

1 绪论

1.1 中国炼焦煤资源利用现状

1.2 煤大分子结构 的研究 及分子模拟

1.3 ~~煤大分子结构~~ 煤热解过程的 Rea^{XFF} 反应动力学模拟

1.4 本论文的研究内容及思路

东曲1号

技术路线图

图 1-1

2. 样品的采集制备及测试

2.1 样品的采集及制备

2.2 样品的测试方法

2.2.1 - -

3 ——— 及大分子 - - -

3. 东曲2号镜煤结构表征

3.1 ———

3.2 ———

3.1 东曲2号镜煤大分子结构模型的构建

4.1 - - -

4.2 计算单元 - - -

4.3 ——— 大分子模型

4. 东曲2号镜煤大分子结构模型的分子力学、动力学及量子化学计算

5. 东曲2号气态煤热解过程 ReaxFF 反应力场模拟

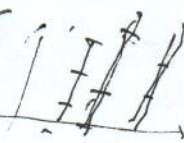
5.1 ~~模拟详细情况~~
模拟设置

5.2. ~~热解过程~~ 热解过程同等模拟

5.2.1 热解过程 $1400-1600 \dots -3000K$ 不同温度条件下

5.2.2

不同温度条件下 主要气态产物生成



5.3. 不同开温速率 条件下 热解过程 模拟

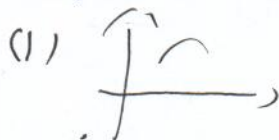
CH₄ H₂ CO CO₂ H₂O
C₁ C₂ C₃ C₄ C₆H₆ ✓

5.3.1 热解产物特征

5.3.2 主要气态产物生成

600

结论



对比试验 TGA MS 条件

(2) 生成机制

CH₄ H₂ C₆H₆

Tab. 3.

