

## 研究论文

## 煤显微组分分子结构模型的量子化学研究

孙庆雷<sup>1 2</sup> 李文<sup>2</sup> 陈皓侃<sup>2</sup> 李保庆<sup>2</sup>

(1. 山东省科学院分析测试中心, 山东 济南 250014; 2. 中国科学院山西煤炭化学研究所煤转化国家重点实验室, 山西 太原 030001)

**摘要** 采用分子力学和半经验量子化学方法, 研究了神木煤显微组分的分子结构模型, 比较了镜质组和惰质组分子模型的能量构成、不同类型键的键长和键裂解能。研究表明, 扭转能和范德华能是分子中的主要作用力, 取代基对体系能量有明显影响, 烷基取代基使体系能量增加, 而苯基取代基使体系能量降低; 脂肪C—C键长比芳香C—C键长长, 说明脂肪C—C在受热过程中比芳香C—C更容易断裂分解。对各键裂解能的计算结果表明, Car—Cal键的裂解能高于Cal—Cal, Car—O醚键的裂解能高于Cal—O醚键。而惰质组结构模型中除C—O醚键外, 各键的裂解能均高于镜质组, 说明惰质组结构模型比镜质组有较高的热稳定性。

**关键词** [煤](#); [显微组分](#); [分子力学](#); [半经验计算](#); [量子化学](#)

收稿日期 2003-12-25 修回日期 2004-3-6

通讯作者

DOI

分类号 TQ530

