

УДК 622.02

ОЦЕНКА ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИИ РАЗРУШЕНИЯ УГЛЯ ДО ЧАСТИЦ ОПРЕДЕЛЕННОГО РАЗМЕРА

Николаев Ю. А., аспирант ФПа-222, II курс
Научный руководитель: Шепелева С.А., к.т.н., доцент
Кузбасский государственный технический университет
имени Т. Ф. Горбачева
г. Кемерово

Проведен эксперимент по изучению процесса разрушения образцов угля, отобранных с угольного пласта. В работе рассчитано число максимально возможных адсорбированных молекул бензола на поверхности частицы угля.

Применяемое нами устройство для разрушения угля изображено на рис 1.

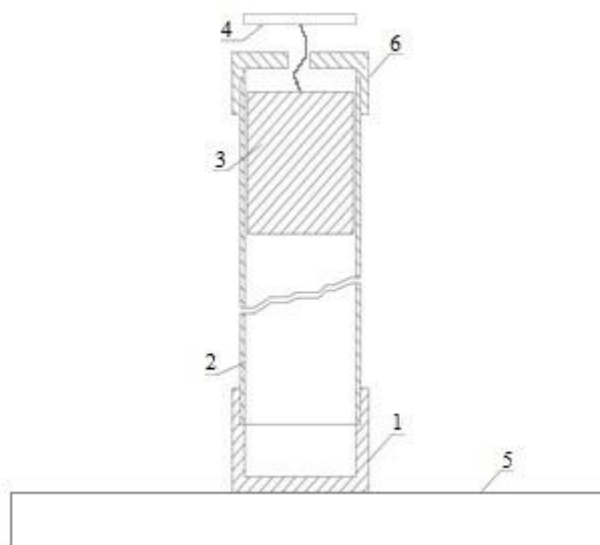


Рис.1. Устройство для разрушения угля [1]

1 – стакан; 2 – трубчатый копер, внутри которого свободно помещается гиря;

3 – гиря массой 2,4 кг; 4 – ручка, привязанная к гире шнуром

С помощью данного устройства осуществляли механическое воздействие на пробу угля, а по массе груза и высоте его падения рассчитывалась затраченная энергия на разрушение угля в зависимости от размеров частиц угля, определяемых с помощью ситового анализа. Отобранную пробу угля раскалывали молотком на твердом основании до получения кусков размером 20 – 40 мм [2].

Все углерод-углеродные связи в бензольном кольце имеют одинаковую длину, которая меньше, чем длина связей C-C в алканах, но больше, чем длина связей C=C в алканах. Это служит подтверждением тому, что углерод-углеродные связи бензола представляют собой гибрид между простыми и двойными связями.

C-C – длина связи 0,154 нм, Энергия связи 348 кДж/моль [3].

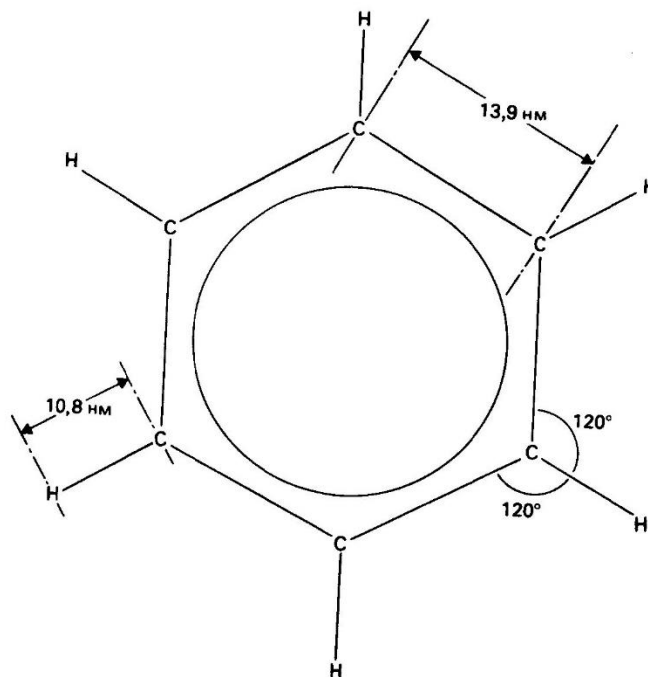


Рис. 2. Геометрическое строение молекулы бензола

Молекула бензола имеет плоскую структуру (рис. 2). Расстояние от атома углерода C до центра шестиугольника равняется 13,9 нм в силу симметрии бензольного кольца.

Введем обозначения: $L_{C-C} = 13,9$ нм – длина связи между двумя атомами углерода; $L_{C-H} = 10,8$ нм – длина связи между атомами углерода и водорода.

Представим молекулу бензола в виде диска радиуса R :

$$R = L_{C-C} + L_{C-H} = 13,9 + 10,8 = 24,7 \text{ нм}$$

Тогда площадь занимаемая молекулой будет равна:

$$S_M = \pi R^2 = 3,14 \cdot 24,7^2 \cdot 10^{-18} (\text{м}^2) = 1916 \cdot 10^{-18} (\text{м}^2) = 1,9 \cdot 10^{-15} (\text{м}^2)$$

Определим площадь пустого пространства между тремя молекулами бензола (S_1).

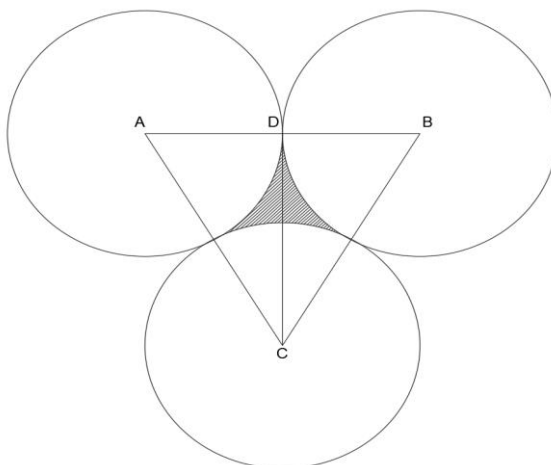


Рис. 3. Три молекулы бензола.

Площадь пустого пространства (рис. 3) между тремя молекулами бензола равна:

$$S_1 = S_{\Delta} - 3 \frac{\pi R^2}{6} = S_{\Delta} - 3 \frac{S}{6}$$

Учитывая, что $AD = DB = R$, $AC = 2R$, получим:

$$DC = \sqrt{AC^2 - AD^2} = \sqrt{4R^2 - R^2} = \sqrt{3R^2} = \sqrt{3}R.$$

Отсюда:

$$S_{\Delta} = \frac{AB \cdot DC}{2} = \frac{2R \cdot \sqrt{3}R}{2} = \sqrt{3}R^2 \approx 1,06 \cdot 10^{-11} (\text{см}^2).$$

Тогда площадь пустого пространства между тремя молекулами бензола равна:

$$S_1 = \left(1,06 - \frac{1,9}{2}\right) \cdot 10^{-11} \text{см}^2 = 0,11 \cdot 10^{-11} (\text{см}^2).$$

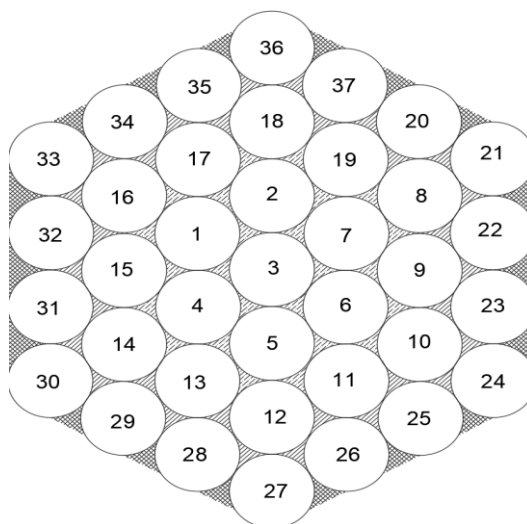


Рис. 4. Молекулы бензола на поверхности

Обозначим: p_m – число молекул на поверхности; p_b – число пустых мест внутри между молекул; p_c – число пустых мест снаружи (рис. 4).

Таблица 1

Данные для расчета площади молекул

Π_M	Π_B	Π_C	$\Pi_B + \Pi_C$
3	1	3	4
7	6	6	12
19	24	12	36
37	54	18	72

Из анализа рис 4 и приведенных в таблице 1 результатов следует, что число пустых мест при $\Pi_M \gg 1$ стремится к $2\Pi_M$. Поэтому среднее расстояние между молекулами бензола:

$$d = \frac{1}{n^{1/3}} = n^{-\frac{1}{3}} = \frac{1}{1,89} \cdot 10^{-7} (\text{см}) = 0,52 \cdot 10^{-7} (\text{см}) = 5,2 \cdot 10^{-8} (\text{см}).$$

Диаметр молекул бензола:

$$D = 2R = 49,4 (\text{нм}) = 49,4 \cdot 10^{-7} (\text{см}) = 4,94 \cdot 10^{-6} (\text{см}).$$

Как видим $D \gg d$.

С учетом данного геометрического фактора эффективная площадь молекул бензола будет равна:

$$S_{iM \text{ эф}} = S_{iM} + 28 = (1,9 + 0,22) \cdot 10^{-11} (\text{см}^2) = 2,12 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2.$$

Далее оценим максимально возможное число молекул бензола Π_C на поверхности угольной частицы радиусом $R_q = 1$ см.

Площадь сферической частицы угля равна:

$$S_{yg} = 4\pi R_q^2 = 4 \cdot 3,14 \cdot 0,01^2 = 0,00126 \text{ м}^2.$$

Отсюда число максимально возможных адсорбированных молекул бензола на поверхности угольной частицы будет равно:

$$N_M = \frac{S_{yg}}{S_{M \text{ эф}}} = \frac{0,00126}{2,12 \cdot 10^{-11}} = 5,92 \cdot 10^{11} \text{ шт, что составляет } \nu_M = \frac{N_M}{N_A} = \frac{5,92 \cdot 10^{11}}{6,02 \cdot 10^{23}} = 0,983 \cdot 10^{-12} \text{ моль.}$$

Далее рассчитаем величину поверхностной энергии связи молекул бензола на поверхности частиц угля.

Обозначим: $d = 2$ см – диаметр частицы угля; $\rho = 1400$ кг/м³ – плотность угля; m_q – масса угольной частицы; $m = 97,41$ г – масса пробы; N_q – количество частиц в пробе; E – энергия, затраченная на разрушение пробы угля.

Объём частицы угля определяют по формуле:

$$V_q = \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{\pi}{6} d^3.$$

Среднюю массу одной частицы в пробе определяем по формуле:

$$m_q = \rho V_q;$$

$$m_q = \rho \frac{\pi}{6} d^3 = \frac{3,14}{6} \cdot 0,02^3 \cdot 1400 = 0,00586 \text{ кг} = 5,9 \text{ г.}$$

Тогда число частиц угля в пробе:

$$N_q = \frac{m}{m_q} = \frac{97,41}{5,9} = 16,5 \text{ шт.}$$

Затем вычислим площадь поверхности одной частицы угля:

$$S_{\text{пов } 1q} = 4\pi r^2 = \frac{4\pi d^2}{4} = \pi d^2 = 3,14 \cdot 0,02^2 = 0,00126 \text{ м}^2.$$

Зная число частиц в пробе, вычислим суммарную поверхность угля:

$$S_{\Sigma} = S_{\text{пов 1ч}} \cdot N_{\text{ч}} = 0,00126 \cdot 16,5 = 0,02079 \text{ м}^2.$$

Поверхностная энергия связи молекул бензола, находящихся на суммарной поверхности частиц угля:

$$W_{\text{с-с}} = \frac{W}{S_{\Sigma}} = \frac{6 \cdot 348 \cdot 10^3 \cdot 16,5 \cdot 0,983 \cdot 10^{-12}}{0,02079} = 1,63 \cdot 10^{-3} \text{ Дж/м}^2.$$

Оценим поверхностную энергию, приложенную к пробе угля в ходе эксперимента по разрушению. После первого цикла разрушения проба угля разрушилась до набора частиц (таблица 2). Оценим суммарную площадь всех частиц.

Таблица 2

Ситовый анализ пробы угля после одного цикла разрушения

Диаметр частиц, мм	Площадь поверхности одной частицы S_i , м ²	Масса, гр	Число частиц N_i , шт
1	$3,14 \cdot 10^{-6}$	89,91	$1,2 \cdot 10^8$
0,5	$7,85 \cdot 10^{-7}$	3,71	$4,1 \cdot 10^7$
0,25	$1,96 \cdot 10^{-7}$	2,43	$2,1 \cdot 10^8$
0,125	$4,91 \cdot 10^{-8}$	1,33	$9,3 \cdot 10^8$
0,063	$1,25 \cdot 10^{-8}$	0,71	$3,9 \cdot 10^9$
0,05	$7,85 \cdot 10^{-9}$	0,024	$2,6 \cdot 10^8$
0,045	—	0	—
0,04	$5,02 \cdot 10^{-9}$	0,046	$9,8 \cdot 10^8$

Тогда суммарная площадь поверхности $S_2 = \sum S_i \cdot N_i = 559,67 \text{ м}^2$.

Поверхностная энергия разрушения пробы угля после первого цикла разрушения:

$$\frac{E}{S_2} = \frac{5mgh}{S_2} = \frac{51,8}{559,67} = 92,6 \cdot 10^{-3} \text{ Дж/м}^2.$$

Список литературы:

1. Ботвенко, Денис Вячеславович. Разработка методики оценки и классификации фрикционной опасности горных пород : диссертация кандидата технических наук : 05.26.03. — Кемерово, 2004. — 147 с.
2. Мирошниченко Д. В., Коваль В. В., Фатенко С. В. Размолоспособность углей. Сообщение 3. Метод определения коэффициента крепости по Протодьяконову / Кокс и химия. — 2021. — № 1. — С. 2-7.
3. Справочник химика [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://chem21.info/info/633027/> (дата обращения 28.04.2025).