

中国科大低温燃烧研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/22214.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

中国科大低温燃烧研究取得进展

。中国科学技术大学国家同步辐射实验室、火灾科学国家重点实验室特任教授王占东课题组与美国明尼苏达大学合作，在低温燃烧研究取得重要进展，实现了低温燃烧链分支中间体——过氧化物的光电离截面的测量和准确定量分析。相关研究成果以Elucidating the photodissociation fingerprint and quantifying the determination of organic hydroperoxides in gas-phase autoxidation为题，发表在《美国国家科学院院刊》（PNAS）上。

过氧化氢（ H_2O_2

）、烷基过氧化物和羰基过氧化物是低温燃烧的关键链分支中间体，控制点火过程。自2010年，合肥光源、美国先进光源、瑞士光源、法国SOLEIL光源相继发展了基于同步辐射光电离质谱技术的低温燃烧研究平台，在一系列

燃料的低温燃烧中测量到 H_2O_2

、烷基过氧化物、羰基过氧化物以及更加复杂的过氧化物的生成，验证和发展了低温燃烧的反应网络【Proc. Natl. Acad. Sci. 114, 13102 (2017)；Prog. Energ. Combust. Sci. 73, 132 (2019)；Commun. Chem. 4, 18 (2021)】。然而，由于过氧化物高温气化易分解、缺少标准品等不足，导致过氧化物的光电离截面难于测定，无法对过氧化物进行定量分析，对低温燃烧模型的关键链分支反应路径无法进行验证。

科研人员在合肥光源原子与分子物理线站发展了喷雾气化-低压流动管-超声分子束取样-同步辐射高分辨

光电离质谱实验平台，实现过氧化物的低温高效气化，测量了 H_2O_2 的光电离截面【Combust. Flame 236, 111797 (2022)；Combust. Flame 242, 112214 (2022)】；发展了一种温和环保的烷基过氧化物合成方法，获得13种不同结构的烷基过氧化物标准品。通过上述实验平台，研究测量了这些烷基过氧化物的光电离截面。进一步，研究开发了基于化学滴定-同步辐射光电离质谱的过氧化物分析方法，结合测量的烷基过氧化物的光电离截面，实现了羰基过氧化物光电离截面的测量。研究通过实验测量和理论计算发现，烷基过氧化物和羰基过氧化物的光解离主要通过脱去OOH的路径发生，是过氧化物光解离的“指纹”反应通道（图1）。

基于烷基过氧化物和羰基过氧化物光电离截面的实验测量，本工作实现了戊烷低温燃烧生成的甲基过氧化氢、乙基过氧化氢、戊基过氧化氢和羰基过氧化氢的准确定量分析（误差 $\pm 32\%$ ）。实验数据与国际上广泛使用、经详细验证的烷烃低温燃烧动力学模型的模拟结果对比发现，模型过早预测了这些链分支中间体的生成温度（25-50 K），并过高的预测了它们的生成量（2-7倍），表明现有的低温燃烧动力学模型需要进一步的验证和优化（图2）。

本工作发展的过氧化物光电离截面测量方法、构建的光电离截面数据库、开发的过氧化物合成方法，为其他燃料体系中的羰基过氧化物的光电离截面的测量和定量分析，为发展过氧化物光电离截面计算和估算方法以及开展过氧化物的反应动力学研究奠定了基础。

研究工作得到国家重点研发计划青年科学家项目、国家自然科学基金、中科院等的支持。

[论文链接](#)

图1. (a) 烷基过氧化物的电离能，(b) 总的光电离截面，(c) 光解离通道占比，(d) OOH脱去路径的出现势

研究团队单位：中国科学技术大学

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发