

CO₂/N₂在不同挥发分烟煤中的吸附特性研究

王浩¹, 司俊鸿², 王传义³, 程根银², 张泉³, 汤晓辰²

¹皖北煤电集团生产技术部, 安徽 宿州

²华北科技学院应急技术与管理学院, 北京

³安徽恒源煤电股份有限公司钱营孜煤矿, 安徽 宿州

收稿日期: 2023年3月27日; 录用日期: 2023年5月4日; 发布日期: 2023年5月10日

摘要

为研究CO₂、N₂在不同挥发分烟煤中的吸附特性, 本文对煤LL (C₁₈₆H₁₅₃NO₆)、煤PDS-1 (C₂₀₇H₁₆₅NO₁₁)和煤XZ (C₁₈₁H₁₆₃NO₆)在不同温度和不同压力下进行了巨正则蒙特卡洛模拟和分子动力学模拟。结果表明, CO₂在不同挥发分烟煤分子中的吸附量和吸附速率大于N₂吸附量, 在低挥发分烟煤中极限吸附量最大, 且随着挥发分程度升高而降低; 两种气体的吸附热都小于40 kJ/mol, 并且对于压力和温度的变化不敏感。另外, CO₂和N₂更容易吸附在含氧官能团和苯环附近。CO₂和N₂在煤中的扩散能力为N₂ > CO₂, 这是由于CO₂具有更强的吸附能力。

关键词

烟煤, 分子模拟, 吸附, 蒙特卡洛

Study on Adsorption Characteristics of CO₂/N₂ in Bituminous Coal with Different Volatile Contents

Hao Wang¹, Junhong Si², Chuanyi Wang³, Genyin Cheng², Quan Zhang³, Xiaochen Tang²

¹Department of Production Technology, Wanbei Coal Power Group, Suzhou Anhui

²School of Emergency Technology and Management, North China Institute of Science and Technology, Beijing

³Qianyingzi Coal Mine, Anhui Hengyuan Coal Power Co., Ltd., Suzhou Anhui

Received: Mar. 27th, 2023; accepted: May 4th, 2023; published: May 10th, 2023

Abstract

In order to study the adsorption characteristics of CO₂ and N₂ in bituminous coals with different vo-

文章引用: 王浩, 司俊鸿, 王传义, 程根银, 张泉, 汤晓辰. CO₂/N₂ 在不同挥发分烟煤中的吸附特性研究[J]. 化学工程与技术, 2023, 13(3): 189-198. DOI: 10.12677/hjct.2023.133022

latiles, giant canonical Monte Carlo simulation and molecular dynamics simulation were performed on coal LL ($C_{186}H_{153}NO_6$), coal PDS-1 ($C_{207}H_{165}NO_{11}$) and coal XZ ($C_{181}H_{163}NO_6$) at different temperatures and pressures in this paper. The results show that the adsorption amount and rate of CO_2 in different volatile bituminous coal molecules are greater than that of N_2 , and the limit adsorption amount of CO_2 in low-volatile bituminous coal is the largest and decreases with the increase of volatile content; the adsorption heat of the two gases are less than 40 kJ/mol and are not sensitive to changes in pressure and temperature. In addition, CO_2 and N_2 are more easily adsorbed near oxygen-containing functional groups and benzene rings. The order of diffusivity of CO_2 and N_2 in coal is $N_2 > CO_2$, which is due to the stronger adsorption capacity of CO_2 .

Keywords

Bituminous Coal, Molecular Simulation, Adsorption, Monte Carlo

Copyright © 2023 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

煤炭是一种重要的能源，其中烟煤可用于电力、冶金等行业，是煤炭中重要的一类。我国矿井火灾时有发生，其中 90%~94% 的煤矿火灾是由煤炭自燃引起的[1]。煤炭自燃不仅对人民的生命和财产造成了损失，而且对环境造成了破坏，有诸多不利的影响。因此，从分子结构上对烟煤进行研究，并运用分子模拟的方法探究不同挥发分烟煤对气体吸附规律的影响，有利于更深入地理解气体在煤中的吸附特性，对煤矿采空区注惰性气体防灭火具有积极意义。

研究人员现已对烟煤对气体吸附进行了实验与模拟的多种研究。郭立稳等[2]为了研究低阶烟煤对 CO 气体的吸附性能及影响因素，对多种低阶烟煤在不同温度下，进行了 CO 等温吸附试验、煤质分析等工作。结果表明：低阶烟煤中对吸附 CO 产生影响的是其中的惰质组和过渡孔含量，并且 CO 吸附量与这些影响因素呈正相关。文虎等[3]通过模拟 CO 在 5 种不同温度、压力下的吸附量、吸附热变化。研究表明：随着温度的升高， CO 在烟煤分子中饱和吸附量和吸附能力降低，并且 CO 分子由能量较高的优势吸附位点逐渐向相对较弱的吸附位点移动。秦兴林[4]测试了不同水分含量下的瓦斯吸附量，研究表明：烟煤瓦斯吸附量在干燥状态下最大，并且受水分含量影响；受水作用后，测试所用两种煤样瓦斯吸附量呈现不同的趋势，在不同水分含量情况下发现，WZ3 煤样较 WZ15 煤样有更好的吸附性。王吉军等[5]采用差示扫描量热仪测定不同变质程度煤的吸热 - 放热曲线。结果表明：随着温度的升高，吸附 N_2 放出的热量随着温度的升高逐渐减小。张晓光[6]模拟了对 CO_2 和 CH_4 在褐煤中的竞争吸附行为，结果表明：单组分吸附时， CO_2 和 CH_4 的吸附量大小关系为 $CO_2 > CH_4$ ；而双组分吸附时， CO_2 与 CH_4 发生竞争吸附， CH_4 受到竞争吸附的影响，吸附量减少。李树刚等[7]模拟了不同温度下煤分子模型中 CO_2 、 N_2 、 CH_4 多组分气体等比例的吸附行为。结果表明： CO_2 、 N_2 、 CH_4 3 种气体在晶胞内呈现不同的吸附状态，分别为簇状分布、带状分布和点状分布；另外，3 种气体的吸附量、吸附热关系为 $CO_2 > CH_4 > N_2$ ，吸附势能 $CO_2 < CH_4 < N_2$ 。

基于以上研究背景，本文对 CO_2 与 N_2 在不同挥发分烟煤中的吸附特性进行了研究。选取合适的烟煤分子模型，通过数值模拟方法，运用 Materials Studio 软件对比 CO_2 和 N_2 在两种煤分子模型中的吸附和扩散行为，为后续研究提供参考。

2. 计算方法

2.1. 煤模型的选取与构建

三种不同挥发分烟煤分别为低挥发分烟煤 LL ($C_{186}H_{153}NO_6$)、中挥发分烟煤 PDS-1 ($C_{207}H_{165}NO_{11}$)和高挥发分烟煤 XZ ($C_{181}H_{163}NO_6$) [8]。其中, 低挥发分烟煤 LL 芳香尺寸最大, 芳香单元主要以 2 环和 3 环为主; 中挥发分烟煤 PDS-1 芳香尺寸较小, 芳香单元主要是以 2 环和 3 环为主; 高挥发分烟煤 XZ 芳香尺寸小, 芳香单元主要是以苯环为主。三种不同挥发分烟煤的基本单元分别如图 1 所示。

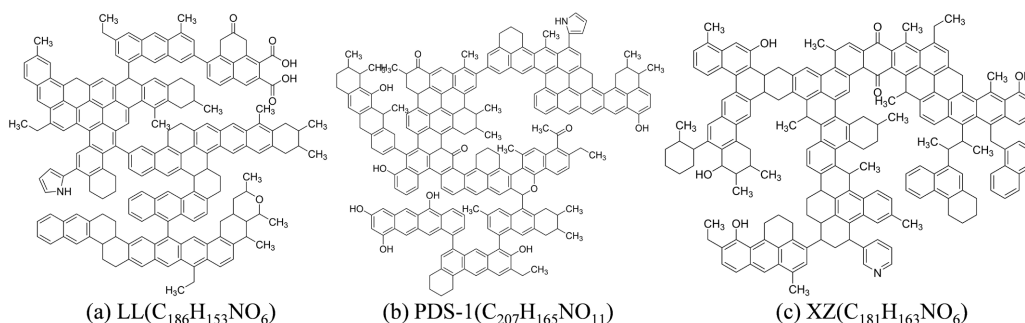


Figure 1. Basic unit of coal molecule

图 1. 煤分子基本单元

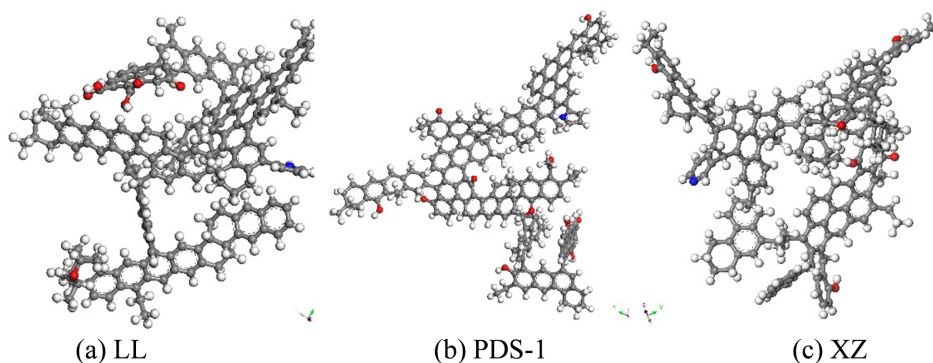


Figure 2. Structure model of coal molecules after structural optimization

图 2. 结构优化后的煤分子结构模型

利用 Materials Studio 2019 软件中的 Forcite 模块对平面煤分子模型进行优化, 使不同挥发分的烟煤模型能量达到稳定状态。采用 Dreiding 立场对煤分子进行几何优化和能量优化。运用电荷平衡法(QEq)计算电荷分布并用原子态计算静电能和范德华能。利用 Anneal 进行退火动力学计算能量最优状态, 初始温度为 300 k, 最高温度为 600 k。经过几何优化和退火后的煤分子基本结构能量变化如表 1 所示, 基本结构单元如图 2 所示。

通过 Amorphous Cell 模块分别构建不同挥发分烟煤的表面模型, 将优化后的煤分子模型分别填充到三维周期性边界晶胞中得到初始煤表面模型, 煤 LL 晶胞大小为 $a = b = c = 15.3 \text{ \AA}$; 煤 PDS-1 晶胞大小为 $a = b = c = 15.7 \text{ \AA}$; 煤 XZ 晶胞大小为 $a = b = c = 14.8 \text{ \AA}$ 。通过测试分别得出三种不同挥发分由低到高的烟煤密度: 1.15 g/cm^3 、 1.20 g/cm^3 、 1.25 g/cm^3 。实际烟煤的密度约为 $1.25 \sim 1.4 \text{ g/cm}^3$, 这是由于实际烟煤含小分子以及其他元素[9]。煤分子表面模型结构如图 3 所示, 其中原子颜色 C: 灰色, H: 白色, O: 红色, N: 蓝色, S: 黄色。

Table 1. Comparison of minimum potential energy composition energies of coal molecules
表 1. 煤分子最小势能组成能量对比

煤种	平均吸附热(kJ/mol)	非成键能(kcal/mol)				非成键能(kcal/mol)			
		键伸缩能	键角能	扭转能	反转能	氢键能	范德华能	库仑能	
LL	最初	9656.138	2522.324	40.052	89.454	2.971	0	7020.335	-18.998
	最终	737.047	98.528	70.856	127.546	2.373	0	463.767	-26.023
PDS-1	最初	14664.559	2920.523	58.821	159.162	5.466	0	11526.216	-5.628
	最终	953.895	114.976	86.910	204.776	4.509	0	528.379	14.345
XZ	最初	11673.678	2224.656	47.597	89.301	2.982	0	9301.776	7.367
	最终	884.963	118.337	88.770	155.162	4.079	0	478.153	40.462

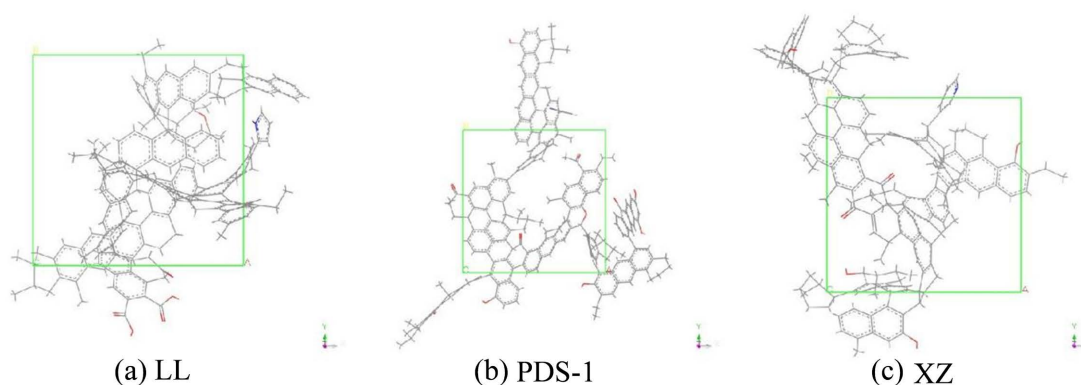


Figure 3. Structure model of coal molecules

图 3. 煤分子结构模型

2.2. 蒙特卡洛模拟

蒙特卡洛(Monte Carlo)方法, 属于统计试验的一种方法, 主要通过进行统计抽样实验来解决各种实际问题。在分子模拟中, 蒙特卡洛方法主要通过 Metropolis 取样在体系中产生 Markov 链, 进而完成统计抽样实验, 得出实验数据。

采用巨正则系综蒙特卡洛模拟方法计算吸附量与吸附热, 在 Materials Studio 2019 软件中吸附模块的 Fixed Pressure Task 进行。在 Fixed Pressure Task 任务中设置温度 303.15、313.15 和 323.15, 压力范围选取 0~5 MPa。选取 COMPASS II 力场, 静电作用与范德华相互作用分别采用 Ewald 加和法和 Atom Based 法。CO₂ 和 N₂ 的摩尔质量、临界温度、临界压力和偏心因子等参数如表 1 所示, 压力和逸度的换算由 Peng-Robinson 公式实现[10] [11]。通过 Langmuir 公式获得了不同温度条件下各组分气体的吸附等温线[12] [13]。Langmuir 公式为:

$$y = \frac{abx}{1+bx} \quad (1)$$

式中: a 是压力趋于无穷大时的极限吸附量, mmol/g; b 是吸附常数, MPa⁻¹。根据模拟结果得出的吸附量 N 单位为(average molecules/cell), 通过下述等式将其转换为(mmol/g):

$$N = 1000 \frac{N_{am}}{N_a \cdot M_s} \quad (2)$$

式中: N 表示吸附量, mmol/g; N_{am} 表示分子个数; N_a 表示晶胞个数; M_s 为单个晶胞的分子量。

Table 2. Physical properties of CO₂ and N₂
表 2. CO₂ 与 N₂ 的物理性质

物理性质	CO ₂	N ₂
摩尔质量(g/mol)	44.01	28.01
临界温度(K)	304.13	126.19
临界压力(MPa)	7.38	3.40
偏心因子	0.22	0.04

吸附位置的定位在吸附模块中的 Locate 进行并在图像上显示。Locate 中力场参数等设置与 Fixed Pressure Task 中的设置相同。

2.3. 分子动力学模拟

采用蒙特卡洛方法,在 Adsorption Locator 模块中分别让三种不同挥发分烟煤分子表面模型吸附 CO₂ 分子和 N₂ 分子。选择能量最低的吸附构型通过 Dynamics 项进行分子动力学模拟,模拟时间为 100 ps,时间步长为 1.0 fs。采用 NVT 正则系综,温度控制采用 Nose 方法,设为 303.15 K。范德华相互作用采用 Ewald 求和方法,精度为 10~3 kcal/mol。选取 20~80 ps 的数据研究体系的动力学性质。

均方位移(MSD)表示分子的平均运动和,MSD 可以通过分子动力学模拟得到,其公式如(3)所示[14]:

$$MSD = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [r_i(t) - r_i(0)]^2 \quad (3)$$

扩散系数指分子均方位移随时间的变化率[10],可以由式(4)得出:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{6Ndt} \sum_{i=1}^N [r_i(t) - r_i(0)]^2 \quad (4)$$

式中: N 是粒子数, $r_i(t)$ 和 $r_i(0)$ 分别是分子 i 在时间 t 和 0 的位置向量。

3. 结果与讨论

3.1. 压力与逸度的关系

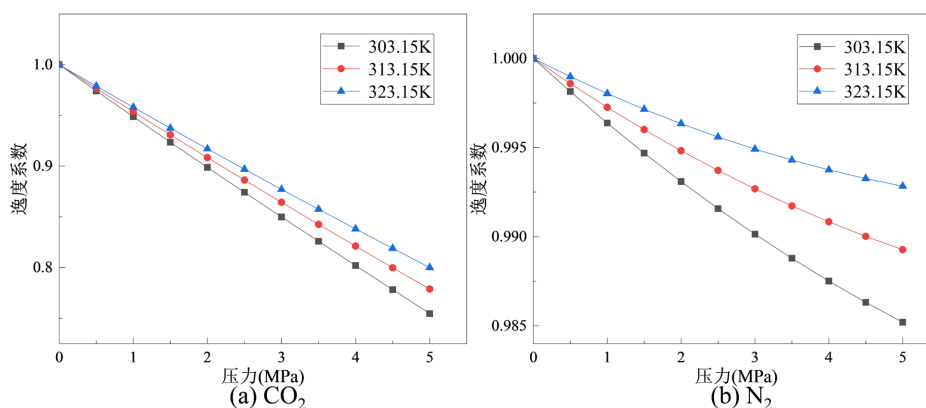


Figure 4. Relationship between gas fugacity coefficient and pressure at different temperatures
图 4. 不同温度下气体逸度系数与压力之间的关系

气体逸度系数与压力的关系如图 4 所示。结果表明:在温度一定的情况下,随着压力增高,气体逸度系数会不断减小,而在压力恒定时,气体逸度系数会因为温度的增高而增大。根据表 2 所示,可知 CO₂

的临界温度为 304.13 K，临界压力为 7.38 Pa。因此，在温度为 303.15~313.15 K 和压力 0~5 MPa 的区间内没有发生梯度变化。在 0~5 MPa 之间，CO₂ 的逸度系数从 0.75 增加到 1.00，N₂ 的逸度系数从 0.985 增加到 1.00。可以发现，CO₂ 的逸度系数的变化率始终大于 N₂，表明两种气体中 CO₂ 的逸度系数相较于 N₂ 的逸度系数更易受到压力的影响。

3.2. 等温吸附曲线

图 5、图 6 和图 7 分别为 CO₂ 和 N₂ 吸附在不同挥发分烟煤的等温吸附曲线，可以发现，在相同的温度和压力下，两种气体吸附量大小顺序为：CO₂ > N₂。从单一挥发分烟煤吸附气体的吸附量可以发现，煤吸附 CO₂ 分子的吸附量始终大于 N₂ 分子的吸附量，可以认为烟煤的挥发分程度高低不会影响 CO₂ 较 N₂ 更强的吸附效能。从不同挥发分烟煤吸附气体的吸附量可以发现：对于 CO₂，随着烟煤挥发分程度越来越高，CO₂ 的极限吸附量逐渐减小；对于 N₂，低挥发分烟煤分子 LL 吸附量要大于中挥发分烟煤 PDS-1 和高挥发分烟煤 XZ。

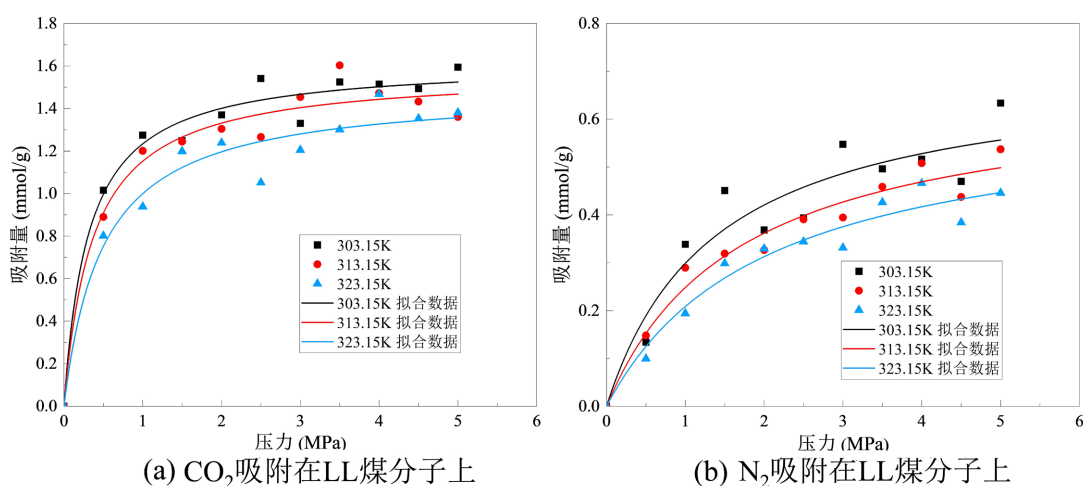


Figure 5. Isothermal adsorption curves of LL coal molecular structure on gases

图 5. LL 煤分子结构对气体的等温吸附曲线

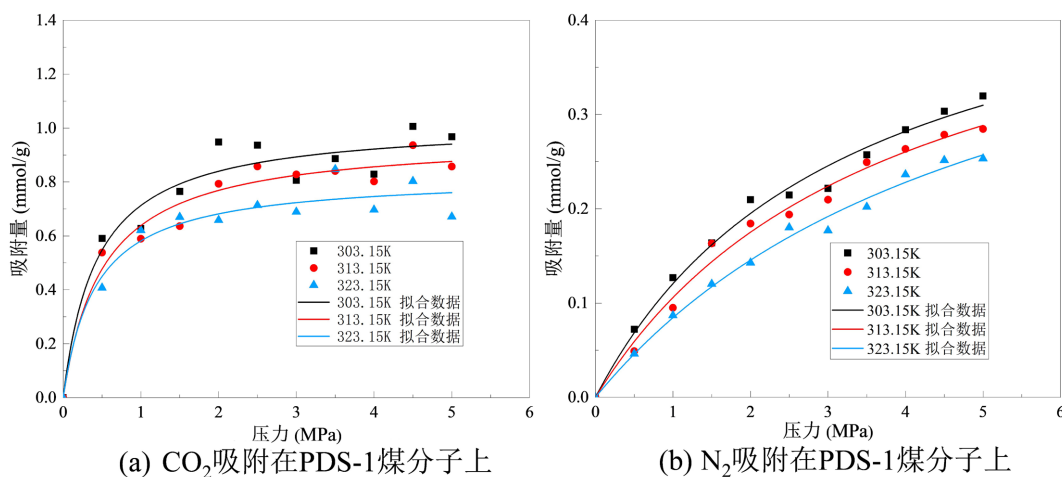


Figure 6. Isothermal adsorption curves of PDS-1 coal molecular structure on gases

图 6. PDS-1 煤分子结构对气体的等温吸附曲线

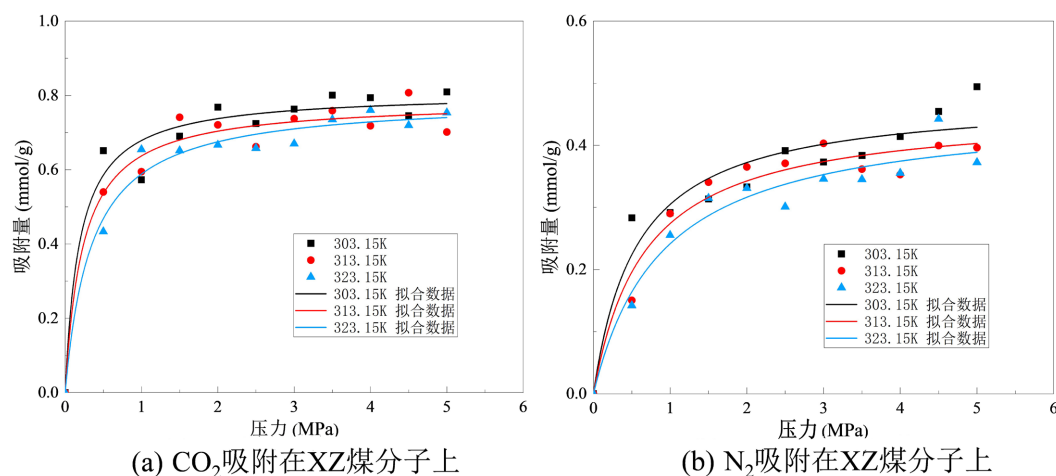


Figure 7. Isothermal adsorption curves of XZ coal molecular structure on gases

图 7. XZ 煤分子结构对气体的等温吸附曲线

从图中可以看出,一定温度下,随着压力增加,煤对 CO_2 分子吸附量逐渐增加,但吸附速率随着压力增大不断降低,当压力增大到一定值时(4~5 MPa),吸附量达到饱和。此外,煤对 CO_2 气体的吸附量受温度影响,在压力一定的情况下,随着温度升高,煤对 CO_2 气体的饱和和吸附呈现下降趋势,对比饱和状态下(4.5 MPa)温度不断升高,不同挥发分烟煤由低到高对 CO_2 吸附量分别为 1.380~1.594 mmol/g、0.671~0.967 mmol/g 和 0.753~0.809 mmol/g。 N_2 与 CO_2 的等温吸附曲线类似,随着压力增加煤对 N_2 分子吸附量逐渐增加,并且吸附速率逐渐放缓,但由于 CO_2 更容易到达极限吸附量,故 N_2 分子吸附速率只有在高挥发分烟煤 XZ 中表现出明显的放缓。三种不同挥发分烟煤由低到高对 N_2 的吸附量分别为 0.455~0.633 mmol/g、0.219~0.253 mmol/g 和 0.372~0.494 mmol/g。由不同挥发分烟煤对 CO_2 和 N_2 两种分子的吸附量和等温吸附曲线可以看出,温度升高不利于煤吸附气体。

Table 3. Langmuir fitting parameters for adsorption isotherms of coal LL at different temperatures

表 3. 煤 LL 在不同温度下吸附等温线的 Langmuir 拟合参数

气体	温度 K	a (mmol/g)	b (MPa^{-1})	R^2
CO_2	303.15 K	1.61	3.20	0.97422
	313.15 K	1.57	2.72	0.96424
	323.15 K	1.48	2.03	0.94881
N_2	303.15 K	0.70	0.72	0.89168
	313.15 K	0.66	0.59	0.95844
	323.15K	0.62	0.50	0.95082

Table 4. Langmuir fitting parameters for adsorption isotherms of coal PDS-1 at different temperatures

表 4. 煤 PDS-1 在不同温度下吸附等温线的 Langmuir 拟合参数

气体	温度 K	a (mmol/g)	b (MPa^{-1})	R^2
CO_2	303.15 K	1.02	2.60	0.93366
	313.15 K	0.96	2.39	0.95996
	323.15 K	0.82	2.12	0.93664
N_2	303.15 K	0.51	0.30	0.98741
	313.15 K	0.50	0.26	0.98747
	323.15 K	0.47	0.19	0.99097

Table 5. Langmuir fitting parameters for adsorption isotherms of coal XZ at different temperatures
表 5. 煤 XZ 在不同温度下吸附等温线的 Langmuir 拟合参数

气体	温度 K	a (mmol/g)	b (MPa ⁻¹)	R ²
CO ₂	303.15 K	0.81	5.26	0.95563
	313.15 K	0.78	4.28	0.96383
	323.15 K	0.76	2.89	0.97636
N ₂	303.15 K	0.47	1.76	0.91439
	313.15 K	0.45	1.50	0.95485
	323.15 K	0.43	1.11	0.94326

不同挥发分烟煤在不同温度下的吸附等温线的 Langmuir 拟合参数分别如表 3、表 4 和表 5 所示。其中, 参数 a 和 b 来自等式(1), a 是压力趋于无穷大时的极限吸附容量, 而 b 是吸附常数, 与吸附能量有关。Langmuir 拟合度较高, 说明吸附量数据是合理的。根据上表可知, 在煤 LL 中 CO₂ 的 a 值范围为 1.48~1.61 mmol/g, N₂ 的 a 值范围为 2.03~3.20 mmol/g; 在煤 PDS-1 中 CO₂ 的 a 值范围为 0.82~1.02 mmol/g, N₂ 的 a 值范围为 0.47~0.51 mmol/g; 在煤 XZ 中 CO₂ 的 a 值范围为 0.76~0.81 mmol/g, N₂ 的 a 值范围为 0.43~0.47 mmol/g。比较表 3、表 4 和表 5 发现, 不同挥发分烟煤由低到高中 CO₂ 的 a 值依次减小, 表明 CO₂ 在低挥发分烟煤中气体的极限吸附量要更大, 并随着挥发分程度升高而降低; 同样, N₂ 也存在相同的趋势, 伴随着烟煤的挥发分程度升高, N₂ 的极限吸附量逐渐降低。该结果与图 5 所示的吸附量结果一致。根据表 2 所示, 临界温度越高, 吸附容量越大。吸附容量的大小顺序为 CO₂ > N₂。由于 CO₂ 的临界温度大于 N₂ 的临界温度, 因此 CO₂ 相较于 N₂ 可以更快地达到极限吸附容量。

3.3. 等量吸附热

CO₂ 与 N₂ 分别在不同挥发分烟煤中的等量吸附热如图 8 所示。可以发现, 在 303.15 K~323.15 K 的温度区间 CO₂ 与 N₂ 两种气体的等量吸附热并没有明显变化, 说明温度由 303.15 K 升高至 323.15 K 的过程中不会影响煤吸附两种气体; 同时, 压力在 0~5 MPa 时气体的吸附热也没有明显变化。从图 8 可以看出, 在相同的温度下, 两种气体在不同挥发分烟煤的吸附热大小均为 CO₂ > N₂。说明烟煤的挥发分程度不会有影响烟煤吸附气体的能力, 三种不同挥发分的烟煤对于 CO₂ 和 N₂ 两种气体的吸附能力相同。

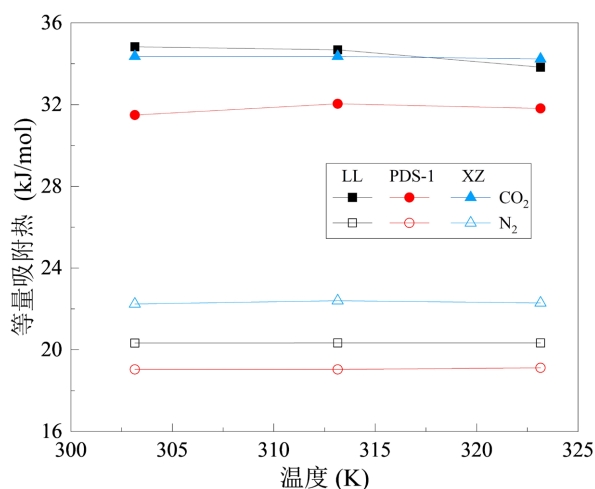


Figure 8. Relationship between the equal adsorption heat and temperature
图 8. 等量吸附热与温度的关系

气体的吸附能力可以用吸附热进行衡量。物理吸附的吸附热一般为几百到几千焦耳每摩尔，最大不超过 40 kJ/mol。化学吸附过程的吸附热比物理吸附过程的大，一般为 84~417 kJ/mol。如表 6 所示，CO₂ 的吸附热在 31.8~34.4 kJ/mol，N₂ 的吸附热在 19.1~22.3 kJ/mol。两种气体的吸附热都小于 40 kJ/mol。表明两种气体在不同挥发分烟煤中的吸附为物理吸附。

Table 6. Adsorption heat data
表 6. 吸附热数据

平均吸附热(kJ/mol)	LL	PDS-1	XZ
CO ₂	34.4	31.8	34.3
N ₂	20.3	19.1	22.3

3.4. 扩散系数

图 9 中(a)、(b)和(c)分别为 CO₂ 和 N₂ 气体在不同挥发分烟煤中的 MSD 曲线及线性拟合曲线。其中，根据拟合线性方程分别得到 CO₂ 在 LL、PDS-1 和 XZ 中的斜率为 0.0195、0.0530 和 0.0140；N₂ 在无烟煤和烟煤的斜率为 0.0476、0.0924 和 0.0792。将其分别带入到式(4)中，得出 CO₂ 在不同挥发分烟煤的扩散系数分别为 $3.256 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ 、 $8.840 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ 和 $2.333 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ ；N₂ 在不同挥发分煤的扩散系数分别为 $7.935 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ 、 $1.541 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ 和 $1.321 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ 。通过比较发现，在不同挥发分烟煤中，两种气体的扩散系数都有所变化，这是由于在不同挥发分烟煤中的孔隙结构与含氧官能团不同所引起的；在同一种煤中，CO₂ 的扩散系数均小于 N₂ 的扩散系数，表明煤吸附两种气体后 N₂ 的扩散能力相较于 O₂ 更强，即 CO₂ 有更强的吸附能力。这是由于两种气体均为非极性分子，但 CO₂ 的偶极矩更大，与含氧官能团产生相互作用更强，阻碍了 CO₂ 的扩散。

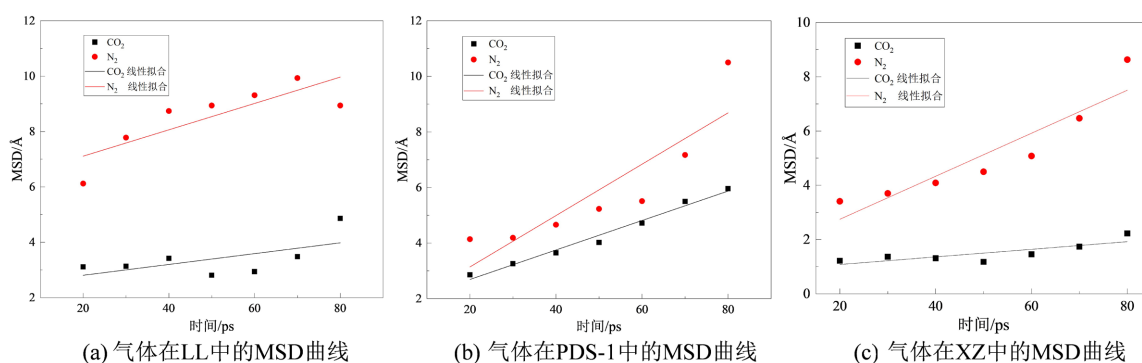


Figure 9. MSD curves of CO₂ and N₂
图 9. CO₂ 与 N₂ 的 MSD 曲线

4. 结论

1) 在三种不同挥发分烟煤分子模型中，两种气体的吸附量大小顺序为 CO₂ > N₂。随着压力的增加，两种气体逐渐达到极限吸附量，吸附速率也随之减小。低挥发分烟煤上的气体比高挥发分烟煤更容易达到极限吸附容量。在同一种煤中，达到吸附极限量由易到难的顺序为 CO₂ > N₂。

2) CO₂ 和 N₂ 的吸附热分别为 31.8~34.4 kJ/mol 和 19.1~22.3 kJ/mol，两种气体的吸附热均小于 40 kJ/mol，属于物理吸附。并且在 303.15 K~323.15 K 温度下，两种气体吸附热变化不明显，对于温度、压强并不敏感。

3) CO₂ 在不同挥发分烟煤的扩散系数为 $2.333 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s} \sim 8.840 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$; N₂ 在不同挥发分烟煤的扩散系数为 $7.935^{-11} \text{ m}^2/\text{s} \sim 1.541 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ 。在不同挥发分烟煤分子中, 气体扩散能力的大小顺序为 N₂ > CO₂, 证明 CO₂ 有更强的吸附能力。

项目基金

国家自然科学基金资助项目(52074122)。

参考文献

- [1] Zhang, Y.-H., Lai, Y.-K., Huang, Z.-A. and Gao, Y.K. (2011) Study on Small Simulation Device of Coal Spontaneous Combustion Process. *Procedia Engineering*, **26**, 922-927. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2011.11.2257>
- [2] 郭立稳, 王月红, 张九零, 等. 低阶烟煤对 CO 的吸附特性及影响因素[J]. 中国矿业大学学报, 2008, 37(6): 763-768.
- [3] 文虎, 唐瑞, 张铎, 等. CO 在烟煤中吸附与扩散的分子模拟研究[J]. 中国安全生产科学技术, 2022, 18(7): 95-101.
- [4] 秦兴林. 水分影响下的烟煤瓦斯吸附特性[J]. 煤矿开采, 2018, 23(1): 104-107.
- [5] 王吉军, 张超, 张银中. 不同变质程度煤不同温度下吸附性能实验研究[J]. 华北科技学院学报, 2019, 16(4): 30-35.
- [6] 张晓光. 褐煤氧化对 CO₂ 和 CH₄ 竞争吸附行为影响的模拟研究[J]. 能源化工, 2020, 41(3): 38-41.
- [7] 李树刚, 白杨, 林海飞, 等. CH₄, CO₂ 和 N₂ 多组分气体在煤分子中吸附热力学特性的分子模拟[J]. 煤炭学报, 2018, 43(9): 2476-2483.
- [8] 孙溶. 典型烟煤的分子结构及模型模拟的初步研究[D]: [硕士学位论文]. 北京: 中国科学院大学, 2017.
- [9] Zhu, H., Wang, W., Huo, Y., *et al.* (2020) Molecular Simulation Study on Adsorption and Diffusion Behaviors of CO₂/N₂ in Lignite. *ACS Omega*, **5**, 29416-29426. <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c04352>
- [10] 李庆杰, 杨圃, 张辰源, 等. PR 方程与 SRK 方程在计算水露点中的比较与应用[J]. 当代化工, 2014, 43(10): 2186-2187+2190.
- [11] 王卫京, 詹世平, 崔洪光. 用 PR 方程直接模拟固体在超临界 CO₂ 中溶解度[J]. 大连大学学报, 2016, 37(3): 44-46.
- [12] 辜敏, 陈昌国, 鲜学福. Langmuir 方程在变压吸附过程中的应用[J]. 天然气化工, 2002, 27(1): 29-32.
- [13] 辜敏, 鲜学福. Langmuir 吸附方程的应用[J]. 广东化工, 2002, 29(2): 42-44.
- [14] 程敢, 李玉龙, 张梦妮, 等. CO₂/N₂/O₂ 及 H₂O 分子在褐煤中的吸附行为模拟[J]. 煤炭学报, 2021, 46(S2): 960-969.