**分 类 号 密 级**

太原理工大学

硕 士 学 位 论 文

东曲2号煤大分子结构模型及其

题 目热反应性研究

**Macromlecular Structural Model and**

**Thermal Reactivity Study of**

英文并列题目 **Dongqu No.2 Coal**

研究生姓名： 李耀高

学 号： 2016520365

专 业： 地质工程

研究方向： 煤分子地球化学

导师姓名： 王传格

职 称： 讲师

学位授予单位：太原理工大学

论文提交日期 2019/05

地 址： 山西·太原

太 原 理 工 大 学

东曲2号煤大分子结构模型及其热反应性研究

**摘 要**

炼焦煤为当今我国乃至全世界能源体系结构中的重要组成部分，伴随着我国国民生产总值的提高，科技、经济等多方面的长足发展，促使科研工作者对煤的高效转化与清洁方面的研究更加深入，因此对深入了解煤的热反应机理提出了更高的要求。

**炼焦煤资源在我国国民经济中占有重要地位，被喻为钢铁工业的“粮食”，虽然我国煤炭资源丰富，但是优质的炼焦煤资源则相对匮乏，因此如何更加高效的利用炼焦煤资源、提高焦炭质量成为一个重要的研究课题。炼焦煤的结焦性和粘结性与其内部大分子结构特征密切相关，要提高炼焦煤的结焦性能，必须深入了解其分子组成和内部结构特征。基于计算机辅助设计技术建立煤的三维大分子结构模型是研究煤结构的一种重要途径。**

**（1）本文使用CS2-NMP混合溶剂对屯兰2号原煤进行了抽提萃取实验,获得了沥青质和残煤两种组分，通过工业和元素测试初步确定了模型中各元素原子个数比，XPS测试确定了样品中氧元素、氮元素的存在形式，根据13C核磁共振测试得到沥青质与残煤XBP分别为0.28、0.336。综合分析以上测试结果确定了两种组分中芳香结构单元与脂肪结构的类型、数量及官能团的存在形式。利用ACD/Chem Sketch软件绘制了初始平面结构模型，通过调整结构单元之间的连接方式，获得了与13CNMR实验图谱吻合程度较好的最终结构模型。**

**（2）沥青质和残煤模型分子式分别为C180H159O6N3和C201H175O6N3，沥青质模型中芳香结构以萘环为主，含有少量的苯环、蒽环和四元芳环，氧原子的存在形式为酚羟基、醚氧键和羰基，包含一个吡啶环和两个吡咯环，脂肪结构以环烷烃、甲基、亚甲基等形式存在；残煤模型芳香结构以菲环和四元芳环为主，并含有少量苯环和萘环，数量分别为1、2，含氧官能团包含一个酚羟基和五个羰基，吡啶环和吡咯环的数目分别是1、2，脂肪结构以环烷烃为主，并含有少量甲基侧链。**

**（3）采用分子力学和分子动力学方法对两种模型进行结构优化，得到了能量最小几何构型，优化后范德华能降低最多，其次是键伸缩能，键角能和键扭转能均出现增加，芳香结构出现弯曲，桥键及脂肪烃发生了很大扭转，残煤稳定构型相较沥青质更加规则、有序。密度模拟结果表明残煤和沥青质分子模型的密度分别为1.34g/cm3和1.25 g/cm3。**

**（4）采用VAMP模块计算了模型微观结构参数键长、键级和电荷布居数，计算结果表明脂肪烃C-C键长较长，键级较小，并带有数目较多的负电荷，化学活性较高；芳香结构中碳碳键键长较短，键级较大因此化学稳定性很高。与苯环相连的脂肪烃化学稳定性均有所增加，与氧原子相连的脂肪碳原子带有数目较多的负电荷，且C-C键键长变大，反应性增强。**

**（5）芳香层片排列有序度为残煤+残煤>沥青质+残煤>沥青质+沥青质，经测量其芳香层间距d002平均值分别为3.61 Å、3.79 Å、4.1 Å，与XRD测试结果基本一致。根据实验所得的抽提率按照3:2的残煤和沥青质比例构建了接近原煤真实构型的屯兰2号煤聚集态结构模型，范德华能和键伸缩能是聚集态模型中最主要能量，其次是键角能和键扭转能，氢键能含量最小。聚集态结构内部分子排列比较杂乱紧凑，边缘部分结构排列比较疏松，芳香层片不仅有相互平行排列方式，边缘区域还出现了垂直构型。屯兰2号煤聚集态模型的模拟密度为1.32 g/cm3略小于残煤模型。**

**本论文利用高性能计算方法将ReaxFF MD应用于大规模煤模型的热解模拟，可获得热解产物全景式的演化趋势规律。借助于VARxMD独特的化学反应分析能力，还获得与之对应的反应机理，这些对煤热解反应机理的认识是实验或其他计算方法难以获得的。本论文的工作表明ReaxFF MD结合GPU巧性能计算的模拟新方法为从分子层次上系统地认识复杂煤热解过程提供了新的途径。该方法具有通用性，可扩展到更多领域的应用中。**

**关键词：屯兰2号镜煤，残煤，沥青质，聚集态结构模型，分子模拟**

MACROMLECULAR STRUCTURAL MODEL AND

THERMAL REACTIVITY STUDY OF

DONGQU No.2 COAL

**ABSTRACT**