

形的中心的连线为五度轴,每两个对应的顶角的连线为三度轴,每两个对应的棱的中点的连线为二度轴,分子的中心为反演中心,故该分子具有 I_h 群对称性.

$C_{20}H_{20}$ 分子共有 120 个自由度. 在以这 120 个自由度为基的矢量空间中, 可以求得 $C_{20}H_{20}$ 的特征标, 如表 2 倒数第 2 行所示. 该表示可约化为

$$\Gamma_{(C_{20}H_{20})} = 2A_g \oplus 2T_{1g} \oplus 2T_{3g} \oplus 4G_g \oplus 6H_g \\ \oplus 4T_{1u} \oplus 4T_{3u} \oplus 4G_u \oplus 4H_u,$$

上式包含了分子整体的平动和整体的转动模. 由表 2 可知分子整体平动和转动模分别为 T_{1u} 和 T_{1g} , 将其从 $\Gamma_{(C_{20}H_{20})}$ 中减去, 得到振动模为

$$\Gamma_{(C_{20}H_{20})}^{\text{vib}} = 2A_g \oplus T_{1g} \oplus 2T_{3g} \oplus 4G_g \oplus 6H_g \\ \oplus 3T_{1u} \oplus 4T_{3u} \oplus 4G_u \oplus 4H_u.$$

从表 2 和上式可看出, 在这些振动模中只有 3 种振动模是红外活性的 (T_{1u}); 有 8 种振动模是拉曼活性的 (2 种 A_g 和 6 种 H_g).

C_{60} 分子具有截正二十面体结构, 如图 1(c) 所示. 它有 12 个五边形, 20 个六边形和 60 个顶角, 60 个碳原子分别位于 60 个顶角上, 它具有 I_h 对称性. C_{60} 分子共有 180 个自由度. 由 I_h 的对称操作可以求得 C_{60} 的特征标, 如表 2 的最后一行所示. 其特征标可约化为

$$\Gamma_{(C_{60})} = 2A_g \oplus 4T_{1g} \oplus 4T_{3g} \oplus 6G_g \oplus 8H_g \\ \oplus A_u \oplus 5T_{1u} \oplus 5T_{3u} \oplus 6G_u \oplus 7H_u,$$

其中有 1 个 T_{1u} 和 1 个 T_{1g} 分别表示 C_{60} 分子的整体平动和转动模, 减去这两种模, 最后得到

C_{60} 的振动模为

$$\Gamma_{(C_{60})}^{\text{vib}} = 2A_g \oplus 3T_{1g} \oplus 4T_{3g} \oplus 6G_g \oplus 8H_g \\ \oplus A_u \oplus 4T_{1u} \oplus 5T_{3u} \oplus 6G_u \oplus 7H_u.$$

由 I_h 的不可约特征标表可知, 在这些振动模中, 有 4 种 T_{1u} 振动模是红外活性的, 十种振动模是拉曼活性的 (8 种 H_g 和 2 种 A_u), C_{60} 的这 4 种红外活性谱和 10 种拉曼活性谱已由实验得到了证实^[7].

以上我们系统地将 I_h 群的对称操作元、类和不可约特征标表作了介绍. 并以 $H_{13}, C_{20}H_{20}$ 和 C_{60} 这些具有一定代表性的分子为例子, 介绍了 I_h 群在分子振动谱分析中的应用. 随着有更多的大分子被证实具有 I_h 对称性, 如 C_{60} 的衍生物 $C_{60}F_{60}$ 等^[8], I_h 群将会受到更多的关注和有越来越多的应用.

参 考 文 献

- [1] E. L. Muetterties et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **84**(1962), 2506.
- [2] L. A. Paquette et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **105**(1983), 5446.
- [3] H. W. Kroto et al., *Nature*, **318**(1985), 162.
- [4] 王广厚, 物理学进展, **13-1**(1993), 266; 物理, **24-1**(1995), 13.
- [5] 苟清泉, 杨仕清, 原子与分子物理学报, **11-1**(1994), 7; **10-2**(1993), 2676.
- [6] D. E. Weeks and W. G. Hartert, *J. Chem. Phys.*, **90**(1989), 4744.
- [7] 张南, 孔繁敷, 朱道本, 物理, **21-4**(1992), 193.
- [8] G. E. Scuseria and G. K. Odom, *Chem. Phys. lett.*, **195**(1992), 531.

烟 与 节 能*

陈俊衡

(华南师范大学物理系, 广州 510631)

摘要 烟是在热力学和能源科学中出现的新概念, 是评价能量价值的重要参数. 它对能源的开发和合理利用具有重大的理论意义和实际意义. 文章介绍了烟的概念、烟效率、烟分析法和烟的合理利用.

关键词 能量, 烟, 效率

* 1995年3月28日收到初稿, 1995年9月11日收到修改稿.

Abstract Exergy, a new concept in thermodynamics and energy resource science, is an important factor in energy appraisals. It has great implications in theory and in practice to the exploitation and reasonable use of energy sources. This article describes the concept of exergy, exergy efficiency, analysis using exergy and its applications.

Key words energy, exergy, efficiency

熵是在热力学和能源科学的发展中逐步形成的新概念。这一概念的提出可追溯到1868年，泰特(Tait)第一次使用可用能的概念，确定热量中的有效部分 $(1 - \frac{T_0}{T})Q$ 与无效部分 $\frac{T_0}{T}Q$ 。1873年吉布斯(Gibbs)导出封闭系统的可用能公式。1898年斯托多拉(Stodola)导出稳流介质的最大技术功。1956年兰特(Rant)建议采用统一的命名：exergy，其中词干 erg 是希腊文字的“功”，前缀 ex 表示“取出”的意思。这个名称与能 energy 既类似又不同，且反映它们的联系，因而得到国际上的公认。“能源危机”迫使人们认真研究各种能源的开发和合理利用，熵作为评价能量价值的重要参数便引起人们的重视和得到广泛的应用。

1 熵

热力学第一定律是能量守恒与转换定律在热现象上的应用，对于一个孤立的热力学系统，一个物体失去的能量等于另一些物体得到的能量，能量的“量”保持不变。这便成为历来评价热能设备热功转换的基础。

热力学第二定律的发现，使人们了解自然过程的方向性，功可以完全变为热，而热变功却有一定的条件限制，任何实际过程都是不可逆过程，必然引起作功能力的损失。这表明能不仅有量的多少，而且有质的区别。

电能、机械能可完全转变为可用的机械功，它们是可完全转换的有用能，能质最高，能质系数定为 1；热能却不能完全转变为机械功，热能 (Q) 转变为机械功 (W) 的最大值为： $W = (1 - \frac{T_0}{T})Q$ ，作功能力决定于热源 (T) 与冷源 (T_0) 的

温差，其能质较差，能质系数小于 1；环境介质虽具有极大量的热能，却无法把它直接转换成有用的机械功，它的能质最差，能质系数为零。显然，能质是以其转换成有用功的大小为标志的。在技术上把可利用来作功的那部分能量称之为熵(exergy)，而不能直接转换成有用功的那部分能量叫做㶲(anergy)。

熵的定义式有多种形式，下面根据热力学第一、二定律导出在封闭系统中熵的定义式^[1]。

设有非流动工质系统，根据热力学第一定律，有

$$\Delta Q = \Delta U + \Delta W. \quad (1)$$

设大气环境保持恒定的压力 P_0 和恒定的温度 T_0 ，当过程是可逆的，利用熵，则有

$$T_0 \cdot \Delta S = \Delta U + \Delta W, \quad (2)$$

式中 ΔW 为系统对外所做的总功，应包括工质推挤环境介质的功 $P_0\Delta V$ 和工质对外界所做的最大有用功 ΔW_m ，于是

$$T_0 \cdot \Delta S = \Delta U + \Delta W_m + P_0\Delta V,$$

即

$$\Delta W_m = T_0\Delta S - \Delta U - P_0\Delta V. \quad (3)$$

若系统由任意状态 (S, U, V) 变化到与环境介质相平衡状态 (S_0, U_0, V_0) 时，系统对外界所做的最大有用功为

$$W_m = (U - U_0) + P_0(V - V_0) \\ - T_0(S - S_0).$$

于是，封闭系统的熵定义为

$$e_x = W_m = (U - U_0) \\ + P_0(V - V_0) - T_0(S - S_0), \quad (4)$$

它表示封闭的热工系统，由任意状态，经可逆过程变化到与环境介质相平衡状态时，对外界所做的最大有用功。显然，当环境状态一定时，熵仅由系统本身的状态所决定。而 $T_0(S - S_0)$ 代

表着系统中不能转换成功的部分能量,便是熵。为了进一步说明熵的物理意义,可把(4)式改写为

$$W_{\text{max}} = e_{xa} - e_{xb} = -\Delta e_x. \quad (5)$$

上式表示,系统由 a 态变到 b 态时,对外所做的最大有用功是以减少自身的熵值为代价的。一切实际过程都是不可逆的,故

$$W_{\text{实}} < -\Delta e_x. \quad (6)$$

对孤立系统, $W_{\text{实}} = 0$,便有

$$\Delta e_x \leq 0. \quad (7)$$

上式表示:孤立系统的熵永不增加;对可逆过程,熵值不变;对不可逆过程,熵值永远减少。因此,可用熵值的变化来判断过程的性质和方向。

2 熵效率

节能与效率有关。传统的节能概念,顾名思义就是节约能量。根据以上所述,能量有可用能和不可用能,而且还分为可转换部分和不能转换部分。既然能量有不可利用的部分,对这部分能量就没有节约的必要了,因此,所谓节能就有不确切的方面了。在技术上,有意义的是可利用来作功的那部分能量,这样,节能的传统概念应该更新,节能并不是节约能量,而应当是节熵。考虑到“节熵”未被普遍接受,文中仍用节能。

效率是评价热能设备的重要指标。要介绍熵效率,先谈谈传统的能量效率。

传统的热能设备的能量效率是以热力学第一定律为基础得出的。能量效率表示为

$$n = \frac{\text{能量收益}}{\text{能量消耗}}.$$

据此,表1列出了几种常见的热能设备的能量效率。表中 Q 为热能, W 为机械功或电功, T_1 (高温) $> T_2$ (中温) $> T_0$ (环境温度) $> T_3$ (低温)。

比较表1的几种热能设备,可见能量效率只论能量的数量;不同类型的热能设备其能量效率各不相同,没有互比性;在综合能量利用中,其效率易引起误解。

从熵概念出发,即从热能设备的作功能力

去分析,热能设备的效率应该是熵效率,表示为
 $n_e = \frac{\text{作功能力收益}}{\text{作功能力消耗}} = 1 - \frac{\text{作功能力的损失}}{\text{作功能力的消耗}}$

显然,熵效率考虑了能量的量和质, n_e 明确合理,具有互比性,在没有作功能力损失时(理想情况),熵效率为 1。 n_e 不等于 1,说明有作功能力的损失,有节能(更确切应是节熵)潜力。因此,熵效率更能从本质上反映热能设备的完善程度。

表1 热能设备的能量效率

设备名称	效率公式	理想值
热动力机	$n = \frac{W_{\text{出}}}{Q_{\lambda}} = \frac{\text{得功}}{\text{耗热}}$	$\frac{T_1 - T_2}{T_1} < 1$
制冷机 (压缩式)	$\epsilon = \frac{Q_3}{W_{\lambda}} = \frac{\text{冷量}}{\text{耗功}}$	$\frac{T_3}{T_0 - T_3}$
锅炉	$n = \frac{Q_{\text{出}}}{Q_{\text{燃料}}} = \frac{\text{供热量}}{\text{燃烧热}}$	1

3 熵分析法

熵分析法已成为热工系统的重要分析方法。随着节能工作的深入进行,熵分析方法已广泛应用于能源管理、热能动力、制冷技术等许多领域之中。熵分析法是从熵平衡方程和熵效率出发,揭示热能设备(包括过程)的熵损失,反映了真实的用能薄弱环节。下面举两个简单例子说明问题。

例1,设室外温度为 -10°C (t_0),要维持室内温度为 20°C (t_2)。

(1) 若用煤气锅炉供暖,其能量效率 $n = 0.7$,燃料燃烧火焰温度为 2300K (T_1),燃料燃烧消耗的热量为 Q_H ,那么,可利用的热量为 $Q = Q_H \cdot n$,其熵效率为

$$n_e = \frac{\text{作功能力收益}}{\text{作功能力消耗}} = \frac{Q_H \cdot n \left(1 - \frac{T_0}{T_2}\right)}{Q_H \left(1 - \frac{T_0}{T_1}\right)} \\ = \frac{0.7 \left(1 - 263/293\right)}{\left(1 - 263/2300\right)} = 0.08.$$

(2)若利用 30°C 的余热水供暖,则

$$n_e = \frac{Q(1 - T_0/T_2)}{Q(1 - T_0/T_1)} = 0.78.$$

从以上的计算可见：

(1) 燃煤气锅炉的能量效率($n = 0.7$)已相当高,看来好象没有多少节能潜力了,可是,烟效率($n_e = 0.08$)相当低,显然还有很大的节烟潜力。

(2) 用余热水供暖比用煤气锅炉供暖烟效率高一个数量级。显然,用煤气锅炉供暖是能源使用不当,作功能力损失很大,其原因是供、需能质不匹配,高质能干低级活,造成不必要的烟损失。

例2,有人对蒸气电站的能量损失和烟损失作了比较(见表2)^[3].

表2 蒸气电站的能量损失和烟损失的比较

设 备	能量损失 输入能量 (%)	烟损失 输入烟 (%)
锅炉	9	49
其中:燃烧过程	—	29.7
传热过程	—	14.9
烟道损失	—	0.68
扩散损失	—	3.72
透平	≈0	4
冷凝器	47	1.5
加热器	≈0	1.0
其他	3	5.5
合计	59	61

从表2中列出的结果看来,能量效率为41%,烟效率为39%,相差不大.但反映内部过程的情况却不同.根据能量分析,最大能量损失发生在冷凝器中,这就可能引起人们误认为,要节能应改造冷凝器,而根据烟分析,情况就不同了,冷凝器的烟损失很小,只有1.5%,而最大烟损失是在锅炉,占49%.显然,要提高能量的利用效率,应该着眼于烟损失大的环节.

4 烟的合理利用

常用的热能设备的烟效率都较低,说明热能设备作功能力的浪费很大.烟效率的理论值为1,从技术上考虑,接近1是有可能的.如何合理利用烟和提高烟效率便成为能源建设和能源设备改造的重要课题,烟的合理利用和提高烟

效率,原则上是使能源能量的质量与用户需要的能量的质量相匹配,尽量做到高质能高用,低质能低用,让不同质的能“各得其所”.特别是低温用热,尽量不直接由燃料燃烧或电炉来供热.

条件仍如例1,若用电炉取暖,其能量效率为100%,而烟效率为

$$n_e = (1 - \frac{T_0}{T_2}) = (1 - \frac{263}{293}) = 0.102,$$

表明高质电能经电炉转换,绝大部分能量转变为无用能.即能量的高质低用造成很大的烟损失.

若改用热泵供暖,电源供应电能,能质仍为1,若用户要求供应的热量相同,与电炉供暖相比较,这时,电源提供的电能在数量上却大大地减少了,用户所需的热量大部分由热泵取之环境.热泵是利用沸点低的液体(如氟里昂12),经节流阀减压蒸发,从低温环境吸热,然后消耗电能驱动压缩机工作,将蒸气压缩,工质温度升高,经冷凝器放热而液化.如此循环工作,便能不断地将热量从低温环境转移到温度较高的室内取暖.热泵供暖可认为是能质为1的电能,与能质为零的环境能量混合,成为用户所需要的能量的能质.这样,热泵取暖过程,烟便得到合理的利用,达到节烟的目的.

火力发电厂的平均烟效率达0.33,已相当高了,但距理想效率值1,相差甚远,故还是有节烟的潜力.目前,采用逐级串联,分级使用的总能系统,是合理利用烟的方向,如燃气-蒸气联合循环, n_e 可达0.55,在燃烧室产生1000℃左右的燃气,在燃气透平中膨胀作功后,温度降为600℃左右,将它送到锅炉使水产生400~500℃的蒸气,让它在蒸气透平中作功,排出的低压蒸气还可在供热用户使用.又如电热合供,发电后利用余热供暖,电能满足电用户,热能满足热用户, n_e 可达0.4~0.45.此外,在研制中的磁流体-蒸气联合发电系统, n_e 可达0.5.

现代文明靠消耗宇宙的能量而生活.根据能量守恒,我们燃烧煤、石油、原子核等矿物燃料,宇宙的能量一样多.但每燃烧一堆煤、一滴石油,或原子核裂变时,宇宙的烟都在无情地减

少,即每次活动都在降低能量的品质.因此,我们的任务不是保存能量,而是要珍惜能量的品质,必须寻找用较低的熵减小来推动和维持社会的文明.

5 结束语

能源是社会生产和人民生活的重要基础,是影响现代化建设的重要因素.我国能源状况如何呢?概括来说,我国能源资源并不丰富,人均能耗低,能源利用率也低.我国除水能资源接近于世界按人口平均水平外,煤、石油、天然气的储量均远低于世界按人口平均水平;我国80年代初,人均能耗是美国的1/17,全世界人均能耗的1/3~1/4,说明能源极待开发,如水力资源仅开发4.5%;据1990年有关资料介绍,我国能

源利用率仅为32%,工业发达国家平均为47.5%,最高达55%,说明我国节能潜力很大.节能潜力应包括技术节能和理论节能未被挖掘出来的部分.而理论节能未被挖掘出来的部分,往往被人们所忽视.熵与节能的介绍,希望能在当前的经济建设热潮中,引起人们的注意.此外,建议在热力学理论中介绍熵概念;在热工系统中,把熵分析法与计算机应用结合起来,建立一套完整的热能设备评价系统,为能源的合理利用和大力开展节能工作服务.

参 考 文 献

- [1] 廖耀发编,温度与熵,高等教育出版社,(1989),61—63.
- [2] 吕灿仁,自然杂志,5-12(1982),901.
- [3] 朱明善,自然杂志,5-4(1982),279.

1996年第6期《物理》内容预告

知识和进展

激光超声的原理及其在固体中的应用(应崇福);
脉冲管制冷研究进展(梁惊涛);
量子信息光学(郭光灿);
色度学的进展(朱正芳);
智能材料发展概述(姚康德);

物理学和经济建设

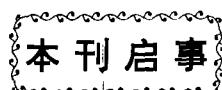
非线性光学限幅技术与激光防护(宋瑛林);
电磁波与电子战(徐润君).

实验技术

高功率超短脉冲激光系统的进展(孟绍贤);

讲座

薄膜物理及其应用讲座第十一讲 Si Ge 量子阱和超晶格的光发射(周均铭).



根据国家有关文件的规定,经《物理》编委会议研究决定,凡 1996 年以后的来稿,经审查录用后,将酌收版面费,希望作者谅解和支持。

《物理》编辑部

1996 年 3 月