

神府东胜煤镜质组和惰质组的热化学反应差异

李军, 冯杰, 李文英

太原理工大学, 煤科学与技术教育部和山西省重点实验室, 太原 030024

摘要:

神府东胜(SD)煤的液化是我国能源多元化战略的重要环节, 然而由于我国西部煤种中的显微组分在液化过程中表现出的差异性, 传统煤化学知识无法解释神府东胜煤惰质组(SDI)和镜质组(SDV)在液化过程中表现出有别于我国东部煤对应煤种的性质; 此外, 由于煤结构基础理论上的局限, 镜质组和惰质组的热化学差异无法由常规热分析得到解释. 为了获取神府东胜煤镜质组和惰质组在液化过程中的差异性, 在建立两种煤岩显微组分平均分子模型的基础上, 应用分子力学、分子动力学和量子化学对所构建分子结构模型的成键特征及其在热化学环境中的变化做了定性分析, 模拟了由不同显微组分生成气、油和焦的过程. 结果表明, 在煤受热初始裂解释放CO₂的过程中, SDI的活性高于SDV, 但这一过程对SDV和SDI的大分子骨架结构基本无影响. 在进一步的裂解中, 根据键级分析发现, SDV的化学键发生断裂的数目远大于SDI, 当SDV已基本裂解成小分子化合物时, SDI还需要进一步裂解才能形成小分子化合物, 而且SDV和SDI的裂解产物存在着差别, SDV以脂肪烃和单环芳烃为主, SDI以双环芳烃为主. 把量子化学计算推测的裂解小分子碎片与热重-质谱(TG-MS)实测结果进行对比, 证明了理论上的裂解过程与实验结果相吻合.

关键词: 神府东胜煤岩有机显微组分 热解 量子化学 热重-质谱

收稿日期 2009-01-23 修回日期 2009-03-11 网络版发布日期 2009-04-16

通讯作者: 李文英 Email: ying@tyut.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 王树军; 罗代兵; 阮文娟; 朱志昂; 马毅. 手性锌卟啉的非线性光学性质及对咪唑类客体分子识别的构象研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(08): 834-839
2. 张静 杜敏 于会华 王宁. 分子结构对咪唑啉缓蚀剂膜在Q235钢表面生长和衰减规律的影响[J]. 物理化学学报, 2009, 25(03): 525-531
3. 莫依; 黎乐民. 对体系局部进行高精度量子化学计算的研究[J]. 物理化学学报, 2002, 18(08): 716-720
4. 戴长虹; 刘素兰; 张显鹏. 碳化硅纳米晶须的微波合成[J]. 物理化学学报, 1997, 13(04): 380-384
5. 刘够生; 宋兴福; 于建国; 钱旭红. 气相中H₂O₂与N₂O反应机理的探讨[J]. 物理化学学报, 2001, 17(06): 491-495
6. 翟高红; 王惠; 杨海峰; 冉新权; 王育彬; 文振翼. 环己烷的热裂解机理[J]. 物理化学学报, 2001, 17(04): 348-355
7. 贡雪东; 肖鹤鸣. 多元硝酸酯热解反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(01): 33-38
8. 林梦海; 刘朝阳; 郑兰荪. 激光等离子体反应生成的AgP⁺_n、Au_mP⁺_n的结构分析[J]. 物理化学学报, 1995, 11(03): 266-269
9. 殷元骐; 李文; 汪汉卿. 簇合物Co₆(μ₃-E)₈(CO)₆(E: -S, -Se)的电子结构及相关性能探讨[J]. 物理化学学报, 1995, 11(02): 151-156
10. 张绍文; 傅孝愿. H₂NCO热解为CO₂和HNCNH的反应机理理论研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 1004-1008
11. 郑瑜; 谢伟文; 张琳娜; 傅桂香; 俞璐; 朱自莹. Na₃Fe(C₂O₄)₃·5H₂O的热解过程和FAB-MS断裂规律[J]. 物理化学学报, 1994, 10(09): 774-778
12. 应立明; 韩德刚; 杨惠星. 异丁烷高温热解反应动力学和机理[J]. 物理化学学报, 1994, 10(03): 223-229
13. 连洪寿; 丁晓琴; 陈常英; 李玉林; 陈翼胜; 罗宇; 徐筱杰. 某些海生毒素(TTX、STX)对钠离子通道的作用研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(02): 141-144
14. 冀永强; 傅孝愿. 2-硝基丙烯热解反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(01): 22-25
15. 方维海; 方德彩; 刘若庄. 丙烯酸气相热解机理的理论探讨[J]. 物理化学学报, 1993, 9(05): 630-634
16. 孙政; 郑世钧; 孟令鹏; 乔春华; 王殿勋. 几种硫醚化合物的紫外光电子能谱及量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(01): 78-83
17. 刘万强; 王学业; 李新芳; 龙清平; 文小红; 李建军. 聚丙烯酸酯类T_g的量子化学-神经网络研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(06): 596-601
18. 杨建; 丘泰; 沈春英. 一种新BCN化合物先驱体的合成及其表征[J]. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1373-1377
19. 张振江; 路建美; 周为群; 祁秀秀. 聚酰胺酸及其接枝衍生物的三阶非线性光学性能研究[J]. 物理化学学报,

扩展功能

本文信息

PDF(2203KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 神府东胜煤岩有机显微组分

▶ 热解

▶ 量子化学

▶ 热重-质谱

本文作者相关文章

▶ 李军

▶ 冯杰

▶ 李文英

- 2005,21(07): 711-715
20. 徐昕;吕鑫;王南钦;张乾二.金属氧化物表面化学吸附和反应的量子化学簇模型方法研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 1045-1054
21. 张乃东;李宁;彭永臻.涂膏热解法制备钛基Sn、Sb氧化物电极[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1154-1158
22. 冯东东;庄启昕;吴平平;韩哲文.PBO聚合物紫外吸收光谱中环境因素影响的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 16-21
23. 徐芬;孙立贤;谭志诚;梁建国;周丹红;邱友莹;兰孝征;张涛.阿司匹林的热解机理及热动力学研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(01): 50-54
24. 钱丽萍;邓文礼.正十八烷醇在HOPG上形成自组装膜的吸附特性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 443-447
25. 耿春宇;丁丽颖;韩清珍;温浩.气体分子对甲烷水合物稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 595-600
26. 李巍;荣华;吴新民;陈中元.苏氨酸对甲苯磺酸盐及其酯化物的微波合成、表征及量化计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 868-872
27. 张军;赵卫民;郭文跃;王勇;李中谱.苯并咪唑类缓蚀剂缓蚀性能的理论评价[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1239-1244
28. 李章朋 邢永恒 张元红 白凤英 曾小庆 葛茂发.蝎型钒氧苯甲酸配合物的合成、结构及量化计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 741-746
29. 吴文娟;赖榕;郑康成;云逢存.抗癌性咪唑啉型生物衍生物的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
30. 陈媛梅;黄元河;刘若庄.一维C₃₆聚合物的C₃₆分子间的电-声相互作用 [J]. 物理化学学报, 2001,17(03): 196-200
31. 陈雷;邓风;叶朝辉.铝在MCM-22分子筛骨架上分布的²⁷Al MQ MAS NMR研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(09): 805-809
32. 贡雪东;肖鹤鸣.一元硝酸酯热解反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(01): 36-41
33. 杨兵;刘晓冬;许海;郑岩;路萍;于景生;马於光;封继康.聚苯类共轭聚合物的重复单元连接方式对禁带宽度的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 962-966
34. 余家康;董俊华;曹楚南;林海潮.硫脲及其衍生物的SERS和量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(09): 856-860
35. 刘瑕 郑玉贵.流动条件下两种不同亲水基团咪唑啉型缓蚀剂的缓蚀性能[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 713-718
36. 曾凡桂 贾建波.霍林河褐煤热解甲烷生成反应类型及动力学的热重-质谱实验与量子化学计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1117-1124
37. 赵健伟 刘洪梅 倪文彬 郭彦 尹星.从分子水平研究电子传递[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1472-1480
38. 钱保华;马卫兴;许兴友;陆路德;杨绪杰;汪信.一维链状配位聚合物[Zn(acac)₂(4,4'-bipy)]_n的合成、表征及量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1650-1654
39. 王罗新;刘勇;虞新林;李松年;王晓工.H⁺、NH₄⁺对HMX的N—NO₂键解离能的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1560-1564
40. 杨作银;周宏伟;张敬畅;曹维良.Mg-Al类水滑石层板结构中Al/Mg比与稳定性的关系[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 795-800
41. 闫共芹;官建国;王维.热解-还原法制备单分散Fe₃O₄亚微空心球[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1958-1962
42. 刘福国;杜敏;张静;仇萌.咪唑啉衍生物缓蚀剂对碳钢在CO₂盐水中的缓蚀机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 138-142
43. 来蔚鹏;薛永强;廉鹏;葛忠学;王伯周;张志忠.粒度对纳米体系化学反应热力学性质的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 508-512
44. 杨刚;龙翔云;杨高文;曾小君.二苯并四氮杂[14]轮烯金属配合物电子结构和性质 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 100-105
45. 夏树伟;隋卫平;陈国华;夏少武.羧甲基壳聚糖衍生物及其振动光谱的理论研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 248-252
46. 张教强;朱春华;贡雪东;肖鹤鸣.1,3,3-三硝基氮杂环丁烷及其衍生物的热解机理的AM1研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(07): 612-616
47. 陈海翔;刘乃安;范维澄.基于差示扫描量热技术的生物质热解两步连续反应模型研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 786-790
48. 赵峰鸣;马淳安;褚有群;徐颖华.氧在Ni-MnO₂电极上的电催化还原[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 716-720
49. 孙命;李维忠;郁铭;王瑾玲;缪方明;I Basnak;T A Hamor;R T Walker.取代脱氧腺苷的量子化学计算及分子对接[J]. 物理化学学报, 1999,15(09): 834-837
50. 侯廷军;李有勇;何元康;陈慧英;徐俊杰.取代基对苯腈类低聚物几何及电子特征的影响[J]. 物理化学学报, 2000,16(10): 886-891
51. 傅旭春;俞庆森;梁文权.氢键碱度的神经网络法计算[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 844-849
52. 缪方明;樊志;周卫红;齐李宁;李爱秀;刘小兰.三(2-苯并咪唑亚甲基)胺合锰的结构和量化计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(09): 775-782
53. 丁涪江;赵可清.环聚炔苯和环聚炔吡啶组成的盘状液晶中的电荷转移[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 764-767

54. 吴立明;黄尊行;李俊箴;陈红;章永凡;周立新.[Pd(en)₂Pd(en)₂X₂]⁴⁺_n(X=Cl,Br,I)链的畸变研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 481-487
55. 陈文凯;许娇;章永凡;周立新;李俊箴.2-羟基吡啶质子转移过程的理论研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(09): 802-807
56. 王殿勋;郑世钧;徐广智.哌嗪二酮的气相HeI光电子能谱及其量化计算[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 484-488
57. 洪三国.取代基对 α -氨基乙腈热解反应影响的研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 305-310
58. 卓济苍;胡加平;王夔.胆红素与胆汁酸盐作用时的构象变化[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 332-338
59. 刘洪霖;曹益林;陈念贻.铝酸钠溶液的紫外吸收峰[J]. 物理化学学报, 1992,8(04): 441-444
60. 洪三国;傅孝愿.硝基胍热解反应途径的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(01): 30-35
61. 徐森;傅孝愿.乙基乙酰胺热解反应机理的MO研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(02): 129-135
62. 赵伟涛;陈海翔;周建军;刘乃安.森林泥炭的热解特性及热解动力学[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
-