

石炭の熱分解過程に対する DC-DFTB-MD シミュレーション

(早大院先進理工¹・早大理工総研²・京大 ESICB³) ○中村 崇玖¹・西村 好史²・中井 浩巳¹⁻³

DC-DFTB-MD simulation of pyrolysis process of coal (¹Graduate School of Advanced Science and Engineering, Waseda University, ²Waseda Research Institute for Science and Engineering, Waseda University, ³ESICB, Kyoto University) ○ Takahisa Nakamura,¹ Yoshifumi Nishimura,² Hiromi Nakai¹⁻³

Coal pyrolysis is a process that involves a large number of chemical bond dissociations and formations. In order to understand complex chemical reactions during coal pyrolysis process, we have performed divide-and-conquer density-functional tight-binding molecular dynamics (DC-DFTB-MD) simulation, which was developed in our group, using a large coal model. The elevation of temperature resulted in an increase of gas and light tar.

Keywords : coal; pyrolysis; divide-and-conquer density-functional tight-binding method; molecular dynamics

石炭を加熱すると、まず熱分解が進行する。熱分解過程では無数の化学結合の解離と生成が起こり、ガスやタールが分離される。石炭の熱分解過程を理解するうえで、結合の生成と解離を記述できること、複雑な過程の動的過程を原子レベルで追跡できること、大規模な分子を扱えることが重要である。当研究室で開発された分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学 (DC-DFTB-MD) 法[1,2]は、これらの条件をすべて満たす計算手法である。本研究では、石炭の熱分解過程に対する DC-DFTB-MD シミュレーションを行った。具体的な手順を Fig. 1 に示す。まず、先行研究[3]で提案された石炭の分子構造に基づいて、モデル構造 (2148 原子) を構築した。300 K での平衡化後、300 – 3000 K まで昇温しながらシミュレーションを行い、熱分解過程におけるガス生成物およびタール生成物の収率を調査した (Fig. 2)。温度の上昇に伴い分解が進行し、ガスおよび小さなタールが増加した。一方、2000 K 以上では大きなタールが減少した。

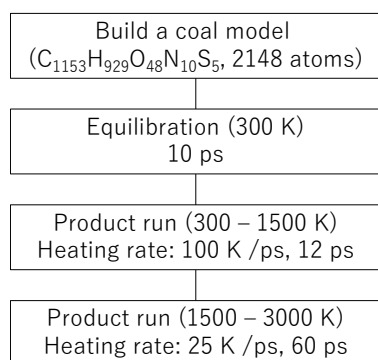


Fig.1. Flowchart for simulation.

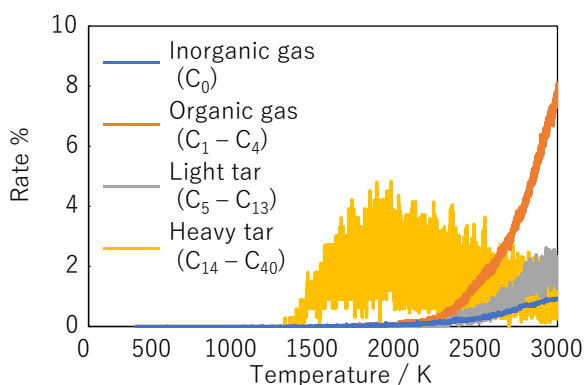


Fig. 2. Yields of gas and tar during coal pyrolysis.

- [1] H. Nishizawa, Y. Nishimura, M. Kobayashi, S. Irle, and H. Nakai, *J. Comput. Chem.*, **37**, 1983 (2016). [2] Y. Nishimura and H. Nakai, *J. Comput. Chem.*, **40**, 1538 (2019). [3] M. Zheng, X. Li, J. Liu, Z. Wang, X. Gong, L. Guo and W. Song, *Energy Fuels*, **28**, 522 (2014).