DQ2V原煤(镜煤)

**热解模拟**

模拟步骤：模拟采用Velocity Verlet+Berendsen系综，在边长4nm·4nm·4nm 的lattice中随机放入5个优化过后的东曲2号煤大分子结构模型，对此体系进行能量最低化模拟，模拟热解分两大步骤，第一步骤对系统进行温度为300K的保温操作，在常压下模拟反应时间为10ps，时间步长为0.1fs，反应力场为HE.ff；第一步骤设置在常压下模拟升温速率分别为5K/ps，50K/ps，500K/ps，模拟步数为1000000steps以保证各个升温速率下的系统的充分反应时间为250ps，系统从1400K升温至3000K，时间步长为0.25fs，反应力场为HE.ff。

升温速率为**500K/ps**

**动力学热解模拟前后的能量(kcal /mol)对比(500k/ps)**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **模拟状态** | **Epotential** | **Ebond** | **Etors** | **Evdw** |
| **Start** | -214377.86 | -295965.09 | 2541.29 | 80804.99 |
| **End** | -100111.35 | -139546.80 | 7736.23 | 40563.22 |



势能随时间变化曲线



键能随时间变化曲线



扭转角能随时间变化曲线



范德华力能随时间变化曲线



总分子数随时间变化曲线



甲烷分子数数随时间变化曲线

氢气分子数数随时间变化曲线



一氧化碳分子数数随时间变化曲线

升温速率为**50K/ps**

**动力学热解模拟前后的能量(kcal /mol)对比(50k/ps)**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **模拟状态** | **Epotential** | **Ebond** | **Etors** | **Evdw** |
| **Start** | -214377.86 | -295965.09 | 2541.29 | 80804.99 |
| **End** | -120141.35 | -159346.80 | 600.95 | 42763.22 |

势能随时间变化曲线



键能随时间变化曲线

扭转角能随时间变化曲线

范德华力能随时间变化曲线

总分子数随时间变化曲线



甲烷分子数随时间变化曲线

氢气分子数随时间变化曲线



一氧化碳分子数随时间变化曲线

升温速率为**5K/ps**

**动力学热解模拟前后的能量(kcal /mol)对比(5k/ps)**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **模拟状态** | **Epotential** | **Ebond** | **Etors** | **Evdw** |
| **Start** | -214377.86 | -295965.09 | 2541.29 | 80804.99 |
| **End** | -130111.35 | -149746.80 | 660.95 | 7736.23 |



势能随时间变化曲线



键能随时间变化曲线



扭转角能随时间变化曲线



范德华力能随时间变化曲线



总分子数随时间变化曲线



甲烷分子数随时间变化曲线



氢气分子数随时间变化曲线



一氧化碳分子数随时间变化曲线