

· 专题一:双清论坛“分布式能源中的基础科学问题” ·

分布式能源中的基础科学问题*

金红光¹ 何雅玲² 杨勇平^{3**} 纪军⁴ 史翊翔⁴ 杜小泽^{3,5}

1. 中国科学院工程热物理研究所, 北京 100190
2. 西安交通大学能源与动力工程学院, 西安 710049
3. 华北电力大学能源动力与机械工程学院, 北京 102206
4. 国家自然科学基金委员会工程与材料科学部, 北京 100085
5. 兰州理工大学能源与动力工程学院, 兰州 730050

[摘要] 分布式能源系统作为高效、清洁、经济、可靠和灵活的先进供能系统,一直受到国际能源领域的广泛关注,也是推动能源转型和能源利用技术变革的重点研发方向,对于我国实施节能减排战略,构建清洁低碳、安全高效的能源体系,具有至关重要的作用。本文基于第233期双清论坛总结了分布式能源系统的研究现状、发展趋势及面临的挑战,凝练出未来5~10年分布式能源涉及的关键科学问题与技术瓶颈,探讨了相关前沿研究方向和科学基金资助战略。

[关键词] 分布式能源;清洁低碳;学科交叉;基础研究

能源短缺与环境污染是制约我国经济和社会可持续发展的主要瓶颈,开发先进供能系统已成为我国实施节能减排战略,构建清洁低碳、安全高效能源体系的重大需求。目前,我国终端能源供应的基础是依靠集中火力发电和远距离输电网的供电、基于燃煤/燃气锅炉的供热和电驱动的空调制冷,造成能源利用率低、环境污染,以及能源高质低用等一系列问题;同时,电力、燃气季节峰谷问题突出,供能形式单一,导致供能安全面临严峻挑战。

分布式能源系统位于或临近负荷中心,不以大规模、远距离输送电力为主要目的,是建立在能量梯级利用概念基础上的一种先进供能系统。在分布式能源系统中,可再生能源与化石能源可以通过不同形式在发电、供热和制冷等不同环节得到互补利用,由此实现能源综合梯级利用、高效转换和大幅度节能,兼具高效、环保、经济、可靠和灵活等特点。它将传统“源—网—荷”间的刚性链式连接转变为便于主动调控的源—荷柔性连接,是集中式供能系统不可或缺的重要补充,是实现我国能源转型和能源利用技术变革的重要方向。我国2014年政府工作报告中



金红光 中国科学院工程热物理研究所研究员、中国科学院院士,中国工程热物理学会理事长。长期从事热力学和能源动力系统的理论与方法研究。建立了燃料化学能梯级利用和多能源互补的能质理论,提出了分布式冷热电联产系统、煤基化工动力多联产系统等。在温室气体控制方面,提出了捕集CO₂的化学链燃烧动力系统。在燃料化学能有序释放、聚光太阳能热化学发电、无火焰燃烧方面,为燃料源头节能和控制温室气体都做出了重要创新贡献。发表主要学术论文400余篇,获国际和国家发明专利60余项。曾获国家自然科学奖二等奖、何梁何利科技进步奖等多项奖项。



杨勇平 华北电力大学教授、博士生导师,国家杰出青年科学基金获得者,国家首批“万人计划”中青年科技创新领军人才。现任华北电力大学校长,中国工程热物理学会副理事长,国务院学科评议组成员,国家能源专家咨询委员会委员。主要研究领域为火力发电节能理论与方法、电站空冷技术、先进能量系统集成与优化、多能源互补系统等。作为首席科学家主持2项国家“973计划”项目及国家自然科学基金创新群体项目等多项国家级和电力行业重大重点科研项目。已发表SCI论文240余篇,获国家科技进步二等奖2项,教育部科技进步一等奖2项。

收稿日期:2020-03-29;修回日期:2020-05-09

* 本文根据第233期“双清论坛”讨论的内容整理。

** 通信作者,Email: yyp@ncepu.edu.cn

首次提出“发展智能电网和分布式能源”,把发展分布式能源提升为国家战略高度。

分布式能源系统的研究和实践涉及工程热物理、控制科学与工程、化学化工、材料科学,以及能源管理等多学科交叉和综合运用,是极具挑战性的课题。其涉及的诸多关键科学问题尚不明晰、亟待解决。在此背景下,2019年5月7~8日,国家自然科学基金委员会工程与材料科学部、化学科学部与政策局联合举办了主题为“分布式能源中的基础科学问题”的第233期双清论坛,来自全国各高等院校、中国科学院各科研院所和海外知名大学等24个单位的38位专家学者代表应邀出席。与会专家通过充分而深入的研讨,凝练了该领域的重大关键科学问题,探讨了前沿研究方向和科学基金资助战略。

基于本次双清论坛与会专家的主题报告,本文分析了我国分布式能源系统的发展机遇与挑战,综述了近年来的研究进展,并根据与会专家的研讨,对分布式能源系统基础研究关键研究方向提出了建议。

1 我国分布式能源系统的发展机遇与挑战

与欧美各国相比,我国分布式能源起步较晚。2002年,分布式能源概念首次被引入我国。2004年,《国家发展改革委关于分布式能源系统有关问题的报告》中对分布式能源的概念、特征、发展重点等做了较为详细的描述,明确了我国分布式能源的发展方向^[1]。2011年,国家能源局与财政部、住建部和国家发展改革委联合下发《关于发展天然气分布式能源发展的指导意见》,对发展天然气分布式能源的重要性、目标、政策及有关措施作了全面阐述^[2]。2013年,国家发展改革委印发《分布式发电管理暂行办法》,对分布式发电的管理予以规范^[3]。《2014年国务院政府工作报告》中首次提出“发展智能电网和分布式能源”,将发展分布式能源提升到国家战略高度^[4]。2017年《关于加快推进天然气利用的意见》和《关于可再生能源发展“十三五”规划实施的指导意见》等政策陆续出台,为大规模推广应用分布式能源创造了条件^[5,6]。随着国家对分布式能源重视程度的逐年增加,以及支持力度不断走向实用化,我国分布式能源迎来了良好的发展机遇。

虽然目前国内分布式能源系统已有一些应用与示范,但仍面临诸多瓶颈与挑战。一方面,在微小型动力循环领域,特别是微小型燃气轮机,美国、日本和英国等发达国家处于世界领先水平,已有成熟的产品;而我国的微小型燃气轮机目前仍依赖国外引

进。另一方面,先进的高效分布式能源系统的关键技术,如HAT循环、正逆耦合循环技术、中低温余热驱动的吸收式热泵和除湿技术、化石燃料与可再生能源互补技术、储能技术等尚未成熟,有待进一步开发^[7]。已投产的分布式能源项目在综合集成性能、多能互补品位匹配、能量梯级利用、变工况运行效率、主动控制水平等方面尚未充分发挥其能源利用率高和用户友好的潜力。因此,弥补当前分布式能源系统存在的缺陷,进而推动分布式能源系统的发展,亟需提高我国分布式能源研究的整体水平。

2 分布式能源系统研究主要进展

2.1 分布式能源系统先进热力循环

热力循环是常规分布式能源系统的核心,其变革往往会带动能源利用技术水平的飞跃。发展高效、经济的新型动力循环形式对于促进我国顺利实现能源结构清洁化转型具有重要意义。

有机朗肯循环是一种利用中低品位热能循环发电并同时产热的技术。基于有机朗肯循环的分布式能源系统不仅可化解过剩产能,还可利用可再生能源发电,现已成为研究分布式能源系统的主要方向之一。有机朗肯循环的基本原理与常规的朗肯循环类似,两者最大的区别是有机朗肯循环的工质是低沸点、高蒸汽压的有机工质,而不是水。工质的选取是有机朗肯循环中的关键技术。我国研究人员已发现R227ea是中低温地热发电有机朗肯循环较理想的工质;对于低温烟气热源(低于150℃)有机朗肯循环发电系统,R245fa比其他工质更优;热源为高温烟气(190℃)时,R601a相对较优,但因其高度可燃,仍需寻找更优的工质;苯、甲苯和环己烷适用于250℃和300℃两种热源温度驱动的有机朗肯循环系统。

除了在中低温余热回收上有突出优势的有机朗肯循环,我国还开展了超临界CO₂闭式布雷顿循环以及正逆耦合循环等技术的研究。超临界CO₂闭式布雷顿循环是目前应用最广且效率最高的超临界CO₂动力循环方式。在中高温热源发电方面,已有学者从理论上验证其能够代替蒸汽朗肯循环,且具有结构紧凑、热效率高、系统布置简单等优点。特别是对于核能和太阳能等恒定高温热源,超临界CO₂闭式布雷顿循环的优势更为突出。

目前分布式能源系统中,300~500℃的发电机组排烟直接用于驱动吸收式制冷系统,而制冷机吸热温度仅为100~200℃,带来了较大的不可逆损失。降低大温降余热利用的温度断层,提高能量利

用效率,是分布式冷热电联供系统面临的一大难题。基于正逆循环耦合的功冷联产技术具有解决这一难题的潜力,具有良好的应用前景。已有国家重点基础研究发展计划“工业余热高效综合利用的重大共性基础问题研究”和国家科技支撑计划“分布式冷热电联供系统技术”等项目,为基于正逆循环耦合的功冷联产技术发展奠定了良好基础。目前,正逆耦合循环相关研究已经从余热利用领域拓展到了太阳能、地热等中低温可再生能源的利用。

2.2 分布式能源系统能量的高效存储

以可再生能源为输入的分布式能源系统具有能量的间歇性、分布不均匀以及波动性大等特点,同时冷、热、电等多种能量负荷输出也呈现周期性和随机性波动,均需要通过储能解决变工况调控的问题。储能技术包括热能存储、电化学能存储、电能存储、化学能存储和机械能存储等。最近,研究人员还研制出充放电装置彼此独立的全新电燃料储能系统。储热技术是分布式能源体系中最常用的储能技术之一,结合工程热物理学特点,本文重点综述了储热技术的发展现状。

按储热方式的不同可分为显热储热、潜热储热和热化学储热。

(1) 显热储热

显热储热技术是目前市场最成熟的技术,常见的显热储热材料包括碎石、砂子、耐火砖等固体显热蓄热材料及熔融盐、液态金属等液态显热蓄热材料。大多显热蓄热材料均具有成本低廉、储量大的特点,适合规模化工业应用及商业推广。然而,目前显热储热材料的热导率、比热容等热物性参数均较低。较低的热导率引发传热恶化,对设备的安全性和可靠性产生威胁,缩短设备使用寿命;而较低的比热容则会导致系统过于庞大,成本增加,使显热蓄热材料难以应用于规模较小的分布式能源体系中。提高显热蓄热材料的热导率、比热容等热物性是目前显热储热技术的主要研究方向。

(2) 潜热储热(相变储热)

与显热储热相比,潜热储热的储能密度更高,有助于减小储热设备的规模。此外,由于潜热储热主要利用材料相变过程中释放/吸收能量,储放热过程中体系温度基本保持恒温,故可减少能量品位的损失。针对不同温度的应用场景,可将相变储热材料分为以无机盐、合金与石蜡类有机材料为代表的高、低温相变储热材料。相变储热材料虽具有较高的相变潜热可供利用,而其与显热蓄热材料相同,具有导

热能力较差的缺陷。故通过添加具有高导热性能的金属颗粒、泡沫或石墨烯、膨胀石墨等添加物制备复合材料成为研究人员主要的关注对象。此外,泄漏、腐蚀、吸潮问题,以及低维添加介质的稳定性问题,成为制约固-液相变技术应用和发展的主要瓶颈,其解决方案亟待研究。

(3) 热化学储热

热化学储热方法是利用化学变化中吸收、放出能量进行热量储存。相较于潜热储热,热化学储热拥有更高的储热密度,可以更加明显的减小储热系统体积,提高储热系统的便利性和灵活性。热化学储热技术可以分为浓度差热储存、化学吸附储热和化学反应储热三类。其中浓度差热储存主要依靠酸碱盐溶液在浓度变化时吸收/释放热量。吸附储热主要是利用吸附剂与吸附质在吸附/解吸过程中伴有大量热量的释放/吸收进行储能,其中 $\text{MgSO}_4/\text{H}_2\text{O}$ 体系被认为是非常有应用前景的水合物储能体系。化学反应储热较为广泛,甲烷重整制氢、氨分解/合成、金属氧化物的分解/合成等化学反应均有较为广泛的应用。化学储热虽储能密度高,但由于在实现过程中化学物质须隔离、反应动力学特性尚未厘清等原因,导致其系统复杂、投资较高、整体效率较低。化学储热目前仍停留在实验室研究阶段。此外,热化学储热需要解决快速充热与放热的难题,另外热输出的稳定性和可调控性也有待深入探索。

2.3 多能互补系统能势匹配与能量梯级利用

多能互补品位匹配不合理,能量梯级利用存在技术断层等问题严重制约了我国分布式能源系统的发展。许多技术难题亟待攻破:以燃气轮机为代表的微小型动力是分布式冷热电联产系统的核心,常规燃气轮机小型化引起叶尖泄漏损失比例增大,气体动能未被利用,初温下降至 $900\text{ }^\circ\text{C}$ 左右,导致燃气轮机热功转换效率下降;吸收式制冷与热泵是有效的余热利用途径,但是现有溴化锂和氨水吸收式制冷仅需要不足 $200\text{ }^\circ\text{C}$ 的热源,将其简单用于分布式冷热电联产系统 $400\sim 500\text{ }^\circ\text{C}$ 的动力余热回收,造成了较大的作功能力损失,而且无法做到大温降范围内有效利用余热;从燃料高温燃烧的热转换开始,到动力排烟余热利用的系统用能上看,目前燃料燃烧作功、余热制冷等只利用了部分温度区间的热能,存在余热利用的温度断层,作功能力损失大,能的梯级利用水平不高等问题。为实现分布式供能系统的能量梯级利用,我国开展了新型动力循环压缩系统、动力余热驱动的热声发电、动力余热驱动的循环耦合

和功冷并供等方面的研究。

在“温度对口、梯级利用”的科学用能思想指导下,我国研究了应用于分布式冷热电联产系统的微型动力循环的压缩系统,从系统循环优化的角度针对其压缩部件从做功本质和流动组织规律上进行理论创新,突破传统动力循环的技术瓶颈,从而实现新型动力系统压缩部件的原理性创新和技术革新突破,研制了国际上首套新型高效增压系统,并实验验证了该压缩系统的高效增压原理。

分布式能源系统中,中低温区的工业废热广泛存在,可用于宽温区的热功转换技术应用前景广阔。热声发动机具有本征效率高、结构简单、可靠性高及成本低等优点,特别是多级环路行波热声发动机因起振温度低、能流密度高,得到了越来越多的关注。近年来,国内外已分别研制出高效行波热声发动机。目前,热声系统中的行波热声转换机理、热声自激振荡演化过程以及大振幅的非线性热声转换理论、变温热源热声转换新流程等是国际研究热点和前沿。

为解决大温降余热的高效和充分利用难题,我国研究开展了动力余热驱动的循环耦合和功冷并供研究。采用的学术思路是将大温降看成多个温位热源,构建适合不同温位的子循环,合理设置各子循环品位与热源品位差,借助循环耦合,实现不同功能的输出,包括功的输出、制冷(制热)量的输出,也可以两者同时输出。将具有较高品位制冷能力的溶液用于制取较高品位的冷能,将较低品位的冷能经过一定过程使其品位得到提升,采用品位匹配、品位提升等措施来实现循环构型的创新。同时,与温度品位对应的变效吸收式制冷技术是余热利用效率提升的有效手段。

2.4 多能互补分布式能源系统多目标优化集成与运行控制

多能互补分布式能源系统耦合多种供能技术,在形成互动、互补、互助效应的同时,也使得系统复杂化。要使其充分发挥潜在的节能减排效益并实现多种能源间“1+1>2”的产出效果,基于系统科学理念下的多目标优化集成与运行控制至关重要。

对于具有多元化驱动装置和能源利用装置的多能互补分布式能源系统来说,如何实现其最佳集成配置以满足用户冷、热、电需求,并取得最大的节能、经济等收益尤为关键。我国科研人员对含有微型燃气轮机、风机、光伏电池、燃料电池等设备的微电网进行了模拟分析,建立了混合整数线性规划模型,并运用优化算法得到了微电网的最优容量配置。另

外,在建立含太阳能光伏光热多能互补分布式能源系统模型的基础上,以成本经济、能耗节约、环境影响低为优化目标对系统进行优化配置,结果表明,优化配置后的多能互补系统具有全面的潜力优势。

由于存在多种能源耦合,多能互补分布式能源系统在运行、管理、调节等方面较为复杂。系统运行优化的目的在于协调系统与用能单位之间的能量匹配关系,依据用能单位能量需求来调整或改变系统的运行模式,达到多能互补、整体运行最优的目标。为解决风光并网消纳问题,我国学者通过搭建风光互补理论模型并设置适宜的装机容量比例,运用多种算法相结合的模型求解算法,优化得出了系统逐时运行策略。

在实际优化过程中,由于多能互补系统多元化的供能方式,会使多能流相互影响,因此孤立地考虑单一机组的运行情况往往会导致其他机组出力冗余或过载。为实现多能互补分布式能源系统效益最大化,有必要对系统整体框架、设备容量以及运行策略进行协同优化。我国学者基于生命周期法,从节能、环保、投资回收期的角度,对含光伏发电的分布式能源系统的容量设计和运行策略进行了协同优化。另外,针对微型燃气轮机和地源热泵构成的复合供能系统,以年总费用和天然气节能率为优化目标,对系统优化配置和运行规律进行了研究,并论证了复合供能系统的综合优势。

目前,多能互补分布式能源系统多目标优化集成与运行控制领域的研究热点包括:在电网信息交互层和热功转换物理层的耦合交界时,不同响应时级是如何进行协同调度的;在物理层中存在的动态响应边界条件,到与微网耦合的优化协调时,是否需要突破边界条件;针对分布式能源的多尺度建模存在的关键科学问题。

3 基于国家需求的分布式能源系统基础研究关键研究方向

针对分布式能源中的基础科学问题,建议未来5~10年围绕以下三个方向开展原创性研究。

(1) 多能源互补的能势匹配、能的梯级利用与热化学储能理论

多能源互补的分布式能源系统涉及多种能量的转化与利用形式,有能量的生产、转换及存储等多个复杂环节,不同品位能源之间的匹配、梯级利用直接影响整个系统的综合性能。其中涉及的不同能源能势匹配,梯级利用原理以及热存储基本理论还有待

深入研究。基于多能源的能势高低、逐级、有序地转化和释放燃料、利用化学能和热能梯级利用,对各个能量转化和利用过程进行品位关联,耦合多能源清洁燃料转化和动力循环,能量品位无缝对接转化,构建能的综合梯级利用原理。具体方向包括:①聚光太阳能、燃料化学能等能势匹配和能量有序释放机理;②高、中品位热能的热声正逆循环耦合机理;③热化学储热系统储放热过程中直接实现热能品质提升的机制与方法;④储热材料微观传质扩散机理、结构演变过程、失效机理及储热系统循环稳定运行方法;⑤热化学储热系统储放热过程中实现热能品质提升的机制与方法;⑥热化学储热系统内的传热传质机理及其与化学反应热力学的耦合理论。

(2) 多能源互补的分布式能源系统动态特性及变工况运行控制策略

多能源互补的分布式能量系统中涉及不同时间尺度动态响应的过程及系统,包括响应时间快的化石能源转化过程,也有多变不稳定可再生能源如太阳能、风能等,有非热力循环转功的燃料电池系统,也有传统热力循环转功过程,各自时间响应特性差异大、揭示整个系统动态特性对于制定系统优化的运行策略,变工况调节方式具有至关重要的意义,其中涉及诸多未解决的关键问题。具体方向包括:①多能源互补的分布式能源系统动态建模理论和方法;②变负荷工况下热化学储热系统的动态响应特征;③多能源互补的分布式能源系统动态仿真与响应特性;④多能源互补分布式能源系统中不同工况需求下的运行策略;⑤多能源互补的分布式能源系统全工况性能优化控制技术。

(3) 多能势互补分布式能源系统的清洁高效动力系统转化及关键单元技术突破

高效、清洁、低碳、环保的多能源互补分布式能源系统的发展依赖于系统中各子单元关键技术的突破与创新,也离不开与之相关的如信息、人工智能、大数据、协同优化控制等技术的发展,每一子单元及相关技术的革新与提升都带来分布式能源系统的大发展与变革。以氢能燃料电池和热声发动机为例,则代表了新一代分布式能源最有前景的动力系

统。具体方向包括:①低成本、高效蓄能(如相变储热、储冷)技术开发;②典型用户用能特性大数据建模及分析;③风能、太阳能负荷、气象数据预测技术;④低成本、中温燃料电池装置开发;⑤低成本、高效太阳能光伏、光热利用技术;⑥适于低品位热驱动的有机朗肯循环工质筛选与开发技术;⑦热声分布式能源系统正逆循环高效耦合机理及大范围供能调节机制;⑧适用于多能互补的分布式能源系统灵活、柔性智能电网技术开发;⑨多能系统协同控制与互动;⑩多能源互补的分布式能源系统综合评估。

4 结 语

我国可再生能源在能源系统中的占比不断增加、各类新型单元技术的快速发展,迫切需要深入探究分布式能源中的基础科学问题,把握分布式能源的未来发展前沿及趋势,实现多学科、多角度、多领域深度交叉,促进可再生能源在分布式能源系统中的应用,进而推动能源利用技术的进步和能源领域研究的发展。目前国内外有关多能源互补的分布式能源系统的研究和实践基本处于初级阶段。这一研究领域涉及多学科交叉和综合运用,极具挑战性,且其涉及的诸多关键科学问题尚不明晰,且亟待解决。本次论坛与会专家通过充分而深入的研讨,提出了未来5~10年分布式能源的发展方向及资助重点,以期对分布式能源系统发展提供科学和技术支撑,力争对促进和推动我国能源技术革命以及保障我国经济社会的可持续发展产生积极意义。

参 考 文 献

- [1] 国家发展改革委. 国家发展改革委关于分布式能源系统有关问题的报告, 2004.
- [2] 国家发展改革委, 财政部, 住房城乡建设部, 国家能源局. 关于发展天然气分布式能源的指导意见, 2011.
- [3] 国家发展改革委. 分布式发电管理暂行办法, 2013.
- [4] 李克强. 政府工作报告, 2014.
- [5] 国家发展改革委. 加快推进天然气利用的意见, 2017.
- [6] 国家能源局. 国家能源局关于可再生能源发展“十三五”规划实施的指导意见, 2017.
- [7] 孙殿义. 中国科学院支撑服务国家战略性新兴产业科技行动计划. 科技促进发展, 2011, 3: 13—22.

Basic Scientific Issues in Distributed Energy System

Jin Hongguang¹ He Yaling² Yang Yongping^{3*} Ji Jun⁴ Shi Yixiang⁴ Du Xiaozhe^{3,5}

* Corresponding Author, Email: yyp@ncepu.edu.cn

1. Institute of Engineering Thermophysics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190
2. School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049
3. School of Energy Power and Mechanical Engineering, North China Electric Power University, Beijing 102206
4. Department of Engineering and Material Sciences, National Natural Science Foundation of China, Beijing 100085
5. School of Energy and Power Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050

Abstract Distributed energy system (DES), as an efficient, clean, economical, reliable and flexible energy system, has received widespread attention in the energy field. It is of great practical significance to promote energy transformations and technological changes in energy utilization. To implement the energy saving and emission reduction strategy and build a clean, safe, efficient and low-carbon energy system for China, DES needs to be studied in further depth. Based on the 233rd Shuangqing Forum of NSFC, this article summarizes the latest research status, development trends and potential challenges of DES. The scientific issues and technical challenges associated with developing DES in the next 5~10 years are also presented. Moreover, the directions on DES research and the funding strategy of NSFC are discussed.

Keywords distributed energy system; clean and low-carbon; interdisciplinary; basic research

(责任编辑 张强)

· 成果快报 ·

我国学者在化学反应量子几何相位效应研究方面取得新进展

在国家自然科学基金项目(批准号:21688102、21590800、21825303、21822305)等资助下,中国科学院大连化学物理研究所杨学明、张东辉院士,孙志刚、肖春雷研究员研究团队,在氢原子与氢分子的同位素($H+HD\rightarrow H_2+D$)反应过程中,发现了新的量子干涉现象,并揭示了该反应中的量子几何相位效应。研究成果以“ $H+HD\rightarrow H_2+D$ 反应中直接抽取机制和漫游插入机制的量子干涉(Quantum interference in $H+HD\rightarrow H_2+D$ between direct abstraction and roaming insertion pathways)”为题,于2020年5月15日在线发表在《科学》(*Science*)杂志上。论文链接:<https://science.sciencemag.org/content/368/6492/767.full>。

在化学反应中,量子干涉现象是普遍存在的,但要准确理解这些干涉现象产生的根源却很困难。因为这些干涉的图样十分复杂,而且在实验上也难以精确分辨出这些干涉图样的特征。

研究团队以最简单的 $H+H_2$ 及其同位素的反应为研究体系,在实验上首次实现了在较高碰撞能处对后向散射(散射角度为 180 度)信号的精确测量,发现在后向散射角度上, $H+HD$ 反应的产物 H_2 会随碰撞能变化而呈现出有规律的振荡现象;为解释该现象,从理论上创造性地发展了基于拓扑学原理分析化学反应发生途径的新方法。

基于拓扑学和经典轨线理论分析表明,这些后向散射的振荡是由两条反应途径的干涉造成的,即直接反应过程和类似于漫游机理的反应过程。这两条反应途径对后向散射均有显著贡献,但两者的幅度随着碰撞能变化并未显著变化。重要的是,这两条反应途径以相反的方向围绕于锥形交叉的反应势能面,所以在考虑几何相位效应后,它们的干涉图样相位将随着碰撞能发生变化,一个呈线性增加,另一个呈线性减少。最终两者相互干涉呈现出了有规律的振荡现象。有趣的是,在所研究的碰撞能范围内,通过漫游机理所发生的反应只占全部反应性的 0.3% 左右,却能够清晰地被理论和实验所揭示。

(供稿:化学科学部 戴亚飞 高飞雪)