

---

# 研究揭示低阶煤和聚乙烯共热解机理

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/23931.html>

**本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！**

研究揭示低阶煤和聚乙烯共热解机理。

我国低阶煤资源丰富，但普遍存在焦油重质组分高，油尘分离困难等问题。相对低阶煤，废塑料富氢，且两者热失重温度区间重叠，存在一定协同效应。将低阶煤与塑料进行共热解不仅可以解决环境危机，还可以实现低阶煤的清洁利用。目前，低阶煤和塑料共热解微观反应机理和相互作用机制尚不明确，利用基于高性能计算和化学信息学反应分析的反应力场分子动力学模拟方法，可实现对大规模塑煤共热模型的直接模拟，系统揭示煤与塑料的共热机制和整体反应性。

近日，中国科学院过程工程研究所郑默副研究员、山西煤炭化学研究所白进研究员团队构建了原子数为30,000~50,000，分子量约为250,000的煤-高密度聚乙烯混合模型。该模型同时满足煤结构的多样性和塑料高聚性的要求，是目前已知最大的塑煤模型之一。为了探究低阶煤与高密度聚乙烯的综合共热解行为，课题组采用反应分子动力学模拟与实验相结合的方法，考察了协同作用对产物分布、主要产物演化和焦炭前驱体结构的影响。原位热解飞行时间质谱实验发现低阶煤与高密度聚乙烯的协同作用是通过产生交叉反应产物来体现的，高密度聚乙烯会显著降低焦油中单环芳烃和正构烷基单酚的产率；而反应分子动力学模拟结果表明高密度聚乙烯会促进焦油产率、抑制焦化过程。多项实验共同证实了共热解焦结构比煤焦具有更高的有序度。

反应分子动力学模拟结果与实验结果相辅相成，该研究为全面了解煤与高密度聚乙烯共热解过程中产物分布及化学结构动态特征提供了丰富的理论信息，以补充对煤与塑料之间相互作用的理解。这一研究还可推广到相关固体燃料的其他共热解应用。

两项成果分别以结合原位热解飞行时间质谱实验和反应分子动力学模拟研究煤和聚乙烯的共热解行为和利用反应分子动力学模拟和实验研究煤和高密度聚乙烯共热解过程中炭前驱体的动态结构变化在能源化工领域期刊《燃料》《化学工程学报》上发表。博士生冯炜为文章第一作者，白进研究员与郑默副研究员为共同通讯作者。

该研究得到了国家自然科学基金面上项目和山西省重点研发项目的资助。(来源：中国科学报 李清波)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.125802>

<https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.145100>

作者：郑默等 来源：《燃料》

---

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发