疫微环境抑制强，制约纳米药物临床疗效。细胞外囊泡由于具有高的生物相容性、固有的靶向能力和低的免疫原性，作为药物递送载体具有一定的潜力。本课题组近年来发展了靶向改造肿瘤免疫微环境及基质微环境等的细胞外囊泡纳米药物，如工程化修饰的巨噬细胞来源的胞外囊泡纳米药物靶向改造M2型肿瘤相关巨噬细胞（TAMs）、工程化修饰的肿瘤细胞来源的胞外囊泡纳米药物靶向改造肿瘤相关成纤维细胞、工程化修饰的益生菌外膜囊泡靶向改造肿瘤神经等，提高免疫治疗、化疗、光热治疗等疗效。

关键词：细胞外囊泡纳米药物；肿瘤免疫微环境；肿瘤基质微环境；肿瘤神经微环境；肿瘤治疗

参考文献：

1. Zhaohan Wei, Xiaoqiong Zhang, Tuying Yong, Nana Bie, Guiting Zhan, Xin Li, Qingle Liang, Jianye Li, Jingjing Yu, Gang Huang, Yuchen Yan, Zelong Zhang, Bixiang Zhang, Lu Gan*, Bo Huang*，Xiangliang Yang*. Boosting anti-PD-1 therapy with metformin-loaded macrophage-derived microparticles. Nature Communications, 2021, 12(1): 440.

2. Xiaoqiong Zhang, Zhaohan Wei, Tuying Yong, ShiyuLi, NanaBie, Jianye Li, Xin Li, Haojie Liu, Hang Xu, Yuchen Yan, Bixiang Zhang, Xiaoping Chen, Xiangliang Yang*, Lu Gan*. Nature Communications, 2023,14(1): 5653.

3. Yun Xia, Xin Li, Nana Bie, Wen Pan, Ya-Ru Miao, Mei Yang, Yan Gao, Chuang Chen, Hanqing Liu, Lu Gan*, An-Yuan Guo*. A method for predicting drugs that can boost the efficacy of immune checkpoint blockade. Nature Immunology. 2024, 25(4): 659-670.

4. Haojie Liu, Shiyi Xu, Tuying Yong, Zhaohan Wei, Nana Bie, Xiaoqiong Zhang, Xin Li, Jianye Li, Shiyu Li, Sheng Wang, Yanbing Zhao, Xiangliang Yang*, Lu Gan*. Hydrophobicity-adaptive polymers trigger fission of tumor-cell-derived microparticles for enhanced anticancer drug delivery. Advanced Materials, 2023, 35(45): e2211980.

手性无机纳米颗粒调控生命过程

匡华[1,*]，徐丽广[1]，孙茂忠[1]，瞿爱华[1]，高锐[1]，郝昌龙[1]，胥传来[1]

[1]江南大学，无锡蠡湖大道 1800 号，214122

Email: kuangh@jiangnan.edu.cn

手性无机纳米结构精确识别生物结构的性能已经得到了验证[1,2]。我们团队之前采用三肽*L*/*D*-青霉胺-苯丙氨酸-色氨酸为手性配体，制备了～4 nm 的手性Cu_2S纳米颗粒，*L*-Cu_2S纳米颗粒在808 nm激光下可以特异性地识别并选择性剪切HBV核心抗原（HBcAg）[3]，*L*-Cu_2S NPs与808 nm激光联合治疗使小鼠肝脏中HBV表面抗原和HBV DNA水平分别降低93%和86%。进一步，我们以青霉胺为手性配体，研制了不对称因子g值0.25，尺度～3 nm的棒状手性$Cu_{1.96}S$纳米颗粒，高效识别烟草花叶病毒（TMV）内孔结构，*D*-$Cu_{1.96}S$与TMV的亲和力是*L*-$Cu_{1.96}S$的20余倍并在太阳光下裂解TMV病毒外壳蛋白[4]。最近，为匹配冠状病毒刺突蛋白的空间结构，我们研制了锥状手性纳米硫化铜颗粒，可以与病毒刺突结构中心凹槽匹配[5]，亲和力达到～0.57 pM，在细胞和活体层面均显示了良好的抗病毒侵染能力，显示了手性无机纳米颗粒作为新型创新药物的巨大潜力。

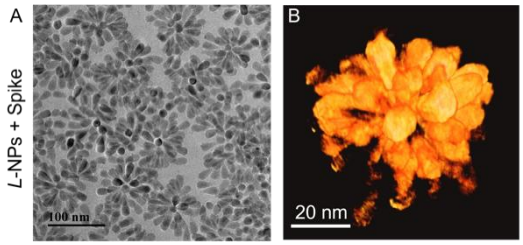


Fig. 1 Chiral Tapered Nanoparticles Targeted Agglutination of Corona Virus

参考文献

[1] Sun, M. Z.; Xu, L. G.; Qu, A. H.; Zhao, P.; Hao, T. T.; Ma, W.; Hao, C. L.; Wen, X. D.; Colombari, F. M.; de Moura, A. F.; Kotov, N. A.; Xu, C. L.;Kuang, H. Nat Chem 2018, 10 (8): 821-830.

[2] Hao, C. L.; Gao, R.; Li, Y.; Xu, L. G.; Sun, M. Z.; Xu, C. L.; Kuang, H. Angew Chem Int Edit 2019, 58 (22), 7371-7374.

[3] Guo, X.; Sun, M. Z.; Gao, R.; Qu, A. H.; Chen, C.; Xu, C. L.; Kuang, H.; Xu, L. G. Angew Chem Int Edit 2021, 60 (23), 13073-13080.

[4] Gao, R.; Xu, L. G.; Sun, M. Z.; Xu, M. L.; Hao, C. L.; Guo, X.; Colombari, F. M.; Zheng, X.; Kral, P.; de Moura, A. F.; Xu, C. L.;Yang, C.G.; Kotov, N. A.; Kuang, H. Nat Catal 2022, 5 (8): 694-707.

[5] Gao, R.; Xu, X.; Kumar, P.; Liu, Y.; Zhang, H.; Guo, X.; Sun, M.; Colombari, F. M.; de Moura, A. F.; Hao, C.; et al. PNAS, 2024, 121 (13), e2310469121.

基于仿生微凝胶的细胞包裹、扩增和命运调控

杜亚楠，陈昊珂，范泽军，敖艳肖，张元元

清华大学生物医学工程学院 北京海淀区清华园 100084

*Email: duyanan@tsinghua.edu.cn

摘要正文：

本报告将介绍利用微组织工程方法，结合仿生人造细胞微环境启发，构建各类微凝胶颗粒，用于各类细胞特别是干细胞（造血干细胞，间充质干细胞，多能干细胞）的体外包裹、扩增和命运调控。为 3D 细胞智造、组织工程和再生医学提供新型工具和方法。

关键词：微凝胶，细胞工程， 组织工程

参考文献

[1] **Chen MW, Fan D, Liu X, Han D, Jin Y, Ao Y, Chen Y, Liu Z, Feng Y, Ling S, Liang K, Kong W, Xu J, Du Y. Water Transport-Induced Liquid-Liquid Phase Separation Facilitates Gelation for Controllable and Facile Fabrication of Physically Crosslinked Microgels. Adv Mater. 2024 Aug;36(35):e2405109. doi: 10.1002/adma.202405109. Epub 2024 Jul 6.**

2) Fan Z, Chen Y, Yang Z, Niu Y, Liang K, Zhang Y, Zeng J, Feng Y, Zhang Y, Liu Y, Lv C, Zhao P, Zhou L, Kong W, Li W, Chen H, Han D, Du Y Superimposed Electric Field Enhanced Electrospray for High-Throughput and Consistent Cell Encapsulation.

Adv Healthc Mater. 2024 Jun 8:e2400780. doi: 10.1002/adhm.202400780.

报告人/墙报展示人简介：

杜亚楠，清华大学医学院长聘教授，清华北大生命联合中心研究员。在“微组织工程”这一特色交叉研究方向进行创新探索，实现理论探究和技术转化。共发表高影响力 SCI 论文 100 余篇，其中独立通讯作者发表在 Nature Materials，Nature Biomedical Engineering, Nature Communications, PNAS，Science Advances 等杂志。分别主持国家自然科学基金杰青项目、优青项目、北京市自然科学基金杰青项目。并获得教育部青年长江学者称号。同时为国内外 5 本知名期刊编委。批准授权专利 20 余项，微组织工程技术于 2018 年成立北京华龛生物科技有限公司进行转化应用和商品化。3D 干细胞及其衍生物规模化制造专利技术在 2022 年获得第 49 届日内瓦国际发明金奖，相关转化产品获得美国 FDA 和中国药监局首款细胞药用辅料资质，获得第二十四届中国科协求是杰出青年成果转化奖。

基于生物纳米颗粒的肿瘤免疫调控新策略

The rapid development of particle-based biomaterials and emerging of nanotechnology provide possibilities for breakthroughs in tumor immunotherapy. Tumor vaccines can be constructed as particle formulations that select appropriate types and numbers of antigens and adjuvants, inducing strong, persistent, and multi-target immune responses, which is a key strategy for actively reshaping anti-tumor immune status. In this lecture, various tumor vaccines and immunotherapeutics for tumor immune microenvironment regulation were explored based on various nanostructures and particle-based biomaterials, especially based on biological membrane materials such as exosomes, bacterial outer membranes, and secretory vesicles, to meet different clinical needs and usage scenarios. In response to tumor heterogeneity and dynamic changes, different forms of tumor antigens and adjuvants, such as peptides, mRNA, and cell membrane antigens, as well as vaccine carriers, were covered. The following aspects will be discussed in the lecture, including precise regulation of multiple factors that affect tumor immunotherapy, design of tumor vaccines with broad adaptability, breaking immune suppression, and shifting the anti-tumor ability of the body's immune system from tolerance to activation, to maximize the potential of the body's immune system to meet the huge challenge of effective treatment of solid tumors.

中性粒细胞药物的创新与转化

张灿

中国药科大学，南京市南京市江宁区龙眠大道 639 号，211198

*Email: zhangcan@cpu.edu.cn

摘要正文：细胞免疫疗法为肿瘤治疗史上的里程碑。迄今已有8款免疫细胞药物包括6款嵌合抗原受体T细胞（Chimeric antigen receptor T Cell，CAR-T）、1款肿瘤浸润淋巴细胞（Tumor Infiltrating Lymphocytes，TIL）和1款T细胞受体T细胞（T cell receptor-T cell，TCR-T）被美国FDA批准上市，中国也上市了5款CAR-T。上市的CAR-T均用于恶性血液瘤治疗。细胞药物用于实体瘤治疗仍面临巨大挑战，目前仅有1款TIL和TCR-T。根源在于实体瘤复杂的免疫抑制微环境造成免疫细胞在实体瘤内的浸润性差及效力不足。中性粒细胞为循环系统中数量最多的白细胞，也是天然免疫系统的首道防线，在机体生理调控及多种病理过程中发挥重要作用。中性粒细胞具有高可及性、实体瘤的高靶向性和高浸润性等优异的生理功能以及自身良好的抗肿瘤作用。本团队采用临床应用药物对中性粒细胞进行改造，研制了系列新型中性粒细胞药物用于实体瘤的免疫治疗，其中一类正在进行临床转化。

关键词：肿瘤免疫治疗；细胞免疫疗法；中性粒细胞

报告人/墙报展示人简介：

张灿，二级教授，“多靶标天然药物”全国重点实验室高端药物制剂与材料研究中心主任。美国医学与生物工程院会士（AIMBE Fellow）。享受国务院政府特殊津贴。获得教育部自然科学奖一等奖等奖项。在 Nature nanotechnology、Science Translational Medicine 等发表论文 200 余篇。主持国家新药创制重大专项、863 计划、国家自然科学基金重点项目、国家自然科学基金重大研究计划集成项目以及国际交流重点项目等。获得中国及美国授权发明专利 30 余项。研究方向为活细胞药物、纳米药物以及免疫调节小分子药物等。

去抗凝低分子量肝素治疗结肠炎双功能靶向药物设计

邢新会，黄龙，王怡，张灿阳
清华大学深圳国际研究生院生物医药与健康工程研究院
清华大学化工系
Email: xhxing@tsinghua.edu.cn

尽管目前肝素最为重要的临床应用是作为抗凝血药物，但其非抗凝功能挖掘同样引起了广泛关注，并且是提升对硫酸化糖胺聚糖新功能发现和认知的重要方向。溃疡性结肠炎（UC）是一种严重威胁人类健康的无特效药现代难治病。大量研究表明，肝素所识别的免疫相关整合素所对应的如巨噬细胞、DC 细胞以及中性粒细胞等，已被证明是高效的 UC 治疗靶细胞。而在众多 UC 稳态失衡因素中，氧化应激是一个影响广泛的重要维度。氧化应激是氧化还原稳态（Redox Homeostasis）失衡的表现，主要体现为异常高的活性氧（ROS）水平。ROS 是细胞代谢途径产生的重要信号分子，在炎症部位，异常产生的高于正常组织 10 至 100 倍水平的 ROS 通过引起细胞凋亡、引导 DNA 断裂及加重脂质氧化等方式影响肠粘膜层，加重 UC 炎症反应并破坏肠隐窝组织修复再生能力。

针对这一重大人类健康威胁以及新药研发挑战，团队前期针对去抗凝肝素治疗 UC 新功能发现展开了一系列研究，发现了治疗 UC 有效的去抗凝低分子量肝素（NALHP），并揭示了 NALHP 治疗 UC 是基于促肠上皮损伤后修复以及抑制免疫系统激活从而打破疾病恶性循环的作用过程。因此，本研究基于“一石二鸟”的思路，提出并设计了一种兼具 UC 炎症靶向定位功能以及氧化还原稳态调节功能的核壳结构双功能口服靶向纳米药物 OPNs@NALHP。通过体内外实验充分证实 OPNs@NALHP 的消化道稳定性、生物安全性和针对整合素 aM 的靶向性，验证了双功能口服靶向纳米药物 OPNs@NALHP 针对 UC 的优异治疗效果，并解析了 OPNs@NALHP 通过抑制粘膜下层氧化应激恢复肠粘膜层正常结构和功能的治疗过程，为肝素非抗凝新功能发现和应用提供了科学依据。

本研究得到了科技部重点研发计划项目（2023YFA0914300）资助。

细胞衍生囊泡材料及其在免疫治疗中的应用

汪超[1]，

[1]苏州大学，功能纳米与软物质研究院，215123

*Email: cwang@suda.edu.cn

摘要正文：免疫疗法利用病人自身的免疫系统来对抗疾病。例如，肿瘤免疫治疗在治疗癌症方面已被证明是成功的，在临床中显著提高了治疗效果。然而，一些局限性仍然需要解决，如临床应答率低易产生免疫抗性、疗效因人而异、以及非靶向引起的免疫相关不良事件(irAEs)等。因此，应开发新的治疗策略，以提高免疫治疗水平。近年来，各种新型的生物材料和策略被报道用于免疫治疗的靶向投递治疗。其中，细胞衍生囊泡材料是一类来源于细胞的天然生物材料，由于其独特的理化和生物学性质，为解决免疫治疗的共性挑战提供了崭新的解决方案（图1）。在这次报告中，我将介绍我们最近基于细胞衍生囊泡材料在递送载体、免疫调控、和工程化修饰方面的研究进展，以及针对多种疾病的免疫治疗策略。

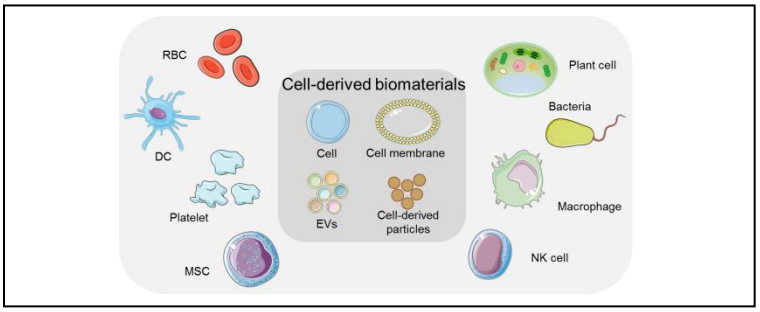


Fig. 1 Cell-derived biomaterials

关键词：生物囊泡；天然颗粒；免疫调控

参考文献

[1] Jialu Xu, Yue Yu, Yue Zhang, Huaxing Dai, Qianyu Yang, Beilei Wang, Qingle Ma, Yitong Chen, Fang Xu, Xiaolin Shi, Zhuang Liu*, Chao Wang*. *Nature Nanotechnology*, (**2024)**

[2] Qingle Ma, Chenlu Yao, Yi Wu, Heng Wang, Qin Fan, Qianyu Yang, Jialu Xu, Huaxing Dai, Yue Zhang, Fang Xu, Ting Lu, Jennifer K. Dowling, Chao Wang*. *Science Advances*, 9, eadi0699 (**2023**)

[3] Fang Xu, Dongpeng Jiang, Jialu Xu, Huaxing Dai, Qin Fan, Ziying Fei, Beilei Wang, Yue Zhang, Qingle Ma, Qianyu Yang, Yitong Chen, Edikan A. Ogunnaike, Jianhong Chu*, Chao Wang*. Cell Reports, 42, 113138 (2023)

[4] Jialu Xu, Qingle Ma, Yue Zhang, Ziying Fei, Yifei Sun, Qin Fan, Bo Liu, Jinyu Bai, Yue Yu, Jianhong Chu*, Jingrun Chen*, Chao Wang*. Nature Communications, 13, 110 (2022)

[5] Qin Fan, Qingle Ma, Jinyu Bai, Jialu Xu, Ziying Fei, Ziliang Dong, Atsushi Maruyama, Kam W. Leong, Zhuang Liu and Chao Wang*. Science Advances, 6, eabb4639 (2020)

报告人/墙报展示人简介：

汪超，博士，苏州大学功能纳米与软物质研究院教授，国家优青，江苏省特聘教授。在生物材料与免疫工程领域从事研究。迄今为止在国际学术期刊共发表 SCI 论文 100 余篇，以通讯作者在 Nature Nanotechnology、Nature Commun、Science Adv、Cell Reports 等学术刊物上发表论文 40 余篇，H-index 75，申请多项发明专利，目前授权 7 项，转让 1 项。近年来入选 MIT Technology Review Innovators Under 35 Asia Pacific (TR35)、科睿唯安“全球高被引科学家”、江苏省科学技术一等奖（4/4）、教育部自然科学二等奖(4/5)、Biomaterials Future Scientist Award 等科技荣誉和奖励。作为项目负责人主持国家重点研发计划青年项目、基金委优秀青年科学基金、面上基金、青年基金，参与基金委创新研究群体项目等。

Inhalable SPRAY Nanoparticles by Modular Peptide Assemblies Reverse Alveolar Inflammation in Lethal Gram-negative Bacteria Infection

Dinghao Chen, Ziao Zhou, Nan Kong, Tengyan Xu, Huaimin Wang*

Department of Chemistry, School of Science, Westlake University, Hangzhou 310030, P. R. China.

* H.M. Wang wanghuaimin@westlake.edu.cn

Current pharmacotherapy remains futile in acute alveolar inflammation induced by gram-negative bacteria (GNB), eliciting consequent respiratory failure. The release of lipid polysaccharides (LPS) after antibiotic treatment and subsequent progress of pro-inflammatory cascade highlights the necessity to apply effective inflammation management simultaneously. This work describes modular self-assembling peptides for rapid anti-inflammatory programming (SPRAY) to form nanoparticles targeting macrophage specifically, possessing anti-inflammation and bactericidal functions synchronously. SPRAY nanoparticles accelerate the self-delivery process in macrophages via lysosomal membrane permeabilization, maintaining anti-inflammatory programming in macrophages with efficacy close to Th2 cytokines. By pulmonary deposition, SPRAY nanoparticles effectively suppress inflammatory infiltration and promote alveoli regeneration in murine aseptic acute lung injury (ALI). Moreover, SPRAY nanoparticles efficiently eradicate multi-drug resistant GNB in alveoli by disrupting bacterial membrane. The universal molecular design of SPRAY nanoparticles provides a robust and clinically unseen local strategy in reverse acute inflammation featured by a high accumulation of pro-inflammatory cellularity and drug-resistant bacteria.

Keywords: Peptide; inhalable nanoparticle; alveolar inflammation; self-assembly

References

[2] Bihan Wu, Juan Liang, Xuejiao Yang, Yu Fang, Nan Kong, Dinghao Chen, **Huaimin Wang***, *J. Am. Chem. Soc*. 2024, doi.org/10.1021/jacs.4c00569.

[3] Tengyan Xu, Jiaqi Wang, Shuang Zhao, Dinghao Chen, Hongy Zhang, Yu Fang, Nan Kong, Ziao Zhou, Wenbin Li*, **Huaimin Wang***, Nature Commun, 2023, 14, 3880.

报告人/墙报展示人简介：

王怀民，西湖大学理学院和工学院研究员。课题组从事多肽生物材料可控组装和生物活性适配性调控，活性多肽开发和应用。相关工作以通讯作者发表在 J. Am. Chem. Soc, Angew. Chem. Int. Ed., Nat Comm., Sci. Adv., Adv. Mat., 等国际高水平杂志。论文他引大于 6000 余次，个人 h-index 为 47。曾获得国家自然基金委优秀青年科学基金，浙江省万人计划，“教育部学术新人奖”，“国家奖学金”，“南开十杰”等

报告人/墙报展示人是否为学生：否

基于纳米颗粒的微生物成像与传感分析

王后禹 [1,*]

[1] 苏州市纳米技术与生物医药重点实验室，苏州大学功能纳米与软物质研究院纳米生化分析实验室，江苏省苏州市工业园区仁爱路 199 号，215123

*Email: houyuwang@suda.edu.cn

摘要正文：目前，临床细菌感染主要是通过血液检查和组织活检来进行诊断，这些诊断方法大都耗时较长且工序较为复杂。近年来，非侵入性的光学成像技术，具有较高的特异性和灵敏度，有望实现细菌感染的早期准确诊断。需要注意的是，临床细菌感染一般由革兰氏阴性致病菌和革兰氏阳性致病菌共同引起。然而，大部分光学成像探针基于配体和受体之间的亲和作用而构建，仅靶向某一组特定的细菌（革兰氏阴性细菌或革兰氏阳性细菌），导致相关光学成像方法难以同时对不同细菌引起的感染做出准确的诊断。针对上述关键科学问题，报告人利用细菌和哺乳动物细胞对不同种类糖分子摄取的差异，在小尺寸纳米颗粒表面修饰细菌特异性糖分子 （例如，麦芽糖糊精等），构建了进入不同细菌而不进入哺乳动物细胞的光学纳米探针，包括荧光探针、光声探针和生物发光探针,实现了同时对不同细菌感染的成像分析，且可有效区分细菌性炎症和非细菌性炎症，提高了探针成像特异性 [1-7]。与目前发展的大多数纳米探针靶向细菌细胞壁成像策略不同，报告人提出了“细菌吞纳米探针”的成像策略。由于进入细菌细胞内部探针的有效载荷要相对高于靶向细菌细胞壁探针的有效载荷，提高了成像灵敏度。报告人系统证明了纳米探针进入细菌内部是由细菌特异性糖转运蛋白介导的，并基于该机制对探针尺寸、形状以及表面修饰配体数目进行优化，使得该类型探针检测限低至~10^6 CFU，比大多数细菌造影剂灵敏度高出约两个数量级。

关键词：纳米颗粒；微生物分析；致病菌；成像；传感

参考文献

[1] **Y. Yang, B. Chu, J. Cheng, J. Tang, B. Song, H. Wang, and Y. He *Nat. Commun.* 2022, 13: 1255.**

[2] **J. Tang, B. Chu, J. Wang, B. Song, Y. Su, H. Wang and Y. He *Nat. Commun*. 2019, 10: 4057.**

[3] **Q. Zhang, B. Song, Y. Xu, Y. Yang, J. Ji, W. Cao, J. Lu, J. Ding, H. Cao, B. Chu, J. Hong, H. Wang, and Y. He *Nat. Commun.* 2023, 14: 2331.**

[4] **M. Liu, B. Chu, R. Sun, J. Ding, H. Ye, Y. Yang, Y. Wu, H. Shi, B. Song, Y. He, H. Wang, and J. Hong *Adv. Mater*. 2023, 35: e2300477.**

[5] **B. Chu, Y. Yang, J. Tang, B. Song, Y. He, and H. Wang, *Angew. Chem. Int. Ed*. 2022, 61: e202208422.**

[6] **J. Lu, J. Ding, B. Chu, C. Ji, Q. Zhang, Y. Xu, B. Song, H. Wang and Y. He *Nano Lett*. 2023, 23: 4326-4333.**

[7] **R. Sun, M. Liu, J. Lu, B. Chu, Y. Yang, B. Song, H. Wang and Y. He *Nat. Commun*. 2022, 13: 5127.**

Nanoparticles-based microbial imaging and sensing analysis

Houyu Wang[1,*]

[1]Suzhou Key Laboratory of Nanotechnology and Biomedicine, Laboratory of Nano-Biochemical Analysis, Institute of Functional Nano and Soft Matter, Soochow University, No. 199, Ren'ai Road, Industrial Park, Suzhou, Jiangsu, 215123, China

Currently, clinical bacterial infections are mainly diagnosed by blood tests and tissue biopsies, which are mostly time-consuming and complicated. In recent years, non-invasive optical imaging technology, with high specificity and sensitivity, is expected to realize early and accurate diagnosis of bacterial infections. It should be noted that clinical bacterial infections are generally caused by a combination of Gram-negative and Gram-positive pathogenic bacteria. However, most optical imaging probes are constructed based on affinity interactions between ligands and receptors and target only a specific group of bacteria (Gram-negative or Gram-positive bacteria), making it difficult for relevant optical imaging methods to simultaneously make accurate diagnoses of infections caused by different bacteria. To address the above key scientific issues, the authors took advantage of the differences in the uptake of different types of sugar molecules by bacterial and mammalian cells, and modified bacterial-specific sugar molecules (e.g., maltodextrins) on the surface of small-sized nanoparticles, and constructed optical nanoprobes, including fluorescent, photoacoustic, and bioluminescent probes, which could simultaneously image and analyze the infection caused by different bacteria, and effectively differentiate between different bacteria and their infections. The imaging analysis can effectively distinguish bacterial inflammation from non-bacterial inflammation and improve the imaging specificity of the probes[1-7]. Unlike most of the nanoprobes developed to target the bacterial cell wall, the authors proposed a "bacteria swallowing nanoprobe" imaging strategy. Since the payload of the probe into the bacterial cell interior is relatively higher than that of the probe targeting the bacterial cell wall, the imaging sensitivity is improved. The authors systematically demonstrated that the entry of the nanoprobe into the bacterial interior is mediated by a bacterial-specific sugar transporter protein, and optimized the probe size, shape, and the number of surface-modified ligands based on this mechanism, resulting in a low detection limit of ~10^6 CFU, which is about two orders of magnitude higher than the sensitivity of most bacterial contrast agents.

Keywords: Nanoparticles; Microbial analysis; Pathogenic bacteria; Imaging; Sensing

References

[1] **Y. Yang, B. Chu, J. Cheng, J. Tang, B. Song, H. Wang, and Y. He *Nat. Commun.* 2022, 13: 1255.**

[2] **J. Tang, B. Chu, J. Wang, B. Song, Y. Su, H. Wang and Y. He *Nat. Commun*. 2019, 10: 4057.**

[3] **Q. Zhang, B. Song, Y. Xu, Y. Yang, J. Ji, W. Cao, J. Lu, J. Ding, H. Cao, B. Chu, J. Hong, H. Wang, and Y. He *Nat. Commun.* 2023, 14: 2331.**

[4] **M. Liu, B. Chu, R. Sun, J. Ding, H. Ye, Y. Yang, Y. Wu, H. Shi, B. Song, Y. He, H. Wang, and J. Hong *Adv. Mater*. 2023, 35: e2300477.**

[5] **B. Chu, Y. Yang, J. Tang, B. Song, Y. He, and H. Wang, *Angew. Chem. Int. Ed*. 2022, 61: e202208422.**

[6] **J. Lu, J. Ding, B. Chu, C. Ji, Q. Zhang, Y. Xu, B. Song, H. Wang and Y. He *Nano Lett*. 2023, 23: 4326-4333.**

[7] **R. Sun, M. Liu, J. Lu, B. Chu, Y. Yang, B. Song, H. Wang and Y. He *Nat. Commun*. 2022, 13: 5127.**

报告人/墙报展示人简介：

王后禹，苏州大学，教授，博士生导师，苏州市纳米技术与生物医药重点实验室副主任，入选国家高层次人才青年人才项目。近 5 年来，以通讯作者身份发表 SCI 论文 40 篇，包括 Nat. Commun.（4 篇）、J. Am. Chem. Soc.（1 篇）、Angew. Chem. Int. Ed.（2 篇）、Adv. Mater.（2 篇）、Anal. Chem.（4 篇）等知名期刊；3 项国家专利获得授权；主持参与国家级项目 5 项，省部级项目 2 项。报告人在教学与研究生指导工作上也取得了优异的成绩，是国家级精品课程《纳米新纪元》（教育部“精品视频公开课”）主讲教师，“2023 年江苏省优秀学术学位硕士学位论文”指导教师和 2024 年江苏省高校“青蓝工程”中青年学术带头人。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

时空双靶向嵌合外泌体用于实体瘤免疫治疗

王双[1]，魏炜[1,*]，马光辉[1,*]

[1]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: weiwei@ipe.ac.cn, ghma@ipe.ac.cn

肿瘤免疫疗法可以调动机体自身的免疫细胞识别杀伤肿瘤，是极具潜力的肿瘤治疗新策略。现有的大部分肿瘤免疫治疗策略侧重于提升体内免疫细胞功能和数量，但通常难以克服实体肿瘤部位的免疫抑制微环境，使得瘤内浸润的免疫细胞难以有效发挥其抗肿瘤功能。

本工作选择具有强吞噬能力的巨噬细胞对肿瘤细胞核进行摄取，经过体外免疫驯化后形成免疫激活型巨噬-肿瘤杂合细胞。该细胞分泌的嵌合外泌体能够继承两种来源细胞的功能：一方面借助纳米尺寸被动靶向淋巴结，依靠继承于巨噬细胞的表面抗原提呈信号和内部的免疫激活因子，激活肿瘤特异性的免疫应答；另一方面继承了肿瘤细胞的归巢能力，主动靶向到肿瘤组织，利用携带的免疫激活因子改善瘤内的免疫抑制微环境。上述空间双重靶向和机制双效协同的创新策略最大程度地保证了效应T细胞在瘤内发挥免疫杀伤效应，显著提高了实体瘤的免疫治疗效果。目前已启动针对复发/转移膀胱癌患者的IIT个体化治疗研究。

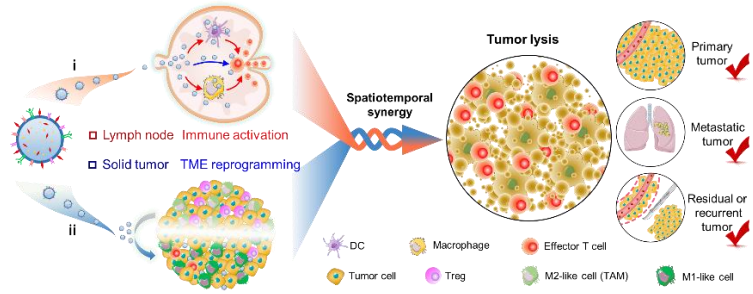


Figure 1. Tumor inhibition mechanism of macrophage-tumor chimeric exosomes

关键词：肿瘤免疫治疗；外泌体；双靶向；淋巴结；肿瘤微环境

参考文献

[31]S. Wang, F. Li, T. Ye, J.H. Wang, C.L. Lyu, S. Qing, Z.W. Ding, X.Y. Gao, R.R. Jia, D. Yu, J. Ren, W. Wei, G.H. Ma, Macrophage-tumor chimeric exosomes accumulate in lymph node and tumor to activate the immune response and the tumor microenvironment, Sci. Transl. Med. 2021, 13, eabb6981.

报告人简介：

王双，中国科学院过程工程研究所，特聘青年研究员，北京市科技新星。主要从事细胞囊泡生物创新剂型的创制与临床转化研究工作，通过对细胞和囊泡进行生物改构，赋予其新颖功能和更高性能，为恶性肿瘤、肝纤维化、呼吸道传染病等疾病的预防和治疗提供新的研究策略，已有两种个体化肿瘤免疫治疗创新剂型进入临床研究。共发表 SCI 论文 38 篇，其中以第一/通讯作者身份在 Sci Transl Med、Nat Nanotechnol、Nat Commun、Adv Mater、Nano Today 等权威期刊发表 10 篇（总 IF 161），申请专利 3 项，授权中国、日本专利 2 项。共主持国自然面上项目、国自然青年基金、重点研发计划子课题、北京市科技新星等科研/人才项目 7 项，入选北京市科技新星计划、中国科学院稳定支持基础研究领域青年团队计划（8 位成员之一）、中国科学院青年创新促进会。曾获中国颗粒学会自然科学奖一等奖（R7/R10）、International Society for Vaccines Awards（中国仅两位）、中国颗粒学会 2023 年会新锐报告奖等，担任中国抗癌协会纳米肿瘤专委会青年委员。

附：非学生

CRISPR基因编辑工具体内递送系统研究

巩长旸 [1,*]

[1]四川大学华西医院生物治疗全国重点实验室，四川成都，610041

*Email: chygong14@163.com

摘要正文：CRISPR系统可以对哺乳动物细胞基因组进行编辑，具有简便、精准、高效等优势，快速推动了干细胞工程、基因与免疫治疗、动物疾病模型构建、靶点筛选等多领域的科学进展。尽管CRISPR技术展现了广阔的应用前景，但是由于该系统编码尺寸较大、缺乏组织靶向性以及存在潜在的脱靶效应，其体内应用仍面临多重挑战。我们采用苯丙氨酸和酪氨酸修饰分子量为1.8 kD的小分子量PEI，合成了具有高转染效率和低毒性的材料PPT。PPT在体内降解后，产生的小分子量PEI可以通过肾脏代谢，氨基酸分子可以在体内被再利用，具有更高的体内安全性。接下来，我们采用PPT构建了携载CRISPR工具的新型协同体系Nano-CD。Nano-CD能够在肿瘤细胞中分级释放顺铂和CRISPR/dCas9质粒，通过激活肿瘤细胞内源性GSDME基因表达GSDME蛋白，并与顺铂诱导激活的caspase-3协同作用，能够高效精准的启动肿瘤细胞焦亡，逆转免疫抑制性微环境，级联放大机体的抗肿瘤免疫应答，有效抑制肿瘤的复发和转移，为肿瘤免疫治疗提供了全新的策略。

关键词：基因递送系统；非病毒基因载体；CRISPR；肿瘤治疗；基因治疗

参考文献

[4] **N. Wang, C. Liu, Y. Li, D. Huang, X. Wu, X. Kou, X. Wang, Q. Wu, C. Gong A cooperative Nano-CRISPR scaffold potentiates immunotherapy via activation of tumour-intrinsic Pyroptosis. Nat. Commun. 2023, 14: 779.**

[5] **J. Yang, L. Song, M. Shen, X. Gou, L. Bai, L. Wang, W. Zhang, Q. Wu, C. Gong Hierarchically responsive tumor-microenvironment-activated nano-artificial virus (TMAN) for precise exogenous and endogenous apoptosis coactivation. Adv. Funct. Mater. 2021, 31: 2104423.**

[6] **J. Yang, L. Bai, M. Shen, X. Gou, Z. Xiang, S. Ma, Q. Wu, and C. Gong A multiple stimuli-responsive nanoCRISPR overcomes tumor redox heterogeneity to augment photodynamic therapy. ACS Nano. 2023, 17: 11414-26.**

[7] **N. Wang, C. Liu, Z. Lu, W. Yang, L. Li, S. Gong, T. He, C. Ou, L. Song, M. Shen, Q. Wu, C. Gong Multistage sensitive nanoCRISPR enable efficient intracellular disruption of immune checkpoints for robust innate and adaptive immune coactivation. Adv. Funct. Mater. 2020, 30: 2004940.**

[8] **J. Yang, Z. Li, M. Shen, Y. Wang, L. Wang, J. Li, W. Yang, J. Li, H. Li, X. Wang, Q. Wu, C. Gong Programmable unlocking nano-matryoshka-CRISPR precisely reverses immunosuppression to unleash cascade amplified adaptive immune response. Adv. Sci. 2021, 8: 2100292.**

[9] **S. Ma, Y. Li, F. Liu, X. Wang, Z. Qin, L. Wang, J. Yang, L. Wang, W. Yang, N. Wang, Y. You, Q. Wu, C. Gong Hierarchical-unlocking virus-esque NanoCRISPR precisely disrupts autocrine and paracrine pathway of VEGF for tumor inhibition and antiangiogenesis. J. Controlled Release. 2024, 366: 505-18.**

报告人/墙报展示人简介：

巩长旸，四川大学华西医院/生物治疗全国重点实验室研究员，博导。2010 年在四川大学获得博

士学位，师从魏于全院士。国家自然科学基金优秀青年基金获得者，入选国家“万人计划”青年拔尖人才，四川省学术和技术带头人，获四川省杰出青年科技人才项目。主要研究领域为新型自组装基因、疫苗和药物递送系统、纳米生物技术和肿瘤治疗。以通讯和第一作者在 Nat Commun, J Am Chem Soc, Adv Mater, Adv Funct Mater, ACS Nano, Adv Sci, Adv Drug Deliver Rev 等国际杂志发表 SCI 论文 100 余篇。授权国际发明专利 14 项。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

细菌生物材料及其在疾病治疗中的应用

郑迪威[1,*]，魏炜[1]， 马光辉[1]

[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

*Email: *dwzheng@ipe.ac.cn*

人体的肠道、口腔和皮肤中拥有大量的微生物构成的共生微生物群。共生微生物群一旦失衡，就会从能量吸收、内毒素产生、短链脂肪酸等多种途径影响人体的健康，从而诱导恶性肿瘤、代谢性病变等疾病的发生和发展。以调控共生微生物为目标的微生物疗法是生物医药研究的前沿，也迅速引起了产业界的重视。由于我国起步较晚，进入临床试验的微生物疗法还很少。即使是极少数进入临床的产品，也只是功能有限的天然菌株，反观美国，则更新到了功能强大的基因改造菌株。因此，如何增强细菌的功能性是一个亟需解决的问题。

基于以上问题，在前期工作中利用材料学和化学方法改造天然细菌，构建了一系列活性微生物材料，并将其应用于恶性肿瘤和代谢性疾病的治疗。首先，优化了一系列和细菌高度相容的材料基元，同时筛选出温和的化学偶联反应。通过按需选择合适的材料基元和化学方法，就可以构建具有特定功能的活性微生物材料。针对恶性肿瘤中共生菌群失衡的问题，我们利用葡聚糖纳米粒子与噬菌体的偶联[1]，以及含活菌黏膜粘附型水凝胶等活性微生物材料，成功开发了一种新的肿瘤治疗方法，实现了对复杂菌群中特定微生物的精确调控[2]。同时，针对伴随肠道菌群失衡的代谢性疾病如肝衰竭和肾衰竭，我们提出了人造微生态系统的概念，通过构建封装人造菌群的微凝胶材料，可以有效纠正和替代病理性菌群[3]，展示了这类微生物活性材料在临床上具有巨大潜力和重要的基础研究价值。

关键词:活性微生物材料、肠道菌群、癌症、代谢性疾病

参考文献（5 篇以内）

[1] Zheng, D.-W. *et al.*, Phage-guided modulation of the gut microbiota of mouse models of colorectal cancer augments their responses to chemotherapy. *Nat. Biomed. Eng.* **2019**, 3, 717-728.

[2] Zheng, D.-W. *et al.*, Biomaterial-mediated modulation of oral microbiota synergizes with PD-1 blockade in mice with oral squamous cell carcinoma. *Nat. Biomed. Eng.* **2022**, 6, 32-43.

[3] Zheng, D.-W. *et al.*, An orally delivered microbial cocktail for the removal of nitrogenous metabolic waste in animal models of kidney failure. *Nat. Biomed. Eng.* **2020**, 4, 853-862.

纳米酶的设计、构筑及其在生物医学领域的应用

杨蓉

国家纳米科学中心，北京海淀区中关村北一条 11 号，100190

*Email : yangr@nanoctr.cn

摘要正文：

自然界中的很多生命活动都与生物体内各种酶有关。天然酶具有催化效率高、底物特异性好、催化反应类别广等特点。无机纳米材料不仅具有独特的光、电、磁等优良的理化性质，还具有类似于过氧化物酶、氧化物酶、过氧化氢酶等催化活性，从而引起了人们极大的关注。纳米酶是一类具有类生物酶催化特性的纳米材料。与天然酶相比，纳米酶具有制备简便、稳定性好、易保存、且可回收重复使用等显著优势。近年来纳米酶研究取得了快速发展，并在很多领域如生物传感、环境治理、纳米药物研发等研究领域发挥重要作用。我们设计与可控制备了多种具有高类酶活性的新型纳米材料[1-6]，研究其结构、组成、形貌和尺寸等对其纳米酶活性的影响，由于载体-颗粒的协同效应，复合颗粒材料表现出增强的类酶活性和稳定性；在此基础上，进一步研究了其纳米酶活性的机理，并开发了多种纳米酶在生化检测及抗菌、肿瘤治疗等生物医学领域中的应用。我们的工作为发展具有高效生物催化活性的纳米酶及其应用提供了新的思路。

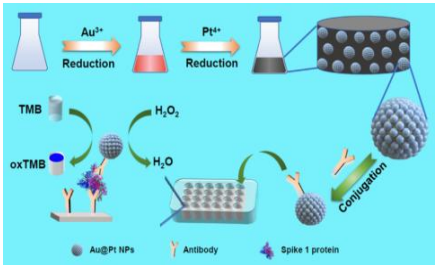


Fig. 1. Nanoparticles with enzyme-like properties

关键词：纳米颗粒；模拟酶；多功能性；异质结构;生物催化

参考文献

[1] S. Cai*, W. Zhang, R.Yang*, Emerging single-atom nanozymes for catalytic biomedical uses, *Nano Research*, 2023, 16:13056.

[2] R. Yang*, S. Wen, S. Cai*, W. Zhang*, T. Wu, Y. Xiong, MXene-based nanomaterials with enzyme-like properties for biomedical applications, *Nanoscale Horizons*, 2023, 8: 1333.

[3] W. Xiao, S. Cai*, T. Wu, Z. Fu, X. Liu, C. Wang, W. Zhang*, R. Yang*, IrO_2 clusters loaded on dendritic mesoporous silica nanospheres with superior peroxidase-like activity for sensitive detection of acetylcholinesterase and its inhibitors, *J. Colloid Interf. Sci.* 2023, 635: 481.

[4] S. Cai, J. Liu, J. Ding, Z. Fu, H. Li, Y. Xiong, Z. Lian, R. Yang*, C.Y. Chen*, Tumor microenvironment responsive cascade reactions by a cobalt-single-atom nanozyme for synergistic nanocatalytic therapy, *Angew. Chem. Int. Ed*, 2022, 61: e202204502.

[5] Z. Fu, W. Zeng, S. Cai*, H. Li, J. Ding, C. Wang, Y. Chen, N. Han, R. Yang *, Porous Au@Pt nanoparticles with superior peroxidase-like activity for colorimetric detection of spike protein of SARS-CoV-2, *J. Colloid and Interf. Sci*., 2021,

604:113-121.

[6] S. Cai, R. Yang*, Noble Metal-Based Nanozymes in: Yan X. Y. (eds) Nanozymology. Nanostructure Science and Technology. Springer, Singapore 2020, 331-365.

报告人简介：

杨蓉，国家纳米科学中心研究员。2006 年于美国俄亥俄大学获得理学博士学位。2006 年至 2007 年在美国明尼苏达大学化工材料系做博士后，2008 年起在国家纳米科学中心工作从事材料、生物、化学和物理之间交叉的新兴科学的研究。研究工作涉及纳米功能材料的可控制备及组装，功能材料的表/界面结构、理化性质，及纳米功能材料在生物医学、能源环保等方面的应用。在纳米酶研究领域也开展了一系列研究工作。作为项目负责人/项目骨干，主持/参与了多项国家级、中科院系统科研项目。在国际重要学术刊物上发表论文近 100 篇，获授权专利 21 项。

附：报告人为老师

mRNA制造中的体外转录合成（IVT）与分离纯化新过程

张松平[1,*]，冯雪[1]，车诗怡[1]，姜凯旋[1]，李正军[1]，苏志国[1]

[1]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），
生化工程国家重点实验室，北京市海淀区中关村北二街1号，100190

*Email: spzhang@ipe.ac.cn

mRNA技术和产品正在从实验室快速走向大规模制造和临床应用，随着越来越多基于mRNA技术的预防性疫苗和治疗性药物取得应用，mRNA的生产逐步进入工程科学研究的轨道，其先进制造成为研究的热点。本报告围绕其制造过程的体外转录合成（In Vitro Transcription，IVT）、分离纯化、与加帽修饰三大关键点出发，介绍基于QbD（Quality by Design）指导思想，通过最优化设计获得创新工艺的探索。主要包括：1）mRNA的精准合成。RNA聚合酶体外转录合成mRNA过程中产生dsRNA副产物，会引起严重副反应且难以去除，是产品质量控制的关键点和难点。我们基于dsRNA产生的机理分析，探索了在转录过程中引入材料界面调控mRNA分子的微观构象以抑制RNA的折叠，从源头上减少dsRNA副产物的同时增加mRNA的产量。2）mRNA的快速提取分离技术。我们发明了可以常温操作、快速、高效的硫酸铵沉淀提取mRNA的新技术。3）mRNA的固相加帽和过程集成。对合成的mRNA进行5’端加帽是提高其稳定性并促进蛋白质翻译的关键，传统工艺需要多步反应-分离单元操作，效率低且易发生mRNA降解。我们发明了一种固相加帽新工艺，一步实现mRNA的提取分离-高效加帽-纯化回收，不仅加帽效率可以达到95%以上，且与专利报道技术相比，新工艺时间缩短2倍，mRNA总收率提高1.8倍，对RNase的耐受性显著提高，且易于实现连续化操作和过程集成。

关键词： mRNA，体外转录合成，固相加帽，分离纯化，过程集成

参考文献

[1] Che SY, Feng X, Li ZJ, Su ZG, Ma GH, Li ZK, Yu AB, Liu MS, Zhang SP. On-column capping of poly dT media-tethered mRNA accomplishes high capping efficiency, enhanced mRNA recovery, and improved stability against RNase. *Biotechnol Bioeng*. 2024, 121(1): 206-218.

[2] Feng X, Li ZJ, Su ZG, Che SY, Dai BQ, Cheng Ym Zhang SP. Rapid and high recovery isolation of mRNA from in vitro transcription system by ammonium sulphate precipitation at room temperature. *Separation and Purification Technology*, 2024, 336: 126331.

[3] Feng X, Su ZG, Cheng Y, Ma GH, Zhang SP. Messenger RNA chromatographic purification: advances and challenges. *J Chromatography A*, 2023, 1707, 464621

报告人简介：

张松平，中国科学院过程工程研究所生化工程国家重点实验室研究员。近期研究方向聚焦于 mRNA、重组病毒样颗粒/病毒载体、蛋白质药物等超大生物分子在反应、分离、剂型化过程中的结构稳定和活性保持。发表论文 150 余篇，申请专利 40 余项，多项技术成果在疫苗和蛋白质药物研发和生产中获得实施应用。兼任国家农业部兽药评审专家，J Chromatogr A 和 Biochem Engin J 编委。

Spatiotemporal delivery via Pickering emulsion for the enhanced vaccination

Yufei Xia[1,2,3*]

[1] National Key Laboratory of Biochemical Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, PR China

[2] School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, PR China

[3] Key Laboratory of Biopharmaceutical Preparation and Delivery, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 10090, PR China

* yfxia@ipe.ac.cn

This study explores the spatiotemporal delivery of vaccines using Pickering emulsions to enhance immune responses. Traditional approaches in vaccine design have focused on the quantity and quality of components, but the timing and coordination of antigen and adjuvant delivery are equally critical. Here, we employed poly(lactic-co-glycolic acid) (PLGA) nanoparticle-stabilized Pickering emulsions (PPE) to optimize the release kinetics of the molecular adjuvant CpG and antigen. The hierarchical structure of PPE enabled differential loading: CpG positioned at the oil-water interface exhibited a rapid release profile, while antigen encapsulated in PLGA nanoparticles offered sustained release. This configuration resulted in a distinct intracellular spatiotemporal release, where rapid CpG release followed by prolonged antigen presentation effectively activated Toll-like receptor 9 (TLR9), fostering a more immunogenic microenvironment. This setup significantly enhanced dendritic cell (DC) activation, leading to higher CD40 expression, increased proinflammatory cytokines, sustained antigen cross-presentation, and robust Th1 and CD8+ T cell responses. In a Varicella-zoster virus (VZV) vaccine model, this approach suppressed tumor growth and improved vaccine efficacy. Further research addressed the challenges of controlled-release systems in anti-tumor responses. We employed Pickering emulsion to deliver lipopeptides with adjustable release profiles: C6-SPE for fast release, C10-SPE for medium release, and C16-SPE for slow release. Early or delayed antigen presentation missed the critical window for effective T cell activation due to lack of synchronization with co-stimulatory signals like CD86. However, C10-SPE achieved optimal timing, coordinating antigen presentation with CD86 expression, leading to effective DC activation and tumor regression in EG7-OVA models. Co-delivery of CpG further boosted DC activation and extended the activation window, yielding robust anti-tumor effects comparable to the optimized C10-SPE formulation.

报告人/墙报展示人简介：

申请人致力于化学和免疫学交叉研究，创建了“颗粒化乳液佐剂系统”，实现了流感、新冠、带状疱疹等多种疫苗的黏膜和系统性免疫增效。以第一/通讯作者在 *Advanced Materials*、*ACS Nano* 等发表 SCI 文章 15 篇，申请专利 9 项（PCT 1 项）、授权 2 项。先后主持国家基金委优秀青年基金、国家自然科学基金委员会重大项目（课题主持）、国家重点研发计划战略性科技创新合作项目、中科院从 0 到 1 基础前沿科学研究计划等；申请人积极推进相关成果的临床转化，与北京科兴中维生物科技有限公司签署联合实验室框架协议 1 项（400W/年持续资助），任“中国科学院过程工程研究所-科兴控股先进佐剂及递送系统”联合实验室主任、合作开发协议 2 项；与益杰立科（上海）生物科技有限公司合作开发我国首项常见病在体基因编辑治疗策略，已获得 IIT 临床研究许可（国科遗办审字(2024)GH0640 号）。入选了北京市科技新星、中科院青年创新促进会、北京市青年人才托举计划等；获得了首届京博科技奖化学化工与材料京博优秀博士奖-金奖（全国唯一）、中国颗粒学会青年颗粒奖、全球华人化工协会未来化工学者奖、国际疫苗协会优秀奖等，以主要完成人获得中国化工学会科学技术奖基础研究成果奖一等奖（5/12）以及中国颗粒学会自然科学奖一等奖（5/10）等。受邀担任 *Research* 国际期刊青年编委。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

AI 赋能 RNA 药物递送

RNA 药物需要递送系统才能真正成药，但不同递送系统千变万化，并且面临诸多挑战，例如靶向性、毒性、免疫激活和低传递效率等等。如何克服这些挑战，开发更强的递送系统，可以使用人工智能（AI）来预测不同组分的性质和性能，并结合高通量数据生产技术，进一步优化和设计更强的 RNA 递送系统。此外，还可以引入更多组分，比如抗体靶向结合来增强递送的特异性和选择性。

抗病毒仿生纳米诱饵

饶浪 [1,*]

[1] 深圳湾实验室，广东省深圳市，518132

*Email: lrao@szbl.ac.cn

摘要正文： 由新型冠状病毒(SARS-CoV-2)引起的新冠肺炎大流行(COVID-19)对全球经济和人们的日常生活造成了巨大影响。在临床上，大多数新冠肺炎患者表现出可忽略或轻微的症状，但其中约20%的患者会因感染诱发的细胞因子释放综合征（或“细胞因子风暴”）而发展成重症肺炎、多器官功能衰竭甚至感染性休克。针对炎症性细胞因子的中和抗体有潜力抑制新冠肺炎引起的免疫病理，但细胞因子相互作用的复杂性和细胞因子靶点的多样性使得减弱细胞因子风暴充满挑战。此外，生物体内非特异性分布和剂量限制副作用限制了这些游离抗体的进一步应用。生物材料和纳米技术的最新进展为传染性和炎性疾病提供了诸多新机遇。在这里，我们首先讨论新冠肺炎细胞因子风暴的潜在机制，然后回顾相关的治疗策略和正在进行的临床试验。此外，我们总结了近期用于改善基于抗体和广谱细胞因子中和策略的新兴生物材料的研究。我们期望本次汇报能为新冠肺炎细胞因子风暴和其他炎症性疾病的新型疗法的开发提供新的思考。

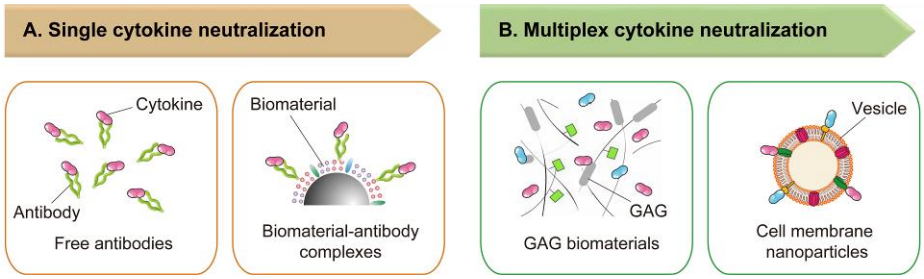


Fig. 1 Comparison diagram of biomaterials in single cytokine and multiplex cytokine neutralization

关键词： 新型冠状病毒；细胞因子风暴；生物材料

参考文献

[1] L. Rao, Y. Yuan, X. Shen, G. Yu, X. Chen. Nat. Nanotechnol. 2024, in press.

[2] Q.-F. Meng, W. Tai, M. Tian, X. Zhuang, Y. Pan, J. Lai, Y. Xu, Z. Xu, M. Li, G. Zhao, G.-T. Yu, G. Yu, R. Chen, N. Jin, X. Li, G. Chen, X. Chen, L. Rao. Sci. Adv. 2023, 9, adg3277.

[3] Q.-F. Meng, R. Tian, H. Long, X. Wu, J. Lai, O. Zharkova, J.-W. Wang, X. Chen, L. Rao, Adv. Mater. 2021, 33, 2100012.

[4] Q.-F. Meng, Y. Zhao, C. Dong, L. Liu, Y. Pan, J. Lai, Z. Liu, G.-T. Yu, X. Chen, L. Rao, Genetically Programmable Fusion Cellular Vesicles for Cancer Immunotherapy. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 26320-26326.

[5] L. Rao, L. Wu, Z. Liu, R. Tian, G. Yu, Z. Zhou, K. Yang, H.-G. Xiong, A. Zhang, G.-T. Yu, W. Sun, H. Xu, J. Guo, A. Li, H. Chen, Z.-J. Sun, Y.-X. Fu, X. Chen, Nat. Commun. 2020, 11, 4909.

[6] L. Rao, S. Xia, W. Xu, R. Tian, G. Yu, C. Gu, P. Pan, Q.-F. Meng, X. Cai, D. Qu, L. Lu, Y. Xie, S. Jiang, X. Chen, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2020, 117, 27141.

报告人/墙报展示人简介：

饶浪，深圳湾实验室，特聘研究员，独立课题组长，博士生导师。2018 年获得武汉大学工学博士学位，2018-2020 年分别在美国德克萨斯大学西南医学中心和美国国立卫生研究院从事博士后研究，2020 年 10 月入职深圳湾实验室开展独立研究工作。2021 年入选深圳市海外高层次人才计划，2022 年获得国家优秀青年科学基金项目资助。

围绕如何提高免疫治疗的有效性与安全性这一关键科学问题，以细胞膜外囊泡是机体免疫调节的重要媒介作为切入点，深入探索了细胞膜囊泡的免疫 学效应，并基于此进行结构设计与性能优化，构建了系列免疫工程化细胞膜纳米囊泡，为基于生物衍生材料的调控免疫反应，进而实现肿瘤、新冠肺炎等重大疾病的安全有效治疗，提供了新的研究思路。

以第一/通讯作者发表科技论文 50 余篇，发表于 Nat. Nanotechnol.、Chem. Soc. Rev.、Adv. Mater.、Angew. Chem. Int. Ed.、Nat. Commun.、Sci. Adv.、Proc. Natl. Acad. Sci. USA 等期刊，其中封面论文 11 篇，ESI 高被引论文 10 篇。研究成果被 Nat. Rev. Drug Discov.、Nat. Rev. Mater.、Nat. Nanotechnol.、Sci. Trans. Med.等期刊引用 7700 余次。受邀担任 J. Nanobiotechnol.、APL Bioeng. 客座编辑，*Asian J. Pharm. Sci.*、*Exploration*、*BME Front.*青年编委。获得深圳市五一劳动奖章、深圳市海外高层次人才、Biomaterials 期刊 Future Scientist Award 等荣誉。

报告人/墙报展示人是否为学生：非学生

“半导体光遗传学”：碳基生命与硅基电子的光学接口

王汉杰*

[1] 天津大学，天津市南开区卫津路 92 号，300072

*Email: wanghj@tju.edu.cn

摘要正文：王汉杰，天津大学生命科学学院副院长、英才教授，国家优青，天津杰青，入选天津市青年人才托举工程（首届）。03-12年于天津大学获得本硕博学位，期间作为国家公派留学博士赴美国宾夕法尼亚大学进行研究合作，12-13年于新加坡国立大学进行博士后研究工作，13年至今于天津大学从事教学科研工作。长期致力于将合成生物学与发光材料学、电子工程学等多学科理论知识交叉融合，提出了“半导体光遗传学”新思路。该思路有望回答“能否通过调控肠菌生物功能促进宿主健康？”这一多学科交叉科学问题。通过揭示“材料器件-工程细菌”机器与生物间光学信号交互的复杂作用机制，有望打造“光控菌”疾病诊疗新技术。首次提出“光遗传工程菌”，为相关疾病诊疗提供新方法，受到学术界及产业界积极评价和广泛关注。现任中国颗粒学会青年委员、中国生物医学工程学会材料分会委员等。本次报告内容围绕“半导体光遗传学”：碳基生命与硅基电子的光学接口进行汇报，着重介绍近期本课题组在半导体合成生物学方面取得的系列进展。

参考文献

[1] Yingying Zhang, Ruru Kang, Xinyu Zhang, et al. A programmable oral bacterial hydrogel for controllable production and release of nanovaccine for tumor immunotherapy. Biomaterials. 2023; 299: 122147.

[2] Xinyu Zhang, Gaoju Pang, Tao Sun, et al. A red light-controlled probiotic bio-system for in-situ gut-brain axis regulation. Biomaterials. 2023; 294: 122005.

[3] Yingying Zhang, Xin Xue, Mingxi Fang, et al. Upconversion Optogenetic Engineered Bacteria System for Time-Resolved Imaging Diagnosis and Light-Controlled Cancer Therapy. ACS Applied Materials & Interfaces. 2022; 14(41): 46351-46361.

[4] Xinyu Zhang, Ning Ma, Wei Ling, et al. A micro-nano optogenetic system based on probiotics for in situ host metabolism regulation. Nano Research. 2023; 16: 2829–2839.

[5] Meihui Cui, Wei Ling, Lili Zhang, et al. Smartphone bioelectronic drug with visual colorimetric sensor and bulk nanoencapsulation optogenetic bacteria for chronic kidney disease theragnostics. Chemical Engineering Journal. 2023; 451(3): 138812.

[6] Chunli Han, Xinyu Zhang, Gaoju Pang, et al. Hydrogel microcapsules containing engineered bacteria for sustained production and release of protein drugs. Biomaterials. 2022; 287: 121619.

[7] Huizhuo Pan, Tao Sun, Meihui Cui, et al. Light-Sensitive Lactococcus lactis for Microbe-Gut-Brain Axis Regulating via Upconversion Optogenetic Micro-Nano System. ACS Nano. 2022; 16(4): 6049-6063.

[8] Meihui Cui, Tao Sun, Shubin Li, et al. NIR light-responsive bacteria with live bio-glue coatings for precise colonization in the gut. Cell Reports. 2021; 36(11): 109690.

[9] Meihui Cui, Gaoju Pang, Tao Zhang, et al. Optotheranostic Nanosystem with Phone Visual Diagnosis and Optogenetic Microbial Therapy for Ulcerative Colitis At-Home Care. ACS Nano. 2021; 15(4): 7040-7052.

[10] Huizhuo Pan, Lianyue Li, Gaoju Pang, et al. Engineered NIR light-responsive bacteria as anti-tumor agent for targeted and precise cancer therapy. Chemical Engineering Journal. 2021; 426(15): 130842.

细菌诊疗材料

齐国斌*，魏炜，马光辉

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: gbqi@ipe.ac.cn

病原微生物的识别和灭活一直是根除微生物引起的感染和疾病的巨大挑战。尽管自抗生素发现以来，与细菌感染的斗争取得了相当大的成功，但使用广谱抗菌剂不分青红皂白地攻击细菌可能会导致微生物群失调和不良健康问题。同时，广谱抗生素的使用导致了许多耐药病原体菌株的出现。因此，能够选择性地识别和灭活致病菌而不伤害有益菌是一个巨大的科学挑战和重要的治疗目标。在这里，我们报道了一种材料平台，利用细菌作为模版，通过铜催化原子转移自由基聚合合成具有特异性识别致病菌的光功能聚合物材料，以自选择性杀死模板细菌而不产生抗生素耐药耐药性。细菌可以选择适合自身的单体并在表面合成能够反映细菌表面结构的光功能模板聚合物。该聚合物更容易与其匹配的细菌相互作用并在细菌的表面发出很强的荧光，实现对特定细菌选择性识别，并在光照条件下对其进行光动力清除。进一步，利用该策略合成含有胍基的模板聚合物用于在不干扰微生物群落的情况下直接选择性杀死特定的致病菌，而对其他物种的生长没有干扰。同时，重复使用该聚合物不会引起细菌耐药，解决了传统细菌感染治疗过程中导致微生物菌群失调和易于产生抗药性的问题。

关键词：生物医用材料，细菌诊疗，光功能材料，

参考文献

[1] **Guobin Qi, et al. Targeted Depletion of Individual Pathogen by Bacteria-Templated Polymer. *Adv. Mater*. 2024, 36, 2307940.**

[2] **Guobin Qi, et al. Bacterium-templated polymer for Self-Selective Ablation of Multidrug-Resistant Bacteria. *Adv. Funct. Mater*., 2020, 30, 2001338.**

报告人/墙报展示人简介：

齐国斌，中国科学院过程工程研究所研究员，中国科学院过程工程研究所百人计划（过程杰青）。研究方向主要聚焦于生物医用功能材料在细菌诊疗中的应用。迄今为止以第一作者/通讯作者在Adv Mater（6篇）、J Am Chem Soc（1篇）、Nat Commun（1篇）、Angew Chem Int Ed（2篇）等期刊上发表SCI论文20余篇。曾获国家优秀自费留学生奖学金，美国化学工程学会青年研究员，中国无锡“太湖杯”国际精英创新创业大赛总决赛三等奖等荣誉。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

生物囊泡在肿瘤免疫治疗中的应用

张志平*

华中科技大学同济药学院，武汉市硚口区航空路 13 号，430030

*Email:zhipingzhang@hust.edu.cn

摘要正文：随着肿瘤免疫治疗的快速发展，生物囊泡作为药物载体展现出巨大的潜力。生物囊泡，因其独特的生物学特性和低免疫原性，被认为是理想的肿瘤靶向药物载体。它们能够携带多种抗肿瘤药物和免疫调节分子，通过特定的表面标志物实现对肿瘤细胞的精准递送。本研究团队在肿瘤免疫治疗领域，特别是在生物囊泡的应用方面取得了一定突破性进展。临床前研究表明，通过工程化改造生物囊泡，可以增强其肿瘤主动靶向能力，并实现抗肿瘤药物在肿瘤内的精准递释[1]。此外，生物囊泡还可以作为免疫激活剂，通过携带免疫刺激分子以激活肿瘤微环境中的免疫细胞，从而增强机体对肿瘤的免疫应答，并在与其他免疫调节剂联合应用后，显著提升抗肿瘤疗效，有效抑制了肿瘤的生长和转移[2]。本团队开发的生物囊泡药物递送系统显示出良好的治疗效果和较低的副作用，在肿瘤免疫治疗中展现出巨大潜力，为未来的临床应用和肿瘤个性化医疗提供了重要的科学依据。

关键词：生物囊泡；免疫治疗；结肠癌

参考文献

[1] Boning Niu, Tianyi Tian, Lu Wang, Yinmei Tian, Tian Tian, Yuanyuan Guo, Hu Zhou, Zhiping Zhang*. CCL9/CCR1 axis-driven chemotactic nanovesicles for attenuating metastasis of SMAD4-deficient colorectal cancer by trapping TGF-β. Acta Pharmaceutica Sinica B 2024, 14, 3711-3729.

[2] Yulin Yu, Yinmei Tian, Yang Li, Xianya Qin, Xiaonan Li, Qian Hu, Chuansheng Fu, Boning Niu, Conglian Yang, Li Kong, Zhiping Zhang*. Self-generated double-stranded RNA for enhancing tumor immunotherapy and metastasis inhibition. Nano Today, 2024, 55: 102173.

报告人/墙报展示人简介：

张志平，华中科技大学同济药学院、国家纳米药物工程技术研究中心教授，附属同济医院双聘教授，博士生导师。入选国家万人计划科技创新领军人才。2007 年获新加坡国立大学博士，2010 年哈佛医学院博士后。主要研究方向：1）仿生递送系统在肿瘤、急性呼吸窘迫综合征中的研究；2）新型药用辅料与自组装递送系统研究。通讯作者发表 SCI 收录文章 100 余篇，包括本领域主流刊物 Journal of Controlled Release 和 Acta Pharmaceutica Sinica B 等。他引 7000 余次，授权中国发明专利 11 件。主持国家自然科学基金 6 项，曾获中国药学会青年药剂学奖。目前担任 Journal of Controlled Release，Acta Pharmaceutica Sinica B 和 Asian Journal of Pharmaceutical Sciences 等杂志编委；任中国药学会药剂专委会委员，中国颗粒学会第八届理事会理事，湖北省药学会理事会理事、制药工程专委会副主任委员等。

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，浙江省杭州市西湖区浙大路 38 号，310027

*Email: 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的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些列工作，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。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，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。

关键词：微流控；传质强化；界面调控；颗粒形貌调控

Mass Transfer Enhancement and Particle Morphology Regulation in Microfluidics and Their Applications

Dong Chen[1*]

[1]College of Energy Engineering, Zhejiang University, Zhe Da Road 38, Hangzhou, 310027

* chen_dong@zju.edu.cn

Microfluidics has risen as a cross-disciplinary research frontier within areas including chemical engineering. The enhancement of mass transfer and the elucidation of its intrinsic mechanisms constitute a crucial foundational element of this cutting-edge research direction. Within this important field, a series of studies have been centered on the theme of "interface regulation", specifically emphasizing the control of nanoparticle morphology. These thorough studies have revealed that inside microfluidic channels, the time required for solvent mixing is significantly less than the time it takes for nanoparticles to aggregate, thus ensuring the simultaneous precipitation of various materials. Expanding on this foundation, additional research explored how the diffusion coefficient affects nanoparticle morphology, resulting in the effective control of diverse particle shapes, including particles and microcapsules. Within the realm of public health, these breakthroughs have opened avenues for pioneering applications that utilize the engineered biocompatible particles, microcapsules, and various carriers.

Keywords: Microfluidics; Mass Transfer Enhancement; Interface Regulation; Particle Morphology Regulation

报告人/墙报展示人简介：

陈东，浙江大学研究员，国家高层次人才，致力于微流控、微化工、微反应等技术在化工、能源、材料等领域的应用研究，先后承担多项国家级和省部级项目。在 Adv. Mater.、Angew. Chem. Int. Ed.等国际权威期刊上发表学术论文 120 余篇，总引用次数 5800 余次，H 因子 45。授权中国发明专利 26 项，其中第一发明人发明专利 21 项，部分研究成果实现转化。获得中国化工学会基础研究成果奖一等奖（1/5）。兼任 Chinese Chemical Letters、Chemical Engineering Science 等期刊编委；入选中国化工学会微化工技术专业委员会委员、中国化学会仿生界面化学分会专委会委员、中国颗粒学会青年理事、中国稀土学会稀土材料化学与生物技术交叉专业委员会委员等。

报告人/墙报展示人是否为学生：非学生

小分子自聚合与自组装构筑新型胶体粒子

周加境 [1]

[1] 四川大学轻工科学与工程学院，四川 成都，610065

*Email: jjzhou@scu.edu.cn

摘要正文：生命系统的形成离不开自组装的作用，自然界中的氨基酸、多肽、蛋白质和DNA等天然分子通过协作自组装发挥着重要的生物功能[1]。其中，小分子具有明确的结构和功能，与大分子相比，可以对其组装过程进行更精细的控制，得到具有特定性质和结构的多层级结构材料。在前期的探索中，我们对1,4-苯二硫醇（BDT）的自组装行为进行了研究。BDT分子可通过双硫键逐步聚合形成聚合物链，苯环间的π-π堆积诱导聚合物链进一步组装成超分子结构[2-4]。研究发现，BDT不仅可以和单宁酸协同组装形成均匀的超分子粒子，还可以通过金硫键在金纳米粒子表面形成立体补丁结构[5]。在最新的工作中，我们发现单独的BDT分子在碱性水溶液中可以制备得到聚苯二硫醇纳米粒子（PBDT），PBDT尺寸均一，并可以通过种子生长法进一步调控粒子尺寸。将PBDT纳米粒子置于二甲基甲酰胺（DMF）中，PBDT溶解并暴露出活性巯基，并通过双硫键进一步逐步聚合形成分子量更大的聚合物链，最终结晶形成球晶（rPBDT）[6]。粒子溶解和逐步聚合的过程可以在1 min内实现。得到的rPBDT不仅形貌可控，结构稳定，更具有独特的簇聚诱导发光（CTE）的特性。体外细胞毒性实验证明，rPBDT球晶具有优良的生物相容性。结合rPBDT丰富的双硫键和超支化结构，其具有作为响应性药物载体的潜力。

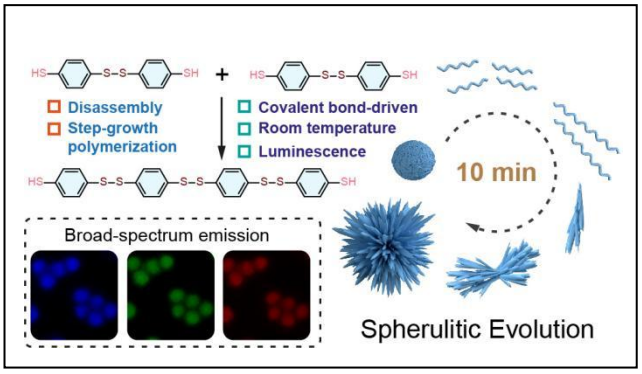


Fig. 1 Schematic of rapid self-assembly process of small molecule BDT into fluorescent rPBDT spherulites

关键词：自组装；小分子；球晶；簇聚诱导发光；药物递送载体

参考文献

[1] Jiang, L.; Zeng, Y.; Li, H.; Lin, Z.; Liu, H.; Richardson, J. J.; Gao, Z.; Wu, D.; Liu, L.; Caruso, F.; **Zhou, J**. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, **145(44)**: 24108-24115.

[2] **Zhou, J**.; Lin, Z.; Penna, M.; Pan, S.; Ju, Y.; Li, S.; Han, Y.; Chen, J.; Lin, G.; Richardson, J. J.; Yarovsky, I.; Caruso, F. *Nat. Commun.* **2020**, **11 (1)**: 4804.

[3] **Zhou, J**.; Xu, M.; Jin, Z.; Borum, R. M.; Avakyan, N.; Cheng, Y.; Yim, W.; He, T.; Zhou, J.; Wu, Z.; Mantri, Y.; Jokerst, J. V. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, **60 (50)**: 26357-26362.

[4] **Zhou, J**.; Penna, M.; Lin, Z.; Han, Y.; Lafleur, R. P. M.; Qu, Y.; Richardson, J. J.; Yarovsky, I.; Jokerst, J. V.; Caruso, F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, **60**: 20225-20230.

[5] **Zhou, J**.; Creyer, M. N.; Chen, A.; Yim, W.; Lafleur, R. P. M.; He, T.; Lin, Z.; Xu, M.; Abbasi, P.; Wu, J.; Pascal, T. A.; Caruso, F.; Jokerst, J. V. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, **143 (31)**: 12138-12144.

[6] Song, Q.; Li, Y.; Jin, Z.; Liu, H.; Creyer, M. N.; Yim, W.; Huang, Y.; Hu, X.; He, T.; Li, Y.; Kelley, S. O.; Shi, L.; **Zhou, J**.; Jokerst, J. V. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, **145(47)**: 25664 -25672

报告人/墙报展示人简介：

周加境，博士，四川大学“双百人才工程”研究员，博士生导师，入选国家海外高层次人才引进计划，四川省科协“海智计划”特聘专家。2016 年博士毕业于新加坡南洋理工大学，并先后在澳大利亚墨尔本大学与美国加州大学圣地亚哥分校从事博士后研究工作。2022 年入职四川大学轻工科学与工程学院组建生物质基智能组装实验室，团队主要利用生物质材料构筑从纳米尺度到宏观尺度的功能组装体，开发和应用以生物质为原料的资源碳中和技术，服务生命健康与绿色低碳领域。迄今，已在 Nat. Rev. Chem.、Chem. Soc. Rev.、Acc. Chem. Res.、J. Am. Chem. Soc.、Angew. Chem. Int. Ed.、Adv. Mater.、Nat. Commun.等国内外高水平学术期刊上发表学术论文 90 余篇。

报告人/墙报展示人是否为学生：报告人为研究员

多肽仿生可控自组装制备及应用

高洁 [1,2]*

[1] 南开大学，天津市南开区卫津路 94 号，300071

[2] 中科院过程所，北京市海淀区中关村北二街 1 号，100190

*Email: chemgaojie@nankai.edu.cn

摘要正文：

多肽分子具有小分子化合物分子量小和易于合成修饰的优势，也具备蛋白类大分子药物的特异性和靶向性等优点，是一类很有潜力的药物候选分子。然而，尽管上世纪20年代就推出了第一款基于多肽的药物（胰岛素），截至目前，上市的多肽类药物只有80多种，与小分子化药和大分子蛋白药物相比数量非常少。多肽临床转化的难点在于：（1）二级结构缺失；（2）体内稳定性差；（3）跨膜和入胞能力差。

针对以上难题，我们课题组开发了多肽仿生可控自组装的策略，通过自组装和酶催化调节和稳定多肽的二级结构，赋予多肽具有更强生物学活性的二级结构；通过疏水自足组装使多肽由单分子转变为超分子的纳米结构，抵抗体内各类酶解和pH变化，提高多肽体内稳定性；通过靶向细胞受体以及自组装多肽纳米结构的内吞作用，提高多肽跨膜和入胞能力。综上所述，解决了多肽临床转化的三个难题，使得自组装多肽成为一种新型且有临床转化前景的药物分子和递送载体。

关键词： 多肽；自组装；生物医学应用；

参考文献

[1] **Zhang, X.; Zhang, B.; Zhang, Y.; Ding, Y.; Zhang, Z.; Liu, Q.; Yang, Z.; Wang, L.* and Gao, J.*, Copper-induced Supramolecular Peptide Assemblies for Multi-pathway Cell Death and Tumor Inhibition. Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 2024, e202406602.**

[2] **Zheng, D#; Guo J.#, Liu J.; Jin, Y.; Qi, C.; Li, X.; Shi, K.; Ding, Y.; Xie, L.; Wang, L.; Hu, Z.; Yang, Z.; Liu, Q.; Ning, W.* and Gao, J.*, Supramolecular Nanofibers Ameliorate Bleomycin-Induced Pulmonary Fibrosis by Restoring Autophagy. Adv. Sci. 2024, 2401327.**

[3] **Zhang, X.; Wang, J.; Zhang, Y.; Yang, Z.; Gao, J.*; Gu, Z.*, Synthesizing biomaterials in living organisms. Chem. Soc. Rev. 2023, 52 (23), 8126-8164.**

[4] **Chen, Y.; Li, W.; Wang, Z.; Yu, Y.; Li, J.; Ding, Y.; Hu, Z.; Liu, Q.; Yang, Z.*; Gao, J.*, A Transformable Supramolecular Bispecific Cell Engager for Augmenting Natural Killer and T Cell-Based Cancer Immunotherapy. Adv. Mater. 2023, 36 (3), 2306736.**

报告人/墙报展示人简介：

高洁，南开大学博士生导师，药物化学生物学全国重点实验室和生命科学学院双聘研究员。获得国家优秀青年基金，天津市青年人才托举工程、天津市“131 创新型人才计划”、南开大学“百名青年学科带头人”计划支持。主要研究方向是活性多肽可控组装用于疾病诊疗。在 Adv. Mater.，Chem. Soc. Rev.，J. Am. Chem. Soc.，Angew 等期刊发表论文 40 余篇。获得天津市自然科学一等奖。担任中国医药生物技术协会纳米生物技术分会委员，天津市药理学会实验药理专业委员，曾任 Exploration 杂志青年编委。

课题组网站：https://sky.nankai.edu.cn/gj/list.htm

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

晶态固定化生物（酶）制剂工程

陈瑶

中科院过程所，北京市海淀区中关村北二街 1 号，100190

南开大学，天津海河教育园区同砚路 38 号，300350

Email：chenyao@nankai.edu.cn

摘要正文：酶等生物大分子以及细胞是支撑生命系统运行的功能和分子基础，其作为生物催化剂，是生物智造的核心“芯片”。然而稳定性差、成本高、难以操作等瓶颈问题限制了生物催化剂工程化应用和产业化发展。用载体材料对其进行固定化有望解决上述关键瓶颈，是促进生物催化产业化应用的有效途径和关键环节。载体创新和性能的提升有赖于材料的创新和理性设计，有别于传统固定化载体，晶态多孔材料如共价有机框架具备高结晶性和多孔性，可以从载体限域空间的尺寸、微环境、排布等多个维度实现设计与调控，为理性设计和精准构筑高性能限域固定化载体提供了结构基础。我们从“构筑适配限域空间”和“固定化策略创制”两方面入手，创建了基于晶态多孔材料的高性能固定化平台，实现酶等生物大分子在理性设计的限域空间内精准高效的可控负载和保护，并从分子水平阐释固定化过程中的重要机理，促进对酶等生物大分子的固定化修饰向复合化、精密化和功能化发展，创建了一系列具有优异性能的功能化生物（酶）制剂和固定化细胞平台，并实现相关应用转化。

关键词：固定化生物制剂；晶态多孔材料

报告人墙报展示人简介：

陈瑶，教授、博导、国家优秀青年基金获得者，天津市杰青。研究长期聚焦酶等生物大分子的限域精准固定及相关剂型工程研究。主持国家重点研发计划课题、国家优秀青年科学基金、国自然面上、天津市重点等国家级、省部级科研项目 10 余项，与多个企业合作横向项目及相关应用转化。发表论文 126 篇，近年来以通讯/第一作者在 Nat Protoc、Nat Commun、Nat Rev Chem、J Am Chem Soc、Angew Chem Int Ed、Adv Mater、Chem、Acc Chem Res、Chem Soc Rev、ACS Catal 等期刊发表论文 56 篇。论文他引超 8200 次，13 篇入选 ESI 高被引。获批或申请中国专利 40 件、PCT2 件和美国专利 3 件。获侯德榜化工科学技术青年奖，全球化工杰出女科学家奖，天津市优秀科技工作者等奖项。现任 CCL、Particuology、Biodesign research、Engineering in life sciences 编委/青年编委，欧洲研究委员会评审专家等。任中国化工学会理事、女科委委员，中国化工学会生物化工专委会委员等。

Exploration of different dimensional particles in biomedical delivery system

Hua Yue[1,*]

[1]Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190

*Email: hyue@ipe.ac.cn

To address the challenges of biocatalysts and antigen/drug delivery, a series of strategies based on different dimensional particles were proposed. The main innovations included three aspects: 1) A biological/immunological evaluation system for chemical particles was constructed to reveal the effects of physiochemical properties (e.g., three/two dimensional) nano/microparticles on subsequent performance, overcoming rational design obstacles for the biomedical formulations. 2) In collaboration with experts in biocatalysis, a mesoporous nanocarrier delivery system was created to meet the mass transfer efficiency of enzymes and real-time monitoring of target products at the single-cell level. Meanwhile, a drug delivery system based on a two-dimensional "sandwiched" structure was designed for computational experts, creating a new mode of precise delivery to cell membranes. 3) A breakthrough was made in the mechanisms of elevating the cell immune response, proposing a new approach of cross-presentation-based immune activation. These constructed vaccine or anti-tumor formulation based on this approach overcame the incapabilities of traditional vaccines in exerting therapeutic killing effects.

Keywords: different dimensional particles, vaccine adjuvant, tumor immunotherapy, nanoenzyme, precise drug delivery

References

[1] Xiaoling Wu[#], **Hua Yue**[#], Yuanyu Zhang[#], Xiaoyong Gao, Xiaoyang Li, Licheng Wang, Yufei Cao, Miao Hou, Haixia An, Lin Zhang*, Sai Li*, Jingyuan Ma, He Lin, Yanan Fu, Hongkai Gu, Wenyong Lou, Wei Wei*, Richard N Zare, Jun Ge*, Packaging and delivering enzymes by amorphous metal-organic frameworks, ***Nature Communications***, 2019, 10, 5165.

[2] Pengyu Chen[#], **Hua Yue**[#], Xiaobo Zhai, Zihan Huang, Guanghui Ma, Wei Wei*, Li-Tang Yan*, Transport of graphene nanosheet sandwiched inside cell membranes, ***Science Advances***, 2019, eaaw 3129.

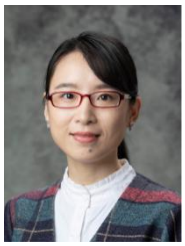
[3] Chao Pan[#], **Hua Yue**[#], Li Zhu, Guanghui Ma*, HengLiang Wang*, Prophylactic vaccine delivery systems against epidemic infectious diseases, ***Advanced Drug Delivery Reviews***, 2021, 113867.

[4] **Hua Yue**[#], Wei Wei[#], Zhanguo Yue, Bin Wang, Nana Luo, Yongjun Gao, Ding Ma, Guanghui Ma*, Zhiguo Su*, The role of the lateral dimension of graphene oxide in the regulation of cellular responses, ***Biomaterials***, 2012, 33(16): 4013-4021.

[5] Fumin Hu, Dangyang Wang, Ting Lu, Guanghui Ma*, **Hua Yue***. A two-pronged strategy utilizing exosomes extracted from antigen-presenting cells to combat hepatitis B, ***Nano Research***, 2024, 17(10): 9084-9094

[6] Yanhui Hu[#], Yuyuan Xing[#], **Hua Yue**[#], Chen Tong, Diao Yanyan*, Wei Wei*, Suojiang Zhang*, Ionic liquids revolutionizing biomedicine: recent advances and emerging opportunities, ***Chemical Society Reviews***, 2023, 52: 7262-7293

报告人/墙报展示人简介：



岳华，中科院过程所特聘青年研究员，聚焦纳微颗粒医药剂型研究。以一作/通讯作者在 Nat Commun、Sci Adv、Chem Soc Rev、Biomaterials、Adv Drug Del Rev、JControl Release 等权威期刊发表论文 26 篇(累计影响因子>200)，单篇他引>300 次；Science 特刊一作文章 1 篇；受邀编辑出版 Topic 专刊 1 部。基于颗粒制剂的理论创新工作被英、美等 40 多个国家机构评述借鉴，并被 Chem Soc Rev 等评价为“最系统的研究之一”、“提出递送新模式，具有重要意义”。主持重大新药创制、国自然专项等项目/课题 12 项。申/授专利 7 项，参编中英文专著 4 部；主要负责的聚乳酸微球/凝胶佐剂正与企业联合申请临床批件。获中国颗粒学会青年颗粒学奖、全球化工杰出女科学家奖；作为重要完成人获省部级一等奖 2 项；入选中科院青促会、中科院优秀青年团队等；获 ICBN Travel Award、Particuology 杰出审稿人、北京市优秀毕业生、赛诺菲巴斯德生物医学杰出研究生奖(中科院第 1 名)、中国科学院院长优秀奖等。

附：报告人/墙报展示人非学生

分子模拟在生物和仿生颗粒中的应用

任瑛[1,2*]，安康[1,2]，熊青霞[1]

[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: yren@ipe.ac.cn

摘要正文：

病毒颗粒、病毒样颗粒、油乳佐剂颗粒等生物和仿生颗粒均呈现典型的多尺度结构，至少涉及由多种化学官能团组成的分子、不同分子组织形成的界面或聚集体结构，以及生物/仿生颗粒三个尺度。分子模拟通过计算不同原子/分子间的相互作用获得体系的微观结构、组装动力学过程、基团间亲和作用能等，从而可以作为生物颗粒和仿生颗粒的的计算式“显微镜”，为关键分子结构理性设计、多组分配方优化、新型药物递送系统的研究等，提供了重要的理论工具。

关键词：生物颗粒；分子模拟；增强采样；多尺度模拟

参考文献

[1] **H. Luo, Y. Y. Ma, J.X. Bi, Z.J. Li, Y.L. Wang, Z.G. Su, L. Gerstweiler, Y. Ren, S.P. Zhang. Experimental and molecular dynamics simulation studies on the physical properties of three HBc-VLP derivatives as nanoparticle protein vaccine candidates. *Vaccine*, 2024,57:48842-54.**

[2] **H. Luo, Y. Y. Ma, Y. Ren, Z.J. Li, Y. Sheng, Y. Wang, Z. G. Su, J.X. Bi, S. Zhang, Study of self-assembling properties of HBc-VLP derivatives aided by molecular dynamic simulations from a thermodynamic perspective, *J. Biomol. Struct & Dyna.*, 2023. DOI:10.1080/07391102.2023.2273438**

[3] **Z.J. Li, Y.Y. Ma, Y. Ren, X. Lin, Z. G. Su, S.P. Zhang. Thermal-triggered loading and GSH-responsive releasing property of HBc particles for drug delivery. *J. Control. Release.* 2023, 382: 784-96**

[4] **J.H. Chen, Y. Ren, W.L Huang, L. Zhang, J.H. Li. Multilevel mesoscale complexities in Mesoregimes: Challenges in Chemical and Biochemical Engineering. *Annu. Rev. Chem. Biomol.* 2022, 13:431-55.**

[5] **Q.X. Xiong, Y. Ren, Y.F. Xia, G.H. Ma, R. Noda, W. Ge . Molecular dynamics simulations of ovalbumin adsorption at squalene/water interface. *Chinese J. Chem. Eng.* 2022,50: 369-78.**

[6] **C. Li，W. Chen，X. Lin，S.P. Zhang，Y.F. Wang，X.F. He，Y. Ren. Molecular dynamics study on the stability of foot-and-mouth disease virus particle in salt solution. *Mole. Simulat.* 2021, 47(13): 1104-11.**

报告人/墙报展示人简介：

任瑛， 2009 年博士毕业于中国科学院过程工程研究所，现任介科学与工程全国重点实验室副研究员。长期从事生物大分子、乳液、聚合物等复杂系统的多尺度模拟算法、软件开发及工业应用，已发表论文 50 余篇，授权软件著作权 2 项。先后主持国家自然基金委科研项目 4 项，巴斯夫、联合利华、中石化等 TOP500 企业合作研发项目 5 项。

酶催化剂的多尺度设计与构建

曹宇飞[1*]，娄文勇[1]

[1]华南理工大学食品科学与工程学院，广州市天河区五山路381号，510640

*Email: yufeicao@scut.edu.cn

酶作为生物体中数亿年进化而来的催化剂，为绿色、温和、高效地构建复杂化学分子提供了强大的工具。酶催化剂在实际应用中以单酶、多酶复合物、酶-金属复合催化剂等形式发挥作用，其催化活性、稳定性和选择性与催化剂结构之间存在多尺度的构效关系。在不同尺度深入阐释酶结构和功能的构效关系对于酶催化剂的理性设计和应用有着重要的意义。结合不同尺度的计算机模拟方法（量子力学计算、分子动力学模拟、QM/MM等）与实验，我们对酶序列和功能之间的对应关系、限域环境中的酶催化机制、酶-金属复合物的尺寸效应以及多酶复合催化的底物通道效应进行了系统的研究。此外，我们正在建立计算机辅助的高通量酶设计方法，基于前期探索的多尺度酶催化机制，高效筛选高性能的酶催化剂。

关键词：酶设计；多尺度；计算机模拟；限域效应

参考文献

[1] Cao, Y.; Qiao, Y.; Cui, S.; Ge, J. *JACS Au* 2022, 2: 961-971.

[2] Cao, Y.; Li, X.; Xiong, J.; Wang, L.; Yan, L. T.; Ge, J. *Nanoscale* 2019, 11: 22108-22117.

[3] Cao, Y.; Li, X.; Ge, J. *Trends Biotechnol. 2021*, 39: 1173-1183.

[4] Li, X.; Cao, Y.; Luo, K.; Sun, Y.; Xiong, J.; Wang, L.; Liu, Z.; Li, J.; Ma, J.; Ge, J.; Xiao, H.; Zare, R. N. *Nat. Catal.* 2019, 2: 718-725.

仿生药物递送与脑卒中治疗

于文艳

郑州大学，河南省高新区科学大道 100 号，450001

*Email: ywyyxy@zzu.edu.cn

脑卒中是威胁人类健康和生存的重大疾病之一，具有较高的发病率和致残率，给患者及其家庭带来了巨大的负担。现有的治疗方法，如静脉溶栓和机械取栓，虽然能够在一定程度上恢复血供，但其应用受限于治疗窗口期短和出血风险高。此外，脑卒中后过度激活的脑部免疫反应也会加重神经损伤，进一步影响预后。因此，如何安全高效地溶栓恢复血供并抑制过度激活的脑部免疫反应是脑卒中治疗的关键。

受体内天然的细胞转运机制及胞外囊泡分泌启发，我们发展了一系列仿生药物递送系统，旨在克服血脑屏障，向脑卒中病灶精准递送小分子、核酸及蛋白药物。这些仿生递送系统能够模拟细胞和胞外囊泡的特性，通过特异性配体与受体的相互作用，实现靶向识别和高效内吞。此外，这些递送系统还具有良好的生物相容性和可降解性，能够显著减少系统性副作用。我们在动物模型中的研究表明，这些仿生药物递送系统不仅能够有效恢复血供，减少梗死面积，还能够显著抑制炎症反应和神经损伤。

综上所述，仿生药物递送系统为脑卒中的治疗提供了一种全新的思路和手段，具有良好的临床应用前景。我们相信，随着这一技术的不断发展和完善，将会为脑卒中患者带来更加安全有效的治疗选择。

关键词：脑卒中治疗；胞外囊泡；药物递送；免疫抑制

参考文献

[5] Kandel A , Arjyal A , Karmacharya B ,et al.Pragmatic solutions for the global burden of stroke[J].The Lancet Neurology, 2024, 23(4):334-334.

[6] Zhang Z G , Buller B , Chopp M .Exosomes — beyond stem cells for restorative therapy in stroke and neurological injury[J].Nature Reviews Neurology, 2019.

报告人简介：

于文艳，2024 年 6 月毕业于郑州大学药学院，入职郑州大学药学院副研究员，主要从事脑靶向药物研究，以第一或通讯作者在 Sci Adv, J Control Release 等期刊发表 SCI 论文 10 余篇，申请国家发明专利 3 项。

附：报告人是副研究员

食品制造与安全的生物-化学耦合解决方案

黎晓阳[1*]，付猜猜[1]，范云凯[1]，戈钧[2]

[1]南昌大学食品学院，江西南昌，330031

[2]清华大学化学工程系，北京，100084

*Email: xyli@ncu.edu.cn

摘要正文：将金属亚纳米团簇/单原子结合于酶分子上构建酶-金属复合催化剂，理论上可以实现高选择性的酶催化与高效率的金属催化在温和条件下的高效协同，有望开发出更加高效、环保、经济的催化过程。面向食品手性香料合成步骤繁琐的问题，提出了基于酶-高分子结合物可控构筑酶-金属亚纳米团簇/单原子复合催化剂的新方法，建立了酶活性口袋稳定金属催化反应过渡态提高金属催化活性和选择性的新理论，探索了复合催化剂中酶与金属的邻近效应、协同效应及互作机制。面向食品真菌毒素阻控关键技术，提出了选择性吸附框架材料区域固定化构建高效酶-金属复合催化剂的新方法，实现了在不影响食品营养和风味的同时靶向脱除真菌毒素，保障食品安全。

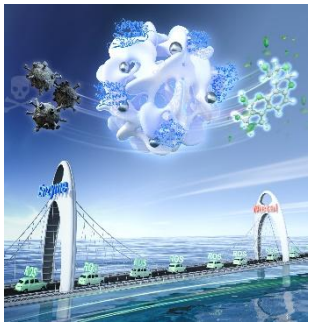


Fig. 1 Application of enzyme-metal hybrid catalyst in food manufacturing and safety

关键词：酶-金属复合催化剂；生物-化学耦合催化；食品和药品制造；食品安全

参考文献

[1] X. Li, Y. Cao, K. Luo, Y. Sun, J. Xiong, L. Wang, Z. Liu, J. Li, J. Ma, J. Ge*, H. Xiao*, R. N. Zare*, Highly active enzyme–metal nanohybrids synthesized in protein–polymer conjugates. ***Nature Catalysis*** 2019, 2, 718–725.

[2] X. Li, Y. Cao, K. Luo, L. Zhang*, Y. Bai, J. Xiong, R. N. Zare*, J. Ge*, Cooperative catalysis by a single-atom enzyme-metal complex. ***Nature Communications*** 2022, 13(1): 2189.

[3] C. Fu, T. Lu, X. Dai, P. Ding, Y. Xiong, J. Ge, X. Li*, Co-Immobilization of enzymes and metals on the covalent-organic framework for the efficient removal of mycotoxins. ***ACS Applied Materials & Interfaces*** 2023, 15(5): 6859-6867.（cover paper）

[4] C. Fu, L. Hou, D. Chen, T. Huang, S. Yin,* P. Ding, Q. Liao, X. Huang, Y. Xiong, J. Ge, and X. Li*. Targeted Detoxification of Aflatoxin B1 in Edible Oil by an Enzyme–Metal Nanoreactor. ***Journal of Agricultural and Food Chemistry*** 2024, 72(11):5966-74. (cover paper)

报告人简介：

黎晓阳，南昌大学食品学院教授，食品科学与资源挖掘全国重点实验室固定成员，入选**第八届中国科协青年人才托举工程、江西省杰出青年基金、江西省高层次人才“千人计划”**创新领军人才（青年）项目、江西省青年井冈学者，**清华大学优秀博士学位论文**、化学化工与材料**京博优秀博士论文奖**获得者。以第一/通讯作者在 **Nature Catalysis、Nature Communications、Chemical Engineering Journal、Small、JAFC** 等期刊发表论文二十余篇，从事生物-化学催化、酶催化剂工程、食品制造与安全等领域研究，承担了国家重点研发计划（青年项目）、国家自然科学基金、江西省杰出青年基金等国家和省部级科研项目 7 项。

附：报告人不是学生

用于黑色素瘤治疗的铜纳米材料修饰微球光热平台张欣

怡[1]，张梦亚[1]，崔恒庆[1]，张停琳[1]，张转转[1]，李婧竹[1]，周靖笙[1]，江相何[1]，刘晨晨[1]，高洁[1]*

[1]上海市海军军医大学第一附属医院 200433， 中 国 上 海 杨 浦 区

gaojiehighclea@smmu.edu.cn

接受过黑色素瘤切除手术的患者面临着愈合延迟和放射性皮炎等挑战。此外，肿瘤切除不彻底是导致预后不良和复发率增加的关键因素。然而，是否能够构建有效预防肿瘤复发并促进伤口愈合的治疗平台仍然是一个问题。因此，我们提出了一种创新的方法，使用黑色素瘤来源的癌细胞膜（CM）作为肿瘤抗原，包裹铜（Cu）基的金属有机框架（MOF）纳米材料，制造出被称为 MOF@CM 的纳米材料。然后将 MOF@CM 吸附到聚多巴胺（PDA）修饰的聚乳酸-乙醇酸（PLGA）多孔微球（PLGA/PDA）上，开发出铜纳米材料修饰的微球，称为 PLGA/PDA-CCM（载有 CM 涂层 MOF 的 PLGA/PDA）。它发挥同源肿瘤靶向和光热效应，诱导免疫原性细胞死亡。同时，MOF@CM 的持续释放在 CpG 的帮助下增强了树突状细胞（DCs）中的抗原呈递，并诱导 DC 成熟和激活免疫反应，作为预防肿瘤复发的有效疫苗。该平台利用了局部热效应和铜基 MOF 的综合优势，赋予了抗菌特性并刺激血管生成，从而促进伤口愈合并减轻放射性皮炎。这种集成微球治疗平台代表了治疗黑色素瘤的一种有前景的策略。

关键词：癌症治疗、微球、纳米材料、放射

报告人/墙报展示人简介：

研究员，博导，课题组长，就职于上海长海医院临床研究中心，生物医用材料专家，以“基于纳米材料的肿瘤防治和器官保护一体化”为题，以通讯和第一作者在 Advanced Science, Advanced Functional Materials, Bioactive Materials, Chemical Engineering J, Acta Pharmaceutica Sinica B 等杂志发表 98 篇 SCI 论文，10 篇>15，36 篇>10，总计 835，ESI 高被引 2 篇，封面 8 篇；引用次数 3608，H 指数 36，i10 指数 72；主持 10 项国家和省部级基金（包括 1 项国家高技术研究计划和 4 项国家自然科学基金，其中含 3 个面上项目），总计 367 万元；授权专利 9 项；主编《生物医用材料：组织修复与肿瘤治疗》（上海交大出版社）；担任 Asian J Pharm Sci（中科院 1 区，IF: 10.7）、Exploration（Wiley 综合性国际学术期刊）、View（Wiley 综合性国际学术期刊，IF：9.7）和 Biomaterials Translational 青年编委、中国研究型医院学会神经再生与修复专业委员会常委、神经损伤修复材料研究学组副组长、中国肿瘤生物治疗杂志和 Cancer Screening and Prevention 编委和中国中医药信息学会中西医外科智能诊疗分会理事，荣获上海市“青年科技启明星”和“晨光学者”，荣获上海市自然科学奖二等奖、上海市药学科技奖二等奖和上海市优秀博士论文。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Ionizable Lipid with Intermolecular Chemistry Features for Optimal and Safe mRNA Delivery

Xiaonan Huang[1,2,3], Weixiang Gao [1,2,3], Yishan Ma[1,2,3], Yufei Xia[1,2,3*]

[1] National Key Laboratory of Biochemical Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, PR China

[2] School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, PR China

[3] Key Laboratory of Biopharmaceutical Preparation and Delivery, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 10090, PR China

* yfxia@ipe.ac.cn

Lipid nanoparticles (LNPs) are clinically approved carriers for siRNA and mRNA, with ionizable lipids playing a pivotal role in RNA delivery efficiency. In this study, we designed a novel series of ionizable lipids, termed the GT series, specifically engineered to enhance weak intermolecular forces for improved mRNA encapsulation. Among these, GT30, characterized by multiple urea groups, demonstrated superior mRNA expression *in vivo* compared to GT35, which lacks such interactions due to its ether groups. Under identical ionizable lipid (IL) ratios, GT30-based LNPs achieved higher expression levels at the injection site than those based on ALC-0315 or GT35. Furthermore, a 40% GT30 lipid ratio formulation outperformed a 50% ratio in expression efficiency. LNPs formulated with GT30 lipid exhibited higher mRNA delivery efficiency and biosafety to those using ALC-0315. When intravenous administrated, the optimized LNPs successfully encapsulated epigenetic editor mRNA and sgRNA targeting Pcsk9, resulting in significant gene editing in the liver and effective reduction of the target protein in mice. When intramuscularly administrated, the optimal LNPs successfully encapsulated VZV gE mRNA and resulting in efficient and long-lasting IFN-γ and IL-2 responses for 90 days. Our findings suggest that ionizable lipids with urea groups can optimize lipid-to-mRNA ratios, potentially lowering the required dose for in vivo safer applications.

Key words: Lipid nanoparticles; mRNA delivery; Ionizable lipid

报告人/墙报展示人简介：

黄箫喃博士，现任中国科学院过程工程研究所研究员、中科院过程工程研究所 BR 计划 B 类过程杰青引进人才。致力于核酸 RNA 药物递送系统构建，通过研究颗粒表面性质对跨细胞层跨粘液组织的影响，建立跨玻璃体眼后细胞层精准递送 LNP 体系；构建喷鼻给药疫苗乳液类佐剂递送系统，成功实现抗原跨鼻粘膜粘液的穿透递送，实现远高于肌肉注射流感疫苗的免疫效果。构建 mRNA 非 LNP 递送载体，成功实现带状疱疹疫苗长达近一年的细胞免疫。以第一/通讯作者在 Biomaterials, Molecular Pharmaceutics 等发表 SCI 文章 8 篇，申请专利 8 项（授权 2 项，其中 1 项美国专利，1 项香港专利，PCT 1 项）。在益杰立科（上海）生物科技有限公司工作期间开发我国首项常见病在体基因编辑治疗策略，已获得 IIT 临床研究许可（国科遗办审字(2024)GH0640 号）

报告人/墙报展示人是否为学生：否

功能化囊泡疫苗及仿生递药系统

刘超

厦门大学

福建省厦门市翔安区厦门大学翔安校区庄瑾楼

liuchao66888@xmu.edu.cn

肿瘤精准治疗研究前沿的免疫疗法和靶向疗法发展迅速。但总体而言，依旧只有小部分患者从中受益。当前疫苗有限的抗原递呈效率及免疫活化能力，及肿瘤抑制性微环境的存在极大程度限制了药物的有效递送，抑制了抗肿瘤应答的有效激活。本团队受细胞膜作为天然的细胞信号交互介质的启发，以细胞膜定向展示技术为核心，构建了功能化仿生囊泡药物平台。通过抗体、配体、受体、抗原、生物酶，及各种天然功能蛋白元件的展示，系统揭示了其在肿瘤免疫治疗与靶向治疗方面的生物活性及作用规律。围绕抗肿瘤治疗关键科学问题及实际需求：如何进行免疫共刺激分子递送介导多层次活化信号网络转导，提高肿瘤抗原递呈及免疫活化效率；如何进行复杂结构蛋白展示，建立高效的联合治疗融合策略实现多形式疗法协同；如何实现空间构象依赖的天然大蛋白递送，靶向调控肿瘤微环境克服顽固性耐受机制，设计开发了免疫共刺激囊泡疫苗、免疫与靶向联合增效囊泡载体、微环境靶向调控囊泡载体等。

仿生中空多壳层结构人造细胞的设计及生物应用

赵德偲[1]，王丹[1,*]

[1]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: danwang@ipe.ac.cn

通过模拟各种自然生化反应构建人造细胞是研究细胞的有效方法。然而，在合成化学领域，实现在结构和功能上与天然细胞类似的人造细胞是一项艰巨的任务。中空多壳结构(HoMS)是一种由纳米颗粒组装而成的新型多功能结构材料，由于其独特的时空有序特性而受到广泛关注[1]。本课题组开发了一种普适可控的HoMS合成新方法——次序模板法(STA)，并揭示了这一方法的“浓度波”物理本质[2]，使理解、预测和控制壳的形成过程成为可能。中空多壳层结构具有多壳层隔室结构、可修饰的空腔与表面，以及独特的时空顺序性，这些天然的类细胞特性使得HoMS在生物医药领域表现出广阔的应用前景。因此，我们报告了一种具有中空多壳层结构的人造细胞骨架，并实现了对细胞的结构模拟、性质模拟与功能模拟。通过对HoMS的功能成分和中空腔体进行修饰，使其能够对外部微环境做出响应，实现药物的可控释放与最佳药物浓度维持[3-4]；利用HoMS腔体构建内部微环境，延长载体的胃肠道滞留时间，提高口服药物的生物利用度。此外，通过天然细胞膜或磷脂分子对其表面进行修饰，可赋予人造细胞选择透过性与长期稳定性，利用级联催化反应介导的人造细胞信息交流，实现生化分子的高效检测和生物活性物质的持续生成[5]。这种具有类细胞特征的中空多壳结构，为下一代响应性药物递送系统与人造细胞的发展提供了新策略[6]。

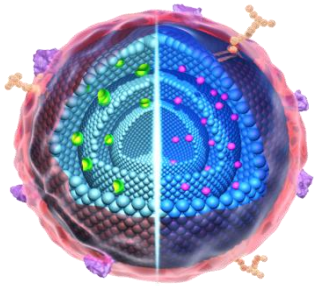


Fig. 1 Artificial cells with hollow multishelled structure.

关键词：中空多壳层结构；药物递送；人造细胞；纳微材料

参考文献

[1] J. Wang, J. Wan, N. Yang, et al, Hollow multishell structures exercise temporal–spatial ordering and dynamic smart behavior. *Nat. Rev. Chem.* **2020**, **4**:159.

[2] Y. Wei., Y. Cheng, D. Zhao, et al, A Universal Formation Mechanism of Hollow Multi-Shelled Structures Dominated by Concentration Waves. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, **62**: e202302621.

[3] D. Zhao, N. Yang, Y. Wei, et al. Sequential drug release via chemical diffusion and physical barriers enabled by hollow multishelled structures. *Nat Commun*, **2020**, **11**: 4450.

[4] D. Zhao, Wei. Y., Jin. Q., et al. PEG-Functionalized Hollow Multishelled Structures with On-Off Switch and Rate-Regulation for Controllable Antimicrobial Release. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, **61**: e202206807.

[5] J. Xiong, L. Shang, D. Zhao, D. Wang, Bio-inspired enzyme-immobilized nanoreactors with cascade catalytic reaction for accurate detection of cholesterol. *Sci. China. Mater.*, **2024**, *67*: 2340.

[6] D. Zhao, Y. Wei, J. Xiong, et al. Response and Regulation of the Microenvironment Based on Hollow Structured Drug Delivery Systems. *Adv. Funct. Mater.*, **2023**, **31**: 2300681.

新型仿生纳米药物用于三阴性乳腺癌脑转移的治疗

彭海豹 [1, *]

[1] 复旦大学，上海市杨浦区邯郸路 220 号，200433

*Email: hbpeng@fudan.edu.cn

摘要正文：

三阴性乳腺癌脑转移是最常见的中枢神经系统恶性肿瘤之一，因缺乏有效的治疗靶点，患者预后较差。血脑屏障严格限制药物进入脑部，导致药物在脑内的浓度难以达到治疗水平。近年来，具有长循环能力的仿生纳米药物逐渐应用于药物输送系统，显示出显著的临床应用潜力。红细胞膜和外泌体因其抗蛋白吸附特性，被用于修饰纳米药物，从而增强其长循环性能。此外，纳米药物通过诱导铁死亡能够克服肿瘤耐药性，提升化疗效果。此类新型仿生纳米药物可高效穿透血脑屏障，靶向三阴性乳腺癌脑转移，调控肿瘤微环境中的智能控释机制，并通过诱导铁死亡克服耐药性，为三阴性乳腺癌脑转移的临床治疗提供了新思路和新策略。

关键词：脑转移；生物仿生；纳米药物

参考文献

[1] Jiang XJ, Stockwell BR, Conrad M. Ferroptosis: mechanisms, biology and role in disease. Nat. Rev. Mol. Cell Biol. 2021, 22(4): 266-282.

[2] Peng, H. B.; Zhang, X. C.; Yang, P.; Zhao, J. X.; Zhang, W.; Feng, N. P.; Yang, W. L.; Tang, J. Defect self-assembly of metal-organic framework triggers ferroptosis to overcome resistance. Bioact Mater 2023, 19, 1.

报告人/墙报展示人简介：

彭海豹，复旦大学脑科学转化研究院副研究员。2017 年博士毕业于复旦大学高分子化学与物理专业。目前研究主要聚焦于脑靶向生物材料、中枢神经系统药物递送、环境响应性功能材料以及仿生纳米医学领域。迄今为止,在 Advanced Materials, Bioactive Materials, Exploration, Nature Cancer, Advanced Healthcare Materials, Journal of Nanobiotechnology, ACS Applied Materials & Interfaces ,J. Control. Release, Biomaterials, Small 等 SCI 期刊上发表论文 20 余篇，其中以第一作者或共同通讯作者身份发表 11 篇，包含 2 篇 ESI 高被引论文及 1 篇封面文章，并已获授权发明专利 1 项。入选上海市高等教育人才项目，主持或参与多项聚合物分子工程国家重点实验室开放课题、国家自然科学基金等项目。目前担任 Nano TransMed、Exploration 和 VIEW 杂志的青年编委。

报告人/墙报展示人是否为学生：不是学生

Neutrophils hitchhiking Nanoparticles boosting bacteria-mediated tumor therapy via NETosis reprogramming

Yue Guo, Yuzhen Zhao, Mingge Li, Wenyan Yu*, Jinjin Shi*and Zhenzhong Zhang*

School of Pharmaceutical Sciences, Key Laboratory of Targeting Therapy and Diagnosis for Critical Diseases, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001,

E-mail:gyhaohaoxuexi@163.com

Abstract: Bacteria have shown great potential in anti-tumor treatment, and an attenuated strain of Salmonella named VNP20009 has been shown to be safe in clinical trials. However, colonized bacteria recruit neutrophils into the tumor, which release NETs to capture and eliminate bacteria, compromising bacterial-based tumor treatment. In this study, we report a neutrophil hitchhiking nanoparticles (SPPS) that block the formation of NET to enhance bacteria-mediated tumor therapy. In the 4 T1 tumor-bearing mouse model, following 24 h of bacterial therapy, there was an approximately 3.0-fold increase in the number of neutrophils in the bloodstream, while the amount of SPPS homing to tumor tissue through neutrophil hitchhiking increased approximately 2.0-fold. It is worth noting that the NETs in tumors significantly decreased by approximately 2.0-fold through an intracellular ROS scavenging-mediated NETosis reprogramming, thereby increasing bacterial vitality by 1.9-fold in tumors. More importantly, the gene drug (siBcl-2) loaded in SPPS can be re-encapsulated in apoptotic bodies by reprogramming neutrophils from NETosis to apoptosis, and enable the redelivery of drugs to tumor cells, further boosting the antitumor efficacy with a synergistic effect, resulting in about 98% tumor inhibition rate and 90% survival rate.

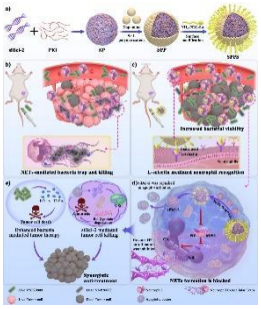


Fig 1. Schematic illustration showing the neutrophils hitchhiking nanoparticle boosting bacteria-mediated tumor therapy via NETosis reprogramming

Keywords: Neutrophils hitchhiking, Neutrophil extracellular traps, Neutrophil reprogramming bacteria-mediated tumor therapy , Drug delivery

References

[1] Y. Liu, L. Niu, N. Li, Y. Wang, M. Liu, X. Su, X. Bao, B. Yin, S. Shen, Bacterial-Mediated Tumor Therapy: Old Treatment in a New Context, Adv Sci (Weinh), 10 (2023) e2205641.

[2] J. Chen, Y. Qiao, B. Tang, G. Chen, X. Liu, B. Yang, J. Wei, X. Zhang, X. Cheng, P. Du, W. Jiang, Q. Hu, Z.-C. Hua, Modulation of Salmonella Tumor-Colonization and Intratumoral Anti-angiogenesis by Triptolide and Its Mechanism, Theranostics, 7 (2017) 2250-2260.

[3] X. Lou, Z. Chen, Z. He, M. Sun, J. Sun, Bacteria-Mediated Synergistic Cancer Therapy: Small Microbiome Has a Big Hope, Nano-micro Letters, 13 (2021) 37.

[4] L. Zitvogel, R. Daillère, M.P. Roberti, B. Routy, G. Kroemer, Anticancer effects of the microbiome and its products, Nat Rev Microbiol, 15 (2017) 465-478.

报告人/墙报展示人简介

郭悦，现就读于郑州大学药学院硕士二年级，导师为张振中教授，硕士期间研究的方向为基于细胞仿生的药物递送系统研究。连续两年获得研究生一等奖学金，参与发表 SCI 论文两篇。

附：报告人为学生。

MOFs-based nanoagent enables dual mitochondrial damage in synergistic antitumor therapy via oxidative stress and calcium overload

Weier Bao[1], Guanghui Ma[2,*], Wei Wei[2,*], Zhiyuan Tian[1,*]

[1] School of Chemical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, P. R. China.

[2] State Key Laboratory of Biochemical Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China.

*baoweier@ucas.ac.cn

Targeting subcellular organelle with multilevel damage has shown great promise for antitumor therapy. Here, we report a core-shell type of nanoagent with iron (III) carboxylate metal-organic frameworks (MOFs) as shell while upconversion nanoparticles (UCNPs) as core, which enables near infrared (NIR) light-triggered synergistically reinforced oxidative stress and calcium overload to mitochondria. The folate decoration on MOFs shells enables efficient cellular uptake of nanoagents. Based on the upconversion ability of UCNPs, NIR light mediates Fe^{3+}-to-Fe^{2+} reduction and simultaneously activates the photoacid generator (pHP) encapsulated in MOFs cavities, which enables release of free Fe^{2+} and acidification of intracellular microenvironment, respectively. The overexpressed H_2O_2 in mitochondria, highly reactive Fe^{2+} and acidic milieu synergistically reinforce Fenton reactions for producing lethal hydroxyl radicals (•OH) while plasma photoacidification inducing calcium influx, leading to mitochondria calcium overload. The dual-mitochondria-damage-based therapeutic potency of the nanoagent has been unequivocally confirmed in cell- and patient-derived tumor xenograft models in vivo.

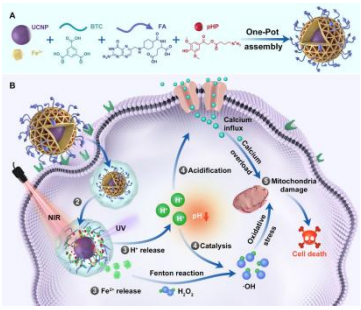


Fig. 1 Schematic Illustration of the construction of FMUP nanoagent and the underlying anticancer mechanism.

Keywords: MOFs, mitochondrial, photoacidification, UCNP, anticancer.

References

[32] W. Bao, M. Liu, J. Meng, S. Liu, S. Wang, R. Jia, Y. Wang, G. Ma, W. Wei, Z. Tian, MOFs-based Nanoagent Enables Dual Mitochondrial Damage in Synergistic Antitumor Therapy via Oxidative Stress and Calcium Overload, Nat. Commun. 2021, 12, 6399.

报告人/墙报展示人简介：

鲍威尔，中国科学院大学与中国科学院过程工程研究所联合博士后，聚焦于光控式抗肿瘤创新剂型的研究，基于多种光学活性材料（如上转换纳米颗粒、光热聚合物、光敏小分子）开发出多种新型抗肿瘤制剂，在光控剂型构建、肿瘤化学动力学治疗、肿瘤免疫治疗等领域积累了较丰富的理论知识和实践经验。目前已发表 SCI 论文 27 篇，包括 *Nature Biotechnology*、*Nature Communications*、*Science Advances*、*Advanced Materials* 等，其中以第一作者或共同第一作者发表 6 篇，包括 *Nature Communications* 2 篇、*Science Advances* 1 篇、*ACS Nano* 1 篇、*Sensors and Actuators: B. Chemical* 1 篇和 *Biomaterials Science* 1 篇；主持中国博士后科学基金面上项目 1 项、中国博士后基金特别资助项目 1 项；获得国家资助博士后研究人员计划 C 档；获得“中国科学院院长优秀奖”1 次。

附：墙报展示人为非学生

Surface topography of particles modulates macrophage phagocytosis induced by particle-cell interface interactions

Cui Song[1,2#], **Xiao Zhang**[1,2#], Guanghui Ma[1,2,3*], Wei Wei[1,2,3*]

[1]State Key Laboratory of Biochemical Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, 1 North 2nd Street, Zhongguancun, Haidian District, Beijing 100190, PR China

[2]Key Laboratory of Biopharmaceutical Preparation and Delivery, Chinese Academy of Sciences

[3]School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, No.19A Yuquan Road, Shijingshan District, Beijing 100049, PR China

*weiwei@ipe.ac.cn; ghma@ipe.ac.cn

Background and purpose

Many biological objects in nature have their special surface topographies which may affect their functions when encounter the macrophages. Although extensive studies have focused on the role of particle size and shape in cellular phagocytosis, the effects of surface topography itself and the underlying mechanisms remain poorly understood.

Methods

The effects of surface topography on phagocytosis are investigated using biocompatible poly(lactic-co-glycolic acid) particles with distinct surface features: Smooth, Convex, and Concave. The detailed mechanism is revealed by the combination of theoretical model, molecular dynamics simulations, and experimental verification.

Results and conclusions

Remarkably, macrophages display varying phagocytosis efficiencies, with Convex particles being readily internalized, while Concave particles exhibit significantly reduced uptake, irrespective of size, charge, or material composition. Mechanical tests and molecular dynamics simulations support that convex topography exerts the strongest influence on particle-cell interface forces and their inclination for phagocytosis, whereas concave topography has the least impact on such interactions. Effective phagocytosis requires the creation of a phagocytic cup through the extension of filopodia, which subsequently close around the particles. Our results suggest a mechanism that differential stimulation of integrin $\alpha_M\beta_2$ induced by particle-cell interface interactions can affect the myosin-II related signaling pathway to close the phagocytic cups. Our findings reveal the role of surface topography in modulating phagocytosis through interactions with surface integrins and integrin-mediated signaling.

Keywords: Surface topography, Macrophage phagocytosis, Phagocytic cup, Microscopic mechanism

卵清蛋白修饰的纳米颗粒通过肿瘤微环境中的酸反应增加肿瘤部位的积累

曹孟唸[1]，刘军杰[1,*]

[1]郑州大学药学院，河南郑州，450001

*E-mail:liujunjie@zzu.edu.cn

卵清蛋白是一种可以显着增加 T 细胞浸润的典型抗原。然而，致密的肿瘤组织限制了载有卵清蛋白的纳米颗粒到达有肿瘤深层。葡萄糖氧化酶(Gox）响应肿瘤酸性环境，消耗葡萄糖并在肿瘤原位转化为有毒的过氧化氢。在这里，我们设计了一个由 pH 智能驱动的自组装纳米平台(Gox@ZIF-OVA)。这种纳米系统克服深层肿瘤组织的障碍，高效累积在肿瘤部位，释放过氧化氢杀死肿瘤细胞。有可能解决实体瘤中肿瘤深度和药物蓄积的局限性。

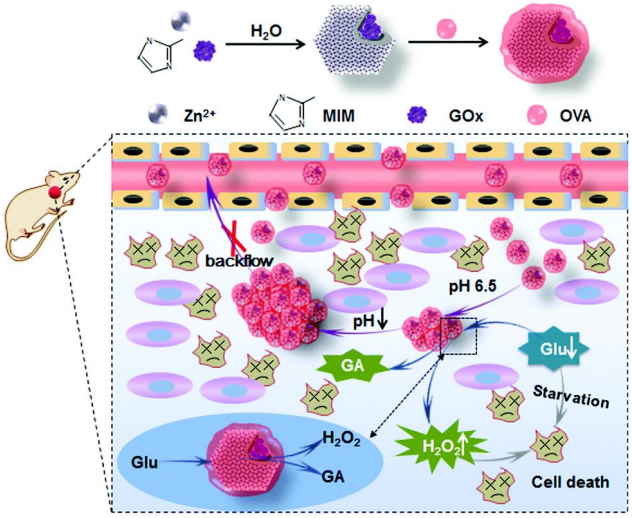


Figure 1.Schematic diagram showing GOx@ZIF-OVA

关键词：葡萄糖氧化酶；沸石咪唑骨架；智能驱动的纳米平台；饥饿疗法

参考文献：

[1] Q. Hu , W. Sun , Y. Lu , H. N. Bomba , Y. Q. Ye , T. Y. Jiang , A. J. Isaacson and Z. Gu , Tumor Microenvironment-Mediated Construction and Deconstruction of Extracellular Drug-Delivery Depots, *Nano Lett.*, 2016, 16 , 1118 —1126

[2] A. I. Minchinton and I. F. Tannoc , Drug penetration in solid tumours, *Nat. Rev. Cancer*, 2006, 6 , 583 —592

[3] W. Tang , W. P. Fan , Z. T. Wang , W. Z. Zhang , S. Y. Zhou , Junction opener protein increases nanoparticle accumulation in solid tumors, *ACS Nano*, 2018, 12 , 12269 —12283

墙报展示人简介：

姓名：曹孟唸

学历：郑州大学药学院研究生

专业：药学

附：请在此处注明墙报展示人是否为学生：是

Generation of whole tumor cell vaccine for on-demand manipulation of immune responses against cancer under near-infrared laser irradiation

Jiaqi Meng[1], Guanghui Ma[1,*], Wei Wei[1,*]

[1] Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China.

Email: jqmeng@ipe.ac.cn

Although whole tumor cell vaccines (TCVs) have shown attractive advantages in containing a pool of all potential antigens in personalized antitumor immunotherapies, these formulations require multiple injections and often fail to achieve the desired immune responses in individual patients. That is, the potency of current TCVs is modest, and clinicians cannot rely on consistent therapeutic benefits.

Here, we introduced photothermal nanoparticles into tumor cells and constructed a new type of TCV. During the fabrication process, mild photothermal heating by near-infrared (NIR) laser irradiation induced tumor cells to produce heat shock proteins as endogenous adjuvants. After a single vaccination, non-invasive NIR laser irradiation further induced local mild hyperthermia, which promoted the recruitment, activation and presentation of dendritic cells. Notably, according to the new indicator proposed for monitoring the fluctuation of tumor growth rate, we rationally created the irradiation regimen, including the irradiation intervals and times. Such a new vaccination modality enabled on-demand NIR manipulation of immune response, and the potent therapeutic efficacies were systematically demonstrated across multiple cell-derived tumor xenograft (CDX) that mimicked a range of clinical requirements, and, most notably, a sophisticated model based on humanized mouse and patient-derived tumor xenograft.

Keywords: whole tumor cell vaccine, immunotherapy, on-demand NIR manipulation, antitumor

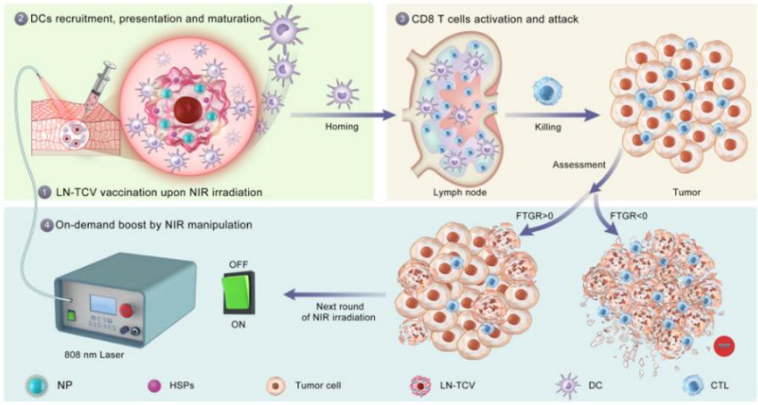


Figure 1 Strategy of using LN-TCV for on-demand NIR manipulation of immune responses against cancer.

References

[33] J. Meng#, Y. Lv#, W. Bao#, Z. Meng, S. Wang, Y. Wu, S. Li, Z. Jiao, Z. Tian, G. Ma, W. Wei. Generation of whole tumor cell vaccine for on-demand manipulation of immune responses against cancer under near-infrared laser irradiation. Nat. Commun. 2023, 14, 4505.

报告人/墙报展示人简介：

孟佳琦，中国科学院过程工程研究所博士后，聚焦于光学活性纳米制剂的构建及其在肿瘤免疫治疗方面的应用研究，开发出多种基于光功能材料的新型肿瘤治疗性疫苗，在仿生剂型构建、肿瘤免疫治疗等领域积累了较丰富的理论知识和实践经验。目前已在 *Nature communications*、*Advanced materials*、*Small*、*Nano Research* 等期刊共发表 SCI 论文 13 篇。同时，申请国家发明专利 1 项，此外，参与了包括国家自然科学面上基金在内的项目基金 2 项。

附：墙报展示人为非学生

Selenized neural stem cell-derived exosomes: a neotype therapeutic agent for traumatic injuries of the central nervous system

Wenjing Wang, Guanghui Ma*, Wei Wei*

State Key Laboratory of Biochemical Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing, P. R. China, 100190

* weiwei@ipe.ac.cn; ghma@ipe.ac.cn;

Traumatic injuries to the central nervous system (CNS), including traumatic brain injury (TBI) and spinal cord injury (SCI), often have devastating consequences and are the leading causes of long-term disability across all age groups [1]. 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, significantly reducing cerebral lesions in a murine traumatic brain injury model. Even extending to a murine spinal cord injury model, we also observed the effective promotion of locomotory recovery, 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

References

[34]GBD 2016 Traumatic Brain Injury and Spinal Cord Injury Collaborators. The Lancet. Neurology 2019, 18: 459.

报告人/墙报展示人简介：

王文婧，吉林大学 2019 级博士，中国科学院过程工程研究所，马光辉院士、魏炜研究员团队博士后。研究方向为仿生纳米颗粒的构建及其在生物医药领域的应用。在 Cell Host & Microbe, Advanced healthcare materials, ACS applied materials & interfaces 等期刊发表文章 15 篇，授权专利 3 项，主持国家自然科学基金青年科学基金项目、中国博士后面上项目、广东省基础与应用基础研究青年基金项目。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生： 博士后，助理研究员

Lysosomal “TRAP”: a neotype modality for clearance of viruses and variants

Chengliang Lyu[1], Wei Wei[1*], Guanaghui Ma[1*]

[1] Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190

* Email: lvchengliang@ipe.ac.cn

The binding of viruses to host-entry factor receptors is an essential step for viral infection. Many studies have shown that macrophages can internalize viruses and degrade them in lysosomes for clearance *in vivo*. Inspired by these natural behaviors and using SARS-CoV-2 as a testbed, we harvested lysosomes from activated macrophages and anchored the protein-receptor ACE2 as bait, thus constructing a lysosomal "TRAP" (lysoTRAP) that selectively captured, internalized, and eventually degraded SARS-CoV-2. Through experiments with cells, mice, hamsters, and human lung organoids, we demonstrated that lysoTRAP effectively cleared SARS-CoV-2. Importantly, unlike therapeutic agents targeting SARS-CoV-2 spike protein, lysoTRAP remained effective against nine pseudotyped variants and the authentic Omicron variant, demonstrating its resistance to SARS-CoV-2 mutations. In addition to the protein-receptor ACE2, we also extended lysoTRAP with the saccharide-receptor sialic acid and verified its excellent antiviral effect against H1N1, highlighting the flexibility of our “TRAP” platform in fighting against various viruses [1].

Keywords: SARS-CoV-2; ACE2; lysosome; trap; influenza A.

References

[1] C. Lyu, Z. He, X. Hu, S. Wang, M. Qin, L. Zhu, Y. Li, F. Yang, Z. Jiao, X. Zhang, G. Lu, E. Wang, Y. Hu, Y. Zhai, Y. Wang, W. Huang, D. Wang, Y. Cui, X. Pang, X. Liu, H. Kamiya, G. Ma, W. Wei, Lysosomal “TRAP”: a neotype modality for clearance of viruses and variants, Nature Communications (submission).

报告人/墙报展示人简介：

报告人/墙报展示人吕程亮，毕业于东京农工大学，现就职于中国科学院过程工程研究所，任助理研究员。研究方向为基于天然生物材料的仿生微纳米颗粒的构建及其在疾病治疗中的应用。以第一作者或共同作者在 ***Science Advances***（IF：13.6）和 ***Chemical Engineering Journal***（IF：15.1）期刊发表文章两篇；一篇作为共同第一作者的溶酶体“陷阱”新冠病毒清除制剂方面的文章已提交 ***Nature Communications***。

报告人/墙报展示人是否为学生：

报告人/墙报展示人吕程亮现就职于中国科学院过程工程研究所，任助理研究员。

自驱动电响应微针给药系统的研究

杨圆，魏炜*，马光辉*

中国科学院过程工程研究所，北京，100190

Email: yangyuan@ipe.ac.cn

摘要正文：微针给药是一种无痛微创的经皮给药方式，能够刺破皮肤屏障角质层，将药物直接递送于表皮层或真皮层。通过光、电、热、磁、力等外源性刺激调控材料理化性质或材料与药物的相互作用，可以准确地控制药物释放，而且外源性刺激还可能发挥其生物学效应增强药物的治疗效果。在本文中，结合新型自驱动技术，通过将机械能转化为电能，开发了一种由纳米发电机作为刺激源的自驱动电响应微针给药系统，系统地研究了自驱动电刺激对药物释放速率以及药效的影响。基于聚吡咯导电微针和纳米发电机的自驱动电响应微针控释系统可以实现药物的可控释放，其中纳米发电机可以将机械能转化为电能，只有拍打和弯曲器件时，微针响应电刺激才会释放药物。进一步研究发现自驱动电刺激微针给药系统可以提升表皮生长因子（EGF）药效， 电刺激（ES）可以减少了谷胱甘肽（GSH）对EGF的还原作用，更好地维持了EGF的稳定性。细胞和动物实验结果显示在ES作用下EGF受体（EGFR）表达增加，成功逆转了长时间EGF刺激，EGFR脱敏的现象，可以有效地提高EGF药效。本研究提供了一种按需释药的经皮给药方法，为优化药物药效学开辟了新的途径，更为传统药物的联合治疗模式提供了全新的思路与策略。

关键词：高分子微针，电刺激，按需给药，增强药效。

参考文献

[1] Y. Yang, R. Z. Luo, S.Y. Chao, et al. Improved pharmacodynamics of epidermal growth factor via microneedles-based self-powered transcutaneous electrical stimulation. Nature Communications. 2022, 13, 6908.

[2] Y. Yang, L. L. Xu, D. J. Jiang, et al. Self-powered controllable transdermal drug delivery system. Advanced Functional Materials. 2021, 36, 2104092.

报告人/墙报展示人简介：

杨圆，中国科学院过程工程研究所助理研究员，聚焦于新型经皮药物递送系统的研究。结合临床疾病治疗的需要，调节微针高分子基质材料的性能，优化微针的结构设计以及药物的装载方式，构建了多种微针释药体系。在生物材料、微针结构设计和制备、肿瘤治疗、组织再生和修复等领域积累了较丰富的理论知识和实践经验。目前已在 Nature Communications、Advanced Functional Materials、Small Methods、ACS Applied Materials & Interfaces 等期刊共发表 SCI 论文 14 篇；获得国家自然科学基金会青年基金、博士后创新人才支持计划、中国博士后科学基金面上项目、中国科学院特别研究助理项目资助。

附：墙报展示人非学生

NAD^+-多酚超小智能纳米颗粒抵抗急性肾损伤及其慢性化

孔颖[1]，付艺[2,*]，刘宏[1,*]

[1]山东大学晶体材料国家重点实验室，山东省济南市历城区山大南路 27 号，250100

[2]山东第一医科大学（山东省医学科学院），山东省济南市槐荫区青岛路 6699 号，250117

*Email: kongying0623@163.com

摘要正文：肾脏具有异质性、复杂性和独特的生理结构，使得大多数抗氧化和抗炎小分子药物由于副作用和缺乏肾脏靶向而无效。急性肾损伤和慢性肾病与代谢中枢分子——NAD^+（烟酰胺腺嘌呤二核苷酸）的耗竭密切相关，但是由于它稳定性差、跨膜运输困难，难以成为肾脏疾病的治疗药物。针对以上问题，研究团队将多酚和NAD^+结合并利用金属-多酚配位自组装，设计了一种尺寸仅为3.65 nm的pH响应型纳米颗粒，该纳米颗粒能够跨越肾小球滤过屏障抵达受损的肾小管细胞，并在急性炎症引起的酸性微环境中智能响应分解，释放NAD^+和多酚，发挥修复线粒体和抗炎功能。研究团队在动物实验中证实，静脉给药30分钟内，纳米药物在肾脏富集效果显著，将损伤肾脏的NAD^+水平提高了2倍，在24小时内恢复急性肾损伤小鼠的肾功能，并且在2周内明显缓解肾脏纤维化，对急性肾损伤和慢性肾病均表现出优异的治疗效果。另外，该纳米颗粒能够稳定储存1年以上，而在动物体内24小时即可观察到在肾脏中快速降解，相比于不可降解颗粒引起纤维化的副作用，该纳米颗粒避免了潜在纤维化风险。病理学分析和生化指标表明纳米颗粒对小鼠无毒性，因此具有长期应用安全性、实用性和优异的临床转化潜力。

关键词：智能纳米颗粒；烟酰胺腺嘌呤二核苷酸；急性肾损伤；慢性肾病

参考文献

[1] Ying Kong, Hong Liu*, Yi Fu*, et al. Ultrasmall Polyphenol-NAD+ Nanoparticle-Mediated Renal Delivery for Mitochondrial Repair and Anti-inflammatory Treatment of AKI-to-CKD Progression. Adv. Mater. DOI: 10.1002/adma.202310731

报告人/墙报展示人简介：

孔颖博士，2022 年 6 月获授山东大学工学博士学位，导师为刘宏教授，主要研究方向是生物材料、组织工程和细胞治疗等相关的医工交叉研究。2022 年 7 月进入中国科学院过程工程研究所博士后流动站，师从中国科学院过程工程研究所马光辉院士和魏炜研究员，从事工程化改造细胞治疗骨质疏松等衰老相关疾病的研究工作。自入站以来，获得国家自然科学基金青年项目资助、中国博士后科学基金会第 8 批博士后创新人才支持计划和中国博士后科学基金第 72 批面上资助。目前，以第一作者及共同第一作者身份在 Chem. Soc. Rev.、Adv. Mater.、Adv. Sci.、Small 和 Nano Res.上发表论文 5 篇，并在 J. Am. Chem. Soc.、Nano Lett.和 Adv. Healthcare Mater.等期刊上合作发表论文 15 篇，总被引次数为 1313 次（谷歌学术），合作申请发明专利 5 项并获得授权。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

Gene-Engineered S. oneidensis MR-1 for In Situ Hirudin Production and Modulation of Lactate Catabolism to Combat Atherosclerosis

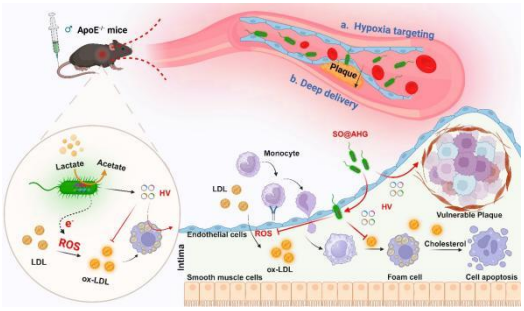
WeiYi Cheng[1], Li He[1], WeiYe Ren[1], JingQuan Chen[1], Dandan Bao[2,*], Ji-Gang Piao[1,*]

[1] School of Pharmaceutical Sciences, Zhejiang Chinese Medical University, Hangzhou, 310053, China.

[2] Department of Dermatology & Cosmetology, The First Affiliated Hospital of Zhejiang Chinese Medical University , Hangzhou 310006, China

* baodandan1990@163.com, jgpiao@zcmu.edu.cn

19857169647，cwy9999@foxmail.com



Scheme. Targeting System of Plaque Macrophages SO@AHG and its Regulation on the Plaque Microenvironment

Abstract:

Atherosclerotic plaques are situated in the arterial intima. The rapid blood flow and high shear stress impede the adhesion of drug carriers to endothelial cells and their accumulation in plaques. Therefore, ensuring effective drug delivery and optimal accumulation within plaques is essential. The discovery of bacteria within atherosclerotic plaques and the rapid progress in bacterial therapies have sparked interest in utilizing bacteria as potential therapeutic agents for atherosclerosis. In this study, we developed a genetically engineered anaerobic bacterium, Shewanella oneidensis MR-1, incorporating a plasmid encoding the hirudin gene and green fluorescent protein (GFP). This system retains the targeting ability of S. oneidensis MR-1 to hypoxic regions and selectively triggers the release of hirudin under acidic conditions, leading to drug accumulation at the plaque site. By modulating foam cell metabolism and dissolving thrombi within damaged plaques, it effectively inhibits the progression of atherosclerosis. Our findings demonstrate that SO@AHG serves as an innovative and precise treatment modality for atherosclerosis, paving the way for bacterial-targeted therapy in cardiovascular disease.

Keywords:

Atherosclerosis, engineered bacteria, hirudin, lesional macrophages, lactate catabolism

References

1. Raggi P, Genest J, Giles JT, Rayner KJ, Dwivedi G, Beanlands RS, Gupta M: Role of inflammation in the pathogenesis of atherosclerosis and therapeutic interventions. *Atherosclerosis* 2018, 276:98-108.
2. Herrington W, Lacey B, Sherliker P, Armitage J, Lewington S: Epidemiology of Atherosclerosis and the Potential to Reduce the Global Burden of Atherothrombotic Disease. *Circulation Research* 2016, 118:535-546.
3. Sethi A, Malhotra G, Singh S, Singh PP, Khosla S: Efficacy of Various Percutaneous Interventions for In-Stent Restenosis. *Circulation: Cardiovascular Interventions* 2015, 8.
4. Turner RM, Pirmohamed M: Statin-Related Myotoxicity: A Comprehensive Review of Pharmacokinetic, Pharmacogenomic and Muscle Components. *Journal of Clinical Medicine* 2019, 9.
5. Lindskog Jonsson A, Hållenius FF, Akrami R, Johansson E, Wester P, Arnerlöv C, Bäckhed F, Bergström G: Bacterial profile in human atherosclerotic plaques. *Atherosclerosis* 2017, 263:177-183.
6. Sneck M, Nguyen SD, Pihlajamaa T, Yohannes G, Riekkola M-L, Milne R, Kovanen PT, Öörni K: Conformational changes of apoB-100 in SMase-modified LDL mediate formation of large aggregates at acidic pH. *Journal of Lipid Research* 2012, 53:1832-1839.
7. Oorni K, Rajamaki K, Nguyen SD, Lahdesmaki K, Plihtari R, Lee-Rueckert M, Kovanen PT: Acidification of the intimal fluid: the perfect storm for atherogenesis. *J Lipid Res* 2015, 56:203-214.
8. Pucino V, Certo M, Bulusu V, Cucchi D, Goldmann K, Pontarini E, Haas R, Smith J, Headland SE, Blighe K, et al: Lactate Buildup at the Site of Chronic Inflammation Promotes Disease by Inducing CD4 T Cell Metabolic Rewiring. *Cell Metabolism* 2019, 30:1055-+.
9. Certo M, Tsai CH, Pucino V, Ho PC, Mauro C: Lactate modulation of immune responses in inflammatory versus tumour microenvironments. *Nat Rev Immunol* 2021, 21:151-161.
10. Ye L, Jiang Y, Zhang MM: Crosstalk between glucose metabolism, lactate production and immune response modulation. *Cytokine & Growth Factor Reviews* 2022, 68:81-92.
11. Certo M, Llibre A, Lee W, Mauro C: Understanding lactate sensing and signalling. *Trends Endocrinol Metab* 2022, 33:722-735.
12. Zheng P, Fan M, Liu H, Zhang Y, Dai X, Li H, Zhou X, Hu S, Yang X, Jin Y, et al: Self-Propelled and Near-Infrared-Phototaxic Photosynthetic Bacteria as Photothermal Agents for Hypoxia-Targeted Cancer Therapy. *ACS Nano* 2021, 15:1100-1110.
13. He T, Wang L, Gou S, Lu L, Liu G, Wang K, Yang Y, Duan Q, Geng W, Zhao P, et al: Enhanced Immunogenic Cell Death and Antigen Presentation via Engineered Bifidobacterium bifidum to Boost Chemo-immunotherapy. *ACS Nano* 2023, 17:9953-9971.
14. Chen W, Wang Y, Qin M, Zhang X, Zhang Z, Sun X, Gu Z: Bacteria-Driven Hypoxia Targeting for Combined Biotherapy and Photothermal Therapy. *ACS Nano* 2018, 12:5995-6005.
15. Wang JW, Chen QW, Luo GF, Han ZY, Song WF, Yang J, Chen WH, Zhang XZ: A Self-Driven Bioreactor Based on Bacterium-Metal-Organic Framework Biohybrids for Boosting Chemotherapy via Cyclic Lactate Catabolism. *ACS Nano* 2021, 15:17870-17884.
16. Gao M, Tang M, Ho W, Teng Y, Chen Q, Bu L, Xu X, Zhang XQ: Modulating Plaque Inflammation via Targeted mRNA Nanoparticles for the Treatment of Atherosclerosis. *ACS Nano* 2023, 17:17721-17739.
17. Beldman TJ, Senders ML, Alaarg A, Perez-Medina C, Tang J, Zhao Y, Fay F, Deichmoller J, Born B, Desclos E, et al: Hyaluronan Nanoparticles Selectively Target Plaque-Associated Macrophages and Improve Plaque Stability in Atherosclerosis. *ACS Nano* 2017, 11:5785-5799.
18. Kim H, Kumar S, Kang DW, Jo H, Park JH: Affinity-Driven Design of Cargo-Switching Nanoparticles to Leverage a Cholesterol-Rich Microenvironment for Atherosclerosis Therapy. *ACS Nano* 2020, 14:6519-6531.
19. Sandesara PB, Virani SS, Fazio S, Shapiro MD: The Forgotten Lipids: Triglycerides, Remnant Cholesterol, and Atherosclerotic

Cardiovascular Disease Risk. *Endocr Rev* 2019, 40:537-557.

20. Michos ED, McEvoy JW, Blumenthal RS: Lipid Management for the Prevention of Atherosclerotic Cardiovascular Disease. *N Engl J Med* 2019, 381:1557-1567.
21. Greinacher A, Warkentin TE: The direct thrombin inhibitor hirudin. *Thrombosis and Haemostasis* 2008, 99:819-829.
22. Yang Z, Zhu Y, Dong Z, Hao Y, Wang C, Li Q, Wu Y, Feng L, Liu Z: Engineering bioluminescent bacteria to boost photodynamic therapy and systemic anti-tumor immunity for synergistic cancer treatment. *Biomaterials* 2022, 281:121332.
23. Cao ZP, Liu JY: Bacteria and bacterial derivatives as drug carriers for cancer therapy. *Journal of Controlled Release* 2020, 326:396-407.
24. Cheng W, He L, Ren W, Yue T, Xie X, Sun J, Chen X, Wu Z, Li F, Piao J-G: Bacteria-nanodrug cancer treatment system: The combination of dual swords and the confrontation of needle tips. *Nano TransMed* 2023, 2.
25. Qin W, Xu W, Wang L, Ren D, Cheng Y, Song W, Jiang T, Ma L, Zhang C: Bacteria-Elicited Specific Thrombosis Utilizing Acid-Induced Cytolysin A Expression to Enable Potent Tumor Therapy. *Adv Sci (Weinh)* 2022, 9:e2105086.
26. Felfoul O, Mohammadi M, Taherkhani S, de Lanauze D, Zhong Xu Y, Loghin D, Essa S, Jancik S, Houle D, Lafleur M, et al: Magneto-aerotactic bacteria deliver drug-containing nanoliposomes to tumour hypoxic regions. *Nat Nanotechnol* 2016, 11:941-947.
27. Roger T, Froidevaux C, Le Roy D, Reymond MK, Chanson AL, Mauri D, Burns K, Riederer BM, Akira S, Calandra T: Protection from lethal gram-negative bacterial sepsis by targeting Toll-like receptor 4. *Proc Natl Acad Sci U S A* 2009, 106:2348-2352.
28. Toyofuku M, Schild S, Kaparakis-Liaskos M, Eberl L: Composition and functions of bacterial membrane vesicles. *Nat Rev Microbiol* 2023, 21:415-430.
29. Kawai T, Akira S: The role of pattern-recognition receptors in innate immunity: update on Toll-like receptors. *Nat Immunol* 2010, 11:373-384.
30. Fitzgerald KA, Kagan JC: Toll-like Receptors and the Control of Immunity. *Cell* 2020, 180:1044-1066.
31. Song RB, Wu Y, Lin ZQ, Xie J, Tan CH, Loo JSC, Cao B, Zhang JR, Zhu JJ, Zhang Q: Living and Conducting: Coating Individual Bacterial Cells with In Situ Formed Polypyrrole. *Angew Chem Int Ed Engl* 2017, 56:10516-10520.
32. Chen QW, Liu XH, Fan JX, Peng SY, Wang JW, Wang XN, Zhang C, Liu CJ, Zhang XZ: Self-Mineralized Photothermal Bacteria Hybridizing with Mitochondria-Targeted Metal-Organic Frameworks for Augmenting Photothermal Tumor Therapy. *Advanced Functional Materials* 2020, 30.
33. Li F, Li YX, Cao YX, Wang L, Liu CG, Shi L, Song H: Modular engineering to increase intracellular NAD(H/(+)) promotes rate of extracellular electron transfer of Shewanella oneidensis. *Nat Commun* 2018, 9:3637.
34. Singh S, Anshita D, Ravichandiran V: MCP-1: Function, regulation, and involvement in disease. *Int Immunopharmacol* 2021, 101:107598.

墙报展示人简介：

姓名：程苇钇

专业：药剂学（学术型）

所属学校：浙江中医药大学

电子邮件：cwy9999@foxmail.com

个人简介：

程苇钇，浙江中医药大学在读研究生，师从朴寄纲研究员。主要研究方向为纳米药物的制备与应用、纳米新型给药系统及靶向制剂研究，涉及中药学、高分子材料、光热及免疫治疗等多个领域。目前在纳米药物递送系统应用研究方面取得了一定的成果，相关研究成果已在**《Biomaterials》**、**《Nano Letters》**、**《Nano TransMed》**等期刊上发表。本人曾多次参加国内大型学术会议，曾在第十六届中国药物制剂大会上作了题为《Overcoming blood-brain barrier with brain metastatic breast cancer derived exosome for glioma treatment》的汇报，并荣获三等奖；在 2024 年浙江省老年肿瘤学学术大会上作了关于中药砒霜纳米药物的制备及其在药物递送系统中应用的报告，展示了最新研究进展和应用前景。本人在科研中表现出了极大的热情和创新能力，期待通过中国颗粒大会这个平台，与更多的专家学者交流合作，共同推进颗粒学及其相关领域的发展。

研究成果：

1、**Cheng W**, Ren W, Ye P, He L, Bao D, Yue T, Lai J, Wu Y, Wei Y, Wu Z, Piao JG. Camouflaging nanoreactor traverse the blood-brain barrier to catalyze redox cascade for synergistic therapy of glioblastoma. **Biomaterials**. 2024 Jul 14;311:122702.**（第一作者，IF=12.8)**

2、**Cheng W**, He L, Ren W, Yue T, Xie X, Jiang S, Xin C, Wu Z, Fan L, Ji-Gang Piao,Bacteria-nanodrug cancer treatment system: The combination of dual swords and the confrontation of needle tips,**Nano TransMed**,Volume 2, Issues 2–3,2023,100008.**（第一作者)**

3、Wang Y, **Cheng W**, Zhu J, He L, Ren W, Bao D, Piao JG. Programmed Co-delivery of tamoxifen and docetaxel using lipid-coated mesoporous silica nanoparticles for overcoming CYP3A4-mediated resistance in triple-negative breast cancer treatment. **Biomed Pharmacother**. 2024 Jan;170:116084. **（共同第一作者，IF=6.9)**

4、Lai J, Luo Z, Liu J, Hu H, Jiang H, Liu P, He L, **Cheng W**, Ren W, Wu Y, Piao JG, Wu Z. Charged Gold Nanoparticles for Target Identification-Alignment and Automatic Segmentation of CT Image-Guided Adaptive Radiotherapy in Small Hepatocellular Carcinoma. **Nano Lett**. 2024 Jul 24. **（8/12，IF=9.6)**

5、Xie X, Yue T, Gu W, **Cheng W**, He L, Ren W, Li F, Piao JG. Recent Advances in Mesoporous Silica Nanoparticles Delivering siRNA for Cancer Treatment. **Pharmaceutics.** 2023 Oct 17;15(10):2483.**（4/8，IF=4.9)**

附：墙报展示人为学生

砷基铁蛋白的构建及用于白血病靶向递送的研究

王昌龙[1]，魏炜[2*]，马光辉[2*]

[1]山东第一医科大学，山东省济南市槐荫区青岛路 6699 号，250117

[2]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

*E-mail: weiwei@ipe.ac.cn, ghma@ipe.ac.cn

摘要正文：

三氧化二砷（ATO）是中国特色的药方组分，是治疗急性早幼粒细胞白血病（APL）的临床一线化疗药物。但是 ATO 在使用过程中存在毒副作用，同时其仅对于 APL 类型白血病有效，而对于其他类型的白血病效果较差。解决上述问题的关键是发展砷的靶向制剂。传统的靶向递送载体通常人工合成，安全性需长期论证，同时制备过程复杂，给质控和放大生产带来了挑战。

铁蛋白是天然的药物载体：首先，作为人体内源性蛋白，生物相容性好；其次，内部具有较大的空腔，适合药物的装载；此外，白血病细胞高表达铁蛋白受体，具有良好的靶向性。受此启发，本工作发展了一种基于铁蛋白的仿生纳米药物用于 ATO 的白血病精准靶向递送。首先，在体外利用基因工程的方法成功表达纯化出全重链人源化铁蛋白，并创新性地利用铁辅助成核的方法实现砷的成功装载。相比于 ATO 注射液，砷基铁蛋白可以显著提高白血病细胞对砷的内吞。纳米药物进入细胞以后主要定位于溶酶体中，并在酸性环境中释放三价砷。相应地，砷基铁蛋白可以显著提高对白血病细胞的杀伤。静脉注射以后，砷基铁蛋白能够高效和白血病细胞结合，降低在正常组织中的分布。相应地，砷基铁蛋白能够显著降低白血病模型小鼠外周血、骨髓和脾脏中的白血病负荷，延长小鼠生存期。

关键词：白血病，铁蛋白，三氧化二砷，靶向递送

参考文献

[1] **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 leukemia types confers strong anti-leukemia therapeutic effects. *Nat. Nanotechnol.* 2021, 6: 1413-23.**

[2] **C. Wang, X. Wang, W. Zhang, D. Ma, F. Li, R. Jia, M. Shi, Y. Wang, G. Ma, W. Wei. Shielding ferritin with a biomineralized shell enables efficient modulation of tumor microenvironment and targeted delivery of diverse therapeutic agents. *Adv. Mater.* 2022, 34: 2107150.**

[3] **F. Sun, Z. Ding, F. Shao, X. Gao, H. Tian, X. Zhang, H. Chen, C. Wang. Albumin-based MUC13 peptide nanomedicine suppresses liver cancer stem cells via JNK-ERK signaling pathway-mediated autophagy inhibition. *ACS Appl. Mater. Interfaces.* 2024, 10.1021/acsami.4c06034.**

报告人简介：

王昌龙，泰山学者青年专家，山东省“仿生纳米剂型”青创团队负责人，校拔尖层次人才，生命科学学院教授，硕士生导师，博士后合作导师。博士毕业于中国科学院过程工程研究所，师从马光辉院士、魏炜研究员。主持国家级项目 1 项，省部级项目 3 项。获得中国科学院优秀博士学位论文，中国化学会京博奖银奖，中国颗粒学会优秀博士学位论文奖等。担任 Asian Journal of Pharmaceutical Sciences、Exploration 等期刊青年编委。

报告人是否为学生：非学生

新型干粉吸入式疫苗开发

李鑫[1]，魏炜[2,*]，马光辉[2,*]

[1]山东第一医科大学，山东省济南市槐荫区青岛路 6699 号，邮编 250117

[2]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，邮编 100190

Email: xinli@163.com

摘要正文：目前获批的呼吸道传染病疫苗多为液体制剂，需要严苛的低温储存环境，由于存在难以诱导黏膜免疫应答，需多次肌肉注射接种，影响接种率。针对上述挑战，该研究提出纳-微复合递送新理念，创制了干粉吸入疫苗；

这种纳微复合结构实现了高性能的递送：具有合适空气动力学尺寸的微球有助于沉积于肺部，防止吸入后被呼出，而释放的展示抗原的纳米颗粒有利于被抗原提呈细胞摄取。基于微球缓释的特性，抗原可以持续的释放，进而实现了单次吸入即可诱导长效的免疫应答，远优于两针的纳米疫苗。此外，纳米颗粒底盘（灵活的抗原展示平台）表面可以展示不同的蛋白抗原，根据疫情需求，快速制备“马赛克”迭代疫苗。单次吸入后，在小鼠、仓鼠及非人灵长类动物上诱导产生了快速、高效和长期的“黏膜-体液-细胞”三重免疫应答。针对未来新发、突发呼吸道传染病，该平台有望实现疫苗的快速构建、高效防治和常温储存。

关键词：吸入疫苗；缓释微球；干粉；空气动力学；黏膜免疫

参考文献

Ye T, Jiao Z, Li X, He Z, Li Y, Yang F, Zhao X, Wang Y, Huang W, Qin M, Feng Y, Qiu Y, Yang W, Hu L, Hu Y, Zhai Y, Wang E, Yu D, Wang S, Yue H, Wang Y, Wang H, Zhu L, Ma G, Wei W. Inhaled SARS-CoV-2 vaccine for single-dose dry powder aerosol immunization. Nature. 2023 Dec;624(7992):630-638.

报告人/墙报展示人简介：

（简介内容采用宋体五号字体）

李鑫，山东第一医科大学（山东省医学科学院），教授，泰山学者青年专家。主要研究方向为新型疫苗开发及免疫增效机制研究。博士毕业于军事医学研究院，博士后在中国科学院过程工程研究所，师从马光辉院士和魏炜研究员。近五年，以第一和通讯作者身份发表 SCI 论文 10 余篇，包括 *Nature*、*Small* 等期刊，总影响因子 130 余分；申请 PCT 和国内发明专利 4 项；主持国家自然科学基金青年项目和中国博士后面上项目等课题 5 项，参与国自然重点项目等课题。

报告人/墙报展示人是否为学生：否

第十三届中国颗粒大会

Pickering Interfacial Biocatalysis with Enhanced Diffusion Processes for CO_2 Mineralization

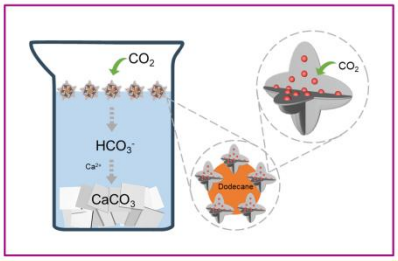
张博禹，石家福*，姜忠义*

天津大学环境科学与工程学院，天津，300350

shijiafu@tju.edu.cn; zhyjiang@tju.edu.cn

Introduction

Utilization of CO_2 has become a crucial and anticipated solution to address environmental and ecological issues. Enzymes such as carbonic anhydrase (CA) can efficiently convert CO_2 into various platform chemicals under ambient conditions, which offers a promising way for CO_2 utilization. Herein, we constructed a Pickering interfacial biocatalytic system (PIBS) stabilized by CA-embedded MOFs (ZIF-8 and ZIF-L) for CO_2 mineralization. Through structure engineering of MOFs and incorporation of Pickering emulsion, the internal and external diffusion processes of CO_2 during the enzymatic mineralization were greatly intensified. The initial reaction rate of CO_2 mineralization of PIBS is nearly twice that of the free system. After the 8th cycle reaction, PIBS can still produce more than 9.8 mg of $CaCO_3$ in 5 min, realizing efficient and continuous mineralization of CO_2.



Results and discussion

Preparation and Characterizations of CA@ZIFs Particles and PIBS

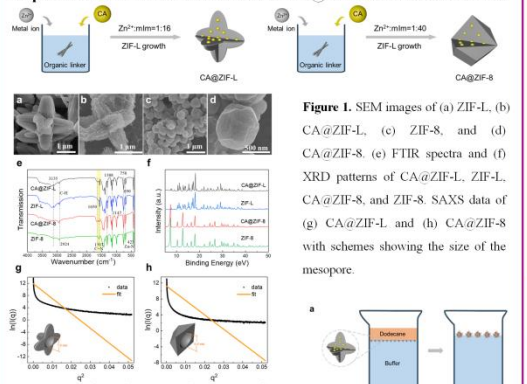


Figure 1. SEM images of (a) ZIF-L, (b) CA@ZIF-L, (c) ZIF-8, and (d) CA@ZIF-8. (e) FTIR spectra and (f) XRD patterns of CA@ZIF-L, ZIF-L, CA@ZIF-8, and ZIF-8. SAXS data of (g) CA@ZIF-L and (h) CA@ZIF-8 with schemes showing the size of the mesopore.

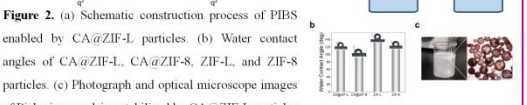


Figure 2. (a) Schematic construction process of PIBS enabled by CA@ZIF-L particles. (b) Water contact angles of CA@ZIF-L, CA@ZIF-8, ZIF-L, and ZIF-8 particles. (c) Photograph and optical microscope images of Pickering emulsion stabilized by CA@ZIF-L particles.

External Diffusion Intensification of PIBS

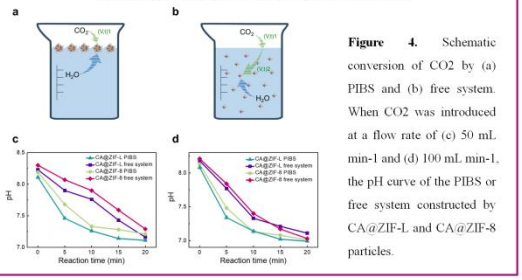


Figure 4. Schematic conversion of CO2 by (a) PIBS and (b) free system. When CO2 was introduced at a flow rate of (c) 50 mL min-1 and (d) 100 mL min-1, the pH curve of the PIBS or free system constructed by CA@ZIF-L and CA@ZIF-8 particles.

Internal diffusion Intensification of CA@ZIFs Particles

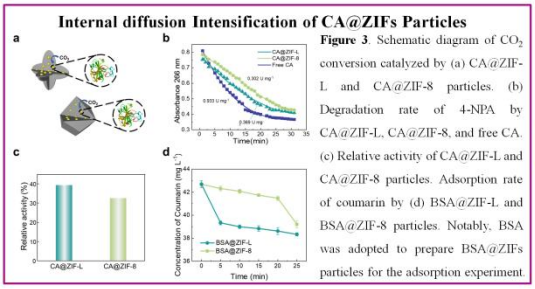


Figure 3. Schematic diagram of CO_2 conversion catalyzed by (a) CA@ZIF-L and CA@ZIF-8 particles. (b) Degradation rate of 4-NPA by CA@ZIF-L, CA@ZIF-8, and free CA. (c) Relative activity of CA@ZIF-L and CA@ZIF-8 particles. Adsorption rate of coumarin by (d) BSA@ZIF-L and BSA@ZIF-8 particles. Notably, BSA was adopted to prepare BSA@ZIFs particles for the adsorption experiment.

Zhang, B. Y., *et al.* unpublished data

Conclusion

In conclusion, we constructed PIBS through the combination of embedding technique of ZIFs and Pickering emulsion to realize the conversion of CO_2. The internal diffusion was fortified by regulating the structure of ZIFs. And the external diffusion was fortified by the incorporation of Pickering emulsion. The initial CO_2 conversion rate of PIBS is nearly twice that of free system. The production of $CaCO_3$ in PIBS reached 12.2 mg in 5 min, which was remarkably higher than that of free system. Moreover, PIBS maintains over 80% of the initial reaction activity after the 8th cycle reaction. Our findings may pave the way for the efficient and continuous utilization of CO_2.

Acknowledge

This work was supported by the National Outstanding Youth Science Fund Project (22122809), National Natural Science Funds of China (21621004), Natural Science Fund of Tianjin (19JCYBJC19700) and Open Funding Project of the State Key Laboratory of Biochemical Engineering (2020KF-06).

聚乳酸微球表面图案化设计及机理研究

高泽静[1,2,3]，韦祎[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：

形状结构可控的聚合物颗粒因其新颖的形貌和多种潜在的应用而备受关注，通常具有特殊表面结构的聚合物颗粒在调控药物释放行为、增强细胞摄取、刺激免疫应答等方面发挥着重要作用[1,2]。然而，在合成各向异性聚合物颗粒的多种策略中，简便而准确地对聚合物颗粒进行表面图案化设计仍具有挑战性，因此迫切需要开发一种安全简单、易于放大并且过程绿色的制备方法。

本研究采用FDA批准的聚乳酸作为辅料，通过快速膜乳化技术结合复乳法（$W_1/O/W_2$）制备聚合物微球，制备时在外水相中添加不同组分，利用溶剂挥发和界面效应的协同作用对微球表面进行图案化设计（Fig.1）。实验结果显示，外水相中磷酸盐的加入能够降低界面张力，使微球表面产生刺突形貌；而利用铵盐可产生氨气的性质，促进乳液液滴内部的相分离过程，使微球产生多孔表面。通过不同组分的组合，最终制备了具有光滑、刺突、树莓、多孔等表面图案化的粒径均一微球，微球尺寸在20~30 μm可控，Span<0.9（Fig.2）。同时，本研究通过构建分子动力学模型，模拟聚合物分子在油水界面的变化过程，研究分子间的相互作用，对微球表面形貌变化的机理进行深入研究。

本研究制备了尺寸均一的具有多种表面图案化的聚合物微球，同时对乳滴的形变过程和表面变化机制进行探索。采用快速膜乳化技术，构建了表面图案化聚合物载体系统，所用辅料安全且批准，实验组分简单，批次稳定性好，易于放大生产，有望适用于药物递送载体等多方面的应用。

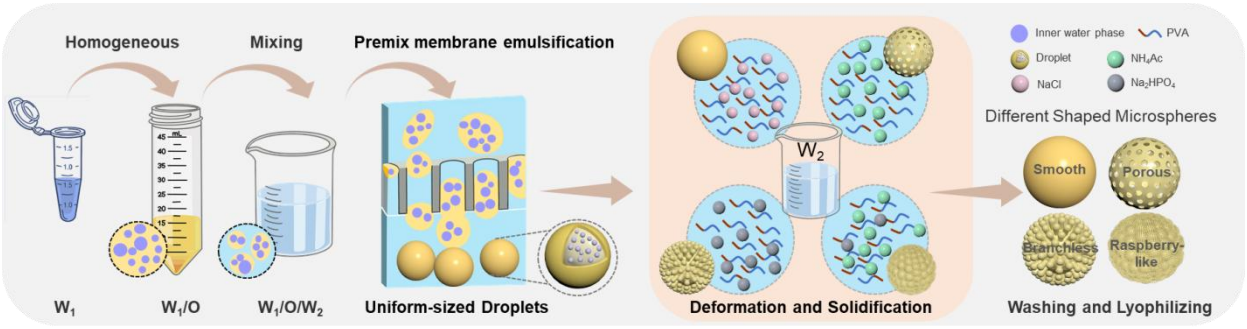


Fig. 1 scheme of the preparation of surface-patterned PLA microspheres

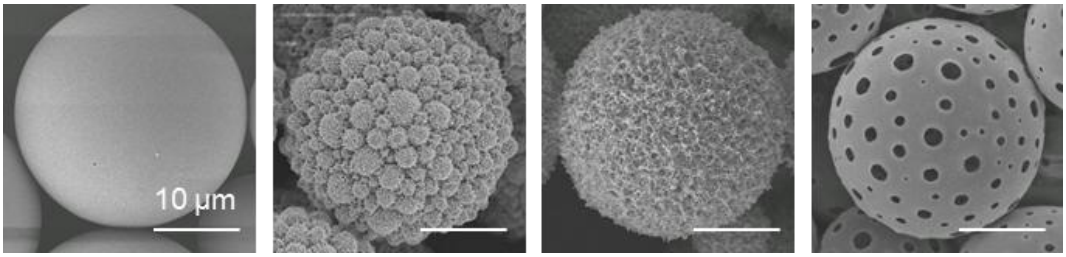


Fig. 2 SEM of the different surface-patterned PLA microspheres

关键词：聚乳酸微球；表面结构；界面张力；氢键；膜乳化

参考文献

[1] Zou, H.; Lv, Y., Synthetic Strategies for Polymer Particles with Surface Concavities. *Macromol Rapid*

Commun **2022,** *43* (10), 2200072.
[2] Ku, K. H.; Shin, J. M.; Yun, H.; Yi, G. R.; Jang, S. G.; Kim, B. J., Multidimensional Design of Anisotropic Polymer Particles from Solvent-Evaporative Emulsion. *Advanced Functional Materials* **2018,** *28* (42).

报告人/墙报展示人简介：

高泽静，中国科学院过程工程研究所生化工程国家重点实验室 2022 级在读博士，导师马光辉院士、韦祎副研究员。主要研究方向为尺寸均一、可控的聚合物微球微囊的制备与应用研究以及缓控释微球制剂的开发与应用研究。

报告人/墙报展示人是否为学生：学生

Preparation and Application of Uniform-sized Goserelin-loaded Long-acting Sustained Release Microsphere

Ying Qin[1,2,3], Yi Wei [1,2*], Guanghui Ma[1,2,3*]

[1.] State Key Laboratory of Biochemical Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China.

[2.] Key Laboratory of Biopharmaceutical Preparation and Delivery, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China.

[3.] University of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, P. R. China.

* ghma@ipe.ac.cn, ywei@ipe.ac.cn

Sustained release microspheres loaded with goserelin are regarded as a promising candidate for treating prostate cancer and other sex hormone diseases. However, their widespread adoption has been hindered by issues such as wide particle size distribution and unstable release characteristics[1]. To address these challenges, we employed a combination of the solid-in-oil-in-water microspheres preparation approach (S/O/W) and innovative premix membrane emulsification technology. With this approach, we successfully produced goserelin-loaded sustained release microspheres of narrow particle size distribution (Span 0.642), remarkable encapsulation efficiency (93.98%), low initial burst release (about 0.50% within 2 hours), and compatibility with small injection needles (23-G, inner diameter 0.33 mm, outer diameter 0.64 mm, maximal force 59 N). Furthermore, in the animal model, sustained release microspheres loaded with goserelin effectively reduced serum testosterone concentrations to castration levels (＜1.0 ng/mL) by day 4, maintaining this inhibition for up to 21 days, exhibiting comparable efficacy to the positive control group. In vivo release kinetics analysis revealed that goserelin-loaded sustained release microspheres exhibited a release pattern dominated by diffusion with corrosion assistance in vivo. In summary, the systematic and comprehensive evaluation of uniform-sized goserelin-loaded sustained release microspheres has highlighted their excellent translational potential, and the study herein may provide new strategies and ideas for the development of microsphere dosage forms.

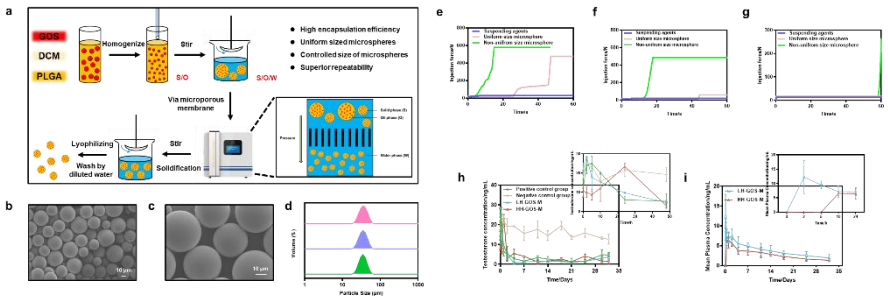


Fig. 1 Schematic preparation of uniform-sized goserelin-loaded microspheres (a) with its scanning electron micrograph(SEM) images (b, c) and particle size distribution (d); Injection force of different injection needles:26-G(e), 23-G(f), 22-G(g); Plasma concentration–time curves of testosterone in rats following intramuscular injection of goserelin microspheres (mean ± standard deviation, n=6)(h); Mean plasma concentration–time curves in rats following intramuscular injection of goserelin microspheres(mean ± standard deviation, n=6)(i).

Keywords: Goserelin, Sustained release microspheres, Model fitting, Release kinetics.

References

[35]G. Ma, Microencapsulation of protein drugs for drug delivery: Strategy, preparation, and applications, Journal of Controlled Release 2014, 193, 324-340.

报告人/墙报展示人简介：

秦莹，中国科学院过程工程研究所 2023 级在读博士生，师从马光辉院士，韦祎副研究员。主要研究方向为尺寸均一缓释制剂的制备与应用，基于机器学习的缓/控释过程精准设计等。

附：学生

衰老红细胞辅助免疫调节性锌铝佐剂/卵清蛋白纳米疫苗进行系统性抗肿瘤免疫

赵婧[1]，张凌宵[1,2,*]，许志平[1,*]

[1]深圳湾实验室系统与物理生物学研究所，深圳，518107

[2]奥胡斯大学跨学科纳米科学中心，丹麦，CDK-8000

*Email: gordonxu@szbl.ac.cn; Zhanglx@inano.au.dk

摘要正文：肿瘤治疗性疫苗虽在临床上有巨大的应用潜力，当前仍面临着临床佐剂活性不足、疫苗递送效率低、免疫抑制性肿瘤微环境（TME）限制等问题。因此，本研究基于功能仿生设计了衰老红细胞（sRBC）辅助免疫调节性锌铝佐剂/卵清蛋白（ZAlum/OVA）纳米疫苗进行系统性免疫的策略（Fig.1）。该策略首先采用水热法合成免疫调节性 ZAlum 纳米佐剂，并负载模式抗原 OVA 制备 ZAlum/OVA 纳米疫苗。相对于商用铝佐剂 Alum，引入 Zn^{2+}的 ZAlum 纳米佐剂不仅表现出更强的佐剂活性，而且能诱发肿瘤免疫原性细胞死亡（ICD）。鉴于疫苗靶向脾脏能迅速启动免疫反应且 sRBC 能被肝脏巨噬细胞生理性地捕获清除，本研究通过预先静脉注射外源性 sRBC 短暂饱和肝脏巨噬细胞的吞噬作用，16 h 后静脉注射 ZAlum/OVA 纳米疫苗实现其在脾脏和肿瘤的双重积累。ZAlum/OVA 纳米疫苗积累于脾脏增强树突细胞中自噬介导的抗原呈递，并迅速启动针对实体瘤的 OVA 特异性 T 细胞反应；积累于 TME 的纳米疫苗可诱导肿瘤 ICD 并释放肿瘤相关抗原（TAA），进而引发个体化 TAA（iTAA）特异性 T 细胞免疫。该策略通过将纳米佐剂设计和 sRBC 辅助递送体系相结合，实现脾脏和 TME 的空间联合免疫调节，以及模式抗原 OVA 与个性化抗原 iTAA 特异性免疫的级联激活。这种 sRBC 辅助 ZAlum/OVA 纳米疫苗系统性免疫的仿生策略引发快速且强大的抗肿瘤免疫，在癌症金属免疫疗法中具有巨大的发展潜力。

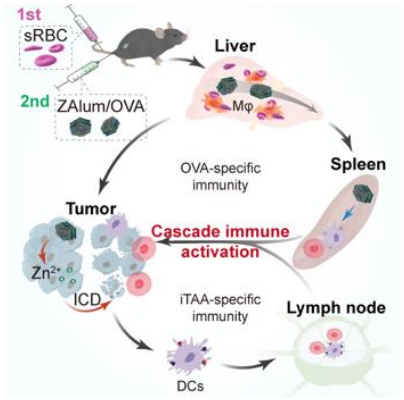


Fig. 1 sRBC-assisted systemic immunization of ZAlum/OVA nanovaccines promoting potent cancer metalloimmunotherapy through cascade immune activation.

关键词：锌铝纳米佐剂；纳米疫苗；红细胞辅助递送；脾脏靶向；金属免疫治疗

参考文献

J. Zhao#, L. Zhang#, P. Li, S. Liu, S. Yu, Z. Chen, M. Zhu, S. Xie, D. Ling*, F. Li*, An immunomodulatory zinc-alum/ovalbumin nanovaccine boosts cancer metalloimmunotherapy through erythrocyte-assisted cascade immune activation, *Adv. Sci*, 2024, 11(6), 2307389

报告人/墙报展示人简介：

赵婧，深圳湾实验室博士后，合作导师为许志平教授。本科和硕士毕业于哈尔滨工业大学生命学院，博士毕业于浙江大学药学院。主要从事纳米佐剂的制备及其在免疫治疗中的应用研究，目前已在 Advanced Materials, Advanced Science 等国际期刊以第一作者（包含共一）发表论文 4 篇，参与发表论文 7 篇，申请中国专利 2 项。

报告人/墙报展示人是否为学生：非学生

基于微流控制备纳米囊泡递送 CD47/PD-L1 抗体用于治疗肺腺癌并降低免疫毒性

苏振伟 [1,*]

[1] 深圳湾实验室，广东省深圳市光明区光侨路高科创新中心，518107

*Email: suzhenwei@szbl.ac.cn

CD47/PD-L1联合阻断可以提高免疫治疗响应率，但因脱靶效应引起的免疫相关不良事件(IRAEs)，极大地影响了其临床疗效[1, 2]。因此，如何在提高治疗响应率的同时降低IRAEs是提高联合免疫治疗效果的关键科学问题。我们开发了微流控一步法诱导pH超敏感聚合物自组装形成高效包载CD47/PD-L1抗体的纳米囊泡。该纳米囊泡可以响应肿瘤胞外酸性环境特异性释放抗体，促进肿瘤相关巨噬细胞重塑为抗肿瘤状态，增加树突状细胞和毒性T淋巴细胞的浸润。在Lewis 肺腺癌小鼠中，相较于游离抗体约20%的瘤内输送效率，纳米囊泡显著增加瘤内抗体的蓄积到50%。同时，相较于游离抗体组合治疗仅有40%的部分缓解，纳米囊泡递送CD47/PD-L1抗体治疗组的肿瘤40%部分缓解和60%完全缓解，并且有效延长小鼠的生存期超过60天。此外，体内实验显示纳米囊泡递送策略引起的贫血、肺炎、肝炎和小肠炎症等 IRAEs 更少。因此，我们基于微流控开发了一种肿瘤酸响应激活CD47/PD-L1双重免疫检查点阻断疗法，具有增强肺腺癌抗肿瘤免疫并降低IRAEs的效果，有望为CD47/PD-L1抗体联合用于肺癌免疫治疗提供新策略。

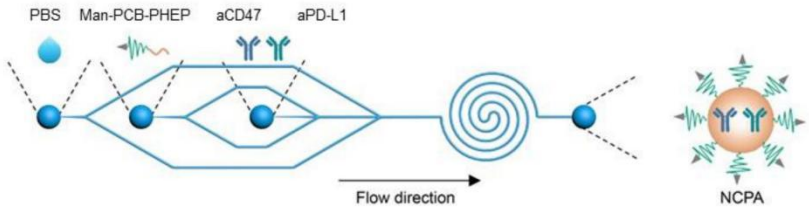


Fig. 1 Schematic of microfluidics-enabled tumor acidity-responsive nanovesicle for on-site release CD47/PD-L1 antibodies

关键词： 纳米囊泡；抗肿瘤免疫；微流控

参考文献

[1] M. Dougan, A. M. Luoma, S. K. Dougan, K. W. Wucherpfennig, Understanding and treating the inflammatory adverse events of cancer immunotherapy. Cell 184, 1575-1588 (2021)..

[2] G. Morad, B. A. Helmink, P. Sharma, J. A. Wargo, Hallmarks of response, resistance, and toxicity to immune checkpoint blockade. Cell 184, 5309-5337 (2021).

报告人简介：

苏振伟，助理研究员，深圳湾实验室

研究领域及主要业绩：研发肿瘤微环境响应的纳米药物用于抗肿瘤免疫治疗，相关研究成果以第一作者或共同第一作者发表于 Advanced Science, Science Advances, Small, ACS Applied Materials & Interfaces, Biomaterials Science, Drug resistance updates 等期刊。

Refining mRNA Delivery with Lipid Nanoparticle-Stabilized Pickering Emulsions for Robust and Long-Lasting T Cell Responses

Yan Zhou[1,2], Yufei Xia[1,2,*], Guanghui Ma[1,2,*]

[1]National Key Laboratory of Biochemical Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, PR China

[2]School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, PR China

* ghma@ipe.ac.cn; yfxia@ipe.ac.cn

mRNA-based vaccines hold immense potential to revolutionize vaccinations, as validated by their success in combating the SARS-CoV-2 pandemic. Central to their efficacy is the successful delivery and expression of mRNA within living organisms, which are foundational for eliciting robust immune responses. However, the mechanisms by which in vivo mRNA delivery and expression influence the intensity, duration, and direction of immune responses remain poorly understood, especially given the complex spatiotemporal dynamics involved in initiating immunity.

Here, we propose that in vivo mRNA delivery and expression should be integrated with the process of immune activation. We engineered a micron-sized particle, termed lipid nanoparticle (LNP)-stabilized Pickering emulsion (LSE), utilizing clinically approved squalene for the oily core, with LNPs uniformly distributed along the oil/water interface of each droplet. This unique structure, combined with the larger size of LSE, enhances retention at the administration site and improves affinity for antigen-presenting cells (APCs), promoting a more stable mRNA expression profile and resulting in distinct humoral and cellular immune dynamics compared to conventional LNP formulations. LSE elicited a comparable humoral immune response to LNPs while achieving more effective and long-lasting Th1-mediated cellular immunity. As a herpes zoster (HZ) vaccine encapsulating mRNA encoding the zoster gE protein, LSE sustained a robust IFN-γ and IL-2 CD4 T cell response at both 120- and 300-days post-immunization. Additionally, LSE elicited a stronger Th1 CD4 T cell response and a more diverse T cell receptor (TCR) repertoire compared to the clinically approved AS01-adjuvanted zoster vaccine, Shingrix™, highlighting its potential for providing enhanced protective efficacy as an HZ vaccine.

Our findings indicate that fine-tuning the in vivo mRNA delivery process can significantly enhance the potency and durability of T cell immune responses, providing a more precise and effective approach to mRNA vaccines. This method offers a practical way to better address evolving immunization needs.

Keywords: Pickering emulsion, mRNA delivery, Herpes zoster vaccine, T cell responses

报告人/墙报展示人简介：

周妍，中国科学院过程工程研究所生化工程国家重点实验室 2021 级在读博士，导师为马光辉院士和夏宇飞研究员。博士期间研究方向为 mRNA 疫苗递送载体的研发与优化，主要关注 mRNA 在体递送过程的调节及其对免疫效果的影响。

报告人/墙报展示人是否为学生：报告人/墙报展示人为学生

Enhanced Nano-Vaccine Utilizing Biomineralized Virus-Like Particles for Efficient Glioblastoma Immunotherapy via the Nose-to-Brain Delivery pathway

Chufan Wang[1], Lei Ren[1,*]

[1] Key Laboratory of Biomedical Engineering of Fujian Province University/Research Center of Biomedical Engineering of Xiamen, Department of Biomaterials, College of Materials, Xiamen University, Xiamen 361005, P. R. China.

* Email: 31420210155951@stu.xmu.edu.cn

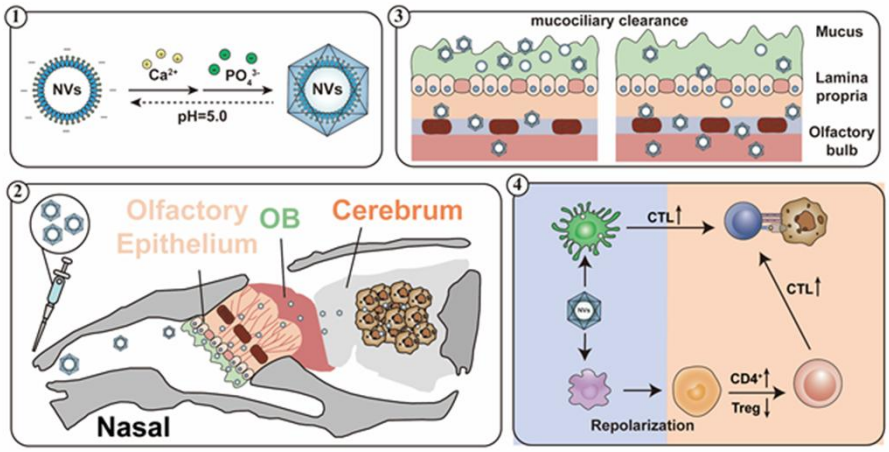


Fig. 1 Schematic illustration of the development of the VLPs based anti-GBM vaccine with CaP on the surface to fit intranasal administration and its antitumor immune response activation.

Glioma is the most common and aggressive primary malignant tumor in the central nervous system (CNS). Despite recent advancements in multiple immunotherapies, they struggle to generate strong anti-tumor responses in situ due to blood-brain barrier (BBB) and the immunosuppressive tumor microenvironment (TME). Next-generation immunotherapy products must address these challenges[1]. Intranasal (IN) administration offers a promising alternative by delivering drugs directly to the brain, bypassing the BBB and avoiding systemic absorption issues.

Inspired by the strong adhesion capability of calcium phosphate (CaP) materials, we developed a novel CaP-shell-covered nano-vaccine based on hepatitis B core antigen-derived VLPs, and displayed a glioma-associated antigen EphA2671-679 on its surface, termed ^{EphA2}HBc@CaP NVs. Post-biomineralization, ^{EphA2}HBc@CaP NVs exhibited enhanced mucosal adhesion, and significantly higher accumulation in glioma tissue. Besides, ^{EphA2}HBc NVs acted as both immunogen and adjuvant, increasing effective T cell infiltration, reducing regulatory T cells and M2-type tumor-associated macrophages, and aiding in TME remodeling to stabilize a long-lasting immune response[2]. In vivo application of NVs in glioma therapy showed that ^{EphA2}HBc@CaP NVs promoted significant therapeutic efficacy and elicited robust, durable tumor suppression. This NVs construction strategy underscores the advantages of the CaP shell for enhancing nose-to-brain delivery and the VLP platform for immunological enhancement, paving the way for broad clinical applications.

Keywords: Tumor vaccine; Biomineralized; Virus like particles; Intranasal administration; Nose-to-brain pathway

References

[36]Jackson, C. M. Choi, J. Lim, M., Mechanisms of immunotherapy resistance: lessons from glioblastoma. Nature Immunology 2019, 20 (9), 1100-1109.

[37]Wang, C. Zhao, J. Duan, Y. Lin, L. Zhang, Q. Zheng, H. Shan, W. Wang, X. Ren, L., Tumor-Associated Myeloid Cells Selective Delivery of a Therapeutic Tumor Nano-Vaccine for Overcoming Immune Barriers for Effective and Long-Term Cancer Immunotherapy. Adv Healthc Mater 2024, e2401416.

墙报展示人简介：

王楚凡，厦门大学材料学院博士研究生，2018 年于华东理工大学获得学士学位，目前研究重点为计算机辅助开发新型类病毒蛋白纳米笼，荧光蛋白和细胞因子等生物活性大学分子，以期提高其可溶性，有效性，安全性和临床转化潜力。

报告人/墙报展示人是否为学生：是学生

Boosting antigen internalization through cellular affinity of Pickering emulsions

Yali Ming[1,2,3], Yufei Xia [1,2,3*], Guanghui Ma[1,2,3*]

[1.] State Key Laboratory of Biochemical Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China.

[2.] Key Laboratory of Biopharmaceutical Preparation and Delivery, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China.

[3.] University of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, P. R. China.

* ghma@ipe.ac.cn, yfxia@ipe.ac.cn

Cellular recognition, uptake, and activation are pivotal for antigen delivery and immune response, all of which hinge on the cellular affinity of micro-/nanoparticles. While the effects of charge, size, and shape on cellular affinity have been thoroughly explored, the importance of softness, fluidity, and complex interfacial interactions is often overlooked. Pickering emulsions, stabilized by nanoparticles at liquid interfaces, offer a versatile platform for vaccine delivery [1]. The aggregation of nanoparticles at the oil/water interface creates multi-layered structures that enhance interactions with the cell membrane, thereby facilitating antigen delivery. Owing to their deformability and lateral mobility, Pickering emulsions can engage in multivalent interactions with immune cells [2]. Moreover, the hydrophobic oil exposed in the gaps between nanoparticles can increase lipid affinity during interactions, thereby reducing the energy required for cellular uptake by altering lipid conformational entropy. In this context, we designed a poly (lactic-co-glycolic acid) (PLGA) nanoparticle-stabilized Pickering emulsion (PNPE) as a fluid vaccine delivery system. Real-time monitoring using quartz crystal microbalance with dissipation (QCM-D) revealed that PNPE exhibits high affinity for biomimetic extracellular vesicles (bEVs), a cell model for bone marrow dendritic cells (BMDCs). Further confirmation by confocal laser scanning microscopy (CLSM) demonstrated that PNPE efficiently promotes antigen uptake by BMDCs. Our findings suggest that PNPE shows enhanced affinity for antigen-presenting cells, potentially boosting antigen internalization and immune responses [3].

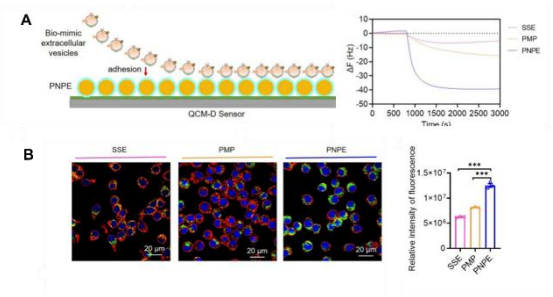


Fig. 1 (A) Schematic of the affinity between PNPE and cell membrane measured by QCM (left) and comparison of changes in ΔF in PLGA microparticles (PMPs), surfactant-stabilized emulsion (SSE), and PNPE (right). (B) Representative diagram (left) and relative fluorescence intensity (right) of cellular uptake of antigens. Scale bar = 20 μm.

Keywords: Pickering emulsion, Antigen internalization, Vaccine delivery system.

References

[38]S. Peng, F. Cao, Y. Xia, X. Gao, L. Dai, J. Yan and G. Ma, Particulate Alum via Pickering Emulsion for an Enhanced COVID-19 Vaccine Adjuvant, Advanced Materials 2020, 32(40), e2004210.

[39]Y. Xia, J. Wu, W. Wei, Y. Du, T. Wan, X. Ma, W. An, A. Guo, C. Miao, H. Yue, S. Li, X. Cao, Z. Su and G. Ma, Exploiting the pliability and lateral mobility of Pickering emulsion for enhanced vaccination, Nature Materials 2018, 17(2), 187-194.

[40]F. Cao, Y. Ming, W. Gao, J. Ge and K. Ogino, Cellular Affinity of Particle-Stabilized Emulsion to Boost Antigen Internalization, JoVE 2022, 2, 187.

报告人/墙报展示人简介：

明亚莉，中国科学院过程工程研究所 2020 级在读博士生，师从马光辉院士，夏宇飞研究员。主要研究方向 Pickering 乳液的优化与免疫应用。

附：学生

Dictating the spatial-temporal delivery of molecular adjuvant and antigen for the enhanced vaccination

Yumeng Yan [1, a, b, c], Xiaonan Huang [1, a, b, c, d], Lili Yuan [1, e], To Ngai [f], Guanghui Ma [a, b, c] and Yufei Xia [a, b, c*]

a State Key Laboratory of Biochemical Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100081, PR China

b School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, PR China

c Key Laboratory of Biopharmaceutical Preparation and Delivery, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 10090, China

d Sinovac Biotech Ltd., Beijing, 100085, PR China

e Key Laboratory of Carbohydrate Chemistry and Biotechnology, Ministry of Education, School of Biotechnology, Jiangnan University, Wuxi 214122, China

f Department of Chemistry, The Chinese University of Hong Kong, Shatin, N.T., Hong Kong, China

1 contribute this this work equally

* Corresponding author, E-mail address: yfxia@ipe.ac.cn

Abstract

The incorporation of molecular adjuvants has revolutionized vaccine by boosting overall immune efficacy. While traditional efforts have been concentrated on the quality and quantity of vaccine components, the impact of adjuvant and antigen delivery kinetics on immunity remains to be fully understood. Here, we employed poly (lactic-co-glycolic acid) nanoparticle (PLGA NP) -stabilized Pickering emulsion (PPE) to refine the delivery kinetics of molecular adjuvant CpG and antigen, aiming to optimize immune responses. The hierarchical structure of PPE enabled spatially differential loading of CpG and antigen. The component inserted on the oil-water interphase exhibited a rapid release profile, while the one encapsulated in the PLGA NPs demonstrated a sustained release. This led to distinct intracellular spatial-temporal release kinetics. Compared to the PPE with sustained CpG release and burst release of antigen, we found that the PPE with rapid CpG release and sustained antigen release triggered an early and robust activation of Toll-like receptor 9 (TLR9) in direct way. This fostered a more immunogenic microenvironment, significantly outperforming the inverted delivery profile in dendritic cells (DCs) activation, resulting in higher CD40 expression, elevated proinflammatory cytokine levels, sustained antigen cross-presentation, an enhanced Th1 response, and increased $CD8^+$ T cells. Moreover, prior exposure of CpG led to suppressed tumor growth and enhanced efficacy in Varicella-zoster virus (VZV) vaccine. Our findings underscore the importance of tuning adjuvant and antigen delivery kinetics in vaccine design, proposing a novel path for enhancing vaccination outcomes.

Keywords

Spatial-temporal delivery; Pickering emulsion; molecular adjuvant; tumor vaccine

Extracellular Vesicle Spherical Nucleic Acids

Kaizhe Wang[1,*]

[1]Ningbo Key Laboratory of Biomedical Imaging Probe Materials and Technology, Ningbo Cixi Institute of Biomedical En-gineering, Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering, Chinese Academy of Sciences, Ningbo 315300

E-mail: wangkaizhe@nimte.ac.cn

Abstract: Extracellular vesicles (EVs) are naturally occurring vesicles secreted by cells that can transport cargo between cells, making them promising bioactive nanomaterials. However, due to the complex and heterogeneous biological characteristics, a method for robust EV manipulation and efficient EV delivery is still lacking. We developed a novel class of extracellular vesicle spherical nucleic acid (EV-SNA) nanostructures with scalability, programmability, and efficient cellular delivery. EV-SNA can be constructed from a wide range of biological sources EV, enhancing cellular delivery capability by nearly 10 to 20 times. Compared to artificial liposomal SNA, endogenous EV-SNA exhibited better biocompatibility and more effective delivery of antisense oligonucleotides in hard-to-transfect primary stem cells. Additionally, the use of DNA to encode the heterogeneous interfaces of EVs and cells in a manner free of covalent or genetic modifications is reported, which enables orthogonal EV-cell interkingdom interactions in complex environments. By implementing several EV-cell circuits, it shows that this DNA-programmed system allows orthogonal EV-cell communications in complex environments. We further demonstrates efficient delivery of EVs with bioactive contents derived from feeder cells toward monkey female germline stem cells (FGSCs), which enables self-renewal and stemness maintenance of the FGSCs without feeder cells. As a novel material form, EV-SNA may provide a modular and programmable framework paradigm for EV-based applications in drug delivery, disease treatment, nanovaccines, and other fields.

Keywords：Extracellular vesicles, Exosomes, Spherical nucleic acids, Cellular delivery.

References

[1] Chen H, Ding Q, Li L, Wei P, Niu Z, Kong T, Fu P, Wang Y, Li J, Wang K#, Zheng J#. Extracellular Vesicle Spherical Nucleic Acids. JACS Au, 2024, 4(6), 2381-2392.

[2] Yao X, He D, Wei P, Niu Z, Chen H, Li L, Fu P, Wang Y, Lou S, Qian S, Zheng J#, Zuo G#, Wang K#. DNA Nanomaterial-Empowered Surface Engineering of Extracellular Vesicles. Adv Mater, 2023, e2306852.

[3] Wang K*, Wei Y*, Xie X, Li Q, Liu X, Wang L, Li J, Wu J, Fan C. DNA-programmed stem cell niches via orthogonal extracellular vesicle-cell communications. Adv Mater, 2023, 35(45), e2302323.

报告人/墙报展示人简介：

王凯喆，中国科学院宁波材料技术与工程研究所，任“春蕾人才”副研究员。主要研究方向是基于细胞外囊泡和 DNA 纳米技术发展新型可编程纳米材料，用于药物递送、疾病诊疗。目前，以第一作者和通讯作者在 Adv Mater（×2）、Angew Chem Int Ed、JACS Au、Nano Lett、ACS Nano、Small、J Neuroinflamm、J Nanobiotech 等杂志发表 SCI 论文 15 篇。研究获得国家自然科学基金青年基金、宁波市重点研发计划、中国博士后基金面上项目、中国科学院宁波材料所“春蕾人才”基金、宁波甬江创新人才等项目资助。申请发明专利 5 项。担任中国抗癌协会纳米肿瘤学专业委员会青年委员。Extracellular Vesicle、Exploration 等杂志青年编委。

附：报告人非学生。

AAV 通用型亲和介质制备及吸附性能研究

薛瑞雪[1,2,3]，黄永东[1,2,]，赵岚[1,2]，朱凯[1,2]，王启宝[3]，马光辉[1,2*]

([1]生化工程国家重点实验室,北京，100190)

([2]生物药制备与递送重点实验室(中国科学院),北京，100190)

([3]中国矿业大学（北京），北京，100083)

Email：ghma@ipe.ac.cn

腺相关病毒(adeno-associated virus,AAV)载体具有体内表达时间长、宿主范围广、免疫原性低、安全性高等优点，是疫苗和基因治疗研究中最有应用前景的载体之一[1]。梯度离心、离子交换、体积排阻层析等多种工艺因效率和成本等问题无法实现 AAV 载体大规模制备，极大限制了 AAV 的批量生产[2]。亲和层析法利用 AAV 病毒衣壳蛋白和抗体间的亲和作用，可以高效、快速、特异性的纯化 AAV。目前市售的 AAV 亲和层析介质多以抗体作为亲和配基，价格昂贵。另一种思路是采用仿生多肽来作为配基，可以大规模化学合成，降低介质成本。

本研究通过深入分析 AAV 的衣壳蛋白结构，确定选用生物相容性良好的琼脂糖微球作为基质[3]，将多肽配基偶联至琼脂糖微球上[4]。通过对亲和介质的结构进行一系列调控，使其对 AAV 衣壳蛋白的吸附具备高效性。通过控制介质制备工艺条件，本研究成功制备出结构可控的 AAV 亲和层析介质[5]。图 1 为激光扫描共聚焦显微镜观察介质对重组 AAV2（rAAV2）病毒衣壳蛋白的吸附量随时间的变化情况。吸附开始后，时间为 5min 时，介质对 rAAV2 病毒衣壳蛋白已有结合。随着吸附时间的延长，荧光强度逐渐增加，说明亲和介质吸附衣壳蛋白的量相应增加。吸附时间 2h 时，荧光强度最大，说明此时介质对衣壳蛋白的结合量最高。本研究为 AAV 的亲和层析纯化提供了新思路。

关键词：AAV；亲和层析；琼脂糖介质；吸附性能；激光扫描共聚焦显微镜

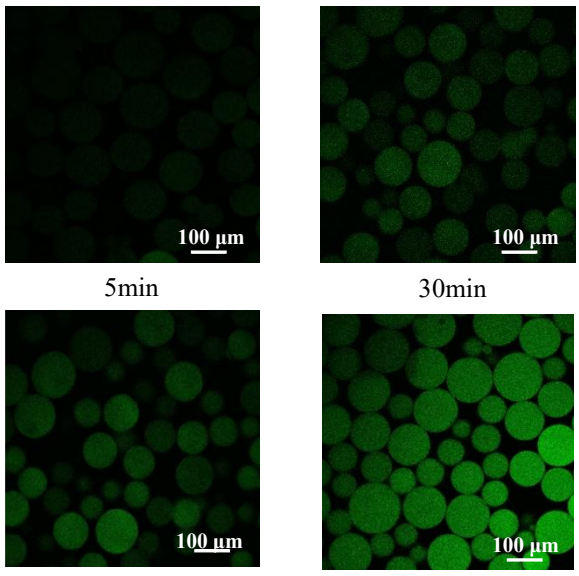


Fig1 CLSM images of adsorption rAAV2 capsid protein on agarose-based the affinity chromatography media

参考文献：

Zhang, C., Zhou, D., Adenoviral vector-based strategies against infectious disease and cancer. Hum. Vaccines Immunother.2016, 12, 2064–2074.

Zhang, Ran, Cao, L., Cui, M., Sun, Z., Hu, M., Zhang, Rouxuan, Stuart, W., Zhao, X., Yang, Z., Li, X., Sun, Y., Li, S., Ding, W., Lou, Z., Rao, Z, Adeno-associated virus 2 bound to its cellular receptor AAVR. Nat. Microbiol.2019, 4, 675–682.

Zhao L , Huang L , Huang Y , Preparation and structural regulation of macroporous agarose microspheres for highly efficient adsorption of giant biomolecules. Colloid and Polymer Science. 2022,

Lan Z ,Yong dong H ,Kai Z , Manipulation of pore structure during manufacture of agarose microspheres for bioseparation. Engineering in life sciences,2020,20(11):504-513.
Dong xia H ,Rong yue Z ,Jia G , et al. Rapid and high-capacity loading of IgG monoclonal antibodies by polymer brush and peptides functionalized microspheres[J].Journal of Chromatography A,2021,1640461948-461948.

墙报展示人简介：

中国矿业大学（北京）硕士在读

附：墙报展示人为学生

第 21 分会场：吸入药物颗粒递送的前沿技术和进展

郭立玮，研究员，博士生导师，广州百奥格林生物科技有限公司联合创始人、首席科学家。兼任中药制药过程技术与新药创制国家工程研究中心专家委员会委员、粤港澳大湾区博士后科技创新（南沙）公共研究中心创新创业导师、香港 科技大学霍英东研究院粤港澳（国际）青年创新工场创业导师、全国吸入给药联盟常务理事等职。曾任南京中医药大学中医药研究院常务副院长、江苏省植 物药深加工工程研究中心主任，江苏省颗粒学会副理事长兼生物医药专业委员会主任委员；江苏省生物医学工程学会纳米专业委员会副主任委员等职。

主要从事中药药剂学、药物动力学、制药分离工程技术研究。专注中药制药分离工程、微纳米科技、数据科学、材料化学工程等交叉学科研究。在中药膜分离、微纳米科技及其产业化领域有较深入、系统的研究。

主持涉及微纳米科技领域的国家、部省级及市级项目，包括：①面向中药复杂体系的吸入给药复 合粒子优化设计原理与方法；②面向干粉吸入剂的中药复合粒子研究；③超细粉体二妙丸的生物药剂 学研究；④中药新药产品开发中超细粉碎技术的应用等。

发表中、英文科学论文 400 余篇。主编《中药药物动力学方法与应用》、《制药分离工程》（“十二五”国家规划教材）、《基于膜过程的中药制药分离技术：基础与应用》（获国家科学技术学术著作出版基 金资助）等多部学术著作。

获授权发明专利 10 余项，软件著作权 2 项。主持新药研发项目 7 项，均获新药临床研究批件，3 项获新药证书。其中主持研发的国家新药“三拗片”于 2017 年 12 月荣获中国专利优秀奖，2019 入选“江苏医疗行业出色产品品牌”名册。获国家科技进步奖二等奖 1 项，获教育部、江苏省科技进步奖等多项。

复方中药吸入给药颗粒制备的科学与技术问题

郭立玮[1]，钟文蔚[2]，曾浩然[3]，陆谨[1]，胡涛[1]，殷爱玲[1]

（1.南京中医药大学，2.广东药科大学 3.广州百奥格林生物科技有限公司）

摘要正文：

吸入给药系统系指通过特定的装置将药物以雾状形式传输至呼吸道和/或肺部以发挥局部或全身作用的制剂。鼻、咽、喉合称上呼吸道，本文所述“复方中药吸入给药”包含：（1）将药物传输至肺部以发挥局部或全身作用中药吸入制剂；（2）中药经鼻吸入脑靶向给药系统。中药经鼻吸入给药历史悠久，经鼻给药治疗全身性疾病首见于《黄帝内经·灵枢》杂病第二十六；张仲景在其《金匮要略》中记载了“以蘁捣汁灌鼻中”以及“吹皂荚末鼻中”以抢救卒死者。2020 版《中国药典》第一部至今仍收载刊于 1406 年的中医药经典《普济方》中，用于治疗中风、昏厥的经鼻给药制剂“通关散”。

目前中药吸入给药颗粒制备面临的科学问题：克服因肺部给药途径的解剖学结构特点，水溶性与脂溶性两类成分在吸入过程可停留在呼吸道不同部位而造成“相分离”现象，实现药物多组分的同步吸入。中药经鼻吸入脑

靶向给药系统面临的科学问题则为如何：（1）创建可兼容药物穿越血脑屏障的两关键环节（“鼻粘膜吸收”与“脑组织渗透”）的药物载体。（2）根据药物与载体材料的物理化学特征，寻找可使不同成分有序复合的技术手段。（3）阐述复方配伍背景下，多元成分经鼻脑靶向转运机理。（通过血脑屏障时各成分之间的相互作用——互相促进抑或竞争透过）。

针对现代医学视野下中药吸入给药颗粒制备的技术问题，本课题组开展了：（1）基于质量源于设计的中药复杂体系干粉吸入给药系统的研究；（2）膜乳化-喷雾干燥联用技术法制备由纳米粒组装而成的微米级复合粒子等思考与实践。并以α-细辛脑干粉与纳米粒为例探讨了不同制剂经鼻脑靶向给药系统的差异。

关键词：复方中药、吸入给药、经鼻吸入脑靶向、膜乳化-喷雾干燥联用、α-细辛脑

寸 冬梅，深圳职业技术大学教授，博士生导师。1999 年获北京大学药学学士学位，2005 年获沈阳药科大学药剂学博士学位，2007-2011 年在丹麦哥本哈根大学从事博士后研究，2004-2024 年在沈阳药科大学工作，2021 年晋升为沈阳药科大学教授。先后入选辽宁省高等学校杰出青年学者成长计划和辽宁省高等学校优秀科技人才支持计划、沈阳市高层次人才拔尖人才称号。中国颗粒学会吸入颗粒专业委员会暨全国吸入给药联盟委员，国家自然科学基金函评专家，SCI 期刊 Chinese Chemical Letter，Asian Journal of Pharmaceutics 以及 Acta Materia Medica 和《沈阳药科大学学报》编委。

主持了包括国家自然基金项目在内的多项国家级、省级科研项目。发表高水平研究论文 70 余篇，参编中英文专著及教材 5 部，申请发明专利 4 项。获辽宁省自然科学学术成果一等奖 1 项，沈阳市自然科学学术成果二等奖 1 项。主要致力于蛋白质、核酸、疫苗等生物大分子药物的递送系统的研究。针对肺癌、慢性肺阻病、哮喘和肺部感染等难治性肺部疾病的治疗，围绕肺部吸入的给药途径，通过制剂的设计、制剂与肺内环境相互作用的研究，寻求克服肺部药物递送的屏障、提高递送的有效策略。

雾化吸入免疫调节剂以调节局部免疫微环境的制剂学策略

寸冬梅[1,2*]，乌兰[1]，徐文文[1]，李鹤然[3]，杨明世[1,4]

[1]沈阳药科大学无涯创新学院，辽宁省沈阳市沈河区文化路 103 号，110016

[2]深圳职业技术大学食品药品学院，广东省深圳市南山区留仙大道 7098 号，518055

[3]中国医科大学药学院，辽宁省沈阳市沈北新区蒲河路 77 号，110001

[4]丹麦哥本哈根大学药学院，Universitetsparken 2, 2100 Copenhagen, Denmark

*E-mail：cundongmei@163.com

摘要正文：

肺部疾病的发生、发展与免疫稳态失衡密切相关。免疫稳态是指免疫系统在维持机体防御和避免病理损伤之间的平衡状态。免疫稳态的失衡可能导致肺局部免疫微环境的抑制、过度活化或者异常表型，进而影响肺部健康，导致肺部疾病，包括慢阻肺、肺癌、哮喘、特发性纤维化等的发生和进展。通过给予免疫调节剂，纠正肺局部免疫微环境的失衡是治疗免疫相关疾病的有效手段。另一方面，人体呼吸道因其独特的解剖学构造和生理学功能，可通过呼吸道雾化给药直接将抗体、细胞因子、疫苗等免疫调节剂递送到肺部，既可直接调控局部的黏膜免疫、募集特异性的防御细胞，还可通过黏膜相关淋巴组织诱导全身的获得性免疫以及免疫记忆，是一种非常有潜力的实施免疫疗法的给药途径。然而，肺部气道高度分支的生理结构、肺内黏液以及肺泡表面活性剂等复杂的内源性物质的屏障作用以及肺部非特异性细胞的摄取等因素都严重影响着肺部递送免疫调节剂的效率。近年来，科研人员广泛尝试各种新型的材料、采用颗粒工程、纳米技术等制剂学手段，设计以微米、纳米颗粒为载体的多功能吸入颗粒，协助免疫调节剂克服上述屏障，显著提高肺部递送效率。 微、纳米颗粒的载体材料的选择、颗粒尺寸和形态的控制，药物释放速率的调节以及颗粒表面的功能化修饰等都对其肺内表现影响显著。报告中，将以免疫调节剂 CpG 等为例，就包载免疫调节剂的肺部吸入颗粒的处方设计中需要考虑的关键因素展开讨论，并对其未来的研究方向作以展望。

关键词：免疫调节剂；肺部递送；颗粒；肺部疾病治疗

参考文献

[1] S. Anderson, P. Atkins, P. Bäckman, D. Cipolla, A. Clark, E. Daviskas, B. Disse, P. Entcheva-Dimitrov, R. Fuller, I. Gonda, H. Lundbäck, B. Olsson, J. Weers, Inhaled medicines: past, present, and future, Pharmacol. Rev. 74 (2022) 48.

[2] P.S. Hiemstra, P.B. McCray Jr., R. Bals, The innate immune function of airway epithelial cells in inflammatory lung disease, Eur. Respir. J. 45 (2015) 1150–1162.

[3] Emma R. Sudduth, Michael Trautmann-Rodriguez, Nicole Gill, Kartik Bomb, Catherine A. Fromen. Aerosol pulmonary immune engineering. Advanced Drug Delivery Reviews 199 (2023) 114831.

沈丹蕾 Medical Doctor 南京白令信息科技有限公司总经理

毕业于南京医科大学临床医疗系和武汉同济医科大学公共卫生学院。在过去的 30 多年中：做过 8 年临床医师（呼吸领域），5 年国际制药 GSK 吸入药物临床研究与应用，14 年国际吸入给药递送装置 Aptar Pharma 吸入给药装置 - 鼻递送装置，pMDI 递送装置技术应用。

在吸入装置，吸入药品包装以及对吸入药物相关法规政策质量技术标准上有丰富的知识和经验。在英国接受过完整的 FDA/EMA 吸入产品的法规学习和培训包含 USP/Ph.Eur. 2011 年开始接受新的挑战，专注于哮喘和慢性阻塞性肺病的市场调研以及吸入药物法规和技术标准的培训（FDA/EMA/USP/CFDA）和药典标准，重点在吸入制剂质量研究和体外测试研究以及体内外相关性研究。目前担任：亚洲吸入技术协会常务委员和全国吸入给药联盟主席，中国颗粒学会吸入颗粒专业委员会副主任委员。

近几年在亚洲变态反应和哮喘年会发表数篇论文摘要，2 次亚洲吸入给药技术大会会议投稿和演讲。2014，2015 年伦敦吸入技术会议邀请演讲人。吸入相关论文摘要和综述文章 10 余篇。参与翻译学术专著 3 部。中国吸入制剂丛书分册编委。

从 OINDP 经口吸入和鼻用药产品体外测试中获得更好的体内预测

Dr. Clair Brooks, Mattew Fenn Copley Scientific Limited
Dr. Anny SHEN (沈丹蕾) ， Tong SHEN Nanjing Bering Scientific Information Limited
Shendl60529@aliyu.com

探讨了在经口吸入和鼻用药物产品（OINDP）开发中，采用更具有临床代表性的体外测试方法和建立方法的动机，特别是在生物等效性（BE）展示方面的重要性。并强调：通过改善体外-体内相关性（IVIVCs）研究，可以提高传统药典方法的临床相关性，从而加速 OINDP 产品开发，减少对体内测试的依赖。讨论了通过使用更现实的口-咽-喉部模型和鼻腔部内模型等方法来提高体外测试的准确性和代表性。此外，通过改进的 IVIVCs 对于仿制药的等效性测试至关重要，有助于更稳健地在体外确认 BE，尽可能减少临床研究的需求。最终，研究强调了不断发展和改进的体外测试实践对于提高 OINDP 产品质量控制和监管提交的重要性。

关键词：OINDP 经口吸入和鼻用药，生物等效，体外测试，体内外相关性

佟振博，东南大学教授、江苏特聘教授。在哈尔滨工业大学获得学士、硕士学位，澳大利亚新南威尔士大学获得博士学位，日本东京农工大学生物应用及系统工程学院助理教授，2015 年回国入选江苏特聘教授。主要从事多相流仿真在药物递送及计算医学方面的研究，干粉吸入剂研究工作得到国际专家的认可。在呼吸系统疾病紧缺的吸入药物装置方面打破国外垄断，填补了国内空白。有多篇高被引文章，获得江苏省科技进步奖。美国 FDA 吸入制剂评价方法研究项目主要参与人，中国吸入制剂指导原则制定专家组成员。CDE 药物制剂质量研究与控制重点实验室特聘专家。

基于鼻腔给药靶向递送的优化策略

郭刚[1]，佟振博[1,2*]，余艾冰[1,2,3]

[1]东南大学能源与环境工程学院，南京，210096

[2]东南大学-蒙纳士大学苏州研究院，苏州，215123

[3]蒙纳士大学，澳大利亚墨尔本，Vic 3800

*Email: z.tong@seu.edu.cn

摘要正文：鼻腔除了作为呼吸循环系统的重要组成部分，也是一个重要的给药途径。鼻腔给药一般用于鼻腔局部疾病（鼻炎、鼻息肉和鼻窦炎等）以及鼻腔手术术后治疗。近年来的研究表明，存在的鼻脑通路为鼻腔给药治疗脑部疾病提供了可能。鼻用疫苗的开发应用也使得鼻腔给药逐渐变得重要。然而由于特殊的鼻腔解剖结构，鼻腔给药的递送效率并不高，尤其是鼻脑通路的递送效率并不理想，为提高鼻腔给药的靶向递送效率，本文提出了几种优化策列，旨在提高递送效率。结果表明，呼气辅助给药方法（EDM）可防止小颗粒进入喉部和下呼吸道，从而减少药物浪费和副作用。此外，将 EDM 的输送效率与双向鼻腔输送方法（BDM）进行了比较，以确认所提出的方法具有优势。与 BDM 相比，气雾剂给药过程中的轻微呼出气流可以实现对小颗粒的更高输送效率。对于特定的粒径，存在一个最佳呼气流量，可使鼻甲的输送效率最大化。EDM 具有药物分布更均匀和输送效率更高的优势，未来可能更有希望用于治疗中枢神经系统疾病、局部疾病和全身疾病。高流量辅助气流法可有效提升嗅区和上鼻腔的递送效率。

关键字：鼻腔给药，药物递送，气溶胶，呼气，计算流体力学

参考文献

[1] Guo. Gang, et al. A new exhalation-assisted aerosol delivery method for nasal administration. *Powder Technology*. 2023, 427: 118708.

吴闻哲，女，研究员，医药先进制造国家工程研究中心经鼻及吸入给药研究室负责人，教育部学位与研究生教育发展中心通讯评议专家、中国颗粒学会吸入颗粒专业委员会委员、上海呼吸系统药物工程技术研究中心副主任、上海市药品审评核查专家、浦东新区科技发展基金专家。主要研究方向为经鼻给药制剂、吸入给药制剂、大分子药物新型给药系统。

主持完成了国家十二五重大新药创制子课题--小核酸黏膜给药系统开发。负责国药基金项目一类新药重组人睫状神经营养因子（CNTF）鼻喷剂的研制，承担上海市药物制剂与工程化专业技术服务平台建设 15DZ2290600 等多个项目。已和多家企业开展技术合作和科研成果转让，包括创新药鼻喷和吸入制剂、改良药鼻喷和吸入制剂、仿制鼻喷雾剂、复方气雾剂等，已协助企业获得鼻喷剂、吸入溶液临床批件多项。国内外期刊发表文章 20 余篇，SCI 2 篇。申请专利 12 项，授权专利 8 项，PCT 专利 1 项。

依达拉奉和利培酮电加热气化吸入给药研究

唐艺菲[1]，高 洁[1]，张 琪[1]，郭俊彦[1]，孔红莉[1]，吴闻哲[1,*]

[1]中国医药工业研究总院医药先进制造国家工程研究中心，上海，201203

*Email: wuwenzhe@sina.com

摘要正文：

与传统干粉吸入剂直接吸入含药粉体不同，电加热气化吸入给药将药物快速升温气化，随后在吸气气流中冷却形成气溶胶吸入。因此，在受热气化过程中控制药物的降解程度，同时保证形成的气溶胶具有较好的递送效率是重要的研究内容。本研究选取依达拉奉（低熔点和沸点）和利培酮（高熔点和沸点）为模型药，采用自制的快速升温、可调式电加热吸入装置，对不锈钢薄片材质、药物涂层厚度、加热气化温度进行优化，探索药物气化吸入过程中控制热降解和提升递送效果的方法。结果表明，不锈钢薄片经 500 ℃、30 min 加热氧化处理后可显著提高利培酮气溶胶纯度，从 39.31%到 95.77%。1.9 mg 依达拉奉在 311 和 357 ℃的加热气化温度下，递送药量较高，气溶胶纯度大于 99.8%；而利培酮 0.5 mg 在 357 ℃的加热气化温度下，递送药量和气溶胶纯度均较高。2 种药物电加热气化后微细粒子分数均大于 95%，具有较好的肺部递送特性。

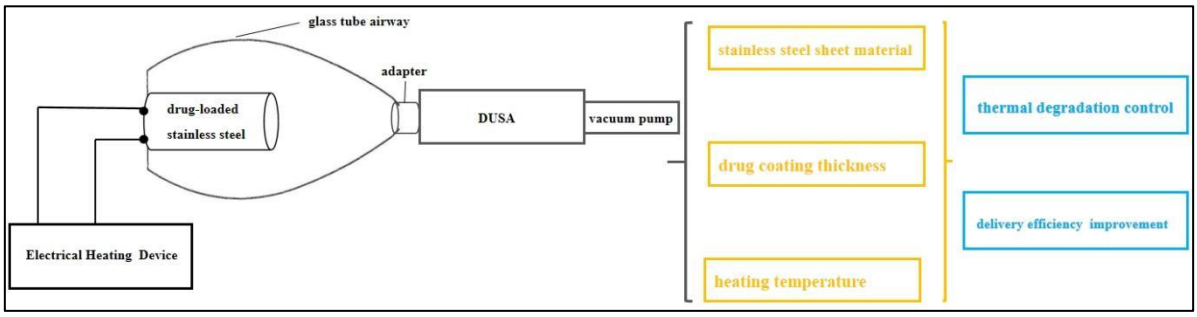


Fig. 1 Schematic Diagram of Detection Device for Emitted Dose of Electrical Heating Inhalation Device

关键词：电加热；气化；吸入；气溶胶；肺部递送

参考文献

[1] RABINOWITZ J D, WENSLEY M, LLOYD P, et al. Fast onset medications through thermally generated aerosols [J]. J Pharmacol Exp Ther, 2004, 309(2): 769-775.

[2] MACLEOD D B, HABIB A S, IKEDA K, et al. Inhaled fentanyl aerosol in healthy volunteers: pharmacokinetics and pharmacodynamics [J]. Anesth Analg, 2012, 115(5): 1071-1077.

[3] MYERS D J, TIMMONS R D, LU A T, et al. The effect of film thickness on thermal aerosol generation [J]. Pharm Res, 2007, 24(2): 336-3342.

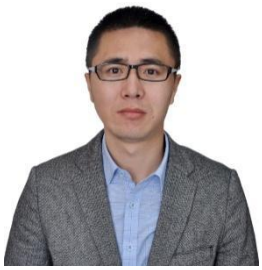
[4] CROSS D, HERBETTE M, KELLY A J G, et al. Multiple dose condensation aerosol devices and methods of forming condensation aerosols: US, 20050268911A1 [P]. 2005-12-08.

[5] SIMIS K, LEI M, LU A T, et al. Nicotine aerosol generation from thermally reversible zinc halide complexes using the Staccato system [J]. Drug Dev Ind Pharm, 2008, 34(9): 936-942.

[6] BENNETT B, HALE R L, LU A, et al. Substrates for drug delivery device and methods of preparing and use: US, 20140072605A1 [P]. 2014-03-13.

[7] MYERS D J, SPYKER D A, DINH K, et al. Consistency of dosing with a thermal aerosol generation system: in vitro and in vivo correlation [J]. Future Med Chem, 2011, 3(13): 1719-1733.

[8] DINH K V, MYERS D J, NOYMER P D, et al. In vitro aerosol deposition in the oropharyngeal region for Staccato loxapine [J]. J Aerosol Med Pulm Drug Deliv, 2010, 23(4): 253-260



崔新光，副研究员，长期从事呼吸多相流及其交叉方面的研究。其先后分别在北京航空航天大学、清华大学和德国海德堡大学获得了流体力学专业方向的学士、硕士和博士学位，并先后在新加坡南洋理工大学和美国伯克利国家实验室从事科研工作，现任华中科技大学航空航天学院呼吸多相流课题组组长。申请人现任中国生物医学工程学会高级会员、世界华人生物医学工程学会终身会员、中国颗粒学会青年理事和中国颗粒协会气溶胶专委会常务委员、中国颗粒学会吸入颗粒专业委员会委员、中国解剖学会智慧解剖学分会委员。任由北航主办的卓越期刊 Medicine in Novel Technology and Devices 杂志的 section editor、Journal of Modern Industry and Manufacturing 杂志的 associate editor 以及其它数个杂志的编委和审稿人。曾主持/参与 10 余个世界前沿项目，已发表 50 余篇 SCI 文章，获得专利 7 项，出版译著一本，多次受邀在国际国内会议做大会报告和主题报告等。

人体呼吸道内三维非定常流场的数值研究

崔新光[1,*]，荆浩[1]，王一啸[1]

[1] 华中科技大学航空航天学院，湖北省武汉市洪山区珞喻路 1037 号，430037

*Email: xinguang_cui@mail.hust.edu.cn

摘要正文：

准确评估和预测人体呼吸道内的不稳定呼吸气流特征在了解有毒颗粒物和吸入气溶胶药物在人体呼吸道中的沉积方面起着至关重要的作用。考虑到人体不同呼吸频率下呼吸流速和声门运动的变化，通过大涡模拟研究了真实呼吸条件下人体呼吸道内的流场特性，包括速度场、压力场、功率损失以及涡流结构。此外，还基于模态分解探究了呼吸流动特征。研究结果表明，呼吸频率的变化显著影响呼吸气流的不稳定性、湍流演变和涡流结构耗散，因为它们增加了湍流扰动引入的复杂性和蝴蝶效应。其次，考虑到呼吸生理特征，尤其是在低呼吸频率下，声门处的压降和流速也符合幂律关系。声门运动在吸气和呼气过程中的能量消耗中起着不同的作用，其大小可以使用基于声门面积和呼吸流量的多项式函数来预测。最后，模态分解可以有效地应用于呼吸流特征的研究，但我们建议分别研究吸气和呼气。主导模式的空间分布表征了大多数呼吸流特征，并受到呼吸频率的影响。谱熵结果表明，声门运动和缓慢呼吸都会延迟吸气和呼气过程中上呼吸道的流动转捩。这些结果证实，不同呼吸频率下呼吸生理特征的变化对不稳定的呼吸气流特征有显著影响，结合更多的生理数据对于获得真实的呼吸气流特性是至关重要的。

关键词：不稳定呼吸气流；呼吸频率；大涡模拟；声门运动；模态分解

谢慧军：DFE Pharma 中国区副总经理及吸入生物药业务负责人，中国科学院理学博士，江西师范大学生物与医药专业特聘校外硕士导师，深耕医药行业 15 年以上，先后任职于亚盛医药、赢创化学和 DFE Pharma 等国内外知名企业。曾参与多个新药/仿制药研究开发上市，组织举办国内外多个大型行业会议（如 DPI China 等），在国内外核心期刊及 SCI 发表 10 余篇论文和 2 篇专利。

细粉乳糖及硬脂酸镁在干粉吸入制剂开发中的考虑

谢慧军

DFE Pharma，上海浦东新区博航路 68 号 303 室，200126

Email: eric.xie@dffepharma.com

摘要正文：

在干粉吸入制剂配方中额外加入一些粒径小的组分可以改善药物的沉积和分散性能，本报告重点研究细粉乳糖以及硬脂酸镁在干粉吸入制剂开发过程中的影响及作用。研究选择不同粒度的细粉乳糖的规格（LH210, LH220, LH230, LH300）与粗乳糖（LH 206）比例来优化混合物的流动性和肺部沉积，通过使用QbD方法达到流动和沉积的最佳组合；并考察不同原理的填充设备对于填充RSD的影响。

另外，分析使用硬脂酸镁上市粉雾剂产品及硬脂酸镁在粉雾剂中的功能与作用，上述乳糖混合物继续在高剪切混合器中混合一定硬脂酸镁，通过水接触角和飞行时间二次离子质谱仪考察不同的混合时间和混合速度对于流动性及硬脂酸镁包裹性的影响。

关键词：粉雾剂；细粉乳糖；硬脂酸镁

参考文献

[1] **A. Welle , M. Mehta, K. Marek , H. Peters, P. van der Wel and O. Imole, Impact of high shear blending on distribution of magnesium stearate on lactose for dry powder inhaled formulations, International Journal of Pharmaceutics 647 (2023) 123503**

[2] **O. Imole, M. Mehta, H. Peters, M. Zerrer and E. Sternberger Rutzer, The result of the magic triangle of excipients, blending and filling processes, Technopharm 11, Nr. 1, (2021) 6-14**

[3] **G. A. Hebbink, M. Jaspers, H. J.W. Peters, B. H.J. Dickhoff, Recent developments in lactose blend formulations for carrier-based dry powder inhalation, Advanced Drug Delivery Reviews 189 (2022) 114527**

崔岩，男，副教授，博士生导师，中国颗粒学会青年理事，长期从事吸入给药领域的研究工作，以第一/通讯作者在 J. Fluid Mechanics, Int. J. Pharmaceutics 等流体力学和药学顶刊上发表论文 20 余篇，授权发明专利 5 项，在研国家重点研发课题、国基金重点项目等项目。

一种基于吸入给药效率分析的呼吸系统疾病个体化诊断方法

王玉龙[1]，崔岩[1]，金振东[1]，Matjaž Hriberšek[2]，Jure Ravnik[2]

[1] 华中科技大学 机械科学与工程学院，湖北·武汉，430074

[2] 马里博尔大学 机械工程学院，斯洛文尼亚·马里博尔，SI-2000

*Email: yan_cui@hust.edu.cn

摘要正文：

由于人体呼吸道中的肺泡壁薄、吸收表面积大和吸收药物快等特点，吸入给药被普遍认为是呼吸系统疾病的首选给药方式。然而，在临床治疗中，受患者个体化差异大和依从性低等因素的影响，存在药物递送效率普遍较低的突出问题。针对上述挑战，本研究提出了一种基于计算流体-颗粒动力学的高效率、个体化的吸入给药效率分析方法。首先，提出了一种不依赖操作者技能的支气管树三维重构技术，可基于患者的临床断层扫描CT图像重构出7级气道精度支气管树；其次，提出了一种高效率呼吸道流场计算方法，在保证计算精度的同时将计算时间降低至24小时以内；最后，提出了一套适用于吸入药物颗粒的高精度颗粒两相流运动模型，可快速预测不同药物颗粒在人体呼吸道内的区域沉积特性。并采用真实呼吸道流场测量和药物区域沉积实验验证了上述方法的可靠性；在60 L/min和15 L/min的吸入流量下，药物总沉积分数的仿真和实验结果差异分别小于4.44%和1.43%。在临床应用时，基于临床测量的患者呼吸道CT图像和吸入特征曲线，可在48小时内给出患者的吸入给药效率分析报告，辅助医生选择最适宜该患者的吸入装置和制剂组合，并以COVID-19患者为案例验证了上述方法的有效性。该方法具有成为呼吸系统疾病临床诊断技术的潜力。

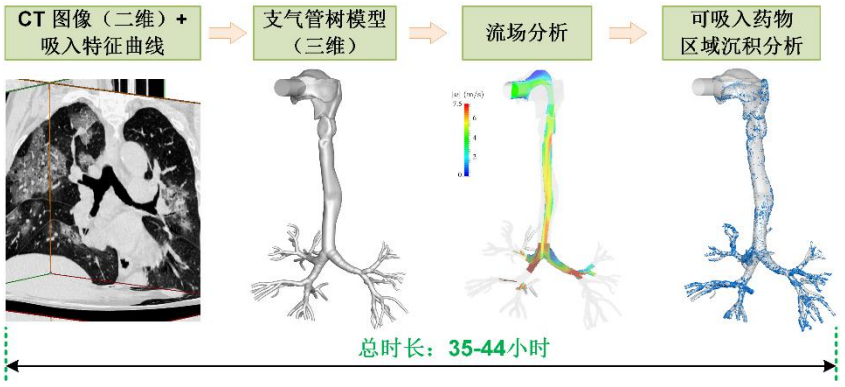


Fig. 1 Flow chart of the individualised approach for drug deposition analysis of respiratory diseases.

关键词： 吸入给药；呼吸系统疾病；药物肺部区域沉积；计算流体-颗粒动力学；个体化诊断方法

参考文献

[1] Y. L. Wang, Z. D. Jin, Y. Cui*, R. B. Dong, L. Li, F. Lizal, M. Hriberšek, J. Ravnik, M. S. Yang and Y. S. Liu (2024). An individualised 3D computational flow and particle model to predict the deposition of inhaled medicines—A case study using a nebuliser. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 2024, 251:108203.

陈晓乐，男，汉族，1986 年生，江苏南京人，中共党员，工学博士，南京师范大学能源与机械工程学院副教授，能源与动力工程系副系主任，江苏省“青蓝工程”优秀青年骨干教师。长期从事动力工程及工程热物理的教学和科研工作，在呼吸道多相流动和室内外污染物预测等领域具有专长。主持国家自然基金面上项目等国家和省部级项目 3 项，横向项目 6 项，发表 SCI 论文 30 余篇，Particle and Fibre Toxicology、Physics of Fluids、Journal of Aerosol Science 等期刊审稿人，曾获全国高校电工电子基础课程实验教学案例设计竞赛二等奖。任中国颗粒学会吸入颗粒专业委员会委员，江苏省粉体新材料智能装备工程技术研究中心技术委员会委员，国家自然科学基金评审专家。

面向智能网式雾化器的实验和数值模拟研究

陈晓乐

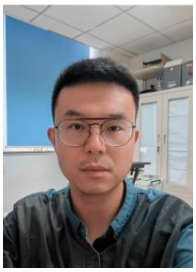
南京师范大学能源与机械工程学院，江苏南京栖霞区学林路 2 号，210042

*Email: xlc@njnu.edu.cn

摘要正文：

雾化器是我国使用量最大的雾化吸入溶液的雾化装置，随着医疗技术的进步，吸入装置的智能化成为未来发展的重要方向。本课题组近年来开展了一系列实验和数值模拟研究，有望推进网式雾化器的智能化。实验方面，构建了液体雾化吸入的沉积实验平台，提出了简单低成本的肺内递送效率体外评价方法，采用荧光NaCl溶液测量上呼吸道沉积比和沉积位置分布，发现了上呼吸道液雾气溶胶沉积比随吸气流量增大先降低后升高的现象，通过热力学原理解释了现象，之后进一步对比了理想口喉模型和真实人体口喉模型对上呼吸道沉积的影响，发现体位对肺内药物递送也有显著影响。数值模拟方面，构建了单个多组分液滴/颗粒物-蒸气作用模型，能够准确预测NaCl溶液、丙三醇等液滴/颗粒的吸湿和蒸发行为，进一步开发了高浓度液滴蒸发的模拟程序，成功与实验结果进行了对比，观察到了呼吸道模型内湿度增大后抑制液滴蒸发的过程。此外，还针对非水基吸湿性溶液设计了实验系统，提出了吸湿性能的测量方法。上述研究能够为智能化网式雾化器研发提供理论支持和技术参考。

关键词：网式雾化器；实验；数值模拟；呼吸道



刘楠，博士，任职于军事医学研究院，主要从事中枢神经系统靶向递送、生物技术药物及吸入制剂研究。作为项目负责人承担国家科技重大专项儿童用药专项课题 1 项，北京市自然科学基金 1 项，以主要负责人或参与人参加军队课题 10 余项。申请国家发明专利 12 项，授权专利 6 项，发表论文 20 余篇。

呼吸道传染病黏膜药物递送系统的设计及研究

刘楠，李蒙，孟繁，王浩，李明峻，郑爱萍*

军事医学研究院，北京市海淀区太平路 27 号，邮编 100850

*Email:apzheng@163.com

呼吸道传染病引起的下呼吸道感染是导致人类死亡的第四大死因，该类疾病具有传播性强、发病集中、致死率高等特点，给公共医疗卫生体系带来了巨大负担。肺是气体交换器官也是呼吸道传染病的主要侵染门户和器官，如何有效提高该区域的防御能力和药物浓度，一直以来都是呼吸道传染病预防和临床治疗的关键。

肺黏膜防御体系构建：肺部大量黏膜表面是感染的主要部位也是防御的关键，构建黏膜免疫能够形成机体的关口性防御屏障，有效阻断呼吸道传染病的感染和传播。因肺内免疫细胞的多样性，给药后可同时产生体液免疫、细胞免疫和黏膜免疫，较传统注射免疫形成更加完整的、系统的免疫屏障。基于此，开发吸入式黏膜免疫疫苗，是呼吸道传染病有效防御的关键。本研究以高传染、高致病性 COVID-19 为对象，选择病毒保守 S 蛋白的 RBD 区域为目标抗原，通过细胞的工程化改造形成载 RBD 抗原并具有靶向功能的细胞外囊泡。1.设计含有 Fc、RBD 以及溶酶体相关膜蛋白 2b (Lamp2b)的嵌合蛋白。通过 DC 细胞改造，实现该嵌合蛋白外泌体生产，通过 Fc 有效介导了载体跨肺上皮细胞的转运，经吸入，形成了有效的免疫屏障。2.将 RBD 抗原蛋白表达于 DC 细胞膜，通过诱导处理，使改造 DC 细胞出芽并获得稳定的类 COVID-19 仿生细胞外囊泡，通过吸入途径实现肺黏膜免疫。上述两种吸入疫苗设计，能够产生有效的黏膜免疫及系统免疫屏障，为呼吸道传染病的预防提供了新的方案。

肺感染疾病治疗：肺部感染性疾病在临床治疗中，常采用注射、口服为主的给药途径，辅以药物吸入治疗，现有治疗方式常导致用药剂量大、靶部位浓度不足、不良反应多等问题，而辅助吸入治疗常采用注射液雾化吸入，存在递送效率低，剂量不可控等问题，因此开发经肺吸入、剂量可控、便携使用的抗感染干粉吸入制剂，能够有效弥补临床用药的不足。研究采用肺内源性脂质材料 DSPC，将其与全氟溴辛烷制备成粒径可控的纳米乳，通过与药物溶液混合后进行喷雾干燥，制备得到多孔载药颗粒，通过对全氟溴辛烷处方比例、纳米乳粒径、干燥参数等的调节，能够形成对多孔颗粒的空气动力学粒径、堆密度、流动性等性能的可控调节，得到具备良好肺沉积和高载药性能的干粉吸入颗粒，显著增加了抗感染药物的肺滞留时间的同时具有良好的安全性，为后续临床药物开发提供了坚实基础。

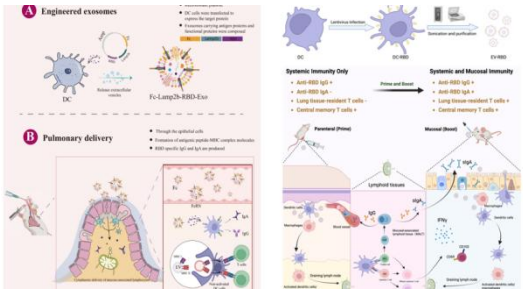


Figure1. Preparation and immune responses of Fc-lamp2b-RBD-Exo and Ev-RBD

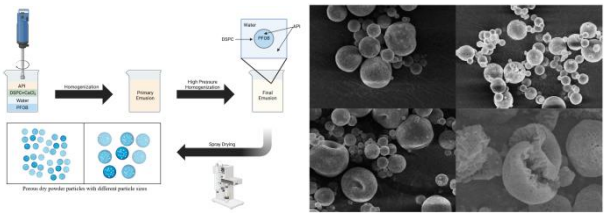


Figure2. Preparation of DSPC porous microsphere

关键词：呼吸道传染病、肺吸入、黏膜免疫、抗感染

参考文献

[1] Li ZJ, Zhang HY, Ren LL, et al. Etiological and epidemiological features of acute respiratory infections in China. Nat Commun. 2021;12(1):5026.

[2] Kozlowski PA, Mantis NJ, Frey A. Editorial: Mucosal Vaccination: Strategies to Induce and Evaluate Mucosal Immunity. Front Immunol. 2022;13:905150.

[3] 李楠、刘畅、刘洪斌.肺部药物递送系统在肺部感染治疗领域的现状和进展[J].药学研究, 2020, 39(11):7.

[4] 中华医学会呼吸病学分会感染学组.成人抗感染药物下呼吸道局部应用专家共识[J].中华结核和呼吸杂志, 2021, 44(4):18.

[5] Qin, L., Sun, Y., Gao, N. et al. Nanotechnology of inhalable vaccines for enhancing mucosal immunity. Drug Deliv. and Transl. Res. 14, 597.

[6] Kryukova N , Baranova I , Abramova N ,et al.Mucosal immunity in health care workers' respiratory tracts in the post-COVID-19 period[J].Scientific Reports, 2023.

李如铁，从事物性表征仪器技术和销售工作多年，熟悉多种物性表征技术，主要包括吸入制剂喷雾表征、吸入制剂溶出、各种粒度测定技术、粉体流动性、分子量表征等。

新型气溶胶发生器及吸入制剂体外溶出系统介绍

报告人[1]：李如铁

[1]上海量通实业有限公司，上海市闵行区虹井路 288 号 B 座 902 室，201103

[2]工作单位，地址，邮编

*Email:13501822725@vip.163.com

主要介绍由瑞典吸入科学公司开发的PreciseInhale气溶胶发生器和DissolvIt吸入制剂体外溶出系统的设计原理和特点，以及应用案例。

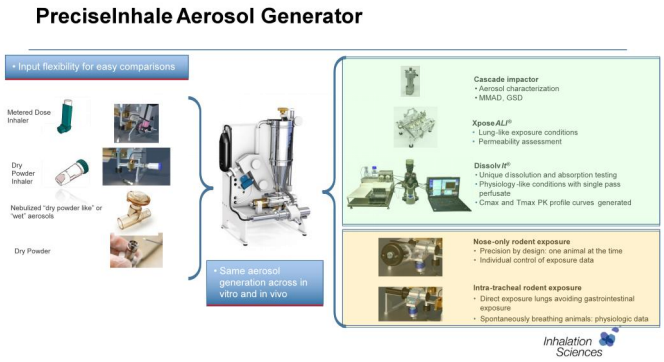


Fig. 1 PreciseInhale Aerosol Generator

关键词：气溶胶；吸入制剂；溶出

张雪娟，博士，暨南大学副教授，中国颗粒学会吸入颗粒专业委员会委员，长期从事口鼻吸入制剂的基础理论及应用转化研究，作为项目负责人完成了7项创新吸入制剂和吸入仿制药的产品开发。主持国家自然科学基金青年基金、广东省自然科学基金面上项目等科研项目5项；以第一作者或通讯作者在ACS Nano、AFM、J Control Release等杂志发表SCI论文 30 篇；授权专利10余项，其中6 项实现转化。

Sivelestat Sodium Dry Powder Inhalation for Respiratory Variability Resistance in Acute Lung Injury

Guanlin Wang[1,2], Cenfeng Liu[1], Yuzhen Jin[1], Ying Huang[1], Xuejuan Zhang[1,*]

[1]College of Pharmacy, Jinan University, Guangzhou, 510632

[2]School of Pharmaceutical Sciences, Sun Yat-Sen University, Guangzhou, 510006

*zhanghongdou0223@126.com

Introduction: Acute lung injury (ALI) is a critical inflammatory syndrome characterized by hypoxemia, inflammatory infiltrates, and severe lung damage, which earned much attention due to its high mortality rate [1]. Sivelestat Sodium (STSM) injection is currently the sole approved treatment for ALI. Nevertheless, the restricted lung accumulation and pronounced hepatotoxicity impose constraints on its widespread clinical utilization [2]. Dry powder inhalations (DPIs) enable the direct delivery of high-dose drug to the lungs, thereby minimizing systemic exposure. However, the limited solubility of STSM and respiratory impairment in ALI patients pose significant challenges for the development of STSM DPIs. In this study, sivelestat sodium dry powder inhalation was prepared by the combination of nanocrystal technology and spray freeze-drying technology to achieve high solubility and excellent respiratory variability resistance.

Methods: STSM DPIs was prepared by high-pressure homogenisation method and spray freeze-drying method. The physicochemical properties of STSM DPIs were characterized, while next generation impactor and respiratory simulator were used to evaluate the aerosolization performance of STSM DPIs under different respiratory variability. The ALI rat model was established to evaluate the *in vivo* efficacy of STSM DPIs.

Results: The F0 exhibits fragmented characteristics, whereas the addition of stabilizer renders the STSM DPIs porous and spherical in shape (Fig. 1A). As the proportion of stabilizer increases, there is a gradual increase in particle size, accompanied by an initial decrease followed by an increase in density. Conversely, the specific surface area and pore volume show an opposite trend (Fig. 1B~E). The inclusion of stabilizer significantly impacts the aerosolization performance of STSM DPIs, with F4 exhibiting the highest FPF value of 78.21 ± 0.80%, which is 2.66 times greater than that of F0 (STSM micro powder) (Fig. 2A). Besides, the FPF of F4 remained consistent across different inspiratory flow rates and two breathing modes among both healthy individuals and dyspnea patients, while F0 demonstrated a dependence on respiratory conditions (Fig. 2B~C). The ALI rat model was established through endotracheal infusion of LPS (Fig. 2D). The results demonstrated F4 significantly inhibited neutrophil elastase activity and alleviated both pulmonary and systemic inflammation, ultimately leading to improvements in lung histopathology (Fig. 2E~G), compared to F0 and commercially STSM injection.

Conclusion: The STSM DPIs exhibited enhanced aerosolization performance under different respiratory variability. The successful development of STSM DPIs provides a promising strategy for inhalation therapy against ALI with respiratory impairment.

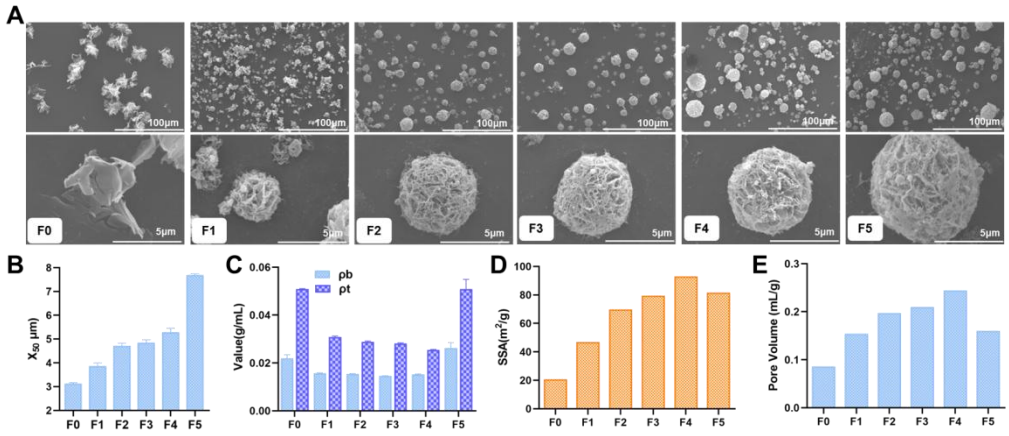


Fig. 1 Preparation and characterization of STSM DPIs: surface morphology(A), particle size (B), density(C), specific surface area(D) and pore volume(E)

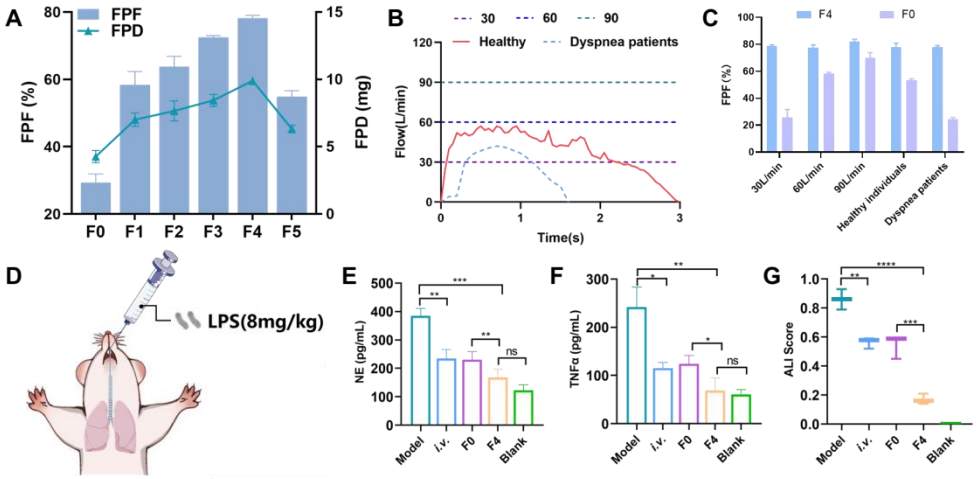


Fig. 2 Fine particle fraction of STSM DPIs (A); breathing modes(B) and fine particle fraction(C) in different respiratory variability; construction of acute lung injury rat model(D); the expression level of neutrophil elastase(E), and TNF-α(F) in lung; Lung injury score(G)

Keywords: Acute Lung Injury; Dry Powder Inhalation; Nanocrystal; Spray Freeze-drying

References

[41] Rubin EJ, Baden LR, Morrissey S. Audio Interview: Acute Lung Injury in Covid-19. *N Engl J Med*. 2020, 383(2): e32.

[42] Kumar H, Choi H, Jo MJ, Joshi HP, Muttigi M, Bonanomi D, Kim SB, Ban E, Kim A, Lee SH, Kim KT, Sohn S, Zeng X, Han I. Neutrophil elastase inhibition effectively rescued angiopoietin-1 decrease and inhibits glial scar after spinal cord injury. *Acta Neuropathol Commun*. 2018, 6(1):73.

张欣，理学博士，副教授，硕士生导师，任职于沈阳药科大学-药物制剂教研室。主要研究方向为仿生黏膜递药系统设计与评价与固体制剂粉体学研究，研究针对目前黏膜递药系统设计中存在的盲目性和低效性问题，基于人体生理微环境，仿生设计智能生物可降解高分子载体，构建可有效突破药物递送障碍的高效递药系统，学术 H 指数（h-index）：23。作为课题负责人主持国家自然科学基金、博士后面上项目、药典委辅料标准提高项目、辽宁省教育厅面上项目、辽宁省青年育苗项目等。相关研究获得辽宁省自然科学奖二等奖、辽宁省自然科学学术成果奖二等奖。

渗透隐身一体化仿生纳米载体设计及逃逸肺内清除命运的机制

张欣[1,*]，岳梦梦[1]，毛世瑞[1,*]

[1]，沈阳药科大学，药学院，辽宁，沈阳，110016

*Email: zhangxinspu@foxmail.com

maoshirui@syphu.edu.cn

摘要正文：

肺部吸入途径治疗哮喘具有天然病灶靶向优势，是哮喘临床治疗的首选给药途径，但作用时间短需频繁给药。新型纳米疗法虽极具应用潜力，但仍无法有效肺部滞留，易被肺部生理屏障快速清除，仍难以实现长效给药。肺部生理屏障包括黏液纤毛清除和肺泡巨噬细胞吞噬是导致纳米粒无法肺部有效滞留的瓶颈问题。本研究以环索奈德为模型药物，设计氨基酸接枝透明质酸衍生物包衣核壳纳米载体，具有良好黏液渗透性的同时，逃逸巨噬细胞吞噬，实现“渗透隐身一体化”功能，进一步探讨载体表面结构特性对黏液渗透、肺泡巨噬细胞吞噬和肺部滞留的影响。应用乳化溶剂挥发法制备PLGA纳米粒，利用壳聚糖和透明质酸-氨基酸衍生物纳米包衣制备透明质酸包衣PLGA纳米粒。包衣纳米粒粒径为 236~267 nm、Zeta 电位约-13 mV，72 h 药物累计释放约 30%，具有明显缓释特性。研究显示所设计纳米载体具有抗黏液黏附性，其中HA-Ser NP 黏液渗透性强。纳米粒与 BALF 共孵育发现亲水性电中性氨基酸接枝的HA-Ser NP 与肺表面活性物质相互作用最小。亲水性带负电或中性氨基酸结构可降低巨噬细胞的吞噬清除。肺气道分布研究显示，HA-Ser NP可有效克服黏液清除，延长载体肺部滞留。小鼠哮喘模型显示，HA-Ser NP 给药后的小鼠体内炎症因子和血清 IgE 浓度分别降低 85.4%，51.5%和 39.3%。综上，氨基酸修饰透明质酸纳米载体表面结构有助于克服肺部清除屏障，延长载体肺部滞留时间，改善药物肺部递送效率。

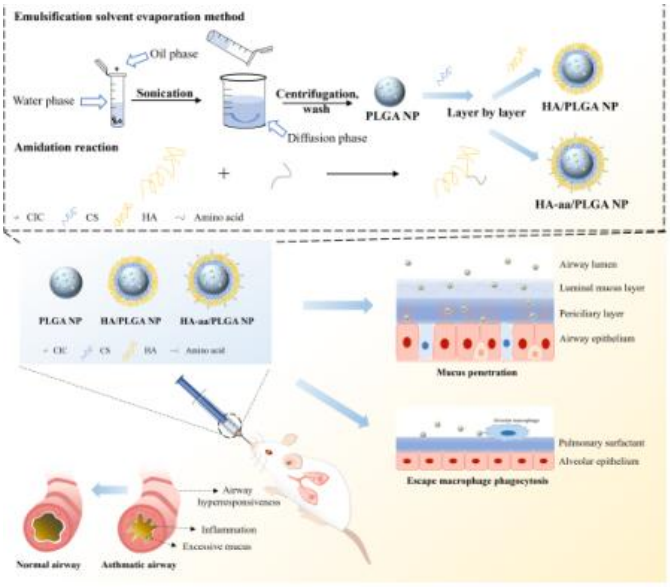


Fig. 1 Schematic diagrams of the designed HA-aa/PLGA NPs and mechanism of overcoming pulmonary physiological barriers.

关键词：聚合物纳米粒；肺部递送；肺部生理屏障；粒子结构特性

刘畅，毕业于沈阳药科大学药物制剂专业，后于澳门大学取得博士学位。主要研究方向为可吸入仿生纳米粒用于炎症性肺部疾病的治疗。近五年， 以第一作者在 ACS nano（2 篇）、 ACS Applied Materials & Interfaces 等期刊发表论文 8 篇。

An Inhalable Hybrid Biomimetic Nanoplatform for Sequential Drug Release and Remodeling Lung Immune Homeostasis in Acute Lung Injury Treatment

Author (Chang Liu)1, Corresponding Author (Shirui Mao)1,*

1 School of Pharmacy, Shenyang Pharmaceutical University, Shenyang 110016, China

* maoshirui@vip.sina.com

Abstract: Interactions of lung macrophages and recruited neutrophils with lung microenvironment continuously aggravate the dysregulation of lung inflammation in pathogenesis of acute lung injury (ALI) or acute respiratory distress syndrome (ARDS). Either modulating macrophages or destroy neutrophil counts cannot guarantee a satisfactory outcome in the ARDS treatment. Aimed at inhibiting the coordinated action of neutrophils and macrophages and modulating the hyper-inflammatory condition, an inhalable biomimetic sequential drug-releasing nanoplatform was developed for the combinatorial treatment of ALI. The nanoplatform (termed D-SEL) was made by conjugating DNase I, as outer cleavable arms, to serum exosomal and liposomal hybrid nanocarrier (termed SEL) via matrix metalloproteinase 9 (MMP-9)-cleavable peptide, and then encapsulating methylprednisolone sodium succinate (MPS). In lipopolysaccharide (LPS) induced ALI mice, the MPS/D-SEL moved through muco-obstructive airways and retained in the alveoli for over 24 h post inhalation. DNase I was then released from the nanocarrier first after responding to MMP-9, resulting in inner SEL core exposing, which precisely delivered MPS into macrophages for promoting M2 macrophage polarization. Locally and sustained DNase I release degraded dysregulated neutrophil extracellular traps (NETs), suppressed neutrophils activation and mucus plugging microenvironment, which in turn amplified M2 macrophage polarization efficiency. Such dual-stage drug release behavior facilitated down-regulation of pro-inflammatory cytokines in the lung but anti-inflammatory cytokines production through remodeling lung immune homeostasis, ultimately promoting the lung tissues repair. This work presents a versatile hybrid biomimetic nanoplatform for the locally pulmonary delivery of dual-drug therapeutics and displays potential in the treatment of acute inflammation.

Keywords: acute lung inflammation; pulmonary drug delivery; exosomes-based drug delivery; mucus permeation; macrophage polarization.

李元：
2015 年 6 月，硕士毕业于南华大学基础医学专业。
2015 年至今，于长沙市第三医院中心实验室，从事科研相关工作。
2017 年 4 月起至今，于长沙市第三医院药物 I 期临床研究室，担任质量负责人。主要研究方向为新药临床研究与评价。共参与 200 余项药物临床试验，其中 30 余项吸入制剂的临床研究，主要负责试验设计及临床质量保证工作。

Pharmacokinetics, Pharmacodynamics, and Tolerability of Single- and Multiple-Dose of inhaled XW001 in Healthy Chinese Subjects

Yuan Li[1], Debiao Xiang[1], Xin Li[*, 1]

[1] Department of Pharmacy, The Third Hospital of Changsha, Changsha, Hunan, China

*Email: xin-li@cssdsyy.com

Objectives: XW001 is a novel recombinant interferon-lambda 1 for the treatment of respiratory syncytial virus (RSV) infection. The aims of the studies were to investigate the pharmacokinetics, pharmacodynamics, safety and tolerability of XW001 inhalation solution in healthy Chinese subjects.

Methods: A randomized, double-blind, placebo-controlled Phase I trial was conducted, up to 80 subjects completed the study with 50 subjects assigned in single ascending dose (SAD) and 30 subjects in multiple ascending dose (MAD). SAD subjects received 0.2, 0.5, 1.0, 2.0 or 4.0 mg XW001 or placebo inhalation solution. MAD subjects received 1mg, 2mg XW001 or placebo inhalation solution twice daily from Day 1 to Day 3 and 1 mg once daily on Day 4 (n=20) or 1mg XW001 or placebo inhalation solution once daily from Day 1 to Day 7 (n=10). Blood and induced sputum samples were taken for pharmacokinetic analysis, pharmacodynamic analysis and safety/tolerability assessment. To characterize the pharmacokinetics (PK) of XW001 and its effect on sputum anti-virus gene expression (ISG56, Mx1, OAS1 and IFIT2) and serum β2m concentrations (pharmacodynamics, PD) in an integrated and quantitative manner, a population pharmacokinetic-pharmacodynamic (PopPK/PD) model was developed based on the data collected in the clinical trials.

Results: XW001 was readily absorbed with median T_{max} being 2.0 to 2.75 h, serum exposure increasing in a roughly dose-dependent manner, and a median half-life ranging from 1.78 h to 3.6711 h. Results of B1-B3 showed weak accumulation after multiple dosing to steady state. An overall increase in OAS1, Mx1, IFIT2, ISG56, and β2M gene expression at each visit point compared with the baseline values and the placebo group. No drug-related immunogenicity was observed, single or multiple doses of XW001 were generally well tolerated. In the PopPK analysis, the pharmacokinetics of XW001 was best described by a one-compartment open model with first-order elimination and first-order absorption. Weight and age had no significant effect on the primary PK parameters of XW001. In the PopPK/PD analysis, no highly correlated covariable with serum beta 2 microglobulin （β2M） concentrations, the first-order elimination rate constant of β2M (Kout) and maximal drug effect (Emax) was found.

Conclusions: In healthy Chinese subjects, XW001 was safe and well tolerated and had favorable PK and PD profiles supporting a once-daily dosing regimen. The present studies suggest XW001 1.0 and 2.0 mg could be the clinically recommended doses, which need to be further investigated in RSV infection patients.

Keywords: Pharmacokinetics, Pharmacodynamics, Population pharmacokinetic-pharmacodynamic, Antiviral, interferon

References

[1] Memish, Z.A., et al., Middle East respiratory syndrome. Lancet, 2020. 395(10229): p. 1063-1077.

吴铎，苏州大学材料与化学化工学部教授、博士生导师。2001-2010年间分别获得中南大学冶金工程学士、澳大利亚墨尔本大学生物医学工程硕士、莫纳什（Monash）大学化学工程博士学位。2010-2013年于莫纳什大学从事博士后研究工作；2013年初加入苏州大学，先后获评江苏省“双创博士（境外世界名校类）”引进人才，入选哈佛大学“高等教育领导者培训计划”（亚洲20位入选者之一）、“中国-新西兰科学家交流计划”（中方10位入选者之一）、江苏省“青年科技人才托举工程计划”、“优秀青年”人才项目支持等。现任美国化学工程师协会会员，中国颗粒学会理事、生物颗粒专委会、吸入颗粒专委会委员，江苏高校化学工程与技术学科联盟理事会副理事长。主要研究方向包括基于喷雾制粒技术的颗粒微纳介观动态结构的调控机理研究、鼻用及经口吸入药物粉雾剂研发、新型喷雾制粒装备设计与放大工艺优化等。至今发表SCI论文90余篇，获授权美国专利4件、中国发明专利20余件；近五年主持国家及省部级重点项目6项，以及20余项产学研合作及高技术成果转化项目。

基于喷雾制粒技术的鼻用粉雾剂研发

报告摘要：

鼻用粉雾剂（Nasal powder, NP）具有无首过效应、生物利用度高且患者依从性佳等优势，但针对NP微粒的结构调控机制，以及影响其鼻腔沉积率的决定因素和作用机理仍需系统深入研究。本报告将主要介绍利用喷雾干燥和喷雾冷冻干燥技术制备一系列NP样品的相关研发实例，通过建立配方性质（前驱液总固含量、药辅比和辅料粘度）和工艺条件（液滴大小、冷冻温度、梯度和风速）与微粒结构属性之间的直接对应关系，拟阐明喷雾冷冻干燥微粒结构的调控机制；采用具有较强体内外相关性的“降液膜”装置和仿生3D打印鼻腔模型，表征NP微粒的粘附行为和在鼻内各部位的沉积率，以确证决定NP微粒鼻腔沉积率的关键结构属性及构效关系，为实现高质量NP产品的结构设计和可控制备提供理论依据和实践指导。

王振勇，上海华瑞气雾剂有限公司总裁，高级工程师，硕士生导师。近三十年吸入/复杂药物递送系统研究、开发与产业化经验，成功领导开发出系列具有自主知识产权的 pMDI 给药系统；DPI 装置；单/双剂量鼻喷装置；外用类给药系统；pMDI 灌装系统；NSD 灌液装配系统及其它医药包装产品，获 100 余项专利，服务于全球吸入药物的研发和生产企业。多次承担科技部、上海市科委及浦东科经委重大专项，两次荣获浦东新区科技进步奖。

单/双剂量鼻喷装置应用及评价

王振勇

上海华瑞，上海市浦东新区园春路 222 号，201399

Email:hrgs@hua-rui.com

摘要正文：

鼻喷装置是通过鼻腔进行药物递送的装置。通过鼻腔途径提供药物，用于治疗中枢神经系统疾病.鼻腔通道可以跨越血脑屏障，为患有 CNS 疾病的患者提供了更好的无针治疗选择。治疗慢性疾病（如鼻炎、过敏、偏头痛和其他 CNS 疾病）的非侵入性药物递送途径的处方，增加了对鼻内药物和疫苗输送设备的需求，并具有良好的耐受性和非侵入性，从而提高了患者的依从性。

鼻喷装置按照人机工程学设计，使用简单、方便；无需识别方向，360 度喷射，喷出剂量精准并且无需预喷射，拥有最小的残留，所有高分子材料均符合最严格的药用要求，可按客户要求定制喷雾形态，可按客户处方定制所需的剂量大小。同时配合客户的应用需求，为客户开发了鼻喷装置装配、灌液设备。

详细介绍了华瑞单/双剂量鼻喷装置的组成原理，鼻喷制剂特点、种类，单/双剂量鼻喷装置在鼻腔制剂中的应用，单/双剂量鼻喷装置的可靠性和一致性评价等。

关键词：鼻喷制剂　鼻喷装置　鼻炎、过敏、偏头痛和其他 CNS 疾病

陈丽，马尔文帕纳科高级业务发展专家，拥有十多年的小分子原料药研发分析服务经验，负责医药与食品行业马尔文帕纳科产品的技术支持和市场拓展，以及客户问题的支持解决等。

鼻喷剂粒度分析的两种互补技术及FDA相关法规解读

陈丽[1,*]，Paul Kippax[2]

[1] 马尔文帕纳科公司，上海市徐汇区田州路 99 号新安大楼 13 号楼 101 室，邮编 200000

[2] Malvern Panalytical，Grovewood Road, Malvern, Worcestershire, WR14 1XZ, United Kingdom

[*]Email: li.chen@malvernpanalytical.com

摘要正文：

鼻腔喷雾剂通常由喷雾溶液或混悬液和鼻喷装置两部分组成，通过鼻喷泵装置将包含药物的液滴递送到鼻腔内进行局部或全身治疗， 所以经装置雾化递送出的液滴粒径分布是一项关键质量指标，对药物的吸收动力学过程和治疗效果有很大影响。鼻喷剂定量喷雾泵触发形成的雾滴粒径大小由处方、鼻喷泵以及两者之间的复杂相互作用共同决定，典型的粒径范围为 20μm – 200μm。如果雾滴粒径过大，液滴会滞留在鼻孔内被快速清除，而太小的雾粒 (< 10μm)会有被吸入肺部的风险，所以需要控制喷雾泵形成的雾滴粒径分布，以确保雾滴能有效沉积在鼻腔发挥药效。

在局部给药局部起效的确证性临床试验中，基于试验数据对研究药物的局部及系统安全性，以及药物的有效性进行全面的药效和风险评估。 FDA 指南文件《局部用药鼻腔喷雾剂和鼻腔气雾剂的生物等效性(BE) 和生物利用度(BA)研究》阐述了新药和改良型新药申报时的测试要求，强调对临床批次的体外测试研究的优势及制定相应对比方法。开展全面而系统的临床试验或桥接研究，通过 BE/BA 演示研究，证实与已上市药品用于拟定适应症的治疗等效性。

关键词：鼻喷制剂；粒径分布；图像分析法；激光衍射法

叶通博士长期从事新型药物递送系统的开发与应用研究，师从生物材料专家马光辉院士，过去 5 年以第一作者（含共一）身份在 Nature、Nature Biomedical Engineering 及 Science Advances 等期刊发表论文多篇。其中吸入递送相关研究居于国际领先水平，1 项个体化治疗研究已推进至临床 I 期实验。

基于多孔微球创制新型疫苗吸入递送系统

叶通[1,2]，魏炜[2,*]，马光辉[2,*]

[1]湖南大学，湖南省长沙市岳麓区麓山南路麓山门，410082

[2]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: yetong@hnu.edu.cn

摘要正文：

疫苗是保护人类健康的成功典范，其递送系统已成为先进增效技术的代表和未来趋势，推动了疫苗研发的跨代革新。但现有疫苗递送系统仅侧重于递送单一环节，忽视了免疫反应的整体协调性，限制了增效作用的充分发挥，并且我国尚无疫苗递送系统获得应用。因此，亟需研发具有自主知识产权且可转化的新型疫苗递送系统，协同调控免疫应答中的多重生物过程，实现增效作用最大化，突破卡脖子困局并占领研发制高点。

直面上述挑战，报告人将化学、化工、材料与肿瘤、免疫等多个学科深度交叉融合，基于已批准的聚乳酸类高分子，利用独特的微孔膜乳化和复乳演变工艺，获得了粒径均一、表面多孔、内部贯穿的微球，基于自愈合特性建立了“后包埋”新方法，实现了抗原温和高效装载。基于合成生物学及乳液调控等手段构建了具有“纳微复合结构”的干粉吸入疫苗，增强了肺部沉积、颗粒释放及抗原提呈等一系列应答过程，通过多组学联合解析了接种前后肺部免疫群落演变；单次吸入后诱导了强烈的特异性T细胞应答和高水平的血清及粘膜抗体，有效防止了新冠病毒感染及变异株传播。

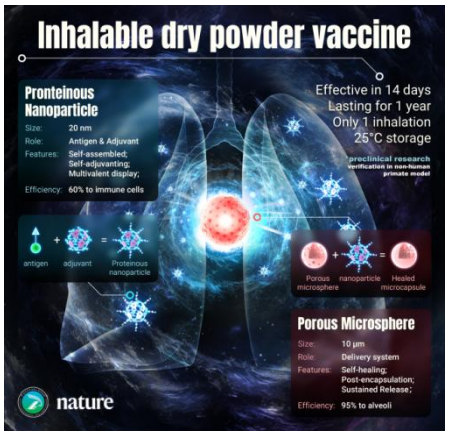


Fig. 1 Inhalable dry powder vaccine

关键词：吸入递送；传染病疫苗；干粉疫苗

参考文献

[1] Ye, T., Jiao, Z., Li, X. et al. Inhaled SARS-CoV-2 vaccine for single-dose dry powder aerosol immunization. Nature 624, 630–638 (2023). https://doi.org/10.1038/s41586-023-06809

张海飞博士，昭衍（无锡）常务副总，机构负责人，昭衍（苏州）吸入毒理高级总监，美国认证毒理学家，中国药理学会安全药理学专业委员会常务委员，中国毒理学会呼吸毒理专业委员会常务委员，中国颗粒学会吸入专业委员会常务委员。十多年新药安全评价经验。建立了符合欧洲标准的啮齿类非啮齿类动物吸入毒理实验室，建立了 COPD，肺纤维化等呼吸系统疾病模型。完成新药非临床评价超 100 多项，发表文章十余篇，作为主要负责人参与并负责国家“十二五，十三五新药创制重大专项”2 项，获得专利 5 项，翻译及参与编撰书籍 4 种。

吸入疫苗开发与非临床评价特点

朱炜凤 孙晓莹 邓艳玲 张海飞

昭衍（苏州）新药研究中性有限公司

江苏省苏州市太仓市生物医药产业园 昭溪路一号

近年新冠的爆发极大刺激了疫苗的开发，尤其是经呼吸道的黏膜接种疫苗的开发受到了空前的重视。我国已经上市国际首款针对新冠的吸入疫苗。黏膜接种的疫苗除产生体液免疫之外，还产生黏膜免疫，依赖分泌的 sIgA，从感染之初切断病毒的感染路径，降低感染风险，理论上存在较大的临床优势。经呼吸道黏膜接种的疫苗，可分为鼻喷与吸入途径。鼻喷疫苗存在免疫效果较弱，入脑风险较高的挑战。吸入疫苗有使用方便，无注射痛感，无感染风险等优势，并且在疫苗接种上最大程度模拟了病毒入侵机体的路径，在肺内持续蓄积也可模拟病毒的抗体提呈动力学过程。报道吸入途径进行黏膜免疫，产生与注射途径相似强度的免疫反应，且产生注射途径所缺乏的记忆免疫细胞。

常规认为吸入药物要达到粒径介于 1-3um 左右，比较理想，可以达到肺泡及微小气管，实现更好的临床疗效。但对于吸入疫苗来讲，产生较强的免疫反应，并不要求疫苗一定到达肺泡及微小气管。根据现有的有限的非临床数据，可以看到，实现大气管沉积的疫苗一样产生较强的免疫反应。吸入疫苗的开发粒径大于 5um 时，仍可能产生足够的免疫反应，更细微的粒子带来较高的药学要求，器械要求，未必伴随更强的免疫反应。过多的肺泡暴露的疫苗可能反而带来疫苗的直接毒性反应。

吸入疫苗的非临床评价过程中首要的挑战是疫苗气溶胶的发生。不同形态的疫苗发生要求不同。吸入大分子生物药的挑战在于避免发生过程破坏生物大分子结构，进而令其失活，并提高免疫原性。具感染性的病毒包裹的疫苗仍有类似的担忧，一旦结构破坏，影响生物功能，不能侵入细胞并表达靶蛋白，则影响疫苗功效。但对于灭活疫苗等直接进行摄取并提呈的疫苗类别，则此类风险较低，理论上，对疫苗免疫原性的影响较小。

常规吸入药物的非临床评价过程中，一旦出现肺部炎症反应，则倾向认为临床风险较高。但对于吸入疫苗的非临床评价而言，疫苗中的佐剂通常具有致炎性，病毒载体本身具有致炎性，吸入疫苗的急毒试验设计应当针对性的观察这种急性炎症反应。对结果中可能会见到的肺部炎症类反应，一般是可预期可恢复的，不伴随肺功能的异常，是否需要像吸入药物一样直接归类于毒性反应？接种疫苗会导致相应的免疫反应，常见的病理改变会伴随单个核细胞浸润，在疫苗的吸入毒理试验中这种病理改变一般认为是免疫反应过程中的免疫细胞活动，不认为是毒性反应。

李鹏辉，男，工学博士，河南洛阳人，1995 年出生。2013 年 9 月至 2017 年 6 月就读于西安交通大学机械工程专业，2017 年 9 月至 2020 年 6 月就读于军事科学院系统工程研究院生物医学工程专业，2020 年 9 月至 2023 年 6 月就读于军事科学院系统工程研究院生物医学工程专业。2023 年 6 月博士毕业至今，工作于联勤保障部队第九二三医院输血医学科。

近年来围绕人体呼吸道体外建模、人体呼吸道气流和吸入气溶胶运动模拟、负压病房等室内环境气溶胶运动模拟等方向，发表 SCI、EI 等高质量论文 13 篇，其中以第一作者发表 SCI 论文 2 篇《Journal of aerosol science》, JCR Q1,IF=4.5）、EI 论文 2 篇、中文核心、科技核心论文 4 篇。参与国家重点研发计划项目、后勤科研重大项目各 1 项。

流固耦合作用下COPD对人体肺腺泡区结构、流场和气溶胶影响研究

李鹏辉[1*]，郭伟旗[2]

[1] 中国人民解放军联勤保障部队第九二三医院，南宁，530021

[2] 清华大学建筑学院，北京，100084

*Email: phl0502@163.com

摘要正文：慢性阻塞性肺病（Chronic obstructive pulmonary disease，COPD）已经成为我国继高血压、糖尿病之后的最常见慢性疾病，迫切需要经济投资与努力，以遏制COPD的健康和经济负担[1-7]。药物吸入治疗是治疗和缓解COPD症状的重要方法之一[8-14]，然而，目前药物吸入治疗还存在疾病靶向区沉积率低、药物利用率有待进一步提高等问题[15-18]。核心原因在于药物气溶胶在人体肺腺泡区，尤其是COPD病变肺腺泡区的动力学特性不够明析。COPD 的特征性病变是小气道病变（闭塞性细支气管炎）和肺实质破坏（肺气肿）共同作用的结果，对肺部结构的影响主要包括：肺泡壁萎缩退化、弹性减弱，肺泡容积增大，细支气管变窄等[19-21]，而这些肺部结构的改变会对肺部流场和吸入气溶胶动力学产生较大影响。然而，探究肺腺泡区气溶胶运动规律的相关研究多基于健康人群生理参数展开，研究结果对COPD人群适用性不强。现有COPD研究主要从模型拓扑结构层面[21-25]考虑COPD的影响，无法从固体特征层面对COPD病变的预防和研究给予数据支持，局限较大。

本项目依据影像学和文献数据构建了符合人体实际的COPD肺腺泡模型组，采用流固耦合方法探究了肺腺管阻塞和肺气肿对人体肺腺泡区流场、肺腺泡固体组织力学特性和气溶胶沉积的影响。结果表明：相较于健康肺腺泡，肺腺管阻塞和肺气肿病变肺腺泡均出现了不同程度的通气量下降和气流受限，尤其是肺气肿病变，通气量仅为健康肺腺泡一半。肺腺管阻塞病变模型内在阻塞处形成了流场高速区，区域中最大流速约4.5 mm/s，明显高于同级正常肺腺管内最大流速。其他区域流场速度分布与健康肺腺泡基本一致：随着级数的增加，肺腺管内速度下降。区别在于，由于18级肺腺管的阻塞，导致肺腺泡通气量下降，17级和18级肺腺管（无阻塞一侧）内气流速度与健康肺腺泡相比稍小，19级肺腺管和肺泡囊区域流速则基本未受到影响。肺气肿病变模型中，流场速度分布与健康肺腺泡基本一致，随着级数的增加，肺腺管内速度下降。肺气肿病变模型体积变化率和通气量相较健康肺腺泡模型显著下降，在流场上体现为17级和18级肺腺管内气流速度的显著下降，下降幅度约25%，对19级肺腺管和肺泡囊区域流速基本无影响。迹线方面，肺腺管阻塞病变模型和肺气肿病变模型内肺泡囊区域循环区均消失。肺腺管阻塞病变模型和肺气肿病变模型位移和应力分布大体上与健康肺腺泡一致，最大位移量分别为200 μm和130 μm，且位移量随级数减小而逐级递减，最大应力值分别为2.8 kPa和1.5 kPa。区别在于，由于18级肺腺泡阻塞侧管径减小、壁面加厚，流固耦合作用下阻塞处壁面变形量极小，与17级肺腺泡变形量相当。由于阻塞处基本无膨大变形，外部压力作用下其他部位需要承担更大的压力，因此肺腺管阻塞病变模型应力值较健康肺腺泡稍大。由

于肺气肿病变模型通气量的下降，各时刻位移量和应力值相比健康肺腺泡较小。与健康肺腺泡沉积率相比，肺腺管阻塞病变模型内3 μm颗粒物沉积率影沉积率减小10.34%， 5 μm颗粒物沉积率减小0.31%，0.1-1 μm颗粒物沉积率则分别增加2.29%、1.57%、0.48%、1.74%、0.74%。肺腺管阻塞区域流速较高，导致3 μm颗粒物沉积率显著降低，引发呼气过程颗粒物局部区域拥挤、分布不均等现象，其中阻塞侧肺腺管气溶胶沉积率显著低于健康侧。这些现象和结果表明，药物吸入治疗中阻塞侧肺腺泡药物颗粒沉积率可能会较健康侧低，治疗效果差，需要额外关注。与健康肺腺泡沉积率相比，肺气肿病变对3 μm颗粒物沉积率影响最大，沉积率增加8.58%， 5 μm颗粒物沉积率增加0.69%，0.1和0.3 μm颗粒物沉积率分别增加0.29%、0.44，0.5、0.8和1 μm颗粒物沉积率分别减少1.34%、0.49%和1.35%。由于通气量的显著下降，导致流场速度普遍下降，流场曳力降低，亚微米颗粒物动力不足，难以进入肺腺泡深处并发生沉积；微米级颗粒物则在重力作用下更早地发生沉积，沉积位置偏向近端，导致肺腺泡深处沉积率降低。因此，建议肺气肿的药物吸入治疗可以使用正压通气设备以获得更好的通气量和深肺区域药物治疗效果。

本研究采用流固耦合方法探究了COPD对人体肺腺泡区流场和气溶胶运动沉积的影响机制，既是对人体肺腺泡区气溶胶动力学的补充，又可以为COPD的临床治疗提供有益借鉴，研究结果和数据可为药物气溶胶吸入治疗优化提供理论依据和技术支撑。

关键词：COPD；人体肺腺泡；流固耦合；流场；气溶胶沉积

参考文献

[1] Celli B., Fabbri L., Criner G., et al. Definition and nomenclature of chronic obstructive pulmonary disease: Time for Its revision [J]. American Journal of Respiratory and Critical Care Medicine, 2022, 206: 1317-25.

[2] 中华医学会呼吸病学分会慢性阻塞性肺疾病学组, 中国医师协会呼吸医师分会慢性阻塞性肺疾病工作委员会. 慢性阻塞性肺疾病诊治指南(2021 年修订版) [J]. 中华结核和呼吸杂志, 2021, 44(3): 36.

[3] Global initiative for chronic obstructive pulmonary disease. Global strategy for the diagnosis, management and prevention of chronic obstructive pulmonary disease [Z]. 2021

[4] Wang C., Xu J., Yang L., et al. Prevalence and risk factors of chronic obstructive pulmonary disease in China (the China Pulmonary Health [CPH] study): a national cross-sectional study [J]. Lancet, 2018, 391(10131): 1706-17.

[5] Li Y., Yang L., Wang L., et al. Burden of hypertension in China: A nationally representative survey of 174,621 adults [J]. International journal of cardiology, 2017, 227: 516-23.

[6] Xu Y., Wang L., He J., et al. Prevalence and control of diabetes in Chinese adults [J]. Jama, 2013, 310(9): 948-59.

[7] Chen S., Kuhn M., Prettner K., et al. The global economic burden of chronic obstructive pulmonary disease for 204 countries and territories in 2020-50: a health-augmented macroeconomic modelling study [J]. Lancet Glob Health, 2023, 11(8): e1183-e93.

[8] Amirav I., Newhouse M. T. Deposition of small particles in the developing lung [J]. Paediatric Respiratory Reviews, 2012, 13(2): 73-8.

[9] Ari A., Fink J. B. Aerosol therapy in children: Challenges and solutions [J]. Expert Review of Respiratory Medicine, 2013, 7(6): 665-72.

[10] Sung J. C., Pulliam B. L., Edwards D. A. Nanoparticles for drug delivery to the lungs [J]. Trends in Biotechnology, 2007, 25(12): 563-70.

[11] Yao. Progress in the application of nano- and micro-based drug delivery systems in pulmonary drug delivery [J]. BIO Integration, 2022, 3(2): 71-83.

[12] Amini E., Hochhaus G. Chapter 9 - Dissolution and drug release [J]. Inhaled Medicines, 2021: 225-66.

[13] Fontana M. C., Laureano J. V., Forgearini B., et al. Spray-dried raloxifene submicron particles for pulmonary delivery: Development and in vivo pharmacokinetic evaluation in rats [J]. International journal of pharmaceutics, 2020, 585: 119429.

[14] Patil J. S., Sarasija S. Pulmonary drug delivery strategies: A concise, systematic review [J]. Lung India : official

organ of Indian Chest Society, 2012, 29(1): 44-9.
[15] Rau J. L. The inhalation of drugs: advantages and problems [J]. Respiratory Care, 2005, 50(3): 367-82.
[16] Anderson S., Atkins P., Bäckman P., et al. Inhaled medicines: Past, present, and future [J]. Pharmacological reviews, 2022, 74(1): 48-118.
[17] Bonn B., Perry M. Chapter 2 - The API [J]. Inhaled Medicines, 2021: 13-34.
[18] 徐瑞. 吸入疗法中药物颗粒在人体呼吸道内输运过程的数值模拟 [D]. 上海. 东华大学, 2009.
[19] Celli B. R., Snider G. L., Heffner J., et al. Standards for the diagnosis and care of patients with chronic obstructive pulmonary disease. American Thoracic Society [J]. American Journal of Respiratory & Critical Care Medicine, 1995, 152(5): 77-121.
[20] Snider G. L., Kleinerman J., Thurlbeck W. M., et al. The definition of emphysema: Report of a national heart, lung, and blood institute, division of lung diseases workshop [J]. American Review Respiratory Disease, 1985, 132(1): 182-5.
[21] Oakes J. M., Marsden A. L., Grandmont C., et al. Airflow and particle deposition simulations in health and emphysema: From In vivo to In silico animal experiments [J]. Annals of Biomedical Engineering, 2014, 42(4): 899-914.
[22] Oakes J. M., Day S., Weinstein S. J., et al. Flow field analysis in expanding healthy and emphysematous alveolar models using particle image velocimetry [J]. Journal of Biomechanical Engineering, 2010, 132(2): 021008.
[23] Oakes J. M., Hofemeier P., Vignon-Clementel I. E., et al. Aerosols in healthy and emphysematous in silico pulmonary acinar rat models [J]. Journal of Biomechanics, 2015, 49(11): 2213-20.
[24] Aghasafari P., Ibrahim I. B. M., Pidaparti R. M. Investigation of the effects of emphysema and influenza on alveolar sacs closure through CFD simulation [J]. Journal of Biomedical Science & Engineering, 2016, 09(6): 287-97.
[25] Xi J., Talaat M., Si X. A., et al. Micrometer aerosol deposition in normal and emphysematous subacinar models [J]. Respiratory Physiology & Neurobiology, 2021, 283: 103556.

姜黄素微粒与齐墩果酸大多孔微球的制备及肺部联合给药缓解急性肺损伤的作用与机制研究

张倩[1,3]，刘学武[2]，彭东东[2]，侯曙光[1,*]

[1]成都中医药大学，四川省成都市温江区柳台大道1166号，611130

[2]湖南普瑞玛药物研究中心有限公司，湖南省长沙市浏阳市康天路123号，410329

[3]海南美康达药业有限公司，海南省海口市国家高新技术产业开发区药谷工业园，571924

*Email: fansz1930@yahoo.com

摘要：目前急性肺损伤（ALI）的治疗手段存在疗效有限及毒副作用明显的缺陷。多靶点、安全的中药活性成分姜黄素和齐墩果酸有治疗ALI的潜力，但均存在生物利用度低的问题。因此，本研究首先开展姜黄素速释微粒和齐墩果酸-PLGA大多孔缓释微球的处方工艺优化，接着开展优化制剂的体内生物利用度研究，然后运用网络药理学对它们治疗ALI的机制进行研究，最后基于PI3K/AKT/mTOR信号通路开展肺部联合给予两种制剂对缓解ALI的作用及机制研究。研究结果表明姜黄素速释微粒和齐墩果酸-PLGA大多孔缓释微球可分别实现姜黄素和齐墩果酸在体内的快速和缓慢释放，使它们的体内生物利用度分别提高了3和3.4倍，且两制剂联合给药进一步抑制了PI3K/AKT/mTOR信号通路的激活而更好地缓解了ALI，为联合中药活性成分治疗ALI提供了新的递送策略。

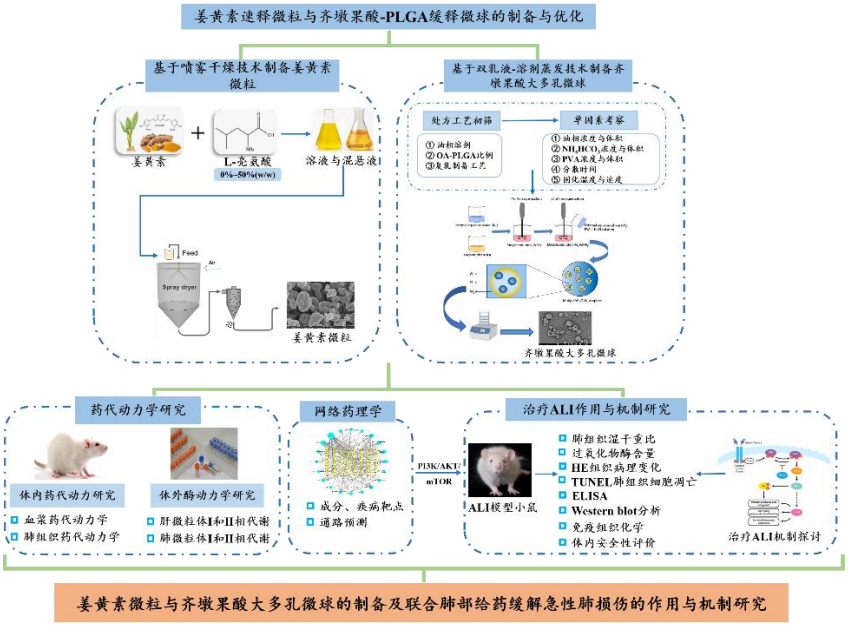


Fig. 1 Technology roadmap

关键词：姜黄素；齐墩果酸；肺部联合给药；生物利用度；PI3K/AKT/mTOR信号通路

参考文献

[1] Santos R S, Silva P L, Oliveira G P, et al. Effects of oleanolic acid on pulmonary morphofunctional and biochemical variables in experimental acute lung injury[J]. Respiratory Physiology and Neurobiology, 2011, 179(2-3): 129-136.

[2] 邵奇,王倩梅,马善波,姜黄素对急性肺损伤小鼠炎症反应的改善作用[J]. 中成药,2019,41(10):2349-2353.

[3] Huang C Y, Deng J S, and Huang W C. Attenuation of Lipopolysaccharide-Induced Acute Lung Injury by Hispolon in Mice, Through Regulating the TLR4/PI3K/Akt/mTOR and Keap1/Nrf2/HO-1 Pathways, and Suppressing Oxidative Stress-Mediated ER Stress-Induced Apoptosis and Autophagy[J]. Nutrients, 2020, 12(6): 1742

Optimization of spray dried protein formulations by machine learning

Liping Wei[1,5,a], Jiayin Deng[2,a], Dongmei Cun[1,5,*], Defang Ouyang[2,3,*], Mingshi Yang[1,4,5,*]

[1] Wuya College of Innovation, Shenyang Pharmaceutical University, Shenyang 110016, China

[2] State Key Laboratory of Quality Research in Chinese Medicine, Institute of Chinese Medical Sciences, University of Macau, Macau 999078, China

[3] University of Macau, Macau 999078, China

[4] Department of pharmacy, Faculty of Health and Medical Sciences, University of Copenhagen, Universitetsparken 2. Copenhagen DK-2100, Denmark

[5] Joint International Research Laboratory of Intelligent Drug Delivery Systems, Ministry of Education, Shenyang 110016, China

Student, email address: 2278387516@qq.com

Abstract:

With the development of biotechnology, the proportion of protein drugs are increasing year by year. However, many protein drugs are not stable in liquid form, which have to be transformed into solid form by certain drying technologies such as freeze drying and spray drying. Spray drying is a continuous, simple and less energy consumption process comparing to freeze drying. Yet the current spray drying processes for proteins are still rely on trial-and-error approaches. In this study, machine learning was employed to predict the physical characteristics of spray-dried protein particles and the physical and chemical integrity of proteins post drying, with an aim to accelerate the development of spray dried proteins formulations. Six machine learning algorithms such as light gradient boosting machine (LightGBM), linear regression, support vector machine (SVM), decision tree (DT), random forest (RF) and artificial neural network (ANN) were compared in predicting critical quality attributes of spray dried protein formulations, including yield, particle size, residual solvent, solid state, aggregates and activities of the proteins. In total, 321 yield data, 290 particle size data, 357 residual solvent data, 206 solid state data, 323 aggregates data and 161 activity data were collected and described by various molecular descriptors to build the models. The performances of the models were evaluated by 10-fold cross-validation. The results showed that LightGBM exhibits great performance for all regression tasks and classification tasks. The LightGBM models can not only predict the properties of formulations, but also can figure out the important features and their influence on the results. Finally, alpha-lactalbumin was applied to verify the performance of the models and the results showed the models can deal with an unshown protein in dataset properly which means a good general performance. In conclusion, machine learning is a capable tool in the development of spray dried protein formulations.

Key words: Spray drying, Proteins, Machine learning, Formulation optimization

免疫佐剂协同化疗药激活 STING 通路治疗肺癌的个性化免疫疫苗

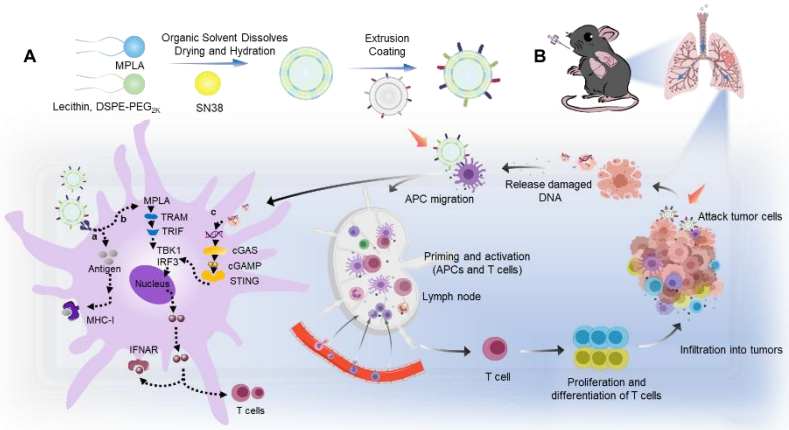
葛迪[1, 2]，廖永红[1,*]

[1]中国医学科学院、北京协和医学院药用植物研究所，北京市海淀区马连洼北路 151 号，100193

[2]新加坡国立大学杨潞龄医学院，新加坡，119074

*Email:yhliao@implad.ac.cn

摘要正文：肺癌是全球第二大癌症死亡原因，纳米免疫疗法因肿瘤靶向性高、易于改造等得到了广泛应用，但仍存在着一定的局限性，如静脉注射递送效率过低，肿瘤抑制性的免疫微环境限制了免疫制剂的疗效等[1]。本研究拟构建一个免疫佐剂协同化疗药的个性化免疫疫苗，通过吸入递送及激活STING通路的方式来从宏观上实现器官靶向，并利用肺部丰富的免疫细胞，逆转免疫抑制性肿瘤微环境[2]。基于细胞靶向的策略，本研究构建了细胞膜与载药脂质体融合的嵌合纳米粒。通过SN38诱导后再梯度离心的方法来提取高表达钙网蛋白(CRT)的LLC细胞膜，采用薄膜分散法得到搭载MPLA和SN38的脂质体，再经反复挤压将二者融合构建嵌合纳米粒。之后在理化性质表征的基础上，构建了直接刺激DC、Transwell和协同刺激DC三个培养系统，在细胞水平上评价了DC的成熟程度。最后，对LLC细胞外泌体中的DNA及DC细胞STING通路蛋白水平的变化进行了探究。SN38诱导LLC细胞免疫原性细胞死亡的探究显示，2 μM作用24 h可实现CRT在细胞膜表面的高表达。理化性质表征显示，细胞膜与脂质体互相嵌合，粒径约100 nm，电位约-25 mV，膜蛋白CRT等可在嵌合纳米粒表面稳定保留。当嵌合纳米粒中SN38的浓度为0.25 μM时，DC的凋亡程度不足10%。但在该浓度下，对LLC细胞的杀伤力大于50%，且可观察到明显的CRT向细胞膜移位和HMGB1从细胞核的释放。在三个DC细胞培养模型中，$CD80^{+}86^{+}$双阳性比例都有显著增加，TNF-α、IL-6、IFN-γ的分泌明显提高。对作用机制的探究显示，嵌合纳米粒可引起LLC细胞外泌体增加2倍，损伤DNA释放增加3倍。同时，一定程度上提高了pTPK1、pIRF3、pSTING的表达，促进了IFN-β的分泌。本嵌合纳米粒递送系统联合递送MPLA和SN38，高表达CRT的LLC细胞膜嵌合表面可实现LLC细胞和DC细胞的双重靶向，通过提高损伤DNA的释放激活了STING通路，并在MPLA的协同下进一步增强，有望实现对原位肺癌的高效免疫治疗。



Scheme. 1 Inhalable nanoadjuvant augments STING activation for personalized immunotherapy and vaccination against lung cancer.

关键词： SN38，MPLA，吸入疫苗，STING，原位肺癌

参考文献

[1] Dai Q, Wilhelm S, Ding D, Syed AM, Sindhwani S, Zhang Y, Chen YY, MacMillan P, Chan WCW. Quantifying the Ligand-Coated Nanoparticle Delivery to Cancer Cells in Solid Tumors. ACS Nano. 2018 Aug 28;12(8):8423-8435.

[2] Decout, A., Katz, J.D., Venkatraman, S. et al. The cGAS–STING pathway as a therapeutic target in inflammatory diseases. **Nat** Rev Immunol 21, 548–569 (2021).

Preparation and evaluation of nintedanib dry powder inhalation for treatment of idiopathic pulmonary fibrosis

Qingxue Gao[1,2,]Dongmei Cun[1,2*],Mingshi Yang[1,2,3*]

[1]Wuya College of Innovation, Shenyang Pharmaceutical University, Shenyang 110016, China

[2]Joint International Research Laboratory of Intelligent Drug Delivery Systems,Ministry of Education, Shenyang 110016, China

[3]Department of Pharmacy, Faculty of Health and Medical Sciences, University of Copenhagen, Universitetsparken 2, Copenhagen DK-2100, Denmark

Student,email address:Qingxuegao1123@163.com

Abstract:

Nintedanib is clinically used in the treatment of idiopathic pulmonary fibrosis. The existing marketed dosage form for nintedanib is an oral capsule. However, it has very low oral bioavailability (ca.5%) and intensive adverse effects including risk of hepatotoxicity, adverse gastrointestinal reactions, causing poor patient compliance. Delivery of nintedanib directly to the lungs *via* oral inhalation may provide a high localized drug concentration in the lungs, reduce systemic drug exposure and mitigate toxic side effects. The aim of this study was to develop dry powder formulation and investigate the storage stability. The spray drying process was employed to prepare dry powder formulations. The process parameters in the spray drying process were optimized in terms of the yield, geometric particle size, particle size distribution, and residual solvent content. The results showed that inhalable dry powders of nintedanib could be readily obtained at an inlet temperature of 110°C, an atomization pressure of 601 L/h, and an feed flow rate of 3 ml/min. X-ray powder diffraction analyses and differential scanning calorimetry showed that spray-dried nintedanib powders were amorphous. The addition of L-leucine to the spray drying formulation could improve the aerosol performance. When nintedanib:L-leucine = 85:15, the fine particle fraction of spray-dried nintedanib could be as high as 82.01%. In contrast, the fine particle fraction of spray-dried alone nintedanib was 73.76% . In addition, the solid state and aerosol performance of the formulation consisting of 15% (w/w) L-leucine were not significant changed after 30 days of storage at 20 °C and 10% RH. In conclusion, inhalable nintedanib dry powders could be prepared by using the spray drying process. The addition of L-leucine in the spray-dried formulations could enhance the aerosol performance and storage stability. The pharmacological effect of the dry powder formulations of nintedanib warrant further investigation in preclinical setting using rodents such as mice or rats post pulmonary administration.

Keywords: Idiopathic pulmonary fibrosis, Nintedanib, Dry powder inhalation, Aerosolization performance, Storage stability

Elucidating the importance of polar structure of endogenous phospholipids on *in vivo* absorption of octreotide after intrapulmonary delivery

Lu Qin[1], Shirui Mao[1,*]

[1]School of Pharmacy, Shenyang Pharmaceutical University, Shenyang 110016, China

[*]E-mail: maoshirui@vip.sina.com

Abstract:

Phospholipids, as an endogenous pulmonary surfactant, have received extensive attention on promoting the transmembrane transport of peptide and protein drugs. However, the influence of polar structure of phospholipids on drug absorption across lung epithelial cells after inhalation, together with the underlying absorption-promoting mechanisms remain uncertain. Therefore, here taking octreotide as a drug model, four lung surfactants, namely dipalmitoyl phosphatidylcholine (DPPC), dipalmitoyl phosphatidylglycerol (DPPG), dipalmitoyl phosphatidylethanolamine (DPPE) and dipalmitoyl phosphatidylserine (DPPS) were adopted as absorption enhancers to investigate the influence of structural polarity of phospholipids on drug absorption in both 3D Transwell cell model and Sprague Dawley (SD) rats. It was demonstrated that the absorption-enhancing action of phospholipids was the polar structure-dependent, with the highest enhancement ratio observed for DPPS, and its apparent permeability coefficient (P_{app}) and area under the curve ($AUC_{0\text{-}4h}$) increased 4.6- and 2.2-fold compared to octreotide solution group. The mechanism studies showed a significantly decreased transepithelial electrical resistance (TEER) level and unaffected pulmonary membrane fluidity, indicating paracellular pathway-mediated drug transport. In addition, phospholipid-based inhalable microparticles were constructed with comparable size, morphology, encapsulation efficiency, *in vitro* release behavior and desirable aerodynamic performance (FPF > 70%), as well as excellent intrapulmonary stability and safety. Meanwhile, the absolute bioavailability of DPPC, DPPG, DPPE and DPPS based microparticles was further increased after spray drying. In summary, phospholipids could be used as biosafe absorption enhancers to enhance macromolecules absorption across pulmonary mucosa, with the absorption enhancement ratio being dependent on the polar structure of phospholipids.

Keywords: Absorption enhancer; Phospholipid; Peptide and protein; Pulmonary delivery; Absorption mechanism

张海飞博士，昭衍（无锡）常务副总，机构负责人，昭衍（苏州）吸入毒理高级总监，美国认证毒理学家，中国药理学会安全药理学专业委员会常务委员，中国毒理学会呼吸毒理专业委员会常务委员，中国颗粒学会吸入专业委员会常务委员。十多年新药安全评价经验。建立了符合欧洲标准的啮齿类非啮齿类动物吸入毒理实验室，建立了 COPD，肺纤维化等呼吸系统疾病模型。完成新药非临床评价超 100 多项，发表文章十余篇，作为主要负责人参与并负责国家“十二五，十三五新药创制重大专项”2 项，获得专利 5 项，翻译及参与编撰书籍 4 种。

影响非临床吸入粉雾剂吸入效果的因素

孙晓莹，朱炜凤，张海飞

（昭衍（苏州）新药研究中心有限公司）

江苏省苏州市太仓市生物医药产业园 昭溪路一号

吸入粉雾剂指固体微粉化原料药单独或与合适载体混合后，以胶囊、泡囊或多剂量贮库形式，采用特制的干粉吸入装置，由患者主动吸入雾化药物至肺部的制剂。在肺部给药系统中，吸入粉雾剂具有吸入效率高、药物稳定性好、环境友好等特点，因此备受关注，有着巨大的市场潜力。据统计阿斯利康 2023 年前三季度吸入粉雾剂的销售份额约为 10.31%，占吸入制剂总销售额的 45.5%。

非临床试验中最常见的干粉气溶胶发生器为旋转电刷粉尘发生器。将粉体吹散形成稳定持续的干粉气溶胶，然后将动物以口鼻暴露的形式暴露于粉雾气溶胶中，由动物在自发呼吸过程中吸入粉雾剂。非临床研究中干粉气溶胶的发生相对难度较大，实验不易控制。吸入相关的基础操作要求之外，还需要特别注意下列问题：

（1）粒径：粒径为吸入药物的关键指标，经济合作与发展组织(Organization for Economic Cooperation and Development, OECD)要求吸入药物粒径仅控制在 1-4 μm 中间。对于小试批次样本而言生产过程精细，粒径可控制在较小范围，当样本扩大生产后，使得药物药学粒径增大，可导致药物气溶胶空气动力学粒径分布（Aerodynamic Particle Size Distribution，APSD）改变。如相同发生条件下扩大生产后样本气溶胶发生得到的质量中值空气动力学直径（mass median aerodynamic diameter，MMAD）较之前小试批次样本轻微增大，可吸入粒子比例（Fine particle fraction, FPF）较之前小试批次样本轻微减少，则导致药物在犬的血浆暴露量下降，Cmax 约降为小试批次样的 50%。提示如果样本扩大生产后需要达到小批次样本的血浆暴露量，给药剂量需要增加，需要利用 PK 桥接方式获得原暴露体系下的目标递送剂量。

（2）环境湿度：OECD 要求吸入药物湿度应控制在 30%-70%。吸入粉雾剂的过程控制一般涉及混粉的水分，一般水分含量应该维持在 4.5%～5.5%之间，维持相对稳定的状态。根据经济合作与发展组织(Organization for Economic Cooperation and Development, OECD)的指导原则要求吸入药物的环境应当维持湿度介于 30%-70%。药物储存、保存条件，环境湿度未进行严格控制，可导致粉体受潮。粉体由于吸湿作用，粒子表面吸附的水分增加了粒子间黏着力降低分散性，使 NGI 检测的 FPF 降低。当环境的相对湿度较低时，干粉小颗粒的静电力要比范德华力大得多，及干粉粒径越小静电力越大，药物发生过程更容易发生团聚现象，影响气溶胶发生结果。吸入粉雾剂的分装、存储、转移、装药关注环境湿度，避免样本吸湿。建议在最优相对湿度条件下对吸入粉雾剂气溶胶发生。

（3）气溶胶发生体系稳定性：药物气溶胶是处于持续变化的相对稳定体系，在给药过程中维持稳定的药物气溶胶浓度，对给药非常重要。吸入粉雾剂气溶胶发生较溶液型气溶胶发生，发生控制条件较多，气溶胶波动较大。粉雾剂气溶胶发生中较显著的一个特点是在固定发生条件下，气溶胶浓度会随时发生时长的增加而增加，导

致气溶胶波动较大。为了达到稳定发生体系，在发生过程中我们需要密集取样进行浓度分析，以监测气溶胶发生稳定性以及气溶胶发生维持稳定体系稳定的时长。

吸入制剂属于药械组合，给药较为复杂，给吸入制剂的非临床研究带来了一定挑战，上述已罗列了一些非临床研究中影响吸入粉雾剂吸入效果的因素，但影响吸入效果的关键因素是吸入粉雾剂处方工艺，因此吸入干粉研发过程需充分考虑生产工艺及实际操作的可行性，合理的制定各个环节质量控制的标准及实施方式。

张海飞博士，昭衍（无锡）常务副总，机构负责人，昭衍（苏州）吸入毒理高级总监，美国认证毒理学家，中国药理学会安全药理学专业委员会常务委员，中国毒理学会呼吸毒理专业委员会常务委员，中国颗粒学会吸入专业委员会常务委员。十多年新药安全评价经验。建立了符合欧洲标准的啮齿类非啮齿类动物吸入毒理实验室，建立了 COPD，肺纤维化等呼吸系统疾病模型。完成新药非临床评价超 100 多项，发表文章十余篇，作为主要负责人参与并负责国家“十二五，十三五新药创制重大专项”2 项，获得专利 5 项，翻译及参与编撰书籍 4 种。

吸入核酸药物非临床评价特点与考量

朱炜凤 孙晓莹 邓艳玲 张海飞

昭衍（苏州）新药研究中心有限公司

江苏省苏州市太仓市生物医药产业园 昭溪路一号

近年来，由于呼吸系统疾病高发，针对呼吸系统疾病的新药开发也越来越受到关注。吸入小分子，吸入生物药，甚至吸入核酸药物均被推入了“快车道”发展阶段。治疗呼吸系统疾病的主要药物多以吸入小分子药物或其它蛋白和多肽等药物为主，但与上述药物相比核酸药物具有高特异性、高效性的优势，因此吸入核酸药物得到了广泛关注。本文以吸入核酸为主要叙述对象，针对非临床安全性评价部分进行了简要总结，旨在进一步促进吸入核酸药物的进一步发展。

裸露核酸分子因其电负性大分子的固有属性，在机体内易被分解，因此需要防护性载体以递送至靶部位，同时在雾化吸入给药的过程中能够保护裸漏核酸不被破坏，雾化后的纳米颗粒能够在呼吸道有效沉积。研究报道，纳米级颗粒（如粒径在 100-300 nm 范围内的 LNP）更容易通过呼吸道进入肺部，并在肺泡区域广泛分布，这是因为这些颗粒的粒径适合通过气道的弯曲和分支，且不易被上呼吸道截留。此外，雾化过程中会产生剪切力会影响其结构及有效性，而研究表明直径约 150 纳米球形微粒，这种微粒可稳定悬浮于雾化装置生成的小液滴中，在吸入上述微粒后的 24 小时，小鼠肺部细胞持续生成发光蛋白，而随着小鼠肺部信使 mRNA 分子逐渐减少，发光蛋白的量也逐渐降低，在对小鼠反复给药后可维持肺部发光蛋白的水平，且吸入的 mRNA 均匀分布于 5 片肺叶，主要聚集部位在肺上皮细胞。此外，振动筛网式雾化器在雾化过程中剪切力低，能够进一步减轻剪切力的影响。

在我实验室已完成的安评项目中，将某核酸药物经振动筛网式雾化器单次雾化吸入给予金黄地鼠，在药后 15min、30min、1h、8h、24h、48h、96h 安乐死采集肺组织，在 1h 达峰后，其含量随时间而降低，至给药后 96h 仍有分布；在毒理试验中，以不同吸入时长重复口鼻吸入给予金黄地鼠，每天 1 次，连续给药前 14 天，低、中、高剂量组吸入时长分别为 60、180、360min，实际递送剂量为临床拟用剂量的 20、60 和 120 倍，各剂量组均未见全身明显毒性反应，中高剂量组可见轻微至轻度肺泡内巨噬细胞聚集，该变化是吸入制剂雾化吸入后肺部常见的适应性变化，故本试验未观察到毒性反应剂量（NOAEL）为高剂量。

综上所述，吸入核酸药物在机体肺部分布受粒径、递送方式的影响，当前可以有效实现吸入核酸药物在肺部的高效靶向递送，并且在非临床研究中体现出了高度的安全性。

刘春辉，女，硕士研究生，目前就读于山东第二医科大学药学院药剂学专业，研究方向为药用高分子材料与靶向制剂。

Preparation and characterization of tilmicosin nanoparticle suspension for nebulized inhalation

Chunhui Liu[a,b], Weifen Zhang[a,b*]

[a] School of Pharmacy, Shandong Second Medical University, Weifang 261053, Shandong, P.R. China.

[b] Shandong Engineering Research Center for Smart Materials and Regenerative Medicine, Shandong Second Medical University, Weifang 261053, Shandong, P.R. China.

17860692956@163.com (Chunhui Liu); zhangwf@sdsmu.edu.cn (Weifen Zhang)

Abstract：

Tilmicosin (TMS) is a macrolide used extensively for pulmonary infections in clinical veterinary medicine, but the clinical effect is limited by its poor solubility, bitterness, gastric instability, and low bioavailability. To overcome these barriers, a tilmicosin nanoparticle suspension (TNPs@GOS) was developed by electrostatic spray technology to administer directly to the infected lung tissue through atomized inhalation *via* the nebulizer for effectively avoiding systemic circulation, reducing toxicity and improving bioavailability. The nanocarriers consist of chitosan (CTS) and poly (lactic-co-glycolic acid) (PLGA), with further combination with guluronate oligosaccharides (GOS) to control the slow release of TMS, enhance the sensitivity of TMS to bacteria, and regulate the formation of bacterial biofilm. *In vitro* analysis showed that TNPs@GOS had a homogeneous morphology and could be efficiently deposited in lung tissues to inhibit and disrupt bacterial biofilm formation. The TNPs@GOS displayed excellent anti-bacterial efficacy against the bacterial pneumonia model of staphylococcus aureus, which significantly restored animal heat and body weight, reduced the distribution of bacteria in the lung, and alleviated inflammatory damage compared with commercially available atomized tobramycin inhalation solution. These results suggested that this nanoparticles-based nebulized inhalation suspension could reduce the number of administrations and dosages, and improve bioavailability, which provided a promising strategy for the clinical treatment of bacterial pneumonia.

Table 1. The result of APSD determination (mean±SD, n=3).

Sample	FPD (μg)	FPF (%)	MMAD (μm)	GSD
TMS	238.70±13.83	59.55±0.73	4.34±0.06	2.12±0.04
TNPs	318.15±2.85	58.72±1.25	4.37±0.09	2.22±0.01
TNPs@GOS	317.32±7.63	57.68±0.49	4.42±0.04	2.21±0.01

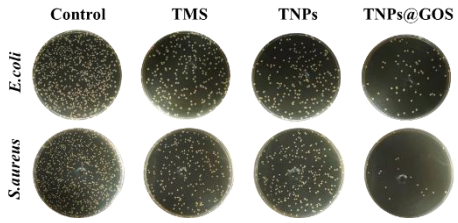


Figure 1. Photographs of the colonies of *E. coli* and *S. aureus* with different groups.

Keywords: tilmicosin; nebulized inhalation; bacterial pneumonia

References

[1] Yu J, Wang M, Ahmed R, Zhao H, Cohen Stuart MA, Wang J. Facile Preparation of Tilmicosin-Loaded Polymeric Nanoparticle with Controlled Properties and Functions. ACS Omega. 2020; 5(50): 32366-32372.
[2] Li L, Zhu B, Yao Z, Jiang J. Directed preparation, structure-activity relationship and applications of alginate oligosaccharides with specific structures: A systematic review. Food Res Int. 2023; 170: 112990.

Acknowledgements

The authors are grateful for the generous financial support from National Natural Science Foundation of China (No. 81973671); Project of Collaborative Innovation Center for Target Drug Delivery System of Shandong Second Medical University (2017).

刘毅（硕士研究生），南京师范大学能源与机械工程学院。

侧躺与平躺体位经口吸入条件下真实人体口喉模型内液雾气溶胶沉积特性的实验研究

刘毅[1]，陈晓乐[1,*]

[1]南京师范大学，能源与机械工程学院，南京 210046

[*]Email: xlc@njnu.edu.cn

摘要：雾化吸入是一种治疗呼吸系统疾病的常用方法。药物气溶胶在呼吸道内的沉积形式和沉积比决定了吸入治疗的效果。本项研究通过实验分析，分别在模型侧躺与平躺两种体位测量了不同吸气流量下药物气溶胶在真实模型内的沉积形式与沉积比。实验结果发现，吸气流量在 10~20L/min 内，随着吸气流量的增加，液滴在口喉内的沉积比明显减少，平躺体位下口喉沉积比从 61.8%下降到 51.7%，侧躺体位下口喉沉积比从 57.38%下降到 47.06%。而在 20~60L/min 时，不论是侧躺还是平躺，真实口喉模型中的液雾沉积比都随着吸气流量的增加而增加，在平躺体位下随着吸气流量从 20L/min 增加至 40L/min，口喉沉积比从 51.7%升高到 60%，然后在 60L/min 时继续升高至 63.65%。而在侧躺体位下随着吸气流量从 20L/min 增加至 40L/min，口喉沉积比从 47.06%升高到 60.35%，然后在 60L/min 时继续升高至 65.85%。随着吸气流量增大，液雾气溶胶主要沉积部位逐渐从口喉前端向口喉后端转移。根据本实验结果有望根据体位和吸气流量条件优化雾化量，进而提高雾化吸入溶液的肺内递送效率，为实现呼吸系统疾病治疗的个体化策略提供参考。

关键词：吸入治疗，液滴，真实呼吸道，沉积比，沉积形式

张盛宇博士，苏州大学材料与化学化工学部博士后，专注于颗粒科学与工程方面的科研工作，围绕功能粉体颗粒微纳结构设计与高效制备，开发了具有自主知识产权的微流控喷雾冷冻干燥技术平台，并以吸入粉雾剂制剂技术作为主要研究方向，探究影响喷雾冷冻干燥吸入粉雾剂颗粒结构的关键因素及作用机理，以及颗粒结构与其相关功能之间的构效关系。

具有高深肺沉积效率的“蒲公英”微粒

张盛宇[1]，孙皖[1]，严珅[1,*]，吴鑫珮[1]，陈晓东[1]，吴铎[1,*]

[1]先进粉体技术工程研究中心，材料与化学化工学部，苏州大学，215123

*Email: syan12@stu.suda.edu.cn (S. Yan), duo.wu@suda.edu.cn (W.D. Wu)

摘要：可用于直接治疗各种肺部疾病的活性药物成分（Active Pharmaceutical Ingredient，API）包埋吸入粉雾剂（API embedded Dry Powder for Inhalation，AeDPI）具有较高的载药量和给药剂量，同时药物递送均匀度和递送效率高[1][2]，近年来在肺部药物递送领域备受关注，现有研究报道的深肺沉积效率较低。有鉴于此，受蒲公英结构的启发，提出了一种新型AeDPI微粒结构，有望显著提高深肺沉积效率。当吸入时，“蒲公英”微粒在气流剪切的作用下被分散为碎片，API类似于蒲公英的“种子”被包裹在由赋形剂组成的冠毛中被递送进入深肺。本研究选择治疗肺曲霉病的一线药物伊曲康唑（Itraconazole，ITZ）作为模型API，以肺部生物相容性良好的两亲性表面活性剂TPGS用于制备性质稳定的ITZ纳米晶悬浮液[3]。通过喷雾冷冻干燥技术制备了一系列微粒，成功得到了“蒲公英”结构。系统研究了前驱液组成和冷冻工艺参数对微粒粒径、形貌、表面能、晶体性质和体外气溶胶性能的影响。最佳样品的微细颗粒分数为~ 68.96%，超细颗粒分数为~ 36.87%，相当于每吸入10 mg干粉时，肺部API沉积量可达~ 4.60 mg干粉，深肺可达~ 2.46 mg干粉。因此，具有“蒲公英”结构的AeDPI微粒在提高大剂量药物肺深部递送效率方面具有显著优势，有望用于肺部感染的治疗。

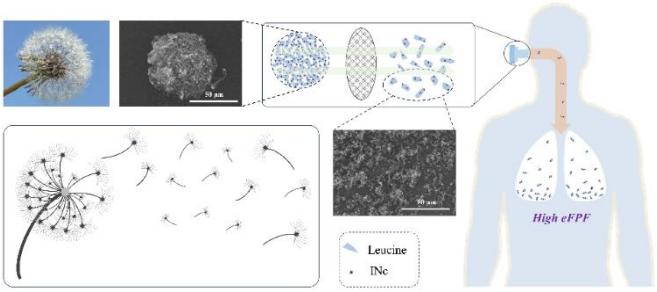


Fig. 1 Schematic graph of dandelion-like microparticle.

关键词：蒲公英微粒；伊曲康唑纳米晶，API包埋型吸入粉雾剂；喷雾冷冻干燥；体外气溶胶性能

参考文献：

[1] F Scherliess R., Etschmann C. DPI formulations for high dose applications-challenges and opportunities [J]. Int. J. Pharm., 2018, 548: 49-53.

[2] Alastruey-Izquierdo A., Cadranel J., Flick H., Godet C., Hennequin C., Hoenigl M., Kosmidis C., Lange C., Munteanu O., Page I., Salzer H. J. F., Cpanet. Treatment of chronic pulmonary aspergillosis: current standards and future perspectives [J]. Respiration, 2018, 96: 159-170.

[3] Yang C., Wu T., Qi Y., Zhang Z. Recent advances in the application of vitamin E TPGS for drug delivery [J]. Theranostics, 2018, 8: 464-485.

李梦媛，苏州大学材料与化学化工学部博士研究生，主要课题方向为鼻用粉雾剂制备技术及其体外性能评价方法开发。

鼻用粉雾剂体外释放评价方法学研究

李梦媛[1]，严珅[1]，谢帅宇[1]，张盛宇[1]，陈晓东[1]，吴铎[1,*]

[1]先进粉体技术工程研究中心，材料与化学化工学部，苏州大学，215123

*Email: duo.wu@suda.edu.cn

摘要：鼻腔给药能够避免肝脏首过效应及胃肠道酸碱、酶的降解，可极大程度提高药物的生物利用度，加之其使用便捷、依从性高，使得经鼻给药在治疗脑部疾病、激发粘膜免疫等领域具有可观的潜力[1, 2]。其中，鼻用粉雾剂（Nasal Powder，NP）相较于液体制剂具有更好的储存和运输稳定性，近年来备受研究者关注。然而，药物在鼻黏膜上的释放性能却难以直接量化，同时由于动物与人体间的生物相关性较低。因此，目前对于 NP 的体外释放评价从监管层面上尚未有统一的标准。本工作基于微流控喷雾干燥制粒技术，将洛沙平和明胶溶解于乙醇/水混合溶剂后进行喷雾干燥，制备了一系列尺寸和形貌可控的标准化 NP 微粒。通过采用不同的释放介质、释放装置和渗透膜对其体外释放行为进行了全面比较，并探索 NP 微粒的结构与其体外释放性能之间的构效关系。进而为有效评价 NP 的体外释放行为提供了一种有前景的方法，同时为合理制备高质量 NP 产品提供了可行的策略。

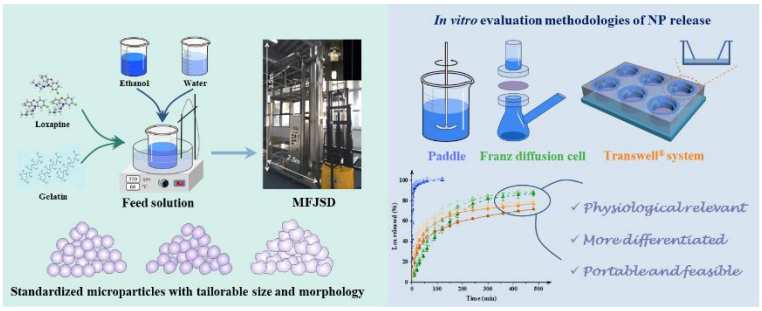


Fig. 1 Schematic graph of *in vitro* evaluation methodologies of release profiles of nasal powders.

关键词：鼻用粉雾剂，喷雾干燥，洛沙平，体外释放，Transwell

参考文献

[1] Huang, Q. Q., Chen, Y. K., Zhang, W. W., et al. Nanotechnology for enhanced nose-to-brain drug delivery in treating neurological diseases [J]. *J. Control. Release*, 2024, 366: 519-34.

[2] Nakahashi-Ouchida, Rika, Fujihashi, Kohtaro, Kurashima, Yosuke, et al. Nasal vaccines: solutions for respiratory infectious diseases [J]. *Trends mol. med.*, 2023, 29: 124-40.

罗伟贤,北京航空航天大学 2023 级硕士研究生
研究方向：可吸入颗粒物在下呼吸道的输运和沉积特性

可吸入颗粒物在非对称下呼吸道的输运和沉积特性研究

罗伟贤[1,2]，李光泽[2,*]，章振中[2,3]，赵一蔚[2,3]，常刘勇[2]，陈龙飞[2,3]

[1]北京航空航天大学航空发动机研究院，北京市昌平区沙河高教园南三街 9 号，102206

[2]杭州市北京航空航天大学国际创新研究院，浙江省杭州市余杭区瓶窑镇双红桥街 166 号，311115

[3]北京航空航天大学能源与动力工程学院，北京市昌平区沙河高教园南三街 9 号，102206

*Email: liguangze@buaa.edu.cn

摘要：吸入给药能使药物在肺部保持更高浓度，该方法疗效快且能够减少全身不良反应[1]，已逐渐成为治疗呼吸系统疾病的首选方案[2]。然而，由于吸入给药是多分散颗粒的输运和沉积过程，涉及颗粒碰撞聚合，惯性扩散以及重力沉降等复杂机制，使得其在下呼吸道的沉积规律尚不明晰。本研究基于经典 Yeh 模型[3]建立了三维非对称下呼吸道物理模型，采用拉格朗日-欧拉方法建立了考虑颗粒碰撞聚合的下呼吸道颗粒输运模型，基于已有实验数据对模型进行验证优化，并在此基础上进一步探究了颗粒物数目浓度、粒径分布、呼吸模式以及呼吸道几何结构等因素对颗粒输运及碰撞聚合的影响，获取了颗粒物发生聚合的浓度下限，得到了不同条件下颗粒物沉积位置、颗粒物沉积率以及颗粒物沉积速度的变化规律，揭示了可吸入颗粒物在下呼吸道的沉积分布特征和沉积模式，研究结果可为优化吸入药物雾化方案以及吸入药物靶向治疗等提供科学指导和数据支撑。

关键词：可吸入颗粒物；下呼吸道；碰撞聚合；颗粒沉积；吸入给药

参考文献

[1] 万妮, 陈斌, 李合, et al. 肺部吸入给药系统的研究进展[J]. 中国新药杂志, 2021, 30(15): 1386-1395.

[2] 薛峰, 金方. 吸入制剂在哮喘和慢性阻塞性肺疾病治疗中的作用及地位[J]. 世界临床药物, 2012, 33(04): 245-249.

[3] Yeh H-C, Schum G M. Models of human lung airways and their application to inhaled particle deposition[J]. Bulletin of Mathematical Biology, 1980, 42(3): 461-480.

第 22 分会场：颗粒特性与测试

光散射理论及其数值计算

沈建琪

上海理工大学，上海市军工路 516 号，邮编 200093

Email: jqshenk@163.com

摘要 经典Lorenz-Mie理论给出了均匀球形颗粒在平面波照射下光散射的严格解。随着激光技术的飞速发展，结构光束照射下的光散射在颗粒表征、光镊、微粒输运和操控、高分辨识别、高密度数据储存等多方面得到广泛应用。自上世纪80年代开始，Gouesbet等人提出了求解结构光束照射下规则形状颗粒散射的广义Lorenz-Mie理论(GLMT)，定义了描述结构光束的光束形状系数(BSC)。40多年来发展了多种求解BSC的数值计算方法，包括正交积分法、局域近似法、有限级数法和谱分解法等。除光束形状系数外，散射与颗粒的大小、形状和形态以及物性系数等密切相关。除了均匀球形颗粒和柱形颗粒外，多层规则颗粒的散射得到了研究。此外，对于不规则颗粒的散射，还发展了包括时域有限差分法(FDTD)、离散偶极子近似法(DDA)、矩量法(MoM)、有限元积分法(FIT)等针对小粒子的数值计算方法，以及针对大粒子的几何近似法(GO)和矢量光线追踪法(VCRM)等。对于散射物理量的研究，除了常规的远场散射和近场散射外，还延伸到辐射力、辐射力矩和角动量等力学性质的研究。发现了很多有意思的光散射现象，诸如光子喷射流、光子钩等。本文聚焦规则球形颗粒的光散射理论及其数值计算，结合作者所在的课题组最近十年在相关方面的研究，介绍广义Lorenz-Mie理论的一些新成果及其可能的应用前景。

关键词 光散射；结构光束；光束形状系数；广义洛仑兹米理论

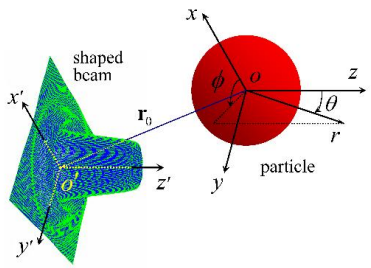


Fig. 1 Particle illuminated by a shaped light beam.

参考文献

[1] G. Gouesbet and G. Gréhan, Generalized Lorenz-Mie Theories, 3nd edition, Springer, 2023.

[2] G. Gouesbet, T-matrix methods for electromagnetic structured beams: A commented reference database for the period 2019-2023, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 322, 2024: 109015.

[3] M. I. Mishchenko, J. W. Hovenier, L. D. Travis, Light scattering by nonspherical particles, Theory, measurements, and applications, Academic Press, 2000.

[4] A. Doicu T.Wriedt Y.A. Eremin, Light Scattering by Systems of Particles, Springer, 2006.

[5] J. Shen, J. Liu, Y. Wang, et. Al., Cylindrical wave spectrum decomposition method for evaluating the expansion coefficients of the shaped beams in spherical coordinates, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 283, 2022: 108138.

[6] J. Shen, H. Yu, Radial quadrature method for evaluating the beam shape coefficients in spherical coordinates, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 305, 2023: 108627.

[7] J. Shen, S. Zhong, J. Lin, Formulation of the Beam Shape Coefficients Based on Spherical Expansion of the Scalar Function, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 309, 2023: 108705.

报告人简介

沈建琪，上海理工大学教授，主要从事光散射理论和颗粒测试技术研究。

事件数据引导的高分辨全息动态颗粒成像

徐捷[1]，王逸卓[2]，陈振熙[3]，骆海鑫[3]，田劲东[1,3,*]

[1]人工智能与数字经济广东省实验室（深圳），广东 深圳，518100

[2]天津大学精密仪器与光电子工程学院，天津，300072

[3]深圳大学物理与光电工程学院，广东 深圳，518060

*Email: jindt@szu.edu.cn

摘要 无透镜全息成像凭借结构简单、紧凑便携、视场大等优点广泛应用于水体微藻、空气花粉、生物细胞等环境颗粒检测中。该技术采用相干光源照明样品，以同轴全息的方式获得颗粒全息图，通过重建算法后得到颗粒的多种图像，如振幅、相位、三维形貌等。高分辨的全息成像有助于实现准确、定量、高精度的颗粒检测任务。然而，由于无透镜全息成像仅具有单倍放大率，其成像分辨率主要受采样率限制，相机传感器一定的像素大小导致其分辨率较低。为了突破这种限制，已经公开了一些像素超分辨的无透镜全息成像技术，通过高精度移动光源结合迭代算法来实现像素超分辨成像。这些技术操作较为繁琐，关键是不能应用于动态样品，例如快速流动的动态颗粒。针对该问题，我们提出了一种事件数据引导的动态颗粒像素超分辨全息成像技术。事件数据指的是事件相机根据光强变化所产生的极性信号，相比传统灰度相机具有更高的时间分辨率和动态范围，对于动态目标具有天然的敏感性。我们将事件数据和原始的低分辨全息图作为双模态输入，通过基于神经网络的插帧算法获得颗粒的亚像素位移全息图。这种方式充分利用了事件数据高时间分辨的特点，通过时空特征提取和融合，将其转化为高空间分辨的灰度信息。结果表明，在物理视场不变的情况下，该方法成功将256×256像素的全息图提升至1024×1024像素。后续的重建结果能够准确分辨更加细微的颗粒，证明该方法成功恢复了颗粒原始全息图中受采样率限制而丢失的高频信息。该方法有望作为颗粒全息术的前置算法，高效提取并重建具有更高时空分辨的动态颗粒图像，助力更高精度的颗粒检测任务。

关键词 全息；颗粒检测；事件相机；像素超分辨

参考文献

[1] 邱嘉钰, 张雅声, 方宇强, 等. 基于事件相机的目标检测与跟踪算法综述[J]. 激光与光电子学进展, 2025, 62(04): 01.

[2] 左嘉乐, 张蒙蒙, 唐睢, 等. 基于物理模型驱动无监督学习的无透镜成像质量增强方法[J]. 光学学报, 2024, 44(16): 1611001.

[3] 吴佳雪, 桂进斌, 李俊昌, 等. 基于深度学习的无干扰全息图生成[J]. 光学学报, 2022, 42(14): 1409001.

[4] Mudanyali O, Tseng D, Oh C, et al. Compact, light-weight and cost-effective microscope based on lensless incoherent holography for telemedicine applications[J]. Lab on a Chip, 2010, 10(11): 1417-1428.

[5] Bishara W, Su T W, Coskun A F, et al. Lensfree on-chip microscopy over a wide field-of-view using pixel super-resolution[J]. Optics Express, 2010, 18(11): 11181-11191.

[6] Luo Z, Yurt A, Stahl R, et al. Pixel super-resolution for lens-free holographic microscopy using deep learning neural networks[J]. Optics Express, 2019, 27(10): 13581-13595.

报告人简介：

徐捷，男，博士，现为人工智能与数字经济广东省实验室（深圳）副研究员，硕士生导师。2019 年毕业于天津大学并获光学工程博士学位，之后在深圳大学纳米光子学研究中心从事博士后研究工作。长期从事光散射、成像、光电检测等理论、实验、与应用方面的研究工作，取得了一系列研究成果。近年来主持参与多项国家级及省部级项目，以第一作者或通讯作者身份累计在相关领域的国际知名期刊例发表论文数十篇，申请及受权国家专利多项。参与中国颗粒学会、中国光学工程学会、中国仪器仪表学会等专业分委会，目前为中国颗粒学会第四届青年理事。

E-mail：xujie@gml.ac.cn

基于光场调控技术的多颗粒操控研究

刘冬梅*，孔令昊，严雅琳，谢君萍，邱健，韩鹏
华南师范大学，广东省广州市番禺区大学城外环西路 378 号，510006
*Email: dmliu@scnu.edu.cn

摘要：光镊技术以其非接触性、无损伤性和高精度等显著优势，自问世以来便在生命科学、胶体物理和原子物理等众多领域发挥了重要作用，并因其卓越贡献荣获2018年诺贝尔物理学奖。随着结构光技术的不断进步，基于结构光的光镊技术也迎来了快速发展。然而，现有的研究大多局限于对单个微粒的操控，或者需要依赖微流控装置来实现对多个颗粒的同时操控，这在一定程度上限制了光镊技术的应用范围。为了突破这些限制，我们利用光场调控技术，设计并生成了几种特殊的结构光场。这些光场不仅能够快速、高效地分离不同粒径大小的聚苯乙烯小球，还能在油溶液中利用暗光阱技术实现对多个低折射率硅小球的快速收集。我们的研究成果不仅为同时操控多个高低折射率颗粒提供了理论和实验基础，也为光镊技术在更广泛领域的应用铺平了道路。

关键词：光镊；光场调控；颗粒操控；结构光；

参考文献

[1] J. Chen, D. Liu, J. Qiu, L. Peng, K. Luo, and P. Han Trapping and Sorting Micro-Nano Particles in a Dynamic Optical Sieve. *IEEE Photon. Journal* 2022, 14(2), 2214604.

报告人简介：

刘冬梅博士，华南师范大学电子科学与工程学院(微电子学院)教授，《中国粉体技术》第八届编委会委员。2013 年毕业于南京大学物理学院获得博士学位，2020-2021 年在美国阿肯色大学访学。科研方面，主持国家自然科学基金项目 2 项、省级自然科学基金项目 4 项，主要从事非线性光学、光场调控及颗粒操控等相关方面研究工作。在 Science Advances、Photonics Research、Optics Letters 等期刊发表学术论文 30 余篇。

基于散斑学习的单帧定量颗粒度表征

张启航

清华大学精密仪器系，清华园街道 1 号，北京，100084，中国

*Email: qhz@tsinghua.edu.cn

摘要：在线无损颗粒度检测技术是先进制造产业的重点需求之一，目前的表征手段以工业相机和显微成像为主，工业相机分辨率不足，显微成像视场小距离近，无法满足高速高精度颗粒度检测的需求。长距离（1-2m）下的非接触式颗粒度检测技术尚不成熟。相干光在复杂介质中的传播会经过多次散射，形成激光散斑图案。如何通过激光散斑来定量表征散射介质的颗粒度等物理信息是一个具有挑战性的课题。我们在世界上首次提出了大颗粒粗糙表面与散斑图像的定量统计关联，并开发了一种基于物理模型增强的机器学习算法，通过散斑分析来提取散射界面颗粒度[1]。本工作将正问题与反问题协同优化，并通过物理模型提升神经网络可解释性。在此基础上，我们进一步利用光阑调制的方法[2]，提高测量系统的信噪比约 30 倍，大幅缩减单次测量时间，实现 4 fps 帧率的高速检测。本研究不仅从原理上建立了对相干光与散射介质相互作用的物理新理解，也开发了适配工业生产场景的在线颗粒度检测技术，对发展新一代无损表面检测设备及其应用具有重要意义。

关键词：无损检测，颗粒度，激光散斑，机器学习

参考文献

[1] Zhang, Q., Gamekkanda, J.C., Pandit, A., Tang, W., Papageorgiou, C., Mitchell, C., Yang, Y., Schwaerzler, M., Oyetunde, T., Braatz, R.D., Myerson, A.S., Barbastathis, G.: Extracting particle size distribution from laser speckle with a physics-enhanced autocorrelation-based estimator (peace). Nature Communications 14, 1159 (2023) https://doi.org/10.1038/s41467-023-36816-2

[2] Zhang, Q., Pandit, A., Liu, Z., Guo, Z., Muddu, S., Wei, Y., Pereg, D., Nazemifard, N., Papageorgiou, C., et al.: Non-invasive estimation of the powder size distribution from a single speckle image. Light: Science and Applications, accepted (2024). Preprint: https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-4082496/v1

报告人简介：

张启航，清华大学精密仪器系博士后，助理研究员。2018 年本科毕业于清华大学物理系，2023 年取得了麻省理工学院电子工程与计算机学院的博士学位，主要研究方向是以计算光学为基础的散射光学和智能光学。主要成果发表在 Nature Communications, Light, Optics Letters 等期刊上并被《麻省理工新闻》等媒体多次报道。

基于扩展 IPI 的呼出气溶胶液滴尺寸测量

吕且妮*，葛宝臻，田庆国
天津大学精密仪器与光电子工程学院
光电信息技术科学教育部重点实验室，天津 300072
*qienil@tju.edu.cn

摘要：人体呼出场是一个复杂的多相流场，呼出气溶胶液滴携带有不同的潜在病原体，液滴粒子大小影响病原体传播过程和传染程度。因此，粒子尺寸是呼出场一个重要参数。干涉粒子成像技术(Interferometric Particle Imaging: IPI) 是一种基于 Mie 散射理论的粒子尺寸测量技术，通过测量粒子散射干涉条纹频率或条纹数得到粒子尺寸信息，已用于喷雾液滴、气泡、流场，呼出粒子场测量。扩展 IPI 技术(Extend IPI: EIPI)是利用双光束照射多角度探测的 IPI 粒子场测量技术，可实现粒子尺寸和折射率同时测量。本文提出一种基于扩展 IPI 技术的呼出气溶胶液滴尺寸测量方法，对 6 位测试者进行了测量。图 1 给出了测试者说话时记录的条纹图，图 2 为说话时呼出粒子场粒径分布及其拟合曲线。从图 2 可以看出，说话时呼出粒子场粒径分布呈对数正态分布，饮水前说话时的呼出液滴小于饮水后说话时的呼出液滴，男性呼出的粒子尺寸稍微大于女性呼出液滴，说话时呼出粒子的平均折射率为 1.3317，与阿贝折射仪测量结果比对，相对误差为 0.0825%。该研究为呼吸道感染等疾病的初步诊断提供一种新方法。

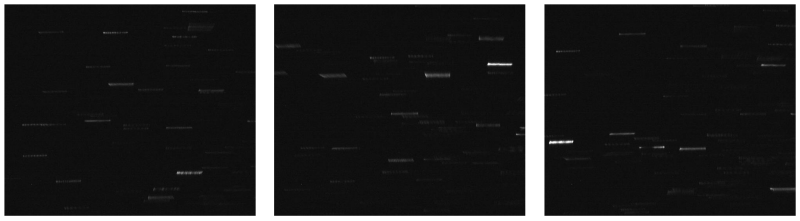


Fig.1 Examples of interferometric images at different times for speaking

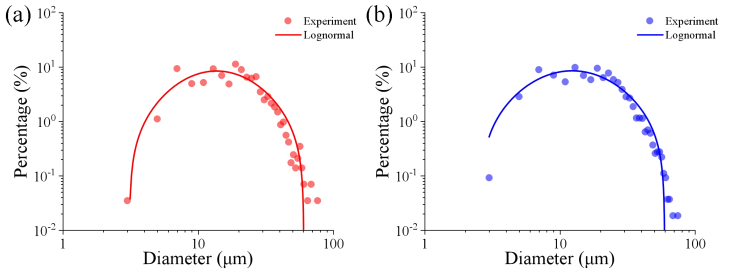


Fig.2 Droplet size distribution for speaking: (a) before drink and (b) after drink.

关键词：EIPI

参考文献

[1] C Y H Chao, M P Wan, L Morawska, et al. Characterization of expiration air jets and droplet size distributions immediately at the mouth opening[J]. Journal of aerosol science, 2009,40(2): 122-133.
[2] Oh W, Bu Y, Kikumoto H, Ooka R, Correlation between beverage consumption and droplet production during respiratory activity using interferometric Mie imaging experiment, Journal of Aerosol Science, https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2024.106458.

*基金项目：国家自然科学基金(批准号：62275192，62175059)。

报告人简介：

吕且妮，博士、博导/硕导，天津大学精密仪器与光电子工程学院教授，英国拉夫堡大学访问学者。主要从事光电成像与检测、粒子测量、光电调制器等方面的科研工作，承担和参与国家级、省部级等项目 17 项，近 5 年发表论文 30 多篇，授权发明专利 10 余项。中国粉体技术编委，中国颗粒学会理事，中国光学学会会员中国光学学会光学测试专业委员会委员。

PIFormer：基于 Transformer 和 UNet 结构的颗粒粒径反演算法研究

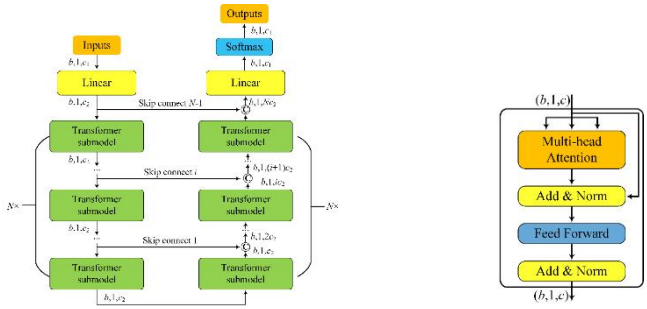
田庆国[1,2,*],孙梦怡[1,2],葛宝臻[1,2],吕且妮[1,2]

[1] 天津大学精密仪器与光电子工程学院，天津，300072

[2] 光电信息技术教育部重点实验室，天津，300072

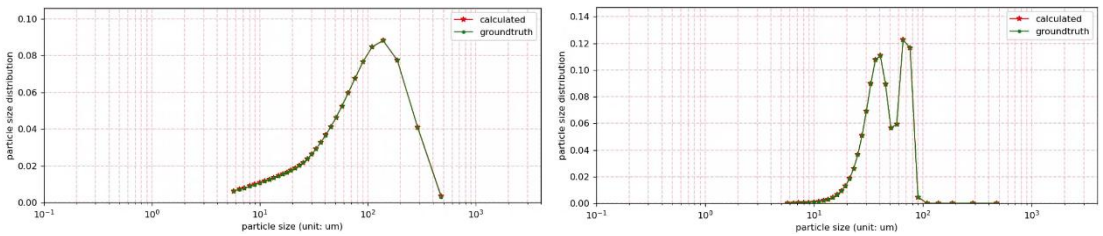
[*]Email: tianqingguo@tju.edu.cn

摘要：颗粒的物化特性，特别是粒径分布特性与冶金、石化、环材、医药等众多领域有密切关系。基于夫琅禾费衍射理论的静态光散射法通过多环光电探测器接收颗粒场散射光场以反演颗粒粒径分布，其本质是求解第一类 Fredholm 积分，属于典型的不适定问题。基于颗粒散射光分布的长程依赖特性，提出一种基于 Transformer 模块和 Unet 架构的颗粒粒径反演神经网络方法—PIFormer。Transformer 组合多头自注意力机制和逐点位置前馈模块学习光能分布序列中的局部和全局特征。Unet 架构实现对光能分布序列特征的多级编、解码，编码器和解码器之间采用跳跃连接。基于自研 LSA III 型激光粒度仪光学结构参数和颗粒粒径 R-R 分布构建单峰和混合分布数据集，并按一定比例分成训练集和测试集完成所提网络模型的训练和测试。与传统粒径分布反演算法以及比较流行的神经网络模型得到的粒径分布反演结果对比，PIFormer 方法具有模型参数规模适中，抗噪能力和泛化能力较强，以及反演精度较高的特点，是一种非常有希望的颗粒粒径分布测量反演新方法。



(a) PIFormer model (b) Transformer submodel

Fig. 1 Particle size inversion based on Transformer and Unet structure



(a) wide unimodal distribution (b) bimodal mixed distribution

Fig. 2 Examples of particle size inversion and comparison with groundtruth

关键词：颗粒粒径分布；静态光散射法；神经网络模型；Transformer 模块；Unet 架构

参考文献

[1] 栾志超. 激光粒度仪的无模式数据处理算法研究[D]. 硕士学位论文, 天津: 天津大学, 2005.

[2] 周臻, 刘亮, 王艳玲等. 煤粉粒径对燃烧特性影响的试验研究, 热力发电, 2007(3): 35~39.

[*]**基金项目：**国家自然科学基金(批准号：62175059)

[3] **Ashish Vaswani, Noam Shazeer, Jakob Uszkoreit, et al. Attention Is All You Need [C]. 31st Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS 2017), Long Beach, CA, USA.**

报告人简介：

田庆国，博士，硕士生导师,2007 年天津大学光学工程专业博士毕业，留校任教，2015 年 3 月至 2016 年 3 月在法国上阿尔萨斯大学作访问学者。主持、参与国家、省部级以及企事业单位委托项目 10 多项，经费近 800 万元。发表论文 20 余篇，授权国家发明专利近 10 项。在中国颗粒学会颗粒测试专业委员会、中国光学学会光电技术专业委员会、中国仪器仪表学会图像科学与工程分会等学术团体担任委员或理事。

国标 GB/T 41949-2022 激光粒度分析仪技术要求主要条文解读

张福根

珠海真理光学仪器有限公司，广东省珠海市高新区港湾 1 号湾 5 栋 3 楼，51900

albert.zhang@linkoptik.com

摘要：世界上第一台商品化激光粒度仪问世至今已经 50 多年。目前在中国市场销售的国内外激光粒度仪品牌数超过 10 个。该仪器已被广泛地应用到粉体、液体喷雾、生物颗粒、悬浮液等的粒度测量中。然而，激光粒度仪还不能说是一种成熟的仪器类型。其不成熟性最明显的表现是：各种品牌的激光粒度仪之间，甚至同一品牌的激光粒度仪的不同型号之间，测试结果不一致。产品标准是用以规范产品的市场化流通的重要手段。目前，国际标准化组织（ISO）已经发布了多个版本的激光衍射法颗粒表征技术标准 ISO13320，中国国家标准等同采用该国际标准，标准号为 GB/T 19077-2016（以下统称 13320 标准）。该标准是一个原理性的技术标准，而不是产品标准。该标准对激光粒度仪的各项性能指标虽然也提出了要求，但有些指标规定不够明确，有些指标在实操中难以验证，有些指标虽有明文规定但在市场上屡屡被仪器厂商违反等问题。

2023 年 7 月开始执行的 GB/T 41949-2022 颗粒.激光粒度仪.技术要求（以下简称“新标准”）根据中国市场激光粒度仪的研发、制造及应用经验，总结了中国颗粒学会颗粒测试专委会多年颗粒测试比对的经验，也参照了 13320 标准，对激光粒度仪的各项性能指标作出了更加明确的规定，同时给出了这些指标的可操作的实验验证方法。这些指标包括对输出报告的要求、测量下限的定义及验证方法、累积粒径适用范围的限制、把体积分布转换成数量分布的问题、重复性、准确性和分辨力的定义及验证。新标准同时也规定了激光粒度仪作为商品的型式要求。

本文对新标准中激光粒度仪的主要性能指标的定义及验证方法进行了解读，希望对宣传和贯彻新标准，促进中国市场上激光粒度仪产品的技术进步和市场规范有所帮助。

关键词：激光粒度仪；国家标准；测量下限；体积分布；数量分布

基于离焦模糊处理的颗粒动态图像分析技术

周骛[1,*]，徐日辛[1]，Cameron Tropea[2]，蔡天意[1]，蔡小舒[1]

[1] 上海理工大学，上海市杨浦区军工路 516 号，200093

[2] 德国达姆斯塔特工业大学，德国达姆斯塔特市，64287

*Email: zhouwu@usst.edu.cn

摘要：图像分析法已广泛应用于颗粒及多相流动可视化分析与检测，但对颗粒分散相如固体颗粒、液滴或气泡而言，粒径分布和浓度等参数的准确定量在线分析依然存在困难，其主要阻碍之一来源于成像系统的离焦模糊特性和由此导致的测量粒径和深度范围等的不确定性。本研究所提出的图像处理方法和相关测量技术，基于常规背光成像的动态图像分析系统硬件，但可将其应用于拓展至深度不受限的测量空间，包括喷雾液滴和管道内流动的颗粒等。报告拟回答以下几个问题：（1）如何从单幅离焦模糊颗粒图像中提取准确的颗粒粒径？（2）不同粒径颗粒的深度测量范围有何不同，且如何准确获得指定空间区域内颗粒系的粒度分布？（3）如何确定不同粒径颗粒的测量深度范围，从而准确计算浓度？（4）重叠颗粒图像如何处理，如何衡量图像系统的浓度测量上限？（5）所建立的方法对不规则颗粒的适用性如何？

关键词：离焦模糊；重叠图像；粒度分布；深度范围；浓度范围

报告人简介：

周骛，女，1986 年生，上海理工大学能源与动力工程学院教授、博导。主要从事颗粒与两相流测量方法研究，包括三维流场测量、三维喷雾场测量、颗粒污染物监测、纳米颗粒原位表征等。主持国家科技重大专项专题、国家重点研发计划子课题、国家自然科学基金面上和青年项目等，参与重大科研仪器设备研制专项。发表 SCI 论文 50 余篇，授权发明专利 13 项。研究成果先后获上海市技术发明奖二等奖、中国颗粒学会自然科学奖一等奖、中国计量测试学会科学技术进步奖二等奖、中国仪器仪表学会科学技术奖一等奖等。目前任中国颗粒学会理事、中国计量测试学会多相流测试专业委员会秘书兼委员、中国工程热物理学会多相流分会青年工作委员会委员、《Particuology》青年编委、《Measurement》副编辑。

库尔特原理及其在纳米材料表征中的应用

许人良

*Email: renliang.xu@yahoo.com

摘要：库尔特原理由华莱士·库尔特（Wallace Coulter）于1950年代发明，科学上称为电阻法（电感应区法，electric sensing zone method），是全球各地医院和医疗机构中血细胞计数的金色标准，也是许多工业领域内颗粒计数和粒径测量方法之一，具有最高的分辨率。尽管有很多种颗粒表征方法，但库尔特原理在某些领域的的一些应用仍然是不可替代的。

传统电阻法的测量下限在数百纳米，而且只能用于计数与粒径测量。近十多年来，两种新型的电阻法及其商业仪器已在数个生物医学领域内应用。这两种方法分别是可调式阻抗脉冲感应法 (Tunable resistive pulse sensing, TRPS) 与纳米库尔特计数器 (NanoCoulter Counter, NCC或Resistive pulse sensing, RPS) 。这两种方法不但将颗粒的测量下限拓展了一个数量级至数十纳米，而且可以测量单颗粒的zeta电位。

此发言除了介绍库尔特原理以及在各种颗粒体系的计数和表征中的几个典型或独特的应用之外，将介绍库尔特原理的两种新技术。

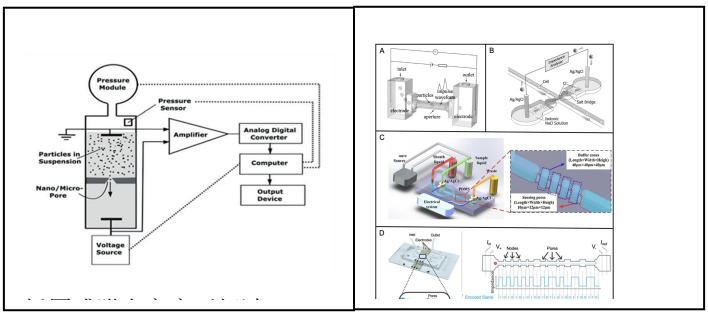


Fig. 1 Schematics of TRPS (left) and NCC (right)

关键词：库尔特原理；可调式阻抗脉冲感应；纳米库尔特计数器；纳米材料表征；电阻法

参考文献

[1] ISO 13319-1:2021 Determination of particle size distribution — Electrical sensing zone method Part 1: Aperture/orifice tube method.

[2] ISO 13319-2:2023 Determination of particle size distribution — Electrical sensing zone method Part 2: Tunable resistive pulse sensing method.

[3] 许人良，Zeta电位实用指南，化学工业出版社，2023.

[4] 许人良，颗粒表征的光学技术及应用，化学工业出版社，2022.

报告人简介：

在纳米技术，科学仪器，胶体化学，材料表征，企业管理等各项领域 30 多年，发表近百篇科学论文与专利，英文专著 Particle Characterization: Light Scattering Methods（Springer，2000），中文专著：颗粒表征的光学技术及应用（化学工业出版社，2022），Zeta 电位实用指南（化学工业出版社，2023）。

美国 ASTM International 贡献奖；美国化学会最佳博士论文奖，美国狄县多元文化奖，美国米乐玛市终身贡献奖。

1993 年起为 ISO 专家及委员，长期担任两个 ISO 专业委员会召集人，主持及执笔过多个国际标准。

曾为美国麦克仪器公司大中国区总经理，资深首席科学家；美国贝克曼库尔特仪器公司商务部主任；英国马尔文仪器公司亚太区技术总监。中国颗粒学会高级理事。

三个全国标准化技术委员会专家委员，一个国家标准第一起草人与数个国家标准起草人。多本专业杂志审稿人。

航空颗粒排放与环境气候

陈龙飞[1,2,3*]，常刘勇[1,2,3]，李光泽[1,2,3]

[1]杭州市北京航空航天大学国际创新研究院（北京航空航天大学国际创新学院），杭州，310023

[2]天目山实验室，杭州，310023

[3]北京航空航天大学 能源与动力工程学院，北京, 100083

* chenlongfei@buaa.edu.cn

摘要：航空排放作为高空唯一的人为污染源，对全球气候变暖具有深远的影响。随着全球民航运输量的不断增长，航空排放对全球变暖贡献已接近5%，预计在2050年将增加三倍。与地面排放不同，航空排放不仅包括二氧化碳等温室气体外，还涉及纳米颗粒物，这些颗粒通过诱导形成尾迹云及卷云，对气候产生显著的“非CO_2效应”。现有研究表明这种非直接温室气体效应对气候的潜在影响是传统温室气体的两倍。因此，深入研究航空颗粒排放及其对环境的影响，对于制定有效的减排策略至关重要。本报告从以下三方面展开讨论：首先需攻克航空纳米颗粒数目测量难题，针对航空排放纳米颗粒温度高、流速快、粒径小的特点，开发高温纳米颗粒直接测量系统，克服传统方法冷却过程中颗粒数目复杂多变导致测量不确定度大问题；其次需探究航空尾迹云生成机理及演化路径，针对当前采用“飞机跟飞机”实验方法必须保持飞机距离一公里以上、成本高、可重复性差的痛点，设计高空低温尾迹云模拟实验系统，实现在地面模拟航空颗粒排放-尾迹云形成的全流程模拟，揭示尾迹云冰晶颗粒形成机理，为尾迹云气候影响评估提供科学依据；最后需开展航空低排放实现路径，研究可持续航空燃料、氢燃料、航线智能优化等方法及对航空减排的潜在贡献，以期为实现低碳甚至零碳航空运输提供解决方案。上述研究不仅对于理解全球气候变化具有重要意义，而且对于推动航空业的可持续发展和技术创新具有指导作用。

关键词：航空排放；纳米颗粒；尾迹云；非CO_2效应；低碳航空

参考文献

[1] International Civil Aviation Organization (ICAO), World Aviation and the World Economy. https://www.icao.int/sustainability/pages/facts-figures_worldeconomydata.aspx.

[2] Sacchi R, Becattini V, Gabrielli P, et al. How to make climate-neutral aviation fly[J]. Nature Communications, 2023, 14(1): 3989.

[3] The National Aeronautics and Space Administration, NASA and Partners Study Contrail Formation. https://www.nasa.gov/image-article/nasa-and-partners-study-contrail-formation/.

[4] Massachusetts Institute of Technology, Delta to Work with MIT to Study Impact of Airplane Contrails on Climate. http://cehs.mit.edu/news/delta-work-mit-study-impact-airplane-contrails-climate.

[5] 中华人民共和国生态环境部，关于印发《国家适应气候变化战略2035》的通知，2022年6月7日，https://www.mee.gov.cn/xxgk2018/xxgk/xxgk03/202206/t20220613_985261.html.

[6] Climate Change Committee, Policies for the Sixth Carbon Budget and Net Zero. https://www.theccc.org.uk/wp-content/uploads/2020/12/Policies-for-the-Sixth-Carbon-Budget-andNet-Zero.pdf.

[7] Wong H W, Beyersdorf A J, Heath C M, et al. Laboratory and modeling studies on the effects of water and soot emissions and ambient conditions on the properties of contrail ice particles in the jet regime[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2013, 13(19): 10049-10060.

[8] Dalirian M, YlisirniöA, Buchholz A, et al. Cloud droplet activation of black carbon particles coated with organic compounds of varying solubility[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2018, 18(16): 12477-12489.

[9] Henning S, Ziese M, Kiselev A, et al. Hygroscopic growth and droplet activation of soot particles: uncoated, succinic or sulfuric acid coated[J]. Atmospheric chemistry and physics, 2012, 12(10): 4525- 4537.

[10] Chang Z, Hu M, Zhang Y. Multi-objective Aircraft Robust Trajectory Optimization Considering Various Predictability Metrics under Uncertain Wind[J]. IEEE Access, 2023, vol. 11, pp. 104333-104346.

动静态光散射流动模式

宁辉*，李晓光，刘岳强
丹东百特仪器有限公司，辽宁省丹东市临港产业园区金泉工业区甘泉路 9 号，118000
*hui.ning@bettersize.com

摘要：纳米粒度仪具有动态光散射和静态光散射测试能力。可以通过动态光散射技术有效检测约1纳米至1000纳米粒径范围内的颗粒体系，具有测试速度快、范围宽、重复性及准确性好等特点，得到了广泛的应用，但是纳米粒度仪广泛采用传统石英或者塑料比色皿测试模式（文献中常称作batch mode），对于宽分布样品的粒径分布测试分辨率较低，极限分辨只能达到区分粒径相差2.5-3倍的窄分布单独组份，这极大地限制了粒径分布结果的定量性；纳米粒度仪也可以利用静态光散射（瑞利散射方程）通过配置一系列浓度的蛋白或者高分子溶液，分别检测其净散射光强度，然后绘制Debye曲线并进行线性外推，得到样品的平均分子量Mw，由于这种方式步骤繁琐，对于样品的浓度准确性和样品洁净程度要求极高，对于操作人员和操作环境要求较高，导致检测结果误差较大（±10%或更高），重复性较低（±10%或更高），且不能给出分子量分布结果，所以实际应用和文献报道均较少。流动模式是一种高分辨率的粒径和分子量检测模式，适用于与分离前端连接使用，检测每一个被分离的流出组分的散射光信号，计算其尺寸或者分子量信息，结合接收到的示差折光检测器或者紫外检测器得到的浓度信号，得到高分辨率的不依赖于计算模型的粒径和分子量分布。

Fig. 1 BeNano flow mode

关键词：静态光散射；分子量；动态光散射；粒径；流动模式

报告人简介：

宁辉，博士，全国专业标准化技术委员会委员，全国纳米技术标准化技术委员会委员，《分析仪器》第十一届编委会委员，现任丹东百特仪器有限公司产品总监，主要负责多个与光散射相关项目的研发和产品推广。

多重散射在气溶胶测量中的问题研究

辛自强[1]*，沈兴志[1]

[1]珠海欧美克仪器有限公司，珠海科技三路 33 号，519085

*Email: Ziqiang.Xin@omec-instruments.com

摘 要：气溶胶是指悬浮在气体介质中的固体或者液体粒子。气溶胶广泛存在于各种环境，包括自然界中土壤扬尘中的颗粒物、大气云粒子、海水飞沫形成的盐粒子等，以及人工生产中的机械粉尘、电厂化工厂的烟雾、锅炉内燃机尾气、可吸入气溶胶等。近些年，大气科学、空气环境、纳米科技、能源、化工制造和药品生产给药等领域对气溶胶表征的需求日益增长。而光学作为一种非侵入、原位、快速的表征手段，也进入气溶胶科学的研究视野。光散射法可以探索纳米级不易观察到的颗粒物到毫米级大颗粒，能够实时表征构成气溶胶颗粒的粒径、形态和浓度。同时通过测量数据可以反推这些颗粒在动力学上的运动、聚集和消散等动力学问题。

然而大部分气溶胶研究课题，具有气溶胶颗粒物浓度高和浓度不稳定的痛点。研究光束的多重散射引起的测试数据漂移问题是促进气溶胶表征科学发展的关键一环。本文就多重散射问题，回顾以往的研究理论，提炼问题的解决思路，利用蒙特卡洛算法构建气溶胶的光散射模型。以此模型为出发点，探讨解决多重光散射的方向。希望该项研究能够促进气溶胶表征的研究发展，也能为相关行业，如化工制造、医药等提供一些指导意义。

关键词：光散射；多重散射；蒙特卡洛；气溶胶

参考文献

[1] P. A Baron, Paul A, K Willeke, 气溶胶测量：原理，技术及应用[M]. 化学工业出版社 2007.

[2] Ugulen H S , Sandven H , Hamre B ,et al. Analysis of multiple scattering errors in LISST-VSF volume scattering function measurements using Monte Carlo simulations and experimental data[J].Optics express, 2021, 29(8):12413-12428.

报告人简介：

辛自强，珠海欧美克仪器有限公司光学工程师，主要从事激光粒度仪研发工作。2020 年获深圳大学光学工程博士学位，在光散射、无标记显微成像和半导体晶圆缺陷检测领域耕耘多年。

工业城市环境空气颗粒实测及理化特征分析

耿春梅，郜泽宇，张楠，韩斌，杨文*

中国环境科学研究院，环境基准与风险评估国家重点实验室，北京 100012

Email: yangwen@craes.org.cn

摘要：$PM_{2.5}$是指空气动力学直径小于或等于2.5μm的大气颗粒物，它可以通过吸收和散射太阳辐射影响气候，也会对人体健康产生危害。华北平原是中国$PM_{2.5}$污染最严重的区域之一，而轻工业城市漯河市地处华北平原腹地，在秋冬季经常出现数天到数周的$PM_{2.5}$污染事件。本研究于2022年9-12月，在漯河市大气灰霾站分别使用扫描电迁移率粒径谱仪（Scanning Mobility Particle Sizer，SMPS）和高分辨率飞行时间气溶胶化学组分质谱仪（Time of Flight Aerosol Chemical Speciation Monitor，TOF-ACSM）对大气颗粒物粒径分布及组分进行在线观测，结合气象数据和气态污染物数据，分析漯河市颗粒物污染变化特征及其主要影响因素，深入认识漯河市秋冬季发生的重污染过程。

从粒径分布（空气动力学直径14.6～661.2 nm）来看，超标天（$PM_{2.5}$＞75 μg/m^3）与清洁天峰型基本不发生变化，峰值粒径也基本不发生偏移，主要为峰值浓度差异。从图1中可以看出相较于清洁时段，超标天爱根核模态（25 nm＜Dp≤100 nm）和积聚模态（Dp＞100 nm）数量大幅增长，核模态（Dp≤25 nm）数浓度反而下降，这与已有的国内城市霾条件下不同模态数浓度变化趋势基本情况一致[1]。超标条件下，温度、颗粒物浓度（包含PM_{10}和$PM_{2.5}$）、NO_2浓度、爱根核模态数浓度、积聚态数浓度和总数浓度都高于清洁天。$PM_{2.5}$超标时，湿度高于清洁天，而过高的$PM_{2.5}$又会导致核模态数浓度低于清洁天，研究表明颗粒物数浓度较大时会减少新粒子的生成[2]。高温低湿条件下有利于核模态颗粒物的生成与累积[3]，而温湿度变化对爱根核模态颗粒物则没有显著的影响[4]，从总数浓度水平来看，无风或风速较小的条件下都存在较高的颗粒物数浓度[5]，秋季$PM_{2.5}$污染主要为颗粒物累积增长所致；而冬季则在东南风向和西北风向存在较为显著的影响源。

从化学成分来看，颗粒物化学组分的质量浓度变化趋势相似，但各化学组分的贡献变化有所不同。颗粒物组分浓度（除氯化物外）都随着$PM_{2.5}$浓度的增加呈现单调增加的趋势。从图2中可以看出，二次无机盐中硝酸盐和铵盐的贡献均随着$PM_{2.5}$浓度的增加呈现出现部分下降但整体上升的变化趋势，从清洁天（$PM_{2.5}$＜50 μg/m^3）到高污染时段（＞200 μg/m^3），硝酸盐贡献从22%上升至43%，铵盐贡献从11%上升至14%；硫酸盐贡献变化则有所不同，从15%下降到10%再上升到13%，这表明硫酸盐不是严重污染形成的关键因素，该结果与北京冬季颗粒物严重污染期间硫酸盐的贡献大幅增加的研究结果不同[6,7]；整体上漯河市二次无机盐在不同的颗粒物污染过程中持续发挥着重要作用[8]，硝酸盐和铵盐在高浓度污染时的贡献更大。随着$PM_{2.5}$浓度的增加，黑碳和有机物组分贡献占比呈现整体下降的变化趋势，黑碳从9%下降至4%，说明在高污染时作为一次排放物的黑碳并不是造成污染的原因；有机物的贡献则是从40%下降至24%，虽然下降幅度达到40%，但仍可以发现在不同质量负荷下，有机物对$PM_{2.5}$污染的贡献都不可忽略。此外，氯化物对$PM_{2.5}$贡献较小且稳定（2%-4%）。在清洁天（$PM_{2.5}$＜50 μg/m^3），贡献最大的组分是有机物（34%）和硝酸盐（30%），而在高污染时段（＞200 μg/m^3）贡献最大的组分则为硝酸盐（39%）和有机物（27%），说明漯河市秋冬季在无污染时段有机物为主，在高污染时段以硝酸盐为主，以硝酸盐为主的二次无机盐是造成污染的主要原因，这与华北平原其他城市的研究结果相似[9,10]。

结果表明：漯河市秋冬季期间，超标天颗粒物数浓度、表面积浓度和体积浓度均大于清洁天颗粒物浓度，但同时$PM_{2.5}$浓度超标影响了新粒子生成而导致颗粒物核模态数浓度下降；在清洁天中颗粒物以有机物为主，在高污染时段则以硝酸盐为主，以硝酸盐为主的二次无机盐是造成污染的主要原因。通过综合分析漯河秋冬季颗粒物污染特征及成因，可以为漯河市及其他典型轻工业城市的大气污染研究提供基础数据，进而有效支撑颗粒物污染的科学防治。

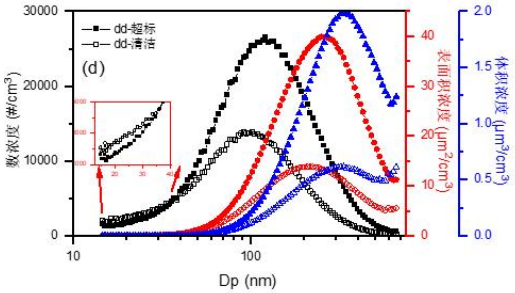


Figure 1: Particle spectrum distribution characteristics of high $PM_{2.5}$ period and clean period

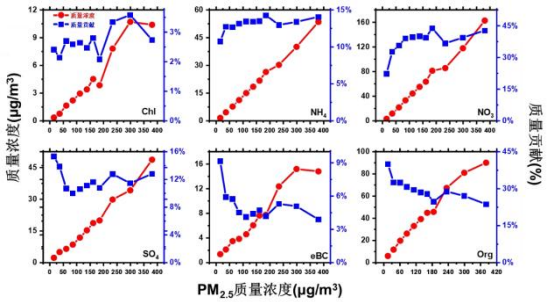


Figure 2: Changes in Chemical Component Concentration and Contribution with Increasing $PM_{2.5}$ Concentration

关键词：大气颗粒物；粒径分布；化学组分；轻工业城市；漯河

参考文献

[1] 吴志军，胡敏，岳玎利，等. 重污染和新粒子生成过程中城市大气颗粒物数谱分布演变过程[J]. 中国科学:地球科学, 2011, 41(08): 1192-1199.
[2]Gu J, Pitz M, Schnelle-Kreis J, Diemer J, Reller A, Zimmermann R, et al. Source apportionment of ambient particles: Comparison of positive matrix factorization analysis applied to particle size distribution and chemical composition data. Atmospheric Environment 2011; 45: 1849-1857.
[3]Shang DJ, Tang LZ, Fang X, Wang LF, Yang SD, Wu ZJ, et al. Variations in source contributions of particle number concentration under long-term emission control in winter of urban Beijing. Environmental Pollution 2022; 304.
[4]Hopke PK, Feng Y, Dai Q. Source apportionment of particle number concentrations: A global review [J]. Science of The Total Environment, 2022, 819: 153104.
[5] Dai Q, Liu B, Bi X, Wu J, Liang D, Zhang Y, et al. Dispersion Normalized PMF Provides Insights into the Significant Changes in Source Contributions to PM(2.5) after the COVID-19 Outbreak. Environ Sci Technol 2020; 54: 9917-9927.
[6] Wang G, Zhang R, Gomez M E, et al. Persistent sulfate formation from London Fog to Chinese haze[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2016, 113(48): 13630-13635.
[7] Xu W, Sun Y, Wang Q, et al. Changes in Aerosol Chemistry From 2014 to 2016 in Winter in Beijing: Insights From High-Resolution Aerosol Mass Spectrometry[J]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 2019, 124(2): 1132-1147.
[8] Wang Z, Yan J, Zhang P, et al. Chemical characterization, source apportionment, and health risk assessment of PM2.5 in a typical industrial region in North China[J]. Environmental Science and Pollution Research, 2022, 29(47): 71696-71708.
[9] An Z, Huang R-J, Zhang R, et al. Severe haze in northern China: A synergy of anthropogenic emissions and atmospheric processes[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2019, 116(18): 8657-8666
[10] Wang X, Chen J, Cheng T, et al. Particle number concentration, size distribution and chemical composition during haze and photochemical smog episodes in Shanghai [J]. Journal of Environmental Sciences (China), 2014, 26 (9): 1894-1902.

报告人简介：

耿春梅，女，中国环境科学研究院，正高级工程师，中国环境科学学会大气环境分会委员，中国环境科学学会环境监测专业委员会委员。研究领域：大气环境监测、数据综合分析、大气污染防治等。近几年，作为负责人完成国家大气污染防治攻关联合中心(总理基金二期)配套项目：服务淄博“一市一策”的基于超级站的数据分析、横向项目“漯河市高时空分辨率大气污染源排放清单编制项目”、“大气污染成因与控制技术研究”重点专项子课题“区域环境空气 PM10 和 PM2.5 来源解析及区域联防联控信息共享平台设计”等。参加建设完成具备自主知识产权的大气复合污染综合观测平台和工业园区 VOCs 监测预警溯源管控平台；参加气溶胶标定风洞设计建设。获得国家专利授权 10 余项；发表学术论文 50 余篇；参加编写专著 3 部；参加制定包含“环境空气细颗粒物污染综合防治技术政策”等技术政策标准多项。

基于拉曼光谱与静态成像对单颗粒表征技术-MDRS

王嘉琦*，高原，毛璐，周欣燃
北京市科学技术研究院分析测试研究所，北京市西三环北路 27 号，100089
*Email:28255291@qq.com

摘要：粒度分析在化工、能源、材料等众多领域拥有广泛应用，随着科技发展，对颗粒精准识别的表征技术也提出新的需求。研究建立了基于拉曼光谱与静态成像对单颗粒表征技术（MDRS），采用拉曼光谱功能鉴别和量化颗粒的化学成分，将单个光谱与参考光谱库进行比较，从而在化学上对颗粒身份识别，最终测出成分特异性颗粒的粒度分布。通过对糠酸莫米松和布地奈德等混悬型鼻喷雾剂药物成分进行方法验证，运用静态成像对颗粒形貌筛选，获得与谱库一致的拉曼光谱图，有效鉴别鼻喷雾剂中原料药与辅料成分，最终得到良好原料药成分的粒度分布。方法准确，高效，为颗粒研究者对单一颗粒的表征识别提供新的参考方法，具有借鉴意义。

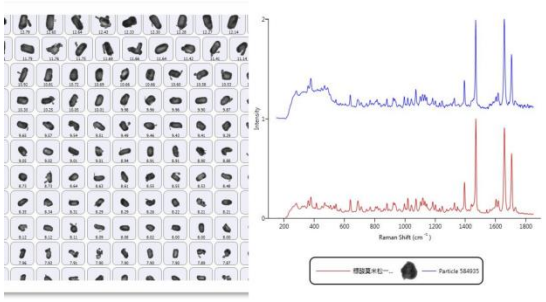


Fig.1 Static imaging (left) and Raman spectrum of mometasone furoate nasal spray particles (right)

关键词：拉曼光谱；静态成像；单颗粒表征技术；MDRS

报告人简介：

王嘉琦，男，1984.09-，研究生，高级工程师，任职于北京市科学技术研究院分析测试研究所（北京市理化分析测试中心），现从事材料分析与颗粒研究。

Dark-field differential dynamic microscopy to measure the dynamics of bulk nanobubbles

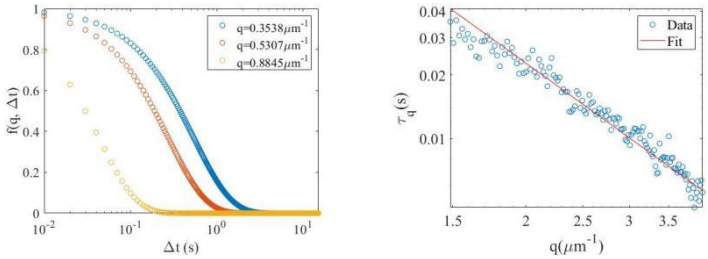
Miao Chen[1, 2*], Zhiqi Guo[1], Jian Qiu[1, 2], Li Peng[1, 2], Kaiqing Luo[1, 2], Dongmei Liu[1, 2], Peng Han[1, 2*]

1 Guangdong Provincial Engineering Research Center for Optoelectronic Instrument, School of Electronics and Information Engineering, South China Normal University, Foshan 528225, China

2 SCNU Qingyuan Institute of Science and Technology Innovation Co., Ltd., Qingyuan 511517, China

*chenmiao@scnu.edu.cn

Abstract: Although bulk nanobubbles have received attention in a variety of fields due to their physicochemical properties, their stabilization mechanism has remained unsolved. In recent years, while more and more researchers have studied the stability of bulk nanobubbles through molecular dynamics simulations, they lack a method for precise bulk nanobubbles dynamics measurement. In this paper, we present a dark-field differential dynamic microscopy (d-DDM) technique to characterize bulk nanobubbles experimentally generated by electrolysis, which allows us to obtain information on the dynamics of the bulk nanobubbles over a shorter period. We built a dark-field differential dynamic microscopy system based on a upright microscope. Then we experimentally measured the diffusive dynamics of polystyrene nanoparticles and bulk nanobubbles using the dark-field differential dynamic microscopy. This technique is expected to provide an efficient tool for research into stability of bulk nanobubbles.



(a) (b)

Figure 7 (a) Intermediate scattering function for bulk nanobubbles at different wave vectors; (b) Bulk nanobubbles with 2.6978μm²/s diffusion coefficient relationship between wavevector q and characteristic time τ_q

Table 3 d-DDM measurements with different particle sizes nanobubbles

	diffusion coefficient by d-DDM (μm²/s)	diffusion coefficient by DLS (μm²/s)	relative errors
BNBS1	2.6978	2.5776	0.4%
BNBS2	1.913	1.9422	0.1%
BNBS3	1.4955	1.5130	1.1%

Keywords: Dark-field differential dynamic microscopy, bulk nanobubbles, dynamics

References

[1] Sun, L., Zhang, F. H, Guo, X. M., Qiao, Z. M., Zhu, Y., Jin, N., Cui, Y.; Yang, W. M. Research progress on bulk nanobubbles. Particuology, 2022, 60, 99-106.

[2] Zhou, L. M., Wang, S., Zhang, L. J., Hu, J. Generation and stability of bulk nanobubbles: A review and perspective. Current Opinion in Colloid & Interface Science, 2021, 53, 101439.

[3] Favvas, E. P., Kyzas, G. Z., Efthimiadou, E. K., Mitropoulos, A. C. Bulk nanobubbles, generation methods and potential

applications. Current Opinion in Colloid & Interface Science, 2021, 54, 101455.

[4] Hansen, H. H., Cha, H. T., Ouyang, L. X., Zhang, J., Jin, B., Stratton, H., Nguyen, N. T., An, H. J. Nanobubble technologies: Applications in therapy from molecular to cellular level. Biotechnology Advances, 2023, 63, 108091.

[5] Safari, M. S., Poling-Skutvik, R., Vekilov, P. G., Conrad, J. C. Differential dynamic microscopy of bidisperse colloidal suspensions. Npj Microgravity, 2017, 3(1), 21.

[6] Cerbino, R., Piotti, D., Buscaglia, M., Giavazzi, F. Dark field differential dynamic microscopy enables accurate characterization of the roto-translational dynamics of bacteria and colloidal clusters. Journal of Physics: Condensed Matter, 2017, 30(2), 025901.

[7] Cerbino, R., Giavazzi, F., Helgeson, M. E. Differential dynamic microscopy for the characterization of polymer systems. Journal of Polymer Science, 2022, 60(7), 1079-1089.

[8] Eklund, F., Alheshibri, M., Swenson, J. Differentiating bulk nanobubbles from nanodroplets and nanoparticles. Current Opinion in Colloid & Interface Science, 2021, 53, 101427.

[9] Xu, S. H., Yu, X. R., Chen, Z. H., Zeng, Y. B., Guo, L. H., Li, L., Luo, F., Wang, J., Qiu, B., Lin, Z. Y. Real-time visualization of the single-nanoparticle electrocatalytic hydrogen generation process and activity under dark field microscopy. Analytical Chemistry, 2020, 92(13), 9016-9023.

[10] Jin, J., Wang, R., Tang, J. T., Yang, L., Feng, Z. Q., Xu, C. X., Yang, F., Gu, N. Dynamic tracking of bulk nanobubbles from microbubbles shrinkage to collapse. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2020, 589, 124430.

[11] Suvira, M., Ahuja, A., Lovre, P., Singh, M., Draher, G. W., Zhang, B. Imaging Single H2 Nanobubbles Using Off-Axis Dark-Field Microscopy. Analytical Chemistry, 2023, 95(43), 15893-15899.

[12] Jadhav, A. J., Barigou, M. Electrochemically induced bulk nanobubbles. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2021, 60(49), 17999-18006.

报告人简介：

陈淼，男，博士研究生，特聘副研究员，于华南师范大学电子与信息工程学院从事教学研究工作。主持并参与国家自然科学基金、广东省自然科学基金及广州市科技计划项目，已在国内外权威期刊发表多篇论文。要从事纳米颗粒粒度表征技术及仪器研究，涉及纳米颗粒粒度、zeta电位、纳米气泡等研究领域。

颗粒分选斑图形成过程中困结结构的关键作用

修文正[1*]，李然[2]，陈泉[2]，杨晖[2]

[1]山东理工大学电气与电子工程学院，山东淄博，255049

[2]上海理工大学光电信息与计算机工程学院，上海，200093

*Email: mrxiuwenzheng@163.com

摘要：在双组元颗粒分选中，当雪崩停止时，颗粒床表面在流动层的上游凸起，形成局部楔形结构，称为困结结构，困结结构对分选斑图的形成十分重要。本文建立了困结头部位置分布与颗粒分选斑图之间的关系。实验结果表明，困结头部位置分布符合对数正态分布。当分布的标准差小于 0.4 时，出现核状斑图。当分布的标准差大于 0.4 时，分选斑图由核状向条纹状转变。困结头部位置分布主要受休止角和雪崩时间等因素的影响。这为描述分选斑图的形成和完善分选模型提供了重要的理论依据。

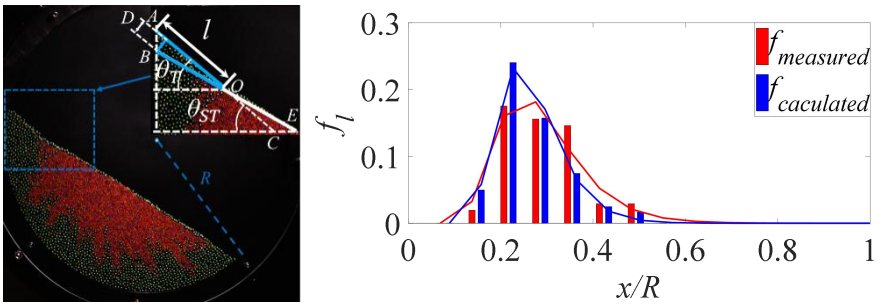


Fig. 1. Schematic diagram of the trapped kink in the profile of the drum and the position distribution of trapped kink head.

关键词：颗粒速度；颗粒分选斑图；转筒；休止角；困结结构

参考文献

[1] Larcher M, Jenkins J T. The evolution of segregation in dense inclined flows of binary mixtures of spheres [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2015, 782:405-429.

[2] Hogg R. Mixing and Segregation in Powders: Evaluation, Mechanisms and Processes [J]. Powder and particle, 2009, 27(43):281-3.

[3] Shimokawa M, Ohta S. Spontaneous formation of dual stratification patterns in a large quasi-two-dimensional sand pile[J]. Physical Review E Statistical Nonlinear & Soft Matter Physics, 2008, 77(1):011305.

[4] Shimokawa M, Ohta S. Dual stratification of a sand pile formed by trapped kink[J]. Physics Letters A, 2007, 366(6):591-595.

[5] Goyal RK, Tomassone M S. Power-law and exponential segregation in two-dimensional silos of granular mixtures[J]. Physical Review E, 2006, 74(5 Pt 1):051301.

[6] Zuriguel I, Gray J, Peixinho J, et al. Pattern selection by a granular wave in a rotating drum[J]. Physical Review E, 2006, 73(6 Pt 1):061302.

[7] Ciz Ea U P, Makse H A, Stanley H E. Mechanisms of Granular Spontaneous Stratification and Segregation in Two-Dimensional Silos [J]. Physical Review E Statistical Physics Plasmas Fluids & Related Interdisciplinary Topics, 1998, 59(4):4408-4421.

[8] Makse HA, Cizeau P, Stanley HE. Possible stratification mechanism in granular mixtures[J]. Physical Review Letters, 1997, 78(17):3298-3301.

[9] Metcalfe G, Shinbrot T, Mccarthy J J, et al. Avalanche mixing of granular solids[J]. Nature, 1995, 374(6517):42-44.

[10] Ottino, J, M, et al. Mixing and Segregation of Granular Materials. [J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2000.

[11] Hill K M, Khakhar D V, Gilchrist J F, et al. Segregation-driven organization in chaotic granular flows [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 1999, 96(21):11701-11706.

[12] Khakhar D V, Mccarthy J J, Ottino J M. Radial segregation of granular mixtures in rotating cylinders [J]. Physics of Fluids, 1997, 9(12):3600-3614.

[13] Hill K M, Gioia G, Amaravadi D. Radial Segregation Patterns in Rotating Granular Mixtures: Waviness Selection[J]. Physical

Review Letters, 2004, 93(22):224301.

[14] Hill K M, Gioia G, Amaravadi D, et al. Moon patterns, sun patterns, and wave breaking in rotating granular mixtures[J]. Complexity, 2010, 10(4):79-86.

[15] Goldfarb, David J, Glasser, et al. Shear instabilities in granular flows[J]. Nature, 2002.

[16] Arntz M M H D, Otter W K D, Briels W J, et al. Granular mixing and segregation in a horizontal rotating drum: a simulation study on the impact of rotational speed and fill level[J]. Aiche Journal, 2010, 54(12):3133-3146.

[17] Pereira G G, Pucilowski S, Liffman K, et al. Streak patterns in binary granular media in a rotating drum[J]. Applied Mathematical Modelling, 2011, 35(4):1638-1646.

报告人简介：

修文正，硕士研究生导师，讲师。主要研究方向为：颗粒流相关理论和测试技术、光电精密检测技术。参与国家自然科学基金面上项目 2 项，参与国家自然科学基金重大研究计划重点支持项目子课题 1 项。以第一作者或通信作者发表论文 20 篇，其中在 POWD TECH, Particuology 等本领域权威 SCI 期刊发表论文 12 余篇。

基于双闭环控制的单分散超细颗粒物稳定发生技术

康士鹏[1]，桂华侨[1, 2*]，刘俊杰[3]，余同柱[1, 2]，杨义新[1, 2]，刘建国[1]，刘文清[1, 2]

[1]中国科学院合肥物质科学研究院，安徽省合肥市蜀山湖路 350 号，230031

[2]合肥综合性科学中心环境研究院，安徽省合肥市蜀山经济技术开发区电商园四期 E 栋，230071

[3]中国计量科学研究院，北京市朝阳区北三环东路 18 号，102200

*Email: hqgui@aiofm.ac.cn

摘要：锥形射流电喷雾因其产生单分散液滴的能力而被广泛应用。电喷雾过程的稳定运行对于生成液滴的质量非常重要，特别是对于需要长期运行的应用。通常，喷雾电流和液滴形状都用于监测电喷雾的工作状态。在实践中，各种因素（操作和环境）都会影响电喷雾操作。因此，开发了一种新的喷雾电流控制系统，以提高锥形射流模式下单喷针电喷雾的稳定性。新的喷雾电流控制系统有两个控制回路：用于喷雾电流控制的主回路和用于液滴形状控制的辅助回路。提出了一种量化液滴形状和识别电喷雾工作状态的简单方法，并研究了所提出喷雾电流控制系统的性能。结果表明，采用新的控制系统，单喷针电喷雾系统在遇到严重扰动时也能够连续运行（即使在喷雾液体进样流速受到阶跃扰动时，电喷雾也会收敛到目标喷雾电流和液滴形状），电喷雾长时间发生超细颗粒物粒径分布一致性良好，40 分钟内，电喷雾系统发生颗粒物中心粒径偏移量<0.2nm，数量浓度变化<2.5%。

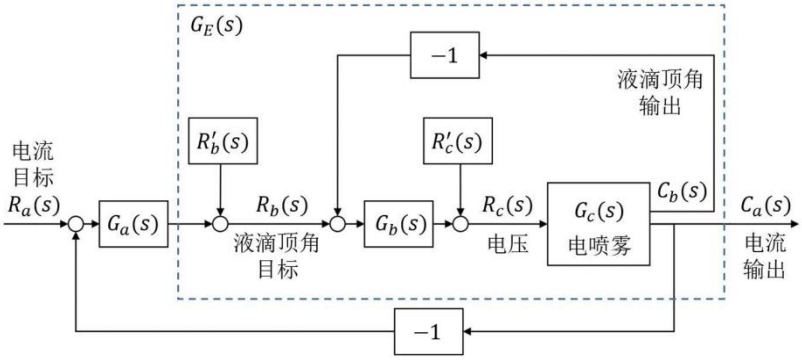


Fig. 1 Schematic of electrospray current controlling system

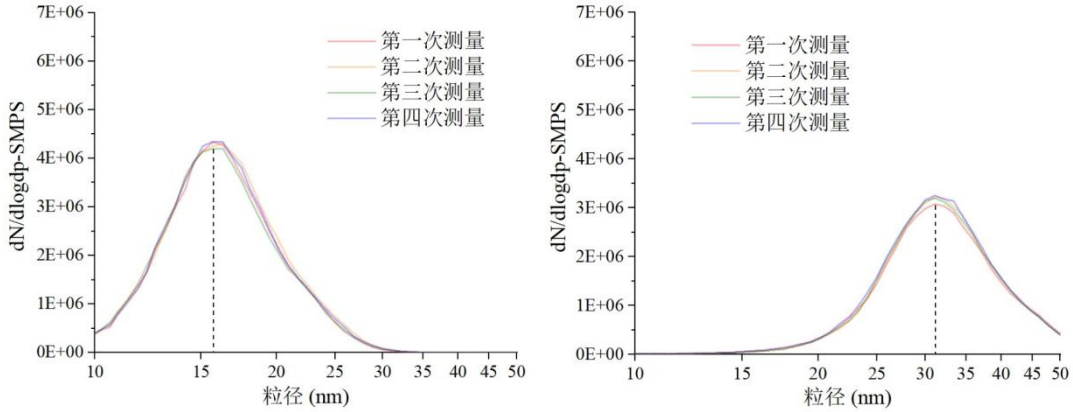


Fig. 2 Test results of stability of electrospraying

关键词：单分散超细颗粒物；电喷雾；电流控制

参考文献

[1] Chen, D. R., Pui, D. Y. H., & Kaufman, S. L. (1995). Electrospraying of conducting liquids for monodisperse aerosol generation in the 4 nm to 1.8 μm diameter range[J]. *Journal of Aerosol Science*, 26(6), 963-977.

[2] Kang, S. P., Chen, A. B., Yu, T. Z., et al. A New Spray Current Control for the Reliable Operation of a Single-Capillary Electrospray[J]. *Journal of Aerosol Science*, 2022, 166: 106073.

[3] Gapeev, A., Berton, A., & Fabris, D. (2009). Current-controlled nanospray ionization mass spectrometry[J]. *Journal Of the American Society for Mass Spectrometry*, 20(7), 1334-1341.

[4] Kien, N. T., Nguyen, V. D., Seong, B., et al. (2014). Control and improvement of jet stability by monitoring liquid meniscus in electrospray and electrohydrodynamic jet[J]. *Journal of Aerosol Science*, 71, 29-39.

报告人简介：

康士鹏，博士，中国科学院合肥物质科学研究院安光所博士后，毕业于中国科学技术大学。研究生期间从事环境空气与移动源细颗粒物监测技术研究工作，研发了环境空气粒径分布检测系统、双极性差分电迁移率分析仪、热沉积静电计等一系列在线监测技术设备。在 Jouarnal of Aerosol Science 等期刊发表论文 4 篇，申请授权发明专利 6 项。

Sample population requirement for PSD analysis: Numerical investigation and experimental verification

Qiwen Jin[1, *], Zhiming Lin[1], Yingchun Wu[1], Xuecheng Wu[1]

[1] State Key Laboratory of Clean Energy Utilization, Zhejiang University, Hangzhou 310027

* qwjin@zju.edu.cn

Abstract: The determination of the minimum particle number needed to meet error specifications and confidence levels poses a fundamental challenge in particle size analysis. Conventional models, primarily designed for log-normal distributions, may yield inaccuracies when applied to other distribution functions. This study introduces a numerical approach to explore the necessary sample size for measuring different types of mean diameters. The methodology involves distribution conversion, sample generation, repeated sampling, and error estimation. Specifically, Gates-Gaudin-Schuhmann (GGS) and Rosin-Rammler (RR) distributions serve as representative models in this investigation. The impact of sample size, span ratio, and boundary sizes on relative errors is examined. Additionally, an empirical model is formulated, simplifying the calculation of the requisite sample size when the relative error and mass-based span ratio are provided. The proposed method is also verified using experimental particle size data that follow the RR distribution.

Keywords: Particle characterization, Sample size, Gates-Gaudin-Schuhmann, Rosin-Rammler, Uncertainty evaluation.

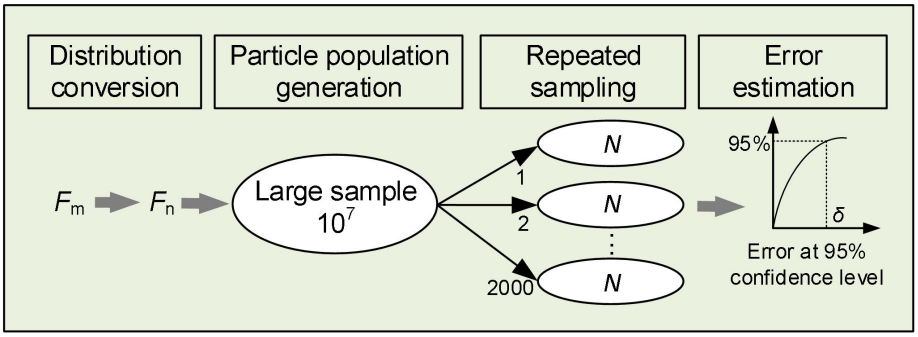


Fig. 1 Schematic illustration of the simulation procedure.

References

[1] Jin Q, Lin Z, Wu Y, et al. Numerical investigation on sample population requirement for mean particle diameter analysis[J]. Measurement, 2024: 115291.

报告人简介：

金其文，博士，浙江大学博士后。主要从事能源环境领域流场、颗粒场在线监测技术和先进传感器研发以及能源系统智能运维方面的工作。

一种频域纯物理监督训练方法用于三维颗粒场颗粒全息重建

骆海鑫[1]，熊锐[1]，徐捷[2]，陈振熙[1]，田劲东[1,2,*]

[1]深圳大学物理与光电工程学院，广东 深圳，518060

[2]人工智能与数字经济广东省实验室（深圳），广东 深圳，518100

*Email: jindt@szu.edu.cn

摘要：无透镜全息术凭借大视场、高通量、结构简单、紧凑便携等优点，广泛应用于水体微藻、空气花粉和生物细胞等微生物颗粒的检测中。与传统全息术依赖高相干光源不同，该技术使用部分相干光源，如LED，结合针孔滤波即可通过Gabor同轴全息方式实现成像，并通过角谱算法和自动聚焦算法提取全息图中的振幅、相位及离焦距离等多维信息。然而，基于无透镜全息的颗粒场三维检测存在自动聚焦的计算负担，且全息重建过程往往带来显著的计算量。此外，现有的全息重建算法通常依赖多张全息图来实现重建，否则容易产生严重的孪生伪影。为解决这些问题，我们提出了一种基于纯物理监督的傅里叶神经网络，用于三维颗粒场中的颗粒全息重建。该网络无需真实值，仅通过少量颗粒的无透镜全息图进行训练，参数优化完成后，不需要自动聚焦即可实现对每个颗粒的自动全息重建。实验结果表明，该方法在三维颗粒场中对生物气溶胶颗粒的振幅和相位成像无伪影，且在重建质量、抗噪性和孪生像消除方面表现出优异性能，验证了其有效性。此方法有望作为三维颗粒场分类技术的前置算法，通过提供颗粒的无伪影振幅和相位信息，提升现有基于二维形态的检测精度。

关键词：数字全息；颗粒检测；傅里叶神经算子；自监督机制

参考文献

[1] 顾高霏, 赵军, 孔明, 等. 基于光场相机层析法的颗粒三维位置测量[J]. 光子学报, 2020, 49(8): 0812002.

[2] 何炳恩, 张利萍, 龚湘君, 等. 基于数字全息显微技术的微纳粒子动态行为表征[J]. 激光与光电子学进展, 2023, 60(8): 0811006.

[3] 张华, 曹良才, 金国藩, 等. 基于压缩感知算法的无透镜数字全息成像研究[J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57(8): 080001.

[4] Zuo, C., Sun, J., Zhang, J., Hu, Y., et al. Lensless phase microscopy and diffraction tomography with multi-angle and multi-wavelength illuminations using a LED matrix[J]. Optics. Express, 2015, 23(11): 14314-14328.

[5] Wu, Y., Wu, J., Jin, S., et al. Dense-U-net: Dense encoder–decoder network for holographic imaging of 3D particle fields[J]. Optics Communications, 2021, 493: 126970.

[6] Wu, Y.-C. et al. Air quality monitoring using mobile microscopy and machine learning[J]. Light: Science & Applications, 2017, 6: e17046–e17046.

报告人简介：

骆海鑫，男，硕士，现为深圳大学物理与光电工程学院光学工程在读博士生。2023 年毕业于深圳大学并获光学工程硕士学位，之后继续在深圳大学攻读博士学位。长期从事数字全息和光电成像和等理论、实验、与应用方面的研究工作，取得了一系列研究成果。主持参与深圳大学 2024 年研究生自主创新成果培育项目，以第一作者身份累计在相关领域的国际知名期刊发表论文 3 篇，申请国家专利多项。

报告人为学生。

颗粒彩色图像分析法的空间分辨力研究

韩雪[1]，周骛[1]，徐喜庆[2]

[1]上海理工大学，上海市杨浦区，200093

[2]大庆石油勘探研究院，黑龙江大庆，163712

*Email: 1105291584@qq.com

摘要：通过仿真和实验相结合的手段分析彩色图片中颗粒边缘区域产生的伪影像素，提出识别和去除的方法，进一步提高颗粒颜色统计的准确性。首先，仿真生成不同直径的小球（1-10 像素）在 Bayer 矩阵（RGGB）中不同位置的投影 RAW 格式图像，采用 6 种不同的插值算法将上述 RAW 格式图像转换为 RGB 彩色图像，并比较分析其插值效果。其次，采用常用的单 CCD（拜尔模式）彩色相机，拍摄白色 LED 背光照明下的圆点标定板，分别获取 RAW 格式图片和 RGB 图片，对 RAW 格式图片采用不同插值算法生成 RGB 图片，并与实际拍摄获得的 RGB 图片进行对比，分析颗粒彩色图像伪色彩区域大小的影响因素。结果表明，尽管不同的插值算法和实验条件会导致伪影区域有所差异，但在颗粒边缘普遍存在着一个大约 7 像素宽的区域，这个区域内的像素与颗粒的实际颜色不符。因此，去除颗粒边缘的伪影像素对于提高颗粒颜色的统计准确性至关重要。此外，彩色颗粒图像的最小像素数应根据放大倍率来设定，以确保即使是最小的颗粒，其像素数量也能满足所需的精度标准。本研究为颗粒图像处理提供了一种去除颗粒边缘伪彩色的有效的方法，以提高颜色测量的准确性和可靠性。

关键词：颗粒图像处理；边缘伪影；插值算法；粒度测量

参考文献

[1] H. S. Malvar, L.-W. He and R. Cutler High-quality linear interpolation for demosaicing of Bayer-patterned color images. ICASSP, IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing - Proceedings. 2004, III485–III488.

[2] 魏凌云, 孙帮勇. Bayer 阵列图像去马赛克算法综述[J]. 中国图象图形学报, 2022, 27 (09): 2683-2696.

报告人简介：

韩雪，女，上海理工大学能源与动力工程学院在读硕士。研究方向为彩色图像处理，包括图像分割、特征提取等。

报告人为学生。

高斯光束入射下液滴的彩虹特性研究

苏天聪，王海楠，沈建琪，于海涛*

上海理工大学,上海 200090

Email: yuhaitao1025@163.com

摘要：在雾化燃烧、雾化干燥、雾化冷却等众多过程中，广泛存在液滴测量相关的问题。譬如在发动机的研发和设计过程中，开展燃烧室内液体燃料雾化性能、蒸发速率、燃烧效率等的诊断研究必不可少，对于发动机及其燃烧部件的研发和优化具有重要意义。在液体火箭发动机、内燃机、燃气轮机等热能动力装置中，雾化场的精确测量也是必不可少。光学测量方法具有无需取样、非接触式、快速等显著优点，主要包括相位多普勒法、粒子图像测速法、激光诱导荧光法、激光全息法和激光散射法，可以实现液滴粒径、温度、速度等信息测量。彩虹方法是激光散射法的一种，它的主要优势在于能够实现液滴多参数同步测量，包括粒径、粒径分布、组分、折射率和温度信息[1,2]。

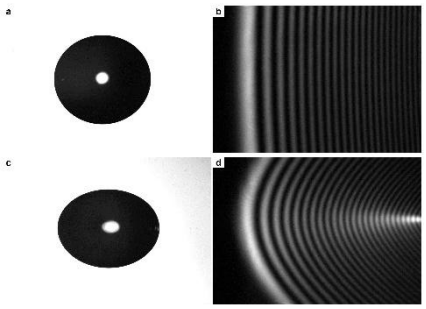


Fig 1: Droplet images and the corresponding generalized rainbow patters

a) a=1.68 mm and a/c=1.02. c) a=1.59 mm and a/c=1.21.

图 1 为椭球液滴及其对应的广义彩虹散射图样，入射光束为平行光。图 1(a)所示液滴的赤道面半径 a=1.58 mm、椭球度 a/c=1.02(c 为椭球液滴的短轴半径)，图 1(b)为其对应的广义彩虹散射图样。图 1(c)的液滴粒径为 a=1.76 mm、a/c=1.21，其对应的广义彩虹散射图样如图 1(d)所示[3]。由图 1 可见：不同椭球液滴粒对应不同的广义彩虹散射图样，因此，可以根据广义彩虹散射实现椭球形液滴信息的反演计算。

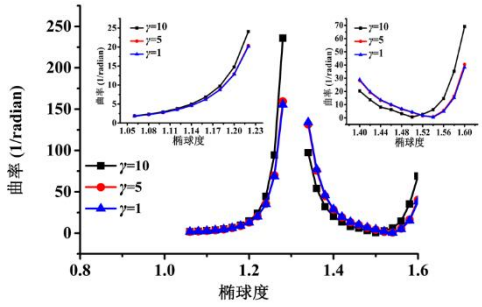


Fig 2: Curvatures of limiting rainbow fringes for droplets illuminated by Gaussian beam with different droplet/beam ratios.

基于矢量光线追踪可以得到彩虹条纹的曲率随液滴形状的变化规律（见图 2），液滴粒径 a 与高斯光束束腰半径 w 之比（即γ=a/w）不同时，彩虹条纹的曲率略有不同，因此液滴形状与彩虹条纹的曲率有关[4]。

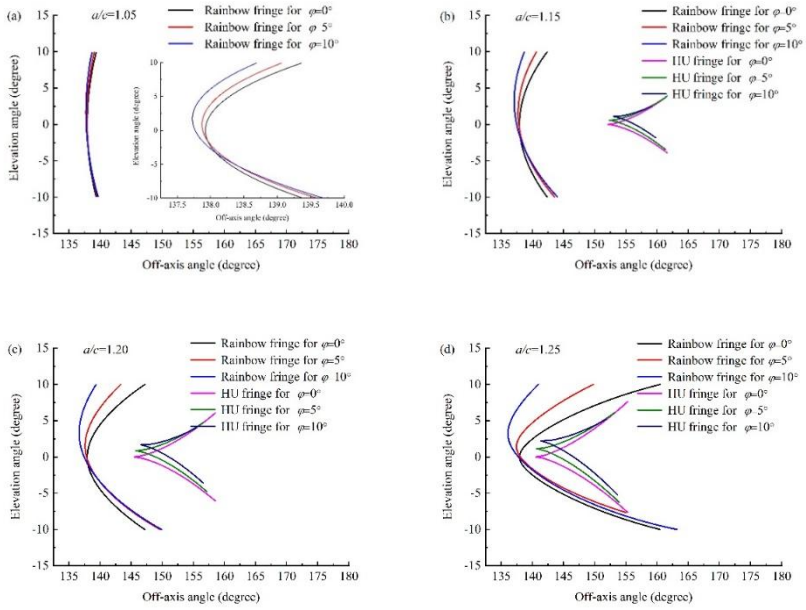


Fig 3: The optical caustic for oblate droplets

基于矢量光线追踪模型进一步研究了高斯光束照射下不同形状液滴光学焦散演化规律（见图 4），当 a/c=1.05（a 是液滴赤道面的半径，c 是垂直液滴赤道面的半径）时，如图 4（a）所示，不同倾斜程度的彩虹条纹几乎重合；当 a/c 增大到 1.15 时，此时出现双曲脐条纹，彩虹条纹的弯曲程度增大且发生逆时针旋转；随着椭球度进一步增大到 1.20，彩虹条纹的弯曲程度进一步增大，它的顶点随着液滴倾斜程度的增大向散射角减小的方向移动，同时双曲脐条纹也向小散射角方向发生偏移；当 a/c=1.25 时，彩虹条纹和双曲脐条纹之间的差异相较于液滴（a/c=1.15 和 1.20）进一步增大。彩虹条纹的曲率和尖点顶点的位置可用于液滴形状的测量。

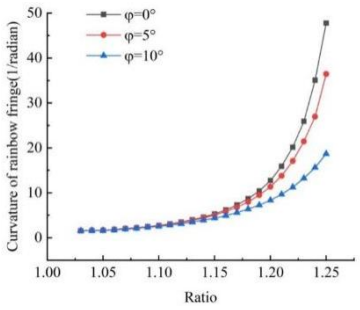


Fig 4: Curvatures for rainbow fringes from oblate droplets.

此外，高斯光束照射下水平和倾斜液滴一阶彩虹条纹的曲率也被研究，如图 3 所示，彩虹条纹曲率随着液滴椭球度的增加而增加，当椭球度 a/c ≤1.15 时，三种液滴（φ=0°，5°, 10°）的条纹曲率几乎重合；当椭球度 a/c ≥1.15 时，观察到未倾斜的液滴条纹曲率较大，三者之间的曲率偏差随着椭球度的增大而增大。

关键词：多相流测试，液滴，彩虹散射，矢量光线追迹

参考文献

[1] Y. C. Wu, J. Promvongsa, S. Saengkaew, X. C. Wu, J. Chen and G. Gréhan, Phase rainbow refractometry for accurate droplet variation characterization, Optics Letter, 2016, 41: 4672.

[2] X. H. Wang, Y. C. Wu, D. Y. Xu, et.al., Synthetic aperture rainbow refractometry, Optics Letter, 2022, 47: 5272.

[3] H. T. Yu, F. Xu, C. Tropea, Spheroidal droplet measurements based on generalized rainbow patterns, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2013, 126: 105.

[4] J.Y. Wang, H. T. Yu, J. Q. Shen, B. Yang, C. Tropea, Simulation of the optical caustics associated with the primary rainbow for oblate spheroidal drops illuminated by a Gaussian beam, Optics Express, 2021, 29 (1): 377.

光学球体度对不同物质适用范围的探讨

华洪[1]，蔡天意[1]，于海涛[2]，刘泽奇[3]，蔡小舒[1,3]，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]上海理工大学 理学院，上海，200093

[3]嘉兴美帕克仪器科技有限公司，嘉兴，314000

Email: tycai@usst.edu.cn

摘要：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 PIDLS 技术测试了不同类型纳米颗粒的光学球体度，并将其结果与电镜图像进行了对比分析。在此基础上，通过对不同形状纳米颗粒的仿真，研究了其光学球体度的理论分布特征，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，进一步验证了其在表征颗粒形貌方面的通用性。本研究将有助于丰富纳米颗粒形貌快速表征技术，具有重要的研究意义和应用价值。

关键词：纳米颗粒 光学球体度 光散射

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.

报告人简介：

华洪，现为上海理工大学能源与动力工程学院 2023 届硕士研究生，师从蔡天意讲师，研究方向为光散射理论。

报告人为学生。

基于伪体视 PTV 的气固微流态化颗粒运动测量方法研究

唐澳，蔡天意,*，周骛，董祥瑞，陈肖潇
上海理工大学，上海市杨浦区，200093
*Email: tycai@usst.edu.cn

摘要：微型流化床兼具微流控系统和宏观流化床的优点，具有潜在的工业应用价值[1-4]。本研究着重探讨微型流化床流化过程中颗粒及颗粒群复杂运动行为的光学图像测量方法。通过构建虚拟双目成像系统，并结合粒子追踪测速（PTV）技术，从多视角捕捉颗粒的动态行为，并利用算法重构其三维轨迹。在高放大倍率下，成功捕捉到颗粒的旋转和离焦现象，初步通过几何特征和离焦信息进行颗粒匹配。仿真结果进一步验证了不同粒径、浓度和流速条件下伪体视 PTV 算法的准确性，并分析了图像噪声及离焦效应对测量结果的影响。

关键词：微型流化床；虚拟双目；PTV

参考文献

[1] Potic B, Kersten S R A, Ye M, et al. Fluidization with hot compressed water in micro reactors[J]. Chemical Engineering Science, 2005, 60(22): 5982-5990.

[2] LIU X H, XU G W, GAO S Q. Micro Fluidized Beds: Wall Effect and Operability[J]. Chemical Engineering Journal , 2008, 137(2):302-307.

[3] 李凡,贾松岩.微型流化床的研究现状[J].化工管理,2022,(19):138-140.

[4] 史亚琪,李彦君,杜玉朋,任万忠.气-固微型流化床压降特性及最小流化速度的实验研究[J].过程工程学报,2021,21(04):420-430.

报告人简介：

唐澳，男，上海理工大学能源与动力工程学院在读硕士。研究方向为颗粒追踪，图像分割等。

报告人为学生。

贝塞尔高斯光束照射下球形颗粒的散射计算

唐思琪，王梦阳，沈建琪*
上海理工大学，上海市杨浦区军工路 334 号，200093
Email: 222132238@stu.usst.edu.cn

摘要：在广义洛仑兹米理论（GLMT）的框架下，研究了贝塞尔高斯光束（BGB）照射下球形颗粒的散射。利用径向积分法推导了光束形状系数（BSC）的解析表达式。对近场散射分布进行了数值计算。同时计算了 BGB 和平面波的远场散射。数值结果表明，BGB 光束散射强度角分布与平面波照射下的散射分布明显不同，可以通过控制光束特征参数控制远场散射强度分布。这些结果在粒子尺寸测量、光学捕获和粒子操控等多个领域具有重要的应用价值。

关键词：广义洛伦兹米理论；径向积分法； Bessel-Gauss 光束；平面波；散射；

Scattering Computation of Spherical Particles under Bessel-Gauss Beam Illumination

Siqi Tang, Jianqi Shen*
University of Shanghai for Science and Technology, 334 Jungong Road, Yangpu District, Shanghai, 200093, China
Email: 222132238@stu.usst.edu.cn

In the framework of the Generalized Lorenz-Mie Theory (GLMT), this study investigates the scattering of spherical particles illuminated by a Bessel-Gauss Beam (BGB). The beam shape coefficients (BSCs) are analytically derived using the radial Quadrature method. Numerical simulations of near-field scattering distributions are conducted, and the far-field scattering of both BGB and plane waves is calculated. The numerical results demonstrate that the angular distribution of scattering intensity under BGB illumination significantly differs from that under plane wave illumination. Moreover, the far-field scattering intensity distribution can be controlled by adjusting the characteristic parameters of the beam. These findings have significant applications in particle size measurement, optical trapping, and particle manipulation.

Keywords: Generalized Lorenz-Mie Theory; Radial Quadrature Method; Bessel-Gauss Beam; Plane Wave; Scattering

1.引言

颗粒散射一直是光学及众多相关交叉学科中的一个核心议题，广义洛伦兹米理论（GLMT）[1]系统地描述有形波束与均匀球形颗粒之间的相互作用，从而揭示出散射过程中的各种物理现象和规律。在广义洛伦兹米理论框架下，在处理有形光束与球形粒子相互作用的散射问题时，光束的电磁场被展开为矢量球面波函数的无穷级数形式，这些级数由光束形状系数（BSC）加权，通过光束形状系数并结合米散射系数就可以得到散射场(包括近场和远场)的光强分布。

最近提出的一种求解 BSC 的正交积分方法-径向积分法[2,3]具有严格的解析基础和高效的级数表达形式，在处理具有复杂结构的光束时具有显著的优势。本文采用径向积分法对具有对称性结构的贝塞尔高斯光束展开研究。

首先采用径向积分（RQ）方法求解贝塞尔高斯光束的 BSC，并结合米散射系数得到散射场的光强分布。通过精确计算 BGB 散射特性。具体如下：第二节简要概述径向积分法求解贝塞尔高斯光束的 BSC，并计算散射场强；第三节进行数值计算并讨论；最后给出结论。

(2)

2. 理论和相关公式推导

有形光束在球坐标系中展开成球谐函数的级数形式

$$\begin{cases}\mathbf{E}(\mathbf{r})=E_0\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}c_n^{pw}\left(iA_{nm}\mathbf{N}_{nm}^{(1)}-B_{nm}\mathbf{M}_{nm}^{(1)}\right)\\ \mathbf{H}(\mathbf{r})=H_0\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}c_n^{pw}\left(A_{nm}\mathbf{M}_{nm}^{(1)}+iB_{nm}\mathbf{N}_{nm}^{(1)}\right)\end{cases} \tag{1}$$

其中 $c_n^{pw}=i^n(2n+1)/[2n(n+1)]$ 是平面波因子，(A_{nm},B_{nm}) 是有形光束在球坐标系中级数展开的光束形状系数，矢量球谐函数 $\left(\mathbf{M}_{nm}^{(1)},\mathbf{N}_{nm}^{(1)}\right)$ 为

$$\begin{cases}\mathbf{M}_{nm}^{(1)}=\dfrac{\psi_n(R)}{R}\left[im\pi_n^m(\theta)\mathbf{e}_\theta-\tau_n^m(\theta)\mathbf{e}_\phi\right]\exp(im\phi)\\ \mathbf{N}_{nm}^{(1)}=\left\{\begin{array}{l}\dfrac{n(n+1)}{R^2}\psi_n(R)\tilde{P}_n^m(\cos\theta)\mathbf{e}_r\\ +\dfrac{\psi_n'(R)}{R}\left[\tau_n^m(\theta)\mathbf{e}_\theta+im\pi_n^m(\theta)\mathbf{e}_\phi\right]\end{array}\right\}\exp(im\phi)\end{cases}$$

$$\varphi(\mathbf{r})=Qe^{-QR^2s^2\sin^2\theta+il\phi+i\left(1-Q\frac{\sin^2\alpha_b}{2}\right)\times(R\cos\theta-kz_0)}J_l\left(QR\sin\alpha_b\sin\theta\right) \tag{4}$$

其中，$Q=1/\left[1+i2s^2(R\cos\theta-kz_0)\right]$，光束约束因子 $s=1/kw_0$，w_0 是高斯光束束腰半径，l 是光束阶数，α_b 为光束半锥角。

2.1 径向积分法求解贝塞尔高斯光束的光束形状系数

径向积分法在光束横截面内进行角向和径向积分获取 BSC 与光束结构的关系，该方法中的径向积分与 GLMT 中常用的其它正交法有所差别，具有较高的数值精度和灵活性。对于弱会聚类高斯光束，电磁场可采用傍轴近似式

$$\begin{cases}\mathbf{E}(\mathbf{r})\approx\mathbf{e}_xE_0\varphi(\mathbf{r})\\ \mathbf{H}(\mathbf{r})\approx\mathbf{e}_yH_0\varphi(\mathbf{r})\end{cases} \tag{3}$$

其中，时谐项取 $\exp(-i\omega t)$，$\varphi(\mathbf{r})$ 为特征光束结构的标量函数。对于贝塞尔高斯光束，特征标量函数为

根据广义洛伦兹米理论，将 BSC 对电磁场的关系独立开来，球坐标系中电磁场的径向分量及其球谐函数级数展开为

$$\begin{cases}E_0\varphi(\mathbf{r})\sin\theta\cos\phi=E_0\dfrac{1}{R}\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}i^{n+1}\dfrac{2n+1}{2}A_{nm}j_n(R)\tilde{P}_n^m(\cos\theta)e^{im\phi}\\ H_0\varphi(\mathbf{r})\sin\theta\sin\phi=H_0\dfrac{1}{R}\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}i^{n+1}\dfrac{2n+1}{2}B_{nm}j_n(R)\tilde{P}_n^m(\cos\theta)e^{im\phi}\end{cases} \tag{5}$$

首先，在 xy 平面作内($\theta=\pi/2$)公式(5)等号两侧分别对方位角ϕ进行积分，消除对 m 的求和以及函数对ϕ的依赖关系；然后，等式两侧分别对 R 积分，利用球贝塞尔函数 $j_n(R)$ 的正交关系式[4]

$$\int_0^{+\infty}j_{2n+1}(x)j_{2n'+1}(x)dx=\frac{\pi}{2(4n+3)}\delta_{n,n'} \tag{6}$$

消除对 n 的求和，即可得到 $(n-m)$ 为偶数的光束形状系数的表达式：

$$\begin{pmatrix} A_{n,m} \\ iB_{n,m} \end{pmatrix} = \left(\delta_{m,l+1} \pm \delta_{m,l-1}\right) \frac{i^{-n-1} a^{-\frac{n+l+2}{2}} b^l c e^{-\frac{1}{4a}}}{\sqrt{\pi} 2^{n+l+1} l! \tilde{P}_n^m(0)} \times \frac{\Gamma\left(\frac{n+l+2}{2}\right)}{\Gamma(n+3/2)} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{n+l+2}{2}\right)_j}{j!(l+1)_j} \left(-\frac{b^2}{4a}\right)^j {}_1F_1\left(\frac{n-l+1}{2} - j; n+\frac{3}{2}; \frac{1}{4a}\right) \tag{7}$$

其中，

$a = \bar{Q} s^2$，$b = \bar{Q} \sin\alpha_b$，

$c = \bar{Q} \exp\left[ikz_0\left(\bar{Q}\sin^2\alpha_b - 2\right)/2\right]$。

当$(n-m)$为奇数时，公式 5 两侧对θ求导，然后重复上述步骤，得到$(n-m)$为奇数时贝塞尔高斯光束的光束形状系数表达式：

$$\begin{pmatrix} A_{n,m} \\ iB_{n,m} \end{pmatrix} = \left(\delta_{m,l+1} \pm \delta_{m,l-1}\right) \frac{i^{2-n} a^{-\frac{n+l+3}{2}} b^l d e^{-\frac{1}{4a}}}{\sqrt{\pi} 2^{n+l+1} l! \tau_n^m(\pi/2)} \times \frac{\Gamma\left(\frac{n+l+3}{2}\right)}{\Gamma(n+3/2)} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{n+l+3}{2}\right)_j}{j!(l+1)_j} \left(-\frac{b^2}{4a}\right)^j {}_1F_1\left(\frac{n-l}{2} - j; n+\frac{3}{2}; \frac{1}{4a}\right) \tag{8}$$

其中，$d = c\left(2 - \bar{Q}\sin^2\alpha_b\right)/2$。

当光束特征函数l和α_b取值为 0 时，贝塞尔高斯光束退化为高斯光束。当束腰半径w_0趋向于无穷大时，进一步退化为平面波光束。

2.2 散射场表达式

根据广义洛仑兹米理论，球形粒子的内部场和散射场可以表示为[5]：

$$\begin{cases} \mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}) = -E_0 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} c_n^{pw} \left(iA_{nm} a_n \mathbf{N}_{nm}^{(3)} - B_{nm} b_n \mathbf{M}_{nm}^{(3)} \right) \\ \mathbf{E}^{\text{int}}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} c_n^{pw} \left(iA_{nm} c_n \mathbf{N}_{nm}^{(1)} - B_{nm} d_n \mathbf{M}_{nm}^{(1)} \right) \end{cases} \tag{9}$$

其中，矢量波函数$\left(\mathbf{M}_{nm}^{(1)}, \mathbf{N}_{nm}^{(1)}\right)$已经在公式 2 给出，$\left(\mathbf{M}_{nm}^{(3)}, \mathbf{N}_{nm}^{(3)}\right)$的定义类似，但是径向函数$\psi_n(R)$替换为$\xi_n(R) = Rh_n^{(1)}(R)$。$(a_n, b_n)$和$(c_n, d_n)$是散射系数[6]。粒子的外部场是入射光和散射光的场的总和 $\mathbf{E}_{\text{ext}} = \mathbf{E}_{\text{sca}} + \mathbf{E}_{\text{int}}$。

考虑到远场近似($kr \to \infty$)情况下存在近似关系

$$h_n^{(1)}(kr) \quad \frac{(-i)^n}{ikr} \exp(ikr) \tag{10}$$

将公式 10 代入公式 9 得到远场散射的表达式：

$$E_r = 0, E_\theta = \frac{iE_0}{kr} e^{-ikr} S_2, E_\phi = \frac{E_0}{kr} e^{-ikr} S_1 \tag{11}$$

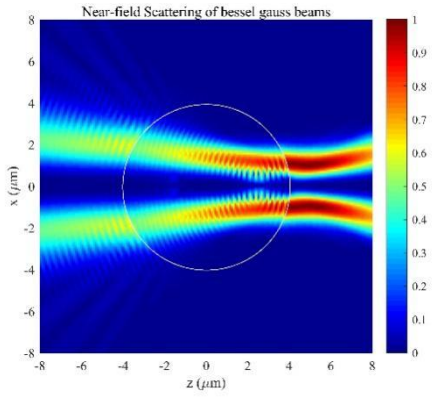
其中，(S_1, S_2)是球形颗粒的散射振幅函数

$$S_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} e^{im\phi} \frac{2n+1}{2n(n+1)} \left[A_{nm} a_n \tau_n^m(\theta) + imB_{nm} b_n \pi_n^m(\theta) \right] \tag{12}$$

$$S_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} e^{im\phi} \frac{2n+1}{2n(n+1)} \left[mA_{nm} a_n \pi_n^m(\theta) + iB_{nm} b_n \tau_n^m(\theta) \right] \tag{13}$$

3．模拟计算结果与分析

采用 C 语言编程进行数值模拟计算，得到了贝塞尔高斯光束和平面光束的近场和远场散射，如图 1 和 2 所示。



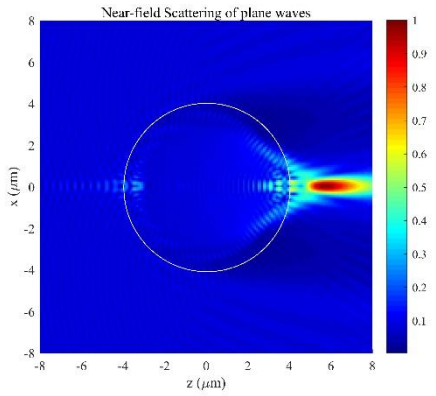


Fig.1 Near field scattering under the illumination of Bessel-Gauss beam and plane wave.

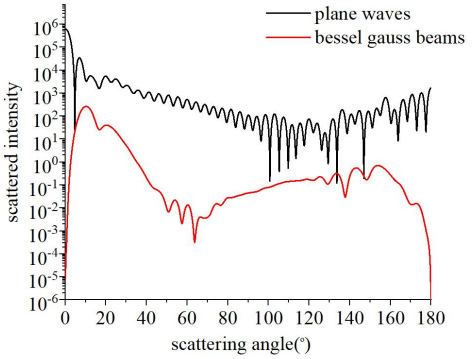


Fig.2 Far-field scattering of the Bessel-Gauss beam and plane wave

4. 结论

通过贝塞尔高斯光束和平面波束的近场散射数值计算，可以发现贝塞尔高斯光束的散射强度分布呈中空结构。与之相比较，平面光照射球形颗粒时，散射光在前向小角度范围内形成较强的衍射峰，呈现明显的衍射效应。在近场区域，贝塞尔高斯光束的散射场形成中空弯曲圆环状结构(空心光子钩)，而平面波散射形成实心的直光子喷射流。通过控制结构光束的特征参数可以调制散射场分布。结构光束在与球形粒子相互作用产生的散射特性在粒子操控、光捕获等领域有着非常重要的应用。

参考文献

[1]. Gouesbet G, Gréhan G. Generalized Lorenz-Mie theories [M], 2nd version. Springer; 2017.

[2]. Shen J, Yu H, Radial quadrature method for evaluating the beam shape coefficients in spherical coordinates [J]. Journal of Quantitative pectroscopy & Radiative Transfer 2023, 305: 108627.

[3]. Lin J, Zhong S, Shen J, Equivalence between Radial Quadrature and Finite Series for Spherical Wave Expansion of Bessel Beams[J]. Journal of the Optical Society of America A 2023: **40**(6): 1201-1207.

[4]. Arfken G. Mathematical methods for physicists [M]. 3rd Ed. London: Academic press; 1985

[5]. J. Shen, X. Liu, W. Wang, et al., “Calculation of light scattering of an elliptical Gaussian beam by a spherical particle,” J. Opt. Soc. Am. A 35, 1288–1298 (2018).

[6]. C. F. Bohren and D. R. Huffman, Absorption and Scattering of Light by Small Particles (Wiley, 1983).

报告人简介：

唐思琪，本科毕业于湖南理工学院物理与电子科学学院物理学专业，研究生就读于上海理工大学理学院光学专业

沈建琪，上海理工大学教授，博士生导师，中国颗粒学会理事兼颗粒测试专业委员会委员。

报告人为学生。

TAPS 燃烧室慢车工况排放碳烟颗粒的微观形貌与纳米结构特性

纪杰 [1,2]，陈龙飞 [1,2]，李光泽 [2]，武海泉 [1,2]，王新宇 [1,2]，常刘勇 [2,*]

[1] 北京航空航天大学能源与动力工程学院，北京市昌平区沙河高教园南三街 9 号，102206

[2] 北京航空航天大学中法航空学院，浙江省杭州市余杭区瓶窑镇双红桥街 166 号，311115

*Email: changliuyong@buaa.edu.cn

摘要： 飞机起降过程中地面滑行时间最长，达26分钟，该过程是机场主要人为颗粒污染排放源，影响着机场附近的环境与人类健康。双环预混（TAPS）燃烧室由于极低的污染物排放水平在当前民航飞机中广泛应用[1]。飞机在地面滑行过程中，燃烧室处于慢车工况，主燃级关闭，仅预燃级工作，此时为富燃扩散燃烧方式，会产生较多的碳烟颗粒，进而严重影响机场区域环境[2]。为揭示慢车工况下TAPS燃烧室的碳烟排放特性，本文采用扫描电子显微镜（SEM）、高分辨透射电子显微镜（HRTEM）对慢车工况下的碳烟颗粒微观形貌进行了研究，与巡航工况下碳烟形貌进行了对比，分析了预燃级当量比对碳烟颗粒结构特性的影响。SEM结果表明：排放的碳烟颗粒中90%以上的碳烟颗粒被非碳成分包覆，慢车工况下颗粒数目、颗粒被非碳成分包覆程度远高于巡航工况，而石墨化程度远低于巡航工况；此外，当量比对慢车工况下碳烟形貌有显著影响，具体为：包覆程度随着当量比接近1而逐渐减少。HRTEM结果表明：随着预燃级接近当量燃烧，基元颗粒直径逐渐减小，内部微晶长度增大，条纹弯曲程度减小，表明碳烟颗粒的纳米结构变得更加有序和石墨化，导致较低的氧化活性。因此，通过改变TAPS燃烧室预燃级的当量比对于减少慢车工况下的碳烟排放、降低碳烟活性，进而减少对环境的影响具有重要意义。

关键词： 双环预混燃烧室；碳烟颗粒纳米结构；电子显微镜；当量比

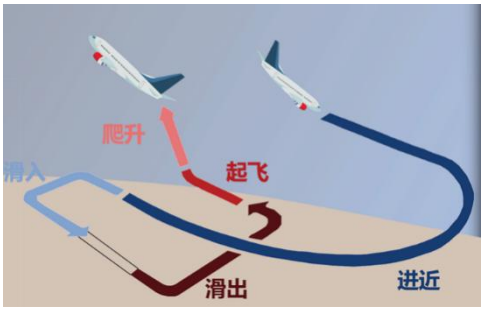


Fig. 1 Landing Take-off cycle

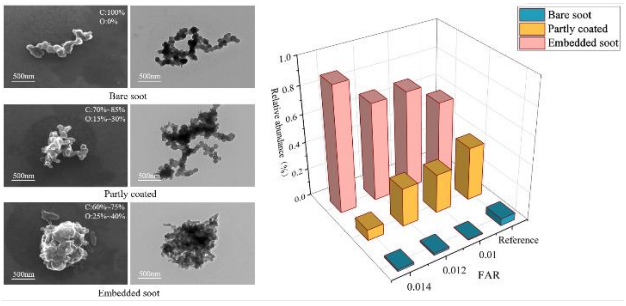


Fig. 2 Morphology of carbonaceous particles under SEM and TEM, and Percentage distribution of the three particle types

[1] 于婷婷,朱宇,杜成,等.双环预混旋流燃烧室点熄火性能试验研究[J].航空发动机,2020,46(05):97-102.

[2] 曲春刚,匡家骏,晏嘉伟.不同航班季节下民航飞机LTO循环颗粒物排放特性——以北京首都国际机场为例[J].环境工程学报,2022,16(08):2640-2652.

报告人简介：

北京航空航天大学能源与动力工程系在读研究生

报告人为学生。

基于蒙特卡罗法的光散射颗粒粒径测量模型

苏格毅，苏明旭*

上海理工大学能源与动力工程学院，上海市动力工程多相流动与传热重点实验室，上海 200093

*Email: sumx@usst.edu.cn

摘要：本文提出了一种基于蒙特卡罗方法（Monte Carlo Method, MCM）的激光散射模型，旨在研究非平行入射光束、高浓度颗粒和混合颗粒体系下的光散射与消光特性，以实现这些特殊条件下颗粒粒径的精确测量。为验证模型的准确性，搭建了一套散射光能分布在线测量系统。通过比较，发现MCM模型预测的散射光能分布与传统模型及实验数据之间的最大均方根误差（Root Mean Square Errors, RMSE）分别仅为0.006和0.011。此外，结合差分进化（Differential Evolution, DE）算法，对散射光能分布进行反演分析。反演结果表明，MCM模型能有效修正由非平行入射光束和高浓度颗粒系中复散射效应引起的颗粒粒径测量误差。具体来说，与传统模型相比，MCM模型将绝对相对误差从13.08%和10.60%降低至3.00%以内。此外，MCM模型还成功反演了混合颗粒系中两种不同颗粒的粒径及混合比，其最大绝对相对误差分别为8.64%、9.55%和4.38%。本研究提出的模型拓宽了传统模型的适用范围，为工业领域中颗粒粒径的在线测量提供一定参考。

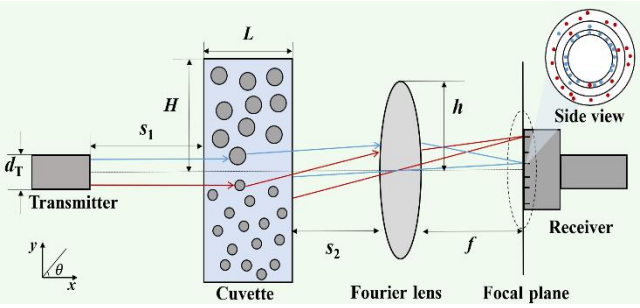


Fig. 1 Schematic diagram of MCM with photon propagation process in a dispersion.

关键词：颗粒粒径；光散射；蒙特卡罗

参考文献

[1] 蔡小舒,苏明旭,沈建琪,颗粒粒度测量技术及应用[M].第二版.北京:化学工业出版社,2022.

[2] R. Xu, Light scattering: A review of particle characterization applications, Particuology 2015, 18:11-21 (2015).

[3] G. Su, Q. Huang, C. Sun, et al., A study on light extinction model and inversion of mixed particle system based on Monte Carlo method, Powder Technology 2023, 430: 119023.

[4] R. Hussain, M. Noyan, G. Woyessa, et al., An ultra-compact particle size analyser using a CMOS image sensor and machine learning, Light, science & applications 2020, 9: 21.

报告人简介：

苏格毅，男，1996 年 11 月，汉族，中共党员，博士研究生。现于上海理工大学攻读动力工程及工程热物理博士学位。主要从事光散射法颗粒粒径测量技术研究。在 Powder Technology、Optics Letters、Measurement、光谱学与光谱分析、工程热物理学报等期刊发表论文 8 篇。

报告人为学生。

MIP-YOLO：显微图像法注射液中不溶性微粒的检测模型

杨达[1]，刘伟[1,*]，王雅静[1]，张宗强[2]，秦福元[2]

[1]山东理工大学电气与电子工程学院,山东 淄博 255000

[2]澳谱特科技（上海）有限公司,上海 201109

*22404020010@stumail.sdut.edu.cn

摘要：准确地检测注射液中的不溶性微粒种类和数量对于提高注射液质量有着重要作用。针对不溶性微粒中的小目标检测难题，提出了一种基于 YOLOv8s 的改进模型 Microscopic Insoluble Particles-YOLO(MIP-YOLO)，用于准确检测不溶性微粒中的玻璃、橡胶等特征微粒。首先，在颈部网络中使用部分卷积，引入重参数化模块对部分卷积进行改进，提出了 DPC2f 模块，增加梯度流动能力，降低漏检、误检率，并结合三重注意力机制提出了 DPTC2f 模块，在减少冗余信息的同时，增强了模型在不同维度的特征提取能力。其次，引入 NWD(Normalized Wasserstein Distance)损失函数替换 CIoU 损失函数，降低对不溶性微粒位置偏差的敏感性。第三，优化了颈部网络检测层结构，提升了浅层信息和深层信息的融合能力，降低了模型的参数量。最后，设计了协同池化坐标注意力机制，提高模型对微粒显著特征的提取能力。实验结果表明，MIP-YOLO 的精度和 mAP 分别达到了 89.0%和 90.5%，在参数量下降了 40%的同时，相比于 YOLOv8s 提升了 5.4%和 3.0%，提高了模型的检测效果。

关键词：不溶性微粒；显微图像；特征检测；YOLOv8s；小目标检测

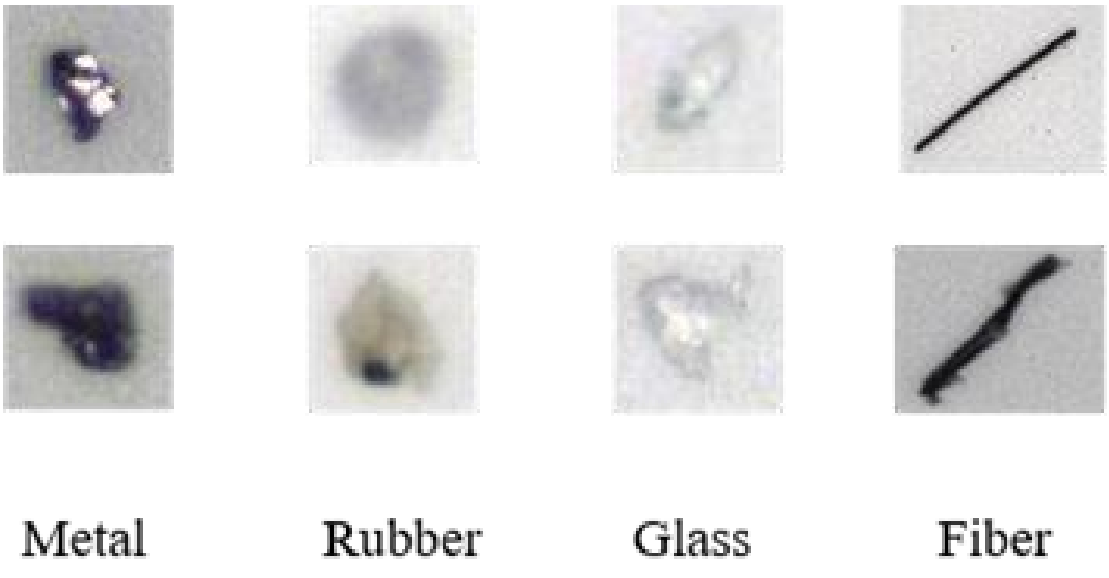


Fig.1 Types of insoluble particles

报告人简介：

杨达，男，山东理工大学电气与电子工程学院硕士研究生，研究方向为深度学习和计算机视觉。

报告人为学生。

多分散颗粒标准物质的定值方法和不确定度评估方案

窦晓亮*

北京海岸鸿蒙标准物质技术有限责任公司，北京市大兴区经济开发区盛坊路 1 号 7 号楼，102627

*Email: bjhongmeng@163.com

摘要：本文聚焦于多分散颗粒标准物质在实际检测应用中的重要性及其当前标准描述中存在的矛盾与不足。鉴于ISO14411与ISO13320等国际标准对于多分散颗粒标准物质的描述存在诸多不一致，且缺乏具体实用的要求与指导，本研究通过深入分析多项ISO标准并结合实验验证，系统总结了多分散标准物质的关键技术要求。为弥补现有标准的空白，本文提出了一种多分散标准物质定值方法，并配套设计了相应的不确定度评定框架，旨在增强此类标准物质的实用性与准确性。该方法不仅有助于提升多分散颗粒检测的标准化水平，也为相关行业在质量控制、产品认证等领域提供了更为可靠的技术支撑。

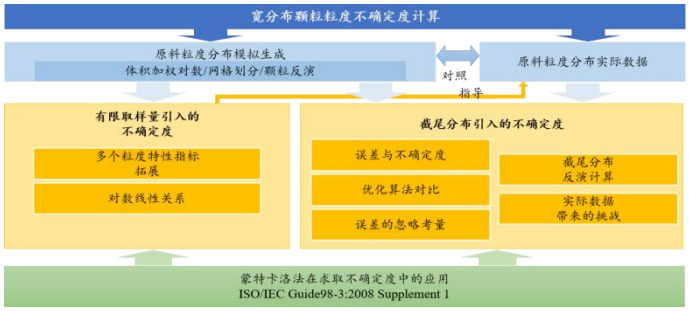


Fig. 1 The Application of the Monte Carlo Method in the Uncertainty Assessment of Wide Distribution Particle Reference Materials

关键词：多分散颗粒标准物质；定值方法；不确定度；

参考文献

[1] ISO 14411-1: 2017, Preparation of particulate reference materials —Part 1: Polydisperse material based on picket fence of monodisperse spherical particles, Geneva: ISO, 2017.

[2] ISO 14411-2: 2019, Preparation of particulate reference materials —Part 2: Polydisperse spherical particles, Geneva: ISO, 2019.

[3] ISO 13320:2020, Particle size analysis — Laser diffraction methods, Geneva: ISO, 2020.

[4] ISO 14488:2007, Particulate materials — Sampling and sample splitting for the determination of particulate properties, Geneva: ISO, 2007.

New approach for monitoring of nano particles kinetcis with time resolved in-line DLS size characterization under various conditions.

David Jacob

Cordouan Technologies, Pessac, France

Abstract: Dynamic Light Scattering (DLS) is a pivotal technique for the analysis of particle sizes in nanoscale systems. Traditional methods of DLS, however, often require ex-situ analysis, which can miss critical dynamics influenced by environmental conditions. We aim to introduces a novel approach using time-resolved inline DLS to continuously monitor the kinetics of nanoparticles under varying conditions such as temperature, pressure, and magnetic fields. Our methodology involves the integration of a time-resolved DLS system into a reaction environment, allowing for real-time monitoring and data collection. This approach enables the observation of nanoparticle behavior and transformation processes as they occur, providing insights into dynamic size changes and aggregation phenomena.

Keywords: In-Situ, in-line DLS, time-resolved, Microfluid, LNP

基于多级联撞击的微纳颗粒数目浓度分级检测方法研究

王新宇[1,2]，陈龙飞[1,2]，李光泽[2]，武海泉[1,2],纪杰[1,2],常刘勇[2,*]

[1]北京航空航天大学能源与动力学院，北京市昌平区沙河高教园南三街 9 号，102206

[2]北京航空航天大学中法航空学院，浙江省杭州市余杭区瓶窑镇双红桥街 166 号，311115

*Email: changliuyong@buaa.edu.cn

摘要:大气气溶胶对环境污染、气候变化以及人体健康有着重要影响，因此大气气溶胶的采集与分析是大气环境研究中的关键课题。目前，光学颗粒分级检测只能实现微米级大颗粒的检测，而纳米级颗粒的粒径检测则依赖于DMA（Differential Mobility Analyzer，差分电迁移率分析仪）等实验室设备，无法工业现场应用，其功能仅在特定位置得以实现。为了实现现场不同粒径颗粒数目浓度的快速检测，本文提出了一种基于多级联撞击的方法。该方法通过多级联撞击将多分散纳米颗粒按照不同粒径分离，并利用多台 CPC（凝聚核粒子计数器）进行测量。本文进一步设计了设计了一款五级分级撞击器（10-2.5、2.5-1、1-0.5、0.5-0.3 微米），确定了具体的分级参数，采用离散相（DPM）模型对撞击器进行详细的仿真研究。仿真结果显示，颗粒物随气流通过孔口，大于截止粒径的颗粒撞击并黏附于撞击板上，小于截止粒径的颗粒随流到下一级。仿真结果表明，该方法能够有效地将多分散颗粒群按照不同粒径进行分离，有望实现纳米颗粒分级检测的能力。本研究为纳米颗粒的分级检测提供了一种新的方法，其在现场快速检测中十分具有应用前景，有望在大气气溶胶研究和环境监测中发挥重要作用。

关键词：大气气溶胶；分级撞击器；纳米颗粒；

参考文献

[1]陈魁,白志鹏,郭光焕.PM_(10)-PM_(2.5)冲击采样器的研制与开发[J].环境污染与防治,2009,31(06):23-25.

[2]韩克勤,程国伟.撞击式分级采样器的设计及标定 %J 卫生研究[J].1985,(03):1-5.

基于多级凝结的微纳颗粒分级计数方法与应用

武海泉[1,2]，陈龙飞[1,2]，李光泽[2]，王新宇[1,2]，纪杰[1,2]，常刘勇[2,*]

1 北京航空航天大学能源与动力学院，北京市昌平区沙河高教园南三街 9 号，102206

2 北京航空航天大学中法航空学院，浙江省杭州市余杭区瓶窑镇双红桥街 166 号，311115

*Email: changliuyong@buaa.edu.cn

摘要：航空发动机运行过程中排放大量颗粒物，严重影响环境和健康。当前已经实施了测量纳米颗粒数目的法规，未来法规将增加对颗粒粒径分布的要求，进一步提升监测精度。然而，现有的颗粒粒径测量方法如光学粒子计数器（OPC）和差分电迁移率分析仪（DMA）存在局限性：OPC只能测量较大颗粒，DMA价格昂贵且复杂，仅适用于实验室环境。为实现颗粒粒径的快速检测，本文提出了一种多级凝结核颗粒物分级计数装置。与传统的凝结核粒子计数器（CPC）不同，该装置采用一个饱和段和五个冷凝段。检测过程中，使用分级撞击的方法将多分散颗粒物按粒径大小分为五路气流，分别进入五个冷凝段进行凝结增长，利用数采卡并结合采样流量获取各尺度范围颗粒物的数目浓度。本文围绕分级凝结进行了仿真研究，仿真结果表明所设计的装置在所有冷凝段内均具有较高的过饱和度分布，能够有效地进行颗粒物的凝结增长。该方法能够将多分散颗粒群按粒径大小进行分离，并分别检测不同粒径颗粒的数目浓度，实现快速、准确的颗粒粒径分布检测。在航空发动机排放监测中，这种分级计数装置将提供一种高效、可靠的新方法，为精确监测和控制航空发动机颗粒物排放，保护环境和健康提供重要支持。

关键词：分级检测；颗粒物；粒径分布

墙报展示人简介：

武海泉，北京航空航天大学在读硕士研究生。

墙报展示人为学生。

Reference aerosols for particle number concentration counters for the new European requirements on periodical technical inspection (NPTI)

L. Hillemann[1], Zongyong Zou[2*], D. Göhler[1], S. Große[1], J. Müller[1] A. Rudolph[1]

[1]Topas GmbH, D-01237 Dresden, Germany

[2]Beijing Aero-Tech Co. Ltd., Beijing, CN - 100068, China

*david.zou@aerosol-technology.com.cn

Abstract: Particle emissions in exhaust gases from motor vehicles are progressively being determined with number-based measuring instruments. Since July 2023, the measurement of the number concentration in the exhaust at the tailpipe is mandatory during periodical technical inspection in Germany [1]. For this purpose, several measurement devices based on the technology of either condensation particle counters (CPC) or diffusion charge particle counters (DC) were developed. These measuring devices require periodic calibration against a reference system employing test aerosols.

Due to the fact that the signal from DC-detectors correlates to the aerosol length concentration but not to the number concentration, it depends on the particle size. Therefore, the test aerosols required for calibration have to be well-defined in terms of size distribution, particle shape and material. All required properties are specified in the "AU-Geräte Kalibrierrichtlinie" (German exhaust emission test equipment calibration guideline [2]).

Typically, these test aerosols are produced by Collison-type atomizers employing saline solutions. Therefore, the humidity of the generated test aerosol has to be controlled to prevent the abrupt increase of particle size at the deliquescence point. This effect is illustrated in Fig. 1 and 2.

The contribution discusses solutions for aerosol conditioning, which are technically and economically suitable for mobile calibration purposes.

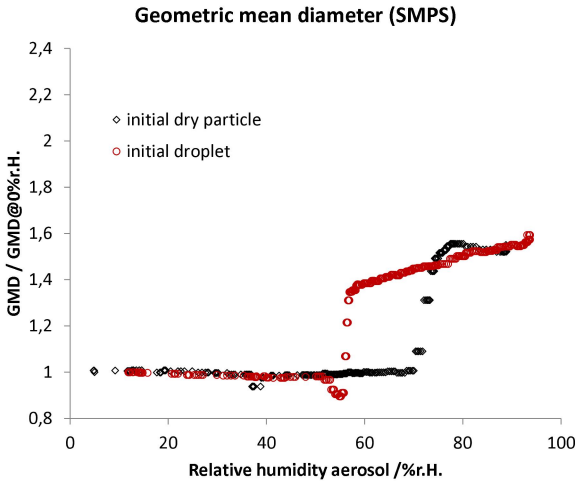


Figure 1. Increase of geometric median diameter of test aerosol compared to the initial value at 0%r.H.

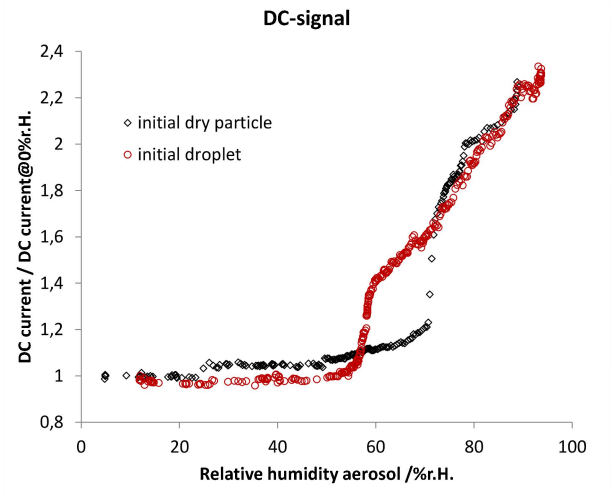


Figure 1. Increase of the diffusion charge particle counter (DC) signal compared to 0%r.H.

Keywords: new periodical technical inspection, NPTI, particle counter, reference aerosol.

References

[1] Amtsblatt des Bundesministeriums für Digitales und Verkehr der Bundesrepublik Deutschland Nr.73/2023 vom 08.05.2023, Verkehrsblatt Nr.11/2023

[2] Richtlinie zur Kalibrierung von Abgasmessgeräten, die für die Untersuchung der Abgase von Kraftfahrzeugen nach Nummer 6.8.2 der Anlage VIIIa StVZO eingesetzt werden (“AU-Geräte Kalibrierrichtlinie”)

PCM 结晶监测系统在功能性糖醇和甜味剂结晶过程的颗粒度控制

唐远旺[1]

[1]北京海菲尔格科技有限公司，北京，100022

*thomas.tang@hiferg.com

摘要：PCM 结晶监测系统能够实现对功能性糖醇和甜味剂结晶过程的实时监控并可根据监控结果实时调整过程工艺。PCM 可以实时记录结晶过程中的颗粒图像并实时分析晶体的颗粒度，同时给出晶体颗粒数量、晶体径长比、晶体生长速率等数据。PCM 探头直接插入具有一定真空度的结晶器中分析晶体颗粒度，避免了取样后进行离线测试的不便和误差，可以真实反映结晶过程中晶体的变化情况，包括晶核形成、晶核数量、晶体生长、二次成核监控、过程颗粒度监控等。PCM 结晶监测系统已经成为获得高质量晶体产品、快速实现定制指定颗粒度晶体产品的有效手段。

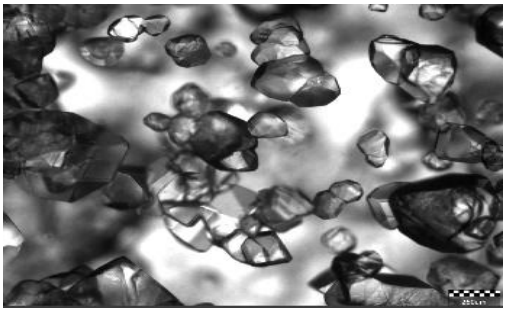


Fig 1. Particle image of xylitol

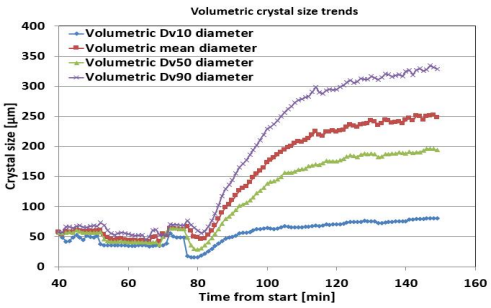


Fig 2. Particle size trends of xylitol crystallization

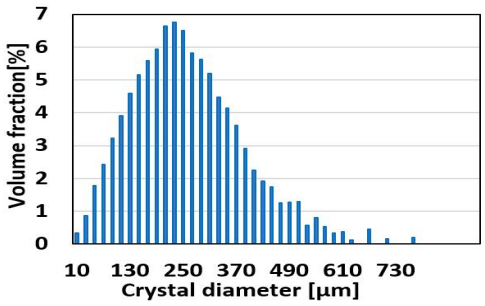


Fig 3. Particle size distribution of xylitol crystals

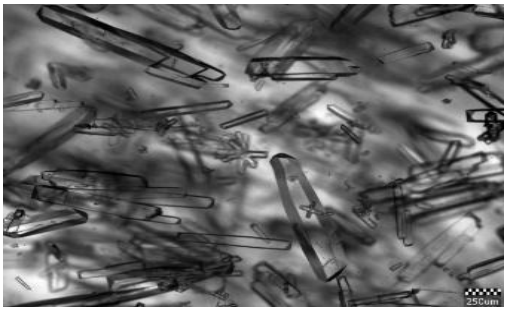


Fig 4. Particle image of xylose

关键词：PCM；结晶监测；实时在线监控；晶体颗粒度；功能性糖醇

微波水分仪用于快速测试聚合物粉体中的极微量水分

唐远旺[1]

[1]北京海菲尔格科技有限公司，北京，100022

*thomas.tang@hiferg.com

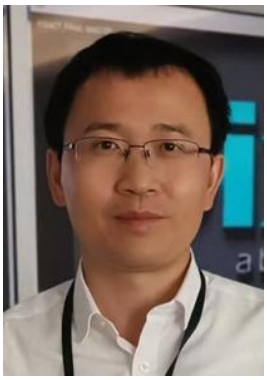
摘要：随着新能源行业及电子材料的快速发展，高性能粉体产品的微量水分的测试越来越凸显其重要性。精准、快速、在线、自动化控制成为行业对于水分测试的主要关注点之一。传统水分测试方法测试时间长、操作繁琐、人工取样、效率低，无法实现在工业大生产中快速测试粉体水分。微波水分仪是一种超快速、高灵敏度的水分测定方法，得到的是聚合物粉体的内部水分而非表面水分，测试下限可达20ppm量级的含水量。微波水分仪可以在1秒内完成微量水分测定，可以更好地服务于苛刻条件、极低水分含量的聚合物粉体颗粒的测试。微波水分仪可以安装于工业生产线，用于对聚合物粉体水分进行实时监控。本文以聚四氟乙烯粉体的极微量水分测试为例，阐述了微波水分仪对于20-100ppm量级水分测试的解决方案。数据表明，微波水分仪可以很好地表征PTFE粉体的极微量水分含量同时能给出粉体的堆密度值。

Table 1　Moisture content of different PTFE powders

样品	PTFE-A	PTFE-B	PTFE-C	PTFE-D
1	0.0037%	0.0038%	0.0032%	0.0032%
2	0.0037%	0.0039%	0.0030%	0.0029%
3	0.0036%	0.0036%	0.0031%	0.0030%
4	0.0036%	0.0038%	0.0030%	0.0029%
5	0.0036%	0.0037%	0.0029%	0.003%
平均值	0.00364%	0.00376%	0.00304%	0.00300%
标准偏差	0.00005%	0.00011%	0.00010%	0.00011%

关键词：粉体水分；微波水分仪；在线监控；PTFE；堆密度

墙报展示人简介：



唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器分析行业技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

Stability Compensation Method and Technology for Light Source in Dual-Path Particle Measurement System

Wang Yixin, Xiong Liling, Lu LiFeng*

School of Energy and Power Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, Gansu, China

*LUlifeng89@163.com

Abstract: Optical methods are essential for particle size measurement, including light scattering[1-3] and light extinction methods[4, 5], known for their advantages of high measurement speed, accuracy, and capability for online detection. They have been widely applied in various fields for characterizing particles. Among optical detection techniques, lasers are commonly used due to their excellent monochromaticity and directionality. However, issues such as budget constraints, measurement environment, and laser performance can lead to poor light source stability, resulting in deviations in particle size and concentration measurements and equipment performance degradation in practical applications[6, 7]. To address these challenges, this paper proposes a stability compensation algorithm for light sources in dual-path mode based on the light extinction method for particle measurement. Firstly, the incoming divergent light from the light source is transformed into parallel light using a collimating lens. Subsequently, a beam splitter is used to divide the light into sampling and compensation paths at specific proportions. Then, a focusing lens is employed to converge the two light paths into focused light before reaching the photodetector to ensure all light beams are received by the photosensitive surface and maintain consistent optical path lengths. Finally, the current signal generated by the photodetector in the compensation path is processed to compensate for the current signal in the sampling path. This compensation algorithm can stabilize the laser light source without affecting the actual use of the equipment, effectively addressing the issue of laser light source instability while maintaining relatively low costs. Through testing, the light source instability of the sampling path using this compensation method was maintained within 0.018%, confirming the feasibility and effectiveness of the approach.

Keywords: Light source stability; Dual-path mode; Compensation algorithm

References

[1] 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.

[2] 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.

[3] 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.

[4] Ceolato R, Berg MJ. Aerosol light extinction and backscattering: A review with a lidar perspective. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2021 Mar 1; 262:107492.

[5] Hříbalová S, Pabst W. Light scattering and extinction in polydisperse systems. Journal of the European Ceramic Society. 2020 Mar 1;40(3):867-880.

[6] XIAO Xinyu，XIONG Bing，CHEN Jun，YANG Huinan，SU Mingxu. influence of divergent beam on particle size measurement by light extinction method. Acta Photonica Sinica, 2022, 51(5):.0551314.

[7] Li Xiangpeng, Xiang Huazhong, Zheng Gang, Chen Minghui, Yang Hui. Particle size measurement of extinction spectrum based on near-infrared narrow band light source. Laser & Optoelectronics Progress, 2022, 59(21):.2129002.

作者简介：

王一鑫，男，现为兰州理工大学在读研究生，中国颗粒学会会员，从事颗粒检测方法与技术、检测仪器开发与集成的科学研究工作。

作者为学生。

颗粒碰壁过程中膜结构的特性研究进展

罗景龙[1]，夏智勋[2]，冯运超[1,*]，马立坤，陈斌斌

[1]国防科技大学空天科学院，湖南长沙，410073

*Email:17503825065@163.com

摘要：颗粒碰壁现象存在于固体冲压发动机的整个工作过程[1]中，随着技术的发展，碰壁颗粒的研究工况范围不断拓展，从常温冷态深入到高温熔融态、从低速大粒径提升到高速小粒径。在关于颗粒碰壁特性研究中，学者们主要根据颗粒与壁面的干湿状态进行分类研究[1]。从最基础的干颗粒撞击干壁面过程，研究颗粒碰撞反弹恢复系数的影响规律；到干颗粒碰撞湿壁面和湿颗粒碰撞干壁面过程[2]，在研究颗粒的碰壁恢复系数基础上探究因液膜存在产生的液桥导致的反弹、沉积、飞溅微观变化机理[1]及特殊单膜碰撞影响机制；进一步的湿颗粒撞击湿壁面过程，因双方各自存在的液膜导致碰撞过程更为复杂，目前这种双膜碰撞过程研究较少，碰撞机理不清晰，在固体超燃冲压发动机中双膜碰撞是十分重要的过程，需要深入研究。

关键词：颗粒碰壁；工况范围；干湿状态；液膜；双膜碰撞

参考文献

[1] 叶佳辉.颗粒与壁面的碰撞反弹特性研究[D].浙江理工大学,2019

[2] Ma, JL;Liu, DY (Liu, Daoyin);Chen, XP (Chen, Xiaoping).Experimental study of oblique impact between dry spheres and liquid layers[J].Physical review, E. Statistical, nonlinear, and soft matter physics,2013,Vol.88: 033018(1-9)

作者简介：

罗景龙，男，国防科技大学空天科学院。

作者为学生。

测试湖泊沉积物中黑碳含量方法的新进展

李刚

中国气象局兰州干旱气象研究所,兰州市东岗东路 2070 号，730020

E-mail：505044897@qq.com

摘要：随着全球变暖的加剧，全球碳循环正日益成为全球气候变化研究所关注的重点问题[1]。其中，陆地生态系统的碳循环是受人类活动影响最大的部分,而湖泊是其重要组成部分，所以研究湖泊碳循环至关重要。且因为湖泊稳定的沉积环境，湖泊沉积物中记录了丰富的碳信息，是研究湖泊碳循环的重要载体[2]。湖泊沉积物是研究黑碳传输、沉降及区域气候变化并重建黑碳历史排放的良好介质。

DRI-2001A 型热/光碳分析仪是一款应用热光法测量原理、设计精良、非常成熟的分析仪。一般适用于美国 IMPROVE-A 采用热光反射法(TOR)测量大气颗粒物中的有机碳（OC）和元素碳（EC）含量 [3]。但由于湖泊沉积物中受无机盐以及粉尘的影响，DRI-2001A 的测量能力有所不足，尤其测量污染程度相对较大的湖泊沉积物时，黑碳含量出现了负值。

在热光反射法（TOR）的基础上：我们把 5 步升温法改成 2 步。即在测试湖泊沉积物时，第一步在无氧环境下，我们把温度直接升到 550℃；在有氧环境下，我们把温度再直接升到 700℃。在新方法的升温过程中，由于升温迅速，导致新方法忽略掉了 OPC（裂解碳）。从而得到湖泊沉积物中有机碳和黑碳的含量。

测试湖泊沉积物中黑碳含量的具体过程见图 1。

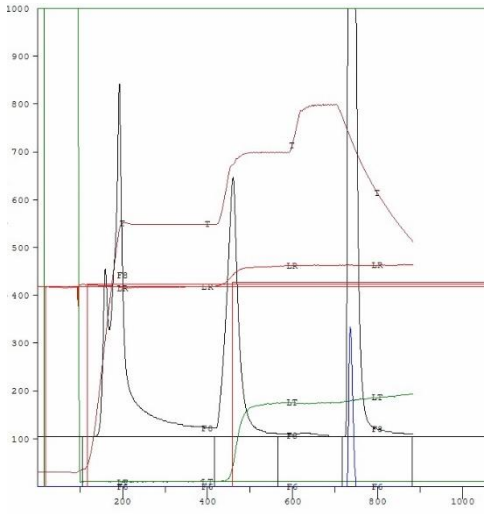


Fig.1　Temp(degC) – Time(sec)

新的测试程序，能够针对湖泊沉积物进行 OC、EC 的分析。与原有程序相比，总碳含量接近，重新分配了 OC、EC 的切割点，业内专家认为黑碳结果合理（由于样品前处理过程中 OC 被破坏，故 OC 测试结果的精确性不如 EC，舍去。）。目前利用此方法陆续展开了黄土高原、青藏高原、云贵高原、河西走廊、新疆等多地湖泊沉积物中黑碳含量的测试工作。其中利用测试分析得到的六盘山天池沉积物中的黑碳数据[4]，重建了该区域中晚全新世古火变化的历史，探明了人类将火作为战争手段所造成的环境影响，首次全面揭示了丝绸之路东段地区历史时期战争与火之间的紧密联系。这一发现不仅为理解火在全球生态系统、气候、碳循环和人类健康等方面的重要作用提供了新视角，还揭示了人类活动影响地球系统的方式和历史。

关键词：黑碳；湖泊沉积物；DRI-2001A 仪器；热光反射法

参考文献

[1] 廖宏、朱懿旦，全球碳循环与中国百年气候变化，第四纪研究，2010, 30，445-456

[2] 姜寿恕、赵德博、唐艺、李梦君、万世明，沉积物中黑碳在古环境古气候研究中的应用，海洋地质与第四纪地质，2023 年 05 期

[3] Chow J.C，Comparison of IMPROVE and NIOSH carbon measurements, Aerosol Sci. Tech., 2010, 34 23-34,

[4] Zhang SJ, Liu H, Li G, et.al.,Warfare impact overtakes climate-controlled fires in the eastern Silk Roads since 2000 B.P., PNAS NEXUS,2023,12

一种振动式粒度仪的设计与筛分效率研究

何召慧，王君涵，郭佳鑫，通信作者(时运来)

南京航空航天大学 航空航天结构力学及控制全国重点实验室,江苏 南京 210016

*Email: 2968646988@qq.com

摘要：颗粒的粒度分布测定在煤炭、化工、电力等领域都有着广泛的应用。例如，在综合研究和评价海底沉积矿物资源、工程地质条件等方面，粒度分析具有重要的作用。筛分法是直观有效的、普遍应用的粒度分析方法之一，但传统的机械振筛无论是在效率上、精度上、自动化上和数据分析处理上已远远不能满足飞速发展的科研和生产的需要，为此，本文研制了一款实现更高效率、更高精度、低成本的自动化筛分振动式粒度仪。筛分效率是衡量振动式粒度仪筛分效果的关键性能指标，运动的频率、振幅等因素对筛分效率有着显著影响，且存在一定的交互作用。本文基于Rocky DEM仿真软件对粒度仪筛分装置部分进行DEM数值模拟，模拟颗粒筛分过程，通过控制变量法在有限时间内计算筛分粒子总数与有效筛分粒子数来确定振动装置适宜的筛分振幅和频率，通过数据表明在频率为75 Hz以上,振幅为0.1 mm~0.2mm时整体的筛分效率较高，而对于较小颗粒来说，继续增加频率筛分效果会继续提高，且其最优筛分振幅也降低。因此实验采用“音圈电机在筛分频率75Hz-120Hz变频、由0.1 mm~0.2mm变幅筛分”的方法，符合音圈电机运动特性。实验验证，此设备对三种不同粒度分布的物料都具有更好的筛分效率及效果。

关键词：粒度仪；音圈电机；DEM 仿真；变频筛分；筛分效率

作者简介：

何召慧，女，2000 年出生于山东省滕州市，本科于 2018 年就读于山东理工大学机械设计制造机器自动化专业，本科毕设内容复合颗粒成型机的设计，运用专业机械知识，设计一台将复合颗粒粉末制成球形的机器，后硕士于 2022 年在读南京航空航天大学航空学院机械专业，负责振动式粒度仪的设计与研究，具有一定的颗粒成型及筛分设备研究基础。

作者为学生。

第 23 分会场：颗粒计量及标准化

中国计量院环境中心颗粒计量介绍

宋小平 [1*]

[1] 中国计量科学研究院，北京，100029

*Email: Songxp@nim.ac.cn

摘要正文：计量是关于测量及其应用的科学，随着社会发展和科技进步，颗粒及其性能的测量表征在新材料、环境保护等重要领域得到广泛应用，颗粒测量的新需求不断涌现，要求越来越高，这些都对颗粒准确测量与计量提供了新的机遇和挑战。中国计量科学研究院环境中心颗粒物计量工作主要研究方向是，对固、液、气颗粒物的计量和测量技术研究。通过科研项目，开展相关计量技术研究，制定计量技术法规，目前已经建立了大气颗粒物质量浓度、颗粒数量浓度和常规颗粒物等计量标准。并围绕这些成果针对不同社会需求开展相关技术服务工作。同时，积极向外寻求合作，与环境监测总站达成战略合作。共同健全环境监测量值传递溯源体系、提高环境监测数据质量。

关键词：颗粒计量；质量浓度；数量浓度

参考文献

[1]许潇,池顺鑫,李想.颗粒物质量浓度智慧计量平台的研制[J].计量科学与技术, 2022(10):71-76.

[2]张文阁,刘巍,刘俊杰,邹亚雄,许潇.环境空气颗粒物质量浓度计量溯源体系的建立[J].计量科学与技术, 2022(10):10-15.

Introduction to Particle Measurement at the Environmental Center of China National Institute of Metrology

Song xiaoping[1*]

[1]National Institute of Metrology , Beijing, 100029

* Email: Songxp@nim.ac.cn

Metrology is the science of measurement and its applications. With the development of society and technological progress, the measurement and characterization of particles and their properties have been widely used in important fields such as new materials and environmental protection. New demands for particle measurement continue to emerge, with increasingly high requirements. These provide new opportunities and challenges for accurate particle measurement and metrology. The main research direction of particulate matter measurement at the Environmental Center of the Chinese Academy of Metrology is the measurement and measurement technology research of solid, liquid, and gas particulate matter. Through scientific research projects, relevant measurement technology research has been carried out, and measurement technology regulations have been formulated. Currently, measurement standards for atmospheric particulate matter mass concentration, particle quantity concentration, and conventional particulate matter have been established. And carry out relevant technical service work based on these achievements to meet different social needs. At the same time, actively seek cooperation with external parties and establish strategic partnerships with the Environmental Monitoring Center. Jointly improve the transmission and traceability system of environmental monitoring values, and enhance the quality of environmental monitoring data..

Keywords: Particle Measurement; Quality Concentration; Quantity Concentration.

References

[1]许潇,池顺鑫,李想.颗粒物质量浓度智慧计量平台的研制[J].计量科学与技术, 2022(10):71-76.

[2]张文阁,刘巍,刘俊杰,邹亚雄,许潇.环境空气颗粒物质量浓度计量溯源体系的建立[J].计量科学与技术, 2022(10):10-15.

报告人简介：

宋小平：中国计量科学研究院环境计量中心主任，研究员。
研究方向为颗粒计量，环境保护等领域。**附：报告人不是学生**

机动车尾气排放碳烟颗粒的模拟可控发生技术

桂华侨[1,2*]，郭皓天[1]，刘俊杰[3]，余同柱[1,2]，杨义新[1,2]，刘建国[1]，刘文清[1,2]

[1]中国科学院合肥物质科学研究院，安徽省合肥市蜀山湖路 350 号，230031
[2]合肥综合性科学中心环境研究院，安徽省合肥市蜀山经济技术开发区电商园四期 E 栋
[3]中国计量科学研究院，北京市朝阳区北三环东路 18 号，102200

*Email: hqgui@aiofm.ac.cn

摘要正文：碳烟气溶胶是含碳物质燃烧过程中产生的具有吸光特性的气溶胶，是大气气溶胶的重要组成部分，其中，机动车尾气排放是大气碳烟气溶胶的主要来源。自 2007 年以来，欧盟、中国、韩国等国家相继推出机动车排放法规对超细颗粒物数量（PN）浓度排放进行限制，并制定了机动车排放 PN 分析仪的相关校准程序。针对机动车排放超细碳烟颗粒测量设备的校准需求，采用燃烧火焰淬灭方法，自主研发碳烟颗粒物发生装置，可生成粒径范围 10-150 nm、数浓度范围≥10^6 #/cm^3、质量浓度范围≥5 mg/m^3 的准单分散碳烟颗粒，且颗粒理化特性与机动车尾气排放颗粒十分相似，粒径、浓度实现可控调节，且颗粒发生稳定性优于 5%。该设备可满足机动车尾气排放颗粒 PN、PM 测量设备的校准需求，且能有效减小因颗粒材质不同导致的校准误差。

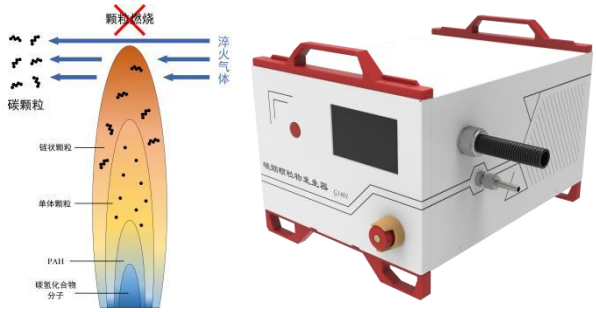


Fig. 1 Schematic and prototype of the soot generator

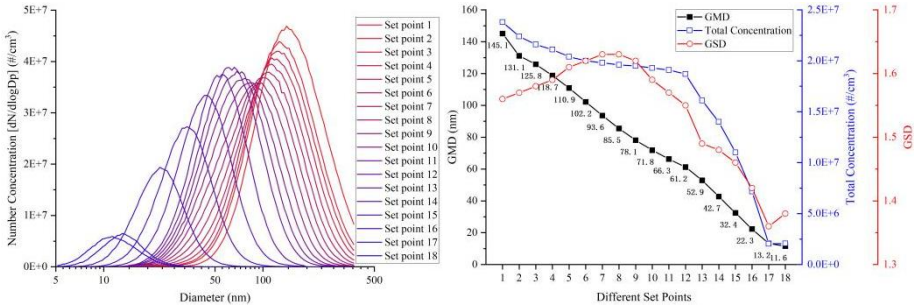


Fig. 2 Test results of size distribution, mode diameter, concentration, and GSD

关键词：碳烟发生器；机动车排放；校准

参考文献

[1] **U. Kirchner *et al.*, Investigation of EURO-5/6 level particle number emissions of European diesel light duty vehicles, *SAE Technical Papers*, 2018, 58(58): 1355-60.**

[2] **J. Rissler, H. Abdulhamid, J. Pagels, P. Nilsson, M. Sanati, and M. Boghard, Mass-mobility relationship of soot generator and diesel soot, *European Aerosol Conference 2009, August 6-11, Karlsruhe, Germany*, 2009.**

[3] **B. Giechaskiel, A. Mamakos, J. Woodburn, A. Szczotka, and P. Bielaczyc, Evaluation of a 10 nm particle number portable emissions measurement system (PEMS), *Sensors*, 2019, 19(24).**

[4] **B. Giechaskiel *et al.*, Calibration of condensation particle counters for legislated vehicle number emission measurements, *Aerosol Science and Technology*, 2009, 43(12): 1164–1173.**

报告人简介：

桂华侨，博士，研究员，博导，入选国家“万人计划”科技创新领军人才，被授予“有突出贡献中青年专家”荣誉称号。现任中国科学院合肥物质科学研究院安光所环境光学中心副主任，兼任中国仪器仪表学会光机电分会、中国光学学会光电专委会委员。长期从事环境空气与移动源细颗粒物监测技术研究工作，研发了一系列在线监测技术设备，支撑建设了国家空气质量和地面能见度自动监测站网。主持了国家重点研发计划、国家重大科学仪器设备开发专项任务等 15 项重要科研项目，在 Science Advances 等期刊发表论文 120 余篇，获授权发明专利 50 余项，获国家科技进步二等奖 1 项（排名 3）、安徽省科技一等奖 1 项（排名 3）。

附：报告人不是学生

可凝结颗粒物监测技术

杜永强

安荣信科技（北京）股份有限公司

摘要：随着国家对大气环境治理的推进，多行业超低排放改造，可凝结颗粒物（CPM）成为工业烟气防治的关键污染物。然而，对其进行准确、快速测量是国内外一大技术挑战。其主要原因是 CPM 在烟道高温环境中为气态物质，排入大气环境后快速凝结或反应形成颗粒态物质，成分复杂且理化性质不稳定，其排放过程涉及错综复杂的物理冷凝和化学转化的过程。本文通过介绍 CPM 的形成机制和排放特征，阐释已有的工业烟气 CPM 采集与分析方法及其优缺点，探讨光学方法在实现 CPM 准确、快速测量方面的可行性和可靠性，以满足适合我国超低排放烟气在线监测的要求。

报告人简介：杜永强 安荣信科技（北京）有限公司 研究员/董事长

附：报告人不是学生

便携式黑碳气溶胶发生器的研制

李友轩[1]，李兴华[1,*]

[1]北京航空航天大学，北京市昌平区沙河高教园南三街 9 号，100191

*Email: lixinghua@buaa.edu.cn

摘要正文：

黑碳气溶胶发生器作为黑碳气溶胶标准发生源，可用来校准在日常监测中使用的各种黑碳仪，也可用于开展模拟黑碳气溶胶老化实验研究；目前国内缺乏便携式的黑碳气溶胶发生器，为此，本研究设计了两种结构的便携式的仪器，即基于吹熄火焰和倒置火焰的黑碳气溶胶发生器（图 1，2）；通过流场模拟，对其结构进行优化。对不同的燃烧当量比条件下所形成的黑碳气溶胶的粒径分布特征和稳定性能进行评估，结果表明：在所有测试的燃烧当量比下，两种仪器发生黑碳气溶胶的总数浓度以及峰值粒径的 RSD 值都保持在 5 %以内（图 3）；且在不同的燃烧当量比条件，黑碳气溶胶的总数浓度以及峰值粒径在一定范围内变化；评估表明所研制的设备性能稳定，可作为黑碳气溶胶的可靠来源。吹熄火焰和倒置火焰的黑碳气溶胶发生器的尺寸分别为 300×250×250mm，300×250×350mm，重量都小于 10Kg（图 4）。

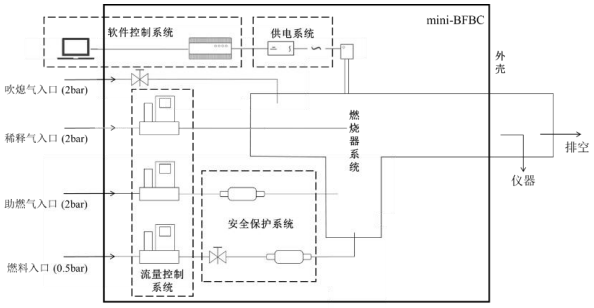


图1. 吹熄火焰黑碳气溶胶发生器结构示意图

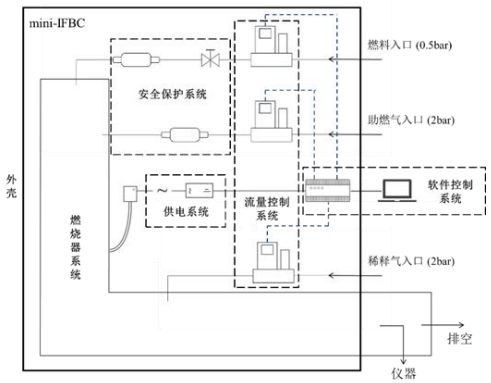


图2. 倒置火焰黑碳气溶胶发生器结构示意图

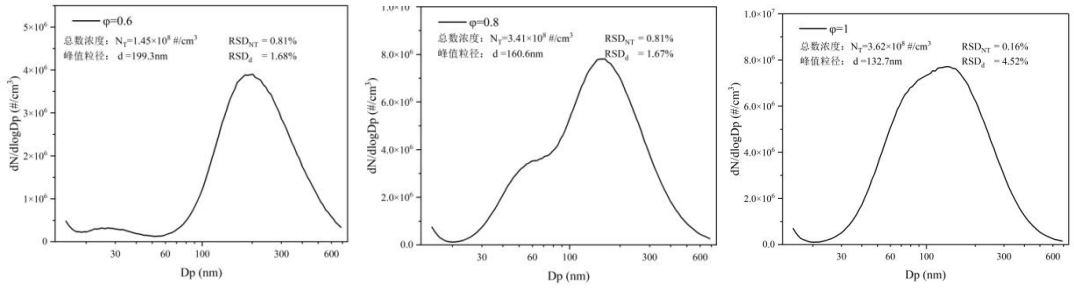


图3. 不同燃烧当量比的粒径分布与稳定性

图4.黑碳气溶胶发生器外形图 （a）吹熄火焰；（b）倒置火焰

关键词：黑碳气溶胶发生器；吹熄火焰；倒置火焰；便携式；性能稳定

参考文献

[1] 郭太伦，肖茂栋，张卓，阮兵，李兴华. 黑碳气溶胶发生器的设计与性能测试. 环境科学学报, 2021, 41(10): 4280-4287.

[2] Stipe C B, Higgins B S, Lucas D, et al. Inverted co-flow diffusion flame for producing soot. Review of Scientific Instruments, 2005, 76(2): 23908.

[3] Moore, R. H., L. D. Ziemba, D. Dutcher, A. J. Beyersdorf, K. Chan, S. Crumeyrolle, T. M. Raymond, K. L. Thornhill, E. L. Winstead, and B. E. Anderson. 2014. Mapping the Operation of the Miniature Combustion Aerosol Standard (mini-CAST) Soot Generator. Aerosol. Sci. Technol. 2014, 48 (5):467–79.

报告人/墙报展示人简介：

李兴华，北京航空航天大学能源与动力工程学院，教授/博士生导师
研究领域：排放测量与排放特征、气溶胶的理化/光学特性与气候效应

附：报告人不是学生

孔口流量计在超大流量气溶胶采样器现场校准中的应用

张雯[1]，肖承川[1,*]

[1]中国测试技术研究院，成都市成华区玉双路10号，610021

[1,*]中国测试技术研究院，成都市成华区玉双路10号，610021

*Email: 331465479@qq.com

摘要正文：基于辐射环境自动监测站超大流量气溶胶采样器的运行环境和工作特点，对其现场校准装置进行了研究和探讨。研究小组根据不同原理的气体流量计特点，分别采用了涡轮流量计原理、孔口流量计原理的两种可以开展超大流量气溶胶采样器现场校准的流量校准装置，开展现场测试。经过现场测试表明，使用孔口流量计原理的流量校准装置，对辐射自动监测站的超大流量气溶胶采样器流量进行测试准确可靠且易于操作。孔口式流量校准装置具有测量精度高、便携性和续航能力强等优点，满足HJ1009-2019标准对超大流量采样装置示值误差的规定，为计量机构对超大流量气溶胶采样器开展现场校准工作提供了技术支撑。

关键词：辐射环境监测；涡轮流量计；孔口差压式流量计；超大流量气溶胶采样器；现场校准

参考文献

[1] 王侃，杨维耿，范方辉，等.国控辐射环境空气自动监测站建设和安装技术探究[J].环境与发展，2022，8 : 53～57.

[2] 王侃,等.辐射环境空气自动监测站建设和运行问题分析及对策[J].环境与发展,2022，4：117-120.

[3] 生态环境部．HJ 1009—2019：辐射环境监测技术规范［S］．北京: 中国环境出版社，2019.

[4] 王钊,许诚,吴桂锋,等. 粉尘采样器校准装置流量计的选型研究［J］. 计量与测试技术，2024，51(4) : 1～3 .

[5] 张建波. 浅谈各种流量计的优缺点［J］. 计量与测试技术，2010，37(07) : 4～5 .

[6] 袁碟，蒋永荣，刘成良，等.常见气体流量计的计量原理及控制系统［J］.仪器仪表用户，2016,23（7）：5～9.

[7] 陈永昌,门相勇，李瑞安，等.容积式气体流量计设计与室内试验［J］.测井技术，2016,40（1）：72-75.

[8] 宁世广.几种容积式流量计的性能特点与使用 [J]. 工业计量，1998（6）：29～30.

[9] 方翔 . 超声波气体流量计的研制[D]. 武汉：华中科技大学，2004.

[10] 万观军，严微微，邵家存,等.气体涡轮流量计结构改进与性能优化研究[J].传感技术学报，2023,36（9）:1337～1342.

[11] 林谋.差压式流量计零点修正方法分析[J].技术与市场，2023,30（10）:106～108.

[12] 徐海东.差压式流量计工作原理及测量准确度技术研究[J].中国设备工程，2020,3:145～146.

[13] 刘洋.孔口流量计的流量测量不确定度影响因素分析[J].轻工标准与质量,2017(02):30-31

[14] 杨辰芳.孔口流量计校准装置的研制[D].保定：河北大学，2021.

报告人/墙报展示人简介：

张雯，女，高级工程师。中国测试技术研究院化学研究所职工，现任环境安全实验室主任，近20年一直从事计量检定校准和计量方法、标准物质的研究以及相关工作。先后取得一级注册计量师、计量标准二级考评员和国家计量标准一级考评员资格。任化学工业专用仪器仪表标准化技术委员副主任委员；中国湿度与水分专业委员会委员。

编写和参与编写了GB/T 33907-2017《电解法固体水分测量仪》、GB/T 5832.1-2016《气体分析 微量水分的测定 第1部分：电解法》、GB/T 5832.2-2016 《气体分析 微量水分的测定 第2部分：露点法》、GB/T 5832.4-2020 《气体分析 微量水分的测定 第4部分：石英晶体振荡法》、GB/T 36240-2018《离子色谱仪》、JJF1076-2020 《湿度传感器》、JJF（川） 041-2017《呼出气体酒精含量检测仪检定装置》校准规范、JJF（川）141-2017《微量总有机碳分析仪》等多个

规程规范和标准。

发表了《粉尘测量仪校准结果的不确定度评定》，参与编写《无纸化原始记录系统 RecMIS 在计量工作中的应用》、《新冠病毒疫情流行期降低计量检校工作中传播风险的措施》、《室内空气污染物降解效果的动态测试》等文章。

主持了四川省科研项目课题《四川省计量测试与技术标准共享服务平台》；参与《公共安全领域气体传感器性能测试系统的研究》、《空气中硫化氢气体标准物质的研制》、《环境监测关键计量标准及测量技术研究》等大型科研项目，获得四川省科技进步三等奖。

附：报告人不是学生

基于光声、腔衰荡复合光谱的大气气溶胶光学特性监测技术研究

戚海洋[1],刘素梅[1],潘孙强[1,*]

[1]浙江省计量科学研究院，浙江省杭州市钱塘区下沙路300号，310018

*pansunqiang@hotmail.com

大气气溶胶可以通过散射和吸收太阳辐射影响地球大气的能量收支，影响气候变化，该效应称为气溶胶的直接辐射效应[1]，在全球温室效应、碳达峰和碳中和中发挥重要作用。气溶胶的直接辐射效应取决于气溶胶的光学特性，包括气溶胶散射系数、吸收系数和消光系数。气溶胶光学特性的微小变化可能导致气溶胶辐射强迫的较大变化，有文献指出，要准确估算气溶胶辐射强迫，气溶胶光学厚度的测量不确定度应在10%以内，单次散射反照率的测量不确定度应在±0.03以内[2,3]。其中，气溶胶光学厚度为气溶胶消光系数在垂直方向上的积分，气溶胶散射系数与消光系数的比值为气溶胶单次散射反照率。因此需要准确测量气溶胶散射系数、吸收系数和消光系数，其中消光系数等于吸收系数与散射系数之和。

目前通常分别采用积分片法（黑碳仪、多角度吸收分光光度计）测量气溶胶吸收系数、积分浊度仪测量气溶胶散射系数[4,5]，在测量吸收系数和散射系数的基础上，计算得到消光系数。采用两套仪器分别抽取气溶胶进行气溶胶吸收系数、散射系数测量，测量对象不一致，测量数据可比性会存在一定问题。此外，积分片法是将气溶胶富集在滤膜上，改变了气溶胶的自然悬浮状态，因此测得的光学特性可能与实际大气情况有所不同。积分浊度法通过各角度散射光的积分强度测量气溶胶散射系数，积分角度（理想的积分角度为0°~180°，实际积分角度通常为7°~170°左右）和光源（理想光源为严格的朗伯发光体）的非理想性使得积分浊度仪测量结果包含有一定的系统性偏差[6-8]。

针对上述问题，本研究基于光声光谱的气溶胶吸收系数检测技术实现气溶胶吸收系数的实时在线测量；基于腔衰荡光谱的气溶胶消光系数检测技术，实现对气溶胶消光系数的准确测量；首次融合光声光谱和腔衰荡光谱两种技术，实现气溶胶吸收系数、消光系数的直接测量，并推算散射系数，避免了积分浊度法测量的原理性误差。融合的光学特性测量仪具有全参数测量、测量准确度高和测量速度快的特点。

关键词：光声光谱；腔衰荡复合光谱；气溶胶光学特性监测

参考文献

[1] **Charlson R J, Schwartz S E, Hales J M, et al. Climate forcing by anthropogenic aerosols. Science, 1992, 255(5043):423-430.**

[2] **Mishchenko M I, Cairns B, Hansen J E, et al. Monitoring of aerosol forcing of climate from space: analysis of measurement requirements. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2004, 88(1):149-161.**

[3] 马楠, 周秀骥, 颜鹏, 赵春生. 一种改进的TSI3563积分浊度误差校正方法. 应用气象学报, 2015, 26(1):12-21.

[4] **Segura S, Estellés V, Titos Vela G, et al. Determination and analysis of in situ spectral aerosol optical properties by a multi-instrumental approach. Atmospheric Measurement Techniques, 2014, 7(8):2373-2387.**

[5] **Yong H, Ti-Jian W, Rui-Zhong R, Ying-Jian W. Progress in the study of physic-optics characteristics of atmospheric aerosols. Acta Physica Sinica. 2008, 57(11):7396-7407.**

[6] **Waggoner A, Ogren J, Caldow R. Performance Characteristics of a High-Sensitivity, Three-Wavelength, Total Scatter/Backscatter Nephelometer. J. Atmos. Oceanic Technol., 1996, 13(5):967-986.**

[7] **Müller T, Nowak A, Wiedensohler A, et al. Angular Illumination and Truncation of Three Different Integrating Nephelometers: Implications for Empirical, Size-Based Corrections. Aerosol Science and Technology, 2009, 43(6):581-586.**

[8] **Massoli P, M. Murphy D M, A. Lack D A, et al. Uncertainty in Light Scattering Measurements by TSI Nephelometer: Results from Laboratory Studies and Implications for Ambient Measurements. Aerosol Science and Technology, 2009, 43(11):1064-1074.**

[9] **Tian G, Moosmüller H, Arnott WP. Simultaneous photoacoustic spectroscopy of aerosol and oxygen A-band absorption for the calibration of aerosol light absorption measurements. Aerosol Science and Technology. 2009, 43(11):1084-1090.**

[10] **Liu Q, Huang H H, Wang Y, et al. Multi-wavelength measurements of aerosol optical absorption coefficients using a photoacoustic spectrometer[J]. Chinese Physics B, 2014, 23(6): 064205.**

[11] **Strawa A W, Castaneda R, Owano T, et al. The measurement of aerosol optical properties using continuous wave cavity ring-down techniques[J]. Journal of Atmospheric and Oceanic Technology, 2003, 20(4) 454-465.**

报告人简介：

戚海洋，项目负责人，博士，2019年于天津大学获得博士学位。现为生化计量光谱技术研发创新团队负责人，从事颗粒物计量技术研究、声表面检测方法研究、气体检测技术研究等。主持省部级科研项目2项，为主或参与科研项目6项，为主参与

荧光细胞计数仪校准微球研究

厉龙[1]，吴嘉炜[1]，贾锐[1]　　通信作者[1,*]，厉龙

[1]苏州市计量测试院，苏州市工业园区娄阳路 6 号，215121

*Email: lilong@szjl.com.cn

摘要正文：细胞数量和细胞活率在细胞治疗行业应用广泛，对其进行计量研究，保证测量结果的准确溯源是细胞计量领域的重要课题。传统的台盼蓝染色法不能很好地鉴别冷冻和复苏的细胞，使用AO/PI或AO/DAPI特异性染色对细胞进行活率和计数浓度分析则能很好地解决该问题，但在实际应用中发现存在不同仪器数据差异大、检测结果不稳定等问题。为保证量值准确可靠，对基于荧光原理的细胞计数仪进行准确高效的校准尤为重要。本研究利用经特殊工艺处理后的聚苯乙烯微球可以模拟荧光染色细胞受激发后发出不同特征荧光这一特性，将该微球配制成一定颗粒物浓度的悬浊液，实现了对基于荧光原理的细胞计数仪的计数浓度和细胞活率的校准。研究证明使用特定的聚苯乙烯荧光微球模拟活细胞、死细胞受激发后的荧光光谱特征，对其数量浓度进行赋值后用来校准荧光原理细胞计数仪的方法可行、数据准确，可用于周期性校准和日常质控。

关键词：计量学；荧光细胞计数仪；聚苯乙烯荧光微球；细胞计数；　细胞活率

报告人简介：

厉龙，硕士研究生，高级工程师，苏州市计量测试院检测型评事业部副部长，主要从事粒子粒度测量及相关仪器校准研究

附：报告人不是学生

基于粒径分布的气溶胶发生器和气溶胶光度计量值溯源研究

崔宏恩[1,*]，黄泽润[1]，曹梦伊[1]，吴振一[2]，林国喜[3]，黄帅[4]

[1]江苏省计量科学研究院，江苏省生物安全计量中心，南京市栖霞区文澜路 95 号，210023

[2]苏州市计量测试院，苏州市吴中区文曲路 69 号，215121

[3]苏州诺达净化科技有限公司，苏州工业园区和顺路 29 号，215028

[4]提赛环科仪器贸易(北京)有限公司，北京市海淀区中关村南大街甲 12 号寰太大厦 1201 室，100081

*Email: cuihongen@163.com

摘要：目前生物安全领域常用的多种气溶胶发生器存在校准方法的缺失，以及气溶胶光度计校准过程中存在气溶胶光度计显示质量浓度与基于天平称量得到的气溶胶浓度无法对应的问题。本研究通过使用扫描电迁移率粒径谱仪、气溶胶粒径谱仪和激光粒度仪分别对口罩颗粒物过滤效率检测仪的油性和盐性气溶胶、生物安全柜质量检测仪的碘化钾（KI）气溶胶、光度法高效过滤器检漏仪的聚α-烯烃（PAO）气溶胶以及计数法高效过滤器检漏仪的癸二酸二异辛酯（DEHS）气溶胶的粒径分布进行了分析研究，同时通过调节气溶胶发雾混匀装置的流量改变输出气溶胶的粒径分布，对不同粒径分布下气溶胶光度计显示质量浓度和基于天平称量得到的气溶胶浓度进行了比较研究。结果表明，通过测定气溶胶发生器的粒径分布能够对气溶胶发生器输出气溶胶在不同粒径下的浓度分布进行很好的表征，气溶胶光度计显示质量浓度和基于天平称量得到的气溶胶浓度随粒径分布到变化而变化，在特定中值粒径下气溶胶光度计显示质量浓度和基于天平称量得到的气溶胶浓度存在对应关系。本研究可为气溶胶发生器校准方法的编写提供有益参考，可为开展气溶胶光度计校准用气溶胶发雾混匀装置的粒径分布比对提供技术依据，促进气溶胶光度计的量值溯源和统一。

关键词：粒径分布；气溶胶发生器；气溶胶光度计；量值溯源

参考文献

[1] 国家市场监督管理总局. JJF 1815-2020, II级生物安全柜校准规范[S].

[2] 国家市场监督管理总局.JJF 2053-2023,洁净工作台性能参数校准规范[S].

[3] 崔宏恩,张新白,司启益.生物安全柜人员、产品和交叉污染保护（碘化钾法）测量不确定度评定[J].计量科学与技术,2022,66(07):70-73.

[4] 司启益,张新白,崔宏恩.生物安全柜质量检测仪雾化量校准方法研究[J].工业计量,2024,34(01):9-12.国家市场监督管理总局. JJF 1815-2020, II级生物安全柜校准规范[S].

[5] 刘志军.高效空气过滤器测试用气溶胶发生器的研制及性能评价[D].天津大学,2007.

[6] 王峥崎,王会如,张雨晨.检验设备气溶胶发生器研发分析[J].医疗装备,2014,27(05):24-25.

[7] Clark R P. 'Containment'--recent developments and BS 5726-1992 (microbiological safety cabinets).[M]// Reflections on conservative politics in the United Kingdom and the United States:. Lexington Books, 2012:193–199.

[8] Clark R P, Goff M R. The potassium iodide method for determining protection factors in open-fronted microbiological safety cabinets[J]. Journal of Applied Bacteriology, 1981, 51(3):439.

[9] 刘志军.高效空气过滤器测试用气溶胶发生器的研制及性能评价[D].天津大学,2007.

[10] 王峥崎,王会如,张雨晨.检验设备气溶胶发生器研发分析[J].医疗装备,2014,27(05):24-25.

[11] Clark R P. 'Containment'--recent developments and BS 5726-1992 (microbiological safety cabinets).[M]// Reflections on conservative politics in the United Kingdom and the United States:. Lexington Books, 2012:193–199.

[12] Clark R P, Goff M R. The potassium iodide method for determining protection factors in open-fronted microbiological safety cabinets[J]. Journal of Applied Bacteriology, 1981, 51(3):439.

[13] 国家市场监督管理总局. JJF 1800-2020,气溶胶光度计校准规范[S].

[14] 张爱亮,顾玲玲,高正,等.高效过滤器检漏用气溶胶光度计校准方法的研究[J].洁净与空调技术,2016(01):65-66.

[15] 张爱亮,刘悦,陈启悦,等.一种气溶胶光度计质量浓度的校准方法[J].计量学报,2020,41(06):765-768.

[16] 钟妮,罗逸龙,黄志凡,等.气溶胶光度计校准方法的研究[J].计量与测试技术,2020,47(01):51-52.

[17] 肖骥,池顺鑫,杨古涵,等.气溶胶光度计校准技术研究[J].计量科学与技术,2020(11):48-52.

[18] 徐立明,马志伟,邵鹏威.气溶胶光度计质量浓度校准设备及方法研究[J].中国计量,2021(08):50-53.

报告人简介：

崔宏恩，江苏省计量科学研究院，江苏省生物安全计量中心，高级工程师， 2013 年毕业于南京大学生物化学与分子生物学专业，现任全国生物计量技术委员会委员、中国计量测试学会生物计量专业委员会委员、全国洁净室及相关受控环境标准化技术委员会纳米受控环境分技术委员会委员和江苏省生物专用计量技术委员会委员，《计量科学与技术》杂志青年编委，《工业计量》杂志青年编委，《中国医疗设备》杂志审稿专家，一级注册计量师，江苏省市场监管“231 人才培养工程”第二层次培养对象，国家标准物质技术评审专家库专家，国家二级计量标准考评员，中国检验检测学会检验检测实物标准专家库专家，江苏省生物医药产业链检验检测技术服务专家组专家，江苏省海洋发展专家库专家，江苏省科技评估评审专家，南京市科技咨询专家库专家，苏州市认证认可和检验检测技术专家，长期从事临床检验设备、可穿戴设备、标准物质和生物安全相关的计量方法研究，主持筹建了江苏省生物安全计量中心，以第一作者发表论文 20 篇，主持了 3 项江苏省市场监督管理局科技计划项目，参与了 1 项 NQI 项目子课题，参与了 1 项江苏省科技计划专项资金项目，主持了 9 项国家计量技术规范制定，主持了 6 项江苏省地方计量技术规范和江苏省地方标准制定，参与了 19 项国家计量技术规范制定，参与了 2 项医药行业标准和 1 项卫生行业标准制定，获得授权发明专利 3 篇和实用新型专利 2 篇，主持制定的 1 项江苏省地方标准 2021 年被评为优秀省级地方标准，获江苏省质量强省强补资金 20 万，另外，主编《临床检验设备计量与检测技术》和《生物防护设备计量与检测技术》专著两本，参与编写《医用电生理设备计量与检测技术》、《核酸检测实验室设备计量校准与质量控制指南》、《生物安全柜质量控制指南》和《血培养仪质量控制指南》专著四本。

附：报告人不是学生

北京计量院颗粒计量及标准化研究成果介绍

李龙

北京市计量检测科学研究院

北京市计量院长期从事颗粒物标物物质研制和颗粒检测仪器的计量评价：

1、搭建了国内先进的颗粒物制备与表征平台，具备（0.1～20）μm 聚苯乙烯微球和石墨烯、核黄素等修饰的荧光微球制备能力，申请国家有证标准物质 30 多项，在生态环境、疾控卫生、生物安全、生物医药等领域有广泛应用。

2、搭建了国内先进的颗粒物监测仪器评价平台，具有多套可产生低、中、高不同量程，能发生不同粒子的颗粒物校准装置，可满足不同原理、不同场合、不同厂家仪器的计量检测，同时还搭建了 30m^3 模拟舱和室外比对舱，可开展不同环境下颗粒检测仪器或传感器的评价。

3、搭建国内首套静态箱原理的切割器评价装置，建立了 $PM_{2.5}$/PM_{10}/PM_1 切割器评价能力，并开展中环协认证检测，为全国几十家环保仪器生产企业开展检测服务；改进和完善了切割器评价方法，并揭示了不同原理气溶胶粒径谱仪和分流法/静态箱法等在评价切割器中的差异，显著提高了检测效率，降低了检测成本，为切割器评价技术的推广奠定了基础；

4、国内首创基于气溶胶粒径谱仪法的颗粒采样器采样物理效率检测技术，是国内现有技术中效率最高、成本最低、数据信息最全的技术，目前正在申报国家标准。

近 5 年，北京计量院在颗粒计量领域，发表 SCI 论文 3 篇，核心期刊论文 30 余篇，授权发明专利 5 项，主起草国家校准规范 5 项，地方校准规范 7 项，多人获得国家科协和北京市科协托举人才项目资助。

报告人简介：

李龙，男，1984 年 5 月出生，硕士研究生，高级工程师，北京市计量检测科学研究院副院长。

附：报告人不是学生

基于准金属纳米结构的表面增强拉曼光谱分析研究

席广成

中国检验检疫科学研究院，工业与消费品安全研究所，北京市亦庄荣华南路 11 号，100176

*Email: xiguangcheng@caiq.org.cn

消费品是食品、药品之外的生活用品。随着我国消费品市场的高速增长，消费品重大安全事件屡见报道，如“毒跑道”、“毒沙发”、“致癌性婴童用品”等，严重威胁消费者生命健康。习总书记强调，“人民对美好生活的向往，就是我们的奋斗目标”，消费品质量安全是人民美好生活的重要保障，对消费品中禁限用物质的高灵敏分析尤其重要。表面增强拉曼光谱(SERS) 具有高灵敏和现场检测等优点，在痕量测定、真伪鉴别等领域具有广泛的应用前景，但仍然存在基底问题束缚了其大规模应用。研究团队以公共安全检测领域国家重大需求为导向，以发展 SERS 新原理和新方法为目标，开创了准金属 SERS 研究，取得了以下成果：(1) 区别于传统贵金属和半导体 SERS 基底，提出了准金属 SERS 新概念，发展了基于准金属的等离子体共振效应协同界面电荷传输的 SERS 增强新机制,为高性能SERS 传感材料的选择和设计提供了指导。(2) 发展了准金属柔性 SERS 基底的有害物检测新策略，构建了大面积信号均匀准金属氮化物/碳化物纳米结构基底，大幅提升了非贵金属 SERS 基底的信号均匀性、稳定性和灵敏度，检测限低至 10^{-11} M。(3) 初步建立了基于准金属 SERS 基底的分离/分析集成式检测方法，率先实现了消费品等复杂基质产品中多组分禁限用物质的连续在线分离和高通量检测，为高灵敏、低成本现场快速检测新型 SERS 器件研制提供了新思路。

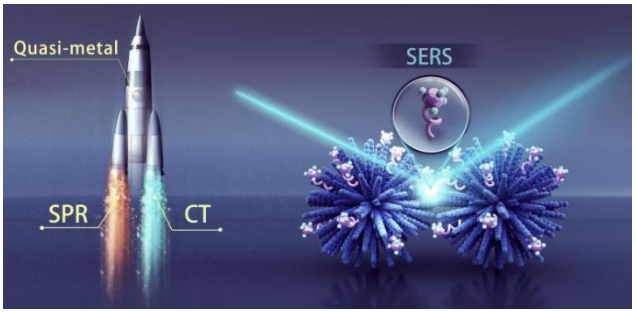


图1：建立高灵敏、高稳定、高通量的准金属拉曼光谱分析方法

关键词：拉曼散射；准金属；纳米结构；协同增强；柔性基底

参考文献：

[1] H. M. Guan, W. T. Li, J. Han, W. C. Yi, H. Bai, Q. H. Kong, G. C. Xi*, *Nat. Commun.* **2021**, *12*, 1376.

[2] H. M. Guan, W. C. Yi, T. Li, Y. H. Li, J. F. Li, H. Bai, G. C. Xi*, *Nat. Commun.* **2020**, *11*, 3889.

报告人简介：

席广成，中国检验检疫科学研究院 副所长/博士/研究员。

附：报告人不是学生

新型生物气溶胶监测用荧光微球标物的制备及校准方法研究

潘一廷，张国城，刘佳琪，田莹，赵汐

北京市计量检测科学研究院，北京，100029

生物气溶胶监测仪是一种利用生物本征荧光信号对环境中生物微粒进行计数的仪器。目前该设备尚无国家校准规范。本研究在研制生物本征物质修饰的标准荧光微球的基础上，探索了生物气溶胶监测仪器的校准方法，及荧光通道计数效率的溯源性研究。

Matyjaszewski等于1995年开发的原子转移自由基聚合(Atom transfer radical polymerization, ATRP)[1]被广泛应用于粒子修饰领域。利用ATRP技术，可以在硅球表面接枝结构明确、多功能的聚合物刷。此外，只需改变聚合时间就可以很好地定制聚合物刷层的厚度[2]，从而更好地控制微球功能特性。

本研究以原子转移自由基聚合(ATRP)固定氨基酸或核黄素聚合物修饰二氧化硅或聚苯乙烯微粒子为底物，制备了一种新型的模拟生物粒子的标准粒子。

通过不同的ATRP反应体系、反应温度和反应时间，确定并优化了氨基酸或核黄素聚合物在微球上接枝的数量和荧光强度。用扫描电子显微镜(SEM)、荧光光谱仪以及红外光谱表征了氨基酸或核黄素聚合物刷在微球上的结构。

用合成的标准生物本征物质修饰的荧光微球，开展了生物气溶胶监测仪荧光通道计数效率校准方法研究以及溯源性研究。

REFERENCES

1. J. S. Wang, K. J. Matyjaszewski,J. Am. Chem. Soc., 117: 5614-5617(1995).

2.R. Barbey, L. Lavanant, D. Paripovic, C. Sugnaux, S. Tugulu and H. A. Klok*, Chem. Rev. 109:5437–5527(2009).

报告人简介：

潘一廷，北京市计量检测科学研究院，博士，正高级工程师。

附：报告人不是学生

$PM_{2.5}/PM_{10}$切割器检测方法的建立与优化

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

$PM_{2.5}/PM_{10}$颗粒物切割器是颗粒物在线监测系统的重要组成部分，其性能对于大气颗粒物浓度监测准确性具有重要影响。目前国内评价$PM_{2.5}$切割器的方法有分流法和静态箱法，两种方法各有利弊，后者还可用于PM_{10}切割器的评价。研究表明，不同种类性质的颗粒物、捕集效率曲线拟合算法、采样流量等因素对切割器评价结果有影响。本文总结了切割器性能评价技术的发展现状及不足，对$PM_{2.5}/PM_{10}$切割器检测方法的建立与优化提出了一些建议，为切割器性能评价技术未来的发展提供参考。

关键词：颗粒物切割器；粉尘浓度；性能评价；曲线拟合；采样流量

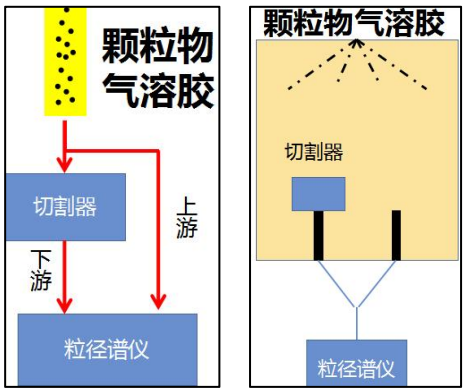


Fig. 1 Measuring methods of cutters

参考文献

[1] 阮兵,李兴华,谢岩,等. 2018. $PM_{2.5}$旋风切割器的性能测试与模拟[J]. 环境科学学报,38(7):2811-2817.

[2] 刘佳琪,张国城,吴丹,等. 2021. 基于静态箱法的$PM_{2.5}$切割器捕集效率评价及拟合曲线优化研究[J]. 计量学报, 42(10): 1398-1403.

[3] Lin C W, Chen T. J., Huang S. H., et al. 2018. Effect of aerosol loading on separation performance of PM2.5 cyclone separators [J]. Aerosol and Air Quality Research. 18:1366-1374

[4] 国家环境保护总局.2013.HJ 93-2013.环境空气颗粒物(PM10和 PM2.5)采样器技术要求及检测方法[S].北京:中国环境科学出版社.

[5] 张文阁,刘巍,许潇,等.2019.PM_(2.5)监测仪检测用国家一级标准物质的研制[J].计量学报,40(1):159-163.

[6] 张文阁,周文刚,许潇,等.2020.PM10监测仪检测用国家一级标准物质的研制[J].中国计量,0(2):83-85.

报告人简介：

刘佳琪，女，（1990-），北京市计量检测科学研究院环能所高级工程师，从事环境监测仪器的计量技术研究，围绕 PM2.5/PM10 切割器及不同类型的颗粒物采样器采样效率评价开展工作，探究采样流量、颗粒物类型等因素对采样效率的影响。承担或参与多项国家或省部级科研项目，以第一起草人承担国家或地方校准规范 3 项，以第一作者在《计量学报》、《环境科学学报》、《中国测试》等核心期刊发表论文十余篇。所著论文荣获北京市科学技术协会“第十六届北京青年优秀论文奖，入选北京市科学技术协会 2023-2025 年度青年人才托举工程。

附：报告人不是学生

基于ICP-MS原理的大气颗粒物组分在线监测技术研究

柴美云[1,*]，周强[2]，栾旭东[1]

[1]上海磐合科学仪器股份有限公司，上海市闵行区联航路1588号上计信息楼B座3楼，201112

[2]中国科学院沈阳应用生态研究所，辽宁省沈阳市沈河区文化路72号，110004

*Email: chaimeiyun@126.com

摘要正文：为实时快速在线监测大气中重金属浓度的变化，搭建了一套气体颗粒物直接进样的大气重金属移动监测车载ICP-MS系统，对该系统的载气进样、气瓶装卸、车体减震、发电及数据处理传输等模块进行研发改进，以提高系统操作的便捷性及数据监测的可靠性。利用该车载ICP-MS系统对整体设备的系统性能做了测试分析，并与国家标准 HJ 657-2013《空气和废气 颗粒物中铅等金属元素的测定 电感耦合等离子体质谱法》进行了比对分析。结果表明，大气重金属移动监测车载ICP-MS系统的检出限为μg/m^{3}级，精密度＜5%，24小时漂移＜2%（K、Ca除外）；与国家标准 HJ 657-2013相比，相对误差为3.2~16.0%。

关键词：大气；重金属；直接进样；车载；ICP-MS

报告人简介：

（柴美云，上海磐合科学仪器股份有限公司售前技术总监，高级工程师，主要研究方向为大气污染监测与防治。上海交通大学博士，曾在 Renewable & Sustainable Energy Reviews，Bioresource Technology 等期刊发表 SCI 论文 10 余篇。现担任科技部国家重点研发计划重点专项项目“基于气体扩散采集分离技术与 ICP-MS 联用的大气重金属在线监测系统研发”子课题负责人，并申请专利 3 项，软著 1 项。参与主编长三角《PM2.5 中金属元素走航监测技术规范》团体标准，参编《工业园区空气污染自动监测技术指南》，并被评为“春申金字塔青年创新人才”。）

附：报告人不是学生

空气动力学粒径谱仪国产化研制及测量极限研究

张志伟[1,2]，侯珑斐[2,3]，张景秀[2,*]

[1]天津大学精密仪器与光电工程学院，天津，300072

[2]北京是卓科技有限公司，北京，102200

[3]南京航空航天大学自动化学院，南京，210016

*Email: jingxiu.zhang@buaa.edu.cn

摘要正文：空气动力学粒径谱仪是测量大气颗粒物粒径分布的重要仪器。本研究致力于该仪器的国产化研制，旨在提高我国在大气环境监测领域的技术自主性。研究团队通过优化仪器结构设计、改进检测系统和数据处理算法，成功研发出具有自主知识产权的空气动力学粒径谱仪。同时，针对测量下限这一关键指标，研究人员采用多种先进技术手段，如高灵敏度传感器和低噪声电路设计，显著提升了仪器对微小颗粒物的检测能力,将测量下限进一步扩展到0.3μm，将测量上限扩展到100μm，远大于进口设备的0.5-20μm。另外，针对测量浓度上限这一关键指标，研究人员采用基于FPGA的抗混叠算法将测量上限提升到大于30000pt/cm^3，远大于进口设备的1000pt/cm^3。这项研究不仅推动了相关技术的本土化发展，也为我国大气污染监测和治理提供了重要的技术支持。

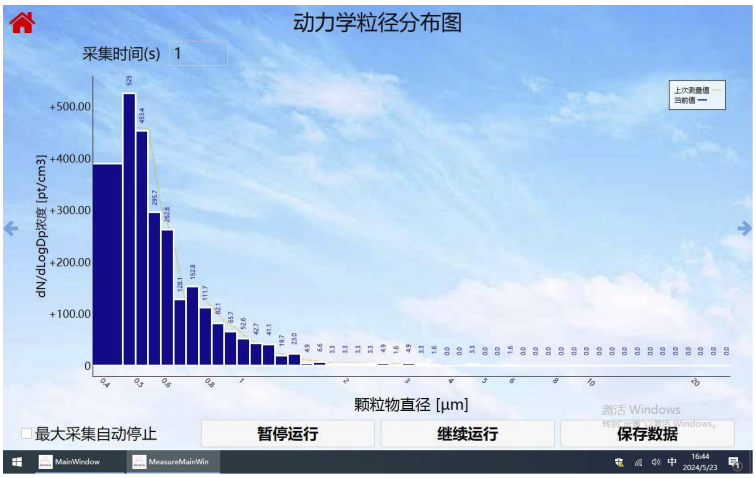


Fig. 1 Aerodynamic Particle Size Distribution Chart

关键词：空气动力学粒径；测量粒径；测量浓度；测量极限

报告人简介：

张景秀，北京是卓科技创始人、河北工业大学客座教授、动态测试技术航空科技重点实验室特聘研究员、多个专业委员会委员。专注于基于极弱光探测的高端精密仪器、激光雷达以及各种数据计算加速卡的研究与开发。带领团队研制出三十余款高端精密分析仪器与设备、十余款极弱光探测器、二十余款高端数据采集卡，产品广泛应用于航空、航天、兵器、环境、气象、医疗等领域。目前正带领团队攻关多个前沿项目,包括空气动力学粒径谱仪算法、水下成像激光雷达系统、无人机探测激光雷达等。未来研发方向包括各类质谱仪和离子源的开发、超大规模矩阵加速计算的研究。

附：报告人不是学生

高压气体颗粒物的光散射测量法

张佩[1, 2*]，王光辉[2]，陈斌[2]，朱菁[1, 2]

[1]中国科学院上海光学精密机械研究所，上海，201800

[2]上海镭慎光电科技有限公司，上海，201800

*Email: 553244847@qq.com

摘要正文：压缩空气和大宗气体在工业生产中具有广泛的应用，在生产过程中与产品直接接触的高压工艺气体的洁净度测试和监测对于确保这些产品的质量和安全至关重要。为了确保压缩气体的高洁净度，现有高压气体洁净度的测试标准要求探测的最小粒径档应小于或等于0.1μm。目前市面上测试高压气体的洁净度大多采用高压扩散器方案，先由高压扩散器将高压气体的压力降低到接近常压状态，然后由常规尘埃粒子计数器进行测试，该方案简单、方便、成本低，但高压扩散器气路连接环节较多容易导致颗粒物沉积，无法长期持续稳定工作，且工作过程中会排出一部分样气到空气中，只能测量不易发生化学反应的惰性气体。本文设计了基于弹性光散射测量原理的高压气体0.1μm尘埃粒子计数技术，无需气体泄压即可直接测量高压气体中的颗粒物。我们以激光二极管为光源，设计了一种高信噪比的单腔式散射光学传感器，配以高增益、低噪声的信号处理电路，同时通过良好的密封结构确保传感器无气体泄漏，实现了0.1μm级粒径的高压气体尘埃粒子计数器的研制。为了测试高压气体粒子计数器，我们提出了一种高压气体粒子计数器校准方法，并搭建了一套校准装置。测试结果表明，研制的高压气体尘埃粒子计数器在0.1μm档计数效率、零计数能力、高压密封性等关键技术指标均能满足实际使用要求。

关键词：高压气体；0.1μm颗粒物；光散射法；粒子计数器；压缩气体。

参考文献

[1] 黄惠杰, 邹海兴. BCJ－1尘埃粒子计数器光学系统的设计．光学仪器, 1995, 17（6）: 11～17

[2] **D D Cooke, M kerker. Response calculation for light-scattering aerosol particle counters. Appl. Opt., 1975, 14(3): 734～739**
郭永彩, 高潮, 胡学东, 谢利利. 微细颗粒粒度分析方法与测试技术．重庆大学学报(自然科学版), 2000, 23(5): 100~103

[3] 王乃宁等,中国颗粒学会颗粒测试全国学术年会论文集. 1991, 9

[4] 松青, 李琳, 郭祀远等. 现代颗粒粒度测量技术. 现代化工, 2002, 22(1): 58~61

[5] 中华人民共和国国家标准《尘埃粒子计数器性能试验方法》, GB6167.1～6167.2－85

[6] **R Jaenicke. The optical particle counter: cross-sensitivity and coincidence. Aerosol Science, 1972, 30: 95～111**

[7] **Japanese Regional Standards Committee. Test method for determination of particle contribution of gas delivery system, SEMI F70-0302, 2002.**

[8] 中华人民共和国国家计量技术规范《尘埃粒子计数器校准规范》，JJF 1190-2008.

报告人简介：

张佩，博士，高级工程师，2014 年博士毕业于中国科学院大学，毕业后在中国科学院上海光学精密机械研究所工作，主修光学工程专业，长期从事气溶胶光学监测技术及应用研究，负责光学生物气溶胶监测仪、激光尘埃粒子计数器、光学生物传感器等产品的研发工作，荣获第十三届嘉定区紧缺人才和中国科学院上海光机所优秀共产党员称号，个人获得授权专利十余项，国际顶级期刊发表论文十余篇。

附：报告人不是学生

大气颗粒物碳质组分在线监测技术及应用

姜雪娇[1]，杨松杰[1]，叶华俊[1,*]

[1]杭州朋谱科技有限公司，浙江省杭州市滨江区滨安路1180号6号楼5楼，310052

*Email: jxuejiao@163.com

摘要正文：大气颗粒物中的碳质组分，按照化学成分分类，主要包括有机碳（OC）、元素碳（EC）以及少量碳酸盐碳（CC），其中OC包含各种有机物，来源于一次排放和二次转化，EC为碳单质，主要来源于燃料的不完全燃烧，而总碳（TC）可近似认为是OC和EC之和。黑碳（BC），是碳质组分中具有强烈吸光特性的物质。《HJ 1327—2023 环境空气颗粒物（PM2.5）中有机碳和元素碳连续自动监测技术规范》介绍了两种颗粒物中碳质组分的测量原理，一是热学-光学校正法，二是热学-光学衰减法。热学-光学校正法在线监测技术可实现OC、EC、TC的测量，结合光学衰减法测量BC，最终实现颗粒物中TC、OC、EC、BC的在线监测，该技术路线直接测量出OC和EC，方法公认成熟可靠，但是运行过程中需要消耗高纯氦气、氦氧混合气体以及氦甲烷混合气体，采样滤膜需要每周更换，运维成本较高。热学-光学衰减法在线监测技术可直接测量TC、BC浓度，根据经验系数换算，间接获得OC和EC浓度，该技术无需专用气体，滤膜更换周期长，运维成本低，但是该技术使用固定经验系数进行转化，会导致OC和EC测量有一定误差。上述碳质组分监测技术和产品，可应用于颗粒物来源解析、交通污染监测、燃烧排放特征分析等领域。本报告主要介绍颗粒物中碳质组分的在线监测原理和技术、对应产品以及应用情况。

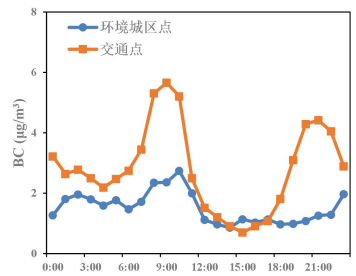


Fig. 1 The variation pattern of black carbon concentration during peak periods

关键词：有机碳；元素碳；黑碳

报告人简介：

姜雪娇，高级工程师，现就职于杭州朋谱科技有限公司，担任研究部经理和大气颗粒物组分监测产品经理，工作期间作为项目经理和系统工程师主导了大气颗粒物黑碳分析仪、大气颗粒物热学-光学校正法有机碳元素碳分析仪、热学-光学衰减法碳质组分监测系统以及大气颗粒物中无机元素在线监测系统等多个大气颗粒物组分在线监测产品的研发和应用。

附：报告人不是学生

电子加热卷烟烟气气溶胶测量表征及模拟发生装置的研制

张爱亮

上海市计量测试技术研究院，上海市徐汇区虹漕路 400 号 1109 室，200233

*Email:zal2088@163.com

摘要：通过搭建快速粒径谱仪测试平台，对电子加热卷烟逐口烟气气溶胶进行了分析测试；获得了各类电子加热卷烟逐口烟气气溶胶表征信息。研制了电子加热卷烟烟气气溶胶模拟发生装置，可模拟发生各类电子加热卷烟烟气气溶胶表征信息一致的气溶胶，为电子加热卷烟烟气质量浓度量值溯源提供了重要的技术支撑。

关键词：电子加热卷烟；烟气气溶胶；烟气模拟发生装置；质量浓度

参考文献：

[1]王明霞,张书铭,窦玉青,等.电子烟安全性研究进展[J].中国烟草科学,2020,41(03):88-92.

[2]雷金辉,张晨光,陈焰,等.光散射法在电子烟气溶胶测量中的应用[J].信息技术,2019,43(12):29-33.

[3]于涛,韩敬美,郑绪东,等.光透射法在电子烟气溶胶定量测定中的应用[J].中国科技论文,2018,13(02):213-217.

[4]段沅杏,赵伟,杨继,等.传统卷烟和电子烟烟气气溶胶粒径分布研究[J].中国烟草学报,2015,21(01):1-5.

[5]张霞,韩熠,李寿波,等.基于气溶胶粒径分布测定电子烟烟雾量[J].中国烟草学报,2016,22(04):1-7.

[6]司晓喜,汤建国,朱瑞芝,等.两种抽吸模式下电加热不燃烧卷烟烟气气溶胶的粒径分布[J].烟草科技,2018,51(08):47-52.

Measurement and characterization of electronic heated cigarette smoke aerosols and development of smoke aerosol simulation device

Zhang Ailiang *Email:zal2088@163.com

Shanghai Institute of Metrology and Testing Technology, Room 1109, No. 400 Hongcao Road, Xuhui District, Shanghai, 200233

Abstract: A rapid particle size spectrometer test platform was set up to analyze and test the flue gas aerosol of electronic heated cigarette. The characterizations of flue gas aerosol of various electronic heated cigarettes were obtained. An electronic heated cigarette smoke aerosol simulation generator was developed, which can simulate all kinds of aerosol with the same characterization information of electronic heated cigarette smoke aerosol, and provide important technical support for the traceability of electronic heated cigarette smoke mass concentration value.

Key words: electronic heating cigarette; smoke aerosol; smoke simulation generator; mass concentration

报告人简介：

张爱亮，上海市计量测试技术研究院，高级工程师。长期从事于环境分析仪器和环境试验设备的量值溯源以及标准化工作，具有较高的理论水平和丰富的工作经验。

现任 IEC/TC104 注册国际专家，并担任 MT16、MT19 和 WG14 成员；全国电工电子产品环境条件与环境试验标准化技术委员会气候环境试验分技术委员会（SAC/TC8/SC2）副秘书长；全国实验室仪器及设备标准化技术委员会（SAC/TC526）委员；中国国际科技促进会“专业技术委员”；中国电工电子学会高级专家；国家计量标准考评专家；上海第二工业大学 硕士生校外导师。近年来主持并参与上海市科委标准化专项课题 3 项，上海市局科研项目 6 项。第一作者发表论文 10 余篇；授权发明专利 4 项，授权实用新型专利 7 项。参与 IEC 国际标准制定 1 项，主持和参与制修订国家标准和计量技术规范 10 余项。曾荣获 上海市“科技进步二等奖”；上海市职工先进操作方法“创新奖”；上海市分析测试协会“科技技术二等奖”；上海市质量协会 “质量技术优秀奖”。

附：报告人不是学生

微细气泡技术及其对计量和标准化发展的挑战

李兆军 [1,*] 张文阁 [2]

[1] 中国科学院过程工程研究所，北京中关村北二街 1 号，邮编：100190

[2] 中国计量科学研究院，北京市朝阳区北三环东路 18 号，邮编：100029

*Email: zjli@ipe.ac.cn

微细气泡技术在我国发展已经有多年历史，上世纪七十年代，陈邦林教授利用微细气泡技术从海水中提取到了公斤级的重铀酸铵，“海水提铀”工作1978年获得全国科学大会奖。近几年，随着中国颗粒学会微纳气泡专业委员会和全国微细气泡技术标准化技术委员会的成立，我国微细气泡技术得以迅猛发展，在多个领域获得广泛应用。

按照国际标准化组织微细气泡技术委员会（ISO/TC281）的定义（见图1），粒径小于100μm的气泡为微细气泡，粒径小于1μm的气泡为超细气泡，粒径从1μm到100μm的称为微气泡。

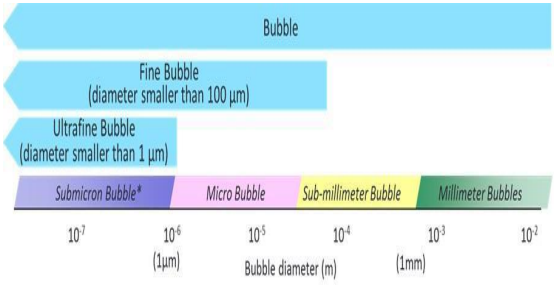


Fig.1 Definition of fine bubble of ISO/TC281

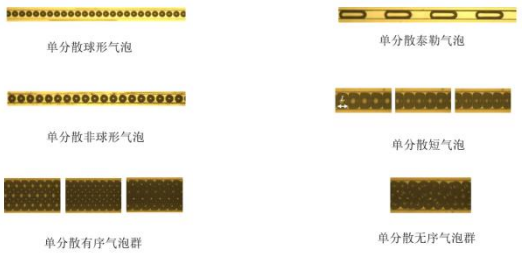


Fig.2 Some samples maybe used as reference materials for FBT

微细气泡具有很多独特性能，其发生原理有多种，包括旋流系统（Swirling flow system）、静态混合器系统（Static mixer system）、喷射器系统（Ejector system）、文丘里系统（Venturi system）、压力溶解（Pressurized dissolution system）等等，基于这些原理，市场上出现了多种微细气泡发生器。报告中列举了近几年我国微细气泡技术的应用情况，如水处理、农业、水产养殖、清洗、化学工业、健康等等【1】。随着微细气泡技术的发展，2013年成立了ISO/TC281，2019年成立了全国微细气泡技术标准化技术委员会，标志着微细气泡技术标准化时代到来。

然而，任何一个产业的发展需要三大支柱：技术、标准和计量，微细气泡技术相关产业发展也一样，2018年成立的中国颗粒学会微纳气泡专业委员会推动学术交流，支撑了技术发展，ISO/TC281和全国微细气泡技术标准化技术委员会以及利用标准进行检测的机构支撑了标准发展。但是到现在为止，有关微细气泡技术计量方面进展很小。清华大学骆广生老师带领的团队，研制出了单分散球形气泡、单分散泰勒气泡、单分散有序气泡群、单分散无序气泡群等多种可用于微细气泡计量用的气泡样品，见图2。

学术研究是要保证独立性，形成各自独到见解，促进独门技术的发展；标准是协商一致，对某些问题达成共识，促进技术的大规模应用；计量是对测量结果的准确性、一致性、有效性和可靠性进行保障的活动，特点是准

确性、一致性、溯源性和法制性，结果是获得完全统一，可以促进全世界各种技术和设备间的相互交叉应用，进而形成全球技术的大统一。

现实中，我国乃至全世界的微细气泡技术应用走在了前面，但目前的标准化工作还仅仅停留在对基本概念的理解与应用上，刚刚涉及到了一些测量技术的应用；而有关微细气泡技术的计量工作几乎处于原始状态，微细气泡技术及其应用领域的快速发展，对其标准化和计量工作提出了巨大挑战，我们必须迎头赶上。

关键词：微细气泡；计量；标准化；挑战

参考文献

[1] 李兆军 杜浩. 我国微细气泡技术发展综述[J]. 过程工程学报, 2017, 17(4): 655-663.

Fine bubble technology and its challenges to the development of metrology and standardization

Zhaojun Li[1,*], Wenge Zhang [2]

[1]Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, 1st, Beierjie, Zhongguancun, Beijing, 100190

[2]National Institut of Metrology, China, 18, Beisanhuandonglu, Chaoyang District, Beijing, 100029

*Email: zjli@ipe.ac.cn

The development of fine bubble technology in China has a history of many years. In the 1970s, Professor Chen Banglin used fine bubble technology to extract kilogram level ammonium uranate from seawater, and won the National Science Conference Award in 1978. In recent years, with the establishment of the Micro/Nano Bubble Committee of the Chinese Society of Particuology and the National Technical Committee 584 on Fine Bubble Technology of Standardization Administration of China, the fine bubble technology has developed rapidly and has been widely applied in multiple fields.

According to the definition of the International Organization for Standardization Technical Committee on Microbubbles (ISO/TC281) (see Figure 1), bubbles with a particle size less than 100 μ m are called fine bubbles, bubbles with a particle size less than 1 μ m are called ultrafine bubbles, and bubbles with a particle size ranging from 1 μ m to 100 μ m are called

The principles of fine bubble generation and its various application fields was reported in the presentation.

However, the development of any industry requires three supports: technology, standards, and metrology. Academic research aims to ensure independence, form unique insights, and promote the development of proprietary technologies; The standards are to reach consensus through negotiation on certain issues and promote the large-scale application of technology; Metrology is the activity of ensuring the accuracy, consistency, validity, and reliability of measurement results, characterized by accuracy, consistency, traceability, and legality. The result is complete uniformity, which can promote the cross application of various technologies and equipment around the world, and thus form a global technological unity.

In reality, the application of fine bubble technology in China and even the world is leading the way, but the current standardization work only stays at the understanding and application of basic concepts, and has just involved the application of some measurement technologies; The metrological work related to microbubble technology is almost in its primitive state. So far, the team led by Professor Luo Guangsheng from Tsinghua University has developed various bubble samples for measuring fine bubbles as shown in Figure 2.

The rapid development of fine bubble technology and its application fields poses a huge challenge to its standardization and metrological work, and we must catch up.

Keywords: Fine bubble, Standardization Metrology,Challenges.

References

[43]Zhaojun LI Hao DU. Review of the Development of Fine Bubble Technology in China[J]. Chin. J. Process Eng., 2017, 17(4): 655-663.

报告人简介：

全国微细气泡技术标准化技术委员会(SAC/TC584)副主任委员兼秘书长
ISO/TC281 fine bubble technology, 学习工作组召集人，第一工作组副召集人
全国颗粒标准化分技术委员会（SAC/TC168SC1）主任委员
中国科学院过程工程研究所 退休
附：报告人不是学生

生物气溶胶测量技术与测量仪器计量和标准化

李劲松 医学博士/教授
原军事医学科学院

摘要

生物气溶胶是大气环境中的重要组成成分，对维持地球微生物生态具有重要的意义，同时对生命健康的影响也具有极大的影响。生物气溶胶研究的重要内容包括生物气溶胶的生物活性成分构成、生物气溶胶有效成分含量测定、生物气溶胶粒径大小测量、生物气溶胶危害性、生物气溶胶与环境的相互作用等五个方面。其中，生物气溶胶有效成分含量测定和生物气溶胶粒径大小测量是生物气溶胶研究的基础，经过 100 多年发展，虽然已经建立了多种生物气溶胶的测量技术，研发了多种测量仪器。但是，由于缺乏有效的测量仪器的计量方法、测量仪器的标准化，使得大量的测量数据无法比较，极大地降低了已获得的生物气溶胶数据的真实性和可用性。因此，在颗粒测量和计量研究领域，应研究和建立生物气溶胶测量仪器的计量方法和标准，研究制定生物气溶胶测量仪器的标准。

报告人简介：

李劲松　军事医学科学院 研究员

污染源颗粒物监测进展

陈仲辉

青岛崂应海纳光电环保集团有限公司，青岛市高新区河东路 379 号，266109

*Email: 2782336927@qq.com

摘要正文：基于β射线原理，设计开发了便携式直读烟尘检测仪，极大的缩短了污染源颗粒物浓度测量的时间，测量范围为（0.1~50）mg/m3，检出限能达到0.1mg/m³，测量示值误差不超过±15%，利用标准粉尘箱和标准膜片，开展了直读烟尘检测仪的校准研究。

关键词：颗粒物；β射线；校准

参考文献

[1] DB 37/ T 3785-2019 固定污染源废气 低浓度颗粒物的测定 β射线法.

[2] 烟尘直读测试仪校准规范

[3]GB/T16157-1996 固定污染源排气中颗粒物测定与气态污染物采样方法.

[4] HJ 836-2017 固定污染源废气 低浓度颗粒物的测定 重量法.

[5]DB 21/T 3270-2020 固定污染源废气 低浓度颗粒物的测定 β射线法.

[6]DB 63/T 1873-2020 固定污染源废气 低浓度颗粒物的测定 β射线法.

[7]DB 36/T 1386-2021 固定污染源废气 低浓度颗粒物的测定 β射线法.

报告人简介：

陈仲辉，高级工程师，青岛崂应海纳光电环保集团有限公司 部门经理，主要负责研发管理和标准的制修订工作，参与标准制修订二十余项。

附：报告人不是学生

Performance of methods for the generation of monodisperse calibration aerosols

D. Göhler[1], L. Hillemann[1], Lukas Oeser[1], K. Oelschlägel, Zongyong Zou[2,*]

[1] Topas GmbH, Dresden, DE - 01237, Germany

[2] Beijing Aero-Tech Co. Ltd., Beijing, CN - 100068, China

*david.zou@aerosol-technology.com.cn

Monodisperse aerosols are a special kind of artificial generated aerosols that provide properties being very useful for various calibration, validation and testing purposes.

The term “monodisperse”, which is not a synonym for “monomodal” (i.e., single mode size distribution), addresses the width of the particle size distribution. The width of a particle size distribution can be described for instance by the standard deviation (σ_{ln}) or the geometric standard deviation (σ_{ln}) of the size distribution. With regard to the size distribution width, aerosols can be categorised according to VDI 3491-1:1980 as:

- monodisperse ($\sigma_{ln} < 1.15$),
- quasi monodisperse ($1.15 \leq \sigma_{ln} \leq 1.5$) and
- polydisperse ($\sigma_{ln} > 1.5$).

Due to the very narrow size distribution width of monodisperse aerosols, the shift between number-weighted mean diameter ($x_{mean,0}$) and volume-weighted mean diameter ($x_{mean,3}$) and vice versa is less than 10 %, i.e. one can assume simplified that $x_{mean,0} \approx x_{mean,3}$. In contrast, the mean diameter shift in the case of polydisperse size distributions is larger than 100%.

Monodisperse aerosols can be generated directly (e.g. by heterogeneous condensation) or indirectly by band-pass separation (via electrostatic or aerodynamic classifying) from polydisperse or quasi-monodisperse aerosols, which are previously formed by atomization, wave transmission or gas-phase reactions. All of the mentioned methods differ i.a. in kind of aerosol substance, charge state, size range and particle production rate. Despite daily use of single methods in the field of applied aerosol technologies, a comparative overview on the performance of these methods is missing.

The presentation will give a deeper insight in the sub-speciality of monodisperse aerosol generation by discussing functional principles, performance and limitations of six selected methods. These methods are:

- aerosolisation and subsequent drying of suspensions containing reference particles by operating a COLLISON type (May 1975) atomizer,
- aerosolisation and subsequent drying of suspensions containing reference particles by operating an electrospray aerosol generator (Chen et al. 1995),
- heterogeneous condensation in a SINCLAIR-LA MER type (Sinclair & La Mer 1949, Peters & Altmann 1993) aerosol generator,
- liquid jet decay in a vibrating orifice aerosol generator (Duan et al. 2016) with subsequent drying
- electrostatic classifying (DMA 3082, TSI Inc., USA) of aerosols (Kuntson & Whitby 1975) generated by COLLISON type atomizers,
- aerodynamic classifying of aerosols (Payne et al. 2023) generated by COLLISON type atomizers.

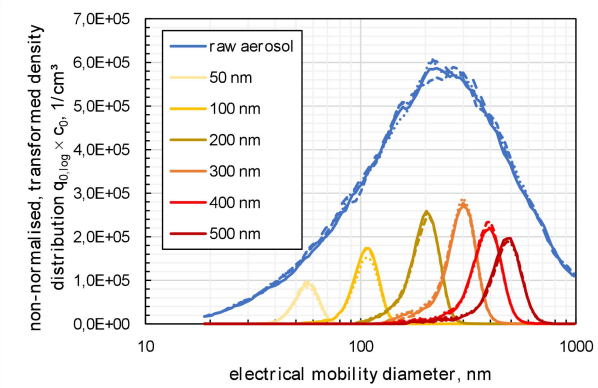


Figure 1. Particle size distributions of a raw polydisperse aerosol (made of DEHS droplets) and of aerodynamic classified monodisperse calibration aerosols

Keywords: monodisperse aerosols, reference particles, heterogeneous condensation, vibrating orifice, electrospray, electrostatic/aerodynamic classifying.

References

[1] Chen DR, Pui DY, Kaufman SL. J. Aerosol Sci. 26 (1995) 6, 963-977. doi:10.1016/0021-8502(95)00027-A

[2] Duan H, Romay FJ, Li C, Naqwi A, Deng W, Liu BYH. Aerosol Sci. Technol. 50 (2016) 1, 17-25. doi:10.1080/02786826.2015.1123213

[3] Knutson E, Whitby K (1975) J. Aerosol Sci., 6, 443-451. doi:10.1016/0021-8502(75)90060-9

[4] May K (1973) J. Aerosol Sci., 4, 3, 235 - 243. doi: 10.1016/0021-8502(73)90006-2

[5] Payne SD, Johnson TJ, Symonds JP (2023). Aerosol Air Qual. Res., 23, 6, 230008. doi: 10.4209/aaqr.230008

[6] Peters C, Altmann J (1993) J. Aerosol Med., 6, 4, 307-315. doi: 10.1089/jam.1993.6.307

[7] Sinclair D, La Mer, VK (1949) Chem. Rev., 44, 2, 245-267. doi: 10.1021/cr60138a001

报告人简介：

Daniel Göhler，德国 TOPAS GmbH，博士。

附：报告人不是学生

新一代药用撞击器采集效率的检测与影响因素研究

田莹，刘佳琪，闫续，冯端，张国城*

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：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（＞0.5μm）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。

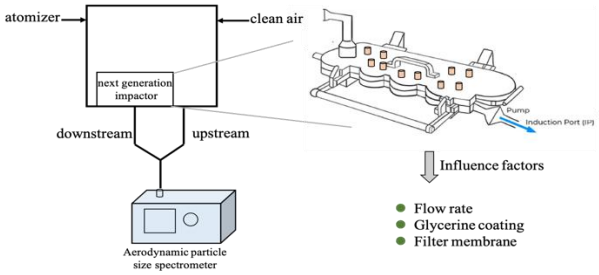


Fig. 1 Experimental frame diagram

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] 严翠霞, 王麟达, 陈桂良. 新一代药用撞击器及其应用[J].药物分析杂志, 2009, 29(09):1572-1578.

[3] Mitchell J P，Nagel M W, et al. Cascade impactors for the size characterization of aerosols from medical inhalers: theirs uses and limitations[J]. *Journal of Aerosol Medicine*, 2003, 16(4):341.

[4] Mohamed E A. Aerodynamic characteristics of nebulized terbutaline sulphate using the andersen cascade impactor compared to the next generation impactor[J]. *Pharmaceutical Development and Technology*, 2011, 16(2): 137–145

[5] 杨资伟, 杨阳, 李晗, 等. 两种撞击器测定自制吸入粉雾剂体外沉积性质的对比研究[J]. 国际药学研究杂志, 2013, 40(04): 475-480.

[6] 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.

[7] 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.

[8] 刘佳琪，张国城，吴丹，等. PM10 切割器捕集效率评价装置及方法研究[J]. 环境科学学报, 2021, 41: 2340-2346.

Study on detection and influencing factors of acquisition efficiency of a new generation medical impactor

TIAN Ying, LIU Jiaqi, WU Dan, FENG Duan, ZHANG Guocheng*
(Beijing Institute of Metrology/National Quality Supervision and Inspection Center for Ecological & Environmental Products, Beijing 100029, China)

The new generation impactor (NGI) is used to evaluate the aerodynamic particle size and particle size distribution of atomized pharmaceutical preparations, which is of great significance for optimizing the inhalation and adhesion site of pharmaceutical preparations and the therapeutic effect, and has been widely used in the field of pharmaceutical preparations detection. However, the size accuracy and number of sieve were the only way to evaluate the performance of NGI due to the lack of standards or testing procedures, which is far away from scientific and systematic. In this study, by adding upstream and downstream sampling channels at all levels, the NGI was reformed, and an evaluation method of sampling physical efficiency based on aerodynamic particle size spectrometer was established to realize the key performance evaluation of this new type of equipment. The study shows that due to the influence of aerodynamic detection limit (> 0.5μm), a method that can measure the number of smaller particles can be further developed to evaluate the collection efficiency of high-level sampling samples, so as to further improve the evaluation method. At the same time, the influence of inlet flow rate and filter membrane on cubed particle size and the influence of glycerin coating on physical sampling efficiency were explored, which has important reference significance for NGI equipment selection and instrument quality improvement.

Keywords: new generation impactor; detection and evaluation; physical collection efficiency; glycerine coating; filter membrane

References

[1] Chen G L, Hou H M. Critical evaluation of determination methods of the particle size of aerosols[J]. *Chinese Journal of Pharmaceuticals*, 2007(03):194-199.

[2] Yan C X, Wang L D, Chen G L. Next generation pharmaceutical impactor and its application[J]. *Chinese Journal of Pharmaceutical Analysis,* 2009, 29(09):1572-1578

[3] Mitchell J P，Nagel M W, et al. Cascade impactors for the size characterization of aerosols from medical inhalers: theirs uses and limitations[J]. *Journal of Aerosol Medicine*, 2003, 16(4):341.

[4] Mohamed E A. Aerodynamic characteristics of nebulized terbutaline sulphate using the andersen cascade impactor compared to the next generation impactor[J]. *Pharmaceutical Development and Technology*, 2011, 16(2): 137–145

[5] Yang Z W, Yang Y, Li H, et al. Characters of dry powder inhaler in vitro deposition with twin-stage impactor and next generation pharmaceutical impactor: a comparative study[J]. *Journal of International Pharmaceutical Research*, 2013, 40(04): 475-480.

[6] Xu Y, Liang C, Xie Y, et al. Comparison of two methods for determination of budesonide aerosol droplet distribution. *Chinese Journal of Pharmaceuticals*, 2013, 44(09): 921-924.

[7] Wang X Y, Gao L, Zhou Y, et al. Comparison of aerodynamic particle size distribution of salmeterol and fluticasone propionate powder for inhalation with the three impactors[J]. *Chinese Journal of Pharmaceutical Analysis***,** 2020, 40(01):186-197.

[8] Liu J Q, Zhang G C, Wu D, et al. Research on the efficiency evaluation device and method of PM10cutter[J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2021, 41: 2340-2346.

报告人/墙报展示人简介：

田　莹（1990-），女，北京市计量检测科学研究院工程师，主要研究颗粒物相关环境监测仪器。

Email：tiany@bjjl.cn

基于喷墨气溶胶发生器的荧光校准粒子生成技术研究

郭黎旭[1]，刘俊杰[2,*]，刘悦[2]，任军[1]，肖骥[2]

[1]太原理工大学（化学工程与技术学院），太原，030024

[2]中国计量科学研究院，北京，100029

*Email: liujj@nim.ac.cn

摘要正文：由于生物气溶胶对人类健康的持续影响，准确的测量对于及时预警和有效预防流行病至关重要。近年来，研究人员一直致力于开发和校准在线监测仪器。然而，目前仍缺乏适合校准的实验室生成的标准气溶胶样本。传统技术获得的气溶胶样品的粒度和荧光特性在很大程度上取决于所用标准颗粒的参数。因此，在本研究中，我们利用自主研发的喷墨气溶胶发生器（H-IJAG）实现了单分散气溶胶标准粒子的可控生成。气溶胶粒度谱仪（APSS，TOPAS 323）被用作颗粒检测器。使用 Image-J 软件测量同一图像中液滴的投影面积，从而计算出液滴的直径。实验结果表明，在标准化喷墨参数下，H-IJAG 表现出良好的可靠性和再现性，生成的固体颗粒在 (0.4~15) μm 范围内。为了更好地模拟环境生物气溶胶的激光诱导荧光发射特性，选择了色氨酸（Trp）和7-羟基香豆素-4-乙酸（7-HCA）作为实验室生成的气溶胶样品的溶质，它们都是已知的生物荧光材料。根据不确定性传播定律，H-IJAG 法测得的 Trp 和 7-HCA 固体颗粒的体积当量直径的相对不确定性为 0.42%，而 H-IJAG 法测得的 Trp 和 7-HCA 固体颗粒的粒数浓度的相对不确定性为 1.4%。这种优化的 IJAG 技术为生物气溶胶监测仪的精确校准提供了一种可行的解决方案。

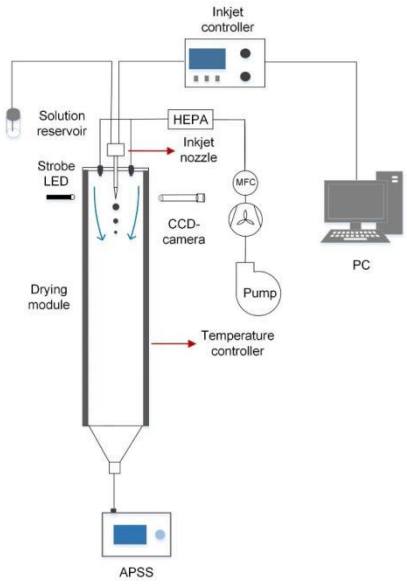


Fig. 1 Diagram of developed Inkjet aerosol generator

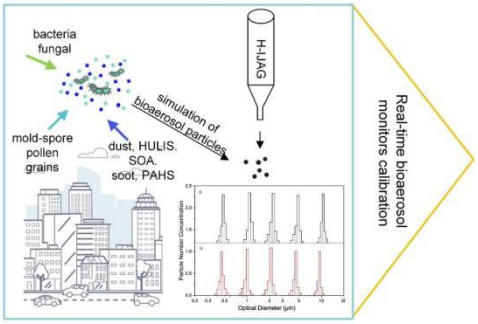


Fig. 2 Graphical abstract

关键词：喷墨发生器；生物气溶胶；荧光微球；色氨酸

参考文献

[1] Fröhlich-Nowoisky, J., Kampf, C.J., Weber, B., Huffman, J.A., Pöhlker, C., Andreae, M.O., Lang-Yona, N., Burrows, S.M., Gunthe, S.S., Elbert, W., Su, H., Hoor, P., Thines, E., Hoffmann, T., Després, V.R., Pöschl, U. Bioaerosols in the Earth system: Climate, health, and ecosystem interactions. Atmospheric Research. 2016, 182: 346-376.

[2] Healy, D.A., O'Connor, D.J., Sodeau, J.R. Measurement of the particle counting efficiency of the “Waveband Integrated Bioaerosol Sensor” model number 4 (WIBS-4). Journal of Aerosol Science. 2012, 47: 94-99.

[3] Iida, K., Ikeda, T., Minakami, T., Sakurai, H. Verifying the viable particle counts of biofluorescent particle counters by using inkjet aerosol generators. Aerosol Science and Technology.2024, 58: 554-568.

[4] Iida, K., Sakurai, H. Counting efficiency evaluation of optical particle counters in micrometer range by using an inkjet aerosol generator. Aerosol Science and Technology. 2018, 52: 1156-1166.

[5] Iida, K., Sakurai, H., Auderset, K., Vasilatou, K. Using an inkjet aerosol generator to study particle bounce in optical particle counters. Aerosol Science and Technology. 2021, 55: 1165-1182.

[6] Iida, K., Sakurai, H., Saito, K., Ehara, K. Inkjet Aerosol Generator as Monodisperse Particle Number Standard. Aerosol Science and Technology.2014,48: 789-802.

[7] Kesavan, J.S., Bottiger, J.R., Schepers, D.R., Mcfarland, A.R. Comparison of Particle Number Counts Measured with an Ink Jet Aerosol Generator and an Aerodynamic Particle Sizer. Aerosol Science and Technology.2014, 48: 219-227.

[8] Könemann, T., Savage, N.J., Huffman, J.A., Pöhlker, C. Characterization of steady-state fluorescence properties of polystyrene latex spheres using off- and online spectroscopic methods. Atmospheric Measurement Techniques. 2018, 11: 3987-4003.

[9] Kwon, K.-S., Kim, W. A waveform design method for high-speed inkjet printing based on self-sensing measurement. Sensors and Actuators, 2007, A 140 75-83.

[10] Pöhlker, C., Huffman, J.A., Pöschl, U. Autofluorescence of atmospheric bioaerosols – fluorescent biomolecules and potential interferences. Atmospheric Measurement Techniques. 2012, 5: 37-71.

[11] Zhang, M., Klimach, T., Ma, N., Könemann, T., Pöhlker, C., Wang, Z., Kuhn, U., Scheck, N., Pöschl, U., Su, H., Cheng, Y. Size-Resolved Single-Particle Fluorescence Spectrometer for Real-Time Analysis of Bioaerosols: Laboratory Evaluation and Atmospheric Measurements. Environmental Science and Ecotechnology. 2019, 53: 13257-13264.

报告人简介：

郭黎旭(1996-)，四川眉山人，太原理工大学博士研究生，现联合培养于中国计量科学研究院，研究方向为颗粒计量和生物气溶胶。

附：报告人是学生

激光散射原理的颗粒物测试标准及仪器计量规范现状及展望

王婷 [1,*]

[1]青岛市标准化研究院，青岛市崂山区科苑纬四路 77 号，266000

*Email: 249295196@qq.com

摘要：

激光散射原理的颗粒物测试在环境监测、工业生产、医疗卫生等诸多领域应用广泛，光散射理论中激光散射法是利用单色性好的激光作为发射光源，在 Mie 散射理论和 Lambert-Beer 定理基础上通过测量激光发射前后的光强比值来计算颗粒物浓度。本文对现阶段关于此原理的颗粒物测试标准及仪器计量规范做了梳理，其中包括国际标准、国家标准、地方标准、团体标准、学协会标准以及相关计量检定规程、校准规范及型式评价大纲。 如《公共场所空气中可吸入颗粒物（PM_{10}）测定方法—光散射法》（WS/T 206-2001）标准，适用于公共场所空气中 PM_{10} 的测定。如《天然气 颗粒物的测定 第一部分：用光学法测定粒径分布》（GB43502.1-2023）,适用于天然气输配场站各系统颗粒物粒径与分布的测定。对于工业生产过程中产生的粉尘等颗粒物监测，不同行业可能根据自身特点制定相关标准，对作业场所的粉尘浓度粒径分布有明确规定和检测方法要求。现行的国家或行业标准对基于激光散射原理的颗粒物测试仪器的计量校准也提出了要求，《气溶胶光度计校准规范》（JJF1800-2020）等计量规范通常采用标准粒子法或重量法，明确了校准周期，具体依据仪器使用频率和工作环境而定，规定了误差要求，以保证测试结果的准确性和可靠性。

随着激光散射技术的日益成熟，相关技术的标准可能会涵盖更多的应用场景和行业领域，如新兴的纳米颗粒物检测标准、室内空气质量细化标准等，以满足多样化的监测需求。如针对不同粒径范围的颗粒物，未来可能会制定更精准的浓度限值和检测方法标准，以更好地反映其对环境和人体健康的影响。在计量规范方面也将不断完善，对激光散射原理仪器的各项性能指标（如光源稳定性、探测器灵敏度、信号处理准确性等）的要求会进一步提高，以确保仪器在不同环境条件下都能保持高精度的测量。校准方法可能会更加多样化和智能化，对新型颗粒物测试仪器（如具有更高分辨率、更快检测速度、更强抗干扰能力的仪器）的计量校准提出明确要求，推动测量技术的应用和发展。

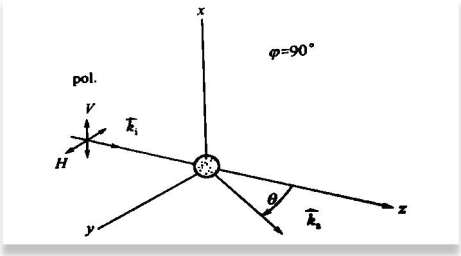


Fig.1 Typical light scattering diagram

关键词：颗粒物测试方法；颗粒物测量仪器；标准；计量规范；激光散射

参考文献

[1] 周瑞鸿. 基于激光全散射法的纤维颗粒物浓度测量研究[D]. 杭州：浙江理工大学, 2022.

[2] 国家质量监督检验检疫总局. 气溶胶光度计校准规范: JJF1800-2020[S]. 北京: 中国质检出版社, 2020.

[3] 国家质量监督检验检疫总局. 粉尘浓度测量仪检定规程: JJG846-2015[S]. 北京: 中国质检出版社, 2015.

[4] 国家质量监督检验检疫总局. 动态光散射粒度分析仪检定规程: JJG1104-2015[S]. 北京: 中国质检出版社, 2015.

[5] 国家质量监督检验检疫总局. 天然气 颗粒物的测定 第一部分：用光学法测定粒径分布 GB/T43502.1-2023[S]. 北京: 中国标准出版社.

报告人简介：

王婷，青岛市标准化研究院高级工程师，主要研究方向：化学、环境颗粒物标准及计量技术研究。

附：报告人不是学生

药品注射剂中可见颗粒检测设备的验证方法

窦晓亮[1,*]，华放[1]，岳凯，高晴

[1]北京海岸鸿蒙标准物质技术有限责任公司，北京市大兴区经济开发区盛坊路 1 号 7 号楼，102627

*Email: 18801185975@163.com

摘要：

可见异物检查作为《中国药典》规定的注射剂、眼用液体制剂和无菌原料必检项目；是药品出厂前对生产全过程质量控制的重要评价。目前自动化设备检查已经越来越普遍，带来的问题的是自动检查设备没有相关的标准物质证明其检出能力。本文介绍了一种单颗粒标准物质用作可见异物自动检查设备的检出能力确证；并给出定值方法和不确定度评定。与传统颗粒标准物质相比在特征量值中增加了检出概率值用于工作转移法。该标准物质经过国内药厂与药机制造商联合实验，使用效果良好，适用于工作转移法评估设备的检出效能。工作转移法的大规模实验在国内外尚属首次，在实验过程中得到了很多与USP和国际通常使用的工作转移法结论不一致的结果：如检出效率与USP的描述不一致，疑似样品检出概率不符合正态分布等。

Fig. 1 The Application of the Monte Carlo Method in the Uncertainty Assessment of Wide Distribution Particle Reference Materials

关键词：标准物质；可见异物；工作转移法

参考文献

[5] The United States Pharmacopoeia,(1790) VISUAL INSPECTION OF INIECTIONS

[6] Knapp J Z , Kushner H K .Generalized methodology for evaluation of parenteral inspection procedures.[J].Journal of the Parenteral Drug Association, 1980, 34(1):14.

[7] FDA Guidance Documents, Inspection of Injectable Products for Visible Particulates Guidance for Industry

报告人简介：

窦晓亮（1981-），博士，北京海岸鸿蒙标准物质技术有限责任公司副总经理，新材料研发中心主任，主要从事颗粒标准物质和化学标准物质的研发，以及相关标准的制订。全国标准物质专家库专家，全国颗粒表征与分检及筛网标准化技术委员会委员；全国纳米技术标准化技术委员会纳米检测分技术委员会委员；中国颗粒学会青年理事。参与设计研发国家级标准物质 300 余种。

附：报告人不是学生

气溶胶发生、检测、混匀技术在计量校准中的应用

郭亮[1,*]，范林[1]，王乐[1]

[1]青岛众瑞智能仪器股份有限公司，青岛市月河路11号，266108

*Email: guoliang_mail@163.com

摘要：

气溶胶受组分、粒径分布等因素影响，其物理、化学性能差异较大，其发生、检测、混匀技术的实现方法差异较大，本报告介绍了几种常见气溶胶介质的发生、检测、混匀技术，旨在将类似方法推广到相关类似的不同领域，重点是在计量校准领域的应用。

本报告着重介绍了当下比较热点的三项气溶胶相关技术，其中生物气溶胶因其独特的生物特性，在发生及混匀方面需重点考虑微生物活性保持问题，这也是开展相关设备计量校准时的关键影响因素；针对目前国内外的生物气溶胶实时LIF检测技术，自主研制了一套具备三路激发光源及八路PMT检测的荧光光谱检测平台，重点研究了几种常见微生物在不同浓度气溶胶状态下的荧光光谱特性，用来探索不同微生物的荧光特性，为生物气溶胶的实时监测提供参考；半导体行业对生产环境中0.1um粒子数浓度监测是当下急需解决的问题，本报告介绍了我司具有自主知识产权的光学传感器技术路线，通过自研泵浦源激光器、增强型光路、信号处理单元及软件算法，实现满足ISO 21501-4:2018国际标准0.1um粒子计数器的自主国产化。

关键词：生物气溶胶；0.1um粒子计数器；气溶胶发生；气溶胶计量

报告人简介：

郭亮，高级工程师，现任青岛众亚科技有限公司总经理，全国颗粒表征与筛网标准化技术委员会颗粒分技术委员会委员（TC168/SC1），全国生物气溶胶标准化工作组副组长（TC168/SC1/WG1），全国生物计量技术委员会委员（MTC20），主导研发仪器仪表设备20余款，其中两项产品分别参与“国家自然科学基金项目”和科技部“十三五”重大专项，主导授权发明专利5项，实用新型专利20余项。参与省部级科研项目3项，行业及地方标准5项。

附：报告人不是学生

颗粒物的发生与测量应用分享

伊方杰

上海瑞辐特仪器仪表有限公司，上海市闵行区新龙路 500 弄虹桥万创中心 T2-906，邮编 201101

* jeff@rft-instrument.com

摘要：颗粒物粒径分布的测量是环境监测、材料研究、计量等多个领域的重要环节。测量方法多样，包括重量法、光散射法、电迁移率法、光度测定法、粒子计算法等。其中，光散射法因其高效、准确的特点，在亚微米级颗粒物测量中得到了广泛应用， 电迁移率法在纳米级颗粒测量中得到广泛应用。

为实时同步测量颗粒物的宽范围粒径分布状态，德国Palas公司设计了一套适用于4nm至 40μm的气溶胶表征装置，通过由扫描电迁移率粒径谱仪和单颗粒光散射粒径谱仪的有机结合解决了从纳米级颗粒到微米级颗粒的连续实时测量问题。

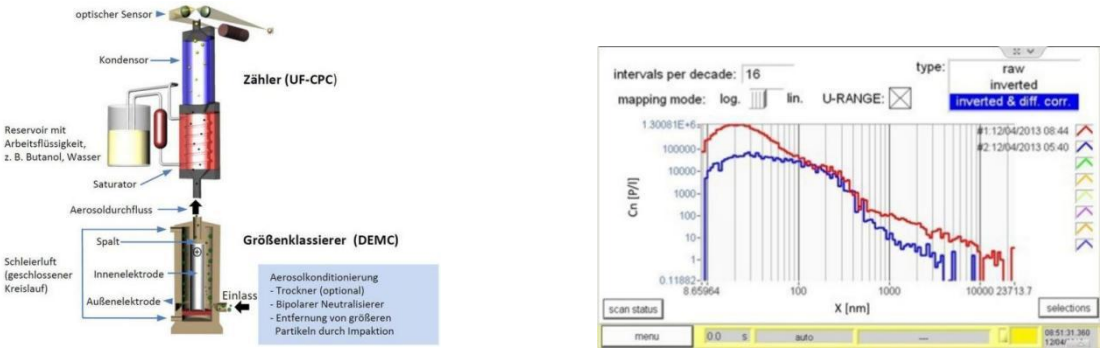


Fig. 1 A real-time wide particle size spectrum analysis device

关键词：气溶胶粒径分布；宽粒径气溶胶粒径分布；颗粒物测量

Particle Generation and Measurement Application Sharing

Author (Fang jie Yi)[1],

[1] Shanghai RFT Instrument Co., Ltd, T2-906, Hongqiao Wanchuang Centre, Lane 500, Xinlong Road, Minhang District, Shanghai, 201101, P.R. China

* jyi@palas.com.cn

Abstract: Measuring the size distribution of particles is an important part of many fields such as environmental monitoring, materials research and metrology. There are various measurement methods, including gravimetric method, light scattering method, electric mobility method, photometric method and particle calculation method. Among them, the light scattering method has been widely used in submicron particle measurements due to its high efficiency and accuracy, and the electrical mobility method has been widely used in nanoscale particle measurements.

In order to measure the wide range of particle size distributions in real time, Palas (Germany) developed a series of aerosol characterisation devices for 4 nm to 40 µm, and solved the problem of continuous and real time measurements from nanoscale particles to micrometer particles by combining the scanning electric mobility spectrometer and the single particle light scattering particle size spectrometer.

Keywords: Aerosol Particle Size Distribution; Wide Aerosol Particle Size Distribution; Particle Measurement

报告人简介：

伊方杰,男,(1983-),

任职于帕刺斯仪器（上海）有限公司

基于光散射技术的颗粒物监测及应用解决方案

肖进华[1]

[1]四方光电股份有限公司，湖北省武汉市东湖新技术开发区凤凰产业园凤凰园三路 3 号，430205

*jinhua.xiao@gassensor.com.cn

摘要： 随着工业化的加速、城市化的推进和机动车保有量的增加，人为排放的颗粒物数量显著上升，对人类健康和自然环境构带来了危害。在此背景下，颗粒物监测市场呈现出稳定增长的趋势，预计户外监测领域将占据市更多市场份额。四方光电股份有限公司是一家从事智能气体传感器和高端气体分析仪器的科创板上市企业，已经形成了包括光学（红外、紫外、光散射、激光拉曼）、超声波、电化学等原理的气体传感技术平台，产品广泛应用于暖通空调、工业及安全、汽车电子、医疗健康、智慧计量、科学仪器、低碳热工等领域。公司通过其领先的光散射技术、自动粒子识别技术和鞘气保护结构，结合其规模化的生产能力，为洁净室、室外环境和室内空气颗粒物监测提供了精准可靠的解决方案，在全球市场中占据领先地位。

关键词：颗粒物；光散射；自动粒子识别；鞘气保护

报告人简介：

肖进华，四方光电股份有限公司副总经理、高级工程师。

毕业于华中科技大学热能工程专业，并获硕士学位，在气体传感器和分析仪器领域从业近二十年，围绕气体传感器在室内、室外颗粒物监测和空气品质监测等方向的应用具有丰富的行业知识和实践经验。

附：报告人不是学生

不同应用场景下颗粒物传感器的性能要求

周勇

南昌攀藤科技有限公司，北京市顺义区后沙峪绿地启航国际北区九号楼 602，101318

Email: zhouyong@plantower.com

摘要正文：基于光散射原理的颗粒物传感器，广泛应用于环保，工业，医疗，汽车，消费电子等领域，应用场景丰富，对传感器的性能要求也不尽相同。本报告从数据精度，粒径范围，量程范围，环境可靠性等方面详细介绍不同场景下颗粒物传感器的性能要求及应用实例。

关键词：光散射原理，颗粒物传感器，多场景

报告人简介：

攀藤科技联合创始人，总工程师，20 多年自动化及传感器领域研发和管理经验

附：报告人不是学生

颗粒物浓度测量仪溯源装置的应用需求和测试方法研究

刘巍 [1,*]

[1] 青岛市计量技术研究院，青岛市崂山区科苑纬四路 77 号，266000

*Email: lwlizzie@163.com

摘要：在环境空气颗粒物测量中，颗粒物浓度测量仪是应用非常广泛的一类仪器，针对这类仪器测量准确性的评价，则需要采用溯源装置和相应的溯源方法，因此推动了颗粒物浓度测量仪溯源装置的功能和性能参数以及相应的测试方法的评价需求。对颗粒物浓度测量仪溯源过程进行分析，关键在于如何提供已知颗粒物浓度的测量环境，且此环境下的颗粒物浓度的测试精度或者颗粒物浓度确定的方法要高于被测颗粒物浓度测量仪。目前通常主要采用两种方法实现：一是采用颗粒物发生器、混匀装置和高精度的颗粒物浓度测量仪，确定待测环境下的颗粒物浓度；另外一种方法是采用发生稳定可控的颗粒物浓度发生器，所发生的颗粒物的浓度可控可测。从装置实现上第一种方法的应用主要和三类装置相关，而第二种方法仅与颗粒物发生器相关，但是结合颗粒物浓度测量仪的溯源过程，存在其他诸多的影响因素，如溯源过程中所采用装置的稳定性、可靠性，即影响待测颗粒物浓度的均匀和稳定性等，都决定了校准过程测量结果的不确定度。同时颗粒物浓度测量仪的溯源不仅仅与装置相关，同时与溯源方法密切相关，采用与较高测量精度的颗粒物浓度测量仪进行比较或者是直接测量颗粒物浓度，不同的测试方法引入的测量不确定度的分量是不一样的，各有优缺点，需要综合评估，在测试装置固定的情况下测量方法的选择是提高测试精度的方法之一。结合颗粒物浓度测量仪溯源装置的应用需求和测试方法，针对国内外相应的测量装置进行分析研究，分析溯源过程中的针对溯源装置进行测量和参数评价的方法，以及溯源方法中所存在的影响测量结果的不确定度分量，为进一步选择科学合理评价方案，为提高颗粒物浓度测量仪溯源过程中测量结果的稳定可靠提供保障。

Fig.1 Calibration devices for particulate matter measuring instrument

关键词：颗粒；溯源；测试方法；不确定度；颗粒物浓度测量仪

参考文献

[1] 邹亚雄, 宋述古, 刘巍,等. 气溶胶发生混匀装置的研究[J]. 工业计量, 2021，31(4):33-36.

[2] 阮兵,李兴华,谢岩,等.PM_1切割器性能测试系统的搭建与应用[J].环境科学学报,2018,38(05):1797-1803.

[3] 王婷，刘巍，张明等.切割器切割特性实验装置的功能性验证方法探讨[J].计量科学与技术，2022（1）：41-45.

[4] 张文阁，刘巍，刘俊杰，等. 环境空气颗粒物质量浓度计量溯源体系的建立[J]. 计量科学与技术，2022, 66(10): 10-15.

[5] 阮兵,李兴华,谢岩,等.PM_(2.5)旋风切割器的性能测试与模拟[J].环境科学学报,2018,38(07):2811-2817.

报告人简介：

刘巍，青岛市计量技术研究院正高级工程师，主要研究方向：化学、环境颗粒物计量技术研究。

附：报告人不是学生

$PM_{2.5}$监测仪检测用国家一级标准物质的研制

张文阁

中国计量科学研究院，北京，100029

*Email: zhangeg@nim.ac.cn

摘要：本文介绍了 GBW13642GBW13649 $PM_{2.5}$ 监测仪检测用国家一级标准物质的研制方法。用球形度好的单分散交联聚苯乙烯微球作为标准物质候选物，采用可溯源至国家长度基准的方法（扫描电子显微镜+图像分析法）和密度测量等方法为标准物质定值，使用经典气溶胶动力学当量直径计算公式，分析计算出其空气动力学直径。该标准物质适用于 $PM_{2.5}$ 监测仪切割特性检测校准和作为尘源用于 $PM_{2.5}$ 监测仪量值的检测与校准。

关键词：$PM_{2.5}$；标准物质；空气动力学直径；切割特性

参考文献

[1] 余学锋,于杰,王柯,等.基于证据理论的测量不确定度评定与分析［J］.计量学报,2017,38(2):252-256.

[2] 李琪,李伟,施玉书,等.248nm紫外显微镜微纳线宽校准方法的研究［J］.计量学报,2015,36(1):6-9.

报告人简介：

张文阁：现任中国计量科学研究院环境计量中心颗粒室主任，高级工程师。负责起草了 JJG1659-2019《$PM_{2.5}$质量浓度测量仪校准规范》、JJG 680-2021《烟尘采样器检定规程》等国家计量技术法规 10 多部；负责和参与起草 GB/T 39193-2020《环境空气颗粒物质量浓度测定重量法》等国家标准 10 余部；负责撰写《计量学辞典》中颗粒计量部分；参与 HJ 653—2021 环境空气颗粒物(PM_{10}和$PM_{2.5}$)连续自动监测系统技术要求及检测方法等多部行业标准和法规的制订；发表论文 40 多篇，获得发明专利多项。是 TC168 全国颗粒表征与分检及筛网标准化技术委员会副主任委员、TC584 全国全国微细气泡技术标准化技术委员会副主任委员、TC168/SC1 全国颗粒表征与分检及筛网标准化分技术委员会委员，TC168/SC1 全国液压污染控制分技术委员会委员，中国颗粒学会测试专业委员会副主任委员，国家计量标准一级考评员、国家一级注册计量师。

附：报告人不是学生

机动车尾气超细颗粒物数浓度（PN）监测与标定技术

余同柱[1, 2]，杨义新[1, 2]，桂华侨[1, 2]，刘俊杰[3]，吉喆[4]，刘建国[1]，刘文清[1, 2]

[1] 中国科学院合肥物质科学研究院，安徽省合肥市蜀山湖路 350 号，230031

[2] 合肥综合性科学中心环境研究院，合肥蜀山经济技术开发区电商园四期 E 栋

[3] 中国计量科学研究院，北京市朝阳区北三环东路 18 号，102200

[4] 中国环境科学研究院，北京市朝阳区洼里乡大羊坊 8 号，100012

*Email: tzyu@aiofm.ac.cn

摘要：针对机动车排放的高温、高浓度超细颗粒物的测量需求，自主研发基于“对冲荷电-平板式静电分级-差分式微电流检测”方案的机动车尾气超细颗粒物数浓度（PN）监测仪，关键性能指标达到国际先进水平（粒径测量范围：23nm～2.5μm，浓度测量范围：3000～3×10^7#/cm^3（无需稀释），时间分辨率 1s），满足机动车国 V 及以上标准中新增超细颗粒物排放限值在线检测、车载 DPF/GPF 失效诊断等测试需求；同时针对 PN 监测仪标定需求，结合雾化发生、非放射源荷电、电迁移分级和微弱电流信号测量技术，开发出颗粒物数浓度（PN）监测仪标定设备（包括：颗粒物发生器、X 射线中和器、差分电迁移分级器和气溶胶静电计），满足便携式、台架式 PN 监测仪的标定。

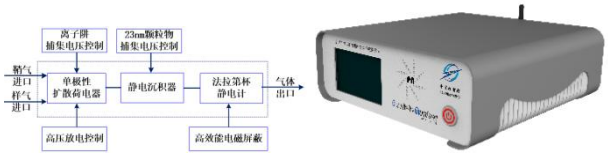


Fig. 1 Schematic and prototype of ultra-fine particle number concentration monitor for vehicle exhaust emissions

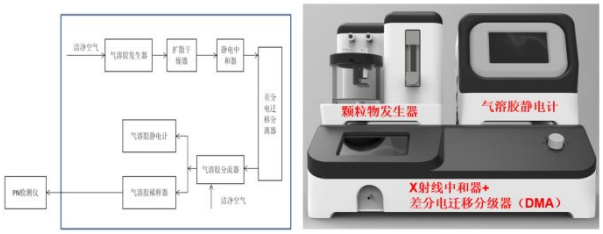


Fig. 2 Calibration scheme and prototype of particle number concentration monitor

关键词：机动车尾气；颗粒物；数浓度；标定

参考文献

[1] B. Giechaskiel, M. Maricq, L. Ntziachristos, C. Dardiotis & W. Schindler, Review of motor vehicle particulate emissions sampling and measurement: from smoke and filter mass to particle number. Journal of Aerosol Science, 2014, 67(1), 48-86.

[2] M. Fierz, C. Houle, P. Steigmeier, & H. Burtscher Design, calibration, and field performance of a miniature diffusion size classifier. Aerosol Science & Technology, 2011, 45(1), 1-10.

[3] Z. Ji, C. Guo, T. Yu, Y. Yang, H. Guo, H. Gui, S. Su, J. Wang, Y. Ding, J. Liu, Design and Evaluation of a Calibration System for Portable Motor Vehicle Emission Particle Number Detectors. Instrumentation Science & Technology, March, 2024. 1–20.

[4]康士鹏,余同柱,桂华侨,员永兴,王焕钦,刘建国. 机动车排放超细颗粒物在线监测技术研究进展[J].大气与环境光学学报, 2020,15(6):16.

报告人简介：

余同柱，博士，副研究员，2018 年博士毕业于中国科学技术大学，目前主持项目 10 余项（国家自然青年基金 1 项、国家重点研发计划子课题等），发表学术论文 10 篇（第一/通讯作者），申请发明专利 15 项（授权 6 项，PCT 专利 1 项），研发的机动车排放超细颗粒物数浓度(PN)监测仪应用于天津、唐山柴油车改造项目评估，并针对不同的应用需求，开发了不同类型的系列化机动车排放超细颗粒物数浓度监测仪产品，实现小批量应用。

附：报告人不是学生

颗粒物标准物质的研制及其在环境监测设备计量中的应用研究

闫续[1]，潘一廷[1]，刘佳琪[1]，赵汐[1]，王浩[1]，张国城[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，100029

[2]北京师范大学物理学系，北京市海淀区新街口外大街 19 号，100091

*Email: zhanggc@bjjl.cn

摘要：本文采用分散聚合法制备了粒径为3、5和7 um的3种单分散聚苯乙烯微球，并进一步以它们做种子，采用种子聚合法制备了粒径为9、12、13、15和17 um的5种单分散聚苯乙烯微球。使用扫描电子显微镜对8种微球进行形貌分析和粒径定值，结果如图1（a）所示，各种微球的球形度良好，大小均一，粒径分布的相对标准偏差均不超过2.5%。将所合成的8种单分散聚苯乙烯微球用于环境监测设备PM_{10}切割器的计量评价研究，通过雾化的方式使不同种类的微球形成浓度足够均匀的单分散颗粒物气溶胶，使用空气动力学粒径谱仪分别测量切割器上下游的颗粒物数量浓度，得出不同空气动力学粒径下的切割器捕集效率。实验结果如图1（b）所示，根据切割器捕集效率曲线可知50%切割粒径Da_{50}=9.93 um，与设备出厂时的标称值10 um吻合度很好，并且计算出的捕集效率的几何标准差σ_g分别为1.41和1.56，满足环境空气颗粒物（PM_{10}和$PM_{2.5}$）采样器技术要求及检测方法（HJ 93-2013）中规定的PM_{10}采样器的σ_g=1.5±0.1的要求。综上所述，本文研制的单分散聚苯乙烯微球在环境监测设备的计量评价中具有很好的适用性，可以满足相关行业的需求。

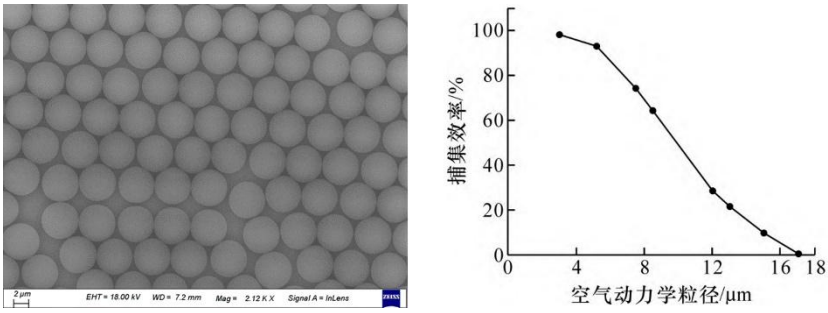


Fig. 1 (a) SEM images of 5 μm polystyrene microspheres. (b) Penetration curve of PM_{10} cutters.

关键词：颗粒物；标准物质；环境监测设备；计量学

参考文献

[1] 王东莎,刘彦军,种子溶胀法制备单分散高交联聚苯乙烯微球[J].应用化学，2007,11:1289-1294.

[2] 张荣荣,徐自力,微米级单分散性聚苯乙烯微球的制备和影响微球粒径及其分布的因素[J].石油化工，2009, 38（3）:322-328.

[3] 曹健,刘彦军,分散聚合制备大粒径单分散聚苯乙烯微球[J].大连工业大学学报，2010, 29（1）:39-42.

[4] 张力,袁桂梅,陈胜利,种子溶胀聚合法制备微米级聚苯乙烯微球[J].中国粉体技术，2011, 17（3）:18-22, 32.

[5] 王晓冬,侯杰,毛铭,多步种子溶胀法制备微米级大粒 径单分散胶体微球[J].河南理工大学学报（自然科学版），2019, 38（2）:143-148.

[6] 刘佳琪,张国城,吴丹等,PM_{10}切割器捕集效率评价装置及方法研究[J].环境科学学报，2021, 41（6）:2340-2346.

报告人简介：

闫续（1990—），博士毕业于天津大学精密仪器与光电子工程学院，现为北京市计量检测科学研究院与北京师范大学物理学系联合培养博士后，研究方向为颗粒物标准物质的研究及环境监测设备的计量评价与应用。

附：报告人不是学生

基于光散射法的粒子粒度测量仪器关键计量技术研究

肖坤坤[1]，厉龙[1]，暴海霞[1]，吴振一[1]

[1]苏州市计量测试院，苏州市吴中区文曲路69号，215128

*xiaokk@szjl.com.cn

摘要：光散射式尘埃粒子计数器（LSAPC）是利用激光散射原理来检测洁净环境中单位体积内尘埃粒子个数和粒径大小的仪器，被广泛应用于电子半导体、生物制药、精密加工、防疫站、药检所等生产企业、质量监督部门及科研机构。本次报告的内容是依据JJF 1190-2008和GB/T 29024.4-2017，通过研究该类仪器在检测、校准中遇到的问题，探讨采样流量、粒径设置误差、计数效率等关键参数的规范化和标准化，重点分析在采样流量项目的检测方法改进和检测设备优选，以及探索响应电压-粒径校准曲线合理的拟合方式，实现该类仪器量值的准确可靠。此外，通过进一步指出国内外仪器在计数效率、仪器稳定性等关键计量参数上的差别，为国产计数器的进一步改进方向提供建议和帮助。

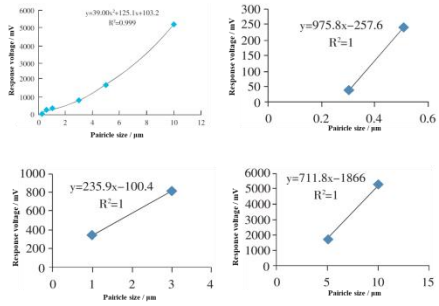


Fig. 1 Calibration curve of LSAPC: (a) polynomial fitting, (b) piecewise fitting(0.3μm~0.5μm), (c) piecewise fitting (1μm~3μm), (d) piecewise fitting (5μm~10μm).

关键词：光散射式尘埃粒子计数器；采样流量；粒径设置误差；校准

参考文献

[1]GB/T 6167－2007《尘埃粒子计数器性能试验方法》[S].

[2]GB/T 29024.4－2017 / ISO 21501－4: 2007《粒度分析 单颗粒的光学测量方法 第4部分: 洁净间光散射尘埃粒子计数器》[S]..

[3]**ISO 21501－4: 2018 "Determination of Particle Size Distribution—Single Particle Light Interaction Methods—Part 4: Light Scattering Airborne Particle Counter for Clean Spaces"[S]..**

[4]**JIS B 9921: 2010 "Light Scattering Airborne Particle Counter for Clean Spaces" [S].**

[5]**Kovbasyuk I Ye, Maslakov O Yu, Shakhov M N. Practical Aspects of Calibration of Airborne Particle Counters According to ISO 21501－4 Standard [J].** ***Journal of Physics: Conference Series.*** **2022, 2192 (01): 12033.**

报告人简介：

肖坤坤，男，汉族，博士研究生，2021年毕业于吉林大学，专业为环境科学。现工作于苏州市计量测试院，从事气溶胶检测与洁净相关仪器检校研究。

附：报告人不是学生

蒙特卡洛法在宽分布颗粒标准物质不确定度评估中的应用

华放[1]，窦晓亮[1,*]，李力[1,*]，高晴[1]，吴媛媛[1]，刘艳丽[1]，岳凯[1]，王健平[1]

[1]北京海岸鸿蒙标准物质技术有限责任公司，北京市大兴区经济开发区盛坊路1号7号楼，102627

*Email: 18801185975@163.com

摘要正文：随着粒度测量标准的提高，目前粒度标准物质逐渐转向宽分布的颗粒粒度标准物质。然而，宽分布颗粒粒度标准物质的定值过程，对不确定度的评估提出了新的挑战。例如，测量的部分颗粒数据难以覆盖整体分布信息，以及颗粒尺寸差异较大，测量需要过多不同放大倍数的镜头等。本研究将蒙特卡洛方法的应用进一步拓展，深入研究有限取样对宽分布颗粒不同粒度特性指标的定量影响；引入统计学截尾分布反演模型，将先进优化算法与蒙特卡洛法相结合，定量给出舍弃小粒径数据过程带来的误差，可有效简化宽分布颗粒截尾统计过程。本研究进一步引入实际静态图像法测得粒径数据作为反演模型输入，尝试多种现代通用优化算法，并给出方法间定量对比，梳理出循环拼接优化算法的逻辑，填补了宽分布颗粒粒度截尾反演模型研究的空白。

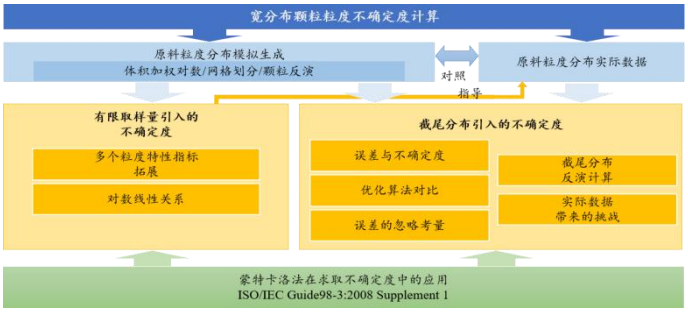


Fig. 1 The Application of the Monte Carlo Method in the Uncertainty Assessment of Wide Distribution Particle Reference Materials

关键词：宽分布颗粒标准物质；蒙特卡洛法；不确定度

参考文献

[8] Janssen H. Monte-Carlo based uncertainty analysis: Sampling efficiency and sampling convergence[J].Reliability Engineering and System Safety, 2013, 109(2):123–132.

[9] Tang Z C , Zuo M J , Xia Y . Effect of Truncated Input Parameter Distribution on the Integrity of Safety Instrumented Systems Under Epistemic Uncertainty[J].IEEE Transactions on Reliability, 2017, 66(3):735-750.

[10] 姜友新,周骛，蔡小舒,基于显微图像法和数值仿真的宽分布颗粒粒度测量的不确定度分析[J].计量学报，2023, 44（6）:975-980.

报告人简介：

华放（1995-），博士，北京海岸鸿蒙标准物质技术有限责任公司中级工程师，新材料研发中心部门主管，主要从事颗粒标准物质研发与制备。

附：报告人不是学生

TSI技术助力颗粒粒径与数量浓度计量特性的计量与标准化

黄帅

TSI China 提赛环科仪器贸易（北京）有限公司，北京市海淀区中关村南大街甲 12 号寰太大厦 1201 室，100081

Email: shuai.huang@tsi.com

摘要：TSI提供了一系列、全栈式解决方案用于准确测量气溶胶的颗粒粒径与数量浓度。TSI系列气溶胶发生器能够发生2纳米到15微米的校准用多分散或者单分散气溶胶，同时以其领先的技术能力能够提供世界范围内最广泛量程的气溶胶测试仪器，下限低至1纳米，最高可以测量到20微米。图一所示是TSI 3482电喷雾气溶胶发生器和TSI SMPS可以发生和检测2纳米到150纳米的蔗糖，氯化钠，DEHS，PSL，大分子，蛋白质等单分散气溶胶，主要应用于凝聚核粒子计数器的校准和气溶胶粒径谱仪的校准；图二所示的是TSI 3940A型气溶胶发生器和TSI SMPS可以发生和检测10纳米到1微米的蔗糖，氯化钠，DEHS，PSL等单分散气溶胶，主要应用于凝聚核粒子计数器的校准和气溶胶粒径谱仪的校准；图三所示的是TSI 1520聚流单分散气溶胶发生器和TSI APS可以发生和检测0.8微米到15微米的氯化钠，DEHS，PSL，牛血清等单分散气溶胶，主要应用于气溶胶粒径谱仪、切割器、旋风分离器和采样器的校准。

关键词：颗粒粒径；数量浓度；单分散气溶胶；粒径谱仪校准；切割器校准

Fig.1 TSI 3482 and SMPS

Fig.2 TSI 3940A and SMPS

Fig.3 TSI 1520 and APS

参考文献

[1] R. N. Berglund, and B. Y. H. Liu. Generation of Monodisperse Aerosol Standards. Environ. Sci. & Technol. 1973, 7:147-153.

[2] H.Duan, F. J. Romay, C. Li, A. Naqwi, W. Deng and B. Y. H. Liu. Generation of Monodisperse Aerosols by Combining Aerodynamic Flow-Focusing and Mechanical Perturbation. Aerosol Sci. Tech. 2016, 50:17-25.

报告人简介：

黄帅，男，TSI 中国资深产品应用经理，主要负责 TSI 粒子仪器在计量校准，大气监测，呼吸毒理，过滤和分离等行业的应用开发。

附：报告人不是学生

创新的标准颗粒物（STA)质量浓度校准方法开发与应用

黄振荣[1]，黄启轩[2]

[1]上海阳耀环保仪器有限公司，上海市闵行区平阳路258号1层，201102

*Email: machineshop@qq.com

摘要：随着大气PM2.5与PM10浓度逐年下降，环境监测任务更显艰钜，如何让监测数据具备更高的精密性、准确性和再现性，成为我们必须正视的课题。

“STA-标准颗粒物技术”领先同业使用超声波技术，将标准溶液转化成标准颗粒物，我们可控制颗粒物的粒径及组分并发生预设的质量浓度 ，这种技术为所有颗粒物监测设备提供可参比的标准值，且STA所产生的质量浓度皆可溯源至国家标准，以确保不同地区的监测设备之数据准确性。

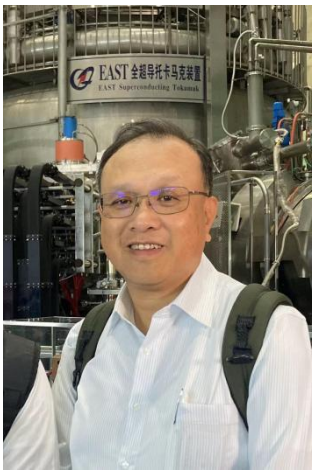
除了PM2.5颗粒物质量浓度外，STA还可延伸至水溶性离子、无机元素、有机碳等组分之监测仪器准之校准。“STA-标准颗粒物技术” 在环境监测中的应用，不仅提高了数据准确性和参比性，更为环境保护提供正确的治理方向。

演讲主题：

1. STA标准颗粒物如何發生
2. 目前环境监测所面临的问题
3. 如何运用STA标准颗粒物解决
4. STA标准颗粒物的延伸应用

关键词：STA；标准颗粒物；PM2.5；水溶性离子；重金属无机元素

报告人简介：



黄启轩，上海阳耀环保仪器有限公司总经理。毕业于东南大学机械工程学系，在气溶胶行业已经超过30年的经历，专注于在线气体与气溶胶水溶性组分监测仪（IGAC）的技术研发，并带领团队不断提升监测仪器的技术及数据的准确性，为监测站点及科研机构提供高品质的数据支持和全方位的设备维护、运营及专业谘询服务，深受业界信赖。

随着环境空气PM2.5质量浓度监测浓度逐年降低，且国家对空气质量要求的不断提高，面对挑战总经理前瞻性地主导公司在颗粒物质控技术领域的研发创新，推出了以标准颗粒物校准技术（STA）为核心的系列产品，包括STA-Pro、STA-PAMAS、STA-ACTION和STA-Lite等，为各类颗粒物监测应用提供精准的校准解决方案。总经理秉持“造就标准”的企业使命，致力于将公司打造成为全球颗粒物校准技术的领导者，引领行业未来发展。

附：报告人不是学生

晶圆表面颗粒物可控沉积技术及标准物质的研究

刘俊杰[1,*]，张子恒[2]，刘悦[1]

[1]中国计量科学研究院，北京市朝阳区北三环东路 18 号，100013

[2]太原理工大学，山西省太原市万柏林区迎泽西大街 79 号，0.0024

*Email: liujj@nim.ac.cn

摘要：以集成电路产业中扫描表面检查系统（SSIS）的日常校准及国产化替代需求，开展了晶圆表面颗粒计量技术研究。基于雾化发生-双DMA筛分技术及热泳沉积技术建立晶圆表面颗粒标准发生-沉积系统，实现粒径及数量的可控，研发不同材质、粒径及沉积模式的晶圆表面颗粒系列标准物质，在（20~60）nm和（60~500）nm范围内的颗粒粒径不确定度分别优于10%和6%（k=2），粒径变异系数优于3%。研究成果可广泛应用于集成电路领域国产化仪器的校准评价，支撑我国集成电路领域自主创新发展。

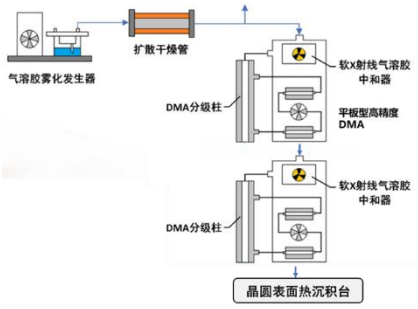


Fig. 1 particle generation and deposition system

关键词：晶圆表面；颗粒；标准物质；沉积

报告人简介：

刘俊杰，副研究员，现工作于中国计量科学研究院环境计量中心。开展颗粒物计量技术研究、测量设备研发、气溶胶测量技术及标准化研究等。承担和参与国家重点研发计划、国家科技支撑计划、自然科学基金等科研项目 10 余项。发表文章 40 余篇，发明专利 10 项，制订国家标准及计量技术标准 20 余项。获得市场监管科研成果奖、中国分析测试协会科学技术奖、中国计量测试学会科学技术奖等 8 项。

附：报告人不是学生

扬尘在线监测仪计量检测中的若干问题

张国城
北京市计量检测科学研究院
zhanggc@bjjl.cn

摘要：工地扬尘是城市大气颗粒污染重要来源，扬尘在线监测仪是工地扬尘污染情况的重要监测工具，其监测结果的准确性对于工地规范管理具有重要意义。目前扬尘在线监测仪主要分为光散射法和β射线法，前者响应快，影响因素多，准确度差；后者响应慢，但准确度高。光散射法仪器受颗粒物材质、粒径和环境湿度等影响，还受仪器管路、阀门设计的影响，有必要对传感器进行分类，避免不同领域的误用，从而提高监测结果的准确性。

报告人简介：

张国城，正高级工程师，博士，北京市计量检测科学研究院环能所所长，长期从事生态环境在线监测设备计量评价技术研究，从事环境颗粒物和生物气溶胶采样效率的检测评价，承担或参与国家或省部级科研项目十余项，以第一起草人承担国家校准规范 6 项，地方校准规范 4 项，在《计量学报》、《环境科学学报》、《中国测试》等国家权威期刊发表论文一百余篇。

附：报告人不是学生

颗粒物监测仪表模拟环境校准方法研究

李亚飞

上海市计量测试技术研究院，地址，邮编

*Email: xxx@xxx

摘要：颗粒物监测仪表在线运行的过程中，设备测量单元和测量过程容易受到环境温湿度条件和颗粒物属性变化的影响，可能会导致颗粒物测量结果出现偏差。为了合理评价颗粒物设备的预处理与测量效果，尽可能规避环境条件对设备计量特性产生的影响，提升设备测量的稳定性和准确度，本文以固定污染源颗粒物在线监测系统和扬尘在线监测系统为研究对象，通过模拟工况颗粒物校准装置的打造，系统地研究了颗粒物设备模拟环境条件下的校准方法。

报告人简介：

李亚飞，上海市计量测试技术研究院高级工程师、计量标准考评（评审）员（二级）、注册计量师（一级） 。近年来，承担参与各级课题 10 余项，发表论文 10 篇，获取专利 15 项；主持参与起草国家计量技术规范 14 项；建立计量标准 2 项。

附：报告人不是学生

固定源颗粒物实流模拟装置

李建鹏[1]，路兴杰[1]，燕迎春[1]

[1]河南省计量测试科学研究院，河南 郑州，45000

*Email: 302094765@qq.com

摘要：针对固定源超低排放烟气高湿度、一定烟温环境下颗粒物在线监测测定结果的准确性和稳定性问题，本文提出了一种可以模拟固定源颗粒物超低排放工况（高湿度、一定烟气流速、温度）的颗粒物实流模拟装置，同时支持光散射法、β射线法、电荷法等颗粒物浓度在线监测仪及便携式颗粒物浓度在线监测仪的校准。设备可分为加温加湿房、含风速测试段和颗粒物测试腔的水平风洞、除尘箱、可变风量风机、回风管等。本文利用ANSYS Fluent DPM 仿真对不同颗粒浓度、速度、温湿度多种情况下烟气进行模拟，通过对实际设备的仿真结果分析和并对其结构采取正交试验等方法进行多目标优化，并与设备试验相验证，为固定污染源颗粒物快速监测技术研究提供一定的数据和设备支撑。

Fig. 1 Device segmentation description

关键词：颗粒物；实流；仿真；优化；试验

Flow simulation device for particulate matter from stationary pollution sources

Li Jianpeng[1], Lu Xingjie[1], Yan Yingchun[1]

[1] Henan Institute of Metrology and Testing Science, Zhengzhou, Henan, 45000

* 302094765@qq.com

In response to the issues of accuracy and stability in the online monitoring results of particulate matter from stationary pollution sources under ultra-low emission conditions with high humidity and specific flue gas temperatures, this paper proposes a flow simulation device for particulate matter that can simulate ultra-low emission conditions of fixed sources (high humidity, specific flue gas flow rate, and temperature). The device also supports the calibration of online monitoring instruments for particulate matter concentration, including light scattering methods, beta-ray methods, and charge methods, as well as portable particulate matter concentration monitors.

The equipment consists of a heating and humidifying chamber, a wind speed testing section, a horizontal wind tunnel with a particulate matter testing chamber, a dust removal box, a variable air volume fan, and a return air duct. This paper employs ANSYS Fluent DPM simulations to model flue gas under various conditions of particulate concentration, velocity, and temperature-humidity. Through analysis of the simulation results of the actual equipment and employing orthogonal experiments for multi-objective optimization of its structure, the results are validated against experimental data. This provides essential data and equipment support for the research on rapid monitoring technologies for particulate matter from fixed pollution sources.

Keywords: Particulate matt. flow simulation. optimization.

报告人简介：

李建鹏，高级工程师，河南省计量测试科学研究院。

从事领域：固定源烟气在线监测系统烟气流速、颗粒物、烟气湿度量值溯源技术研究；扬尘在线、环境空气站颗粒物量值溯源技术研究；生物安全柜、尘埃粒子计数器量值溯源技术研究。

附：报告人不是学生

透射电镜内标法对颗粒尺寸定值过程中阈值确定方式对结果的影响

赵光耀[1,*]，公丕胜[1]，郭清华[1]，程志峰[1]

[1]苏州纳微生命科技有限公司，江苏省苏州市园区金鸡湖大道99号苏州纳米城东北区NE-37栋，215123

*Email: gyzhao@nanomicrotech.com

摘要：对颗粒尺寸进行准确的溯源定值是颗粒计量标准化的基础。用透射电镜对颗粒进行测量的时候，由于不同的拍照条件下颗粒与背景像素灰度分布不均一导致的阈值难以确定对颗粒尺寸定值的准确度有很大影响。我们对100nm–500nm范围内不同尺寸的聚苯乙烯标准颗粒进行了内标法粒径测定，并研究了不同的阈值算法及参数对于定值的影响。结果表明，通过调节适当的灰度Gamma值和选取合适的阈值算法，我们能使不同图像间测定的颗粒尺寸数值具有高度的一致性，并且与参考值非常接近，消除了像素灰度不均一带来的波动，对颗粒尺寸计量过程中的量值传递具有重要意义。

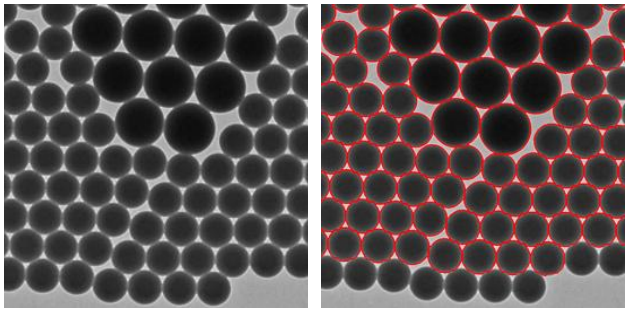


Fig. 1 (left) original TEM image of 270nm PS particles with 400nm PS particles as internal standard (right) boundaries of particles overlapping on the original image after appropriate thresholding

关键词：颗粒计量；透射电镜；内标法；阈值确定；量值溯源。

参考文献

[1] **K.Y. Jung, B.C. Park, W.Y. Song, B.-H. O, T.B. Eom. Measurement of 100-nm polystyrene sphere by transmission electron microscope. *Powder Technol.* 2002, 126: 255–265.**

报告人简介：

赵光耀 苏州纳微生命科技有限公司 总经理/博士。

附：报告人不是学生

细颗粒物化学组分计量研究进展

许潇[1,*]，池顺鑫[1]，刘悦[1]，刘俊杰[1]

[1]中国计量科学研究院，北京市朝阳区北三环东路18号，100029

*Email: xuxiao@nim.ac.cn

摘要：细颗粒物的化学组分监测是“十四五”期间大气环境监测和污染防治的重要建设方向。颗粒物化学组分的在线监测仍存在诸多量值溯源问题。本研究团队响应国家大气颗粒物化学组分监测网的量值溯源需求，以污染源自动在线监测的溯源为重点，开展细颗粒物在线监测量值溯源方法的研究和标准物质的研制。

细颗粒物化学组分计量的研究依据分析对象和方法，可分为水溶性离子、有机碳/元素碳（OC/EC）、无机元素和有机物等4个方面。本研究团队主要针对水溶性离子和碳组分的计量技术开展研究。在水溶性离子计量方面，依托气溶胶定量发生和传输技术研制水溶性离子在线分析仪器校准方法和校准装置，并研制滤膜基底颗粒物水溶性离子标准物质。在有机碳/元素碳计量方面，通过选择具有真实环境代表性的有机碳组分，结合高稳定性气溶胶发生混匀技术，研制碳质气溶胶滤膜载体标准物质。

为提高量值溯源方法的准确性，降低不确定度，在水溶性离子和有机碳/元素碳计量研究过程中，探索建立基于重量法和重量—容量法的量值溯源路线，将在线监测仪器和滤膜基底颗粒物标准物质的量值溯源至国家标准物质。为此，研究团队开展气溶胶定量发生技术的研究，以实现溶液标准物质的量值通过气溶胶形态转移至滤膜基底颗粒物标准物质；以及高稳定性气溶胶发生混匀技术的研究，以提高单片滤膜内的颗粒物分布均匀性。目前，研究团队已通过试验验证了上述量值溯源路线的可行性，并应用于正在起草的细颗粒物水溶性离子在线分析系统和有机碳、元素碳监测系统的校准规范中。

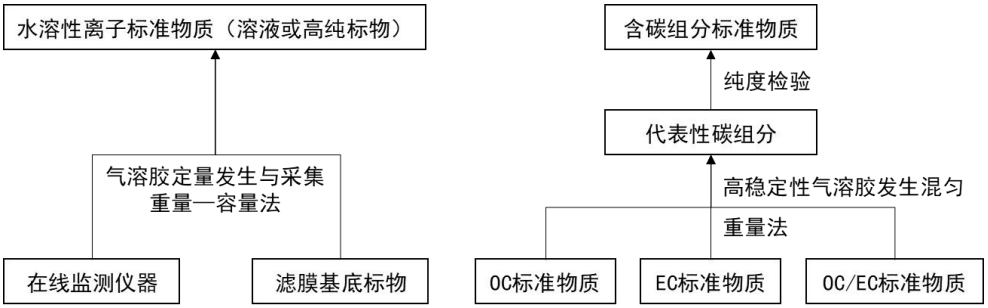


Fig. 1 Traceability for water soluble ions and OC/EC of fine particulate matters

关键词：大气颗粒物；化学组分；水溶性离子；OC/EC；无机元素

参考文献

[1] 李想，许潇. 大气颗粒物水溶性离子计量技术研究概述[J]. 计量科学与技术，2022, 66(6): 31-37.

[2] **Y. Liu, J. J. Liu, J. Xiao, J. Ye, L. X. Guo and C. Q. Yan Metrological traceable calibration of organic carbon and elemental carbon based on laboratory-generated reference materials. *J. Environ. Sci.* 2024, 149: 524-34.**

报告人简介：

许潇，副研究员，就职于中国计量科学研究院环境计量中心，从事颗粒物质量浓度和化学组分计量技术的研究和装置的研发与应用工作。参与多项 $PM_{2.5}$ 质量浓度和化学组分测量仪器校准规范和国家标准的起草。

附：报告人不是学生

模拟生物细胞活性检测质控品的制备和应用

吴媛媛[1]，高晴[2]，华放[3]，岳凯[4]，王建平[5]，窦晓亮[1,*]，

[1]北京海岸鸿蒙标准物质技术有限责任公司，北京市大兴经济开发区盛坊路1号三利工业园7号楼，102600

*Email:bjhongmeng@126.com

摘要：生物细胞活性检测在现代生物医学领域具有举足轻重的地位。然而，生物细胞活性的检测往往面临诸多挑战，如检测困难、溯源困难，以及缺乏稳定性和保存困难等问题。更重要的是，目前缺乏统一的标准物质和质控品，使得检测结果的准确性和可靠性受到质疑。为解决这些难题，研发一种溯源清晰、检测手段丰富、化学性质稳定的化学染色剂显得尤为重要。这种染色剂需要完全模拟生物染色剂的特性，包括发光特性与生物染色剂一致、发光稳定性、与颗粒反应的能力，以及满足特定反应条件的化学性质。目前，采用溶胀法制备的聚苯乙烯荧光微球展现出了良好的光学特性、高稳定性和与颗粒良好的反应性、粒径可控，为模拟生物细胞活性检测提供了新的方向。这些荧光微球可以应用于流式细胞仪的校准、医疗诊断、血流测定、示踪、体内成像以及成像仪器等领域，为生物医学研究提供了强有力的支持。

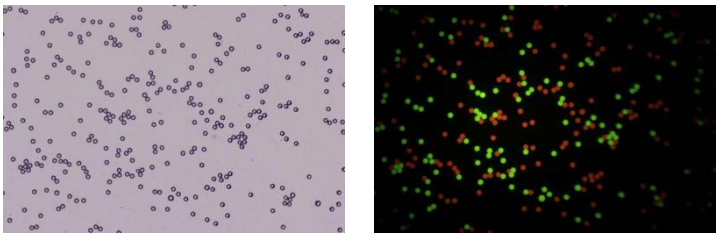


Fig. 1 Comparison before and after staining

关键词：溶胀法；荧光微球；聚苯乙烯；模拟；

参考文献

[44]Wan-xia Y ,Biao Y ,Qun L , et al.[Preparation method of polystyrene core-poly (acrylamide-acrylic acid) shell fluorescent microspheres].[J].Zhejiang da xue xue bao. Yi xue ban = Journal of Zhejiang University. Medical sciences,2011,40(1):44-50.

[45]Lijuan S ,Yichen Z ,Zhinan F , et al.Encoding microspheres based on fluorescence energy transfer between poly(phenylenevinylene) nanoparticles and rhodamine 6G[J].Applied Surface Science,2021,540(P1):148300-.

[46]Siyu L ,Fan L ,Bo L , et al.Monodisperse Fluorescent Polystyrene Microspheres for Staphylococcus aureus Aerosol Simulation.[J].Polymers,2023,15(17):

报告人简介：

吴媛媛，北京海岸鸿蒙标准物质技术有限责任公司新材料研发中心部门主管。主要从事颗粒标准物质的研发及制备。目前，制备的产品有亚微米、纳米粒度标准物质、颗粒计数标准物质、流式细胞仪线性校准微粒、荧光微粒。

附：报告人不是学生

粒子光学计数技术在大气颗粒物浓度监测中的应用及展望

施惠民[1]，施伟雄[2]，沈嘉祺[1,*]

[1]张家港朗亿机电设备有限公司，江苏省张家港市乐余科技创业园，215600

[2]张家港朗亿机电设备有限公司，江苏省张家港市乐余科技创业园，215600

*Email: px_sjq@163.com

摘要：

近年来，我们开发的基于粒子光学计数器原理的光散射粉尘仪开始被一些地区、城市选定用于建筑工地、堆场等无组织颗粒物排放源的在线监测。与先前普及的基于β射线衰减原理的粉尘仪相比，本仪表的优势在于响应速度快、结构简单、小巧轻便；与先前普及的基于光散射原理的粉尘仪相比，本仪表的优势在于可以计入粒径变化对质量浓度的影响。在本仪表的应用推广阶段，我们设计了多个比对测试。测试结果证明我公司生产的粉尘仪中，搭载了单颗粒光散射技术的粉尘仪较未搭载该技术的粉尘仪，测量准确度有显著提高。

关键词：光散射；粒子光学计数；大气颗粒物浓度监测

参考文献

[1] 蔡小舒,苏明旭,沈建琪等.颗粒粒度测量技术及应用[M].化学工业出版社，2010.

[2] HJ 1263—2022.环境空气 总悬浮颗粒物的测定 重量法[S].

报告人简介：

施惠民，张家港朗亿机电设备有限公司。

附：报告人不是学生

颗粒物中无机元素校准方法研究进展

罗武文[1]

[1]北京雪迪龙科技股份有限公司，北京市昌平区双营西路88号，102200

*Email: luowuwen@qq.com

摘要：用能量色散X射线荧光光谱法(ED XRF)测定大气颗粒物样品中K、Ca、Ti、V、Cr、Mn、Fe、Co、Ni、Cu、Zn、As、Pb、Sr、Ba等无机元素的标准HJ 1329-2023已颁布实施，颗粒物滤膜标准样品对于校准曲线的建立、评估具有重要意义。目前市场上的滤膜标样有两种：一是美国NIST SRM2783模拟大气颗粒物滤膜标准样品，无浓度梯度；二是加拿大Micromatter公司的薄膜标样，单元素，具备浓度梯度。上述二者均为进口标样，价格较高，与实际样品基体也有较大不同，给实际的运维质控工作带来一定难度。鉴于此，国内的学者也进行了大量相关工作，走到了行业前列。研究方向一，借鉴国外模拟大气颗粒物滤膜标样制备方法，以污染土壤标样为加工原材料，经进一步粉碎后，利用表面活性剂将细颗粒物制成悬浊液，定量、均匀分布在多孔滤膜上，进行定值。多家实验室对同批次制备的滤膜样品随机抽取进行了测试，对滤膜上20多种元素测定结果的准确度和精密度进行了评估，初步分析结果表明：Al、Fe、Zn、As、Ba、Ti、Pb等元素含量与依据土壤标样元素认定值比值推算的结果基本相符；Al、Si、Fe、Ti、Mn、Zn、K、As、Pb等元素含量相对标准偏差(RSD)范围为68%~21%，基本满足滤膜质控样品要求，可以用于一般校准使用。研究方向二，使用真空溅射方式，定值，制作校准膜片，便于长期保存；研究方向三，使用气溶胶发生方式，直接进行质量浓度校准，探索了颗粒态汞校准方法和条件。

关键词：大气颗粒物；无机元素；校准；标准膜片

参考文献

[1] 郭超,张百慧,范爽,等．能量色散X射线荧光光谱法测定大气颗粒物中无机元素应用程序的建立、评估与维护．冶金分析，2020,40(9):1-9.

[2] 杜祯宇,张百慧,黄智鹏,等．模拟大气颗粒物混合元素滤膜标准样品的研制与质量考察．冶金分析,2020,40(11):1-7.

报告人简介：

罗武文，高级工程师，北京雪迪龙科技股份有限公司研发中心能谱室主任。中关村示范区高精尖产业协同创新平台-“中关村大气污染防治协同创新中心”核心成员，中国仪器仪表学会分析仪器分会在线分析仪器专委会委员，主持研制的“低浓度烟尘烟气综合监测仪”入选工信部、科技部、生态环境部联合制定的《国家鼓励发展的重大环保技术装备目录》。参与多项国家重点研发计划、国家重大科学仪器设备开发专项的研发工作。参与《现代在线分析仪器技术与应用》书籍的编写，参与相关团体标准制定3项。荣获中关村科技园昌平园2020年度“经济技术创新标兵。

附：报告人不是学生

基于原位稀释技术的口罩颗粒物过滤效率测试仪校准研究

张明，邹亚雄*，王婷，刘巍，刘伟光，徐广强，杨杰

青岛市计量技术研究院，青岛市崂山区科苑纬四路 77 号，266100

摘要：提出以一种原位气溶胶稀释器作为标准器，用于口罩颗粒物过滤效率测试仪的校准方法。该方法可以弥补传统校准方法（标准光度计法和标准滤膜法）在可操作性和溯源性方面的不足。原位气溶胶稀释器以多根限流毛细管组合和气溶胶原位稀释为特点，是一种结构型式满足在口罩夹具位置接入使用的限流式气溶胶稀释器。在工况流量已知的情况下，经过标定的稀释器，可根据校准过程中采集到的上下游差压，计算得到稀释器的稀释比。为证明该流量法稀释比可以直接转化为稀释器所提供的过滤效率参考值使用，文中针对稀释比校准方法进行了讨论。将校准过程类比于对气溶胶颗粒的同轴非等速采样，进行了斯托克斯数的推导计算，说明了所使用限流毛细管的吸入效率接近 1。计算得到伴有扩散损失的毛细管内的输送效率大于 0.99。使用原位气溶胶稀释器针对典型

测量对象开展校准实验，并进行了参考值的不确定度分析。上述内容共同验证了稀释法校准的可行性和有效性。

关键词:颗粒物过滤效率；计量溯源；稀释器；流量法稀释比

参考文献

[1]全国纺织品标准化技术委员会. 纺织品细颗粒物过滤性能试验方法: GB/T 38413-2019[S]. 北京: 中国标准出版社, 2019.

[2] 邹亚雄, 王婷, 张明, 等. 口罩颗粒物过滤效率测试仪校准方法研究 [J]. 计量科学与技术, 2020(10): 15-18.

报告人简介：

邹亚雄，青岛市计量技术研究院正高级工程师，长期从事质量领域的技术工作，包括计量、标准化、合格评定等工作。目前担任国家环境监测仪器产业计量中心（筹）副主任，主要从事产业计量测试和气溶胶测量技术研究工作，带领团队承担了多项山东省重大科技创新工程以及国家市场监管总局科技计划项目的研究工作。曾获青岛市科学技术奖，山东计量测试学会科技进步奖。目前担任 ISO TC24/SC4 注册专家，SAC/TC 374、SAC/TC168/SC1 和 SAC/TC562/SC1 委员，中国计量测试学会环境监测仪器专业委员会委员。

附：报告人不是学生

液体颗粒计数器计量技术的现状与面临的问题

郝新友

国防科技工业颗粒度一级计量站，河南省新乡市解放大道中段 1 号，453019

*Email: ZHKLDZ@163.com

液体颗粒计数器是测量单位体积液体中特定粒径范围内固体颗粒数量浓度的关键仪器，主要用于评定流体系统工作介质的污染程度或元器件及特定液体的清洁程度，在航空、航天、船舶、医药、电子等领域获得广泛应用。按照测量的液体不同可分为油介质仪器和水介质仪器，按照测量原理可分为遮光原理和光散射原理。计量是液体颗粒计数器测量准确的基础。本文详细分析了液体颗粒计数器的主要性能参数及对测量结果的影响，介绍了性能参数的测量方法及当前国内外液体颗粒计数器的校准方法，论述了当前国内液体颗粒计数器计量技术的现状，指出了我国计量技术规范存在的问题，并针对问题给出了初步解决方案。

关键词：液体颗粒计数器；计量；校准；分辨力

参考文献

[1] **ISO 11171, Hydraulic fluid power - Calibration of liquid automatic particle counters[S].**

[2] **ISO 21501-3, Determination of particle size distribution - Single particle light interaction methods - Part 3: Light extinction liquid-borne particle counter[S].**

[3] JJF 1290，微粒检测仪校准规范[S].

[4] JJG 1061，液体颗粒计数器检定规程[S].

[5] **USP 35<1788>, Methods for the determination of particulate matter in injections and ophthalmic solutions[S].**

[6] 郝新友，液体自动颗粒计数器的校准技术与发展[J]. 液压与气动，2011，（6）:1-6.

[7] 郝新友，液体自动颗粒计数器的性能参数与测量[J]. 液压与气动，2011，（8）:38-42.

报告人简介：

郝新友，国防科技工业颗粒度一级计量站，研究员，主要从事流体污染控制、过滤产品检测、颗粒度测量仪器计量、颗粒标准物质研制等技术研究工作。现任全国颗粒表征与分检及筛网标准化技术委员会颗粒分技术委员会委员、全国液压气动标准化技术委员会液压污染控制分技术委员会委员、ISO/TC131/SC6/WG2 注册技术专家。制定国家技术标准 8 项，研制国家一级和二级标准物质 30 余种，授权技术发明专利 10 余件，获得国防和航空技术发明奖二等奖 7 项。

附：报告人不是学生

全光程多级校准颗粒物浓度监测仪的研制及标定

周文刚[1,*]，张文阁[2]，陈金玚[2]
北京九州鹏跃科技有限公司 北京市昌平区昌平科技园区超前路 6 号
中国计量科学院 北京市朝阳区北三环东路 18 号
*zhwg86@163.com

摘要：环境空气质量监测和预报是环境保护工作的重点工作之一，环境保护部已经取消了颗粒物在线监测的方法限制，认可了颗粒物浓度光学测量仪器。本文介绍了一种全光程多级校准在线颗粒物浓度监测仪的结构、工作原理（自动校准 0 值和多级自动校准跨度值）及一种可移动气溶胶发生器在标定该仪器时的应用。通过长期实验数据分析得出结论，具有全光程多级校准在线颗粒物浓度监测仪，测量误差可以达到小于 10%的水平。

关键词：多级校准，颗粒物浓度，气溶胶发生器

报告人简介：

周文刚，北京九州鹏跃科技有限公司，总经理。

附：报告人不是学生

Mixing type condensation particle counting technology application and metrology certification in Europe NPTI (new periodical technical inspection) program

J. Li[1], D. Booker[2], O. Franken[2], S. Gandi[2]L

[1]Sensors Europe GmbH, 40699-Erkrath, Germany

[2] Sensors (Shenzhen) Technology Services Ltd. Shenzhen, China

*jli@sensors-inc.com

From 01.01.2021, the checking of the particle number by measurement at the exhaust tailpipe has been introduced as part of the exhaust emission test for vehicles with compression ignition engines in Europe. The goal is to increase the quality of the periodic emission check by improving fault detection and to make sure that the emission behaviour does not deteriorate because of decay, manipulation, lack of service or improper repairs.

In parallel to the development of a suitable test procedure, various measurement technologies that can be used to report particle number concentrations have been evaluated. Condensation particle counters (CPC) have been widespread used for more than four-decades in various industries and applications. CPCs are also the established particle number (PN) measurement technique for vehicle type approval since Sep 2011.

Mixing type CPC is different from the Full flow CPC in vehicle type approval procedure, illustrated in Fig. 1. It's much more suitable for NPTI program with benefits like reducing work fluid consumption, quicker response time and insensitive to altitude, temperature and vibration effect.

Measurement equipment used in mandatory emission test has to be verified in a stringent homologation process and needs to be calibrated regularly against traceable reference equipment to guarantee proper functioning before market entry and during its useful life. A typical aerosol lab test setup, illustrated in Fig. 2, to check the metrological properties of Mixing CPC in various Europe labs like PTB, METAS and Ricardo.

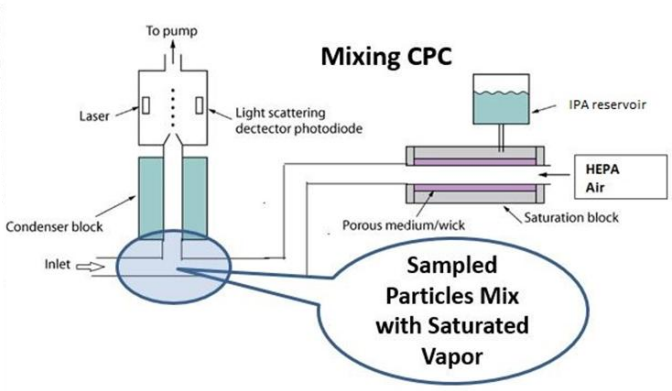


Figure 1. Diagram of mixing type CPC.

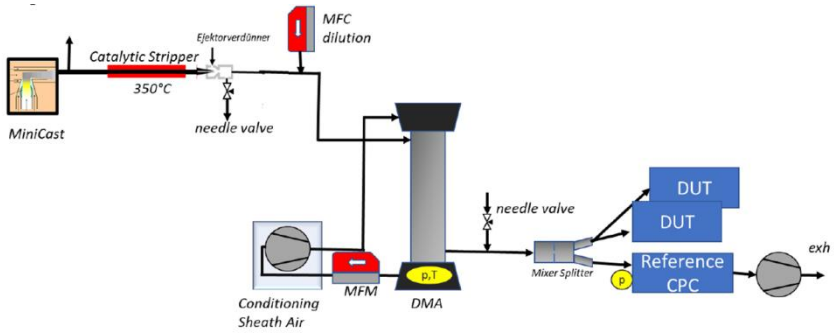


Figure 2. Typical aerosol lab. Test Setup.

Keywords: mixing type CPC, NPTI, particle counter, metrology certification.

References

[1] Kadijk, G., Mayer, A.(2017). NPTI- the New Periodic Technical Inspection emission test procedure for vehicles with emission control systems, White Paper published at 21st ETH-Conference on Combustion Generated Nanoparticles.

[2] Mohr, M., Lehmann, U., (2003). Comparision study of particle measurement for future type approval application, Research report No-202779, Swiss contribution to GRPE particle measurement programme (GRPE-PMP CH5)

[3] ISO 27891:2015 Aerosol particle number concentration – Calibration of condensation particle counters, www.iso.org

报告人简介：

李金岩，深圳市森信深中技术服务有限公司(Sensors)

附：报告人不是学生

第 24 分会场：神奇的二维材料

主题报告：

液相剥离法规模化制备二维纳米材料

毋　伟[1*]

[1]北京化工大学化学工程学院，北京，100029

[*]Email: wuwei@mail.buct.edu.cn

摘要：二维纳米材料因其独特的物化性质和各向异性特点，大的比表面积和多的活性位点，以及作为基本单元易组装成性能多变优异的功能材料等特性，引起了人们的广泛关注和研究，在众多传统和新兴领域都具有良好的应用及应用前景，是助力新质生产力的中坚功能材料。对于性能相对稳定的二维纳米材料，如：石墨烯、二维二硫化钼、六方氮化硼纳米片等，目前可规模化的制备主要有气相合成法及液相剥离法。在液相剥离法中原料的预处理方式、液相体系的选择及助剂的类别、剥离设备和工艺等有起到非常关键的作用。在这个报告中将介绍目前国内外的研究现状和课题组进行的工作，并对这一方法进行深入分析，指出存在的问题和未来的发展前景。

关键词：二维纳米材料；液相剥离法；剥离体系；工艺和设备

报告人简介：

毋伟，男，河南灵宝人，1966 年 4 月出生。北京化工大学博导教授。目前已在“*Ind. Eng. Chem. Res.*”、“*J. Phys. Chem. C.*”、“*Langmuir*”、 “*Appl. Surf. Sci* ”“*J. Appl. Phys.* ”、“*Chem. Eng. J*”、*“J Colloid Inter. Sci.”*、“*Phys. Chem. Chem. Phys.*”等重要期刊上发表学术论文 100 余篇，主编专著 1 部，参编专著 3 部，申请和授权专利 20 余项，获国家科技进步二等奖 1 项，北京市科技进步一等奖 1 项，石化协会优秀图书一等奖 1 项。主持或主要参与完成的及正在进行的国家 863 重点项目课题、国家支撑计划、国家自然科学基金以及企业合作项目多项。社会兼职有中国颗粒学会常务理事，中国颗粒学会颗粒制备与处理专业委员会副主任，“中国粉体技术”杂志编委等。

纳米级二維氧化鋁粉末

顏富士[1*]，游佩青[1]，李孟穎[1]，向性一[1]，馬淑雲[2]

[1]成功大學資源工程系

[2]河南天馬新材料股份有限公司

*Email: yfs42041@mail.ncku.edu.tw

摘要：製作氧化鋁粉的前驅物 boehmite 及 gibbsite 水鋁氧化合物，因由鋁氧八面體構成的層狀排列，具備良好的節離面，可採熱助剝層法製作二維粉末。熱助剝層法製作二維粉末可能存在兩機制: OH 基的釋出及相變過程結構重整時 Al 原子遷移。前者發生於剝片初期， 其後加入後一機制。不同升溫速率可能改變所得片體的尺寸及其外型的完整與否。低昇溫速率較易得到大尺寸及完整外型的片體。

关键词：熱助剝片，二為粉末，Boehmite, gibbsite。

气相法制备薄层石墨烯及其储能应用

崔超婕[1]，骞伟中[1,*]

[1]清华大学化工系，北京，100084

*Email: qianwz@tsinghua.edu.cn

摘要：石墨烯是电学，磁学，力学性质都非常优异的材料；发展高效的高质量石墨烯的制备方法对其应用促进非常关键。与液相剥离法相比，化学气相沉积法制备石墨烯，具有高温结晶性好，模板结构可调，产品层数与孔结构可调，纯度高，含氧量低与化学稳定好的优势。同时用酸量大大下降，具有环境友好的可持续发展特征。本报告将介绍基于模板气相沉积法的三维薄层石墨烯的控制制备及流化床的批量制备技术，主要关注点在如何可控生成空间网络三维联通结构的多孔模板，以及如何优化工艺提高材料的结晶性与互联通性。同时，在应用中介绍三维薄层石墨烯的密度轻，吸液量大等特性在储能器中的不利条件，以及利用三维泡沫铝的网架结构限制石墨烯在液体中的体积膨胀，从而获得压实密度高的极片，解决了行业内长期十余年的石墨烯难加工的难题。此工作的意义在于，在石墨烯的加工性能解决后，就可以有效利用其比表面积大，化学稳定高的优点，就能够使用离子液体等离子尺寸大，但电压窗口高的电解液类型，从而具有比现有商用超级电容器具有更高的温度操作域与高的能量密度及高能量密度的优势。

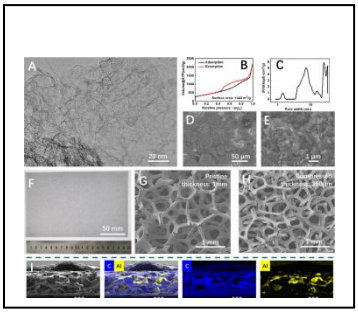


Fig. 1 Structure of graphene, 3D Al foam and the composite electrode

关键词：石墨烯；化学气相沉积；结构调控；电容储能

参考文献

[1] **C.J. Cui, W.Z. Qian and F. Wei Highly Electroconductive Mesoporous Graphene Nanofibers and Their Capacitance Performance at 4 V. J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 2256−2259.**

[2] **Z.F. Yang, C.J. Cui and W.Z. Qian High energy and high power density supercapacitor with 3D Al foam-based thick graphene electrode: Fabrication and simulation. *Energy Storage Mater.* 2020, 33: 18–25.**

报告人简介：

骞伟中，男，1971 年生，清华大学化工系教授。国家重点研发计划项目首席科学家，侯德榜化工科技创新奖获得者，原中国超级电容产业联盟副理事长（现顾问专家）。鄂尔多斯实验室执行副主任；鄂尔多斯现代煤化工集群促进会理事长。中国颗粒学会理事，能源颗粒专委会副主任。

研究方向为纳米材料与能源化工。发表学术专著 1 部，学术论文 160 余篇，发明专利 100 余项，有多项技术实现产业化应用，获得国家级科技奖励 1 项及省部级一等奖 6 项。

耐迁移型插层结构聚烯烃抗氧剂的构筑新策略及性能

李子甲[1]，冯拥军[1]*

[1]北京化工大学，化工资源有效利用国家重点实验室，化学学院，北京市朝阳区北三环东路 15 号，100029

*Email: yjfeng@mail.buct.edu.cn

摘要：聚丙烯（PP）是应用最广泛的热塑性塑料之一，国内年产能近3000万吨，已广泛应用于汽车、包装和医疗等诸多重要领域。但其结构中存在不稳定α-H导致其在光热等环境中易脱除老化，从而失去使用价值。为了抑制PP及其复合材料的老化降解，通常在其制品成型加工过程中添加抗氧剂。受阻酚类抗氧化剂在提高PP复合材料的耐热性和抗氧化性能方面得到了广泛的认可和应用。然而，在制品加工和使用过程中，低分子量抗氧剂存在容易挥发、迁移和被提取等缺陷，这种行为会直接降低PP及其复合材料的抗氧化效果，在长期稳定PP方面存在一定的挑战，并且迁出的抗氧剂还存在污染环境以及危害人体健康的风险[1]。层状复合金属氢氧化物（LDHs）因其主体组成可调（M^{2+}和M^{3+}）、层间客体阴离子可调（A^{n-}）和电荷密度可调（M^{2+}/M^{3+}比例）等性质，而成为理想的抗氧剂保护材料。在我们的工作中，基于LDHs可调节的多维结构和层间功能客体插层组装特性，通过将低分子量受阻酚类抗氧化剂插入LDHs的层间间隙，利用主-客体相互作用和晶格能抑制抗氧剂的迁移行为，开发了一系列具有优异抗氧化性能和耐迁移性能的插层结构抗氧剂[2]。特别是突破超薄插层结构抗氧剂（L-LDHs）的一步合成、溶剂混合等关键技术，实现了一系列1~10层超薄插层结构抗氧剂和相应的L-LDHs/PP复合材料的精准制备。在此基础上，进一步突破了一种高效的合成-有机改性耦合策略，实现制备过程中低洗涤用水量以及超薄插层结构抗氧剂的高度分散[3]。然而，高抗氧剂暴露比的超薄插层结构抗氧剂面对复杂环境中的溶剂萃取以及空气中CO_2交换时，仍存在较大迁移风险。因此，我们提出“围栏”结构插层抗氧剂构筑新策略，利用无机/有机离子交换插层抗氧剂层间边缘抗氧剂，形成层间无机/有机围栏，或是利用长链有机分子环绕包封整个超薄插层抗氧剂颗粒，形成外部围栏，保护层间抗氧剂免受萃取和交换的侵害并且抑制其迁移行为，使抗氧剂发挥高效持久的PP保护作用。

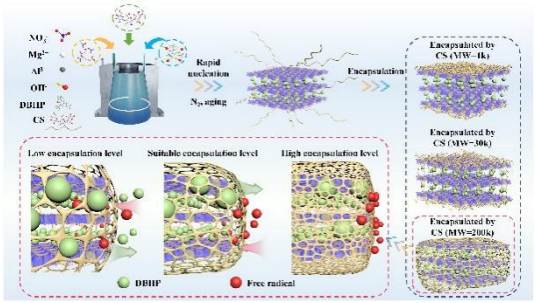


Fig. 1 Illustration of the synthesis and anti-migration mechanism of antioxidants intercalated LDHs with a fence structure.

关键词：聚烯烃；抗氧剂；层状复合金属氢氧化物；耐迁移

参考文献

[1] Z. Li, C. Zhang, Y. Jiang, Y. Bai, M. Xu, K. Xu, D. Gao, F. Leroux, Y. Feng, Antimigration Polypropylene Antioxidants: A Review, Ind. Eng. Chem. Res. 2024, 63(4): 1713-1728.

[2] Q. Zhang, Y. Guo, F. Leroux, P. Tang, D. Li, L. Wang, Y. Feng, An aqueous miscible organic (AMO) process for layered double hydroxides (LDHs) for the enhanced properties of polypropylene/LDH composites, New J. Chem. 2020, 44(24): 10119-10126.

[3] Z. Li, M. Zhao, R. Tian, Y. Shi, W. Tian, Y. Bai, M. Xu, K. Xu, D. Gao, Y. Feng, An efficient synthesis and organic-modification coupling strategy to produce highly dispersed ultrathin antioxidant intercalated layered double

hydroxides for enhancing performance of polypropylene composites, Chem. Eng. J. 2024, 483: 149247-149256.

报告人简介：

冯拥军，1976 年 1 月出生，教授，博士生导师，2022 年入选国家重大人才工程（校企联聘）和山东泰山产业领军人才。现任北京化工大学人才引进办公室主任、国际插层化合物委员会委员（ISIC）、中国化学会高级会员、中国再生资源产业技术创新战略联盟专家委员会副主任委员、安徽省新材料产业发展战略咨询委员会委员等。2007 年 1 月获法国 Blaise Pascal 大学化学专业博士学位，随后到法国 University of Poitiers 开展博士后研究。2011 年加入化工资源有效利用国家重点实验室，聚焦插层结构功能材料、多孔载体与吸附材料以及非贵金属电催化材料等的基础、应用基础与工程化研究，承担国际、国家和企业委托等项目 30 余项，建成百吨级以上规模装置 8 套，其中主导 2 套；以第一作者或通讯联系人在国际主流刊物发表论文 120 余篇，申请国家发明专利 60 余项，其中授权 43 项；受聘《Applied Clay Science》《精细化工》等期刊编委。所研发的多项专利技术已实现落地转化。

二维材料在电解水中的应用

周道金[1]，孙晓明[1,*]

[1]北京化工大学，北京市朝阳区北三环东路15号，100029

*Email: sunxm@mail.buct.edu.cn

摘要：电解水制氢是一种绿色、高效且无碳循环的电化学制氢路线。针对电解水制氢系统所采用的刷涂法电极，表面的催化剂附着力不足、易脱落的问题。我们发展了原位沉积法构筑（氢）氧化物纳米阵列电极技术，发展了以层状双金属氢氧化物、金属氧化物为代表的一系列阳极水氧化催化材料。通过液相化学沉积取向生长，实现有序纳米阵列（氢）氧化物电极的制备，大幅提升了催化材料的负载机械强度，改善了电接触。在此基础上，我们发展了拓扑化学合成技术，通过金属（氢）氧化物前驱体的原位拓扑化学转化，制备了一系列金属、硫化物、磷化物、碳化物、氮化物、硒化物等化合物纳米阵列电极，实现了电解活性的提升和能耗降低。进一步的，将拓扑化学转化技术应用于海水电解抗腐蚀的钝化层构筑中，提出了含氧酸根阴离子钝化层防腐新机理，用于指导一系列多级复合结构电极设计制备。并开发了世界首台10-500 kW电解海水制氢系统，实现连续稳定运转。

关键词：电解水制氢、纳米阵列电极、层状双金属氢氧化物、拓扑转化、海水电解

参考文献

[1] Zhou D, Li P, Lin X, et al. Layered double hydroxide-based electrocatalysts for the oxygen evolution reaction: identification and tailoring of active sites, and superaerophobic nanoarray electrode assembly[J]. Chemical Society Reviews, 2021, 50(15): 8790-8817.

[2] Zhou D, Wang S, Jia Y, et al. NiFe hydroxide lattice tensile strain: enhancement of adsorption of oxygenated intermediates for efficient water oxidation catalysis[J]. Angewandte Chemie International Edition, 2019, 58(3): 736-740.

[3] Lu Z, Xu W, Zhu W, et al. Three-dimensional NiFe layered double hydroxide film for high-efficiency oxygen evolution reaction[J]. Chemical Communications, 2014, 50(49): 6479-6482.

[4] Kuang Y, Feng G, Li P, et al. Single-Crystalline Ultrathin Nickel Nanosheets Array from In Situ Topotactic Reduction for Active and Stable Electrocatalysis[J]. Angewandte Chemie International Edition, 2016, 55(2): 693-697

[5] Cai Z, Zhou D, Wang M, et al. Introducing Fe^{2+} into nickel–iron layered double hydroxide: local structure modulated water oxidation activity[J]. Angewandte Chemie International Edition, 2018, 57(30): 9392-9396.

[6] Liu W, Yu J, Li T, et al. Self-protecting CoFeAl-layered double hydroxides enable stable and efficient brine oxidation at 2 A cm^{-2}[J]. Nature Communications, 2024, 15(1): 4712.

报告人简介：

孙晓明，教授，博士生导师。2000年和2005年于清华大学化学系获理学学士和理学博士学位。2008年在Stanford University完成博士后研究回国，进入北京化工大学化工资源有效利用国家重点实验室工作。主要从事无机纳米材料化学研究，在电解水、燃料电池和气体超浸润电极器件领域取得系列进展。目前已在Joule，Chem，Nat. Catal.，Nat. Commun.，JACS，Angew Chem，Adv Mater.等化学和材料类国际主流刊物以通讯作者发表论文200余篇，总引用36000余次；出版专著一本。申请国际专利13项，获授权2项；获国家发明专利授权40余项，数项已经完成转化。现承担国家自然科学基金重点项目、国家重点研发项目等多项科研项目。2011年获国家自然科学基金杰出青年基金资助，2019年获中组部万人计划领军人才。

MXene 材料的合成及光催化应用

许文康[1]，余智洋[1]，李理波[1]，彭超[2]，余皓[1,*]

[1]华南理工大学 化学与化工学院，广州，510641

[2]五邑大学 环境与化学工程学院，江门，529020

*Email: yuhao@scut.edu.cn

摘要：MXene是2014年首次报道的一种新型过渡金属碳化物构成的二维材料。由于其具有高载流子迁移率、可调变的电子功函数、丰富的表面官能团和新颖的原子排列方式，迅速引起了储能、催化、吸附、传感等领域研究者的广泛关注。目前MXene的主流合成方法多涉及到大量的氟化氢或强碱等刻蚀剂，原子经济性低，废液回收成本高，且刻蚀时间长且不完全，不能满足绿色生产的需要。本工作提出一种较为绿色的MXene合成方法[1]，通过对MAX相刻蚀反应动力学调控（图1），引入多元醇为溶剂，在溶剂热条件下将含氟试剂用量降低至化学计量，刻蚀时间下降2个数量级。该方法可直接合成单层MXene，产品品质友好，收率高。

由于构成MXene的过渡金属碳化物较容易氧化形成相应的过渡金属氧化物，为构建半导体氧化物复合光催化剂提供了新的契机。本文进而通过水热法合成多种MXene衍生的复合光催化剂。在水热条件下，MXene可以发生氧化反应，可控地转变成相应的过渡金属氧化物。通过合适的水热条件和晶面控制剂，我们得到了晶型可控并选择性暴露活性晶面的TiO_2[2]、Nb_2O_5[3]等氧化物与MXene的异质结构。由于MXene作为氧化物生长的金属原子供体，该异质结构的界面缺陷少，有效减少了电子-空穴在界面缺陷处的复合[2]。我们进一步在氧化物半导体上引入Cu[4],[5]、Ag[3]、Ru[6]等金属助催化剂，构建了三元光解水催化剂，并研究了其光解水产氢性能。进一步的机理研究表明，在该结构中，金属作为产氢位点，而表面富含羟基的MXene具有极低的功函数，可以作为空穴的导体，使得光生电荷有效分离。我们的结果表明，MXene可以作为一个有效的材料平台，设计多种高效的光催化材料。

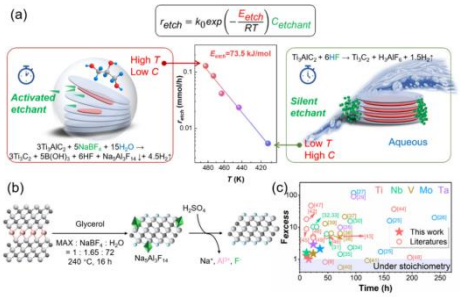


Fig. 1 Fundamentals of the Sweet synthesis of MXenes

关键词：MXene；刻蚀动力学；分子动力学；光催化产氢；异质结

参考文献

[11] **Xu, W.; Shi, Z.; Yu, Z.; Peng, C.; Yang, G.; Wang, H.-F.; Huang, J.; Cao, Y.; Wang, H.; Li, L.; Yu, H., A Sweet Synthesis of MXenes.** ***Nano Lett.*** **2024, 10.1021/acs.nanolett.4c02584.**

[12] **Peng, C.; Yang, X.; Li, Y.; Yu, H.; Wang, H.; Peng, F.** ***ACS Applied Materials & Interfaces*** **2016,** ***8*** **(9), 6051.**

[13] **Peng, C.; Xie, X.; Xu, W.; Zhou, T.; Wei, P.; Jia, J.; Zhang, K.; Cao, Y.; Wang, H.; Peng, F.et al.** ***Chem. Eng. J.*** **2021, 128766.**

[14] **Peng, C.; Xu, W.; Wei, P.; Liu, M.; Guo, L.; Wu, P.; Zhang, K.; Cao, Y.; Wang, H.; Yu, H.et al.** ***Int. J. Hydrogen Energ.*** **2019,** ***44*** **(57), 29975.**

[15] **Peng, C.; Wei, P.; Li, X.; Liu, Y.; Cao, Y.; Wang, H.; Yu, H.; Peng, F.; Zhang, L.; Zhang, B.et al.** ***Nano Energy*** **2018,** ***53*****, 97.**

[16] Xu, W.; Li, X.; Peng, C.; Yang, G.; Cao, Y.; Wang, H.; Peng, F.; Yu, H., *Applied Catalysis B: Environmental* 2022, *303*, 120910.

报告人简介：

华南理工大学化学与化工学院副院长，教授，博士生导师。入选教育部新世纪优秀人才（2012），广东省自然科学基金杰出青年基金（2012），广东省千百十省级培养对象（2014），广州市珠江科技新星（2011），全国石油化工青年教学名师（2021）。兼任中国颗粒学会理事，广东省化工学会副秘书长，科普与学术工作委员会主任委员，《化工进展》编委，《化工高等教育》编委。主要研究兴趣包括新型碳基纳米催化材料的创制及其催化性能、与能源环境相关的新型催化材料及反应工程等。在包括 Angew. Chem. Int. Ed., Energ. Environ. Sci., ACS Catal., J. Catal., AIChE J., Chem. Eng. Sci.等化学化工重要期刊上发表研究论文 200 余篇，近五年 SCI 引用 10000 余次。

High-performance electrothermal coatings based on natural flake graphite for multifunctional electrothermal applications

Xiaowen Wu[1,*], Zhi Lei[1], Shengzhi Duan[1], Xin Min[1], Zhaohui Huang[1], Minghao Fang[1]

[1] School of Materials Science and Technology, China University of Geosciences Beijing, Beijing, 10083

* xwwu@cugb.edu.cn

Electrothermal elements are used in electronic devices, physiotherapy, and health care due to their lightweight and fast temperature response [1]. However, the high cost and susceptibility to oxidation of traditional electrothermal materials limit their application [2,3]. In this work, a low-cost, environment-friendly, controllable, and high-performance natural flake graphite-based electrothermal coating is proposed that can be used in various electrothermal applications[4]. The results demonstrate that the morphology and electrothermal properties of the coatings can be controlled based on pressure engineering and the use of various adhesives. The uncompressed electrothermal coatings can reach a maximum temperature of 157.9 ℃ and a maximum electric conductivity of 27.89 S/m at 36 V, whereas the compressed coatings can reach a maximum temperature of 199 ℃ at only 18 V and a maximum conductivity of 433.6 S/m, which is 22 times higher than the corresponding uncompressed coatings. This work provides a low-cost, high-performance, and well-attainable industrialization path for the application of natural graphite-based electrothermal coatings in indoor heating, light electrothermal clothing, and snow and ice removal.

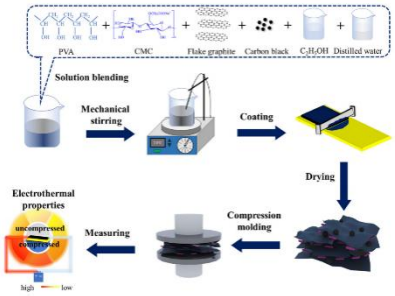


Fig. 1 Schematic diagram of multifunctional electrothermal coatings

Keywords: Electrothermal coatings, Natural flake graphite, Electric conductivity, Reduce the particle gap, Joule effects.

References

[1] Yang P, Xia T, Ghosh S, Wang JC, Rawson SD, Withers PJ, et al. Realization of 3D epoxy resin/Ti3C2Tx MXene aerogel composites for low-voltage electrothermal heating. 2D Mater 2021, 8, 11.

[2] Hu ZQ, Zhou J, Fu Q. Design and construction of deformable heaters: materials, structure, and applications. Advanced Electronic Materials. 2021, 7, 26.

[3] Ma A, Wei J, Wu Y, Wu Y, Zhao W. A novel directional repairing rGO-Fe3O4/Oil coating with magnetic driving for metal protection and self-healing. Chem Eng J, 2021, 421, 129597.

[4] Gao P, Liu W, Yang J. Using “intercalation bridging” to effectively improve the electrothermal properties of sheet graphite/ultrafine carbon powder conductive paste for screen printing. J Mater Sci Mater Electron. 2022, 33, 17599-618.

报告人简介：

吴小文，男，中国地质大学（北京）教授，博士生导师，伦敦大学学院访问学者。主要从事新型碳材料、陶瓷基复合材料、非金属矿物及工业固废综合利用相关科研及教学工作。主持国家重点研发计划项目子课题、国家自然科学基金面上项目、地质调查项目专题、北京高校“青年英才”计划项目、教育部产学合作协同育人项目、中央高校基本科研业务费项目和企业横向项目 20 余项。发表论文 230 余篇，其中 SCI 检索论文 200 余篇。获授权国家发明专利 10 余项。编制行业标准 10 余部。参编教材 1 部。获“科创江苏”创新创业大赛二等奖（2021）。现为中国非金属矿工业协会石墨专委会专家组成员，担任《ACS Applied Materials & Interfaces》《Composite Science and Technology》《CARBON》等 20 多个学术期刊审稿人。指导毕业博士硕士研究生 30 余人。

柔性加热膜的精确力热耦合分析

李宇航 [1,*]

[1] 北京航空航天大学，北京市，100191

[*]Email: liyuhang@buaa.edu.cn

摘要：可延展生物集成器件是一类新兴的电子器件，一般由无机功能元件、可延展互联结构和柔性生物兼容衬底和封装组成，对各种复杂的柔软生物组织曲面具有广泛的适应性。一方面，功能元件尺度小、基底厚度薄、导热性差极易导致生物组织局部温度集中造成热灼伤，生物组织独特的微观结构特性和生物热特性使得集成器件在生物组织上的传热行为与传统的傅里叶传热定律具有明显的不同。另一方面，为了实现对复杂曲面的适应性，必然离不开器件的非均匀变形，这将导致器件与皮肤界面的剪切作用，尤其是当器件整体机械特性与生物组织不匹配时，这种机械失配将会更为严重。因此，针对可延展生物集成器件与生物组织紧密贴附时的热痛感知与机械匹配性问题进行深入的机理分析并提出相应的器件设计指导是十分有必要的。本文针对生物集成器件贴附于皮肤时发热元件引起热痛评估的问题，考虑了皮肤微观多孔两相结构，利用双温度模型预测了双相滞后模型中的两个热迟滞参数。基于非傅里叶热效应，建立了器件/皮肤系统的热力耦合理论模型，对预测的热迟滞参数进行了验证。

关键词：柔性加热膜，力热耦合，非傅里叶效应，Pennes 生物方程

报告人简介：

李宇航，男，北京航空航天大学教授，国家级青年人才。主要从事新型功能材料与器件设计与制备、电子器件传热分析与散热设计、结构热力耦合分析、结构动力学分析等方面研究。发表SCI论文100余篇，H指数36。近5年，在JMPS、Int. J. Heat Mass Transf.、Adv. Funct. Mater.、IJSS、Small、Nat. Commun.、Nature、Adv. Mater.等期刊发表SCI论文50余篇，获得了2023年度中国航空学会科学技术奖（自然科学）二等奖。担任中国力学学会软物质力学工作组成员、中国颗粒学会理事、《Carbon》、《Labon a chip》、《Journal of Applied Mechanics》等20余个国际期刊的审稿人，主持国家自然科学基金面上和青年项目、航空基金、航天基金等10余项。

邀请报告：

直升机-进气道一体化条件下砂尘宏观运动特性研究

吴祯龙*

南京航空航天大学，南京，210016

*Email: zhenlongwu@nuaa.edu.cn

摘要：砂尘防护是直升机设计、尤其是涡轴发动机进气防护必须考虑的一个重要课题。目前涡轴发动机砂尘防护存在的一个突出问题是所设计的砂尘分离系统，即粒子分离器，在真实直升机飞行条件下对砂尘的分离效率达不到设计性能。针对这一问题，有关学者提出真实装机飞行条件下旋翼下洗流可能对砂尘运动轨迹具有显著影响的猜想。在两机专项的支持下，本课题组对直升机与进气道一体化条件下旋翼下洗流与发动机抽吸流耦合流场中砂尘运动规律和粒子分离器分砂性能进行了详细深入的研究。本报告将对UH-60黑鹰直升机气动/砂尘一体化研究结果进行简要介绍。

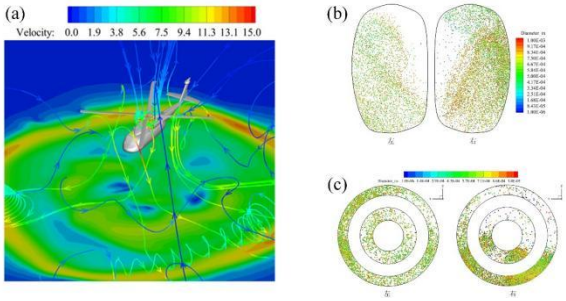


Fig. 1 Figure title in English

关键词：直升机；涡轴发动机；砂尘；下洗流

Study on macroscopic motion characteristics of sand sediment under helicopter-inlet integrated condition

Zhenlong Wu[1,*]

[1] College of Energy and Power Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing, 210016

* zhenlongwu@nuaa.edu.cn

Sand and dust protection is an important issue in helicopter design, especially in turboshaft engine intake protection. At present, a prominent problem in the sand and dust protection of turboshaft engine is that the designed sand and dust separation system, namely particle separator, can not reach the designed performance in the real helicopter flight conditions. To solve this problem, some scholars have put forward a conjecture that the rotor downwash may have a significant effect on the sand and dust movement trajectory under real installed flight conditions. With the support of the National Science and Technology Major Project of China, our research group has carried out a detailed and in-depth study on the sand and dust movement rule in the coupling flow field of rotor downwash flow and engine suction flow under the integrated condition of helicopter and inlet, and the sand separation performance of particle separator. This report will provide a brief introduction to the results of the UH-60 Black Hawk helicopter aerodynamic/sand-dust integration study.

Keywords: Helicopters; Turboshaft engine; Sand dust; downwash

报告人简介：

吴祯龙，南京航空航天大学教授、博士生导师，国家级青年人才、德国洪堡学者、南航进气道团队航空环境实验室负责人。2011 年在南京航空航天大学获学士学位，2016 年在北京航空航天大学获博士学位，2016-2020 在北京航空航天大学担任讲师、硕士生导师，2017-2020 在德国斯图加特大学从事洪堡博士后研究，2020 年至今在南京航空航天大学担任教授、博士生导师。主要从事与飞行器设计、飞行器进气道气象适应与排异技术相关的环境流体力学、空气动力学、多相流研究，发表 SCI 学术论文 50 余篇（其中一作或通讯 40 余篇），谷歌学术总引用 1600 余次，单篇最高引用超 500 余次，h 指数 16，参与编写英文专著 1 部，连续 4 年入选爱思唯尔-美国斯坦福大学“全球前 2%顶尖科学家”榜单，ESI 高被引。主持国家高层次人才计划青年项目、德国洪堡基金、国家自然科学基金（青年+面上）、北京市自然科学基金（青年）、航空科学基金、航空航天工业项目等研究课题，参与两机专项、民机专项、陆航预研等重大基础研究课题，对我国军民两用飞发环境适航设计起到了一定的推动作用。讲授本科生《航空发动机总体设计》及本科留学生《航空发动机原理(英文)》课程。

改性二维碳材料在锂电/钠电中的应用

李念武*

北京化工大学 化学工程学院，北京市朝阳区北三环东路 15 号，100029

*Email: linianwu@buct.edu.cn

摘要：高比容量的锂电和钠电负极材料是电池领域研究的焦点之一。[1] 软碳和硬碳材料都含有类石墨结构和准石墨结构，类石墨结构多的软碳材料更适合用于负极材料的包覆层，含有大量闭孔和无序碳结构的硬碳更适合作为储锂和储钠的主体材料。在锂离子电池方面，我们采用含丰富亚纳米孔（＜0.4 nm）的硬碳材料将金属锂以准金属的形式限域在硬碳内部的孔结构中，高的亚纳米孔容（0.262 cm^3 g^{-1}）为准金属的存储提供足够的纳米空间，同时亚纳米孔结构可以将电解质与金属锂隔开，从而避免了电解质与金属锂的副反应，因此，准金属锂/硬碳负极在碳酸酯电解质中表现出高的锂沉积效率（240 圈平均效率为99.7%），而且其可逆容量可达600 mAh g^{-1}。[2] 此外，我们制备了富含大量闭孔结构的硬碳材料，并且用软碳层包覆来提高库伦效率和循环稳定性，其可逆嵌锂容量可达530 mAh g^{-1}。在钠离子电池方面，我们采用交联、掺杂等方法制备主体硬碳材料，采用软碳包覆减少副反应，得到可逆容量为340 mAh g^{-1}的钠离子电池负极材料。

关键词：软碳；硬碳；包覆层；负极材料

参考文献

[1] T. Jin, J. Chen, X. Chen, N. Li, L. Yu [J]. Next Energy, 2023, 1(3): 100040.

[2] K. Su, T. Jin, C. Zhang, R. Wang, S. Yuan, N. Li, L. Yu. Quasi-metallic lithium encapsulated in the subnanopores of hard carbon for hybrid lithium–ion/lithium metal batteries [J]. Chemical Engineering Journal, 2022, 450: 138049.

报告人简介：

李念武，副教授，博士。北京化工大学化学工程学院副教授，中国颗粒协会青年理事，eScience 青年编委，Energy Materials 青年编委。长期从事锂/钠电池负极、电解质及界面等方面的研究工作。在 Advanced Materials、Angewandte Chemie International Edition 等国际学术期刊上发表论文 80 余篇，SCI 总引用 8000 余次，H-index 为 36，入选 2023 年科睿唯安全球高被引学者。主持国家自然科学基金青年基金一项，主持国家自然科学基金面上项目一项，作为骨干参与国家重点研发计划、山东省重点研发计划等。已授权国内发明专利 7 项，国际 PCT 专利 1 项。

伊蒙黏土基纳米片状污染水体治理材料的构建

潘志东[1,*]，黎振源[1]，袁姗姗[2]，王燕民[1,*]

[1]华南理工大学材料科学与工程学院，中国广州五山，510640

[2]深圳市理邦精密仪器股份有限公司，中国深圳坪山，518122

*Email: panzd@scut.edu.cn, wangym@scut.edu.cn

摘要：水体中重金属离子污染难以生物降解，导致其在环境和生物体中累积。黏土矿物为片层状结构，具有良好的吸附和离子交换性能，常被作为吸附剂用于处理水体中的重金属离子。伊蒙黏土是蒙脱石矿物在成岩作用下向伊利石转化过程中的一种过渡类型不规则混层矿物，在两广地区分布广泛，储量丰富，易开采，具有应用于污染水体治理的潜在价值。

伊蒙黏土原矿（粒径小于100 nm的颗粒含量约21%）经超细研磨制备了纳米粒级的伊蒙黏土，其粒径小于100 nm的颗粒含量达到了70%，颗粒呈典型二维层片状。将其应用于处理市政生活垃圾焚烧飞灰渗滤液和/或水体中的典型重金属离子，包括Cr(III)、Mn(II)、Co(II)、Ni(II)、Cu(II)、Zn(II)、Cd(II)和Pb(II)，可显著降低重金属离子的浓度，在优化条件下，对Cu(II)和Cd(II)的吸附脱除率分别为95.15%和91.53%，对Ni(II)、Cu(II)、Cd(II)和Pb(II)的最大吸附量分别为7.704 mg/g、8.813 mg/g、17.16 mg/g和36.20 mg/g。

构建纳米片状伊蒙黏土基复合材料可有效提高其对重金属离子的吸附能力。经硅烷化反应在纳米伊蒙黏土颗粒表面接枝3-氨丙基三乙氧基硅烷（APTES），制备了一种胺基-纳米伊蒙黏土复合材料，对水中Pb(II)和Cr(VI)离子最大吸附量分别为131.23 mg/g和36.91 mg/g。

进一步，通过化学共沉淀法原位合成Fe_3O_4纳米颗粒并将其沉积负载于纳米伊蒙黏土层片状颗粒表面，再经硅烷化反应接枝3-氨丙基三乙氧基硅烷（APTES）制备了一种磁性胺基-纳米伊蒙黏土复合材料用于处理重金属离子，其呈类超顺磁性，可通过外磁场磁分离回收再生，经过6次吸附/脱附循环后，仍可保持对水中Pb(II)离子初始吸附量的82.91%。

另外，通过机械力化学法复合聚乙烯亚胺（PEI）、纳米伊蒙黏土和Fe_3O_4纳米颗粒制备了磁性聚乙烯亚胺基-纳米伊/蒙黏土复合材料（PEI-MI/S）。与常规搅拌复合的方法相比，机械力化学效应产生的挤压与剪切应力作用使Fe_3O_4纳米颗粒被均匀分散并附着于纳米伊蒙黏土层片状颗粒表面，利于其通过静电作用和氢键接枝PEI分子，并促进PEI分子与戊二醛分子之间的交联反应，显著提高了PEI的负载量。采用磁分离法回收并再生该复合材料，经6次吸附/脱附循环后，仍可保持对水中Cr(VI)离子初始吸附量的71.43%。

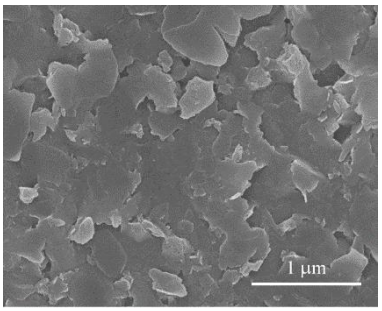


Fig. 1 SEM images of nano-sized illite/smectite clay

关键词：纳米伊蒙黏土；复合材料；吸附；水污染；重金属

报告人简介：

潘志东，华南理工大学，博士，副教授，中国颗粒学会理事

从事无机功能材料与纳米技术方向的研究，包括：1) 粉体工程与纳米材料 – 纳米颗粒的精细合成/调控技术、纳米颗粒的低成本批量制备技术、纳米颗粒的改性技术等。2) 无机功能材料 – 功能性无机填料、新型陶瓷色料、近红外反射陶瓷材料、环境诱导发光材料、磁性功能材料、陶瓷喷墨打印材料等。

承担国家自然科学基金、广东省教育部产学研结合项目、广东省省级科技计划项目公益研究与能力建设专项、广州市科技计划民生科技重大专项、佛山市重大科技项目（应用型核心技术攻关领域）、佛山市科技创新项目和企业委托项目等 20 余项；发表研究论文 90 余篇，被 SCI 和 EI 收录 60 余篇。申请专利 30 余件，其中 6 件专利已向企业实施转让。曾获中国颗粒学会技术发明奖二等奖、佛山高新技术进步奖二等奖、中国轻工业联合会科学技术发明奖三等奖、广东省轻工业联合会科学技术发明奖二等奖、茂名市科学技术进步奖三等奖和清远市科学技术进步奖三等奖。

以勃姆石合成片状氮化铝粉末之制备技术

陈智成[1,*]，向性一[2]，陈奕廷[2]

[1]中信科技大学机械工程系，台南市中华路 49 号，74448

[2]成功大学资源工程系，台南市大学路 1 号，70101

*Email: ccchen@mail.ctbctech.edu.tw

摘要：由于与碳中和相关，电子设备的散热问题近来引起了广泛关注。 热材料的应用变得至关重要，以提高设备内部材料的散热性能，从而实现设备的小型化和能效化。导电聚合物复合材料作为解决这些挑战的有前景的解决方案而出现。 开发高性能导电聚合物复合材料已成为学术界和工业界的关注焦点。 增强复合材料导热性的创新方法涉及片状和球形填料的策略性组合。这种混合填料策略旨在利用每种填料的独特性能，促进复合材料内热传输的改善。但有关制作具有最高导热陶瓷填料之片状氮化铝粉末之文献却相当少，使得其在增强复合材料导热性的应用更少。

本研究以水热法合成片状勃姆石，再以碳热还原氮化生产片状氮化铝粉末。并分析了非晶质碳涂层、液态有机氮源和氮化剂对氮化铝热行为和微观结构的影响。优化合成参数以获得所需的片状 AlN 颗粒的长宽比和表面特性。

关键词： 氮化铝、片状、碳热还原氮化法、氮化剂

参考文献

[1] **Jung, W. S. (2011). Use of melamine in the nitridation of aluminum oxide to aluminum nitride. Journal of the Ceramic Society of Japan, 119(1396), 968-971.**

[2] **Uheda, K., Takahashi, M., Takizawa, H., Endo, T., Shimada, M. (1999). Synthesis of aluminium nitride using urea-precursors. Key Engineering Materials, 159-160, 53-58.**

[3] **Kato, T., Sugawara, K. (2019). Low-Temperature Synthesis of Aluminum Nitride by Addition of Ammonium Chloride. ACS Omega, 4(12), 14714-14720.**

[4] **Wu, H., Qin, M., Chu, A., Wan, Q., Cao, Z., Liu, Y., Qu, X., Volinsky, A. A. (2014). AlN powder synthesis by sodium fluoride-assisted carbothermal combustion. Ceramics International, 40(9), 14447-14452.**

[5] **董小琳 (CN108516835A). 一种片状氮化铝粉体的制备方法.**

[6] **Zhang, L. M., Lu, W. C., Cui, R. R., Shen, S. S. (2010). One-pot template-free synthesis of mesoporous boehmite core-shell and hollow spheres by a simple solvothermal route. Mater Res Bull, 45, 429−436.**

[7] **Santos, P. S., Coelho, A. C. V., Santos, H. S., Kiyoharab, P. K. (2009). "Hydrothermal Synthesis of Well-Crystallised Boehmite Crystals of Various Shapes." Materials Research, 12(4), 437-445.**

[8] **Fukuda, Takeshi. (1994). "Fine flaky boehmite particles and process for the preparation of the same." US Patent US5306680A.**

[9] **Fukuda, Yushi, Shito, Ryuichi. (1999). "Fine thin platy boehmite particles and their production." Japanese Patent JPH1121125A.**

[10] **Lefort, P., & Billy, M. (1993). "Mechanism of AlN Formation through the Carbothermal Reduction of Al2O3 in a Flowing N2 Atmosphere." Journal of the American Ceramic Society, 76(9), 2295-2299.**

[11] **Forslund, B., & Zheng, J. (1993). "Carbothermal synthesis of aluminum nitride at elevated nitrogen pressures. Part I. Effect of process parameters on conversion rate." Journal of Materials Science, 28, 3125-3134.**

[12] **Forslund, B., & Zheng, J. (1993). "Carbothermal synthesis of aluminum nitride at elevated nitrogen pressures. Part II. Effect of process parameters on particle size and morphology." Journal of Materials Science, 28, 3135-3142.**

报告人简介：

中信科技大学机械工程系 特聘教授

中信科技大学绿能材料研究中心 主任

Ceramics International 期刊评审

中国颗粒学会理事

台湾陶业研究学会精密陶瓷研究委员会委员

陶业季刊编辑委员会委员

FE 石墨烯柔性传感器

张晓静*

北京航空航天大学，北京市海淀区学院路 37 号，100191

*Email: zhangxiaojing@buaa.edu.cn

摘要：柔性压力传感器作为一种常用于人体健康监测的可穿戴设备而受到了广泛的关注。拥有优异导电性的石墨烯为柔性压力传感器性能进一步提升开辟了新的道路。长久以来，阻碍柔性压力传感器发展的关键在于：高灵敏度、大工作范围和制备流程简易程度三者往往不可兼得，但是实际应用中却缺一不可。本文以石墨烯柔性压力传感器的浸染液研制为基础，选用斜纹布、海绵、防滑布三种不同结构的基底材料，通过对其表面形貌、内部结构和层数的设计，研制了性能均衡、灵敏度可调节、高灵敏度的三种石墨烯柔性压力传感器，并根据三种传感器的不同性能特点，研究了其应用于人体健康监测领域的效果，如步行监测、手指灵活度监测、手腕脉搏监测、喉结振动监测和抓握监测等。

关键词：柔性压力传感器，石墨烯基导电油墨，浸染，缝纫，人体健康监测

Cu 纳米添加剂摩擦催化聚合物-金属界面石墨烯的原位生成与全程油基超滑的实现

高传平（副教授）[1,2,*]，张晟卯 [1,2]，张平余 [1,2]，张治军 [1,2]

[1]河南大学纳米杂化材料应用技术国家地方联合工程研究中心，河南 开封，475003

[2]河南大学纳米科学与工程研究院，河南 开封，475003

[*]Email: chuanpinggao@henu.edu.cn；chuanpinggao@163.com

摘要：目前，润滑油较高的粘度和摩擦副材料的严苛限制是实现油基超滑的主要制约因素，因此建立新颖的油基超滑实现体系具有重要的学术意义和工程价值。本文以二烷基二硫代磷酸改性的 Cu 纳米颗粒（DDP-Cu NPs）为润滑油聚α烯烃（PAO40，一种工业现役高黏度润滑油）的添加剂，在聚醚醚酮-不锈钢（PEEK-GCr15）配副体系中不仅实现了高黏度润滑油体系的超滑，而且体系未经历跑合阶段。尤其当 DDP-Cu NPs 的添加量为 0.25 wt.%时，最低的摩擦系数约为 0.002，而磨损率降至 10^{-9} mm^3/Nm 水平（比现有文献的报道低 1~2 数量级），且超滑状态持续整个摩擦实验过程（7200 s），这些现象在以往的报道中并不常见。经过对 PAO40 和 DDP-Cu NPs 摩擦实验前后理化性质的对比，以及 PEEK 与 GCr15 摩擦接触面的系统分析，我们发现以上结果主要归功于球形 Cu NPs 的滚动效应和摩擦接触界面上的高性能碳基摩擦膜。一方面，二烷基二硫代磷酸分子链有助于 Cu NPs 在金属 GCr15 表面的吸附，从而有助于其滚动效应的发挥，这也是超滑前期未经历跑合阶段的原因；另一方面，GCr15 表面的碳基摩擦膜，除了大部分的无定型非晶碳膜外，还有少部分原位生成的少层石墨烯（甚至是单层石墨烯）；同时这些石墨烯也出现在润滑油中，它们共同维持了体系后半段的超滑状态。进一步的微观结构显示，这些石墨烯的原位生成与 DDP-Cu NPs 的摩擦催化，尤其是 Cu（111）晶面紧密相关，即 DDP-Cu NPs 的摩擦催化作用加剧了 PEEK 分子和 PAO40 分子的降解，促进了非晶碳和石墨烯等高润滑性能碳衍生物的形成，最终诱导了油基超滑的实现。本文所涉及结果在一定程度上既丰富了无机纳米颗粒的抗磨减摩理论，又拓展了油基超滑的实现方式，同时对其实际应用也具有一定的推动作用。

关键词：油基超滑；Cu 纳米添加剂；摩擦催化效应；PEEK-GCr15 摩擦配副；高性能碳基摩擦膜

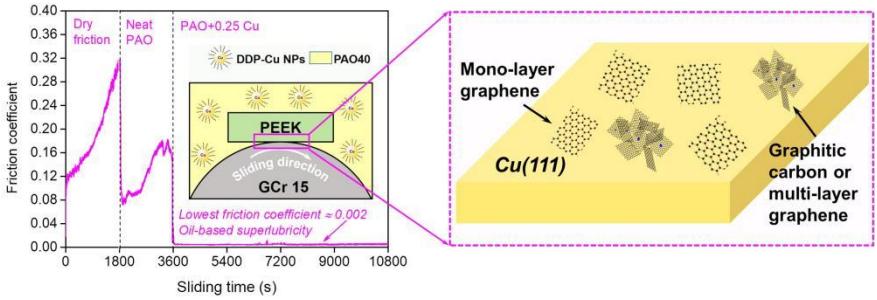


Fig. 1 Achieving oil-based superlubricity and corresponding friction mechanism.

报告人简介：

高传平，男，博士（后），河南大学副教授，博士生导师。国家自然科学基金网评专家；教育部和河南省研究生学位论文评审专家；中国机械工程学会高级会员、摩擦学分会青年委员；中国颗粒学会第四届青年理事；《Friction》和《摩擦学学报（中英文）》青年编委。主持/完成国家自然科学基金、河南省自然科学基金、中国博士后基金等省部级以上项目 5 项；中国科学院、清华大学等国家重点实验室/工程中心开放课题 4 项；作为研究骨干，参与完成省部级和企业委托项目各 4 项。近 5 年，在摩擦学专家认可的国内外专业期刊发表论文 20 余篇；申请中国发明专利 9 件，授权 5 件。

锂电高镍层状正极失效机制及改性策略研究

黄士飞[1,3,4]，吕姚[2,3,4]，曹译丹[4]，赵玉峰[3]，张久俊[3*]，康飞宇[4,*]

[1]扬州大学机械工程学院、扬州大学碳中和技术研究院，扬州，225009

[2]浙江水利水电学院机械工程学院，杭州，310018

[3]上海大学理学院可持续能源研究院，上海，200444

[4]清华大学深圳国际研究生院材料研究院，清华-伯克利深圳学院，518071

*Email: huangsf@yzu.edu.cn

摘要正文：低钴高镍层状氧化物正极材料因具有高比容量（>200 mAh g^{-1}）和高能量密度（~800 Wh kg^{-1}）已被广泛应用于锂离子电池的正极材料。开发高电压范围 （>4.3V）的容量、减少钴金属的使用以及降低成本等仍是目前研发的热点领域，也是下一代高能量密度商业化锂离子电池正极材料使用的必备条件。但是，低钴高镍材料中低钴和高镍含量会大大降低层状氧化物正极材料的热学（热失控风险）和力学（晶粒机械疲劳）稳定性，并增加表面敏感性，使得生产、存储和应用过程中存有诸多技术挑战。同时，此材料在充放电循环过程中还存在不可逆的副反应、结构退化和电压/容量衰减等，致使其电化学性能下降。鉴于此，本文从低/无钴高镍层状氧化物正极材料的制备方法与改性策略入手，通过结构表征、原位/非原位电化学性能测试分析并结合第一性原理计算等手段进行了从微观形貌、晶体结构到原子及电子水平的电化学储能机制探索，取得了系列的研究进展。

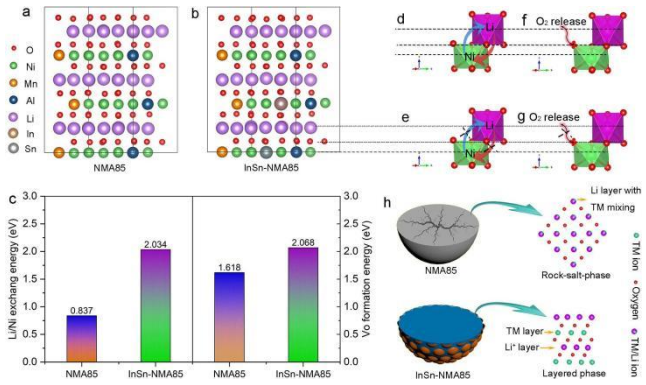


Fig. 1 Schematic illustration of crack evolution and the phase transformation and DFT simulation for high-nickel layered lithium cathode materials.

关键词：锂离子电池；低钴高镍层状氧化物；容量衰减；改性策略；电化学储能机制

参考文献

[1] Lv Y, Huang S, Zhang J, et al. Antimony Doping Enabled Radially Aligned Microstructure in $LiNi_{0.91}Co_{0.06}Al_{0.03}O_2$ Cathode for High-Voltage and Low-Temperature Lithium Battery[J]. Adv. Funct. Mater. 2024, 34, 2312284.

[2] Lv Y, Huang S, Lu S, et al. Engineering of cobalt-free Ni-rich cathode material by dual-element modification to enable 4.5 V-class high-energy-density lithium-ion batteries[J]. Chemical Engineering Journal, 2023, 455, 140652.

[3] Lv Y, Huang S, Lu S, et al. $B_2O_3/LiBO_2$ dual-modification layer stabilized Ni-rich cathode for lithium-ion battery. Journal of Power Sources, 536, 231510.

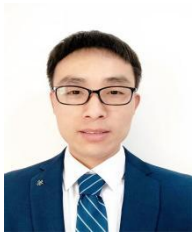
[4] Lv Y, Huang S , Zhao Y ,et al. A review of nickel-rich layered oxide cathodes: synthetic strategies, structural characteristics, failure mechanism, improvement approaches and prospects[J]. Applied Energy, 2022, 305.DOI:10.1016/j.apenergy. 2021.117849.

[5] Liu Y, Lv Y, Li N, et al. "LiF/Fe composite for Ni-rich cathode prelithiation: Synthesis, bilayer structured electrode and lithium loss compensation." Chemical Engineering Journal 484 (2024): 149550.

[6] Ouyang Y, Huang S, Li N, et al. Carbon cloth with lithiophilic carbon-coated ZnO nanotubes as anode current collector for hybrid

lithium ion/lithium metal battery. Carbon, 2024, 229, 119452.

报告人简介：



黄士飞，清华大学博士后、助理研究员，现为扬州大学“青年百人计划”特聘教授/硕导。河北省优秀博士学位论文，深圳市优秀科技创新人才专项资助获得者；兼任中国颗粒学会会员，中国化学会会员，中国化工学会专业会员，江苏省可再生能源学会会员，新加坡 Viser 学术专家委员会委员等职；同时担任《eScience》、《Exploration》、《Carbon Neutralization》、《Batteries》、《Information &Functional Materials》、《Next Materials》、《Electrochemical Acta》等高水平 SCI 期刊青年编委、审稿人和电池专题咨询专家，三零六零环境管理等公司技术顾问等职。

现阶段主要从事高能电化学储能材料与器件的关键技术研发工作，涉及新型高性能锂\钠电池关键正负极材料、电解液设计开发，电极界面稳定化策略研究与应用等。

近年来取得研究成果 50 余项，其中 SCI 论文 30 余篇（其中 AFM、EnSM 等领域高水平学术论文 10 余篇，多篇入选 ESI 高被引，论文引用超 2500 次，单篇最高引用超 500 次）；授权/申请国家发明专利多项；主持/参与国家、省市级等科研项目十余项；

墙报展示人简介：

吕姚，浙江水利水电学院讲师、“南浔青年学者”，兼中国计量大学硕士研究生导师。先后于上海大学可持续能源研究院（博士导师张久俊院士）和清华大学深圳国际研究生院（博士联培导师康飞宇教授、曹译丹副教授）从事高能电化学储能材料与器件研发工作。研究主要涉及锂、钠电高镍、超高镍（无钴）等层状正极材料的结构设计、改性及微观形貌与晶体结构调控等。近年来参与国家自然科学基金及横向项目等研发工作多项。在 Adv Funct Mater、Chem Eng J、Appl Energy、Nano Research、J Power Sources 和 Rare Metals 等国际期刊发表 SCI 论文 10 余篇。

石墨烯在 CL-20 降感中的应用研究

马含 [1*]

[1]沈阳理工大学, 辽宁省沈阳市浑南区南屏中路 6 号， 110159

*Email: 1075826286@qq.com

摘要：新型单质含能材料 CL-20 具备优异的爆轰性能，但较高的感度限制了其在军民领域的广泛应用。二维纳米材料石墨烯具有优良的润滑性能和导热性，将其引入复合含能材料体系中，能够抑制热点的产生，有效降低炸药感度。本课题以石蜡作为 CL-20 降感壳层的基体，采用简便易行的溶液混合法，分别将 Si 纳米粒子、石墨烯纳米片和多壁碳纳米管作为增强相添加至石蜡基体中，系统探究了不同含量的（0.2wt%、0.5wt%、1.0wt%）纳米材料对复合含能材料体系性能的影响规律。结果表明，与 Si 纳米粒子和多壁碳纳米管相比，添加 0.2wt%石墨烯的复合含能材料同时具备高热稳定性、高包覆率、低摩擦感度和撞击感度，且较低的添加量使得复合含能材料能够保持较高的爆轰性能。本课题为新型包覆降感材料的设计和制备提供了全新的思路。

柔性 RF MEMS 开关

史迎利*

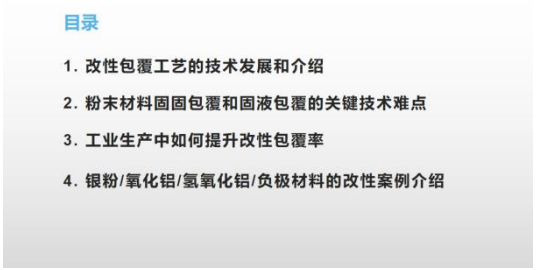
北京航空航天大学，北京市海淀区中关村南大街 5 号, 100081

*Email: yingli.shi@bit.edu.cn

摘要：基于柔性基底的微机电系统 (MEMS，micro electromechanical system)广泛应用于柔性、可重构射频系统中，如射频 (RF，radio-frequency) MEMS 开关、移相器、可重构天线、相控阵天线和谐振器等。具有可动结构的柔性 RF MEMS 器件，与刚性 MEMS 器件或者其他类型的柔性电子器件相比，其在结构设计与制备工艺上要困难得多。本文提出了一种基于改进表面 MEMS 加工技术、集成在 COP 基底上的柔性 RF MEMS 开关，可应用于卫星通信的 17-19 GHz 频段。通过有限元仿真，柔性 RF MEMS 开关可以通过缩小器件尺寸达到承受一定的弯曲半径，而不会降低射频性能的目标。表明采用改进表面 MEMS 工艺、具有 MEMS 膜桥锚点特殊结构设计的柔性 RF MEMS 开关，在 0 mm-1、0.05 mm-1、0.10 mm-1 曲率下的弯曲变形对射频特性的影响不明显。采用系统地多物理场耦合仿真模型，给出了影响 RF MEMS 开关射频特性的弯曲曲率范围。柔性射频 MEMS 开关具有高工艺兼容性和稳定的射频性能，是未来微波通信和消费类电子产品的潜在选择。

粉末材料的改性包覆装备及工艺

杨震
Hosokawa Alpine AG
Peter-Doerfler-Str. 13 – 25，Augsburg，Germany，86199
yhyz@live.cn



[46] 报告人简介：

杨震，Hosokawa Alpine AG，矿物及技术部高级工程师，专注粉体工程行业近 14 年。

位错对铁电薄膜畴变影响机制研究

王帅 [1*]

[1] 北京航空航天大学，北京市海淀区学院路 37 号，100191

摘要：随着电子器件日趋微型化，具有尺寸效应且广泛存在于所有介电材料中的挠曲电效应越发受到重视。“挠曲电效应”是描述材料中应变梯度和电极化强度之间相互作用的一种新型的力电耦合效应。另一方面，铁电电子器件小型化也对畴结构调控带来了更大的挑战。位错是一种存在于铁电薄膜中常见的一维缺陷。本工作利用相场方法，探讨了挠曲电效应及刃位错对铁电薄膜畴结构及与畴壁移动之间的相互作用机制。

通过对不同方向的刃位错及不同温度下的铁电体的涡结构的相场模拟显示，刃位错产生的应力对畴涡有吸引或排斥的作用。随着温度的升高，这种影响变得更加显著。未来展望可以开展位错周围挠曲电效应的影响研究。

图像法对二维材料粒度粒形的表征

曹静 [1*]

[1] 深圳市百利特科技有限公司

*Email: 1014154013@qq.com

摘要：在当今二维材料的研究领域中，粒度和粒形具有至关重要的意义。粒度方面，它能够显著改变二维材料的电学性能。具体而言，会对导电性和半导体特性产生影响。例如，不同粒度的二维材料在导电能力上可能存在差异，较大粒度可能导致导电性降低，而较小粒度则可能使其导电性增强。同时，粒度还会影响二维材料在化学反应中的活性和选择性，合适的粒度可以提高反应效率和产物的选择性。

粒形同样不可忽视，它对光学性能有着重要影响。特定形状的颗粒在光吸收和发射上呈现出明显差异，这为二维材料在光学领域的应用提供了更多可能性。此外，粒形还会作用于力学性能、分散性和相容性。不同形状的二维材料颗粒在力学强度上有所不同，并且在与其他材料混合时，其分散性和相容性也会因粒形的差异而变化。

对于二维材料粒度和粒形的测量，图像法具有独特优势。其测量方法主要是通过先进的成像技术获取二维材料的清晰图像，利用专业的图像分析软件对图像中的颗粒进行识别和测量。在粒度测量方面，通过对大量颗粒的尺寸统计分析，得出粒度分布情况。对于粒形的测量，则从多个角度进行评估，如形状因子、圆度、纵横比等参数，全面准确地描述颗粒的形状特征。

鉴于精准控制粒度和粒形对二维材料的优化和广泛应用极为重要，本次报告聚焦于图像法对二维材料粒度及粒形的表征。首先介绍图像法的测试原理，进而阐述其技术特点，能够提供高分辨率的图像，准确测量粒度和粒形参数，同时还可以对不同形状的颗粒进行分类和统计。在应用方面，图像法可广泛应用于二维材料的研发、生产和质量控制等环节，为二维材料的性能优化提供有力支持。

基于机械形变的电磁超表面性能调控研究

樊宣青[1]，李宇航[2*]

[1]杭州市北京航空航天大学国际创新研究院，浙江省杭州市，311115

[2]北京航空航天大学，北京市，100191

* Email: liyuhang@buaa.edu.cn

摘要：频率选择表面（FSS）是由周期性排列的金属贴片或孔径单元构成的二维无限大平面结构，具有带通或带阻的滤波特性，可针对不同工作频率、极化方式或入射角度的电磁波进行选择性传输。一旦设计和制造完成，频率选择表面的电磁特性就很难改变，但调整这些特性对于它们的实际应用至关重要。与传统器件相比，柔性频率选择表面更薄、高度柔性和可拉伸，使其能够附着在工程结构中典型的不可展曲面上，从而实现与电磁器件的共形接触。本报告研究了能够机械变形的柔性频率选择表面，将传统的电磁性能调节原理与当前柔性电子设备设计技术相结合。同时，本研究系统地探讨了机械变形对电磁特性的影响以及相关的力电磁调制机制，促进了它们在具有不同电磁调制需求的广泛应用中的使用。

关键词：频率选择表面；柔性；二维超表面；电磁调控

报告人简介：

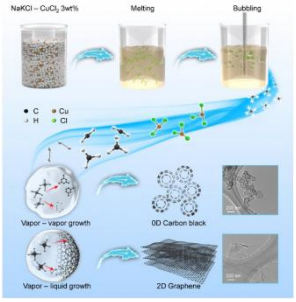
樊宣青，男，1994 年生，杭州市北京航空航天大学国际创新研究院助理研究员。担任中国颗粒学会第四届青年理事。研究方向为柔性电子器件与频率选择二维超表面，致力于频率选择表面的设计优化制备，等效方法及力学调谐等系统研究。近年来，第一/通讯作者发表 SCI 论文 9 篇，申请国家专利 4 项，参与多项国自然基金、省部级科研项目、军民研发项目。

口头报告：

熔融盐鼓泡 CVD 法制备 0D-2D 碳材料及机制研究

赵一洼，时志远，于庆凯
中科院上海微系统与信息技术研究所

摘要：熔融盐作为一种烃类裂解介质，具有优异的热稳定性、流动性以及易与产物分离的特性。利用烃类气体在熔盐中鼓泡是发挥熔盐优势的重要方法，通常，熔融盐的催化能力低于熔融金属或者熔融合金，但在熔盐中加入过渡金属盐可提高催化性能，但其中的催化机理尚不清晰。本文研究了 850°C 在熔融盐中一锅法合成 0D 炭黑和 2D 石墨烯的鼓泡 CVD 技术。谱学表征结果证明，过渡金属（Cr、Fe、Ru、Ni、Pd、Cu）对应的氯离子配合物是实现甲烷高效裂解的活性物质。气泡引入的限域空间作为一种微型反应器，既定义了碳材料产物的形态，又加速了碳材料的生长。得益于离子配合物与限域空间的协同作用，利用鼓泡 CVD 法在较低的温度下实现了高效、低成本的制备 0D 炭黑-2D 石墨烯复合碳材料。



纯弯曲下充气薄膜管状结构的起皱行为分析

吴文斌[1]，李宇航[1,*]

[1]北京航空航天大学固体力学所，北京市海淀区学院路 37 号，100191

*Email: liyuhang@buaa.edu.cn

摘要：充气薄膜管状结构具有着重要应用，对结构施加弯曲载荷可能会导致其压缩侧的局部不稳定，导致褶皱的形成，这可能会损害结构强度。因此，有必要全面了解充气薄膜管状结构在弯曲载荷作用下的起皱行为。首先，利用最小势能原理推导了纯弯曲条件下结构临界起皱行为的理论解。根据系统的能量表达式，结构的临界起皱行为取决于无量纲几何参数和内压参数。系统的临界起皱载荷和起皱模式受厚度与半径之比和内部气压与杨氏模量之比的影响。随后，通过有限元分析实例验证了理论解，并系统地研究了无量纲几何参数和内压参数的影响。最后，通过数值结果研究了后屈曲过程中结构形态的演变。研究结果表明，在屈曲后，褶皱可能会发生二次分叉，并演变成非轴对称的菱形图案。这些结果对于理解充气薄膜管状结构的弯曲失稳和破坏机制具有重要意义。

关键词：充气薄膜管状结构；弯曲起皱；临界起皱载荷

报告人简介：

吴文斌，男，1999 年生，北京航空航天大学博士生在读。
研究方向为柔性电子器件结构设计分析，薄膜结构的失稳力学分析等。

附：报告人/墙报展示人为学生

DES 性能对电化学液相剥离法制备氮化硼纳米片的影响研究

丁琦晖[1]，单倩[1]，张琦[1]，陈孟达[1]，蔡鼎[1]，毋伟[1,*]

[1]北京化工大学，北京市朝阳区北三环东路 15 号，100059

报告人丁琦晖邮箱：susia374@163.com

通讯作者毋伟邮箱：wuwei@mail.buct.edu.cn

摘要：六方氮化硼（h-BN）具有较大的比表面积和独特的光电性能，在许多领域具有良好的应用前景。液相剥离法被认为是实现氮化硼纳米片（BNNS）可控制备的最有前景的方法，但低成本、相对环保和高效的液相剥离仍然难以实现。选择合适的溶剂体系是实现高效剥离的关键。低共熔溶剂（DES）具有合成简单、成本低、热化学稳定性高、生物相容性强等优点，有望成为制备 BNNS 的绿色溶剂。阐明 DES 的物理化学性质和特征，以及 DES 与 h-BN 之间的相互作用，对于剥离制备至关重要。在本文中，使用氯化胆碱作为氢键受体，尿素、乙二醇和葡萄糖-水作为氢键供体，通过简单的加热混合制备了三种 DES，研究了 DES 与 h-BN 之间的相互作用以及 DES 对剥离的影响。通过粘度、电导率、表面张力和汉森溶解度常数可以看出，ChCl-EG 和 h-BN 之间的相互作用最强。在电化学剥离过程中，DES 的插层效应及其与 h-BN 的相容性是影响产率的主要因素，在电场作用下，ChCl-EG 的强插层效应和高相容性导致剥离产率高。BNNS 的质量主要取决于 DES 的分解和膨胀效应，BNNS（ChCl-U）具有最大的层间距、最少的层数和最小的尺寸。DES 体系中的电化学液相剥离法既适用于绝缘疏水材料 h-BN 的剥离，也适用于导电性良好的亲水材料 Ti-MXene 的剥离，具有良好的应用范围和前景。

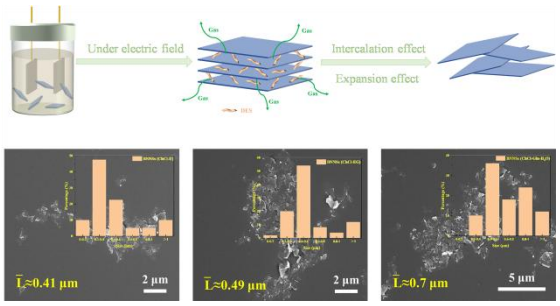


图 氮化硼纳米片的电化学剥离制备过程和 AFM 图

关键词：六方氮化硼；电化学液相剥离法；低共熔溶剂；氮化硼纳米片；Ti-MXene

报告人简介：

丁琦晖，北京化工大学化学工程与技术专业在读博士研究生，导师为毋伟教授，主要研究方向为：石墨烯/氮化硼/MXene 等二维材料的剥离制备； 以二维材料为基底的双功能 OER/ORR 催化剂的高效制备及在液态/固态锌空气电池中的应用； 凝胶电解质的制备及在固态锌空气电池中的应用

附：报告人/墙报展示人为学生

1T 相二硫化钼的合成与制备

蔡鼎，毋伟

北京化工大学化学工程学院，北京 100029

Email: 631518262@qq.com

摘要： 1T 相二硫化钼（1T-MoS_2）作为一种具有优异电催化性能的二维材料，近年来引起了广泛的研究兴趣。相比于稳定的 2H 相，1T 相具有更高的导电性和更多的活性位点，因此在电化学催化和能量存储领域显示出了巨大的应用潜力。然而，由于 1T 相的热力学不稳定性，其制备和稳定性一直是研究中的关键挑战。本文综述了当前 1T-MoS_2 的主要制备方法，包括化学剥离、溶剂辅助法、液相剥离法、缺陷工程以及基于离子液体等新型方法。这些方法通过不同的策略成功地合成了 1T-MoS_2，并在一定程度上提高了其稳定性。最后，还探讨了 1T 相稳定性与其制备条件的关系，并展望了未来研究中可能的改进方向和应用前景。

关键词： 1T-MoS_2，相位调制

报告人简介:

蔡鼎，博士，现于北京化工大学就读化学工程与技术专业博士。主要研究方向为低共熔溶剂体系中晶相稳定的介稳相二维二硫化钼的可控制备及应用。特别在二硫化钼作为电解水析氢催化剂方面有深入的研究。现研究内容已申请到国家自然科学基金项目。当前的研究重点为制备具有高稳定性和高催化性的 1T 相二硫化钼。

附：报告人/墙报展示人为学生

基于定制共形掩模在任意曲面上印制的完全共形液态金属电路

陈嘉昀[1]，李宇航[1,*]

[1]北京航空航天大学航空科学与工程学院，北京，100191

*Email: liyuhang@buaa.edu.cn

摘要： 由于对曲面具有出色的机械适应性和高电路灵活性，共形电子技术已被开发用于广泛的应用领域，包括航空航天和可穿戴电子产品。然而，传统的共形电路制造方法通常受限于平面结构，限制了电子设备在更复杂和多样化表面上的设计灵活性和适用性。在本研究中，我们提出了一种通过结合3D打印的定制共形掩模（CCM）与液态金属喷墨打印的新方法，建立了在任意曲面上完全共形的液态合金电路打印技术。我们开发了一个二维瞬态数学模型，以模拟喷墨打印过程中的颗粒沉积过程，并预测电路在曲面上的形态。此外，我们还表征了液态金属电路在可变形和不可变形表面上的电阻值和横截面形态等参数。展示了各种共形液态金属电路，如等高线、图案、文字、LED阵列照明图案，以及曲面上的多通道压力阵列智能皮肤。与传统的共形电子制造方法相比，这种新方法具有工艺简单、灵活性强、成本低（小于0.01美元/平方厘米）和效率高（超过1平方厘米/秒）的优点，适合大规模共形电子产品的生产。

关键词： 定制共形掩模；完全共形液态金属电路；数学模型；共形电子

附：报告人/墙报展示人为学生

二维碳纳米材料在脑机接口中的应用研究

朱宇微[1]，张晓静[1,*]

[1]北京航空航天法大学，北京市海淀区学院路 37 号，100101

*Email: Zhangxiaojing@buaa.edu.cn

摘要：脑机接口是一种采集人脑生理电信号并将信号转换为指令的设备，用以连接大脑神经系统和外界设备。作为脑机接口关键元件的神经电极，未来的发展趋势必是向着柔性、稳定性和高性能演化。石墨烯作为一种性能优异的碳材料，它具备高比表面积、高电导率以及良好的生物相容性和机械柔韧性等等优点，是一种潜在的神经电极材料。然而石墨烯在现有的脑机接口领域多以传统刚性电极的表面改性材料或导电聚合物掺杂材料出现，鲜少有以石墨烯作为本征电极材料的研究。鉴于此，本论文以石墨烯基导电油墨的丝网印刷工艺为基础，提出一种可制备得到高性能神经电极的研究路线，预期在电化学特性，力学特性，可靠性和生物相容性领域内都具有优异的表现。研究内容主要包括：

1. 通过研究导电油墨主要成分、研磨条件和烘干条件对其流动性和黏度的影响，以高导电性丝网印刷油墨配方为基础，进一步优化特制该导电油墨的主要成分配比以及后续加工工艺。即通过改变导电油墨的配方和工艺，在保证良好的导电性的前提下，最大程度上提高印刷电极的分辨率，以提升印刷质量，减小电极尺寸，从而优化采集信号的空间分辨率。

2. 通过电化学工作站分析不同成分油墨配比，不同尺寸的印刷电极的电化学特性。构建电极-生物组织的等效电路模型，克服石墨烯基电极存在的电荷储存容量低、界面阻抗大的问题。

3. 建立电极-生物组织的力学模型，通过对于电极图案设计（类似于岛屿结构或者弹簧结构）改善其力学性能，通过弯折和拉伸试验分析电极的力学特性和与生物组织间的力学错配性（对比二者的杨氏模量等），同时检验油墨是否具有良好的附着力。

4. 通过生物实验分析碳基柔性电极的生物相容性（电镜观察免疫因子的生长和瘢痕组织的增生，及其是否会对信号传输造成不利影响），由此分析柔性电极的稳定性和可靠性。

对于采集到的生物电信号进行解码分析，通过滤波等方法处理信号，分析其信号质量（带宽和信噪比），对本论文研制得到的神经电极各方面性能做出全方位的，客观可信的评价。

关键词：神经电极，石墨烯基导电油墨，脑机接口，柔性，生物相容性

参考文献

[1] M. Mayer, O. Arrizabalaga, F. Lieb, M. Ciba, S. Ritter, C. Thielemann, Biosens. Bioelectron. 2018, 100, 462.

[2] U. A. Aregueta-Robles, A. J. Woolley, L. A. Poole-Warren, N. H. Lovell, R. A. Green. Front. Neuroeng. 2014, 7, 15.

[51] 墙报展示人简介：

朱宇微，北京航空航天大学工程力学系博士生。北京市重点实验室研究团队人员，主要研究方向：射流空化石墨烯的制备，表征，及其在脑机接口领域方向研究前景。

附：报告人/墙报展示人为学生

熱操作法對 Boehmite 衍生γ-Al2O3 2D 片體晶粒性質的影響

顏富士 [1*] 李孟穎 [2] 涂勝龍 [2]

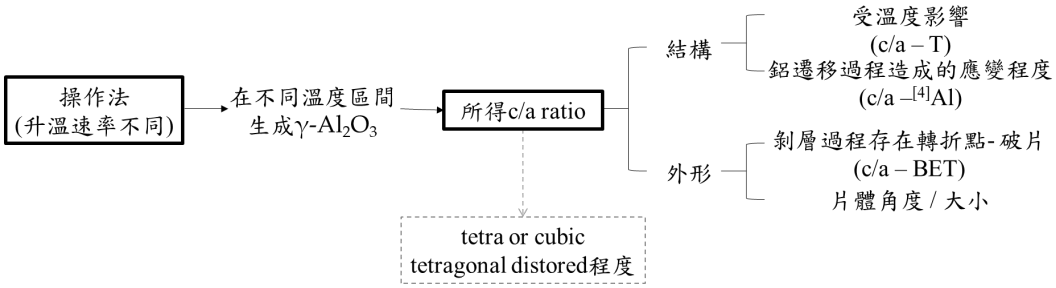
1. 國立成功大學資源工程學系名譽教授
2. 國立成功大學資源工程學系 研究助理

*聯絡信箱：yfs42041@mail.ncku.edu.tw

摘要：Boehmite 存在的完美劈開面可透過熱處裡得到納米級2D γ-Al2O3的晶粒。此2D晶粒之結構及形狀，會受製作時採用的原料及處理過程的反應溫度，時間長短不同而改變。 由其c/a 軸長比(ratio)改變，γ-Al2O3結構會偏向正方或等方(tetra or cubic)或變形正方(tetragonal distored)。研究試以不同升溫速率觀察該過程中c/a變化幅度，及其反應所得γ-Al2O3片體因結構改變以致外形上產生的差異。

由c/a ratio隨溫度發生的變化可看出，560oC可能為低溫/高溫γ-Al2O3的分界點。而由鋁遷移過程中鋁四配位數的增加看c/a ratio的變化，其斜率可表示晶格受到的應變程度。 以量BET值變化來觀察剝層造成2D片體的依據，不同操作法間BET質均可達100m2/g。c/a ratio隨BET值的變化，於c/a達0.981前後以兩種斜率上升。 反應在外形上，轉折點可視為顆粒產生破碎/尺寸變小的時間點，推測c/a自0.969(boehmite)開始1.24%左右的變化量為二維片體所能承受應變之臨界值。似與核—核的c/a比不等，沒能對位結合(Oriented attachment)有關。

各操作法間c/a ratio變化的差異，最明顯在0.5 ~ 2.5oC/min的操作條件下未見轉折，可得完晶片體。升溫速率在2.5oC/min以上則呈破碎片體形態。



Treatments	Variance percentage of c/a ratio	
°C/min	%	
0.5	1.15	完整
2.5	1.20	
5.0	1.21	
10	1.43	破碎
20	1.64	

关键词：2D 粉末、Boehmite、γ-Al2O3、剝片熱處理、配位數。

附：报告人/墙报展示人为学生

柔性大尺寸液态金属频率选择表面：通过机械重构实现增强调谐

王宽[1]，李宇航[1,*]

[1]北京航空航天大学航空科学与工程学院固体力学研究所，北京，100191

*Email: liyuhang@buaa.edu.cn

摘要：调谐能力对于拓宽频率选择表面（Frequency Selective Surfaces，FSS）的应用可能性至关重要。柔性可拉伸FSS因其能够共形粘附到曲面并以机械方式重新配置电磁波传输性能而引起了广泛的研究兴趣。然而，由于材料的限制，传统的金属FSS缺乏足够的柔性和可变形性，导致耐用性降低，电磁调谐范围有限。本文提出了一种柔性液态金属FSS的设计方法，该方法可以贴合曲面结构并通过机械拉伸实现大范围的电磁波调谐而不会损坏结构。通过力-电磁仿真和等效电路分析探索了调谐机制。此外，本研究在另一个柔性液态金属FSS中观察到的调谐现象强调了设计方法和调谐机制的可移植性。这项研究为可调谐柔性液态金属FSS的应用提供了一个有希望的方向。

关键词：调谐；频率选择表面；柔性；可拉伸；液态金属（五号宋体，关键词个数不超过5个）

参考文献

[1] B. A. Munk, Frequency selective surfaces: theory and design, John Wiley & Sons, New York 2000.

[2] J. Tan, X. Dai, F. Tang, M. Zhao, N. Kato, IEEE Internet Things J. 2023, 10, 11507.

[3] Y. Yang, W. Li, K. N. Salama, A. Shamim, IEEE Trans. Antennas Propag. 2021, 69, 2779.

[4] H. B. Shim, K. Han, J. Song, J. W. Hahn, Adv. Opt. Mater. 2022, 10, 2102107.

[5] Priyanka, S. Mohanty, P. S. Alegaonkar, H. B. Baskey, ACS Appl. Mater. Interfaces 2023, 15, 37107.

[6] H. Rafieipour, A. Setoodeh, A. Kin-Tak Lau, Compos. Struct. 2021, 273, 114256.

[7] X. Sheng, H. Wang, N. Liu, K. Wang, IEEE Trans. Antennas Propag. 2024, 72, 2423.

[8] J. Zhang, S. Zhang, G. F. Pedersen, IEEE Trans. Antennas Propag. 2020, 68, 7612.

[9] H. H. Chou, G. J. Ke, IEEE Microw. Wirel. Compon. Lett. 2021, 31, 361.

[10] H. P. Wang, Y. B. Li, H. Li, J. L. Shen, S. Y. Dong, S. Y. Wang, K. N. Qi, Q. Ma, S. Jin, S. J. Li, T. J. Cui, Nanophotonics 2022, 11, 1401.

[11] S. Ghosh, K. V. Srivastava, IEEE Antennas Wirel. Propag. Lett. 2020, 19, 1808.

[12] C. Huang, B. Zhao, J. Song, C. Guan, X. Luo, IEEE Trans. Antennas Propag. 2021, 69, 3593.

[13] H. Bai, M. Yan, W. Li, J. Wang, L. Zheng, H. Wang, S. Qu, IEEE Antennas Wirel. Propag. Lett. 2021, 20, 1108.

[14] G. Shah, Q. Cao, Z. U. Abidin, Z. Rafique, IEEE Antennas Wirel. Propag. Lett. 2020, 19, 954.

[15] S. Yang, P. Liu, M. Yang, Q. Wang, J. Song, L. Dong, Sci Rep 2016, 6, 21921.

[16] X. Fan, Z. Pan, S. Chen, Y. Li, Z. Zhao, T. Pan, Adv. Mater. Technol. 2022, 7, 2101216.

[17] A.-L. Chen, Y.-S. Wang, Y.-F. Wang, H.-T. Zhou, S.-M. Yuan, Appl. Mech. Rev. 2022, 74, 020801.

[18] X. Lu, F. Zhang, L. Zhu, S. Peng, J. Yan, Q. Shi, K. Chen, X. Chang, H. Zhu, C. Zhang, W. Huang, Q. Cheng, Nat. Commun. 2024, 15, 3157.

[19] Z. Xu, Y. S. Lin, Adv. Opt. Mater. 2019, 7, 1900379.

[20] J. Li, C. M. Shah, W. Withayachumnankul, B. S.-Y. Ung, A. Mitchell, S. Sriram, M. Bhaskaran, S. Chang, D. Abbott, Opt. Lett. 2013, 38, 2104-2106.

附：报告人/墙报展示人为学生

基于 GA-BP 神经网络对柔性电子器件的温度预测与实验验证

南金[1]，李宇航[1,*]

[1]北京航空航天大学航空科学与工程学院，北京市海淀区学院路 37 号，100191

*Email: liyuhang@buaa.edu.cn

摘要：针对柔性电子器件工作状态下自身热安全性难以实时快速评估的问题，本研究建立了一种基于遗传算法优化的 BP 神经网络(GA-BPNN)温度预测模型。该模型采用 BP 神经网络拟合输入工况与设备稳态温度之间的函数关系，并针对 BP 神经网络参数初始化问题使用遗传算法进行优化。为克服获取实验数据成本高的挑战，采用有限元分析软件对设备在不同工况下的温度结果仿真。根据仿真数据对模型进行训练，GA-BPNN 模型的预测方差不超过 0.57℃，并具有较好的鲁棒性。本研究对柔性电子器件的温度预测模型进行了热学验证实验，器件在额定功率下器件在工作 1200s 后达到稳态，预测结果与实验结果误差小于 0.9℃，验证了该模型预测结果的有效性。与传统热仿真和实验方法对比，该预测模型能够在保证一定精度条件下对温度快速预测，在计算效率和软硬件集成应用方面具有突出优势。

关键词：柔性电子器件；GA-BP 神经网络；热安全；温度预测模型

附：报告人/墙报展示人为学生

第 25 分会场：氮化物粉体、制品及应用

报告人：张伟儒 中材高新材料股份有限公司 非学生 zhangwr@vip.163.com

高性能氮化硅陶瓷产业化技术和应用发展现状

张伟儒[1,2,3,4,*]

[1]国家工业陶瓷工程技术中心，山东省淄博市，255000

[2]中材高新氮化物陶瓷有限公司，山东省淄博市，255000

[3]山东工业陶瓷研究设计院有限公司，山东省淄博市，255000

[4]中材高新材料股份有限公司，北京，100102

*Email: zhangwr@vip.163.com

氮化硅陶瓷具有优异的机械性能，耐磨损、耐高温、抗氧化、无磁、绝缘、透波性等优异性能，在新兴战略产业和国防工业具有巨大市场前景，近十几年来国内外对高性能氮化硅陶瓷材料产业化应用给予高度重视，在工程化技术、低成本制造控制和应用方面取得了显著突破，多种氮化硅陶瓷产品得到了广泛应用并显示出巨大发展前景。本文综述了氮化硅陶瓷国内外研究、产业化及应用进展，从产业链介绍了先进陶瓷粉体、近净尺寸成型、高效烧结、精密冷加工、无损探伤检测等方面工程化制备技术，从产品性能和应用端介绍了氮化硅在陶瓷轴承球、高导热基板、生物医学陶瓷材料、高端半导体设备、高温透波材料等重点产品应用进展，提出了我国高性能氮化硅陶瓷产业化存在的问题及解决对策，并结合中材高新十四五发展规划展望了氮化硅陶瓷材料未来发展重点及趋势。

关键词：氮化硅；低成本；产业化；应用

报告人/墙报展示人简介：

张伟儒，博士，教授级高工，享受国务院政府特殊津贴，中国建材总院先进陶瓷首席科学家，中材高新战略科学家，全国建材行业十大科技创新人物、山东省泰山产业领军人才、山东省蓝色汇智双百人才、建材行业优秀科技工作者、北京市中关村管委会优秀企业家。作为我国高性能氮化硅陶瓷材料的学科带头人，主持和承担国家“863”计划、国家科技攻关和军品配套等课题 32 项，荣获国防科学技术进步二等奖 1 项，其他省部级奖项 11 项，授权发明专利 79 项，获得国家级新产品 3 项制定国家行业标准 5 项，发表论文 40 余篇，出版专著 1 部。

附：报告人非学生

通讯地址：张伟儒，北京市朝阳区望京北路 16 号中材国际大厦五楼，13910307668

报告人：郭伟明 广东工业大学 非学生 guo1237@126.com

高性能氮化硅基陶瓷的制备及其在刀具中应用研究

郭伟明[1,*]，唐绍均[1]，谭大旺[1]，林华泰[1]

[1]广东工业大学机电工程学院，广州 510006

*Email: guo1237@126.com

氮化硅陶瓷具有低密度、高硬度、高强度、高导热和良好的化学稳定性等特性，在轴承球、刀具、散热基板等方面具有巨大的应用潜力。本报告首先通过调控烧结工艺、引入过渡金属硼化物和织构化等手段，系统研究了氮化硅基陶瓷相组成、微结构与力学性能关系，制备了高硬、高韧氮化硅基陶瓷。然后，将研制的高性能氮化硅陶瓷用于陶瓷刀具，研究了其切削性能。

关键词：氮化硅陶瓷；力学性能；切削性能

报告人/墙报展示人简介：

郭伟明，广东工业大学教授、博士生导师。中国硅酸盐学会特种陶瓷分会理事、中国机械工程学会材料分会理事。《Journal of Advanced Ceramics》、《现代技术陶瓷》、《机械工程材料》编委。累计发表第一作者/通讯作者 SCI 论文 110 多篇，授权发明专利 70 多项。主要从事氮化硅陶瓷、高熵陶瓷及核能陶瓷等方面工作。

附：报告人非学生

报告人：李江涛 中国科学院理化技术研究所 非学生 lijiangtao@mail.ipc.ac.cn

氮化硅粉体及陶瓷：从力学到热学、光学的应用拓展

李江涛[1]，赵皆岩[2]，杨增朝[3]，李永[4]，李江涛[1,*]

[1] 中国科学院理化技术研究所，北京市海淀区中关村东路 29 号，100190

[2] 中国科学院理化技术研究所，北京市海淀区中关村东路 29 号，100190

[3] 中国科学院理化技术研究所，北京市海淀区中关村东路 29 号，100190

[4] 中国科学院理化技术研究所，北京市海淀区中关村东路 29 号，100190

*Email: lijiangtao@mail.ipc.ac.cn

氮化硅陶瓷制品由于其优异的力学、导热、绝缘性能，在集成电路封装、精密零件、航空航天等国民经济重要领域发挥着不可或缺的作用。近年来，氮化硅粉体及陶瓷材料的光学性能也愈发受到广泛关注。本工作通过一步法燃烧合成工艺制备了光谱选择性的 Si_3N_4 粉体[1]及 Si_3N_4-BN 复相多孔陶瓷[2]。其中多孔陶瓷具有~0.95 的 UV-vis-NIR 波段反射率以及~0.95 的中红外 8-13 μm 大气窗口波段发射率。这使其能够在日间 964 W m^{-2} 的太阳辐照度条件下实现 5.14 ℃的低于环境温度降温效果，同时产生 78.55 W m^{-2} 的辐射冷却功率。Si_3N_4-BN 复相多孔陶瓷同时兼具优异的力学性能和环境稳定性，从而有望推进陶瓷基辐射冷却材料在车辆降温、建筑节能领域的实际应用。

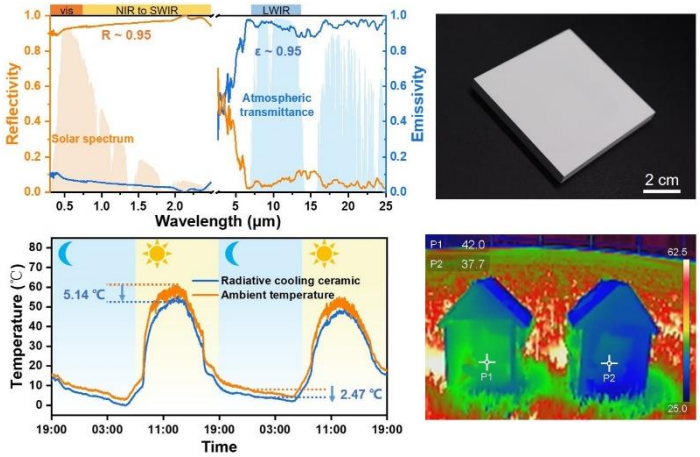


Fig. 1. (a) Reflectivity and emissivity of porous Si_3N_4-BN ceramic in the UV−vis-IR band. (b) Photograph of porous porous Si_3N_4-BN ceramic. (c) Continuous temperature measurement of porous Si_3N_4-BN ceramic and ambient temperature for 48h. (d) Infrared photograph of the building models constructed by porous Si_3N_4-BN ceramics and commercial white acrylic plates.

关键词：氮化硅陶瓷；辐射冷却；光谱选择性；燃烧合成

参考文献

[1] J. Zhao, Y. Song, Z. Yang, Y. Li, and J. Li Spectrally designed photonic film with heat conducting pathways for efficient daytime radiative cooling and thermal dissipation. Opt. Mater. 2024, 152: 115533.

[2] J. Zhao, Q. Meng, Y. Li, Z. Yang, and J. Li Structural porous ceramic for efficient daytime subambient radiative cooling. ACS Appl. Mater. Interfaces 2023, 15: 47286-47293.

报告人：秦明礼 北京科技大学 非学生 qinml@mater.ustb.edu.cn

高品质氮化铝粉体及其高导热产品开发与应用

秦明礼[1*]，鲁慧峰[1,2]，吴昊阳[1]，何庆[1,2]，贾宝瑞[1]，曲选辉[1]

1 新材料技术研究院，北京科技大学，北京

2 厦门钜瓷科技有限公司，厦门

*E-mail:qinml@mater.ustb.edu.cn

氮化铝（AlN）具有高导热、绝缘、低膨胀、无磁等优异性能，是半导体、电真空等领域高端装备的关键材料，特别是在航空航天、轨道交通、新能源汽车、高功率 LED、5G 通讯、电力传输、工业控制等领域功率器件中具有不可取代的作用。本报告重点介绍北京科技大学在高品质氮化铝粉体合成及高导热制品研究与产业化方面的工作。

报告人：姚东旭 中国科学院上海硅酸盐研究所 非学生 yaodongxu@mail.sic.ac.cn

高温自蔓延合成氮化硅基多孔陶瓷及其性能研究

姚冬旭[1,*]，张叶[1]，曾宇平[1,*]

[1] 中国科学院上海硅酸盐研究所，上海市嘉定区和硕路 585 号，201899

*Email: yaodongxu@mail.sic.ac.cn，yu-ping Zeng@mail.sic.ac.cn

氮化硅陶瓷具有力学性能优异、热稳定好、耐烧蚀与抗雨水侵蚀等优点，可作为一种力-热-电综合性能良好的耐高温透波材料。针对多孔氮化硅陶瓷成本高的问题，本研究提出了采用高温自蔓延法合成直接制备多孔氮化硅陶瓷，35 wt.%Si 粉提供合适的反应温度(1870℃)，可制备收缩可控，氮化完全、具有长棒晶形貌的多孔 Si_3N_4 陶瓷，获得了孔隙率为 46.5%~38.4%，弯曲强度达到 168 MPa ~259 MPa，Weibull 模数(m)达到 11.0~17.2 的高性能多孔 Si_3N_4 陶瓷。基于高温自蔓延法实现了超低助剂含量的多孔氮化硅陶瓷制备，0.4 wt.%Y_2O_3 添加所制备样品 1400℃高温弯曲强度为 77 MPa，相对室温强度保持率为 76.6%。 采用高温自蔓延反应直接制备β-Sialon 多孔陶瓷，利用 Si 粉氮化的剧烈放热同步完成 Si3N4 与 AlN 以及 Al_2O_3 的反应，将 Al、O 原子固溶进β- Si_3N_4 晶格形成β-Sialon 陶瓷。通过 Si 含量控制反应温度，添加 BN 调控烧结收缩，成功制备得到不同 z 值(0~1)的β-Sialon 多孔陶瓷。

关键词：高温自蔓延合成；氮化硅；多孔陶瓷；相组成；力学性能

参考文献

[1] **Zhang Ye, Yao Dongxu, Zuo Kaihui, Xia Yongfeng, Yin Jinwei, Liang Hanqin, Zeng Yu-Ping. Effects of N_2 pressure and Si particle size on mechanical properties of porous Si_3N_4 ceramics prepared via SHS, *Journal of the European Ceramic Society*, 2020, 40(13): 4454-4461.**

[2] **Zhang Ye, Yu Xing, Gu Hao, Yao Dongxu, Zuo Kaihui, Xia Yongfeng, Yin Jinwei, Liang Hanqin, Zeng Yu-Ping. Microstructure evolution and high-temperature mechanical properties of porous Si_3N_4 ceramics prepared by SHS with a small amount of Y_2O_3 addition, Ceramics International, 2021, 47(4): 5656-5662.**

[3] **Zhang Ye, Yao Dongxu, Zuo Kaihui, Xia Yongfeng, Yin Jinwei, Liang Hanqin, Zeng Yu-Ping. The synthesis of single-phase β-Sialon porous ceramics using self-propagating high-temperature processing, Ceramics International, 2022, 48(3): 4371-4375.**

报告人：傅仁利 南京航空航天大学 非学生 renlifu@nuaa.edu.cn

氮化硅陶瓷的光固化3D打印成型工艺与性能研究

沈民浩，傅仁利*

南京航空航天大学，江苏南京，210016

*Email: renlifu@nuaa.edu.cn

光固化3D打印技术在制备异形氮化硅陶瓷方面具有广阔的应用前景。受限于氮化硅陶瓷的高折射率和低烧结活性，实现高固化深度和大壁厚致密化组件的制备依然是一个挑战。本文通过精准设计光敏树脂体系，提升了增加固化深度，并通过流变学、光固化动力学、微观结构等分析，优化打印成型工艺，在此基础上利用还原性气体进行排胶，改善有机物挥发引起的层间开裂问题。最终，在1900℃下烧结可以制备几何还原度高，力学性能良好的高性能氮化硅陶瓷，为其它深色陶瓷光固化3D打印成型提供了一定的工艺参考。

关键词：氮化硅陶瓷；光固化3D打印；固化行为；排胶气氛；致密化

报告人简介：

傅仁利，男，南京航空航天大学材料科学与技术学院教授、博士生导师。主要从事白光 LED 用无机荧光材料、微电子封装与基板材料、功率电子器件封装基板及散热技术和 LTCC 低介电常数基板材料等方面的研究和开发工作。承担国家自然科学基金 2 项，其他国家级项目 2 项。获得 1999 年度江苏省科技进步二等奖一项、2002 年度广东省优秀新产品三等奖一项。2017 年度江苏省科技进步三等奖一项。申请并授权国家发明专利 10 余项，发表学术论文 120 余篇。目前担任中国硅酸盐学会特种陶瓷分会理事；仪器仪表学会电子元器件关键材料与技术专委会常务委员；复合材料学会导热材料专业委员会委员；《复合材料学报》第 7 届和第 8 届编委会委员；全国万名优秀创新创业导师人才库首批入库导师。

附：报告人不是学生：

报告人：杨建锋 西安交通大学 非学生 yang155@mail.xjtu.edu.cn

用于髋关节的多孔/致密氮化硅复合结构的制备及性能研究

杨建锋*，李凤

西安交通大学，西安市咸宁西路 28 号，710049

*Email: yang155@mail.xjtu.edu.cn

Si_3N_4 材料具有良好的生物相容性、优异的成像性能、化学及物理性能稳定在髋关节置换术以及骨科领域中有很大的应用前景。人工髋关节假体主要由髋臼杯、衬垫、球头和股骨柄组成，其中人工髋臼杯表面采用多孔结构设计，有利于骨骼向内生长以及假体结合的稳定。通过原位凝固注模成型结合模板法来制备多孔/致密复合 Si_3N_4 陶瓷材料，基于有机单体原位聚合实现净尺寸成型，并分别对致密 Si_3N_4 和多孔 Si_3N_4 的制备工艺进行研究，探究了烧结助剂含量以及固含量对致密 Si_3N_4 的影响、固含量以及模板保温时间对多孔 Si_3N_4 的影响，最终成功制备出多孔/致密复合 Si_3N_4 陶瓷材料。

研究了 pH 值、分散剂含量以及固含量对浆料分散性和稳定性的影响，在最佳分散条件下探究烧结助剂含量和固相含量对原位凝固注模成型致密氮化硅的影响。将原位凝固注模成型与模板法结合制备可控孔隙的多孔 Si_3N_4 陶瓷，制备过程中采用压力浸渍手段将浆料充分填充至模板孔隙。实验采用平均直径 900 μm 的 EPS 小球作为造孔剂，通过热粘接 EPS 颗粒制备高分子模板，由于基体致密化程度低导致烧结后样品内部产生裂纹。随着固含量的提高，多孔 Si_3N_4 孔骨架致密度提高，总体孔隙率从 66.34 %下降到 62.29 %，抗压强度从 6.38 MPa 提高到 16.55 MPa。当 EPS 模板保温时间从 10 min 延长到 30 min 时，使用固含量 75 wt%制备的多孔 Si_3N_4 孔隙率从 58.81 %增加到 62.94 %，抗压强度均大于 10 MPa。多孔 Si_3N_4 陶瓷在体外 SBF 模拟体液中浸泡结果表明其表面有羟基磷灰石生成，Si_3N_4 具有良好的生物相容性。使用原位凝固注模成型工艺结合模板法制备多孔/致密 Si_3N_4 陶瓷，制备过程中采用压力浸渍手段将浆料充分填充至模板孔隙后预留部分浆料作为致密层。研究了高分子模板粘接方式对样品的影响。PVA 粘接能够保持 EPS 颗粒原有性质，保证有模板和无模板两部分 Si_3N_4 基体干燥收缩率的一致，改善开裂现象。当使用 PVA 用量为 EPS 质量 1/5 的高分子模板制备出的多孔 Si_3N_4. 具有三维贯通性良好的孔隙，孔隙结构完整、排列整齐，符合骨组织材料的需求。

报告人/墙报展示人简介：

杨建锋，西安交通大学材料科学与工程学院教授，博士生导师。1999 年在日本大阪大学获博士学位，1999 年至 2004 年在日本 AIST 从事研究。美国陶瓷学会会员、机械工程学会工程陶瓷分会副理事长、中国核物理学会反应堆物理与核材料专业委员会委员、中国兵工学会材料科学与技术专业委员会理事，《西安交通大学学报》和《陶瓷学报》编委。长期从事先进陶瓷材料的制备与评价的研究。发表 SCI 收录论文 300 多篇，获得日本授权专利 6 项，中国授权专利 50 项。

报告人/墙报展示人不是学生：

报告人：曾小亮 中国科学院深圳先进技术研究院 非学生 rong.sun@siat.ac.cn

导热粉体的表面改性及其表征技术

报告标题

曾小亮 [1,*]，

[1] 中国科学院深圳先进技术研究院，深圳先进电子材料国际创新研究院，深圳市南山区西丽大学城学苑大道 1068 号，518055

*Email: rong.sun@siat.ac.cn

摘要正文：随着电子设备功率和集成度的提高，伴随来的散热问题也日益严重。将导热填料与聚合物基体简单的物理混合制备聚合物复合材料是最为简单有效的解决电子设备散热问题的技术。大多数填料属于无机材料，其本身极性和聚合物基体之间相容性较差。对于导热填料而言，除了分散问题，不相容还会使得填料和聚合物基体之间接触不完全程度较大，且两相材料之间的振动频率不匹配引起大量声子散射，在填料和聚合物基体界面之间会产生很高的界面热阻，导致复合材料热导率急剧下降。因此，改性设计导热粉体提高复合粉体填充率，是目前研究导热材料的重点。本报告技术了导热粉体表面改性及其表征技术的现状和未来发展趋势，报告包括：（1）导热粉体功能化背景；（2）导热粉体功能化技术；（3）导热粉体功能化效果表征技术；（4）总结与展望。

关键词：导热粉体；表面改性；表征技术

参考文献

[1] **D. Wang, Z. Tang, and R. Huang, et al. F. Xu, K. F. Ren, and X. Cai Interface Coupling in Rubber/Carbon Black Composites toward Superior Energy-Saving Capability Enabled by Amino-Functionalized Polysulfide. *Chem. Mater.* 2023, 35, 2, 764–772.**

[2] **H. NasrallahRita, Z. DouaihyIgor, T., et al. New Coupling Agent Structures for Preparing Filler-Polymer Hybrid Materials Under Soft Irradiation Conditions. Macromolecules 2022, 55, 15, 6394–6404**

Surface Modification and Characterization Technology of Thermal Conductive Powders

Xiaoliang Zeng[1,*]

[1] Shenzhen Institute of Advanced Electronic Materials, Shenzhen Institute of Advanced Technology, Chinese Academy of Sciences, Shenzhen, 518055

*xl.zeng@siat.ac.cn

With the increase in power and integration of electronic devices, the accompanying heat dissipation problem is becoming increasingly serious. The simplest and most effective technology to solve the heat dissipation problem of electronic devices is to prepare polymer composite materials by simply physically mixing thermal conductive fillers with polymer matrix. Most fillers belong to inorganic materials, and their polarity and compatibility with the polymer matrix are poor. For thermal conductive fillers, in addition to dispersion issues, incompatibility can also lead to incomplete contact between the filler and the polymer matrix, and the mismatch of vibration frequencies between the two materials can cause a large amount of phonon scattering, resulting in high interfacial thermal resistance between the filler and the polymer matrix interface, leading to a sharp decrease in the thermal conductivity of the composite material. Therefore, modifying the design of thermal conductive powders to improve the filling rate of composite powders is currently the focus of research on thermal conductive materials. This report discusses the current status and future development trends of surface modification and characterization techniques for thermal conductive powders. The report includes: (1) background of functionalization of thermal conductive powders; (2) Functionalization technology of thermal conductive powder; (3) Characterization technology for functionalization effect of thermal conductive powder; (4) Summary and outlook.

Keywords: Thermal conductive powder; Surface modification; Characterization technology

References

[10] [1] D. Wang, Z. Tang, and R. Huang, et al. F. Xu, K. F. Ren, and X. Cai Interface Coupling in Rubber/Carbon Black Composites toward Superior Energy-Saving Capability Enabled by Amino-Functionalized Polysulfide. Chem. Mater. 2023, 35, 2, 764–772.

[2] H. NasrallahRita, Z. DouaihyIgor, T., et al. New Coupling Agent Structures for Preparing Filler-Polymer Hybrid Materials Under Soft Irradiation Conditions. Macromolecules 2022, 55, 15, 6394–6404

报告人/墙报展示人简介：

中国复合材料学会导热复合材料专业委员会副秘书长、中国科学院青促会优秀会员、深圳市“孔雀计划”海外高层次人才，入选斯坦福大学发布的2023年“全球前2%科学家榜单”，Google学术总引用次数超一万次，h指数54，担任国际学术期刊《Nanomaterials》的客座主编，以第一作者或通讯作者在Nano Letter, Adv. Funct. Mater., ACS Nano, IEEE Trans., Chip等期刊发表SCI论文100多篇，合著书籍《聚合物基导热复合材料》，授权专利36件，主持国家重点研发计划-战略性先进电子材料专项、国家自然科学基金面上、青年基金和华为公司技术委托等项目。

报告人：徐久军；工作单位：大连海事大学；不是学生；联系邮箱：jjxu@dlmu.edu.cn

纳米AlN粉体合成及其烧结性能研究

徐久军*，单英春*，王俊博

大连海事大学，大连市甘井子区凌海路 1 号，116026

*Email: jjxu@dlmu.edu.cn; shanychun@dlmu.edu.cn

AlN陶瓷具有高热导率、低介电损耗和低电导率的特点[1,2]，且其热膨胀系数与半导体材料硅相匹配[3,4]，可广泛用于大功率集成电路基板、电子封装及光电子学等领域 [5,6]。AlN粉体作为制备制其陶瓷的必备关键原料，纯度和烧结性能直接影响后续陶瓷产品的制备及性能。目前，在AlN粉体的合成方法中，碳热还原氮化法(Carbothermal Reduction and Nitridation, CRN) 因具有原料成本低、工艺简单且粉体烧结性能好等优势而被广泛采用，但是，当以传统的碳粉为碳源时，制备的AlN粉体存在粒度较大、烧结性能不佳的问题。利用碳包覆Al_2O_3前驱体作为原料，应是碳热还原氮化制备细颗粒乃至纳米AlN粉体的有效途径之一[7-9]。

本研究分别以Al_2O_3和葡萄糖粉体为铝源和碳源，首先通过水热法制备碳包覆Al_2O_3前驱体，再采用碳热还原氮化法合成纳米AlN粉体。研究了γ-Al_2O_3预球磨工艺（不球磨、无水乙醇中球磨、葡萄糖水溶液中球磨、无水乙醇中球磨+葡萄糖水溶液中球磨 (PMEG)）、原料配比及CRN工艺（升温速率、合成温度和时间）对合成粉体物相组成、微观形貌和粒度等性能的影响，并通过球磨细化AlN粉体，采用无压烧结方法评价其烧结性能。结果表明：(1) 无水乙醇预球磨能有效解除γ-Al_2O_3的初始聚集，再将该粉体在葡萄糖水溶液中进行二次球磨会使γ-Al_2O_3与葡萄糖充分接触，有利于获得良好碳包覆效果的γ-Al_2O_3/C前驱体（Fig. 1），从而使制得的AlN粉体平均粒径较小、比表面积较大；(2) 当γ-Al_2O_3/葡萄糖质量比为1:2.5时，γ-Al_2O_3/C前驱体碳含量不足 (22.4 wt.%)，导致合成的AlN粉体中仍存在残余Al_2O_3，而当γ-Al_2O_3/葡萄糖质量比为1:2.9-1:5.0时，所合成的粉体为纯相AlN，且因葡萄糖比例增加使前驱体中碳含量增加，起到了更好的隔离效果，使AlN粉体颗粒尺寸逐渐减小；(3) 碳包覆γ-Al_2O_3前驱体结合快速升温 (50℃/min) 的CRN工艺能够有效抑制γ-Al_2O_3向α-Al_2O_3的转变，使絮状纳米γ-Al_2O_3直接反应成AlN，从而在1600℃保温60 min合成了平均粒径为99.8 nm的纯相AlN粉体 (Fig. 2)；(4) 不添加烧结助剂，相较微米AlN粉体，纳米AlN粉体的致密化烧结能力更优，在1850℃无压烧结4 h的样品相对密度达98.37%，远高于微米AlN粉体所制备样品的71.44%（Fig. 3），表明所合成的AlN粉体具有良好的烧结性能。

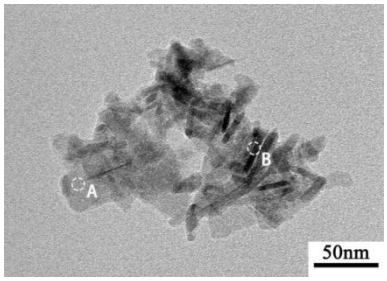


Fig. 1 TEM image of carbon coated Al_2O_3 precursor of PMEG.

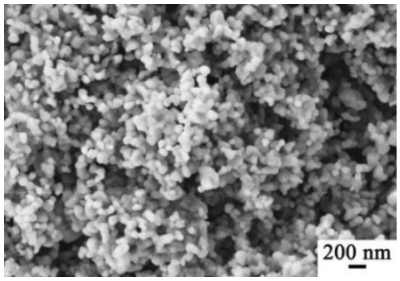


Fig. 2 SEM image of synthesized AlN powder.

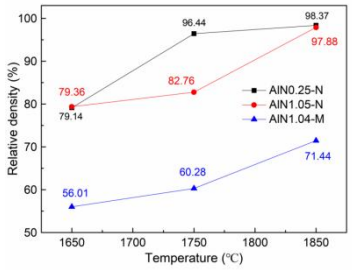


Fig. 3 Relative density of the samples held 4 h at each temperature.

Tab. 1 Element contents of γ-Al_2O_3/C precursor in different regions of Fig. 1 (at.%)

Elements	C	O	Al
A	95.96	3.46	0.58
B	66.47	22.25	11.28

关键词： AlN粉体；纳米粉体；碳热还原氮化；水热合成；碳包覆

参考文献

[1] N. Canikoglu, Synthesizing of nano-sized AlN powder with alumina balls, J. Ceram. Process. Res. 2021, 22: 258–63.

[2] T.B. Jackson, A.V. Virkar, K.L. More, R.B. Dinwiddie, R.A. Cutler, High-thermal conductivity aluminum nitride ceramics: the effect of thermodynamic, kinetic, and microstructural factors, J. Am. Ceram. Soc. 1997, 80: 1421–35.

[3] H. Boussebha, N. Mutlu, N. Canikoglu, A.O. Kurt, Synthesis of submicron AlN powder using dynamic/thermochemical method, Int. J. Appl. Ceram. Technol. 2022, 19: 2967–78.

[4] S. Wang, W.C. Wang, D.Z. Yang, Z.J. Liu, Direct synthesis of AlN nano powder by dielectric barrier discharge plasma assisted high-energy ball milling, J. Mater. Sci. Mater. Electron. 2016, 27: 8518–23.

[5] X.F. Huang, P. Tang, S. Yang, J.Y. Feng, Z.P. Wan, Investigation of AlN ceramic anisotropic deformation behavior during scratching, J. Eur. Ceram. Soc. 2022, 42: 2678–90.

[6] T. Wang, J.J. Xie, C. Chen, J. Fang, Y. Shi, Fabrication translucent AlN ceramic under the strong magnetic field, Opt. Mater. 2022, X 14: 100148.

[7] X.X. Mao, Y.G. Xu, X.J. Mao, H.L. Zhang, J. Li, S.W. Wang, Synthesis of fine AlN powders by foamed precursor-assisted carbothermal reduction-nitridation method, J. Inorg. Mater. 2019, 34: 1123–7.

[8] Q.H. Yang, H.P. Wang, R.S. Lei, S.Q. Xu, Low temperature formation of AlN nanofibers by carbothermal reduction nitridation of hydrothermal precursor fibers, J. Asian Ceram. Soc. 2017, 5: 13–7.

[9] M. Xiang, Y.F. Zhou, W.T. Xu, D.C. Huang, K. Wang, W. Pan, Hydrothermalcarbothermal synthesis of highly sinterable AlN nanopowders, J. Am. Ceram. Soc. 2017, 100: 2482–91.

报告人简介：

徐久军教授是大连海事大学的二级教授，博士生导师，入选辽宁省“兴辽英才计划”创新领军人才项目。主要从事高性能陶瓷和船机摩擦学方面的研究工作，在高纯高烧结活性 AlON、AlN 粉体合成、高透光性 AlON 和 SiAlON 透明陶瓷制备方面的技术已通过中试，具备转化条件。近年来，主持国防 973、总装“十一五”“十二五”“十三五”预研计划项目、科技部重点研发计划课题、国防科工局基础科研专项等项目 20 余项，研究成果获兵器工业集团科技进步一等奖，辽宁省科技进步一等奖，工信部国防科技一等奖和国家科技进步二等奖，发表的学术论文被 SCI、EI 收录 100 余篇，出版专著 1 部。

附：不是学生

报告人：侯新梅 北京科技大学 非学生 houxinmeiustb@ustb.edu.cn

高性能氮化硼陶瓷产业化技术和应用发展现状

刘旭升[1]，闫东红[1]，刘新红[1]，侯新梅[2,*]

[1]郑州大学材料科学与工程学院 河南省高温功能材料重点实验室，河南省郑州市，450052

[2]北京科技大学 碳中和研究院，北京，100083

*Email: houxinmeiustb@ustb.edu.cn

摘要：氮化硼陶瓷具有优异的机械性能、化学稳定性、耐高温、透波性、导热性、电绝缘等优异性能，使得高性能氮化硼陶瓷材料在军工、航空航天、新能源等新兴国家战略产业有着巨大的市场前景，近些年随着高性能氮化硼陶瓷材料在各个领域的应用壁垒不断被突破挖掘，人们在产业化方面开始重视如何低成本制造高性能氮化硼陶瓷材料并开拓其应用领域。研究团队提出了一种高性能氮化硼粉体的前沿制备方法，该方法不仅能大幅降低产业化成本，得到的粉体呈球形且平均粒径 40 nm 左右。相比于传统方法制备得到的氮化硼粉体，具有合成温度低且性能优异等优势，用于侧封板能将其成本降低 15 元/公斤。

关键词：氮化硼；低成本；制备方法；产业化；应用

报告人：邓腾飞 武汉理工大学 非学生 dengtf@whut.edu.cn

高强度氮化硅常压烧结的基础研究

邓腾飞[1,*]，罗春希[1]

[1]武汉理工大学硅酸盐建筑材料国家重点实验室，武汉市洪山区珞狮路 122 号，邮编：430070

*Email: dengtf@whut.edu.cn

摘要正文：氮化硅（Si_3N_4）作为一种结构陶瓷材料，强度和韧性是其损伤耐受性和可靠性的决定性特征。在本工作中，利用ZrO_2/Si_3N_4界面结构演变增强了Si3N4陶瓷，其弯曲强度和断裂韧性分别达到982.8 MPa和9.81 $MPa·m^{1/2}$；并通过第一性原理分子动力学模拟结合实验研究了ZrO_2/Si_3N_4界面结构形成机制。首先，通过HRTEM表征了Si_3N_4/ZrO_2界面结构，包括：（i）玻璃层，（ii）Zr_3N_4界面层。其次，第一性原理分子动力学模拟表明在烧结过程中Si_3N_4/ZrO_2界面形成Si-O键和Zr-N键以提供键合。同时，在烧结过程中Si_3N_4晶粒和ZrO_2晶粒之间形成了嵌入式复合微观结构，并由于Si_3N_4和ZrO_2的强度差异，裂纹倾向于通过复合结构中的ZrO_2晶粒传播，在遇到长棒状Si_3N_4晶粒时偏转，从而有效提高材料的断裂能。其次，ZrO_2对β-Si_3N_4晶粒尺寸的细化和玻璃相含量的降低起着重要作用。

关键词：氮化硅；常压烧结；晶界

报告人：王琦 北京科技大学 非学生 wangqi@ustb.edu.cn

基于导热基元序构的一维氮化物及其热管理应用研究

王 琦

北京科技大学，北京市海淀区学院路 30 号，100083

*Email: wangqi@ustb.edu.cn

摘要正文：随着芯片的高度集成化，散热问题已成为制约电子行业发展的重要瓶颈问题，开发高性能的导热复合材料是解决这一问题的关键。AlN、Si_3N_4等氮化物具有极高的热导率，非常适用于作为导热填料；而高长径比的一维形态，可有效构筑导热通路，在低填充分数下能够获得相对更高的热导率，满足电子设备轻量化的使用需求。但是现有一维氮化物的直接合成仍存在产量和产率偏低、形貌均一度差、尺寸不易控制等问题，加入液相催化剂虽然可以改善这一现象，但杂质的存在又会导致声子散射加剧，热导率下降。在本研究中，我们重点通过反应动力学调控对氮化物进行非常规生长控制，实现一维AlN晶须、Si_3N_4纳米线的可控合成，并且借助导热基元序构的理念，促使一维氮化物的定向有序排列，最终获得高热导率的导热复合材料。

关键词：氮化铝；氮化硅；一维；热管理

参考文献

[1] M. Niu, Z. Zhao, B. Wang, C. Yu, L. Zhu*, X. Hao, S. Wan, M. Yue, W. Xuan, Q. Lu, W. Cao*, K. Chen*, Q. Wang*. Boosting the in-plane thermal conductivity of Nanofibrillated Cellulose Films: alignment engineering of cross-linked AlN whiskers. *Journal of Materials Chemistry A*, 2023, 11, 23787-23797.

[2] M. Li, B. Wang, C. Yu, M. Niu, K. Yuan, W. Xuan, M. Yue, L. Zhu*, K. Chen*, Q. Wang*. Direct construction of interconnected Si3N4 nanowire networks for enhancing the thermal conductivity and mechanical performance of flexible composite films. *Journal of Materials Chemistry A*, 2024, 12, 21923-21932.

[3] X. Hao, S. Wan, Z. Zhao, L. Zhu, D. Peng, M. Yue, J. Kuang, W. Cao*, G. Liu*, Q. Wang*. Enhanced Thermal Conductivity of Epoxy Composites by Introducing 1D AlN Whiskers and Constructing Directionally Aligned 3D AlN Filler Skeletons. A*CS Applied Materials & Interfaces*, 2023, 15(1):2124-2133.

报告人简介：

王琦，女，工学博士，北京科技大学教授。长期从事氮化物陶瓷及其热管理应用研究。主持国家自然科学基金面上项目、青年项目、国家重点研发计划子课题等纵向科研项目 20 余项，另与华为技术有限公司等开展多项校企合作项目。迄今已发表 SCI 论文 70 余篇，以第一/通讯作者在 *Angew Chem*、*J Adv Ceram*、*Chem Eng J*、*J Mater Chem A*、*ACS Appl Mater Inter*、*J Am Ceram Soc* 等期刊发表论文 38 篇，申请/授权发明专利 10 项，参与编写学术专著 1 部，联合发布团体标准 2 项。入选中国科协青年人才托举工程、JMCA 新锐科学家、北科青年学者等。

附：报告人非学生

报告人：杨现锋 长沙理工大学 非学生 yangxfcsust@csust.edu.cn

熔融沉积方法3D打印制备气压烧结氮化硅陶瓷

杨现锋[1]*，董浩霖[1]，杨小乐[1]，刘子玉[1]，谢呵瀚[1]

[1]长沙理工大学，材料科学与工程学院，长沙 410114

*Email:yangxfcsust@csust.edu.cn

摘要：结构陶瓷3D打印技术目前在高可靠性、大尺寸和高精度结构陶瓷部件制备方面亟待突破。与光固化、激光选区烧结和粘结剂喷射等方法相比，熔融沉积 技术(FDM)具有打印效率高、坯体致密度高、粉体适应性广和设备成本低等优势。本研究通过熔融沉积成型法结合气压烧结制备了致密的Si_3N_4陶瓷，对表面台阶、层间结合和微观结构演变进行了表征，获得了无明显缺陷的致密Si3N4陶瓷。研究结果表明打印层厚和喷嘴直径对生坯和烧结陶瓷的密度和抗弯强度影响较小。对于填充策略，矩形路径比平行线和网格路径更有利于得到高强度陶瓷。当层厚0.15mm、喷嘴尺寸0.6mm和矩形填充路径时，获得了最高的抗弯强度824.74±85MPa。本研究要评价了FDM方法制备的的Si_3N_4陶瓷的可靠性，并成功制备了形状保持良好的复杂形状Si_3N_4陶瓷零件。

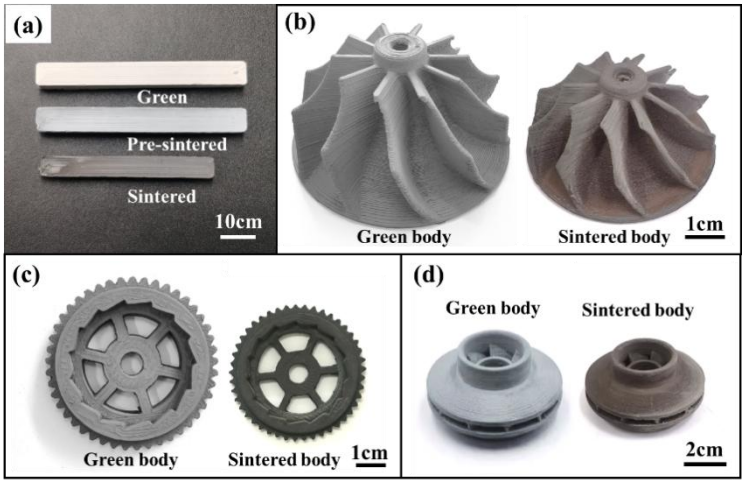


Fig. 1 Images of Si_3N_4 parts prepared by FDM: (a) rectangular bar; (b)turbine rotor; (c) gear; (d) swirl fan

关键词：3D打印；熔融沉积；氮化硅；气压烧结

报告人简介：

杨现锋, 博士，教授，博士研究生导师，现任长沙理工大学卓越工程师学院副院长。中国机械工程学会工程陶瓷专业委员会理事，中国陶瓷工业协会工业陶瓷分会副会长，中国材料研究学会增材制造材料分会委员会委员。主要从事陶瓷精密成型技术、特种陶瓷材料结构功能一体化和工程陶瓷 3D 打印技术研究。主持国家和省部级项目 10 余项，主持成果转化和技术合作项目 20 余项。在国内、外学术刊物上发表 SCI, EI 收录论文 70 余篇，获发明专利授权 20 余项。获省部级科技奖励 2 项。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

报告人：黄向东 福州大学 非学生 hxd@ceravite.com.cn

六方氮化硼及其应用

黄向东 副教授，董事长

福州大学材料可以与工程学院

福建赛瑞特科技有限公司

Email:hxd@ceravite.com.cn

摘要

报告内容简介：六方氮化硼具有与石墨相同的层状结构，层内氮硼原子间强共价键结合，层与层间有时弱的范德华力结合，决定了氮化硼具有与石墨材料相似的力学性能。同时由于电子结构不同，氮化硼与石墨的电学性质又截然相反。六方氮化硼独特的性能使其在众多工业领域有着不可替代的关键作用。报告将就氮化硼粉体的合成、热解氮化硼制备及应用、氮化硼导热填料、热压氮化硼陶瓷、热压氮化硼基复相陶瓷材料的制备技术及应用等主题进行相关分享。

报告人简介：

黄向东，博士，福州大学材料科学与工程学院副教授。福州赛瑞特新材料技术开发有限公司、福建赛瑞特科技有限公司董事长兼研发总监。

清华大学材料系新型陶瓷与精细工艺国家重点实验室博士毕业。在非氧化物特种陶瓷材料，碳碳复合材料热压模具领域拥有二十多年的开发研究及生产经验，尤其在氮化硼陶瓷领域，其创立的赛瑞特品牌在行业内处于领先地位。近几年更是在氮化铝、氮化硅陶瓷基板烧结用高纯氮化硼治具方面取得重大突破，产品比肩日本电气化学产品。取得国内市场占有率第一的好成绩。在 3D 打印用金属气雾化喷嘴领域赛瑞特品牌也是主流厂家的指定品牌。

报告人：洪若瑜 福州大学 非学生 rhong@fzu.edu.cn

纳米氮化硅的清洁生产

洪若瑜
福州大学 化工学院，福建省福州大学城
Email: rhong@fzu.edu.cn

摘要：氮化硅陶瓷具有优异的高温力学性能、抗热震性能和抗侵蚀性能，应用越来越广。该陶瓷的制备首先需要具有下列特征的高性能氮化硅粉体：(1)微粉粒度超细并具有高比表面积，有利于烧结进行，形成均匀的显微结构，微粉的平均粒径至少为亚微米级；(2)氮化硅微粉晶型如果是等轴状的，会使素坯的密度有很大提高，因此粉体中必须含有较多的α晶型，从而在烧结时有足够的α相转变为β相，使陶瓷体获得良好的物理性能；(3)粉体高纯度，不能含有太多杂质，因杂质会使氮化硅制品的力学性能大幅下降。

氮化硅的传统制备方法是固相法，硅粉直接氮化法是制备氮化硅微粉的传统固相合成法，成本较低，用于大规模工业生产。主要生产流程为：高纯的硅粉放入氮化炉中，通入氮气进行高温氮化反应，反应温度为1150~1400℃时，但直接氮化法很难控制产物的晶相，会制备出α、β两种晶相混杂的微粉。由于反应温度较高时，常会出现产物黏结或硅溢现象，影响氮化反应的继续进行。因反应结束后氮化硅产物成块，需要对成块的产物进行粉碎后才可以得到较细的粉体。

固相法中的碳热还原法，把石英粉和炭粉混合均匀后放入反应炉内，通入氮气或者氨气加热到 1400℃进行，二氧化硅先与碳进行还原反应，生成单质硅后再和氮气或者氨气反应得到氮化硅，该法的优点是所得到的微粉小，且含有大量α相，比直接氮化法的速度快。但是反应时要保证碳过量，以免有剩余的二氧化硅未反应，需要燃烧除碳。为了提高反应物的接触面积，提高反应速率，缩短反应时间，可以用溶胶-凝胶法对碳热还原法进行改进，但是增加了成本。

固相法中的自蔓延法又称燃烧合成法，通过点燃粉料产生高温，反应自行推进。该法可减少合成所需能量，高效制备高纯度、高质量β相氮化硅微粉。

除固相法外还有液相法。在硅亚胺（或胺化物）法中，低温下将四氯化硅与氨反应，生成固体亚胺基硅或胺基硅；再将生成物进行热分解，得到纯度较高的α相氮化硅微粉。该法反应速度快，可制备出高纯度粉体，是除氮化法和碳热还原法外已商业化生产的方法，目前只有日本宇部较好地掌握大规模生产方法。

除上述固相法和液相法，还有高温气相反应法（CVD 法），大部分 CVD 制备还处于实验室规模，该法用四氯化硅或硅烷在高温下与氨气反应，得到纯度较高的氮化硅纳米粉，但α相含量较低，反应速度也较慢，生产率较低，需要改进。在激光改进法中，用二氧化碳激光激发氨气与硅烷气体，反应制备氮化硅微粉，制得粉体粒径小于 50nm。在等离子体改进法(PCVD)中，用等离子体激发反应气体，在超高温下反应，制备出超细的氮化硅，该法升温迅速、冷却快，可以减少反应时间，制备粒径极小的氮化硅，反应器紧凑且产量大。根据等离子体的类型，PCVD 法分为直流电弧等离子体法、高频等离子体法（RF 法）和复合等离子体法。三种方法均可得到粒径约十几 nm 的无定形氮化硅，以及数十 nm 的高纯度、无团聚的α相微粉。改法还可以规模化生产复相粉体如氮化硅-碳化硅。

制备高纯度、高α相、粒度小、粒径分布窄的高质量氮化硅，达到规模化、低成本的稳定生产是关注焦点。目前我国能规模化生产氮化硅粉体的主要方法是硅粉直接氮化法和二氧化硅碳热还原法。因此等离子体法大规模生产要吸收其它方法的优点，改进现有生产工艺中的问题，实现高质量粉体的生产。

关键词：纳米材料，纳米粉体，氮化硅，化学气相沉积法，等离子体

Keywords: nanomaterial, nanosized powder, silicon nitride, chemical vapor deposition, plasma

报告人：史忠旗 西安交通大学 非学生 zhongqishi@xjtu.edu.cn

氮化铝粉体的形貌可控“微反应器”燃烧合成及其应用探索

史忠旗

西安交通大学，材料科学与工程学院，金属材料强度国家重点实验室，西安 710049

氮化铝（AlN）陶瓷因具有高热导率、低介电常数和损耗、与硅匹配的热膨胀系数、优良的力学性能等一系列优良特性，可作为电子基板和封装材料等使用。但由于目前高品质 AlN 粉原料严重依赖进口，同时对于 AlN 粉料的形貌难以控制，导致其广泛应用受到一定限制。如何发展具有自主知识产权的工艺方法获得形貌可控的高品质 AlN 粉原料，并在此基础上根据其形貌特征进行合理应用，是该领域亟待解决的关键问题。燃烧合成法是一种经济有效合成 AlN 粉体的方法，但在合成过程中仍难以实现产物的形貌控制，限制了该方法的广泛应用。本研究通过一种独特的“微反应器”燃烧合成法成功实现了 AlN 粉体的形貌可控合成，制备出了多种具有均一形貌的 AlN 粉体，如纳米晶须状、多孔空心球状、近球形粉体等，并探索了所制备的不同形貌的 AlN 粉体在电子封装材料和 AlN 多孔陶瓷领域的应用。

报告人：贺刚 天津理工大学 非学生 ipchg@mail.ipc.ac.cn

光伏硅泥制备氮化硅粉及其导热复合材料

贺刚*

天津理工大学功能晶体研究院，天津市西青区宾水西道 391 号，300384

*Email：ipchg@mail.ipc.ac.cn

摘要正文：光伏硅片切割生产过程产生的“硅泥”，是有重要应用价值的特色廉价 Si 资源。针对半导体先进封装对氮化物高导热填料的迫切需求，以细粒度、高氧含量的光伏硅泥为原料，通过燃烧合成方法制备β相氮化硅粉体；研究了燃烧温度、压力、催化剂等工艺参数，对氮化硅粉体物相、形貌的影响规律；并以合成的β相氮化硅粉体为导热填料，制备有机硅树脂复合材料，研究了β相氮化硅粉体氧含量、填充量对复合材料热导率、介电性能、力学性能的影响规律。结果表明：通过优化的燃烧合成工艺，可将高氧含量（4.0wt%）的光伏硅泥，转变为低氧含量（<1.0wt%）的β相氮化硅粉体；以低氧含量的β相氮化硅粉体为导热填料，可以显著提升有机硅树脂的导热性能（提升>7 倍@80wt%填充量）。以低廉的光伏硅泥为原料，通过低能耗的燃烧合成工艺，制备的低氧含量β相氮化硅导热填料，在半导体先进封装领域具有工程应用前景。

关键词：光伏硅泥；氮化硅；燃烧合成；导热填料

参考文献

[1] M Qing, H Gang, Y Zengchao, L Jiangtao. Combustion synthesis of tunable-aspect-ratio β-Si3N4/BNcomposite ceramic materials, J Am Ceram Soc., DOI: 10.1111/jace.20005.

Preparation of silicon nitride powder and thermal conductive composites by photovoltaic silicon slime

Gang He*

Institute of Functional Crystals, Tianjin University of Technology, 391 Binshui West Road, Xiqing District, Tianjin, 300384

*Email：ipchg@mail.ipc.ac.cn

The "silicon sludge" produced in the silicon wafer cutting process of photovoltaic industry is a unique and inexpensive source of Si with important application value. In response to the urgent demand for high thermal conductivity fillers based on nitride in advanced semiconductor packaging, the fine-grained, high-oxygen-content photovoltaic silicon sludge was used as the raw material, and the beta-phase silicon nitride powder was synthesized by combustion method. The influence laws of the phase and morphology of the silicon nitride powder on the synthesis temperature, pressure, catalyst and other process parameters were studied. And the thermal conductivity, dielectric properties, and mechanical properties of the organic silicone resin composite material made with the synthesized beta-phase silicon nitride powder as the thermal conductive filler were studied. The results show that by optimizing the combustion synthesis process, the high-oxygen-content (4.0wt%) photovoltaic silicon sludge can be transformed into low-oxygen-content (<1.0wt%) beta-phase silicon nitride powder. With the low-oxygen-content beta-phase silicon nitride powder as the thermal conductive filler, the thermal conductivity of the organic silicone resin can be significantly improved (improved by more than 7 times at 80wt% filling rate). The low-oxygen-content beta-phase silicon nitride thermal conductive filler made from low-cost photovoltaic silicon sludge by low-energy consumption combustion synthesis process has engineering application prospects in the advanced semiconductor packaging field.

Keywords: silicon sludge, silicon nitride, combustion synthesis, thermal conductive filler

References

[1] M Qing, H Gang, Y Zengchao, L Jiangtao. Combustion synthesis of tunable-aspect-ratio β-Si3N4/BNcomposite ceramic materials, J Am Ceram Soc., DOI: 10.1111/jace.20005.

报告人简介：

贺刚，天津理工大学功能晶体研究院研究员。2015 年在中国科学院理化技术研究所获得博士学位。主要从事先进陶瓷粉体、光电功能材料的燃烧合成及烧结制备科学及工程应用研究。主持国家自然科学基金面上项目、青年基金和横向课题等项目 10 余项，累计发表学术论文 70 余篇，授权发明专利 20 余项。

报告人：宋育杰 中国科学院宁波材料技术与工程研究所 非学生 songyujie@nimte.ac.cn

先驱体转化低碳氮化物陶瓷的研究

宋育杰[1,*]，李天昊[1]

[1]中国科学院宁波材料技术与工程研究所，浙江省宁波市镇海区中官西路 1219 号，315201

[*]Email: songyujie@nimte.ac.cn

摘要：随着航空航天和高速武器的快速发展，针对高性能结构功能一体化材料的需求十分迫切。氮化物陶瓷具有优异的高强度、低密度、耐高温、抗氧化、抗热冲击等优异性能，同时，低碳含量氮化物陶瓷如 Si_3N_4、SiBN 等具有优异的高温透波性能，低碳氮化物陶瓷的开发和研究对高速飞行器性能提升具有重要的意义。

我们开发了一种含有易离去基团的先驱体设计策略，将三甲基硅基这种易离去基团引入到单体分子结构中，不仅增加了先驱体的位阻，提高了先驱体的稳定性，最大程度降低了储存过程中氧化、水解的可能性，降低了产品中氧元素含量，同时三甲基硅基又容易热解脱落，避免了陶瓷化过程中碳元素的残留，可以得到低碳含量的氮化物陶瓷。通过这种先驱体设计策略，我们已经制备得到了高纯度 Si_3N_4 陶瓷粉体、SiBN 陶瓷粉体及 SiAlBN 陶瓷粉体，通过对陶瓷中 B、Al 元素含量的精准调控，研究了 B、Al 元素对陶瓷微观结构及性能的影响。

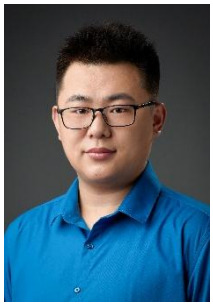
关键词：先驱体转化陶瓷；结构设计；氮化物；低碳

参考文献

[1] Tianhao Li, Wei Zhang, Liantai Duan, Ke Chen, Qing Huang, Yinsheng Li, Zhengren Huang, Liu He, Yujie Song*,High-purity stoichiometric Si_3N_4 ceramics through trimethylsilyl-substituted polysilazanes, J Am Ceram Soc, 2023, 106: 3329-3335.

[2] Liantai Duan, Tianhao Li, Yangzhong Zhao, Yanpei Dang, Jianning Zhang, Ke Chen, Jian Xu, Qing Huang, Chuanzhuang Zhao, and Yujie Song*, Polyborosilazane with Broadly Tunable Boron Content for SiBCN Ceramics, Inorg. Chem. 2023, 62, 25, 10014-10020.

报告人简介：宋育杰博士，中国科学院宁波材料技术与工程研究所研究员，主要从事高性能有机硅高分子材料开发。 2020 年入选中国科学院百人计划，宁波市领军人才，2023 年受聘有机硅绿色发展产业联盟“有机硅特聘专家”。近 3 年主持和参与国家自然科学基金、科技部重点研发计划、浙江省“尖兵计划”、广东省自然科学基金、企业横向委托等多项，其中多项技术业内头部企业转移。近 3 年在 *Polym. Chem., Macromolecules* 等高分子领域顶刊发表 SCI 论文 50 余篇，申请国际专利 3 项，中国专利 40 余项，其中授权 20 余项。其技术成果先后荣获华为优秀项目奖、首届中国-中东欧国家创新创业大赛一等奖、“国科大杯”创新创业大赛二等奖等。



报告人：王波 西安交通大学 非学生 wangbo_1@xjtu.edu.cn

木材衍生多孔 Si_3N_4 陶瓷的微观结构调控与多功能化应用

王波，徐娇倩，郝旭，周小楠

西安交通大学金属材料强度国家重点实验室，陕西省西安市咸宁西路 28 号，710049

Email: wangbo_1@xjtu.edu.cn

摘要正文：多孔 Si_3N_4 陶瓷在航空航天、耐热透波、过滤催化等领域可发挥重要作用。针对其力学性能和功能特性进行协同调控，以层次分明、构造有序的多尺度分级结构的天然木材为模板，原位转化为质轻高强的 Si_3N_4 纳米多孔陶瓷，实现其强韧化。将天然木材经过高温碳化后，采用“碳热还原氮化-液相烧结”两步法制备仿生结构 Si_3N_4 陶瓷。并通过引入稀土氧化物助剂在细胞层构建β-Si_3N_4 纤维阵列，提高骨架承载和变形能力。采用不同种类稀土氧化物烧结助剂，在细胞壁内调控β-Si_3N_4 纤维阵列的结构。阐明 Si_3N_4 晶粒的碳热还原氮化机制，研究烧结助剂的种类和工艺参数对木材衍生 Si_3N_4 陶瓷微观形貌的影响规律，揭示β-Si_3N_4 纤维阵列的形成和调控机制；阐明微观亚微米尺度对多孔 Si_3N_4 陶瓷宏观力学性能和功能特性的内在关联，研究其功能特性并将其用于烟气过滤、油水分离、相变储能等领域。为高比强多孔材料和功能复合材料的创新设计提供新思路。

关键词：天然木材；氮化硅；微观结构；多孔陶瓷；碳热还原氮化反应

参考文献

[1] **S. Xu, X. Zhou, Q. Zhi, J. Gao, L. Hao, Z. Shi, B, Wang, J. Feng, K. ISHIZAKI, Anisotropic, biomorphic cellular Si_3N_4 ceramics with directional well-aligned nanowhisker arrays based on wood-mimetic architectures. *J. Adv. Ceram*. 2022, 11(4): 656-664.**

报告人：李淑星 厦门大学 非学生 lishuxing@xmu.edu.cn

稀土掺杂氮化物发光材料与激光照明应用

李淑星[1]，解荣军[2]

[1]厦门大学材料学院，福建省厦门市思明区思明南路 422 号，361005

[2]厦门大学材料学院，福建省厦门市思明区思明南路 422 号，361005

*Email:lishuxing@xmu.edu.cn

摘要正文：稀土掺杂氮化物发光材料具有丰富的发光色、高的量子效率、显著红移的激发和发射光谱以及优异的热稳定性，在半导体照明与显示领域具有不可或缺的重要应用。针对半导体照明与显示技术新的发展方向和应用需求，探索和发现新型稀土掺杂氮化物发光材料迫在眉睫。本报告将围绕稀土掺杂氮化物发光材料与激光照明应用展开。由于传统试错法发现新材料的效率低，我们提出了高通量离子替换算法挖掘稀土发光材料的新思路，并率先建立了预测误差小于 7 nm 的氮化物发光材料发射波长的定量预测模型，高通量筛选获得了超长发射波长的氮化物发光材料，并获得了实验验证。在失效机制方面，我们揭示了高功率密度激光激发下稀土发光材料的光猝灭失效机制，阐明了光猝灭背后的物理过程为能量传递上转换，建立了发光效率与激发强度的定量计算公式，提出了光猝灭的量化参数，为耐激光激发的发光材料的研制奠定了理论基础。在实际应用方面，我们筛选出了耐高功率密度激光辐照且短缺的橙红色氮化物发光材料。提出了两步法制备小粒径的氮化物粉体，解决了其粒径和量子效率之间相互制约的矛盾。基于小粒径粉体，研制出了高效且稳定的氮化物发光陶瓷，在此基础上，提出了微结构调控策略提升陶瓷的发光亮度，开发了针对智慧照明、雨雾天气探照、医用内窥镜等应用场景的高亮度、高显色指数的激光照明光源，推动了稀土发光材料和半导体照明与显示器件的迭代升级。

关键词：高通量计算；失效机制；激光照明应用；稀土掺杂氮化物发光材料

参考文献

[1] R. Tian, Q. Wang, S. Li, T. Zhou, R.-J. Xie, J. Mater. Sci. & Technol., 210 (2025) 179-187.

[2] S. Li, R. Tian, T. Yan, Y. Guo, Y. Liu, T.-L. Zhou, L. Wang, R.-J. Xie, Mater. Today, 70 (2023) 82-92.

[3] S. Li, L. Huang, Y. Guo, L. Wang, R.-J. Xie, Mater. Hori., 10 (2023) 4581-4588.

[4] T. Deng, D. Halmurat, Z. Shen, T. Yan, S. Li, L. Wang, R.-J. Xie, Laser Photon. Rev. 17 (2023) 2300240.

[5] S. Li, M. Amachraa, C. Chen, L. Wang, Z. Wang, S. P. Ong, R.-J. Xie, Matter 5 (2022) 1924-1936.

[6] S. Li, Y. Guo, R.-J. Xie, Acc. Mater. Res. 3 (2022) 1299-1308.

[7] T. Deng, L. Huang, S. Li, Q. Zhu, L. Wang, T. Takeda, N. Hirosaki, R.-J. Xie, Laser Photon. Rev. 16 (2022) 2100722.

[8] H. Chen, T. Lin, F. Huang, S. Li, X. Tang, R.-J. Xie, Adv. Opt. Mater. 10 (2022) 2200836.

[9] T. Lin, H. Chen, S. Li, L. Wang, F. Huang, R.-J. Xie, Chem. Eng. J. 444 (2022) 136591.

[10] M. Amachraa, S. Li, P.-Y. Huang, R.-S. Liu, Z. Wang, R.-J. Xie, S. P. Ong, Chem. Mater. 34 (2022) 4039-4049.

[11] P. Zheng, S. Li, T. Takeda, J. Xu, K. Takahashi, R. Tian, R. Wei, L. Wang, T. Zhou, N. Hirosaki, R.-J. Xie, Acta Mater. 209 (2021) 116813.

[12] S. You, S. Li, L.Wang, T. Takeda, N. Hirosaki, R.-J. Xie, Chem. Eng. J. 404 (2021) 126575.

[13] S. Li, Y. Xia, M. Amachraa, N. T. Huang, Z. Wang, S. P. Ong, R.-J. Xie, Chem. Mater. 31 (2019) 6286-6294.

[14] P. Zheng, S. Li, R. Wei, L. Wang, T. Zhou, Y. Xu, T. Takeda, N. Hirosaki, R.-J. Xie, Laser Photon. Rev. 13 (2019) 1900147.

[15] S. You, S. Li, P. Zheng, T. Zhou, L. Wang, L. Liu, N. Hirosaki, F. Xu, R.-J. Xie, Laser Photon. Rev. 13 (2019) 1800216.

[16] P. Zheng, S. Li, L. Wang, T. Zhou, S. You, T. Takeda, N. Hirosaki, R.-J. Xie, ACS Appl. Mater. Interfaces 10 (2018) 14930-14940.

[17] S. Li, L. Wang, N. Hirosaki, R.-J. Xie, Laser Photon. Rev. 12 (2018) 1800173.

报告人/墙报展示人简介：

李淑星，厦门大学副教授，博士生导师，南强青年拔尖人才，在国际知名期刊上发表 SCI 收录论文 40 余篇，包括《Matter》、《Mater. Today》、《Mater. Horiz.》、《Acc. Mater. Res.》、《Acta Mater.》、《Laser & Photon. Rev.》等，授权中国发明专利 13 项，美国发明专利 1 项，获福建省高层次人才、博士后创新人才支持计划、中国稀土科学技术一等奖（排名第 2）、中国“互联网+”创新创业大赛全国总决赛亚军/金奖等。担任《Journal of Advanced Ceramics》助理编委，《Journal of Rare Earths》、《发光学报》青年编委，承担国家自然科学基金面上项目等。

报告人：江凡 南京信息工程大学 非学生 jiangfan@nuist.edu.cn

氮化硅增强镍基超疏水涂层的制备及其耐腐蚀性能的研究

江凡[1, 2*]，杨志[2]，娄添阁，徐子壹

[1]南京信息工程大学，江苏省南京市宁六路 219 号，210044

[2]嘉善鑫海精密铸件有限公司，浙江省嘉善县陶庄镇汾湖南路 138 弄 118 号，314101

*Email: jiangfan@nuist.edu.cn

摘要正文：由于铜铸件拥有各项优良的性能广泛应用于工业生产领域，但是其耐腐蚀较差，在潮湿环境中易被腐蚀从而导致巨大的损失。针对铜的腐蚀问题，本研究通过氯化胆碱-乙二醇体系电沉积镍-氮化硅复合涂层，经热处理后得到超疏水涂层。实验结果表明，该复合涂层表面具有独特的微纳米结构，其接触角达到了156°。与热处理单一镍涂层得到的超疏水表面相比，该涂层同样具有良好自清洁能力和空气稳定性，并且其的耐摩擦性以及耐腐蚀性都有所提升。

关键词：氮化硅；镍基涂层；超疏水；腐蚀

报告人：庄黎伟 华东理工大学 非学生 lwzhuang@ecust.edu.cn

原子层沉积虚拟系统及其在氮化物薄膜方面的应用

庄黎伟[1,*]，Dennis T. Lee[2]，Peter Corkery[2]，Michael Tsapatsis[2]

[1] 华东理工大学化工学院，上海，200237

[2] Johns Hopkins University, Baltimore, Maryland, USA, 21218

*Email: lwzhuang@ecust.edu.cn

摘要正文：原子层沉积(Atomic Layer Deposition，ALD)前驱体，区别于一般电子化学品。除了纯度要求，它的分子功能，与薄膜沉积工艺、装备高度关联。原子层沉积前驱体的开发，与薄膜沉积工艺脱节，这是目前电子化学品难以实现芯片制造终端应用的共性问题！我们开发了基于虚拟ALD阀门、源瓶的供气系统模型、真空腔体流体力学传递过程模型、大面积平面/维纳结构基底的薄膜沉积模型，致力于全流程的ALD过程与装备仿真设计，相关模型已在国内外高校、企业的研究级、工业级ALD机台得到了系统验证。基于该虚拟全流程系统，可用于评估各种类型前驱体的分子功能，及其与镀膜工艺、装备的适配性。相关技术已应用于各类液体源、固体源及其钢瓶的设计、开发和评估。此外，本报告将介绍以上虚拟系统在氮化物薄膜沉积的应用。

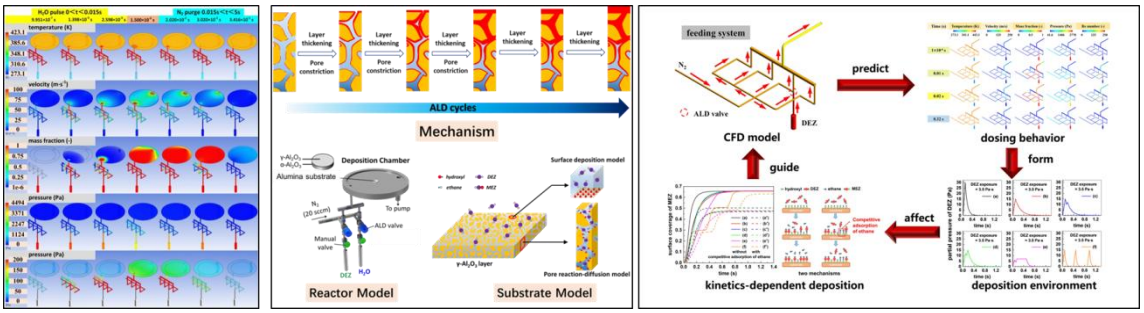


Fig. 1 Virtual System of Atomic Layer Deposition

关键词：原子层沉积；前驱体；分子功能；虚拟系统；镀膜

参考文献

[1] *X. Ma*, P. Kumar, N. Mittal, A. Khlyustova, P. Daoutidis, K.A. Mkhoyan, M. Tsapatsis*, "Zeolitic imidazolate framework membranes made by ligand-induced permselectivation", Science 361: 1008-1011(2018).*

[2] *L. Zhuang*, P. Corkery, D.T. Lee, S. Lee, M. Kooshkbaghi, Z. Xu, G. Dai, I.G. Kevrekidis, M. Tsapatsis*, "Numerical simulation of atomic layer deposition for thin deposit formation in a mesoporous substrate", AIChE Journal 67(8): e17305(2021).*

[3] *G. Hao, D.T. Lee, P. Corkery, Y. Miao, Y. Yuan, Z. Xu, G. Dai, G. Parsons, I.G. Kevrekidis, L. Zhuang*, M. Tsapatsis*, " Modeling of deposit formation in mesoporous substrates via atomic layer deposition: insights from pore-scale simulation", AIChE Journal 68(12): e17889(2022).*

[4] *Y. Yuan, H. Ping, D.T. Lee, P. Corkery, Z. Zhang, C. Liu, S. Xue, L. Zhuang*, M. Tsapatsis, " CFD simulation of the dosing behavior within the atomic layer deposition feeding system", Industrial & Engineering Chemistry Research 62(23): 9335-9347 (2023).*

报告人/墙报展示人简介：

庄黎伟，博士，华东理工大学化工学院副教授，上海“浦江人才”计划获得者(集成电路方向)，美国约翰霍普金斯大学访问学者，美国能源部项目（ALD 技术，2020-2023）研究员。研究方向包括：原子层沉积(ALD)，计算流体力学(CFD)，膜分离与膜组件，化工反应器，钙钛矿太阳能电池等。近年来已在 AIChE Journal(封面)等期刊发表学术论文 20 余篇，主持国家自然科学基金面上、青年项目，工业 ALD 机台、ALD 供气系统、ALD 固体前驱体容器仿真设计，各类 ALD 工艺开发等企业项目。

附：教师

报告人 朱久一 中国科学院过程工程研究所 非学生 zhujiuyi@ipe.ac.cn

Near-Room-Temperature 'Sintering' of Two-Dimensional Bulk Materials

Jiuyi ZHU[1,2*], Yang SU [2], Hui-ming CHENG[2]

[1] State Key Laboratory of Mesoscience and Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing, People's Republic of China 100190

[2] Institute of Materials Research, Tsinghua Shenzhen International Graduate School, Tsinghua University, Shenzhen, People's Republic of China 518055

*zhujiuyi@ipe.ac.cn

Bulk van der Waals (vdW) materials, such as graphite and hexagonal boron nitride (h-BN), have traditionally been produced using high-temperature sintering processes (>1000 °C). We have developed an alternative method to fabricate vdW materials at near room temperature (~45 °C), reducing energy consumption by over an order of magnitude. This approach involves first exfoliating particulates into two-dimensional (2D) nanosheets, which are then molded at 45 °C into mechanically strong bulk vdW materials. Our method is versatile and applicable to a broad range of 2D materials, including MXene and transition metal dichalcogenides. The lower processing temperature also allows for surface imprinting and in-situ shaping, which are challenging under high-temperature conditions due to thermal shrinkage and expansion. Additionally, the additive-free nature of these vdW materials makes them suitable for high-temperature applications where conventional 2D material-polymer composites are inadequate.

The mechanical strength of the resulting bulk vdW materials stems from the formation of vdW interactions, which are activated by nanometer-scale contact between adjacent nanosheets, rather than by high temperature. The thinness and flexibility of the 2D nanosheets facilitate close contact, which is crucial for vdW interaction. Remarkably, water adsorbed on the nanosheets acts as a "sintering aid," lubricating the nanosheets to enable proper alignment. As the water desorbs under nano-confinement effects, capillary forces close, triggering vdW interactions and leading to a densified, strong material.

This 2D-material-based method not only reduces the energy required for producing bulk vdW materials but also offers new opportunities for the design and large-scale fabrication of vdW materials, particularly those that are unstable at high temperatures. The findings also highlight the transformative potential of nanomaterials in altering traditional material processing techniques.

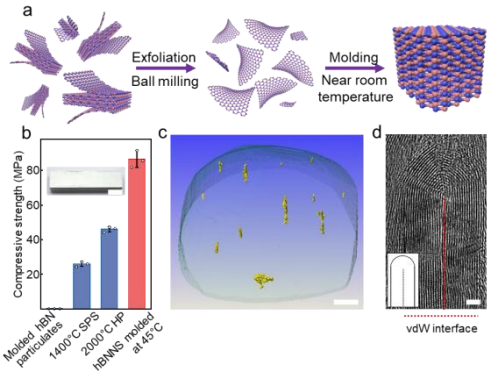


Fig.1 The schematic showing the exfoliation of nanosheets and their subsequent molding to form bulk vdW materials, the mechanical strength and microstructure of the bulk vdW materials.

Keywords: Two-dimensional nanosheets, Van der Waals interactions, Sintering, Die Forming.

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：不是学生

报告人：向茂乔 中国科学院过程工程研究所 非学生 qszhu@ipe.ac.cn

化学气相合成Ti_2NCl_2粉体

向茂乔 [1,2]，岳芬 [2]，朱庆山 [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，化学工程学院，北京，100049

*Email: qszhu@ipe.ac.cn

过渡金属氮化物作为 MXenes 家族中重要的组成部分，因其独特的结构和表面性质，在催化、光探测、传感器、电磁屏蔽、能量存储等领域受到广泛关注[1]。然而，当前 MXenes 还面临稳定性低，制备工艺复杂、成本高、产量小等难题，严重阻碍了实际应用。虽然化学气相沉积被认为是潜在的解决方案[2]，但直接合成少层单相 MXenes 仍然面临巨大挑战，特别是对于 Ti_2NCl_2 粉体。针对上述问题，本报告分析了现有技术合成 MXenes 粉体成本高和效率低的原因，介绍了基于化学气相沉积合成少缺陷高质量二维 Ti_2NCl_2 粉体的新方法，通过第一性原理理论分析和路径调控实验，解析了新方法的合成机理，同时采用分子动力学模拟，揭示了阳离子缺陷是影响稳定性的关键因素，并发现高质量 Ti_2NCl_2 粉体呈现出优异的导电性能和储能性能。新方法不仅显著降低了成本（约 2 个数量级），而且具有优异的综合性能，为 MXenes 的实际应用奠定了坚实的基础。

关键词： MXenes；Ti_2NCl_2；粉体合成；化学气相沉积；储能性能

参考文献

[1] Lim, K.R.G., Shekhirev, M., Wyatt, B.C. et al. Fundamentals of MXene synthesis[J]. Nat. Synth. 2022, 1, 601–614.

[2] Xiang, M.Q., Shen, Z. H., Zheng J, et al. Gas-phase synthesis of Ti_2CCl_2 enables an efficient catalyst for lithiumsulfur batteries [J]. The Innovation 2024, 5(1): 100540

报告人人简介：

向茂乔，中国科学院过程工程研究所青年研究员，中国科学院创新促进会会员。主要从事陶瓷粉体流态化合成研究，致力于解决高纯、超细特种陶瓷粉体的气相合成机理、低成本批量规模化制备、工艺创新和系统集成的难题。主持项目 7 项，包括中科院基础前沿科学“从 0 到 1”原始创新项目 1 项、国家自然科学基金 2 项以及中科院仪器研制项目等，发表 SCI 论文 50 余篇，包括 The Innovation, Adv. Funct. Mater., Chem. Eng. J., J. Am. Ceram. Soc., Powder Technol.等期刊，授权专利 30 余项。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

报告人：裴军 国家知识产权局专利局专利审查协作北京中心 非学生 peijun@bjguozhi.cn

东芝氮化硅陶瓷基板全球专利布局研究

裴军

国家知识产权局专利局专利审查协作北京中心；北京国知专利预警咨询有限公司

氮化硅陶瓷基板在新能源汽车、风力发电、高铁等多个领域广泛应用，具有广阔的市场需求和商业价值。东芝公司在全球氮化硅陶瓷基板市场中占据领先地位，并通过在全球范围内构建起完整的专利布局体系长期维持其行业竞争力，我国氮化硅陶瓷基板产业发展迅猛，但仍面临以东芝为代表的国外企业的知识产权壁垒。本研究工作对东芝公司在氮化硅陶瓷基板方面的全球专利布局进行系统分析，从专利布局的时间跨度、地域分布、技术覆盖程度、专利保护和运用模式等维度进行综合研判，提出我国创新主体在应对和规避专利侵权风险、关键技术攻关、自身专利布局体系构建等方面的策略与建议。

报告人：王兵 国防科技大学 非学生 cfcwb01@163.com

连续陶瓷纤维表面氮化硼界面相的高效制备

王兵

国防科技大学

氮化硼（BN）界面相在陶瓷基复合材料中起着至关重要的作用，特别是对陶瓷基复合材料的力学性能和耐高温性能有着重要影响。目前，主要采用化学气相沉积（CVD）法在连续纤维表面沉积氮化硼界面涂层，但存在制备成本高和沉积速率低等问题。先驱体浸渍涂覆法作为一种低成本高效率的涂层制备方法。前期，我们合成了一种新型无碳水溶性聚硼氮烷先驱体 PABB，并创新地设计了一种在线氮化硼界面相制备技术，可用于在陶瓷纤维上高效连续制备高质量氮化硼涂层。氮化硼界面相厚度可以在从 0.1 μm 到 1.2 μm 调控。此外，在连续纤维织物上低成本、高效率地制备的高质量 BN 界面相仍然是一个重大挑战。采用先驱体浸渍涂覆法在 2.5D-SiC 织物上整体制备了均匀致密的 BN 界面相。织物内部和表面纤维的 BN 界面相厚度差别不大，平均厚度为 550 nm。制备的 BN 界面相具有较低的结晶温度(~ 1200℃)，且在 1600℃处理后与纤维保持紧密结合。本研究不仅提出了在连续陶瓷纤维丝束上实现了高质量 BN 界面相的指标，还提出了 SiC 织物上制备均匀 BN 界面相的整体方法，为 BN 界面相的高效指标提供了一种新的策略。

报告人：金星 安徽工业大学 非学生 jinxing@ahut.edu.cn

原位生成 Si_2N_2O 增强 Si_3N_4 基复合陶瓷材料

金星[1]，冉松林[2]

安徽工业大学冶金减排与资源综合利用重点实验室，安徽 马鞍山 243002

安徽工业大学材料科学与工程学院，安徽 马鞍山 243002

摘要：本文以纳米非晶 Si_3N_4 为原料，Al_2O_3 和 Y_2O_3 为烧结助剂，通过放电等离子烧结在 1750℃制备了致密的 Si_2N_2O 陶瓷。并对 Si_2N_2O 陶瓷的反应烧结过程、力学性能和介电性能进行了详细研究。结果表明：在烧结过程中，无定形的 Si_3N_4 首先结晶为α-Si_3N_4 和β-Si_3N_4，然后氧化为 Si_2N_2O。随着保温时间的延长，Si_2N_2O 的晶粒取向逐渐向斜方晶的 c 轴方向生长。同时，陶瓷的致密度逐渐提高，显著促进了 Si_2N_2O 陶瓷的力学性能和介电性能。在本工作中，烧结过程的最佳保温时间为 20 分钟，所制备的 Si_2N_2O 陶瓷表现出优异的力学性能和介电性能，其体积密度为 2.80±0.01 g·cm-3，维氏硬度为 13.1±0.1 GPa，弯曲强度为 214.1±15.8 MPa，断裂韧性为 2.8±0.3 MPa·m1/2，并在 8.2-12.4 GHz 具有约 3.5 至 4.5 的低介电常数。相较传统的固相反应烧结法（Si_3N_4+SiO_2），此方法具有快速、高效和无杂质残留的优势，为高品质 Si_2N_2O 陶瓷及 Si_3N_4–Si_2N_2O 复合陶瓷材料的快速制备提供了潜在方式。

关键词：氮化硅；氮氧化硅；原位反应烧结；复合陶瓷

论文所属专题分类号：25）氮化物粉体、制品及应用。

论文联系作者：金星、安徽省马鞍山市湖东路 59 号、18202437274、jinxing@ahut.edu.cn。

报告人：照片、简介

金星，博士，安徽工业大学讲师，硕士研究生导师。2011-2021 年就读于东北大学，分别获有色金属冶金及材料学学士、硕士、博士学位。主要从事硅基光伏固废的氮化回收，氮化硅基复合陶瓷材料的烧结研究；主持国家自然科学基金青年项目 1 项、安徽省自然科学基金重点项目 1 项、安徽省自然科学基金青年项目 1 项；在 Journal of Hazardous Materials、Journal of Cleaner Production、Ceramics International 等期刊发表多篇学术论文；申请并授权国家发明专利 4 项。

报告人：李磊 上海迈克孚生物科技有限公司 非学生 stone@macf.com.cn

微射流分散技术助力纳米材料产业化应用

李磊

上海迈克孚生物科技有限公司，上海市闵行区碧溪路 55 号 13 幢 102 室，邮编 201109

Email: stone@macf.com.cn

氮化物纳米粉体材料是具有奇异和优良性能的功能性材料，其生产和应用涉及到新能源、军工、半导体、电子信息、冶金、航空航天、矿业等关乎国民经济发展的各个领域。纳米粉末的制备工艺决定着粉体材料的品质，而常用的纳米粉体形貌各异，如何制备具有特定形貌的超细、粒径均一、分散性好、高纯度的高性能纳米粉体是行业最关注问题。其中超细纳米粉体的分散，一直是制约其制品性能和下游应用的关键因素。微射流纳米分散技术其原理是利用成熟稳定的液压技术，在柱塞泵的作用下将液体物料增压，凭借准确压力调节使物料压力增加到 20Mpa 至 300Mpa 之间设定的压力值。被增压的物料，流向具有固定几何形状的金刚石交互容腔并产生高速微射流，具有高速射流的物料在交互容腔微通道内产生剪切、对撞、空穴效应等物理作用力，从而对物料起到粒径有效减小，均一、纳米化分散的作用。该技术具有分散效率高，处理均一性好，批次稳定性好以及线性放大等一系列优点，可以助力纳米材料产业化快速应用。

关键词：纳米分散；微射流；氮化物纳米粉体材料；

Fig. 1 High pressure microjet homogenizer

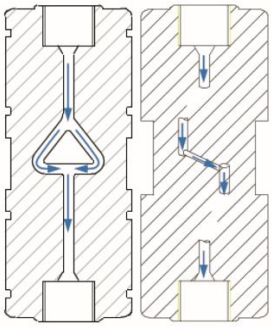


Fig. 2 Diamond Interaction Chamber

报告人/墙报展示人简介：非学生

李磊，1984 年 3 月生，2014 年获得复旦大学博士学位，迈克孚微射流技术研发&应用总监，上海迈克孚生物科技有限公司联合创始人。李磊博士博览众长，花费大量精力深入研究国内外相关微射流技术应用文献及技术专利。以微射流技术实际应用为导向，李磊博士在纳米生物，纳米化妆品，纳米食品，纳米材料，纳米医药等领域都具有较多的样品测试及工艺研发的探索实践经验。结合大量亲身实践总结，在高压微射流技术应用领域，李磊博士带领研发团队，先后申请发明专利、实用新型专利几十件。

结合微射流技术纳米均质及分散应用的卓越性能，李磊博士积极探索高压微射流技术在纳米粉体材料领域的应用，并成功开发了利用微射流技术进行 CMP（氧化铝、氧化硅、氧化铈等）抛光液的分散，LTCC/MTCC 材料分散，纳米陶瓷（氧化锆、氧化钛、碳化硅、氮化硅等）材料分散，金属纳米粉体材料分散，纳米油墨材料分散，石墨烯、氮化硼、二硫化钼等二维材料剥离，碳纳米管分散，碳载铂催化剂分散，锂电池正极材料的破碎等一系列应用。并参与了 T CGIA 004.3-2022 石墨烯材料绿色制备与温室气体排放核算指南 第 3 部分：液相剥离法的编制。李磊博士带领迈克孚团队实现了高压微射流均质机的国产化替代，为纳米材料领域客户企业提供了更有性价比的解决方案。

报告人：于俊杰 广东技术师范大学 非学生 jun160331@126.com

过渡金属硼化物增强增韧的氮化硅陶瓷性能调控研究

于俊杰

广东技术师范大学

氮化硅（Si_3N_4）陶瓷因具有较高的硬度、强度和韧性及良好的热稳定性等而广泛应用于高速切削刀具和高精密轴承球等的制造。但是，如何获得高硬度高韧性兼具的 Si_3N_4 陶瓷，是制约 Si_3N_4 陶瓷产品高可靠性批量制造的关键瓶颈。研究指出，通过向 Si_3N_4 中引入过渡金属硼化物粉体 MB_2（TiB_2、ZrB_2、HfB_2、TaB_2、NbB_2、CrB_2 和 MoB_2）可促进 Si_3N_4 陶瓷中α-到β-Si_3N_4 的相变及长棒状β-Si_3N_4 晶粒的长大。单相 Si_3N_4 陶瓷中α-Si_3N_4 相的含量最高为 79.1 wt%，显微形貌为等轴超细晶粒具有最高的维氏硬度（23.3 GPa），但断裂韧性和抗弯强度较低（5.1 $MPa\cdot m^{1/2}$ 和 390 MPa）；当引入硼化物粉体后α-Si_3N_4 相的含量明显降低，出现长柱状β-Si_3N_4 晶粒；引入 HfB_2 的 Si_3N_4 陶瓷中α-Si_3N_4 相的含量最低（42.1 wt%），长柱状β-Si_3N_4 晶粒形态最佳，具有最佳的综合力学性能（硬度、韧性和强度分别为 20.3 GPa、8.2 $MPa\cdot m^{1/2}$ 和 780 MPa）；引入 MoB_2 的 Si_3N_4 陶瓷中α-Si_3N_4 相的含量最高（68.9 wt%），长柱状β-Si_3N_4 晶粒的数量较少、直径和长径比最小，力学性能也较低。

报告人：耿建芳 德国新帕泰克有限公司苏州代表处 非学生 Jgeng@sympatec.com.cn

高性能氮化硅陶瓷粉体的粒度粒形分析

耿建芳[1]，赵春霞[1,*]

1．德国新帕泰克有限公司苏州代表处（SYMSINO），苏州，215123

*Email: Czhao@sympatec.com.cn

摘要

氮化硅陶瓷材料的性能深受其烧结过程的影响，其中氮化硅粉体原料的粒度和粒形是决定烧结过程中材料密度、微观结构和烧结活性的关键因素。因此，精确控制氮化硅粉体的颗粒特性对于制备高性能陶瓷制品至关重要。传统的颗粒图像分析方法如电镜法，由于取样量有限，测试结果重复性和统计性较差，为此，本研究引入了德国新帕泰克公司开发的动态图像法分散技术，探讨该技术在氮化硅粉体的粒度和粒形分析方面的先进性。

该技术结合了先进的光学成像系统与干湿法分散模块的灵活性，为氮化硅粉体样品提供了高效且精确的测量手段。其高分辨率图像分析能力不仅能够详细评估颗粒的球形度、宽长比等形态参数，还能迅速识别和分析超规格颗粒，从而为材料性能的优化提供了重要的数据基础，为氮化硅粉体生产工艺的优化和产品质量的提升提供新的视角。

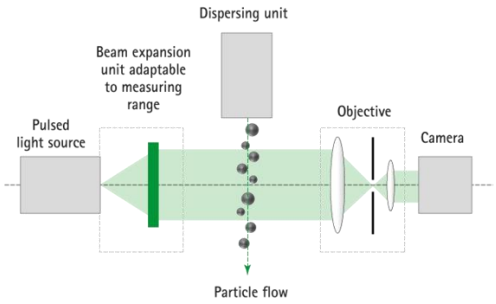


Fig. 1 Optical Setup of dynamic image analysis

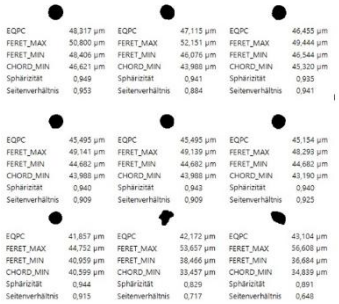


Fig. 2 Particle shape of sample with dynamic analyzer

关键词：氮化硅陶瓷粉体；粒度分析；粒形分析；材料表征

参考文献

[1] Ignazio Cavarretta;Catherine O'Sullivan;Erdin Ibraim;Martin Lings;Simon Hamlin;David Muir Wood; Characterization of artificial spherical particles for DEM validation studies. Particuology, 2012, 10(2):209-220

[2]赵旭锋;贾建军;王欣凯;蔡廷禄;杨阳;时连强;夏小明. 新型动态激光粒度粒形仪分析结果的对比与评价[J]. 海洋地质与第四纪地质,2015,35(6):175-184

报告人简介：

耿建芳 博士

1998 年于华东理工大学获工学博士学位，研究方向为新型陶瓷复合材料。2004 年加入德国新帕泰克公司，担任新帕泰克在中国代表处的首席代表，致力于激光光谱及超声检测在粒度、粒形与浓度等方面的综合应用。对于不同粉体、不同材料的粒度表征解决方案，具有丰富的技术背景和市场应用经验。

联系方式：18662608012
邮箱：Jgeng@sympatec.com.cn

非学生

报告人：唐远旺 北京海菲尔格科技有限公司 非学生 thomas.tang@hiferg.com

微波水分仪用于快速测试聚合物粉体中的极微量水分

唐远旺[1]

[1]北京海菲尔格科技有限公司，北京，100022

*thomas.tang@hiferg.com

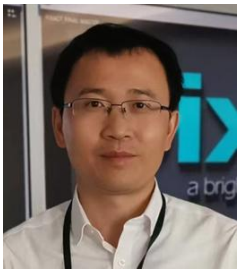
随着新能源行业及电子材料的快速发展，高性能粉体产品的微量水分的测试越来越凸显其重要性。精准、快速、在线、自动化控制成为行业对于水分测试的主要关注点之一。传统水分测试方法测试时间长、操作繁琐、人工取样、效率低，无法实现在工业大生产中快速测试粉体水分。微波水分仪是一种超快速、高灵敏度的水分测定方法，得到的是聚合物粉体的内部水分而非表面水分，测试下限可达20ppm量级的含水量。微波水分仪可以在1秒内完成微量水分测定，可以更好地服务于苛刻条件、极低水分含量的聚合物粉体颗粒的测试。微波水分仪可以安装于工业生产线，用于对聚合物粉体水分进行实时监控。本文以聚四氟乙烯粉体的极微量水分测试为例，阐述了微波水分仪对于20-100ppm量级水分测试的解决方案。数据表明，微波水分仪可以很好地表征PTFE粉体的极微量水分含量同时能给出粉体的堆密度值。

Table 1 Moisture content of different PTFE powders

样品	PTFE-A	PTFE-B	PTFE-C	PTFE-D
1	0.0037%	0.0038%	0.0032%	0.0032%
2	0.0037%	0.0039%	0.0030%	0.0029%
3	0.0036%	0.0036%	0.0031%	0.0030%
4	0.0036%	0.0038%	0.0030%	0.0029%
5	0.0036%	0.0037%	0.0029%	0.003%
平均值	0.00364%	0.00376%	0.00304%	0.00300%
标准偏差	0.00005%	0.00011%	0.00010%	0.00011%

关键词：粉体水分；微波水分仪；在线监控；PTFE；堆密度

墙报展示人简介：



唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器分析行业技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

附：墙报展示人非学生

报告人：陈颖 中国原子能科学研究院 学生 18801064330@163.com

M5包壳的氧化机制及动力学研究

陈颖[1]，孙艳东[1]，郑卫芳[1,*]

[1]中国原子能科学研究院，北京，102413

*Email: 18801064330@163.com

摘要正文：本研究在400-900℃温度范围内，利用热重法探究了M5包壳在不同氮氧比条件下的氧化行为。通过宏量热重分析装置和扫描电镜（SEM），对比分析了氧化过程中包壳的质量变化和氧化层的形貌变化。结果显示，随着氧化温度的提高，包壳内部裂纹扩展而且数量显著增加，导致两相接触面积增大。进而在900℃下，反应曲线由抛物线逐渐过渡为直线。同时，随着氧化时间的延长，氧化速率逐渐减缓。在800℃下、N_2和O_2按1:1的比例混合气体中，产物颗粒破碎程度显著加剧，氧化反应速率显著提高。进一步分析发现，氮的存在明显加速了氧化过程，主要原因是初期氮化锆沉淀的形成以及后期氧化层内部裂纹处大量多孔氧化物的生长。本研究深入探讨了含氮气氛对M5包壳的氧化动力学加速的微观机制，为理解和预测高温下包壳的氧化挥发行为提供了理论依据。

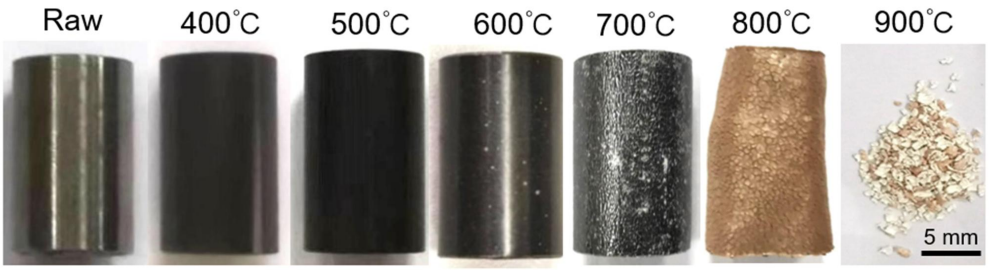


Fig. 1 Surface morphology of zirconium cladding after oxidation for 4h at different temperatures

关键词：M5包壳；O_2- N_2；氧化速率；热重法

报告人：韩召 安徽工业大学 非学生 authan@163.com

氨解法合成氮化硅粉体研究进展

韩 召

安徽工业大学冶金工程学院

authan@163.com

氮化硅是一种先进陶瓷材料，广泛应用于半导体、新能源、电动汽车等领域。高纯度、细粒度、形貌一致是高品质氮化硅粉体的基本要求。氨解法相对于硅粉氮化、燃烧合成等传统方法在产品质量控制方面具有显著优势。本文在深入调研国内外科研机构、生产企业、下游用户基础上，基于国内外专利、公开报告、科研论文等数据，对氨解法合成氮化硅的研究进展、存在的主要问题、未来发展趋势进行综合分析，以期对我国高端氮化硅陶瓷行业的研发、生产、应用提供指导。

报告人：岳芬 中国科学院过程工程研究所 学生 fyue@ipe.ac.cn

One-step synthesis of single-crystal Si_3N_4 nanowires-amorphous SiO_2 beads nanochains by chemical vapor deposition

Fen Yue [1,2], Jiuyi Zhu [1], Yuqi Geng [1,2], Maoqiao Xiang [1,2,*], Qingshan Zhu [1,2,3,*]

[1] State Key Laboratory of Mesoscience and Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

[2] School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

[3] Innovation Academy for Green Manufacture, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

[*] Maoqiao Xiang, E-mail: mqxiang@ipe.ac.cn; Qingshan Zhu, E-mail: qszhu@ipe.ac.cn

One-dimensional (1D) nanochain heterojunctions have attracted wide attention due to their unique optical and electrical properties, while efficient and controllable synthesis of nanochains is still difficult. Herein, Si_3N_4/SiO_2 nanochain heterojunctions (Si3N4 single-crystal nanowires and amorphous SiO_2 beads) were successfully synthesized by a one-step chemical vapor deposition (CVD) process without using any templates and catalysts. A two-stage growth mode was proposed to explain the formation mechanism of the special nanochain. We found that carbon vapor induced the formation of Si_3N_4 nanowires and suppressed the formation of Si_2N_2O. The Si_3N_4/SiO_2 nanochains can only be synthesized within a suitable concentration range of carbon vapor. The as-synthesized fascinating nanochain exhibits an extra strong emission at about 3.02 eV, showing great promise for optoelectronic nanodevices.

Keywords: Silicon nitride, nanochain, chemical vapor deposition, photoluminescence

References

[1] Yue F, Zhu J, Geng Y, Xiang M, Zhu Q. One-step synthesis of single-crystal Si3N4 nanowires-amorphous SiO2 beads nanochains by chemical vapor deposition[J]. Ceramics International, 2024, 50(7): 10635-10640.

报告人/墙报展示人简介：

岳芬，中国科学院过程工程研究所博士研究生在读。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

报告人：丁雯珺 中国科学院过程工程研究所 学生 qszhu@ipe.ac.cn

流态化气相合成近计量比氮化钛粉体

丁雯珺[1,2]，向茂乔[1,2]，朱庆山[1,2,3,*]

[1] 中国科学院过程工程研究所多相复杂系统国家重点实验室，北京，100190

[2] 中国科学院大学化学工程学院，北京，100049

[3] 中国科学院绿色过程制造创新研究院，北京，100190

*Email: qszhu@ipe.ac.cn

氮化钛是具有特殊面心立方结构的过渡金属氮化物，具备优异的物化性能，在机械、电子和催化等领域引起了广泛关注。然而，氮化钛是典型的非化学计量比化合物(TiN_x)，其化学计量比x会影响材料硬度、熔点等性能。理论上，正化学计量比氮化钛具备优异的综合性能。但是，现有合成工艺由于存在传质屏障、氧固溶、副反应多等问题，合成高质量正计量比粉体还存在较大困难。本报告提出了“基于流态化气相合成近计量比氮化钛粉体”的新方法，通过构建TiNCl包覆型前驱体，然后流态化脱Cl合成近计量比氮化钛粉体。首先，探明了温度对$TiCl_4$-NH_3体系合成产物的影响规律，发现在该体系中于475 °C可定向合成TiNCl前驱体。其次，通过非等温热动力学分析法并结合离子色谱明确了TiNCl的脱Cl动力学行为，实现了Cl杂质含量小于100 ppm。最后，在高温(950 °C)脱除TiNCl中的Cl，利用其体积收缩产生的裂纹实现氮化钛粉体的自脱落，成功合成了x≈1.0的近计量比氮化钛粉体。

关键词：氮化钛；化学计量比；流态化；气相合成

报告人/墙报展示人简介：

丁雯珺，中国科学院过程工程研究所 2022 级硕士生。研究方向为钛基特种陶瓷粉体化学气相合成，导师为朱庆山研究员和向茂乔副研究员。曾获国家奖学金、江苏省三好学生、江苏省优秀毕业生等荣誉。大四下学期来到过程所进行毕业论文设计，所完成的论文被评为“江苏省优秀毕业论文”一等奖。目前以第二作者的身份在 CJChE 上发表综述一篇。

报告人：邓亚宁 广东工业大学 学生 2112201278@mail2.gdut.edu.cn

电流模式对氮化硅基复相陶瓷SPS烧结行为及产品性能的影响

邓亚宁，林东涛，左飞，郭伟明，林华泰

广东工业大学机电工程学院，广州 510000

*Email:2112201278@mail2.gdut.edu.cn

氮化硅（Si_3N_4）基陶瓷因具有良好的力学、热学及生物学等性能，而成为一类重要的先进结构陶瓷材料；由于其难烧结特征，通常采用热压、气压和放电等离子烧结（SPS）方法实现其制备。本研究以Si_3N_4-Al_2O_3-Y_2O_3体系为基体，通过引入TiN与金刚石等高电导第二相，系统探索了液相烧结过程中，连续直流与脉冲直流对其致密化过程、α-β相转变过程以及微观结构演化过程的作用效果与潜在机制，并针对部分产品的硬度与摩擦学性能进行了测试与分析。

结果表明，具有高导电特征的第二相，其粒度大小与含量会显著影响SPS液相烧结过程中Si_3N_4基体的液相形成与颗粒重排行为；高电导第二相粒度的减小会抑制α-β扩散型相变程度；连续直流与脉冲直流分别针对于微米级与纳米级高电导第二相有更加显著的作用效果。可以推测，SPS电流路径上的Joule Heating生成与局部高电压/Plasma的形成等现象，具有潜在的尺度效应。上述结论同样可以在Si_3N_4-金刚石复相体系中得到验证；当采用脉冲直流模式时，该复相材料可以获得高达28 GPa的硬度以及10^{-9} $mm^3/(N·m)$的高耐磨性，以及低至0.06的摩擦系数（COF）。

关键词：氮化硅基陶瓷；外场辅助烧结；电流模式；导电相

报告人简介：邓亚宁，广东工业大学机电工程学院在读研究生，广东省“高技术陶瓷先进制造技术创新团队”成员。

报告人：学生

报告人：李泽华 广东工业大学 学生 2398679695@qq.com

低温热挤压制备高硬度高韧性一维织构 Si_3N_4 基陶瓷

唐绍钧[1]，李泽华[1]，郭伟明[1,2]，于俊杰[3]，孙世宽[4]，林华泰[1,2,*]

[1]广东工业大学机电工程学院，广州，510006

[2]广东工业大学高性能刀具国家重点实验室，广州，510006

[3]广东技术师范大学汽车与交通工程学院，广州，510665

[4]佛山大学材料科学与能源工程学院，佛山，528000

*huataylin@comcast.net

摘要：为了获得高硬度和高韧性的氮化硅（Si_3N_4）基陶瓷，采用放电等离子烧结（SPS）结合热挤压技术，在1600°C 和 1800°C 下制备了一维织构 Si_3N_4 基陶瓷，在热挤压温度为 1600°C 时，添加 0.5vol.%ZrB_2 的 Si_3N_4 基陶瓷获得了一维织构（f_I=0.89）。断裂韧性（7.49±0.47 MPa·$m^{1/2}$）与 1800°C 热挤压处理的 Si_3N_4 样品（7.95±0.27 MPa·$m^{1/2}$）非常接近，而硬度（18.55±0.18 GPa）明显高于 1800°C 热挤压处理的 Si_3N_4 样品（16.48±0.20 GPa）。结果表明，通过引入 ZrB_2 并结合低温热挤压工艺，可以制备出具有高硬度和高韧性的一维织构 Si_3N_4 基陶瓷。

关键词：Si_3N_4 基陶瓷；热挤压；一维织构；力学性能

报告人/墙报展示人简介：

李泽华，广东工业大学，在读硕士研究生

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

第 27 分会场：亚稳态新材料的极端条件合成与先进表征

复杂和极端条件下亚稳材料的高能同步辐射研究

任洋 [1],*

[1] 香港城市大学物理学系，香港特别行政区，999077

Email: yangren@cityu.edu.hk

亚稳材料有其独特的结构和性能，在材料科学中具有重要的研究价值。同时在极端条件下和复杂工况环境中，材料的结构也会经历非平衡状态而发生显著变化，这对科学研究和实际应用提出了新的挑战和机遇。本报告将探讨利用原位高能同步辐射X射线技术研究先进材料在极端条件下的结构和动态特性。不同于一般实验室X光，高能同步辐射X射线作为一种强有力的分析工具，具有很多优势，能够在高温、高压、强磁场等复杂环境中实时揭示材料的微观结构变化和相变过程。通过具体案例研究，我们将展示同步辐射X射线在揭示材料内部机制、优化材料性能以及开发新型材料方面的独特优势。

关键词：亚稳材料；复杂工况；高能同步辐射；内部机制

[11] [1] Frontiers in high entropy alloys and high entropy functional materials[J].Rare Metals, 2024, 43(10):4639-4776.

报告人简介：

任洋教授现为香港城市大学讲座教授（Chair Professor）。在 2021 年 8 月加入香港城市大学之前是美国阿贡国家实验室的资深物理学家（Senior Physicist），美国先进光源（APS）的首席光束线站科学家。主要从事固体材料物理研究，包括结构-特性-功能之间在原子和电子层面的关联；相变机理和应用；强关联体系；纳米材料；金属和合金；材料在极端条件或多场下的变化；电池等储能材料和能源转换材料的机理研究。长期开发同步辐射和中子散射技术及其在基础研究和应用科学以及工业材料研发中的应用，在同步辐射和中子散射领域有广泛的国际合作。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

复式碳化物陶瓷的调幅分解组织演化与性能增效机理研究

张伟彬[1],*，张志轩[1]，王伟礼[1]

[1]山东大学材料科学与工程学院，山东济南，250061

*Email: zhangweibin@sdu.edu.cn

碳化物陶瓷具有高硬度、高耐磨、耐高温和耐腐蚀等特点，可在磨损、冲击、腐蚀和高温等恶劣工况条件下服役。调幅分解可诱导碳化物陶瓷由均相亚稳态向纳米片层稳态组织演化，进而强化材料综合性能。由于复合碳化物陶瓷具有宽广的成分设计空间，调幅分解机理、调幅结构演化和性能增效机理仍缺乏系统性的研究。本工作针对难熔金属复合碳化物陶瓷材料体系，通过集成第一性原理计算、相图热力学计算、相场模拟和高通量实验，研究复合碳化物体系调幅分解的相变条件、显微组织与综合性能的影响规律。基于高通量实验生成的数据集，利用可解释性机器学习，建立了预测碳化物调幅分解的机器学习回归模型，搭建起成分—工艺—结构—性能的关系，构建了快速预测和设计复合碳化物陶瓷的科学方法。

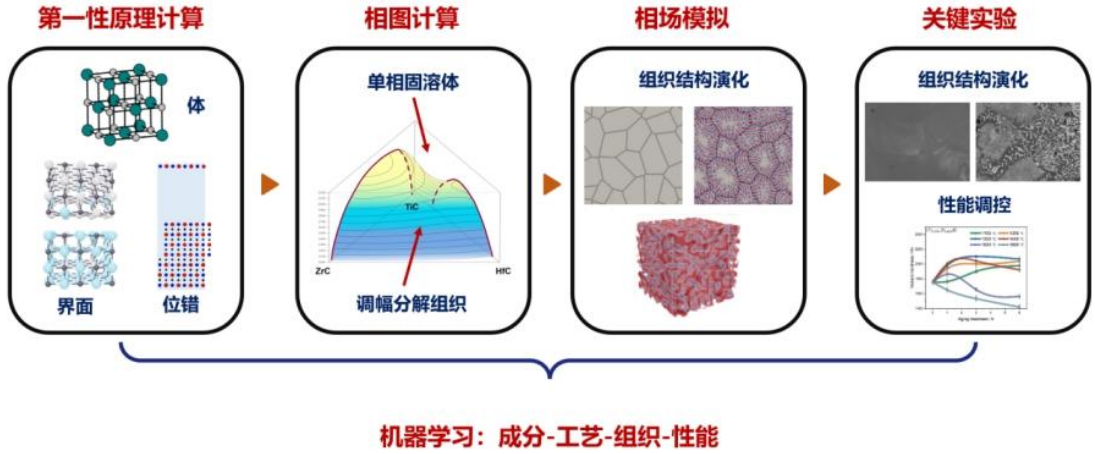


Fig. 1 Data-driven materials design framework for composite carbides

关键词：碳化物陶瓷；多尺度模拟；微结构演化；性能调控

[12] [1] Guan Z , Tian H , Li N ,et al.High-accuracy reliability evaluation for the WC–Co-based cemented carbides assisted by machine learning[J].CERAMICS INTERNATIONAL, 2023.

报告人简介：

张伟彬，山东大学教授、博士生导师，山东大学“齐鲁青年学者”、国家重点研发计划青年科学家项目首席。主要从事硬质耐磨材料理论设计与应用开发、材料集成计算与数据库开发等研究方向。主持国家重点研发计划青年科学家、国家自然科学基金、山东省重点研发计划、江苏省自然科学基金和企业委托横向课题等项目 10 余项，发表论文 90 余篇，授权发明专利 10 余项。兼任“十四五”国家重点研发计划“高端功能与智能材料”专项总体专家组专家，《Metals》编委、《材料工程》《航空材料学报》青年编委。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

3D 打印高熵合金中的原位微结构调控

穆永坤[1]，贾岳飞[1]，贾延东[1]，王刚[1],*

[1]上海大学材料研究所，上海，200444

*Email: g.wang@shu.edu.cn

采用直接能量沉积增材制造技术制备出了具有高致密且力学性能优异的$(FeCoNi)_{86}Al_7Ti_7$沉淀强化高熵合金与$AlCoCrFeNi_{2.1}$共晶高熵合金。针对沉淀强化高熵合金，研究发现合金中原位生成大量亚稳态核壳沉淀，同时在塑性变形过程中表现出独特的多级“台阶状”滑移波特征，而这种“台阶状”滑移波增强了合金的塑性变形能力，起到显著的增韧效果，使其保持25.5%断裂延伸率的同时，极限抗拉强度达到~1070 MPa。针对共晶高熵合金，提出了一种层间暂停策略，可原位调控共晶片层的微观组织结构，以增强合金的强度和延展性。层间暂停策略可显著细化共晶片层结构，与无层间暂停的情况相比，暂停60s样品的片层结构细化程度提高近40%，合金的抗拉强度提高~14%，均匀伸长率提高~47%。本研究中提出的亚稳态核壳沉淀强化与层间暂停策略共同为通过LDED增材制造工艺开发具有原位可控微结构、优异机械性能的高熵合金提供了一种简单而有效的方法，为其工程应用开辟了新的可能性。

关键词：共晶高熵合金；亚稳态核壳；原位调控；增材制造

报告人简介：

上海大学教授 / 博导；上海大学发展规划处处长。德国洪堡学者。2019 年获得国家自然科学基金委“杰出青年科学基金”。2013 年获得国家自然科学基金委“优秀青年科学基金”资助。2020 年获“王宽成育才奖”和河南省自然科学奖二等奖。兼任《中国科学 • 技术科学》（中英文卷）编委、中国物理学会第 5 届非晶态物理专业委员会委员、中国材料研究学会金属间化合物和非晶合金分会第 2 届非晶合金学术委员会委员、中国材料研究学会凝固科学与技术分会第 1 届常务理事。中国载人航天空间科学与应用领域专家组空间材料物理组成员。从事金属材料力学性质的研究以及新金属材料的开发。研究了非晶合金断裂孕育阶段的结构演化，揭示了断裂结构起源协同变形区的形成机理；通过观察非晶合金塑性变形应力-应变行为，从动力学角度阐明了塑性变形机理；通过非晶合金断口形貌的三维成像观察，揭示了非晶合金裂纹尖端塑性开裂机制；成功制备大尺寸非晶合金板材，完成了模拟非晶合金的空间碎片撞击测试。2019 年至今，一直在高熵合金的力学性能极限化方向开展研究。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

基于原子制造的金属玻璃序调控研究

柯海波[1],*

[1]松山湖材料实验室，广东东莞，523808

*Email: slab@sslab.org.cn

原子的序构行为对结构金属材料的强度和延展性起着关键作用，然而如何有效地操纵原子序构来克服长期存在的强度-延性权衡仍然是一个挑战。原子制造作为一种革命性的方法，可以创造出具有颠覆性性能的全新材料，为克服这一挑战带来了前景。在这里，我们采用脉冲激光沉积技术，在典型的$Zr_{50}Cu_{40}Al_{10}$合金成分中制备出不同有序度的纳米结构。与现有的锆基合金相比，这些结构表现出更广泛的范围和优越的机械性能。尤其是，在spinodal玻璃和双相纳米结构中都实现了强度和延展性之间的平衡，展现出高达3.83 GPa的屈服强度和69%的压缩应变。本工作表明，利用原子制造进行序调控在探索具有特殊结构与极限性能的新型材料方面拥有巨大潜力。

关键词：原子序构；脉冲激光；双相纳米结构；极限性能

报告人简介：

柯海波，研究员，博士生导师，松山湖材料实验室非晶材料团队负责人。2012 年博士毕业于中国科学院物理研究所，毕业后在香港城市大学（访问学者）、中国工程物理研究院材料研究所（特聘人才）开展基础研究，于 2019 年全职加入松山湖材料实验室，长期围绕非晶合金新材料研发与应用基础开展研究工作，在非晶合金稳定性机制、新材料研发及其应用基础等方面取得了系列创新性成果。迄今已发表了 Nature Materials, Nature Communications, Science Advances, Acta Materialia 等国际知名 SCI 期刊学术论文 90 多篇，授权国家发明专利 10 多项，主持了国家自然科学基金面上项目和青年项目，粤莞联合基金粤港澳团队项目，广东省基础与应用基础重大项目课题，企业横向合作课题等 10 多项科研项目。担任 Materials Today、Acta Materialia 等国际知名期刊审稿人，多次受邀在国内外学术会议做邀请报告。2019 年获评广东省东莞市特色人才称号，2023 年获巴渝学者讲座教授称号,曾多次作为嘉宾亮相中央电视台。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

多功能的微点阵力学超材料

陆洋 [1],*

[1] 香港大学机械工程系，香港特别行政区，999077

*Email: ylu1@hku.hk

机械超材料通过其微纳结构的设计实现对宏观力学性能的调控，为高性能的结构设计和新颖的多功能设计提供了近乎无限的可能性。在我们过去金属微纳点阵超材料的研究基础上，我们最近的研究更进一步展示了通过对3D打印聚合物微点阵进行部分热解碳化，可以得到一种高强高韧的碳点阵力学超材料，这种刚柔并济的碳点阵材料具有很好的生物兼容性。通过对其表面进行功能性半导体镀膜，经过组装成为一种具有优异机械性能和可靠性的多功能器件，展现了力学超材料可通过人工构建其几何及材料特性来调控整体机械和功能特性的能力。利用部分碳化产生的具有优异强度和延展性的微点阵，同时也具备良好的热阻抗效果，用其制造出的具有三维结构的热电发电机，表现出约30 J/g的比能吸收和约10%的功率转换效率。此外，我们通过精心设计纳米复合前驱体，并结合高精度微纳米3D打印技术，创建了具备复杂三维亚微米特征的高性能透明玻璃微点阵，展现出优异的力学特性和光学性能。总之，多功能的力学超材料正在推动高性能结构设计和先进制造领域新的范式转变，为能量转换、生医工程、柔性电子等其他应用领域提供了新的启发。

关键词：力学超材料；高熵合金；3D打印；多功能器件

报告人简介：

陆洋，香港大学机械工程系终身教授，HKU-100 Scholar（港大百人学者）。他在南京大学获得物理学学士学位，在美国莱斯大学获得机械工程博士学位，并在麻省理工学院的纳米力学实验室进行博士后研究。此前，他在香港城市大学担任助理教授、副教授和教授职位（2012-2021）。陆教授课题组长期致力于微纳米力学及先进制造的研究，对纳米金属的冷焊（cold welding）以及硅与金刚石在纳米尺度下的超大弹性等现象的发现做出重要贡献。他以第一或通讯作者在 Science、Nature Nanotechnology、Nature Materials 等学术刊物发表文章 200 余篇，并担任国际期刊 Materials Today 的副主编以及《国家科学评论》、《中国科学:技术科学》、《Acta Mechanica Sinica》等学术期刊的编委。陆教授曾获得香港大学教育资助委员会(UGC)「杰出青年学者奖 2013/14」，2017 年香港城市大学「校长奖」以及 2019 年度「杰出研究奖(青年学者)」，并入选并完成首届(2019 年)国家自然科学基金(NSFC)「优秀青年科学基金(港澳)」项目，以及入选首届香港研究资助局(RGC)「研资局研究学者计划 2020/21」，并于 2022 年当选为香港青年科学院（YASHK）成员。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

高温热冲击：焦耳热驱动超快合成，亚稳态加速材料升级应用

陈亚楠[1],*

[1]天津大学材料学院，天津，300000

*Email: yananchen@tju.edu.cn

课题组多年来瞄准双碳重大战略目标，以清洁能源重大需求为牵引，重点研究先进能源存储与转换过程中的关键能源化学，材料，器件及系统。报告主要介绍课题组高温热冲击技术的研发历程，亚稳态微纳材料结构调控，及其在新能源和交叉科学方面的应用研究。通过大幅度调控材料合成过程的相变速率，精准调控亚稳态新材料结构，揭示亚稳态新结构与电化学性能的构效关系，提出了亚稳态材料的设计原则。

关键词：先进能源存储；高温热冲击；亚稳态微纳材料；精准调控

报告人简介：

天津大学博士生导师，清华大学"卓越学者"。主要从事新材料制备及其在新能源领域的应用，研究兴趣包括：高温热冲击技术(HTS)、微纳米材料超快速合成（微纳米制造）、亚稳态材料结构调控及宏量制备、能源存储（锂/钠离子电池）、能源转换（绿氢及燃料电池）、人工智能与交叉科学。2016 年，陈亚楠与胡良兵教授首次提出高温热冲击概念，并开创了基于高温热冲击概念的纳米材料超快合成这一新兴研究领域。以第一/通讯作者（含共同）在 Nature Sustainability、Nature Comm. (2)、JACS (2)、Adv. Mater. (5)、Angew. Chem.、NSR、Materials Today (2)、Nano Letters (3)、ACS Nano (2)、AEM (12)、AFM (2)等顶级期刊发表研究论文 100 余篇。授权国家发明专利、美国发明专利 10 余项，专利转化多项（400 万）。主编中文专著《微纳新能源材料超快速制备》、英文专著《High Temperature Shock Technology》。承担国家科技基金***计划、重大研究计划、***联合基金、国家自然科学基金面上项目、中国科协青年人才托举项目、天津市重点项目、产学研项目（容百集团、中船集团、小米集团等）。担任中国科协海智计划特聘专家、中国材料研究学会常务副秘书长、SCI 期刊 Progress in Natural Science-Materials International 常务副主编、Chinese Chemical Letters 副主编，国家自然科学基金、瑞士科学基金、中国科协青年托举项目、科技奖励、工信部、中船集团等评审专家。中国最大的科技传播平台"科研云"发起人。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

大科学装置在多孔材料表征中的应用

赵朴[1],*

[1]苏州大学化学科学国际合作创新中心，苏州大学材料与化学化工学部，苏州，215123

*Email: puzhao@suda.edu.cn

以分子筛为代表的多孔材料是重要的先进功能材料。探索多孔材料的功能机理，有助于理性设计材料，促进相关产业发展。机理研究的难点是，如何准确表征客体分子的微观结构与微观行为。由于传统表征技术分辨率有限，上述关键科学问题长期无法解决，导致了多孔材料功能机理不明晰，使理性设计高效多孔材料十分困难。中子散射与高能同步辐射技术是两类具有极高分辨率的先进表征技术。作为国家“十一五”期间重点建设的十二大科学装置之首，中国散裂中子源于2018年建成；作为国家“十三五” 重大科技基础设施，高能同步辐射光源预计于2025年建成。这些进展为解决上述问题带来了机遇。然而，如何运用中子散射与高能同步辐射技术解决多孔材料机理研究中的关键问题，还存在瓶颈。

针对以上挑战，我们发展/运用了一系列中子散射与高能同步辐射方法，准确表征了多孔材料中客体分子的微观结构与微观行为，在此基础上，揭示了一系列重要的吸附催化机理，为材料设计提供了科学依据：1) 建立了准弹性中子散射−中子粉末衍射联用方法，实现了精准表征多孔材料孔道内的客体分子扩散行为，发现MOFs中的客体分子定向扩散能够引起孔道结构变化进而诱导吸附量突跃，突破了MOFs吸附的传统理论[1]；2) 开发了精确控制样品吸附量的中子粉末衍射原位实验方法，使定量追踪多孔材料中的客体分子吸附行为成为可能，揭示了MOFs中的客体分子网络可以引起刚性孔道结构变化从而诱导吸附拐点变化，深化了MOFs吸附的微观认知[2]；3) 提出了基于定位活性中心的中子粉末衍射研究方法，为准确描述多孔材料上的客体分子反应行为提供了新思路，阐明了分子筛中的Brønsted酸中心能够加速金属中心与烯烃反应，拓展了分子筛催化的调控原理[3]；4) 运用针对高能同步辐射全散射技术的先进数据分析方法，首次解析了MOFs中多原子金属团簇的真实结构，明确了金属与MOFs孔道的成键模式，阐明了缺陷限制底物与金属接触的催化机制，夯实了MOFs催化的理论基础[4]。

关键词：多孔材料、中子散射、同步辐射

[13] [1] P. Zhao et al., *Nature Commun.* 2019, 10: 999; *J. Mater. Chem. A* 2014, 2: 620; *Chem. Mater.* 2014, 26: 1767.

[14] [2] P. Zhao et al., *J. Am. Chem. Soc.* 2021, 143: 3205; *Cell Rep. Phys. Sci.* 2021, 2: 100544.

[15] [3] P. Zhao et al., *Chem Catal.* 2022, 2: 3290; *ACS Catal.* 2021, 11: 3530; *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140: 6661.

[16] [4] P. Zhao et al., *J. Mater. Chem. A* 2024, 12, 19018; *Cell Rep. Phys. Sci.* 2023, 4: 101681.

报告人简介：

赵朴，教授、博士生导师、国家自然科学基金优秀青年科学基金项目（海外）获得者。本科毕业于复旦大学，博士毕业于剑桥大学，在牛津大学从事博士后研究并晋升至 Glasstone Research Fellow。回国后，历任苏州大学副教授、教授。研究方向为多孔吸附催化材料、同步辐射和中子散射表征方法学。主持国家自然科学基金、省自然科学基金、英国皇家学会等科研项目。在 J. Am. Chem. Soc., Nature Commun.等期刊发表学术论文 20 余篇。入选 J. Mater. Chem. A、Chem Catal.新锐科学家。作为首位华人获英国晶体学会优秀博士论文奖。任中国晶体学会固体局域结构与全散射技术专业委员会委员。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

Temperature-dependent nanoscale oxidation behavior of Al2Au alloy

Weimin Wang[1],*, Zhicheng Yan,

[1]Key Laboratory for Liquid-Solid Structural Evolution and Processing of Materials, Ministry of Education, Shandong University, Jinan 250061, China, 0086 531 88392749,

*Email: weiminw@sdu.edu.cn (Weimin Wang)],

Temperature-dependence was found in oxidation behavior of Al2Au, exhibiting two distinct oxidation forms. Uniform oxidation occurred below the critical temperature Ts (700 < Ts < 800 °C), resulting in ultra-thin oxide layers (<10 nm) with corrosion resistance enhanced by Au solute atoms. Phase-separate oxidation, occurring at the temperature above Ts, resulted in a much thicker oxide-affected region (250~300 nm) composed of Al2O3 and AlAu phases. Above 625 °C, bulk recrystallization led to Al diffusion through grain boundaries, disrupting the continuity of the oxide layer on surface. These findings offer insights for tailoring thin oxide layers to enhance corrosion resistance.

Keywords: Al2Au; oxidation behavior; Au-soluted oxide layer; phase-separate

[17] [1] K. Sohlberg, T.J. Pennycook, W. Zhou, S.J. Pennycook, Insights into the physical chemistry of materials from advances in HAADF-STEM, Phys. Chem. Chem. Phys. 2015, 17(6): 3982-4006.

[18] [2] Z.C. Yan, L.Y. Guo, Q. Chen, H. Zhang, X.Y. Chen, K.B. Kim, L.C. Zhang, W.M. Wang, Induction and pore-formed stages in Al_2Au' s dealloying process in HCl solutions, Corros. Sci. 2021, 181: 109220.

[19] [3] Z.C. Yan, Q. Chen, H. Zhang, K.B. Kim, W.M. Wang, The effects of Al2Au phase and oxide film on dealloying performances of $Al_{50}Au_{50}$ ribbon, Intermetallics. 2022, 147: 107611.

报告人简介：

王伟民，山东大学材料科学与工程学院、材料液固结构演化与加工重点实验室教授、博士生导师。1988-1995，于东南大学机械系学习，获学士与硕士学位；1995-1998，于山东工业大学材料学院学习，获博士学位；2000-2002，于南京大学物理系作博士后研究。2000 年，曾赴乌克兰国家科学院金属物理所作过短期访问研究。 2006.2-2007.7, 以洪堡学者身份于德国莱布尼兹固体物理与材料研究所（IFW-Dresden）合作访问。研究兴趣包括玻璃合金、材料计算科学和金属电化学。在国际期刊上发表过 200 余篇学术论文，引用 4500 余次。承担学术职务包括：洪堡基金会会员,国家自然科学基金通讯评议专家，教育部科技项目评审专家，山东省科技项目评审专家,山东省高层次专家库成员，Materials 期刊客座编辑， Journal of Non-Crystalline Solids, Journal of Alloys and Compounds, Progress in Natural Science, Journal of Materials Science and Technology, International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials, Chinese Physics Letter, Transaction of Non-Ferrous Society of China, 稀有金属材料与工程，上海交通大学学报等国际国内杂志评审专家。第 69 届世界铸造会议学术工作委员会成员。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

准静态变形下元素配分介导的晶体-非晶及非晶-非晶 TRIP 效应

吴戈[1],*

[1]西安交通大学，金属材料强度国家重点实验室，微纳尺度材料行为研究中心 & Hysitron 中国应用研究中心，西安，710049

*Email: gewuxjtu@xjtu.edu.cn

相变诱导塑性（TRIP）现象发生在塑性变形过程中某一相向另一相的转变，通常为非扩散过程，相的成分通常不会变化。不同于以往无成分变化的TRIP效应，我们通过混合焓指导成分设计，在晶体-非晶纳米双相多主元合金[1]和多级纳米化学异质非晶合金[2]中调控两相组成元素间的混合焓，于室温准静态塑性变形过程中分别实现了元素配分介导的晶体-非晶转变（CA-TRIP）和非晶-非晶转变（AA-TRIP），并提供应变硬化。先前报道的多主元合金晶体-非晶相变通常发生在高应变速率变形、低温塑性变形或裂纹尖端的纳米尺寸区域中。本研究与其有较大的区别。在常规准静态加载条件下（10^{-4}~10^{-3} s^{-1}应变速率，而不是非平衡加载条件下），由于纳米非晶相的尺寸效应，其剪切转变事件被全域激活。两相内各自塑性载体的协同演化使得相界面区域原子发生大量重排，使两相原子混合。在较大负混合焓的作用下促进了晶体-非晶[1]及非晶-非晶[2]相变（同时具备应变硬化）。这种基于CA-TRIP及AA-TRIP效应的焓导合金设计展示了一种开发超高强度、大塑性晶体-非晶及非晶-非晶复合材料的新思路。

关键词：非晶；多主元合金；相变；TRIP效应；混合焓

[20] [1] Wu, G.*, Liu, C., Shan, Z.-W.*, et al. Nat. Commun. 2024, 15: 1223.
[21] [2] Wu, G.*, Liu, C.*, Shan, Z.-W., et al. Nat. Commun. 2023, 14: 3670.

报告人简介：

吴戈，西安交通大学教授，博导，国家级青年人才，在金属材料强韧化的研究中，提出一种创新材料设计理念——“晶体-非晶纳米双相结构”。这种理念使用纳米尺寸非晶相取代传统晶态合金中的晶界，可有效克服晶界软化效应。代表性成果包括：1）开发出结构特征尺寸小于 10 纳米的晶体-非晶纳米双相结构镁基合金，提高材料的强度至接近理论极限；2）通过晶态固溶体替换金属间化合物晶体相，激活晶体相的应变硬化与纳米级非晶相的均匀塑性流变，解决脆性问题，设计并制备出了兼具超高强度和高塑性的高熵合金及铝合金；3）物理气相沉积纳米双相非晶合金以及晶体-非晶纳米双相合金的实用化可行研究：大幅提升基体合金和 3D 打印结构的力学性能或使役性能。相关研究为新型超强、高韧合金的研发及其在高载耐磨涂层、微纳芯片等方面的应用提供了纳米结构基础、理论和实验依据。相关成果以第一作者/通讯作者在 Nature（封面文章）、Nature Communications（6 篇）、Science Advances、Advanced Materials、Materials Today 等期刊发表，获“非晶杰出青年科学家奖”（当年全国 5 人）等。担任陕西省电子显微镜学会常务理事。期刊 Journal of Materials Science & Technology 青年编委。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

晶界偏聚与纳米团簇实现高强高塑性合金

刘畅[1],*

[1]西安交通大学，陕西省西安市咸宁西路 28 号，710049

*Email: chang.liu@xjtu.edu.cn

Grain boundary hardening and precipitation hardening are two important mechanisms for enhancing the strength of metals. Both mechanisms can be promoted, by adding into the host metal, a suitable alloying element that segregates to grain boundaries and forms coherent nanoprecipitates. Here, we show that these two effects can be amplified simultaneously in nanocrystalline compositionally complex alloys (CCAs), leading to near-theoretical strength and large deformability. We developed a model nanograined $(TiZrNbHf)_{98}Ni_2$ alloy via thermodynamic design. The Ni solutes, which has a large negative mixing enthalpy and different electronegativity to Ti, Zr, Nb and Hf, not only produce Ni-enriched local chemical inhomogeneities in the nanograins, but also segregate to grain boundaries. The resultant alloy achieves a 2.5 GPa yield strength, together with work hardening capability and large homogeneous deformability to 65% compressive strain. During plastic deformation, the local chemical inhomogeneities impede dislocation propagation to improve strength, and encourage dislocation multiplication and accumulation to promote strain hardening. Meanwhile, as predicted by our density function theory simulations, Ni shows a tendency to segregate to grain boundaries and enhance cohesion, suppressing the grain growth and grain boundary cracking found while deforming the reference TiZrNbHf alloy. Our alloy design thus opens a new avenue, via solute decoration at grain boundaries combined with local chemical inhomogeneities inside the grains, towards ultrahigh strength and large plasticity in nanostructured alloys.

关键词：高熵合金；强度；塑性变形；晶界工程；纳米团簇

[22] [1] C. Liu et al. Near-theoretical strength and deformation stabilization achieved via grain boundary segregation and nano-clustering of solutes, Nat. Commun. *In press*.

报告人简介：

刘畅，西安交通大学教授、博士生导师，国家级青年人才。于 2017 年在香港城市大学获博士学位，先后在香港城市大学吕坚院士课题组、马克斯普朗克学会钢铁研究所 Dierk Raabe 院士课题组从事博士后研究，现就职于西安交通大学材料学院金属材料强度国家重点实验室。刘畅教授长期致力于开发超强高塑性合金，并研究其力学行为、强塑化机制及使役性能，以第一作者/通讯作者在国际顶级期刊发表多篇论文，包括 Nature Communications（4 篇），Advanced Materials, Materials Today， Progress in Materials Science, Advanced Science 等。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

Emergent negative thermal expansion in amorphous Fe-Y-Zr-B alloys

Kun Lin[1,*], Ming Gao[1], Hankun Xu[1], Xianran Xing[1]

Institute of Solid State Chemistry, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

*kunlin@ustb.edu.cn

Negative thermal expansion (NTE) is an unusual yet highly useful phenomenon that has been extensively studied in numerous crystals, including ceramics, alloys, and metal-organic frameworks. This letter reports an unprecedented NTE in an amorphous $Fe_{87.5}Y_3Zr_{1.5}B_8$ alloy, which lacks a periodic atomic arrangement. Such NTE is significant for metallic materials and extends over a wide temperature range (α_l = - 6.9 × 10^{-6} K^{-1}, 200 - 403 K). We demonstrate that this NTE is intrinsic to the amorphous nature of the alloy and is correlated with Fe moment. Extended X-ray absorption fine structure confirms a coordination number of approximately 12 around Fe and reveals a strong NTE for nearest neighboring Fe-Fe pairs. Further analysis using X-ray paired distribution function indicates that the amorphous $Fe_{87.5}Y_3Zr_{1.5}B_8$ alloy, serving as a transition state, exhibits a tendency towards local ordered atomic arrangement. A complex interplay among local structure, magnetic interaction, and thermal relaxation results in volume contraction upon heating below T_C. This study introduces amorphous alloys as a new family of materials with NTE functionality, offering interesting prospects for both scientific research and practical applications.

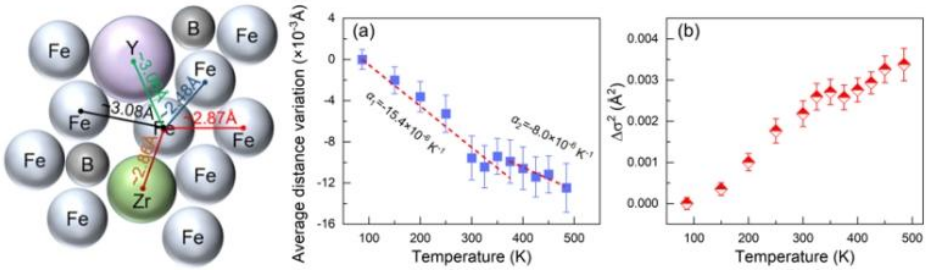


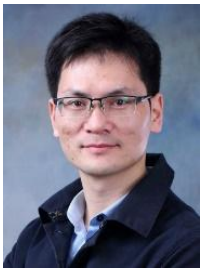
Fig. 1 Local structure and negative thermal expansion in amorphous Fe-Y-Zr-B alloys.

Keywords: Negative thermal expansion, amorphous alloy, local structure

[23] [1] Lunkenheimer, P.; Loidl, A.; Riechers, B.; Zaccone, A.; Samwer, K., Thermal expansion and the glass transition. Nature Physics 2023, 19 (5): 694-699.

[24] [2] Ma, N.; Ohtani, R.; Le, H. M.; Sorensen, S. S.; Ishikawa, R.; Kawata, S.; Bureekaew, S.; Kosasang, S.; Kawazoe, Y.; Ohara, K.; Smedskjaer, M. M.; Horike, S., Exploration of glassy state in Prussian blue analogues. Nat Commun 2022, 13 (1): 4023.

报告人简介：



林鲲，北京科技大学教授、固体化学研究所副所长，国家重大人才工程（青年项目）获得者。研究领域为固体化学、功能材料、构效关系，包括负（零、低）热膨胀固体的合成与机理、晶态/非晶固体的结构化学、新颖磁/电功能材料等。研究手段包括基于国内外同步辐射、中子衍射等先进大科学装置的原位衍射、PDF 以及 TEM 等。研究成果在 Chem. Soc. Rev.、Nat. Commun.、JACS、Adv. Mater.、Acta. Mater.等学术期刊发表研究论文 60 余篇。主持国家自然科学基金项目 3 项、“博士后创新人才支持计划”项目 1 项、中央基本科研业务费 5 项；

作为骨干成员参与国家自然科学基金重大项目、国家重点研发计划项目各 1 项。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

局域结构和动力学的固体核磁共振研究

唐明学[1,2]*，娄晨杰[2]，张文达[1]

[1]北京科技大学， 北京海淀区学院路 30 号，100083

[2]北京高压科学研究中心，北京海淀区西北旺东路 10 号院，100193

*Email: mingxue.tang@hpstar.ac.cn

在材料的设计和制备中，经常针对性地引入缺陷、亚稳态、玻璃相等，使得材料能达到某些目标性能。然而这类结构的解析至关重要，但其精准的表征具有很强的挑战性。固体核磁共振（NMR）采用原子核的信号来反映核外电子结构和分布，进而能灵敏地揭示原子、分子级别上的微观结构和动力学而被广泛应用于有序或无序材料的局域化学环境的表征。通过镓Ga的引入而产生的玻璃相能有效填充晶界，降低锂离子的传输能垒而提高整体电导率[1]。高分辨固体^{23}Na和^{31}P核磁共振谱定量解析了玻璃相与整体电导率的关系。此外，我们分析核磁共振信号宽度和弛豫时间随温度的变化来对玻璃相和晶体相的活化能研究分析，首次实验分离出钠离子在玻璃相内的迁移行为。借助DFT理论计算，高分辨固体核磁共振谱可靠地归属了钠离子导体的六种化学环境，通过二维交叉核磁共振和离子示踪，揭示了钠离子的传输路径是借助4位点钠离子作为桥梁作用，在5位点和6位点之间，形成低能垒的3维传输路径[2]。

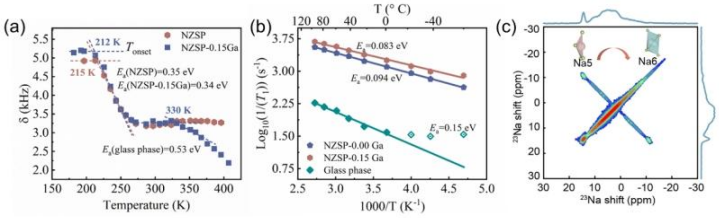


Fig. 1 (a) Spectral linewidth and (b) spin-lattice relaxation as a function of temperature, which will give the ability of Na+ mobility. (c) 2D 23Na exchange NMR spectrum for determining the transport behavior of Na5 and Na6.

关键词：固体核磁共振；局域结构；分子动力学；活化能；构效关系

[25] [1] C. Lou, W. Zhang, and M. Tang The Glass Phase in the Grain Boundary of $Na_3Zr_2Si_2PO_{12}$, Created by Gallium Modulation. Chem. Sci. 2024, 10.1039.D3SC06578B.

[26] [2] C. Lou, L. Liu, and M. Tang Correlating Local Structure and Migration Dynamics in Na/Li Dual Ion Conductor $Na_5YSi_4O1_2$. Proc. Natl. Acad. Sci. 2024, 121(33): e2401109121.

报告人简介：

唐明学，北京科技大学，教授，北京高压科学研究中心访问研究员。本科和硕士分别毕业于浙江大学和中国人民大学，博士毕业于德国帕德博恩大学化学系。先后在欧洲高场核磁共振中心、阿斯利康研发总部、法国科学院高温核磁共振实验室、美国国家强磁场实验室进行博士后研究。主要研究锂离子、钠离子电池正负极材料、掺杂稀土金属固态电解质的合成设计与优化，全固态电池界面优化及组装设计；发展高级原位表征手段及其在光电、能源、医药等材料方面的检测应用；主持和参与国家高层次人才项目，基金委重大项目及面上项目、科技部重点研发计划项目等。部分科研工作已在 PNAS，Nat.

Commun., JACS, Angew. Chem.，等顶级期刊上发表 90 余篇，撰写英文专著四章，中文专著一章。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

基于机器学习设计的高性能轻质合金体系亚稳相设计

刘思达[1],*，张志轩[1]，王伟礼[1]

[1]西安交通大学航天航空学院，陕西西安，250061

*Email: sidaliu@xjtu.edu.cn

传统的材料设计主要依赖于实验和传统的计算方法，这种方法耗费较大的人力财力，且效率较低。近年来理论计算与机器学习辅助亚稳材料设计在各个领域得到了广泛的应用并表现优异。为了提高预测的准确性，我们采用贝叶斯优化技术对代理模型的超参数进行优化。基于关键实验数据[Acta Mater., 2019, 165: 615-625]、理论计算[Acta Mater., 2020, 196: 313-324]与反复迭代，通过模型的潜空间分布，分析不同组分亚稳材料的性能分布规律。这一研究不仅实现了高性能亚稳相的快速设计，而且充分展示了机器学习在亚稳材料科学领域的巨大应用潜力。鉴于此，本方向拟构建基于主动学习框架的机器学习模型，优化材料的“功能基元-序构-性能”设计思路，通过磁控溅射、液固反应、3D打印等手段，最终制备出在强韧化[Chem. Rev., 2024, 124(3), 1247-1287]、析氢催化[Sci. Adv., 2022, 8(44): eadd6421]、医用涂层等方面具有优异性能的新一代亚稳材料。

关键词：机器学习；贝叶斯优化技术；功能基元

报告人简介：

刘思达，西安交通大学航天航空学院教授，博导，国家级青年人才。西安交通大学“复杂服役环境重大装备结构强度与寿命全国重点实验室”成员，“先进材料和结构多尺度力学与智能设计”团队成员。长期致力于基于数据驱动的轻质合金材料设计与性能开发。在理论计算的指导下，自主开发了一种可批量制备的纳米双相 Al-Mn 高效析氢催化剂，性能与成本均优于商用铂碳催化剂。自主设计并完善的 Al-Ti-B-C(TCB)晶种细化剂系列产品出口至德、意、韩等十几个国家，并在中铝、华为、美国辉门等企业获得应用。主持国家青年人才、国自然等多项课题。以一作/通讯作者身份在 Chemical Reviews、Science Advances、Acta Materialia、Compos. Part. B Eng.、Advanced Science、JMST 等发表论文，共发表 SCI 论文 40 余篇，授权国家发明专利 4 件。担任 MRL、JMST 等中科院一区期刊的青年编委。研究经历得到央视国际频道、德意志学术交流中心(DAAD)、今日头条等媒体或机构的报道。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

无机材料超快高温烧结及高通量筛选

王成威[1],*

[1] 中国科学技术大学化学与材料科学学院，安徽合肥，230000

*Email: vcwang@ustc.edu.cn

全固态锂金属电池因其高安全性和高能量密度，被认为是未来最具潜力的储能器件之一。然而，在固态电池中，高性能固态电解质材料的开发和制备，以及电极材料和固态电解质之间的界面等问题是目前制约其走向实用的关键。本报告以超快速高温合成技术为基础，结合理论计算和高级表征技术，研究高性能电解质材料和全固态电池的开发。陶瓷基固态电解质材料筛选率受到传统陶瓷合成和烧结技术处理时间长的限制，由于挥发性元素的损失，容易导致成分控制不佳。这些问题也给固态电池的制造带来了巨大的挑战。为此，我们开发了一种用于通过辐射加热制造陶瓷材料的超快高温烧结 (UHS) 工艺，该工艺可以在几秒钟内将氧化物前体直接烧结成致密的陶瓷。与传统烧结方法相比，UHS 工艺快了 100-1000 倍以上（例如，将烧结时间从几小时减少到约 10 秒）。因此，我们能够对含有挥发性成分（例如固态电解质中的锂）的陶瓷进行有效的成分控制，并防止不受控制的晶粒生长，从而实现出色的材料性能。此外，UHS 工艺还可用于制造具有高导电性的 SSE 膜，并限制材料界面处相互扩散，这对于薄膜电池等设备至关重要。该技术还可与3D 打印兼容，可生产其他快速烧结方法无法实现的新型陶瓷结构和器件。该技术有可能加快陶瓷材料的研发，对固态电池的快速材料筛选和制造产生影响。

关键词：全固态锂金属电池；辐射加热；超快速高温合成；陶瓷材料

[27] [1] C. Liu et al. Near-theoretical strength and deformation stabilization achieved via grain boundary segregation and nano-clustering of solutes, Nat. Commun. *In press*.

报告人简介：

王成威，国家海外高层次青年人才，中国科学技术大学特任教授，博士生导师。主要从事全固态电池关键材料和器件的研发，在高储能密度全固态锂金属电池关键材料的设计与制备、界面演化物理机制等方面取得了创新成果。发明了超快高温烧结技术(UHS)，将传统陶瓷烧结时间由数十小时缩短至 10 秒，并作为联合创始人成立 HighT-Tech LLC 公司将该技术产业化转化，相关成果获得美国“2021 R&D 100 Award”。已在 Science, Chemical Reviews, Nature Communications, Advanced Materials, JACS 等国际顶级期刊发表多篇 SCI 论文。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

上海光源 BL13SSW 线站实验方法及开放进展

曾建荣 [1,*]

[1] 中国科学院上海高等研究院上海光源中心，上海市浦东新区张衡路 239 号，200120

*Email: zengjr@sari.ac.cn

报告介绍上海光源稀有元素分析光束线站（BL13SSW）基本设施及相关实验方法。BL13SSW光子能量可覆盖5~60 keV，配备了多类型探测器，可开展多种衍射和谱学相关实验。实验站空间较大，便于开展多类型在线实验。报告还将介绍近一段时间的用户开放进展情况。

关键词：上海光源，稀有元素分析线站，衍射，谱学。

报告人简介：

曾建荣，中国科学院上海高等研究院上海光源中心正高级工程师。本科和博士分别毕业于中国科学技术大学和中国科学院大学。长期从事同步辐射 X 射线实验方法学及其应用方面的研究。先后主持多项国家自然科学基金项目和企业横向课题等。骨干参与“十二五”重大科技基础设施建设、科技部重点研发计划、国家自然科学基金等多项国家级项目。发表研究论文 70 多篇，担任中国核学会辐射研究与应用分会理事、中国晶体学会固体局域结构与全散射技术专业委员会委员，是 Angewandte Chemie International Edition、Journal of Physical Chemistry Letters、RSC Advances 等多个期刊的审稿人。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

高熵合金中的有序相对性能影响作用的研究

赫全锋 [1,*]

[1] 上海交通大学材料科学与工程学院，材料改性与数值模拟研究所，上海，200240

*Email: hequanfeng@sjtu.edu.cn

多主元复杂合金也称为高熵合金，由于其独特的结构性能特征而获得了广泛的关注。由于其成分结构的复杂性，如何理解高熵合金等复杂体系的结构特征，建立性能与结构特征的本征关系一直是高熵合金研究领域内的重点关注的难点问题。当多主元合金从熔体冷却凝固时，由于不同合金元素之间几何尺寸和化学亲和性的差异，合金体系内部普遍存在原子尺度的化学短程有序与强晶格畸变等亚稳原子结构特征，这种独特的原子结构对合金的力学及功能特性具有显著的影响。我们从构型熵、晶格畸变、化学短程有序等结构特征切入，在热力学稳定性、原子结构调控、超弹性Elinvar合金材料开发等方面开展了深入的研究。通过调控其内部的有序原子结构，开发具有不同功能性能的合金体系，如超弹性Elinvar合金，建立了原子结构调控与宏观性能的关联。我们进一步通过有序化调控，发现了高熵金属间化合物优异的变形能力与变形模式，研究成果对于改善金属间化合物的脆性问题提供了新的思路。

关键词：高熵合金；有序化调控；高熵金属间化合物

报告人简介：

赫全锋，上海交通大学材料科学与工程学院副教授，本科毕业于中国科学技术大学近代力学系，2019 年获得香港城市大学哲学博士学位，此后在香港城市大学进行博士后研究工作。于 2023 年加入上海交通大学材料科学与工程学院。研究方向聚焦于先进金属材料合金设计与表征、材料力学行为与变形机制、金属材料的高通量设计与增材制造。近年来在多组元合金材料的结构设计、微纳尺度材料力学行为、多组元合金材料的物性研究等方面取得了一系列研究成果，以第一作者/通讯作者在 Nature、PNAS、Acta Materialia、International Journal of Plasticity 等期刊发表论文十余篇，合作发表论文五十余篇，学术引用 2300 余次，主持国家自然科学基金、上海市领军人才等项目。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

PDF 局域结构表征与化学短程有序研究

杨龙 [1,*]

[1] 同济大学材料科学与工程学院无机材料系，上海市曹安公路 4800 号，201804

*Email：long_yang@tongji.edu.cn

本报告首先介绍基于同步辐射 X 射线、中子和电子等高能衍射技术的原子对分布函数（pair distribution function, PDF）全散射实验方法，该方法适用于晶态、非晶态和无定形态等多种材料体系。PDF 可用于表征非晶、高熵合金等亚稳态材料的局域原子结构，我们将以高熵材料体系为例，介绍如何利用 PDF 对其亚纳米尺度局域原子结构进行表征与建模，揭示了不同于长程平均结构的短程有序原子排列，有望建立这类新材料的微观结构与宏观性能之间的关联机制。

关键词：原子对分布函数；高熵材料；亚纳米尺度；短程有序原子

报告人简介：

杨龙，同济大学特聘研究员、博士生导师。本科毕业于复旦大学，硕士和博士毕业于美国哥伦比亚大学，随后在加州大学洛杉矶分校从事博士后研究工作。2022 年加入同济大学材料科学与工程学院，主要从事基于同步辐射 X 射线、中子、电子等高能衍射实验，发展材料的局域原子结构表征方法学，以及结合机器学习、数据挖掘等领域的新型算法。相关合作研究成果发表于 Nature, Nature Communications, Advanced Materials 等国际学术期刊 20 余篇，参与编写 Elsevier 出版英文专著 1 部。现任中国晶体学会固体局域结构与全散射技术专业委员会委员，以及上海同步辐射光源用户课题的国际评审专家。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

Advances in the Synthesis and Characterization of In-Situ Formed Metastable Materials for High-Performance Battery Electrodes

Ruohan Yu[1*], Liang Zhou [1, 2*], Liqiang Mai [1, 2*]

[1]Wuhan University of Technology, The Sanya Science and Education Innovation Park

Sanya 572000, People's Republic of China.

[2] State Key Laboratory of Advanced Technology for Materials Synthesis and Processing, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, P. R. China.

* E-mail: yuruohan@whut.edu.cn, liangzhou@whut.edu.cn, mlq518@whut.edu.cn

This presentation explores the crucial role of advanced transmission electron microscopy (TEM) in understanding the dynamic behavior of in-situ formed metastable materials for high-performance battery electrodes. We work on how techniques like in-situ TEM, and aberration-corrected TEM provide unprecedented insights into the atomic-scale structural changes, chemical composition, strain mechanisms, and reaction pathways governing the formation and evolution of these materials during electrochemical cycling. By combining these advanced TEM techniques with complementary characterization methods, we can gain a comprehensive understanding of the structure-property relationships in in-situ formed metastable materials, paving the way for the rational design of next-generation battery electrodes. The presentation will conclude by highlighting future opportunities and challenges in utilizing advanced TEM to further advance the field of metastable materials for energy storage applications.

Keywords: Metastable materials, Battery electrodes, In-situ TEM, Aberration-corrected TEM, Structure-property relationships.

[28] [1] Yu R, Pan Y, Liu Y, et al. Constructing Sub 10 nm Scale Interfused TiO_2/SiO_x Bicontinuous Hybrid with Mutual-Stabilizing Effect for Lithium Storage[J]. ACS nano, 2023, 17(3): 2568-2579.

[29] [2] Yu R, Pan Y, Jiang Y, et al. Regulating Lithium Transfer Pathway to Avoid Capacity Fading of Nano Si Through Sub-Nano Scale Interfused SiO_x/C Coating[J]. Advanced Materials, 2023, 35(49): 2306504.

报告人简介：

余若瀚，武汉理工大学三亚科教创新园助理研究员，工学博士，本科/博士毕业于武汉理工大学，师从赵东元院士，后于香港科技大学展开博士后研究，合作导师: Mitch Guijun Li, 2024 年全职加入武汉理工大学三亚科教创新园。主要从事电子显微学与亚稳态功能纳米材料电化学储能机制研究。参与发表 SCI 论文 115 篇，论文引用 4000 余次，h 因子 38，i10 因子 70。以第一/通讯作者(含共同)发表 SCI 论文 30 篇，包括 Nature Catalysis、Nat. Commun（2）、Adv. Mater.（3）、J. Am. Chem. Soc.、Cell. Rep. Phys. Sci.、Angew. Chem. Int. Ed.（2）、Energ. Environ. Sci.（2）、ACS Nano（3）、Adv. Funct. Mater（2）、InfoMat、Nano Energy（2）等。申请专利 12 篇，其中中国发明专利 10 篇，授权 2 篇，国际专利 1 篇，美国专利 1 篇。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

上海硬 X 射线自由电子激光装置先进谱学表征方法

张凯宇 [1,*]

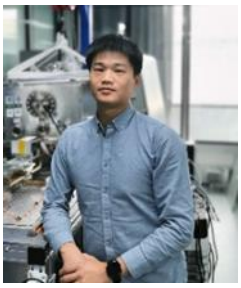
[1] 上海科技大学，上海市浦东新区，201210

*Email：zhangky@sari.ac.cn

上海高重频自由电子激光装置（SHINE）毗邻上海同步辐射光源，是中国第一台硬线自由电子激光（XFEL）。SHINE 采用连续波注入器和超导射频直线加速器，获得 8GeV 电子能量和 1MHz 重复频率，通过 3 条超长光束线将超短、超强的 X 射线脉冲传送至 10 个终端实验站，在物理、化学、生物、生命科学等领域开展衍射、成像、谱学等泵浦探测科学研究。本报告将首先介绍 SHINE 装置的一些基本情况，其次结合 SHINE 超快谱学线站建设介绍 X 射线谱学技术的发展与应用，最后介绍我们近年来利用实验室光源发展的一些先进谱学表征手段。

关键词：SHINE；超导射频直线加速器；先进谱学表征

报告人简介：



张凯宇，上海科技大学副研究员，上海高重频自由电子激光装置（SHINE）硬 X 射线高分辨共振散射谱学线站（HSS）负责人。SHINE 工作期间，设计了 XFEL 下多谱学方法学兼容的超快硬 X 射线共振非弹性散射光谱仪（tr-RIXS）；搭建了国内首台中能 X 射线发射谱仪与硬 X 射线吸收谱仪；研制了多种类型的弯曲晶体分析器核心光学元件。研究方向为发展基于实验室光源和先进光源的 X 射线吸收谱、发射谱、共振非弹谱等先进谱学技术，用于凝聚态物理和化学能源材料中物质电子结构等表征。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

HEPS 工程材料束线与高能同步辐射的原位表征

樊龙龙[1,*]，程虎[1]，王佳怡[1]，杨一鸣[1]

[1]中国科学院高能物理研究所，北京 100049

*Email: longlongfan@zky.edu.cn

高能同步辐射全散射技术是一种非常强大的表征手段，它在材料、固体化学和能源研究领域发挥着重要作用。该技术通过利用同步辐射源的高亮度、高强度、高能量的特点，能够对材料的结构、组分分布和反应动力学等关键参数进行多模态的表征，从而深入探究材料的构效关系。对于电池材料，同步辐射全散射技术可以揭示电极材料的结构演化，有助于优化电池的性能和寿命。该技术还可以用于研究氢储存材料和超级电容器等能源存储材料的结构与储能机制，为新型高效能源存储材料的开发提供重要指导。高能同步辐射全散射技术在催化剂研究领域也具有广泛应用。催化剂是许多化学反应和能源转化过程的关键组件，因此对催化剂的理解和优化至关重要。利用同步辐射全散射技术，可以实时监测催化剂在工作条件下的结构变化，深入了解催化剂的局域结构信息和反应中间体等信息。这有助于优化催化剂的设计，提高催化反应的效率和选择性。通过对材料结构和反应动力学等关键参数的深入探究，该技术为新材料的设计和能源转化过程的优化提供了新的视角和方法。

目前，我国正在发展的第四代光源HEPS具有世界领先的技术指标，将极大提升对能源等前沿科学研究的支撑能力，如提供能量上限可达300 keV 的高性能同步辐射X射线；为衍射实验提供微米量级的聚焦光斑；达到ps 量级的时间分辨能力，研究物质结构变化的动力学过程，为实现物质调控奠定基础；为开展动态、原位和极端条件下的科学研究提供了重要的平台。这些支撑能力将会对材料、固体化学和能源材料等多学科交叉的科学研究的发展起着重要的推动作用。

关键词：全散射技术；同步辐射

报告人简介：

樊龙龙，中国科学院高能物理研究所，助理研究员，研究领域包括同步辐射 PDF 方法应用，单晶衍射，织构分析等。2016 年博士毕业于北京科技大学，博士期间在美国阿贡国家实验室进行了访学并采用同步辐射原位分析技术研究了铁电压电体系晶体结构特征，揭示了优异压电性质的结构因素，首次报道了铁电单斜相的本征压电行为。2018 年后先后在美国阿贡国家实验室和北京高能所进行博士后研究工作，负责对分布函数（PDF）实验方法和原位环境开发等工作。目前已在 Science, PRL 等期刊发表学术论文 80 余篇。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

基于数据驱动的轻合金高压铸造研究

汪星辰[1]，王鑫[1]，彭立明[1,*]

[1]上海交通大学材料科学与工程学院，上海市闵行区东川路 800 号材料 B 楼，200240

*Email: johnstar@sjtu.edu.cn

随着汽车制造技术的更新迭代，以镁、铝代钢，以铸代冲成为行业的主流发展趋势。镁、铝合金拥有良好的压铸能力。与传统重力铸造等方法相比，高压铸造是一种更高速的铸造模式，其冷却速度快、晶粒更细小、制造效率高，是实现大型薄壁、高性能、轻量化铸件一体化设计与制造的主要方法。目前，多种高性能免热处理铝合金已经应用于各类新能源车身结构的应用之中，在保证车身服役性能需求的前提下极大的提升了车身的轻量化效果并有效降低装配成本。然而大型一体化压铸由于其充型速度快、冷却速度快，微观结构与缺陷形成方式与传统铸造模式不同，面临了压铸专用材料设计效率低、铸造工艺与铸件质量间的关系不明确、铸件形性控制难等问题，导致产品研发周期长、制造成本高、废品率高等问题。随着现代信息技术与人工智能的发展，基于数据驱动的机器学习方法已经逐渐融入先进材料研究与制造过程。本研究结合机器学习算法，探索了轻合金压铸过程中的材料智能化设计、铸件品质智能化预测、工艺参数智能化优化、以及微观组织智能化识别等问题，建立了压铸铝合金“成分-力学性能”、“工艺参数-缺陷等级”间的内禀关系模型，并开发了压铸金相组织快速识别软件，为轻合金高压铸造智能“设计-制造-评价”一体化产业提供研究基础。

关键词：高压铸造；轻合金；机器学习；智能制造

报告人简介：

汪星辰，博士毕业于香港中文大学，现为上海交通大学材料科学与工程学院、轻合金精密成型国家工程研究中心助理研究员。主要从事基于金属材料液态成形与智能化制造研究，发表相关 SCI 与 EI 学术论文 7 篇，申请相关专利与软件著作权 5 项；作为研究骨干参与国家自然科学基金项目 2 项，科技部国家重点研发计划项目 2 项，担任国家重点研发计划“大型复杂薄壁高端金属构件智能液态精密铸造成型技术与应用”项目子课题负责人。所属的研究团队长期从事从事轻合金材料设计与液态成形技术研究，在国内外均具有较高的影响力。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

纳米尺度成分起伏对 CrFeCoNiPd 高熵合金变形过程位错异常响应影响研究

英会强[1]，杨啸[1]，何海燕[2,*]，闫澳[1]，安柯，柯于斌，吴桢舵，唐颂，张自由，董洪亮，Stefanus Harjo，Tamás Ungár，朱贺，孙晴雅，王循理，兰司*

1 南京理工大学，材料科学与工程学院，江苏省南京市，210094

2 大湾区大学物质科学学院，广东省东莞市，523000

*Email: haiyanhe@gbu.edu.cn

本工作采用小角散射和原位中子衍射方法研究了 CrFeCoNi 基高熵合金（HEAs）的成分起伏及其对变形行为的影响。小角散射结果表明 CrFeCoNiPd 高熵合金中存在纳米尺度(>10 nm)的成分起伏，原因可归结于 CrFeCoNiPd 高熵合金中元素间的负混合焓以及 Pd 与其他元素原子半径的差异。拉伸测试结果表明，CrFeCoNiPd 高熵合金的屈服强度和拉伸强度均优于无成分起伏的 CrMnFeCoNi 高熵合金。原位中子衍射数据分析显示，位错随应变的演化具有异常响应，即 CrFeCoNiPd 高熵合金的位错密度呈线性增加，且位错密度和螺位错比例均高于 CrMnFeCoNi 高熵合金，提升了合金的强度。本研究为通过纳米尺度调节成分起伏开发高性能合金提供了新的思路。

关键词：小角散射；原位中子衍射；位错密度；纳米尺度调节

报告人简介：

何海燕博士毕业于香港城市大学，导师是王循理教授。2022 年 4 月加入大湾区大学（筹），任助理教授。何海燕博士的研究方向是使用同步辐射和中子衍射研究高熵合金的结构和极端环境下的变形行为，在 Science Advances、Nano Letters、Physical Review Letters、Acta Materialia、Scripta Materialia 等杂志发表了多篇论文，并主持了国家自然科学基金-青年项目、粤莞联合基金-地区培育项目和东莞市大科学装置开放课题等。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

亚稳态纳米非晶合金材料的制备及能量状态调控

冯涛[1,*]，裴超群[1]，陈双琴[1]，兰司[1]，Horst Hahn[2], Herbert Gleiter[2]

[1]南京理工大学，材料科学与工程学院/格莱特研究院，江苏省南京市，210094

[2]Institute of Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, 76021, Germany

*Email: tao.feng @njust.edu.cn

成分-结构-性能之间的关系是影响材料制备和性能调控的基础。然而，由于非晶合金的原子排列无序性，晶体材料的经典理论和传统结构表征方法都无法揭示其微观结构与性能间的关系。非晶合金的能量亚稳态特征，使得能量状态成为衔接于结构-性能之间的新桥梁，为理解和认识非晶合金材料基本物理问题提供了重要途径。通过纳米结构化，引入高度结构不均匀性的纳米非晶合金，有望成为实现非晶合金能量状态调控的普适性方法。本文主要探讨纳米非晶合金的制备技术、能量调控实现途径、能量状态与中短程原子结构特征的关联、以及能量状态对力学和催化性能的影响，为实现非晶合金性能调控和应用拓展提供新的思路和方法。

关键词：非晶合金；纳米结构化；中短程原子结构；性能调控

报告人简介：

冯涛教授，男，江苏省特聘教授，江苏省高校青蓝工程中青年学术带头人，国际先进材料学会会士，中国材料新技术发展研究会常务理事。主要从事纳米结构金属材料的制备、结构表征及性能开发研究工作。2007 年获上海市青年科技启明星称号；2008 年获上海市创新人才称号；2010 年获上海市科技进步奖三等奖；同年获“洪堡学者”称号，赴德国卡尔斯鲁厄纳米技术研究所与纳米材料创始人 Herbert Gleiter 教授合作开展纳米非晶合金材料的开创性研究工作。2013 年加入南京理工大学格莱特纳米研究所，担任所长助理，全面负责纳米晶与非晶课题组创建工作。负责研发了具有自主知识产权的国际上最先进的激光气固超高真空互联系统；开发了多相脉冲电沉积法用于制备纳米非晶合金，成为继气体冷凝法和磁控溅射法后第三种纳米非晶合金制备技术；开发了纳米双相高熵合金复合材料，开拓了纳米高熵合金材料研究的新方向。近年来作为项目负责人承担了国家自然科学基金面上项目和江苏省自然科学基金项目等多项，已在 Nature Communications, Advanced Materials, Nano Letters，Acta Materialia 等国内外学术期刊发表论文 120 余篇。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

基于数据驱动的轻合金高压铸造研究

单贵斌 [1,*]

[1] 河海大学材料科学与工程学院，南京市鼓楼区西康路，200240

*Email: johnstar@sjtu.edu.cn

冷变形金属材料在退火过程中由于晶格缺陷的湮灭通常表现为软化。本工作展示了经冲击载荷作用后的CrCoNi 基中熵合金在低温退火后强度和延展性同时提高的现象：在 553K 退火处理 2h 后，屈服强度提高了 33%，延展性提高了 19%。如此优异的力学性能源于材料在液氮温度动态等径角挤压过程中(超高应变速率(1.17×105 s-1)与极大的剪切变形(200%))产生的高密度晶格缺陷(位错、层错和孪晶)。大尺度分子动力学研究表明，在退火过程中晶格缺陷至纳米孪晶的演化主要通过初始孪晶的拓展与位错滑移，高分辨透射电镜也观察到了这一实验现象。退火形成的纳米孪晶可与位错产生强相互作用，提高位错滑移的能垒，从而产生显著的强化作用，进而提高合金的应变硬化能力。受益于屈服强度和延展性的提高，在塑性变形过程中，材料中还形成了多取向孪晶，这也可以有效阻碍位错的运动，进一步提高其加工硬化能力。

关键词：冷变形金属；低温退火；晶格缺陷；纳米孪晶

报告人简介：

单贵斌，河海大学材料学院讲师，2021 年于西北工业大学获得博士学位，同年进入南京理工大学从事博士后研究工作，2024 年入职河海大学材料科学与工程学院。主要从事高热稳定纳米晶材料的制备、力学性能分析及抗辐照性能研究。以第一作者或者合作作者身份在 Acta Materialia，Scripta Materialia 和 Journal of Materials Science & Technology 等期刊发表论文二十余篇，总被引超 200 余次。近两年成功获批江苏省卓越博士后项目、江苏省青年基金以及中国博士后面上项目。此外还以第一发明人和主要发明人参与申报国家发明专利 9 项，目前已授权 5 项。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

亚稳态合金对含氮污水处理与再利用研究

陈双琴 [1,*]

[1] 南京理工大学，材料科学与工程学院/格莱特研究院，江苏省南京市，210094

*Email：chensq-hgi@njust.edu.cn

亚稳态合金（非晶合金、高熵合金、纳米非晶等）由于具有丰富的低配位活性位点和高吉布斯自由能，成为电化学催化剂家族中极具潜力和竞争力的新候选材料。我们主要针对含氮污水处理与再利用开展了一系列研究，包括亚稳态结构调控、催化体系设计及其环境因素影响。通过纳米晶化、纳米团簇、纳米界面等不同尺度调控非晶合金的微观结构，用于偶氮染料降解、尿素氧化、尿素燃料电池电极材料研究。

关键词：亚稳态合金；低配位活性；含氮污水；电极材料

报告人简介：

陈双琴，南京理工大学材料科学与工程学院/格莱特研究院，副教授、硕士生导师。主要从事亚稳态材料（非晶合金、纳米非晶和高熵合金等）的可控制备、改性及其应用于环境治理与新能源催化研究。获得江苏省双创博士、获得江苏省优青项目，同时主持国家自然科学青年基金项目，并参与国家重点研发计划项目、国家自然科学基金面上项目等多项国家自然科学基金项目。自 2012 年至今在 Adv. Mater.、J. Mater. & Chem. A、J. Mater. Sci. & Tech.等国内外学术期刊上发表论文 20 余篇。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

基于中子衍射和同步辐射技术研究磁制冷合金中自旋-晶格-电子强耦合作用

缪雪飞[1,*]，郭文辉[1]，张玉晶[1]，徐锋[1]

[1]南京理工大学，孝陵卫街 200 号，210019

*Email: xuefeimiao@njust.edu.cn

基于磁热效应的室温磁制冷技术，因其具有绿色环保、高效节能、稳定低噪等显著优点，有望颠覆传统蒸气压缩制冷技术，应用到日常生活、医疗卫生、交通运输、国防科技等领域，具有重要的社会价值和经济价值。尽管所有的磁性材料均具有磁热效应，但是该效应在一级磁相变合金中更为显著[1]。与二级磁相变不同的是，一级磁相变通常与结构相变相互耦合，磁相变与晶体结构相变的相互叠加带来了巨磁热效应。

$(Mn,Fe)_2(P,Si)$合金因其价格低廉、工作温域易于调控、磁热性能优异等显著特性，在室温磁制冷领域具有重要应用前景。然而，$(Mn,Fe)_2(P,Si)$合金存在着热滞大、相变可逆性差等问题，限制了其在制冷循环中的制冷效率。本研究利用极化中子衍射、同步辐射技术和透射电镜揭示了该合金磁弹相变过程中铁磁团簇在时间和空间尺度上的演变规律，建立了热滞现象与晶格畸变之间的关联性。进一步通过成分调控，实现了超低热滞，极大增强了其可逆磁热性能。本研究不仅揭示了一级磁相变材料中电子-晶格-自旋强耦合作用，也为巨磁熵变材料的应用提供了理论指导[2]。此外，我们还发现$(Mn,Fe)_2(P,Si)$合金存在相变弛豫亚稳态，导致一级磁相变发生“动力学受限”现象，从而影响磁制冷性能。本研究从相变热力学和动力学角度阐明了这种亚稳态的形成机理和稳定化方法[3]。

关键词：磁制冷；中子衍射；同步辐射

[30] [1] F. Zhang, X. Miao, N. van Dijk et al. Advanced magnetocaloric materials for energy conversion: Recent progress, opportunities, and perspective. Advanced Energy Materials, 2024, 14: 2400369.

[31] [2] W. Guo, X. Miao, J. Cui, et al. Novel magnetocaloric composites with outstanding thermal conductivity and mechanical properties boosted by continuous Cu network, Acta Materialia, 2023, 242: 118453.

[32] [3] X. Miao, Y. Mitsui, I. Dugulan, et al. Short-range magnetic correlations and spin dynamics in the paramagnetic regime of $(Mn,Fe)_2(P, Si)$. Physical Review B, 2016, 94: 014426.

报告人简介：

缪雪飞副教授于 2016 年在荷兰代尔夫特理工大学获得博士学位，曾在日本国立材料研究所开展博士后研究。长期从事磁相变合金（磁制冷、反常热膨胀合金）的高性能设计、关键成型技术及相变机制研究，近年来在 Acta Materialia、Advanced Energy Materials、Physical Review B 等学术期刊发表 SCI 论文 50 多篇，授权中国发明专利 6 件、PCT 国际专利 2 件，受邀在国际学术会议做口头报告 10 余次。主持国家自然科学基金 3 项、江苏省自然科学基金 2 项以及其它科研项目 10 余项，荣获 2018 年江苏省双创博士。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

MgCoNiMnFeOx 高熵氧化物催化剂/载氧体实现高效稳定化学链甲烷干重整

邵羽 [1,*]

[1] 南京理工大学，材料科学与工程学院/格莱特研究院，江苏省南京市，210094

*Email: yushao@njust.edu.cn

高熵氧化物的高构型熵能够有效促进其在高温下形成单相固溶体，并进一步促进其部分金属组分在还原及氧化环境下的可逆析出和再溶解。这一特性使得特定高熵氧化物能够可靠稳定地循环释放和恢复晶格氧，从而使它们成为如化学链等应用场景中的理想载氧体。同时，高熵氧化物不同组分间的协同效应，能够有效提高其在化学链甲烷干重整反应中的催化活性及抗积碳能力。此外，高熵氧化物通常具有良好的高温稳定性及机械强度。基于以上优势，作者通过简单的共沉淀-煅烧法合成MgCoNiMnFeOx高熵氧化物，作为反应催化剂和载氧体应用于化学链甲烷干重整中，在100个反应循环中表现出高催化活性和高循环稳定性。尽管引入Fe、Mn导致混合焓较高，难以通过热平衡手段获得单相固溶体；其在反应气氛下，能够原位生成、并在回复至室温时保持单一岩盐相固溶体结构。通过电镜、XRD、XPS、XAFS等表征手段进一步揭示其长程有序短程无序结构的形成过程、反应循环中FeCoNi合金的析出与再溶解、氧化物各组分及其高熵效应在甲烷活化、催化剂烧结、积碳、晶格氧再生等关键过程中的作用。展现了基于多组分协同、熵调控结构的高熵氧化物构筑策略，以及其在催化场景中的应用前景。.

关键词：高熵氧化物；甲烷干重整；熵调控结构；多组分协同

报告人简介：

邵羽博士毕业于新加坡国立大学，之后在新加坡南洋理工大学完成博士后阶段的研究，主要从事纳米功能材料的研究工作。通过金属－载体界面性质的动态精准调控实现纳米功能材料自组装，构建了一系列金属单原子－有机硅酸盐、金属团簇－MOF、高熵纳米颗粒－无机纳米材料的界面结构单元，合成了多种以多孔材料为基础的集成催化剂，应用于 CO_2 加氢制甲醇、化学链甲烷干重整、生物质加氢制航空燃油等领域。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

Decoding Active Sites for Highly Efficient Semihydrogenation of Acetylene in Palladium–Copper Nanoalloys

Fan Xue[1], Qiang Li[1,*], Xianran Xing[1,*]

[1]Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering, Institute of Solid State Chemistry, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

*Email: xing@ustb.edu.cn, qiangli@ustb.edu.cn

Accurately decoding the three-dimensional atomic structure of surface active sites is essential yet challenging for a rational catalyst design. Here, we used comprehensive techniques combining the pair distribution function and reverse Monte Carlo simulation to reveal the surficial distribution of Pd active sites and adjacent coordination environment in palladium – copper nanoalloys. After the fine-tuning of the atomic arrangement, excellent catalytic performance with 98% ethylene selectivity at complete acetylene conversion was obtained in the $Pd_{34}Cu_{66}$ nanocatalysts, outperforming most of the reported advanced catalysts. The quantitative deciphering shows a large number of active sites with a Pd – Pd coordination number of 3 distributed on the surface of $Pd_{34}Cu_{66}$ nanoalloys, which play a decisive role in highly efficient semihydrogenation. This finding not only opens the way for guiding the precise design of bimetal nanocatalysts from atomic-level insight but also provides a method to resolve the spatial structure of active sites [1-2].

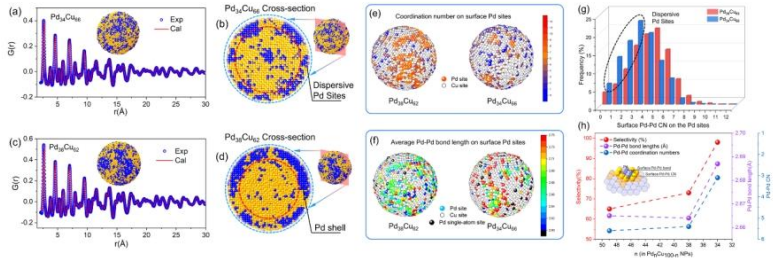


Figure 1. Reverse monte carlo (RMC) simulation for atomic pair distribution functions (PDF). (a-b) RMC fitting of PDF (a) and the cross-section of $Pd_{34}Cu_{66}$ model (b). (c-d) RMC fitting of PDF (c) and the cross-section of $Pd_{38}Cu_{62}$ model (d). The blue ball is Pd atom and yellow ball is Cu atom. (e-f) The 3D distribution of the nearest Pd-Pd coordination number (e) and average bond length of Pd-Pd (f) on the Pd sites of PdCu NPs. (g) The comparison of surface Pd-Pd coordination number of PdCu NPs. (h) The relationship of the selectivity for acetylene hydrogenation (red) with the Pd−Pd interatomic distance (purple, the unit is Å) and Pd-Pd coordination number (blue) at the surface of PdCu NPs.

Key Words: pair distribution function, local structure, bimetallic catalysis, reverse monte carlo, 3D distribution

[33] [1] F. Xue, Q. Li, M. Lv, Y. Song, T. Yang, X. Wang, T. Li, Y. Ren, K. Ohara, Y. He, D. Li, Q. Li, X. Chen, K. Lin, X. Xing, Atomic Three-Dimensional Investigations of Pd Nanocatalysts for Acetylene Semi-hydrogenation, J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 26728-26735.

[34] [2] Q. Li, H. Zhu, X. Chen, H. Liu, Y. Ren, Y. Chen, K. Ohara, L. Zhou, J. Chen, J. Deng, J. Miao, K. Lin, X. Kuang, X. Xing, Local Structure Insight into Hydrogen Evolution Reaction with Bimetal Nanocatalysts, J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 20298-20305.

报告人简介：

薛凡现为北京科技大学固体化学研究所博士研究生，导师邢献然教授，主要从事纳米催化剂的精确合成及局域结构研究，利用国内外先进的同步辐射和散裂中子源等大科学装置并基于原子对分布函数（PDF）和反向蒙特卡洛（RMC）模拟相结合的方法从原子尺度对催化剂活性位的三维空间分布和局域配位结构进行揭示。研究成果以第一作者发表 SCI 论文 3 篇，包括 1 篇 J. Am. Chem. Soc.、1 篇 Nano Lett.、1 篇 Chem. Sci.。合作在 ACS Catal.、Chem. Mater.、Dalton Trans. 等期刊上发表共同作者论文。

附：请在此处注明报告人是否为学生：是

结构调控增强多主元合金电解水催化性能研究

杨绎原[1]，贾喆[1,*]，沈宝龙[1,*]

1 东南大学，江苏省南京市江宁区东南大学路 2 号，211189

*Email: zhejia@seu.edu.cn; blshen@seu.edu.cn

多主元合金以其成分多样性，极大扩展了金属材料设计范围，在能源催化领域展现独特潜能。然而，传统合金化方法严重依赖成分设计和鸡尾酒效应，忽视了高熵固溶体结构调控的潜力。本文展示了两种结构调控策略，旨在设计新型无序合金催化材料以突破“成本-效率”制衡关系：（1）采用创新磁性诱导合金设计策略在 Fe10Co5Ni10Cu15Al60 多主元合金中成功构筑化学短程有序结构[1]，并研究其有序结构对电解水催化活性的影响。脱合金过程中表面大量 Al 元素浸出，形成均匀多孔结构。形成的 M-Cu (M = Fe, Co, Ni, Al)有序原子配位构型，尤其是 Cu-Al 配位，极大降低水分解反应能垒，实现优异的碱性双功能电解水，在电池电压为 2.0 V 时，获得电流密度 130 mA cm-2，优于商业贵金属体系 4 倍；（2）应变工程策略[2]，通过空位诱导高熵合金薄膜产生晶格微观应变场，进而调控电荷分布与 d 带中心结构，实现优异全 pH 析氢反应催化活性。该高熵合金薄膜实现安培级电流密度过电势 104 mV（碱性）和 106 mV（酸性），在阴离子交换膜电解池稳定运行近 500 小时，寿命是商用 Pt/C || IrO_2 体系的 40 倍。以上结构调控设计策略为开发高性能、低成本合金催化材料提供重要实验和理论基础，为设计高性能多主元合金催化材料在能源催化领域广泛应用提供了新的思路。

关键词：多主元合金；结构调控；电解水；化学短程序；应变工程

[35] [1] Y.Y. Yang, Z. Jia, X.Y. Zhang, Y.J. Liu, Q.Q. Wang, Y.J. Li, L.L. Shao, S.Y. Di, J. Kuang, L.G. Sun, L.C Zhang, Jamie J. Kruzic, Y. Lu, J. Lu, B.L. Shen Chemical short-range order in multi-principal element alloy with ordering effects on water electrolysis performance. Mater. Today 2024, 72: 97-108.

[36] [2] Y.Y. Yang, Z. Jia, Q.Q. Wang, Y.J. Liu, L.G. Sun, B. Sun, J. Kuang, S.J. Dai, J.G. He, S.D. Liu, L.B. Duan, H.J. Tang, L.C. Zhang, Jamie J. Kruzic, J. Lu, B.L. Shen Vacancy induced microstrain in high-entropy alloy film for sustainable hydrogen production under universal pH conditions. Energy Environ. Sci. 2024, 17: 5854-5865.

报告人简介：

杨绎原，东南大学材料科学与工程学院 2020 级在读博士生，师从沈宝龙教授和贾喆教授，博士期间致力于无序合金电解水催化特性研究。在 Mater. Today, Energ. Environ. Sci., Adv. Mater.等期刊发表 SCI 论文 7 篇。

附：请在此处注明报告人是否为学生：是

In-situ Neutron Scattering study of Plastic Deformation Mechanism in a High-entropy Alloy with nanoscale structure heterogeneity

Huiqiang Ying[1], Haiyan He[2], Stefanus Harjo[3], Yang Ren[4], Xun-Li Wang[4], Tamás Ungár[5], Zhenduo Wu[6], Si Lan[1,4,*]

1 Herbert Gleiter Institute of Nanoscience, School of Materials Science and Engineering, Nanjing University of Science and Technology, 200 Xiaolingwei Avenue, Nanjing, China

2 School of Physical Sciences, Great Bay University, Dongguan 523000, China

3 J-PARC Center, Japan Atomic Energy Agency, Tokai, Ibaraki 319-1195, Japan

4 Department of Physics, City University of Hong Kong, 83 Tat Chee Avenue, Kowloon, Hong Kong, China

5 Department of Materials Physics, Eötvös University Budapest, PO Box 32, H-1518, Hungary

6 City University of Hong Kong (Dongguan), Dongguan, 523000, China

* lansi@njust.edu.cn

Like elements choose to gather together and tend to form chemical short-range ordering in compositionally complex alloys, i.e., high-entropy alloys. The role of chemical short-range ordering in plastic deformation of a CoCrFeNiPd alloy has been studied using in-situ neutron diffraction and small-angle neutron scattering. The FCC single-phase CoCrFeNiPd alloys show much more substantial nanaoscale heterogeneity than CoCrFeNiMn Cantor alloy, indicating the existence of pronounced chemical short-range order. Moreover, controlling heat treatment process can obtain the spinodal decomposition structure in the CoCrFeNiPd high-entropy alloy. Lattice strain analysis reveals that the stacking fault probability is much lower in CoCrFeNiPd alloy than that of Cantor alloy due to the increase of stacking fault energy by chemical short-range ordering. Analysis of diffraction and microscopy data confirms that dislocations interations and propagations, rather than stacking faults or twinning, play an essential role at the early stage of plastic deformation in CoCrFeNiPd, leading to higher yield strength without compromising strain hardening and tensile ductility than those in Cantor alloy.

Keywords: High entropy alloy; Small-angle scattering; Neutron diffraction; Chemical fluctuation

[37]

[38] 报告人简介：

英会强，南京理工大学博士生，主要从事亚稳高熵合金材料的开发、微观结构调控以及变形机理的研究工作。结合原位中子衍射、同步辐射、三维原子探针、透射电镜等表征手段对所开发材料进行结构与力学性能的相关联性研究。揭示了宽温域下条幅分解结构高熵合金变形机理。已在 Small，Scripta， JMST， International Journal of Plasticity， Rare Metals，Microstructures 等国际期刊上发表论文 12 篇，其中以第一作者身份发表论文 3 篇，申请国家专利 9 项，授权 2 项。

附：请在此处注明报告人是否为学生：是

选择性腐蚀制备Pd-Ni-P纳米多孔非晶及其电化学性能研究

娄宇[1]，朱贺[1,*]，兰司[1,*]

1 南京理工大学，江苏省南京市玄武区孝陵卫大街 200 号，210014

*Email: hezhu@njust.edu.cn; lansi@njust.edu.cn

糖尿病作为世界十大慢性疾病之首，严重影响了人类的生命健康安全，根据世界卫生组织统计，2022 年全球糖尿病患者人数达到约 5.5 亿。因此，为了加强对糖尿病的早期预测与干预，亟需研发高灵敏度的葡萄糖传感器。相比于传统的商用酶类葡萄糖传感器，新型的电化学非酶葡萄糖传感器由于其宽线性检测范围、高灵敏度、低成本和高稳定性等特点得到了广泛关注并快速发展。金属玻璃(Metallic glass)具有丰富的不饱和活性位点和高表面能的特点，是理想的非酶葡萄糖电极材料。然而由于非晶合金结构的复杂性，其优异电化学性能表现与结构之间的关联尚不清楚。本研究采用选择性腐蚀法制备了一种具有高比表面积的 Pd-Ni-P 纳米多孔非晶合金，展现出优异葡萄糖电化学检测性能并实现器件组装，利用金属玻璃技术等手段探索了金属玻璃局域有序结构对葡萄糖电化学检测性能的影响。结果表明，Pd41.25Ni41.25P17.5 纳米多孔非晶合金在宽葡萄糖浓度范围内检测灵敏度约为 3.01 mA mM-1 cm^{-2}，并表现出优异的抗干扰性以及回复性。

关键词：葡萄糖传感器；金属玻璃；不饱和活性位点；局域有序结构；抗干扰性

[39] 报告人简介：

娄宇，南京理工大学博士生，主要从事大块金属玻璃的制备与性能研究。结合原位同步辐射、x 射线吸收精细谱仪、三维原子探针、透射电镜等表征手段对所开发材料进行结构与电化学性能的相关联性研究。揭示了非晶合金在宽温域下的结构演变规律和电化学性能的关联。已在 Intermetallics，PNS，Small，JMST 等国际期刊上发表论文 9 篇，其中以第一作者/通讯作者发表论文 3 篇，申请国家专利 2 项。

附：请在此处注明报告人是否为学生：是

揭示成分调制诱导的 Ni-Mo-P-B 金属玻璃的化学短程有序结构

姚忠正[1]，朱贺[1,*]，兰司[1,*]

[1]南京理工大学，江苏省南京市玄武区孝陵卫大街 200 号，210014

*Email: hezhu@njust.edu.cn; lansi@njust.edu.cn

对材料构效关系的认知在材料设计中起着至关重要的作用。金属玻璃(Metallic glass)虽然宏观上表现出各向同性，但内部存在局域不均匀性。这赋予了金属玻璃丰富的不饱和活性位点和高能量状态的特性。然而由于金属玻璃结构的复杂性，解析其结构本质及建立电化学性能-结构的关联仍是难题。本研究采用单辊旋淬法制备了Ni-Mo-P-B金属玻璃，通过微量的成分调控发现其在葡萄糖电化学检测上展现出的性能大有不同。利用高能同步辐射技术和径向分布函数分析等手段探索了不同成分的金属玻璃局域结构变化并建立了对葡萄糖电化学检测性能的影响。Ni64Mo16P16B4金属玻璃具有优异的电化学葡萄糖检测性能如高的检测灵敏度、出色的抗干扰性和可重复性。其高活性归功于其独特的短程化学有序结构，同时这种结构可以以致密的3-atom堆积模式扩展至更长的空间尺度。在无序体系中构建多尺度有序结构可以改善电子传递能力，同时确保了电化学反应进程的稳定性。

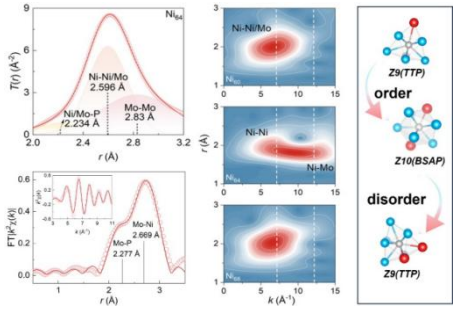


Fig. 1 Analysing the chemical short-range order structure of Ni-Mo-P-B metallic glasses.

关键词：金属玻璃；化学短程有序；电化学性能

报告人简介：

姚忠正，南京理工大学材料科学与工程学院博士研究生，主要研究方向是镍基非晶合金的结构设计和电化学性能研究。

附：请在此处注明报告人是否为学生：是

亚稳态材料在调控硫正极催化机制中的应用

王志华[1]，朱贺[1,*]，兰司[1,*]

[1]南京理工大学，江苏省南京市玄武区孝陵卫大街200号，210014

*Email: hezhu@njust.edu.cn; lansi@njust.edu.cn

Li-S电池是高能量密度二次电池的有力候选者，但其应用受限于硫转化动力学缓慢导致的“穿梭效应”和硫利用率低等问题。[1]使用催化剂是解决硫缓慢转化的有效策略。[2]但是，硫在催化剂表面的电化学转化复杂，涉及多硫化锂（LiPSs）吸附、催化和脱附等过程。[3]其中，通过金属-硫相互作用会使催化剂对LiPSs实现吸附，内球电子转移机制实现了S-S键的断裂，并和扩散到催化剂表面的Li^+结合来完成LiPSs的转化。[4]但是，催化剂与硫物质的强金属-硫键也会造成金属催化剂腐蚀或者相变，锚定作用和催化催化作用所需的活性位点数量不协同等问题。[5]同样，生成的（多）硫化锂与催化剂之间的金属-硫之间的结合依旧存在，使后续的脱附工作难以执行，造成催化剂覆盖失活和活性物质损失。[6]针对上述问题，我们认识到优化和完善催化机制是实现稳定硫氧化还原动力学的可行策略。目前，我们利用亚稳态材料，对解耦吸附和催化之间的矛盾、解耦吸附和脱附之间的矛盾和稳定反应过程中催化剂的价态等问题进行了深入探索。

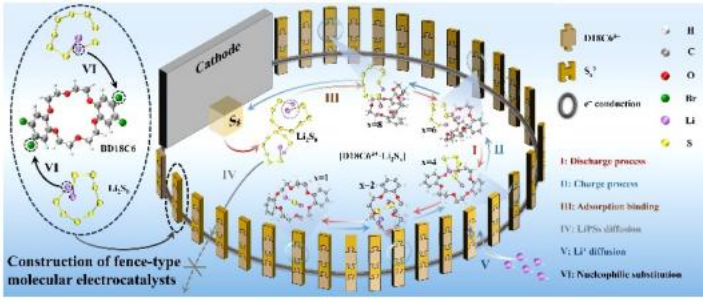


Fig. 1 Schematic diagram of the construction and function of fence-type molecular electrocatalysts.

关键词：亚稳态材料；锂硫电池；（多）硫化锂；催化机制

[40] [1] H. Raza, S. Bai, J. Cheng, S. Majumder, H. Zhu, Q. Liu, G. Zheng, X. Li, and G. Chen Li-S Batteries: Challenges, Achievements and Opportunities. Electrochem. Energy Rev. 2023, 6: 29.

[41] [2] 汪涛,董琴,李存璞,魏子栋, 锂硫电池中的硫正极电催化认识[J]. 物理化学学报，2024, 40（2）: 2303061.

[42] [3] Z. Shen, X. Jin, J. Tian, M. Li, Y. Yuan, S. Zhang, S. Fang, X. Fan, W. Xu, H. Lu, J. Lu, and H. Zhang Extension of geometrical-optics approximation to on-axis Gaussian beam scattering. Nat. Catal. 2022, 5: 555.

[43] [4] N. Ramaswamy, and S. Mukerjee Influence of Inner- and Outer-Sphere Electron Transfer Mechanisms during Electrocatalysis of Oxygen Reduction in Alkaline Media. J. Phys. Chem. C 2011, 115: 18015–18026.

[44] [5] J. Xiang, W. Shen, Z. Guo, J. Meng, L. Yuan, Y. Zhang, Z. Cheng, Y. Shen, X. Lu, Y. Huang A Supramolecular Complex of C60–S with High-Density Active Sites as a Cathode for Lithium–Sulfur Batteries. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60: 14313-14318.

报告人简介：

王志华，南京理工大学材料科学与工程学院博士研究生，主要研究方向是锂硫电池中反应界面的理论设计。

附：请在此处注明报告人是否为学生：是

高熵纳米非贵合金+碳空腔—电催化微纳反应器 HTS 构筑

朱信栋[1]，黄雯[1]，朱贺[1,*]，兰司[1,*]

1 南京理工大学，南京市玄武区孝陵卫街道 200 号，210094

*Email: hezhu@njust.edu.cn; lansi@njust.edu.cn

由于化石燃料消耗的增加和环境污染的日益严重，对可持续和绿色能源的需求变得越来越关键。在潜在的解决方案中，水的电催化分解在过去几十年中作为一种有前景且具有成本效益的清洁能源转换技术受到了广泛关注。析氧反应（OER）是通过水分解产生氢能所必需的半反应。但是OER涉及复杂的四电子转移机制，导致动力学缓慢，同时为实现所需的电流密度导致过电势较大。目前，商业OER电催化剂主要依赖于钌和铱等贵金属。尽管这些电催化剂的活性很高，但它们的高成本、稀缺性和操作条件下的不稳定性严重阻碍了它们的广泛应用。

合成非贵高熵合金是一种提升电催化性能的有效方法，而另一种提高电催化性能方法是在此基础上进行微纳结构的构筑。微纳结构构筑提高了材料比表面积，增加活性位点浓度，从而提高电催化性能。具有显著扩大的表面积和更容易接近的活性位点的球中球结构材料正在成为研究的重点。电极材料和电解质之间扩大的接触面积有助于加速质量扩散/转移和气体释放动力学，进一步提高催化性能。采用快速热冲击方法制备Fe-Co-Ni-Cu-Al非贵高熵合金纳米催化剂，不同于高熵颗粒负载在碳布上制备方式，将前驱体盐与炭黑直接混合均匀后快速热冲击制备粉末材料，有着独特形貌和更大的负载量等优势。

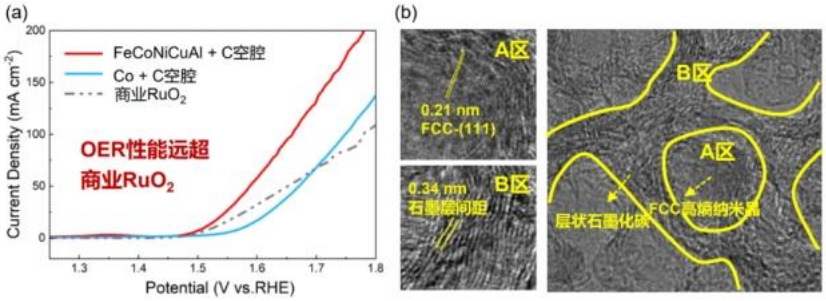


Fig. 1 (a) OER LSV polarization curves. (b) HRTEM images of FeCoNiCuAl.

FeCoNiCuAl+C 空腔复合材料和 Co+C 空腔复合材料的极化线性扫描伏安法曲线如图所示(Fig. 1 (a))。结果表明，在电流密度为 10 mA/cm 时，FeCoNiCuAl+C 空腔复合材料表现出较高的 OER 活性，过电位为 280 mV，催化性能优于 Co+C 空腔复合材料，并且也优于商业氧化钌。

优异的性能首先是因为高温热冲击加热法制备了十纳米左右的单相 Fcc 结构高熵纳米颗粒，纳米级的高熵颗粒有着高熵材料特有的优势，以及纳米材料具有的大量催化活性位点的大表面积和纳米尺寸效应，提供了好的电催化性能。同时高温热冲击时使部分碳形成独特的石墨层间距(Fig. 1 (b))，具有大的结晶 SP2 杂化电子结构，使碳基质可以具有高电导率。石墨化增强了结构稳定性和电子传输，赋予了所获得的催化剂更高的电催化性能。

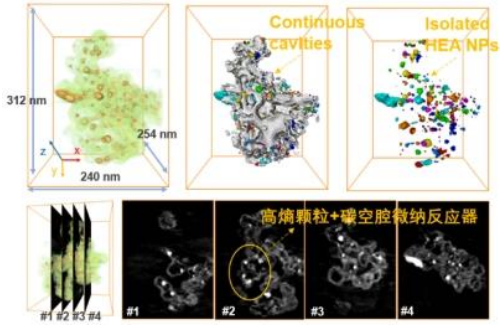


Fig. 2 Illustration of the FeCoNiCuAl+C cavity composite nanomaterials by 3D tomography reconstruction

FeCoNiCuAl+C 空腔复合材料的形貌是几十纳米碳颗粒中包覆着几纳米的高熵金属颗粒和一定的空腔(Fig. 2)，在制备的过程中前驱体盐在经过高温时会产生裂变聚变，除了前驱体盐形成高熵颗粒外，在碳颗粒内部还形成独特的空腔结构，这种空腔可以提供更高的表面积，使电解液与复合材料有更大的接触面积，从而提高催化性能。具有丰富通道的独特结构导致更易接近的活性位点以及反应物和产物的快速转移，高熵颗粒+碳空腔微纳反应器作为一种具有良好催化性能和稳定性的电催化剂具有广阔的应用前景。这种对亚稳态材料的结构、性能和功能一体化研究有助于电催化制氢。

关键词：微纳反应器；快速热冲击方法；FeCoNiCuAl 高熵合金；析氧反应

报告人简介：

朱信栋，南京理工大学硕士生，主要从事高温热冲击法合成亚稳态高熵合金纳米材料，微观结构调控以及催化机理的研究工作。结合中子衍射、同步辐射全散射、球差电镜三维原子重构等表征手段揭示高熵合金非均匀元素分布、非均匀原子结构并寻求电化学性能优化，揭示不同元素和结构与电化学性能的构效关系，基于构效认识逆向设计提升性能。在 Progress in Natural Science: Materials International 期刊上以第一作者发表论文 1 篇。

附：请在此处注明报告人是否为学生：是

高熵合金化学有序助力高 OER 催化活性

黄雯[1]，朱信栋[1]，朱贺[1,*],兰司[1,*]

[1]南京理工大学，南京市玄武区孝陵卫街道 200 号，210094

*Email: hezhu@njust.edu.cn; lansi@njust.edu.cn

电解水制备氢气与氧气这种可循环无污染的能量利用方式被视为未来能源利用的合理方式，大量的科研人员致力于制备高效且稳定的电解水催化剂。[1-2]焦耳加热高温冲击（HTS）方法利用焦耳加热原理瞬时升温和降温，几毫秒内可加热至 2000K 并瞬时降温。[3]焦耳加热高温冲击法制备的非贵高熵催化剂——碳布负载 FeCoNiCuAl 高熵合金。该材料为碳纤维负载约 5nm 超细粒径高熵纳米晶，有着优于商业氧化钌的析氧性能，从线性扫描图中可以看出电流密度 10mA/cm2 处其过电位 273mv 优于商业氧化钌。

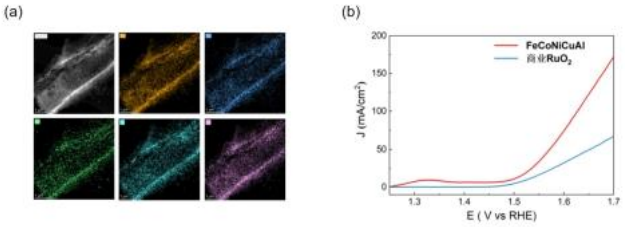


Fig.1 (a) The TEM-Mapping image of carbon-supported FeCoNiCuAl non-precious high-entropy alloy nanocatalysts. (b) OER-LSV curves for materials.

纳米尺度多主元素金属间化合物（MPEIs）的制造具有挑战性，因为颗粒有生长或团聚在退火过程中的相分离。而且以前难合成的 MPEI 组成由于元素的固有不混溶性，传统方法一直难以实现。但高温冲击方法的快速加热和快速冷却可以限制合成过程中的相分离，原子扩散和团聚，超高瞬态温度确保金属原子可以形成强烈的相互作用，为制备 MPEIs 提供新的可能。在焦耳加热合成的碳布负载 FeCoNiCuAl 高熵合金结构中，发现了极为罕见的特殊长程化学有序——Al 原子处在面心立方结构的面心位置、FeCoNiCu 原子处在面心立方结构的顶点位置。

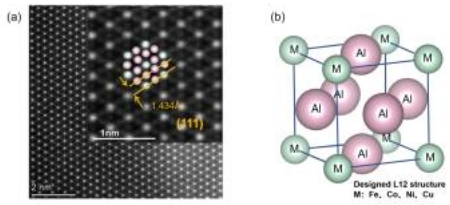


Fig.2 (a) STEM high-resolution image of FeCoNiCuAl. (b) Schematic of the face-centered cubic ordered structure of FeCoNiCuAl.

选取最易暴露面（111），通过 DFT 计算发现有氧倾向于吸附在三个 Al 中间吸附，形成三角锥结构。计算发现有序 FeCoNiCuAl 由于 Al 在面心位置，特殊的位置特征导致吸附 O 后形成 12 环包围住 FeCoNiCu，既能够分开活性位点，又削弱了对吸附态 OH 的吸附，能给 FeCoNiCu 活性元素带来好的 OER 活性。

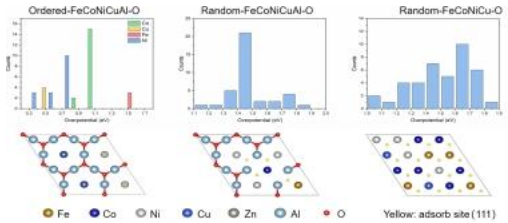


Fig.3 DFT calculations of OER overpotentials for ordered FeCoNiCuAl, random FeCoNiCuAl, and random FeCoNiCu

我们发现这种超快合成碳支撑的 FeCoNiCuAl 非贵高熵合金纳米催化剂由于其独特的化学有序结构带来优异的电化学活性。这种对亚稳态材料结构、性能、功能一体化研究助力电催化制氢。

关键词：超快合成，高熵纳米晶，化学有序，电催化

[45] [1] Xiao, Yuting, Guohui Tian, Wei Li, Ying Xie, Baojiang Jiang, Chungui Tian, Dongyuan Zhao, and Honggang Fu, Molecule Self-Assembly Synthesis of Porous Few-Layer Carbon Nitride for Highly Efficient Photoredox Catalysis. Journal of the American Chemical Society, 2019, 141 (6): 2508–15.

[46] [2] Zhang, Longshuai, Ning Ding, Licheng Lou, Kodai Iwasaki, Huijue Wu, Yanhong Luo, Dongmei Li, Kazuya Nakata, Akira Fujishima, and Qingbo Meng, Localized Surface Plasmon Resonance Enhanced Photocatalytic Hydrogen Evolution via Pt@Au NRs/C_3N_4 Nanotubes Under Visible-Light Irradiation. Advanced Functional Materials, 2019, 29 (3): 201806774.

[47] [3] Dou, Shuming, Jie Xu, Xiaoya Cui, Weidi Liu, Zhicheng Zhang, Yida Deng, Wenbin Hu, and Yanan Chen, High-Temperature Shock Enabled Nanomanufacturing for Energy-Related Applications. Advanced Energy Materials, 2020, 10 (33): 202001331.

报告人简介：

黄雯，南京理工大学硕士，主要从事亚稳高熵合金材料的开发、微观结构调控以及电催化机理的研究工作。结合同步辐射、球差电镜等表征手段对所开发材料进行结构与电催化性能的相关联性研究。揭示了高熵合金亚稳态结构和性能构效关系。在 Progress in Natural Science: Materials International 期刊上发表论文 1 篇，国家专利 2 项。

附：请在此处注明报告人/是否为学生：是

通过中程结构调制优化的高性能应力阻抗传感器

赵一鸣 [1]

[1] 南京理工大学，江苏省南京市玄武区孝陵卫大街 200 号，210094

*Email: hezhu@njust.edu.cn; lansi@njust.edu.cn

柔性压力传感器因其在人体运动检测和人机交互方面的应用而引起了广泛的关注。铁基软磁非晶合金由于其在应力和磁场下优异的阻抗响应性能，已被广泛应用于传感器领域。然而，铁基软磁非晶合金条带的有限塑性和高刚性限制了其在柔性压力传感器领域的应用。利用糖颗粒模板方法将具有可调软磁性的铁基非晶态粉末加入到海绵状聚二甲基硅氧烷（PDMS）基体中开发了一种协同压阻和磁弹性效应的柔性压力传感器。通过设计合理的成分配比，调节非晶合金的中程序结构，提高电导率，进一步优化了柔性压力传感器的性能。该传感器不仅在超低压力（0-6 kPa）下具有很高的接触传感灵敏度（6.56 kPa^{-1}），而且还显示出 29 ms 的超快响应时间和超过 10000 个压缩-释放的稳定性。此外，根据传感器的边缘磁场对不同导电介质磁导率的敏感特性，还可用于非接触传感，即能够检测正上方 18 cm 范围内高磁导率物体的垂直移动。这种基于应力阻抗效应的复合薄膜传感器能够进一步集成为传感器阵列，从而在人体运动跟踪和触觉感知等应用中具有巨大的潜力。

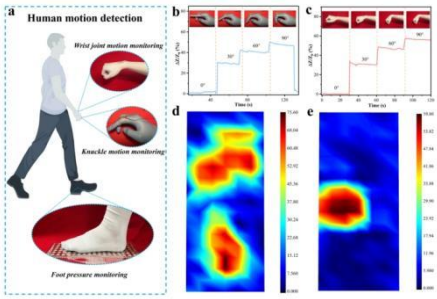


Fig. 1 Applications of the large-area pressure sensing array and single sensors.

关键词：铁基软磁非晶合金粉末；柔性传感器；触觉感知；

[48] [1] hukov A. Design of the magnetic properties of Fe-rich , glass-coated microwires for technical applications[J]. ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS, 2006,16(5):675-680.

[49] [2] Pei C, Zhang B, Xie J, et al. Superlattice-shelled nanocrystalline core structural design for highly sensitive GMI sensors[J]. ACTA MATERIALIA, 2023,255.

[50] [3] Inoue A, Shen B L, Koshiba H, et al. Cobalt-based bulk glassy alloy with ultrahigh strength and soft magnetic properties[J]. NATURE MATERIALS, 2003,2(10):661-663.

[51] [4] Zhao X, Lan S, Hu L, et al. Features of relaxation modes in soft magnetic metallic glasses and their correlation with magnetic ordering[J]. JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS, 2023,602.

报告人简介：

赵一鸣，南京理工大学硕士生，主要从事铁基软磁非晶合金及多孔复合薄膜结构和应力阻抗性能的研究工作。结合中子成像、X 射线成像、同步辐射、透射电镜等表征手段对所开发材料进行结构与应力阻抗性能的相关联性研究。揭示了应力场和磁场下的应力阻抗传感机制。已在 Microstructures 国际期刊上发表论文 1 篇，申请国家专利 3 项。

附：请在此处注明报告人是否为学生：是

第 28 分会场：超微颗粒材料及应用分会

主题报告 气相合成高熵超微颗粒及其应用

张易阳 [1]

[1] 清华大学核能与新能源技术研究院，北京 100084

摘要：近年来面向固态电解质、高端光学器件等领域的快速发展，多元高熵颗粒材料日益受到业界和学界的关注。气相法因其“自下而上”一步连续合成的特点，在多元超微颗粒材料的合成方面具有独特的优势。本报告将介绍以火焰合成为代表的气相合成方面的研究积累，包括基本原理、过程诊断、调控机理、方法拓展及应用等，特别是面向 NZSP、BCZYYb 等固态电解质的应用。

主题报告 水系锌离子电池锌中的负极保护策略研究

徐锡金 [1,*]，王成刚 [1]，张习习 [1]，李传琳 [1]，李娜 [1]

[1] 济南大学，山东省济南市南辛庄西路 336 号，250022

*Email: sps_xuxj@ujn.edu.cn

摘要：锂离子电池（LIB）广泛用于消费电子和电动汽车领域，主导当前可充电电池市场。然而 LIB 仍然面临安全性、成本和锂资源的挑战。水系电池因其易于组装、成本低廉等优点成为理想的动力电池之一。其中，水系锌离子电池因其安全性高、容量大、性价比高等特点成为传统电池最有前途的替代品。然而，ZIBs 的长期运行受到 Zn 负极界面析氢、pH 升高和副产物形成的阻碍，限制其大规模应用。这些挑战显著影响 ZIBs 的库仑效率和长期循环性能，进一步影响其商业化。因此，通过构筑稳定的电极/电解液界面以有效抑制界面副反应，进而提升水系锌离子电池在高功率密度下的使用寿命和机械稳定性，这对水系锌基电池的未来发展具有重要意义。本研究中，实现了高可逆性负极的优化，通过原位手段在电极表面处进行界面结构设计和组分优化，以使锌离子电池在高功率运行时实现高可逆稳定性工作。

266-001 复合微纳颗粒原位析出规律及在固体氧化物电解池阴极中的应用

葛奔

[1] 中国矿业大学（北京）

摘要：固体氧化物电解池(SOECs)是一种高效环境友好的能量转换装置。因高效、灵活、规模成本低等特点，在解决可再生能源规模化电解水制氢工程技术难题上，SOEC具有突出的应用优势及广泛的应用前景。由于所处的工作环境苛刻，SOEC 阴极对选材的要求高，是制约 SOEC 整体技术发展的关键瓶颈。与传统的 Ni-YSZ 金属陶瓷氢电极反应活性位点局限于金属-氧化物-气体的三相界线相比，具有离子-电子混合电导的钙钛矿阴极可将催化反应扩展到钙钛矿氧化物颗粒与气体的两相界面进行。此外，近些年的研究表明，很多含过渡金属元素的钙钛矿材料在还原性气氛下会析出较稳定的微纳金属相，从而使电极反应活性区进一步得到升维拓展。这是钙钛矿材料应用于SOEC阴极表现出比传统Ni-YSZ材料更为优异的电化学性能的至关重要的原因之一。 本报告重点介绍了课题组关于 SOEC 钙钛矿阴极材料的近期研究进展。通过控制 B 位过渡族元素及 A 位元素原位微纳颗粒原位析出在钙钛矿材料表面构建了异质结构，并研究其对电解电极反应催化性能的影响。与传统 SOEC 电极相比，改性后的电极在水电解及水二氧化碳共电解性能方面都表现出了更高的催化活性和稳定性。研究结果说明对阴极过渡金属微纳颗粒原位析出的调控是未来开发高性能SOEC 阴极材料的一个非常有前景的技术研究方向。

关键词：固体氧化物电解池;阴极;微纳颗粒;原位析出

266-003 硅热还原法制备金属硼化物及无定形硼微纳米粉体

张锦化*，柯昌明，王景然，熊思，李萌芮，秦智，庞吉宏

[1] 武汉科技大学 省部共建耐火材料与冶金国家重点实验室，湖北武汉，430081

*Email: zhangjinhua@wust.edu.cn

摘要：金属硼化物及无定形硼粉是国防、军工、航空航天及核工业领域急需的关键物质和原材料，是关系国家安全的重要战略物质。目前工业上主要采用碳热或镁热还原法制备硼及硼化物粉体，存在反应温度高、副产物需要酸洗分离，部分副产物难以有效分离等问题。针对上述问题，基于硅热还原反应，提出在 Si-B2O3、Si-B2O3-MO2 反应体系中，引入碱金属氧化物 R2O，采用熔盐参与的硅热还原法制备金属硼化物及无定形硼微纳米粉体。通过该方法在 1100℃条件下即制得了晶体尺寸可控的 TiB2、ZrB2、HfB2 微纳米陶瓷粉体，在 900℃条件下即制得了粒径 200~400nm 的球形无定形硼粉。引入的 R2O 吸收硅热还原反应的副产物 SiO2，并将其转变为水溶性的 R2O·nSiO2，实现无定形硼粉、金属硼化物的绿色分离。反应副产物 R2O·nSiO2 水溶液是重要的工业原料，可以直接回收利用。该方法为金属硼化物、碳化物、氮化物等非氧化物陶瓷微纳米粉体的制备提供了新的思路。

关键词：硼化物;无定形硼;硅热还原法;微纳米粉体

266-004 超重力法快速绿色可控合成高质量 MOF-74

石欣冉[1,2]，王洁欣[1,2*]

[1]北京化工大学有机无机复合材料国家重点实验室，北京 100029

[2]北京化工大学超重力工程技术研究中心，北京 100029

*Email: wangjx@mail.buct.edu.cn

摘要：金属有机框架（MOFs）是一类新兴的晶体材料，由有机配体和无机构建单元（金属离子或团簇）构成，已被广泛应用于催化、电化学、生物化学、吸附等多个领域[1]。MOF-74 或 M2(dhtp)（M = 金属离子，dhtp = 2,5-二羟基对苯二甲酸）作为一种典型的金属有机框架材料，因其丰富的不饱和金属位点而备受关注[2]。然而，传统合成过程中大量使用有机溶剂所造成的环境和经济限制阻碍了它们的工业应用[3-4]。虽然水作为一种绿色溶剂被认为是最佳候选溶剂，但水基 MOF 通常结晶度差、合成时间长、粒度难以控制。超重力技术作为一种高效的过程强化技术，可显著强化反应物的微观混合和传质过程，大大缩短反应时间，加速成核过程[5]。 鉴于此，本工作提出了一种水相合成策略，基于旋转填料床（RPB），利用超重力技术快速绿色合成粒径可控的高质量 MOF-74-Co。与传统釜式法相比，超重力法所得 MOF-74 材料粒径更小、更均匀、结晶度更高和比表面积更大。进一步采用醋酸作为调制剂，所得 MOF-74-Co 在迄今为止的文献报道中具有最高的比表面积（1599 m2 g-1），同时还具有高的时空产率（293 kg m-3 day-1）。此外，该方法还被成功应用于高质量的 MOF-74-Zn 和 MOF-74-Ni 的制备，证明了该策略的通用性。与大尺寸样品相比，小尺寸 MOF-74-Co-78 nm 表现出更快的吸附速率和更高的 CO2 饱和吸附容量（298 mg g-1）。上述工作不仅推动了 MOF 绿色合成领域的发展，而且为高效吸附 CO2 材料的宏量制备提供了新策略。

关键词：MOF-74;超重力技术;可控尺寸;绿色合成;二氧化碳吸附

266-005 骨架增强制备硅气凝胶工艺优化

马龙，刘贺峻，朱彩霞，姜海波*，李春忠*

华东理工大学材料科学与工程学院-上海多级结构纳米材料工程技术研究中心，上海市徐汇区梅陇路 130 号，200237

*jianghaibo@ecust.edu.cn

摘要：二氧化硅气凝胶是一种主要由溶胶-凝胶法制成的，高度多孔的材料，通常采用常压干燥或者超临界干燥等方式脱去空隙内水分后获得，其内部可以保证三维网状结构的连续性，固体相和孔隙结构都可以达到纳米量级。该材料因其高孔隙率、低导热系数、低折射率、大孔容、大比表面积等特点而引起国内外的关注，广泛应用于建筑、工业、纺织品、新能源、航空航天等领域，是最具潜力的保温隔热材料。传统的二氧化硅气凝胶制备方法，例如溶剂置换法以及超临界干燥法，面临成本高，有污染等问题，从而限制其应用领域。本文将使用撞击流反应器制备高强度骨架的硅凝胶，再结合骨架增强法以及常压干燥法制备大孔容二氧化硅气凝胶，旨在低成本，无污染的生产大孔容二氧化硅气凝胶，并通过改性扩大硅气凝胶的应用领域。具体工作内容如下： （1）利用计算流体力学（CFD）软件结合实际实验，探究搅拌反应釜内流场变化对持续进料的分散均匀程度的影响。结果表明，当加料点高度处于液面时，搅拌桨高度为搅拌反应釜的 T/5 时，搅拌桨转速为 600 rpm 时，搅拌反应釜内持续进料的传质能力大大提升，单位时间内进料可以在 5 s 内均匀分散在搅拌反应釜内，得到的二氧化硅气凝胶的孔容为 2.02 cm3/g，搅拌工况经过优化，孔容大小最大可提升 20 %。 （2）在最佳的搅拌工况下，使用撞击流反应器制备出孔隙均匀的高强度硅凝胶骨架，结合骨架增强法生产出大孔容高孔隙率的二氧化硅气凝胶。当碱液浓度为 0.15 mol/L，骨架增强时间为 17 min 以及骨架增强温度为 70 ℃时，获得的二氧化硅气凝胶具有高孔容（2.31 cm3/g），低堆积密度（0.100 g/cm3），低导热率（0.1003 W/(m·K)）等特点，且颗粒团聚少，分散均匀。

关键词：二氧化硅气凝胶；计算流体力学（CFD）；骨架增强；常压干燥

高温气冷堆放射性粉尘源项研究进展

谢 锋

清华大学核能与新能源技术研究院，先进核能技术协同创新中心，先进反应堆工程与安全教育部重点实验室，北京 100084

摘要：高温气冷堆/超高温气冷堆是国际上公认的第四代先进核能系统堆型之一。2023年12月，全球首座球床模块式高温气冷堆示范电站（HTR-PM）实现商业运行，标志着第四代先进核电技术取得重要进展。高温气冷堆最突出的两个特点是固有安全性和高温，使得其在高效发电、工艺热应用、核能制氢等领域具有广阔的发展空间。然而，高温气冷堆在辐射安全方面也面临两个重要挑战，即堆芯“热点”和一回路放射性粉尘。本文基于10MW高温气冷实验堆（HTR-10），针对放射性粉尘源项开展研究，介绍取得的研究进展和下一步工作。

球床式高温气冷堆采用大量石墨材料，比如反射层、燃料元件基体材料等。球形燃料元件在堆芯流动，相互之间及其与管道、设备等摩擦、磨损，会产生大量石墨粉尘。这些石墨粉尘为堆芯及一回路裂变产物和活化产物提供了一条平行于氦气冷却剂的传输途径。[2]关于石墨粉尘的产生、迁移、沉降等行为已经有不少工作，然而，关于粉尘上放射性的来源及其核素与石墨粉尘的相互作用研究相对较少。我们的工作集中在HTR-10放射性石墨粉尘基本特征的测量、一回路典型核素的化学形态、核素与石墨材料的相互作用。我们建立HTR-10一回路放射性粉尘实验系统，测定放射性石墨粉尘特征参数，包括粉尘浓度、粒径分布、携带核素类型等。核素的化学形态极大地影响其与石墨等材料的相互作用。我们提出一种多元多相体系核素化学形态及反应研究方法，发展2维投影相图，确定典型核素在HTR-10一回路中的主要化学形态。进而基于统计力学和第一性原理方法，计算核素不同化学形态在石墨表面上的吸附能和吸附份额。

获得的结果为我国高温气冷堆辐射安全评价提供了重要研究基础，也推动了国际上高温气冷堆放射性粉尘源项研究的深入开展。

主题报告 压水堆核电站一二回路汽泡行为计算研究

胡广

摘要：本报告对压水堆核电站圆形通道过冷流动沸腾的汽泡行为进行了深入研究，重点评估了壁面沸腾模型与群平衡模型（PBM）在高压工况下的耦合计算准确性。通过对两种典型高压工况（压力为 6.77 MPa、15.70 MPa）及 DEBORA 实验工况的分析，研究评估了五种成核点密度模型及多种聚并与破碎核函数组合的表现。结果表明，Kocamustafaogullari 和 Ishii (1983) 与 Basu 等(2002)提出的成核点密度模型在特定应用中的预测精度较高。特别是，在汽泡尺寸分布和截面含汽率的计算中，采用 Guo 等(2016)的聚并核函数与 Luo 和 Svendsen (1996)的破碎核函数的组合表现最为优异。研究结果为压水堆核电站一二回路过冷流动沸腾的数值模拟提供了有效的模型选择借鉴，对压水堆核电站一二回路等系统中的高压工况汽液两相相间行为的预测具有重要意义。

266-012 基于金属磷化物的柔性自供电气体传感器

王晓 [1,*]

济南大学物理科学与技术学院，济南市南辛庄西路 336 号， 250022

*Email: sps_wangx@ujn.edu.cn

摘要：柔性可穿戴式气体传感器在空气污染物检测、医疗保健监测以及爆炸性和可燃性气体预警等多个领域都有着巨大的需求。这些传感器始终要求检测准确、功耗低、巡航时间长和自供电工作。基于此，作者通过集成气体传感器、能源转化与存储器件和智能控制模块，构建了集成化气敏传感微系统，实现了微系统的自供电、信号自发射、实时检测等功能。此外，系统研究了磷化钴、磷化锡等磷化物材料在自供电气敏传感系统中的应用，揭示了其表面气体吸附及 NO2 气敏响应机制。随后，作者以锌-空气电池为气体传感器平台，将 Zn 与强氧化性气体（如 NO2）结合，构建了能够根据 NO2 浓度输出可变电压的锌-空气电池基气体传感器。实现了电池与气敏传感器的有机结合，摆脱了对机械振动、太阳能等外部工作环境的依赖，提高了传感器的环境适应性。

关键词：气体传感

266-006 高温气冷堆氦气透平内石墨粉尘运动行为分析

王晓钟，孙琦，张梓璇，彭威*

清华大学 核能与新能源技术研究院，北京 100084；

*Email: pengwei@tsinghua.edu.cn

摘要：高温气冷堆具有出口温度高，固有安全性等优点，对实现国家双碳战略具有重要意义。目前的高温气冷堆采用蒸汽透平循环，发电效率只有40%左右，并未将高温气冷堆的特点完全发挥出来。如果进一步提高出口温度并采用氦气透平直接循环，其发电效率可以进一步提高到50%左右。其中，氦气透平是高温气冷堆堆直接循环系统的核心部件，燃料球磨损产生的放射性石墨粉尘颗粒会进入到氦气透平中并沉积在氦气透平的叶片上，这将对氦气透平的性能造成影响，同时也给氦气透平的维护造成挑战。本文采用数值模拟的方法研究了石墨颗粒在氦气中的运动行为及其与叶片之间的相互作用，考虑了颗粒的反弹、粘附和重悬浮。在此基础上，本文进一步采用动网格的方法，研究了石墨粉尘沉积对氦气透平冷却性能的影响。研究结果表明：颗粒的反弹和重悬浮会对石墨粉尘颗粒在氦气透平中的沉积分布产生明显的影响；在同时考虑颗粒的粘附和反弹作用下，随着颗粒粒径增大，颗粒的沉积率先增大后减少。吹风比的作用相对复杂，不同的粒径存在不同的作用机理。而长时间的沉积结果表明：曳力和粘附力的相对大小是影响颗粒沉积高度的主要因素；小颗粒由于与壁面的粘附作用更突出，因此可以堆积更高的高度；其次颗粒沉积对不同位置的冷却性能存在不同的影响，但从总体上看，这种影响有限。

关键词：高温气冷堆;氦气透平;颗粒;沉积;重悬浮

266-011 颗粒复配制备高机械强度和高孔隙率的氧化铝载体

吴凡[1]，王嘉[1]，乔婷[2]，王嗣强[2]，季顺迎[2]，陆安慧[1*]

[1]大连理工大学，精细化工国家重点实验室，大连，116024

[2]大连理工大学，力学与航空航天学院，大连，116024

*Email: anhuilu@dlut.edu.cn

摘要：多孔氧化铝作为工业催化剂的重要载体，是支撑石油化工和化学工业高质量发展的基石。在基础研究阶段，氧化铝载体通常以粉末形式存在，而在实际应用中，需要将其加工为具有适宜形状、高机械强度和丰富孔隙结构的毫米级颗粒，以满足工业反应器的要求。然而，如何在保持高机械强度的同时提高孔隙率和孔道连通性，始终是多孔氧化铝载体开发的难点与挑战。 针对上述问题，本工作提出了一种基于粉体颗粒复配的挤出成型策略。我们利用颗粒形状、流动性和胶溶性等粉体性质的差异，将不同类型的颗粒进行复配并挤出成型制备氧化铝载体。研究发现，具有高长径比的薄片状和棒状氧化铝颗粒因流动性差，容易堆积形成多孔骨架。而类球状的拟薄水铝石则具有良好的流动性和胶溶性，易于分散在氧化铝骨架搭接的界面处，增加接触面积并提供粘结力。当类球状拟薄水铝石与片状氧化铝以 3:1 的质量比复配时，挤出物的机械强度可达 183 N·cm-1，孔隙率为 62.24%，相比于使用单一类球状拟薄水铝石成型，分别提高了 46.4%和 4.5%。多尺度表征和可视化结果表明，复配挤出物具有丰富且连通的孔隙结构。结合离散元数值模拟，我们发现复配挤出物在孔隙率和颗粒平均配位数上均明显优于单一粉末挤出物。这一结果揭示了粉末性质与成型体结构之间的内在关联，为载体力学性能和孔隙结构的定向调控与设计提供了重要的理论依据和实践参考，具有广泛的应用前景。

关键词：氧化铝;成型;机械强度;孔隙率;复配

主题报告 管束换热器内颗粒沉积-再悬浮的流固耦合研究

孙琦[1]

[1]清华大学核能与新能源技术研究院，先进反应堆工程与安全教育部重点实验室，北京，100084

摘要：高温气冷堆是一种具备固有安全性的第四代先进核反应堆。在其运行过程中，石墨燃料球由于摩擦及事故条件下的化学反应可能会生成微细的石墨粉尘，这些粉尘可能携带放射性物质。随着流体流动，这些放射性石墨粉尘在反应堆的一回路中会经历沉积、扩散和凝并等过程，给设备的维护和检修带来挑战。作为能量传递的关键枢纽，中间换热器的复杂结构和表面温度梯度使得粉尘颗粒容易在此区域发生沉积。粉尘的长期沉积会改变壁面的轮廓结构，从而影响换热器的流动压降和传热性能。因此，研究石墨粉尘在高温气冷堆换热器中沉积的流固耦合行为具有重要意义。

本研究聚焦于高温堆工况下粉尘颗粒的气动力特性、粘附力特性以及其沉积-再悬浮行为。通过采用动网格技术进行流固耦合分析，探讨了颗粒与壁面间的相互作用及其对热阻的影响，揭示了颗粒连续沉积和间断再悬浮耦合作用下，管束壁面轮廓演化特征。基于理论分析和数值模拟，建立了颗粒沉积的预测模型，并研究了沉积特性、沉积形态及其对传热性能的影响。研究结果显示，颗粒沉积分数随着无量纲弛豫时间的增加呈现先增后减的趋势；随着沉积高度的增加，间断再悬浮逐渐占据主导地位，换热器壁面上颗粒沉积高度最终趋于动态平衡，粉尘颗粒的长期沉积对换热器性能的影响较为有限。

特邀报告：水系电池中的界面结构设计实现长循环稳定性

王成刚[1,*]，张习习[1]，李传琳[1]，李娜[1]，徐锡金[1,*]

[1]济南大学，山东省济南市南辛庄西路336号，250022

*Email: sps_xuxj@ujn.edu.cn

摘要：锂电和铅酸仍是当下电化学储能市场的主力。然而，锂资源的匮乏和电池安全性问题仍然是一个巨大的挑战；铅酸电池的环境污染问题也亟待解决。水系电池具有离子扩散速率快和安全系数高等优点，因此绿色环保、无污染的无铅水系二次储能电池的发展被视为是理想的储能电池之一。此外，二次水系储能电池的高安全性和高倍率性能使其可以用于新能源汽车的动力电池，以及军用潜艇等军用设备的动力电池。然而水系电解液对电极具有很强的侵蚀作用，导致循环过程中容量衰减迅速。因此，通过构筑稳定的电极/电解液界面以有效抑制界面副反应，进而提高电极稳定性。基于此，我们实现了水系质子电池、水系锌电池的长循环稳定性。通过原位共形包覆有效抑制了水系质子电池负极材料的溶解，同时促进了水合质子的去溶剂化过程，极大地提高了水系质子电池的循环稳定性。通过电解液工程构建稳定的电极/电解液界面，有效抑制了锌金属负极电极电解液界面处的副反应，极大的提高了锌负极的循环稳定性。

关键词：水系质子电池；界面副反应；电解液工程

口头报告：连续液滴撞击加热壁面铺展飞溅行为实验研究

马越 [1]

[1] 清华大学核能与新能源技术研究院，北京 100084

Email yue-ma22@mails.tsinghua.edu.cn

摘要：目前，喷雾液滴碰壁现象在工业上非常常见，广泛应用于动力机械、材料学、农业、化工等领域。实验研究了不同温度和不同韦伯数（Tw = 40-400℃，Wed = 30-1000）条件下连续液滴撞击加热壁面的铺展和飞溅行为。利用高速摄影技术，对陶瓷压电液滴发生器产生的液滴对加热壁面的连续撞击进行了实验观察。在此基础上，将液滴在不同条件下撞击壁面的行为分为扩散、弹跳、冠状飞溅和完全飞溅，并给出了液滴扩散的相图。此外，根据液滴扩散的实验图像给出了不同时间的铺展因子和铺平因子，并对液滴扩散参数随韦伯数和壁面温度的变化进行了理论分析和数学拟合。得到了液滴在不同时间飞溅产生的二次液滴的数量、大小和速度，并分析了液滴飞溅参数与韦伯数和壁面温度的关系。本文可为液滴连续撞击加热壁面的工业应用提供参考。

微纳磁性粉体密封理论与实验研究

乔雅靖[1]，李德才[2,*]，

[1]北京交通大学，机械与电子控制工程学院，北京 100044

[2]清华大学，摩擦学国家重点实验室，北京 100084

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

摘要：磁性介质密封是将磁性密封介质加入由高性能的永磁体、导磁性良好的轴和极靴所构成的导磁回路中，利用其对磁场的响应特性，在磁场梯度的作用下，形成数个具备耐压能力的“O”型圈，从而发挥密封作用。微纳磁性粉体密封作为一种新型磁性介质密封具有更强的耐压能力以及更好的耐高低温特性。本文对磁性粉体密封的耐压性能进行了理论分析，探究了磁性粉体密封的压力传递机理和泄漏规律。通过使用有限元仿真软件进行磁场、流场的仿真，结合磁性粉体密封理论，对磁粉密封装置的具体参数进行优化。通过实验探究不同初始压力及不同旋转轴转速与被密封介质泄漏速度之间的关系以及磁性粉体密封装置的密封性能。本研究为微纳磁性粉体密封的实际工程应用给出理论指导。

关键词：密封;微纳;磁性粉体

沉积层壁面剪切流内椭球形颗粒曳力特性研究

张梓璇[1]，孙琦[1]，王晓钟[1]，王辉[2],彭威[1,*]

[1]清华大学核能与新能源技术研究院，先进反应堆工程与安全教育部重点实验室，北京，100084

[2]中国核电工程有限公司，北京，100084

* Email: pengwei@tsinghua.edu.cn

摘要：模块化高温气冷堆是第四代先进核能系统的主要堆型之一，采用氦气冷却，石墨慢化，全陶瓷包覆颗粒燃料元件。在高温气冷堆运行的过程中，石墨材料之间的摩擦会产生不规则的石墨粉尘颗粒，随氦气在反应堆一回路内流动并沉积在设备表面，对系统性能及维护检修带来一定影响。因此开展高温气冷堆内石墨粉尘运动特性研究，对反应堆运行具有重要意义，而气动曳力是影响颗粒运动最主要的因素。目前针对均匀来流中球形颗粒受到气流的气动曳力已有大量学者开展了研究，并得到了对应的计算模型。而高温气冷堆中石墨粉尘颗粒通常为不规则形状，且贴近壁面边界层内颗粒的运动行为对其沉积、再悬浮特性具有重要影响。 本文通过模拟反应堆沉积层壁面，采用计算流体力学分析了近壁面剪切流内椭球形颗粒气动曳力的产生机理，并对颗粒-壁面距离、长短半轴之比、雷诺数与来流角等影响因素进行了研究，对比分析了不同工况下曳力系数的变化。研究结果表明：颗粒雷诺数和来流角对曳力系数影响较为显著，随着颗粒雷诺数增加，曳力系数降低；随着来流角增加，曳力系数增大。最后采用最小二乘法拟合了沉积层壁面剪切流内曳力系数的表达式，与现有经验关联式进行了对比，可为高温气冷堆中近壁面颗粒运动特性研究提供参考。

关键词：高温气冷堆;石墨粉尘;非球形颗粒;气动曳力

口头报告：电解质添加剂调控界面化学实现高可逆性锌负极

李传琳[1]，王成刚[1]，张习习[1]，李娜[1]，徐锡金[1,*]

[1]济南大学，山东省济南市南辛庄西路 336 号，250024

*Email: sps_xuxj@ujn.edu.cn

摘要：近年来，水系电池作为一种有前途的可再生能源存储系统越来越受到人们关注。锌离子电池（ZIBs）因其高理论容量（820mAh g-1 和 5855mAh cm-3）和理想的电化学氧化还原电位（-0.762V vs. SHE）具有巨大的商业化潜力。然而，ZIBs 的长期运行受到 Zn 负极界面上副反应的阻碍，限制其大规模应用。在镀锌过程中，较低电位下的 H2O 分解会导致氢演化反应、局部 pH 升高、副产物形成和表面钝化。Zn 表面尖端效应导致电场分布不均匀，进一步导致枝晶生长猖獗，增加内部短路的风险。这些挑战显着影响 ZIBs 的库仑效率和长期循环性能，进一步影响其商业化。诱导添加剂在 Zn 表面形成不同的吸附相或改变 Zn2+离子的溶剂化结构在最近的研究中很受欢迎。因此，本研究中，引入含有多种极性基团和强烈分子间相互作用的添加剂，在内亥姆霍兹平面中形成竞争性吸附界面，以阻止 H2O 的分解。同时极性添加剂在锌表面通过强吸附作用或自组装形成保护层，以调节 Zn2+的电镀/剥离行为，实现均匀且稳定的锌沉积。此外，组装的 Zn-I2 全电池表现出卓越的循环稳定性和容量保持能力。

LEDs 用新型发光材料的制备及其光电性能研究

吴红娥 [1*]
安徽工程大学化学与环境工程学院，安徽 芜湖，241000
*Email: hongewu@ahpu.edu.cn

摘要：暖白色发光二极管 (W-LEDs) 可以改善我们的视觉、身体和心理健康 1, 2，是照明领域（尤其是室内照明）的主导产品。因此，荧光粉作为荧光粉转换型白光 LEDs 的发光核心，在调节 LEDs 器件的发光光谱方面起着至关重要的作用 3。目前，室内 W-LEDs 大多采用蓝光 LEDs 芯片激发荧光粉材料所得。但不少专家认为，当色温（CCT）高于 7000 K 时，强蓝光对人眼视网膜有害，尤其对青少年。在健康照明的新理念下，考虑光源对人体的物理影响，紫外光（UV）激发的荧光材料已成为科学照明的一个重要研究领域。本文采用成本低、环境友好的合成方法制备出 LEDs 用的新型发光材料。

关键词：W-LEDs，健康照明，新型发光材料

转角1T-TaS_2体系电荷密度波的调控研究

李志琴[1]，刘佳[1]，刘力[1]，李敏新[1]，李惠[1]

[1]安徽大学物质科学与信息技术研究院量子材料与物理研究所，合肥 230601

* Q22201085@stu.ahu.edu.cn

摘要：电荷密度波是材料物理中的重要物性之一，对理解材料中的强关联电子相互作用具有重要意义[1]。近年来，通过化学掺杂[2]和外部电场[3-4]等调控手段，实现了对电荷密度波的有效调制，发现了一些新奇的物理特性，从而引起人们广泛的研究兴趣。然而，由于化学掺杂等手段通常会引起材料晶体结构的损伤，使得精确调控比较困难。因此，发展新型调控手段，实现对电荷密度波的精确调制成为目前材料物理研究领域的热点和难点之一。

在本工作中，我们采用人工堆叠技术，成功制备了不同转角的 1T-TaS_2同质结构。电输运测试结果表明，转角能够显著调控 1T-TaS_2电荷密度波的相变温度及电阻滞回线面积。如图 1 所示，随转角增大，电荷密度波的相变温度及电阻滞回线面积呈现先减小后增大的趋势，这一变化可能源于莫尔周期的引入及面内畸变导致的电荷密度重新分布。我们的研究为深入理解和调控电荷密度波特性提供了新的视角，也为基于转角 1T-TaS_2的潜在器件应用提供了参考。

关键词：转角；电荷密度波调控；层间耦合

二维范德瓦尔斯反铁磁材料$MnPX_3$(X=S、Se)中的磁有序研究

韩 慧

物质科学与信息技术研究院，安徽大学，合肥，安徽，230601

huihan@ahu.edu.cn

摘要：二维范德瓦尔斯反铁磁材料由于超大巨磁阻效应、优异的光响应特性及激子-磁振子耦合效应等独特的物理性质及在自旋电子器件的潜在应用价值备受关注和研究。其中 MnPX3 (X=S、Se) 由于多种磁交换作用的共存和竞争导致磁基态较为复杂，在奈尔温度以下不仅表现出反铁磁性还表现出铁磁性。我们通过系统的磁学特性表征与微磁模拟分析，证实了 MnPS3 丰富的磁相图特性，并利用非磁 Se 元素掺杂实现对其磁学特性的调制，包括：

1）在反铁磁材料 MnPS3 中发现，在 Néel 温度以下，当温度低于约 34 K，外加磁场低于约 2k Oe 时，MnPS3 表现出铁磁有序行为，反铁磁并未消失依旧存在。基于微磁模型拟合，提出了一个可能的自旋磁矩随外磁场重定向的演化图像；

2）通过用非磁元素 Se 取代硫 S 原子，发现了在掺杂样品 MnPS3(1-x)Se3x 中存在混合反铁磁态这一有趣的物理现象；

关键词：二维磁性材料；元素掺杂；微磁模拟

口头报告 基于 15 冠醚 5 与锂盐络合的长寿命 PEO 基固态电池的制备与性能研究

李世佳[1]

[1]中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所

*Email: sjli@mail.ustc.edu.cn

摘要：聚环氧乙烷（PEO）基固态电解质因其良好的机械性能、易于加工和与锂金属的良好兼容性而被广泛研究。然而，其离子电导率低、电化学稳定性窗口窄和循环稳定性差等问题仍未完全得到解决。在我们的工作中，我们通过简单的溶液浇铸法制备了 15 冠醚 5 和高浓度锂盐共掺杂的 PEO 基固态电解质。该电解质在 60℃时的离子电导率高达 3.14×10-3 S cm-1，电化学稳定窗口超过 5.2 V。以该电解质组装的 Li//Li 对称电池在 0.1 mA cm-2 的电流密度下可稳定循环超过 850 小时，LiFePO4//Li 电池在 2C 倍率下的初始放电容量为 144 mA h g-1，经过 800 次循环后容量保持率为 85%。通过优化电解质的组分，Li//Li 对称电池的循环稳定性可长达 2200 小时，LiFePO4//Li 电池在 2C 倍率下可循环 2000 次，在 5C 高倍率下可循环 4800 次。此外，所制备的固态电解质与高压正极电极匹配良好，显示出其在高能量密度锂金属电池中的应用潜力。

气相合成高熵超微颗粒及其应用

墙报报告：事故工况下颗粒物水洗实验研究

罗蓝韬 [1]

[1] 清华大学核能与新能源技术研究院，北京 100084

Email luolt22@mails.tsinghua.edu.cn

摘要：在反应堆发生事故时，核岛内部可能会产生放射性气溶胶，为了避免气溶胶直接释放到大气环境中。主流措施之一是将气溶胶通入抑压水池中，利用气溶胶与水池的相互作用来达到净化气体的目的。为满足抑压水池水洗作用和蒸汽发生器传热管破裂事故工况下源项精确评估的要求，对不同压力及温度液池内裂变产物的滞留及沸腾再夹带进行量化，确定相应的计算评估模型。本文主要通过实验探究水洗过程中不同入口流量、蒸汽份额、方向等因素对于水洗效率的影响。同时对于不同压力、浓度的沸腾水池再夹带行为的气溶胶出口浓度进行了量化。本研究为事故工况下气溶胶水洗及沸腾再夹带行为的实际工程应用给出指导。

关键词：事故工况、气溶胶、过滤

航空器座舱内飞沫流动研究

刘潜峰 [1]

[1] 清华大学核能与新能源技术研究院，北京 100084

Email liuqianfeng@tsinghua.edu.cn

摘要：呼吸道传染病对人类健康、医疗系统和社会经济产生重大影响。航空旅行中的疾病传播是呼吸道传染病全球传播的重要途径，因此针对民航飞机上的呼吸道传染病毒研究具有重要意义。本研究基于 PBM 模型，对 A320 客舱内感染乘客持续呼吸引起的气溶胶分布进行了研究。研究了不同空调风速、不同呼吸速度、不同位置和不同感染人数下的气溶胶体积分数分布。结果表明：客舱两侧乘客受影响最大；随着空调转速和呼吸速度的增加，气溶胶的扩散和传播得到改善。这些结果有助于建立完整的液滴产生、传播和控制的数学模型。

第 29 分会场：微纳气泡，为中国绿色高质量发展提供新质生产力

2023-2024微纳米气泡国内外研究进展和未来发展趋势分析

胡钧

上海大学

Email: hujun@sinap.ac.cn

摘要：微纳米气泡的发展非常迅速，报告中将回顾该领域的前沿研究热点，如纳米气泡的制备、新的性质，国内外出现的新的微纳米气泡研究领域。同时，将预测微纳米气泡研究和应用的未来方向。

氢分子的医用基础与临床研究及其应用

秦树存[1、2、*]

[1]山东第一医科大学（山东省医学科学院）临床与基础医学院，山东济南，250117

[2]山东第一医科大学第二附属医院、山东第一医科大学泰山氢生物医学研究院，山东泰安，271016

*Email: scqin@sdfmu.edu.cn

摘要正文：早在1975年美国学者就通过高压氢舱的动物实验发现了氢分子的生物医学效应（Science 1975），2007年日本学者则通过给予低浓度氢气的动物和体外实验提出了氢分子选择性清除有害自由基作用机制假说（Nature Medicine 2007），这使得存在百年的自由基生物医学理论和实践柳暗花明，从而在全球掀起了氢分子医用基础和临床研究热潮。随着愈益增多的疾病模型动物实验和人群验证试验论文的发表和相应技术方法专利的获得授权，氢分子生物医学研究开始走出实验室向临床应用迈进。迄今已经有千篇以上的氢分子医用基础和临床研究的英文论文发表，涉及人体各大系统和器官的数十种疾病的氢分子防治作用。首先，在营养代谢异常及其相关疾病、辐射损伤及其相关疾病、缺血和再灌注损伤及其相关疾病、皮肤损伤及其相关疾病等领域都分别取得了系列研究成果，比如“氢分子对多器官组织氧化应激相关损伤的保护作用”的研究成果最早在2014年即获得山东省科学技术进步奖。第二，在氢分子效应机制的基础研究方面不断有学者提出新的科学假说和提供相应的研究数据，比如2022年中国学者提出的铁卟啉氢分子假说获得国内外同行专家的高度评价。第三，为了满足高效防治效果和精准医学的需要，包括氢分子微纳米颗粒等各种新型氢分子供体的研发方兴未艾，近年来相应的高质量文章亦纷纷发表。第四，2016年以来，氢医学作为新兴的临床应用领域也取得了长足的进展，比如人脑缺血损害、慢性阻塞性肺气肿和新冠肺炎等的辅助疗法。第五，伴随氢分子医学效应认知不断深化，氢分子已经成为新兴的健康应用手段，受到社会重视。但某些产品的夸大和虚假宣传屡禁不止，市场产品亦是鱼目混珠，这些乱象亟需国家监管部门进行依法依规适时治理，而制定相应的行业和国家标准已成当务之急。

关键词：氢分子；医用基础；临床研究；应用与市场

参考文献

1) Ohsawa I, Ishikawa M, Takahashi K, Watanabe M, Nishimaki K, Yamagata K, Katsura K, Katayama Y, Asoh S, Ohta S. Hydrogen acts as a therapeutic antioxidant by selectively reducing cytotoxic oxygen radicals. Nat Med. 2007 Jun;13(6):688-94.

2) Qin S. Role of Hydrogen in Atherosclerotic Disease: From Bench to Bedside. Curr Pharm Des. 2021;27(5):713-722.

3) Liu B, Zhao M, Xue J, Gu Q, Zhang X, Qin S. Hydrogen influences HDL-associated enzymes and reduces oxidized phospholipids levels in rats fed with a high-fat diet. Life Sci. 2021 Feb 15;267:118945.

4) Chen W, Zhang HT, Qin SC. Neuroprotective Effects of Molecular Hydrogen: A Critical Review. Neurosci Bull. 2021 Mar;37(3):389-404.

5) Tao G, Song G, Qin S. Molecular hydrogen: current knowledge on mechanism in alleviating free radical damage and diseases. Acta Biochim Biophys Sin (Shanghai). 2019 Dec 13;51(12):1189-1197.

6) Liu B, Xie Y, Chen J, Xue J, Zhang X, Zhao M, Jia X, Wang Y, Qin S. J Protective Effect of Molecular Hydrogen Following Different Routes of Administration on D-Galactose-Induced Aging Mice. Inflamm Res. 2021 Oct 27;14:5541-5550.

7) 赵敏，秦树存．氢气生物医学效应的发现，研究与应用．山东第一医科大学(山东省医学科学院)学报 2021，42(5)：340-346.

8) Tao G, Zhang G, Chen W, Yang C, Xue Y, Song G, Qin S. A randomized, placebo-controlled clinical trial of hydrogen/oxygen inhalation for non-alcoholic fatty liver disease. J Cell Mol Med. 2022 Jul;26(14):4113-4123.

9) Xue J, Zhao M, Liu Y, Jia X, Zhang X, Gu Q, Xie Y, Qin S, Liu B. Hydrogen inhalation ameliorates hepatic inflammation and modulates gut microbiota in rats with high-fat diet-induced non-alcoholic fatty liver disease. Eur J Pharmacol. 2023 May 15;947:175698.

10) Tao G, Liu F, Jin Z, Liu B, Wang H, Li D, Tang W, Chen Y, He Q, **Qin S.** A strategy of local hydrogen capture and catalytic hydrogenation for enhanced therapy of chronic liver diseases. Theranostics. 2023 Apr 23;13(8):2455-2470.

11) Liu B, Lv P, Zhang X, Xia C, Liu X, Liu J, Xue J, He Q, **Qin S.** Zn-Fe primary battery-enabled controlled hydrogen release in stomach for improving insulin resistance in obesity-associated type 2 diabetes. Bioact Mater. 2023 Nov 17;33:242-250.

微液滴界面自发产生过氧化氢的动力学研究

王伟

南京大学化学化工学院，南京 210023，wei.wang@nju.edu.cn

摘要:双氧水作为重要的化工原料，在有机合成、消毒、微电子、能源等领域有着广泛的应用。目前工业上合成双氧水主要采用蒽醌氢化——氧化法，该方法需要使用氢气、氧气、蒽醌、钯催化剂和大量有机溶剂等，能耗高且会产生大量固液废弃污染物，不利于实现“碳达峰”和“碳中和”。2019年，斯坦福大学Richard Zare课题组意外发现了一种无需外界能量（如光或电）输入、且无需催化剂的双氧水合成新途径：微水液滴中水自发转化为双氧水。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。部分学者提出，这一双氧水自发形成过程可能发生在微水液滴的表面，而空气（或者油）——微水液滴界面的独特理化性质可能是产生这一独特现象的主要原因（比如界面上的强电场，水分子的定向排列，独特的酸碱性等）。解析单个微水液滴中双氧水自发产生的动力学，将有助于最终解开这一谜团。然而，受制于微水液滴快速蒸发、液滴快速融合等问题（存续时间通常只有几分钟且不稳定），实时测量单个微水液滴中双氧水自发产生的动力学仍然充满挑战。我们借助于先进的微纳加工技术，将微水液滴“锁”在微孔阵列芯片之中，成功获得了寿命长达1h的微水液滴，构筑了稳定的油——微水液滴界面，借助荧光成像技术实现了单个微水液滴中双氧水自发产生过程的动力学测量。通过动力学分析，该研究首次获得了单个微水液滴中双氧水自发产生的速率,提供了微水液滴中双氧水自发产生发生在油——微水液滴界面的证据。

关键词：微液滴；过氧化氢；动力学

参考文献

[1] **Kai Zhou+，Hua Su+, Jia Gao, Haoran Li, Shasha Liu, Xuannuo Yi, Zhibing Zhang*, Wei Wang*, Deciphering the kinetics of spontaneous generation of H2O2 in individual water microdroplets, J. Am. Chem. Soc., 2024, 146, 4, 2445-2451.**

报告人/墙报展示人简介：

王伟，2004 年和 2009 年分别从中国科学技术大学化学系获得理学学士和分析化学博士学位。2009-2013 在美国亚利桑那州立大学从事博士后研究。2013 年起任南京大学教授。先后获得国家优青和国家杰青项目资助，入选英国皇家化学会会士（FRSC）。曾获中国化学会青年化学奖（2017），中国颗粒学会青年颗粒学奖（2020），中国化学会电化学青年奖（2021），中国青年科技奖（2022）等学术奖励和荣誉。主要研究兴趣包括纳米电化学、单颗粒化学成像与测量、纳米气泡和纳米液滴等。

气液转变调控研究进展

楚化强

安徽工业大学

hqchust@163.com

摘要：气液转变调控在现代高效能源利用中至关重要，特别是微纳尺度现象更是影响深远。对微纳尺度气液行为的研究，有助于提升能源效率、系统可靠性和环保性能。在微纳尺度沸腾传热研究中，微观结构表面和纳米涂层表面展现独特传热特性，深入研究气泡行为能够优化冷却系统和热管理系统的性能，并提高多相流动和传热模型的仿真精度与预测准确性。在加热丝上的气泡行为研究中，观察和解析了马兰戈尼流效应、气泡射流现象、气泡合并和旋转现象。这些气泡动力学现象对局部传热特性有显著影响，深入理解这些现象可以显著提升传热效率和系统可靠性。本报告详细介绍了研究团队在上述领域的研究进展，结合系统的实验研究与数值模拟，深入探讨了微纳尺度气泡传热行为，提出若干优化策略和设计建议，并为实际应用提供了科学支撑和技术指导。

报告人/墙报展示人简介：

安徽工业大学教授、博士生导师，安徽省杰出青年基金获得者、安徽省“高水平导师”。入选全球前 2%顶尖科学家榜单、安徽省第八批战略性新兴产业技术领军人才、山东省德州市 C 类人才（省级领军人才）。主要从事多相流界面气泡/液滴动力学、低碳燃烧与能源利用、燃料催化合成研究。在 Chemical Engineering Journal、Combustion and Flame、Energy 等权威期刊上发表 SCI 论文 108 篇，H 指数 33，被引用 4000 余次，12 篇论文入选 ESI 高被引/热点论文，授权国家发明专利 11 项，主持国家/省部级项目 12 项，包括国家自然科学基金 4 项。先后任中国工程热物理学会传热传质青年委员会委员、全国青年燃烧学术会议程序委员会委员、全国分析与应用裂解学术会议理事、中国内燃机学会后处理技术分会委员。担任 Rare Metals、Energy & Environmental Materials、Carbon Neutraligy 等期刊青年编委。曾获宝钢优秀教师奖、省部级奖 6 项。指导学生获安徽省优秀硕士学位论文、全国大学生节能减排社会实践与科技竞赛一等奖 3 项、全国能源动力类专业百篇优秀本科毕业论文(设计)3 篇。

气泡界面传质过程的三维测量方法

尹俊连[1]，黄广源[1]，宋煜晨[1]，王德忠[1,*]

[1]上海交通大学位，上海市东川路 800 号，200240

*Email: jlyin@sjtu.edu.cn

摘要：高雷诺数条件下对气泡的传质系数的精确量化是深入了解气泡相间传质机理的迫切需要。对此，提出了根据质量守恒间接地量化跨气泡界面传质速率的思想，并开发了先进的三维SI-LIF 测量技术以及对应的重建算法。对测量方法开展了数值验证，结果表明k_l估算的总体不确定性小于 ±5%。基于上述技术，我们对单个氧气泡在各向均匀同性湍流场中的传质进行了测量，发现在湍流雷诺数在 0 到 1114 之间，气泡的相间传质系数k_l与背景湍流强度无关，且均与边界层近似的分析解接近。这表明在实验研究的参数范围内，气泡的近界面流动不受液相速度脉动的影响。

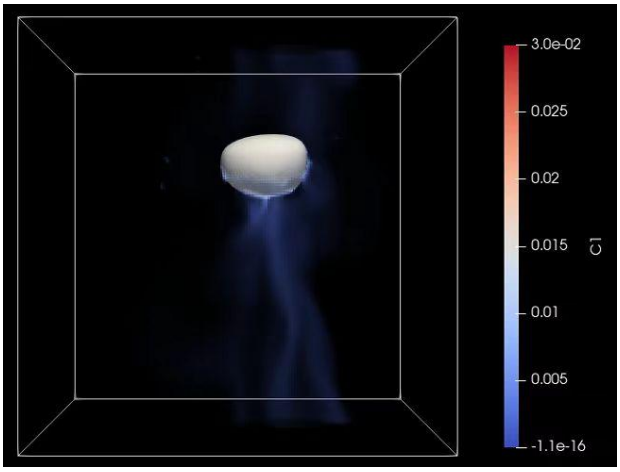


Fig. 1　Mass transfer measurement around the 3D bubble interface

关键词：气泡；传质；界面；测量

参考文献

[1] G. Huang, J. Yin,　Measurement of interfacial mass transfer of single bubbles rising in homogeneous turbulence .Chem. Eng. Sci., 2024, 288: 119757.

微米液滴在 X 射线诱导下转变为纳米气泡的相变过程

张立娟

中国科学院上海高等研究院

Email: zhanglijuan@sari.ac.cn

Abstract

To understand the theoretical and applied value of phase transition in perfluorocarbons (PFCs) droplets below 10 μm, leading to the formation of long-lived nanobubbles (NBs), it is crucial to overcome technological barriers and explore the mechanisms of droplet phase transition and NBs evolution. In this report, we present evidence from a synchrotron-based scanning transmission X-ray microscope (STXM), demonstrating a close correlation between the growth of PFCs NBs and the size of droplets and the presence of interfaces. It is noteworthy that PFCs NBs preferentially nucleate in the central region of the droplets. Their growth rate does not linearly increase with decreasing droplet size; an inhibitory phase transition effect occurs when the size is below a specific threshold. Different growth kinetics are displayed with varying droplet sizes, and droplet deformation ceases at 1 μm. Importantly, the interface accelerates reactions within the droplets. We establish a mathematical model to elucidate the differences between various droplet phase transition modes, including in-situ mass conservation mode and "boiling" mode. Our analysis indicates that variations in droplet stability can be attributed to differences in received X-ray flux. The findings indicate a surprising fact: the phase transition of sub-micron or even nanoscale droplets may be fundamentally different from that of large-sized micrometer droplets.

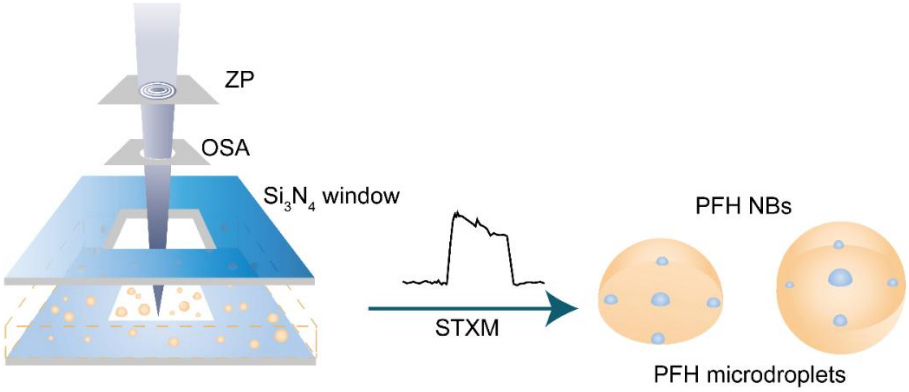


Figure 1. Schematic illustration of STXM measurement of PFH NBs produced by phase transition of PFH micro-nanodroplets.

Acknowledgements

This work was supported by the National Natural Science Foundation of China (Nos. 12274427, 22393934, 11874379).

Theoretical Model of Dynamics and Stability of Nanobubbles on Heterogeneous Surfaces [1, 2]

Lili Lan[1], Yongcai Pan[2], Limin Zhou[3], Hua Kuang[1, *], Lijuan Zhang[3, 4, *], Binghai Wen[1, 2, *]

1 College of Physical Science and Technology, Guangxi Normal University, Guilin 541004, China

2 Key Lab of Education Blockchain and Intelligent Technology, Ministry of Education, Guangxi Normal University, Guilin 541004, China

3 Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China

4 University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

*Corresponding authors

E-mail addresses: khphy@gxnu.edu.cn (H. Kuang), zhanglijuan@zjlab.org.cn (L. Zhang),

oceanwen@gxnu.edu.cn (B. Wen).

Abstract: Surface nanobubbles have revealed a new mechanism of gas-liquid-solid interaction at the nanoscale; however, the nanobubble evolution on real substrates is still veiled, because the experimental observation of contact line motions at the nanoscale is too difficult [3-5]. This study proposes a theoretical model to describe the dynamics and stability of nanobubbles on heterogeneous substrates. It simultaneously considers the diffusive equilibrium of the liquid-gas interface and the mechanical equilibrium at the contact line [6-8], and introduces a surface energy function to express the substrate's heterogeneity. The present model unifies the nanoscale stability and the microscale instability of surface bubbles. The theoretical predictions are highly consistent to the nanobubble morphology on heterogeneous surfaces observed in experiments [9, 10]. As the nanobubbles grow, a lower Laplace pressure leads to weaker gas adsorption, and the mechanical equilibrium can eventually revert to the classical Young-Laplace equation above microscale. The analysis results indicate that both the decrease in substrate surface energy and the increase in gas oversaturation are more conducive to the nucleation and growth of surface nanobubbles, leading to larger stable sizes. The larger surface energy barriers result in the stronger pinning, which is beneficial for achieving stability of the pinned bubbles. The present model is able to reproduce the continual behaviors of the three-phase contact line during the nanobubble evolution, e.g., "pinning, depinning, slipping and jumping" induced by the nanoscale defects.

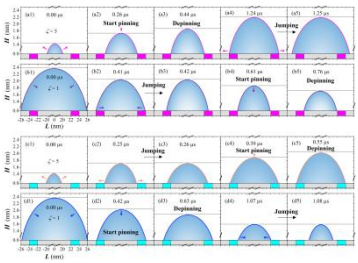


Fig. 1. The dynamic morphology of a growing nanobubble ($\zeta = 5$) with initial footprint radius $L_0 = 20$ nm , and a shrinking nanobubble ($\zeta = 1$) with initial footprint radius $L_0 = 26$ nm at five key time points. A defect with width of 2 nm on the substrate with $60°$ (grey stripes), the defect surface with $62°$ and $58°$ is marked by magenta and cyan stripes, respectively.

Keywords: Surface nanobubble, nanobubble dynamics, nanobubble stability, pinning strength, heterogeneous surface.

References

[1] L. Lan, Y. Pan, L. Zhou , H. Kuang , L. Zhang, B. Wen, Theoretical Model of Dynamics and Stability of Nanobubbles on Heterogeneous Surfaces, Journal of Colloid and Interface Science 2025, 678, 322–333.

[2] B. Wen, Y. Pan, L. Zhang, S. Wang, L. Zhou, C. Wang, J. Hu, State Transition of Stable Nanobubbles to Unstable Microbubbles on Homogeneous Surfaces, Physical Review Fluids 2022, 7, 103601

[3] D. Lohse, X. Zhang, Surface Nanobubbles and Nanodroplets, Reviews of Modern Physics 2015, 87, 981-1035.

[4] L. Zhou, S. Wang, L. Zhang, J. Hu, Generation and Stability of Bulk Nanobubbles: A Review and Perspective, Current Opinion in Colloid & Interface Science 2021, 53, 101439.

[5] B. H. Tan, H. An, C.-D. Ohl, Stability of Surface and Bulk Nanobubbles, Current Opinion in Colloid & Interface Science 2021, 53, 101428.

[6] D. Lohse, X. Zhang, Pinning and Gas Oversaturation Imply Stable Single Surface Nanobubbles, Physical Review E 2015, 91, 031003.

[7] B. H. Tan, H. An, C.-D. Ohl, Surface Nanobubbles Are Stabilized by Hydrophobic Attraction, Physical Review Letters 2018, 120, 164502.

[8] N. D. Petsev, L. G. Leal, M. S. Shell, Universal Gas Adsorption Mechanism for Flat Nanobubble Morphologies, Physical Review Letters 2020, 125, 146101.

[9] L. Zhang, X. Zhang, Y. Zhang, J. Hu, H. Fang, The Length Scales for Stable Gas Nanobubbles at Liquid/Solid Surfaces, Soft Matter 2010, 6, 4515–4519.

[10] B. M. Borkent, S. de Beer, F. Mugele, D. Lohse, On the Shape of Surface Nanobubbles, Langmuir 2010, 26, 260–268.

报告人简介：

姓名：闻炳海，性别：男，年龄：50，研究方向：微纳米流体，格子 Boltzmann 方法，
Email: oceanwen@gxnu.edu.cn

一种解释微纳气泡寿命的新方法

Andrei Dukhin[1], 许人良[2,*]

[1]Dispersertioni Technologies Inc, NY, United States; [2] 已退休

*Email: renliang.xu@yahoo.com

现在已知微细气泡在水中可以存在数周甚至数月，这与已有的经典理论相矛盾。按照经典理论，这些气泡的寿命在毫秒级。微细气泡由于OH离子的吸附而带电，从而在其界面上产生双电层。有人提出双电层可能是微细气泡寿命的原因，但其机制仍然未知。

我们提出一种新的机制。双电层有一个得到了许多实验和理论支持但被忽视了的特性：它们界面第一层的水分子是定向的。由于双电层产生的电场具有梯度分量，它对这些定向分子偶极矩施加力。我们的计算表明它实际上与经典的Young-Laplace力在同一数量级，但在方向上相反。它确保了界面处法向力的平衡，并产生压力梯度，防止了气体分子扩散通量的泄漏，从而产生稳定的气泡。我们给这个力起了个名：介电静力（dielectrostatic force）。此外，定向水偶极矩相互排斥。这种效应类似于表面活性剂极性基团的排斥，这一排斥可以抵消切向方向的表面张力并稳定气泡。这些作用在气泡界面上的力平衡导致了稳定气泡大小的方程，该方程与已发表的实验数据趋势。需要更多在不同离子强度、温度、pH的气泡大小与zeta电位的实验数据来支持与完善此一理论机理。

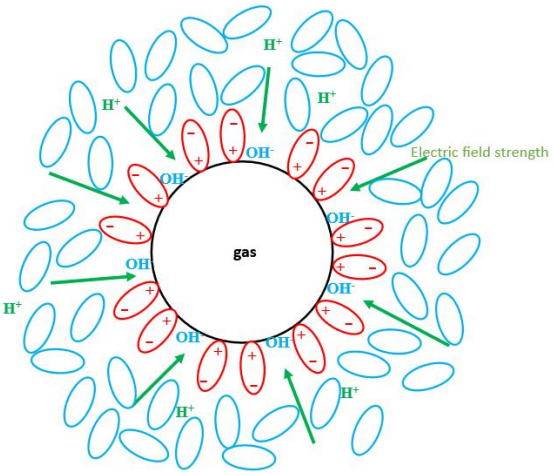


Fig. 1. 在微细气泡界面第一层定向水分子（红色）示意图

关键词： 微细气泡；双电层；Zeta电位；介电静力；电偶极；分子定向

参考文献

[1] Dukhin A, Xu R: A new approach to explaining nano-bubbles paradoxical longevity. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 2024:700, 134805.

[2] Alheshibri M, Qian J, Jehannin M, Craig VS: A history of nanobubbles, Langmuir 2016:32 (43), 11086–11100.

[3] 许人良，Zeta电位实用指南，化学工业出版社，2023.

报告人简介：

- 在纳米技术，科学仪器，胶体化学，材料表征，企业管理等各项领域浸淫 30 多年，发表近百篇科学论文与专利，英文专著 Particle Characterization: Light Scattering Methods（Springer，2000），中文专著：颗粒表征的光学技术及应用（化学工业出版社，2022），Zeta 电位实用指南（化学工业出版社，2023）
- 美国 ASTM International 贡献奖；美国化学会最佳博士论文奖，美国狄县多元文化奖，美国米乐玛市终身贡

献奖

- 1993 年起为 ISO 专家及委员，长期担任两个 ISO 专业委员会召集人，主持及执笔过多个国际标准
- 曾为美国麦克仪器公司大中国区总经理，资深首席科学家；美国贝克曼库尔特仪器公司商务部主任；英国马尔文仪器公司亚太区技术总监
- 中国颗粒学会高级理事
- 全国颗粒表征与分检及筛网标准化技术委员会（SAC/TC168）委员；全国颗粒表征与分检及筛网标准化技术委员会颗粒分技术委员会（SAC/TC168/SC1）委员；全国微细气泡技术标准化技术委员会（SAC/TC584）委员
- 一个国家标准第一起草人与数个国家标准起草人
- 多本专业杂志审稿人

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Coupling effects of ionic surfactants and electrolytes on the stability of bulk nanobubbles

Xiaotong Ma[1], Mingbo Li[2,*], Xuefei Xu[3], Chao Sun[3]

[1]School of Aerospace, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, Shaanxi 710049, China

[2]School of Ocean and Civil Engineering,Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China

[3]Department of Energy and Power Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084,China

* mingboli@sjtu.edu.cn

The abnormal stability of bulk nanobubbles has attracted substantial attention from academia and industry since classical Epstein-Plesset theory predicts that gas bubbles can not keep stable thermodynamic equilibrium spontaneously. Herein the stability of bulk nanobubbles in ionic surfactant and electrolyte solutions over a wide range of concentration is studied. Experimental results show that ionic surfactant (SDS) molecules not only reduce the surface tension but also promote accumulation of net charges, which facilitate the nucleation and stabilization of bulk nanobubbles. The addition of electrolyte (NaCl) in surfactant solution results in a decrease in zeta potential and number concentration of nanobubbles due to the ion shielding effect, essentially colloidal stability of multiple nanobubbles suspended in surfactant solutions. We demonstrate that the adsorption behaviour of surfactants and electrolytes play a significant role on nanobubbles Stabilization. An adsorption model for ionic surfactants and electrolytes, that specifically takes into account the effect of adsorption layer thickness within the framework of modified Poisson-Boltzmann equation, is developed. Combined with the Gibbs adsorption isotherm equation, quantitative agreement between the predicted and experimental surface tension of ionic surfactant solutions is found in a wide range of bulk concentrations. Further, the spatial distribution of the surface potential, surfactant ions and counterions in the vicinity of the interface of bulk nanobubbles are described specifically. Our study explores the coupling effect of surfactant and electrolyte in stabilizing nanobubbles and identifies a route to explore the intrinsic mechanism of bulk nanobubble's stability.

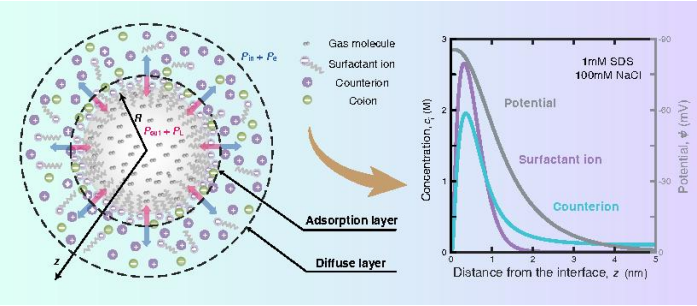


Fig. 1 Schematics of the adsorption layer structure of ionic surfactants and electrolyte surrounding a negatively charged nanobubble. Distribution of potential, surfactant ions and counterions near the nanobubble surface.

Keywords: Bulk nanobubbles; surfactant; surface charge; surface tension; stability

References

[47]X. Ma, M. Li, X. Xu, C. Sun. Coupling effects of ionic surfactants and electrolytes on the stability of bulk nanobubbles, Nanomaterials 2022, 12(19): 3450.

报告人/墙报展示人简介：

马晓彤，西安交通大学航天航空学院“青年优秀人才计划”助理研究员。2024年6月于清华大学能源与动力工程系获得博士学位，指导老师为新基石研究员

孙超教授。主要从事多相流、气泡动力学、微纳米气泡以及胶体与界面物理化学领域相关基础研究。近五年在 Applied Surface Science，Journal of Colloid and Interface Science，Nanomaterials，Soft Matter，Physical Review Letters 等国际界面科学与软物质材料领域的知名期刊发表 SCI 学术论文 8 篇。曾获清华大学优秀博士论文、清华大学优秀毕业生等荣誉。

附：请在此处注明报告人为助理研究员

常温下固液界面有序水层上的气泡和液滴

王春雷

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，比如有序行为。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，且气泡也出现高密度态。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, in preparation

简介

王春雷,上海大学理学院研究员，主要开展“界面水的相变行为及其生物效应”研究，从比较简单均一的固体材料表面开始再到复杂的柔性材料和生物分子，重点关注这些体系中表面结构诱导界面水的无序—有序相变特性，以及其如何主动参与和调控界面物理性质和生物分子功能，主要包括表面浸润性质、抗冻蛋白的结冰成核效应、双亲分子的溶解行为等。工作解决了领域内长期存在的争议问题，引发了国际上许多课题组的后续实验和理论工作。共发表文章 90 余篇，包括 PNAS，PRL(2)，JACS，Nano Lett.，Chem. Sci.等，引用 3000 余次。获 2020 年国家优青项目资助。

体相纳米气泡界面特性及稳定机理研究

厉明波[1,*]，马晓彤[2]，高雅温[3]，孙超[3]

[1]上海交通大学，船舶海洋与建筑工程学院，上海，200240

[2]西安交通大学，航天航空学院，西安，710049

[3]清华大学，燃烧能源中心/能源与动力工程系，北京，100084

*Email: mingboli@sjtu.edu.cn

摘要正文：

体相纳米气泡（Bulk nanobubble）是指存在于液相环境中的纳米级气态聚集物，其独特的物理性质使其在污水处理、动植物生长、医学诊断以及矿物浮选等方面具有广泛应用前景。自经典 Epstein-Plesset 理论预测气泡不能自发保持稳定的热力学平衡以来，体相纳米气泡异常的稳定性已引起学术界和工业界的广泛关注。本工作系统性研究了水溶液理化环境（温度、压力、离子环境等）对于体相纳米气泡界面特性及稳定性的影响。研究发现，体相纳米气泡的成核以及稳定特性对于水溶液理化特性非常敏感，并证明了体相纳米气泡的长期稳定性一部分来源于表面电荷的净积累。同时，解析了纳米尺度气液界面特殊的扩散双电层结构，明确了界面内部气体分子域和扩散双电层之间界面吸附层的存在。在此基础上揭示了电解质离子、表面活性剂离子等在界面层的吸附特性，理论构建了考虑吸附层厚度的离子竞争性吸附模型，解耦了界面张力和表面电荷对于纳米气泡稳定平衡的作用机制。

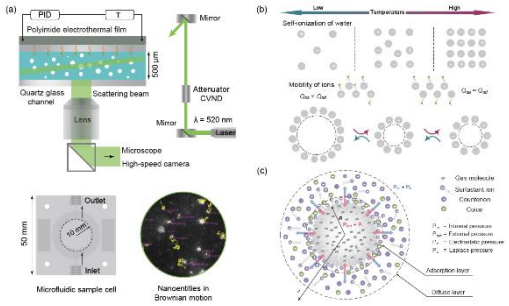


Fig. 1 Effect of physicochemical property of aqueous solution on the stability of bulk nanobubbles

关键词：体相纳米气泡；稳定性；表面电荷；界面结构

参考文献

[1] **M. Li*, Y. Li, Y. Gao, C. Sun, B. Wang*, Effect of nanoscale nuclei on the dynamics of laser-induced cavitation, Physics of Fluids, 2024, 36(9).**

[2] **X. Ma, M. Li*, C. Sun, Decoupling the role of aqueous ionic solution in nucleation and stabilization of bulk nanobubbles, Applied Surface Science, 2024, 656: 159726.**

[3] **X. Ma#, M. Li*,#, P. Pfeiffer, J. Eisener, C.D. Ohl, C. Sun*, Ion adsorption stabilizes bulk nanobubbles, Journal of Colloid and Interface Science, 2022, 606: 1380-1394.**

报告人/墙报展示人简介：

厉明波，现任上海交通大学船舶海洋与建筑工程学院助理研究员。2014 年 6 月本科毕业于西南交通大学机械工程学院，2019 年 6 月获得浙江大学机械电子工程专业博士学位，2019 年 9 月至 2023 年 8 月于清华大学能源与动力工程系（燃烧能源中心）从事博士后研究工作，2023 年 9 月加入上海交通大学船舶海洋与建筑工程学院。研究领域主要涉及界面流体力学、微纳流及纳米气泡/纳米液滴等方面，相关研究成果已在《Chem. Eng. J.》、《J. Colloid Interf. Sci.》、《Int. J. Heat Mass Tran.》、《Phys. Fluids》等界面科学和流体力学领域权威期刊发表科研论文 20 余篇。作为负责人主持国家自然科学基金青年项目、中国博士后科学基金面上资助（已结题）、上海交通大学“深蓝计划”基金项目等。

附：报告人为老师。

微纳强化再造化学制造流程降碳增效

张志炳

电化学析气反应中气泡诱导颗粒跳跃行为研究

王俊刚 [1,*]

[1] 上海应用技术大学，化学与环境工程学院，上海市海泉路 100 号，2014181

*Email: jgwang@sit.edu.cn

摘要正文：电化学反应过程中，电极溶液界面发生电荷传递的同时还随着物质传递过程。[1,2] 尤其电化学多相界面过程，由于新相的生成，将导致异常的界面物质传递，并对电化学反应动力学过程产生显著影响，因此如何理解电化学多相界面过程对于析气过程电催化剂的设计和筛选具有重要意义。基于此，通过自主设计具有良好电化学特性以及全内反射适应性的电化学微流控装置，并结合电化学全内反射显微镜，实现了电化学氧气析出过程中气泡诱导颗粒跳跃行为的高时空分辨原位监测，通过提取不同颗粒在跳跃过程中的扩散系数，建立了新型催化反应评价标识符。该标识符有效消除了传统测试评价系统中存在的充放电、物质价态转换（赝电容）以及形貌异质性等干扰，实现了不同催化剂本征活性的有效评价。该工作实现了单颗粒水平气泡诱导催化剂动态运动过程的原位监测，提出并建立了颗粒运动-活性关系用于评价催化剂本征活性的新方法。[3]

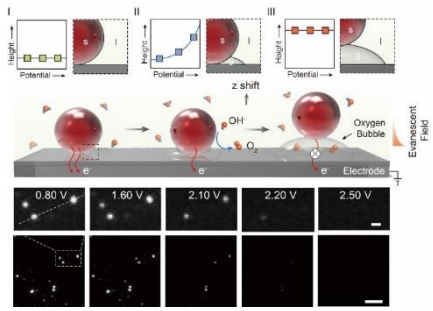


图. 1 原位监测颗粒跳跃行为，建立新的评价标识符评估催化剂本征活性。

关键词：电极溶液界面；氧气析出；物质传递；单颗粒

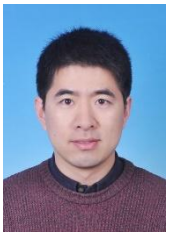
参考文献

[1] J.-G. Wang, R.-J. Yu, X. Hua, Y.-T. Long, *Chemical Society Reviews*, 2023, *52*, 2596-2616.

[2] J.-G. Wang, L. Shi, Y. Su, L. Liu, Z. Yang, R. Huang, J. Xie, Y. Tian, D. Li, *Nature Communications*, 2021, *12*, 2164.

[3] J.-G. Wang, L. Zhang, J. Xie, Y. Weizmann, D. Li, J. Li, *Nano Letters*, 2022, *22*, 5495-5502.

报告人/墙报展示人简介：



王俊刚，上海应用技术大学化学与环境工程学院，副教授，分析测试中心主任，主要研究内容聚焦于发展原位谱学监测平台，并通过原位谱学手段（光谱，质谱以及电化学联用技术）以高的时空，能量以及质量分辨实现电极-电解质溶液界面反应过程原位监测，已在 Chem. Soc. Rev.、Nat. Commun.、Nano Lett.、Anal. Chem.等学术期刊发表论文 26 篇，并撰写等离激元散射光谱电化学方面英文专著 1 章（ACS Symposium Series），主编《现代仪器分析》获第一批石油和化工行业“十四五”规划教材（普通高等教育）立项，主持国家自然科学基金面上项目、青年项目、中央高校基本业务费等多个项目。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

微纳气泡粒度浓度测量

蔡天意

非标记三维动态显微镜测量微纳气泡的表面电荷

龚湘君[1,*]，陆昊[2]，梁霄[1]

[1]材料科学与工程学院，华南理工大学，广州天河五山路 381 号，510641

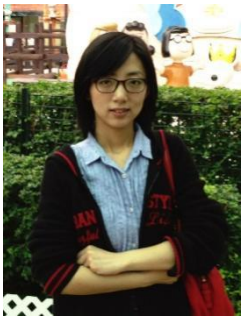
[2]土木与交通学院，华南理工大学，广州天河五山路 381 号，510641

*Email: msxjgong@scut.edu.cn

摘要正文：微纳气泡的寿命比经典的热力学模型预测的更久。以往研究表明气泡的表面电荷与其制备工艺和稳定性有很强关联。在本研究中，我们使用基于数字全息的非标记三维动态显微镜对不同电场及不同制备条件下的微纳气泡个体进行三维动态追踪，建立了一套同步获取其粒径及表面电荷密度的方法(holo-coulombmeter，全息库仑计)。这一三维动态分析技术可用于探究气泡粒径、运动与表面电荷的关系。结果表明电场和制备工艺可显著影响气泡的尺寸和表面电荷密度。

关键词：微纳气泡；三维动态；表面电荷；zeta电位；稳定性

报告人/墙报展示人简介：



龚湘君，女，博士。华南理工大学材料科学与工程学院教授、博士生导师。
研究方向：三维动态显微技术与材料表征。
学术成果：承担 7 项国家及省部级科研基金及 17 项其他项目；发表 SCI 学术论文 50 余篇。获中国仪器仪表协会朱良漪分析仪器青年创新奖。
Email: msxjgong@scut.edu.cn

附：请在此处注明报告人不是学生。

Coalescence-induced late departure of bubbles improves water electrolysis efficiency

Tao Wu[1], Bo Liu[1,*], Fang Yuan[1], Qiang Yang[1,*]

[1]Department of Mechanical and Power Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai, China, 200237

*boliu@ecust.edu.cn, qyang@ecust.edu.cn

In water electrolysis, bubbles form on the electrode and interact through processes such as collision and coalescence. Achieving the primary optimization goals of water electrolysis, including improving current density (and thus increasing gas production rate) and enhancing electrolysis efficiency, largely depends on mitigating the effects of bubbles. However, the impact of bubble-bubble interactions, e.g., collision and coalescence, on electrolysis efficiency remains unclear. Here, we set out to unravel this mystery by systematically manipulating the coalescence probability of colliding bubbles in microelectrode experiments. By introducing coalescence inhibition electrolytes, such as $HClO_4$, to a 0.5 M H_2SO_4 solution (where bubbles merge rapidly), we observed a 50% reduction in bubble departure diameter corresponding to a surprising 30% dip in HER (hydrogen evolution reaction) efficiency. The efficiency reduction becomes more pronounced with the increase of electrolysis current density, and varies significantly with the type and concentration of the coalescence inhibition electrolyte. Remarkably, the result suggests that late bubble departure at larger sizes induced by coalescence enhances electrolysis efficiency, challenging the conventional belief that smaller bubble departure diameters favour electrolysis efficiency. These findings should fundamentally alter our understanding and strategies for mitigating the bubble effect in water electrolysis, particularly in originally coalescence-inhibited electrolytes, such as in alkaline water/seawater electrolysis and the chlor-alkali industry.

Keywords: water electrolysis, bubble coalescence, HER, electrolysis efficiency

References

[1] Moschkowitsch, W., Lori, O. & Elbaz, L. Recent Progress and Viability of PGM-Free Catalysts for Hydrogen Evolution Reaction and Hydrogen Oxidation Reaction. ACS Catal 2022, 12, 1082–1089.

[2] Zhang, X.-L. et al. Efficient acidic hydrogen evolution in proton exchange membrane electrolyzers over a sulfur-doped marcasite-type electrocatalyst. Sci. Adv 2023, 9, eadh2885.

[3] Gabler, A. et al. Ultrashort-pulse laser structured titanium surfaces with sputter-coated platinum catalyst as hydrogen evolution electrodes for alkaline water electrolysis. Int. J. Hydrog. Energy 2018, 43, 7216–7226.

[4] Ma, R. et al. Efficient electrocatalysis of hydrogen evolution by ultralow-Pt-loading bamboo-like nitrogen-doped carbon nanotubes. Mater. Today Energy 2017, 6, 173–180.

[5] Zeradjanin, A. R., Narangoda, P., Spanos, I., Masa, J. & Schlögl, R. How to minimise destabilising effect of gas bubbles on water splitting electrocatalysts? Curr. Opin. Electrochem 2021, 30, 100797.

……

报告人/墙报展示人简介：

袁方，主持或参与国家自然科学基金、上海市科技创新行动计划“双碳专项”、新加坡能源创新研究计划、入选上海市浦江人才计划(D 类)，以第一作者在 International Journal of Heat and Mass Transfer 等 Top 期刊发表文章。

附：报告人/墙报展示人不为学生

软 X 射线发射谱学和快速 X 射成像探究微纳气泡的新奇特性和动态行为

周利民
上海同步辐射光源
中国科学院上海高等研究院
周利民

摘要：水中的微纳米级的气泡，具有包括超强稳定性和新奇物理化学效应等在内的诸多特性。深入了解微纳气泡的内部气体状态及动态演化行为，对于解释这些令人惊讶的效应至关重要，并将有助于推动微纳气泡技术在工业生产中的更好应用。同步辐射技术是探测微纳尺度的样品自身性质和电子结构的有力工具。我们基于同步辐射的 X 射线成像和谱学等技术，设计了一款用于同步实验原位电解实验的原位电解池装置，对电催化过程中产生的纳米气泡及其附近水层结构开展探究，在对不同电解参数和溶液环境下，利用同步辐射快速 X 射线成像对电解产生的氢气和氧气气泡开展表征，获取了微纳气泡在电解初始过程中的生长、演化和脱离的全过程。同时，我们采用软 X 射线共振发射谱学，对于嵌入在固态材料中的纳米气泡中气体组分和内部状态展开了探究。这些研究结果为理解不同环境下微纳米气泡的特性和演化行为带来了新的认识，能够为探究纳米尺度气泡在电催化反应和材料界面性能中的扮演的角色带来了新的启发。

参考文献

[1] Zhang L, et al. Imaging interfacial micro- and nano-bubbles by scanning transmission soft X-ray microscopy. J Synchrotron Radiat 20, 413-418 (2013).
[2] Zhou LM, et al. Interfacial nanobubbles produced by long-time preserved cold water. Chinese Phys B 26, (2017).
[3] Zhou, L., Wang, X., Hyun-Joon, S., Zhang, L., & Hu, J. (2018). Surface Nanobubbles Produced by Cold Water Investigated Using Scanning Transmission X-ray Microscopy. Microscopy and Microanalysis, 24(S2), 470-471(2018).
[4] Wang S, Zhou L, Wang X, et al. Force spectroscopy revealed a high-gas-density state near the graphite substrate inside surface nanobubbles. Langmuir, 2019, 35: 2498-2505
[5] Zhou L, Wang X, Shin H J, et al. Ultrahigh density of gas molecules confined in surface nanobubbles in ambient water. J Am Chem Soc, 2020, 142: 5583-5593
[6] Zhou L, Wang S, Zhang L, et al. Generation and stability of bulk nanobubbles: A review and perspective. Curr Opin Colloid Interface Sci, 2021, 53: 101439
[7] 周利民, 王兴亚, 张立娟, 胡钧. 纳米气泡的同步辐射研究进展. 中国科学: 物理学力学天文学, 2021, 51: 092006

纳米气泡与血栓治疗

杨芳*，唐健，李明熹

东南大学生物科学与医学工程学院，南京，210096

数字医学工程全国重点实验室，江苏省生物材料与器件重点实验室，南京，210096

* Email: yangfang2080@seu.edu.cn

血栓性疾病，如急性心肌梗死、肺栓塞、深静脉血栓形成和缺血性卒中，是全球大多数发病率和死亡率的主要原因[1-4]。血栓引起的血管栓塞可导致严重的组织损伤和器官衰竭，最终危及生命。因此，早期诊断和及时治疗恶性肿瘤具有重要意义。近年来，纳米医学为血栓形成的诊断和治疗带来了新方法和新思路，如环精氨酸甘氨酸天冬氨酸（cRGD）肽修饰的血栓靶向纳米气泡（NBs）[5]，点击化学介导的血栓靶向微泡[6]，血栓治疗的血小板衍生多孔纳米马达[7]等超声溶栓策略引起了人们的极大兴趣。然而，目前还有诸多问题尚需解决，如纳米载体的生物安全性和稳定性、血栓发生的早期诊断和发展的及时治疗、以及新技术的临床转化困难等。本研究以构建血栓靶向的气泡诊疗策略为核心，设计并制备了可特异性靶向血栓病灶的纳米气泡材料，实现结合血栓靶向超声成像和超声介导的药物控制递送。研究中创建的血小板膜纳米气泡，可基于血小板膜天然靶向受损的血管特性，实现了急性缺血性病变的微血管高效靶向，从而通过超声影像实时动态反映血管受损的状态，精确勾勒病灶，可对后续的治疗策略的建立提供影像学信息[7]。进一步的，构建了修饰鞘氨醇，并装载溶栓药物rtPA的约200 nm的纳米气泡，可通过结合血栓特异性靶向成像和超声介导的药物递送，实现溶栓药物的可控、有效递送治疗[8]。由此可见，利用气泡载体的声学响应特性，构建血栓靶向的纳米气泡材料，有望在未来应用于血栓性疾病的准确诊断和高效治疗。

关键词：纳米气泡；血栓靶向；超声显影；药物递送；溶栓

参考文献

[1] M. Di Nisio, N. Van Es, H. R. Büller. Deep vein thrombosis and pulmonary embolism. *Lancet*. 2016, 388(10063): 3060–3073.

[2] M. Olaf, R. Cooney. Deep venous thrombosis. *Emerg. Med Clin.* 2017, 35(4): 743–770.

[3] P. Jolugbo, R. A. Ariëns. Thrombus composition and efficacy of thrombolysis and thrombectomy in acute ischemic stroke. *Stroke*. 2021, 52(3): 1131–1142.

[4] A. M. Wendelboe, G. E. Raskob. Global burden of thrombosis: Epidemiologic aspects. *Circ. Res*. 2016, 118(9): 1340–1347.

[5] T. Wang T, C. Yuan, B. Dai, Y. Liu, M. Li, Z. Feng, Q. Jiang, Z. Xu, N. Zhao, N. Gu, F. Yang. Click-chemistry-mediated rapid microbubble capture for acute thrombus ultrasound molecular imaging. *Chembiochem*. 2017, 18(14): 1364–1368

[6] L. Ma, Y. Wang, S. Zhang, X. Qian, N. Xue, Z. Jiang, O. U. Akakuru, J. Li, Y. Xu, A. Wu. Deep penetration of targeted nanobubbles enhanced cavitation effect on thrombolytic capacity. *Bioconjug. Chem.* 2020, 31(2): 369–374.

[7] M. Li, Y. Liu, J. Chen, T. Liu, Z. Gu, J. Zhang, X. Gu, G. Teng, F. Yang, N. Gu. Platelet bio-nanobubbles as microvascular recanalization
nanoformulation for acute ischemic stroke lesion theranostics. *Theranostics*. 2018, 8(18): 4870-4883.

[8] J. Tang, H. Xu, M. Li, Y. Liu, F. Yang. Controllable Thrombolysis Using a NanobubbleImaging-Guided rtPA Targeted Delivery Strategy. *BME Front.* 2024, 5: 0040.

报告人/墙报展示人简介：

杨芳，女，东南大学，教授/博导，长江学者特聘教授。2009 年毕业于东南大学，获博士学位。2012 年美国密歇根大学化学系访问学者，2013 年美国加州大学戴维斯分校生物医学工程系访问学者。主要研究方向为智能微纳气泡递送系统、磁性微纳气泡多模态影像材料以及影像指导下精准药物递送系统和传感器件等。已在国际核心期刊上发表论文 90 余篇，申请国家发明专利 16 件。负责主持完成 ISO 国际标准 1 项。先后荣获教育部自然科学一等奖（排 3）；第 46 届日内瓦国际发明展特别嘉许金奖（排 2）；江苏省科技一等奖（排 5）。入选全国优秀博士学位论文、江苏省六大人才高峰、江苏省 333 第二层次。任中国生物材料学会影像材料与技术分会副主任委员、中国解剖学会血管分会副主任委员、中国颗粒学会青年理事会青年理事、中国生物医学工程学会青年委员会委员、中国医药生物技术协会造影技术分会委员、江苏省生物医学工程学会理事会理事、《中国材料进展》杂志青年编委等。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否。

动态纳米气泡的荧光成像研究

苏华[1,2,*]，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

纳米气泡由于具有长寿命、高的拉普拉斯压力、大的比表面积、强列吸附有机物等特性，近年来已在水处理、表面清洁、泡沫浮选、农业、渔业、生物医学等领域展现出巨大的应用前景[1]。与“硬”的无机纳米材料相比，“软”的纳米气泡对环境极度敏感、结构动态多变，这使得诸多用于无机纳米材料表征的技术手段受到局限，亟需发展与纳米气泡动态特性相适应的原位表征技术[1-2]。近年来，本团队利用荧光染料标记纳米气泡，结合全内反射荧光成像技术（TIRF），实现了对单个纳米气泡的动态成像示踪[3-4]。首先，以具有光催化产氢能力的硫化镉半导体纳米颗粒（CdS NPs）为模型体系，我们成功实现了对单个CdS NPs表面生成的氢气纳米气泡的动态追踪，单颗粒水平揭示出CdS NPs光催化产生氢气纳米气泡的过程具有高度动态变化的特性。其次，我们进一步将研究体系拓展到一维CdS纳米线上，并探究了在亚纳米线水平通过定点沉积磷化钴助催化剂（Co_xP）调控氢气纳米气泡生成动力学的可能性。再次，为了提高荧光成像纳米气泡方法的灵敏度，我们筛选了用于气泡标记的荧光染料，并研究了表面活性剂对气泡标记的影响。研究发现，亲脂性阳离子型染料（比如罗丹明R6G，带正电荷的卟啉衍生物TMPyP4，派诺宁B等），具有非常优异的纳米气泡标记能力，推测可能与纳米气泡表面富集大量的氢氧根有关。动态纳米气泡的荧光追踪，为理解产气化学反应中纳米气泡的形成和生长规律提高了可靠的研究工具，对于进一步理解和调控相关的反应动力学具有重要意义。

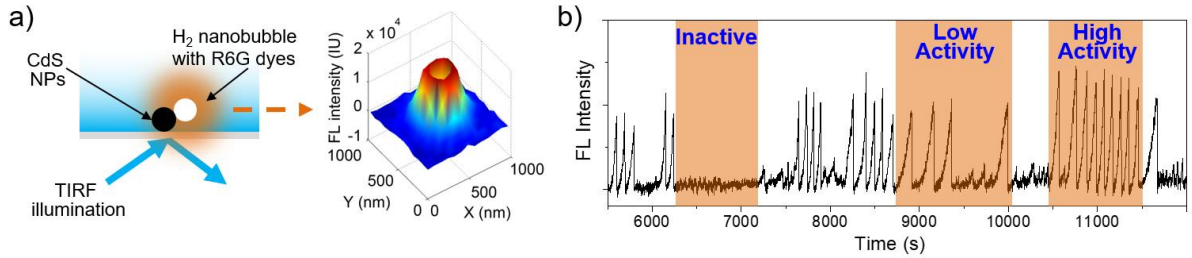


Fig. 1 Dynamically monitoring the evolution of H_2 nanobubbles during single CdS NP photocatalysis *via* fluorescence imaging. (a) Illustration of the principle. (b) Highly dynamic evolution of H_2 nanobubbles during CdS photocatalysis.

关键词：纳米气泡；动态示踪，荧光成像，光催化

参考文献

[1] **M. Alheshibri, J. Qian, M. Jehannin, and V. S. J. Craig. A history of nanobubbles.** ***Langmuir*** **2016, 32 (43): 11086-11100.**

[2] **Y. Fang, Z. Li, Y. Jiang, X. Wang, H.-Y. Chen, N. Tao, and W. Wang*, Intermittent photocatalytic activity of single CdS nanoparticles.** ***Proc. Natl. Acad. Sci.*** **2017, 114: 10566-10571.**

[3] **H. Su, Y. Fang, F. Chen, and W. Wang. Monitoring the dynamic photocatalytic activity of single CdS nanoparticles by lighting up H_2 nanobubbles with fluorescent dyes.** ***Chem. Sci.*** **2018, 9 (8): 1448–1453.**

[4] **K. Zhou, T. Yuan, H. Su, and W. Wang. Accessing the spatiotemporal heterogeneities of single nanocatalysts by optically imaging gas nanobubbles.** ***Curr. Opin. Colloid Interface Sci.*** **2021, 55: 101465.**

报告人/墙报展示人简介：

苏华，副教授，硕士生导师。2015 年博士毕业于中山大学无机化学专业，2016-2022 年先后以博士后、特任副研究员身份在南京大学化学化工学院、生命分析化学国家重点实验室王伟教授课题组从事分析化学方法学研究，2022 年进入南京中医药大学药学院工作。目前已以第一作者或者通讯作者身份在 J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem. Int. Ed., Chem. Sci., Anal. Chem.等高水平学术期刊上发表了 11 篇 SCI 论文。近期聚焦化学和生命过程的原位光学成像分析研究，已揭示出多种传统研究方法难以观测到的新现象和新规律。比如，测量出单个水微液滴中双氧水自发产生过程的动力学，首次揭示倏逝波具有驱动有机分子在界面上长程有序组装的特性等。目前担任 Nature Communications 等学术期刊的独立审稿人。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

表面形变对胶体液滴蒸发和颗粒沉积图案的影响

赵彬钰 [1,*]

中国科学院青海盐湖研究所，西宁，810008

*Email: binyuzhao@isl.ac.cn

固-液界面相互作用对液体在固体表面的流动行为有重要影响，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基底表面形变，形成润湿脊。当软基底被拉伸后，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沿垂直于拉伸方向的更早更快。当在液体中加入不溶纳米颗粒后，颗粒呈各向异性沉积，液滴蒸发后形成类椭圆环形的沉积图案。通过改变基底拉伸比例、倾斜角度、旋转角度等，可以制备多种复杂沉积图案。这些发现拓宽了我们对软基底和各向异性基底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。

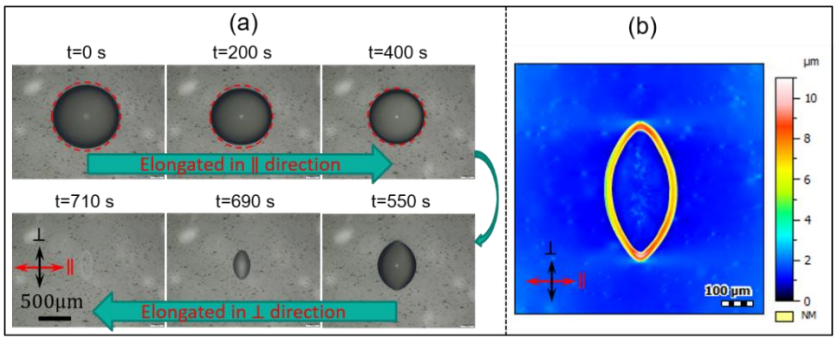


Fig. 1 Droplets drying on uniaxially stretched soft substrates. (a) Droplet drying process. The droplet elongation direction switches from along the direction parallel to the stretch (∥) to the perpendicular (⊥) direction. (b) 3D image of the final deposition pattern.

关键词：液滴蒸发；颗粒沉积图案；表面形变；润湿脊；接触线

参考文献

[1] Zhao, B.; Bonaccurso, E.; Auernhammer, G. K.; Chen, L., Elasticity-to-Capillarity Transition in Soft Substrate Deformation. *Nano Letters* **2021,** *21* (24), 10361-10367.

[2] Du, Y.; Bonaccurso, E.; Guo, J.; Uhlig, K.; Chen, L.; Zhao, B.; Auernhammer, G. K., How droplets dry on stretched soft substrates. Under review.

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

微纳米气泡协同脉冲强光处理有机染料废水的增强机制研究

Synergistic mechanism investigation of Oxygen micro and nanobubbles coupled with Intense Pulsed Light in addressing organic dyes from wastewater

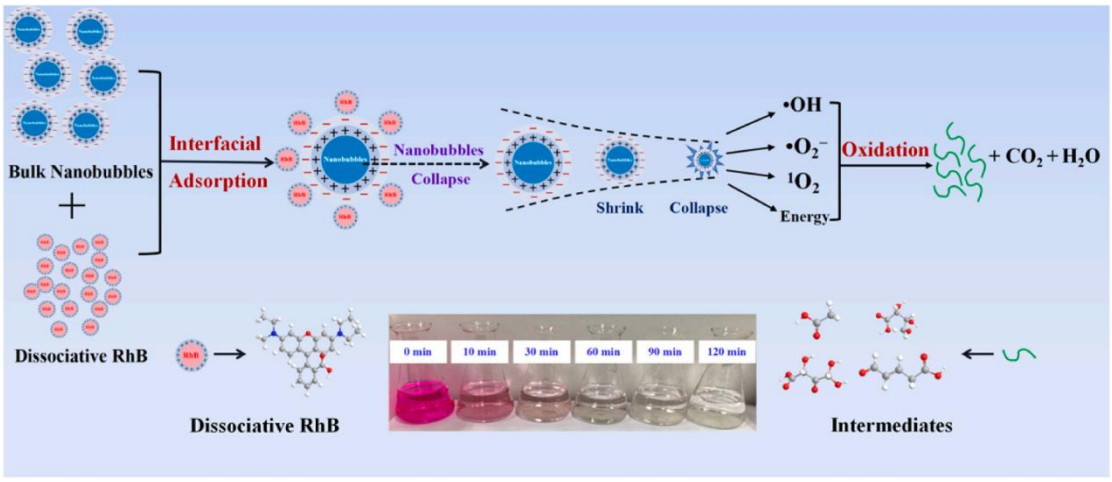
Lijing Wang[1,*], Bangguo Wang[1], Gang Pan[2, 3]

[1] College of Resources and Environment, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

[2] United Kingdom School of Humanities, York St John University, Lord Mayor's Walk, York, North Yorkshire, YO31 7EX, United Kingdom

[3] School of Chemical and Environmental Sciences, Guangdong Ocean University, Zhanjiang, 524088, China

* wanglijing@ucas.ac.cn



Micro and nanobubbles (MNBs) is supposed to be an innovative technology to remove multiple pollutants from the various environmental mediums, and intense pulsed light (IPL) is also an emerging photochemical technology but rarely applied in environmental field at present. In this study, MNBs and MNBs coupled with IPL technology were used to degrade organic pollutants of three organic dyes Rhodamine B (RhB), methylene blue (MB), and methyl orange (MO), from aqueous solutions. In addition, individual and synergistic mechanisms and potential degradation pathways were systematically investigated. The MNBs generated in this study reach a relatively high level at 10^7 particles/mL and had extraordinary longevity over 72h in pure water. Only MNBs could achieved 100% (90 min), 98.51% (120 min), 96.78% (540 min) removals on 0.1, 1, 10 mg/L RhB through interfacial adsorption enhanced oxidation degradation process. However, individual MNBs did not exhibit any removal effects to MB and MO. This difference may be due to combined factors of more stable chromophoric group of MB and azo bond of MO, electrostatic repulsion between MO and MNBs, and their slower reaction rate with ROS than RhB. Nonetheless, MNBs coupled with IPL technology significantly improved degradation efficiency and achieved 91.43% and 87.45% removals on 1 mg/L MB and MO in 90 and 120 minutes with accumulated dose at 427 J/cm^2 and 625 J/cm^2, respectively. Quenching experiments illustrated that the contribution of ROS to degradation by MNBs-IPL technology followed the order: hydroxyl radical (•OH) > superoxide radical ($•O_2^-$) > singlet oxygen ($^1O_2$). The potential synergistic mechanism might be the high-energy electrons and photothermal energy enhanced ROS oxidization process. Furthermore, the degradation pathway of three dyes by MNBs-IPL was proposed based on the detected intermediates using LC-MS. The degradation processes of three dyes mainly involved those processes: deethylation, hydroxylation, hydrogenation, demethylation, chromophore cleavage, opening-ring and mineralization to realize the entire degradation. These findings will provide a novel MNBs-IPL technology that is green, totally chemical-free, low-carbon, and without secondary pollution to address various types of organic dyes from wastewater.

Keywords: Oxygen micro and nanobubbles, Intense pulsed light, Rhodamine B, Methyl orange

报告人/墙报展示人简介：

王丽静，中国科学院大学资源与环境学院，副教授，研究领域为水资源与水环境，主要研究方向包括水污染治理与生态修复、富营养化与新型污染物复合污染治理、新污染物绿色低碳处理技术研究等方面。主持和参与新型环境纳米技术在水质改善中的应用、蓝藻水华应急治理及生态修复、污染水源地生态修复的纳米技术原理及应用、印染/制药/化工废盐等废水处理与资源化利用等国家重点基础研究发展计划、国家自然科学基金以及院企合作等多项课题研究，主要研究成果发表在 *Water Research, Environmental Science & Technology, Environmental Pollution* 等专业期刊杂志上，曾获 2017 年大禹水利科学技术奖一等奖，新华网 2017 年度中国双创好项目等奖项。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

超小粒径纳米气泡缓解细胞氧化压力

郑晋[1]，张立娟[2]，胡钧[1,*]

[1]中国科学院上海应用物理研究所，上海市嘉定区嘉罗公路 2019 号，201800

[2]中国科学院上海高等研究院上海同步辐射光源，上海市浦东新区张江高科技园区海科路 99 号，201204

*Email:hujun@sinap.ac.cn

摘要正文：生物系统中产生的活性氧 (ROS) 对生理过程至关重要。然而，生物体内过量的 ROS（氧化应激）会损害关键的细胞成分，导致许多疾病。尽管一些商用抗氧化剂可以抵消 ROS 损伤，但它们的组织渗透性不足、正常 ROS 功能的破坏以及可能的毒性导致 ROS 诱发的慢性疾病的临床试验结果令人失望。因此，有必要开发新的抗氧化策略。本文，我们报道了一种由纯氮气组成的新型“抗氧化剂”，以超小粒径纳米气泡 (UNB) 的形式存在，可以缓解细胞中的氧化应激。我们的结果表明，UNB 可以降低氧化应激下的细胞 ROS 水平并提高存活率和增殖率。此外，UNB 可以减少对细胞生物大分子（脂质、蛋白质和核酸）的氧化损伤。因此，UNB 是一种有前途的非化学抗氧化策略，具有对抗氧化应激相关疾病的潜在应用价值，并且没有化学抗氧化剂的天然缺陷。

关键词：超小粒径纳米气泡；ROS；氧化损伤；抗氧化

Strategy to Relieve Cellular Oxidative Stress Based on Ultra-small Nanobubbles Without Exogenous Antioxidants

Jin Zheng[1], Lijuan Zhang[2], Jun Hu[1,*]

[1]Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China.

[2]Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China.

*hujun@sinap.ac.cn

Reactive oxygen species (ROS) produced in living systems are essential to physiological processes. However, excess ROS in the organism (oxidative stress) damages crucial cell components, leading to many diseases. Although some commercial antioxidants can counteract ROS damage, their inadequate tissue penetration, disruption of normal ROS functions, and possible toxicity have led to disappointing results in clinical trials for ROS-induced chronic diseases. Thus, new antioxidant strategies are warranted. Here-in, we report a novel “antioxidant” composed of pure nitrogen gas in an ultra-small nanobubble (UNB) form, which can relieve oxidative stress in cells. Our results indicate that UNBs can reduce cellular ROS levels under oxidative stress and increase survival and proliferation. Besides, UNBs can decrease the oxidative damage to cellular biomacromolecules (lipids, proteins, and nuclear acids). Thus, UNBs are a promising nonchemical antioxidative strategy with potential applications against oxidative stress–related diseases and without the natural defect of chemical antioxidants.

Keywords: Ultra-small Nanobubbles, ROS, Oxidative damage, Antioxidation.

附：报告人为学生

纳米级小气泡的爱因斯坦-斯托克斯关系

周有斌[1]，黄梦园[1,2]，田发林[3]，施兴华[3,*]，张现仁[1,*]

[1]北京化工大学，北京市朝阳区北三环东路 15 号，100029

[2]Institute of Process Engineering, Technical University of Dresden, Helmholtz Str. 14, 01069 Dresden, Germany

[3]国家纳米科学中心，北京市海淀区中关村北一条 11 号，100190

*Email: zhangxr@mail.buct.edu.cn

摘要正文：由于超细气泡系统的物理化学性质受其尺寸的影响，因此确定超细气泡系统的尺寸和分布至关重要。目前，悬浮液中纳米气泡的大小和分布通常是通过动态光散射(DLS)或纳米颗粒跟踪分析(NTA)来测量。这两种技术均是通过基于布朗运动理论的爱因斯坦-斯托克斯方程来确定气泡大小。然而，目前尚不清楚爱因斯坦-斯托克斯方程在多大程度上适用于这种纳米级超细气泡。在本工作中，我们利用分子动力学模拟评估了爱因斯坦-斯托克斯方程在直径小于10 nm的体相纳米气泡中的适用性，并与不含溶解气的纳米空泡和铜纳米颗粒进行了比较。结果表明，刚性（铜）纳米颗粒在水中的扩散系数与爱因斯坦-斯托克斯方程高度一致，仅在半径小于1 nm的纳米颗粒中存在轻微偏差。然而，对于纳米气泡，包括甲烷纳米气泡和不含溶解气的纳米空泡，当气泡半径大于3nm时，扩散系数与爱因斯坦-斯托克斯方程的偏差很大。这种偏差归因于纳米气泡的可变形性，它导致了一种类似气垫的缓冲作用，从而降低了纳米气泡的扩散[1]。

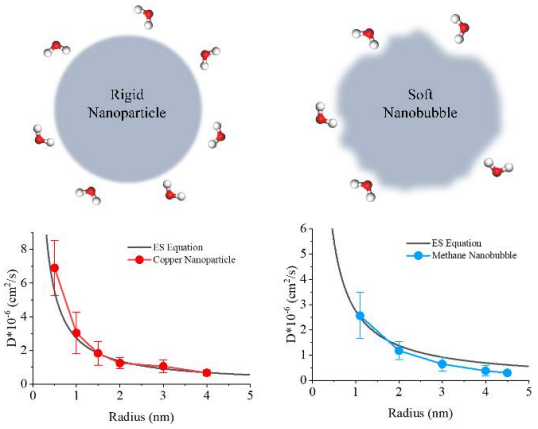


Fig. 1. Comparison of diffusion coefficients determined from simulations and Einstein's Stokes equations. (left) nanoparticle, (right) nanobubble.

关键词：纳米气泡；反常扩散；分子动力学模拟

参考文献

1. Zhou, Y.; Huang, M.; Tian, F.; Shi, X.; Zhang, X., Einstein–Stokes relation for small bubbles at the nanoscale. *The Journal of Chemical Physics* **2024,** *160* (5), 054109.

报告人/墙报展示人简介：

报告人周有斌，北京化工大学博士研究生，研究发现为纳米气泡动力学行为的分子模拟研究。

新兴的中国微纳气泡氢水灌溉农业-机遇与挑战

沈文飚*

南京农业大学生命科学学院，江苏南京，210095

* wbshenh@njau.edu.cn

摘要正文：

氢是宇宙中最丰富的元素。在地球大气中，氢气是除了甲烷之外含量最丰富的还原性气体，其在维持地球大气的氧化还原状态中具有重要的作用[1]。氢农业是指运用氢气或产氢材料，以微纳米富氢水或氢气熏蒸等方式提高农林牧副渔等相关产品产量以及品质的实践，其跨度可以从田间到餐桌，同时其发展还涉及到食品与营养学等学科[2]。尽管目前还不清楚植物氢气的代谢途径和详细机制，但是大量的证据已经提示氢气可以调节植物生长、发育和应激反应。改善土壤微生物菌群和提高土壤肥力是微纳米气泡氢水灌溉具有提质增产效应的生物学基础。氢气也可作为一种信号分子调控植物代谢。最近的研究发现，与植物氮素吸收利用能力相关的硝酸还原酶可能是氢气的靶点（磷酸化修饰），而植物的氮素吸收与利用能力是影响作物产量的关键因素，这也是氢农业大田实践的生物化学基础[3]。此外，microRNAs 表达[4]和激素信号转导[5]也作为重要机理来解释氢气生物学效应。当前，微纳气泡氢水灌溉农业大田试验已经在主粮作物水稻和草莓、番茄等园艺作物中开展。富氢水灌溉增加稻米的大小和重量，改善大米品质，降低重金属镉、锡含量；提高磷、钾、镁、铁的含量[6]。微纳气泡氢水灌溉还能显著提高草莓产量（正常种植条件下 16.7%~33.3%），并延长草莓保鲜期，缓解农用化学品对草莓整体香气的负面影响[7,8]，类似的正面效果也在番茄和小青菜大田试验中得到证实。值得一提的是，氢农业涉及全产业链，包括从采前、采中、采后的生产、加工、流通、销售到消费者的全过程。总体看，氢农业有望逐步扩展到农林牧副渔各行业，推动农业生产方式的变革，减少碳足迹的同时提高生产力。此外，氢农业的发展为氢农机和基于氢气生物学效应的氢家电带来新的发展机遇。当然，氢农业也面临的一些问题，例如，不同植物/品种对外源氢气刺激的敏感性存在差异，且不适合的氢浓度会有明显的负面效应。上述问题仍需要有志于加入氢农业领域的机构、企业、专家学者和广大农业从业者的广泛参与。

关键词：氢气；微纳米气泡；氢农业

参考文献

[1] Constant P, Poissant L, Villemur R. Tropospheric H_2 budget and the response of its soil uptake under the changing environment[J]. Science of the Total Environment, 2009, 407(6): 1809-1823.

[2] 沈文飚,孙学军.崭露头角的氢气生物学[J].中国生物化学与分子生物学报，2019, 35(10): 1037-1050.

[3] Cheng P, Wang Y, Cai C, et al. Molecular hydrogen positively regulates nitrate uptake and seed size by targeting nitrate reductase[J]. Plant Physiology, 2023, 193(4): 2734-2749.

[4] Xu S, Jiang Y, Cui W, et al. Hydrogen enhances adaptation of rice seedlings to cold stress via the reestablishment of redox homeostasis mediated by miRNA expression[J]. Plant and Soil, 2017, 414: 53-67.

[5] Li L, Lou W, Kong L, et al. Hydrogen commonly applicable from medicine to agriculture: From molecular mechanisms to the field[J]. Current Pharmaceutical Design, 2021, 27(5): 747-759.

[6] Cheng P, Wang J, Zhao Z, et al. Molecular hydrogen increases quantitative and qualitative traits of rice grain in field trials[J]. Plants, 2021, 10(11): 2331.

[7] Li L, Wang J, Jiang K, et al. Preharvest application of hydrogen nanobubble water enhances strawberry flavor and consumer preferences[J]. Food Chemistry, 2022, 377: 131953.

[8] Jin Z, Liu Z, Chen G, et al. Molecular hydrogen-based irrigation extends strawberry shelf life by improving the synthesis of cell wall components in fruit[J]. Postharvest Biology and Technology, 2023, 206: 112551.

报告人/墙报展示人简介：

沈文飚，教授，南京农业大学博士生导师。以通讯作者在 Curr Biol、Plant Physiol、Mol Plant、Plant J、New Phytol、Nanoscale、Environ Pollut、Plant Cell Environ、J Exp Bot、Free Radic Biol Med、Chem Eng J、Food Chem 和 Postharvest Biol Tec 等 SCI 刊物发表论文 180 多篇。入选 2014-2023 年爱思唯尔发布的 “中国高被引学者”榜单，获得 6 项氢农业的国家发明专利。尝试从大田到餐桌的可持续和低碳氢农业的理论与实践工作，相关的目标是让农产品恢复原味，提高风味物质含量，降低农药和化肥的使用以及重金属的积累，延长农产品的保鲜期/贮藏期，从而为人类提供绿色健康食品。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

Micro and Nanobubbles Influence on Membrane Fouling During Drinking Water Treatment

Pan Li, Nachael Mwanga, Chenao Xu,Yubin Ye, Niquan Liu

College of Environmental Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, PR China

**Corresponding author: Pan Li*

lipan@tongji.edu.cn

The demand for clean and safe drinking water has risen significantly due to population growth and declining water quality, caused by a high volume of pollutants entering water bodies. Membrane technology has emerged as a solution for providing clean and safe drinking water while occupying a small footprint. However, membrane fouling remains a substantial challenge during ultrafiltration processes despite its effectiveness in removing contaminants. Conventional fouling prevention methods like chemical treatments and backwashing are expensive, environmentally problematic, and often disrupt the filtration process. This situation has led to the exploration of innovative solutions such as micro and nanobubbles (MNBs), which offer lower environmental impact and provide a dual benefit of fouling prevention and enhanced cleaning capabilities. Their small size, higher surface area to when compared to their volume, stability across various pH levels, and highly negative charge improve their interaction with water pollutants, preventing their adhesion to the membrane surface. Although it's known that the size, concentration, and distribution of MNBs significantly affect their behavior and interaction with pollutants in water, there's limited understanding of how these factors specifically impact membrane processes. Additionally, the high costs associated with generating MNBs limit the global adoption of this technology. Therefore, this research aims to address these challenges through carefully designed lab-scale experiments. The first experiment will focus on producing bubbles of the desired size and concentration by adjusting the release pressure of air-saturated water from the microbubble generator using a single release valve. The second experiment will optimize release intervals to halve power consumption. Two types of membranes will be utilized: hollow fiber membranes, which have been used for an extended period, and ceramic membranes, which are emerging competitors. Humic acid will simulate organic foulants, mimicking natural organic matter found in water and causing similar fouling effects. This will help understand and develop effective strategies to mitigate membrane fouling in water treatment processes. The research's objectives extend beyond immediate outcomes, aiming to prevent membrane fouling, reduce power consumption, and develop cost-effective, environmentally friendly water treatment solutions. As water scarcity and environmental concerns escalate, such innovative approaches become increasingly crucial.

基于臭氧微纳米气泡技术处理土库曼斯坦钻井废水的探索研究

吉永忠[1,*]，朱园园[1]　李永强[2]，兰清泉[2]，

1. 中国石油川庆钻探国际工程公司

2. 南京天祺超氧科技有限公司

钻井现场污水池中钻井废水主要是由钻井液的高倍稀释液、采出液、地下水、清洗设备产生废水、废弃岩屑、废弃钻井液、雨水和少量生活污水混合而成，具有稳定性好、化学需氧量（COD）高、色度高、降解难的特点。现有处理方法包括物理法、化学法和生物法，但由于钻井废水可生化性差，含有少量重金属，有一定毒性，使用传统方法处理存在耗时长、影响微生物活性、产生二次污染及成本高等问题。

目前微纳米气泡技术已经广泛应用于水处理行业，臭氧以微纳米气泡形式进入污水中，增强其传质效果，微纳米气泡表面以及破裂时会产生·OH，可以催化臭氧与有机物发生一系列链式反应，提高臭氧在高级氧化中的反应速率，处理效果好，同时无废气产生，无固体催化剂添加，无二次污染，经济环保。

本研究以土库曼斯坦钻井现场污水池的钻井废水为研究对象，通过芬顿、臭氧微纳米气泡高级氧化技术，使其高浓度COD降解和高色度脱除。土库曼斯坦钻井现场污水池中经过自然蒸发浓缩的钻井废水浓缩倍数约为5倍，取得500 mL现场浓缩液。将浓缩液稀释10倍，以此方式稀释后的水样模拟实际现场产生的钻井废水。模拟试验认为，宜将稀释后的水样先进行芬顿处理，然后再使用臭氧微纳米气泡高级氧化处理。稀释后的水样TOC为2408 mg/L，COD为6550 mg/L，色度为2286.4 倍；芬顿处理后TOC为173.5 mg/L，TOC去除率为92.8%，COD为256 mg/L，COD去除率为96.1%，色度为50倍；臭氧投加量1873 mg/L时，TOC为17.68 mg/L，TOC去除率为99.27%，COD为29 mg/L，COD去除率为99.56%，色度为4倍。研究认为，通过芬顿预处理，将高浓度溶解COD转变成固废，耗能更低；芬顿处理后废水中存在的COD成分基本为溶解性有机物，再使用臭氧微纳米气泡进行深度降解，可完全去除有机物，并脱除废水色度。

研究表明，臭氧微纳米气泡高级氧化技术结合其他预处理工艺方式可为钻井废水处理提供一种高效、经济、环保的新工艺，解决现在清洁化生产问题，将钻井废水处理提升到一个新的高度。

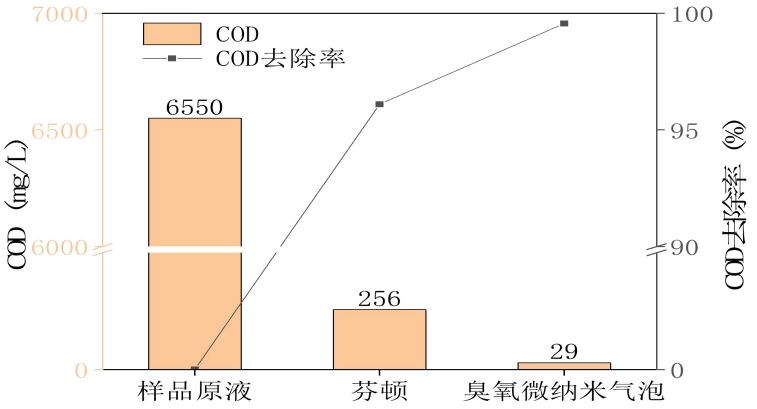


Fig. 1 Parameter change in process flow

关键词：臭氧微纳米气泡；钻井废水；高浓度难降解有机物；高级氧化；零排放

参考文献:

[1] LU RONGHU, HUANG GUOHE, ZHANG HONGYAN,et al. Treatment of drilling wastewater by combined coagulation-ultraviolet fenton-pressurized biological processes[J].Journal of environmental engineering,2010, 136(3):281-287.

[2] 杨德敏,袁建梅. O3/TiO2/Al203处理钻井废水的实验研究[J]. 工业水处理,2014,34(6):69-72.

[3] ZHAO C L, ZHOU J Y, YAN Y, et al. Application of coagulation/flocculation in oily wastewater treatment: a review[J]. Science of the Total Environment，2021，765：142795.

[4] CHIKWE T N, IGWE E C. Characterization, efffects and chemical treatment of heavy metals in produced water from injection wells using hydroxide precipitation[J]. Nigerian Journal of Chemical Research，2024，28（2）：74-87.

[5] KUYUKINA M S, KRIVORUCHKO A V, IVSHINA I B. Advanced bioreactor treatments of hydrocarbon-containing wastewater[J]. Applied Sciences，2020，10（3）：831.

[6] 黄青, 刘爱荣, 张立娟. 微纳米气泡特性及在土壤环境改善中的应用 [J]. 环境工程技术学报，2022，12（4）：1324-1332.HUANG Q, LIU A R, ZHANG L J. Characteristics of micronanobubbles and their applications in soil environment improvement[J]. Journal of Environmental Engineering Technology，2022，12（4）：1324-1332.

报告人简介：

吉永忠（1968—),男，高级工程师，主要研究方向为石油工程领域的钻井液、完井液和防漏堵漏技术，长期研究和关注微泡沫钻井液及微纳米气泡技术。

邮箱：jyz5288@163.com

臭氧微纳米气泡强化处理高盐有机废水

谢勇冰[1*]，王双[2]，任名珠[1]，曹宏斌[1]

[1]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，1010190

[2]济南大学化学化工学院，山东省济南市市中区南辛庄西路 336 号，250012

*Email: ybxie@ipe.ac.cn

摘要：高盐有机废水处理是工业废水污染控制的重要技术难题，其产生于各种生产环节或者废水零排放产生的膜浓缩废水，具有废水组成复杂，氧化处理难度大等特点。特别在后续膜处理过程中，废水中有机物造成的膜污染现象突出，严重影响废水处理成本和稳定运行周期。臭氧氧化技术广泛应用于工业废水氧化处理，但具有反应选择性，处理高盐废水时氧化效率较低。本研究团队针对以上难题，引入微纳米气泡技术强化臭氧氧化有机物过程。本报告简要介绍两部分工作：一是通过微纳米气泡强化气液传质过程，并结合陶瓷膜催化剂协同强化催化处理高盐有机废水；二是通过臭氧微纳米气泡结合絮凝药剂，实现高盐废水中有机物和总磷的协同深度去除。

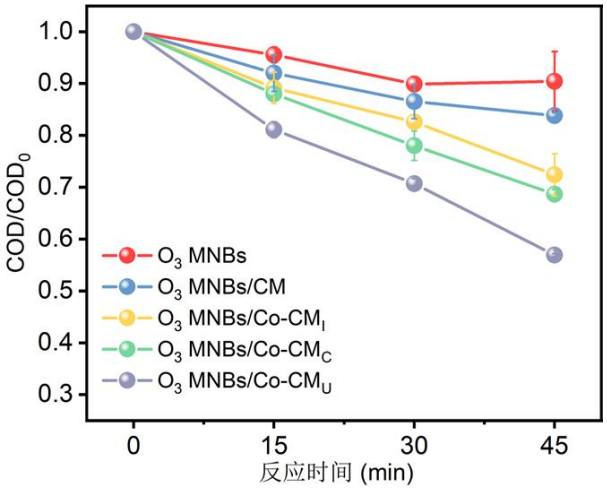


Fig. 1 Ozone nano-micro bubbles coupled with ceramic membrane enhanced reverse osmoses concentrate treatment

关键词：臭氧微纳米气泡；高盐废水；反渗透浓水；催化陶瓷膜

参考文献

[1] **S. Wang, J. K, Qiu, M. Z. Ren, Y. Cui, Y. B. Xie* and H. B. Cao. Enhanced treatment of reverse osmosis concentrates by ozone micro-nano bubbles coupled with catalytic ceramic membranes, *J. Water Process Eng*., 2024, 61, 105213.**

报告人简介：

谢勇冰，中国科学院过程工程研究所研究员，博士生导师，国家级青年人才。主要从事臭氧界面活化机理、新型催化材料和工业废水深度处理技术研究。联合编著中英文专著 3 本，在 JACS、ES&T、ACS Catal、Water Res 等期刊发表 SCI 论文 100 余篇，授权国内外发明专利 20 项，担任《Journal of Environmental Engineering》副主编，《工业水处理》编委等。研发技术应用于鞍钢、邯钢等多项焦化废水、钢铁综合废水和浓盐水处理工程，先后获环境科学学会青年科学家奖、颗粒学会青年颗粒学奖、国家科技进步奖二等奖、分析测试协会科学技术奖一等奖、冶金科学技术奖二等奖、环境保护科学技术奖二等奖等。

离子调整辅助微气泡提高石油采收率技术实践

王石头[1,*]，吕伟[1]，于九政[1]，李建山[1]，高雨[1]，何令普[1]，饶天利[2]

[1]中国石油长庆油田分公司油气工艺研究院，陕西省西安市未央区明光路51号，710018

[2]中国石油长庆油田分公司第三采油厂，宁夏省银川市兴庆区长庆油田银川生产指挥中心，750000

*Email: 43988131@qq.com

摘要正文：随着非常规油气田的开发，二次三次采油技术引起社会广泛关注，泡沫因其堵水不堵油的独特性质得到广泛关注，但是由于普通泡沫存在稳定性差、注入压力高、遇油消泡和施工成本高等问题，限制了普通泡沫在油藏开发中的推广使用。与普通泡沫相比，微气泡具有直径小（10~100μm）、比表面积大、稳定性高且具有类似水的流动性等特点，其在生物医学、矿物浮选以及石油工程等领域取得了广泛的应用。近年来，长庆油田科研人员针对长期水驱油藏存在平面多方向见水、剩余油分布复杂及再难以有效驱动的开发问题，攻关形成了“微纳米气泡（孔板物理发泡）扩大注入介质向地层深部波及为主+调整注入水离子提高原油从岩石表面脱附能力为辅”的微泡驱技术,如图Fig.1-2所示，实现了注入介质对目标油藏的“洗油效率、波及体积”的双提升。2018年首次在长庆靖安油田特低渗“双高”油藏成功应用，小PV（0.09）注后地层压力保持水平提升15%，实现了快速补能，同时生产井多方向见效，采收率提高2.6个百分点，试验效果显著，如图Fig.3所示，建成中国石油首个微泡驱先导试验示范区，并成功入选2022年度中石油十大科技进展，该项技术预计可推广应用到3.4亿吨地质储量的相似油藏开发中，社会经济效益巨大。

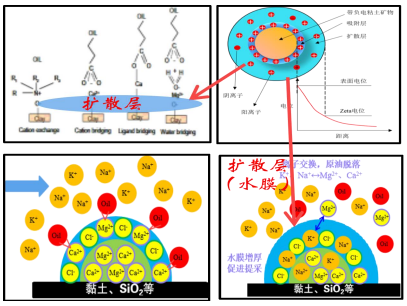


Fig. 1 Mechanism of ion adjustment under high salinity

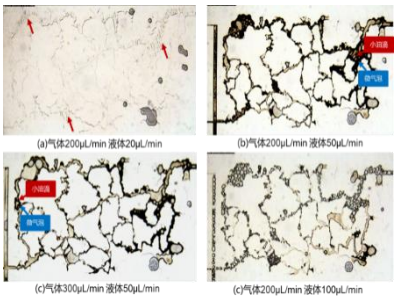


Fig. 2 Oil displacement process of microbubbles in core sheet model

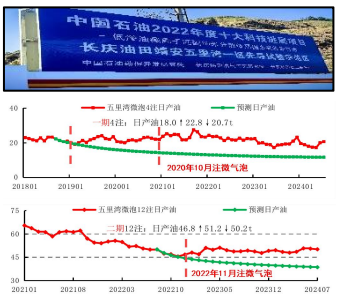


Fig. 3 Microbubble flooding test well group production curve

关键词：特低渗“双高”油藏；微气泡；快速补能；洗油效率；波及体积

参考文献

[1] 刘凯, 王前荣, 王维波. 微泡沫提高采收率技术研究进展[J]. 应用化工, 2017, 46(6):1204-1209.

[2] 俞宏伟, 马德胜, 李实, 等. 水气分散体系提高采收率实验研究[J]. 科学技术与工程, 2013, 13(33):9946-9949.

[3] 葛罗. 新型水-气分散体系提高低渗透油藏采收率的实验研究[J]. 精细石油化工, 2023, 40(01):9-13.

[4] JAUREGI P, VARLEY J. Colloidal gas aphrons:A novel approach to protein recovery [J]. Biotechnology & Bioengineering, 2015, 59(4):471-481.

[5] SALEEM H, PAL P, HAIJA M A, et al. Regeneration and reuse of bio - surfactant to produce colloidal gas aphrons for heavy metal ions removal using single and multistage cascade flotation [J]. Journal of Cleaner Production, 2019, 217:493-502.

报告人/墙报展示人简介：

王石头，男，2008 年毕业于长江大学，硕士研究生，现为长庆油田分公司油气工艺研究高级工程师，主要从事 CO_2 驱、微泡驱等提高采收率技术方面的技术研究与应用，通讯地址为陕西省西安市未央区明光路 51 号，邮编 710018，电话 029-86596537。

附：非学生

A new process for enhanced coagulation with micro-nano bubbles to meet the demands of cleaning production

Xiaojiang Huang[1], Zhiqiang Zhang[1,2], Jinsuo Lu[1,2]*

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

[2]Shaanxi Key Laboratory of Environmental Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China

*Email: lujinsuo@xauat.edu.cn

Background, Aims and Scope. To minimize the risk of carcinogenicity, teratogenicity and mutagenicity in chlorinated drinking water, enhanced removal of disinfection by-product precursors, mainly natural organic matter (NOM), has become an effective option for controlling the generation of disinfection by-products (DBPs) [1]. Previous studies have shown that enhanced coagulation is an effective process to reduce the generation potential of DBPs. However, all existing enhanced coagulation processes inevitably require the addition of chemicals other than coagulants[2–4]. With the implementation of China's "14th Five-Year Plan", the existing enhanced coagulation process no longer meets the national demand for cleaning production, so it is of high research significance to try to develop a new enhanced coagulation process that meets the demand for cleaning production while improving the efficiency of NOM removal. In this study, based on the cleaning characteristics of micro-nano bubbles and their adsorption[5,6] and oxidation abilities[7,8], micro-nano bubbles were used as the initial collision particles in the coagulation process, and the co-coagulation process of micro-nano bubbles (MNBs-coagulation process) was proposed, with the hope that the process could meet the requirements of cleaning production, strengthen the coagulation efficiency, reduce the potential of disinfection by-products, and contribute to the promotion of the national programme on pollution reduction and carbon synergies.

Methods. Based on the concept of cleaning production and the need for enhanced coagulation, the MNBs-coagulation process was proposed by adding MNBs generators to the coagulant hydrolysis tank to meet the process requirements. Unlike the conventional coagulation process where the coagulant was directly injected, in the MNBs-coagulation process the diluted coagulant firstly reacted with the MNBs through the self-circulating system of the MNBs generator, and then the hydrolysate of the coagulant containing the MNBs was transferred to the coagulation tank, and then the coagulation and mixing process was completed in accordance with the predetermined procedure. In this study, polymeric aluminum chloride (PACl) was used as the coagulant, and natural surface water or simulated surface water was used as the experimental raw water, and the enhanced coagulation efficacy of the MNBs-coagulation process was judged mainly by comparing the DOC concentration and the fluorescence intensity of each component of NOM in the effluent water. In addition, starting from the distribution of polymeric forms of PACl and the physicochemical characteristics of MNBs, the mechanism related to the involvement of MNBs in the coagulation process on the enhancement of coagulation efficacy was analyzed.

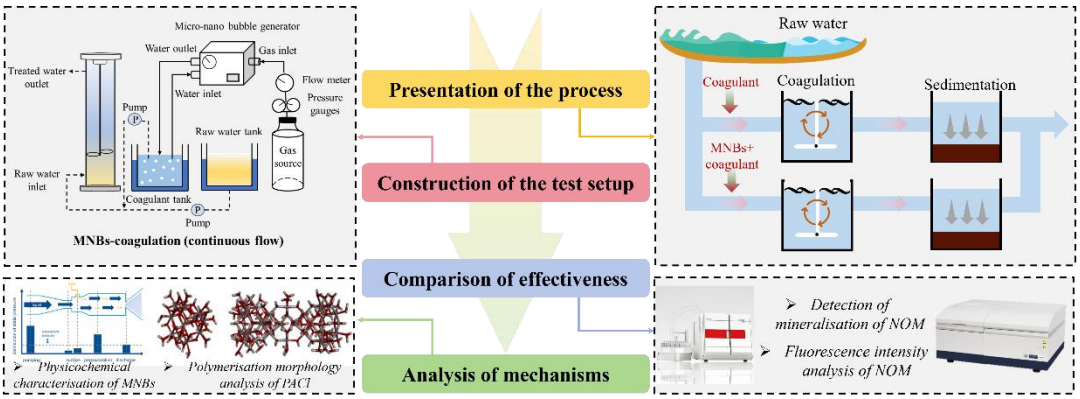


Fig. 1 Schematic diagram of the research methodology

Results and Discussion. The experimental results showed that the participation of MNBs in the continuous coagulation process could increase the removal efficiency of humic acid (HA) by 26.5%. Compared with the conventional coagulation process, the MNBs-coagulation process had stable pollutant removal efficiency and strong resistance to fluctuations in influent water quality. In addition, the results of EEM fluorescence spectroscopy showed that the MNBs-coagulation process was able to enhance hydrophilic NOM removal along with hydrophobic NOM removal, and that the process was able to effectively enhance disinfection by-product precursor removal, which was expected to reduce the potential for the generation of DBPs in the subsequent chlorination disinfection process. The enhanced removal of pollutants in the MNBs-coagulation process was mainly attributed to the ability of MNBs to force PACl hydrolysis. The hydroxyl groups (OH^-) adsorbed on the surface of the MNBs during the generation process could force the hydrolysis of PACl, which induced and strengthened the adsorption bridging and netting sweeping effects during the coagulation process. In addition, the oxidation effect of hydroxyl radicals generated by the rupture of micro bubbles during the MNBs-coagulation, as well as the enhanced complexation effect of the polyanion effect of MNBs, could also assist in the enhanced removal of NOM in the MNBs-coagulation process. Based on the development of the MNBs-coagulation process and the demand for upgrading the rural decentralized water supply process, the MNBs-coagulation process was applied to the short-range coagulation-ultrafiltration process in the hope that the process could alleviate the fouling of the ultrafiltration membranes while reinforcing the coagulation efficiency. It was able to effectively reduce the transmembrane pressure difference of the ultrafiltration membrane (the pressure difference was reduced by about 41.6%) and the percentage of irreversible contamination (the percentage was reduced by about 43.1%) during 40 consecutive days of operation. The above research results were expected to provide scientific basis and theoretical support for promoting the application of MNBs-coagulation process in engineering applications.

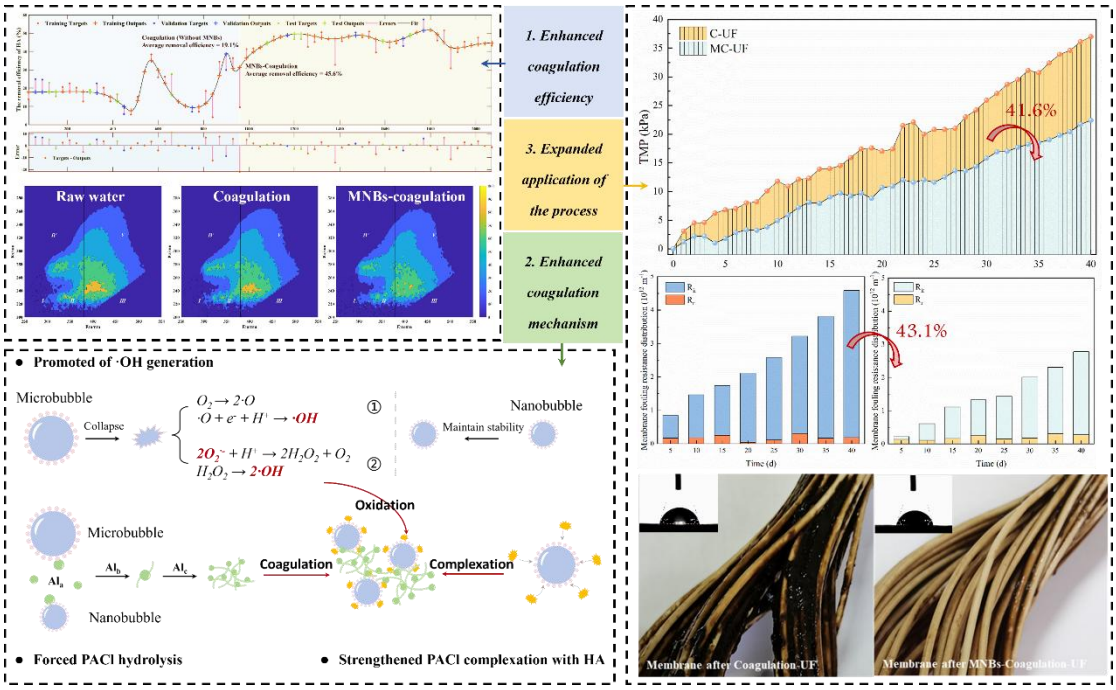


Fig. 2 Schematic diagram of the enhanced coagulation efficiency, the enhanced coagulation mechanism and the mitigated ultrafiltration membrane fouling performance of MNBs-coagulation

Conclusion. The proposal of MNBs-coagulation process breaks people's inherent thinking about the traditional drinking water treatment process, so that the coagulation process has been silent for many years to appear in the public's field of vision again with a new appearance, and the MNBs-coagulation process has the effect of improving the removal efficiency of NOM and alleviating the fouling of ultrafiltration membranes, so that the public began to look forward to the application of this cleaning process in the actual engineering and to improve the quality of drinking water.

Keywords: drinking water treatment; polymeric aluminum chloride; forced hydrolysis; disinfection by-product precursors

References

[1] TAK S, VELLANKI B P. Natural organic matter as precursor to disinfection byproducts and its removal using conventional and advanced processes: state of the art review[J]. Journal of water and health, 2018, 16(5):681–703.

[2] CHEN M, NAN J, JI X, et al. Effect of adsorption and coagulation pretreatment sequence on ultrafiltration membrane fouling: Process study and targeted prediction[J]. Desalination, 2022, 540:115967.

[3] YANG X, YAO L, WANG Y, et al. Simultaneous removal of algae, microcystins and disinfection byproduct precursors by peroxymonosulfate (PMS)-enhanced Fe(III) coagulation[J]. Chemical Engineering Journal, 2022, 445:136689.

[4] HU S, JIN X, LIU M, et al. Enhanced removal strategy towards organic matter with low coagulability: Immediate entrapment and complexation of oxidized intermediates by the hybrid ozonation-coagulation process[J]. Journal of Hazardous Materials, 2023, 465:133288.

[5] SUGANO K, MIYOSHI Y, INAZATO S. Study of Ultrafine Bubble Stabilization by Organic Material Adhesion[J]. JAPANESE JOURNAL OF MULTIPHASE FLOW, 2017, 31(3):299–306.

[6] SOYLUOGLU M, KIM D, ZAKER Y, et al. Stability of Oxygen Nanobubbles under Freshwater Conditions[J]. Water Research, 2021, 206:117749.

[7] ZHOU S, MARCELINO K R, WONGKIEW S, et al. Untapped Potential: Applying Microbubble and Nanobubble Technology in Water and Wastewater Treatment and Ecological Restoration[J]. ACS ES&T Engineering, 2022, 2(9):1558–1573.

[8] FAN W, ZHOU Z, WANG W, et al. Environmentally friendly approach for advanced treatment of municipal secondary effluent by integration of micro-nano bubbles and photocatalysis[J]. Journal of Cleaner Production, 2019, 237:117828.

报告人/墙报展示人简介：

黄晓江，男，江苏江阴人，西安建筑科技大学环境与市政工程学院博士研究生，师从卢金锁教授，提出了微纳米气泡驱动下的新型强化混凝工艺，聚焦于该工艺背景下的污染物迁移转化规律及副产物控制，并作为主要研究人员参与国家自然科学基金面上项目(52470014)。近年来，以第一作者或除导师外顺位第一作者在 Water Research 和中国环境科学等期刊国内外上发表论文 4 篇并申请发明专利 1 项。

附：报告人/墙报展示人为学生

在不同溶液中电化学可控产生氧气纳米气泡与氢气纳米气泡

王笑天,[1,2] 王兴亚,[3] 宋浙俊,[1,6] 胡钧,[*,4,5] 周利民,[*,3] 张立娟[*,1,2,3]

[1] 中国科学院上海应用物理研究所, 上海， 中国， 201800

[2] 中国科学院大学, 北京， 中国 100049

[3] 上海高等研究院上海同步辐射光源, 上海， 中国， 201204

[4] 祥符实验室, 嘉善， 中国， 314102

[5] 上海大学, 上海， 中国， 200444

[6] 上海科技大学, 上海， 中国， 201210

邮箱: wangxiaotian@sinap.ac.cn

摘要：纳米气泡的可控与高效产生在废水处理和矿物浮选等各种不同领域中应用至关重要。通过电化学反应产生体相纳米气泡(NBs)是实现这些目标的一种有效途径。在这项研究中，我们介绍了一种创新的电解电池设计，具有不同的阳极和阴极隔间，以促进氢纳米泡(H_2-NBs)和氧纳米泡(O_2-NBs)的产生。结果表明，纳米气泡的浓度受电解电压、电解时间和电解质溶液浓度的显著影响。在较大电解电压和合适电解时间下使用较高浓度的电解液，可以稳定制备出浓度为 1.8×10^8/mL 的氢纳米泡(H_2 - NBs)。此外，电解质溶液类型对纳米气泡的稳定性有实质性影响，纳米气泡在碱性溶液中更稳定。我们的工作为纳米气泡的受控形成提供了宝贵的见解，这对于推进纳米气泡的实际应用至关重要。

关键词: 纳米气泡 ; 电化学

简介：

王笑天，男，26，博士研究生，无机化学，wangxiaotian@sinap.ac.cn

微细气泡技术从现象级应用走向产业级应用

陈鲁海[1]

[1]纳泡检测技术（上海）股份有限公司，上海，200062

*Email: 373058058@qq.com

摘要正文：微细气泡作为一门新兴的次底层核心技术，与诸多传统工艺和技术相结合，在实践中形成了大量组合技术工艺包，广泛应用于农林牧渔、盐碱地改良和土壤修复、水务行业、选矿和石油行业、医疗和生物大健康、文物清洗和工业/民用清洗等领域。微细气泡在中国上世纪 70 年代已有应用，最早是用于核素分离，应用远远走在机理研究前面。从应用中发现“有用的现象”并联合高校科研院所开启机理研究，再通过机理研究成果反哺工艺设计的优化方案，从而实现：现象级应用（知其然而不知其所以然）→课题立项→机理研究→论文成果→专利→标准→产业级应用，形成完善高效的组合技术工艺包和整体解决方案。这种产学研用的循环上升，是微细气泡技术产业化应用的核心关键。

关键词：微细气泡；微纳气泡；机理研究；现象级应用；产业级应用

参考文献

[1] 李兆军, 杜浩. 我国微细气泡技术发展综述[J]. 过程工程学报, 2017, 17(04):655-663.

[2] 杨晓东，陈鲁海，张立娟，等. 微纳气泡技术及在农业种植与养殖方面的应用[J]. 净水技术, 2021, 40(02):118-126. DOI:10.15890/j.cnki.jsjs.2021.02.014.

[3] 王美琳, 陈鲁海, 刘亚男. 微纳米气泡的气液界面作用在水处理与农业种植及水产养殖中的应用[J]. 净水技术, 2023, 42(06):14-21. DOI:10.15890/j.cnki.jsjs.2023.06.003.

[4] Guoqing L ,Yanbiao L ,Wei H , et al.Simultaneous remediation of arsenic and organic chemicals contaminated soil and groundwater using chemical oxidation and precipitation/stabilization: a case study.[J].Environmental science and pollution research international,2023,30(36):86478-86483.

[5] Zhang Y ,Chen L ,Wang M , et al.Evaluating micro-nano bubbles coupled with rice-crayfish co-culture systems: A field study promoting sustainable rice production intensification.[J].The Science of the total environment,2024,933173162-173162.

[6] Yinyin Z ,Li C ,Luhai C , et al.Effect of micro-nano bubbles on the remediation of saline-alkali soil with microbial agent.[J].The Science of the total environment,2023,912168940-168940.

[7] Zhang Y ,Chen L ,Wang M , et al.Evaluating micro-nano bubbles coupled with rice-crayfish co-culture systems: A field study promoting sustainable rice production intensification.[J].The Science of the total environment,2024,933173162-173162.

报告人/墙报展示人简介：

陈鲁海，上海金相企业管理有限公司（科技成果转化孵化平台）创始人。现任民盟中央农业委委员、民盟上海经信委副主委，全国纳米技术标准委员会委员，全国微细气泡技术标准委员会副秘书长，中国颗粒学会理事，中国颗粒学会微纳气泡专业委员会副主任委员，东华大学研究生院特聘导师、全国循环经济工程实验室副主任。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

纳米气泡氢水在保健领域的应用

报告人：李烨，　　第二作者：裴忠强

1. 工作单位：大连迪创氢能源科技有限公司 地址：大连开发区中关村信息谷 邮编：2100009

2. 工作单位：大连迪创氢能源科技有限公司 地址：大连开发区中关村信息谷 邮编：2100009

1. 邮箱：liye1632010@163.com

2. 邮箱：fy_546@126.com

本文总结了纳米气泡氢水在保健领域的广泛应用及其潜在的健康效益。纳米气泡氢水通过纳米气泡技术，实现了氢气高浓度的物理溶解，形成富含氢分子的饮用水，且浓度保持时间久。纳米气泡氢水在促进机体新陈代谢、清除体内自由基、抗氧化、改善炎症、促进药物吸收、提高免疫力等方面展现出一定的效果，具有广泛的应用前景。

纳米气泡氢水在医学领域展现了良好的生物学效应，特别是在健康养生领域。我们在企业的应用中，与科研院所的合作项目中，积累了大量的应用案例。如促进药物的吸收，提高药效；缓解肺部炎症与矽肺纤维化；洗浴中可促进血液循环，去除角质与黑色素，防控银屑病等；抗氧化，有效清除体内 ROS，延缓衰老；同时也有一定的解酒作用。

综上所述，纳米气泡氢水在保健方面展现出多方面的优势和应用潜力。随着相关研究的深入和技术的不断进步，相信其应用前景将更加广阔。本文希望通过介绍企业在纳米气泡氢水的应用实际，为相关领域的研究人员和消费者提供参考和借鉴。

关键词：纳米气泡氢水 2.健康效益

参考文献：

Zanini D, Todorovic N, Korovljev D, Stajer V, Ostojic J, Purac J, Kojic D, Vukasinovic E, Djordjievski S, Sopic M, Guzonjic A, Ninic A, Erceg S, Ostojic SM. The effects of 6-month hydrogen-rich water intake on molecular and phenotypic biomarkers of aging in older adults aged 70 years and over: A randomized controlled pilot trial. Exp Gerontol. 2021 Sep 30:111574.

韩文杰，欧敏，刘于红等。氢气饱和生理盐水对氧中毒肺损伤的防护作用. 中华航海医学与高气压医学杂志，2011（3）：129-923

The effect of skin moisturizer using micro nano bubble technology in the treatment of atopic dermatitis

Gui Junfang [1], Wang Qinyi [1], Zhu Shiqing [2], Hong Yiming [3]（报告人）, Zhang Yi[1]*

(Shanghai Tongji University Affiliated Shanghai Dermatology Hospital, Shanghai 200443)
Email: sanwell@yunnic-doctor.com

Objective: To observe the effect of moisturizing agents using micro nano bubble (NBs) technology in the treatment of atopic dermatitis (AD). Method: Sixty patients with mild to moderate AD who visited the outpatient department of Shanghai Dermatology Hospital from September to October 2023 were randomly divided into a treatment group and a control group, with 30 patients in each group. The control group was treated with topical application of mometasone furoate cream once a day, once every other day after 2 weeks, for 4 weeks; The treatment group was treated with topical application of mometasone furoate cream once a day, once every other day after 2 weeks, for 4 weeks. At the same time, a moisturizing agent using NBs technology was applied twice a day for 8 consecutive weeks; Both groups of patients were observed for 8 weeks. Record the patient's baseline information and conduct follow-up on the patient at weeks 2, 4, and 8. At the 2nd and 4th week follow-up, the treatment group showed significant efficacy compared to the control group, and the difference between the two groups was statistically significant ($P<0.05$). The skin barrier repair in the treatment group was significantly improved compared to the control group, and the difference was statistically significant ($P<0.05$). At the 8th week follow-up, the recurrence rate in the treatment group was lower than that in the control group among clinically cured patients. Conclusion: In the treatment of AD patients, the use of NBs technology moisturizers can achieve better therapeutic effects, repair the skin barrier, and reduce the possibility of recurrence.

Keywords： Atopic dermatitis; Skin barrier; Mometasone furoate; Humectant for micro nano bubble process

References

1. 中华医学会皮肤性病学分会免疫学组,特应性皮炎协作研究中心. 中国特应性皮炎诊疗指南(2020 版)[J]. 中华皮肤科杂志,2020,53(2):81-88.
2. 中华医学会,中华医学会杂志社,中华医学会皮肤性病学分会,等. 特应性皮炎基层诊疗指南（2022 年）[J]. 中华全科医师杂志,2022,21(7):609-619.
3. Williams H C,Burney P G,Pembroke A C et al. Validation of the U.K. diagnostic criteria for atopic dermatitis in a population setting. U.K. Diagnostic Criteria for Atopic Dermatitis Working Party.[J] .Br J Dermatol, 1996, 135: 12-7.
4. 赵辨. 湿疹面积及严重度指数评分法[J]. 中华皮肤科杂志,2004,37(1):3-4.
5. Elias Peter M,Hatano Yutaka,Williams Mary L,Basis for the barrier abnormality in atopic dermatitis: outside-inside-outside pathogenic mechanisms.[J] .J Allergy Clin Immunol, 2008, 121: 1337-43.
6. van Smeden Jeroen,Bouwstra Joke A,Stratum Corneum Lipids: Their Role for the Skin Barrier Function in Healthy Subjects and Atopic Dermatitis Patients.[J] .Curr Probl Dermatol, 2016, 49: 8-26.
7. 于艳秋,李龙. 玉泽皮肤屏障修护剂对儿童特应性皮炎的干预治疗[J]. 中国中西医结合皮肤性病学杂志,2014,13(4):232-234.
8. 孙之中,刘朝红. 薇诺娜保湿霜治疗特应性皮炎疗效及对皮肤屏障功能的影响研究[J]. 中国美容医学,2018,27(11):49-52.
9. 路坦,申春平,田晶,等. 保湿润肤剂在儿童中重度特应性皮炎治疗中的辅助作用[J]. 中国皮肤性病学杂志,2019,33(7):757-760.
10. Zheng J, Qi J, Song S, et al. An antioxidation strategy based on ultra-small nanobubbles without exogenous antioxidants. Sci Rep. 2023;13(1):8455. Published 2023 May 25. doi:10.1038/s41598-023-35766-5
11. Mitropoulos AC, Pappa C, Kosheleva RI, Kyzas GZ. The Effect of Nanobubbles on Transdermal Applications. Nanomaterials (Basel). 2023;13(18):2600. Published 2023 Sep 20. doi:10.3390/nano13182600

报告人/墙报展示人简介：

Dr.Sanwell：上海云冠医院管理有限公司创始人，云冠医妍实验室联合创始人，氢生活 Hidrogenlife 联合创始人，转化医学技术专家，执业医师，中国研究型医院学会眼科专委会委员，天津市医疗健康学会南北研究会秘书长，上海同济大学双创学院实训基地导师，曾任原上海张江医学创新研究院、上海张江转化医学研发中心临床与政府事务总经理、中日医学科技交流协会理事，曾参与多项国内外知名功能性护肤品、食品的临床功效性研究并将成果发表于 SCI 与核心期刊。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

新一代智能化NTA技术助力纳米气泡表征

李蓓[1]，黎小宇[2]

[1]马尔文帕纳科，上海市闵行区，邮编 201100

[2]马尔文帕纳科，上海市闵行区，邮编 201100

*Email: betty.li@malvernpanalytical.com

摘要正文：纳米气泡因其独特的物理和化学特性，而广泛应用与水体修复、工业清洗、水产养殖、药物传递、污水处理等领域。尽管纳米气泡的制备方法已众所周知，但不同气体、不同的盐浓度、pH值以及溶剂温度、压力、搅拌和流动条件等都将影响纳米气泡的粒径、浓度和长期稳定性[1]，而这些性能决定了纳米气泡的实际应用效果。纳米颗粒示踪分析技术（简称：NTA）极其擅长检测和分析纳米气泡这类相对浓度极低、尺寸极小、粒径分布较宽的颗粒[2]，能够实时、直接可视化悬浮液中纳米尺度的颗粒，提供高分辨率的粒径分布且样品制备简单[3]。马尔文帕纳科仪器新一代纳米颗粒示踪分析仪Nanosight Pro升级了自动颗粒识别、聚焦和智能可变帧频图像采集，极大提高了数据质量、缩短测试时间，同时，采用AI技术进行大数据图像分析，大大消除了人为误差。本文将介绍利用最新的Nanosight Pro纳米颗粒跟踪分析仪，帮助研究者快速捕捉纳米气泡在不同条件下粒径和浓度的变化，并研究纳米气泡的长期稳定性。

关键词：纳米气泡；长期稳定性；Nanosight pro；智能化

参考文献

[48]E. P. Favvas, G. Z. Kyzas, E. K. Efthimiadou, A. C. M. Gen, Bulk nanobubbles, generation methods and potential applications, Current Opinion in Colloid & Interface Science. 2021, 54:101455

[49]N. Nirmalkar, A. W. Pacek, M. Barigou, On the existence and stability of bulk nanobubbles, Langmuir. 2018, 34:10964-10973

[50]C. H. Cho, H. J. Shin, B. Singh, K. Kim, M. H. Park, Assessment of sub-200-nm nanobubbles with ultra-high stability in water, Applied Water Science. 2023,13:149

报告人/墙报展示人简介：

李蓓，马尔文帕纳科亚太卓越应用中心粒度分析高级应用专家。毕业于华南理工大学，2019 年加入马尔文帕纳科公司，从事激光粒度仪、纳米粒度仪的应用培训和技术支持等工作。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：报告人不是学生

微纳米气泡技术在膜污染防治中的应用机制及评估方法研究

王瑞琦[1]，李永强[1]，兰清泉[1]，柳姝[2,*]

1. 南京天祺超氧科技有限公司

2. 北京航空航天大学 材料科学与工程学院

膜分离工艺因其高效去除水中各种杂质的能力，在纯水生产、再生水利用和工业废水处理等领域得到了广泛应用。然而，膜污染问题制约了膜分离技术的应用，影响了其经济可行性和可持续性。近年来，微纳米气泡技术被证明可以显著减少膜污染，然而其抗污机制尚未完全明确，另一方面也缺乏有效的方法来全面评估其抗膜污染效果。美国材料与试验协会（ASTM）提出的基于微滤膜（MFI-0.45）的污染指数模型虽然是一种常用评价方法，但由于MFI模型采用死端过滤，与含气泡体系的实际工况不符。气泡容易在膜表面聚集，影响过流膜面积和过滤阻力等参数，导致渗透通量受到影响。因此，本研究对该模型进行了改进，采用错流过滤模式，考察膜渗透通量随时间变化的趋势，建立了错流膜污染指数（CMFI）。错流过滤模式更接近实际工艺中的膜运行模式，因此能够更真实、准确地反映膜污染情况，提高膜污染评估的可靠性。

本研究通过在焦化废水中分别引入空气微纳米气泡和臭氧微纳米气泡，测量了含有不同气源微纳米气泡的焦化废水的膜污染错流膜污染指数，以评估微纳米气泡在膜系统中抗污染性能。陶瓷膜因其高机械强度和化学稳定性，成为本研究的研究对象。试验结果表明，在焦化废水中引入空气微纳米气泡可使膜污染指数降低32.14%。这是因为微纳米气泡的疏水性在亲水膜表面产生扰动，减少了有机物与膜的接触，进而减缓滤饼层的形成。而当通入300 mg/L臭氧微纳米气泡时，膜污染指数下降了75.56%。臭氧微纳米气泡能够通过氧化还原反应将大分子污染物降解为小分子，改变污染物的结构，生成带有羟基和羧基等亲水官能团的氧化产物，从而减缓污染物在膜表面的吸附。因此，臭氧微纳米气泡不仅可以能够降低错膜表面的污染，也能有效清除膜孔内有机物沉积。

在实际应用中，微纳米气泡技术显著提升了焦化废水膜系统的运行稳定性，系统在长达1年的运行过程中保持了高通量，清洗频率由15天延长至90天，显著延长了膜的使用寿命。当臭氧投加量达到700 mg/L时，COD去除为48.2%，CMFI降低99.6%。本研究为微纳米气泡防治膜污染提供了坚实的理论基础和有效的评价方式。

Table.1 Effect of Air and Ozone Nanobubbles on Membrane Contamination Parameters in Coking Wastewater Treatment

	错流膜污染指数 (CMFI)	CMFI 降低率 %
焦化废水	247.55	-
焦化废水+空气微纳米气泡	167.99	32.14
焦化废水+臭氧微纳米气泡	60.50	75.56

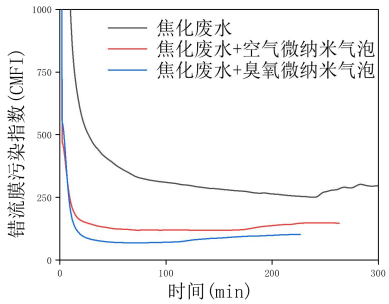


Fig.1 Membrane contamination CMFI model

关键词：错流膜污染指数；抗污染；陶瓷膜；空气微纳米气泡；臭氧微纳米气泡

参考文献

[7] A. Ghadimkhani, W. Zhang, T. Marhaba.Ceramic membrane defouling (cleaning) by air Nano Bubbles。Chemosphere, 146 (2016), pp. 379-384.

[8] J.C. Schippers, J. Verdouw,The modified fouling index, a method of determining the fouling characteristics of water,Desalination,Volume 32,1980,Pages 137-148,ISSN 0011-9164,https://doi.org/10.1016/S0011-9164(00)86014-2.

[9] 范益群,漆虹.陶瓷纳滤膜制备与应用研究进展[J].化工进展,2016,35(6):1786-1793.

汇报人简介

王瑞琦（1995—），女，助理工程师，主要研究方向为微纳米气泡应用技术，2672668443@qq.com

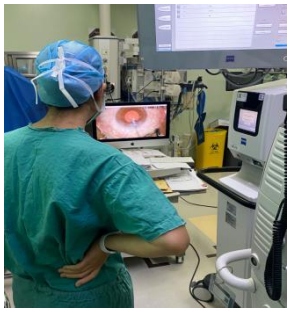
微细气泡发生装备——试验-中试-生产的全周期技术服务

徐美倩[1]，王培

[1]上海行恒科技有限公司　上海市宝山区长江路 43 号 200441

*Email:13872448@qq.com

摘要正文：近年来，包括微米气泡和超细气泡在内的微细气泡技术在众多科学研究领域和产业应用方面取得了丰硕成果。随着科学研究的深入和产业需求的增长，科学家和工程师们对于微细气泡发生装置的性能、稳定性、经济性等核心指标提出了更高的要求。为持续推进我国微细气泡技术相关的前沿科学研究和产业装备工艺升级，急需一批拥有全领域、全周期微细气泡发生装备技术开发和生产制造能力的微细气泡发生装置与成套设备研发制造企业，推动我国微细气泡发生装备制造产业的自主化、标准化、专业化变革和优化升级，促进我国微细气泡发生装备制造产业模式和企业形态的根本性转变。上海行恒科技拥有近 20 年全领域、全周期微细气泡发生装备技术开发和生产制造经验，已为全球超过 100 个研究团队和科技企业提供了覆盖实验研究、中试测效和产业应用的微细气泡发生装备和技术解决方案，这让我们能更快速、更准确地了解全领域微细气泡前沿技术需求和应用技术问题。我们希望通过产品和案例介绍来分享行恒科技在微细气泡发生领域的浅见拙识，能够对研究机构和企业的科学家和工程师们有所助益。



关键词：微细气泡发生装备

参考文献

[1] **D Yan，S Xue，JZW Zhang　Air nanobubble water improves plant uptake and tolerance toward cadmium in phytoremediation.337 (2023) 122577**

[2] **Si, Q.; Zhao, R.; Gao, F.; Guo, J.; Zhang, F.; Wang, L.　Cooking Delicacy with Ice—Nanobubble Isolation Switches Stewing to'BBQ'. Nanomaterials 2023, 13, 562.**

[3]**Z Xiao，T Bin Aftab，X Yuan，H Xia，D Li　Experimental results of NO removal by the MBGLS　Micro & Nano Letters, 2019, Vol. 14, Iss. 7, pp. 721 - 726**

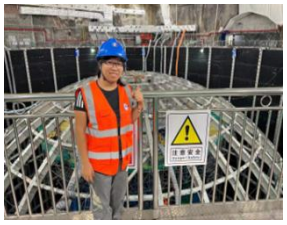
[4]**X Wang ;　X Wang ; C Xu ; Y Ye ;　R Ning ; R Rehman ; E Li ;P Li . Optimizing fouling mitigation in membrane distillation by controlled microbubble size and concentration 584 (2024) 117751**

[5]**Cheng, CX ; Wang, Z ; Xiao, YQ　; Jin, TX; Shi, JS; Liu, JX ; Zhu, SQ; Qi, T ; Hu, WF; Zhang, J ; Ma, J; Han, YX ; Ma, YL ; Zhang, LX. Synergistic effect of ultrasound combined with bubble enhanced rapid nucleation and growth of methane hydrate. Fuel 360 (2024) 130483**

报告人/墙报展示人简介：

徐美倩，上海行恒科技有限公司

南京工业大学化学工艺专业硕士,精通气液相平衡理论，对气液混合、相平衡、塔板数计算和模拟等方面有丰富的实践经验，主持开发过气相色谱 GC、食用油乳化设备，参与开发变压反应器、高浓度氢水系统、超高浓度臭氧水系统、微纳米气泡膜蒸馏中试系统等产品的技术研究和产品开发。



Interface Engineering and Nanoelectrode Optimization for Hydrogen Energy Applications

Liang Luo [1], Xiaoming Sun [1,*]
[1]Department of Chemistry, Beijing University of Chemical Technology, Beijing, 100029
* sunxm@mail.buct.edu.cn

There exist many gas evolution reactions (HER and OER, GER in brief) and gas consumption reactions (ORR and HOR, GCR in brief) in hydrogen energy applications. In this report we want to provide some fundamental understanding of the interfacial variations between electrode and electrolyte during GERs and GCRs. For example, visible bubbles emerge in GERs should have a high nucleation barrier and a rapid barrier-less growth process according to the traditional view, which, however, is contradicted by the experimental observation that a higher overpotential is required for enlarging the nanobubbles to visible ones. We resolve this contradiction by observing and proposing the ‘‘pin-rise’’ growth mode of interfacial nanobubbles under electrolysis conditions with the combination of newly developed SPRi technology, atomic force microscopy, and molecular dynamics simulations. On the other hand, water management is crucial for the long-term performance of ion exchange membrane-based fuel cells (FCs), while the lack of flooding pictures at the catalyst layer is seriously challenging for the further optimization of devices. A self-flooding phenomenon was observed at the bubble/electrode interface when ions instead of water forms, based on our built-up in situ model reaction system during ORR/HOR. The unexpected flooding phenomenon was attributed to the decrease in saturated vapor pressure driven by the generation of ions (H^+ for acidic HOR and OH^- for alkaline ORR), leading to the condensation of the water vapor at the bubble/electrode interfaces, which offers a novel perspective for water management in FCs. These works shed light on the behaviors at the three-phase boundaries and mechanisms thereof, which should be helpful for further optimization of various gas-involving electrochemical reaction-based devices.

Keywords: Bubbles, Catalysts, Diffusion, Electrodes, Surface interaction.

References

Xu W, Lu Z, Sun X, et al. Superwetting electrodes for gas-involving electrocatalysis[J]. Accounts of Chemical Research, 2018, 51(7): 1590-1598.

Li M, Xie P, Yu L, et al. Bubble Engineering on Micro-/Nanostructured Electrodes for Water Splitting[J]. ACS Nano, 2023, 17(23): 23299–23316.

Yu J, Hu K, Zhang Z, et al. Interfacial nanobubbles’ growth at the initial stage of electrocatalytic hydrogen evolution[J]. Energy & Environmental Science, 2023, 16(5): 2068–2079.

Yang Y, Qin J, Hu K, et al. Self-flooding behaviors on the fuel cell catalyst surface: an in situ mechanism investigation[J]. Energy & Environmental Science, 2023, 16(2): 491–501.

Li M, Xu W, Zhou D, et al. Bubble pump consumption chronoamperometry for evaluating gas diffusion electrodes[J]. Chem Catalysis, 2023, 3(10).

Lu Z, Zhu W, Yu X, et al. Ultrahigh hydrogen evolution performance of under‐water “superaerophobic” MoS2 nanostructured electrodes[J]. Advanced Materials, 2014, 26(17): 2683-2687.

Lu Z, Sun M, Xu T, et al. Superaerophobic electrodes for direct hydrazine fuel cells[J]. Advanced Materials, 2015, 27(14): 2361-2366.

报告人/墙报展示人简介：

孙晓明，教授，博士生导师。2000 年和 2005 年于清华大学化学系获理学学士和理学博士学位。2008 年在 Stanford University 完成博士后研究回国，进入北京化工大学化工资源有效利用国家重点实验室工作。主要从事无机纳米材料化学研究，在电解水、燃料电池和气体超浸润电极器件领域取得系列进展。

目前已在 Joule，Chem，Nat. Catal.，Nat. Commun.，JACS，Angew Chem，Adv Mater. 等化学和材料类国际主流刊物以通讯作者发表论文 200 余篇，总引用 36000 余次；出版专著一本。申请国际专利 13 项，获授权 2 项；获国家发明专利授权 40 余项，数项已经完成转化。现承担国家自然科学基金重点项目、国家重点研发项目等多项科研项目。2011 年获国家自然科学基金杰出青年基金资助，2019 年获中组部万人计划领军人才。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

熔盐堆用镍基合金辐照损伤研究进展

黄鹤飞

中国科学院上海应用物理研究所，上海市嘉定区嘉罗公路 2019 号，邮编：201800

Email: huanghefei@sinap.ac.cn

摘要正文：镍基Hastelloy N合金被公认为是熔盐堆最优备选合金结构材料。然而，该合金在堆内服役过程中存在明显的高温辐照脆化，且在遭受高剂量中子辐照时还存在辐照腐蚀协同损伤，均会造成其服役性能劣化。镍基合金的上述损伤机理尚不明确，制约了对其堆用抗辐照性能的有效评估，是熔盐堆技术发展的瓶颈问题。采用离子束辐照的方法研究了镍基合金的辐照性能劣化方式，通过原位观测发现并提出了一种新的氦泡长大机制——“形变合并”长大机制。此外，利用同步辐射X射线吸收精细结构光谱（XAFS）技术，并结合EPMA和TEM等分析手段研究了镍基合金辐照和熔盐腐蚀协同损伤机制。进一步的，采用粉末冶金的方法将纳米碳化物/氧化物颗粒弥散添加到镍基合金中，成功研制出纳米弥散强化（CDS/ODS）镍基合金。优化了合金抗辐照性能，也为未来抗辐照高温熔盐堆堆内构件材料的开发提供了新思路及解决方案。

关键词：镍基合金；辐照损伤；氦泡；熔盐腐蚀

报告人简介：

黄鹤飞，研究员、博导。2012 年毕业于法国鲁昂大学材料物理研究所（GPM CNRS 6634），获理学博士学位，同年入职中科院上海应用物理研究所。目前担任上海应物所所务委员、党委委员、材料研究部主任。中国核学会辐照效应分会常务理事，上海市核学会理事（青年工作委员会副主任、核材料专委会副主任委员），NST 期刊编委。曾获上海市核学会杨福家核科技青年人才奖（2022）、国家杰出青年科学基金（2024）、国家优秀青年科学基金（2020）、中科院青促会优秀会员（2020）、上海市青年拔尖人才（2019）、嘉定区青年英才（2018）、上海市科技系统青年五四奖章（集体）（2020）、上海市科技系统青年岗位能手（2019）。

近年来，围绕熔盐堆用结构材料的辐照损伤机制研究及其性能优化开发开展研究，在核材料领域内专业学术期刊发表学术论文 135 篇，其中 JMST（5）、Corros Sci(14)、Scripta Mater（2）、MSEA（6）、Mater Design（3）、JNM（30）、NST（6）及其它多篇具有领域影响力的相关论文。在国际原子能机构，国际四代堆论坛等会议做邀请/口头报告 43 次。主持基金委、中科院、上海市等机构科研及人才类项目 18 项。

气液界面上电容耦合等离子的交流阻抗特征研究

王硕[1]

[1]深圳技术大学，广东深圳坪山，邮编：518118

*Email: wangshuoleon@gmail.com

摘要：微纳米气泡是气液异相化学反应的基本单位。近年来，人们通过电场将气泡内的气体激发为等离子体，利用其中高反应活性的中间产物，在二氧化碳固化，合成氨，碳氢化合物重整化，以及污水处理等领域得到了广泛关注。我们开发了一套气液等离子反应装置，通过高压脉冲宽度调制电场激发气液界面上的等离子体，并且测量不同电压，频率，以及不同电极构型条件下的等离子的交流阻抗特征，研究了不同激发条件下等离子的反应效率；这些结果可以帮助设计更高效的等离子反应装置。

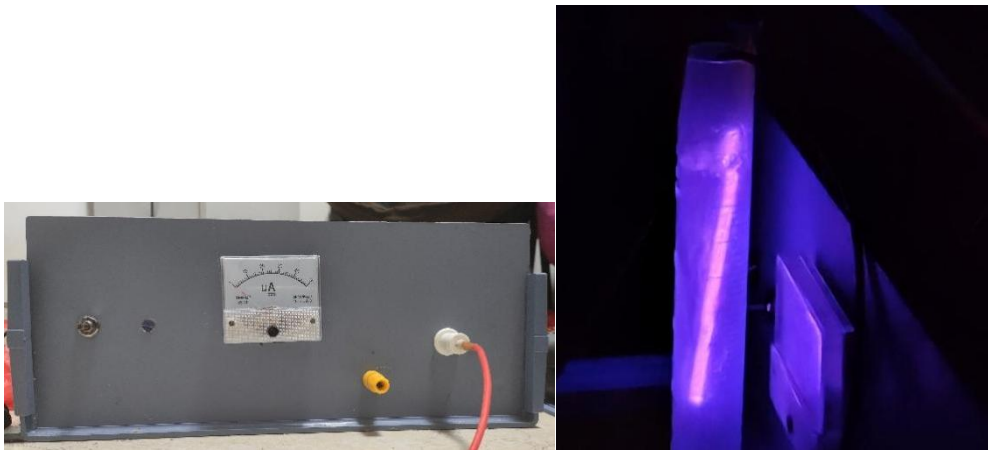


Figure 1. The Plasma reactor, the left figure is the power source for plasma generation, right is a reactor that introducing plasma into liquid.

关键词：等离子体，纳米气泡，交流阻抗谱

超声波强化微气泡臭氧降解氧化铝工业中有机物研究

冉剑锋[1]，翟本康[1]，孙旭[1]，庞昊昊[1]，尹少华[1,*]

[1] 昆明理工大学冶金与能源工程学院，云南省昆明市一二一大街文昌路 68 号，650093

[*] yinsh@kust.edu.cn

摘要正文：目前全球超过 95%的氧化铝均由拜耳法生产[1]。有机物杂质在此过程中不断累积，可导致氧化铝产品质量降低，粒度细化和电流效率低等问题[2, 3]。因此，如何深度降解氧化铝生产系统中有机物杂质，已成为困扰我国氧化铝工业高质量发展的卡脖子难题。本项目基于超声波的空化效应可有效强化微气泡臭氧分解及传质的基本思路，以铝酸钠溶液中关键有机物杂质为研究对象，查明了铝酸钠溶液中有机物的赋存行为；开发了超声波强化臭氧微气泡降解铝酸钠溶液中有机物技术，明确了声致自由基对铝酸钠溶液中有机物作用调控机制；攻克了铝酸钠溶液中大分子有机物低温难降解的难题。在超声功率 80W、氧气流速 60L/h 和反应时间 100min 条件下，铝酸钠溶液中总有机碳 (TOC) 由原液 10.89g/L 降至 6.58g/L，降解率达到 39.6%，实现了高效绿色降解有机物[4]。超声波可显著强化微气泡臭氧传质，使臭氧气泡尺寸显著减小 38%，比界面面积显著增加 60%，臭氧利用率从 52%增加到 75%，臭氧与 TOC 的摩尔比从 0.45 显著降低到 0.23，臭氧的体积传质系数提高 61%，有效降低臭氧使用成本[5]。针对苯环类有机物，以 4-羟基苯甲酸为例，研究了其降解路径：加氢、羟醛缩合、脱羧、开环及羟基化等；以 5-羟基-1,3-苯二甲酸为例，研究了其降解路径：脱羧、脱氢取代、开环、羟醛缩合、羟基化、加氢、去甲基化等[5]。目前工业中降解有机物的平均成本约为 3 万元/吨 TOC，超声强化臭氧工艺的成本为 1.46 万元/吨 TOC，故该技术大规模应用可节约现有工艺 51.4%的成本。项目的实施为经济消除有机物对氧化铝生产的负面影响，丰富我国铝土矿资源和充分利用国外优质铝土矿提供理论基础和技术支撑，对云南乃至我国氧化铝产业的高值利用和可持续发展具有重要的科学价值和实际意义。

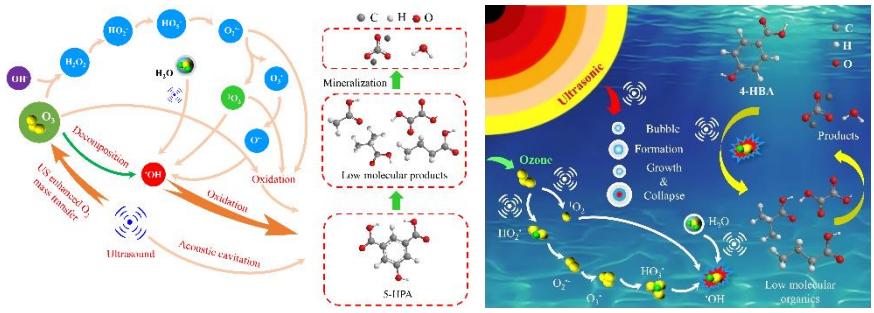


Fig. 1 Schematic diagram of the mechanism of degradation of organics in alumina industry by ultrasonic-assisted microbubble ozone

关键词：超声波；微气泡臭氧；有机物；氧化铝

参考文献

[1] J. Ran, Y. Liu, J. Zhao, S. Li, H. Duan, Y. Chen, Z. Shi, S. Yin*, L. Zhang**. Ultrasonic-induced crystallization for efficient extraction of hazardous sodium oxalate with ultra-low alkali loss in alumina industry: From laboratory-scale to continuous pilot-scale. *Chemical Engineering Journal*, 2024, 498: 155150.

[2] Y. Zhang, R. Xu, H. Tang, L. Wang,W. Sun. A review on approaches for hazardous organics removal from Bayer liquors. *Journal of hazardous materials*, 2020, 397: 122772.

[3] Z. Fu, G. Liu, T. Qi, L. Shen, Z. Peng, Q. Zhou, Y. Wang, H. Fang, Y. Wang. A short process for organics removal from sodium aluminate solution by regulating electrical double layer of tricalcium aluminate hexahydrate[J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2024, 34(7): 2354-2366.

[4] Jianfeng Ran, Haisheng Duan, C. Srinivasakannan, Jiashu Yao, Shaohua Yin*, Libo Zhang**. Effective Removal of Organics from Bayer Liquor through Combined Sonolysis and Ozonation: Kinetics and Mechanism [J]. *Ultrasonics Sonochemistry,* 2022, 88:

106106.

[5] Jianfeng Ran, Xuxu Wang, Jiaping Zhao, Benkang Zhai, Haisheng Duan, Ying Chen, Shaohua Yin*, Shiwei Li**, Libo Zhang***, Zulai Li. Ultrasound catalytic ozonation to remove 5-hydroxy-1,3-phthalic acid from strongly alkaline and high-salt solutions: Aiding nuclear waste disposal and human health [J]. *Separation and Purification Technology*, 2024, 345: 127352.

报告人/墙报展示人简介：

冉剑锋，男，昆明理工大学冶金与能源工程学院博士研究生，导师是尹少华教授，主要研究方向为外场强化冶金、高级氧化技术和稀土资源高值化利用。目前共发表高质量学术论文 15 篇，申请专利 6 项。其中，以第一作者共发表 7 篇高水平 SCI 论文（包括 Chemical Engineering Journal （IF=13.3），*Materials Horizons*（IF=15.7），Environmental Chemistry Letters（IF=15），*Ultrasonics Sonochemistry*（IF=9.3），*Separation and Purification Technology*（IF=8.6）期刊）和 2 篇中文核心论文，申请 4 项专利，多次参加国际国内学术会议并作报告。先后获得第七届全国大学生冶金科技竞赛二等奖、第十五届全国大学生节能减排社会实践与科技竞赛三等奖、云南省省政府奖学金、第二届云南省大学生节能减排社会实践与科技竞赛一等奖等。主持云南省高校服务重点产业科技专项（博士生服务产业科研创新培育项目）、昆明理工大学研究生拔尖创新人才项目、昆明理工大学分析测试基金各 1 项，以主要成员参与多项国家自然科学基金青年、云南省重大科技专项等。

附：报告人为博士研究生

水平管道内纳米气泡稳定性模拟分析

刘舒荣[1]， 李琦芬[1]，杨涌文[1]，汪晶[2]，张丽婷[1,*]
[1]上海电力大学，上海上海市浦东新区南汇新城镇沪城环路 1851 号，201306
[2]上海上海市浦东新区南汇新城镇，上海上海市浦东新区南汇新城镇，201615
*Email: zhangliting708@163.com

摘要：纳米气泡在管道中流动传输的分布特性对于纳米气泡应用在储能、农业、医学等领域具有重要意义。现有针对纳米气泡在管道气液两相混合的数值模拟研究仍存在捕捉纳米气泡在实际环境中复杂行为准确性的不足，无法完全考虑纳米气泡动态行为的影响，限制了模拟的效率和准确性。为了揭示纳米气泡在管道流动中的发展规律，本文基于群体平衡模型并结合 CFD 模拟纳米气泡在管道中的流动中的粒径与数量的变化。计算结果显示:气泡聚合占主导作用，纳米气泡粒径随流程增加而达到稳态。进口气相体积分数增加导致纳米气泡粒径分布更分散、尺寸增大、分布密度减少。该研究为纳米气泡在管道输送中的应用提供优化方向和理论基础。

关键词：纳米气泡　管道流动　群平衡模型　CFD　稳定性

姓名：刘舒荣　　工作单位：上海电力大学　　身份：学生　　邮箱：lsr137761lsr@163.com

纳米二氧化钛/臭氧微纳米气泡处理氰化尾渣的研究

高碧荷[1]，肖巍*

[1]西安建筑科技大学 资源工程学院，陕西 西安 710055

Email: 1670751909@qq.com

黄金行业每年产生大量的氰化尾矿，多数黄金矿山存在尾矿库接近饱和的问题[1]。随着国家对环保的要求不断提高，如何高效对氰化尾渣进行无害化处理及综合利用得到了越来越多的关注[2, 3]。臭氧作为一种高级氧化技术，因其高效、低廉被广泛应用在废水处理中[4]。但常规臭氧曝气产生的普通大气泡在体系中溶解度小、传质效率低、选择性不足，而臭氧微纳米气泡技术（O_3-MNBs）产生的气泡在纳米级别，延长了气泡在体系中的停留时间、促进了强氧化性自由基的产量进而增强处理效果[5]。二氧化钛纳米颗粒（TNP）具有较高复合率、无选择性地将污染物去除甚至矿化。据此，本论文研究 O_3-MNBs 体系以及 TiO_2/O_3-MNBs 体系对氰化尾渣的处理效果。在单独 O_3-MNBs 体系下，通过改变不同 O_3 投加量、不同初始 pH、不同矿浆浓度对氰化尾渣中总氰的去除效果，在最佳反应条件下，臭氧微纳米气泡对总氰的去除率可达 86%。在臭氧微纳米气泡对氰化尾渣的去除机理中发现，叔丁醇（TBA）和对苯醌（PBQ）的加入使得总氰的去除率有所抑制，说明羟基自由基（·OH）和超氧自由基（$\cdot O_2^-$）在 O_3-MNBs 对氰化尾渣去除中的不同程度贡献比。TiO_2/O_3-MNBs 体系下，研究了 TNP 投加量、O_3 投加量、初始 pH、矿浆浓度对总氰的去除效果。在最佳反应条件下（矿浆浓度 15%、初始 pH=8、$[O_3]$=0.75 L/min、[TNP]=2.0 mg/L)总氰的降解率可达 99%。比较两种体系处理氰化尾渣的效果，TiO_2/O_3-MNBs 体系效果明显更好，两种体系的臭氧利用率分别为：75%、58%。由此可见纳米二氧化钛颗粒促进了臭氧的利用率，对臭氧微纳米气泡体系具有促进作用。一方面，纳米二氧化钛颗粒改变微纳米纳米气泡由均相成核变为异相成核，增加微纳米气泡浓度；其次 TNP 在光催化下产生·OH，使体系中·OH 含量增加，提高了去除效果。经处理后的氰化尾渣符合《污水综合排放标准》（GB-8978-1996)的一级标准。通过对氰化尾渣的处理进行经济性分析，达到去除效果的经济成本低于现有技术的处理和排放成本。综上，臭氧微纳米气泡体系处理实际氰化尾渣具有一定的可行性。

关键词：臭氧微纳米气泡；氰化尾渣；纳米二氧化钛

参考文献

[1] Dong P, Song Y, Wu L, et al. Synergistic removal of organics from semi-coke wastewater by persulfate and cyanide tailings[J]. Separation and purification technology, 2024,333:126056.

[2] 晏春华. 含氰废水处理技术进展[J]. 化工与医药工程, 2021,42(04):66-71.

[3] 李和付, 曹欢, 孙皞, 等. 夏家店金矿含氰尾矿无害化处理实验[J]. 矿产综合利用, 2022(06):79-83.

[4] Tu Y, Shao G, Zhang W, et al. The degradation of printing and dyeing wastewater by manganese-based catalysts[J]. Science of The Total Environment, 2022,828:154390.

[5] 王冠宇, 寇丽红, 刘敏, 等. 微纳米气泡与臭氧催化氧化联用技术的应用进展[J]. 煤质技术, 2023,38(04):21-28.

报告人简介：

高碧荷 女 1999.05

西安建筑科技大学资源工程学院资源与环境专业研三在读硕士

研究方向为微纳米气泡技术的应用

Research on the theory and efficacy of nanobubbles naturally generated by tourmaline

Zhejun Song[1,2], Jun Hu [3,4*], Li Juan Zhang [4*]

[1] Key Laboratory of Interfacial Physics and Technology, Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai

[2] School of Physical Science and Technology, ShanghaiTech University, Shanghai

[3] Shanghai University, Shanghai

[4] Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai

* songzhj@shanghaitech.edu.cn

Tourmaline is a general term for a group of minerals with tourmaline as the main constituent. The crystal structure of tourmaline belongs to the cubic crystal system and exhibits unique heteropolar symmetry. As a result, tourmaline possesses pyroelectric, piezoelectric, infrared radiation, and spontaneous polarization properties. It finds wide applications in environmental protection, piezoelectric devices, and other fields.

The inherent polarity of tourmaline generates an electric field around it, which is sufficient to ionize water molecules. Under suitable conditions, tourmaline can be utilized to produce nano bubbles. In this study, for the first time, tourmaline was employed to prepare a large-scale nano bubble solution in water. Through degassing control, it was confirmed that the particles do not act as pollutants. The relationship between reaction time, tourmaline particle concentration, tourmaline type, and tourmaline particle size on the concentration of nano bubbles was investigated using machine learning and other techniques to determine the optimal solution. The infrared spectrum of tourmaline was utilized for theoretical exploration, specifically examining the preservation of nanobubble solutions over an extended period of time.These research findings will undoubtedly contribute to the development and application of tourmaline, ultimately enhancing the value of related products in the field of environmental protection.

Keywords: Nanobubbles Tourmaline Infrared radiation

报告人展示人简介：

宋浙俊
单位：上海应用物理研究所
年龄：25
职位：在读博士研究生
邮箱：songzhj@shanghaitech.edu.cn
联系方式：13575535821

气泡降压析出的微观表征研究

吕欣[1,*]，尹俊连[1,*]，王德忠[1]

[1]上海交通大学，上海，200240

*Email :alzn.11@sjtu.edu.cn

*Email: jlyin@sjtu.edu.cn

摘要正文：气泡析出是一种常见的现象，例如火山喷发时岩浆中的脱气行为，潜水员的减压病，碳酸饮料、香槟的起泡行为等，其本质是压力下降时气体溶解过饱和导致的析出。目前，许多学者对气体过饱和导致的成核（nucleation）及析出（desorption）进行了研究。经典成核理论（Classical Nucleation Theory, CNT）基于经典热力学理论建立了气泡成核的能垒与气泡临界直径的关系，然而CNT预测的气泡析出临界过饱和度与实验测量值相差数个量级，有学者推测该差异来源于经典热力学无法准确描述纳米气核的性质，并且与表面的粗糙度、润湿性等性质高度相关[1-5]。因此，有必要对降压析出过程中纳米气泡形貌的变化进行动态显微表征。目前，已发展了原子力显微镜（AFM）[6]、全内反射荧光显微（TIRF）[7]、同步辐射扫描透射软X射线显微镜（STXM）[8]等实验方法，可用于表面气核的研究。目前，对降压的气泡析出的微观动态过程较少，为了探索气体在不同特性固体壁面上的异相成核析出与表面纳米气泡的关系，本文采用共聚焦显微镜对碳酸饮料在亲水和疏水玻璃表面的析出长大行为进行了微观表征，其中，疏水玻璃经过了硅烷化反应表面改性处理。本文发现，碳酸饮料在亲水玻璃（接触角10°）上的析出成核点比在疏水玻璃（接触角110°）上多，是因为光滑的亲水玻璃上无法形成纳米气泡，初步实验结果可以支持表面纳米气泡的存在有利于气泡成核析出的结论。

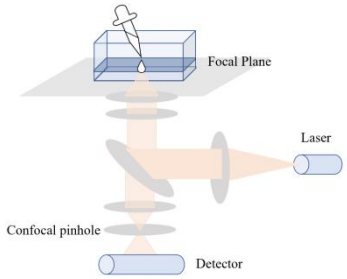


Fig. 1 Experimental setup

关键词：气泡成核动力学；过饱和析出；共聚焦显微镜

参考文献

[1] **JONES S F. Bubble nucleation from gas cavities — a review. Chemical Engineering Science, 1999, 53(1): 169-73.**

[2] **LUBETKIN S D. Why is it much easier to nucleate gas bubbles than theory predicts. Langmuir, 2003, 19: 2575-87.**

[3] **MAHESHWARI S, VAN KRUIJSDIJK C, SANYAL S, et al. Nucleation and Growth of a Nanobubble on Rough Surfaces. Langmuir, 2020, 36(15): 4108-15.**

[4] **MCHALE J P, GARIMELLA S V. Bubble nucleation characteristics in pool boiling of a wetting liquid on smooth and rough surfaces. International Journal of Multiphase Flow, 2010, 36(4): 249-60.**

[5] **LEE J-W, KIM S, LEE S, et al. Exponential promotion and suppression of bubble nucleation in carbonated liquid by modification of surface wettability. Applied Surface Science, 2020, 512: 145709.**

[6] **ZHANG X, CHAN D Y C, WANG D, et al. Stability of Interfacial Nanobubbles. Langmuir, 2013, 29(4): 1017-23.**

[7] **CHAN C U, OHL C-D. Total-Internal-Reflection-Fluorescence Microscopy for the Study of Nanobubble Dynamics. Physical Review Letters, 2012, 109(17): 174501.**

[8] **ZHOU L, WANG X, SHIN H-J, et al. Ultrahigh Density of Gas Molecules Confined in Surface Nanobubbles in Ambient Water [J]. Journal of the American Chemical Society, 2020, 142(12): 5583-93.**

报告人简介：

吕欣，上海交通大学，机械与动力工程学院，核科学与技术专业在读硕士研究生，主要研究方向为气液两相流，气泡成核动力学。

附：请在此处注明报告人是否为学生：是

纳米气泡膜的制备及其超快脱盐性能研究

刘富

微细气泡技术标准化

李兆军

基于微气泡强化的浆态床内多相流动特性数值模拟

李宇慧[1]，刘束玉[1]，崔怡洲[1]，石孝刚[1]，王成秀[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：在炼油产业结构调整及原油重劣质化程度加深的背景下，浆态床加氢技术具有原料结构简单、渣油转化率高、经济效益好等优势，逐渐成为实现原油资源的最大化利用的发展热点和前沿技术。传统浆态床反应器在工业运行中面临局部生焦快的问题，生成的焦炭颗粒倾向于在反应器底部沉积及壁面处挂壁，严重制约了浆态床加氢装置的长周期稳定运行。这是由于气泡尺寸及间隙较大，气液两相对固体颗粒的携带能力差导致的。微气泡具有气泡尺寸小、界面积大、停留时间长等特性，相较常规气泡具有更小的气泡间隙与更高的气含率，可对焦炭颗粒的自由沉降起到一定的阻挡作用，并通过气液流动将焦炭颗粒带出反应器，有助于减少浆态床反应器底部及壁面处焦炭颗粒的聚集，增加浆态床操作的连续性。掌握浆态床反应器内部空间的气液固三相的流动规律是减缓焦炭颗粒沉积挂壁结焦问题的前提和基础。目前针对气泡对颗粒流动特性的影响多集中于常规气泡，且研究对象多为小型装置，所得规律无法直接运用到较大规模的浆态床体系中。

在浆态床反应器中空气由床层底部的进料分布器进入固液混合的浆液中，以气泡的形式沿着反应器向上运动直至浆液顶部离开。本文采用欧拉-欧拉双流体模型与离散相模型 (DPM) 耦合的方法对某中试规模的间歇式浆态床反应器(H=5.35 m，D=0.9 m)中空气-水-玻璃珠三相的流动进行了详细的数值模拟，采用修正的S-N 曳力模型描述微气泡反应器内气固间作用力。进一步考察了浆态床中进气流量、气泡尺寸对颗粒沉积的影响。模拟结果表明：相比于常规浆态床反应器，微气泡浆态床内颗粒轴向与径向分布更均匀，颗粒轴向高度更高同时低于浆态床液面高度，减弱了颗粒对浆态床内壁的撞击与侵蚀，有助于提高装置运行的稳定性。在微气泡反应器中，不同的进气流量(Q) 与气泡尺寸(D_g) 会直接影响气含率分布进而影响反应器内的颗粒的碰撞。提高进气流量可以提升浆态床内的表观气速，当进气流量为150 m^3/h、200 m^3/h和250 m^3/h时，对应的颗粒膨胀高度分别为2.83 m、3.06 m和3.81 m。但高进气流量会加剧底部颗粒的沉积。减小气泡尺寸会使反应器内的整体气含率升高，当微气泡尺寸为300 μm、500 μm和800 μm时，对应的颗粒膨胀高度分别为4.13 m、3.81 m和3.07 m。微气泡技术可提高气泡对焦炭颗粒的携带能力，缓解浆态床底部和反应器壁面的颗粒沉积现象。通过对微气泡强化下较大规模浆态床反应器内的数值模拟研究，揭示了微气泡浆态床反应器中空气-水体系流动特性规律，为后续微气泡技术应用于渣油加氢浆态床反应器提供理论指导。

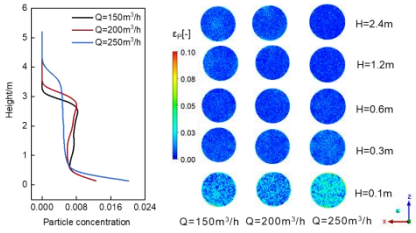


Fig. 1 Particle concentration distribution with different inlet flow rate

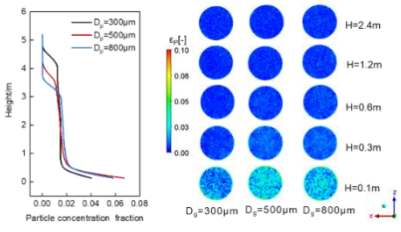


Fig. 2 Particle concentration distribution with different bubble size

关键词：微气泡；浆态床；颗粒沉积；数值模拟

参考文献

[1] 崔怡洲,李成祥,翟霖晓,等.亚毫米气泡和常规尺寸气泡气液两相流流动与传质特性对比[J].化工学报,2024,75(01):197-210+396.

[2] Li C X, Cui Y Z, Zhai L X, et al. Investigation into drag coefficient for sub-millimeter bubbles in gas–liquid bubbly flow: Experiments and CFD simulations[J]. Chemical Engineering Journal, 2023, 478: 147236.

[3] 徐世梅,渣油加氢浆态床内焦炭颗粒的流动与沉积特性研究[D].中国石油大学(北京), 2022.

报告人/墙报展示人简介：

李宇慧（1999-），女，中国石油大学（北京）在读博士研究生，研究方向为微气泡强化下浆态床反应器内多相流动特性。

报告人为学生。

气泡运动及传质过程驱动的精准曝气机制探讨

陈振[1]，于佳傲[1]，高文浩[1]，何双[1]，范伟[1,*]，霍明昕[1]

[1]东北师范大学环境学院，长春市净月大街2555号，130117

*Email: fanw100@nenu.edu.cn

摘要正文：气泡曝气是污水处理、河道修复和水产养殖等气液传质反应中最常用的技术。然而，传统气泡曝气技术面临着高能耗和低效率的瓶颈问题。针对应用广泛的微孔曝气系统的增效降耗需求，许多研究致力于改进微孔扩散器或优化曝气池构型以生成更小的气泡，但这些技术往往是能源密集型的。我们针对水中气泡的动力学展开研究，开发了一种综合考虑浸没孔的气泡膨胀、脱离及其在上升过程中氧传质的动力学模型，提出了一种针对特定曝气环境的精准曝气策略。我们发现气泡形成过程受到气体流速、孔口半径、表面张力、液体粘度和表面润湿性等因素的影响，而小气泡更容易在高润湿性、小孔口和低流速条件下形成。此外，我们探讨了曝气过程中的氧转移速率与气泡尺寸、气体类型及水深之间的关系。研究发现半径小于特定阈值的气泡会在水面以下发生收缩和溶解，将氧气完全释放到水中，因此具备100%的氧气利用率。在水深为5 m和15 m的条件下，气泡的阈值尺寸分别为150 μm和250 μm。基于建立的气泡动力学模型，我们能够反演气泡产生的参数组合，生成对应阈值的气泡。在相应的水环境中，确保产生的气泡在水面以下完全破裂，能够有效提高氧利用率，实现精准曝气的目标。因此，本研究提出的精准曝气策略在指导节能气泡生成方面具备良好的应用潜力。

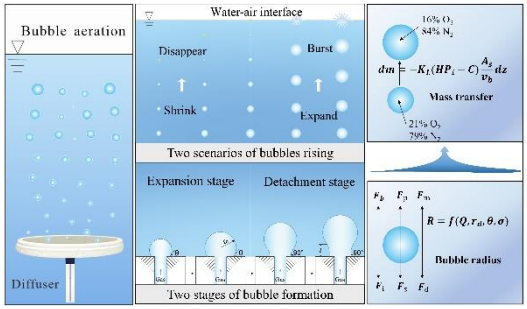


Fig. 1 Bubble formation and mass transfer dynamics in water

关键词：曝气；气泡动力学；氧传质；模型

参考文献

[1] **Fan, W., Li, Y., Lyu, T., Yu, J., Chen, Z., Jarvis, P., Huo, Y., Xiao, D., Huo, M. A modelling approach to explore the optimum bubble size for micro-nanobubble aeration. 2023. Water Res. 228, 119360.**

[2] **Chen, Z., Yu, J., Huo, Y., Liu J., Xiao, D., He, L., Lin S., Fan, W., Huo, M. Energy-efficient bubble aeration guided by bubble dynamics model: From bubble formation at submerged orifice to oxygen utilization during uprising. J. Clean. Prod. 2024. 454, 142324.**

报告人/墙报展示人简介：

陈振，东北师范大学环境学院，环境科学与工程专业2024级在读博士生，师从东北师范大学范伟教授。主要从事微细气泡的生成、运动、传质及溃灭方面的研究，曾获中国发明协会发明创业奖创新奖，以第一作者在J. Clean. Prod.等期刊发表学术论文一篇。

报告人/墙报展示人为学生

基于三维动态追踪的微纳气泡表面电荷密度测量

陆昊[1]，梁霄[1]，龚湘君[1,*]

[1]华南理工大学材料工程学院，广州市天河区五山路 381 号，510640

*Email: msxjgong@scut.edu.cn

摘要正文：微纳气泡的寿命比经典的热力学模型预测的更久。然而，至今未有通用的模型可完全解释微纳气泡的稳定机理。以往研究表明气泡的表面电荷与其稳定性有很强关联。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微纳气泡个体进行三维动态追踪，并实现了原位颗粒粒径测量。通过三维动态分析获得个体气泡的运动速度，从而根据微纳气泡受力状态和测定的气泡粒径确定表面电荷密度。并且，根据气泡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（the Holographic Micro-coulombmeter）为研究气泡表面电荷特性和稳定性提供方法论指导。

关键词：三维动态；表面电荷；微库伦计；微纳气泡

报告人/墙报展示人简介：

陆昊，男，华南理工大学在读博士生。研究兴趣为微纳气泡的应用、颗粒表征方法。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

超声作用下纳米气泡行为的分子模拟研究

胡娇惠[1]，李敬[1]，张现仁[1]

摘要正文： 在这项研究中，我们将超声波模拟为以简谐振动的正负压力循环，然后使用原子分子动力学模拟来超声作用下纳米气泡行为。

关键词：纳米气泡；超声；分子动力学模拟

电气石纳米气泡的制备原理以及稳定性研究

宋浙俊 [1,2], 胡钧 [3,4*], 张立娟 [4*]

[1] 中国科学院上海应用物理研究所，上海

[2] 上海科技大学物理科学与技术学院，上海

[3] 上海大学，上海

[4] 中国科学院上海高等研究院上海同步辐射装置, 上海

* songzhj@shanghaitech.edu.cn

电气石(Tourmaline)是电气石矿物的总称。电气石晶体结构为三方晶系，具有独特的异极对称结构，所以电气石具有热释电性，压电性，红外辐射特性和自发电极性的特点，其被广泛应用于环境保护，压电器件等领域。

电气石自发电极性导致其周围电场（$1.35V/Å$）足以电离水分子，因此在合适条件下电气石能用来制备纳米气泡。本研究首次使用电气石在水中制备体相纳米气泡溶液，通过脱气对照证明颗粒不是污染物。并研究反应时间、电气石颗粒浓度、电气石类型和电气石颗粒粒径对纳米气泡浓度的关系，实验中找寻最优解。该研究使用电气石的红外光谱进行理论探究，并且在理论上研究如何长时间保存纳米气泡溶液。这些研究结果能促进电气石的开发应用、提高相关产品的环境保护领域附加值。

Keywords: 纳米气泡　电气石　红外光谱

报告人展示人简介：

宋浙俊

单位：上海应用物理研究所

年龄：25

职位：在读博士研究生

邮箱：songzhj@shanghaitech.edu.cn

联系方式：13575535821

在不同溶液中电化学可控产生氧气纳米气泡与氢气纳米气泡

王笑天,[1,2] 王兴亚,[3] 宋浙俊,[1,6] 胡钧,[*,4,5] 周利民,[*,3] 张立娟[*,1,2,3]

[1] 中国科学院上海应用物理研究所, 上海， 中国， 201800

[2] 中国科学院大学, 北京， 中国 100049

[3] 上海高等研究院上海同步辐射光源, 上海， 中国， 201204

[4] 祥符实验室, 嘉善， 中国， 314102

[5] 上海大学, 上海， 中国， 200444

[6] 上海科技大学, 上海， 中国， 201210

邮箱: wangxiaotian@sinap.ac.cn

摘要：纳米气泡的可控与高效产生在废水处理和矿物浮选等各种不同领域中应用至关重要。通过电化学反应产生体相纳米气泡(NBs)是实现这些目标的一种有效途径。在这项研究中，我们介绍了一种创新的电解电池设计，具有不同的阳极和阴极隔间，以促进氢纳米泡(H_2-NBs)和氧纳米泡(O_2-NBs)的产生。结果表明，纳米气泡的浓度受电解电压、电解时间和电解质溶液浓度的显著影响。在较大电解电压和合适电解时间下使用较高浓度的电解液，可以稳定制备出浓度为 1.8×10^8/mL 的氢纳米泡(H_2 - NBs)。此外，电解质溶液类型对纳米气泡的稳定性有实质性影响，纳米气泡在碱性溶液中更稳定。我们的工作为纳米气泡的受控形成提供了宝贵的见解，这对于推进纳米气泡的实际应用至关重要。

关键词: 纳米气泡 ; 电化学

简介：

王笑天，男，26，博士研究生，无机化学，wangxiaotian@sinap.ac.cn

磁响应聚合物微囊超声成像

陈天冬，杨芳*

江苏省生物材料与器件重点实验室，数字医学工程全国重点实验室，东南大学生物科学与医学工程学院，南京市江宁区东南大学路 2 号，211189

* 通讯作者，杨芳，Email : yangfang2080@seu.edu.cn

摘要正文：刺激响应性气泡由于其在疾病诊断和治疗中的应用而受到越来越多的关注[1-3]。除了内在的声响应之外，已经有研究报道了光和温度响应气泡的开发和应用[4, 5]。由于磁场的安全性和可操控性[6]，磁响应气泡具有极大的研究价值和应用潜力。本研究中，通过超声乳化和机械搅拌法制备PLGA微囊（PLGA@IONPs&PFC），微囊的壳中载入氧化铁纳米颗粒（IONPs），微囊中心载入全氟化碳（PFC）。利用SEM观察该微囊为球形结构，平均尺寸为2.4 μm。通过小动物超声成像仪检测了该微囊的超声成像性能，显影表现为低超声信号。这是因为超声下PLGA壳完好，限制了PFC液滴的成核和膨胀（声滴汽化）[7]。将该微囊置于交变磁场中，利用IONPs的磁热效应，成功在完好的PLGA壳上实现了热穿孔。通过SEM观察到交变磁场处理后的PLGA壳变得褶皱和孔洞形成。PLGA壳上孔洞形成后，该微囊的超声造影效果显著增强。除了磁热效应增强超声造影效果，还可以利用磁靶向效果，增强微囊在小鼠脏器（如肾脏）的积累和滞留，从而进一步增强气泡的体内超声造影效果。总之，磁响应聚合物微囊不仅表现出磁热增强的超声造影效果，还可以通过磁靶向进一步控制微囊在体内的分布。

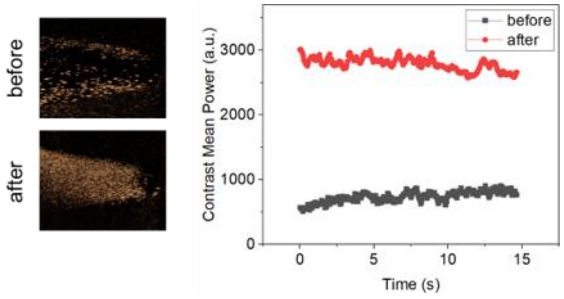


Fig. 1 Representative images and signal intensity in ultrasound imaging of PLGA@IONPs&PFC before and after treated by alternating magnetic field.

关键词：聚合物微囊；磁热；磁靶向

参考文献

[1] Fujii, S.; Nakamura, Y. Stimuli-Responsive Bubbles and Foams Stabilized with Solid Particles. *Langmuir* 2017, *33* (30), 7365–7379.

[2] Xiong, R.; Xu, R. X.; Huang, C.; De Smedt, S.; Braeckmans, K. Stimuli-Responsive Nanobubbles for Biomedical Applications. *Chem. Soc. Rev.* 2021. 50, 5746.

[3] Chattaraj, R.; Blum, N. T.; Goodwin, A. P. Design and Application of Stimulus-Responsive Droplets and Bubbles Stabilized by Phospholipid Monolayers. *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.* 2019, *40*, 14–24.

[4] Lee, H.; Kim, M. A.; Lee, C. M. Near-Infrared Laser-Responsive Photothermal Bubble-Generating PLA Nanoparticles for Controlled Drug Release. *Macromol. Res.* 2021, *29* (3), 224–229.

[5] Xie, Y.; Zhao, C. An Optothermally Generated Surface Bubble and Its Applications. *Nanoscale* 2017, *9* (20), 6622–6631.

[6] Jiang, S.; Wu, D.; Li, J.; Chu, J.; Hu, Y. Magnetically Responsive Manipulation of Droplets and Bubbles. *Droplet* 2024, *3* (2), e117.

[7] Zhang, W.; Shi, Y.; Abd Shukor, S.; Vijayakumaran, A.; Vlatakis, S.; Wright, M.; Thanou, M. Phase-Shift Nanodroplets as an Emerging Sonoresponsive Nanomaterial for Imaging and Drug Delivery Applications. *Nanoscale* 2022, *14* (8), 2943–2965.

基于自组装磁性自由纳米气泡的肿瘤诊疗一体化

刘双语 [1]，杨芳 [1,*]

[1] 江苏省生物材料与器件重点实验室，数字医学工程全国重点实验室，东南大学生物科学与医学工程学院，南京市江宁区东南大学路 2 号，211189

* 通讯作者，杨芳，Email : yangfang2080@seu.edu.cn

摘要：自组装磁性自由纳米气泡（Self-assembled Magnetic Free Nanobubbles, SAMF-NBs）是一种结合了纳米气泡和磁性纳米颗粒特性的复合纳米结构。区别于传统的有膜壳磁性纳米气泡，其不依赖于磷脂或聚合物壳作为稳定层，通常由磁性纳米颗粒自组装形成，内含气体，通过表面张力和静电效应来稳定气泡[1]。由于其独特的磁响应性、超小尺寸、高表面积、空化效应和气液界面效应，磁性纳米气泡在生物医学工程领域的研究和应用中展现出巨大的潜力[2]。本研究以瑞存（γ-Fe_2O_3）为磁性纳米材料，SF_6 为气核，通过压差法制备出平均粒径为 148 nm±5 nm (Fig. 1a),电位为-25±3 mV 的自组装磁性自由纳米气泡，其在一个星期内保持稳定。透射电子显微镜(TEM，Fig. 1b)和扫描电子显微镜(SEM, Fig. 1c)分析表明，SAMF-NBs 呈球形，具有中空的气核，γ-Fe_2O_3 吸附在气体核心的表面。在 18 MHz；20% Power 的超声强度下，SAMF-NBs 表现出良好的超声成像信号（Fig. 1d），并在 10 min 内被持续监测到。通过超声诱导，SAMF-NBs 会发生空化效应，破坏局部组织的细胞膜结构，提高药物或基因载体的渗透性和递送效率。此外，不同浓度的 SAMF-NBs 在 1200 kHz；12 A 的交变磁场作用下，10 min 内可以升温 5~20℃，同时在磁共振成像（MRI）上表现出显著的 T_1 成像信号，为肿瘤诊疗一体化提供了基础。基于此独特的物理和化学特性，SAMF-NBs 在药物递送、肿瘤治疗、MRI、超声成像、靶向治疗、组织修复等方面具有广泛应用前景[2]。

关键词：自组装磁性自由纳米气泡；γ-Fe_2O_3；压差法；超声成像；肿瘤诊疗一体化

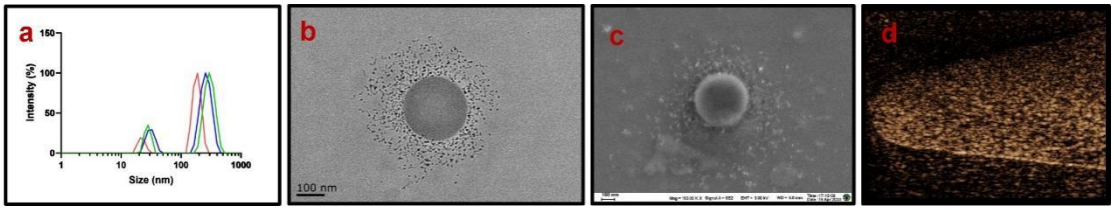


Fig.1 (a) The DLS distribution diagram of SAMF-NBs. (b) TEM image of SAMF-NBs. (c) SEM image of SAMF-NBs. (d) Ultrasonic imaging of SAMF-NBs

参考文献

[1] Li J， Feng Z, and Gu N Superparamagnetic iron oxide nanoparticles assembled magnetic nanobubbles and their application for neural stem cells labeling. *J. Mater. Sci. Technol.* 2021, 63: 124-132.

[2] Yang F, Gu Z X, and Jin X Magnetic microbubble: A biomedical platform co-constructed from magnetics and acoustics. *Chin. Phys. B.* 2013(10):12.

负载臭氧油的脂质纳米乳液的构建研究

王铄萱[1]，杨芳[1,*]

[1]江苏省生物材料与器件重点实验室，数字医学工程全国重点实验室，东南大学生物科学与医学工程学院，南京市江宁区东南大学路 2 号，211189

* 通讯作者，杨芳，Email : yangfang2080@seu.edu.cn

摘要正文：

臭氧油通常由气态臭氧注入含有不饱和双键的油类物质形成，其应用场景根据浓度的不同而有所变化[1]。当臭氧油中的三氧戊烷与皮肤等温热渗出物接触时，会分解产生局部氧气和过氧化氢。这些被称为“臭氧信使”的物质是臭氧油发挥治疗作用的关键因素[2]。此外，纳米乳液作为一种有效的载体，能够显著提高所封装疏水性药物的溶解度和生物利用度[3]。在临床研究中，脂质纳米乳液展现出巨大的发展潜力，以实现更可控的臭氧油释放。

本研究以 DPPC 为脂质原料，通过高能超声波细胞粉碎仪制备出稳定的脂质纳米乳液。负载油样的形式对臭氧油本身的刺激性气味稍有改善。DLS 检测显示，该乳液的平均粒径为 350 nm，并在 4℃下可稳定保存约 20 天。SEM 观察到样品中存在大量球形纳米粒子。TEM 则揭示了乳液中存在明显的水包油包水（W/O/W）结构，通过观察氧、磷元素的分布进一步证实了包载臭氧油的脂质纳米粒子的形成。此外，通过硫代硫酸钠的滴定实验测定了乳液中活性氧的含量，并通过抑菌环和平板涂布实验进一步验证了乳液的抗菌性能。这些结果表明，该脂质纳米乳液在油样递送和抗菌应用方面具有潜在的应用价值。

关键词：臭氧油，磷脂，乳液

参考文献：

[1] Ugazio, E, Tullio, V, Binello, A, Tagliapietra, S, Dosio, F. Ozonated Oils as Antimicrobial Systems in Topical Applications. Their Characterization, Current Applications, and Advances in Improved Delivery Techniques. Molecules. 2020, 25, 334.

[2] Deamer, D. W. From “Banghasomes” to Liposomes: A Memoir of Alec Bangham, 1921-2010. Faseb J. 2010, 24, 1308–1310.

[3] Preeti, Sambhakar S, Malik R, Bhatia S, Al Harrasi A, Rani C, Saharan R, Kumar S, Geeta, Sehrawat R. Nanoemulsion: An Emerging Novel Technology for Improving the Bioavailability of Drugs. Scientifica (Cairo). 2023, 2023, 6640103.

磁性血小板膜纳米气泡用于心脑血管疾病早期诊断

王雅坤[1]，杨芳[1,*]

[1]江苏省生物材料与器件重点实验室，数字医学工程全国重点实验室，东南大学生物科学与医学工程学院，南京市江宁区东南大学路 2 号，211189

* 通讯作者，杨芳，Email : yangfang2080@seu.edu.cn

摘要：

心脑血管疾病是对人类健康的最大威胁之一，具有高发病率、高致残率和高死亡率等特点。现有的临床诊断方法如超声（US）成像、磁共振成像（MRI）、CT血管造影（CTA）、磁共振血管成像（MRA）和数字减影血管造影（DSA）等存在对早期微小病灶识别不足的问题，导致难以在疾病发生早期及时诊断并干预[1]。针对这一问题，我们利用生物自体成分血小板及磁性纳米颗粒Fe_3O_4@PEG构建了一种磁性血小板膜纳米气泡（PMNBs），可实现对早期心脑血管疾病的靶向超声/磁共振双模态成像。该气泡结构包括由血小板膜和磁性纳米颗粒组成的气泡膜壳及六氟化硫气体核心。由于气泡膜壳上保留了血小板膜上与血栓黏附和免疫补体识别相关的主要蛋白[2]，具有靶向血管损伤与血栓的能力，可精准靶向病灶区域。此外，单一的成像方式通常难以满足对复杂病理状态监测的需要，纳米气泡与磁性纳米颗粒结合实现了超声成像与磁共振成像的联合互补，既发挥了超声成像对组织器官实时动态观察的优势，也利用了磁共振成像组织穿透能力强、成像分辨率高等特点[3]。

体外超声成像结果如图1（a）所示，PMNBs由于具有膜壳装载Fe_3O_4@PEG磁性纳米颗粒、内部包裹六氟化硫气体的纳米气泡结构而具有优良的超声响应性能，可以有效增强Contrast Mode的超声显影信号，且其信号强度高于未负载Fe_3O_4@PEG磁性纳米颗粒的血小板膜纳米气泡（PNBs），说明作为磁共振造影剂的Fe_3O_4@PEG磁性纳米颗粒与气泡膜壳的组装并不会阻碍纳米气泡实现其本身的超声造影功能。此外，利用磁共振成像系统表征其体外磁共振成像效果，如图1（b、c）所示，PMNBs由于膜壳中装载了磁性纳米颗粒，可以有效增强磁共振T_2信号，并随着其中磁性纳米颗粒装载量的增加，信号逐渐增强，其r_2可达到120.50 $mM^{-1}s^{-1}$。

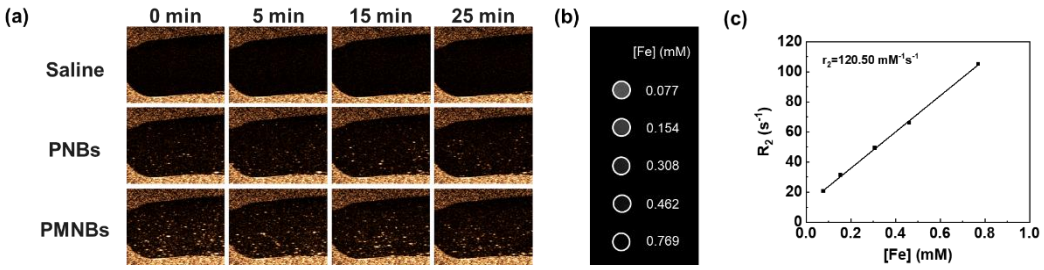


Fig. 1 *In vitro* ultrasound imaging and magnetic resonance imaging enhancement of PMNBs. (a) Contrast mode ultrasound images of saline, PNBs and PMNBs at different time intervals. (b) T_2-weighted magnetic resonance images of PMNBs. (c) Plot of $1/T_2$ over [Fe] concentration of PMNBs. The slope indicates the specific relaxivity (r_2).

关键词：血小板膜纳米气泡；磁性纳米颗粒；靶向超声/磁共振双模态成像

参考文献

[1] **Y. Tu, Y. Sun, Y. Fan, et al. Multimodality Molecular Imaging of Cardiovascular Disease Based on Nanoprobes. *Cell Physiol Biochem*. 2018, 48:1401-1415.**

[2] **M. Li, L. Wang, D. Tang, et al. Hemodynamic Mimic Shear Stress for Platelet Membrane Nanobubbles Preparation and Integrin $\alpha_{IIb}\beta_3$ Conformation Regulation. *Nano Lett*. 2022, 22:271-279.**

[3] **H. Chen, R. Wang, J. Wei, C. Fan A review on cardiac positron emission tomography/magnetic resonance imaging in diagnosis of cardivascular diseases. *Journal of biomedical engineering*. 2020, 37:897-902.**

基于电荷反转的脂质体原位生成气泡治疗胶质瘤

徐绘婷[1]，杨芳[1,*]

[1]江苏省生物材料与器件重点实验室，数字医学工程全国重点实验室，东南大学生物科学与医学工程学院，南京市江宁区东南大学路 2 号，211189

* 通讯作者，杨芳，Email : yangfang2080@seu.edu.cn

摘要正文：胶质瘤是中枢神经系统中最具侵袭性的恶性肿瘤，其自我更新和多向分化潜能使得传统的化疗和放疗手段效果不佳。更为复杂的是，血脑屏障（BBB）作为大脑的保护屏障，阻止了大多数大分子和药物进入中枢神经系统，进一步限制了治疗手段的有效性。因此，研究突破血脑屏障及靶向调控胶质瘤干性的新型治疗策略成为目前的热点。近年来，随着纳米技术的发展，纳米材料在胶质瘤治疗中的应用取得了显著进展。其中，机械力在肿瘤治疗中的应用引起了广泛关注。在本研究中，我们设计了一种基于电荷反转的脂质体，用于胶质瘤治疗。该脂质体具有独特的双功能性：一方面，它能够通过表面电荷的动态转换，实现有效穿越血脑屏障；另一方面，该脂质体装载了 H_2S 前药 ADT，能够在肿瘤部位原位生成 H_2S 气泡，利用机械力对肿瘤细胞施加影响。在穿越血脑屏障的过程中，脂质体由于其良好的分散性和稳定性，能够快速到达肿瘤区域，并被胶质瘤细胞主动内吞。在肿瘤内部，ADT 通过细胞内酶的作用生成 H_2S 气泡，这些气泡的产生触发了细胞内机械敏感通道的打开，导致一系列下游信号分子表达的改变。

研究结果表明，通过打开机械敏感通道，H_2S 气泡能够有效下调包括多种蛋白表达，进一步导致凋亡的发生。因此，通过 H_2S 气泡的机械力调控，机械敏感通道的周期性开闭引发了广泛的信号通路重塑，最终有效抑制了胶质瘤干细胞的存活和增殖。

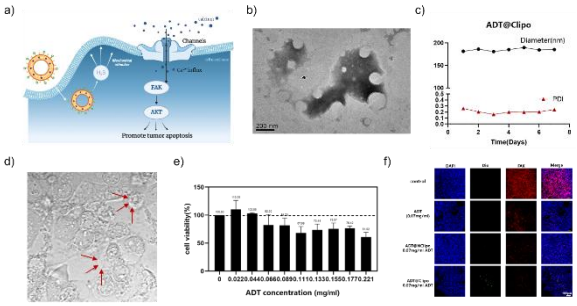


Fig. 1 Material characterization and effect verification of charge reversal liposomes

关键词：脂质体；硫化氢；胶质瘤

参考文献

[1] Zhou, Q., Shao, S., Wang, J. et al. Enzyme-activatable polymer – drug conjugate augments tumour penetration and treatment efficacy. Nat. Nanotechnol. 14, 799-809 (2019).

[2] Paul, R., Luo, M., Mo, X. *et al.* FAK activates AKT-mTOR signaling to promote the growth and progression of MMTV-Wnt1-driven basal-like mammary tumors. *Breast Cancer Res* 22, 59 (2020).

[3] Sulzmaier, F., Jean, C. & Schlaepfer, D. FAK in cancer: mechanistic findings and clinical applications. *Nat Rev Cancer* 14, 598–610 (2014).

[4] Passini FS, Jaeger PK, Saab AS, et al. Shear-stress sensing by PIEZO1 regulates tendon stiffness in rodents and influences jumping performance in humans. *Nat Biomed Eng*. 2021;5(12):1457-1471.

一种仿古菌脂的新型纳米气泡

张慧宇[1]，杨芳[1,*]

[1]江苏省生物材料与器件重点实验室，数字医学工程全国重点实验室，东南大学生物科学与医学工程学院，南京市江宁区东南大学路 2 号，211189

* 通讯作者，杨芳，Email : yangfang2080@seu.edu.cn

摘要： 脂质纳米气泡在基于超声的生物医学应用中起着极为重要的作用，然而，脂质气泡的稳定性和体内循环时间仍是限制其应用的问题之一。近年来，研究发现提取自极端环境中生存的古细菌的古菌脂在热稳定性、pH稳定性以及降低膜的渗透性等方面有着优异的性能[1]。在本研究中，我们使用一种仿古菌脂，甲基支链脂质（DPhPC）作为主要磷脂，与传统磷脂共同制备了脂质纳米气泡[2]。如图1所示，动态光散射（DLS）显示该脂质气泡的粒径在200nm左右，体外超声成像结果表明，该脂质气泡具有良好的回声性能，且成像持续时间较长。体内成像结果表明，该脂质气泡在心脏成像效果较好。此外，透射电镜（TEM）结果也证明了这种气泡的存在。这种新型的脂质气泡在提高超声成像效果的稳定性和药物的控制释放方面具有较大的潜力。

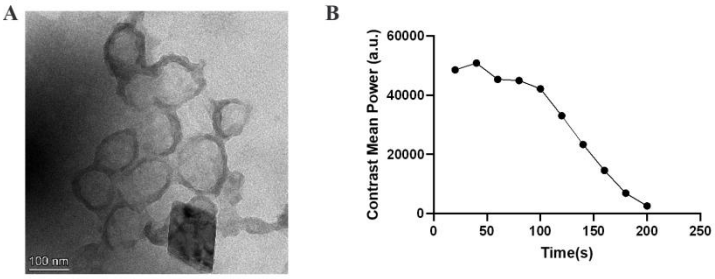


Fig. 1 (A) TEM images of DPhPC bubble. (B) In vitro ultrasound image of DPhPC bubble**关键词：**纳米气泡；超声成像；脂质；甲基支链脂质

参考文献

[1] Santhosh, P. B. & Genova, J. Archaeosomes: New Generation of Liposomes Based on Archaeal Lipids for Drug Delivery and Biomedical Applications. ACS Omega 2023, 8, 1−9

[2] Li, Y. et al. Methyl-Branched Liposomes as a Depot for Sustained Drug Delivery. Nano Lett. 2023, 23, 9250−9256

通过一氧化氮诱导胶原蛋白耗竭来增强深部肿瘤消融

赵艳晓[1]，杨芳[1,*]

[1]江苏省生物材料与器件重点实验室，数字医学工程全国重点实验室，东南大学生物科学与医学工程学院，南京市江宁区东南大学路 2 号，211189

* 通讯作者，杨芳，Email : yangfang2080@seu.edu.cn

摘要正文：目前脑胶质瘤是颅内最常见的恶性侵袭性生长肿瘤，具有高死亡率、高复发率和低治愈率等特征。临床治疗常采用手术结合放、化疗的方法，但 5 年生存率仅 9.8%。导致癌症治疗不佳的主要瓶颈之一是大多数治疗药物无法到达肿瘤内部组织。

为了进一步促进纳米药物在实体瘤的分布和渗透， 本研究工作探究了一种用于增强肿瘤治疗的贯序给药策略。在这种策略中，首先合成了尺寸为 208.42nm、内部装载 NO 气体的聚合物纳米气泡，通过瘤内注射的方式进入肿瘤组织中，通过抑制下游促纤维信号的转导抑制基质的产生[1-3]。实验中，通过抑制胶原蛋白和纤连蛋白的表达来抑制肿瘤内的致密基质的产生。随后使用装载惰性气体的聚合物纳米气泡在超声的刺激下空化，在不引起肿瘤周围正常组织热损伤的情况下消融肿瘤，达到治疗的目的。因一氧化氮处理后的肿瘤基质的破坏，实体瘤渗透增强，用于空化的纳米气泡的渗透效果得到了显著的提高，抗肿瘤疗效增强。通过细胞实验以及肿瘤模型验证了本工作的安全性和有效性，证实了气体疗法-非热消融模式有着广泛的抗癌前景。

关键词：一氧化氮；基质耗竭；增强渗透；空化；肿瘤消融

参考文献

[1] Chen, X. et al. Nitric oxide-induced stromal depletion for improved nanoparticle penetration in pancreatic cancer treatment. Biomaterials 246, 2020, 119999.

[2] Zhang, K. et al. Ultrasound-Triggered Nitric Oxide Release Platform Based on Energy Transformation for Targeted Inhibition of Pancreatic Tumor. ACS Nano 10, 2016, 10816–10828.

[3] Ikeda-Imafuku, M. et al. Extracellular matrix degrading enzyme with stroma-targeting peptides enhance the penetration of liposomes into tumors. Journal of Controlled Release 352, 2022, 1093–1103.

利用等离子体-微气泡技术处理回用水产养殖废水的研究

黄文杰[1]，Chirwa William[1]，刘亚男[2]，李攀[1*]

[1]同济大学环境科学与工程学院，上海，200092

[2]东华大学，上海，201620,

*Email: lipan@tongji.edu.cn

摘要：水产养殖业正面临着环境方面的重大挑战。由于缺乏有效的废水处理设施，废水中有机物以及残存的抗生素和激素排放入环境带来严重污染。本研究提出了微气泡等离子体(FBP)技术作为一种可持续的水产养殖废水处理方案。实验结果表明，FBP 处理可有效去除微污染物，如四环素(76%)和 17a-甲基睾酮(48%),处理后的相关产物的毒性值在检出限以下，这表明与原始形式相比，其毒性已显著降低。FBP 在提升水产养殖废水中氨(80-83%)和磷(61-77%)的去除效率方面表现显著，同时实现了 38-59%的化学需量去除。然而，该方法也导致了总氮含量(8-44%)和硝酸盐含量(9.1-57%)有所增加。因此我们提将 FBP 处理水原位用于灌溉的技术路线。研究表面，FBP 处理尾水培育的生菜表现出更大的叶面积，平均日生长率达到 14.2cm^2，远高于对照组（未处理和自来水）的 8.17cm^2，这表明植物生长条件得到了明显改善。植物激素信号传导途径中特定表达基因的变化也支持了 FBP 处理促进植物生长速率的观察结果。论文研究成果为水产养殖废水的处理和回用提供了新的解决方案。

关键词：微纳米气泡；水培；环境污染；可持续发展

参考文献

[1] William Chirwa, Pan Li, Han Zhan, Yinyin Zhang, Yanan Liu, Application of fine bubble technology toward sustainable agriculture and fisheries, Journal of Cleaner Production,Volume 449, 2024, 141629

Aquaculture Effluent Treatment UsingPlasma-Fine Bubbles

Wenjie Huang[1], Chirwa William[1], Yanan Liu[2], Pan Li[1,*]

[1] College of Environmental Science and Engineering, Tongji University, Shanghai, 200092

[2]Donghua University

* lipan@tongji.edu.cn

Abstract: The aquaculture industry faces significant environmental challenges due to the lack of effective wastewater treatment facilities. The discharge of organic matter, residual antibiotics, and hormones into the environment causes severe pollution. This study proposes the use of Fine Bubble Plasma (FBP) technology as a sustainable solution for aquaculture wastewater treatment. Experimental results indicate that FBP treatment effectively removes micropollutants such as tetracycline (76%) and 17 α -methyltestosterone (48%). The toxicity values of the treated by-products were below the detection limit, indicating a significant reduction in toxicity compared to their original forms. FBP demonstrated remarkable efficiency in removing ammonia (80-83%) and phosphorus (61-77%) from aquaculture wastewater, achieving a 38-59% reduction in chemical oxygen demand. However, this method also led to an increase in total nitrogen (8-44%) and nitrate content (9.1-57%). Therefore, we propose the in-situ use of FBP-treated water for irrigation. The study shows that lettuce cultivated with FBP-treated effluent exhibited larger leaf areas, with an average daily growth rate of 14.2 cm² , significantly higher than the control groups (untreated and tap water) at 8.17 cm² . This indicates improved plant growth conditions. Changes in the expression of specific genes in the plant hormone signaling pathway also support the observation that FBP treatment promotes plant growth rates. The findings of this study provide

a novel solution for the treatment and reuse of aquaculture wastewater.

Key words：Micro-nanobubbles, Hydroponics, Environmental pollution, Sustainable Development

References:

[1] William Chirwa, Pan Li, Han Zhan, Yinyin Zhang, Yanan Liu, Application of fine bubble technology toward sustainable agriculture and fisheries, Journal of Cleaner Production,Volume 449, 2024, 141629

报告人/墙报展示人简介：

黄文杰，男，同济大学 2024 级硕士研究生。邮箱：3155356825@qq.com

臭氧微纳米气泡处理焦化废水零排放工艺中浓盐水的效能

王学琳[1]，沈俊伯[1]，胡楠[1]，缪蔚[2]，李攀[1*]

1.同济大学环境科学与工程学院，上海，200092

2.宝武水务科技有限公司

*Email: lipan@tongji.edu

摘要正文：焦化废水的零排放工艺中使用蒸汽机械再压缩（MVR）蒸发结晶处理膜浓缩液，最终产生超高盐浓缩液废水，其难以通过传统氧化方法进行处理。臭氧微纳米气泡技术能够提高臭氧传质效率、增强臭氧氧化能力，可望用于处理 MVR 浓缩母液。此工作以 MVR 浓缩母液为研究对象，对比臭氧微纳米气泡和普通大气泡两种曝气方式下臭氧传质速率以及有机物的降解效能，从技术、经济角度分析盐浓度和有机物浓度对两种臭氧氧化工艺处理效果的影响，验证了该技术的工程应用可行性。结果表明：随着盐浓度从 0.1 mol/L 增加至 1 mol/L，不同于传统的钛板曝气产生的大气泡，高盐条件下气泡尺寸逐渐升高，微纳米气泡和普通大气泡的臭氧传质系数分别提高 0.13 和 0.09 倍，同时臭氧微纳米气泡自分解速率的升高加速了臭氧从气相向液相的传质过程。在处理高盐、高有机物废水（TOC 浓度为 57.2~587.6 mg/L，电导率为 3.47~28.6 mS/cm）时，臭氧微纳米气泡较普通大气泡的 TOC 去除率提升 0.50~3.76 倍，吨水能耗最大可降低 71%。高盐废水的盐浓度和有机物浓度对臭氧微纳米气泡处理效能影响显著，工程应用中应根据废水特性选择合适的臭氧曝气方式。

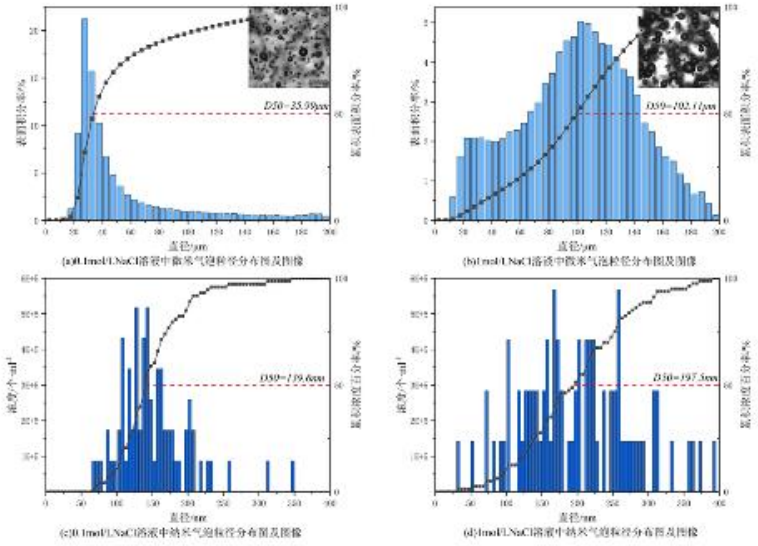


Fig.1 Particle size distribution and images of micro-nanobubbles at different salt concentrations

关键词：焦化废水；微纳米气泡；臭氧氧化；降解；MVR 浓缩母液

参考文献

[1] 沈俊伯，缪蔚，胡楠，等.臭氧微纳米气泡处理焦化废水零排放工艺中浓盐水的效能[J].环境工程技术学报，2024，14（4）：1130-1140.

Efficiency of ozone micro-nano bubbles in treating concentrated brine in zero discharge process of coking wastewater

Xuelin Wang[1], Junbo Shen[1], Nan Hu[1], Pan Li[1*]

[1] College of Environmental Science and Engineering, Tongji University, Shanghai, 200092

2.Baowu Water Technology, Co., Ltd.

* lipan@tongji.edu.cn

Keywords：Coking wastewater; Micro-nano bubbles; Ozone oxidation; Degradation; MVR concentrated mother liquor

References

[1] SHEN J B,MIAO W,HU N,et al.Efficiency of ozone micro nano bubbles in treating concentrated brine in zero discharge process of coking wastewater[J].Journal of Environmental Engineering Technology，2024，14（4）：1130-1140

报告人/墙报展示人简介：

王学琳，2022 级同济大学博士生在读，市政工程专业。邮箱：1264682350@qq.com

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：

饮用水处理中微纳气泡控制超滤膜污染技术研究

张余睿哲，Nachael Mwanga，李攀*

同济大学环境科学与工程学院，上海，200092

* lipan@tongji.edu.cn

摘要：膜法水处理技术被广泛应用于饮用水处理，但膜污染仍然是一个重大挑战。本研究开展了微纳米气泡应用于超滤膜污染控制的研究，探究了微纳米气泡曝气对浸没式陶瓷膜和中空纤维膜过滤处理中膜污染的控制效果，优化了微纳米气泡的大小和浓度，分析了膜污染控制机理。实验结果表明，尺寸较小且浓度更高的微纳米气泡更有利于控制膜污染。连续曝气模式与 30 分钟间隔的最佳间歇曝气模式均可保持较低的跨膜压，一定浓度的纳米气泡有利于控制膜污染。论文研究成果可为微纳米气泡技术应用于膜法水处理工程的设计及运行维护提供指导。

关键词：陶瓷膜；中空纤维膜，腐殖酸，膜污染，微气泡，纳米气泡

参考文献

[1] Nachael Mwanga, Xitong Wang, Pan Li, Yanling Liu, Shengji Xia, Daqiang Yin, Min Rui, Yubin Ye,Effect of micro and nanobubble size and concentration on membrane fouling: Strategies for energy-saving and ultrafiltration efficiency enhancement,Desalination,Volume 587,2024,117929

The Effects of Micro-nano bubbles in Facilitating Ultrafiltration and Prevention of Membrane fouling during Drinking Water treatment

Yuruizhe Zhang, Nachael Mwanga , Pan Li*

[1] College of Environmental Science and Engineering, Tongji University, Shanghai, 200092

* lipan@tongji.edu.cn

Abstract: Membrane technology is widely used in drinking water treatment, but membrane fouling remains a significant challenge. This study investigates the application of micro-nano bubbles in controlling ultrafiltration membrane fouling. The effects of micro-nano bubble aeration on fouling control in submerged ceramic and hollow fiber membranes were explored, optimizing the size and concentration of the bubbles and analyzing the fouling control mechanisms. Experimental results indicate that smaller and higher concentration micro-nano bubbles are more effective in controlling membrane fouling. Both continuous aeration and the optimal intermittent aeration mode with 30-minute intervals maintained low transmembrane pressure. A certain concentration of nanobubbles is beneficial for controlling membrane fouling. The findings of this study provide guidance for the design, operation, and maintenance of membrane-based water treatment systems using micro-nano bubble technology.

.

Keywords: Ceramic Membrane, Hollow fiber membranes, Humic acid, Membrane fouling, Microbubble, Nanobubble,

References:

[1] Nachael Mwanga, Xitong Wang, Pan Li, Yanling Liu, Shengji Xia, Daqiang Yin, Min Rui, Yubin Ye,Effect of micro and nanobubble size and concentration on membrane fouling: Strategies for energy-saving and ultrafiltration efficiency enhancement,Desalination,Volume 587,2024,117929

报告人/墙报展示人简介：

张余睿哲，男，同济大学 2024 级硕士研究生。

邮箱：2431519@tongji.edu.cn

附：报告人/墙报展示人是否为学生：是学生

Research on Size Distribution and Trends of Micro-nano Bubble using Pixact Online Bubble Monitoring System

Yuanwang Tang[1]
[1]Beijing Hiferg Technology Co., Ltd., Beijing, 100022
*thomas.tang@hifer.com

The size distributions and trends of micro-nano bubbles that prepared with different parameters were investigated using Pixact online bubble monitoring system(CCPT12) and micro-nano bubble generator. The probe of Pixact online bubble monitoring system was inserted into the liquid mixture of bubble and water to record the images of bubbles that is generated from micro-nano bubble generator in time. Statistical parameters of bubbles such as: size distribution, bubble counts number and their trends with time were analyzed based on the images recorded. The results of different parameters was compared and the reason of generating different bubble size was discussed.

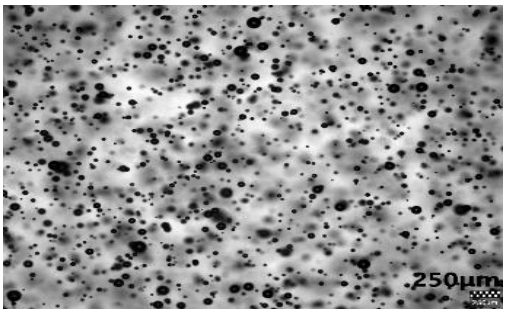


Fig 1. Image of micro bubbles

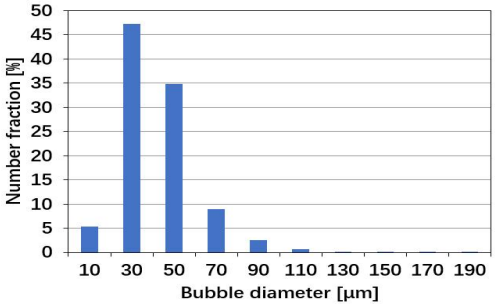


Fig 2. Size distribution of micro bubbles

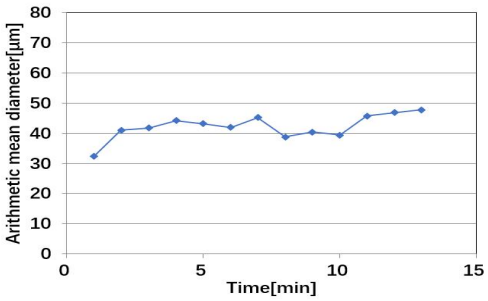


Fig 3. Trend of bubble size with time

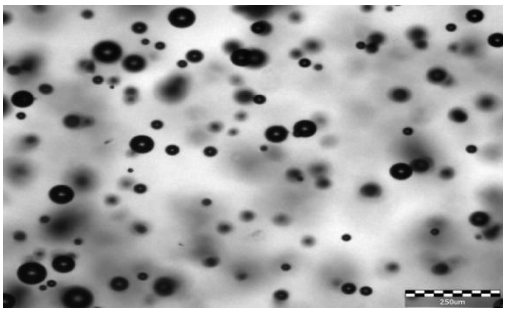
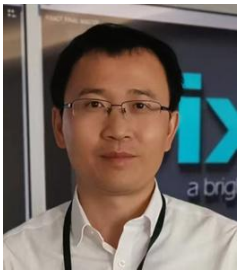


Fig 4. Zoomed Image of micro bubbles

Keywords: PBM; micro-nano bubbles; bubble size; bubble counts

墙报展示人简介：



唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器分析行业技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

附：墙报展示人非学生

第 30 分会场：微纳米结构与功能复合材料

超长碳纳米管及其高性能纤维的可控制备与优异性能

张如范*

清华大学

zhangrufan@tsinghua.edu.cn

摘要：超长碳纳米管是指长度达到厘米级以上的一种碳纳米管类型，它们具有非常低的缺陷密度和接近理论值的优异性能，在超强纤维、碳基电子、透明导电膜、智能传感等许多领域都具有突出的性能优势和广阔的应用前景。然而，目前超长碳纳米管还存在制备工艺苛刻、产率很低的问题，这严重限制了它们的实际应用。报告人长期从事超长碳纳米管的可控制备与性能研究方面的工作，并取得多项研究突破。本报告将介绍本课题组在超长碳纳米管的生长机理探索、催化剂的结构设计、超长碳纳米管的催化生长、高产率制备以及超长碳纳米管的优异性能开发方面的工作。

参考文献:

[1] Rufan Zhang*, Superdurable and fire-retardant structural coloration of carbon nanotubes, Science Advances, 2022, 8(26), eabn5882.

[2] Rufan Zhang*, Synthesis of Ultralong Carbon Nanotubes with Ultrahigh Yields, Nano Letters, 2023, 23(2), 523-532.

[3] Rufan Zhang*, Fei Wei*, Super-durable ultralong carbon nanotubes. Science, 2020, 369(6507), 1104-1106.

[4] Rufan Zhang*, Floating Bimetallic Catalysts for Growing 30 cm-Long Carbon Nanotube Arrays with High Yields and Uniformity, Advanced Materials, 2024, DOI: /10.1002/adma.202402257.

[5] Rufan Zhang*, Ultrasensitive Airflow Sensors Based on Suspended Carbon Nanotube Networks, Advanced Materials, 2022, 34(18), 2107062.

报告人简介：

张如范，清华大学化工系长聘副教授、特别研究员、博士生导师、国家高层次人才计划入选者、中国颗粒学会青年理事、中国化学会奖励推荐委员会委员、中国材料研究学会高级会员、中国微米纳米技术学会青年工作委员会委员、中国能源学会专家委员会委员，SusMat、Carbon Future、Carbon Energy、Carbon Neutralization、Particuology 及 Exploration 青年编委。主要从事纳米碳材料以及功能纳米材料的可控制备与性能表征及应用等方面的研究，在 Science、Nature Nanotechnology、Nature Sustainability、Science Advances、Nature Communications、Journal of American Chemical Society、Advanced Materials 等期刊发表论文 113 余篇。申请发明专利 16 项；撰写学术专著 6 部。曾获侯德榜化工科学技术青年奖（2019）、中国化学会青年化学奖（2018）、2018 年《麻省理工科技评论》中国区“35 岁以下科技创新 35 人”（2018)、中国石油与化学工业联合会首届彤程青年研发基金（2023）、全国超材料优秀青年学者（2024）、中国新锐科技人物（2018）、教育部自然科学一等奖（2016）、瑞士乔诺法（Chorafas）青年研究奖（2015）等奖励。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

室温塑性陶瓷的研制

赵智胜 [1*]

[1]燕山大学亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室，高压科学中心，秦皇岛，066004

*Email: zzhao@ysu.edu.cn

摘要：相较于金属，陶瓷因其轻质、高强、耐高温、耐腐蚀等特性而被广泛应用于结构材料，但陶瓷室温下缺乏塑性，容易发生脆性断裂，成为其工程应用的致命弱点。至今为止，实现陶瓷块材室温塑性这一科学目标一直面临巨大挑战。我们利用洋葱氮化硼在热压和放电等离子烧结过程中的结构相变合成出一种层状基元转角序构的氮化硼陶瓷块材，其内部氮化硼纳米片呈三维互锁结构，且每个纳米片由相对转动不同角度的平行薄片（几层到十几层厚度）为结构基元堆叠而成。在单轴压缩下，这种陶瓷的断裂应变达到14%，永久塑性变形能力高达8%，并且强度相较于传统层状六方氮化硼陶瓷也获得了大幅提升，打破了结构材料强度和塑性难以兼顾的传统认知。转角层状氮化硼陶瓷的成功研制不仅首次实现了陶瓷块材的室温高塑性，也为其他层状材料体系的塑性研究提供了启示。此外，转角层状氮化硼陶瓷还具有高的能量吸收能力和抗疲劳特性，具有重要的应用前景。

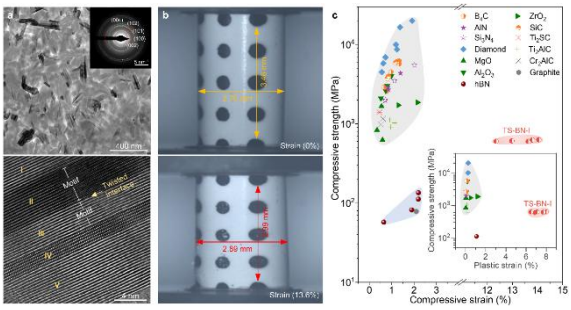


Fig. 1 Microstructure and room-temperature uniaxial compression performance of twisted-layer boron nitride ceramic. a, The ceramic is composed of three-dimensional interlocking nanosheets, each of which is stacked with layer motifs with different rotation angles; b, The ceramic before and after uniaxial compression deformation at room temperature; c, Comparison of room-temperature deformation capacity, plasticity and strength of twisted-layer boron nitride ceramic and traditional ceramic.

关键词：室温塑性；陶瓷；氮化硼；层状基元；转角序构；

参考文献

[1] **Y.J.Wu, Y.Zhang, X.Y.Wang, W.T.Hu, S.Zhao, T.Officer, K.Luo, K.Tong, C.C.Du, L.Q.Zhang, B.Z.Li, Z.W.Zhuge, Z.T.Liang, M.D.Ma, A.M.Nie, D.L.Yu, J.L.He, Z.Y.Liu, B.Xu, Y.B.Wang, Z.S.Zhao, and Y.J.Tian,Twisted-layer boron nitride ceramic with high deformability and strength, Nature 2024, 626: 779-784.**

[2] **Y.J.Wu, Y.Zhang, S.S.Zhang, X.Y.Wang, Z.T.Liang, W.T.Hu, Z.S.Zhao, J.L.He, D.L.Yu, X.Bo, Z.Y.Liu, and Y.J.Tian, The rise of plastic deformation in boron nitride ceramics, Sci. China Mater. 2020, 64: 46-51.**

报告人/墙报展示人简介：

赵智胜，燕山大学教授、博士生导师，从事超硬材料与结构陶瓷方面的研究工作。目前研究聚焦在碳和氮化硼材料体系，发现了全新的固态相变机制，实现了碳和氮化硼材料组织结构的精细调控，发展出了超硬、高韧、导电性可调的石墨-金刚石杂交碳（以 Gradia 命名）、室温高弹塑性的转角层状氮化硼陶瓷、最硬的非晶碳、导电超硬的非晶碳/纳米金刚石复合材料以及高密封性和超弹性的“橡胶”碳等新型和高性能亚稳材料。主持国家自然科学基金面上、优青、杰青和重点项目、国家重点研发计划课题、河北省杰青、河北省百人计划等基金项目。以主要完成人获河北省自然科学一等奖和二等奖。至今发表 SCI 论文 150 余篇，以第一或通讯作者在 Nature、Nat Mater、Natl Sci Rev、Nat Commun、Sci Adv、Matter、PNAS、PRL、JACS、Nano Lett、ACS Nano 等期刊上发表 56 篇；授权美日欧专利 16 项、中国发明专利 16 项。研究成果被 Nature、Science、人民日报、新华社、国家自然科学基金委员会等亮点报道和介绍。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

仿生微纳孔材料的设计与应用

闻利平

中国科学院理化技术研究所，北京市海淀区中关村东路 29 号，100190

*E-mail: wen@mail.ipc.ac.cn

摘要：微纳米结构材料在能源、环境和化学工程领域具有广泛的潜在应用。同时，它们在生物医学和生物质转化等新兴领域也展现出显著的前景。作为一门跨学科前沿，仿生学从自然中汲取灵感，推动新技术、产品和系统的设计与开发。这种方法解决了工程、医学和环境领域的复杂问题，提高了生产效率，降低了成本，并促进了可持续发展[1-2]。

受生物离子通道的启发，我们的研究小组通过将聚合物与结晶多孔盐（CPOS）、沸石、共价有机框架（COFs）和金属有机框架（MOFs）等多孔材料结合，开发了一系列仿生微纳米多孔膜系统。通过精确控制离子通道的尺寸、表面电荷特性和润湿性，并引入分子间相互作用和跨相运输机制，我们实现了离子和分子的可控传输。这些技术已应用于神经信号调节、资源利用、能量转换和环境保护等多个领域[3-6]。

关键词：仿生；离子通道；微纳米结构材料

参考文献

[1] Zhang, Z.; Wen, L.; Jiang, L. Nanofluidics for osmotic energy conversion. *Nat. Rev. Mater.* 2021, **6**, 622.

[2] Liu, P.; Kong, X.-Y.; Jiang, L.; Wen, L.*Chem. Soc. Rev.*2024, 10.1039/d3cs00367a.

[3] Chen, W.; Zhai, L.; Zhang, S.; Zhao, Z.; Hu, Y.; Xiang, Y.; Liu, H.; Xu, Z.; Jiang, L.; Wen, L. Cascade-heterogated biphasic gel iontronics for electronic-to-multi-ionic signal transmission, *Science* 2023, **382**, 559.

[4] Hu, Y.; Xiao, H.; Fu, L.; Liu, P.; Wu, Y.; Chen, W.; Qian, Y.; Zhou, S.; Kong, X.-Y.; Zhang, Z.; Jiang, L.; Wen, L. *Adv. Mater*. 2023, **35**, 2301285.

[5] Xin, W.; Fu, J.; Qian, Y.; Fu, L.; Kong, X.-Y.; Ben, T.; Jiang, L.; Wen, L. Biomimetic KcsA channels with ultra-selectiveK^+ transport for monovalent ion sieving. *Nat. Commun.* 2022, **13**, 1701.

[6] Xin, W.; Lin, C.; Fu, L.; Kong, X.-Y.; Yang, L.; Qian, Y.; Zhu, C.; Zhang, Q.; Jiang, L.; Wen, L. Nacre-like Mechanically Robust Heterojunction for Lithium-Ion Extraction. *Matter* 2021, **4**, 737.

Design and Application of Biomimetic Micro-Nano porous materials

Liping Wen

Technical Institute of Physics and Chemistry, CAS, 29 Zhongguancun East Road, Beijing, 100190

Micro-nanostructured materials hold extensive potential applications in energy, environmental, and chemical engineering fields. They also show significant promise in emerging areas such as biomedicine and biomass conversion. As an interdisciplinary frontier, biomimetics draws inspiration from nature to drive the design and development of new technologies, products, and systems. This approach addresses complex problems in engineering, medicine, and environmental fields, enhances production efficiency, reduces costs, and promotes sustainable development[1-2].

Inspired by biological ion channels, our research group has developed a series of biomimetic micro-nanoporous membrane systems by combining polymers with porous materials such as crystalline porous salts (CPOS), zeolites, covalent organic frameworks (COFs), and metal-organic frameworks (MOFs). By precisely controlling the size, charge properties, and wettability of ion channels, and

introducing intermolecular interactions and cross-phase transport mechanisms, we have achieved controlled transport of ions and molecules. These technologies have been applied in various fields, including neural signal regulation, resource utilization, energy conversion, and environmental protection[3-6].

*感谢国家自然科学基金(No: 21625303)和国家重点研发计划 (No: 2022YFB3805900, 2017YFA0206900)资助

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

质子交换膜燃料电池电催化界面优化的材料策略

陈胜利*，唐美华，朱福龙，王春萍

武汉大学化学与分子科学学院，武汉，中国，430072

*Email: slchen@whu.edu.cn

摘要正文：发展高性能的低铂（Pt）膜电极（MEA）对质子交换膜燃料电池（PEMFC）的大规模市场渗透至关重要。[1] 当前，常用全氟磺酸（PFSA）离聚物的磺酸侧链对Pt表面的毒化、以及碳氟主链在界面形成高结晶致密层而引起的界面局域氧气传输阻抗（Rlocal）等是限制低铂MEA性能的主要因素。[2,3] 优化Pt/离聚物界面结构，实现催化层（CL）中多组分传输及界面电化学反应的平衡，是突破PEMFC性能瓶颈的有效途径。本文介绍了我们近期从材料设计出发调控Pt/离聚物界面结构及过程的研究进展。首先，我们发现在Pt/PFSA离聚物界面引入羟基金属卟啉（MPOH）化合物可以大幅提升MEA的性能。结合电化学测试、物理表征、分子动力学模拟等手段，我们揭示出MPOH不仅可以有效削弱磺酸侧链对Pt表面的毒化，并可提供额外的局域氧气传输通道改善传输效率。[4] 此外，我们发展了基于强亲水性Anderson型多酸（POM）阴离子团簇为质子传输载体的新型离聚物。多维度物理表征及电化学测试结果表明，与PFSA离聚物相比，POM阴离子团簇的大尺寸、电荷离域、高吸水性等特性使得其在Pt表面的吸附较弱，且能行程更大、更连通的亲水域。因此，与PFSA离聚物相比，基于该POM阴离子的离聚物显著降低MEA的Rlocal，同时提升质子传导率，在各湿度工况下均展现出优异的电化学性能。不仅如此，该POM团簇中的锰离子可有效清除过氧化物，故MEA耐久性也得以改善。[5]

关键词：质子交换膜燃料电池；催化层；局域传输阻抗；离聚物；金属卟啉

参考文献

[1] Tang, M. H., Zhang S. M., Chen, S. L. Chem. Soc. Rev., 2022, 51, 1529-1546.
[2] Tang, M. H., Shan Q., Liu, Y. W., Chen, S. L. J. Power. Sources, 2023, 567, 232966.
[3] Tang, M. H., Yan H. L., Zhang X. M., Zheng Z. Y., Chen, S. L. Adv. Mater., 2023, 2306387.
[4] Tang, M. H., Wang C. P., Zheng Z. Y., Chen, S. L. To be published.
[5] Zhu F. L., Wang C. P., Tang M. H., Zheng Z. Y., Yan H. L., Chen, S. L. Adv. Funct. Mater., 2024, 2408118.

报告人/墙报展示人简介：

陈胜利，武汉大学教授、博士生导师；分别于 1991 和 1996 年在武汉大学获学士和博士学位，随后在英国帝国理工学院化学系等从事博士后研究；长期从事能源电化学基础与材料研究，在 *Nat. Catal.*，*J. Am. Chem. Soc.*，*Nat. Commun.*，*Adv. Mater.*等期刊发表论文 160 余篇，作为主编之一出版《电催化》书籍；主持国家自然科学基金重点项目等；担任 ACS Catalysis (2018-2022)、ACS Electrochemistry、催化学报、电化学等期刊编委；获中国电化学青年奖。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

面向高性能电池研究的实验技术和分析方法

禹习谦[1]

[1]中国科学院物理研究所，北京市海淀区中关村南三街 8 号，100190

*Email: xyu@iphy.ac.cn

摘要：电池内部从材料到电极至电池器件的结构特性决定了电池材料和器件的性能。目前，各种应用场景对锂电池的性能提出了很高的要求，锂电池从材料到器件的设计已经趋于使用极限。通过电池内部从材料到器件等不同空间尺度结构的精细调控和平衡设计，实现电池具有高能量密度、或者高功率密度、长循环寿命等并具有较好的综合性能，是满足不同应用场景使用需求的关键。电池内部的结构复杂性跨越从原子尺度到宏观器件尺度，结构在电化学过程中存在复杂的演化，与电池的电化学性能和安全性能密切相关。本报告将介绍针对跨空间尺度复杂结构研究的实验技术和分析方法，比如研究电极材料无序结构的全散射实验技术与反蒙托卡诺分析方法、研究电极颗粒中高维缺陷结构的衍射成像技术与人工智能辅助图像分析方法和研究电池器件中金属锂电极结构的多模态耦合成像实验技术等，并基于此讨论材料的精细设计[1-3]。

关键词：锂离子电池；微结构；多尺度表征；智能分析

参考文献

[1] Y. Sun, S. Jiao, J. Wang, Y. Zhang, J. Liu, X. Wang, L. Kang, X. Yu, H. Li, L. Chen, X. HuangExpandable Li percolation network: the effects of site distortion in cation-disordered rock-salt cathode material. *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145: 11717.

[2] S. Jiao, Y. Sun, J. Wang, D. Shi, Y. Li, X. Jiang, F. Wang, Y. Zhang, J. Liu, X. Wang, X. Yu, H. Li, L. Chen, X. HuangThe mechanism of fluorine doping for the enhanced lithium storage behavior in cation-disordered cathode oxide. *Adv. Energy Mater.* 2023, 13: 2301636.

[3] S. Jiao, Y. Sun, D. Shi, Y. Zhang, X. Wang, J. Liu, L. Kang, F. Wang, X. Yu, H. Li, L. Chen, X. Huang. Structural regulation-induced Li-electron disentanglement for stabilized oxygen redox of Li-excess disordered rock-salt cathode.*Energy Environ. Sci.* 2024, DOI: 10.1039/D4EE00638K.

报告人/墙报展示人简介：

禹习谦，中国科学院物理研究所研究员，博士生导师。2005 年武汉大学本科毕业，2010 年中国科学院物理研究所获博士学位，2010-2013 年在美国布鲁克海文国家实验室从事博士后研究，2013 年-2016 年任布鲁克海文国家实验室助理研究员，2016 年 4 月起加入中国科学院物理研究所工作。获国家自然科学基金委杰青等项目资助。主要从事高能量密度锂电池及关键材料开发、先进表征与材料智能设计、电池失效分析等研究工作。在包括 Nature Energy 在内的国际重要学术期刊上发表学术论文 220 余篇，引用 26900 余次，H 因子 86。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

钠离子电池储能机制与关键材料

陆雅翔*，代涛，丁飞翔，李钰琦，杨佯，赵晓兵，谢飞，容晓晖，胡勇胜*

中国科学院物理研究所，北京，100190

*Email: yxlu@iphy.ac.cn;yshu@iphy.ac.cn

摘要：钠离子电池因资源丰富、成本低廉，成为大规模储能领域的重要技术之一。基于层状氧化物正极和无定形碳负极的研究基础，我们提出了高熵层状氧化物正极的概念，并研究了高熵策略对延迟相变改善循环性能、拓宽钠离子传输通道提升倍率性能和调控电子结构增加电荷补偿容量的作用。同时，我们探索了一系列碳材料微观结构的调控策略，将碳负极的储钠容量提升至 416 mAh/g，并揭示了硬碳支持 Ah 级钠离子电池快速充放电的根源。最近，我们发现了一种新型的黏弹性无机玻璃电解质，其兼具了传统无机陶瓷和有机聚合物的优点，有效解决了电极和电解质之间的界面兼容性问题，实现了全固态电池在室温下无需外部压力的平稳运行。

关键词：层状氧化物；无定形碳；无机玻璃

参考文献

[1] Dai, T., Wu, S., Lu, Y., Yang, Y., Liu, Y., Chang, C.,Rong, X., Xiao, R., Zhao, J., Liu, Y., Wang. W., Chen, L., Hu, Y.-S., Nature Energy, 2023, 8, 1221-1228.

[2] Li, Y., Vasileiadis, A., Zhou, Q., Lu, Y., Meng, Q., Ombrini, P., Zhao, J., Chen, Z., Niu, Y., Qi, X., Xie, F., Jagt, R., Ganapathy, S., Titirici, M., Li, H., Chen, L., Wagemaker, M., Hu, Y.-S., Nature Energy, 2024, 9, 134-142.

报告人简介：

陆雅翔，中国科学院物理研究所副研究员，博士生导师，科技部重点研发计划（青年项目）首席科学家，国家优秀青年科学基金获得者。主要从事二次电池关键材料、界面性质及器件构筑等相关研究工作。近年来在 Science、Nature Energy 等国内外重要学术期刊上发表学术论文 50 余篇，授权发明专利 10 余项，参著《钠离子电池科学与技术》。担任 SusMat, Carbon Energy, Carbon Future、Chinese Physics Letters、物理学报等期刊青年编委。荣获北京市科学技术奖自然科学一等奖（2022）、北京市科学技术协会“首都前沿学术成果”奖（2022）、Energy Storage Materials 青年科学家奖（2023）等多项学术荣誉。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

基于低维光电功能微纳米材料的能量收集/转化纤维织物

卓明鹏*, 刘金卓，鞠一逸，张克勤

苏州大学纺织与服装工程学院，现代丝绸国家工程实验室，江苏苏州 215123，

*Email: mpzhuo@suda.edu.cn

摘要：光热转换与辐射降温的太阳辐射调控技术，不仅可以实现个人热管理，获得理想的热舒适；还可以为可穿戴热电器件提供可观的温差，实现高性能电力输出。因此，织物式太阳能热电器件因其在能源利用、便携性和环保性方面的显著优势而受到广泛关注。因此，我们首先提出设计新型的有机光热材料并制备其光蓄热纳米纤维薄膜，系统研究了有机光热材料“分子结构-凝聚态结构-光电性能”之间的内在关联，深入探究了有机光热材料在纳米纤维薄膜的光热转换机制，并进一步与热电纤维进行耦合集成，实现了光-热-电的能量收集和转换。热电器件单元的密度也是实现高能量输出的一个重要因素，经济实惠高效的热电器件构筑方法也是热电应用的关键。为解决这两个问题，促进柔性热电在智能可穿戴中的运用，我们进一步通过简便的丝网印刷技术，调控碳纳米管浆液流变性，实现在传统织物上印刷大面积碳纳米管热电器件阵列，进一步与辐射制冷织物进行集成，为高密度碳纳米管热电单元提供理想的温差，同时实现夏季服装的热舒适和高效光热转换，助力于可穿戴智能织物和柔性智能电子产品的集成化、轻量化、便捷和舒适发展。

关键词：自组装，电荷转移作用，光热转换，能量收集与转换，智能穿戴

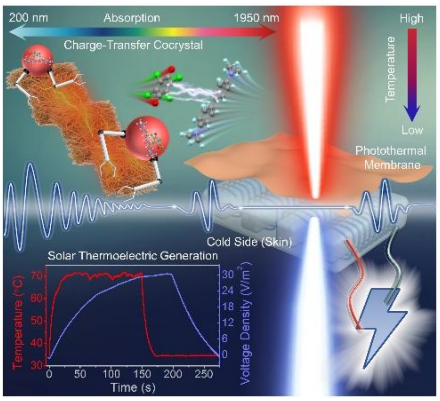


Figure 1. Stretchable Nanofiber Membrane of NIR-II Absorbing Charge-Transfer Cocrystal for Wearable Solar Thermoelectric Power Generation

参考文献：

[1] Y. D. Zhao, W. Jiang, S. Zhuo, B. Wu, P. Luo, W. Chen, M. Zheng, J. Hu, K.-Q. Zhang, * Z.-S. Wang,* L.-S. Liao,* **M.-P. Zhuo***,Stretchable photothermal membrane of NIR-II chargetransfer cocrystal for wearable solar thermoelectric power generation.***Sci. Adv.**2023, *9*, eadh8917.

[2] **M. P. Zhuo**, Y. Yuan, Y. Su, S. Chen, Y. T. Chen, M. D. Li, Y. Li, B. W. Hu, X. D. Wang, L. S. Liao,Segregated Array Tailoring CT Degree of Organic Cocrystal for the Efficient Near-Infrared Emission beyond 760 nm.***Adv. Mater.*** 2022, 43, 2107169.

[3] **M. P. Zhuo**, X. Wei, Y. Y. Li, Y. L. Shi, G. P. He, H. Su, K. Q. Zhang, J. P. Guan, X. D. Wang, Y. Wu, L. S. Liao,Visualizing the interfacial-layer-based epitaxial growth process toward organic core-shell architectures.***Nat. Commun***. *2024*, *15*, 1130.

[4] S. Zhuo, W. Jiang, Y. Dong Zhao, J.-Z. Liu, X. Zhao, J. Ye, M. Zheng, Z.-S. Wang, X.-Q. Zhou, X.-Q. Wang, Y.-L. Shi, W. Chen*, K.-Q. Zhang*, L.-S. Liao, **M.-P. Zhuo***,Large-area nanofiber membrane of NIR photothermal $Cs_{0.32}WO_3$ for flexible and all-weather solar thermoelectric generation.***Chem. Eng. J.**2024, *479*, 147571.

[5] Y. B. Xue, Y. M. Cao, P. Luo, X. X. Dong, B. B. Han, Y. D. Zhao, M. Zheng, M. Zheng*, Z. S. Wang*,**M. P. Zhuo*,** Asymmetric Sandwich Janus Structure for High-Performance Textile‐Based Thermo-Hydroelectric Generators Toward Human Health Monitoring. ***Adv. Funct. Mater***. 2024, *34*, 2310485.

[6] Y. D. Zhao, J. Han, Y. Chen, Y. Su, Y. M. Cao, B. Wu, S. M. Yu, M.-D. Li*, Z. Wang*, M. Zheng, **M.-P. Zhuo***, L.-S. Liao,

Organic Charge-Transfer Cocrystals toward Large-Area Nanofiber Membrane for Photothermal Conversion and Imaging. ***ACS Nano***2022, *16*, 15000-15007.

报告人/墙报展示人简介：

卓明鹏，1990 年 2 月生，苏州大学优秀青年学者，副教授，硕士生导师。2014 年和 2016 年分别获得南昌大学材料科学与工程学院的工学学士和硕士学位，2016 进入苏州大学功能纳米与软物质研究院（FUNSOM），师从廖良生教授攻读工学博士学位。博士毕业后入选 2019 年度“博士后创新人才支持计划”，2019 年 7 月-2022 年 7 月在李述汤院士和廖良生教授的指导下，在苏州大学 FUNSOM 围绕着有机光电功能材料设计合成及其光电器件的开发制作开展博士后研究工作。2022 年 8 月就职于苏州大学纺织与服装工程学院，主要开展无机功能纳米材料改性制备、有机光电材料设计合成及其柔性智能纺织领域研究。目前以第一作者/通讯作者身份在 ***Adv. Mater.***(4 篇), ***Angew. Chem. Int. Ed.***(3 篇),***Sci. Adv., Matter*** (2 篇), ***Nat. Commun.***(3 篇), ***ACS Nano*** (3 篇), ***CCS Chem., Adv. Funt. Mater. Nano Energy*** 等国际重要学术期刊发表论文 40 余篇，影响因子总数超过 1000；已授权发明专利 22 项，已产业化专利 3 项。独立主持完成了第四批“博新计划”、中国博士后科学基金第 68 批面上项目以及江苏省博士后科研资助项目等多项科研项目。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

轻质高强中空颗粒及其电磁功能复合材料

安振国 [1],*张敬杰 [1]

[1] 中国科学院理化技术研究所，北京市海淀区中关村东路 29 号，100190

*Email: anzg@mail.ipc.ac.cn

装备的升级和应用场景的复杂化对电磁功能复合材料的低密度、高强度、高功能性提出了更高要求。聚合物基体与电磁功能颗粒的复合是构筑电磁功能复合材料，并实现轻量化的重要手段。高分子基体的密度调控空间较小，而电磁功能材料通常具有远高于高分子基体的密度，因此复合材料的轻量化设计多通过引入泡孔实现。虽然泡孔的存在可以大幅度降低密度，但同时也会显著削弱材料的强度。相对而言，对颗粒进行中空化设计则有望在大幅度降低密度的同时利用合理设计的球壳结构协同实现电磁功能和力学补强。我们的工作通过设计中空微球形颗粒结构，将其球壳进行力学支撑和电磁功能分区设计和成型，获得高的力学稳定性并在低电磁功能物质含量下构筑有效网络。基于这一思路，一方面对力学支撑和电磁功能结构单元对中空微球整体的功能性和力学性能的作用及其机理进行了研究；另一方面针对球形颗粒因点接触而导致的连通性较差的问题，开展了针对球间连接区的强化与综合性能调控。

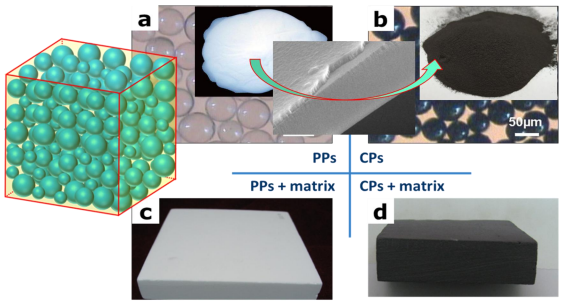


图1 轻质高强微纳米复合型中空微球及其复合材料

关键词： 中空颗粒；轻量化；高强度；电磁功能；复合材料

参考文献

[1] Jia,Q.; Li,M.; An,Z.;Wang, P.;Zhang, J.*Chem. Eng. J.***2024, 483**: 148748.

[2] Jia,Q. An,Z.; Li,M.;Liu, R.;Xiao, W.; Zhang, J.*Small***2023, 19**: 2005735.

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

同种电荷介质球之间静电相互作用的调控

李鑫[1]， 黄德财[1*]

[1]南京理工大学应用物理系，南京，210094

*mail: hdc@njust.edu.cn

摘要： 本文开发了一种多重成像方法，用于准确计算均匀电场中两个同种电荷介质球之间的静电相互作用。与有效偶极子方法相比，多重成像方法产生更精确的数值结果，与实验结果一致。通过调整净电荷、相对介电常数、外部电场和间隙尺寸，可以调控介质球之间的吸引力和排斥力。对于两个同种电荷的球体，在均匀电场下观察到短程吸引和长程排斥。在短程条件下，减小球体之间间隙会导致不同电荷在球体内部局部表面内显著地积累。因此，两个同种电荷介质球之间的静电相互作用明显增强的增强。

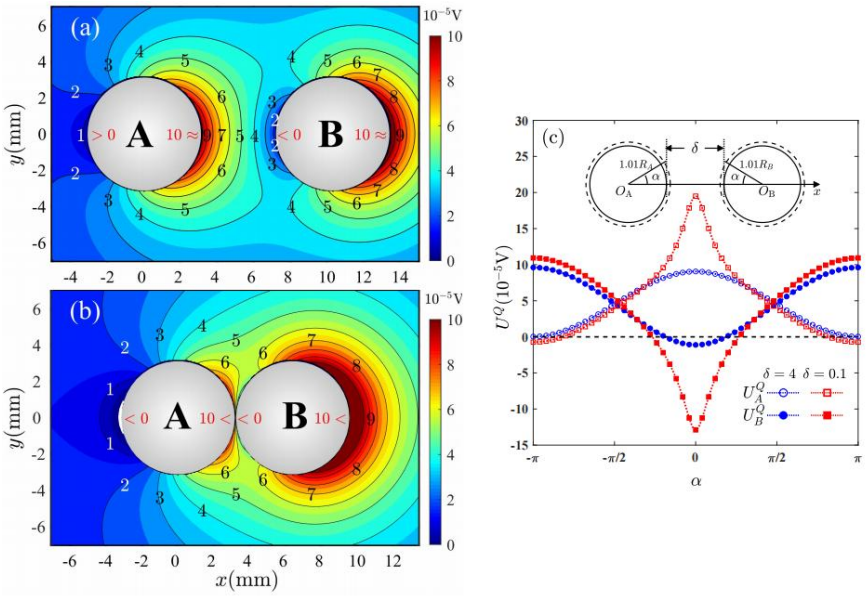


Fig. 1 Like-charge attraction between two identical dielectric spheres in a uniform electric field

关键词：同种电荷；静电相互作用；多重镜像法

References

[1] Xin Li, Changhao Li, Xin Gao, Decai Huang*, Like-charge attraction between two identi -cal dielectric spheres in a uniform electric field: a theoretical study via a multiple-image method and an effective-dipole approach, J. Mater. Chem. A, 2024, 12, 6896-6905.

原文链接：https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2024/ta/d3ta07945g

报告人/墙报展示人简介：

毕业于中国科学院物理研究所，现为南京理工大学物理系副教授，物理学和材料科学与工程博导，主要研究方向为软物质物理，在 Nonlinear Dynamics, Physical Review E, AIChE Journal， Journal of Materials Chemistry A 等 SCI 杂志发表文章 50 多篇。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

海洋多糖碳基吸波材料设计合成与机制强化研究

翟尚儒*

环境与资源学院，浙江科技大学；

辽宁省生物质化学与材料重点实验室/辽宁木质纤维生物质精炼协同创新中心，大连工业大学

Email: zhaisrchem@1663.com

摘要：基于设计合成手段实现生物质基环境功能材料的结构与性能调控是当前环境、化工和材料等交叉领域的前沿研究。利用多糖物质（壳聚糖、海藻多糖等）本征分子特点和大宗生产优势，通过可控碳化手段、界面改性和与金属纳米颗粒功能复合制备了系列电磁污染吸收材料，通过性能探究和结构分析揭示了合成过程对材料结构和性能的调控规律，建立了材料结构性质和组成对其应用性能的影响机制[1-4]。系统研究了基于海藻多糖、壳聚糖为前驱体制备新型功能材料的研究工作。围绕海藻多糖、壳聚糖创制绿色功能材料的研究有效拓展了生物质资源的高值化利用途径。

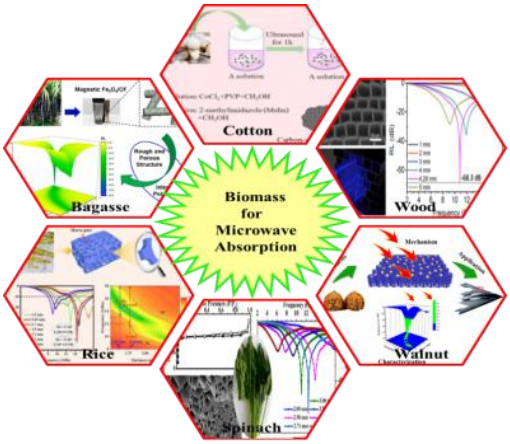


Fig.1.Biomass-derived microwaveabsorbing materials.

关键词：电磁污染；吸收；多糖；结构控制；性能调控

参考文献

1. Zhai*etal., ***Small***, 2024, 2309773.

2. Zhai*etal., ***Chem. Eng. J***., 2024, 487, 150636.

3. Zhai*et al., ***Chem. Eng. J***., 2020, 359, 125063.

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

二维功能高分子材料

徐宇曦*

西湖大学工学院，浙江省杭州市，310024

*Email: xuyuxi@westlake.edu.cn

摘要：石墨烯是具有单原子厚度的二维碳原子晶体，备受瞩目，同时也是一种独特的二维天然共轭高分子。受石墨烯二维大分子结构和特性的启发，研究人员希望从原子和分子水平理性设计合成具有新的骨架联接方式和多样化分子结构的二维晶态高分子，拓展二维功能高分子的研究范围，获得更多具有优异性能的新型二维材料，这一研究领域已成为高分子学科和材料学科新的生长点，充满巨大机遇和挑战。本报告将介绍我们在二维功能高分子尤其是二维三嗪高分子方面取得的一些研究进展，通过发展材料的精准可控制备策略和有序组装加工方法，理解二维高分子独特的构效关系，探索二维功能高分子材料在能源存储和转化方面的实际高效应用，为解决当前能源、催化和环境的重要问题提供新思路。

关键词：二维高分子；可控制备；电催化；光催化；电化学储能

参考文献

[1] Ren, Y. M.; Xu, Y. X.*_Chem. Soc. Rev._**2024**, *53,*1823-1869.

[2] Cui, K.; Tang, X. L.; Xu, X. P.; Lyu, P. B.; Xu, Y. X.*_Angew. Chem. Int. Ed._**2024**, *63,*e202317664.

[3] Sun, T.; Li, S.; Zhang, L.; Xu, Y. X.*_Angew. Chem. Int. Ed._**2023**, *62,* e202301865.

[4] Wang, C. X.; Lyu, P. B.; Chen, Z.; Xu, Y. X.*_J. Am. Chem. Soc._**2023**, *145,* 12745-12754.

[5] Zhang, Z.; Xu, Y. X.*_J. Am. Chem. Soc._**2023**, *145,*25222-25232.

[6] Sun, T.; Liang, Y.; Xu, Y. X.*_Angew. Chem. Int. Ed._**2022**, *61,* e202113926.

Two-Dimensional Polymers for Energy Storage and Conversion

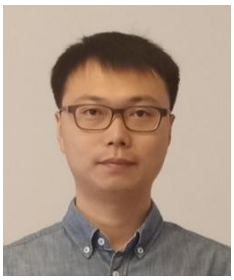
Yuxi Xu*

College of Engineering, Westlake University, Hangzhou, 310024

*xuyuxi@westlake.edu.cn

Graphene is a unique single-atom-thick 2D carbon nanosheet and also a 2D natural polymer consisting of sp^2 chemically bonded carbon atoms. Inspired by the structure and property of graphene, there is growing interest in rational synthesis of new 2D crystalline polymers at the atomic or molecular level via 2D topological polymerization of designed monomers. The 2D synthetic polymers with new linkage motifs and excellent structural diversity can demonstrate highly tailorable network structures and physicochemical properties and hold great potential in various applications such as energy, catalysis, and optoelectronics, which have emerged as an active research area in the functional polymers and 2D materials. In this talk we will introduce our recent progress on the 2D synthetic polymers particularly 2D triazine polymers. We have developed effective synthesis methods to prepare a series of crystalline 2D triazine polymers in a controlled and scalable way and also processed them into macroscopic assemblies as well as explore their high-performance applications in energy storage and conversion with understanding their unique structure-property relationship.

Keywords:2D polymers, synthetic methods, electrocatalysis, photocatalysis, batteries



报告人简介：

徐宇曦，西湖大学工学院研究员、博导。2007 年本科毕业于武汉大学化学与分子科学学院，2011 年博士毕业于清华大学化学系，随后在华盛顿大学、加州大学洛杉矶分校从事博士后研究。主要致力于新型高分子和石墨烯等低维功能材料的化学精准制备、可控组装复合及其在能源、环境和催化中的高效应用。以通讯/第一作者在 Chem. Soc. Rev.、Acc. Chem. Res.、Nat. Commun.、J. Am. Chem. Soc.、Angew. Chem. Int. Ed.、Adv. Mater.等学术期刊上发表论文一百余篇，他引两万七千多次，获得 2016 年度国家自然科学二等奖（第二获奖人）、2019 年中国化学会首届菁青化学新锐奖、2020 年国家基金委优秀青年科学基金（结题优秀）、2021 Young Innovator Award of Nano Research、2024 首届 2DM Young Scientist Award，入选上海市东方学者特聘教授（2015）、中国科协青年人才托举工程（2017）、浙江省万人计划青年拔尖人才（2020）、Clarivate Analytics 全球高被引科学家（2018-2021）、Elsevier“中国高被引学者”（2019-2023）、英国皇家化学会会士（FRSC，2021），国际先进材料协会会士（FIAAM，2024）。担任中国材料研究学会纤维改性与复合技术分会理事、浙江省膜学会和材料学会理事、以及 Nano Research、InfoMat、Nano-Micro Letters 等期刊的青年编委。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

水系锌离子电池氧化钒电极材料的制备与性能调控

朱孔军 [1,*], 梁彭花 [1,2], 季定玮 [1,2], 孔之翰 [1,2], 刘劲松 [2], 严康 [1],王婧 [1]
1 南京航空航天大学航空学院航空航天结构力学及控制全国重点实验室
2 南京航空航天大学材料科学与技术学院

摘要：可充电水锌离子电池因其经济性和高安全性被认为是锂离子电池固定式储能的一种很有前途的替代品[1-3]。钒基材料作为阴极材料以其开放层结构和较高的理论容量等优点受到广泛的关注。离子/分子嵌入是调节阴极性能的重要策略。本文分别制备了预插入 Ca2+和 Na+离子的水合钒酸盐材料。结构水的引入增加了钒酸盐的层间间距，起到了“润滑剂”的作用。金属离子的插入也扩大了层间距，进一步稳定了钒基氧化物的层间结构。水合钒酸钙在 10 A g−1 的高电流密度下稳定了 15000 次循环。水合钒酸钠阴极在 0.2 A g−1 时提供 423 mAh g−1 的高比容量，远高于水合钒酸钙。在 10 A g−1 条件下，经过 10000 次循环后，水合钒酸钠的比容量为 223 mAh g−1。水合钒酸钠阴极组装的准固体 ZIBs 在 25°C 下，在 5A g−1 下循环 6000 次后，其比容量保持在 158 mAh g−1。水合钒酸钠阴极在 azib 和准固态 zib 中具有稳定的循环寿命和良好的耐久性。第一性原理计算结果表明，与 CaV6O16·3H2O 相比，Na2V6O16·3H2O 具有更低的 Zn2+扩散能垒，更有利于 Zn2+在层间的快速扩散。这些发现为金属离子插入和结构水引入氧化物生产高质量的 ZIBs 阴极提供了可靠的策略。

参考文献:

1. N. Zhang, X. Chen, M. Yu, Z. Niu, F. Cheng, J. Chen, Materials Chemistry for Rechargeable Zinc-Ion Batteries, Chem. Soc. Rev. 49(13) (2020) 4203-4219.
2. L. Fan, Y. Ru, H. Xue, H. Pang, Q. Xu, Vanadium-Based Materials as Positive Electrode for Aqueous Zinc-Ion Batteries, Advanced Sustainable Systems 4(12) (2020) 2000178.
3. S. Liu, L. Kang, J.M. Kim, Y.T. Chun, J. Zhang, S.C. Jun, Recent Advances in Vanadium-Based Aqueous Rechargeable Zinc-Ion Batteries, Advanced Energy Materials 10(25) (2020) 2000477.

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

基于超组装体系智能界面材料构筑及其分析诊疗应用

孔彪 [1]

[1] 复旦大学，上海，中国， 200438

*Email:bkong@fudan.edu.cn

摘要正文：生命健康是人民最具普遍意义的美好生活需要，随着人民生活水平的逐步提高，疾病的早期诊断领域备受关注。实现重大疾病的早期精准诊断是提高重疾治愈率的关键。生物分子准确、快速检测可用于多种重大疾病的早期诊断和治疗，对化学测量学及生物医学具有重要的科学意义和实际应用价值，其关键核心问题是设计构筑性质稳定、生物相容性良好、灵敏度高、抗干扰性强的材料感知界面。报告人针对精准诊断和医疗发展需求，基于超组装策略设计了一系列智能界面材料，构筑了多种离子通道传感界面器件及平台，基于催化反应实现了多种疾病标记物分子的无标记、高灵敏、高选择性检测。此外，报告人还提出动力学调控界面超组装新方法，开发了系列可移动的中空超组装微纳机器人，实现被动传感与疾病诊疗到主动模式的转变，在微纳米尺寸上对生物分子及外界刺激进行体内智能感知，并针对相关疾病治疗开发了一系列药物递送及癌症诊疗微纳机器人，实现药物的可控释放以及癌症疾病的靶向精准治疗，提高了疾病治疗效率并降低了对健康组织的毒副作用，最终实现目标疾病诊疗一体化。

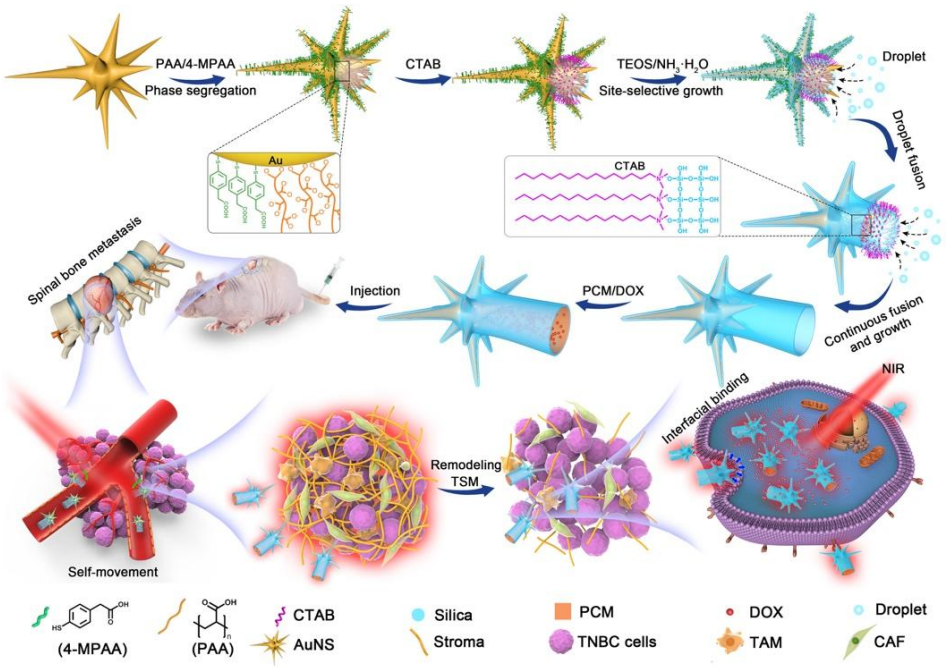


Fig. 1 Design of the superassembled nanorobot for the treatment of TNBCspinal bone metastasis with stiff stroma.

关键词：超组装；智能界面；微纳生物传感器件；微纳机器人

参考文献

[1] M. Yan, Q. Chen, T. Liu, X. Li, P. Pei, L. Zhou, S. Zhou, R. Zhang, K. Liang, J. Dong, X. Wei, J. Wang, O. Terasaki, P. Chen, Z. Gu, L. Jiang, B. Kong, Site-Selective Superassembly of Biomimetic Nanorobots Enabling Deep Penetration into Tumor with Stiff Stroma, *Nature Commun.* 2023, 14(1), 4628.

报告人/墙报展示人简介：

孔彪，国家高层次人才特聘专家，国家重点研发计划首席科学家，上海市高层次特聘专家，复旦大学研究员、博士生导师，绿色化工与功能材料山东省实验室执行主任，复旦大学山东研究院常务副院长，国家工程实验室副主任，国际 Frontiers 系列刊物副主编，Nano Research 期刊青年编委（Young Star Editor）。主要开展超组装软界面智能材料与器件组装及集成工作，面向超组装软界面仿生材料设计及组装、软界面智能传感与探测芯片集成、新型微型化可植入感知器件构建、高端医疗器械开发、新型微型化可植入新能源器件构建的研究和应用开发，致力于为传感检测、软界面电子光电子器件、仿生软界面储能器件等领域提供高效可持续的软界面智能材料及器件。共发表 SCI 期刊论文近 160 余篇，SCI 总引用 13000 余篇次。授权国内外发明专利 40 余项，主编《Functional Mesoporous Carbon-Based Film Devices For Energy Systems》，参编《碳中和关键问题与颠覆性技术》。相关研究成果被《自然》Nature 主刊列为研究热点（highlight）。曾获上海市自然科学一等奖、中国化工学会科学技术奖、侯德榜化工科学技术奖青年奖、上海市优秀发明选拔赛金奖、科技部重点专项优秀青年奖、联合国工发组织科学技术进步奖、国家重点研发计划首席科学家等多项荣誉奖项。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

超微颗粒表面精准调控技术在医药和增材制造领域的应用

张福翁 [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: zfw.ustb@hotmail.com

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 μm。然而，该尺寸范围内的颗粒的高内聚性通常会导致吸入器气雾化不良，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（布地奈德）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。

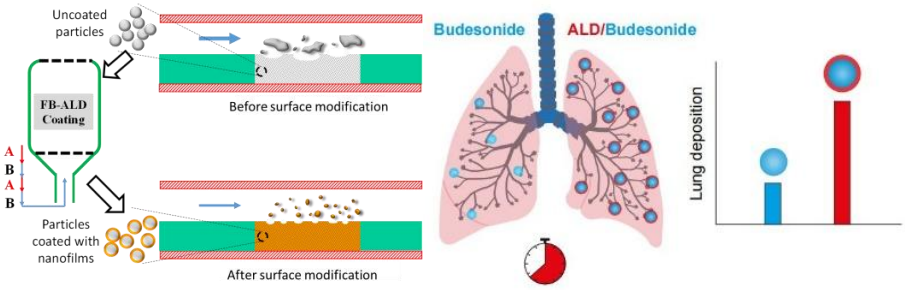


Fig. 1 ALD modifications of drug particles for controlleddrug release and enhanced delivery

关键词：超微颗粒；表面改性；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.

报告人/墙报展示人简介：

张福翁，福建省“百人计划”特聘专家，现任清源创新实验室（中国福建化学工程与科技技术创新实验室）研究员，荷兰代尔夫特理工大学客座研究员，泉州市新华福合成材料有限公司科技副总，福州大学和北京科技大学研究生导师。长期从事粉体工程关键技术和高端反应器设计研究。先后在爱尔兰、英国及荷兰从事科研工作。主持和参与了 973 子课题、欧盟地平线 2020 计划、爱尔兰贸科部、荷兰卫生部、福建省自然科学基金面上等 10 多项科研项目。在 *ACS:Nano*、*Chem. Eng. J.*、*Appl. Phys. Lett.*、*J. Power Sources* 等学术期刊发表 SCI 论文 30 余篇。研究受到 sciencedaily.com、phys.org/news/ 等国际著名科学媒体亮点报道。获中科院能源与可持续发展优秀论文、全国博士后创业创新大赛决赛全国优胜奖、泉州市最美科技工作者等荣誉。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

半导体核壳结构纳米材料的构筑及其气体传感应用

付海涛[1]

[1] 东北大学，冶金学院，沈阳，110819

*Email:fuht@smm.neu.edu.cn

摘要：气体传感器在一些前沿应用如疾病诊断、食品安全、药品毒品安检等逐渐引起了人们的兴趣，这就对气体传感材料提出了更高要求，例如更低的探测极限、室温下的工作温度，更高的响应和选择性等。我们提出开发大比表面积材料增加其活性位，同时基于电子敏化效应利用功函梯度进行复合材料的设计。材料的复合形式一般分为纳米颗粒表面修饰和核壳结构，其区别在于客体材料（另一种过渡金属氧化物）在主体材料表面修饰是否连续。核壳材料在气体传感方面多有报道，表现了优秀的气敏性质。在核壳材料制备方面，我们提出利用客体材料的无定型有机前驱物进行核壳结构制备。有以下优点：1. 其各向同性性质能够实现均匀的包覆；2. 有机前驱物在后续处理时能够形成介孔材料，增加复合材料的比表面积。基于此，我们开发了一系列核壳结构用于高性能气体探测。这些材料包括：Pt/In_2O_3@ZnS 空心纳米球、In_2O_3@MoO_3 空心纳米球、SnO_2@PANI 等。另外，尽可能降低半导体气体传感器的工作温度对传感器寿命及未来无线物联网传感器有重要意义。贵金属纳米颗粒具有优良的催化作用，用其修饰在材料表面能够有效降低表面反应能垒，从而降低工作温度。尤其铂纳米颗粒能够将某些材料的工作温度降低至室温。综上所述，我们主要围绕高性能气体传感的开发进行针对性的设计，并利用自主开发制备核壳结构的方法进行材料制备，这为其未来的前沿性应用打下了理论与技术基础，具有重要的理论与实际意义。

关键词：过渡金属氧化物纳米材料；核壳结构；气体传感；功函梯度

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

Catalytic upcycling of waste plastics into CNTs-based composites for high-performance microwave absorption

Qi Cao[1,2], Jixing Bai[1], Huiyan Zhang[1,*], Renchao Che[2,*]

[1]School of Energy and Environment, Southeast University, Nanjing 210096, China

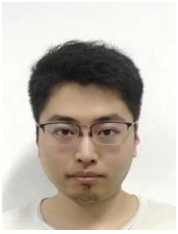
[2]Laboratory of Advanced Materials, Fudan University, Shanghai 200438, China

*hyzhang@seu.edu.cn (Huiyan Zhang); rcche@fudan.edu.cn (Renchao Che)

The increasing amount of discarded waste plastics causes significant environmental problems. Conventional mechanical and energy recovery methodology for waste plastics treatment is inadequate due to the complex components within plastic waste, necessitating the development of a sustainable and green upgrading pathway to achieve more value-added products. This work proposes an innovative approach for production of high-quality carbon nanotubes (CNTs) using discarded waste polypropylene as a low-cost carbon source with a series of Fe/Co/Ni-loaded oxide support catalysts. The as-obtained CNTs, together with the retained magnetic metal–metal oxide catalysts, turn out to be intrinsically ternary composite microwave absorption materials with rich loss mechanisms. Particularly, the optimal ternary composite microwave absorbent achieves a strong reflection loss of –63.1 dB and an absorption bandwidth of 6.2 GHz at a thin thickness of 1.82 mm. Overall, this work demonstrates a cost-effective, scalable and sustainable carbon-negative pathway for upcycling waste plastics into highly value-added and high-performance microwave absorbent products.

Keywords: carbon nanotubes (CNTs); waste plastics upcycling; dielectric–magnetic synergy; microwave absorption

报告人/墙报展示人简介：



曹祺，中共党员，东南大学长聘副教授，博士生导师。2018 年 9 月博士毕业于日本东京大学，2019 年 9 月入职东南大学。长期从事生物质与有机固废衍生的碳基功能材料（吸波、催化等）方面的研究，近三年主持国家自然科学基金、江苏省自然科学基金、国家重点研发计划项目子课题、江苏省“碳达峰·碳中和”科技创新专项资金-农业农村领域重大关键技术攻关项目课题、GF 科技工业创新中心基金、GF 科技国家级重点实验室基金、航空工业集团-航空科学基金、全国重点实验室开放课题、科技部“一带一路”联合实验室开放课题、美的集团技术开发项目等各级纵/横向项目/课题 11 项；入选 *Journal of Advanced Dielectrics*（《先进电介质学报》）、*cMat*（《铜新材》）等期刊首届青年编委；在材料、GF、能源、环境等交叉学科领域的重要期刊如 *Advanced Materials*、*Chemical Society Reviews*、*Nature Communications* 等上发表 SCI 论文 60 余篇，出版专著章节 1 章，累计他引 4800 余次（*h* 因子：32），第一作者论文单篇最高他引>1600 次。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

锂硫电池电极/电解质界面的调控机制研究

严敏*，王晨阳，黄睿，张彩芸，邓惠玲，李婧怡

武汉工程大学，材料科学与工程学院，武汉，430205

*Email: yanmin@wit.edu.cn

摘要：锂硫电池因超高的理论比容量（1675 mAh g−1）和能量密度（2600 Wh kg−1），以及丰富、廉价、环保的硫矿产资源，被认为是“后锂离子电池时代”中最具发展潜力的二次电池体系之一[1,2]。然而，锂硫电池的实际应用仍然面临着诸多限制，其中，最为突出的是电池内部电极/电解质界面的不稳定性问题。具体而言，充放电终产物（S8/Li2S）的低导电率和巨大密度差异、多硫化物的“穿梭效应”、高度易燃的有机电解液、锂金属负极表面锂枝晶和不稳定固态电解质界面的生成，使得稳定的电化学反应界面难以形成[3-6]，并最终导致锂硫电池容量和循环寿命衰减快、安全性差，严重阻碍了其规模化应用与推广。

为解决上述问题，本团队针对锂硫电池的不同界面制定了优化方案。例如，对硫正极进行设计改性（图 1a），在提高正极机械强度的同时，实现对多硫化物有效限域和连续的吸附-催化-转化，避免循环过程中正极结构坍塌和活性物质流失，从而有效增强正极/电解质界面的稳定性[7,10,11]。针对负极/电解质界面的不稳定问题，在锂负极表面原位构建了一种混合电子/离子导体层（图 1b），以此抑制锂负极表面副反应和锂枝晶的产生，均匀界面 Li+/e-的分布，避免负极/电解质的界面退化[8,9]。此外，为提升电池在高温条件下的界面稳定性，开发了一种高交联密度、丰富极性基团的阻燃型粘结剂（图 1c），使其在保证粘结性能的前提下，既能调节多硫化物的穿梭行为，也能阻断电解液自由基链式放热反应，避免热失控，进而保证锂硫电池的安全性能[12]。因此，深入研究锂硫电池电极/电解质界面的调控机制和界面稳定策略，不仅为锂硫电池的界面物理化学特性、电化学反应机理分析提供更全面的科学研究基础，还能为锂硫电池带来较大的性能提升，对于推动锂硫电池的实际应用至关重要。

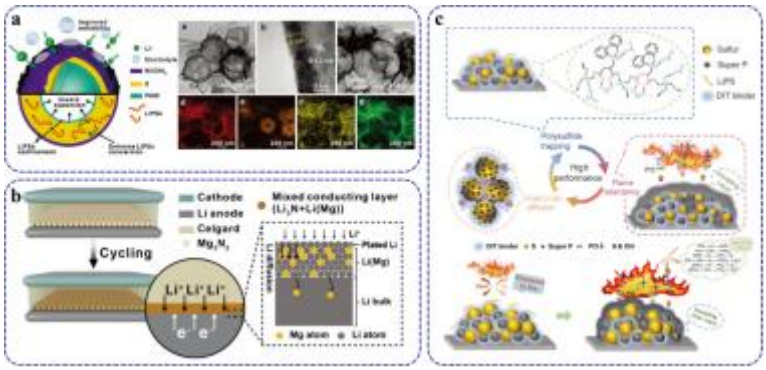


Fig. 1（a）Schematic structure of α-$Ni(OH)_2$ nanosheets-sulfur-polyaniline and mechanism of action on polysulfides [6]. （b）Schematic construction of in situ hybrid electron/ion conductor layer [9].（c）Schematic diagram of multifunctional flame retardant binder [12].

关键词：锂硫电池、电极/电解质界面、穿梭效应、调控机制、安全性

参考文献

[1] Yan M, Zhang Y, Li Y, et al. Manganese dioxide nanosheets functionalizing sulfur@pedot core-shell nanospheres for advanced lithium-sulfur batteries. J. Mater. Chem. A. 2016; 24:9403.

[2] Yan M, Chen H, Yu Y, et al. 3D ferroconcrete-like aminated carbon nanotubes network anchoring sulfur for advanced lithium–sulfur battery. Adv. Energy Mater. 2018;8:1801066.

[3] Yu Y, Yan M, Dong W D, et al. Optimizing inner voids in yolk-shell TiO_2 nanostructure for high-performance and ultralong-life lithium-sulfur batteries. Chem. Eng. J. 2021;417:129241.

[4] Tian Y W, Yu Y, Wu L, et al. Bioinspired urchin-like murray carbon nanostructure with protection shell for advanced lithium-sulfur batteries. J. Energy Chem. 2023;85:1-10.

[5] Tian Y W, Zhang Y J, Wu L, et al. Bifunctional separator with ultra-light weight MnO_2 coating for highly stable lithium-sulfur batteries ACS Appl. Mater. & Inter. 2023;15:6877-6887.

[6] Yan M, Wang Z-Y, Yu G-W, et al. Adsorption-catalysis-conversion of polysulfides in sandwiched ultrathin $Ni(OH)_2$-PANI for stable lithium-sulfur batteries. Small. 2022;18:2201822.

[7] Yu G W, Wang C Y, Dong W, et al. Anion-doped polypyrrole three-dimensional framework enables adsorption and conversion in lithium-sulfur batteries. J. Colloid Interf. Sci. 2024;654:201-211.

[8] Yan M, Liang J-Y, Zuo T-T, et al. Stabilizing polymer–lithium interface in a rechargeable solid battery. Adv. Funct. Mater. 2019;30:1908047.

[9] Yan M, Wang C Y, Fan M, et al. In situ derived mixed ion/electron conducting layer on top of a functional separator for high-performance, dendrite-free rechargeable lithium-metal batteries. Adv. Funct. Mater. 2023;34:2301638.

[10] Yan M, Dong W, Liu F, et al. Unprecedented strong and reversible atomic orbital hybridization enables a highly stable Li-S battery. Natl. Sci .Rev. 2022;9:nwac078.

[11] Yan M, Huang R, Wang Z Y, et al. A polysulfide-repulsive, in situ solidified cathode−electrolyte interface for high-performance lithium-sulfur batteries. J. Mater. Chem. A. 2016;4:9403.

[12] Yu G, Ye G, Wang C, et al. A flame-retardant binder with high polysulfide affinity for safe and stable lithium-sulfur batteries. Sci. China. Chem. 2023;67:1028-1036.

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

多尺度增强相对熔丝沉积钛合金力学性能及强化机理研究

陶学伟[1,2*]，石正军[3]，朱帅帅[1,2]，姚正军[3],张烽[4]，张保森[1,2]

1.南京工程学院材料科学与工程学院，江苏南京 211167

2. 江苏省先进结构材料与应用技术重点实验室，江苏南京 211167

3. 南京航空航天大学材料科学与技术学院，江苏南京210016

4.南京工程学院机械工程学院，江苏南京 211167

tao_xuewei@126.com

摘要：熔丝沉积技术在制造大型复杂航空航天结构件展现出广阔的应用前景。本文利用合金化与工艺参数调控采用实现沉积钛合金内部增强相多级结构原位构筑，系统研究了工艺参量对增强相形成的影响规律，揭示了多级结构的调控机理，澄清了其强韧化机制。研究结果表明，添加Cu元素可以拓宽固/液界面前沿产生较大的成分过冷区，消除沉积过程中高的温度梯度引起的负面影响，不仅抑制初生β晶粒柱状生长而且促使晶粒细化，使得微米级TiB增强相趋于网状分布，并促进其尺寸发生细化。此外，Cu元素有利于细化α相，并促使更多α相变体形成，使得沉积钛合金织构强度明显减弱。研究发现Ti_2Cu析出相形态对力学性能具有重要影响，片层状Ti_2Cu与TiB增强相均能够发挥承载强化作用，颗粒状Ti_2Cu能够阻碍位错运动，起析出强化的作用。此外，晶内弥散分布的超细纳米Ti_2Cu能够有效钉扎位错，提高强度并保持良好的塑性。通过工艺优化调控多级增强相结构有利于获得沉积钛合金的强塑性匹配，降低力学性能各向异性。

关键词：熔丝沉积；钛合金；多级结构；强化机理

通讯地址：南京市江宁区弘景大道1号，通讯作者邮箱：tao_xuewei@126.com

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

Performance and mechanism of tetracycline removal byperoxymonosulfate-assisted double Z-scheme $LaFeO_3$/g-C_3N_4/ZnOheterojunction under visible light drive

Jie Wang[a,b], YuyiShangguan[c], Guanyi Yang[d], ChaoyangChen[d], Jiahua Zhang[a,b], Guofeng Cheng[a,b], XingguoLiu[a, b]*

[a] Fishery Machinery and Instrument Research Institute of Chinese Academy of Fishery Sciences, 63 Chifeng Road, Shanghai, 200092, China

[b] Key Laboratory of aquaculture facilities engineering, Ministry of agriculture and rural affairs, 63 Chifeng Road, Shanghai, 200092, China

[c] Shanghai Key Lab for Urban Ecological Processes and Eco-Restoration, East China Normal University, 500 Dongchuan Road, Shanghai, 200241, China

[d] School of Environment and Architecture, University of Shanghai for Science and Technology, 516 Jungong Road, Shanghai, 200093, China

*Corresponding author:Tel:+8621 55128360 Fax:+86 21 65977260

E-mail: liuxingguoyjs@163.com

***Keywords*:** Perovskite; persulfate activation technology; photocatalytic; antibiotic degradation

Abstract

The photocatalytic persulfate activation technology has attracted attention due to the synergistic effect that can be generated by the coupling of photocatalysis and persulfate. In this study, a ternary heterostructure $LaFeO_3$/g-C_3N_4/ZnO was successfully formed by hydrothermal method, and a coupled photocatalytic/PMS system was constructed. The coupled system exhibited synergistic effect and achieved high tetracycline removal efficiency and quick kinetic, as 85.89% tetracycline was degraded within 40 min. Additionally, thecoupled system has a wider pH adaptation range and can better resist the influence of coexisting ions (Cl^-, CO_3^{2-}) and humic acid. Mechanism investigation indicated that the double-Z scheme heterojunction between $LaFeO_3$, g-$C_3N_4$and ZnO provides driving force for charge transfer and improves the separation of photogenerated electron-hole pairs, and PMS can act as an electron acceptor to prevent photogenerated electron hole recombination.$\bullet SO_4^-$, •OH, $\bullet O_2^-$, h^+, and $^1O_2$ work together in photocatalysis/PMS coupled system, with •OH and $\bullet SO_4^-$ play a major role. Compared to the solo photocatalytic system, the toxicity of tetracycline degradation intermediate products is lower and the mineralization degree of tetracycline is higher in the coupled system. Besides, $LaFeO_3$/g-C_3N_4/ZnO also exhibiting superior photocatalytic performance after four cycles. This work provides a new strategy for preparing heterostructured perovskite composite photocatalysts, and provide reference for photocatalytic persulfate activation technology to degrade tetracycline in water environment.

References

[1] N. Chandel, V. Ahuja, R. Gurav, V. Kumar, V.K. Tyagi, A. Pugazhendhi, G. Kumar, D. Kumar, Y.H. Yang, S.K. Bhatia, Progress in microalgal mediated bioremediation systems for the removal of antibiotics and pharmaceuticals from wastewater, Sci. Total Environ. 825 (2022) 153895, https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.153895.

[2] J.J. Ma, N. Ding, H. Liu, Research progress in photocatalytic activated persulfate degradation of antibiotics by bismuth-based photocatalysts, Sep. Purif. Technol. 324 (2023), 124628, https://doi.org/10.1016/j.seppur.2023.124628.

[3]P.N.T. Ho, T.B. Nguyen, C.P. Huang, R.A. Doong, C.W. Chen, C.D. Dong, In-situ immobilization of Ag/AgCl on sulfurized g-C_3N_4 nanosheet for enhancing visible-light driven photocatalysis toward simultaneous oxidation of tetracycline and reduction of Cr(VI) in water, J. Environ. Chem. Eng. 11 (2023) 109453,https://doi.org/10.1016/j.jece.2023.109453.

报告人/墙报展示人简介：

王婕，副研究员，中国水产科学研究院渔业机械仪器研究所

2016 年毕业于同济大学环境工程系，2017 至 2020 年于华东师范大学生态与环境学院从事博士后研究工作。

2020 年至今任职于中国水产科学研究院渔业机械仪器研究所，主要从事水产养殖环境调控的应用基础研究，主持国家重点研发计划子任务、上海市自然科学基金、上海市“扬帆计划”等 5 项，作为主要负责人参与国家自然科学基金、农业部现代农业产业技术体系、上海市科技兴农、海南省重点研发计划等 6 项。在《Nano Energy》（中科院一区，IF=19，TOP 期刊，纳米能源领域顶级刊物）、《Water Research》（中科院一区，IF=13，TOP 期刊，环境领域顶级刊物）、《Chemical Engineering Journal》（中科院一区，IF=17，TOP 期刊，工程技术与化学化工领域顶级刊物）、《*Journal of Hazardous Materials*》（中科院一区，IF=14，TOP 期刊，环境危险材料领域顶级刊物）、《Reviews in Aquaculture》（中科院一区，IF=10，TOP 期刊，水产领域顶级刊物）、《Applied Energy》（中科院一区，IF=11，TOP 期刊，能源领域顶级刊物）、《Waste Management》（中科院一区，IF=9，TOP 期刊，环境领域顶级刊物）、《Journal of Power Sources》（中科院一区，IF=9，TOP 期刊，能源类顶级刊物）等期刊上发表 SCI 论文 30 余篇（其中，第一/通讯作者 12 篇）；申请发明专利 12 项（授权 8 项），申请实用新型专利 6 项（授权 5 项）。作为主要参与人研发的团队成果“池塘养殖水质调控与尾水生态治理技术”入选 2020 年中国农学会“中国农业农村十大新技术”和 2021 年“中国农业农村部主推技术”并荣获“2021 年中国产学研合作创新与促进奖”，个人获得上海市科委“青年科技英才”（省部级），中国水产科学研究院“拔尖人才”等。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

High efficiency and selective separation of oily wastewater based on superamphiphilic biomass aerogel: Characteristics, mechanisms and application

Yuxin Wang, Qifan Yu, Hanyu Zhang, Yifei Li, Bingjie Wang*
East China University of Science and Technology, Shanghai, 200237
*bjwang@ecust.edu.cn

Abstract: The design and development of multifunctional materials to meet the sophisticated requirements of oily wastewater treatment is an urgent need and remains a great challenge. Herein, a superamphiphilic bio-aerogel (PTGA) with honeycomb-like porous structure was synthesized. The directional and reversible control of interfacial wettability can be achieved by simple pre-wetting process and solvent replacement method. Combined with the advantages of structure and wettability, PTGA was proved to be ideal for high-efficient oil-water mixture separation (J> 1500 L/m^2·h, η> 99.8%), oils absorption (C_{abs} = 17-26 g/g) and dye selective removal (MB: 45.876 mg/g). Furthermore, based on the newly developed dynamic separation device and excellent mechanical property of PTGA, enhanced separation of oil-water mixture (J = 3007 L/m^2·h) and synergistic removal of co-existing pollutants (MB: 51.274 mg/g) were realized. Mechanism results indicated that the transition of interfacial wetting properties of PTGA was a multi-stage process, while oil/water separation and dye adsorption were two independent processes. Benefit from facile synthesis and unparalleled characteristics, the designed PTGA promise to be reliable and competitive candidates in wastewater remediation.

Keywords: Oily wastewater treatment; Multifunctional bio-aerogel; Adjustable superwettability; Oil-water mixture separation; Dyes synergistic removal

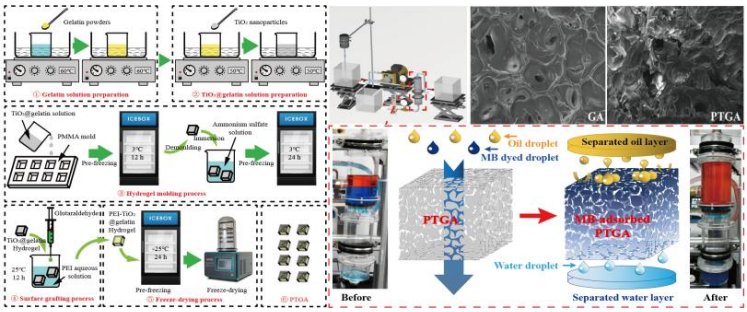


Fig. 1 The schematic diagram of PTGA synthesis process and the layered oil-water mixture separation and MB synergistic removal mechanism

References
[51]C.H. Peterson,*et al*. Long-term ecosystem response to the exxon valdez oil spill, *Science*,2023, 302, 2082-2086.
[52]J. Chen, *et al*. Oil spills from global tankers:status review and future governance, *J. Clean. Prod.* 2019, 227, 20-32.

报告人/墙报展示人简介：

王玉鑫　联系方式：wang_yuxin2023@163.com
华东理工大学 机械与动力工程学院，硕士研究生
研究方向：微界面强化分离技术及装备的开发和应用研究
科研成果：发表 SCI 论文 1 篇（一区），申请发明专利 3 件

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

The methodology and mechanism of deep targeted treatment of heavy metal effluent enhanced by hierarchical porous microspheres in swirling flow field

Yifei Li, Hanyu Zhang, Qifan Yu, Yuxin Wang, Bingjie Wang*

East China University of Science and Technology, Shanghai, 200237

*bjwang@ecust.edu.cn

Abstract: Heavy metal wastewater pollution is one of the most serious environmental issues, threatening biological health and water ecological balance. Although the current adsorption treatment method using fixed bed reactor is simple and effective, the treatment process is only the transfer and concentration of pollutants.In addition, The interface occlusion and secondary pollution caused by adsorbent accumulation and local turbulence oscillations in the bed will reduce the adsorption performance. Thus, in this study, the methodology and mechanism of deep targeted treatment of heavy metal effluent enhanced by hierarchical porous microspheres in swirling flow field was studied. Based on the density functional principle, the optimum trimonomer coordination between cobalt ion and carboxymethyl chitosan monomer was obtained. A novel hierarchical porous carboxymethyl chitosan microspheres (HPCMCS) with targeted adsorption performance were developed by using two-step cross-linking method and ion imprinting technology. The saturated adsorbance of cobalt ions reached 56 mg/g. The model fitting results showed that the adsorption process was an exothermic adsorption process under the synergistic action of electrostatic attraction and chemisorption. Finally, by means of the spatial rearrangement of pollutants and the self-rotating behavior regulation of microspheres in the swirling flow field, targeted removal of heavy metal ions and efficient separation of microspheres were realized simultaneously.The residual concentration of cobalt ion by the usage of as-prepared microspheresenhanced by swirling flow field wasreduced to 9.14 mg/L, which is lower than that in thebatch static adsorption experiment(29.77 mg/L). The above research results can provide theoretical and technical support for the depth control of heavy metal pollution.

Keywords: Heavy metal removal; hierarchical porous microspheres; swirling flow field enhancement; Targeted adsorptive separation

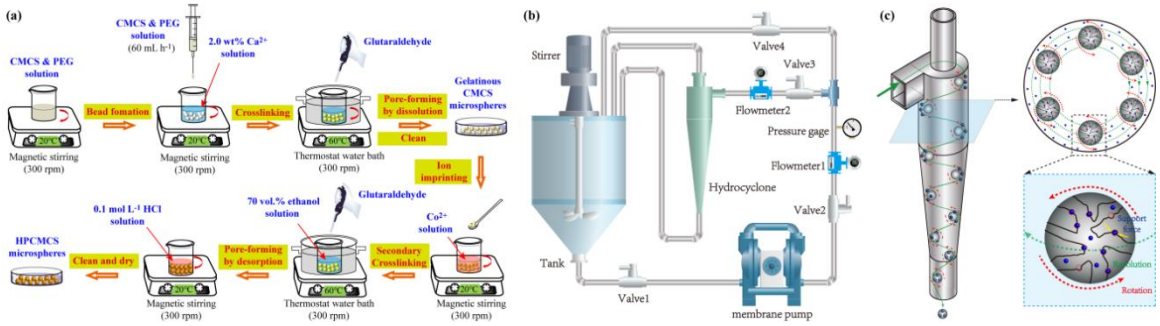


Fig. 1 Schematic diagram of HPCMCS synthesis and heavy metal wastewater enhanced treatment

References

[53]Wang B J, *et al*. Selective heavy metal removal and water purification by microfluidically-generated chitosan microspheres: Characteristics, modeling and application. *Journal of Hazardous materials*. 2019, 364: 192-205.

[54]汪华林. 液固旋流分离新技术. 北京：化学工业出版社. 2019.

报告人/墙报展示人简介：

李羿霏　联系方式：liyifei0710@163.com

华东理工大学 机械与动力工程学院，硕士研究生

研究方向：限域空间旋流场强化污染物靶向分离技术研究

科研成果：申请发明专利 2 件

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

Facile fabrication of bubble-propelled nanomotors of metal organic frameworks for efficient water remediation

Qi Wang[1], Yang Ren[1], Yan-Xu Chen[2], Maojie Zhang[1,*], Wei Wang[2]

[1]CollegeofEngineering,SichuanNormalUniversity,Chengdu, Sichuan Province,610101

[2]SchoolofChemicalEngineering,SichuanUniversity,Chengdu, Sichuan Province,610065

*Email: zhangmaojie@sicnu.edu.cn

Metal organic frameworks (MOF) are power for use in water remediation, but the fabrication strategy of MOF nanomotors are usually troublesome. Here we report on a facile strategy to create bubble-propelled ZIF-8-based nanomotors based on dopamine chemistry.These ZIF-8 nanomotors contain Ag nanoparticles decorated on their polydopamine coating and Fe_3O_4 nanoparticles embedded in their porous matrix. Due to the high surface area and porosity of ZIF-8 and negatively-charged polydopamine coating, the ZIF-8 nanomotors exhibit excellent adsorption capacity for cationic dye methylene blue in water. The Ag nanoparticles decorated on the nanomotors can degrade H_2O_2 into O_2 bubbles to achieve a bubble-propelled motionwith a velocity of6510 μm/s.Meanwhile, in the H_2O_2-containing media, the nanomotors with Fe_3O_4 nanoparticles can achieve catalytic degradation of organic pollutants via Fenton reaction. Based on these features, the Fe_3O_4@ZIF-8/Ag nanomotors can achieve a degradation efficiency of 99.73 % at *t*=60 min for removal of methylene blue. Moreover, these Fe_3O_4@ZIF-8/Ag nanomotors can be easily recovered under magnetic guide. This study provides an effective strategy for creating MOF-based nanomotors for advance water remediation.

Keywords: Nanomotors.Metal-organic frameworks.Synergistic degradation.Water remediation.

References

[1] M. Guix, S. M. Weiz, O. G. Schmidt, M. Medina-Sanchez, Self-Propelled Micro/Nanoparticle Motors, Particle & Particle Systems Characterization, 2018, 35, 1-31.

[2] H. Ghorbani, M. Ghahramaninezhad, M. N. Shahrak, The effect of organic and ionic liquid solvents on structure crystallinity and crystallite size of ZIF-8 for CO_2 uptake, Journal of Solid State Chemistry, 2020, 289, 1-8.

[3] D. Pan, S. S. Ge, J. Y. Tian, Q. Shao, L. Guo, H. Liu, S. D. Wu, T. Ding, Z. H. Guo,Research Progress in the Field of Adsorption and Catalytic Degradation of Sewage by Hydrotalcite-Derived Materials, Chemical Record, 2020, 20, 355-369.

[4] J. Dai, X. Xiao, S. X. Duan, J. Liu, J. He, J. D. Lei, L. Y. Wang, Synthesis of novel microporous nanocomposites of ZIF-8 on multiwalled carbon nanotubes for adsorptive removing benzoic acid from water, Chemical Engineering Journal, 2018, 331, 64-74.

[5] A. I. Zarate-Guzman, L. V. Gonzalez-Gutierrez, L. A. Godinez, A. Medel-Reyes, F. Carrasco-Marin, L. A. Romero-Cano, Towards understanding of heterogeneous Fenton reaction using carbon-Fe catalysts coupled to in-situ H_2O_2 electro-generation as clean technology for wastewater treatment, Chemosphere, 2019, 224, 698-706.

墙报展示人简介：

王淇，四川师范大学工学院资源与环境专业的硕士研究生

研究方向为微化工技术与功能材料

附：墙报展示人为学生

多相流微分散乳液体系构建及微颗粒可控制备

张抒遥[1]，王淇[1]，杨虹宇[1]，何佳慧[1]，张茂洁[1*]，汪伟[2]

[1]四川师范大学 工学院，四川 成都 610101

[2]四川大学 化学工程学院，四川 成都 610065

[*]Email: zhangmaojie@sicnu.edu.cn

摘要：多相流微分散乳液体系可以作为制备颗粒的模板，以及多相反应、物质封装和药物控释的载体，因而在化工、化学、医学、材料等领域具有重要用途。该体系通常可通过搅拌、超声等方法来制备，但由于这些方法是在同一时间生产大量的液滴，因而对每个液滴的生成情况难以精确控制，导致所产生的液滴均一性差，液滴的尺寸和结构难以精确控制。本文开发了一种新型微流控乳化方法用以构建多相流微分散乳液体系，该方法设计的微通道装置具有结构简单、设计灵活、易于处理等特点，能够可控制备单分散性良好的单乳液滴及双重乳液液滴。该方法中连续相在容器中保持静止，分散相由于与壁面间隙处产生的毛细作用变窄而形成乳液液滴，实验探究了间隙距离、流体流量、流体粘度、微通道内径等条件对乳液液滴尺寸的影响规律，所制备的单乳乳液尺寸范围约为 50-1000 μm。实验得出：液滴尺寸与间隙距离、流体流量、微通道内径、流体粘度均具有一定的相关性，由此，可通过调节具体参数，实现乳液的便捷可控制备，从而得到尺寸可控的乳液液滴，再以乳液液滴为模板，通过紫外光照聚合，制备得到单分散性良好且尺寸可控的聚合物微颗粒。制备过程中，微颗粒孔结构可通过加入不同含量的表面活性剂 PGPR 来进行调控，随着 PGPR 含量增大，过量的 PGPR 形成反胶束从而制孔，使得聚合物微颗粒的孔增多，从而得到不同孔结构的聚合物微颗粒。本文开发了一种能够可控构建多相微分散乳液体系的便捷微流控方法，这对进一步促进微流控技术和多相微分散乳液体系的应用具有重要意义。

关键词：微分散乳液体系；微通道装置；液滴模板；聚合物微颗粒

参考文献

[1] L.P. Mei, M. L. Jin, S. T. Xie, Z. B. Yan, X. Wang, G. F. Zhou, A. V. D. Berg, L. L. Shui, A simple capillary-based open microfluidic device for size on-demand high-throughput droplet/bubble/microcapsule generation, Lab on a Chip,2018, 18,2806.

[2] L. Sheng, L. Ma, Y. C. Chen, J. Deng, G. S. Luo,A comprehensive study of droplet formation in a capillary embedded step T-junction: From squeezing to jetting, Chemical Engineering Journal, 2022, 427, 132067.

[3] X. J. Ge, B. Y. Rubinstein, Y. F. He, F. N. O. Bruce, L. N. Li, A. M. Leshansky, Z. Z. Li, Double emulsions with ultrathin shell by microfluidic step-emulsification, Lab on a Chip, 2021, 21, 1613.

[4] Y. X. Liu, Y. Cheng,C. Zhao, H. Wang, Y. J. Zhao, Nanomotor-derived porous biomedical particles from droplet microfluidics, Advanced Science, 2021, 9, 2104272.

[5] C. Chen, Q. W. Cai, C. Z. Zhan, B. C. Wang, P. F. Li, R. Xie, X. J. Ju, Z. Liu, W. Wang, L.Y. Chu, Controllable fabrication of highly uniform sub-10 nm nanoparticles from spontaneous confined nanoemulsification, Small, 2023, 19, 2300801.

墙报展示人简介：

张抒遥，四川师范大学工学院硕士研究生
研究方向为微化工技术与功能材料。

附：墙报展示人为学生

Preparation of self-driven Zr-MOF@PAM micromotor with synergized adsorption-degradationfor water remediation

Jiahui He[1]， Qi Wang[1], Shuyao Zhang[1], Hongyu Yang[1], Maojie Zhang[1]*, Wei Wang[2]

[1] CollegeofEngineering,SichuanNormalUniversity,Chengdu, Sichuan Province,610101

[2]SchoolofChemicalEngineering,SichuanUniversity,Chengdu, Sichuan Province，610065

*E-mail：zhangmaojie@sicnu.edu.cn.

Abastract: Organic dyes and organic phosphorus pollutants pose increasing threats to water ecological systems and global sustainability. Rational development of self-drivenmicromotor with adsorption-degradationsynergy is envisioned as a powerful route for enhanced water remediation. Here, Functional micromotorwith self-driving and coordinated catalytic degradation is developedfor effective water remediation.Based on acrylamide (PAM) hydrogel and combined with Zirconium basedmetal-organic framework material (Zr-MOF), a self-driven Zr-MOF@PAM micromotor is prepared by dopamine silver plating technology and microfluidic technology.The micromotor not only has good sphericity and monodispersity, but also can react with H_2O_2 like Fenton-like to produce hydroxyl radicals.As demonstrated by removal ofanionic and cationic dyes methylene blue (MB), congo red (CR), malachite green (MG), methyl orange (MO) and organophosphorus pesticide methyl parathion (MP) in water.The Ag nanoparticles in the Zr-MOF@PAM micromotors can react with$H_2O_2$to form O_2, and the recoil of the liquid when the O_2 bubble bursts makes the microparticles move in the solution and improve the adsorption and degradation effect, and these micromotors show much higher performances with fast adsorption and high capacity,the degradation efficiency various dyes can reach 99% at 30 min. At 120 min, the degradation of methyl parathion by these micromotors is as high as 670 μg/g.This work provides a simple and flexible route for rational fabrication of Zr-MOF@PAM micromotorwith adsorption-degradation synergy, and thus may open up new horizons for developing advanced functional micromotor for effective water remediation.

Keywords: Metal-organic frameworks; Hydrogels;Adsorption-degradation;Organic dyes; Organophosphorus pesticides

References

[1] AhmadijokaniF, MolaviH , et al.Waste organic dye removal using MOF-based electrospun nanofibers of high amine density[J]. Chemical Engineering Journal,2023,446: 143119-143129.

[2] SochaB; PatankarB,et al.Efficient green one-pot MOF synthesis for ultra-fast wastewater treatment and industrial catalytic bag[J]. Chemical Engineering Journal,2024,493:152566-152576.

[3] GaoP, Hussain M Z,Zhou Z, et al. Zr-based metalloporphyrin MOF probe for electrochemical detection of parathion-methyl [J]. Biosensors Bioelectronics, 2024, 261: 116515-116526.

[4] Mehta J, Dhaka S, Bhardwaj N, et al. Application of an enzyme encapsulated metal-organic framework composite for convenient sensing and degradation of methyl parathion [J]. Sensors and Actuators B-Chemical, 2019, 290: 267-74.

[5] Mehta J, Dhaka S, Paul A K, et al. Organophosphate hydrolase conjugated UiO-66-NH_2 MOF based highly sensitive optical detection of methyl parathion [J]. Environmental Research, 2019, 174: 46-53.

墙报展示人简介：

何佳慧，四川师范大学工学院硕士研究生
研究方向为微化工技术与功能材料

附：墙报展示人为学生

第 33 分会场：同步辐射等先进技术及其在微纳界面结构与功能表征方面的应用

报告人姓名：李爱国
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：liag@sari.ac.cn

同步辐射先进实验方法及其应用

李爱国 研究员
中国科学院上海高等研究院

报告人/墙报展示人简介：

李爱国研究员，博士生导师，上海光源中心线站总工程师。参加上海光源、上海光源线站工程国家重大基础设施建设，先后担任上海光源微聚焦及应用线站负责人、上海光源线站工程成像分总体负责人和后续线站总工程师。长期从事同步辐射硬 X 射线微探针实验技术发展，带领团队完成上海光源微聚焦实验站建设工作将国内硬 X 射线探针水平提升到 1 微米，研制成功国内首个 100nm 级波带片聚焦纳米探针，研制成功国内首台高稳定柔性铰链动态压弯 200nm K-B 镜聚焦系统，研制成功国内首台硬 X 射线多层膜纳米探针实现优于 30nm 聚焦。并长期从事同步辐射应用研究工作，先后承担上海市、基金委、科技部重点研发计划等项目，入选上海领军人才，发表论文 100 余篇。

报告人姓名：江怀东
工作单位：上海科技大学物质科学与技术学院
是否为学生：否
联系邮箱：jianghd@shanghaitech.edu.cn

先进X射线光源及其新技术带来的机遇与挑战

江怀东*

上海科技大学物质科学与技术学院，上海，201210

*Email: jianghd@shanghaitech.edu.cn

摘要正文：近年来，随着高性能的同步辐射光源以及具有超高亮度、超短脉冲的X射线自由电子激光（XFEL）的出现，为开展超微结构探索与超快时间研究等重大科学问题带来新的机遇。这些先进X射线光源及其新技术的应用将帮助我们进一步理解光与物质的相互作用，探索物理、化学和材料科学中一些纷繁复杂现象背后的本质。目前，为推动多领域实验科学的发展，我国已开展了新型衍射极限同步辐射装置以及新一代相干X射线光源的建设。在此我将主要介绍同步辐射、上海软X射线自由电子激光装置以及正在建设中的高重频硬X射线自由电子激光装置，这些光子大科学装置将为科学家在材料科学、物理、化学等领域研究中提供高分辨成像、超快过程探索、结构与功能表征等多种具有前瞻性的尖端研究手段，形成独具特色、多学科交叉的先进科学研究平台。与此同时，这些大科学装置在科学技术、工程设备、大数据收集与处理等方面也面临着巨大的挑战。

关键词：同步辐射；X射线自由电子激光；高分辨成像；定量分析

参考文献

[1] H. Jiang, R. Xu, C. Chen, et al., Three-dimensional coherent X-ray diffraction imaging of molten iron in mantle olivine at nanoscale resolution. *Phys. Rev. Lett.* 2013, 110: 205501.

[2] Z. B. Sun, J. D. Fan, H. Y. Li, H. D. Jiang, Current Status of Single Particle Imaging with X-ray Lasers. *Applied Sciences* 2018, 8, 132.

Opportunities and Challenges for Applications of Advanced X-ray Sources and Their New Technologies

Huaidong Jiang

School of Physical Science and Technology, ShanghaiTech University, Shanghai 201210, China

*Email: jianghd@shanghaitech.edu.cn

In recent years, with the emergence of high-performance synchrotron radiation sources and X-ray free-electron lasers (XFELs) with ultra-high brightness and ultra-short pulses, new opportunities have arisen to address major scientific questions, such as the exploration of ultrafine structures and ultrafast temporal studies. The application of these advanced X-ray sources and their new technologies will further our understanding of the interaction between light and matter and allow us to explore the underlying principles behind complex phenomena in physics, chemistry, and materials science. Currently, to promote the development of experimental science in multiple fields, China has initiated the construction of new-generation diffraction-limited synchrotron radiation facilities and coherent X-ray sources. Here, I will primarily introduce the synchrotron radiation source, Shanghai Soft X-ray Free Electron Laser facility, and the

high-repetition-rate hard X-ray Free Electron Laser facility under construction. These large-scale scientific facilities will provide cutting-edge research tools with forward-looking capabilities, such as high-resolution imaging, exploration of ultrafast processes, and structural and functional characterization, enabling scientists to conduct advanced research across multiple disciplines, including materials science, physics, and chemistry. At the same time, these large scientific facilities also face significant challenges such as science and technology, engineering equipment, and big data collection and processing.

Keywords：synchrotron radiation; X-ray free-electron laser; high-resolution imaging; quantitative analysis

References

[55]H. Jiang, R. Xu, C. Chen, et al., Three-dimensional coherent X-ray diffraction imaging of molten iron in mantle olivine at nanoscale resolution. Phys. Rev. Lett. 2013, 110: 205501.

[56]Z. B. Sun, J. D. Fan, H. Y. Li, H. D. Jiang, Current Status of Single Particle Imaging with X-ray Lasers**.** *Applied Sciences* 2018**,** 8, 132**.**

报告人/墙报展示人简介：

江怀东，上海科技大学大科学中心及物质科学与技术学院教授。长期从事基于同步辐射和 X 射线自由电子激光的成像研究，尤其是三维定量成像和高分辨相干衍射成像方法，及其在材料科学、物理学和生物学中的应用。在 Nature、PNAS、PRL、JACS 等杂志上发表论文 150 余篇。目前，担任国家重点研发计划首席科学家，中国光学学会理事，X 射线显微术会议（XRM）和国际相干会议（Coherence 等国际咨询委员会委员。作为上海软 X 射线自由电子激光用户装置副总经理，以及上海硬 X 射线自由电子激光装置 FEL-I 负责人参与我国先进 X 射线光源的设计和建设。

报告人姓名：李江
工作单位：上海大学，材料生物学研究所
是否为学生：否
联系邮箱：lijiang80@shu.edu.cn

框架核酸在活细胞环境中的表征

郭琳洁 [a]；诸颖 [a,b]；王丽华 [a,b]；李江 [a,b,*]

a 上海大学，材料生物学研究所，嘉定区，上海 201800;
b 中国科学院上海高等研究院，上海同步辐射光源，浦东新区，上海 20210;
联系人：lijiang80@shu.edu.cn

摘要：近年来，随着核酸纳米技术的发展，基于框架核酸的纳米探针、分子机器等在活细胞诊断与治疗应用中已经展现出巨大潜力。但是，核酸作为一种生命体内普遍存在的生物分子，难以与存在高浓度内源生物分子的细胞环境背景区分，这给研究框架核酸在活细胞内的时空分布带来了挑战。因此，发展可以在活细胞环境中原位表征框架核酸的微观结构与时空分布的新方法，成为一个迫切的需求。在此背景下，本报告回顾了国内外团队在为发展框架核酸活细胞表征技术所开展的研究；讨论了不同表征技术的原理、优势与不足；重点介绍了本研究团队近期的研究进展，探讨了该方向仍然存在的挑战；最后，对这一方向未来的发展趋势做出了展望。
关键词：框架核酸；原位表征；活细胞；结构表征；时空分布

致谢：本工作得到了科技部重点研发计划（2020YFA0908900）与国家自然科学基金（22325406）的支持。

报告人/墙报展示人简介：

李江，上海大学材料生物学研究所研究员，获国家杰出青年基金、上海市青年拔尖人才计划等项目支持。主要研究方向为：框架核酸材料的设计、合成以及在活细胞内的精准诊疗应用。发展了可在活细胞内分级递送 CRISPR 系统的时序响应性框架核酸分子机器。已在 Nature 系列、JACS、Angew、Adv Mater 等国内外高影响力学术期刊发表一作/通讯作者论文 50 余篇。

报告人姓名：姚涛
工作单位：中国科学技术大学
是否为学生：否
联系邮箱：yaot@ustc.edu.cn

同步辐射原位技术及其在能源催化中的应用

姚涛*

中国科学技术大学，合肥，230029

*Email: yaot@ustc.edu.cn

摘要正文：能源转换的动态过程涉及发生在材料表界面的一系列复杂的物理和化学反应。捕捉能源材料在工作和服役环境下的若干关键中间体并揭示其结构动态变化过程，是理性设计和制备高效能源存储和转换材料的基础和前提。我们基于同步辐射大科学装置，发展了一系列原位X射线吸收谱和红外谱学技术，实现了原子级水平精确鉴别功能材料在实际工作状态下的真实结构及动态演化过程，弥补了非原位表征无法准确给出结构-性能关系的局限。基于建立的原位同步辐射技术，精确鉴别出金属单原子材料在电催化反应环境下，原子自适应形成的反应结构及其动态演化过程；从原子尺度揭示了在复杂反应环境中光电催化剂表面活性位点吸附反应分子的原子构型和电子结构、及中间态构型，为设计具有高效稳定和实用型的光电催化剂材料提供了理论基础。

报告人/墙报展示人简介：

姚涛，中国科学技术大学讲席教授，国家杰青，国家重点研发计划项目负责人。长期从事同步辐射先进实验技术的创新方法学、理论分析方法发展、及其在能源材料应用的交叉科学研究。发展了多环境多模态原位同步辐射谱学技术和数据分析方法，实现对低维光电催化材料固/液/气界面能量转换反应的原位在线监测。已在 Nature、Nat. Catal.、Nat. Commun.、JACS、Nano Lett.等著名学术期刊发表论文 150 余篇，其中 24 篇 ESI 高被引论文。曾获国家优青、中科院优秀导师、中科院青促会优秀会员、真空紫外与 X 射线物理学会青年科学家、科睿唯安 2019-2023 年度高被引科学家。

报告人姓名：胡钦红

报告人/墙报展示人简介：

胡钦红，博士，美国亚里桑那大学教授，中国石油大学（华东）二级教授，美国地质协会（2013）和美国科学促进会（2020）会士，国家级海外高层次人才（2023），石油地质国际权威 Top 期刊《Marine and Petroleum Geology》主编(2017 至今)，荣获美国德州大学阿灵顿分校终身杰出教授(2022)、美国政府“富布赖特全球学者奖”（2022)等 27 个奖项，领导的“纳米岩石物理与碳中和能源地质”研究团队聚焦多孔介质的微观孔隙结构和宏观物质传输、裂缝-基质相互作用、低渗地质岩体中流体（油气-热水和氢气等）的高效开采和储存，已发表 243 篇 SCI 检索论文（其中 157 篇为第一或通信作者；96 篇 Top 期刊），指导各类型团队人员 200 多名（其中 50 多人在四个国家任教；10 人次荣获国家与省部级人才计划称号）。

报告人姓名：陆现彩
工作单位：南京大学地球科学与工程学院，关键地球物质循环教育部前沿中心
是否为学生：否
联系邮箱：xcljun@nju.edu.cn

地表矿物“承载力”及其环境意义

陆现彩*，刘显东，李伟，刘欢

南京大学地球科学与工程学院，关键地球物质循环教育部前沿中心，江苏 南京，210093

*Email: xcljun@nju.edu.cn

摘要正文：矿物是地球和类地行星固态物质的基本构成单元。天然矿物往往会含有一定量的“杂质”，使其实际组成不同于理想的化学式。在一定物理化学条件下，矿物通过表面吸附、类质同像替代、矿物晶格吸持这些“杂质”的能力称为矿物的“承载力”。地表矿物往往具有颗粒细小、比表面积大、表面化学活性高等特点，不同矿物的承载力不同，对有害元素或分子固定和吸持的能力是衡量矿物作为环境工程材料价值的重要指标。研究发现：（1）固溶体矿物具有通过类质同象替代方式大量固定有害组分的能力。我们在风化层铁锰结壳中发现重金属元素的主要载体矿物-富锰铁氧化物，替代锰离子的分布受针铁矿晶格能量约束，不仅控制表面砷酸根的吸附和迁移[1]，还对针铁矿光催化效能有直接的影响；还系统阐明了羟基磷灰石中不同晶格位Ca容纳重金属的能力，确定了Cd、Mn优先替代Ca的晶格占位，为理解磷灰石矿物中离子替代机理及其环境应用提供了理论依据。（2）矿物表面络合作用是吸持重金属和有害有机物的重要方式。我们基于计算模拟建立了常见地表矿物的表面模型和表面酸位络合模型[2]，揭示了黏土表面金属离子在矿物表面吸附、成核结晶的微观机制[3]，结合实验研究提出“内圈络合诱导表面成核和沉淀”的动力学模型[4]。这些认识系统揭示了表生矿物表面金属离子和有害元素的分布规律和赋存形式，通过价态分析重建了矿物物相转变过程中元素释放和价态变化，为全方位定量分析矿物承载力提供新途径。

关键词：地表矿物；固溶体；表面吸附；同步辐射

参考文献

[1] Liu, H., Lu, X., Flynn, E.D. and Catalano, J.G. Fate of arsenic during the interactions between Mn-substituted goethite and dissolved Fe(II). *Geochim. Cosmochim. Acta* 2023, 356, 1–13.

[2] Zhang, Y., Liu, X., Cheng, J. and Lu, X. Surface Acidity and As(V) Complexation of Iron Oxyhydroxides: Insights from First-Principles Molecular Dynamics Simulations. *Environmental Science & Technology* 2021, 55, 15921–15928.

[3] Cui, X., Liu, H., Lu. X. Li., J., Chen, J., Chan, T., Liu, X. and Wang, R. Lattice match-based nucleation of cerianite on halloysite surface: From an observation of a regolith-hosted rare earth element deposit in Southern China. *Am. Min.* 2023, 108, 769–774.

[4] Wang, Z., Kwon, K.D., Peacock, C., Mo, X., Gou, W., Feng, X., Li, W. Zn stable isotope fractionation during adsorption onto todorokite: A molecular perspective from XAS and density functional theory. *Geochim. Cosmochim. Acta* 2022, 327, 116–136.

Carrying capacity of minerals on the Earth surface and its environmental significance

Xiancai Lu*, Xiandong Liu, Wei Li, Huan Liu

School of Earth Sciences and Engineering, Frontier Research Center on Critical Earth Material Cycles, Nanjing University, Nanjing, Jiangsu, 210093, China
* xcljun@nju.edu.cn

Minerals are the fundamental constitutive units of the solid Earth and terrestrial planets. Natural minerals often contain certain amounts of “impurities”, which deviates from their ideal chemical formulas. The ability of minerals to adsorb, substitute, or retain “impurities” under specific physical and chemical conditions is defined as the "carrying capacity" of minerals. The minerals on the Earth’s surface are often featured by fine particle size, large specific surface area, and high chemical reactivity. The carrying capacity of different minerals varies, and their ability to fix and adsorb harmful elements or molecules is a crucial indicator of their value as environmental engineering materials. In the past decade, we have disclosed two main modes for fixing harmful species on the Earth’s surface. (1) Solid solution minerals have the ability to fix harmful components in large quantities through isomorphous substitution. We found Mn-hematite/goethite as the main carrier minerals of heavy metals in the Fe-Mn crusts on weathered carbonates. The distribution of Mn ions is energetically constrained by the lattice structure, not only controlling the adsorption and migration of arsenate ions [1], but also directly affecting its photocatalytic efficiency. We also systematically elucidated the ability of different lattice positions of hydroxyapatite to accommodate heavy metals, determining that Cd and Mn have a preference for substituting Ca positions, providing a theoretical basis for understanding the ion substitution mechanisms and environmental applications of apatite minerals. (2) The surface complex on mineral surfaces is a significant way to adsorb heavy metals and harmful organic compounds. We established surface structure and surface complex models for common minerals based on computational simulations [2], revealing the mechanisms for surface adsorption and nucleation crystallization [3]. Combining experimental studies, we proposed a kinetic model of “inner-sphere complex inducing surface nucleation and precipitation” [4]. The distribution and states of harmful species on mineral surfaces have been revealed. Based on valence analysis, we studied the element release and redox reactions during weathering processes, which provides a new approach for comprehensively understanding the mineral carrying capacity.

Keywords: Surface minerals; Solid solutions; Surface adsorption; Synchrotron radiation

References

[1] Liu, H., Lu, X., Flynn, E.D. and Catalano, J.G. Fate of arsenic during the interactions between Mn-substituted goethite and dissolved Fe(II). Geochim. Cosmochim. Acta 2023, 356, 1–13.

[2] Zhang, Y., Liu, X., Cheng, J. and Lu, X. Surface Acidity and As(V) Complexation of Iron Oxyhydroxides: Insights from First-Principles Molecular Dynamics Simulations. Environmental Science & Technology 2021, 55, 15921–15928.

[3] Cui, X., Liu, H., Lu. X. Li., J., Chen, J., Chan, T., Liu, X. and Wang, R. Lattice match-based nucleation of cerianite on halloysite surface: From an observation of a regolith-hosted rare earth element deposit in Southern China. Am. Min. 2023, 108, 769−774.

[4] Wang, Z., Kwon, K.D., Peacock, C., Mo, X., Gou, W., Feng, X., Li, W. Zn stable isotope fractionation during adsorption onto todorokite: A molecular perspective from XAS and density functional theory. Geochim. Cosmochim. Acta 2022, 327, 116–136

报告人/墙报展示人简介：

陆现彩，南京大学教授，博士生导师。主要从事矿物学和地质微生物学研究。先后完成国家级和省部级科研项目十余项，2014 年获国家杰出青年基金项目资助，2022 年任国际矿物学协会副主席，2023 年入选自然资源部高层次科技创新人才工程科技创新团队首席专家，曾获国家级教学成果二等奖两次，教育部自然科学奖一次，中国青年地质科技奖一次。

报告人姓名：陈森
工作单位：中国工程物理研究院，流体物理研究所
是否为学生：否
联系邮箱：senchen02@163.com

基于同步辐射的冲击载荷下材料动态行为原位多尺度研究

陈森[1,*]，侯琪玥[1]，李江涛[1]，吕超[1]，李可[2]，谢红兰[2]，胡建波[1*]

[1]中国工程物理研究院，流体物理研究所，四川绵阳，621000

[2]中科院上海高等研究院，上海，201210

*陈森: senchen02@163.com；胡建波：jianbo.hu@caep.cn

摘要正文：强冲击荷载下材料的微介观动态行为是动态压缩科学中的重要研究内容，但长期以来由于缺乏原位动态跨尺度表征技术而进展缓慢。以同步辐射为典型代表的先进 X 射线光源的出现为该问题的解决提供了革命性的机遇与挑战。依托同步辐射光源，近年来对强冲击荷载下材料的动态变形、损伤失效、固-固相变、熔化等问题研究取得了重要突破。本工作聚焦基于同步辐射的强冲击荷载下原位诊断技术及其应用研究进展，介绍了同步辐射光源的特性、同步辐射光源与动态加载装置的结合，以及基于上述技术对极端荷载下材料多尺度变形、相变、损伤研究的进展。

关键词：同步辐射；冲击载荷；原位 X 射线诊断；变形损伤

报告人/墙报展示人简介：

陈森，中物院流体研究所副研究员。本科毕业于中国科学技术大学，中国工程物理研究院博士。聚焦于极端条件下的材料多尺度动态行为研究及基于先进 X 射线光源的原位诊断技术研究。在 NC、PRL、IJP、JMST、IJIE、EFM 等期刊发表学术论文 40 余篇，其中一作/通讯近 20 篇。任冲击波物理与爆轰物理全国重点实验室青年助理、成都市天府海智计划专家、《高压物理学报》青年编委，深入参与了我国动态压缩科学平台建设与应用，在材料的冲击变形与相变、损伤以及制造过程研究获得了系列创新成果。

报告人姓名：诸颖
工作单位：上海大学材料生物学研究所
是否为学生：否
联系邮箱：zhuying@zjlab.org.cn

同步辐射X射线生物成像

诸颖*

上海大学材料生物学研究所，上海，201800

* Email: zhuying@zjlab.org.cn

摘要正文：开发了基于同步辐射的超高分辨细胞显微成像分析技术，实现了单细胞纳米分辨成像；发展了高序数元素胞内高灵敏分析新方法，为元素细胞效应分析提供新工具；应用同步高序数元素细胞效应分析新方法揭示砷的细胞和动物作用新机制，提出纳米自噬抑制剂-砷剂联用新方案，率先将三氧化二砷应用于实体瘤治疗研究。

报告人/墙报展示人简介：

诸颖，上海大学材料生物学研究所副所长，卢嘉锡国际团队首席科学家。主要从事同步辐射生物成像研究，在国际上率先研制了 X 射线成像的“GFP”遗传标记探针，实现了纳米分辨的 X 射线分子影像，并应用于细胞和脑神经元的特异性标记与成像研究。先后主持国自然优秀青年科学基金、国自然原创探索计划、科技部国家重点研发计划课题等多个项目。被评为上海市青年科技启明星、中科院青促会优秀会员；获中国分析测试协会科学技术奖特等奖。近年来以第一/通讯作者身份在 Nature 系列期刊、Angew Chem Int Ed、Adv Mater 等领域内重要期刊发表论文 50 余篇，授权发明专利 11 项。

报告人姓名：高俊华
工作单位：上海大学材料生物学研究所
是否为学生：否
联系邮箱：gaojunhua@wioe.westlake.edu.cn

金属陶瓷材料纳米尺度结构调控与光学特性研究

高俊华[1,*]，陈芝琳[1]，李西军[1]

[1]中国工程物理研究院，流体物理研究所，四川绵阳，621000

[1]西湖大学光电研究院，浙江杭州，311400

*Email: gaojunhua@wioe.westlake.edu.cn

摘要正文：金属陶瓷（金属-陶瓷进行复合）光学薄膜材料内金属组分和微结构的调控，极大丰富了薄膜自身的物理特性和功能。其光功能特性的人工裁剪，关键在于纳米尺度下金属微纳结构的精确调控，如何精确、可定制化调控金属微纳结构仍是金属陶瓷光学材料研究与应用所面临的瓶颈问题。围绕金属陶瓷薄膜中这一关键问题，提出了“陶瓷母相内金属微纳结构可控直接生长”策略来调控它们的光学特性，从而发展出金属纳米结构自组织生长技术，解决了金属陶瓷内金属一维纳米线阵列与三维光学微结构直接生长的难题，进一步借助金属微纳结构可控直接生长技术，联合同步辐射微结构表征等手段，从纳米线自组织生长行为的控制入手，实现其特征几何尺寸可按需调控，开发了折射率可定制化的复合超材料薄膜，成功构筑了宽光谱、低色散且折射率连续可调的超材料，其可见光折射率可低至约 1.15，而红外高折射率可超过 7。

关键词：金属陶瓷；纳米复合；小角 X 射线散射；光学超材料薄膜

参考文献

[1] Z. L. Chen, J. H. Gao, et al., Infrared absorber miniaturization: exceptional optical phase shift induced by ultrahigh refractive index artificial films. Laser Photonics Rev. 2024, 2400994.

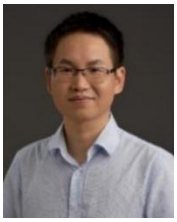
[2] Z. L. Chen, J. H. Gao, et al., Vertically-aligned Ag nanowire array-based metamaterial with high refractive index and low-dispersion in the infrared band. Adv. Opt. Mater. 2023, 2301334.

[3] H. B. Hu, J. H. Gao, et al., Direct growth of vertically orientated nanocavity arrays for plasmonic color generation. Adv. Funct. Mater. 2020, 30, 2002287.

[4] J. H. Gao, X. Z. Wu, et al. Template-free growth of well-ordered silver nano forest/ceramic metamaterial films with tunable optical responses. Adv. Mater. 2017, 29, 1605324.

报告人/墙报展示人简介：

高俊华，西湖大学光电研究院，研究员，长期从事纳米复合光学薄膜材料和多层膜涂层应用基础研究方面的工作，包括新型金属陶瓷复合薄膜开发，多层膜光学涂层理论设计、可控制备及其微结构的同步辐射表征、光学性能优化等方面。同时，发展了陶瓷母相内金属微纳结构可控直接生长技术，实现了基于金属陶瓷超材料结构的超快光开关、人工结构色和超黑涂层的开发等。



报告人姓名：陈波
工作单位：同济大学材料学院
是否为学生：否
联系邮箱：bo.chen@tongji.edu.cn

3D Nano-structure Investigation on the MoC Nanoparticles embedded N-Doped Porous Carbon Cubes via Synchrotron X-ray and Electron Imaging

Bo Chen,* Qin Li, Jing Zhao, Zhengrong Xu and Rui Liu*
Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 201804, China
* bo.chen@tongji.edu.cn (B. C.); ruiliu@tongji.edu.cn (R. L.)

Promotion of oxygen reduction reaction (ORR) kinetics, to a large extent, depends on the rational modulation of the electronic structure and mass diffusion of electrocatalysts. Herein, a ferrocene (Fc)-assisted strategy is developed to prepare Fc-trapped ZnMo-hybrid zeolitic imidazolate framework (Fc@ZnMo-HZIF-50) and the derived Fe single atom coupling with MoC nanoparticles, coembedded in hierarchically porous N-doped carbon cubes (MoC@FeNC-50). The introduced Fc is utilized not only as an iron source for single atoms but also as a morphology regulator for generating a hierarchically porous structure. The redistribution of electrons between Fe single atoms and MoC nanoparticles effectively promotes the adsorption of O2 and the formation of *OOH intermediates during the ORR process. Along with a 3D hierarchically porous architecture for enhanced mass transport, the as-fabricated MoC@FeNC-50 presents excellent activity ($E1/2$ = 0.83 V) and durability (only 9.5% decay in current after 40000 s). This work could inspire valuable insights into the construction of efficient electrocatalysts through electron configuration and kinetics engineering [1].

Keywords: metal-organic framework, Fe single atom, MoC, hierarchically porous structure, oxygen electroreduction

References

[1] Qin Li, Jing Zhao, Peng Li, Zhengrong Xu, Jie Feng,* Bo Chen,* and Rui Liu* Coembedding Fe Single Atom-Coupled MoC Nanoparticles in N- Doped Hierarchically Porous Carbon Cubes for Oxygen Electroreduction. ACS Nano (2024) online

Notes: These contents are adapted from Reference 1.

报告人/墙报展示人简介：

陈波，同济大学材料学院研究员。2008 年-2013 年在英国伦敦大学学院(UCL) 攻读博士，并获理学博士学位，博士学位论文获得伦敦大学学院优秀博士论文奖。2013 年-2017 年在英国伦敦大学学院伦敦纳米技术中心(LCN) 和英国罗瑟福-阿尔普顿国家实验室从事博士后研究工作; 2017 年到同济大学工作至今。长期从事基于 (同步辐射)X 射线和电子显微镜的三维成像技术发展与应用研究，利用三维成像技术对材料纳微三维空间结构进行定量分析并在基于材料真实三维结构的基础上进行材料性能模拟。现为上海市显微学学会理事、全国分析测试技术联盟理事和 Coherence2024 会议国际学术委员会委员等，以（共同）通讯或第一作者在 Science Advances、Advanced Materials 、Energy & Environmental Science 和 Angew. Chemie 等国际知名期刊上发表论文 50 余篇

报告人姓名：赵玉宝
工作单位：内蒙古师范大学环境与健康研究院
是否为学生：否
联系邮箱：ybzhao@gzhu. edu. cn

金属单原子催化类芬顿反应中活性位点局域结构调控机制

崔佳豪[1]，王坤[1]，赵玉宝[1,*]，…

[1] 内蒙古师范大学环境健康研究院，呼和浩特，100028

*Email: ybzhao@gzhu.edu.cn

摘要正文：单过氧硫酸盐（PMS）催化活化降解水体有机污染物这一项高级氧化技术具有诸多独特优势，例如：药剂储运成本低，操作安全性高，和反应速率相对较快等，其在水处理过程中有良好的应用前景。开发高性能的催化剂是推进这项技术的应用进程的关键。本工作设计共聚氮化碳框架结构负载的金属单原子Fe催化剂，充分利用金属单原子同配位原子的相互作用（金属载体相互作用），[1] 共聚氮化碳框架的“模块化”结构特征，通过载体分子结构调控，实现金属单原子Fe活性中心局域结构和物化属性的调控，从而实现高效的催化活化PMS去除水体难降解有机污染物的性能。通过对共聚氮化碳载体合成的前驱体的设计，发现了单宁酸及其对苯二胺等分子的引入可以提升载体框架结构的C/N元素比例，载体的C/N比例上升是由于框架结构中七嗪单元部分被全碳的芳环取代。这些单原子铁催化剂在PMS活化降解BPA所表现出的催化活性也同其Fe单原子价态正相关。后续的研究表明，具有较高价态单原子Fe的催化剂在BPA降解过程中表现出优异的催化活性。理论研究表明，相对高价态的单原子铁中心上的PMS活化及其后续氧转移过程在能量上具有优势。这些工作为进一步设计高性能金属单原子催化剂提供了启发。[2-4]

关键词：单原子催化；类芬顿反应；污染物降解

参考文献

[1] Y. Zhao, P. Zhang, Z. Yang, L. Li, J. Gao, S. Chen, T. Xie, C. Diao, S. Xi, B. Xiao, C. Hu, W. Choi, *Nat. Commun.* 2021, *12*, 3701.

[2] J. Cui, L. Li, S. Shao, J. Gao, K. Wang, Z. Yang, S. Zeng, C. Diao, Y. Zhao, C. Hu, *ACS Catal.* 2022, 12, 14954-14963.

[3] S. Shao, J. Cui, K. Wang, Z. Yang, L. Li, S. Zeng, J. Cui, C. Hu, Y. Zhao, *ACS EST Engg.* 2023, 3, 36-44.

[4] J. Cui, S. Shao, L. Li, P. Zhang, J. Cui, C. Hu, Y. Zhao, *ACS EST Engg.* 2022, 2, 2014-2022.

[5] J. Cui, L. Li, Y. Wu, J. Gao, K. Wang, C. Diao, C. Hu, Y. Zhao, *Appl. Catal. B* 2023, 331, 122706.

报告人/墙报展示人简介：

赵玉宝，教授，内蒙古师范大学环境健康研究院副院长。主要开展高级氧化水处理过程中界面催化反应原理分析等方面的系统研究工作，并获得了一系列创新成果。在 *Nature Communications, Angewandte Chemie International Edition, ACS Catalysis, Applied Catalysis B: Environmental,* 以及 *ACS ES&T Engineering* 等国际著名期刊发表 SCI 收录研究论文 40 余篇。研究成果也受到国内外同行广泛关注，并受邀担任美国化学会期刊 *ACS ES&T Engineering* 杂志的顾问编委（Early Career Advisory Board），*Global Environmental Science*, 和 *Chinese Chemical Letters* 杂志的青年编委。2023 年入选美国斯坦福大学 World’s Top 2% Scientists。

报告人姓名：王利光
工作单位：浙江大学
是否为学生：否
联系邮箱：wanglg@zju.edu.cn

高能量密度电池材料的先进同步辐射表征分析

王利光[1*]

[1]浙江大学，杭州市浙江大学紫金港校区，310058

*Email: wanglg@zju.edu.cn

摘要正文：新能源汽车的发展对锂离子电池的能量密度与循环寿命、安全性等提出了更高的要求，当前电池材料的失效机制尚不明确的问题为材料设计改性带来了较大不确定性，设计制备高性能正极材料亟需解决失效机制不明的问题。针对下一代动力电池高比能正极材料的开发，通过结合多种先进同步辐射表征技术系统性地深入剖析了导致层状正极材料的性能失效机制，率先揭示了层状正极材料的应力应变与晶格微裂纹之间的内在关联，阐明了在脱嵌锂过程中区域应力应变是其结构畸变和性能衰减的根本诱因，解决了困扰研究人员多年的世界难题，开辟了结构应力调控的新策略，创新地通过晶格尺度上材料结构设计方法，极大地缓解了这一本征缺陷，实现了超低应变层状正极材料的开发。

关键词：同步辐射表征；电池材料

参考文献

[1] **L. Wang, T. Liu, T. Wu, J. Lu. Strain-Retardant Coherent Perovskite Phase Stabilized Ni-Rich Cathodes. Nature, 2022, 611, 61-67.**

报告人/墙报展示人简介：

王利光，"百人计划"研究员，博士生导师，入选国家级高层次人才计划青年项目（海外），浙江省杰青。哈尔滨工业大学-阿贡国家实验室联合培养博士，曾多年在美国阿贡国家实验室先进光子源（Advanced Photon Source, APS）同步辐射中心参与线站运行及维护，熟识同步辐射技术在电化学能源储存领域的应用，主要从事交叉学科的基础和应用研究，涉及化学、物理、材料等领域，重点结合同步辐射表征（谱学及成像技术）在高能量密度锂离子电池正极材料领域取得了一些成果，以第一/通讯作者在 Nature, Nature Commun., J. Am. Chem. Soc., Adv. Mater.等期刊发表 SCI 论文 40 余篇，总引用 6000 余次。主持国家自然科学基金面上、浙江省杰出青年基金等。担任 Angew. Chem., Adv. Mater., Adv. Energy Mater., Nano Energy, Energy Storage Mater., ACS Appl. Mater. Interfaces, Langmuir 等十余种期刊审稿人，任 Research，SusMat，Carbon Energy 和 EcoEnergy 青年编委，获 2022 和 2023 年 Carbon Energy 优秀青年编委奖。

报告人姓名：黄秋实
工作单位：同济大学物理科学与工程学院
是否为学生：否
联系邮箱：huangqs@tongji.edu.cn

高精度 X 射线薄膜器件界面表征与调控研究

黄秋实[1,2,3,4,5*]，齐润泽[1,2,3,4,5]，张哲[1,2,3,4,5]，张众[1,2,3,4]，王占山[1,2,3,4*]

[1]同济大学物理科学与工程学院，先进微结构材料教育部重点实验室，精密光学工程技术研究所，上海 200092

[2]先进微结构材料教育部重点实验室，

[3]上海市全光谱高性能光学薄膜器件及应用专业技术服务平台

[4]上海市数字光学前沿科学研究基地

[5]浙江同越光学科技有限公司

*Email: huangqs@tongji.edu.cn, wangzs@tongji.edu.cn

摘要正文：

X 射线光学薄膜是实现精密 X 射线探测的核心之一，是光源大科学装置、等离子体诊断、高能天文观测和科学分析仪器等前沿科学和高新产业发展的关键器件。由于波长短，X 射线薄膜的膜层厚度只有 1-3nm，界面粗糙度、扩散、化合等原子级缺陷是影响其光学性能的重要问题。团队依托实验室平台和同步辐射光源装置建立了超薄 X 射线薄膜的形貌结构综合表征方法，利用 X 射线吸收谱对膜层整体化学价态进行了测试，结合 X 射线深度刻蚀光电子能谱和 X 射线驻波场对膜层界面结构和成分进行了表征，利用 X 射线散射对膜层粗糙形貌的特征进行了分析。基于上述表征手段揭示了超薄膜层缺陷的产生和演化规律。以此为指导，发展了膜层界面阻隔层、反应溅射等原子级缺陷的生长调控方法，显著提升了 X 射线薄膜的反射率。针对超薄薄膜的工程化难题，发展了大尺寸膜层生长质量和膜厚一致性的镀制技术，实现了百毫米尺寸-几十皮米精度的误差控制，研制的 X 射线薄膜器件成功应用于国内外同步辐射光源线站。

关键词： X 射线；超薄薄膜；界面表征与调控，同步辐射

报告人/墙报展示人简介：

黄秋实，同济大学物理科学与工程学院教授，博导，入选国家高层次青年人才，上海市青年拔尖人才，上海市青年科技启明星，长期从事高性能极紫外与 X 射线薄膜元件研究，研制的相关元件成功应用于国内外同步辐射光源装置和半导体产业。作为第一或通讯作者在 Nature Communications、 Applied Physics Reviews 等期刊发表 SCI 论文 40 余篇，授权发明专利 13 项，在国际会议做邀请报告 11 次，相关技术与团队实现成果转化，成立浙江同越光学科技有限公司。获 2021 年中国仪器仪表学会技术发明奖一等奖（排二），2019 年中国光学十大进展（应用研究类）。担任国际 X 射线多层膜主流会议（PXRNMS）和国际 X 射线光学元件检测与制造会议（IWXM）程序委员会委员，国家同步辐射实验室和上海软 X 射线自由电子激光装置用户专家委员会委员、中国材料研究学会极端条件材料与器件分会第二届委员会委员、中国激光杂志社第三届青年编委等。

报告人姓名：郭智
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：guozhi@sari.ac.cn

同步辐射X射线光子关联谱技术原理及应用

郭智[1,*]，崔晨辉[2,3]，周子木[3]，魏林峰[2]，李松林[2,3]，徐以会[2]，江怀东[2]，邰仁忠[1]

[1]中国科学院上海高等研究院，上海市，201204

[2]上海科技大学，上海市，201210

[3]中国科学院上海应用物理研究所，上海市，201800

*Email: guozhi@sari.ac.cn

摘要正文：X射线光子关联谱（ X-ray Photon Correlation Spectroscopy, XPCS）技术是一种利用相干X光散射的二次相干特性来研究材料微观尺度的弛豫动力学的技术。因其具有高空间分辨率和穿透能力，已成为探测软凝聚态和强相关材料纳米级动力学的有力工具。在表征材料微观动力学行为上，XPCS具有其他动力学观测技术无法替代的作用。基于上海光源BL10U1、BL08U1A线站开展XPCS方法和实验研究，完成了对软物质（胶体悬浮液）、强关联材料的动力学观测。在国内首次利用XPCS方法观测了胶体自由扩散运动的动力学过程，借助高帧率的区域探测器，最高可实现毫秒级时间分辨率的动力学观测。另外，通过反射式测量，观测到强关联材料在共振能量和偏离共振能量上弛豫动力学的差别，说明观察到来源于磁结构的信号，这反映了材料中磁性部分与其他部分的动力学行为的差异，为磁结构的相变研究提供了实验依据。

关键词：上海光源；X射线光子关联谱；动力学

参考文献

[1] C. H. Cui, Z. M. Zhou, L. F. Wei *et al.* Millisecond dynamics of colloidal suspension studied by X-ray photon correlation spectroscopy at the Shanghai Synchrotron Radiation Facility. *NUCL SCI TECH.* 2024, 35(1).

Synchrotron radiation X-ray photon correlation spectroscopy technology principle and application

Zhi Guo[1,*], Chenhui CUI[2,3], Zimu ZHOU[3], Linfeng WEI[2], Songlin LI[2,3], Yihui XU[2], Huaidong JIANG[2], Renzhong TAI[1]

[1] Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China

[2] ShanghaiTech University, Shanghai 201210, China

[3] Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China

* guozhi@sari.ac.cn

Keywords: SSRF; XPCS; Dynamics

References

[57] C. H. Cui, Z. M. Zhou, L. F. Wei *et al.* Millisecond dynamics of colloidal suspension studied by X-ray photon correlation spectroscopy at the Shanghai Synchrotron Radiation Facility. *NUCL SCI TECH.* 2024, 35(1).

报告人/墙报展示人简介：

郭智，博士，研究员，博士生导师。2007 年博士毕业于中科院上海应物所，目前担任高研院物理环境部副主任、担任 SXFEL 束线分总体负责人、SHINE 项目束线诊断系统负责人。主要从事同步辐射和 X 射线自由电子激光束线方法和应用研究，并开展 X 射线光子关联谱方法和应用。

负责完成了国家重大科研仪器设备研制专项 SiP·ME2 项目中软 X 射线弯铁光束线设计、调试和基金委验收，目前已进入用户开放阶段；完成了软 X 射线谱学显微束线升级改造的设计和调试，综合性能得到极大提升。负责完成了国内首条软 X 射线自由电子激光用户装置活细胞成像光束线设计、建设、调试和工艺验收，目前进入用户开放阶段，是世界上聚焦性能最好（3μm）的覆盖水窗波段的软 X 射线自由电子激光装置，支撑实验站实现 20nm 空间分辨的单脉冲成像分辨率。担任高重频硬 X 射线自由电子激光束线诊断系统负责人，负责脉冲时域、强度、能谱、位置等诊断，目前已进入工程实施阶段。

报告人姓名：许子健
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：xuzj@sari.ac.cn

上海光源软 X 射线谱学显微线站方法学及应用研究

许子健[1,*]，张立娟[1]，张祥志[1]，甄香君[1]，刘海岗[1]，张瑜[1]，郭智[1]，王勇[1]，邰仁忠[1]

[1]中国科学院上海高等研究院上海光源科学中心，上海市浦东新区张衡路 239 号，201204

*Email: xuzj@sari.ac.cn

摘要正文：上海光源软 X 射线谱学显微线站(BL08U1A)线站实现了国内领先、国际先进的高速高分辨软 X 射线扫描透射谱学显微成像技术，将扫描透射 X 射线显微术（STXM）的高空间分辨（优于 30nm）能力和软 X 射线近边吸收精细结构谱学（NEXAFS）的高化学态分辨能力（能量分辨大于 11000）相结合，实现了在纳米尺度上对固体、液体、软物质等多种物态特性的精确定量表征能力。本线站建立了国内首个 X 射线相干衍射成像（CDI）平台，实现了 7nm 空间分辨、1/12 常规成像剂量的扫描相干衍射成像方法（ptychography），建立了大视场（百微米量级）、高分辨的快速扫描相干衍射成像技术，并具备高抗噪高抗振性能，在 80-100nm 随机样品振动、强背景噪声条件下，仍能获得优于 15nm 的空间分辨率，整体平台性能居于国际先进水平。基于上述核心竞争力上海光源 BL08U1A 线站支持多学科的国内外用户开展了前沿科技和基础科学研究，目前已累计支持用户发表了 648 篇科技论文，其中一区期刊论文 243 篇，国际顶刊 Nature/Science 论文 5 篇，学科范围覆盖了材料科学、环境科学、生物医药、能源化学、磁性材料和磁学、纳米器件等前沿领域。

关键词：软 X 射线谱学显微线站；高空间分辨；高化学态分辨；扫描相干衍射成像；高抗噪高抗振

参考文献

[1] **ZHANG Li-Juan, XU Zi-Jian, ZHANG Xiang-Zhi, YU Huai-Na, Zhou Ying, GUO Zhi, ZHEN Xiang-Jun, CAO Jie-Feng, et al. Latest advances in soft X-ray spectromicroscopy at SSRF.** ***Nucl. Sci. Tech.*** **2015, 26: 040101**

[2] **Chun-Peng Wang, Zi-Jian Xu, Hai-Gang Liu, Xulei Tao, Ren-Zhong Tai. Soft X-ray ptychography method at SSRF.** ***Nucl. Sci. Tech.*** **2017, 28: 74**

[3] **Shilei Liu, Zijian Xu, Xiangzhi Zhang, Bo Chen, Yong Wang, Renzhong Tai. Position-guided ptychography for vibration suppression with the aid of a laser interferometer.** ***Optics and Lasers in Engineering*** **2023, 160: 107297**

报告人人简介：

许子健，中科院上海高等研究院研究员，博士生导师，中科院特聘研究骨干，上海光源软 X 射线谱学显微线站用户负责人。2007 年获中国科学院大学博士学位，2009 年进入上海同步辐射光源工作，在上海光源长期从事 X 射线谱学显微方法学发展和数据分析技术研究。基于上海光源成功建立了国内首个 X 射线扫描相干衍射成像实验平台，实现了低剂量、高分辨、大视场、高效率的扫描相干衍射成像方法，将上海光源空间分辨能力由 30nm 提升至 7nm，综合性能居于国际最好水平。负责上海光源 BL08U1A 线站实验方法发展和用户支持工作，开发了多套 STXM 数据分析软件，有力支持了用户的高水平研究工作。主持多项国家自然科学基金和国家重点研发课题，发表论文 70 余篇。

报告人姓名：曾建荣
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：zengjr@sari.ac.cn

胶体半导体量子点结构演变的同步辐射散射研究

曾建荣 [1,2*]

[1] 中国科学院上海高等研究院，上海市浦东新区张衡路 239 号，201204

[2] 中国科学院上海应用物理研究所，上海市嘉定区嘉罗公路 2019 号，201800

*Email: zengjr@sari.ac.cn

摘要正文：胶体半导体量子点材料由于量子限域效应而具有独特的光电性质，在照明、显示、光伏、通讯、电子学、生物标记等领域具有巨大的应用潜力。然而，量子点的大规模可控合成制备方面仍然存在诸多问题，其中一个关键因素在于对量子点材料结构的形成及演变过程仍有很多盲区。同步辐射 X 射线散射技术具有统计性、高通量、可进行原位分析等特点，在分析量子点纳米及晶体结构方面具有独特的优势。报告介绍采用同步辐射 X 射线散射研究量子点结构演变的实验方法、数据分析等基本特点，以及近年来国内外在该方向的相关研究进展。

关键词：量子点；结构演变；同步辐射；X 射线散射

参考文献

[1] Zhaopeng Cao, Jinming Zhu, Jun Peng, Nan Meng, Fenggang Bian, Chaoran Luan, Meng Zhang, Yan Li*, Kui Yu*, Jianrong Zeng*. Transformation pathway from CdSe nanoplatelets with absorption doublets at 373/393 nmto nanoplatelets at 434/460 nm. *Journal of Physical Chemistry Letters* **2022, 13**, 3983-3989

[2] Jinming Zhu[+], Zhaopeng Cao[+], Yongcheng Zhu, Nelson Rowell, Yan Li, Shanling Wang, Chunchun Zhang, Gang Jiang, Meng Zhang*, Jianrong Zeng*, Kui Yu*. Transformation Pathway from CdSe Magic-Size Clusters with Absorption Doublets at 373/393 nm to Clusters at 434/460 nm. *Angewandte Chemie International Edition* **2021, 60**: 2-10

[3] Xiaoyu Hao, Meng Chen, LinXi Wang, Zhaopeng Cao, Yan Li, Shuo Han, Meng Zhang, Kui Yu*, Jianrong Zeng*. In situ SAXS probing the evolution of the precursors and onset of nucleation of ZnSe colloidal semiconductor quantum dots. *Chemical Communications* **2020, 56**: 2031-2034

[4] Baowei Zhang[#], Tingting Zhu[#], Mingyang Ou, Nelson Rowell, Hongsong Fan, Jiantao Han, Lei Tan, Martin T. Dove, Yang Ren, Xiaobing Zuo, Shuo Han*, Jianrong Zeng*, Kui Yu*. Thermally-induced reversible structural isomerization in colloidal semiconductor CdS magic-size clusters. *Nature communications* **2018, 9**: 2499

[5] Mingyang Liu, Kun Wang, Linxi Wang, Shuo Han, Hongsong Fan, Nelson Rowell, John, A. Ripmeester, Romain Renoud, Fenggang Bian, Jianrong Zeng*, Kui Yu*. Probing Intermediates of the Induction Period Prior to Nucleation and Growth of Semiconductor Quantum Dots. *Nature Communications* **2017, 8**: 15467

[6] Jianrong Zeng, Fenggang Bian*, Jie Wang*, Xiuhong Li, Yuzhu Wang, Feng Tian, Ping Zhou. Performance on absolute scattering intensity calibration and protein molecular weight determination at BL16B1, a dedicated SAXS beamline at SSRF. *Journal of Synchrotron Radiation*, **2017, 24**: 509~520

报告人简介：

曾建荣，中国科学院上海高等研究院上海光源中心正高级工程师。本科和博士分别毕业于中国科学技术大学和中国科学院大学。长期从事同步辐射 X 射线实验方法学及其应用方面的研究。先后主持多项国家自然科学基金项目和企业横向课题等。骨干参与“十二五”重大科技基础设施建设、科技部重点研发计划、国家自然科学基金等多项国家级项目。发表研究论文 70 多篇，担任中国核学会辐射研究与应用分会理事、中国晶体学会固体局域结构与全散射技术专业委员会委员，是 Angewandte Chemie International Edition、Journal of Physical Chemistry Letters、RSC Advances 等多个期刊的审稿人。

报告人姓名：杨春明
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：yangcm@sari.ac.cn

有机太阳能电池固液界面形貌演变原位掠入射 X 射线散射研究

杨春明[1,*]，冯杨[1]，马千一[1]，郝嘉亮[1]，洪春霞[1]，李秀宏[1]，边风刚[1]

[1]中国科学院上海高等研究院/上海光源，上海，201204

*Email: yangcm@sari.ac.cn

摘要正文：有机太阳能电池(OSCs)因其工艺简单、低成本、柔性可穿戴而受到广泛关注。目前单结有机太阳能电池的最高光电转换效率(PCE)已达到 19.65%[1]。这一进展有望推动有机太阳能电池的大规模实际应用，并有可能减少全球碳排放[22-23]。目前有机太阳能电池的生产方法主要有旋涂镀膜、狭缝涂布镀膜、卷对卷印刷和刮涂镀膜等。虽然目前 OSCs 最高的光电转换效率都是通过旋涂方法获得的，但不能制备大面器件。为了实现 OSCs 的商业应用，对刮刀涂布，狭缝涂布和印刷等大面积制备工艺的研究也正在逐步深入，其中探究活性层液相成膜的动态变化及其构效关系是实现高性能和高稳定性器件制备的关键。

基于小角散射线站建立起了有机太阳能电池液相成膜原位掠入射小角 X 射线散射（GISAXS），原位掠入射广角 X 射线散射(GIWAXS)以及和原位紫外可见光光谱（UV-Vis）相结合的实时测量技术（发明专利：N202011588432.0， CN 202211683802.8），发展了用于原位测量数据处理所需的软件 SGTools [2]。与国际上常用的 SAXS 数据处理软件（Fit2d, GIXSGUI）相比，该 SGTools 软件具有适合处理弱散射体系（如高分子薄膜，超薄纳米薄膜等）掠入射散射数据批处理的特点，兼具透射 SAXS 数据批处理功能，已经被国内外相关研究人员下载并使用逾万次。应用自研原位技术和开发的相关软件，首次原位研究了刮涂三元有机太阳能电池的溶液剪切成膜机制，详细分析了局域结构的电子跃迁，成核、结晶以及给受体的相分离的特征演变时间和规律[3]。同时也研究了全聚合物 OSCs 的溶液剪切和成膜动力学机制。发现刮涂速率不仅影响 OSCs 的光电转换效率，而且还是 OSCs 的柔性的重要影响因素。

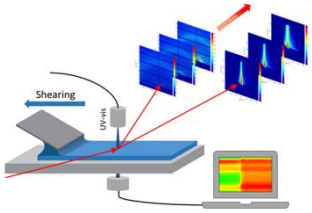


Fig. 1 Figure title in English Schematic of in situ UV-Vis/GIWAXS/GISAXS simultaneous measurement during blade-coating

关键词：固液界面；溶液剪切；掠入射 X 射线散射；有机太阳能电池

参考文献

[1] **H. Lu, W. Liu, G. Ran, Z. Liang, H. Li, N. Wei, H. Wu, Z. Ma, Y. Liu, W. Zhang, X. Xu, Z. Bo, High-pressure fabrication of binary organic solar cells with high molecular weight D18 yields record 19.65% efficiency, Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202314420.**

[2] **Zhao, N.; Yang, C.; Bian, F.; Guo, D.; Ouyang, X., SGTools: a suite of tools for processing and analyzing large data sets from in situ X-ray scattering experiments, J. Appl. Cryst. , 2022, 55: 195.**

[3] **Peng Z.; Zhang Y.;, Sun X.;, Yang, C.; et al. Real-Time Probing and Unraveling the Morphology Formation of Blade-Coated Ternary Nonfullerene Organic Photovoltaics with In Situ X-Ray Scattering, Adv. Funct. Mater., 2023, 33(14): 2213248.**

报告人简介：

杨春明

中国科学院上海高等研究院/上海光源，研究员。

从事同步辐射掠入射 X 射线散射方法学发展及应用研究，负责开发了有机太阳能电池原位成膜多方法联用测量技术；负责发展和建立了基于同步辐射小角 X 射线散射的集成电路关键尺寸测试的方法（CD-SAXS），开发 CD-SAXS 数据批预处理软件和重构分析软 件。主持国家自然科学基金项目三项，主持科技部重点研发计划项目子课题两项，教育部留学回国基金一项，企业委托项目一项。以第一或通讯作者在 Adv. Mater.，Adv. Funct. Mater.，Energy Environ. Sci.等期刊发表论文 30 余篇。获得浦东新区“明珠工程师”称号。

报告人姓名：郑官豪杰
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：lixiaolong@sari.ac.cn

上海同步辐射光源表面衍射线站（BL02U2）情况介绍

郑官豪杰[1,2]，顾月良[1,2]，李晓龙[1,2*]

[1]工作单位上海同步辐射光源，上海市浦东新区张衡路 239 号，201204

[2]中国科学院上海高等研究院，上海市浦东新区海科路 99 号，201210

*Email: lixiaolong@sari.ac.cn

摘要正文：随着电子信息技术的发展，电子器件需要更小的尺度以满足材料超高集成度、多功能化和低能耗方向的发展。对于低维薄膜功能器件，材料的表、界面性质对器件性能具有决定性影响，精准表征材料表界面结构特性，甚至实现薄膜形成过程的原位表征对于材料性能改善以及新材料的发展至关重要。上海同步辐射光源表面衍射线站（BL02U2）是上海光源线站工程中一条专门进行各种表、界面结构表征的线站，针对固体-真空、固体-液体、液体-液体等界面研究，本线站进行了特别的参数设计和线站配置优化。同时，表面衍射线站具有单独的液体表界面研究实验站，站内有专用液体衍射仪，可以实现X射线的弯折等。除此之外，该线站采用波荡器插入件，结合高精度衍射仪和先进面探测器等，该线站不仅可以提供多种X射线表征方法，也保证了ms级时间分辨条件下衍射数据的质量。本报告将对表面衍射线站的线站构造、相关实验方法及其在材料研究领域的应用做简要介绍。

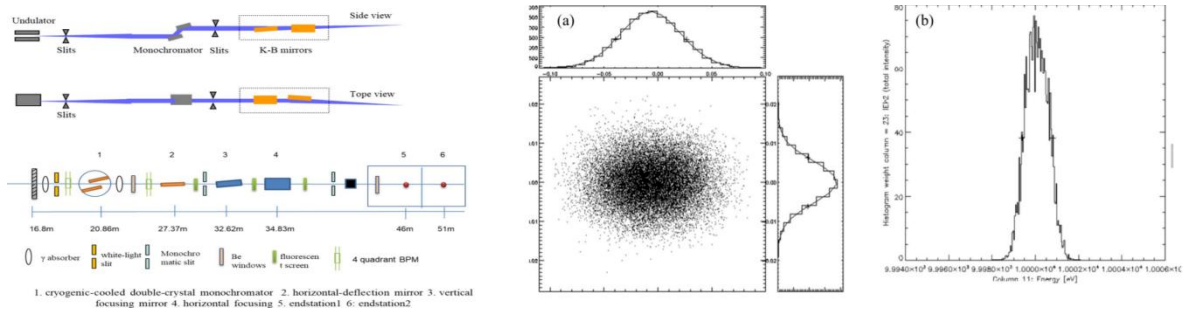


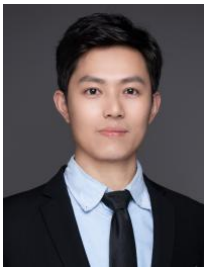
Fig. 1 Left: Optical design schematic and layout of surface diffraction beamline. Right: Focused beam size (a) and energy distribution curve (b) at 10 keV according to SHADOW tracing.

关键词：表面衍射；同步辐射表征技术；微结构表征；GIWAXS

参考文献

[1] **Y. L. Gu, X. Zheng, X. M. Zhang, B. Zhao, G. Z. Yin, D. M. Zhu, Y. H. Sun, X. Y. Gao and X. L. Li Surface Diffraction Beamline at the SSRF.** ***Nuclear Science and Techniques*** **(2024) 35:116**

报告人简介：



郑官豪杰，中国科学院上海高等研究院副研究员，上海光源表面衍射线站运行负责人，长期从事同步辐射光束线运行、X 射线衍射实验技术与相关应用研究，先后主持国家自然科学基金、中国科学院和上海市科委等各类科研项目 3 项。入选上海市 2021 年度“科技创新行动计划”扬帆计划及中国科学院青年创新促进会。2016 年以来，专注于新型钙钛矿材料半导体器件和同步辐射技术应用的交叉领域，以第一或通讯作者身份（含共同）在 Science, Nature Photonics, Nature Communications, Advanced Energy Materials 等期刊共发表文章 10 篇，以合作者身份在 Science, Nature Energy, Nature Communications, Advanced Materials, JACS 等期刊共发表 36 篇，文章总引用近 5000 次，H-index 27。

报告人姓名：张继超
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：liag@sari.ac.cn

同步辐射硬X射线微纳聚焦及应用

张继超[1]，张丽丽[1]，闫帅[1]，何燕[1]，李爱国[1,*]，

[1] 中国科学院上海高等研究院，上海市浦东新区张衡路 239 号，201204

*Email: liag@sari.ac.cn

摘要正文：硬X射线微聚焦光束线站（BL15U1）是上海光源首批建设的七条线站中的一条硬X射线微束线站，提供稳定、高亮度、高通量的硬X射线微束[1]，并开展多种实验方法，如X射线荧光成像、X射线荧光成分分析、共聚焦X射线荧光成像、微束X射线吸收精细结构分析、微束X射线衍射等。结合线站搭建的基于波带片的硬X射线亚微米聚焦系统，满足用户在微米（2μm）和亚微米尺度（200 nm）分辨率下的各类实验需求，在凝聚态物理、生物成像、能源催化、材料、环境、考古等领域具有广泛的应用。

关键词：硬X射线聚焦；X射线荧光成像；X射线微束衍射；

参考文献

[1] **L. Zhang, S. Yan, S. Jiang, et al. Hard X-ray micro-focusing beamline at SSRF, *Nucl. Sci. Tech.* 2015, 26: 060101.**

报告人姓名：董康
工作单位：中国科学院高能物理所
是否为学生：否
联系邮箱：dongkang@ihep.ac.cn

Synchrotron-based multiscale and multimodal imaging for degradation study of Li batteries

Kang Dong[1,*], Fu Sun [2], Markus Osenberg[3], Henning Markötter[4], André Hilger[3], Ingo Manke[3*]

[1] Multi-disciplinary Research Division Institute of High Energy Physics Chinese Academy of Sciences Beijing, 100049

[2]Qingdao Institute of Bioenergy and Bioprocess Technology, Chinese Academy of Sciences, Qingdao 266101

[3]Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Hahn-Meitner-Platz 1, Berlin 14109, Germany

[4] Bundesanstalt für Materialforschung und -Prüfung Unter den Eichen 87, 12205 Berlin, Germany

* dongkang@ihep.ac.cn

Li-ion batteries are becoming ubiquitous in all sectors of modern society. Advanced characterization techniques, like microscopic techniques, are critical and indispensable to understanding the battery operation and degradation mechanism, which in turn could inform and guide the development of next-generation batteries.[1] The combination of multi-scale and multimodal imaging techniques, under in-situ or operando conditions, can promote a comprehensive understanding of battery systems regarding the interface/interphase properties, dynamic processes and microstructure degradation, as well as the interplays between them.

Herein, several customized batteries are designed for in-situ/operando imaging-based characterization of batteries. Taking advantage of their respective advantages, a combination of multiple imaging techniques has been successfully used to obtain a multi-scale and comprehensive view towards understanding battery working and degradation mechanism, including Si-based anode[2], Li metal anode[3,4] and solid-state battery systems[5].

For instance, the microstructural evolution in the bulk and at the interphases SSBs and their interplays with performance degradation are critical, but still remain elusive due to limited in-situ characterization techniques available in probing the “buried” features in SSBs.[5] Using in-situ X-ray tomography, the phase transformation and microstructural evolution of a CuS cathode in SSBs is three-dimensionally (3D) visualized and characterized. The dynamic phase transformation during de/lithiation within the CuS particle is unraveled. For the first time, the particle expansion-induced electrode expansion is found to be more pronounced along the direction perpendicular to the cathode pellet, which leads to an anisotropic displacement at the particle- and electrode-level and could generate an analogous distribution of mechanical stress/strain. The combination of electrochemical measurements, tomography and pressure measurements promotes a comprehensive understanding of the reaction mechanism and the microstructural evolution in SSBs.

Keywords: synchrotron radiation, multiscale imaging, Li batteries, degradation mechanism.

References

[1] Jonathan Scharf, Mehdi Chouchane, Donal P. Finegan, et al, Nature Nanotechnol. 2022, 17, 446.

[2] Se-Ho Kim, Kang Dong, Huan Zhao, et al, J. Phys. Chem. Lett. 2022, 13, 36, 8416.

[3] Kang Dong, Y. Xu, J. Tan et al, ACS Energy Lett. 2021, 6, 1719−1728.

[4] Kang Dong, M. Osenberg, Fu Sun, et al, Nano Energy, 2019, 62, 11-19.

[5] Zhenggang Zhang, Kang Dong, Katherine A. Mazzio, et al, Adv. Energy Mater. 2023, 13, 2203143.

报告人简介：

董康，中国科学院高能物理研究所，副研究员/特聘青年研究员，博士生导师。入选中科院人才引进计划（青年项目）。2019 年博士毕业于柏林工业大学。2019-2023 年先后于柏林工业大学和亥姆霍兹柏林能源与材料中心进行博士后研究。2023 年 4 月加入中国科学院高能物理研究所。近年来发展了基于同步辐射的多模态跨尺度表征共联用技术，并从事基于同步辐射的高比能电池工作机理与失效机制研究。截止目前，在 Adv. Energy Mater, ACS Energy Lett., Materials Today, Nano Energy 等多个权威期刊发表论文三十余篇。主持包括国家重点研发计划（青年科学家）项目，国家自然科学基金青年基金在内课题 4 项。

报告人姓名：付亚楠
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：

上海光源快速 X 光成像线站及其应用

付亚楠*

中国科学院上海高等研究院，上海市浦东新区张衡路 239 号，201204

摘要正文：快速 X 光成像线站是一条可以实现从百皮秒级、微秒级到毫秒级时间分辨、并同时实现微米级空间分辨的高性能 X 射线成像光束线站，能够提供百皮秒级时间分辨的单脉冲超快 X 射线成像、微秒级时间分辨动态 X 射线成像、毫秒级时间分辨动态显微 CT 和高空间分辨批量显微 CT 等实验方法。

报告人姓名：鞠光旭
工作单位：北京大学
是否为学生：否
联系邮箱：

同步辐射原位技术及其在第三代半导体材料外延生长中的应用

北京大学　　鞠光旭

gxju@pku.edu.cn

摘要正文：理解 III 族氮化物外延薄膜生长过程中的表面动力学对于生长高质量可控材料至关重要。先进的相干 X 射线表征技术为原位观察晶体生长过程中的原子尺度动力学提供了新契机。随着 X 射线光源亮度的提升和相干 X 射线技术的发展，我们开发了一种高精度、高稳定性的同步辐射 X 射线原位监测 MOCVD 氮化物半导体外延生长系统，满足 III 族氮化物缺陷产生与演变研究需求。该系统具有高精度和稳定性[1,2]，到目前为止，该仪器可以实现先进的 X 射线技术，包括 X 射线光子关联光谱图（x-ray photon correlation spectroscopy (XPCS)）[3]和微束衍射[4]。该新装置和新方法不仅可测到二维原子岛表面的平均大小和间距，而且可监测到每个原子岛的动态变化。

本人将展示非极性面（m 面）GaN 在逐层生长模式下二维原子岛形核生长动力学过程。在此基础上揭示了一种新的生长动力学现象——形成于连续晶层上的原子岛的排布具有记忆效应，即某一层上的原子岛的排布和后续层之间是有关联的，且该关联具有多层持久性。实验结果结合蒙特卡洛模拟计算揭示了新晶层原子岛的初始形核往往会在现有岛的中心附近发生，后续的原子被吸附沉积在原子岛的边缘。该工作为研究 GaN 不同晶面上的生长模式和原子在表面的非稳定态沉积过程提供了新思路，开创了相干 X 射线原位监测薄膜生长过程中原子在表面动态沉积的新领域。

[1] Guangxu Ju, M.J. Highland, Angel Yanguas-gil, Carol Thompson, J.A. Eastman, Hua zhou, Sean Brennan, G. Brian Stephenson, and P.H. Fuoss, Review of Scientific Instruments, 88: 035113-1-035113-13(2017)

[2] Guangxu Ju, Matthew Highland, Carol Thompson, Jeffrey A. Eastman, Paul H. Fuoss, Hua Zhou, Roger Dejus, and G. Brian Stephenson, Journal of Synchrotron Radiation, 25: 1036-1047 (2018)

[3] Guangxu Ju, Dongwei Xu, M.J. Highland, J.A. Eastman, Carol Thompson, P.H. Fuoss, Andrew Ulvestad, Peter Zapol, Hua zhou and G. Brian Stephenson, Nature Physics, 15: 589-594 (2019)

[4] Guangxu Ju, Dongwei Xu, Carol Thompson, Matthew J. Highland, Jeffrey A. Eastman, Weronika Walkosz, Peter Zapol, G. Brian Stephenson, In-situ microbeam surface X-ray scattering reveals alternating step kinetics during crystal growth, Nature Communications, 12(1): 0-1721 (2021).

报告人姓名：赵红卫
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：zhaohw@sari.ac.cn

同步辐射红外显微光谱与成像技术及应用

赵红卫*，武玉，吉特，王杰，朱化春，彭薇薇，陈敏

中国科学院上海高等研究院，上海浦东新区张衡路 239 号，201204

*Email:zhaohw@sari.ac.cn

摘要正文：红外光谱与成像技术能够有效揭示材料的物质组成、分子结构及相互作用特性。上海光源红外谱学显微实验线站，光谱范围覆盖近、中、远红外太赫兹区域，具有透射、反射及 ATR 等多种测量模式和原位表征技术。同步辐射红外光具有高准直性、高亮度、光源尺寸小等特点，可聚焦到衍射极限，获得高信噪比的显微光谱，在对样品的微区探测表征方面比传统红外光源具有显著的优势[1, 2]。纳米显微红外则结合了 AFM 和红外谱学技术，可实现纳米尺度的物质结构和性质探测与分析，获得高分辨率和高灵敏度的物质成分和结构信息[3-5]。这些先进探测技术在生物医学、化学药物、材料科学和能源催化等领域前沿科学研究中发挥重要作用。

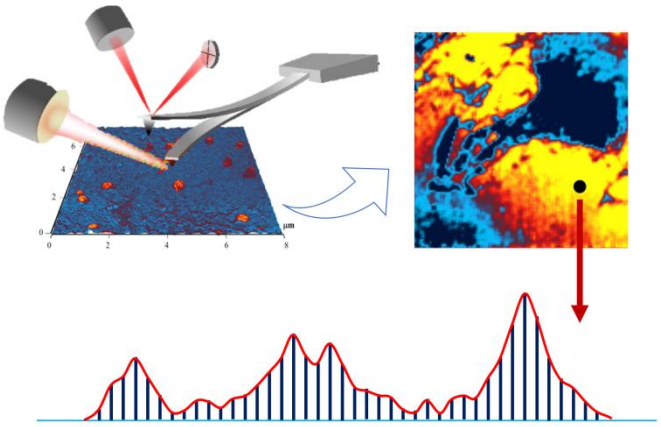


Fig. 1 Figure title in English

关键词：红外特征光谱；共振吸收；显微成像；红外纳米光谱成像

参考文献

[1] Jingting Hu, Zeyu Wei, Yunlong Zhang, et al. Edge-rich molybdenum disulfide tailors carbon-chain growth for selective hydrogenation of carbon monoxide to higher alcohols. *Nature Communications*, 2023, 14: 6808

[2] Yuanfeng Li, Tian Qin,Yuechang Wei, et al. A single site ruthenium catalyst for robust soot oxidation without platinum or palladium., *Nature Communications*, 2023, 14: 7149.

[3] Kim, S.Y., et al., High-fidelity probing of the structure and heterogeneity of extracellular vesicles by resonance-enhanced atomic force microscopy infrared spectroscopy. *Nature Protocols*, 2019. 14(2): 576-593.

[4] Kenkel, S., S. Mittal, and R. Bhargava. Closed-loop atomic force microscopy-infrared spectroscopic imaging for nanoscale molecular characterization. *Nature Communications,* 2020, 11(1): 3225.

[5] Te Ji, Huachun Zhu, Weiwei Peng, et al. Infrared microspectroscopy beamline BL06B at SSRF. *Nucl. Sci. Tech.,* 2024, 35: 2-8.

报告人/墙报展示人简介：

赵红卫，理学博士，副研究员，硕士生导师。毕业于中国科学院上海应用物理研究，美国 Rensselaer Polytechnic Institute太赫兹中心访问学者，目前就职于中国科学院上海高等研究院上海光源中心。长期从事生物化学和纳米材料红外技术表征与探测、光与物质相互作用微观机制、同步辐射红外谱学与显微成像、太赫兹技术及应用等研究。先后主持并参加多项国家自然科学基金项目、国家重点基础研究发展计划、国防科技创新项目和中科院领域前沿及方向性等研究项目。近年来发表包括PRL、JPCL、Nano Lett、Anaylst、PCCP等研究论文80多篇，申请专利多项。

报告人姓名：彭程
工作单位：华东理工大学资源与环境工程学院
是否为学生：否
联系邮箱：cpeng@ecust.edu.cn

同步辐射技术在微纳颗粒环境行为与风险识别中的应用

彭程[1,*]，梁玮瑜[1]，韩艳娜[1]，张卫[1]

[1]华东理工大学资源与环境工程学院，上海，200237

*Email: cpeng@ecust.edu.cn

摘要正文：纳米颗粒与微塑料的环境风险已成为近期研究前沿和热点问题。本研究重点利用多种同步辐射技术从组织和细胞水平揭示了土壤-生物中金属基纳米颗粒和微塑料的迁移转化规律。利用X射线吸收近边结构谱（XANES）、微束X射线荧光法（μ-XRF）、纳米级X射线断层扫描显微镜（nano-CT）等技术明确了CdSe量子点和纳米CuO与天然有机质、铁氧化物相互作用机制；发现纳米ZnO在水稻中积累量和转运能力显著高于纳米CuO和CeO_2，纳米颗粒能够进入植物根并到达内皮层却很难穿过凯氏带，且主要存在于细胞间隙中，纳米CuO易与半胱氨酸、柠檬酸和磷酸根结合。探究了整个水稻生育期纳米CuO在土壤-水稻系统中的迁移转化规律及其对水稻生长影响，发现CuO和胡敏酸结合态铜逐渐向Cu_2S和针铁矿吸附态铜转化；XANES结果表明水稻根、叶和谷壳中均有少量CuO存在，而在米粒中未发现CuO，但仍促进了米粒糊粉层中Cu累积。利用μ-XRF联合μ-XANES揭示了根表铁膜对水稻吸收运输纳米颗粒的影响及其作用机制，发现根表铁膜是水稻吸收和转运纳米CuO的阻隔层，可通过促进Cu(II)还原抑制纳米颗粒从根向茎叶迁移。$FeSO_4$和纳米零价铁(nZVI)作为外源铁会影响全生命周期中土壤-水稻体系中纳米CuO吸收和转运特征，外源铁可通过将纳米CuO还原为Cu_2O以及促进铁膜的形成，从而降低纳米颗粒的环境风险。此外，利用同步辐射傅里叶显微红外（SR-FTIR）成像发现蚯蚓肠道中微塑料发生了老化，并间接验证了微塑料对阻燃剂的载体效应。该研究可为科学评估微纳颗粒的环境行为和生态健康风险提供重要依据。

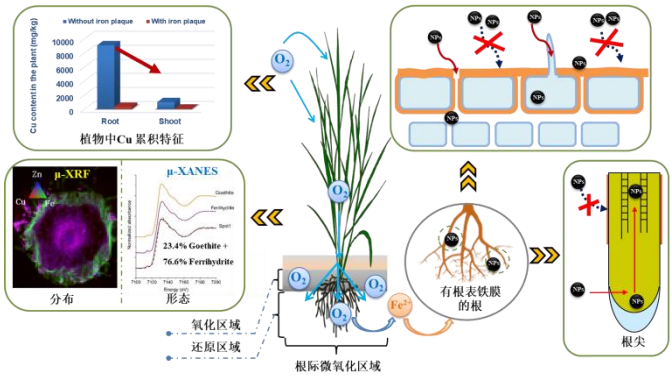


Fig. 1 Regulation mechanism of the iron plaque on the uptake and accumulation of CuO nanoparticles in rice seedlings

关键词：纳米颗粒；微塑料；植物；迁移转化；生物积累

参考文献

[1] **W. Liang, W. Zhang, X. Shao, K. Gong, C. Su, W. Zhang, C. Peng*. Organic matters adsorbed on goethite inhibited the heterogeneous aggregation and adsorption of CdSe quantum dots: Experiments and extended DLVO theory. Journal of Hazardous Materials, 2024, 467: 133769.**

[2] **Q. Zhang, P. Yuan, W. Liang, Z. Qiao, X. Shao, W. Zhang, C. Peng*. Exogenous iron alters uptake and translocation of CuO nanoparticles in soil-rice system: A life cycle study. Environment International, 2022, 168: 107479.**

[3] **P. Yuan, C. Peng*, J. Shi, J. Liu, D. Cai, D. Wang, Y. Shen. Ferrous ions inhibit Cu uptake and accumulation via inducing iron plaque and regulating metabolism of rice plants exposed to CuO nanoparticles. Environmental Science: Nano, 2021, 8: 1456-1468.**

[4] **C. Peng, S. Chen, C. Shen, M. He, Y. Zhang, J. Ye, J. Liu*, J. Shi*. Iron plaque: a barrier layer to the uptake and translocation of copper oxide nanoparticles by rice plants. Environmental Science & Technology, 2018, 52(21): 12244-12254.**
[5] **C. Peng, C. Xu, Q. Liu, L. Sun, Y. Luo, J. Shi*. Fate and transformation of CuO nanoparticles in the soil-rice system during the life cycle of rice plants. Environmental Science & Technology, 2017, 51(9): 4907-4917.**

报告人简介：

彭程，华东理工大学副教授，博士生导师，生态环境部重点实验室成员，EEH 期刊青年编委，中国土壤学会环境微塑料工作组青年委员。博士毕业于浙江大学。入选上海市青年科技英才扬帆计划。长期从事新污染物生态风险评估、土壤污染修复研究。主持国家自然科学基金、重点研发计划等 10 余项省部级以上课题和任务。以第一和通讯作者在 Environ. Sci. & Technol.等国内外环境领域权威期刊上发表 SCI 论文 40 余篇，授权专利 6 项，研究成果多次入选北京同步辐射装置和上海光源年度亮点工作，并被国际权威学术新闻媒体 Chemistry Views 报道。

报告人姓名：赵鸣宇
工作单位：清华大学
是否为学生：是
联系邮箱：zhaomy21@mails.tsinghua.edu.cn

Template-confinement-induced entropy effects for zeolite intergrowth

Mingyu Zhao[1†], Qinming Wu[2†], Xiao Chen[1,3*], Hao Xiong[1], Guo Tian[1], Yu Qiu[1], Litang Yan[1], Fengshou Xiao[2*], and Fei Wei1,[3*]

1Department of Chemical Engineering, Tsinghua University, Beijing, 100084, China.

2College of Chemical and Biological Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China

3Ordos Laboratory, Ordos, Inner Mongolia, 017000, China.

*Corresponding author. Email: chenx123@tsinghua.edu.cn (X.C.); fsxiao@zju.edu.cn (F.-S.X.);

wf-dce@tsinghua.edu.cn (F.W.)

†These authors contributed equally to this work.

Abstract: Entropy, stemming from the second law of thermodynamics, reflects the tendency of systems to evolve towards states of greater disorder and randomness. In the realm of structural design for zeolite, researchers intentionally introduce disorder to enhance mass transfer. However, existing strategies predominantly focus on regulating structure from the perspective of energy, with few efforts devoted to entropy effect control. In this study, we propose an entropy strategy by enhancing the translational and rotational confinement of large organic structure-directing agents (OSDAs), leading to an order of magnitude larger change in free energy than the enthalpy effect. This in turn promotes compensation in the configurational entropy of zeolite structures, leading to the formation of highly disordered intergrown zeolites (e.g. ITH/ITR, MFI/MEL, etc.). Our entropy strategy paves a novel perspective for the intergrowth of zeolites, holding significant guidance for the microscopic mechanisms underlying the formation of zeolite skeletons, including highly disordered porous materials.

Keywords: Zeolite; STEM; Entropy

报告人/墙报展示人简介：

赵鸣宇，本科毕业于中国石油大学（华东），目前于清华大学化学工程系魏飞教授课题组攻读博士学位，研究方向为：纳米尺度下分子筛合成与失活的原位表征

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

PCM结晶监测系统在功能性糖醇和甜味剂结晶过程的颗粒度控制

唐远旺 [1, *]

[1] 北京海菲尔格科技有限公司，北京，100022

*thomas.tang@hiferg.com

摘要正文：PCM 结晶监测系统能够实现对功能性糖醇和甜味剂结晶过程的实时监控并可根据监控结果实时调整过程工艺。PCM 可以实时记录结晶过程中的颗粒图像并实时分析晶体的颗粒度，同时给出晶体颗粒数量、晶体径长比、晶体生长速率等数据。PCM 探头直接插入具有一定真空度的结晶器中分析晶体颗粒度，避免了取样后进行离线测试的不便和误差，可以真实反映结晶过程中晶体的变化情况，包括晶核形成、晶核数量、晶体生长、二次成核监控、过程颗粒度监控等。PCM 结晶监测系统已经成为获得高质量晶体产品、快速实现定制指定颗粒度晶体产品的有效手段。

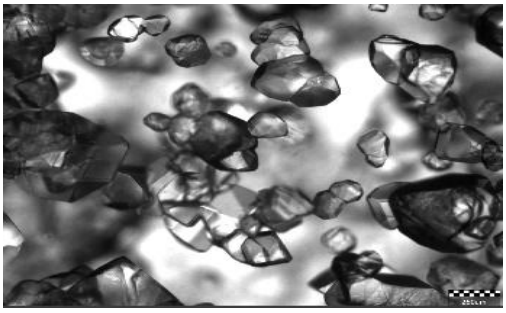


Fig 1. Particle image of xylitol

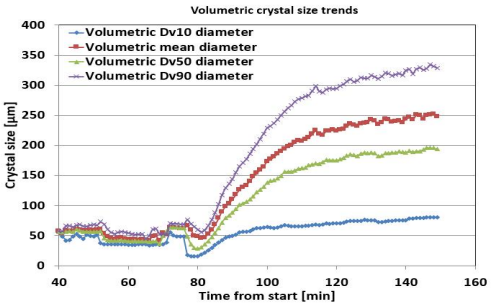


Fig 2. Particle size trends of xylitol crystallization

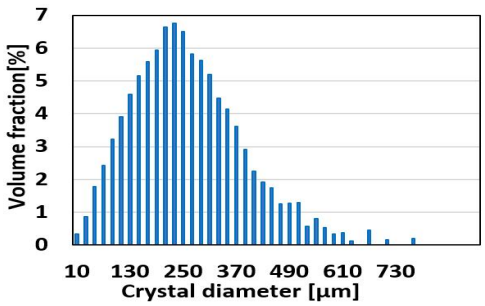


Fig 3. Particle size distribution of xylitol crystals

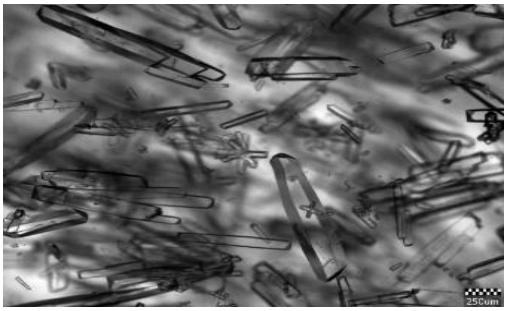
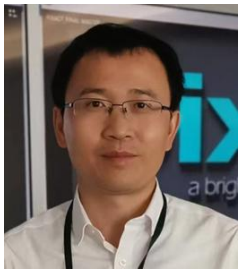


Fig 4. Particle image of xylose

关键词：PCM；结晶监测；实时在线监控；晶体颗粒度；功能性糖醇

墙报展示人简介：



唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器行业的技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

附：墙报展示人非学生

Research on Size Distribution and Trends of Micro-nano Bubble using Pixact Online Bubble Monitoring System

Yuanwang Tang[1, *]

[1]Beijing Hiferg Technology Co., Ltd., Beijing, 100022

*thomas.tang@hifer.com

The size distributions and trends of micro-nano bubbles that prepared with different parameters were investigated using Pixact online bubble monitoring system(CCPT12) and micro-nano bubble generator. The probe of Pixact online bubble monitoring system was inserted into the liquid mixture of bubble and water to record the images of bubbles that is generated from micro-nano bubble generator in time. Statistical parameters of bubbles such as: size distribution, bubble counts number and their trends with time were analyzed based on the images recorded. The results of different parameters was compared and the reason of generating different bubble size was discussed.

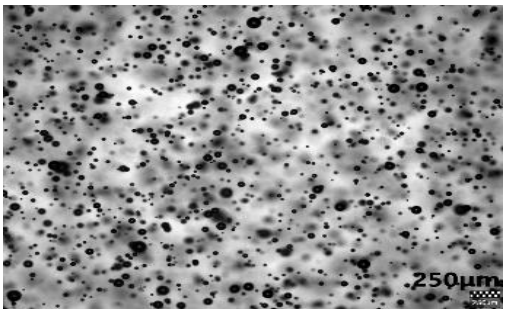


Fig 1. Image of micro bubbles

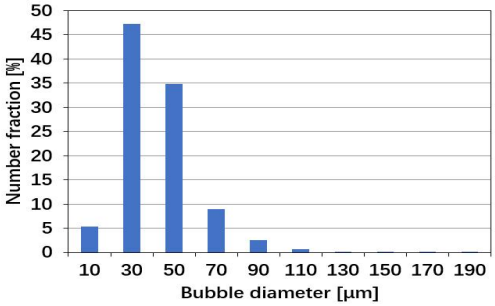


Fig 2. Size distribution of micro bubbles

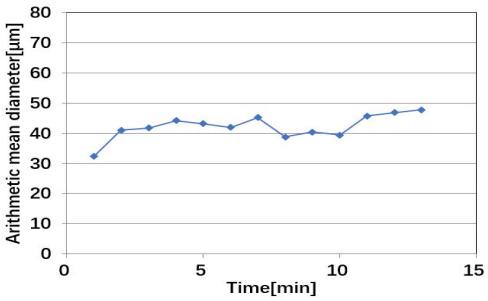


Fig 3. Trend of bubble size with time

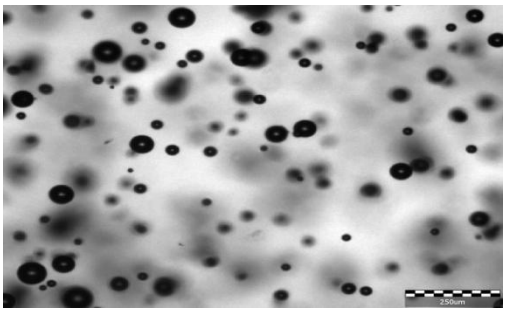
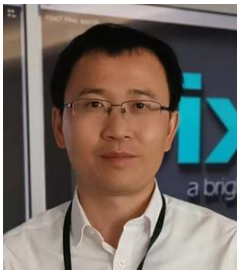


Fig 4. Zoomed Image of micro bubbles

Keywords: PBM; micro-nano bubbles; bubble size; bubble counts

墙报展示人简介：



唐远旺现任北京海菲尔格科技有限公司技术经理，2006 年北京化工大学硕士研究生毕业，毕业后一直从事化工领域技术工作，具有十六年以上的仪器分析行业技术和服务经验。曾担任多家知名跨国仪器公司的技术主管和技术经理职务。多年来主要从事化工过程工艺优化、材料分析、药物晶型研究及化工过程在线监测等相关工作。在材料热分析、精细化学品结晶工艺研究、晶型控制、矿物加工过程在线监测方面积累了丰富的理论与实践经验。多年来参与出版多部化工领域技术专著，并独自翻译出版多部国外化工领域著作。

附：墙报展示人非学生

报告人姓名：刘晰
工作单位：宁夏大学化学化工学院，上海交通大学化学化工学院
是否为学生：否
联系邮箱：thomas.tang@hiferg.com

原子分辨二次电子成像用于纳米颗粒表面原子结构原位研究

刘晰[1, 2*]，秦天[2]，陈立桅[2]

[1]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] 上海交通大学，化学化工学院，物质科学原位中心，上海，200210

*Email: liuxi@sjtu.edu.cn

摘要正文：异相催化反应中，催化剂纳米颗粒表面原子结构决定了其催化性能。但是直接表征纳米颗粒催化剂表面的原子结构对研究人员来说是一个巨大的挑战。虽然透射电子显微镜能够实现高分辨的原子成像，但是信号中混合了过多的体相信息，难以直接用于表面研究。包括隧道扫描显微镜和原子力显微镜在内的探针技术主要用于大块单晶材料的表面原子结构表征，很难施用于纳米颗粒表面研究，更难以对同一区域进行原位动态演化研究。报告人团队发展了原子分辨的二次电子成像研究，可以对包括氧化物、金属、卤化物、二维材料在内的多种纳米颗粒进行原子分辨表面成像，揭示了透射电镜无法辨别的复杂表面原子结构，并进一步对真实化学环境下表面原子结构的演化进行了记录，显示了催化剂在化学环境下亚稳态活性位点可能存在的结构，为理解异相催化剂活化过程和构效关系提供了原子尺度的证据。

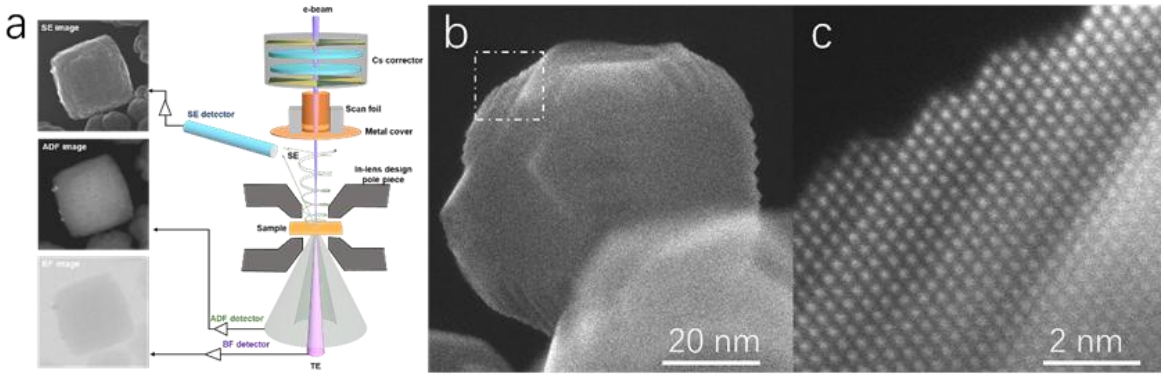


Fig. 1a) Simultaneous acquisition of bright field (BF), annular dark field (ADF), and secondary electron (SE) images in STEM; b) SE image of CeO_2 NPs; c) Atomic-resolved SE image of the stepped region marked by the dashed line in b).

关键词：原子分辨二次电子成像；原位电镜；表面原子结构

参考文献

[1] **B. He, X. Tao, L. Li, X. Liu, and L. Chen, Environmental TEM study of the dispersion of Au/α-MoC: From nanoparticles to two-dimensional clusters, *Nano Lett.* 2023, 23: 10367–73.**

[2] **R. J. Lewis, K. Ueura, X. Liu, Y. Fukuta, T. E. Davies, D. J. Morgan, L. Chen, J. Qi, J. Singleton, J. K. Edwards, S. J. Freakley, C. J. Kiely, Y. Yamamoto, and G. J. Hutchings, Highly efficient catalytic production of oximes from ketones using in situ–generated H2O2, *Science 2022*, 376: 615–20.**

Title of the Abstract Atomic-Resolution Secondary Electron Imaging for In Situ Study of Surface Atomic Structure of Nanoparticles

Xi Liu[1,2*], Tian Qin[2], Liwei Chen[2]

[1] School of Chemistry and Chemical Engineering, Ningxia University, , Yinchuan, 750021

[2] School of Chemistry and Chemical Engineering, In-Situ Center for Physical Sciences, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai, 200210

* liuxi@sjtu.edu.cn

In heterogeneous catalytic reactions, the surface atomic structure of catalyst nanoparticles determines their catalytic performance. However, directly characterizing the atomic structure of the surface of nanocatalysts is a significant challenge for researchers. Although transmission electron microscopy can achieve high-resolution atomic imaging, the signal often contains excessive bulk information, making it difficult to use directly for surface studies. Probe techniques, such as scanning tunneling microscopy and atomic force microscopy, are primarily used to characterize the surface atomic structure of bulk single-crystal materials, making them unsuitable for studying nanoparticle surfaces, especially for in situ dynamic evolution studies in the same region. Our team has developed atomic-resolution secondary electron imaging, which allows for atomic-resolution surface imaging of various nanoparticles, including oxides, metals, halides, and two-dimensional materials. This technique reveals complex surface atomic structures that transmission electron microscopy cannot distinguish and records the evolution of surface atomic structures under real chemical environments. It shows the possible existence of metastable active sites in catalysts under chemical conditions, providing atomic-scale evidence for understanding the activation process and structure-activity relationships of heterogeneous catalysts.

Keywords: Atomic-resolved secondary electron imaging; in situ transmission electron microscopy; surface atom configuration.

References

[1] B. He, X. Tao, L. Li, X. Liu, and L. Chen, Environmental TEM study of the dispersion of Au/α-MoC: From nanoparticles to two-dimensional clusters, Nano Lett. 2023, 23: 10367–73.

[2] R. J. Lewis, K. Ueura, X. Liu, Y. Fukuta, T. E. Davies, D. J. Morgan, L. Chen, J. Qi, J. Singleton, J. K. Edwards, S. J. Freakley, C. J. Kiely, Y. Yamamoto, and G. J. Hutchings, Highly efficient catalytic production of oximes from ketones using in situ−generated H2O2, Science 2022, 376: 615–20.

报告人/墙报展示人简介：

刘晰，教育部长江特聘学者，宁夏大学教授，上海交通大学客座研究员。本科毕业于中国科技大学，博士毕业于马普协会 Fritz-Haber 研究所，2015 年入职中科合成油有限公司表面实验室，2019 年入职上海交通大学化学化工学院。主要从事异相催化、绿色化工和先进表征方法学及表面科学研究。在包括 Science，Nat. Energy, Nat. Synth.，Nat. Catal., Nat. Comm., JACS, Angew. Chem., ACS Catal. Nano Lett.等国际知名科学期刊共发表 SCI 论文超过 180 余篇。

附：墙报展示人非学生

报告人姓名：满睿琪
工作单位：北京大学环境科学与工程学院
是否为学生：否
联系邮箱：ruiqiman@stu.pku.edu.cn

Direct observation of chemical morphology, mixing state, and water uptake of urban submicron aerosol individual particles

Ruiqi Man[1], Yishu Zhu[1,†], Zhijun Wu[1,2,*], Peter Aaron Alpert[3,‡], Bingbing Wang[4], Jing Dou[5,§], Qi Chen[1], Shiyi Chen[1], Xiangrui Kong[6], Markus Ammann[3], Min Hu[1]

[1] State Key Joint Laboratory of Environmental Simulation and Pollution Control, College of Environmental Sciences and Engineering, Peking University, 100871, Beijing, China

[2] Collaborative Innovation Center of Atmospheric Environment and Equipment Technology, Nanjing University of Information Science and Technology, 210044, Nanjing, China

[3] Laboratory for Environmental Chemistry, Paul Scherrer Institute, 5232 Villigen, Switzerland

[4] College of Ocean and Earth Sciences, State Key Laboratory of Marine Environmental Science, Xiamen University, 361102, Xiamen, China

[5] Institute for Atmospheric and Climate Science, ETH Zürich, 8092 Zürich, Switzerland

[6] Department of Chemistry and Molecular Biology, University of Gothenburg, 41390 Gothenburg, Sweden

[†] now at Department of Earth and Planetary Science, University of California Berkeley, Berkeley, CA 94720, USA

[‡] now at XRnanotech Gmbh, Parkstrasse 1, 5234 Villigen, Switzerland

[§] now at Institute for Atmospheric and Earth System Research, University of Helsinki, 00014 Helsinki, Finland

*zhijunwu@pku.edu.cn

Abstract. Determining chemical composition and physicochemical properties of aerosols is of much importance to atmospheric multiphase and heterogeneous chemistry. However, the task is challenging due to the complexity, diversity, and heterogeneity of aerosols. In this study, we investigated the size distribution, chemical morphology, mixing state, and water uptake of ambient individual submicron aerosol particles under dry and humid conditions (RH = 86%) using scanning transmission X-ray microscopy coupled with near-edge X-ray absorption fine structure spectroscopy. We imaged and quantified the mixing states of organic carbon (OC), inorganic matter (In), and elemental carbon (EC) typical soot, categorizing them into OC, OCIn, OCEC, and OCInEC types. OCIn was the predominant mixing state, accounting for 73.1 ± 7.4%, indicating a highly internally mixed particle population. Inorganic material was mainly located in the center of particles and coated by organic matters, generally presenting a core-shell structure. Approximately a quarter of the individual particles contained soot, which was mostly distributed at the edge of the particles. As RH rose from 0% to 86%, 41.6% of particles adsorbed water, evidenced by the enhanced water content and observable morphological changes. The main type of water-adsorbing particle mixing state was OCIn (76.8%). The findings enhance our understanding of the mixing state and physicochemical properties of various chemical components in ambient aerosols, particularly under typical urban pollution and high oxidative conditions. This knowledge aids in clarifying their atmospheric processes and provides insights into their environmental impacts.

Keywords: ambient particles; water uptake; chemical morphology; mixing state; STXM

报告人/墙报展示人简介：

满睿琪，女，吉林大学理学学士，北京大学环境科学与工程学院博士在读，研究方向为环境气溶胶的物理化学性质及其相行为，导师为吴志军研究员。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

报告人姓名：张昊
工作单位：中国科学院上海高等研究院，深圳大学化学与环境工程学院
是否为学生：否
联系邮箱：zhanghao@sari.ac.cn

基于同步辐射 X 射线散射的国产碳纤维缺陷结构表征

张昊[1,2]，田丰[1]，朱才镇[2]，李秀宏[1,*]，徐坚[2,*]

[1]中国科学院上海高等研究院，上海 200100

[2]深圳大学化学与环境工程学院，广东 深圳 518060

E-mail: zhanghao@sari.ac.cn

摘要正文：高性能碳纤维因其高强度、高模量和低密度的优越性能成为国民经济和国防安全密切相关的战略关键材料，是战略核武器和新一代战机等先进武器装备以及新型卫星、飞船等国防高技术必不可少的关键结构材料(JU等, 2013; LIU等, 2018)。目前国外一直对我国实行“高端产品禁运、低端产品倾销、先进技术封锁”战略，突破国产高性能碳纤维规模化制备技术迫在眉睫。基于上海同步辐射光源10U1线站搭建的高通量纤维表征平台在线模拟工业生产碳纤维预氧化工艺。通过该平台中的软硬件结合表征，可快速探测工艺条件中碳纤维缺陷结构演变，优化工业生产工艺，解决超高性能碳纤维关键科学问题。助推国产高性能碳纤维的高性能化、高效化、产品系列化和关键技术成熟化等实际工业问题。

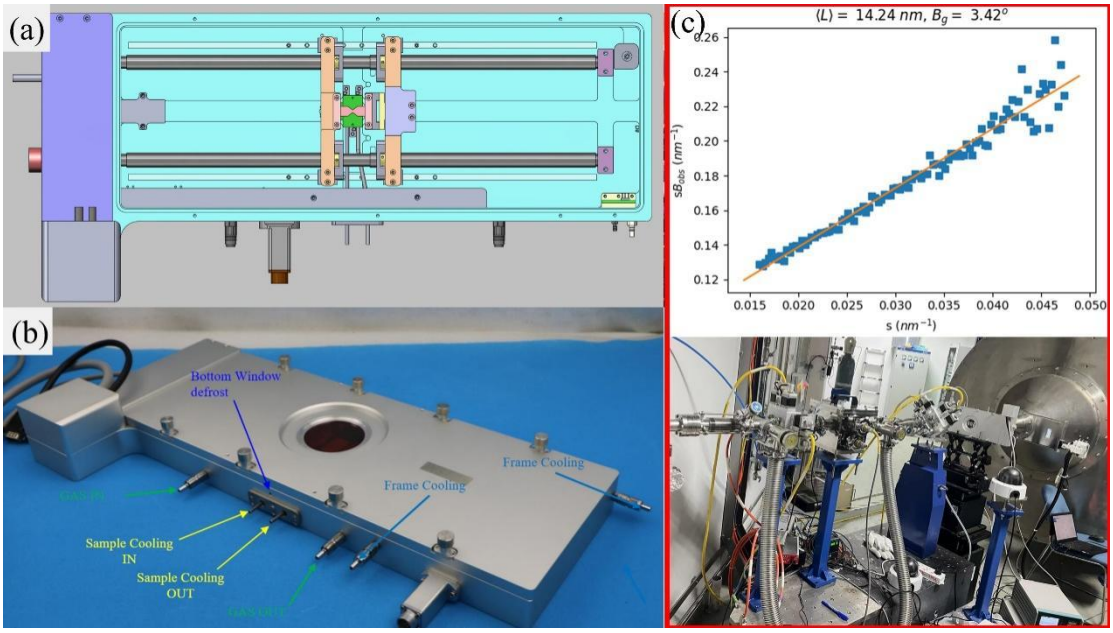


图1：(a) 适用于上海同步辐射光源散射线站的In-situ实验装置主体部分设计图；(b) 由Insetc公司代工生产的原位装置实体图；(c) 实时输出的碳纤维缺陷拟合结果及高通量表征平台在10U1线站上的实际工作照片。

关键词：纳米颗粒；微塑料；植物；迁移转化；生物积累

参考文献

[1]**Ju A, Guang S, Xu H, Effect of comonomer structure on the stabilization and spinnability of polyacrylonitrile copolymers[J]. Carbon, 54: 323-335.**

[2]**Liu H, Luo Q, Zhang S et.al, New comonomer for polyacrylonitrile-based carbon fiber: Density functional theory study and experimental analysis[J]. Polymer, 153(1): 369-377.**

报告人简介：

张昊，男，民盟盟员。 工学博士，师从深圳大学徐坚教授，浙江理工大学郭玉海研究员。现任中国科学院上海高等研究院，上海同步辐射光源中心助理研究员。第十届中国核学会辐射研究与应用分会理事。主要从事高性能纤维（碳纤维、UHMWPE 纤维）加工及结构调控、同步辐射 X 射线小角散射原位装置设计。目前已发表 Adv. Mater.、ACS Macro Lett.、Compos Sci Technol.、ACS Appl Mater Interfaces.等期刊文章 13 篇，已授权发明专利两项、2022 年荣获中国化纤学会优秀学术论文二等奖。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

报告人姓名：吕欣
工作单位：上海交通大学
是否为学生：是
联系邮箱：jlyin@sjtu.edu.cn

气泡降压析出的微观表征研究

吕欣[1,*]，尹俊连[1,*]，王德忠[1]

[1]上海交通大学，上海，200240

*Email :alzn.11@sjtu.edu.cn，*Email: jlyin@sjtu.edu.cn

摘要正文：气泡析出是一种常见的现象，例如火山喷发时岩浆中的脱气行为，潜水员的减压病，碳酸饮料、香槟的起泡行为等，其本质是压力下降时气体溶解过饱和导致的析出。目前，许多学者对气体过饱和导致的成核（nucleation）及析出（desorption）进行了研究。经典成核理论（Classical Nucleation Theory, CNT）基于经典热力学理论建立了气泡成核的能垒与气泡临界直径的关系，然而CNT预测的气泡析出临界过饱和度与实验测量值相差数个量级，有学者推测该差异来源于经典热力学无法准确描述纳米气核的性质，并且与表面的粗糙度、润湿性等性质高度相关[1-5]。因此，有必要对降压析出过程中纳米气泡形貌的变化进行动态显微表征。目前，已发展了原子力显微镜（AFM）[6]、全内反射荧光显微（TIRF）[7]、同步辐射显微镜（SXTM）[8]等实验方法，可用于表面气核的研究。目前，对降压的气泡析出的微观动态过程较少，为了探索气体在不同特性固体壁面上的异相成核析出与表面纳米气泡的关系，本文采用共聚焦显微镜对碳酸饮料在亲水和疏水玻璃表面的析出长大行为进行了微观表征，其中，疏水玻璃经过了硅烷化反应表面改性处理。本文发现，碳酸饮料在亲水玻璃（接触角10°）上的析出成核点比在疏水玻璃（接触角110°）上多，是因为光滑的亲水玻璃上无法形成纳米气泡，初步实验结果可以支持表面纳米气泡的存在有利于气泡成核析出的结论。

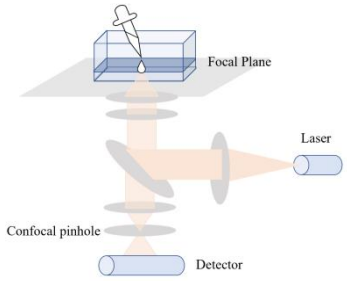


Fig. 1 Experimental setup

关键词：气泡成核动力学；过饱和析出；共聚焦显微镜

参考文献

[1] **JONES S F. Bubble nucleation from gas cavities — a review. Chemical Engineering Science, 1999, 53(1): 169-73.**

[2] **LUBETKIN S D. Why is it much easier to nucleate gas bubbles than theory predicts. Langmuir, 2003, 19: 2575-87.**

[3] **MAHESHWARI S, VAN KRUIJSDIJK C, SANYAL S, et al. Nucleation and Growth of a Nanobubble on Rough Surfaces. Langmuir, 2020, 36(15): 4108-15.**

[4] **MCHALE J P, GARIMELLA S V. Bubble nucleation characteristics in pool boiling of a wetting liquid on smooth and rough surfaces. International Journal of Multiphase Flow, 2010, 36(4): 249-60.**

[5] **LEE J-W, KIM S, LEE S, et al. Exponential promotion and suppression of bubble nucleation in carbonated liquid by modification of surface wettability. Applied Surface Science, 2020, 512: 145709.**

[6] **ZHANG X, CHAN D Y C, WANG D, et al. Stability of Interfacial Nanobubbles. Langmuir, 2013, 29(4): 1017-23.**

[7] **CHAN C U, OHL C-D. Total-Internal-Reflection-Fluorescence Microscopy for the Study of Nanobubble Dynamics. Physical Review Letters, 2012, 109(17): 174501.**

[8] **ZHOU L, WANG X, SHIN H-J, et al. Ultrahigh Density of Gas Molecules Confined in Surface Nanobubbles in Ambient Water [J]. Journal of the American Chemical Society, 2020, 142(12): 5583-93.**

报告人简介：

吕欣，上海交通大学，机械与动力工程学院，核科学与技术专业在读硕士研究生，主要研究方向为气液两相流，气泡成核动力学。

报告人是否为学生：是

报告人姓名：Bing Zhao
工作单位：中国科学技术大学，中国科学院大连化学物理研究所
是否为学生：否

In situ studies on the varying spatial distribution of Co active sites in Silicalite-1 zeolites for propane dehydrogenation

Bing Zhao[1,2], Mingbin Gao[3,*], Mao Ye[2,*],Zhongmin Liu[2]

[1] Department of Chemical Physics, University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui, China

[2] National Engineering Research Center of Lower-Carbon Catalysis Technology, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian, Liaoning, China

[3] Department of Chemical and Biochemical Engineering, College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen, Fujian, China

The propane dehydrogenation (PDH) reaction has been extensively developed and applied as a key technology for propylene production. Simultaneously, the introduction of metal active centers into zeolites and other porous materials has achieved significant success in industrial catalysis. Most reported studies have focused on enhancing catalytic performance or investigating coke formation kinetics. However, aggregated and averaged studies often fail to capture the complex, localized information within specific reaction zones. In this work, we employed in situ spectroscopy to explore the spatial distribution of active sites within zeolite monocrystals during the PDH reaction, examining coke deposition and temperature variations across different regions. We analyzed how these local heterogeneities influence catalytic performance. Our findings reveal that different regions of the zeolite monocrystal exhibit varying temperature trends and coke amounts during the reaction. Specifically, regions with greater temperature decreases showed less coke formation and lower propane conversion rates. This suggests that the catalytic performance of the PDH reaction in this system is governed by temperature kinetics rather than the extent of coke deposition. Our in situ study of spatially distributed active sites within zeolite monocrystals provides deeper insights into structure-function relationships and catalytic mechanisms.

Keywords: Propane dehydrogenation; In situ spectroscopic; Local heterogeneity; Temperature monitoring; Catalytic performance evaluation

报告人姓名：David Jacob
工作单位：Cordouan Technologies
是否为学生：否

New approach for monitoring of nano particles kinetcis with time resolved in-line DLS size characterization under various conditions.

David Jacob PhD
([1] Cordouan Technologies, Pessac, France.)

Abstract: Dynamic Light Scattering (DLS) is a pivotal technique for the analysis of particle sizes in nanoscale systems. Traditional methods of DLS, however, often require ex-situ analysis, which can miss critical dynamics influenced by environmental conditions. We aim to introduces a novel approach using time-resolved inline DLS to continuously monitor the kinetics of nanoparticles under varying conditions such as temperature, pressure, and magnetic fields. Our methodology involves the integration of a time-resolved DLS system into a reaction environment, allowing for real-time monitoring and data collection. This approach enables the observation of nanoparticle behavior and transformation processes as they occur, providing insights into dynamic size changes and aggregation phenomena.

Keywords: In-Situ, in-line DLS, time-resolved, SAXS, SANS

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

报告人姓名：王兴亚
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：wangxingya@sari.ac.cn

上海光源膜蛋白线站 BL17UM 微聚焦实验平台介绍

王兴亚[1]，王玉柱[1*]，王伟玮[1]，杨予琪[2]，武丽杰[2*]，汪启胜[1*]

[1]上海光源，中国科学院上海高等研究院，上海市浦东新区张衡路 239 号，201204

[2]上海科技大学, 上海市浦东新区华夏中路 393 号，201210

*Email: wangxingya@sari.ac.cn

摘要正文：上海光源高性能膜蛋白晶体学线站（BL17UM）是一条具备微米尺寸蛋白质晶体结构解析能力的光束线站，可进行微米尺寸膜蛋白晶体和常规尺寸蛋白晶体衍射数据采集。线站配备多层膜单色器（DMM）和双晶单色器（DCM）切换运行。线站 X 射线能量范围 5-25 keV。通过两级 KB 镜聚焦光路设计，样品点光斑尺寸可在 1~20μm 范围内调节。多层膜单色器模式下，样品点光斑尺寸在 1×1μm^2 时光子通量仍大于 1.6×10^{12} phs/s，达到国际同类线站领先水平。

BL17UM 配置了多款先进实验站设备，例如 Eiger2X16M 高性能面探测器，有效探测面积 311.1×327.2 mm^2，最大帧频 130Hz；衍射仪为 MD3-UP 型号高精度衍射仪，SOC≤0.1μm；机械手为 IRELEC 公司生产的新型双抓手机械手（ISARA）。实验站数据采集系统为 MxCube3 系统，为基于 Web 界面的通用晶体衍射线站控制与数据采集系统。

BL17UM 今年建立了高压微束衍射实验平台，可以开展高压粉末/单晶衍射等相关实验。平台配置同轴相机系统，可原位观测样品和样品点光斑；样品点距镜箱法兰大于 200mm，可配置多种原位测量装置；样品点至探测器距离为 280-800mm。基于六轴多维高精度运动台，线站还可以开展多种微聚焦衍射散射和掠入射衍射（μGIWAXS）等实验方法。

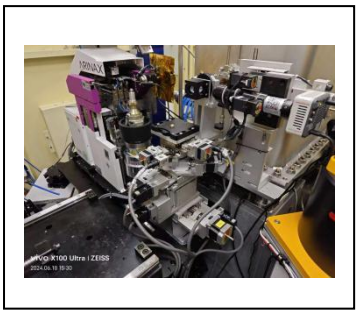


Fig. 1 High pressure physics experiment platform in BL17UM

关键词：同步辐射；晶体；衍射；高压。

报告人/墙报展示人简介：

王兴亚，上海光源 BL17UM 线站运行负责人，2013 年开始从事纳米气泡相关研究。主持国家自然科学基金 1 项，2020 获中国颗粒学会自然科学奖二等奖、2021 获陕西高等学校科技技术奖二等奖，主要研究方向：基于同步辐射技术的纳米气泡相关研究。

附：请在此处注明报告人是否为学生：否

报告人姓名：周利民
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：zhoulm@sari.ac.cn

同步辐射软 X 射线散射方法在能源催化研究中的应用

周利民[1,*]，陈振华[1]，李海涛[1]，邹鹰[1]
[1]中国科学院上海高等研究院，上海市浦东新区张衡路 239 号，201204
*zhoulm@sari.ac.cn

摘要正文：上海光源能源材料线站(E-line)软分支（BL20U2）是上海光源(二期)线站工程建设的线站之一，于 2023 年完成验收并正式对用户开放，为目前国内首个包含“两站三谱仪”的软 X 射线散射系统。线站所搭建的三台散射谱仪分别提供软 X 射线共振发射谱学（RXES），软 X 射线弹性散射(REXS)和有机材料软 X 射线共振散射(RSoXS)方法。其中软 X 射线共振发射谱站主要面向能源材料和催化方向，能量分辨率优于 0.1eV(65 meV@445eV)，达到国际先进水平，能够对包括轻元素 C，N，O 等的 K 边和金属元素的 L 边和大部分过渡金属的 M 边进行共振吸收和发射谱研究，是探究能源材料和电催化材料中的元素价态和电子结构变化的利器。

目前本线站对于能源催化材料的软 X 射线散射表征技术已发展成熟，包括手套箱快速传样、样品自动化扫描、CCD 图像算法处理和高效率的元素二维能量 mapping 等。截止 2024 年本线站已经完成用户 26 个课题，提供用户机时 1368 小时，用户群体研究内容主要为电池材料和催化相关方向，目前已发表文章 2 篇一区文章(Angew. Chem. Int. Ed. 63, e202403521 (2024), Energy Storage Mater. 71, 103587 (2024))。线站欢迎具有电池材料领域重要研究价值体系的课题申请和合作研究，并积极为产业应用研究的企业用户提供高质量检测服务。

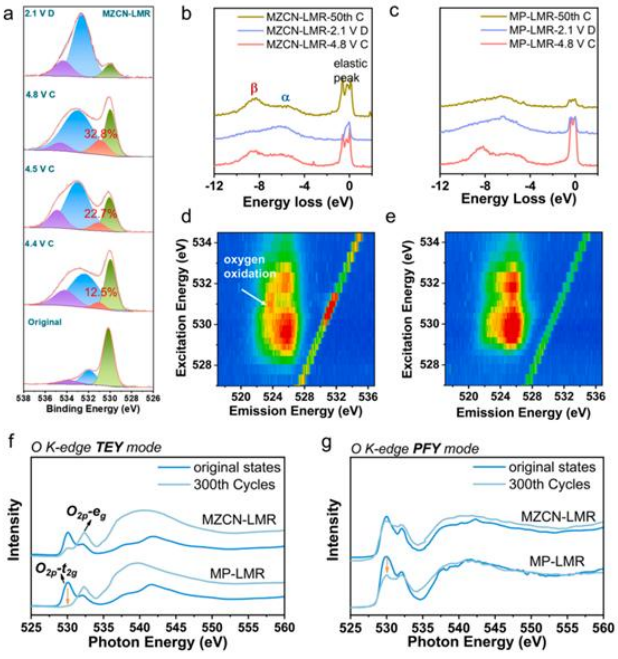


图 1 通过表面高熵策略提高富锂锰基氧化物正极的稳定性

参考文献

[1]Gel'mukhanov, F., Odelius, M., Polyutov, S. P., Föhlisch, A. & Kimberg, V. Dynamics of resonant x-ray and Auger scattering. *Rev. Mod. Phys.* **93**, 035001 (2021).

[2]Ament, L. J. P., van Veenendaal, M., Devereaux, T. P., Hill, J. P. & van den Brink, J. Resonant inelastic x-ray scattering studies of elementary excitations. *Rev. Mod. Phys.* **83**, 705–767 (2011).

[3]Yang, W. Oxygen release and oxygen redox. *Nat. Energy* **3**, 619–620 (2018).

[4]Yang, Y. *et al.* Enhancing the stability of Li-Rich Mn-based oxide cathodes through surface high-entropy strategy. *Energy Storage Mater.* **71**, 103587 (2024).

[5]Li, Q. *et al.* Improving the oxygen redox reversibility of Li-rich battery cathode materials via Coulombic repulsive interactions strategy. *Nat. Commun.* **13**, 1123 (2022).

报告人姓名：李秀宏
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：lixiuhong@sari.ac.cn

上海光源超小角 X 射线散射线站介绍及应用

李秀宏*，滑文强，田丰，周平，杨春明，缪夏然

中国科学院上海高等研究院，上海浦东新区张衡路 239 号，邮编：201204

*Email: lixiuhong@sari.ac.cn

摘要正文：上海光源时间分辨 USAXS 线站是上海光源线站工程 3 条超长线之一，USAXS 线站 2020 年 12 月完成中国科学院组织的测试验收， 2024 年 5 月完成国家正式验收。USAXS 线站具有高通量、快时间分辨、微米级聚焦光斑的特点，线站致力于高分子材料和纳米多孔材料 nm~μm 多尺度范围内的结构演变研究。线站设计采用一线三站式结构，三个实验站分别是 USAXS 实验站、微聚焦 SAXS 实验站和工业应用实验站; 其中工业应用实验站重点支持国内产业技术攻关,已在被国外“卡脖子”的超高强度碳纤维和高分子薄膜材料等产业应用方面取得一系列技术突破。中石化、安徽皖维、长盛科技等大型企事业单位已多次在 USAXS 工业应用实验站开展纤维和薄膜材料工业级加工过程中的原位结构检测，为我国材料工程化量产技术达到全球先进水平贡献了重要力量。

关键词：同步辐射；散射；高通量；高分子；纤维

报告人简介：

李秀宏，中国科学院上海高等研究院研究员，上海光源时间分辨 USAXS 线站负责人，散射组组长。负责建设完成国内第一条超长时间分辨 USAXS 线站。2000 年本科毕业于山东大学物理系，2005 年于中国科学院物理研究所获博士学位。2008 年进入中国科学院上海应用物理研究所工作。2018 年转入中国科学院上海高等研究院。是国家自然科学基金和科技部重点研发计划课题负责人。目前主要从事同步辐射散射技术在高分子材料领域的研究工作。

报告人姓名：蒋之森
工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：jiangzs@sari.ac.cn

上海光源纳米探针线站介绍

蒋之森[1]，何燕[1,*]，蒋晖[1]，于怀娜[1]，梁东旭[1]，李爱国[1,*]

[1] 中国科学院上海高等研究院，上海市浦东新区张江高科技园区海科路 99 号，201210

*Email: hey@sari.ac.cn, liag@sari.ac.cn

摘要正文：硬X射线纳米探针光束线（BL13U）属于上海光源二期项目。该线站旨在实现从 50 纳米到 10 纳米的高空间分辨率同步辐射表征实验。光束线的 X 射线能量范围为 5-25 keV，可探测元素周期表中的大多数元素。为满足高能量分辨率或高光子通量的实验要求，设计了两种运行模式。X 射线荧光（XRF）、衍射（XRD）和相干衍射成像（CDI）是 BL13U 的主要实验技术。本文介绍了线站光束线系统、实验站配置以及实验方法。

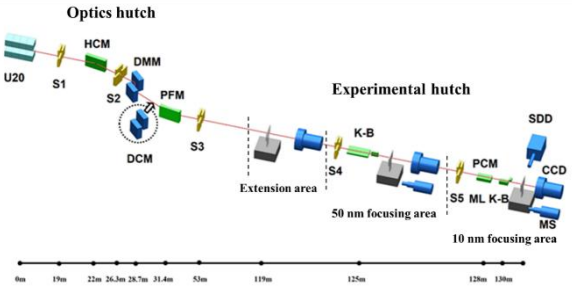


Fig. 1 Schematic layout of the hard X-ray nanoprobe beamline

关键词：上海光源；硬X射线纳米探针；X射线纳米聚焦

参考文献

[1] **U. Johansson, D. Carbone, S. Kalbfleisch et al. NanoMAX: the hard X-ray nanoprobe beamline at the MAX IV Laboratory. J. Synchrotron Radiat. 2021. 28, 1935–1947.**

[1] **L.X. Yin, R.Z. Tai, D. Wang et al. Progress and future of Shanghai synchrotron radiation facility. J. Vac. Soc. Jpn. 2016. 59, 198–204.**

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

报告人姓名：宋三召
工作单位：国科温州研究院
是否为学生：否
联系邮箱：songsanzhao@ucas. ac. cn

精准调控不同磁性Fe203之间的相变促进磁场条件下的析氧性能

宋三召 [1*]

[1] 国科温州研究院，浙江省温州市龙湾区金联路 1 号，325001

*Email: songsanzhao@ucas.ac.cn

摘要正文：磁场可以通过增强铁磁性催化剂自旋选择性的电子转移来促进析氧反应(Oxygen Evolution Reaction，OER)的反应动力学。通过控制Co离子添加量实现了精确调控反铁磁性 α -Fe_2O_3相向铁磁性 γ -Fe_2O_3相的转变，在阳极处施加恒定外磁场(200 mT)，对催化剂OER性能具有显著增强效果。理论研究表明， γ -Fe_2O_3中Fe和O原子相同的自旋构型提供自旋传导通道，增强了从反应物中选择性去除与 γ -Fe_2O_3具有相同自旋取向电子的能力，进而加速OER过程中三重态氧分子的积累，促进了OER性能的提升

关键词：析氧反应；磁性；Fe_2O_3;相转变；X射线吸收谱

参考文献

[1] **G. Song, M. Wei, J. Zhou, L. Mu, and S. Song Modulation of the Phase Transformation of Fe2O3 for Enhanced Water Oxidation under a Magnetic Field. ACS Catal. 2024, 14, 846−856**

Transformation of Fe_2O_3 for Enhanced Water Oxidation under a Magnetic Field

Sanzhao Song[1,*]

[1] Wenzhou Institute, University of Chinese Academy of Science

No.1 Jinlian Road, Longwan District, Wenzhou, Zhejiang Province, China 325001

* songsanzhao@ucas.ac.cn

Ferromagnetic catalysts in the presence of an external magnetic field can promote the reaction kinetics of the oxygen evolution reaction (OER) by enhancing spin-selective electron transfer as intermediates and products confer spindependent behavior. It has been found that γ-Fe_2O_3 with ferromagnetism exhibits an enhanced performance for the OER activity, but its preparation is limited. Herein, we report an adsorption-pyrolysis process in air in which the transformation of α- Fe_2O_3 into γ- Fe_2O_3 is precisely regulated by controlling the content of Co ions. Interestingly, a small, constant external magnetic field (~200 mT) was applied at the anode, resulting in a significant impact on the OER performance of the obtained series of catalysts with different contents of γ- Fe_2O_3 under alkaline conditions. Theoretical results reveal that the same spin configuration of Fe and O atoms in γ- Fe_2O_3 provides a spin conduction channel, which enhances the ability to selectively remove spin-oriented electrons from the reactants and accelerates the accumulation of triplet oxygen molecules during the OER process, thereby promoting the OER. These findings provide a strategy toward the controllable phase transformation of Fe_2O_3 and deep insights for understanding the OER behavior of Fe-based electrocatalysts under magnetic fields.

Keywords：OER, magnetic field, magnetization, Fe_2O_3, phase transformation；XAFS

References

[58]G. Song, M. Wei, J. Zhou, L. Mu, and S. Song Modulation of the Phase Transformation of Fe2O3 for Enhanced Water Oxidation under a Magnetic Field. ACS Catal. 2024, 14, 846−856

报告人/墙报展示人简介：

宋三召，男，副研究员，2019 年获得中国科学院大学无机化学专业博士学位，2019 年 7 月至 2021 年 11 月于中国科学院上海应用物理研究所胡钧课题组从事博士后研究，开展界面水与催化的研究工作。2021 年任中国科学院大学温州研究院副研究员。

作为项目负责人已完成中国博士后科研基金面上资助，博士后站中资助的项目。目前主持国家自然科学基金委青年项目、中国科学院大学温州研究院重大项目。目前主要从事纳米催化材料的可控合成与能源环境催化领域的机制研究；尤其在利用同步辐射技术探索催化材料的微观机制取得了一些有意义的研究成果。

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

报告人姓名：刘爱荣
工作单位：同济大学环境科学与工程学院
是否为学生：否
联系邮箱：liuairong@tongji.edu.cn

同步辐射技术研究铁纳米颗粒砷污染物界面的界面反应

刘爱荣*，黄青，付佳慧，刘钊丽，张伟贤

同济大学环境科学与工程学院，上海市四平路 1239 号

liuairong@tongji.edu.cn

摘要正文：核-壳结构的纳米零价铁（nZVI）材料，适用于水体砷（As）污染治理修复。壳层中的铁氧化物作为 As 污染物的吸附位点和电子转移通道，内核中的金属铁具有还原作用，将水中的砷离子等通过吸附、氧化、还原或者共沉淀作用从水溶液中分离并固定起来。本报告介绍 nZVI 与典型金属含氧阴离子砷化学反应，考察水化学参数、界面反应、固相迁移等对砷在纳米颗粒中的分布、赋存状态的影响。借助同步辐射 X-射线吸收精细结构表征，着重研究富集在纳米颗粒中 As 原子周围临近配位壳层的结构信息，比如铁氧原子之间的键和状态、中心原子、配位原子的种类，中心原子与配位原子的距离、配位数等结构参数，推测 As 与 nZVI 之间反应机理。从原子尺度上了解分离砷的原子结合形态和键合力等微观状态，为砷的固定、迁移等提供理论依据。

关键词：同步辐射 铁纳米颗粒 砷 界面反应

参考文献

[1] **Liu Z.L., Liu A.R. , Wang S., Liu J., Wang W., Zhang W.-X., Wang S.Z., Phase transformation of nanoscale zero-valent iron and concurrent arsenite sequestration under oxic water environment, Journal of Environmental Chemical Engineering, 2023,11, 110896.**

[2] **Liu, A. R.; Wang, W.; Liu, J.; Fu, R. B.; Zhang, W. X. Nanoencapsulation of arsenate with nanoscale zero-valent iron (nZVI): A 3D perspective. Science bulletin 2018, 63, 1641-1648.**

[3] **Yan, W.; Vasic, R.; Frenkel, A. I.; Koel, B. E. Intraparticle reduction of arsenite (As(III)) by nanoscale zerovalent iron (nZVI) investigated with in situ X-ray absorption spectroscopy. Environ. Sci. Technol. 2012, 46, 7018-7026.**

[4] **Huang, Q.; Qi, J.; Zhou, L.; Wang, Y.; Zhang, W.-X.; Hu, J.; Tai, R.; Wang, S.; Liu, A.; Zhang, L. Hydrogen nanobubbles generated in situ from nanoscale zerovalent iron with water to further enhance selenite sequestration. Environ. Sci. Technol. 2024, 58, 4357-4367.**

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：否

报告人姓名：王笑天
工作单位：中国科学院上海应用物理研究所
是否为学生：是
联系邮箱：wangxiaotian@sinap.ac.cn

Electrochemically Controllable Production of Hydrogen and Oxygen Bulk Nanobubbles in different solutions

Xiaotian Wang[1,2], Xingya Wang[3], Li Juan Zhang [1,3*], Limin Zhou[3*], Jun Hu [4,*] ,

[1] Key Laboratory of Interfacial Physics and Technology, Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai,201800,China

[2] University of Chinese Academy of Sciences, Beijing,100049,China

[3] Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai,201204,China

[4]Shanghai University, Shanghai,200444,China

* wangxiaotian@sinap.ac.cn

The controllable and effective generation of nanobubbles (NBs) is crucial in various applications like wastewater treatment and mineral flotation. Production of bulk nanobubbles via electrochemical reactions is a promising way to realize these goals. In this study, we introduce an innovative electrolytic cell design, featuring distinct anode and cathode compartments, to facilitate the production of hydrogen and oxygen nanobubbles. It is revealed that the concentration of nanobubbles is significantly influenced by the electrolytic voltage, duration of electrolysis, and concentration of electrolyte solution. The optimal electrochemical conditions, as characterized by a high electrolytic voltage, an appropriate electrolysis duration, and a concentrated electrolyte solution, can lead to the mass generation of hydrogen nanobubbles with a number concentration of 1.8×10^8/mL. Furthermore, the types of electrolyte solution are found to have substantial influence on the stability of nanobubbles, nanobubbles are more stable in alkaline solutions. Our work provides valuable insights into the controlled formation of nanobubbles, which is essential for advancing their practical applications.

Keywords: Nanobubbles; Electochemical

简介：

王笑天，男，25，博士研究生，无机化学，wangxiaotian@sinap.ac.cn

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

报告人姓名：宋浙俊
工作单位：中国科学院上海应用物理研究所
是否为学生：是
联系邮箱：songzhj@shanghaitech.edu.cn

Research on the theory and efficacy of nanobubbles naturally generated by tourmaline

Zhejun Song[1,2], Jun Hu [3,4*], Li Juan Zhang [4*]

[1] Key Laboratory of Interfacial Physics and Technology, Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai

[2] School of Physical Science and Technology, ShanghaiTech University, Shanghai

[3] Shanghai University, Shanghai

[4] Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai

* songzhj@shanghaitech.edu.cn

Tourmaline is a general term for a group of minerals with tourmaline as the main constituent. The crystal structure of tourmaline belongs to the cubic crystal system and exhibits unique heteropolar symmetry. As a result, tourmaline possesses pyroelectric, piezoelectric, infrared radiation, and spontaneous polarization properties. It finds wide applications in environmental protection, piezoelectric devices, and other fields.

The inherent polarity of tourmaline generates an electric field around it, which is sufficient to ionize water molecules. Under suitable conditions, tourmaline can be utilized to produce nano bubbles. In this study, for the first time, tourmaline was employed to prepare a large-scale nano bubble solution in water. Through degassing control, it was confirmed that the particles do not act as pollutants. The relationship between reaction time, tourmaline particle concentration, tourmaline type, and tourmaline particle size on the concentration of nano bubbles was investigated using machine learning and other techniques to determine the optimal solution. The infrared spectrum of tourmaline was utilized for theoretical exploration, specifically examining the preservation of nanobubble solutions over an extended period of time.These research findings will undoubtedly contribute to the development and application of tourmaline, ultimately enhancing the value of related products in the field of environmental protection.

Keywords: Nanobubbles Tourmaline Infrared radiation

墙报展示人简介：

宋浙俊
单位：上海应用物理研究所
年龄：25
职位：在读博士研究生
邮箱：songzhj@shanghaitech.edu.cn
联系方式：13575535821

附：请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生：是

工作单位：中国科学院上海高等研究院
是否为学生：否
联系邮箱：tianfeng@zjlab.org.cn ， songzx@sari.ac.cn

In situ GISAXS/GIWAXS reveals the structural evolution of LiTFSI solvation in PVDF-HFP solid-state electrolytes

Zhaoxin Song[1,2], Xiuhong Li[1], Feng Tian[1*], Ping Zhou[1], Hao Zhang[1], Zhiwei Xu[2], and Haiting Shi[2]

1. Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, People's Republic of China.

2. State Key Laboratory of Separation Membranes and Membrane Processes, School of Textile Science and Engineering, Tiangong University, Tianjin 300387, China.

3. Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, People's Republic of China.

***Correspondence e-mail**: tianfeng@zjlab.org.cn , songzx@sari.ac.cn

PVDF-HFP solid polymer electrolytes (SPEs) have attracted attention due to their better dielectric constant, high interfacial stability with Li-metal, etc. Li+ transport relies on the movement of chain segments in the amorphous region of the polymer. Therefore, the crystallization behavior of PVDF-HFP solid-state electrolytes is an important factor affecting the electrochemical performance. In this study, FTIR and stretching were used to investigate the coordination state and mechanical properties of the chemical bonding of solid electrolyte films. In addition, the crystallization evolution behavior of PVDF-HFP solid-state electrolyte during the transition from liquid to solid state was systematically investigated using synchrotron radiation in situ Grazing incidence small angle (GISAXS)/wide angle x-ray scattering (GIWAXS).

第 34 分会场：首届晶态多孔颗粒国际前沿交叉论坛

In-situ Growth of Single-crystal Pt Nanowire Arrays for Electrode Applications

Shangfeng Du*

School of Chemical Engineering, University of Birmingham, Birmingham B15 2TT, UK

* s.du@bhamac.uk

One-dimensional (1D) nanostructures, in particular single-crystal nanowires, compared to nanoparticles, allow for the preferential exposure of low energy crystal facets and lattice planes with fewer lattice boundaries. During the practical electrochemical application, 1D metal nanostructures can also provide a highly electrically conductive path, and show better stability and high tolerance to aggregation compared to 0D nanoparticle electrocatalysts. These advantages thus make single-crystal Pt nanowires a promising electrocatalyst for fuel cell applications. However, in practical, there is a big challenge in the preparation of this nanostructure using a facile method and fabricate devices based on them.

This talk will introduce the evolution and innovation of single-crystal Pt nanowire arrays for the design of three-dimensional ordered electrodes in low temperature fuel cell applications, discussing the lessons learnt during the thin film electrode fabrication, from nanostructure growing for tuning the electrode structure [1], the surface modification using functional Pd nanoseeds and plasma treatment to guide the nucleation and growth of Pt nanowires [2], and alloying to boost the catalytic activity and durability towards oxygen reduction reaction in practical fuel cells [3-5]. The development of self-assembled Pd polyhedral catalyst layer to work as the anode for direct formic acid fuel cells will also be explained [6-7].

Keywords: Pt, nanowire, fuel cell, oxygen reduction reaction, Pd, formic acid oxidation; polyhedron

References

[1] P. Mardle, X.C. Ji, J. Wu, S.L. Guan, H.S. Dong, S.F. Du. Thin film electrodes from Pt nanorods supported on aligned N-CNTs for proton exchange membrane fuel cells. Applied Catalyst B: Environmental 2020, 260, 118031.

[2] S Du. Recent advances in electrode design based on one-dimensional nanostructure arrays for proton exchange membrane fuel cell applications. Engineering 2021, 7, 33-49.

[3] P. Mardle, G. Thirunavukkarasu, S.L. Guan, Y.L. Chiu, S.F. Du. Comparative study of PtNi nanowire array electrodes toward oxygen reduction reaction by half-cell measurement and PEMFC test. ACS Applied Materials & Interfaces 2020, 12, 42832-42841.

[4] E. Fidiani, G. Thirunavukkarasu, Y. Li, Y.L. Chiu, S.F. Du. Ultrathin AgPt alloy nanorods as low-cost oxygen reduction reaction electrocatalysts in proton exchange membrane fuel cells. Journal of Materials Chemistry A 2020, 8, 11874-11883.

[5] E. Fidiani, G. Thirunavukkarasu, Y. Li, Y.L. Chiu, S.F. Du. Au integrated AgPt nanorods for the oxygen reduction reaction in proton exchange membrane fuel cells. Journal of Materials Chemistry A 2021, 9, 5578-5587

[6] Y. Li, Y.C. Yan, Y.P. He, S.F. Du. Catalyst electrodes with PtCu nanowire arrays in situ grown on gas diffusion layers for direct formic acid fuel cells. ACS Applied Materials & Interfaces 2022, 14, 11457-11464.

[7] Y. Li, Y.C. Yan, M. S. Yao, F. Wang, Y. H. Li, S. M. Collins, Y. L. Chiu, S.F. Du. Porous electrodes from self-assembled 3D jointed Pd polyhedra for direct formic acid fuel cells. Chemical Engineering Journal 2023, 462, 142244.

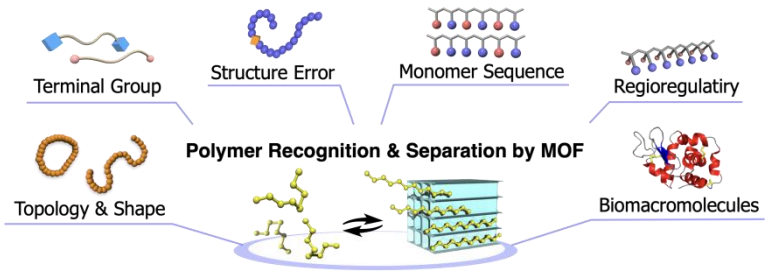
MOFs for Polymer Separation Technology

Nobuhiko Hosono[1, *]

[1]Graduate School of Engineering, The University of Tokyo 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656, Japan

* nhosono@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

Molecular separation is one of the most energy-intensive industrial processes, primarily due to the inadequate efficacy of current separation methods. This issue becomes critical when it comes to large polymeric compounds. Our group has been focusing on developing new technologies for separating polymers using crystalline nanoporous media: metal-organic frameworks (MOFs). We recently made a discovery that MOFs can adsorb polymers in their nanopores.[1–3] During the adsorption process, even the slightest differences in polymer structures are recognized, enabling highly precise polymer separation. This has allowed us to distinguish the differences in terminal groups,[4] topology,[5] and even monomer sequences[6] of polymers, which were previously impossible using conventional methods. In the lecture, the mechanisms of polymer adsorption and the promising prospects of MOF-based technologies in polymer recognition, separation, and decoding will be discussed.



Keywords: metal-organic framework, separation, adsorption, polymer, chromatography

References

[1] N. Hosono, T. Uemura, Metal-Organic Frameworks for Macromolecular Recognition and Separation, Matter 2020, 3, 652-663.
[2] N. Hosono, T. Uemura, Metal-Organic Frameworks as Versatile Media for Polymer Adsorption and Separation, Acc. Chem. Res. 2021, 54, 3593–3603.
[3] N. Oe, N. Hosono, T. Uemura, Revisiting Molecular Adsorption: Unconventional Uptake of Polymer Chains from Solution into Sub-Nanoporous Media. Chem. Sci. 2021, 12, 12576–12586.
[4] N. Mizutani, N. Hosono, B. Le Ouay, T. Kitao, R. Matsuura, T. Kubo, T. Uemura, Recognition of Polymer Terminus by Metal-Organic Frameworks Enabling Chromatographic Separation of Polymers, J. Am. Chem. Soc. 2020, 142, 3701–3705.
[5] T. Sawayama, Y. Wang, T. Watanabe, M. Takayanagi, T. Yamamoto, N. Hosono, T. Uemura, Metal-Organic Frameworks for Practical Separation of Cyclic and Linear Polymers, Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 11830-11834.
[6] B. Manna, M. Asami, N. Hosono, T. Uemura, Decoding Polymer Chains via Gated Inclusion into Flexible Nanoporous Crystals, Chem 2023, 9, 2817–2829.

3D Electron Diffraction for Accelerated of Materials Discovery

E. Svensson Grape[1], A. Lopez-Olvera[1], Y. Zheng[1], Y. Xia[1], T. Willhammar[1], A. Ken Inge[1,*]

[1]Department of Materials and Environmental Chemistry, Stockholm University, Stockholm, 106 91, Sweden

* andrew.inge@mmk.su.se

Modern 3D electron diffraction (3DED) techniques allow for single crystal data collection on individual sub-micrometer sized crystals.[1] The possibility to collect single crystal diffraction data on such small crystallites has made it much easier and faster in recent years to determine the crystal structures of phases that are particularly difficult to grow sufficiently large for single crystal X-ray diffraction (SCXRD), including porous crystalline materials such as zeolites and metal-organic frameworks (MOFs).

3DED has not only opened new ways to determine crystal structures of MOFs, but it also has begun to influence the way we perform synthesis when developing new MOFs. Prior to 3DED, effort and time, sometimes weeks or months, was often required for synthesis optimization to grow sufficiently large crystals for structure determination by SCXRD or obtaining phase pure samples for structure determination by X-ray powder diffraction. Now with 3DED, structure determination can be performed without large crystals or phase pure samples, which significantly reduces time and effort spent in the lab for synthesis optimization. This has significantly accelerated the discovery of new materials. Also, this implies that traditional synthesis conditions that were optimized for promoting crystal growth, are not always necessary when 3DED is available. This advantage can be applied to, for example, employ synthesis conditions that instead focus on greener synthesis methods such as the use of water as a solvent, lower reaction temperatures or solvent-free synthesis methods.

We have explored the use of a naturally occurring, biocompatible, and inexpensive plant-based molecule as a new organic linker for MOF synthesis – ellagic acid. Ellagic acid is well known as an antioxidant and part of our natural diet, and is found in fruits, nuts, tree bark and other plant matter. The bismuth ellagate MOF, SU-101, was first synthesized under quite green conditions by stirring ellagic acid with non-hazardous bismuth (III) cations in water at room temperature for 48h. These synthesis conditions do not readily dissolve any of the solid reagents, but still results in crystallites of SU-101 suitable for 3DED.

Recently we have discovered a new family of zirconium ellagate MOFs,[3] where different MOF structures were obtained simply by changing the species of the organic structure-directing agent[4]. The combined time for synthesis and structure determination by 3DED for the first nine of these new MOFs was only a period of two weeks all done by a single student, demonstrating how 3DED can dramatically accelerate the discovery of new materials. Other research groups have also demonstrated the use of 3DED to determine the structures of novel MOFs prepared using mechanochemical synthesis methods.[5]

Keywords: MOFs, 3DED, synthesis, crystallography

References

[1] M. Gemmi, E. Mugnaioli, T.E. Gorelik, U. Kolb, L. Palatinus, P. Boullay, S. Hovmöller, J.P. Abrahams, 3D Electron Diffraction: The Nanocrystallography Revolution, ACS Cent. Sci. 2019, 5, 1315–1329.

[2] E. Svensson Grape, J.G. Flores, T. Hidalgo, et al., A Robust and Biocompatible Bismuth Ellagate MOF Synthesized Under Green Ambient Conditions, J. Am. Chem. Soc. 2020, 142, 39, 16795–16804.

[3] E. Svensson Grape, A. Lopez-Olvera, Y. Zheng, Y. Xia, T. Willhammar, A.K. Inge, Guest-directed synthesis reveals vast family of robust polyphenolic metal-organic frameworks. ChemRxiv. 2024.

[4] E. Svensson Grape, A.J. Chacón-García, S. Rojas, et al. Removal of pharmaceutical pollutants from effluent by a plant-based metal–organic framework. Nat Water, 2023, 1, 433–442.

[5] D. Marchetti, F. Guagnini, A.E. Lanza, et al., Combined Approach of Mechanochemistry and Electron Crystallography for the Discovery of 1D and 2D Coordination Polymers, Cryst. Growth Des. 2021, 21, 6660-6664.

Photo-responsive MOF Coated Plasmonic Nanowire for Intracellular Gas Delivery

Tomoko Inose[1,2,3,*]

[1]Institute for Integrated Cell-Material Sciences (WPI-iCeMS), Kyoto University, iCeMS Research Bldg, Yoshida, Sakyo-ku, Kyoto 606-8501, Japan.

[2]The Hakubi Center for Advanced Research, Kyoto University, Kitashirakawa-Oiwakecho, Sakyo-ku Kyoto 606-8502, Japan

[3]JST PRESTO, Saitama 332-0012, Japan

* inose.tomoko.1v@kyoto-u.ac.jp

Nitric oxide (NO) is recognized as one of the unique bio-active gases, known as gasotransmitters. It plays a key role as a signaling molecule in the cardiovascular systems. Despite its significant effects on the cardiovascular systems, the clinical use of NO-releasing materials is limited due to the rapid diffusion and short lifetime of NO, which makes it challenging to elucidate its behavior in detail.

Photochemically triggered NO donors are one of the attractive materials for deeper understanding of intracellular NO behavior due to their NO release properties in a time-controlled manner. In our previous study, we developed a near-infrared two-photon-sensitive NO release metal-organic framework (NOF-1).[1] In addition to time-controlled NO release, achieving site-specific NO release on the cell membrane or inside cells can provide more precise and accurate information regarding NO behavior. However, controlling a location of NO release is more challenging than controlling the timing of NO release because NO-release materials diffuse within the intra/extra-cellular environment.

In this study, we present a novel approach for achieving site-specific release of NO on a single live-cell membrane by integrating light-induced NO release MOF and a plasmonic nanowire (AuAgNW@NOF-1). We have developed a plasmon-based nanowire single live-cell endoscopy technique, which enables access a site-specific position on a cell membrane or inside a single live-cell. [2,3,4] By applying AuAgNW@NOF-1 to this endoscopy technique, a site-specific NO delivery system is realized. Our results demonstrate that NO is released from AuAgNW@NOF-1 on the cell membrane, which is induced by the plasmonic thermal effect. We also confirm released NO is delivered inside a single live-cell by staining a cell with a fluorescence probe for NO detection. Our results suggest that the combination of our proposed photo-responsive MOF with plasmonic nanowires has great potential to develop a novel approach for delivering materials to a specific position inside a single live-cell, not limited to NO delivery.

Keywords: Photo-responsive NO release MOF, Plasmonic nanowire, Nanowire single live-cell endoscopy

References

[1] S. Furukawa, et al. Nat. Commun. 2013, 4, 2684.
[2] H. Uji-i, et al. Adv. Mater. 2014, 26, 5124-5128.
[3] T. Inose, et al. ACS Appl. Nano Mater. 2021, 4, 9886-9894.
[4] H. Uji-i, et al. Anal. Chem. 2021, 93, 5037-5045.

How to get published in the Nature Portfolio

Jet-Sing Lee[1,*]

[1]Springer Nature

Shiroyama Trust Tower 5F, 4-3-1 Toranomon, Minato-Ku, Tokyo 105-6005, Japan

* jet-sing.lee@nature.com

What makes a good paper? How do I choose a journal to publish in? How do I have an impact as a researcher? All of these are valid questions from students to fully-fledged professors. In this talk, I aim to give you a taste inside the mind of a Nature Portfolio editor. The Nature Portfolio publishes a wide array of research, from our flagship journal, *Nature*, to Nature Research, *Nature Communications*, Communications Journals, and *Scientific Reports*. I will explain the editorial process, peer review, and how we make editorial decisions. Lastly, I'll present some tips for preparing your manuscript, perhaps to submit your next paper to the Nature Portfolio.

Organic-inorganic epitaxial interface on metal hydroxides as scaffold for oriented MOF films with unique properties

Kenji Okada[1*], Masahide Takahashi[1]

[1]Department of Materials Science, Osaka Metropolitan University, Sakai, Osaka, 599-8531

* k_okada@omu.ac.jp

Precise control of the material interface, i.e., lattice matching at the interface, is important for the fabrication of oriented thin films with sophisticated functionalities. In the field of inorganic materials, epitaxial growth by lattice matching at the interface has been deeply investigated and contributed to the development of semiconductor devices. We have been reporting unique organic-inorganic epitaxial interface on metal hydroxides which allowed the fabrication of oriented metal-organic framework (MOF) films (Figure 1)[1-6]. Crystalline metal hydroxides have hydroxyl groups (M-OH units) regularly arranged on their surface of which alignment reflects their crystalline structure. The ordered array of hydroxyl groups defines the alignment of the organic molecules on the surface (organic-inorganic epitaxial interface), affording the fabrication of oriented MOF films [1]. Because the MOF micropores are aligned to the specific directions in the macroscopic scales in the oriented MOF films, thin films with anisotropic properties for advanced technologies including electronic, optical, and thermal devices can be achieved via a host-guest approach by an accommodation of functional guests (molecules, ions, or nano objects) into the pores. For example, oriented MOF films impregnated with fluorescent molecules exhibited polarization-dependent optical responses[3]. In this presentation, our resent progress on the fabrication and applications (unique optical, electrical, and thermal properties) of oriented MOF films will be reviewed.

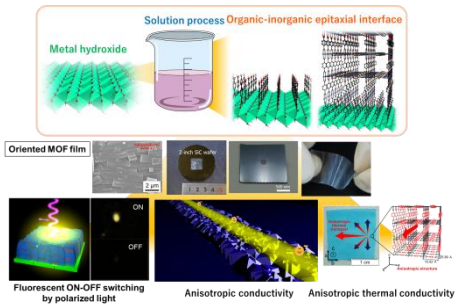


Fig 1 Anisotropic optical, electrical, and thermal properties by oriented MOF film fabricated via epitaxial growth on metal hydroxide

Keywords: Epitaxial growth, MOF, film, patterning, inorganic

References

[1] P. Falcaro, K. Okada, T. Hara, K. Ikigaki, Y. Tokudome, A. W. Thornton, A. J. Hill, T. Williams, C. Doonan, M. Takahashi, Centimetre-scale micropore alignment in oriented polycrystalline metal–organic framework films via heteroepitaxial growth, Nature Mater. 2017, 16, 342−348.

[2] K. Ikigaki, K. Okada, Y. Tokudome, T. Toyao, P. Falcaro, C. J. Doonan, M. Takahashi, MOF-on-MOF: Oriented Growth of Multiple Layered Thin Films of Metal−Organic Frameworks, Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58, 6886–6890.

[3] K. Okada, M. Nakanishi, K. Ikigaki, Y. Tokudome, P. Falcaro, C. J. Doonan, M. Takahashi, Controlling the alignment of 1D nanochannel arrays in oriented metal–organic framework films for host–guest materials design, Chem. Sci. 2020, 11, 8005–8012.

[4] K. Okada, K. Mori, A. Fukatsu, M. Takahashi, Oriented growth of semiconducting TCNQ@ Cu3(BTC)2 MOF on Cu(OH)2: crystallographic orientation and pattern formation toward semiconducting thin-film devices, J. Mater. Chem. A 2021, 9, 19613–19618.

[5] B. Baumgartner, R. Mashita, A. Fukatsu, K. Okada, M. Takahashi, Guest Alignment and Defect Formation during Pore Filling in Metal–Organic Framework Films, Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202201725.

[6] Y. Koseki, K. Okada, S. Hashimoto, S. Hirouchi, A. Fukatsu, M. Takahashi, Improved optical quality of heteroepitaxially grown metal–organic framework thin films by modulating the crystal growth, Nanoscale 2024, 16, 14101–14107.

Exploring Hidden Softness of Porous Coordination Polymers for Selective Gas Sorption

Ken-ichi Otake[1*], Hirotoshi Sakamoto [1], Susumu Kitagawa[1]

[1]Institute for Integrated Cell-Material Sciences, Kyoto University, Yoshida-honmachi, Sakyo-ku, Kyoto, 606-8501

* ootake.kenichi.8a@kyoto-u.ac.jp

Porous Coordination Polymers (PCPs), also known as Metal-Organic Frameworks (MOFs), are a class of porous materials based on coordination chemistry, composed of metal ions and polydentate ligands [1]. PCPs are distinguished by their high structural versatility, which can be tailored by adjusting various components such as ligands, metal ions, and synthesis conditions, resulting in highly crystalline structures. Among PCPs, those with flexible frameworks are referred to as "Flexible PCPs." These materials exhibit structural responsiveness to external stimuli, such as the adsorption and desorption of guest molecules, making them particularly intriguing [1]. Recently, the local dynamic motion of structural components in PCPs has attracted increasing attention for its role in enabling unique properties. For example, our team demonstrated that this motion at gate positions within the pore channels regulates the diffusion of guest species, enabling the difficult separation of chemically similar substances [2]. However, in many PCPs, such dynamic motion is often overlooked, and the design principles for adsorption properties remain elusive. We has employed in situ crystallographic techniques to investigate the mechanisms behind gas sorption processes in flexible PCPs. In this talk, we will present examples of the hidden flexibility in PCPs, where materials once considered rigid actually exhibit flexibility, which plays a crucial role in their gas sorption properties [3].

Keywords: metal-organic frameworks, porous coordination polymers, flexibility, gas sorption.

References

[1] S. Krause, N. Hosono, S. Kitagawa, Chemistry of Soft Porous Crystals–Structural Dynamics and Gas Adsorption Properties, Angew. Chem. Int. Ed., 2020, 59, 15325.

[2] Yan Su, Ken-ichi Otake, Jia-Jia Zhang, Satoshi Horike, Susumu Kitagawa, Cheng Gu, Separating water isotopologues using diffusion-regulatory porous materials, Nature 611, 289–294, 2022

[3] H. Sakamoto, K. Otake, S. Kitagawa, Progressive gas adsorption squeezing through the narrow channel of a soft porous crystal of [Co2(4,4′-bipyridine)3(NO3)4], Communications Materials, 2024, 5, 171.

MOF Thin Film Gas Sensing Materials

Gang Xu*

Fujian Institute of Research on the Structure of Matter, Chinese Academy of Sciences,

155 Yangqiao Road West, Fuzhou, 350002, China

* gxu@fjirsm.ac.cn

Metal oxides stand as the cornerstone of semiconducting materials for chemiresistive gas sensors. Historically, the fabrication of metal oxides into diverse micro- and nano-scale particles has significantly amplified their external surface area and the quantity of accessible sensing active sites, a strategy extensively employed to enhance the high-temperature sensitivity of these oxides. Nonetheless, these "outer surface sensing" materials encounter limitations in terms of diminished sensitivity at ambient temperatures and a lack of selectivity. In our presentation, we introduce our pioneering work on the evolution of metal-organic frameworks (MOFs) into a new class of "inner surface sensing" materials, designed for superior gas sensing capabilities. [1-5] To refine the sensing characteristics, we have designed MOF 2D thin films, MOF-on-MOF heterojunction 2D thin films, and MOF 3D thin films. Our findings reveal that the "inner surface sensing" materials based on MOF thin films not only deliver exceptional performance in detecting gases at room temperature but also hold immense promise for the detection of trace vapors from solid analytes.

Keywords: MOF, Thin Film, Gas Sensing

References

[1] G. Wu, J. Huang, Y. Zang, J. He,* and G. Xu* J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 1360.
[2] M. Yao, J. Xiu, Q. Huang, W. Li, W. Wu, A. Wu, W. Deng, G. Wang, G. Xu* Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58, 14915.
[3] M. Yao, X. Lv, Z. Fu, W. Li, W. Deng, G. Wu, and G. Xu* Angew. Chem. Int. Ed. 2017, 56, 16510.
[4] Y. Lin, W. Li, Y. Wen, G. Wang, X. Ye, G. Xu* Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 25758.
[5] W. Deng, M. Yao, M. Zhang, M. Tsujimoto, K. Otake, B. Wang*, C. Li*, G. Xu*, and S. Kitagawa* Nati. Sci. Rev. 2022, 9, nwac143.

Pt-based Bimetallic Catalyst Engineering

Xi Wang[1,*]

[1]National Key Laboratory of Heavy Oil, China University of Petroleum (Beijing), 18 Fuxue Road, Changping District, Beijing, 102249.

* wangxicas@gmail.com

Over the past five years, our research has been focused on investigating the interaction between dual-component interfaces in Pt-based bimetallic catalysts, as well as developing novel industrial catalysts and establishing their large-scale production and application systems. Our aim has been to establish an innovative chain that connects interface interaction mechanisms with the design of highly stable catalysts, enabling mass production and practical implementation. In response to limitations of conventional in-situ techniques that can only characterize single elements, we have developed a new technology called Dual-Beam X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy combined with Artificial Intelligence (DB-XAFS/AI) for simultaneous dynamic characterization of dual-component interfaces. This technique has provided insights into the deactivation patterns during industrial catalytic reactions. We have also proposed a novel approach to enhance interface interactions through carrier confinement control. Furthermore, we have achieved real-time monitoring and identification of active center reconstruction in novel bimetallic catalyst reactions, elucidating new mechanisms underlying interface interactions that influence catalyst stability. Key common technologies for large-scale preparation of high-stability bimetallic catalysts with low Pt loading were also developed. Additionally, we successfully demonstrated the application of fuel cells in unmanned aerial vehicles and conducted an industrial demonstration for alkane dehydrogenation at a million-ton scale.

Keywords: Pt-based bimetallic catalyst, dual-component in-situ synchronous dynamic characterization technology, and macro-scale preparation common technology

References

[1] Lu F, Wang J, Wang Y, Wang X*, Engineering Pt-Cu Diatomics Electrocatalysts Enables Highly Efficient Urea Synthesis, AIChE J., 2024, 70, e18403.

[2] Yao Y, Wang J, Liu Q, Yu C, Gao Z, Yuan F, Wang X*, Improving the Selectivity and Stability of Supported Cobalt Catalysts via Static Bi-Doping and Dynamic Trace CO2 Co-feeding during Propane Dehydrogenation, Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63, e202415295.

[3] Lu F, Wang J, Chai S, Wang Y, Yao Y, Wang X*, Asymmetric Coupled Binuclear-Site Catalysts for Low-Temperature Selective Acetylene Semi-hydrogenation, Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63, e202414719.

[4] Pan L, Wang J, Lu F, Gao Y, Wang Y, Jiang J, Sun C, Wang X*, Single-Atom or Dual-Atom in TiO2 Nanosheet: Which is the Better Choice for Electrocatalytic Urea Synthesis? Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 62, e202216835.

[5] Li P., Zhang X, Xue Y, Yao Y, Zhou B, Wang X*, Zheng N, Yao J, Engineering O–O Species in Boron Nitrous Nanotubes Increases Olefins for Propane Oxidative Dehydrogenation, J. Am. Chem. Soc., 2022, 144, 5930-5936.

Strongly Correlated Electrons and Spins in 2D Metal-Organic Frameworks

Zhongyue Zhang[1,] * Qi Chen[2], Kunio Awaga[2]

[1]International Research Organization of Advanced Science and Technology, Kumamoto University, Kurokami 2-39-1, Chuoku, Kumamoto, 8608555, Japan

[2]Department of Chemistry, Nagoya University, Furochuo, Chikusa, Nagoya, 4648602, Japan

* zhongyuezhang@kumamoto-u.ac.jp

Metal-organic frameworks (MOFs) have been widely studied for their potential applications in gas separation, catalysis, sensors and drug deliveries, however, these applications only take the advantage of the structural porosity of MOFs. This situation is overturned by the development of 2D π-d conjugated MOFs in recent years, in which the *d* orbitals of metal cations and molecular orbitals of extended aromatic ligands are highly hybridized, resulting unconventional high conductivities within these MOFs. Indeed, the outstanding conductivity has opened the gate of utilizing 2D conjugated MOFs as main component in electronic devices. To date, most studies focused on the development of new materials as well as the fabrication of devices, yet the potentially existing strongly correlations in these materials have been overlooked for a long time.

Herein, using advanced measurement techniques, we unveiled the strongly correlated phenomena in various 2D conjugated MOFs: We firstly examined the electrochemically doped 2D coordination polymer, CuTHQ with quantitative ESR and magnetic susceptibility measurement, it is revealed that the system of CuTHQ is converted from a Kagome spin lattice to a honeycomb electronic structure, meanwhile, the existence of strongly correlated electrons in highly doped CuTHQ was demonstrated with the emergence of temperature independent paramagnetism, which demonstrated the graphite-like charge storage mechanism in 2D MOFs that the doped electrons form strongly correlated delocalized electrons.(**Fig.1**) Furthermore, we studied the 2D MOF $Cu_3(HHTP)_2$, which adapts a honeycomb structure but with a Kagome lattice composed by Cu(II) S=1/2 lattices. This compound matches perfectly with the theoretical model of Kagome Heisenberg antiferromagnet (KHAF) type quantum spin liquid. Moreover, by alternating the ligands from fully conjugated ones, such as HHTP or THQ to a non-conjugated ligand, namely triptycene derivatives, 2D cMOFs without in-plane spin-spin interaction could be obtained, namely $Cu_3(TripH_2)_2$ and $Cu3(TripMe_2)_2$. It is found that without the in-plane spin-spin interaction, the 2D magnetism in 2D cMOFs vanished and 1D quantum Heisenberg antiferromagnetism emerged via the interlayer superexchange between the $Cu(cat)_2$ SBUs in adjacent layers. These research results emphasized the potential of new research paradigm that translates the crystal engineering design of coordination chemistry to the prediction of properties in solid-state physics, as well as the future of unearthing exotic physics in properly designed low-dimensional molecular systems.

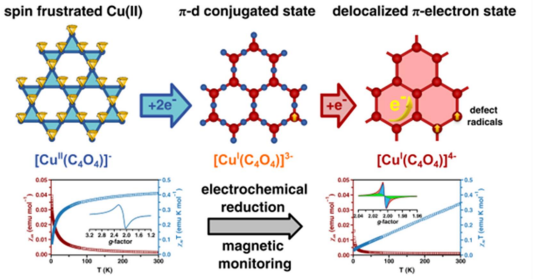


Fig. 1 Electronic state evolution of 2D cMOF, CuTHQ

Keywords: Metal-Organic Frameworks. Magnetism, Electronic States, Strrongly Correlated Phenomena

References

[1] Misumi, Y.; Yamaguchi, A.; Zhang, Z.; Matsushita, T.; Wada, N.; Tsuchiizu, M.; Awaga, K.; Quantum Spin Liquid State in a Two-Dimensional Semiconductive Metal–Organic Framework. J. Am. Chem. Soc., 2020, 142, 16513-16517.

[2] Chen, Q.; Adeniran, O. Liu, Z.-F.; Zhang, Z.; Awaga, K.; Graphite-like Charge Storage Mechanism in a 2D π–d Conjugated Metal–Organic Framework Revealed by Stepwise Magnetic Monitoring. J. Am. Chem. Soc., 2023, 145, 1062-1071.

Heterogeneous Catalysis of Coordination Polymer Glass Membranes Involving Metalloporphyrin

Hiroyasu Tabe[1,*] , Satoshi Horike[1,2]

[1]Institute for Integrated Cell-Material Sciences (iCeMS), Institute of Advanced Study, Kyoto University, Yoshida-hommachi, Sakyo-ku, Kyoto 606-8501, Japan

[2]Graduate School of Science, Kyoto University, Japan

* tabe.hiroyasu.4y@kyoto-u.ac.jp

Transparent and grain boundary-free substrates are essential to immobilize photocatalysts for efficient photoirradiation reactions without unexpected light scattering and absorption by the substrates. The grain boundary-free membranes also allow efficient electron transfer between electrodes and catalysts due to low interface resistance when the membranes are formed on the electrodes. Herein, we examined coordination polymer glasses as membrane substrates of metal complex photo/electrocatalysts. We used $[Zn(HPO_4)(H_2PO_4)_2](ImH_2)_2$ **(Zn-1)** due to their high transparency and formability by melt-quench technique (Fig. 1A). Melting temperature of **Zn-1** is 155 °C, which is lower than the decomposition temperatures of metal complex catalysts.

Zn-1 liquid containing iron(III) 5,10,15,20-tetraphenyl-21H,23H-porphine chloride (Fe(TPP)Cl, 0.1-0.5 w/w%) was cast on a borosilicate glass substrate followed by cooling to room temperature, resulting in transparent glass membranes (**Fe/Zn-1g)** with the thickness of 3, 5 and 9 μm (Fig. 1B). Yields of carbon monoxide (CO) was in proportion to the membrane thickness under visible-light irradiation in the presence of 1,3-dimethyl-2-phenyl-2,3-dihydro-1H-benzo[*d*]imidazole (BIH) as a sacrificial reductant (Fig. 1C). Fe(TPP)Cl in the subsurface of membranes effectively absorbed light and contributed to the reactions.[1]

Fe/Zn-1g membranes were fabricated on a fluorine-doped titanium oxide (FTO) electrode (**Fe/Zn-1g**/FTO, Fe(TPP)Cl: 1.0 w/w%). Application of negative potential to **Fe/Zn-1g/FTO** in CO_2-satudated acetonitrile/water (99.5:0.5 v/v) resulted in electrocatalytic reduction of CO_2 to CO. Use of the **Zn-1g** membranes without grain-boundary resistance results in electron transfer from the electrode to catalysts. **Fe/Zn-1g** intact during the photocatalytic and electrocatalytic reactions and showed no recrystallization, transformation to zinc phosphates, nor leaching of immobilized metal complex catalysts.

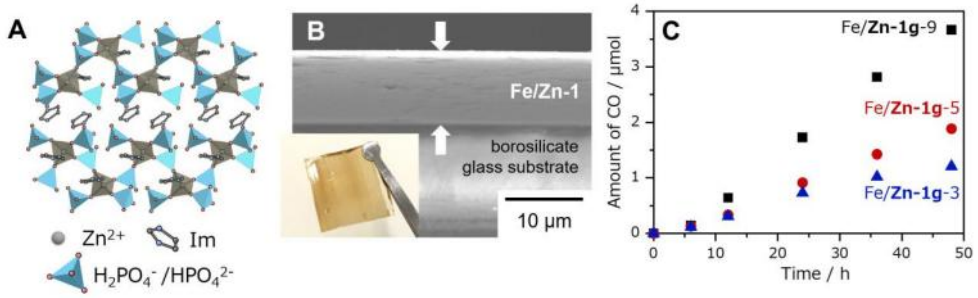


Fig. 1 (A) Crystal structure of **Zn-1**. (B) Cross-section SEM image of Fe/**Zn-1g**. (C) Time courses of CO amounts formed in photocatalytic CO_2 reduction using Fe/g-**ZnPIm**-n (n = 9, 5, or 3) in acetonitrile/water containing BIH.

Keywords: metal-organic framework, vitrification, photocatalysis, carbon dioxide, grain-boundary free

References

[1] H. Izu, H. Tabe, Y. Namiki, H. Yamada, S. Horike, Inorg. Chem. 2023, 62, 11342–11349.

材料孔结构调控与吸附分离动力学

鲍宗必 [1,*]

[1]（浙江大学）浙江省杭州市西湖区余杭塘路 866 号

*Email: baozb@zju.edu.cn

摘要正文：金属有机框架材料因其孔径的均一性、可精密调控及多样的柔性特征，在结构相似低碳烃吸附分离领域展现出巨大的应用潜力。本报告围绕材料孔结构精准调控策略的建立，重点阐述材料限制性孔道的亚埃米级精准调控及其对低碳烃吸附分离热力学和动力学行为的影响规律，从而建立低碳烃吸附分离性能的强化方法。报告重点介绍溶剂介导的异构孔、二维堆叠的层间孔、手性控制的准离散孔及配位聚合物链形成的柔性孔等特殊孔结构对二氧化碳甲烷、烷烃、丙烯丙烷及二甲苯异构体等低碳烃吸附分离性能的影响，揭示孔道结构对吸附动力学的影响机制，为开发高性能基低碳烃吸附分离材料提供重要参考。

关键词：金属有机框架材料、吸附分离、动力学

参考文献

[1] **Journal of the American Chemical Society 146 (1), 617-626、Science 377 (6603), 335-339、Engineering, 2023, 23, 64-72**

异基元分子结人工光合作用催化剂

兰亚乾*

华南师范大学化学学院，广东广州，510000

*Email: yqlan@m.scnu.edu.cn

摘要正文：在人工光合成领域，实现可见光驱动下以水作为牺牲剂的 CO_2 光还原是最具有挑战性的光催化反应之一。因此，设计和合成有效的光催化剂是至关重要的。与纳米材料相比，金属有机框架（MOF）、共价有机框架（COF）以及各种金属团簇有着明确的分子结构，作为催化剂可以从原子层面阐明活性位点和催化机制，为实现精准催化提供理论和实验依据。近五年来我们课题组设计合成了一系列氧化-还原异基元分子结人工光合作用催化剂。1、合成氧化-还原型共价键框架，多组分协同实现光合作用的人工模拟；2、合成氧化-还原型配位金属有机框架，利用明确单晶结构，探索光生电荷新型传输模式，确定分子级构效关系；3、设计多功能光-有机催化体系，光催化 CO_2 转化-串联有机催化生成高附加值产品。为构筑高效稳定的晶态人工光合作用催化剂提供了新的策略。

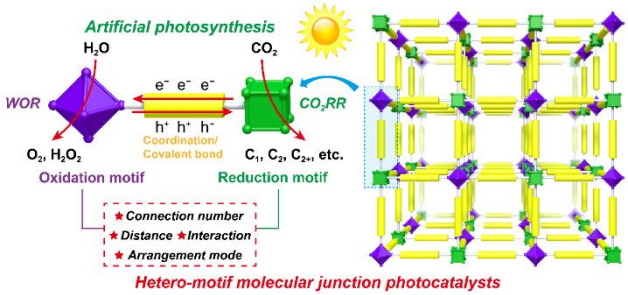


Fig. 1 Hetero-Motif Molecular Junction Photocatalysts

关键词：异基元分子结；人工光合作用；光催化二氧化碳还原；碳中和

参考文献

[1] **M. Lu, J. Liu, et al., Y.-Q. Lan*, Angew. Chem. Int. Ed., 2019, 58: 12392.**

[2] **L. Zhang, R.-H. Li, et al. J. Liu*, Y.-Q. Lan*, Proc. Natl. Acad. Sci., 2022, 119, e2210550119.**

[3] **Y.-S. Xia, M. Tang, et al. J. Liu*, Y.-Q. Lan*, Nat. Commun., 2022, 13, 2964.**

[4] **L. Zhang, J. Liu, Y.-Q. Lan*, Acc. Chem. Res., 2024, 57, 870.**

锕系元素精准识别：分离提取、安全防护与资源化新策略

王殳凹[1,*]

[1]苏州大学放射医学与辐射防护国家重点实验室，江苏 苏州 215123

*Email: shuaowang@suda.edu.cn

摘要正文：近年来，我们课题组系统开展了以锕系元素化学为核心的核能放射化学研究：在苏州大学搭建了超铀元素化学实验室，部分填补了我国在该领域基础研究的平台空缺并在国内率先开展了钚和镅的实验配位化学研究；提出了基于配位识别稳定锕系非常规价态的思路，发展了镧系锕系精准分离新策略，获得了至今报道的六价镅与三价镧系的最好分离效果；系统开展了基于新型多孔框架的放射性核素分离材料应用基础研究，并获得了针对部分放射性核素目前报道的性能最为优越的吸附分离材料，为解决核污染水处理和核事故应急任务中的放射性核素深度净化问题提供了科学依据；发展了放射性核素生物体内精准识别理念，设计了系列新型高效、低毒的锕系促排剂，解决了锕系元素从人体骨组织中难以促排的瓶颈问题，为发展新一代核应急救治药物奠定了基础；开发了多种新型锕系高端功能材料，探索了其在核电池、辐射探测、核素成像等领域的应用，为放化诊断分析、太空能源供给等重要任务提供了新思路。

关键词：锕系元素；精准识别；分离提取；污染控制；促排药物

参考文献

[1] **Shuao Wang* et al. Nature, 2024, DOI: 10.1038/s41586-024-07933-9; Nature, 2023, 616, 482; Nat. Commun., 2021, 12, 2798; Nat. Commun., 2019, 10, 2570; Nat. Commun., 2017, 8, 1354; Nat. Commun., 2017, 8, 14438; Nat. Commun., 2017, 8, 15369; J. Am. Chem. Soc., 2023, 145, 13161; J. Am. Chem. Soc., 2023, 145, 14679; J. Am. Chem. Soc., 2022, 144, 11054; J. Am. Chem. Soc., 2020, 142, 16218; J. Am. Chem. Soc., 2019, 141, 8030; J. Am. Chem. Soc., 2017, 139, 5110; J. Am. Chem. Soc., 2015, 137, 6144; Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 9886; Angew. Chem. Int. Ed., 2019, 58, 16110; Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 7883; Angew. Chem. Int. Ed., 2017, 56, 7500; CCS Chem., 2020, 2, 425; CCS Chem., 2019, 1, 197; Chem, 2023, 9, 3172.**

金属硼咪唑骨架材料研究

张健[1,*]

[1]（中国科学院福建物质结构研究所）

*Email: zhj@fjirsm.ac.cn

摘要正文：本报告将介绍基于 BIF 的功能结构开发的最新进展，以及它们在多个领域的不同应用，包括气体吸附和分离、固态光致发光和机械致变色光致发光、光催化和电催化。BIF 材料在结构设计、功能调控和广泛应用方面仍有巨大的发展潜力。

关键词：金属硼咪唑骨架材料

参考文献

[1] **Angew. Chem., Int. Ed. 2021, 60, 16687-16692.**

柔性MOF用于与CO吸附分离

张杰鹏 [1,*]

[1] 中山大学化学学院, 广州市新港西路 135 号, 510275

*Email: zhangjp7@sysu.edu.cn

摘要正文：伴随着分子基晶态材料的兴起，尤其是多孔配位聚合物（Porous Coordination Polymer, PCP）或金属有机框架（Metal-Organic Framework, MOF），研究者意识到吸附过程中柔性行为的普遍性和重要性。但是，关于柔性行为与吸附/分离的构效关系仍然存在许多误解和争议。本报告将基于近期在CO吸附分离方面的研究进展，简要介绍讨论化学吸附及结构变化周期性有关的问题。

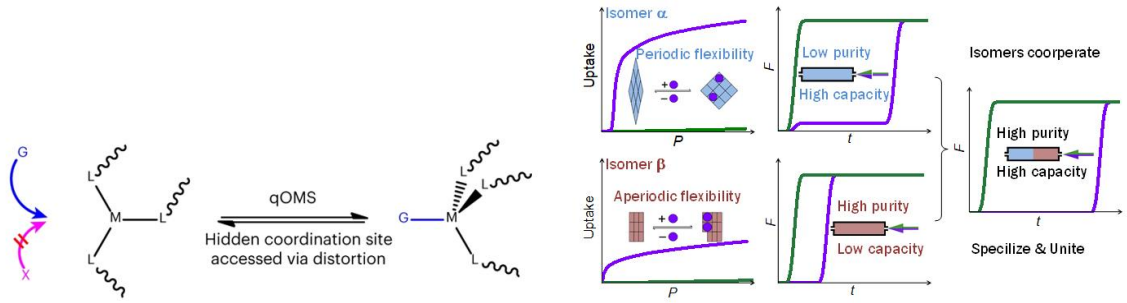


Fig. 1 Quasi-open metal site with periodic/aperiodic flexibility for CO adsorption/separation.

关键词：柔性；开孔；周期性；纯度

参考文献

[1] **Zhang, X.-W.; Wang, C.; Mo, Z.-W.; Chen, X.-X.; Zhang, W.-X.; Zhang, J.-P.* Quasi-open Cu(I) sites for efficient CO separation with high H_2O/O_2 tolerance. Nat. Mater. 2024, 23, 116.**

[2] **Wang, C.; Zhang, X.-W.; Chen, X.-X.; Zhang, W.-X.; Zhang, J.-P.* Isomeric Porous Cu(I) Triazolate Frameworks Showing Periodic and Aperiodic Flexibility for Efficient CO Separation. J. Am. Chem. Soc. 2024, 146, 13886.**

双稳态晶态框架材料

张章静 [1,*]

[1] 福建师范大学化学与材料学院，福建师范大学旗山校区，350117

*Email: zzhang@fjnu.edu.cn

摘要正文：双稳态是材料的物理性质在一定的温度、电、磁、光、压力等外界微扰条件下，完成不同状态之间的可逆转换，实现两种(或多种)稳定状态，在分子开关、信息存储、传感器材料和记忆材料等领域有广阔的应用前景。但是，双稳态材料面临着“高稳定性与易可逆性矛盾”的难题，导致该领域发展仍处于起步状态。传统双稳态材料通常以共价键或金属有机配位键构筑，键能较高，稳定性好、但可逆能垒高、易可逆性差，存在转化能耗高、效率低、速率慢等问题。因此，利用氢键等弱的非共价相互作用的键能低、可逆性强的特点，我们提出利用非共价相互作用组装双稳态材料的新策略。但存在弱键无法保持稳定结构的挑战。因此，申请人以非共价有机框架材料为研究对象，结合路易斯酸碱对理论和结构化学控制合成，率先提出节点主导的协同调控新策略，发展出榫卯组装和路易斯碱调控等新方法，开发新节点，合成高稳定、高可逆性、高结晶性的双稳态框架材料；应用于独特的温度-压力门控筛分效应的、多重态异质结光学防伪、多重阻变材料；在普通实验室平台条件下开发原位探测技术，从原子、分子水平对双稳态的机理进行深入研究；并以通讯/共同通讯作者在Nat. Chem.、Acc. Chem. Res.、 J. Am. Chem. Soc.、Angew. Chem. Int. Ed.、Chem、Nat. Commun.、Sci. Adv.、Adv. Mater.及CCS Chem.等学术期刊发表论文，[1-10] 推动了双稳态框架材料新体系的建立。

关键词：双稳态；框架材料

参考文献

[1] **Y. Yang, L. Li, R. B. Lin, Y. Ye, Z. Yao, L. Yang, F. Xiang, S. Chen, Z. Zhang,* S. Xiang,* B. Chen,* Nat. Chem., 2021, 13(10): 933-939.**

[2] **L. Chen, Z. Yuan, H. Zhang, Y. Ye, Y. Yang, F. Xiang, K. Cai, S. Xiang, B. Chen, Z. Zhang,* Angew. Chem. Int. Ed., 2022, 61, e202213959.**

[3] **Y. Li, X. Wang, H. Zhang, L. He, J. Huang, W. Wei, Z. Yuan, Z. Xiong, H. Chen, S. Xiang, B. Chen, Z. Zhang,* Angew. Chem. Int. Ed., 2023, e202311419.**

[4] **J. Huang, Y. Li, H. Zhang, Z. Yuan, S. Xiang, B. Chen, Zhangjing Zhang,* Angew. Chem. Int. Ed., 2023, e202315987.**

[5] **S. Chen, Y. Ju, Y. Yang, F. Xiang, Z. Yao, H. Zhang, Y. Li, Y. Zhang, S. Xiang, B. Chen, Z. Zhang,* Nat. Commun., 2024, 15, 298.**

H. Zhang, Y. Li, L. Chen, Y. Yang, H. Lin, S. Xiang, B. Chen, Z. Zhang,* Chem, 2023, 9, 242-252.

[6] **C.-H. Liu, L. Chen, H. Zhang, Y. Li, H. Lin, L. Li, J. Wu, C. Liu, Z.-M. Ye, S. Xiang, B. Chen, Z. Zhang,* Chem, 2023, 9, 3532-3543.**

[7] **Y. Chen, Y. Yang, Y. Wang, Q. Xiong, J. Yang, S. Xiang, L. Li,* J. Li, Z. Zhang,* B. Chen,* J. Am. Chem. Soc., 2022, 144, 17033−17040.**

[8] **Y. Lv, J. Liang, Z. Xiong, X. Yang, Y. Li, H. Zhang, S. Xiang, B. Chen,* Z. Zhang,* Adv. Mater., 2024, 36, 2309130.**

[9] **Z. Zhang,* Y. Ye, S. Xiang, B, Chen,* Acc. Chem. Res., 2022, 55, 3752−3766.**

2D Conjugated Polymers and Related Devices

Long Chen[1,*]

[1]State Key Laboratory of Supramolecular Structure and Materials, College of Chemistry, Jilin University, Changchun 130012, China

* longchen@jlu.edu.cn

One dimensional linear conjugated polymers, especially the counterparts containing donor-acceptor structural units, have gained tremendous research interests and application potentials in optoelectronics. It has been demonstrated that introduction of conjugated side chains to the backbone of 1D linear conjugated polymers (i.e. changing the traditional 1D conjugation to the 2D conjugation) could effectively improve the performance of the linear conjugated polymers.

Inspired by this idea, we recently focus on introducing such "2D conjugation" strategy to the design and synthesis of novel 2D organic frameworks, and try to simplify the synthesis and improve the electron delocalization degree and related device performance. We recently developed an efficient "two-in-one" molecular design strategy to construct new 2D polymers and illustrated the mechanisms and advantages of the self-polymerization of the bifunctional building blocks over the conventional co-polymerization of different monomers. Furthermore, we developed several new efficient methods to stabilize the 2D conjugated polymers *via* using the molecular planarization, and integrating electron donor-acceptor alternating structures. Last but not least, a versatile method for the fabrication of 2D conjugated polymer thin films was developed based on layer-by-layer assembly. And the new application scope of 2D conjugated polymers in organic spintronics and energy related materials have been exploited as well. We wish our results could provide new insights and method to the development of the synthetic methodology and device fabrication techniques for 2D polymers.

Keywords: 2D Conjugation; Organic Frameworks; Optoelectronics; Spintronics

References

[1] L. Zhou, S. Yang, N. Quan, Z. Geng, S. Wang, B. Zhao, X. Wang, Y. Dong, R. Tai, J. Hu, L. Zhang, Wetting Behavior of Surface Nanodroplets Regulated by Periodic Nanostructured Surfaces, ACS Appl. Mater. Interfaces 2021, 13, 55726−55734.
[2] Cui, C.; Wong, W-Y.*; Li, Y.* Energy Environ. Sci., 2014, 7: 2276.
[3] Li, Y.; Chen, Q.; Xu, T.; Liu, J.; Yu, X.; Ma, S.; Qin, T., Chen, L.* J. Am. Chem. Soc. 2019, 141: 13822.
[4] Xing, G.; Zheng, W.; Gao, L.; Zhang, T.; Wu, X.; Fu, S.; Song, X.; Zhao, Z.; Osella, S.; Wang, H.; Cai, J.; Mateo-Alonso, A.; Chen, L. J. Am. Chem. Soc. 2022, 144: 8214; Qi, M.; Zhou, Y.; Lv, Y.; Chen, W.; Su, X.; Zhang, T.; Xing, G.; Xu, G.; Terasaki, O.; Chen, L. J. Am. Chem. Soc. 2023, 145: 2739.
[5] Song, X.; Wang, X.; Li, Y.; Zheng, C.; Zhang, B.; Di, C.; Li Feng, Jin, C.*; Mi, W.; Chen, L.*; Hu, W. Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59: 1118.
[6] Li, Y.; Chen, W.; Xing, G.; Jiang, D.; Chen, L.* Chem. Soc. Rev. 2020, 49: 2852.
Zhang, T.; Zhang, G.; Chen, L. Acc. Chem. Res. 2022, 55: 795.

Gas separation applications and green preparation of MOFs

Yang Chen*

College of Chemistry and Chemical Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024

* chenyangtyut@163.com

Metal-organic frameworks exhibit vast application prospects in gas separation fields such as methane purification, low-carbon olefin separation, carbon dioxide capture, and water capture due to their structural diversity and tunability. The structure of these crystalline materials can be precisely tuned by selecting different metal nodes and organic ligands, thereby achieving high selectivity for specific gases. Leveraging this characteristic of MOFs, it is possible to design and synthesize separation materials suited for complex systems, further advancing the development of various gas separation technologies. On the other hand, one of the key factors for the widespread application of MOFs is whether they can be prepared cost-effectively and environmentally friendly. Currently, traditional MOFs methods often involve high temperature, high pressure, and the use of organic solvents, which limits their large-scale industrial application. Therefore, developing low-energy, non-toxic, and green preparation methods is crucial for advancing the use of MOFs. We are exploring gas separation applications in areas such as low-carbon olefins, carbon dioxide, and atmospheric water collection, with the hope that innovations in MOF structure tuning and green synthesis methods will continue to drive the progress of gas separation technologies, contributing to more efficient and environmentally friendly industrial gas separation solutions.

Keywords: Metal-organic frameworks; gas separation; green preparation

References

[1] Y. Chen, et al. Ultramicroporous Hydrogen-Bonded Organic Framework Material with a Thermoregulatory Gating Effect for Record Propylene Separation. J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 17033-17040.

[2] Y. Chen, et al. Removal of Ammonia Emissions via Reversible Structural Transformation in M(BDC) (M = Cu, Zn, Cd) Metal-Organic Frameworks. Environ. Sci. Technol. 2020, 54, 3636-3642.

[3] Y. Chen, et al. Synthesis of hierarchically porous Cu-BTC through phase-controlled etching. Chem. Eng. Sci. 2024, 297, 120293.

Oriented design and control of soft nanoporous crystals for separation of light hydrocarbons

Jingui Duan[1, 2, *]

[1] State Key Laboratory of Chemistry and Utilization of Carbon-Based Energy Resources, College of Chemistry, Xinjiang University, Urumqi, 830017 China

[2] State Key Laboratory of Materials-Oriented Chemical Engineering, College of Chemical Engineering, Nanjing Tech University, Nanjing 211816, China

* duanjingui@njtech.edu.cn

The separation of substances by porous materials is a fundamental process in both our daily lives and in industry. To illustrate, zeolite adsorbents are employed in the manufacture of respirators to increase the oxygen concentration to meet medical standards, whereas activated carbons are utilized as typical adsorbents for water purification. Nevertheless, one of the most challenging processes in industry is the separation of C2 and C3 olefins from corresponding alkynes, due to the fact that they are of a similar size and volatility. It is therefore imperative that the development of advanced porous adsorbents for this challenging task be expedited, with a view to ensuring broad application prospects in terms of high efficiency and energy savings.

Soft nanoporous crystals with structural dynamics represent one of the most exciting classes of recently discovered materials. Nevertheless, the design and control of this system, which is capable of recognizing gases with significant similarities, represents a significant challenge. In this study, we have developed a series of soft crystals, in which the strategies of confined-rotational shutters, confined local dynamic water nanotubes, temperature-dependent gating effects and trap-and-flow channels have been employed to demonstrate promising separation performance. In the future, regulating the soft pore nature can be conveniently extended to other families of nanoporous crystals, thereby making it a powerful tool to optimize these materials for more complex applications.

References

[1] Duan, J.; Higuchi, M.; Zheng, J.; Noro, S. I.; Chang, I. Y.; Hyeon-Deuk, K.; Mathew, S.; Kusaka, S.; Sivaniah, E.; Matsuda, R.; Sakaki, S.; Kitagawa, S., Density Gradation of Open Metal Sites in the Mesospace of Porous Coordination Polymers. J. Am. Chem. Soc. 2017, 139 (33), 11576-11583.

[2] Dong, Q. B.; Huang, Y. H.; Wan, J. M.; Lu, Z. Y.; Wang, Z. X.; Gu, C.; Duan, J. G.; Bai, J. F., Confining Water Nanotubes in a CuO-Based Metal-Organic Framework for Propylene/Propane Separation with Record-High Selectivity. J. Am. Chem. Soc. 2023, 145 (14), 8043-8051.

[3] Huang, Y. H.; Wan, J. M.; Pan, T.; Ge, K.; Guo, Y. A.; Duan, J. G.; Bai, J. F.; Jin, W. Q.; Kitagawa, S., Delicate Softness in a Temperature-Responsive Porous Crystal for Accelerated Sieving of Propylene/Propane. J. Am. Chem. Soc. 2023, 145 (44), 24425-24432.

[4] Lu, Z. Y.; Du, L. T.; Guo, R. Y.; Zhang, G. B.; Duan, J. G.; Zhang, J. F.; Han, L.; Bai, J. F.; Hupp, J. T., Double-Walled Zn@Zn Multicomponent Senary Metal-Organic Polyhedral Framework and Its Isoreticular Evolution. J. Am. Chem. Soc. 2021, 143 (43), 17942-17946.

[5] Dong, Q. B.; Zhang, X.; Liu, S.; Lin, R. B.; Guo, Y. N.; Ma, Y. S.; Yonezu, A.; Krishna, R.; Liu, G. P.; Duan, J. G.; Matsuda, R.; Jin, W. Q.; Chen, B. L., Tuning Gate-Opening of a Flexible Metal-Organic Framework for Ternary Gas Sieving Separation. Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59 (50), 22756-22762.

[6] Huang, Y. H.; Feng, Y. F.; Li, Y.; Tan, K.; Tang, J.; Bai, J. F.; Duan, J. G., Immobilization of Amino-site into a Pore-Partitioned Metal-Organic Framework for Highly Efficient Separation of Propyne/Propylene. Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63 (22).

[7] Wan, J. M.; Zhou, H. L.; Hyeon-Deuk, K.; Chang, I. Y.; Huang, Y. H.; Krishna, R.; Duan, J. G., Molecular Sieving of Propyne/Propylene by a Scalable Nanoporous Crystal with Confined Rotational Shutters. Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62 (52).

[8] Yang, X. X.; Zhang, Q.; Liu, Y. F.; Nian, M. J.; Xie, M.; Xie, S. S.; Yang, Q. L.; Wang, S.; Wei, H.; Duan, J. G.; Dong, S. Y.; Xing, H., Metal-Organic Framework Nanoparticles with Universal Dispersibility through Crown Ether Surface Coordination for Phase-Transfer Catalysis and Separation Membranes. Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62 (34).

[9] Duan, J.; Higuchi, M.; Krishna, R.; Kiyonaga, T.; Tsutsumi, Y.; Sato, Y.; Kubota, Y.; Takata, M.; Kitagawa, S., High CO2/N2/O2/CO separation in a chemically robust porous coordination polymer with low binding energy. Chem. Sci. 2014, 5 (2), 660-666.

[10] Duan, Y. F.; Huang, Y. H.; Wang, C. Q.; Wang, Q.; Ge, K.; Lu, Z. Y.; Wang, H. J.; Duan, J. G.; Bai, J. F.; Jin, W. Q., Formation and fine-tuning of metal-organic frameworks with carboxylic pincers for the recognition of a CH tetramer and highly selective separation of CH/CH. Chem Sci 2023, 14 (17), 4605-4611.

[11] Li, Y.; Wu, Y. X.; Zhao, J. X.; Duan, J. G.; Jin, W. Q., Systemic regulation of binding sites in porous coordination polymers for ethylene purification from ternary C2 hydrocarbons. Chem Sci 2024, 15 (24), 9318-9324.

[12] Liu, S.; Huang, Y. H.; Wan, J. M.; Zheng, J. J.; Krishna, R.; Li, Y.; Ge, K.; Tang, J.; Duan, J. G., Fine-regulation of gradient gate-opening in nanoporous crystals for sieving separation of ternary C3 hydrocarbons. Chem Sci 2024, 15 (17), 6583-6588.

Photoactive Lead Halide-Based Metal-Organic Frameworks

Honghan Fei[1,*]

[1]School of Chemical Science and Engineering, Tongji University, 1239 Siping Rd., Shanghai, 200092

* fei@tongji.edu.cn

Metal-organic frameworks (MOFs) are a class of porous crystalline materials with high specific surface area and high porosity. However, the conventional carboxylate-based MOFs often exhibit a narrow visible-light absorption range and limited charge-transport capabilities. It is intriguing to introduce photo/electro-active groups to enhance their potential applications in photochemistry. Lead halide materials possess tunable semiconductive band structures and high carrier mobility. This presentation reports our research groups' recent work on coordination assembly of lead halide hybrids.[1] First, we have established the synthetic approach for constructing layered lead halide frameworks using linear dicarboxylic acids, and achieved photocatalytic overall water splitting.[2] Second, we have extended the synthesis to porous frameworks consisting of lead halide secondary building units (SBUs), which exhibit small molecule activation including CO_2, H_2O and O_2 for photocatalysis.[3,4] Third, the porous frameworks facilitate the structural deformation of the soft lead halide SBUs for luminescent ferroelectrics.[5] Overall, the coordination assembly of lead halide-based MOFs overcomes the stability bottleneck of lead halide perovskites, and combine the excellent photophysical properties and high porosity to extend a variety of photoactive properties.

Keywords: Metal-organic frameworks; lead halide hybrids; crystal engineering; photocatalysis; photoluminescence

References

[1] C. Sun; R. Xi; H. Fei, Organolead Halide-Based Coordination Polymers: Intrinsic Stability and Photophysical Applications, Acc. Chem. Res. 2023, 56, 452.

[2] X. Song; G. Wei; J. Sun; C. Peng; J. Yin; X. Zhang; Y. Jiang; H. Fei, Overall Photocatalytic Water Splitting by an Organolead Iodide Crystalline Material, Nat. Catal. 2020, 3, 1027.

[3] X. Chen; C. Peng; W. Dan; L. Yu; Y. Wu; H. Fei, Bromo- and Iodo-Bridged Building Units in Metal-Organic Frameworks for Enhanced Carrier Transport and CO2 Photoreduction by Water Vapor, Nat. Commun. 2022, 13, 4592.

[4] J. Yin; D. Li; C. Sun; Y. Jiang; Y. Li; H. Fei, Solar-Driven Coversion of CO2 to C2 Products by the 3d Transtion Metal Intercalates of Layered Lead Iodides, Adv. Mater. 2024, 36, 2403651.

[5] C. Sun; Y. Li; J. Yin; D. Li; C. Wu; C. Zhang; H. Fei, Highly Stable MOF-Type Lead Halide Luminescent Ferroelectric, Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202407102.

Topology Reprogramming of Metal-Organic Polyhedra

Takao Fujikawa[1], Fuyuki Matsuda[1], Daishi Fujita[1,*]

[1]Department of Chemistry Institute of Integrated Cell-Material Sciences (WPI-iCeMS), Kyoto University, iCeMS Research Building, Yoshida, Sakyo-ku, Kyoto 606-8501, Japan

* dfujita@icems.kyoto-u.ac.jp

The topology of polyhedral molecules that can be synthesized through self-assembly is surprisingly limited. According to reviews on polyhedral metal complexes, there are only about 20 polyhedral topologies that are highly reproducible in synthetic chemistry. [1] Therefore, the development of methods to actively propose new polyhedral topologies could significantly advance the chemistry of polyhedral self-assembly. In this context, the author has been working on exploring new polyhedral topologies using graph theory, aiming to build theoretical frameworks and validate them through synthetic chemistry.

Graph theory refers to the mathematical study of "graphs," which are structures made up of "vertices" and "edges." Self-assembled structures, such as polyhedral molecules, are well-suited for graph theory. For example, the structural principles of icosahedral virus capsids can be mathematically described as part of the Goldberg polyhedral group. However, this principle assumes that "self-assembly spontaneously selects highly symmetrical structures." This means that it is not applicable for assembling structures with lower symmetry. To address this, the author has taken on the challenge of developing new methods for the spontaneous assembly of low-symmetry structures using graph theory, successfully achieving the self-assembly of polyhedral molecules that exhibit low symmetry.

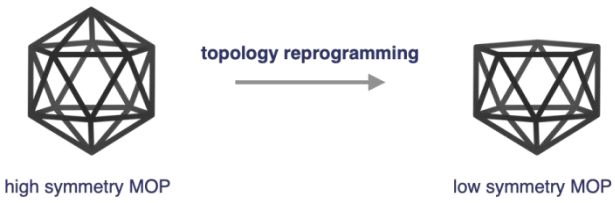


Figure1. Image of our research concept.

Keywords: metal-organic polyhedra. graph theory

References

[1] S. Lee, H. Jeong, D. Nam, M. S. Lah, W. Choe, Chem. Soc. Rev. 2021, 50, 528–555.

Revealing Invisibles: Analysis of Crystalline Porous Particles by 3D Electron Diffraction

Zhehao Huang[1,2,*]

[1]Center for Electron Microscopy, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China

[2]School of Emergent Soft Matter, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China

* zhehaohuang@scut.edu.cn

Porous coordination polymers (PCPs) and covalent organic frameworks (COFs) are known for their versatile physicochemical properties, which offers immense opportunities in a wide range of applications. However, PCPs and COFs are often synthesized as nanocrystals and/or multiphasic powders, which are challenging for studies by X-ray diffraction methods. Three-dimensional electron diffraction (3DED) has been developed to tackle these challenges. By taking advantage of the strong interaction between electrons and matter, 3DED allows single crystal structural analysis even when the crystal sizes are down to the range of nanometers[1].

In this talk, I will give an overview of the development of low-dose 3DED method for analyzing PCPs and COFs, where we overcome the challenges of electron beam damage to these compounds. Using 3DED, I will give an example of studying structure-property relationship of PCN-226 as an electrocatalyst[2]. Furthermore, I talk about the high-throughput advantage of 3DED on discovery of new PCP compounds among phase mixtures[3], and discovery of unknown layer stacking behavior in a 2D COF[4]. Last but not least, I will present our recent development by using 3DED to probe molecular motions in PCP nanocrystals[5] and using 3DED to study host-guest interactions[6]. We believe that using 3DED as a powerful analytical tool for discovering new PCPs and COFs and revealing their unique properties at an atomic level would help to accelerate research in this community.

Keywords: porous coordination polymer, covalent organic framework, metal-organic framework, electron diffraction, electron crystallography.

References

[1] T. Yang, T. Willhammar, H. Xu, X. Zou, Z. Huang, Nat. Protoc. 2022, 17, 2389–2413.
[2] M. O. Cichocka, Z. Liang, D. Feng, S. Back, S. Siahrostami, X. Wang, L. Samperisi, Y. Sun, H. Xu, N. Hedin, H. Zheng, X. Zou, H.-C. Zhou, Z. Huang, J. Am. Chem. Soc. 2020, 142, 15386–15395.
[3] M. Ge, Y. Wang, F. Carraro, W. Liang, M. Roostaeinia, S. Siahrostami, D. M. Proserpio, C. Doonan, P. Falcaro, H. Zheng, X. Zou, Z. Huang, Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 11391–11397.
[4] C. Kang, K. Yang, Z. Zhang, A. K. Usadi, D. C. Calabro, L. S. Baugh, Y. Wang, J. Jiang, X. Zou, Z. Huang, D. Zhao, Nat. Commun. 2022, 13, 1370.
[5] L. Samperisi, A. Jaworski, G. Kaur, K. P. Lillerud, X. Zou, Z. Huang, J. Am. Chem. Soc. 2021, 143, 17947–17952.
[6] M. Ge, T. Yang, H. Xu, X. Zou, Z. Huang, J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 15165–15174.

Sponge-Like Macrocycle Crystals

Kecheng Jie[1,*]

[1] State Key Laboratory of Coordination Chemistry, School of Chemistry and Chemical Engineering, Nanjing University, Nanjing 210023, P. R. China

* jiekecheng@nju.edu.cn

Bulk sponge-like soft materials (e.g., sponges, towels, fabrics) can release guests when external forces such as squeezing, twisting, and screwing are applied to induce material deformation, compress voids, and ultimately release guests. We here reported an unprecedented molecular-squeeze triggered guest release behavior from sponge-like macrocyclic crystals. The material functions as typical sponge to include guest molecules within their microscopic voids that are adaptively formed, thus acting as adsorbents for toluene/pyridine separations. Intriguingly, vaporized ethyl acetate molecules could trigger the guest release from the sponge-like material without entering the pores or voids of the adsorbent to replace the guest. Instead, they work as external forces applied directly onto the adsorbents themselves, squeezing the materials to close the voids and release the guest molecules.

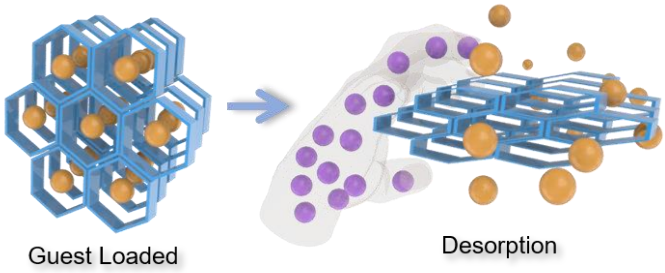


Fig. 1 Guest desorption from sponge–like macrocycle crystals by molecular squeeze induced deformation.

Keywords: macrocycles, sponges, squeeze, crystals, guest desorption

References

[1] Jie, K.; Zhou, Y.; Li, E.; Huang, F. Nonporous Adaptive Crystals of Pillararenes. Acc. Chem. Res. 2018, 51, 2064-2072.

Synthesis of Electrically Conductive [Fe_4S_4]-based Coordination Polymers

Kentaro Kadota[1*]

[1]Department of Chemistry, Graduate School of Science, Kyoto University, Kitashirakawa-Oiwakecho, Sakyo-ku, Kyoto 606-8502, Japan

* kadota.kentaro.7a@kyoto-u.ac.jp

Tailoring the molecular building blocks of hybrid organic-inorganic materials allows for precise modulation of their electronic structures. Designing electrically conductive coordination materials, such as coordination polymers (CPs) and metal–organic frameworks (MOFs), has been restricted to single-metal nodes. This limitation arises because the metal–oxo clusters typically found in CPs do not facilitate electrical conduction due to the localized electron orbitals. The development of metal-cluster nodes with charge-delocalized bonds would expand the structural and electrochemical tunability of conductive CP/MOFs. Although the cuboidal [Fe_4S_4] cluster is a ubiquitous cofactor for electron transport in biological systems, the limited electrically conductive materials employ the [Fe_4S_4] cluster as a building unit due to the lack of suitable bridging linkers.

In this work, we utilized ditopic N-heterocyclic carbene (NHC) linkers to connect [Fe_4S_4] clusters via charge-delocalized Fe–C bonds, enhancing electronic communication between the clusters. [$Fe_4S_4Cl_2$(ditopic-NHC)] (**1**) was synthesized from the preformed discrete [Fe_4S_4] cluster and *in situ* generated NHC linkers.[1] Linear sweep voltammetry of **1** demonstrated a high electrical conductivity of 1.0 mS cm^{-1} at 25 °C under Ar atmosphere, surpassing the conductivity of related analogues with less charge-delocalized Fe–S bonds. We comprehensively studied the amorphous structure of **1** by total X-ray scattering and FT-IR and the bonding character by DFT calculations. Besides, we'll discuss the electroactive behavior of the related Fe-based coordination nanosheets in solution phase as well.[2]

Key words: coordination polymers, electrical conductivity, synthesis

References

[1] K. Kadota, T. Chen, E. L. Gormley, C. H. Hendon, M. Dincă, and C. K. Brozek,* "Electrically Conductive [Fe4S4]-based Organometallic Polymers", Chem. Sci., **2023**, 14, 11410.

[2] J. McKenzie, D. Pennington, T. Ericson, E. Cope, A. Cozzolino, K. Kadota,* C. H. Hendon,* and C. K. Brozek,* "Tunable Interlayer Interactions in Exfoliated 2D van der Waals Framework Fe(SCN)2(pyrazine)2", Adv. Mater., **2024**, Just Accepted.

Multiple Linkage Construction for Multinary Metal–Organic Frameworks

Qiaowei Li[1,*]

[1]Department of Chemistry, Fudan University, Shanghai, China

* qwli@fudan.edu.cn

Metal–organic frameworks (MOFs) are usually constructed by the coordination between one kind of metal and one kind of organic linker. It remains a great challenge to further increase the number of components in one single framework, since precise placement of multiple components in a well-ordered framework requires careful design of the lattice topology, judicious selection of building blocks, and precise control of the crystallization parameters.[1]

In this talk, I will present several strategies we developed to introduce multiple inorganic and organic component into one framework in an ordered way. First, multinary MOF structures were prepared by consolidating two metal ions with distinct coordination preferences and geometries, and two or three different linkers, achieving quaternary and quinary MOFs.[2] The multinary MOFs based on Cu and Yb provide a new method to effectively accommodate both imaging and therapy functions in one well-defined material for precise treatment.[3] By replacing the weak moieties with organic linkers post-synthetically, the multinary MOFs based on Al and Cu could be converted to stable Al-based MOFs with exceptional water harvesting capacity.[4] In the end, I will show our progress in combining coordination linkages with dynamic covalent linkages for the construction of multinary MOFs.[5]

Keywords: metal-organic frameworks, multicomponent, synthesis

References

[1] W. Xu, B. Tu, Q. Liu, Y. Shu, C.-C. Liang, C. S. Diercks, O. M. Yaghi, Y.-B. Zhang, H. Deng, Q. Li, Nat. Rev. Mater. 2020, 5, 764.
[2] B. Tu, L. Diestel, Z.-L. Shi, W. R. L. N. Bandara, Y. Chen, W. Lin, Y.-B. Zhang, S. G. Telfer, Q. Li, Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58, 5348.
[3] L. Yang, M. Lu, Z. Jiang, Z.-H. Chen, Y. Tang, Q. Li, J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 26169.
[4] H. Xu, Y. Wu, L. Yang, Y. Rao, J. Wang, S. Peng, Q. Li, Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202217864.
[5] X. Li, J. Wang, F. Xue, Y. Wu, H. Xu, T. Yi, Q. Li, Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 2534.

Metal-Organic Frameworks for Hydrocarbon Separation

Weigang Lu*

Jinan University, Guangzhou, China 510632

* weiganglu@jnu.edu.cn

Porous materials like metal-organic frameworks (MOFs) provide flexibility in their synthesis and design to accommodate targeted molecules. By adjusting pore dimensions, surface functionality, and framework flexibility, MOFs show high selectivity in separating and purifying hydrocarbons. Traditional molecular sieving materials may achieve maximum adsorption selectivity by excluding large molecules but struggle to separate middle-sized molecules from mixtures of three or more components. We proposed a dynamic molecular sieving mechanism and designed a MOF material (JNU-3) with dynamic molecular pockets along one-dimensional channels that can selectively adsorb alkynes over C_2H_4, enabling the separation of C_2H_4 from mixtures with C_2-C_4 alkynes in a single step regardless of their sizes. Large-scale breakthrough experiments successfully demonstrated the collection of C_2H_4 ($\geq$ 99.9995%) from mixtures with C_2-C_4 alkynes in a single adsorption operation.

In summary, supramolecular chemistry has significantly advanced host-guest interactions and molecular recognition. These advancements have great potential in the fields of hydrocarbon separation/purification. Future research is focused on further tuning the properties of the MOF materials for broader applications and enhanced performance.

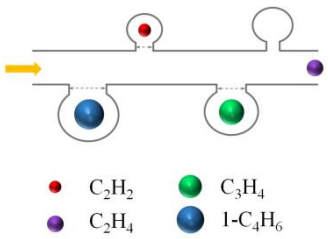


Figure 1 Illustration of dynamic molecular pockets for one-step splitting of C_2H_4

Keywords: Metal-Organic Frameworks, Hydrocarbon Separation, Energy-Efficient, Molecular Pocket

References

[1] H. Zeng, M. Xie, T. Wang, R.-J. Wei, X.-J. Xie, Y. Zhao, W. Lu, D. Li, Orthogonal-array dynamic molecular sieving of propylene/propane mixtures, Nature, 2021, 595, 542-548.

[2] H. Zeng, X.-J. Xie, T. Wang, M. Xie, Y. Wang, R.-J. Wei, W. Lu, D. Li, Dynamic molecular pockets on one-dimensional channels for splitting ethylene from C2–C4 alkynes, Nature Chemical Engineering, 2024, 1, 108-115.

Polyoxometalate-Based Porous Materials for Catalysis and Adsorption

Naoki Ogiwara[1,*]

[1]Department of Basic Science, School of Arts and Sciences, The University of Tokyo, Komaba, Meguro-ku, Tokyo, 153–8902

* cogiwara@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

Polyoxometalates (POMs) are oxide cluster anions composed of high-valence early transition metals.[1] We employed two distinct approaches to construct POM-based porous materials. The first approach involves the assembly of POM anions with macrocations, such as metal complexes and polycations, through Coulombic interactions, resulting in the formation of porous ionic crystals (PICs, **Fig. 1**).[2–4] These PICs exhibit significant catalytic activity, serving as heterogeneous catalysts for both acid-catalyzed reactions and electrochemical oxidation reactions. Specifically, a PIC composed of a Keggin-type POM $[\alpha\text{-}CoW_{12}O_{40}]^{6-}$ and a Cr complex $[Cr_3O(OOCCH_2CN)_6(H_2O)_3]^+$ exhibits efficient and sustained OER catalytic activity, while each building block is inactive. The Tafel slope of the linear sweep voltammetry curve and the relatively large kinetic isotope effect value suggest that elementary steps closely related to the OER rate involve single-electron and proton transfer reactions. Electrochemical and spectroscopic studies clearly show that the synergistic catalysis originates from the charge transfer from the Cr complex to $[\alpha\text{-}CoW_{12}O_{40}]^{6-}$; the increased electron density of $[\alpha\text{-}CoW_{12}O_{40}]^{6-}$ may increase its basicity and accelerate proton abstraction as well as enhance electron transfer to stabilize the reaction intermediates adsorbed on $[\alpha\text{-}CoW_{12}O_{40}]^{6-}$.

The second approach involves the incorporation of POMs into porous coordination polymers (PCPs). The resulting POM/PCP materials exhibited excellent cation adsorption properties, particularly towards Cs^+ ions (**Fig. 2**).[5] In particular, the composite of ZIF-8 and $[\alpha\text{-}PMo_{12}O_{40}]^{3-}$ (**PMo_{12}/ZIF-8**) adsorbed Cs^+ ions effectively when compared to pristine ZIF-8. In addition, the reduction of Mo within the POM from Mo^{VI} to Mo^{V} by ascorbic acid during the Cs^+ uptake process doubled the Cs^+ uptake capacity of **PMo_{12}/ZIF-8**. This observation can be attributed to the increased overall negative charge of the POM facilitating Cs^+ uptake to compensate for the charge imbalance. Hybridization with other PCPs (MIL-101 and UiO-66) largely suppresses the Cs^+ uptake, highlighting the importance of hydrophobicity in Cs^+ capture. Furthermore, **PMo_{12}/ZIF-8** led to an outstanding Cs^+ uptake (291.5 mg g^{-1}) with high selectivity (79.6%) from quinary mixtures of alkali metal cations even among other representative porous materials (Prussian blue and zeolites).

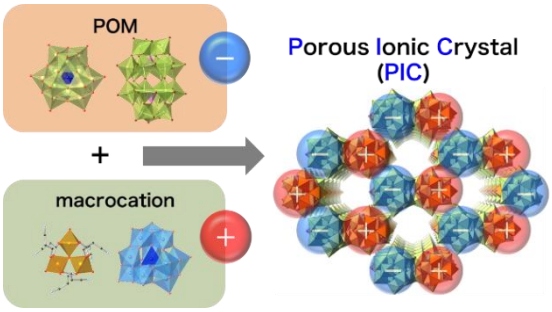


Fig. 1 the formation of porous ionic crystals (PICs)

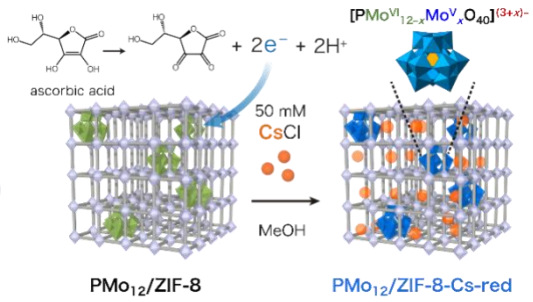


Fig. 2 Cs^+ capture by **PMo_{12}/ZIF-8**

Keywords: Polyoxometalate, Ionic Crystal, Coordination Polymer, Catalyst, Ion Adsorption

References

[1] N. Ogiwara, S. Uchida, Metal–Oxo-Cluster-Based Crystals as Solid Catalysts, Chem Catal., 2023, 3, 100607.
[2] Z. Weng, N. Ogiwara, T. Kitao, Y. Kikukawa, Y. Gao, L. Yan, S. Uchida, Incorporating Highly-basic Polyoxometalate Anions Comprising Nb or Ta into Nanoscale Reaction Fields of Porous Ionic Crystals, Nanoscale, 2021,13, 18451–18457.
[3] Y. Shimoyama, N. Ogiwara, Z. Weng, S. Uchida, Oxygen Evolution Reaction Driven by Charge Transfer from a Cr Complex to Co-Containing Polyoxometalate in a Porous Ionic Crystal, J. Am. Chem. Soc., 2022, 144, 2980–2986.
[4] W. Zhou, N. Ogiwara, Z. Weng, C. Zhao, L. Yan, Y. Kikukawa, S. Uchida, Vanadium-Substituted Polycationic Al-Oxo Cluster in a Porous Ionic Crystal Exhibiting Lewis Acidity, Chem. Commun., 2022, 58, 12548–12551.
[5] C. A. Nagasaka, N. Ogiwara, S. Kobayashi, S. Uchida, Reduction-Induced Uptake of Cs+ in Metal–Organic Frameworks Loaded with Polyoxometalates, Small, 2024, 20, 23007004.

Multimode semiconductor sensing integrated system

Linlin Li[1,2], Zhexin Li[1,2], Yiqiang Zheng[1,2], Lili Wang[1,2,*]

[1]State Key Laboratory for Superlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China

[2]Center of Materials Science and Optoelectronic Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

* liliwang@semi.ac.cn

With the rapid development of post-molar information technology, the signal acquisition and processing of semiconductor multifunctional integrated systems are required to be higher. At present, flexible semiconductor sensors can realize single function perception, including light, sound, force, temperature, biochemical signals, etc [1-4]. However, compared with single function devices, multi-mode semiconductor perception fusion has obvious advantages in evaluating human health status and improving disease recognition accuracy. In the traditional multi-mode sensing system, the acquisition of different information is mainly through the integration of various sensors to collect different signals, which will produce large power consumption and circuit redundancy. Therefore, it is very important for us to design semiconductor materials, optimize the structure of new semiconductor devices, and propose new sensing mechanisms to realize the perception and recognition of external complex information.

Keywords: Semiconductor, Sensor, Integrated system

References

[1] Lili Wang* et al. Nature Electronics, 2024, Accept.
[2] Lili Wang* et al. Nature Communications, 2024, 15, 624.
[3] Lili Wang,* et al. Advanced Materials, 2024, 36, 2404026.
[4] Lili Wang,* et al. IEEE Electron Device Letters, 2024, 45, 629-632.

Semicon soft porous interfaces

Ming-Shui Yao[1,*]

[1]State Key Laboratory of Mesoscience and Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

* msyao@ipe.ac.cn

Some crystalline porous materials (CPMs), especially metal-organic frameworks (MOFs) or porous coordination polymers (PCPs), exhibit soft porosity arising from their lattice flexibility (named soft porous crystals), which has garnered significant attention owing to their potential to switch functionalities [1, 2]. To explore the semicon soft porous interfaces, we reported that: 1) the molecular-level integration of insulating *i*MOFs and conductive *c*MOFs (*c*MOF-on-*i*MOF) heterostructures to realize the direct electrical control [3]. Our goal extends beyond simple adsorption and sensing applications. The enhanced gate-type selective sorption of CO_2, even without electrical control, confirms the existence of a porous interface. Under direct electrical control and the transduced electrical signals, the *c*MOF-on-*i*MOF heterostructures with the semiconductive soft porous interfaces exhibit visible flexibility and electrical "shape memory" effects, as revealed by *operando* synchrotron measurements. 2) a strategy to grow 'face-on' and 'edge-on' cMOF nanofilms on substrates by controlling the "stand-up" behaviors of ligands on various surfaces to overcome the difficulty in the orientation control of such film [4], and the establishment of *operando* characterization methodology using atomic force microscopy and X-ray, thereby demonstrating the softness of the crystalline nanofilms and revealing their unique anisotropic softness–dependent conductive functions. It answers the question of whether the generally considered rigid Cu-HHTP can be soft.

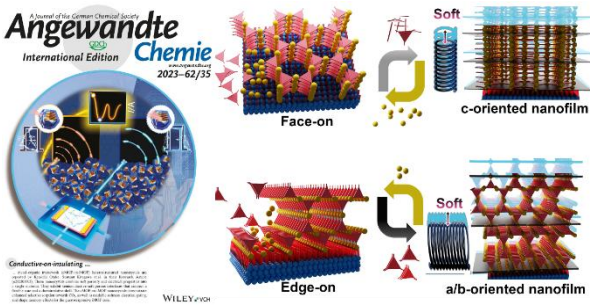


Fig.1 Reports on the synergistic interfaces and electric control of soft porous crystals

Keywords: metal-organic frameworks, conductivity, soft porosity, *operando*, sensor

References

[1] M.-S. Yao, J. W. Xiu, Q. Q. Huang, W. H. Li, W. W. Wu, A. Q. Wu, L. A. Cao, W. H. Deng, G. E. Wang, G. Xu, Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58, 14915-14919.

[2] Z. Shan, J.-Z. Xiao, M. Wu, J. Wang, J. Su, M.-S. Yao, M. Lu, R. Wang, G. Zhang. Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63(16): e202401679

[3] M.-S. Yao, K.-i. Otake, S. Kitagawa, Trends Chem. 2023, 5(8), 588-604.

[4] M.-S. Yao, K.-i. Otake, J. Zheng, M. Tsujimoto, Y.-F. Gu, L. Zheng, P. Wang, S. Mohanna, M. Bonneau, T. Koganezawa, T. Honma, H. Ashitani, S. Kawaguchi, Y. Kubota, S. Kitagawa, Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62 (35): e20230390.

[5] M.-S. Yao, K. Otake, T. Koganezawa, M. Ogasawara, H. Asakawa, M. Tsujimoto, Z.-Q. Xue, Y.-H. Li, N. C. Flanders, P. Wang, Y.-F. Gu, T. Honma, S. Kawaguchi, Y. Kubota, S. Kitagawa, PNAS. 2023, 120 (40): e2305125120.

Solution-Processable MOF-based Systems for Ultra-trace Gas Detection

Xuanhao Wu, Hongye Yuan*

State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials, School of Materials Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049, P. R. China

* hongye.yuan@xjtu.edu.cn

A formidable yet sought-after endeavor is developing sensitive metal-organic framework (MOF) systems that overcome the ubiquitous trade-off between porosity and conductivity. This pursuit holds significant importance for advancing MOF-based chemiresistive sensors, enhancing their sensitivity and selectivity. Within this context, we introduce a template-assisted approach for fabricating a series of stable MOF-based systems, which exhibit considerate conductivity, porosity, and solution processability. This methodology leverages the two-dimensional nature and good conductivity of the templates (e.g., MXene, graphene, etc.) and results in the formation of layered $M_3(HXTP)_2$/template heterostructures that are solution-processable and exhibit highly enhanced conductivity. The excellent solution processability enables the preparation of large-area films with high quality and potential mass-production of relevant sensors. Gas sensors based on those heterostructures all exhibit substantially increased sensitivity but distinctive selectivity depending on the type of templates. Sensing mechanisms and structure-property will be thoroughly discussed based on solid experimental results and theoretical calculations.

Green synthesis and engineering of crystalline porous organic materials

Chao Xu[1,*]

[1]Division of Nanotechnology and Functional Materials, Department of Materials Science and Engineering, Ångström Laboratory, Uppsala University, 75121 Uppsala, Sweden

* chao.xu@angstrom.uu.se

Metal-organic frameworks (MOFs) and covalent organic frameworks (COFs) are new families of crystalline porous materials. Due to their unique properties, such as high surface areas, tunable pore sizes, synthetic diversity, and ease of modification, they have been extensively studied for applications in gas adsorption and separation, catalysis, and energy harvesting and storage. However, the synthesis of MOFs and COFs typically requires harsh solvothermal conditions, which limits their large-scale production. Additionally, MOFs and COFs are usually synthesized as insoluble and infusible powders, posing significant challenges in processing them into desired shapes for specific applications. These limitations have significantly hampered their practical applications.

To address these limitations, we have recently developed methods for the green synthesis and engineering of these materials. For example, we have developed an aqueous synthesis approach for imine-linked COFs under ambient conditions. Sixteen distinct COFs with high crystallinity and surface areas (up to 2487 m^2/g) were synthesized from monomers with various molecular sizes, geometries, pendant groups, and core structures. Furthermore, we employed an interfacial synthesis technique to grow COF nanolayers on the surface of cellulose nanofibers (CNF) in aqueous solution. The obtained CNF@COF hybrid nanofibers can be easily processed into freestanding nanopapers, which demonstrate high efficiency in removing trace amounts of antibiotics from wastewater through membrane separation. By employing a similar interfacial synthesis approach, we also enabled the growth of MOF nanolayers on the surface of CNF and the fabrication of various CNF@MOF nanopapers. The obtained CNF@MOF nanopapers have been developed for various applications, including solar thermal-driven seawater desalination, ionic power generation, and electrochemical energy storage. These studies open up new possibilities for green synthesis, processing, and practical application of crystalline porous organic materials.

Keywords: covalent organic frameworks; metal-organic frameworks; green synthesis and engineering; cellulose nanofibers

References

[1] X. Kong, Z. Wu, M. Strømme, C. Xu, Ambient Aqueous Synthesis of Imine-Linked Covalent Organic Frameworks (COFs) and Fabrication of Freestanding Cellulose Nanofiber@COF Nanopapers, J. Am. Chem. Soc., 2024, 146, 742-751.

[2] S. Zhou, T. Liu, M. Strømme, C. Xu, Electrochemical Doping and Structural Modulation of Conductive Metal-Organic Frameworks, Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63, e202318387.

[3] S. Zhou, X. Kong, M. Strømme, C. Xu, Efficient Solar Thermal Energy Conversion and Utilization by a Film of Conductive Metal–Organic Framework Layered on Nanocellulose, ACS Mater. Lett., 2022, 4, 1058-1064.

[4] S. Zhou, Z. Qiu, M. Strømme, C. Xu, Solar-driven ionic power generation via a film of nanocellulose @ conductive metal–organic framework, Energy. Environ. Sci., 2021, 14, 900-905.

[5] S. Zhou, X. Kong, B. Zheng, F. Huo, M. Strømme, C. Xu, Cellulose Nanofiber @ Conductive Metal–Organic Frameworks for High-Performance Flexible Supercapacitors, ACS Nano, 2019, 13, 9578-9586.

Two-Dimensional Polymers for Energy Storage and Conversion

Yuxi Xu*

College of Engineering, Westlake University, Hangzhou, 310024

* xuyuxi@westlake.edu.cn

Graphene is a unique single-atom-thick 2D carbon nanosheet and also a 2D natural polymer consisting of sp^2 chemically bonded carbon atoms. Inspired by the structure and property of graphene, there is growing interest in rational synthesis of new 2D crystalline polymers at the atomic or molecular level via 2D topological polymerization of designed monomers. The 2D synthetic polymers with new linkage motifs and excellent structural diversity can demonstrate highly tailorable network structures and physicochemical properties and hold great potential in various applications such as energy, catalysis, and optoelectronics, which have emerged as an active research area in the functional polymers and 2D materials. In this talk we will introduce our recent progress on the 2D synthetic polymers particularly 2D triazine polymers. We have developed effective synthesis methods to prepare a series of crystalline 2D triazine polymers in a controlled and scalable way and also processed them into macroscopic assemblies as well as explore their high-performance applications in energy storage and conversion with understanding their unique structure-property relationship.

Keywords: 2D polymers, synthetic methods, electrocatalysis, photocatalysis, batteries

References

[1] Ren, Y. M.; Xu, Y. X.* Chem. Soc. Rev. 2024, 53, 1823-1869.
[2] Cui, K.; Tang, X. L.; Xu, X. P.; Lyu, P. B.; Xu, Y. X.* Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202317664.
[3] Sun, T.; Li, S.; Zhang, L.; Xu, Y. X.* Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202301865.
[4] Wang, C. X.; Lyu, P. B.; Chen, Z.; Xu, Y. X.* J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 12745-12754.
[5] Zhang, Z.; Xu, Y. X.* J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 25222-25232.
[6] Sun, T.; Liang, Y.; Xu, Y. X.* Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202113926.

Dynamic 3D Covalent Organic Frameworks: Robust Soft Porous Crystals

Yue-Biao Zhang*

[1]School of Physical Science and Technology, Shanghai Key Laboratory of High-Resolution Electron Microscopy, State Key Laboratory of Advanced Medical Materials and Devices, ShanghaiTech University, Shanghai 201210, China.

* zhangyb@shanghaitech.edu.cn

Soft porous crystals (SPCs), known for their periodic structural transformations under external stimuli, have emerged at the forefront of crystal chemistry and materials science due to their exceptional performance in functional applications such as gas storage, adsorptive separation, molecular sensing, and heterogeneous catalysis. However, traditional responsive frameworks, which largely rely on geometric alterations of coordination bonds, face limitations such as weak bonding strength, low chemical tolerance, and poor mechanical stability. These issues make it difficult for these frameworks to maintain stable properties under repeated dynamic changes in practical conditions.

To overcome these challenges, we focus on the unique system of dynamic 3D covalent organic frameworks (COFs), where organic building units are linked into extended 3D networks via strong covalent bonds. These COFs exhibit remarkable conformational flexibility and host-guest adaptivity upon the inclusion of guest molecules. A deeper understanding and theoretical insight into their dynamic structure-property relationships are crucial for controlling and optimizing their dynamic responses.

In this talk, we will discuss:

1. The facile preparation of dynamic 3D COFs with multivariate functionalities and controlled morphology through the synergy of covalent polymerization and crystal growth kinetics;
2. Atomic-level observations of structural evolution involving guest-induced single-bond rotational conformational isomerism;
3. A newly discovered mechanism for multi-responsive molecular sensing across a broad spectrum of gases and vapors.

These findings pave the way for the sequential construction and response regulation of multi-component frameworks. By linking various structural or functional units into deformable periodic networks, according to specific chemical sequences and strong bonding interactions, this multi-component, multi-level regulation strategy enables the customization, optimization, and integration of functional properties.

Keywords: Covalent organic framework; dynamics response; adaptive gas inclusion; fluorescence sensing; isomer separation

References

[1] Chen, Y.; Shi, Z.; Wei, L.; Zhou, B.; Tan, J.; Zhou, H.-L.; Y.-B. Zhang, J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 3298.
[2] Sun, T.; Wei, L.; Chen, Y.; Ma, Y.; Zhang, Y.-B. J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 10962.
[3] Wei, L.; Sun, T.; Shi, Z.; Xu, Z.; Wen, W.; Jiang, S.; Zhao, Y.; Ma, Y.; Zhang, Y.-B. Nature Comm. 2022, 13: 7936.
[4] Xu, Y.; Sun, T.; Zeng, T.; Zhang, X.; Yao, X.; Liu, S.; Shi, Z.; Wen, W.; Zhao, Y.; Jiang, S.; Ma, Y.; Zhang, Y.-B. Nat. Comm. 2023, 14: 4215.
[5] Wang, M.; Zeng, T.; Yu, Y.; Wang, X.; Zhao, Y.; Xi, H.; Zhang, Y.-B. J. Am. Chem. Soc. 2024, 146: 1035.
[6] Zeng, T.; Ling, Y.; Jiang, W.; Yao, X.; Tao, Y.; Liu, S.; Liu, H.; Yang, T.; Wen, W.; Jiang, S.; Zhao, Y.; Ma, Y.; Zhang, Y.-B. PNAS 2024, 121: e2320237121.

有序大/介孔MOF基电催化剂的设计

陈立宇*

华南理工大学，广州，510640

*Email: liyuchen@scut.edu.cn

摘要正文：金属有机框架材料（Metal-organic framework, MOF）是由金属节点（离子或簇）和有机配体自组装而成的有序多孔材料。MOF可作为优异的前体设计组成和分布可控的碳基催化剂，在电催化领域具有潜在的应用前景。我们致力于解决MOF基材料在电催化应用中面临的关键问题，针对MOF基催化剂金属位点本征活性差的问题，发展了“多配位层间协同调控”、“多金属间强作用界面构筑”等新策略，调控过渡金属电子结构以增强活性位点的本征活性，提升电解水和CO_2还原性能；针对MOF微孔结构影响活性位的可及性的问题，提出“构筑多级有序大、介、微孔MOF基材料”的思想，提升了材料的长程传质速率和近程金属可及性，获得了比常规微孔MOF基材料高5倍以上的电催化活性；针对MOF基电解水和CO_2还原体系能量效率低的问题，使用热力学有利的肼氧化替代不利的氧析出反应，构筑高效肼氧化辅助产氢和CO_2还原新体系，大幅降低体系槽电压，提升催化体系的效率和经济性。

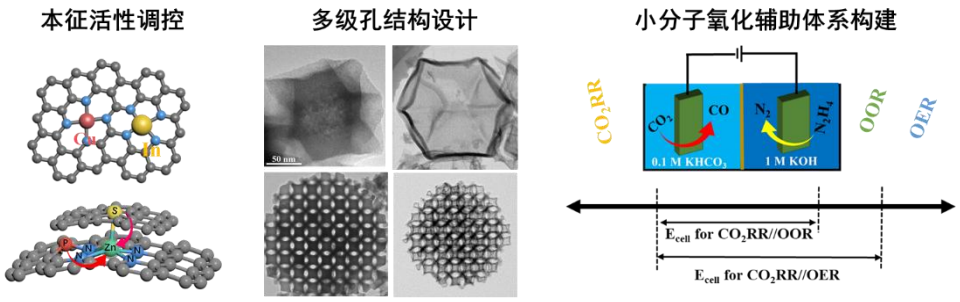


Fig. 1 Hierarchically ordered macro-/mesoporous MOF-based materials for electronic catalysis

关键词：MOF；有序大孔；多级孔；电催化CO_2还原

参考文献

[1] **J. Ding, D. Guo, N. Wang, H.-F. Wang, X. Yang, K. Shen, L. Chen,* Y. Li,* Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 62, e202311909.**

[2] **W. Yao, J. Chen, Y. Wang, R. Fang, Z. Qin, X. Yang, L. Chen,* Y. Li,* Angew. Chem. Int. Ed., 2021, 60: 23729.**

[3] **W. Yao, A. Hu, J. Ding, N. Wang, Z. Qin, X. Yang, Kui Shen, L. Chen,* Y. Li*, Adv. Mater., 2023, 35, 2301894.**

[4] **C. Hu, Y. Zhang, A. Hu, Y. Wang, X. Wei, Kui Shen, L. Chen,* Y. Li*, Adv. Mater., 2023, 35, 2209298.**

[5] **J. Ding, H.-F. Wang, X. Yang, W. Ju, K. Shen, L. Chen,* Y. Li,* Natl. Sci. Rev., 2023, 10, nwac231.**

面向复杂分离应用微孔配位聚合物的设计合成

陈凯杰*

西北工业大学化学与化工学院，西安，710072

*Email: ckjiscon@nwpu.edu.cn

摘要正文：工业分离提纯流程每年的耗能约占到全球总能耗的 10-15%。[1]作为产量最高的其中一个化工原料单体（2020 全球产量 2 亿吨，分离能耗占全球总能耗 0.3%），乙烯的高效分离一直是全球科学家和相关行业的高度关注。在实际工业分离流程中，绝大多数的分离场景都是高度复杂的多组分体系。目前通常采用繁琐的多步分离工艺，如能将复杂分离体系的多步分离过程简化，甚至是一步完成，将有望大大降低相关的能源消耗和经济成本。对于乙烯纯化分离而言，如何将最具挑战性的多种杂质气体一步去除（如分子大小和沸点都和乙烯非常接近的乙炔、乙烷和二氧化碳），则是其核心难点。

金属有机框架，又称多孔配位聚合物，因具有超高比表面、结构三维有序、高度可调的结构等优势，在乙烯分离领域展现出了巨大的优势（图 1）。该报告将就如何通过结构的精准设计实现具有特定吸附位点的多孔材料，并展示其在高效多组分乙烯分离方面的应用潜力。[2-5]

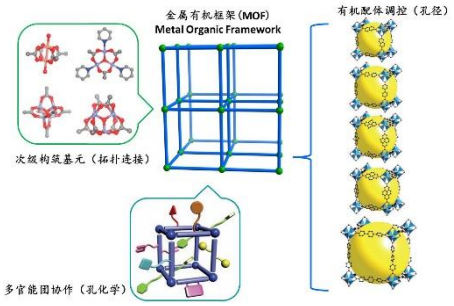


图 1. 金属有机框架 MOF 结构调控示意图

关键词：金属有机框架；气体吸附分离；多组分分离；晶体工程

参考文献

[1] **D. S. Sholl and R. P. Lively，Nature，2016，532：435-437.**

[2] **K.-J. Chen, D. G. Madden, S. Mukherjee, et.al, Science，2019，366：241-246.**

[3] **X. Cui, K.-J. Chen, H. Xing，et.al, Science，2016，353：141-144.**

[4] **B. Zhu, J. Cao, S. Mukherjee, et. al, J. Am. Chem. Soc., 2021，143：1485-1492.**

[5] **J. Cao, S. Mukherjee, T. Pham, et. al, Nat. Commun., 2021, 12: 6507.**

多孔框架离聚体

冯霄*

北京理工大学，北京市海淀区中关村南大街 5 号，100081

*E-mail: fengxiao86@bit.edu.cn

摘要正文：共价有机框架等通过刚性分子基元空间连接构筑的具有纳米、亚纳米孔道的高孔隙率多孔材料，对于同时实现选择性物质协同传输具有极大的潜力。我们基于共价有机框架材料，针对质子交换膜燃料电池催化层中质子、水、氧气在气固液三相界面处的传质制衡效应，聚焦于多物质协同耦合传输机制和构效关系，提出了侧链诱导偶极促进堆积和“预成核、慢生长”纳米通道合成策略，创造了COF最大孔径记录，实现了高取向纳米通道的构筑；揭示了水、离子、气体在孔道中的传输机制，发展了纳米孔道限域蒸发增强效应；开拓了多孔框架离聚物新体系，实现了复杂界面处多物质的协同输运和质子交换膜燃料电池功率密度的大幅提升。

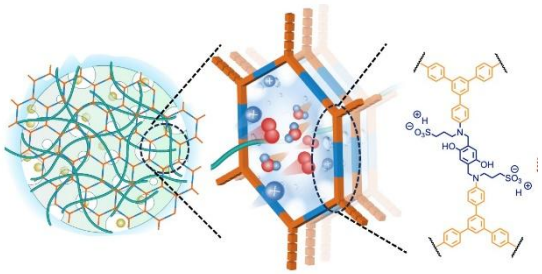


图1 多孔框架离聚体

关键词：共价有机框架；多孔框架离聚；燃料电池

参考文献

[1] **Q. Zhang, X. Feng,* B. Wang,* et. al., Science, 2022, 378, 181.**

[2] **S. Zhao, C. Jiang, X. Feng,* F. Wang*, B. Wang*, et. al., Nat. Mater., 2021, 20, 1551.**

[3] **Z. Mu, X. Feng,* et. al., J. Am. Chem. Soc., 2022, 144, 5145.**

[4] **Z. Mu, X. Feng,* et. al., Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 62, e202300373.**

[5] **Y. Zhu, X. Feng,* et. al., J. Am. Chem. Soc., 2021, 143, 7897.**

[6] **C. Sun, X. Feng,* et. al., Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 62, e202217103.**

[7] **C. Sun, X. Feng,* et. al., Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 62, e202303378.**

[8] **Z. Zhu, Y. Zhu, X. Feng,* A. Yin*, J. Xie*, B. Wang*, et. al., J. Am. Chem. Soc. 2024, 146, 1572.**

多孔配位笼的精准合成与选择性调控

Yu Fang [1,]*

[1] State Key Laboratory of Chemo/Bio-Sensing and Chemometrics, Department of Chemistry and Chemical Engineering, Hunan University, Changsha, China, 310027

*E-mail: yu.fang@hnu.edu.cn

摘要正文：多孔配位笼（PCC）是一类离散型、通过配位键连接金属节点和有机配体的多孔材料，其良好的可加工性适合作为应用导向型的材料。更重要的是，多孔配位笼明确的晶体结构、可调整尺寸的孔道，以及可订制氧化还原活性的金属中心，十分适合研究光催化、储能，以及级联反应选择性调控的对象。这为构建新型催化和储能系统，研究“构效关系”提供参考依据，也为发展新型催化材料和柔性电极材料提供了具有潜力的研究对象。

我们通过有机合成与自组装，构建了一些具备精准调控基元和官能团的多孔配位笼。首先，PCC-6系列是由有机吩噻嗪为结构基元、以四核过渡金属簇为节点的新型光活性多孔配位笼。该型光活性多孔配位笼具备可调整的能带间隙，具备在光反应中能够改变活性氧的生成路径的潜力，被应用于一系列光催化反应并开发出特异性反应。其次，PCC-11、PCC-12和PCC-13具备可精准控制的电子储存位点和电子传输路径，被应用于高能量密度和长循环寿命的柔性混合型超级电容器。最后，报告人将PCC-4和PCC-5通过配位方式修饰到金属有机框架（MOF）的表面，由于这两种分子笼具有相反的电荷，其调控了复合结构的有机染料选择性吸附，以及在级联反应中展现出相反的产物选择性。这些研究表明了多孔配位笼的精准合成在特定应用场景中能够进行选择性调控，为配位化学的研究提供新的理论基础。

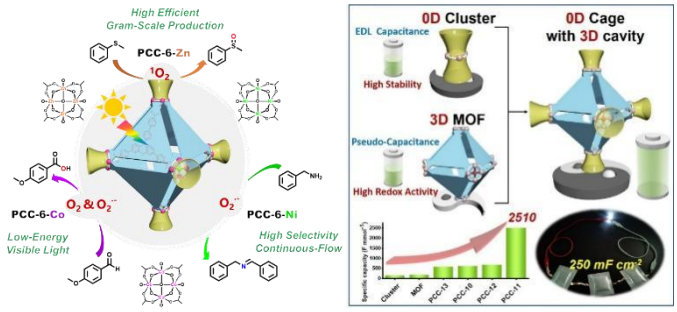


图1：多孔配位笼的特异性光催化和超级电容器应用。.

关键词：分子笼；精准合成；选择性；光催化；电容器；串联反应

参考文献

[1] **Yu Liang, Xiaoxin Yang, Xiaoyu Wang, Zong-Jie Guan, Hang Xing,* Yu Fang,* A cage-on-MOF strategy to coordinatively functionalize mesoporous MOFs for manipulating selectivity in adsorption and catalysis. Nature Communications, 2023, 14: 5223.**

[2] **Hui-Hui He, Jiang-Pei Yuan, Pei-Yu Cai, Kun-Yu Wang, Liang Feng, Angelo Kirchon, Ji Li, Liang-Liang Zhang,* Hong-Cai Zhou,* Yu Fang,* YolkShell and Hollow Zr/Ce-UiO-66 for Manipulating Selectivity in Tandem Reactions and Photoreactions. J. Am. Chem. Soc., 2023, 145, 17164-17175.**

[3] **Jiang-Pei Yuan, Zong-Jie Guan, Heng-Yu Lin, Bing Yan, Kang-Kai Liu, Hong-Cai Zhou*, Yu Fang,* Modeling the Enzyme Specificity by Molecular Cages through Regulating Reactive Oxygen Species Evolution, Angewant. Chem. Int. Ed., 2023, 62,**

e20230389.

[4] **Yu Liang, Yu Fang*, Yong Cui*, and Hongcai Zhou*, A stable biocompatible porous coordination cage promotes in vivo liver tumor inhibition, Nano Research, 2021, 14, 3407–3415.**

超精准二氧化碳分子识别功能的多孔配位聚合物结构设计

顾逸凡 [1,*]

[1] 同济大学环境科学与工程学院，上海市杨浦区四平路 1239 号，200092

*Email: 21514@tongji.edu.cn

摘要正文：以二氧化碳（CO_2）为代表的温室气体排放是全球气候变化的重要推手，发展CO_2分子识别、分离捕获和资源化利用等相关技术对环境和社会可持续发展至关重要，符合国家“双碳”重大战略需求。虽然金属有机框架化合物（MOFs）等多孔自组装纳米材料在CO_2分离捕获领域研究已取得了一定进展，但仍存在着学界广泛关注和亟待解决的瓶颈问题。如何精准构筑在多元混合气体中具有超精准CO_2分子识别性能和高选择性吸附能力的孔道结构尚缺少明确的设计原则。基于CO_2分子结构和电子云排布特征，本研究提出通过晶体工程学设计调控具有柔性波纹状孔道结构的柔性MOFs材料并应用于超精准CO_2分子识别与分离捕获。在面向CO_2, N_2, CH_4, CO, O_2, H_2, Ar, C_2H_2, C_2H_4和C_2H_6十种常见气体时，该材料能且只能通过柔性孔道开门效应选择性吸附CO_2，在多个混合气体中显示出优异的CO_2分离捕获性能。单晶XRD衍射、原位同步辐射PXRD衍射结合理论计算研究结果表明，通过在柔性多孔配位聚合物中合理的设计窄波纹状通道、作用位点和合适的柔性作用是实现超精准CO_2分子识别的关键要素。相关研究为具有高效物理吸附捕获CO_2材料的结构设计提供了新思路。

关键词：二氧化碳；分子识别；吸附分离；金属有机骨架材料；主客体作用

参考文献

[1] **Y. Gu, et al., Soft corrugated channel with synergistic exclusive discrimination gating for CO2 recognition in gas mixture. Nat. Commun. 2023, 14, 4245.**

[2] **Y. Gu, et al., Host–Guest Interaction Modulation in Porous Coordination Polymers for Inverse Selective CO2/C2H2 Separation. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 11688.**

[3] **Y. Gu, et al., Structural-Deformation-Energy-Modulation Strategy in a Soft Porous Coordination Polymer with an Interpenetrated Framework. Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 15517.**

[4] **Y. Gu, et al., Controllable Modular Growth of Hierarchical MOF-on-MOF Architectures. Angew. Chem. Int. Ed. 2017, 56, 15658.**

[5] **L. Wang, et al., Designed metal-organic frameworks with potential for multi-component hydrocarbon separation. Coordin. Chem. Rev. 2023, 484, 215111.**

分子筛的改性、成型及其在碳捕集中的应用

胡国平 [1,*]

[1] 中国科学院赣江创新研究院，江西赣州，341119

*Email: gphu@gia.cas.cn

摘要正文：随着大气中二氧化碳（CO_2）含量的不断上升，其减排压力日益迫切。碳捕集、应用与封存可有效减少大气中 CO_2 含量，而研发先进的 CO_2 捕集技术近年来得到广泛关注。本研究主要探索弱酸环境在改善 Y 型分子筛孔道结构中的作用及利用沸石-高岭土混合物生产无粘合剂 Y 型沸石的方法，以期提升沸石对 CO_2 吸附效率。结果表明，通过弱酸刻蚀，Y 对于 CO_2 的吸附性能显著。为了进一步优化这些吸附剂，我们严格应用响应面方法（RSM）并分析了 GW-2 结果，深入考察了酸浓度、组分质量比和焙烧温度等关键因素对吸附效率的影响。优化后的吸附剂在 289 K 和 1 bar 的条件下 CO_2 吸附量达 6.1 mmol/g，而在 273 K 下该数值为 7.14 mmol/g。此外，本研究还通过二次水热将高岭土成功转化为沸石，制备了无粘合剂的圆柱形 Y 沸石颗粒。该方法可有效解决传统成型工艺中添加粘结剂导致的性能下降问题，以提高 Y 沸石应用性能。结果表明，圆柱形 Y 沸石在 298 K 及 1 bar 条件下对 CO_2 吸附容量为 5.52 mmol/g，平均抗压强度高达 110 N/cm。两种方法的结合不仅提升了 CO_2 的吸附能力，还通过实验技术和密度泛函理论（DFT）模拟彻底调查了改性机制，包括硅铝比的减少、孔径的扩大以及无粘合剂颗粒的形成。这些增强的性能归因于精确的材料设计和过程优化，突显了抗坏血酸改性 NaY 沸石和无粘合剂 Y 型沸石颗粒作为对抗气候变化的有效、持久和环保解决方案的潜力，为 CO_2 捕集技术的未来发展和应用铺平了道路。这一综合研究不仅加深了我们对 CO_2 吸附机理的理解，也为实现更高效、环境友好的 CO_2 捕集材料提供了新的设计方向和制备策略。

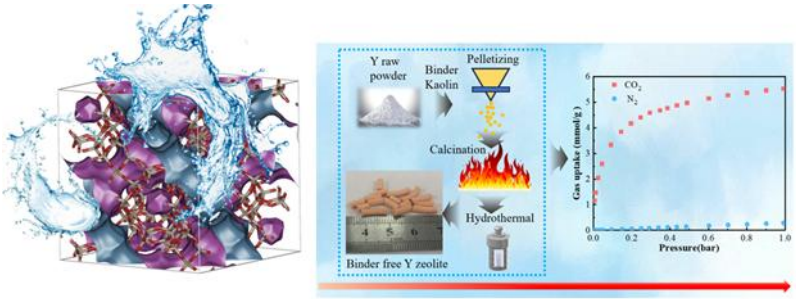


Fig. 1 Functionalization and adsorption isotherms of the Y zeolite

关键词：CO_2捕集；酸改性；无粘结剂；吸附剂

参考文献

[1] **Rao, F.; Liu, M.; Liu C.; Hu G. Carbon Capture Science & Technology, 2023: 100166.**

呼气式疾病早筛传感器与应用

金涵*

上海交通大学纳米生物医学工程研究所

*Email: hjin@mail.ustc.edu.cn

摘要正文：气体传感器广泛应用于环境监测、军事安全和医疗健康等领域。为进一步提高气体传感器的工作性能，研究人员提出了多种概念型的气体传感器。本文概括了上海交通大学纳米检测与传感器团队近年来在智能气体传感器领域的代表性成果，并着重介绍了该课题组在设计与构建概念型传感器件方面的研究进展。其中将重点阐述：1）呼气分析法的研究背景和技术瓶颈：作者将阐述呼气分析法的起源，发展历程和研究现状。尤其对呼气分析法中存在的诸多问题给予相应的评价，同时将展望呼气分析法的未来发展；2）VOCs传感器的研究进展：呼出气中的水分显著影响传感器的性能。为此本研究提出了一种基于湿度自适应功能的呼出气传感器。结果证实湿度自适应模式可有效去除环境湿度对传感器性能的影响：3）呼气标志物传感系统的研究进展：呼气标志物传感系统的构建对未来医疗卫生领域的发展和健康中国战略的落实起着至关重要的作用，作者将介绍近几年团队在传感系统方面的研究成果。

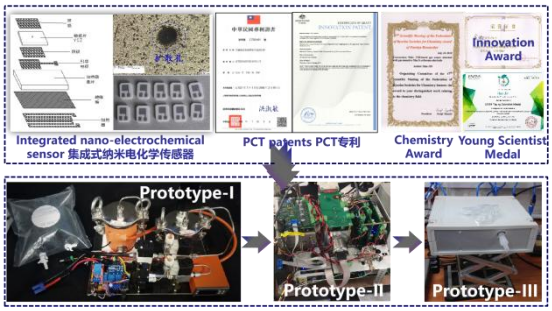


图 1. 集成式传感器与呼气分析仪在人体健康隐患预警中的应用

低浓度有机胺捕获与传感双功能分子材料

李鹏*，王艺锦，高翔宇，陈威

复旦大学化学系，上海市杨浦区淞沪路 2005 号，200438

*Email: penglichem@fudan.edu.cn

摘要正文：有机胺作为一种常见的挥发性有机化合物，在工业、环境和生物医学领域扮演着重要角色。然而，其低浓度的存在使得其检测和监测成为一项挑战。设计合成能选择性吸附并传感目标分子而排除干扰物的传感材料，长期以来一直是传感领域的挑战。传统多孔材料，如活性炭、金属有机框架和沸石，虽然具有一定的吸附能力，但对于有机胺缺乏特异性的识别机制，通常会产生较强的背景信号，甚至导致误报。自适应分子晶体是一种无客体的分子材料，通常对特定蒸汽展现出选择性吸附能力，已被广泛应用于多种分离应用中。这类材料在没有客体分子存在时保持稳定，但在吸附特定蒸汽后能够发生结构变化。之前，我们的研究团队设计并合成了具有羧酸官能团的微孔氢键有机框架材料FDU-HOF-3，在吸附氨气过程中，展现出从结晶态到非晶态的自适应相转变。基于此，我们推断，含有羧酸官能团的非孔性分子晶体可以基于特定的酸碱作用，对胺类蒸汽具有选择性吸附能力。吸附过程中的相转变导致光物理性质的显著变化，如荧光性质的增强、衰减或蓝移/红移，这些变化可以作为选择性传感的机制。本论文报道了首个具有捕获与传感双重功能的分子晶体，它能够选择性地捕获并传感有机胺。通过开发这种具有自适应性和选择性功能的分子晶体，我们为低浓度有机胺的高效捕获和精确传感提供了一种创新的方法，这在环境监测、工业安全和生物医学诊断等众多领域具有广泛的应用前景。

关键词：分子晶体；有机胺；自适应相变；选择性吸附；非接触式传感

参考文献

[1] **Gao, X.; Lu, W.; Wang, Y.; Song, X.; Wang, C.; Kirlikovali, O. K; Li, P., Sci. China. Chem. 2022, 65, 2077–2095.**

[2] **Song, X.; Wang, Y.; Wang, C.; Wang, D.; Zhuang, G.; Kirlikovali, K. O.; Li, P.; Farha, O. K., J. Am. Chem. Soc. 2022, 144(24), 10663–10687.**

[3] **Song, X.; Wang, Y.; Wang, C.; Gao, X.; Zhou, Y.; Chen, B.*; Li, P.*, J. Am. Chem. Soc. 2024, 146 (1), 627–634.**

一锅法合成吸波增强型导电金属-有机框架@聚吡咯复合物

李伟金*，王康，吴佳乐

南京理工大学材料科学与工程学院，南京市玄武区孝陵卫 200 号，210094

*Email: wjli@njust.edu.cn

摘要正文：合理的异质结构设计可以带来界面极化弛豫，从而显著地提高电磁波吸收性能。然而，如何构建兼具有优异电磁波吸收性能的异质结构仍然是一个巨大的挑战。本文通过一步原位聚合法，将典型的导电金属-有机框架 $Cu_3(HHTP)_2$（六羟基三亚苯，HHTP）巧妙地填充到聚吡咯（PPy）导电聚合物表面。结果表明，$Cu_3(HHTP)_2$被很好地填充在PPy表面，形成了$Cu_3(HHTP)_2$@PPy复合界面微结构，与PPy和$Cu_3(HHTP)_2$的单一成分相比，它在电磁波吸收方面具有独特的优越性。有趣的是，$Cu_3(HHTP)_2$@PPy 复合物的界面微结构可以通过调整PPy和$Cu_3(HHTP)_2$的成分来调节，从而改善阻抗匹配、导电损耗和增强界面极化弛豫，优化 $Cu_3(HHTP)_2$@PPy的电磁波吸收特性。其宽广的有效吸收带宽覆盖了6.68 GHz（11.00-17.68 GHz）的范围，高于大多数已报道的基于MOFs和导电聚合物的电磁吸收材料。这项研究为通过复合界面微结构工程开发高效电磁波吸收材料提供了新的见解。

关键词：电磁波吸收、异质结构、导电金属-有机框架、界面工程

参考文献

[1] **J. L. Wu, K. Wang, S. Ye, Q. L. Zhou, S. Q. Lu, Y. Q. Laigao, L. Jiang, L. X. Wei, A. M. Xie, H. B. Zeng, W. J. Li, One-pot synthesis of conductive metal-organic framework@polypyrrole hybrids with enhanced electromagnetic wave absorption performance. Small Struct. 2024, 2400245.**

烷烃分子辨识分离材料

李立博[1, *]

[1]（太原理工大学）

*Email: lilibo@tyut.edu.cn

摘要正文：化工分离过程的节能降耗是国家重大需求，突破的关键在于分离材料的创新。申请人以烯烃/烷烃高效分离为目标导向，通过结构精准设计，扩散通道可控构筑，解决了多孔材料在烷烃分离过程中选择性不高、传质效率低等问题。提出空位修饰、扩散孔道分割与孔道氟化策略，创制了高选择性烷烃吸附剂；构筑晶格“插锁”MOF@COF，实现了烷烃分离材料的扩散传质与结构稳定性显著提升，为高性能烷烃捕获吸附剂的研制提供了理论借鉴，为烯烃的高效分离与纯化提供了新的技术路径。

关键词：MOF 材料、烷烃优先吸附、孔环境调控、超分子相互作用

参考文献

[1] **Science, 2018, 362: 443-446.**

[2] **Adv. Mater., 2023, 35, 2207955.**

[3] **J. Am. Chem. Soc., 2023, 145: 19707-19714.**

[4] **J. Colloid Interface Sci., 2024, 669, 258-264.**

[5] **Engineering, 2024, DOI: 10.1016/j.eng.2024.01.024.**

晶态吸附剂孔道调控及其吸附分离性能

陈静雯[1], 周珍宇[1], 王珺*

[1]南昌大学 化学化工学院，江西，330031

*Email: jwang7@ncu.edu.cn

摘要正文：降低化工分离过程能耗是实现国家“双碳”战略的重要途径和抓手。吸附分离不涉及相变是低能耗分离技术，其中，吸附剂是实现气体吸附分离发展和应用的核心基础。针对吸附剂在难分离体系中分离选择性低的瓶颈问题，报告围绕强化和识别吸附分离过程中作用差异的关键科学问题，实现提升难分离体系分离性能的目标。并简要介绍吸附剂孔道调控的孔径尺寸精准控制、吸附位点匹配设计、孔道环境协同调控等方面的研究进展。

关键词：吸附剂、吸附分离、孔道调控

参考文献

[1] **Nat. Commun, 2022, 13, 200、Nat. Commun, 2022, 13, 5515、Nat. Commun, 2024, 15, 625**

多孔晶态超分子笼及共价有机框架用于CO_2资源化利用

严勇[1,*]，阚亮[1]，周杰[1]，兰亚乾[1,*]

[1]华南师范大学化学学院，广州，510006

*Email: yong.yan@m.scnu.edu.cn; yqlan@m.scnu.edu.cn

摘要正文：利用清洁的光电等能源实现高效CO_2的催化转化与利用是实现“碳中和”计划中切实可行的方案。金属团簇因同时具有“电子海绵”与活性位点的特征，是催化CO_2转化的优异分子结构体。本报告利用金属团簇为结构基元，可调控地制备了一系列不同堆积、稳定的{Cu_3}簇基超分子多孔金属有机笼结构，并利用超分子金属有机笼的多变性，构建了均相催化、异相分离的超分子催化体系，同时兼备了活性高、选择性好、高稳定性和可回收的优势。该金属有机笼不仅作为均相催化剂能够高效的催化CO_2与一系列环氧化物的环加成反应，而且在反应后通过一步简单的相转移方法可同步实现催化剂的异相回收和产物的分离，得到的产物无需进一步提纯就可达到97%的商业化纯度。同时设计并制备了基于COF策略的晶态异金属簇催化剂MCOF-Ti_6Cu_3，有效耦合光催化CO_2还原（CO_2RR）和水氧化反应（WOR），实现全反应。

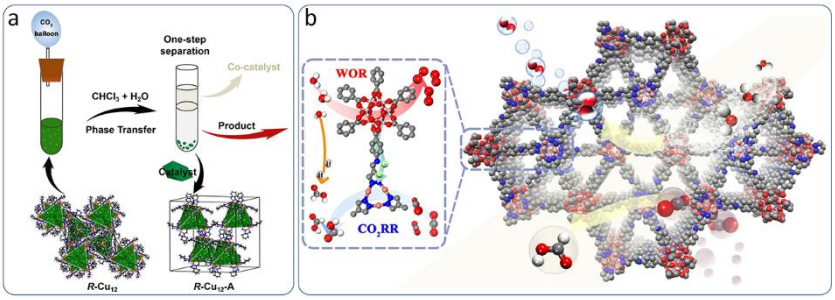


Fig. 1 Metal-organic cages (a) and metal-organic covalent frameworks (b) for catalyzing CO_2 transformation.

关键词：金属有机笼；金属共价有机框架；CO_2还原；光催化

参考文献

[1] **T.-T. Ma, G.-Z. Huang, X.-H. Wang, Y. Liang, R.-H. Li, B. Wang, S.-J. Yao, J.-P. Liao, S.-L. Li, Y. Yan*, Y.-Q. Lan*, “Photochromic Radical States in 3D Covalent Organic Frameworks with zyg Topology for Enhanced Photocatalysis”, Natl. Sci. Rev. 2024, 11, nwae177.**

[2] **L. Kan, L. Zhang, L.-Z. Dong, X.-H. Wang, R.-H. Li, C. Guo, X. Li, Y. Yan*, S.-L. Li, Y.-Q. Lan*, “Bridging the Homogeneous and Heterogeneous Catalysis by Supramolecular Metal-Organic Cages with Varied Packing Modes” Adv. Mater. 2024, 2310061.**

[3] **T.-Y. Yu, Q. Niu, Y. Chen*, M. Lu, M. Zhang, J.-W. Shi, J. Liu, Y. Yan*, S.-L. Li, Y.-Q. Lan*, “Interpenetrating 3D Covalent Organic Framework for Selective Stilbene Photoisomerization and Photocyclization” J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 8860–8870.**

[4] **J. Zhou, J. Li, L. Kan, L. Zhang, Q. Huang, Y. Yan*, Y. Chen, J. Liu, S.-L. Li, Y.-Q. Lan*, “Linking Oxidative and Reductive Clusters to Prepare Crystalline Porous Catalysts for Photocatalytic CO2 Reduction with H2O” Nat. Commun. 2022, 13:4681.**

柔性多孔框架材料用于温室气体的捕获和分离

杨庆远 [1,*]

[1]西安交通大学，陕西西安市碑林区咸宁西路 28 号，710049

* E-mail: qingyuan.yang@xjtu.edu.cn

摘要正文：六氟化硫（SF_6）作为一种电子气体,具有良好的化学稳定性、耐腐蚀性和电绝缘性，在半导体、电力设备、航空航天、金属加工、医疗等领域应用广泛。但六氟化硫也是《联合国气候变化框架公约》中重点控制的温室气体之一，它的温室效应是二氧化碳的 22800 倍，《京都议定书》将其列为六大温室气体之一。各行业中使用的六氟化硫仅有一小部分被回收利用，大部分被直接排放到空气中，因此六氟化硫气体的高效回收与减弱其直接排放所导致的温室效应，具有重要的实际意义。

最近我们开发了系列具有不同孔结构的金属-有机框架（MOF）材料，用于六氟化硫的捕获。研究表明，具有一维纳米孔道且孔尺寸与 SF_6 分子动力学直径相近的 MOF 材料具有良好的六氟化硫捕获效果。MOF 材料 $Ni(ina)_2$ 的孔径为 0.6 nm，和 SF_6 的分子大小（0.52 nm）非常匹配，因此该材料表现出优良的六氟化硫捕获效果，$Ni(ina)_2$ 在 298K（0.1 bar）下的 SF_6 吸附量为 2.39 mmol/g，其 SF_6/N_2 分离比高达 375。理论模拟计算和单晶结构解析表明 $Ni(ina)_2$ 框架和六氟化硫分子之间存在较强的作用力，可以从低浓度 SF_6-N_2 混合气中选择性地捕获六氟化硫分子。动态突破实验也进一步表明 $Ni(ina)_2$ 具有良好的 SF_6/N_2 实际分离效果，该工作为工业上含氟电子气体的捕获提供了思路。

参考文献

[1] **Wang, S.-M.; Mu, X-T.; Liu, H.-R.; Zheng, S.-T.; Yang, Q.-Y.* Pore-Structure Control in Metal–Organic Frameworks (MOFs) for Capture of the Greenhouse Gas SF6 with Record Separation. Angewandte Chemie International Edition 2022, e202207066.**

[2] **Wang, S.-M.; Shivanna, M.; Yang, Q.-Y.* Nickel-Based Metal-Organic Frameworks for Coal-Bed Methane Purification with Record CH4/N2 Selectivity. Angewandte Chemie International Edition, 2022, e202201017.**

[7]

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: mailto:syuan@nju.edu.cn

摘要正文：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，从而实现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]。

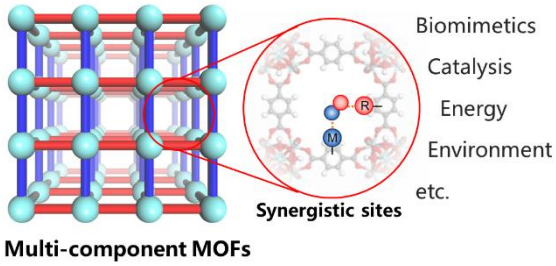


Fig. 1 Schematic representation of multi-component MOFs with synergistic sites and their applications.

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, 18, 8267.**

面向无痛化健康监测的微纳集成传感平台

徐琳[1,*]，周青青

[1]集成光电子学国家重点实验室，吉林大学电子科学与工程学院，130012

*Email: linxu@jlu.edu.cn

摘要正文：集成化、智能化电子技术的兴起，极大地促进了远程医疗、环境监控中信息的无创、及时跟踪。构建集成多功能化敏感单元对于设计具有先进认知功能的传感器件具有重要意义。针对目前传感器多模式集成化性能不足的问题，团队从半导体传感器微纳集成功能设计的角度出发，研究了传感器件在呼气检测、疾病诊断、智慧农业等领域的应用探索。智能可穿戴设备对于远程医疗保健至关重要，因为它们可以实时监测生理信息。精心构建突触仿生材料为设计高性能的多刺激响应传感器提供了重要指导。然而，在“结构和感觉”上真实地模拟生物突触以获得高级多功能仍然是一项挑战。本文构建了一个 Ti_3CNT_x 纳米片原位集成沸石咪唑酸框架(ZIF-L@Ti_3CNT_x 复合材料)的离子人工突触，并行仿生模拟突触的结构和工作机制。仿生 ZIF-L@Ti_3CNT_x 复合材料的柔性传感器具有优异的双模二甲胺(DMA)和应变敏感响应，具有不重叠的电阻变化。通过密度泛函理论模拟证实了 DMA 气体或应变在湿度辅助下触发的特定离子传导工作原理。最后，将双模传感器集成到柔性印刷电路中，自主开发了智能可穿戴系统。该装置成功应用于帕金森病患者异常生理信号的多元监测，包括模拟 DMA 呼气和运动震颤信号的实时准确评估。本工作为开发智能化多功能远程医疗诊断设备提供了一种可行的思路。

关键词：多模态传感；集成传感；健康监测；仿生器件

参考文献

[1] **Qingqing Zhou, Zixun Geng, Long Yang, Bo Shen, Zitong Kan, Yu Qi, Songtao Hu, Biao Dong, Xue Bai, Lin Xu,* Hongwei Song,* and Luquan Ren. A Wearable Healthcare Platform Integrated with Biomimetical Ions Conducted Metal–Organic Framework Composites for Gas and Strain Sensing in Non-Overlapping Mode, Adv. Sci. 2023, 2207663.**

金属有机笼与气体分子的超分子化学

周小平*，李丹

暨南大学化学与材料学院，广州市，广东省广州市番禺区兴业大道东 855 号，511443

*Email: zhouxp@jnu.edu.cn

摘要正文：金属有机笼是由金属离子和有机配体通过配位键组装而成。金属有机笼具有精美的结构，以及在催化，分离，传感，药物传输等领域具有非常重要的应用前景，引起了科学家的广泛关注。相对于气体分子，传统的金属有机笼具有较大空腔和窗口，难以被应用于封装气体分子。针对这一问题，我们利用配位导向的策略，使用尺寸较小的咪唑配体与金属离子构筑了一系列金属咪唑笼。通过取代基，金属离子及阴离子的调控，获得具有不同拓扑结构及微小窗口特征的金属有机笼[1-5]。我们使用X-射线单晶衍射、核磁共振波谱、高分辨质谱等测试方法对这些金属有机笼进行了详细的表征。进一步我们利用这些金属有机笼进行了气体的超分子化学研究。发现具有微小窗口尺寸的金属有机笼可以在溶液中对气体分子进行封装，并具有不同的络合常数，可以对气体进行分离。进一步，由于其较小的窗口，金属有机笼还可以用来稳定活泼气体分子，例如一氧化氮，使其可以用来传递气体信号分子，应用于生物医药领域。

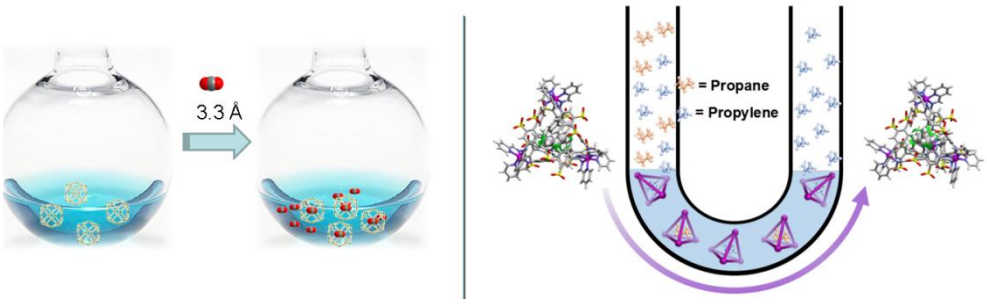


Fig. 1：Metal-organic cages for encapsulation of CO_2 (left) and separation of propane/propylene (right)

关键词：金属有机笼；配合物；气体分子；超分子化学

参考文献

[1] **D. Luo, X.-Z. Wang, C. Yang, X.-P. Zhou, D. Li, Self-Assembly of Chiral Metal–Organic Tetartoid, J. Am. Chem. Soc. 2018, 140, 118.**

[2] **X. Zhang, X. Dong, W. Lu, D. Luo, X.-W. Zhu, X. Li, X.-P. Zhou, D. Li, Fine-Tuning Apertures of Metal–Organic Cages: Encapsulation of Carbon Dioxide in Solution and Solid State, J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 11621.**

[3] **D. Luo, Z.-J. Yuan, L.-J. Ping, X.-W. Zhu, J. Zheng, C.-W. Zhou, X.-C. Zhou, X.-P. Zhou, D. Li, Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202216977.**

[4] **C.-W. Zhou, X.-Z. Wang, M. Xie, R.-Q. Xia, D. Luo, Z.-X. Lian, G.-H. Ning, W. Lu, X.-P. Zhou, D. Li, Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202315020.**

[5] **Y.-L. Lai, M. Xie, X.-C. Zhou, X.-Z. Wang, X.-W. Zhu, D. Luo, X.-P. Zhou, D. Li, Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202402829.**

用于 CO_2 分离的 MOF 基混合基质膜开发

代忠德 [1,*]

[1]四川大学 碳中和未来技术学院，四川省成都市四川大学江安校区建环学院附 501，610065

*Email: zhongde.dai@scu.edu.cn

摘要正文：MOF 具有良好的气体分离性能，但是纯 MOF 膜制备过程复杂。本工作从 MOF 出发，系统研究了 MOF 的形貌、孔结构等参数对不同混合基质膜的 CO_2 分离性能的影响。进一步的，本工作还研究了通过 MOF 功能化、高温功能化等手段，进一步调控 MOF 微孔及 MOF 纳米填料与聚合物膜基材之间的界面相容性，大幅提升 CO_2 渗透系数及 CO_2/N_2 选择性。

Surface Engineering of Metal-Organic Framework thin films

Min Tu[1,*]

[1]2020X-Lab, Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology, Chinese Academy of Sciences, Pingcheng Road 1455, Shanghai, 200050

* min.tu@mail.sim.ac.cn

Metal-organic frameworks (MOFs) offer unique prospects in micro and optoelectronics, such as low-k dielectrics, photodetectors, and chemical sensors.[1] Surface engineering is essential for integrating metal-organic frameworks (MOFs) in miniaturized solid-state devices. To achieve this, it is crucial to develop a thin-film deposition technique that can be scaled up to wafer-scale substrates. Also, resist-free lithography of functional materials is desirable to minimize the number of process steps and possible contamination sources, especially for highly porous materials.

In this presentation, we introduce a scalable thin-film deposition method and a resist-free nanoscale MOF patterning strategy.

We developed a robust deposition technique that enables high-quality MOF thin film deposition with a controllable thickness.[2,3] By incorporating irradiation-sensitive moieties with the frameworks or pores, MOFs can be directly patterned by UV, X-ray, e-beam, and EUV lithography, eliminating the need for photoresists.[4,5] This straightforward approach enables high-quality MOF patterns in which all desirable material properties are maintained. The compatibility of these lithography techniques with existing nanofabrication processes provides a new perspective on the potential of MOFs as high-performance dielectrics and coatings for more selective and sensitive sensors.

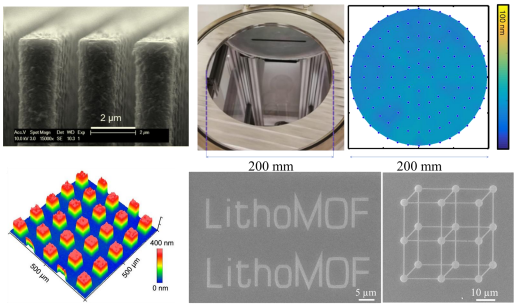


Figure 1. Wafer-scale deposition of MOF thin films and their nanoscale lithography

Keywords: metal-organic frameworks, thin films, photopatterning, lithography

References

[1] M. D. Allendorf, R. Dong, X. Feng, S. Kaskel, D. Matoga, V. Stavila, Electronic Devices Using Open Framework Materials, Chem. Rev. 2020, 120, 8581.

[2] P. Su, M. Tu, R. Ameloot, Vapor-Phase Processing of Metal–Organic Frameworks, W. Li, Acc. Chem. Res. 2022, 55, 186.

[3] M. Tu, D. E. Kravchenko, B. Xia, V. Rubio‐Giménez, N. Wauteraerts, R. Verbeke, I. F. J. Vankelecom, T. Stassin, W. Egger, M. Dickmann, H. Amenitsch, R. Ameloot, Template-Mediated Control over Polymorphism in the Vapor-Assisted Formation of Zeolitic Imidazolate Framework Powders and Films, Angewa. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 7553.

[4] M. Tu, B. Xia, D. E. Kravchenko, M. L. Tietze, A. J. Cruz, I. Stassen, T. Hauffman, J. Teyssandier, S. De Feyter, Z. Wang, R. A. Fischer, B. Marmiroli, H. Amenitsch, A. Torvisco, M. de J. Velásquez-Hernández, P. Falcaro, R. Ameloot, Nature Materials 2021, 20, 93.

[5] Z. Zhu, F. Li, J. Li, Q. Chen, W. Li, Z. Tang, W. Xu, W. Shen, T. H. Tao, L. Sun, Y. Fu, M. Tu, Direct Optical Patterning of Metal–Organic Frameworks vi Photoacid–Induced Etching, ACS Nano, 2024, 18, 19628.

Precision Control of Defects in Crystalline Porous Frameworks

Xiao Feng[1,*]

[1]School of Chemistry, Dalian University of Technology, Dalian, 116024 China

* xiaof@dlut.edu.cn

Crystalline porous frameworks, also MOFs, are highly tunable materials, and their properties are profoundly influenced by defects[1]. However, controlled defect synthesis in these frameworks remains a significant challenge. In this study, we tackled this issue by synthesizing mixed-metal frameworks and applying selective etching to introduce controlled cluster defects[2]. By exploiting the differential stability of metal nodes under acidic conditions, we successfully achieved controllable defect formation, leading to enhanced catalytic, adsorption, and separation properties. To address stability concerns associated with increased defects, we introduced hemilabile ligands during synthesis, which not only introduced the largest structural defect but also substantially improved the stability of the framework[3]. We further validated defect acidity through model reactions, establishing a clear relationship between acidity and defect concentration.Defects are particularly critical in determining the adsorption and separation performance of crystalline porous frameworks. Our research demonstrates that precise control of defect structures—specifically in terms of defect quantity, type, and distribution—leads to significant improvements in adsorption and molecular separation efficiency. These results offer valuable insights into the design of highly efficient and stable frameworks for gas adsorption, separation, and catalytic applications, paving the way for next-generation porous materials tailored for specific practical uses.

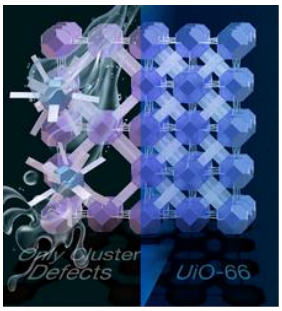


Fig. 1 Figure title in English

Keywords: MOFs, Defect, Controlled Synthesis, Catalysis, Adsorption

References

[1] Feng, X.; Jena, H. S.; Krishnaraj, C.; Leus, K.; Wang, G.; Chen, H.; Jia, C.; Van Der Voort, P., ACS Appl. Mater. Interfaces 2021, 13 (51), 60715-60735.

[2] Feng, X.; Jena, H. S.; Krishnaraj, C.; Arenas-Esteban, D.; Leus, K.; Wang, G.; Sun, J.; Rüscher, M.; Timoshenko, J.; Roldan Cuenya, B.; Bals, S.; Voort, P. V. D., J. Am. Chem. Soc. 2021, 143 (51), 21511-21518.

[3] Feng, X.; Hajek, J.; Jena, H. S.; Wang, G.; Veerapandian, S. K. P.; Morent, R.; De Geyter, N.; Leyssens, K.; Hoffman, A. E. J.; Meynen, V.; Marquez, C.; De Vos, D. E.; Van Speybroeck, V.; Leus, K.; Van Der Voort, P., J. Am. Chem. Soc. 2020, 142 (6), 3174-3183.

Syntheses, Separations and Catalyses of Nano Solid Solutions

Bo Huang[1,2,*], Zhe Tan[1], Yuhan Liu[1], Junyun Gao[1]

[1]School of Chem. Eng. Tech. Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 712000

[2]National Innovation Platform for Industry-Education Integration of Energy Storage, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 712000

*bohuang@xjtu.edu.cn

In this study, we developed a universal coreduction method[1] and a slow synthesis method[2] for immiscible alloy systems. In addition, a three-solvent separation method was developed for the separation of all nanoparticles, and a theoretical explanation of the separation method was given[3].

Based on the above method, we synthesized uniformly mixed Ni-Ru[4], Pt-W[5], Pd-Rh[2], Pd-Pt[6], Os-Pt[7], Os-Pd[8] binary immiscible alloy systems, and Ru-Rh-Pd-Pt[9] quaternary high-entropy alloy system for the first time.

We developed phase control methods and mechanism explanations for Ni and Ru single metals[4]. In the Ni-Ru[4] and Pt-W[5] systems, the enhancement effect of inert sites on active sites in catalytic reactions was studied. In the Pd-Rh[2] and Pd-Pt[6] systems, it was found that the excellent three-way catalytic performance of the two systems comes from the dissociation of NO and C_3H_6 molecules at the Pd-Rh and Pd-Pt diatomic sites respectively. ability. And the infrared wave number of CO adsorbed species was proposed to be regarded as a substitute descriptor for the reaction activation energy.

For the Os-Pt[7] and Os-Pd[8] systems, Os-Pt had an N_2H_4 decomposition hydrogen production activity exceeding the currently best-performing catalyst Ir, while Os-Pd had an NO_x reduction activity that surpasses the currently best-performing catalyst Rh. The excellent performances mainly came from the dissociation effect of Os-Os sites on N-N in the decomposition process of N_2H_4, and the dissociation effect of Os-Pd sites on NO. The Ru-Rh-Pd-Pt[9] quaternary high-entropy alloy system also showed better NO_x reduction ability than the pure Rh catalyst, which mainly comes from the mutually independent active multiple-atomic sites for coupling of multiple reaction steps such as CO adsorption, NO adsorption, NO dissociation and oxygen spillover.

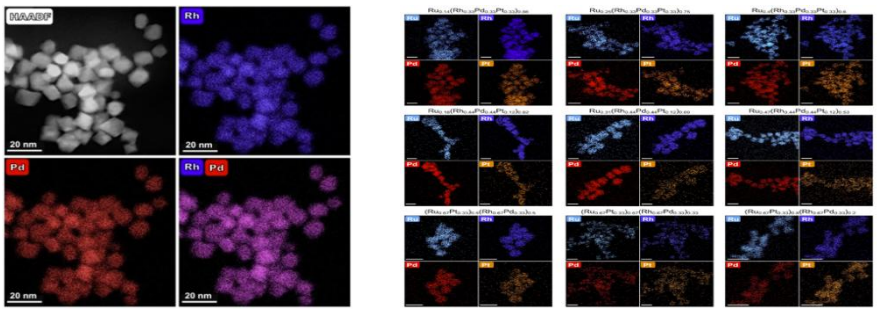


Fig. 1. STEM-EDX maps of Pd-Rh immiscible solid solutions and Ru-Rh-Pd-Pt high-entropy alloys.

Keywords: Immiscible alloy, solid solution, high-entropy alloy, alloy synthesis, alloy catalysis

References

[1] Huang, B.* et al., Chem. Sci. 2020, 139: 4643.
[2] Tan, Z.; Haneda, M.; Kitagawa, H.; Huang, B.* Angew. Chem. Int. ed. 2022, 61: e202202588.
[3] Tan, Z.#; Liu, Y.#; Huang, B.* Nanoscale, 2022, 14: 5482.
[4] Liu, Y.#,*; Zhai, W.#; Li, L.; Dai, Z.; Huang, B.* Chem. Mater. Accepted.
[5] Liu, Y.; Huang, B.* Manuscript in preparation.
[6] Tan, Z.; Huang, B.* et al., Chem. Mater., 2024, 36: 524.
[7] Gao, J.; Deng, H.; Huang, B.* Manuscript submitted.
[8] Huang, B.*; Qin, Y.; Gao, J.; Zheng, H.*; Tan, Z.* Manuscript submitted.
[9] Tan, Z.; Huang, B.* Angew. Chem. Int. ed. 2024: e202400496.

Gas Induced Gate-opening Mechanism for Cooperative Inverse Spin Transition in a 3D Porous Cobalt(II) MOF

Yunsheng Ma[1,*]

[1]School of Materials Engineering, Changshu Institute of Technology, No.99 South Third Ring Road, Changshu, Jiangsu, 215500

*Email:*ysma@cslg.edu.cn

Development of gas induced spin-switchable material is a major challenge. Here, we choose a highly flexible metal-organic framework (MOF). Compound **1** has two-fold interpenetrated 3D porous framework leaving isotropic 1D channels decorated with uncoordinated nitrogen atoms. Compound **1** exhibits gate-opening adsorption behavior for CO_2, N_2 and Ar, which showing the flexible characteristic of the framework. **1**⊃ H_2O and **1** exhibit normal thermal spin crossover (SCO) behavior, while **1**⊃ CO_2, **1**⊃ N_2 and **1**⊃ Ar show guest-host synergistic SCO characteristics of unique inverse spin transition with hysteresis. Moreover, the high-spin (HS) and low-spin (LS) transition temperature can be tuned by the gas types and gas pressure over a wide temperature range. The stabilized HS state of **1** in the gas-loaded phase, could be manipulated by framework transformation of **1** with gas introducing, supported by the computational studies. [1,2]

Keywords: Metal organic framework, spin transition, gas induce

References

[1] Y. S. Ma, R. Matsuda, H. Sato, Y. Hijikata, L. Li, S. Kusaka, M. Foo, F. Xue, G. Akiyama, R. Yuan, S. Kitagawa, A convenient strategy for designing a soft nanospace: an atomic exchange in a ligand with isostructural frameworks, J. Am. Chem. Soc. 2015, 137, 15825-15832.

[2] Y. Ma, X. Tang, M. Chen, A. Mishima, L. Li, A. Hori, X. Wu, L. Ding, S. Kusaka, R. Matsuda, Design of a MOF based on octa-nuclear zinc clusters realizing both thermal stability and structural flexibility, Chem. Commun., 2022, 58, 1139-1142.

Structure Engineering of Porous Coordination Polymer-Based Electrocatalysts by Entropy Increase Strategy for Green Hydrogen Energy

Ziqian Xue[1,*]

[1]School of Advanced Energy, Sun Yat-Sen University, No.66, Gongchang Road, Guangming District, Shenzhen,518107

* xuezq3@mail.sysu.edu.cn

The combustion of fossil fuels has led to severe energy and environmental issues. The establishment of a clean and sustainable energy system is crucial for attaining sustainable development. Hydrogen energy, marked by high energy density, long energy storage duration, cleanliness, and zero carbon emissions, constitutes an essential component of the future energy system. The advancement of hydrogen energy holds great significance in addressing energy and environmental problems. Hydrogen energy production based on the electrochemical process is capable of coupling with the renewable energy power generation system to transform hydrogen in water into hydrogen gas, thereby achieving the production of green hydrogen. Furthermore, coupling hydrogen production from electrolytic water with the reduction of pollutant nitrate enables the direct storage of hydrogen in water as green ammonia. These green hydrogen energies can facilitate hydrogen energy power generation via fuel cell systems and construct a green and sustainable energy system. In the electrochemical-related conversion processes, efficient and low-cost electrocatalysts are the key to enhancing the system efficiency; however, the development of efficient electrocatalysts is highly challenging.

Porous coordination polymers (PCPs), also known as metal-organic frameworks (MOFs) with highly porous structure and ultra-large surface area have attracted much attention as electrocatalysts for sustainable hydrogen generation, storage and utilization.[1, 2] Their tunable composition allows for the optimization of electronic properties and coordination environments through precise control of the structure and composition, which are crucial for improving the catalytic performance and selectivity. Entropy increase strategy serves as an effective approach for designing advanced electrocatalysts through introducing disorder into ordered PCPs. Based on this strategy, we have fabricated a series of efficient PCP-based electrocatalysts, such as single atom-doped PCPs,[3, 4] multivariate PCPs,[5] and defected PCPs (Figure 1).[6] These catalysts exhibit outstanding performance in sustainable hydrogen generation, storage, and utilization. The PCPs not only provide a platform for designing efficient electrocatalysts, but also offer possibilities for understanding the catalytic mechanism at the molecular level, contributing to the development of an effective catalyst design methodology.

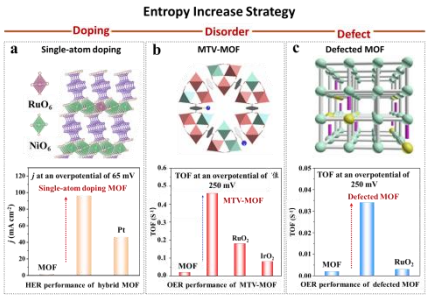


Figure 1. The scheme of Entropy Increase Strategy for designing efficient MOF-based electrocatalysts.

Keywords: PCPs/MOFs, Entropy Increase Strategy, Electrocatalysis, Hydrogen energy, Disorder

References

[1] S. Kitagawa, R.Kitaura, S.-i. Noro, Functional Porous Coordination Polymers, Angew. Chem. Int. Ed. 2004, 43, 2334-2375.
[2] Z. Xue, M.-S. Yao, K.-i. Otake, Y. Nishiyama, Y. Aoyama, J.-J. Zheng, S. Zhang, T. Kajiwara, S. Horike, S. Kitagawa, Modular Design of Highly Stable Semiconducting Porous Coordination Polymer for Efficient Electrosynthesis of Ammonia, Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202401005.
[3] Y. Sun+, Z. Xue+, G. Li, et al. Modulating electronic structure of metal-organic frameworks by introducing atomically dispersed Ru for efficient hydrogen evolution, Nat. Commun., 2021, 12, 1369.
[4] Z. Xue, K. Liu, J. Zheng, T. Kajiwara, H. Sakamoto, T. Honma, K. Otake, S. Kitagawa, Single-Atom tailoring of the electronic structure of the conductive porous coordination polymer enhances efficient electrochemical NH3 production. Chem. of Mater., 2024, 36, 5897–5903.
[5] Z. Xue, Y. Li, Y. Zhang, W. Geng, B. Jia, J. Tang, S. Bao, H. Wang, Y. Fan, Z. Wei, Z. Zhang, Z. Ke, G. Li, C.-Y. Su, Modulating Electronic Structure of Metal-Organic Framework for Efficient Electrocatalytic Oxygen Evolution, Adv. Energy mater., 2018, 29, 1801564.
[6] Z. Xue, K. Liu, Q. Liu, M.-R. Li, C.-Y. Su, N. Ogiwara, H. Kobayashi, H. Kitagawa, M. Liu, G. Li, Missing-linker metal-organic frameworks for oxygen evolution reaction, Nature Communications, 2019, 10, 5048.

Separation of alkane isomers by metal-organic frameworks

HaoWang[1,*]

[1]Hoffmann Institute of Advanced Materials, Shenzhen Polytechnic University, 7098 Liuxian Blvd., Shenzhen, 518055

* wanghao@szpu.edu.cn

The separation of alkane isomers (mostly C5 and C6) represents a crucial process in petrochemical industry for ethylene feed optimization and high quality gasoline production. Metal-organic frameworks (MOFs) hold enormous promise for high-efficiency separation of alkane isomers in light of their structure diversity and high tunability toward pore structures. We present the regulation of structure and pore dimensions of MOFs for alkane isomers separation, including size-exclusion based separation of linear/branched alkanes and monobranched/dibranched alkanes, and temperature-programmed separation by flexible MOFs.[1-5] In addition, reversed separation through shape-dependent recognition by MOFs containing cage-like pores are also discussed. Separation mechanisms have been explored through combined techniques including single-crystal X-ray diffraction and DFT calculations etc. We also expand our separation toward full mixture of naphtha, where MOFs demonstrate outstanding performance.

Keywords: Alkane isomers separation, metal-organic frameworks, size exclusion

References

[1] F. Guo, J. Wang, C. Chen, X. Dong, X. Li, H. Wang*, P. Guo*, Y. Han, and J. Li* "Linker Vacancy Engineering of a Robust ftw-type Zr-MOF for Hexane Isomers Separation" Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202303527.

[2] F. Xie, L. Yu, H. Wang*, and J. Li* "Metal-Organic Frameworks for C6 Alkane Separation" Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202300722.

[3] L. Yu, S. Ullah, K. Zhou, Q. Xia*, H. Wang*, S. Tu, J. Huang, H. Xia, X. Liu, T. Thonhauser, and J. Li* "A Microporous Metal-Organic Framework Incorporating Both Primary and Secondary Building Units for Splitting Alkane Isomers" J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 9, 3766-3770.

[4] Y. Lin, L. Yu, S. Ullah, X. Li, H. Wang*, Q. Xia, T. Thonhauser, and J. Li* "Temperature-Programmed Separation of Hexane Isomers by Porous Calcium Chloranilate Metal-Organic Framework" Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202214060.

[5] L. Yu, S. Ullah, H. Wang*, Q. Xia*, T. Thonhauser, and J. Li* "High-Capacity Splitting of Mono- and Dibranched Hexane Isomers by a Robust Zinc-Based Metal-Organic Framework" Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202211359.

[8]

Sequential Sol-Gel Self-Assembly and Nonclassical Gel-Crystal Transformation of the Metal-Organic Framework

Gel Jiarui Fu, Ziyan He, Ziqi Wang, Eduardo Schott, Honghan Fei, Min Tu, Jianrong Zeng, and Yi-nan Wu*

Metal-organic frameworks (MOFs) gel, an emerging subtype of MOF structures, is unique in formation and function; however, its evolutionary process remains elusive. Here, we explore the evolution of a model gel-based MOF, UiO-66(Zr) gel, by demonstrating its sequential sol-gel self-assembly and nonclassical gel-crystal transformation. The control of the sol-gel process enables the observation and characterization of structures in each assembly stage (phase-separation, polycondensation, and hindered-crystallization) and facilitates the preparation of hierarchical materials with giant mesopores. Employing a combination of in-situ and ex-situ characterizations including small-angle X-ray scattering (SAXS), attenuated total reflection-Fourier transform infrared (ATR-FTIR), and X-ray absorption fine structure (XAFS), the gelation mechanism was explored thoroughly. Post phase separation, the coalescence of zirconium and terephthalic acid ligands was found to give rise to amorphous clusters which then aggregate rapidly to form a three dimensional gel network. The swift assembly, which initiates at sub-solvent temperatures and takes less than 90 seconds to complete, results in Zr-O clusters caught within the gel, thus limiting further crystallization that typically produces a long-range ordered framework. The consequence is the reduction in specific surface area and crystallinity when compared to the crystalline form of UiO-66(Zr). However, prolonged heating at higher temperatures was found to enhance the long-range order and introduce a well-defined pore architecture. Surprisingly, the coordination network within UiO 66(Zr) gels demonstrated exceptional flexibility, leading to unusual gel-to-crystal transformations via a "coordination scissors" approach. This novel method revealed various crystalline intermediates and distinctly nuanced crystallization dynamics. This comprehensive exploration of the sol-gel and gel-crystal evolutions of UiO-66 contributes significantly to the understanding of self-assembly and crystallization processes, inspires innovative structural designs, and underscores the need for further research into the molecular details of intermediates in future MOFs and supramolecular materials.

Keywords: hierarchical structures, metal-organic frameworks, nonclassical crystallization, self-assembly, supramolecular gel.

References

[1] Jiarui Fu, Ziyan He, Eduardo Schott, Honghan Fei, Min Tu, Yi-nan Wu. Sequential Sol-Gel Self-Assembly and Nonclassical Gel-Crystal Transformation of the Metal-Organic Framework Gel. Small, 2023.

[9]

Ultrastable Metal-Organic Frameworks

Huajun Yang [1,*]

[1] Nanjing Normal University, School of Chemistry and Materials Science, Wenyuan Road No.1, 210023

* huajunyang@nnu.edu.cn

The synthesis of stable metal-organic frameworks(MOFs) is of great significance for industrial applications. Under the guidance of hard-soft-acid-base theory, a large series of stable MOFs has been synthesized. However, the theory cannot take both acid resistance and base resistance into account. Further, it is not in accordance with the stability difference of some MOFs. Based on crystal-field and ligand-filed theory, we have synthesized new Cr-MOFs capable of withstanding extreme pH conditions across approximately 16 pH units from pH < 0 to pH > 14, likely the largest observed pH range for MOFs. The integration of multiple stability-enhancing factors including nonlabile Cr3+, mixed Cr–N and Cr–O cross-links, and the highest possible connectivity by Cr3O trimers enables extraordinary chemical stability confirmed by both PXRD and gas adsorption. Notably, the base stability is much higher than literature Cr-MOFs, thereby revitalizing Cr-MOF's viability in the pursuit for the most chemically stable MOFs.

Keywords：ultrastable metal-organic frameworks；Cr^{3+} MOFs；stability

References

[1] Huajun Yang, Fang Peng, Anh N. Hong, Yanxiang Wang, Xianhui Bu,*, Pingyun Feng*, Ultrastable High-Connected Chromium Metal-Organic Frameworks, J. Am. Chem. Soc., 2021, 143, 14470

Confined Metal Nanoclusters within Porous Materials for Catalytic dehydrogenation

Xinchun Yang[1,*]

[1]Shenzhen Institute of Advanced Technology (SIAT), Chinese Academy of Sciences, Shenzhen, 518055

* xc.yang@siat.ac.cn

Liquid chemical hydrides are considered to be the efficient hydrogen carriers for hydrogen storage and transport in the future, owing to their unique advantages: a) high hydrogen contents and excellent stability, b) easy synthesis by a centralized chemical process using “green hydrogen” produced from renewable energy, c) long-distance, large-scale and safe storage and transport, and d) portable release of hydrogen through dehydrogenation reaction when it needs to be used. However, the traditional catalysts have several drawbacks such as high reaction temperature, low efficiency, poor stability, and high consumption of noble metals. In this regard, metal nanoclusters have exhibited outstanding catalytic properties due to their special geometric configuration, discrete electronic structure, and maximum utilization of metal atoms. Unfortunately, the construction of ultrafine metal nanoclusters with clean surface, high dispersibility, specific structure and high stability is challenging, because of the strong self-aggregation (caused by their high surface energy), the weak interactions between the metal and support, and the almost complete blockage of surface atoms. This paper reviews the recent research progress in our group on the design and synthesis of supported metal nanoclusters with high activity, selectivity and stability for the catalytic dehydrogenation of high-content chemical hydrides, such as formic acid, hydrazine hydrate, and ammonia borane.

Keywords: metal nanoclusters; dehydrogenation; catalysis

References

[1] Yang, X.; Sun, J. K.; Kitta, M.; Pang, H.; Xu, Q.* Nat. Catal. 2018, 1: 214.
[2] Yang, X.; Li, Z.; Kitta, M.; Tsumori, N.; Guo, W.; Zhang, Z.; Zhang, J.; Zou, R.*; Xu, Q.* Nano Res. 2020, 13: 105.
[3] Yang, X.; Chen, L.; Liu, H.; Kurihara, T.; Horike, S.; Xu, Q.* Cell Rep. Phys. Sci. 2021, 2: 100289.
[4] Yang, X.; Pachfule, P.; Chen, Y.; Tsumori, N.; Xu, Q.* Chem. Commun. 2016, 52: 4171.
[5] Yang, X.; Ullah, Z.; Stoddart, J. F.*; Yavuz, C. T.* Chem. Rev. 2023, In press.

Crystal-structure-controlled synthesis of solid-solution alloy nanoparticles and their catalytic performance

Quan Zhang[1,2]

[1]State Key Laboratory for Modification of Chemical Fibers and Polymer Materials, Donghua University, No. 2999 North Renmin Road, Songjiang, Shanghai, 201620

[2]College of Materials Science and Engineering, Donghua University, No. 2999 North Renmin Road, Songjiang, Shanghai, 201620

* zhangquan@dhu.edu.cn

Crystal structure describing the arrangement of the atoms in a solid is the most important parameter that affects its physicochemical properties. However, for solid-solution alloy, once its constituent element and composition are fixed, the crystal structure is uniquely determined and hardly changed.[1] Therefore, crystal structure control of solid-solution alloy is still a great challenge and has not been freely used to control the properties of alloy NPs.[2,3]

Here, by fine-tuning the reduction process of the metal precursors, we succeeded in selectively synthesizing fcc and hcp binary and ternary solid-solution alloy NPs with the same composition, size, and morphology through a chemical reduction method.[4] The structures of the obtained NPs were confirmed by powder X-ray diffraction analysis and atomic resolution scanning transmission electron microscopy coupled with energy-dispersive X-ray spectroscopy. The electrocatalytic hydrogen evolution reaction catalytic performance of the alloy NPs with two different crystal structures was investigated. The catalytic performance of the alloy NPs showed obvious dependence on their crystal structure. The hcp alloy NPs show improved catalytic activity compared to the fcc alloy NPs and commercial Pt (Figure). Our work provides a new controllable parameter, crystal structure, to regulate the catalytic performance of solid-solution alloy NPs.

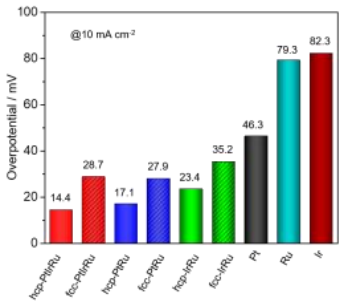


Figure. Catalytic performance of alloy NPs with fcc and hcp structures for hydrogen evolution reaction.

References

[1] Zhang, Q.; Kusada, K.; Kitagawa, H. ChemPlusChem, 2021, 86: 504.
[2] Zhang, Q.; Kusada, K.; Wu, D.; Yamamoto, T.; Toriyama, T.; Matsumura, S.; Kawaguchi, S.; Kubota Y; Kitagawa, H. Nat. Commun. 2018, 9: 510.
[3] Zhang, Q.; Kusada, K.; Wu, D.; Yamamoto, T.; Toriyama, T.; Matsumura, S.; Kawaguchi, S.; Kubota Y; Kitagawa, H. Chem. Sci. 2019, 10: 45133.
[4] Zhang, Q.; Kusada, K.; Wu, D.; Yamamoto, T.; Toriyama, T.; Matsumura, S.; Kawaguchi, S.; Kubota Y; Kitagawa, H. J. Am. Chem. Soc 2022, 144: 4224.

Ultrafast selective enrichment of ammonia nitrogen from water using sulfonated covalent organic frameworks bearing single Cu sites

Wei Jin[1,2,3], Jinglin Liu[1], Naixian Huang[1], Zihao Wang[1], Yunhui Zhang[1,2,3,*], Yongwu Peng[4], Chengtao Gong[4], Yong Sik Ok[5], Zuxin Xu[1,3,]

[1] College of Environmental Science and Engineering, Tongji University, Shanghai, 200092, China

[2] Key Laboratory of Yangtze River Water Environment, Ministry of Education, Tongji University, Shanghai, 200092, China

[3] Shanghai Institute of Pollution Control and Ecological Security, Shanghai, 200092, China

[4] College of Materials Science and Engineering and College of Chemical Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou, 310014, China

[5] Korea Biochar Research Center, APRU Sustainable Waste Management Program & Division of Environmental Science and Ecological Engineering, Korea University, Seoul, Korea

[6] State Key Laboratory of Pollution Control and Resource Reuse, Shanghai, 200092, China

* yunhuizhang@tongji.edu.cn

Abundant and diverse functional groups of adsorbents are essential for their adsorption performances. Herein, we report a strategy to construct highly efficient ammonia nitrogen adsorbents by installing ion-exchange-complexation coordination-hydrogen bonding multiple sites onto covalent organic frameworks (COFs). As a proof of concept, we prepared a COF (TpPa-SO_3H) via a modified mechanical grinding synthetic method and then obtained a sulfonated COF bearing single Cu sites (TpPa-$SO_3Cu_{0.5}$) by post loading. Benefiting from the highly exposed active sites and ordered COF channels, TpPa-$SO_3Cu_{0.5}$ exhibited the highest adsorption kinetics among reported ammonia nitrogen adsorbents proven by the highest pseudo-second-order adsorption rate constant (k_2) of 8.97 g mg^{-1} min^{-1} with its maximum adsorption capacity (30.45 mg N g^{-1}) higher than most adsorbents (<0.001−0.994 g mg^{-1} min^{-1} and 0−25 mg N g^{-1}). Furthermore, TpPa-$SO_3Cu_{0.5}$ exhibited excellent adsorption selectivity with its selective coefficient 328 times as high as that of TpPa-SO_3H in real water (10 mg N L^{-1}, pH=10). It also showed good stability and recyclability with a high ammonia recycle ratio (95.1%) after 5 adsorption-regeneration cycles. These findings pave a new way to develop unique COFs as platforms for ultrafast and selective pollutants in water and wastewater treatment.

Keywords: COFs, Cu(II), fast adsorption kinetics, removal of ammonia nitrogen, high selectivity

An exhaled breath sensor based on gas vortex effect induced by periodic cavity structure

Xinyuan Zhou[1,*], Mingqi Tang[1], Manqing Qi[1], Tie Wang[1,*]

[1]Tianjin Key Laboratory of Life and Health Detection, Life and Health Intelligent Research Institute, Tianjin University of Technology, 391 Binshui West Road, Xiqing District, Tianjin 300384

* xyzhou@email.tjut.edu.cn

* wangtie@email.tjut.edu.cn

The construction of high-performance gas sensors is crucial for exhaled breath detection. Traditional gas sensors work in the static gas environment, with little consideration of gas mass transfer. In this case, most gas sensors adopt a planar film structure. Due to its strong fluidity and diffusion, the exhaled breath flows too quickly through the planar film structure to have sufficient time for molecular adsorption, unable to effectively detect trace gas biomarkers, thus gas mass transfer should be necessarily considered. The periodic cavity structure can induce the airflow to produce embedded vortexes, which can enhance mass transfer by spontaneously mixing and simultaneously inhibit the molecular escape and extend molecular residence time by decreasing the velocity. Therefore, this project applies the periodic cavity structure-induced vortex effect to the design of breath sensors. Using anode porous alumina as the template, the structure parameters of cavity are adjusted flexibly to prepare the periodic cavity structure of different structure parameters, improving the detection performance of exhaled breath[1-3]. Various in-situ experiments including the schlieren photography technology, fluorescence flowing experiment, and in-situ infrared spectroscopy are utilized to investigate the microscopic characteristics of gas flow, diffusion, and adsorption in periodic cavity structures of different structure parameters. This project will reveal the influencing rule between material structure-mass transfer-sensing properties in high-speed flowing gases, and propose the detection mechanism based on the mass transfer dynamics.

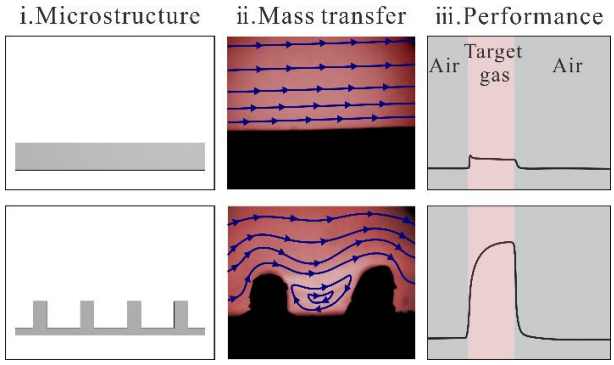


Fig. 1 Study on material microstructure-gas mass transfer-gas sensing performance in high-speed flowing airflow. Microstructure model (i), gas mass transfer (ii) and gas sensing performance (iii) of planar film and periodic cavity.

Keywords: Sensing principle and method; breath sensor; periodic cavity structure; gas vortex effect; gas mass transfer

References

[1] Huang, C H; Shang, X L; **Zhou, X Y**, et al., Hierarchical conductive metal-organic framework films enabling efficient interfacial mass transfer, Nature Communications 2023, 14 (1), 3850.

[2] **Zhou, X Y**; Chen, X Y; Xue, Z J, et al., Nanoparticle assembled structures for matter assays in human flowing systems, Matter 2022, 5 (9), 2760-2786.

[3] **Zhou, X Y**; Qi, M Q; Li, K, et al., Gas sensors based on nanoparticle-assembled interfaces and their application in breath detection of lung cancer, Cell Reports Physical Science 2023, 4 (11), 101678.

基于Fe-MOFs的催化剂材料

孙文婷[1]，徐梓钧[1]，商文静[1]，陈金喜[1,*]

[1]东南大学化学化工学院，南京江宁区东南大学路2号，211189

*Email: chenjinxi@seu.edu.cn

摘要正文：作为一种新型的有机-无机杂化材料，金属有机骨架（MOFs）具有很多优点包括大的比表面积、高结晶度、可调节的孔隙率以及机械稳定性，被认为是有巨大发展前景的贵金属催化剂替代品之一。尤其是Fe-MOFs催化剂因Fe元素独特的电子轨道、低毒性等优点正在被广泛研究。然而，原始Fe-MOFs的低导电性极大地限制了其在电催化领域的应用。本研究利用基底原位生长、构建复合材料、优化电子结构三个策略相互结合的方法来优化改善Fe-MOFs的催化性能。探究不同导电基底、不同负载方法、引入异质金属离子对于催化剂结构形貌，OER催化性能的影响。

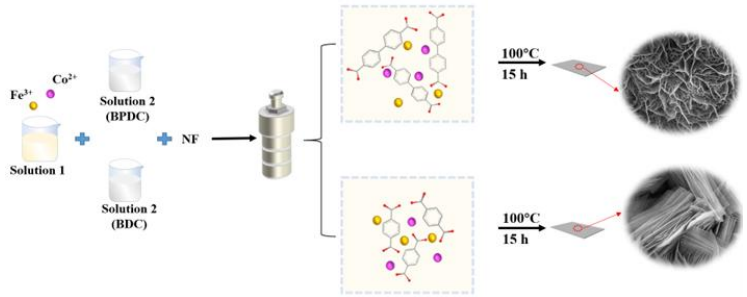


Fig. 1 Schematic representation of the synthesis for FexCo1-x-MOF/NF

关键词：电解水；金属有机框架(MOFs)；原位生长；复合材料

参考文献

[1] **J. Q. He, X. Deng, W. T. Sun, W. J. Shang, Y. B. Lou, and J. X. Chen, A bimetallic NiFe MOF with ultra-thin two-dimensional nanosheet structure effectively accelerates oxygen evolution reaction, Dalton Transactions, 2024,53, 12936-12942.**

[2] **W. J. Shang, B. H. Wang, X. Deng, Y. Q. Tian, Y. B. Lou, and J. X. Chen, Ultrathin Fe-MOFs modified by Fe9S10 for highly efficient oxygen evolution reaction, Dalton Transactions, 2024,53, 2039-2047.**

[3] **K. Zhang, J. Jia, E. D. Yang, S. P. Qi, H. Z. Tian, J. X. Chen, J. Li, Y. B. Lou, and Y. Z. Guo, Work-function-induced electron rearrangement of in-plane FeP@CoP heterojunction enhances all pH range and alkaline seawater hydrogen evolution reaction, Nano Energy, 2023, 114, 108601.**

晶态多孔气体吸附剂和分离膜

范卫东*，孙道峰*

中国石油大学（华东），青岛，266580

*Email: wdfan@upc.edu.cn；dfsun@upc.edu.cn

摘要正文：聚焦晶态多孔材料，以构筑吸附剂和分离膜为研究目标，从研究框架结构与气体分子之间的构效关系出发，发展了系列结构调控策略，构筑了性能优异的晶态多孔吸附剂和分离膜，阐明了晶态多孔框架与碳烃分子之间的多重氢键和偶极-偶极相互作用机制，解决了通过结构精准调控实现碳烃分子低能耗分离的瓶颈问题，拓展了晶态多孔材料的应用范围。

通过协同调控金属模块、功能化连接基和末端配体三元变量，结合高通量筛选，定向合成了系列多元金属-有机框架，揭示了小孔径和极性官能团对碳烃分离选择性的贡献[1]。利用网状化学和孔环境工程策略，功能化修饰框架中的特定位点，进一步通过官能团尺寸和电负性的差异，精确调控孔道的电子和空间环境，首次实现了金属-有机笼对碳烃的高效分离[2,3]。结合单晶X-射线衍射技术和分子模拟，确定了碳烃分子在孔道中的精确位置，发现功能位点与碳烃分子之间的相互作用[4]。基于自适应孔工程，通过单晶到单晶的转化实现对不同吸附质的差异响应，选择性增加框架对乙炔和乙烷的吸附能力，实现了从三元C2烃混合物中一步纯化乙烯[5]。发展了氟功能化的极性和疏水性系列多元金属-有机框架多晶膜，提升了框架对碳烃分子的亲和力和水蒸气稳定性，实现了多晶膜对碳烃的高效分离[6]。

Fig. 1 Precise regulation of MOF structure and improvement of low-carbon hydrocarbon separation performance

关键词：晶态多孔材料；吸附剂；分离膜；结构精准调控

参考文献

[1] **Fan, W.; Yuan, S.; Wang, W.; Feng, L.; Liu, X.; Zhang, X.; Wang, X.; Kang, Z.; Dai, F.; Yuan, D.; Sun, D.; Zhou, H.-C. J. Am. Chem. Soc., 2020, 142: 8728.**

[2] **Fan, W.; Peh, S. B.; Zhang, Z.; Yuan, H.; Yang, Z.; Wang, Y.; Chai, K.; Sun, D.; Zhao, D. Angew. Chem. Int. Ed., 2021, 60: 17338.**

[3] **Feng, X.; Wang, X.; Yan, H.; Liu, H.; Liu, X.; Guan, J.; Lu, Y.; Fan, W.; Yue, Q.; Sun, D. Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63, e202407240.**

[4] **Fan, W.; Wang, X.; Zhang, X.; Liu, X.; Wang, Y.; Kang, Z.; Dai, F.; Xu, B.; Wang, R.; Sun, D. ACS Cent. Sci., 2019, 5: 1261.**

[5] **Wang, Y.; Fu, M.; Zhou, S.; Liu, H.; Wang, X.; Fan, W.; Liu, Z.; Wang, Z.; Li, D.; Hao, H.; Lu, X.; Hu, S.; Sun, D. Chem, 2022, 8: 3263.**

[6] **Fan, W.; Ying, Y.; Peh, S. B.; Yuan, H.; Yang, Z.; Yuan, Y. D.; Shi, D.; Yu, X.; Kang, C.; Zhao, D. J. Am. Chem. Soc., 2021, 143: 17716.**

有机框架材料孔道精准调控及气体分离性能研究

高俊阔 [1,*]

[1]浙江理工大学，材料科学与工程学院，杭州，310018

*Email: jkgao@zstu.edu.cn

摘要正文:实现碳烃混合气的高效吸附分离是学术界与工业界长期关注的重要科学问题，对实现中国碳达峰、碳中和具有重要战略意义[1]。晶态多孔有机框架材料包含金属-有机框架材料（MOF）、共价-有机框架材料（COF）和氢键-有机框架材料（HOF）等，具有结构可调、易功能修饰等优点，在碳烃混合气的分离领域展现重要应用前景[2]。但有机框架材料孔道结构的精准调控和对气体分子的定向识别作用还存在巨大挑战。针对这些难题，我们构筑出具有高密度开放镍位点、极化表面以及致密孔道的MOF材料。孔道内对气体分子的多个结合位点以及其对具有相似物化性质的C_2H_2和CO_2气体的不同结合方式，使得MOF材料兼具高的C_2H_2吸附量和出色的C_2H_2/CO_2选择性（1bar和室温条件下IAST选择性24）[3]。同时，我们提出了溶剂诱导自组装原理，对HOF材料孔道尺寸和多重吸附位点进行精准调控，实现了HOF材料高效分离和纯化丙烯气体，解决了物化性质近似的气体分子难以吸附分离的难题，揭示了HOF对丙烯和丙烷分子的识别机理和吸附位点[4,5]。

关键词：有机框架材料；分子辨识；气体分离；孔道工程

参考文献

[1] **Sholl, D. S.; Lively, R. P.; Seven Chemical Separations to Change the World, Nature, 2016, 532: 435-437.**

[2] **Li, H.; Li, L.; Lin, R.-B.; Zhou, W.; Xiang, S.; Chen, B.; Zhang, Z.; Porous Metal-Organic Frameworks for Gas Storage and Separation: Status and Challenges, EnergyChem, 2019, 1: 100006.**

[3] **Gao, J.; Qian, X.; Lin, R.; Krishna, R.; Wu, H.; Zhou, W.; Chen, B.; Mixed Metal-Organic Framework with Multiple Binding Sites for Efficient C2h2/Co2 Separation, Angew. Chem. Int. Ed., 2020, 59: 4396-4400.**

[4] **Gao, J.; Cai, Y.; Qian, X.; Liu, P.; Wu, H.; Zhou, W.; Liu, D.-X.; Li, L.; Lin, R.-B.; Chen, B.; A Microporous Hydrogen-Bonded Organic Framework for the Efficient Capture and Purification of Propylene, Angew. Chem. Int. Ed., 2021, 60: 20400-20406.**

[5] **Cai, Y.; Gao, J.; Li, J.-H.; Liu, P.; Zheng, Y.; Zhou, W.; Wu, H.; Li, L.; Lin, R.-B.; Chen, B.; Pore Modulation of Hydrogen−Bonded Organic Frameworks for Efficient Separation of Propylene, Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 62: e202308579.**

多尺度有机框架功能材料的精准构筑及能源应用

侯春朝[1,*]

[1]中国海洋大学材料科学与工程学院，中国山东省青岛市西海岸新区三沙路 1299 号，266404

*Email: houchunchao@ouc.edu.cn

摘要正文：在国家“双碳”战略下，能源转型已是大趋势所在。汇报人主要围绕新能源纳米材料催化性能调控的基本科学问题，以金属有机框架材料（MOF）功能金属材料的绿色能源应用牵引，通过从 MOF 材料设计调控出发，构筑了一系列 MOF 基催化应用体系，研究了多尺度 MOF 基功能材料构筑以及对能源催化相关等调控规律，发展了新型功能纳米催化材料，丰富了 MOF 化学，实现了绿色能源方面高效催化应用。本报告将以电催化和储能等能源应用为导向，围绕 MOF 基催化剂的精准设计，通过对材料的结构设计和催化单元调控，从原子尺度的活性位点出发，构筑了一系列具有优异催化性能的功能 MOF 基催化材料。并深入探索催化性能与材料结构和电子结构的关联，优化催化过程中的传质作用，阐明单原子金属位点提效机制，实现了氧气还原反应高效电催化，研制了高性能锌离子混杂型电容器器件，为发展新一代新能源器件打下了实验和理论基础。

参考文献

[10] [1] **Hou, C.; Zou, L.; Sun, L.; Zhang, K.; Liu, Z.; Li, Y.; Li, C.; Zou, R.; Yu, J; Xu, Q. Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 7384-7389.**

[11] [2] **Hou, C.; Wang, H.; Li, C.; Xu, Q. Energy Environ. Sci., 2020, 13, 1658.**

电荷分离孔道工程强化轻烃分离

张袁斌 [1,*]

[1] 先进催化材料教育部重点实验室，浙江师范大学，浙江金华，321004

*Email: ybzhang@zjnu.edu.cn

摘要正文：设计合成具有高效轻烃分离性能的多孔颗粒具有重要的学术和工业意义。然而，多孔颗粒的吸附容量和选择性之间通常存在博弈效应，导致分离性能不理想。主要瓶颈在于多孔颗粒的分子辨识能力弱。本报告汇报我们课题组基于电荷分离孔道工程在乙炔/二氧化碳[1]、乙炔/二氧化碳/乙烯[2]、丙炔/丙烯[3]、丙炔/丙二烯[4]、丙烷/乙烷/甲烷[5]分离方面的研究进展，探讨电荷分离多孔颗粒孔径、拓扑结构和孔表面化学性质调控规律，以实验研究和模拟计算相结合的方法研究气体吸附、扩散和分离规律，在分子层次研究主客体相互作用、客体客体相互作用以及分子识别机理，利用协同相互作用克服气体分离过程中选择性和吸附容量难以兼具的难题，实现结构相似轻烃的高效分离纯化。

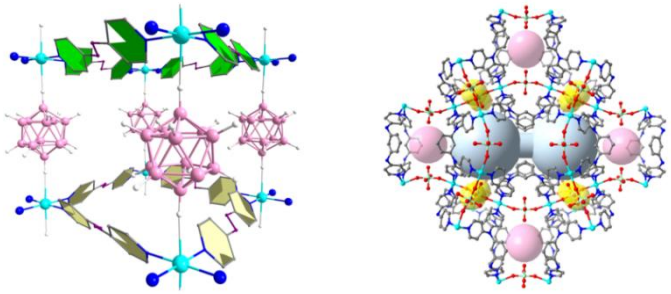


Fig. 1 two types of charge separation porous frameworks

关键词：电荷分离；吸附分离；轻烃分离

参考文献

[1] **Wang L, Sun W, Zhang Y. et al. Interpenetration symmetry control within ultramicroporous robust boron cluster hybrid MOFs for benchmark purification of acetylene from carbon dioxide. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60: 22865-22870.**

[2] **Jiang Y, Hu Y, Luan, B, et al. Benchmark Single-Step Ethylene Purification from Ternary Mixtures by a Customized Fluorinated Anion Embedded MOF. Nat. Commun. 2023, 14: 401.**

[3] **Jiang Y, Hu J, Wang L, et al. Comprehensive Pore Tuning in an Ultrastable Fluorinated Anion Cross-Linked Cage-Like MOF for Simultaneous Benchmark Propyne Recovery and Propylene Purification. Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61: e202200947.**

[4] **Jiang Y, Wang L, Hu J, et al. Specific Propyne Trapping Sites within a Robust MOF for Efficient Propyne/Propadiene Separation with Record Propadiene Productivity. Adv. Mater. 2024, 36: 2311140**

[5] **Zhang Y, Yang L, Wang L, et al. A Microporous Metal-Organic Framework Supramolecularly Assembled from a Cu(II) Dodecaborate Cluster Complex for Selective Gas Separation. Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58: 8145**

Mechanism-Guided Computational Screening of Nanomaterials for Medical Applications

Jia-Jia Zheng[1],* Xiaomei Shen[2], Xuejiao Gao, Xingfa Gao[1,*]

[1]Laboratory of Theoretical and Computational Nanoscience, National Center for Nanoscience and Technology, No. 11 ZhongGuanCun BeiYiTiao, Beijing, 100190

[2]College of Chemistry and Chemical Engineering, Jiangxi Normal University, No. 99 Ziyang Avenue, Nanchang, 330022

* zhengjj@nanoctr.cn

Nanomaterials have attracted considerable interest in disease prevention and treatment, largely due to their great potential in enhancing the therapeutic efficacy and reducing the dosage, toxicity, and side effects of conventional small molecule drugs. However, the considerable diversity of nanomaterials and their complex structures present a significant challenge in the efficient screening of nanomaterials with desirable medical functions. One of the main reasons is that conventional studies are primarily based on experience or experimental trial-and-error, lacking the guidance of underlying mechanisms to achieve rational design. To address these issues, our research is focused on the surface-catalyzed conversion of intracellular reactive oxygen species (H_2O_2, $O_2^{\bullet-}$, HO•, etc.) by inorganic nanomaterials, with the aim of developing nanomaterials for safe and effective medical applications. Our approach is based on the "chemical mechanism - predictive model - theoretical screening - experimental validation" framework. For example, a theoretical prediction model and an experimental standard method for determining the activity of H_2O_2 activation on nanosurfaces to kill bacteria and tumor cells were established by combining theoretical calculations and microkinetics[1-3]. Based on this model, an inverse screening strategy combining theoretical calculations and experiments was developed to identify alloy nanomaterials from a materials database. The reliability of the screening results was verified by wet chemistry methods, with the antibacterial application severing as an example[4]. In addition, an artificial intelligence approach was employed to analyse nanotoxicity data accumulated over the past decades using a large language model. Based on these chemical mechanisms and experimental data, an artificial intelligence screening method can be developed to accelerate the discovery of safe nanomaterials for medical applications.

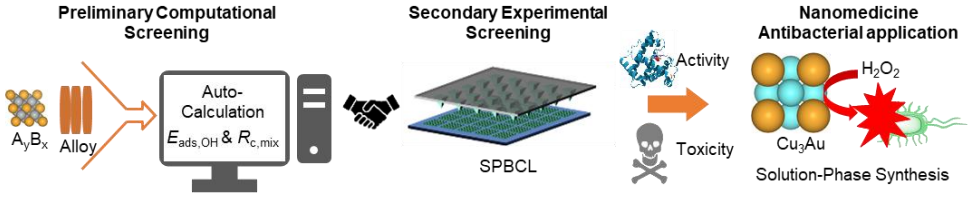


Fig. 1 Integrated computational and experimental framework for inverse screening of nanomaterials for medical functions.

Keywords: Nanomaterials, Cytotoxicity, Antibacterial nanomedicine, Chemical mechanism, Machine learning

References

[1] J.-J. Zheng, Q.-Z. Li, Z. Wang, X. Wang, Y. Zhao, X. Gao, Computer-aided nanodrug discovery: recent progress and future prospects, Chem. Soc. Rev. 2024, 10.1039/D3CS00575E.

[2] J.-J. Zheng, F. Zhu, N. Song, F. Deng, Q. Chen, C. Chen, J. He, X. Gao, M. Liang, Optimizing the standardized assays for determining the catalytic activity and kinetics of peroxidase-like nanozymes, Nat. Protoc. 2024, 10.1038/s41596-024-01034-7.

[3] H. Fan, J.-J. Zheng, J. Xie, J. Liu, X. Gao, X. Yan, K. Fan, L. Gao, Surface ligand engineering ruthenium nanozyme superior to horseradish Peroxidase for enhanced immunoassay, Adv. Mater. 2024, 36, 2300387.

[4] J.-J. Zheng, X. Wang, Z. Li, X. Shen, G. Wei, P. Xia, Y.-G. Zhou, H. Wei, X. Gao, Integrated computational and experimental framework for inverse screening of candidate antibacterial nanomedicine, ACS Nano. 2024, 18, 1531.

[12]

Boosting C_2H_6/C_2H_4 separation via the precise electrostatic modulation of synthetic 1-D channel at atomic level

Salamanti Ainiwaner[1], Hengcong Huang[1], Jia-Jia Zheng[2], Fengting Li[1], Ming-Shui Yao[3,4], Yifan Gu[1]

[1] College of Environmental Science and Engineering, State Key Laboratory of Pollution Control and Resource Reuse, Tongji University, 200092 Shanghai, China.

[2] Laboratory of Theoretical and Computational Nanoscience, National Center for Nanoscience and Technology, Chinese Academy of Sciences, 100190 Beijing, China.

[3] Skate Key Laboratory of Mesoscience and Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, 100190 Beijing, China.

[4] University of Chinese Academy of Sciences, Chinese Academy of Sciences, 100049 Beijing, China.

The regulation of gas sorption via simple pore modification is crucial to molecular recognition and chemical separation. Herein, a rational pore surface electrostatic modulation in synthetic one dimensioned(1-D)channel is demonstrated to boost C_2H_6/C_2H_4 selectivity for one-step extraction of C_2H_4 from C_2H_6/C_2H_4 mixtures. Through the precise modulation of the surface charge arrangement with negatively charged moieties in the1-Dchannelofa metal–organic framework (MOF), enhanced C_2H_6-host framework and decreased C_2H_4-host framework electrostatic interactions were obtained, which resulted in an obvious improvement in adsorption selectivity. Furthermore, the breakthrough separation performance rendered the obtained MOF an efficient adsorbent for C_2H_4 purification from C_2H_6/ C_2H_4 mixture. The combined detail theoretical studies prove that the gas sorption selectivity is remarkably sensitive to framework electrostatic change even in the case of pore surface modification at the atomic level. These results are of fundamental importance to the design of porous materials for challenging separation tasks

[13]

[14]

[15]

[16]

[17]

Functionalized dual/multi-ligand metal-organic frameworks for efficient CO_2 capture under flue gas conditions

Na Geng[1,4], Li Xu[1], Jiajia Zheng[2], Yaofeng Wang[1], Yangyang Guo[1,*], Ming-Shui Yao[1,4,*], Tingyu Zhu[1,3,*]

[1]CAS Key Laboratory of Green Process and Engineering, Institute of Process Engineering, Innovation Academy for Green Manufacture, State Key Laboratory of Mesoscience and Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190

[2]Laboratory of Theoretical and Computational Nanoscience, National Center for Nanoscience and Technology, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190

[3]Center for Excellence in Regional Atmospheric Environment, Institute of Urban Environment, Chinese Academy of Sciences, Xiamen, 361021

[4]School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100049

* yyguo@ipe.ac.cn
* msyao@ipe.ac.cn
* tyzhu@ipe.ac.cn

Reducing CO_2 emissions is critical for China, especially in industry. In this study, a series of functionalized MFM-136 adsorbents have been synthesized, involving the grafting of NO_2 and NH_2 groups onto MFM-136. Modifications with amino groups were found to be effective for CO_2 adsorption, specifically, the CO_2 adsorption capacity peaked at 4.35 mmol/g for $NH_{2(0.6)}$-MFM-136, representing 55% enhancement than MFM-136. It turns out that NH_2 modification can effectively mitigate the chemical deposition from the impurity gases, and significantly improve the adsorbent's hydrophobicity and its tolerance. Remarkably, $NH_{2(0.6)}$-MFM-136 showed 34% less CO_2 capacity loss than MFM-136 after 24h in simulated flue gas. Suitable for stable and selective CO_2 capture under industrial flue gas conditions.

Keywords: CO_2 capture, flue gas, impurity gas resistance, dual/multi-ligand MFM-136, NO_2/NH_2 functionalization.

References

[1] Q. Ju, J. Zheng, L. Xu, H. Jiang, Z. Xue, L. Bai, Y. Guo, M. Yao, T. Zhu, Enhanced carbon capture with motif-rich amino acid loaded
[2] defective robust metal-organic frameworks, Nano Research 2024, 17, 2004−2010.
[3] O. Benson, I. da Silva, S. Argent, R. Cabot, H. Godfrey, Y. Yan, S. Parker, P. Manuel, M. Lennox, T. Mitra, T. Easun, W. Lewis, A. Blake, E. Besley, S. Yang, M. Schröder, Amides do not always work: Observation of guest binding in an amide-functionalized porous Metal-Organic Framework, Journal of the American Chemical Society 2016, 138, (45), 14828-14831.
[4] Z. Shi, Y. Tao, J. Wu, C. Zhang, H. He, L. Long, Y. Lee, T. Li, Y. Zhang, Robust metal–triazolate frameworks for CO2 capture from flue gas, Journal of the American Chemical Society 2020, 142, (6), 2750-2754.
[5] W. Wu, Z. Li, Y. Chen, W. Li, Polydopamine-modified Metal–Organic Framework membrane with enhanced selectivity for carbon capture, Environmental science & technology 2019, 53, (7), 3764-3772.

Construction of a redox-active metal−organic framework based on an octanuclear lithium one-dimensional building block

Shu-Fan Li,[1] Sheng-Yu Jin, Gen Zhang[1,*] and Jian Su,[1,*]

[1]Department of Chemistry and Chemical Engineering, University of Nanjing University of Science and Technology, Nanjing, Jiangsu 210094, China

* zhanggen@njust.edu.cn; sujian@njust.edu.cn

Given the redox activity of tetraphenylbenzene-1,4-diamine, which exhibits two oxidation states, TPPDA-based materials can be utilized in radical materials and electrochromic materials.[1-2] Li^+ has a flexible coordination number, and Li^+ ions in Li- metal-organic frameworks (MOFs) often aggregate to form clusters or chain-like structures.[3-4] These characteristics make the combination of functional organic linkers beneficial for further specific applications. Based on this, we constructed a stable lithium metal-organic framework, constructed using a redox-active N,N,N',N'-tetrakis(4-carboxyphenyl)-1,4-phenylenediamine linker and Li_8 cluster-based one-dimensional rod secondary building unit, with good stability, reversible redox activity. The oxidation of Ag^+ is helpful for the formation of radical MOF. Furthermore, under various potentials, Li_8-MOF can function as an electrochromic device, displaying color changes from colorless to yellow and dark brown. The multi-state electrochromic behavior of Li_8-MOF reported in this study holds promise for advancing the development of smart MOF materials.[5]

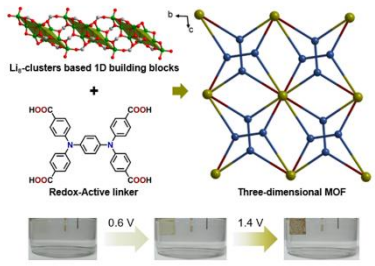


Fig. 1 Redox-active N,N,N',N'-tetrakis(4-carboxyphenyl)-1,4-phenylenediamine linker and Li_8 cluster-based one-dimensional rod secondary building unit constitute Li_8-MOF, and photographs of them for electrochromic devices.

Keywords: redox-active, metal−organic framework, electrochromic.

References

[1] F. Yu, W. Liu, S.-W. Ke, M. Kurmoo, J.-L. Zuo, Q.-C. Zhang. Electrochromic two-dimensional covalent organic framework with a reversible dark-to-transparent switch. Nat. Commun. 2020, 11, 5534.

[2] Q. Hao, Z.-J. Li, B. Bai, X. Zhang, Y.-W. Zhong, L.-J. Wan, and D. Wang. A Covalent Organic Framework Film for Three-State Near-Infrared Electrochromism and a Molecular Logic Gate. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 12498– 12503.

[3] J. Guo, X. Xue, H. Yu, Y. Duan, F. Li, Y. Lian, Y. Liu and M. Zhao. Metal–organic frameworks based on infinite secondary building units: recent progress and future outlooks. J. Mater. Chem. A, 2022, 10, 19320–19347.

[4] M. A. Alnaqbi, A. Alzamly, S. H. Ahmed, M. Bakiro, J. Kegerea and H. L. Nguyen, Chemistry and applications of s-block metal–organic frameworks. J. Mater. Chem. A, 2021, 9,3828.

[5] S.-F. Li, Y.-R. Meng, M.-J. Xu, G. Zhang, and J. Su. Construction of a redox-active metal−organic framework based on an octanuclear lithium one-dimensional building block. Chem. Commun. 2024, 60, 8047−8050.

Light-induced free radicals in biphenothiazine-based metal-organic frameworks

Ya-Ru Meng[1], Yuan Liang, Gen Zhang, Jian Su[1*]

[1] School of Chemistry and Chemical Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing, 210094 P. R. China

* sujian@njust.edu.cn

Photochromic metal-organic frameworks (MOFs) have garnered considerable interest in the design of smart materials.[1-2] Among these, radical MOFs, which are generated under light illumination, have demonstrated significant functionality in both material science and biomedicine.[3,4] Two isomorphic two-dimensional MOFs were synthesized using a solvothermal method with zinc (Zn) and cadmium (Cd) metal ions in combination with a diphenothiazine-based ligand (H4TPTZ). Notably, the phenothiazine units in these MOFs were oxidized in situ to sulfoxide. Both MOFs exhibited reversible photochromic behavior when irradiated with ultraviolet light at room temperature, showcasing a rapid response to light stimuli. The formation of free nitrogen radicals upon light exposure was confirmed by electron paramagnetic resonance and magnetic measurements.[5] The single crystal structures of both states were elucidated through X-ray single crystal diffraction, allowing for an exploration of the underlying mechanisms of photochromic behavior in these MOFs.

Keywords: Light-induced free radicals Phenothiazine Photochromic Metal organic framework

References

[1] J. X. Hu, Q. Li, H. L. Zhu, Z. N. Gao, Q. Zhang, T. Liu, G. M. Wang, Achieving large thermal hysteresis in an anthracene-based manganese(II) complex via photo-induced electron transfer, Nat. Commun., 2022, 13, 2646.

[2] Y. J. Ma, J. X. Hu, S. D. Han, J. Pan; J. H. Li, G. M. Wang, Manipulating On/Off Single-Molecule Magnet Behavior in a Dy(III)-Based Photochromic Complex, J. Am. Chem. Soc., 2020, 142, 2682-2689.

[3] X. F. Jiang, S. D. Han, A. N. Wang, J. Pan, G. M. Wang, The Tri(imidazole)-Derivative Moiety: A New Category of Electron Acceptors for the Design of Crystalline Hybrid Photochromic Materials, Chemistry, 2021, 27, 1410-1415.

[4] L. Liu, Q. Liu, R. Li, M. S. Wang; G. C. Guo, Controlled Photoinduced Generation of "Visual" Partially and Fully Charge Separated States in Viologen Analogues, J Am Chem Soc, 2021, 143, 2232-2238.

[5] X. Wang, Z. Zhang, Y. Song, Y. Su, X. Wang, Bis(phenothiazine)arene diradicaloids: isolation, characterization and crystal structures, Chem Commun, 2015, 51, 11822-5.

Four-folded Interpenetrated Soft Porous Polymers with Multistage Structures Exhibit Guest-induced Gate-open Adsorption

Xiaoyu Zhang, Yifan Gu *

College of Environmental Science and Engineering, State Key Laboratory of Pollution Control and Resource Reuse, Tongji University, Siping Rd 1239, Shanghai, 200092, China

* 21514@tongji.edu.cn

Soft porous polymers are gaining significant attention due to their stimuli responsive behavior, which is characterized by structural transformations in response to host-guest interactions, temperature, etc.. Herein, we synthesized a novel class of coordination polymers with an interdigitated structure, designated as TJE-21 (Zn(dpg)(bcpa)) and TJE-22 (Zn(dpg)(dcca)). By adjusting the activation temperature, completely distinct desolvated structures can be obtained, each exhibiting entirely different properties. Interestingly, these structures demonstrate gate-opening adsorption behavior for various common gases such as carbon dioxide, C3 gases, and water vapor. Furthermore, for some gases, the gate-opening pressure can be tuned by temperature, and these materials have already shown promising selectivity for the separation of carbon dioxide and acetylene.

Construction of a stable radical hydrogen–bonded metal–organic framework by functionalized tetrathiafulvalene linkers

Jun-Zhe Zhu,[1] and Jian Su[1,*]

[1]Department of Chemistry and Chemical Engineering, University of Nanjing University of Science and Technology, Nanjing, Jiangsu 210094, China

* sujian@njust.edu.cn

Radical metal-organic frameworks (MOFs) represent a novel class of materials characterized by high porosity, crystallinity and diverse applications in magnetic, electrical, and optical areas.[1-2] To combine the characteristics of MOFs and hydrogen−bonded organic frameworks (HOFs), hydrogen−bonded MOFs are constructed through both coordination and hydrogen bonds.[3] The construction of stable radical hydrogen−bonded MOF has become a significant challenge. Herein, this work presents an unprecedented stable radical hydrogen−bonded MOF generated from a modified tetrathiafulvalene-tetrabenzoate ((2-Me)-H_4TTFTB) linker and a two-connected $Cd(COO)_2(H_2O)_3$ node. Strategies involving tuning the conformation of metal ions through steric effect and reticular synthesis were employed in the design of this MOF. Single-crystal X-ray diffraction, electron paramagnetic resonance, and magnetic measurements were performed to elucidate the presence of $TTF^{\bullet+}$. Additionally, this radical MOF exhibited a high electrical conductivity of 4.1×10^{-4} S/m and excellent photothermal conversion with a temperature increase of 137 ℃ in 15 s under the irradiation of 0.7 W cm^{-2} 808 nm laser. The directed synthetic approach for hydrogen-bonded MOF reported in this study holds promise for advancing the development of novel functional MOF materials.[4]

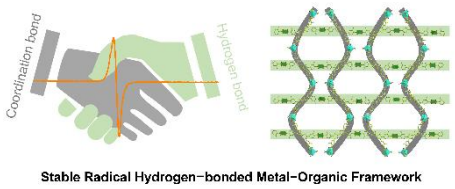


Fig. 1 The construction of stable radical hydrogen-bonded metal-organic framework.

Keywords: Radical, hydrogen−bonded metal−organic framework, photothermal conversion.

References

[1] B. Ding, M. B. Solomon, C. F. Leong, D. M. D'Alessandro, Redox-active ligands: Recent advances towards their incorporation into coordination polymers and metal-organic frameworks Coord. Chem. Rev. 2021, 439, 213891.

[2] D. Maspoch, D. Ruiz-Molina, K. Wurst, N. Domingo, M. Cavallini, F. Biscarini, J. Tejada, C. Rovira, J. Veciana, A nanoporous molecular magnet with reversible solvent-induced mechanical and magnetic properties. Nat. Mater. 2003, 2, 190-195.

[3] J. Su, S. Yuan, Y.-X. Cheng, Z.-M. Yang, J.-L. Zuo, Coordination-bond-directed synthesis of hydrogen-bonded organic frameworks from metal–organic frameworks as templates. Chem. Sci. 2021, 12, 14254-14259.

[4] J. Su, X. Han, S.-W. Ke, X.-C. Zhou, S. Yuan, M.-N. Ding, J.-L. Zuo, Construction of a Stable radical hydrogen−bonded metal−organic framework by functionalized tetrathiafulvalene linkers. Chem. Commun., 2024, 60, 5812-5815.

单晶二维导电金属有机框架的设计和简易合成：转子-定子设计策略

苏熹，陈龙*

吉林大学化学学院超分子结构与材料国家重点实验室，长春市前进大街 2699 号，130012

*Email: longchen@jlu.edu.cn

摘要正文：二维导电金属有机框架（2D *c*-MOFs）因其高电导率和大载流子迁移率，在电子学和光电学领域展现出巨大的应用潜力。然而，常用的平面配体溶解度有限，这给合成和纯化过程带来了挑战，并导致了繁琐的配位条件筛选。此外，目前大多数报道的2D *c*-MOFs为多晶粉末，结晶度较低且形态不规则，这进一步阻碍了对其详细结构-功能关系的深入研究。为了解决这些问题，我们开发了一种“转子-定子”分子设计策略，利用精心设计的非平面双咔唑配体（8OH-DCB）来构建2D *c*-MOFs。得益于该配体独特的“转子-定子”结构，我们成功制备了Cu-DCB-MOF单晶，并实现了其晶体结构的精确确定。值得注意的是，Cu-DCB-MOF单晶能够在多种有机溶剂中获得，显示出优异的溶剂相容性。此外，我们的“转子-定子”分子设计策略的多样性还通过另外两种具有相同结构的新配体得到了进一步验证，分别获得了2D *c*-MOFs单晶（Cu-DCBT-MOF和Cu-DCBBT-MOF）。本研究提出了一种简便有效的方法，通过非平面配体的合理设计和直接构建，实现单晶2D c-MOFs的高效合成。

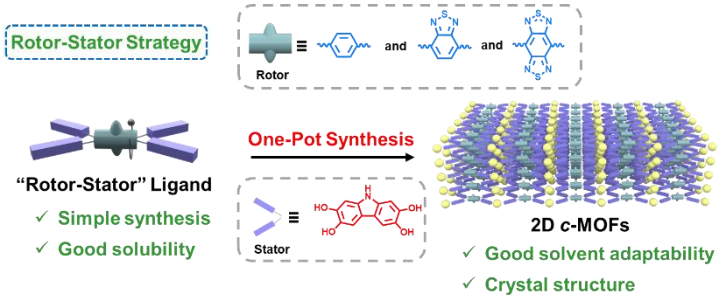


Fig. 1 Schematic diagram of single-crystal 2D c-MOFs constructed by “rotor-stator” molecular design strategy.

关键词：2D *c*-MOFs；“转子-定子”设计策略；单晶结构；溶剂相容性；策略多样性

参考文献

[1] **Su, X.; Zhong, Z.; Yan, X.; Xu, Y.; Zhang, T.; Ma, Y.; Chen, L. De Novo Design and Facile Synthesis of Highly Crystalline 2D Conductive Metal–Organic Frameworks: A “Rotor-Stator” Strategy. J. Am. Chem. Soc. 2024, 146, 9036-9044.**

CCPT13

2024 第十三届中国颗粒大会

The 13th China Congress on Particle Technology

中国·苏州

2024年10月24日-28日

第十三届中国颗粒大会
官方网站

第十三届中国颗粒大会
照片直播

中国颗粒学会
官方微信

颗粒世界
官方B站

中国颗粒学会
官方视频号