

含瓦斯煤与水之间接触动态演化特性及微观机制

岳基伟^{1,2,3}, 韩奇峻¹, 梁跃辉¹, 石必明^{1,2}, 申晓静¹, 郑梦浩¹, 张明月¹, 廖杰¹, 王辰¹

(1. 安徽理工大学 安全科学与工程学院, 安徽 淮南 232001; 2. 安徽理工大学 煤矿安全高效开采省部共建教育部重点实验室, 安徽 淮南 232001;
3. 平顶山天安煤业股份有限公司, 河南 平顶山 467036)

摘要: 煤层注水治理瓦斯及粉尘的效果与水分润湿煤体的效果密切相关, 含瓦斯煤与水接触后形成一个动态的润湿过程, 其对于揭示煤层注水的润湿机理及煤层注水的应用至关重要, 然而目前关于含瓦斯煤与水之间接触动态演化特性及微观机制还不清楚。基于此, 采用自开发的水与瓦斯之间表面张力分析软件、含瓦斯煤接触角实验设备及水滴轮廓线提取软件研究了含瓦斯煤与水之间接触演化特性, 结合分子动力学模拟揭示了含瓦斯煤与水之间接触动态演化的微观机制。研究结果表明: 表面张力与瓦斯压力满足负指数函数的关系; 接触角是关于瓦斯压力及时间的函数, 其与时间负相关, 与瓦斯压力正相关; 同一瓦斯压力条件下, 随着润湿时间的增加, 煤水界面能逐渐减小, 煤的表面能逐渐增加, 黏附功逐渐增加; 随着瓦斯压力的增加, 煤水界面能变大, 煤的表面能变小, 黏附功变小, 水分在煤体表面铺展的难度增加; 随着润湿时间的增加, 水滴轮廓最高点下降的高度逐渐增加, 水滴与含瓦斯煤接触面的宽度逐渐增加; 瓦斯压力分别与水滴轮廓最高点下降的高度、水滴与含瓦斯煤接触面增加的宽度负相关, 其与分子动力学模拟获得的含瓦斯煤-水之间的接触演化规律一致; 在煤水交界面的上方, 水分子的浓度出现峰值点, 在峰值点上方一定距离处, 水分子浓度分布规律由随着瓦斯压力的减小而增加逆转为随着瓦斯压力的增加而增加。对于高瓦斯煤层, 可将煤层增透措施与注水措施联合使用, 采取增透及抽采措施降低煤层瓦斯压力后再注水, 从而增加润湿范围及润湿程度。研究结果为揭示水分对含瓦斯煤的动态润湿机理及煤层注水的应用提供理论支撑。

关键词: 煤层注水; 瓦斯压力; 接触动态演化; 水滴轮廓; 瓦斯粉尘协同治理

中图分类号: TD712; TD714.4 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-9993(2025)04-2147-11

Dynamic evolution characteristics and microscopic mechanisms of contact between gas-bearing coal and water

YUE Jiwei^{1,2,3}, HAN Qijun¹, LIANG Yuehui¹, SHI Biming^{1,2}, SHEN Xiaojing¹, ZHENG Menghao¹,
ZHANG Mingyue¹, LIAO Jie¹, WANG Chen¹

(1. School of Safety Science and Engineering, Anhui University of Science & Technology, Huainan 232001, China; 2. Key Laboratory of State and Effective Coal Mining Ministry of Education, Anhui University of Science & Technology, Huainan 232001, China; 3. Pingdingshan Tian'an Coal Industry Co., Ltd.,
Pingdingshan 467036, China)

Abstract: The effectiveness of coal seam water injection in controlling gas and dust is closely related to the wetting effect of water on the coal. A dynamic wetting process is formed after the contact between gas-bearing coal and water, which is crucial for revealing the wetting mechanism of coal seam water injection and the application of coal seam water injection.

收稿日期: 2024-05-20 策划编辑: 王晓珍 责任编辑: 李雅楠 DOI: 10.13225/j.cnki.jecs.2024.0554

基金项目: 安徽省自然科学基金资助项目 (2308085QE152); 国家自然科学基金资助项目 (52304200, U23A20601)

作者简介: 岳基伟 (1990—), 男, 河南临颍人, 副教授, 博士。E-mail: yjwhpu@163.com

通讯作者: 石必明 (1964—), 男, 安徽太湖人, 教授, 博士生导师, 博士。E-mail: bmshi@aust.edu.cn

引用格式: 岳基伟, 韩奇峻, 梁跃辉, 等. 含瓦斯煤与水之间接触动态演化特性及微观机制[J]. 煤炭学报, 2025, 50(4): 2147-2157.

YUE Jiwei, HAN Qijun, LIANG Yuehui, et al. Dynamic evolution characteristics and microscopic mechanisms of contact between gas-bearing coal and water[J]. Journal of China Coal Society, 2025, 50(4): 2147-2157.



移动阅读

However, the contact dynamic evolution characteristics and microscopic mechanism between gas-bearing coal and water are still unclear. Based on this, this paper uses the self-developed surface tension analysis software between water and gas, the contact angle experimental equipment of gas-bearing coal, and the water droplet contour extraction software to study the contact evolution characteristics between gas-bearing coal and water. The microscopic mechanism of contact evolution between gas-bearing coal and water is revealed based on molecular dynamics simulation. The results show that the relationship between surface tension and gas pressure satisfies the negative exponential function. The contact angle is a function of gas pressure and time, which is negatively correlated with time and positively correlated with gas pressure. Under the same gas pressure condition, with the increase of wetting time, the interface energy of coal and water decreases gradually, the surface energy of coal increases gradually, and the adhesion work increases gradually. With the increase of gas pressure, the coal-water interface energy becomes more extensive, the surface energy of coal becomes smaller, the adhesion work becomes smaller, and the difficulty of water spreading on the surface of coal increases. With the increase of wetting time, the height of the drop of the highest point of the water droplet contour increases gradually, and the contact surface width between the water droplet and the gas-bearing coal increases gradually. The gas pressure is negatively correlated with the height of the drop at the highest point of the water droplet profile and the increase of the contact surface width between the water droplet and the gas-bearing coal, which is consistent with the contact evolution law between gas-bearing coal and water obtained from molecular dynamics simulation. The concentration of water molecules appears at a peak point above the interface between coal and water. At a certain distance above the peak point, the concentration distribution of water molecules increases with the decrease of gas pressure and increases with the increase of gas pressure. For high gas coal seam, the coal seam permeability improvement measures and water injection measures can be used in combination, and the permeability improvement and drainage gas measures can be taken to reduce the gas pressure of coal seam before water injection, so as to increase the wetting range and wetting degree. The research results provide some theoretical support for revealing the dynamic wetting mechanism of water in gas-bearing coal and the application of coal seam water injection.

Key words: coal seam water injection; gas pressure; contact dynamic evolution; droplet contour; collaborative treatment of gas and dust

0 引言

我国以煤为主的能源资源禀赋,决定了煤炭仍将是我国能源安全的压舱石^[1,2]。因此,煤炭安全开采是保障国家能源安全的前提。近年来,随着煤矿开采深度及强度的增加,部分煤矿由低瓦斯向高瓦斯、突出矿井演变,瓦斯和煤尘两大灾害逐渐凸显,其严重威胁着煤炭工业的高质量发展及矿工的职业安全与健康^[3-4]。因此,进行瓦斯灾害和粉尘灾害的协同治理势在必行。

研究表明:煤层注水具有降尘、置换及驱替瓦斯的多种效果,被广泛用于煤层瓦斯治理及预湿减尘^[5]。煤层注水治理瓦斯及粉尘的效果关键在于煤中的含水率,煤中含水率与煤的润湿性直接相关,然而影响煤润湿性的因素有煤的化学组成、煤表面电荷及气体压力等,接触角是评价煤体润湿性能的重要指标之一^[6]。因此相关研究采用接触角评价煤的化学组成、煤表面电荷、孔隙结构及气体压力对润湿性的影响。

煤中灰分、水分和氧元素是亲水因素,固定碳含量与润湿性负相关,随着煤阶的增高,吸附在煤表面

的含氧官能团减少,煤的亲水性能下降^[7]。程卫民等^[8]等获得了无机矿物含量与接触角的定量关系,发现了煤尘表面以灰分和无机硅酸盐为代表无机矿物质官能团、以芳香羟基为代表的含氧官能团及以芳香环C—H键为代表的有机大分子结构对煤尘润湿性有较大影响,含硅矿物是增强润湿性的根本原因。WANG 等^[9]采用FTIR对5种不同类型的煤样(褐煤、气肥煤、焦煤、1/3焦煤、无烟煤)进行测试,发现以羟基和羧基为代表的含氧官能团、硅酸盐和碳酸盐矿物亲水,不同变质程度煤的呼吸性煤尘具有不同的润湿性。陈跃等^[10]研究获得灰分与煤的润湿性正相关,挥发分与煤的润湿性负相关,氢元素含量高,润湿性变差,碳和氧元素对润湿性的影响取决于含氧官能团的类型。LI 等^[11]研究认为C/O(碳和氧的比率)和羟基是影响煤体润湿性的主要因素,随着变质程度增加,水分对煤的润湿性逐渐变差。WANG 等^[12]基于接触角测试实验发现接触角大小分别与极性基团、自由基的比例呈负线性关系,但与Zeta电位呈正线性关系。李树刚等^[13]研究发现Zeta电位与煤体的接触角呈现正相关的关

系,与自由基含量呈现负相关的关系。CHENG 等^[14]、JIANG 等^[15]、ZHOU 等^[16]、WANG 等^[17]研究发现随着煤体表面的 Zeta 电位越高,液体越容易在煤体表面铺展,煤体越容易被润湿。ZHU 等^[18]、SUN 等^[19]、KAVEH 等^[20]通过实验发现煤吸附 CO₂ 后水对煤的润湿性能下降。魏建平等^[21]研究了煤体在瓦斯氛围中煤水之间的接触角,分析发现接触角随着气体压力的增加而增加。对于不含瓦斯煤的条件,水分与煤体之间的接触角演化特性已有相关研究。在含瓦斯的条件下,目前研究主要聚焦于水与煤接触后某一时刻接触角大小,水与煤接触后水在煤体表面发生铺展效应,对煤体形成一个动态的润湿过程。然而目前关于含瓦斯煤与水之间接触动态演化特性鲜有研究,其导致煤层注水润湿含瓦斯煤的机理不清楚,从而限制着煤层注水的应用。

为弄清含瓦斯煤与水之间接触动态演化特性,笔者首先采用自开发的水与瓦斯之间的表面张力分析软件计算了不同瓦斯压力条件下水的表面张力;其次采用开发的含瓦斯煤与水接触角实验设备测试了不同瓦斯压力、不同时间条件下的煤水接触角,理论分析了不同瓦斯压力条件下煤水界面能、煤的表面能、黏附功随接触角及时间的演化规律;再次,采用开发的水滴轮廓线提取软件对不同时间及不同瓦斯压力条件下的水滴轮廓进行提取,获得了水滴轮廓最高点及水滴与含瓦斯煤接触面的宽度演化规律;最后,采用分子动力学模拟的方法,从微观角度揭示了含瓦斯煤与水之间的接触动态演化的微观机制。研究结果为揭示水分对含瓦斯煤的动态润湿机理及煤层注水的应用提供理论支撑。

1 含瓦斯煤与水之间接触角动态演化测试及水与瓦斯之间的表面张力计算方法

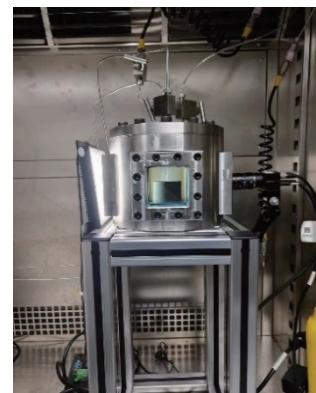
1.1 含瓦斯煤与水之间接触角测试设备及步骤

含瓦斯煤与水之间接触角测试设备具备抽真空、充气吸附、恒温控制、滴水、光学成像及自动采集数据的功能,设备的实物图及原理分别如图 1a—图 1b 所示。

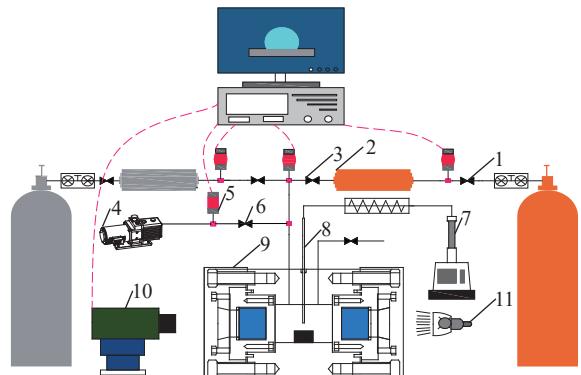
含瓦斯煤与水之间接触角动态演化测试步骤如下:

1) 试验煤样取自贵州金沙龙凤煤业公司 9 号煤(煤层瓦斯压力为 1.46 MPa),煤质为无烟煤,其水分 2.24%,灰分为 9.45%,挥发分为 5.77%,固定碳为 82.54%。煤样的尺寸为 $\varnothing 50 \text{ mm} \times 42 \text{ mm}$ 的煤样,将实验煤样在 105 °C 条件下干燥,干燥结束后放置在干燥皿中。

2) 向实验设备中分段充入氦气,观察传感器示数气体压力 4~5 h 不发生变化,认为装置气密性良好。



(a) 实物



(b) 原理

注: 1, 3, 6—阀门; 2—甲烷参考罐; 4—真空泵; 5—真空计;
7—恒速恒压泵; 8—滴管; 9—透明釜体; 10—摄像机;
11—冷光源

图 1 含瓦斯煤与水之间接触角实验设备

Fig.1 Experimental equipment for contact angle between
gas-bearing coal and water

3) 将实验煤样放置在透明釜体 9 中,将透明釜体密闭。依次打开真空泵 4, 阀门 3 再次对实验系统进行抽真空,当真空计 5 的示数小于 20 Pa 时抽真空结束,关闭阀门 6; 打开阀门 1, 向甲烷参考罐 2 充入一定压力的甲烷气体,关闭阀门 1; 打开阀门 3, 向透明釜体内充入甲烷气体,关闭阀门 3。吸附一段时间后,当透明釜体内达到预定的吸附平衡压力值,结束充气;如果透明釜体内小于预定的吸附平衡压力值,继续向透明釜体充入甲烷气体,直至达到预定的吸附平衡压力。

4) 打开摄像机 10 的连拍程序、冷光源 11 及恒速恒压泵 7,当液滴脱离滴管 8 的下端口时,关闭恒速恒压泵;采用图像分析功能对不同瓦斯压力条件下的接触角进行测量,并记录时间,即可获得含瓦斯煤与水之间接触角动态演化的实验数据。

1.2 水与瓦斯之间的表面张力计算方法

笔者采用悬滴法进行水与瓦斯之间表面张力的测试,当水滴被静止悬挂在毛细管的管口处时,液滴的外形主要取决于重力和表面张力的平衡^[22],通过对水滴外形的测定获得水与瓦斯之间表面张力计算的

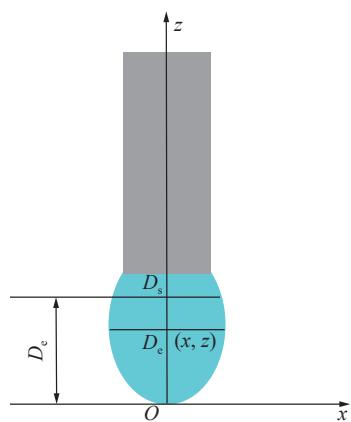


图 2 悬滴法原理

Fig.2 Principle diagram of hanging drop method

相关参数。悬滴法原理如图 2 所示,采用自开发的水与瓦斯之间界面张力分析软件获得式(1)中 D_s 、 D_e ,联合水、瓦斯的密度、修正后的形状因子(F)、重力加速度(g),基于式(2)计算水与瓦斯之间的表面张力。

$$G = \frac{D_s}{D_e} \quad (1)$$

$$\gamma = \frac{g D_e^2 (\rho - \rho_g)}{F} = \frac{g D_e^2 (\rho - \frac{pM}{RT})}{F} \quad (2)$$

式中: γ 为水与瓦斯之间的表面张力,N/m; g 为重力加速度,m/s²; ρ_g 为瓦斯气体的密度,kg/m³; ρ 为水的密度,kg/m³; D_e 为悬滴的最大直径,m; D_s 为距顶点距离等于 D_e 处悬滴截面的直径,m; G 为液滴形状因子; p 为气体压力,MPa; M 为甲烷的摩尔质量,16 g/mol; R 为气体状态常数,8.314 J/(mol·K)。

2 水与瓦斯之间的表面张力

采用团队自开发的水与瓦斯之间的表面张力分析软件对不同瓦斯压力条件下的水滴形貌(图3)进行



图 3 不同瓦斯压力条件下的水滴形貌

Fig.3 Water droplet morphology under different gas pressure conditions

分析,即可获得式(1)中的 D_s 及 D_e 。 F 为 G 修正后的形状因子, F 通过查表及插值法获得^[22-23],式(1)中的参数见表1,将表1中的参数带入式(1)及式(2),即可获得不同瓦斯压力条件下水与瓦斯之间的表面张力(图4)。

由图4可知,水与瓦斯之间的表面张力随着瓦斯压力的增加而减小,表面张力与瓦斯压力满足负指数的关系,如式(3)所示。在水与瓦斯的界面,水分子两

侧分别与瓦斯分子、液体分子接触,表面分子受到的朝向液体内部的吸引力大于气体分子的吸引力。随着瓦斯压力的增加,水与瓦斯接触表面之间的密度差逐渐减小,瓦斯分子对水分子的引力逐渐变大,抑制了液体表面分子向液体内部的运动,使系统的能量趋向于平衡状态。因此,水与瓦斯之间的表面张力随着瓦斯压力的增加而减小。

$$\gamma = 0.01524 \times e^{-p/1.097854} + 0.05585 \quad (3)$$

表1 式(1)及式(2)中的参数
Table 1 The parameters in Equations (1) and (2)

压力/MPa	0	0.5	1.5	2.5	3.5
D_s/m	2.71110×10^{-3}	2.80850×10^{-3}	2.71110×10^{-3}	2.71430×10^{-3}	2.77270×10^{-3}
D_e/m	3.46670×10^{-3}	3.48940×10^{-3}	3.33330×10^{-3}	3.33330×10^{-3}	3.36360×10^{-3}
$\rho_g/(kg \cdot m^{-3})$	1.14600	3.13100	9.39300	15.65500	21.91000
G	0.78205	0.80488	0.81333	0.81429	0.824320
I/F	0.60040	0.56066	0.54138	0.53968	0.522470

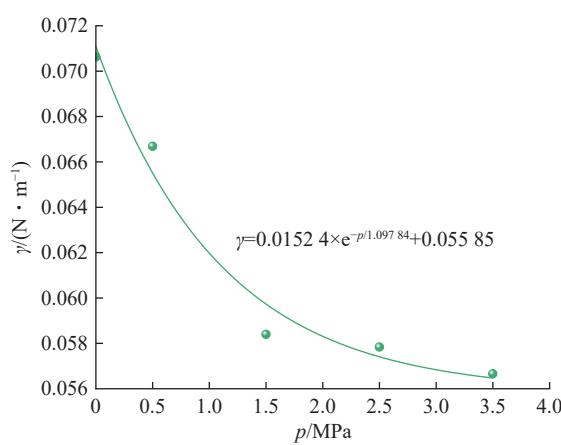


图4 不同瓦斯压力条件下水的表面张力

Fig.4 Surface tension of water under different gas pressure conditions

3 含瓦斯煤与水之间接触动态演化特性

3.1 含瓦斯煤与水之间接触角动态演化特性

按照“含瓦斯煤与水之间接触角测试实验流程”对含瓦斯煤与水之间的动态接触角进行测试。不同瓦斯压力下煤与水之间动态接触角测试结果如图5所示。

由图5可知,同一瓦斯压力下,接触角随着时间的增加而逐渐减小,说明水分在含瓦斯煤表面发生了浸润现象。接触角 θ 与时间 t 满足 $\theta = a/(t+b)$ 的关系,参数 a 和 b 的值如图6所示。参数 a 与压力 p 满足 $a = 4.3398 \times 10^9 \times (1 - e^{-p/236327.2346})$ 的关系,参数 b 与压力 p 满足 $b = 10426.97554 - 10183.56389e^{-p/42.87289}$

的关系。接触角与压力及时间的关系如式(4)所示。

$$\theta = 4.3398 \times 10^9 \times (1 - e^{-p/236327.2346}) / (t + 10426.97554 - 10183.56389e^{-p/42.87289}) \quad (4)$$

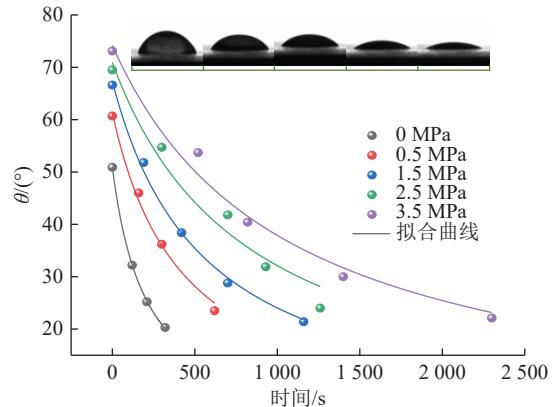
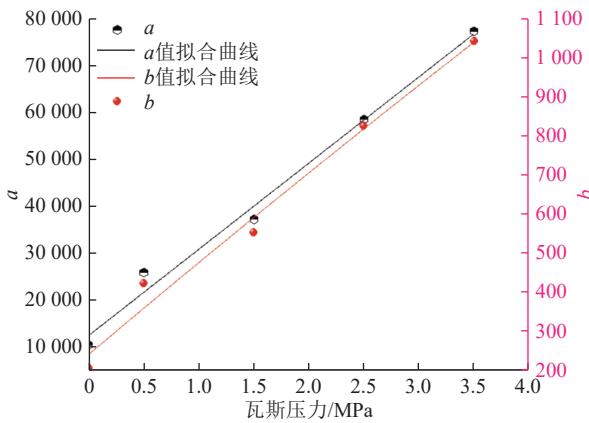


图5 不同瓦斯压力下煤与水之间动态接触角

Fig.5 Dynamic contact angle between coal and water under different gas pressures

3.2 煤水界面能、煤的表面能及黏附功的动态演化规律

同一时刻,随着瓦斯压力的增加,煤与水之间的接触角变大,由于水与瓦斯之间的表面张力随着瓦斯压力的增加而减小,无法定性的判断水分对含瓦斯煤的润湿特性。判断润湿性能的指标有煤水界面能、煤的表面能及黏附功^[24],其计算公式分别如式(5)—式(7)所示。不同瓦斯压力条件下的煤水界面能、煤的

图 6 参数 a 和 b 随瓦斯压力的变化规律Fig.6 The variation of parameters a and b with gas pressure

表面能及黏附功的计算结果,如图 7a—图 7c 所示。

$$\gamma_{sl} = \frac{\gamma_{lg}}{2} \left(\sqrt{1 + \sin^2 \theta} - \cos \theta \right) \quad (5)$$

$$\gamma_{sg} = \frac{\gamma_{lg}}{2} \left(\sqrt{1 + \sin^2 \theta} + \cos \theta \right) \quad (6)$$

$$W_a = \gamma_{lg} (\cos \theta + 1) \quad (7)$$

式中: γ_{lg} 为水的表面张力, N/m; θ 为接触角, ($^\circ$); γ_{sl} 为煤水界面能, N/m; γ_{sg} 为煤的表面能, N/m; W_a 为黏附功, N/m。

由图 7a 可知,同一瓦斯压力条件下,煤水界面能随着润湿时间的增加而减小,随着接触角的减小而减小。因为煤水界面能越小,水分越容易在煤体表面铺展。同一时刻,瓦斯压力越大,煤水接触角越大,煤水界面能越大,水分越不容易在煤体表面铺展;由图 7b 可知,同一瓦斯压力条件下,煤的表面能随着润湿时间的增加而增加,随着接触角的减小而增大。因为煤的表面能越高,越容易被水润湿。同一时刻,瓦斯压力越大,煤水接触角越大,煤的表面能越小,水分越不容易在煤体表面铺展;由图 7c 可知,同一瓦斯压力条件下,黏附功随润湿时间的增加而增加,随着接触角的减小而增大。黏附功越大,越容易被水润湿。同一时刻,瓦斯压力越大,煤水接触角越大,黏附功越小,水分越不容易在煤体表面铺展。因此,降低瓦斯压力及延长润湿时间有助于减小煤水界面能、增加煤的表面能及增加黏附功,进而有助于提高水对煤的润湿效果。因此,采用煤层注水措施治理瓦斯及预湿减尘时,应给予煤体充分的润湿时间。

3.3 水滴在含瓦斯煤表面的演化特性

水滴与含瓦斯煤表面接触后,水分逐渐浸润含瓦斯煤表面。采用开发的水滴轮廓线提取软件对不同时间及不同瓦斯压力条件下的水滴轮廓进行提取,提

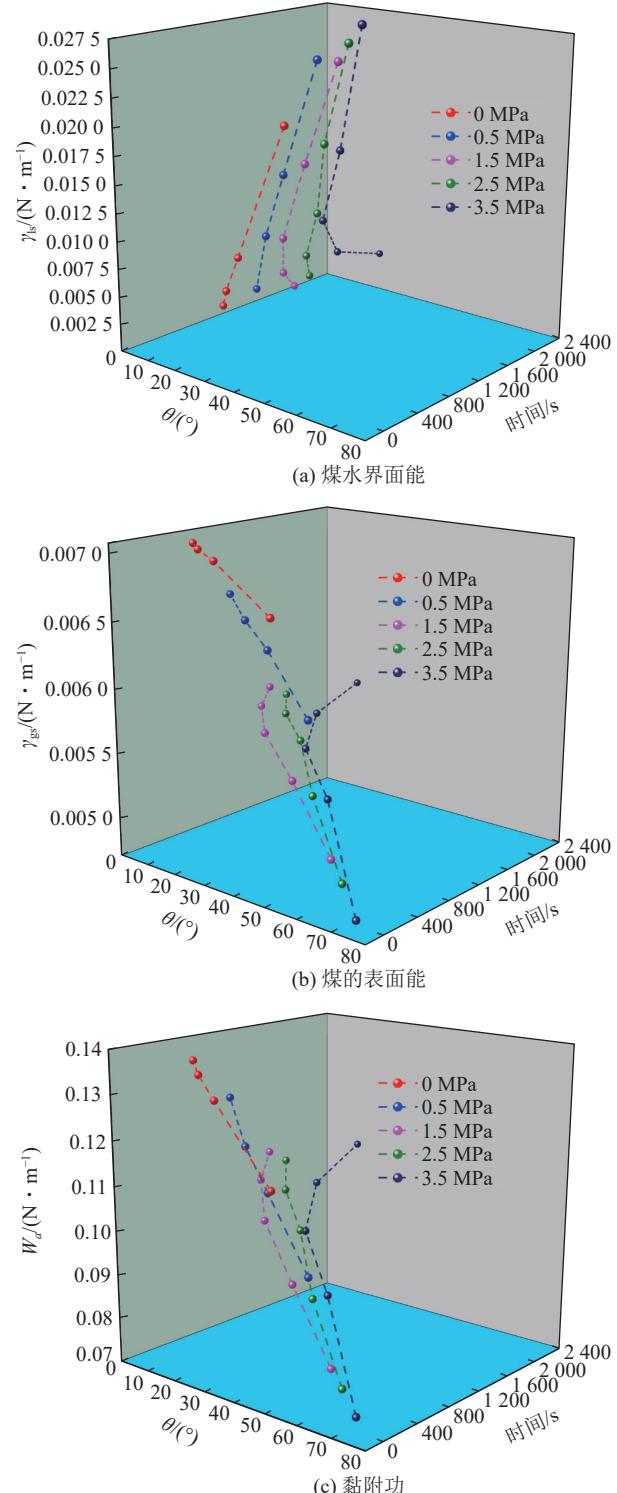


图 7 不同瓦斯压力条件下煤水界面能、煤的表面能及黏附功的动力学演化规律

Fig.7 Dynamic evolution law of coal and water interface energy, coal surface energy, and adhesion work under different gas pressure conditions

取后的水滴轮廓如图 8 所示。

由图 8 可知,在一定的瓦斯压力条件下,随着时间的增加,水滴逐渐趋于扁平,水滴与含瓦斯煤的接触面宽度逐渐增加,即润湿的宽度逐渐增加,水滴

的高度逐渐减小。通过图8可以获得,不同瓦斯压力、不同时间水滴轮廓最高点的坐标,将不同瓦斯压力、不同时间水滴轮廓的最高点与不同瓦斯压力、初始时刻水滴轮廓的最高点做差,可以获得水滴轮廓最高点随时间的演化规律(图9a)。通过图8可以获得不同瓦斯压力、不同时间水滴与含瓦斯煤接触面的宽度,采用不同瓦斯压力、不同时间水滴与含瓦斯煤接触面的宽度减去不同瓦斯压力、初始时刻水滴与含瓦斯煤接触面的宽度,即可获得水滴与含瓦斯煤接触面的宽度演化规律(图9b)。

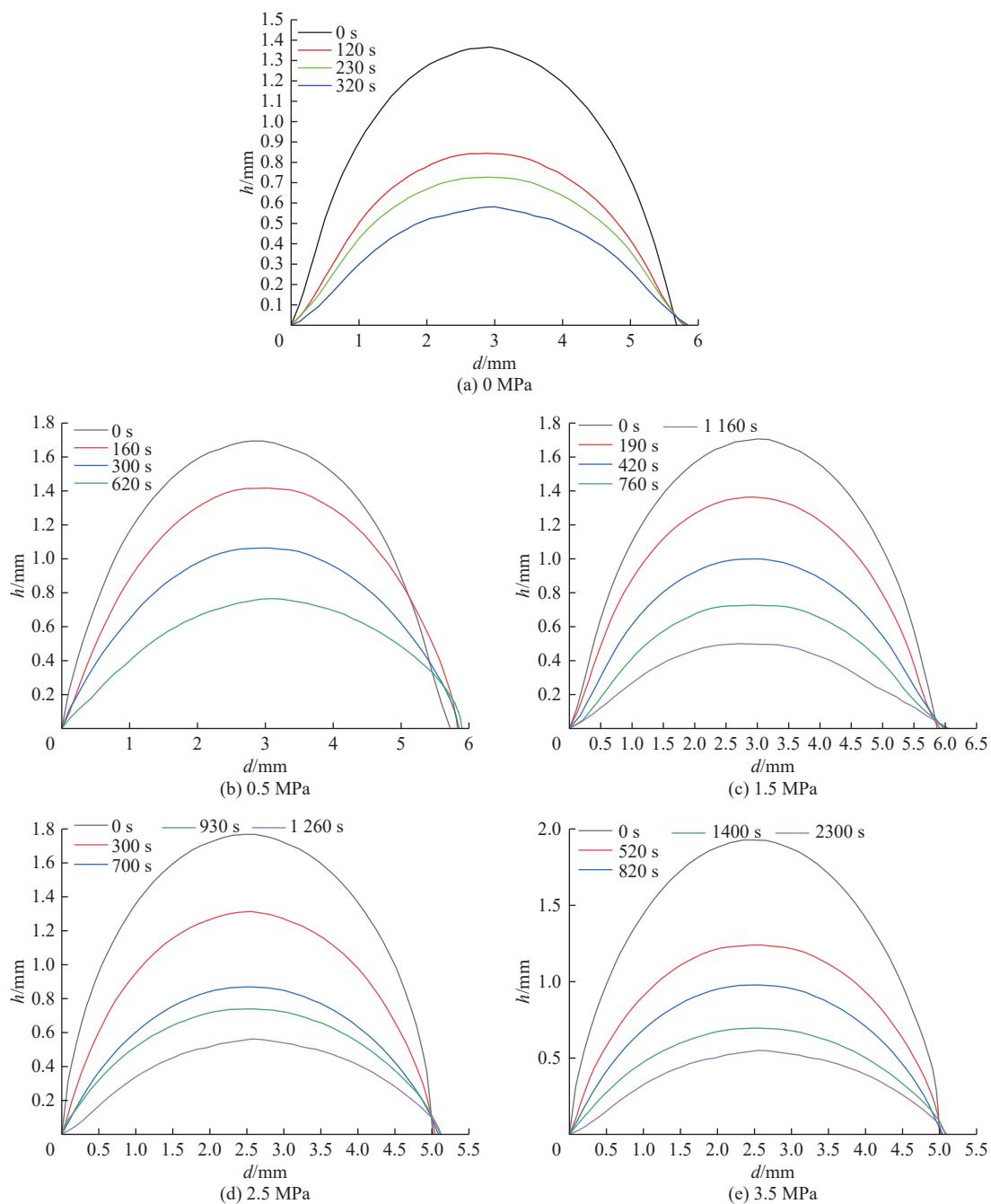


图8 不同时间及不同瓦斯压力条件下的水滴轮廓
Fig.8 Water droplet profiles under different time and gas pressure conditions

由图9a可知,同一瓦斯压力条件下,水滴轮廓最高点下降的高度逐渐增加,然而增加的速率逐渐减小,其主要是因为水分在煤中孔隙流动所受的黏滞力所致。同一时间,瓦斯压力越大,水滴轮廓最高点下降的高度越小。由前述分析可知,瓦斯压力越大,水分对煤体润湿的难度越大,水分越难浸润含瓦斯煤体,因此呈现出瓦斯压力越大,水滴轮廓最高点下降的高度越小的规律。由图9b可知,同一瓦斯压力条件下,水滴与含瓦斯煤接触面的宽度逐渐增加,然而增加的速率逐渐减小,其主要也是因为水分在煤中孔隙流动

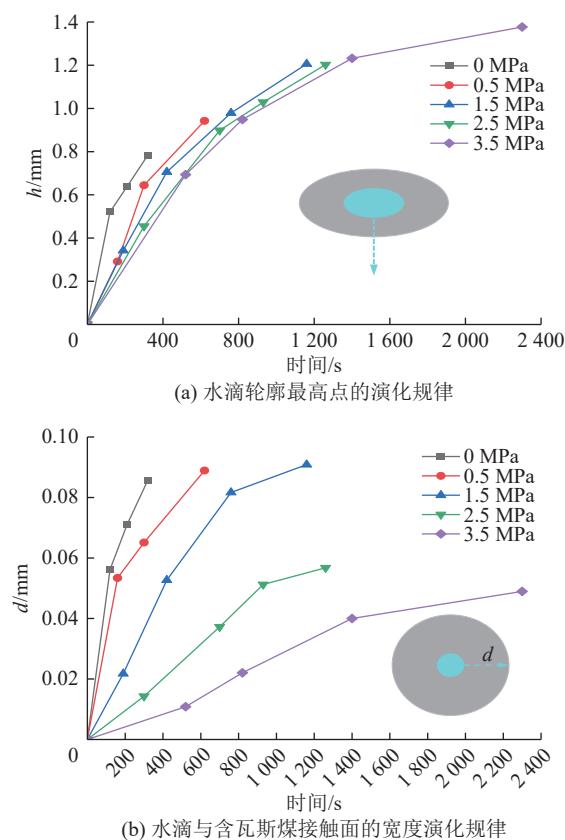


图9 水滴轮廓最高点及水滴与含瓦斯煤接触面的宽度演化规律
Fig.9 Evolution law of the highest point of the water droplet contour and the width of the contact surface between the water droplet and gas-bearing coal

所受的黏滞力所致。同一时间,瓦斯压力越大,水滴与含瓦斯煤接触面宽度增加的越小,其说明瓦斯压力越高,水分越不容易在含瓦斯煤表面铺展。水滴与含瓦斯煤表面的接触是一个动态润湿的过程,基于对图9a—图9b的分析可知,瓦斯压力的增加一方面不利于水分浸润到煤体中,另一方面不利于水分对煤体表面润湿范围的增加。

4 含瓦斯煤与水之间接触动态演化的微观机制

采用 Materials studio 分子动力学软件中的 Amorphous Cell 功能,建立一个由 150 个 wender 无烟煤分子组成的煤盒子^[25](图 10a),煤盒子的长和宽均为 10 nm;然后创建 1 个与煤盒子等长/等宽的含有 2 层石墨烯的结构,通过 Build layers 功能将含有 2 层石墨烯的结构放置于煤分子上下两侧(图 10b);最后,通过不断的压缩、移动及结构优化操作,将上下两侧的石墨烯结构删除,获得平整的煤表面模型(图 10c)。

采用 Sorption 模块对构建的平整的煤表面模型进行等温吸附模拟,选择的立场为 COMPASS II 立场,

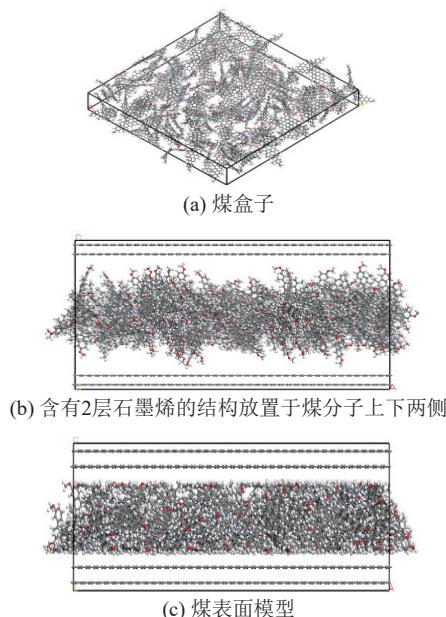


图10 平整的煤表面模型

Fig.10 Flat coal surface model

分别获得吸附平衡压力 0.5、1.5、2.5、3.5 MPa 下的煤吸附瓦斯的构型(图 11);基于 Amorphous Cell 功能构建 1 个水盒子,通过 Nanocluster 功能构建 1 个直径为 6 nm 水球,将该水球放置在煤吸附瓦斯的构型中,从而构成含瓦斯煤与水的分子结构模型,如图 12 所示;对含瓦斯煤与水的分子结构模型进行结构优化及分子动力学模拟,选择 COMPASS II 力场^[26-27],系综选择 NVT, 温度被设置为 308.15 K, 时间步长为 1 fs, 总模拟时间为 500 ps。

为揭示水分在含瓦斯煤表面的微观演化机制,选择如下情况进行分析:瓦斯压力为 3.5 MPa 条件下,模拟时间为 100、250、500 ps 时,煤与水分子的接触结构模型进行对比,如图 13a 所示;不同瓦斯压力条件下,模拟时间为 250 ps 及 500 ps 时,煤与水分子的接触结构模型进行对比,分别如图 13b—图 13c 所示。

通过对瓦斯压力为 3.5 MPa 条件下,模拟时间为 100、250、500 ps 时,煤与水分子接触构型(图 13a)可以获得如下规律:随着时间的增加,水分子逐渐在煤表面铺展,接触面宽度逐渐增加,通过观察图 13a 中的区域 A 可以明显发现此规律。通过对比同一瓦斯压力、不同时间条件下,煤与水分子接触构型(图 13b—图 13c)发现:随着时间的增加,煤与水分子之间的接触角逐渐减小。综合分析可知,在同一瓦斯压力条件下,随着时间的增加,水分逐渐在煤体表面铺展,水与煤之间的接触角逐渐减小。通过对比同一时间条件下(图 13b—图 13c)可知,随着瓦斯压力的增加,煤与水分子之间的接触角逐渐增加,其原因是瓦斯压

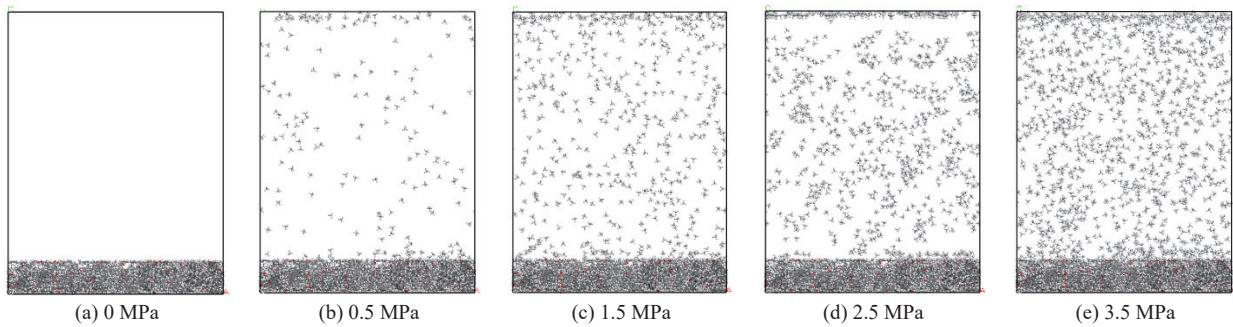


图 11 不同瓦斯压力条件下煤吸附瓦斯的构型

Fig.11 Configuration of coal adsorption gas under different gas pressure conditions

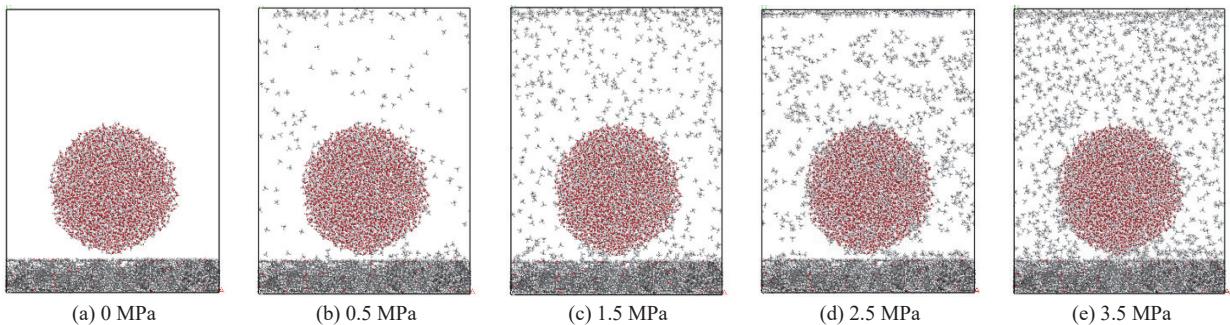


图 12 含瓦斯煤与水的分子结构模型

Fig.12 Molecular structure model of gas-bearing coal and water

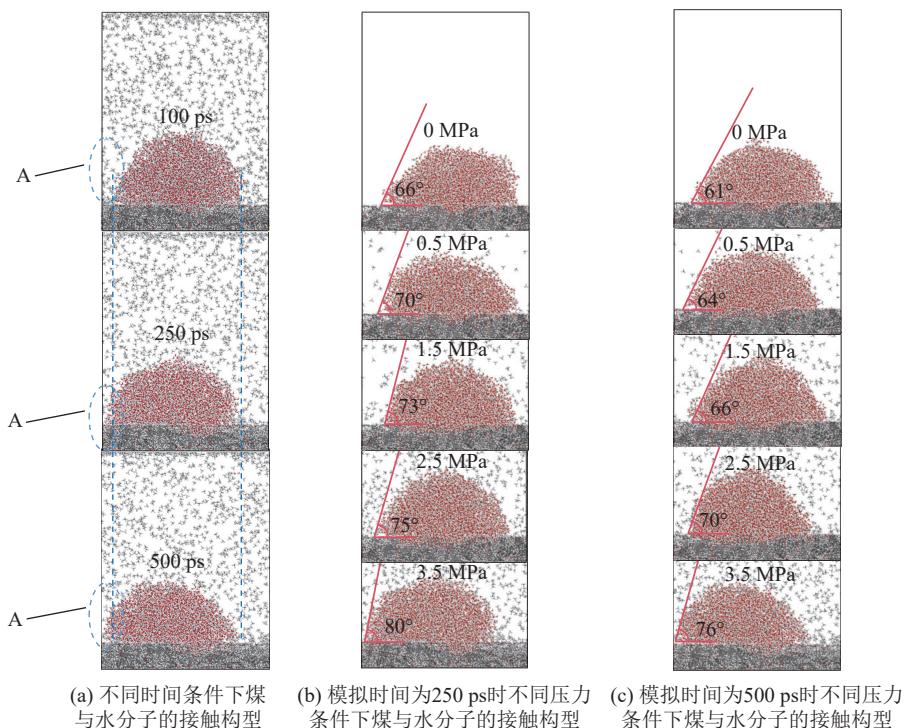


图 13 不同瓦斯压力、时间条件下煤与水分子接触结构模型

Fig.13 Contact structure model between coal and water molecules under different gas pressure and time conditions

力越大,水分子越不易在煤表面铺展且不易进入煤中,水分越不容易润湿煤。

基于不同瓦斯压力条件下、动力学模拟时间为 500 ps 时,煤与水分子的分子动力学模拟结果,对不同

瓦斯压力条件下水分子沿 Z 轴的相对浓度进行计算,即可获得不同瓦斯压力条件下,水分子的相对浓度(一定法向距离范围,水分子数密度与系统内水分子总数密度的比值)分布如图 14 所示。

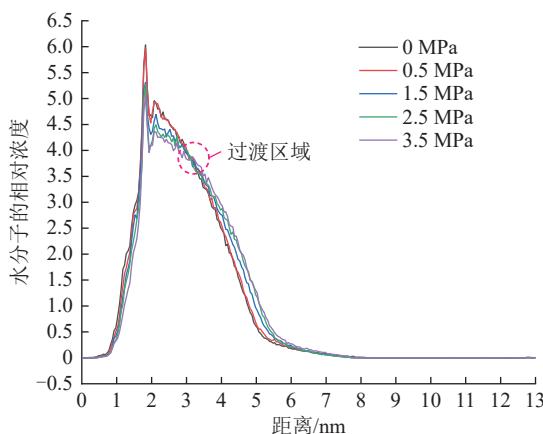


图 14 不同瓦斯压力条件下水分子的相对浓度分布

Fig.14 Relative concentration distribution of water molecules under different gas pressure conditions

由图 14 可知,在任意一个瓦斯压力条件下,水分子浓度沿 Z 轴均会出现峰值点(1.825 nm),峰值点位于煤水交界面的上方,因为煤表面吸附有瓦斯,所以峰值点没有出现在煤表面。在峰值点的左侧,同一距离处,水分子浓度随着瓦斯压力的增加而减小,说明瓦斯压力越大,水分子越不易进入到煤中。在峰值点右侧一定距离处(图 14 过渡区域的左侧),水分子浓度随着瓦斯压力的增加而减小,其说明瓦斯压力越大,水分子越难在煤表面铺展。然而,在图 14 中过渡区域的右侧一定范围内,水分子浓度随着瓦斯压力的增加而增加,其说明瓦斯压力越大,水分子越不易进入煤中,反而越易聚集。

基于对前已述及的煤水界面能、煤的表面能及黏附功的动态演化规律,水滴在含瓦斯煤表面的演化特性及分子动力学模拟结果,分析可知:煤层瓦斯压力越高,煤层注水后,水分铺展的范围越小,水分润湿煤体的程度越低。因此,可将煤层增透措施与煤层注水措施联合使用,首先,采取增透及抽采措施降低煤层瓦斯压力;其次,进行煤层注水,增加煤体润湿的范围及程度,从而提高吸附态瓦斯被置换的程度,最终提升煤层瓦斯治理及预湿减尘的效果。

5 结 论

- 1) 水与瓦斯之间的表面张力与瓦斯压力满足负指数函数的关系,接触角是关于瓦斯压力及时间的函数,其与时间负相关,与瓦斯压力正相关。

- 2) 同一瓦斯压力条件下,随着润湿时间的增加,煤水界面能逐渐减小,煤的表面能逐渐增加,黏附功逐渐增加;随着瓦斯压力的增加,煤水界面能变大,煤的表面能变小,黏附功变小,水分煤体表面铺展的难度增加。

- 3) 随着润湿时间的增加,水滴轮廓最高点下降的高度逐渐增加,水滴与含瓦斯煤接触面的宽度逐渐增加,水滴轮廓最高点下降的高度大于水滴与含瓦斯煤接触面增加的宽度;瓦斯压力越大,水滴轮廓最高点下降的高度越小,水滴与含瓦斯煤接触面宽度增加的越小,其与分子动力学模拟获得的含瓦斯煤-水之间的接触演化规律一致。

- 4) 由于煤表面吸附有瓦斯,在煤水交界面的上方,水分子的浓度出现峰值点,在峰值点上方一定距离处,水分子浓度分布规律发生逆转,由水分子浓度随着瓦斯压力的减小而增加逆转为随着瓦斯压力的增加而增加。

- 5) 对于高瓦斯煤层可将煤层增透措施与煤层注水措施联合使用,首先,采取增透及抽采措施降低煤层瓦斯压力;其次,进行煤层注水,增加煤体润湿的范围及程度,提升煤层瓦斯治理及预湿减尘的效果。

参 考 文 献(References):

- [1] 袁亮,徐良骥.高潜水位采煤沉陷区资源化、能源化、功能化利用构想与实践[J].煤炭学报,2024,49(1): 65–74.
YUAN Liang, XU Liangji. Conception and practice of resource utilization, energization and functionalization of coal mining subsidence areas with high groundwater level[J]. Journal of China Coal Society, 2024, 49(1): 65–74.
- [2] 袁亮.我国煤炭主体能源安全高质量发展的理论技术思考[J].中国科学院院刊,2023,38(1): 11–22.
YUAN Liang. Theory and technology considerations on high-quality development of coal main energy security in China[J]. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2023, 38(1): 11–22.
- [3] 王刚,李胜鹏,刘义鑫,等.真三轴下注水条件对煤体超声波传播特性影响规律的研究[J].岩石力学与工程学报,2022,41(11): 2225–2239.
WANG Gang, LI Shengpeng, LIU Yixin, et al. Influence of water injection on ultrasonic propagation characteristics of coal under true triaxial stress[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2022, 41(11): 2225–2239.
- [4] 秦玉金,苏伟伟,田富超,等.煤层注水微观效应研究现状及发展方向[J].中国矿业大学学报,2020,49(3): 428–444.
QIN Yujin, SU Weiwei, TIAN Fuchao, et al. Research status and development direction of microcosmic effect under coal seam water injection[J]. Journal of China University of Mining & Technology, 2020, 49(3): 428–444.
- [5] YUE J W, MA Y K, ZHAO A H, et al. Competitive adsorption effect during spontaneous external water imbibition in loaded gas-bearing coal and application of a normalized desorption rate model[J]. *Geoenergy Science and Engineering*, 2023, 226: 211799.
- [6] 韩方伟,胡福宏,奚志林,等. AO_3 润湿褐煤性能及机理[J].煤炭学报,2023,48(10): 3766–3775.
HAN Fangwei, HU Fuhong, XI Zhilin, et al. Wettability and mechan-

- ism of AEO₃ for lignite wetting[J]. Journal of China Coal Society, 2023, 48(10): 3766–3775.
- [7] HOU J Y, HU X M, ZHAO Y Y, et al. Improvement of wettability of coal seams in water injection via co-deposition of polydopamine and polyacrylamide[J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2022, 636: 128112.
- [8] 程卫民,薛娇,周刚,等.烟煤煤尘润湿性与无机矿物含量的关系研究[J].中国矿业大学学报,2016,45(3):462–468.
- CHENG Weimin, XUE Jiao, ZHOU Gang, et al. Research on the relationship between bituminous coal dust wettability and inorganic mineral content[J]. Journal of China University of Mining & Technology, 2016, 45(3): 462–468.
- [9] WANG H T, ZHANG L, WANG D M, et al. Experimental investigation on the wettability of respirable coal dust based on infrared spectroscopy and contact angle analysis[J]. Advanced Powder Technology, 2017, 28(12): 3130–3139.
- [10] 陈跃,马东民,夏玉成,等.低阶煤不同宏观煤岩组分润湿性及影响因素研究[J].煤炭科学技术,2019,47(9): 97–104.
CHEN Yue, MA Dongmin, XIA Yucheng, et al. Study on wettability and influencing factors of different macroscopic components in low rank coal[J]. Coal Science and Technology, 2019, 47(9): 97–104.
- [11] LI K, ZHU C J, ZHANG X L, et al. Wetting behavior of CO₂-H₂O-coal with different metamorphic degrees under *in situ* thermophysical conditions[J]. Energy & Fuels, 2024, 38(9): 7980–7996.
- [12] WANG Y H, YANG W, YANG W M, et al. Effect of AES anionic surfactant on the microstructure and wettability of coal[J]. Energy, 2024, 289: 130118.
- [13] 李树刚,闫冬洁,严敏,等.烷基糖苷活性剂对煤体结构改性及甲烷解吸特性的影响[J].煤炭学报,2022,47(1): 286–296.
LI Shugang, YAN Dongjie, YAN Min, et al. Effect of alkyl glycoside on coal structure modification and methane desorption characteristics[J]. Journal of China Coal Society, 2022, 47(1): 286–296.
- [14] CHEN Y M, SONG Z D, SUN Q X, et al. Insights into the dispersion mechanism of microfine coal particles modified with naphthalene sulfonate formaldehyde based on EDLVO theory[J]. Energy & Fuels, 2023, 37(11): 7777–7787.
- [15] JI B, JIANG B Y, YUAN L, et al. Experimental and molecular dynamics simulation study on the influence of SDS and JFC composite ratios on bituminous coal wettability[J]. Process Safety and Environmental Protection, 2023, 174: 473–484.
- [16] ZHOU Q, QIN B T, ZHOU B H, et al. Effects of surfactant adsorption on the surface functional group contents and polymerization properties of coal dust[J]. Process Safety and Environmental Protection, 2023, 173: 693–701.
- [17] WANG H, XIE J N, XIE J, et al. Effect of critical micelle concentration of imidazole ionic liquids in aqueous solutions on the wettability of anthracite[J]. Energy, 2022, 239: 122088.
- [18] ZHU C J, WAN J M, TOKUNAGA T K, et al. Impact of CO₂ injection on wettability of coal at elevated pressure and temperature[J]. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2019, 91: 102840.
- [19] SUN X X, YAO Y B, LIU D M, et al. Investigations of CO₂-water wettability of coal: NMR relaxation method[J]. International Journal of Coal Geology, 2018, 188: 38–50.
- [20] KAVEH N S, RUDOLPH E S J, WOLF, K H A A, et al. Wettability determination by contact angle measurements: hvB coal-water system with injection of synthetic flue gas and CO₂[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 364(1): 237–247.
- [21] 魏建平,王洪洋,司磊磊,等.瓦斯氛围下煤水固液接触特征[J].煤炭学报,2022,47(1): 323–332.
WEI Jianping, WANG Hongyang, SI Leilei, et al. Characteristics of coal-water solid-liquid contact in gas atmosphere[J]. Journal of China Coal Society, 2022, 47(1): 323–332.
- [22] FORDHAM S. On the calculation of surface tension from measurements of pendant drops[J]. Proceedings of the Royal Society of London Series A Mathematical and Physical Sciences, 1948, 194(1036): 1–16.
- [23] 岳基伟,王辰,石必明,等.瓦斯氛围下煤-水界面润湿特性及其影响机制[J].煤炭学报,2024,49(10): 4325–4335.
YUE Jiwei, WANG Chen, SHI Biming, et al. Wetting characteristics of coal and water interface under gas atmosphere and its influencing mechanism[J]. Journal of China Coal Society, 2024, 49(10): 4325–4335.
- [24] 朱定一,戴品强,罗晓斌,等.润湿性表征体系及液固界面张力计算的新方法(I)[J].科学技术与工程,2007,7(13): 3057–3062.
ZHU Dingyi, DAI Pinqiang, LUO Xiaobin, et al. Novel characterization of wetting properties and the calculation of liquid-solid interface tension(I)[J]. Science Technology and Engineering, 2007, 7(13): 3057–3062.
- [25] WENDER I. Catalytic synthesis of chemicals from coal[J]. Catalysis Reviews, 1976, 14(1): 97–129.
- [26] 张江石,贾宏福,任晓峰,等.C₁₂H₂₅-(HG)亲水基团对无烟煤润湿影响的实验和分子模拟[J/OL].煤炭学报,1–12[2024–04–30]. <https://doi.org/10.13225/j.cnki.jccs.2023.0590>.
ZHANG Jiangshi, JIA Hongfu, REN Xiaofeng, et al. Effect of C₁₂H₂₅-(HG) hydrophilic group on the wetting of anthracite: experimental and molecular simulation[J/OL]. Journal of China Coal Society, 1–12[2024–04–30]. <https://doi.org/10.13225/j.cnki.jccs.2023.0590>.
- [27] YUE J W, MA Y K, WANG Z F, et al. Infiltration characteristics of surfactant solution in non gas-bearing coal and its influence mechanism[J]. Journal of Molecular Liquids, 2024, 397: 124116.