۵
فراخوان هفدهمین کنگره پیشگامان پیشرفت
فناوری‌های نوظهور و آینده پیشرفت ایران
(چالش ها، فرصت ها، راهکارها)
مهلت دریافت آثار و ایده‌های نوآورانه:
۱۵ بهمن ۱۴۰۴ و زمان برگزاری: بهار ۱۴۰۵

بررسی جنبشی جذب رقابتی آب و گاز در فرآیند ترشوندگی زغال‌سنگ گازدار با رویکرد آزمایشگاهی–مولکولی

محمد امین زارعی درمیان[1]

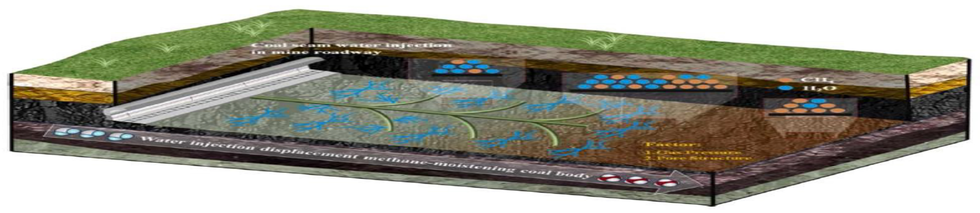
۱-کارشناس ارشد مهندسی معدن دانشگاه بیرجند، Aminz4811@yahoo.com

چکیده

حوادث ناشی از گاز و گرد و غبار، از مهم‌ترین عوامل تهدید کننده ایمنی در معادن زغال‌سنگ به شمار می‌روند. تزریق آب به لایه‌های زغال‌سنگ، یکی از روش‌های رایج برای کاهش خطر فوران گاز و کنترل گرد و غبار است، که از طریق جابجایی گاز جذب شده و بهبود ویژگی‌های ترشوندگی زغال‌سنگ عمل می‌کند. با این حال، سازوکارهای دینامیکی حاکم بر این فرآیند، به دلیل وجود برهم‌کنش‌های پیچیده سه فاز گاز–مایع–جامد، هنوز به‌طور کامل شناخته نشده‌اند. در این مقاله، به‌منظور تبیین رفتار جذب رقابتی آب و گاز در حین ترشوندگی و ارتقای کارایی جابجایی گاز، یک سامانه آزمایشگاهی اختصاصی برای بررسی ترشوندگی زغال‌سنگ حاوی گاز، طراحی و توسعه داده شد. با تلفیق نتایج آزمایش‌های تجربی و شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، رفتار جذب رقابتی و پویای مولکول‌های آب و گاز بر سطح ماتریس زغال‌سنگ مورد تحلیل قرار گرفت. نتایج تجربی نشان داد که، افزایش فشار گاز، موجب تجمع آن در فضای منفذی شده و با محدود کردن نفوذ آب، میزان رطوبت تعادلی زغال‌سنگ را حدود ۵۰ درصد کاهش می‌دهد. نتایج شبیه‌سازی‌های مولکولی نیز بیانگر آن است که با افزایش فشار گاز، ظرفیت جذب آب در زغال‌سنگ به‌تدریج به حالت اشباع نزدیک می‌شود.

مقدمه

منابع زغال سنگ، به عنوان ستون اصلی سیستم انرژی جهانی، مدت‌هاست که نقش غیرقابل جایگزینی در تولید صنعتی و تأمین انرژی ایفا کرده‌اند. با این حال، استخراج زغال‌سنگ، اغلب با خطراتی مانند فوران گاز و انفجار گرد و غبار همراه است که تهدیدات جدی برای ایمنی معادن ایجاد می‌کند. در میان فناوری‌های پیشگیری موجود، تزریق آب در لایه‌های زغال سنگ به طور گسترده، به عنوان اقتصادی‌ترین و مؤثرترین رویکرد برای فرونشانی پیشگیرانه گرد و غبار و کاهش فوران گاز در نظر گرفته می‌شود و بنابراین به طور گسترده در معادن زغال سنگ اجرا شده است. در طول تزریق آب به لایه‌های زغال‌سنگ حاوی گاز، فعل و انفعالات پیچیده چند فازی بین آب و گاز در ماتریس زغال‌سنگ ایجاد می‌شود. رفتار جذب-واجذب متان در منافذ زغال‌سنگ، نه تنها ساختار منافذ را تغییر می‌دهد، بلکه از طریق اثرات کشش سطحی گاز-مایع، بر مسیرهای انتشار و ویژگی‌های خیس شدن آب نیز تأثیر می‌گذارد. در نتیجه، بررسی سیستماتیک رفتار ترشوندگی زغال‌سنگ، تحت شرایط مختلف ذخیره‌سازی گاز و برهمکنش‌های سطحی بین آب، گاز و زغال‌سنگ برای افزایش راندمان تزریق آب لایه زغال‌سنگ و تضمین عملیات استخراج ایمن‌تر، از اهمیت بالایی برخوردار است. جذب گاز روی سطوح زغال‌سنگ، به طور قابل توجهی ترشوندگی آنها را تغییر می‌دهد و مطالعات متعددی تلاش کرده‌اند تا این رفتار را توصیف کنند. همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، فرآیندهای تزریق آب و ترشوندگی در لایه‌های زغال‌سنگ حاوی متان، تحت تأثیر عوامل متعددی، از جمله جذب رقابتی بین متان و آب روی سطح زغال‌سنگ و ساختارهای منافذ پیچیده ماتریس زغال‌سنگ قرار دارند. برای روشن شدن رفتار ترشوندگی زغال‌سنگ حاوی گاز و کشف مکانیسم‌های میکروسکوپی حاکم بر جذب رقابتی گاز-مایع، این مطالعه، ابتدا از یک دستگاه آزمایشگاهی گاز-مایع توسعه یافته برای بررسی برهمکنش‌های آب-گاز-زغال‌سنگ تحت فشارهای مختلف گاز و ساختارهای منافذ استفاده کرد. ویژگی‌های ترشوندگی از چندین منظر، از جمله درجه ترشوندگی و زمان ترشوندگی، مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفتند. علاوه بر این، بر اساس ساختار ماکرومولکولی زغال‌سنگ، یک مدل جعبه‌ای سلول آمورف (AC) در Materials Studio 2019 با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی ساخته شد، که در آن مساحت سطح ویژه و پارامترهای ساختار منافذ به‌دست آمده از آزمایش‌های جذب N_2 گنجانده شد. در نهایت، مکانیسم میکروسکوپی خیس شدن آب در زغال‌سنگ حاوی گاز، از طریق تجزیه و تحلیل دینامیک مولکولی مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. این نتایج، مکانیسم جابجایی گاز ناشی از نفوذ آب در لایه‌های زغال‌سنگ حاوی گاز را نشان می‌دهد و راهنمایی‌های نظری برای بهبود کارایی تزریق آب لایه‌های زغال‌سنگ ارائه می‌کند. شکل ۱ نمودار شماتیک تزریق آب به درون یک لایه زغال‌سنگ حاوی گاز را نشان می‌دهد.



شکل ۱: نمودار شماتیک تزریق آب به درون یک لایه زغال‌سنگ حاوی گاز

روش تحقیق

آماده‌سازی نمونه زغال‌سنگ

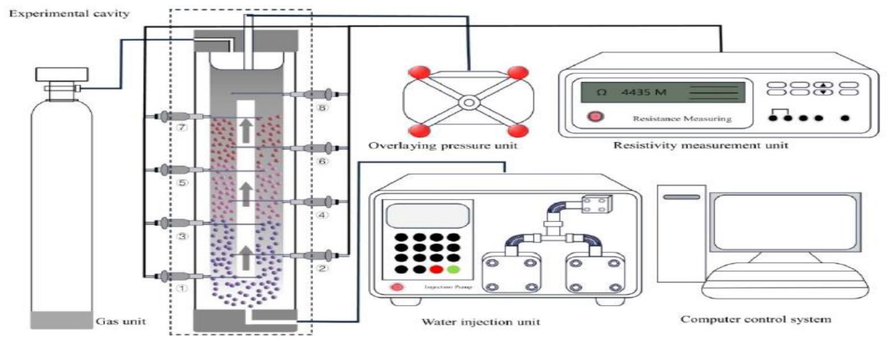
نمونه‌های زغال‌سنگ بلوکی جمع‌آوری شده، ابتدا با استفاده از یک پودرکننده چند منظوره به پودر تبدیل شدند و متعاقباً از طریق الک‌های مش استاندارد الک شدند، تا نمونه‌هایی با اندازه ذرات مختلف به دست آیند. تجزیه و تحلیل تقریبی روی نمونه‌های آماده شده انجام شد و نتایج در جدول ۱ خلاصه شده است. برای اطمینان از ساختار منافذ نماینده در طول آزمایش‌های مرطوب‌سازی با آب و بهبود دقت اندازه‌گیری، نمونه‌های زغال‌سنگ، به سه محدوده اندازه ذرات ۶۰-۲۰ مش، ۱۰۰-۶۰ مش و ۱۴۰-۱۰۰ مش طبقه‌بندی شدند. در نهایت، پودرهای زغال‌سنگ به مدت ۲۴ ساعت در دمای ۶۰ درجه سانتیگراد خشک شدند و برای آزمایش‌های بعدی در کیسه‌های بسته‌بندی شده با خلاء نگهداری شدند.

جدول ۱: آنالیز تقریبی نمونه زغال‌سنگ آزمایشی (تحلیل تقریبی (٪)).

نمونه زغال سنگ	M_{ad}	A_d	V_{daf}	FC_{daf}
LL	۰.۸۹	۴.۰۳	۳۶.۵۲	۵۸.۵۶

M_{ad}، میزان رطوبت؛ A_d، میزان خاکستر؛ V_{daf}، میزان مواد فرار؛ FC_{daf}، کربن ثابت.

دستگاه آزمایشی، شامل یک دستگاه خودساخته بود که به‌طور خاص برای مطالعه رفتار مرطوب‌سازی زغال‌سنگ حاوی گاز طراحی شده بود. این دستگاه، امکان تزریق آب با فشار ثابت و جریان ثابت، جذب گاز کنترل شده و اندازه‌گیری درجای محتوای آب از طریق الکترودهای تعبیه شده را فراهم می‌کند. با استفاده از این تجهیزات، آزمایش‌های مرطوب‌سازی بر روی نمونه‌های زغال‌سنگ، تحت سه شرایط فشار گاز ۰.۳ مگاپاسکال، ۰.۷۴ مگاپاسکال و ۱.۲ مگاپاسکال انجام شد. هشت الکترود به‌صورت عمودی از پایین تا بالای محفظه نمونه زغال‌سنگ تعبیه شدند. با این حال، فقط الکترودهای ۲، ۴، ۶ و ۸ برای تجزیه و تحلیل استفاده شدند و به ترتیب با شماره ۱، شماره ۲، شماره ۳ و شماره ۴ مشخص شده‌اند. تغییرات مقاومت ویژه اندازه‌گیری شده در محل هر الکترود برای محاسبه نرخ تغییر مقاومت محلی استفاده شد، که از آن ارتفاع جبهه ترشوندگی و میزان رطوبت نمونه زغال‌سنگ تعیین گردید. دقت کنترل فشار تجربی ۰.۱٪ ± بود. نمودار شماتیک سیستم، در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل ۲: نمودار شماتیک دستگاه آزمایش برای مرطوب‌سازی بدنه زغال‌سنگ حاوی گاز

نتایج و بحث

در حال حاضر، روش‌های تجربی متنوعی در سراسر جهان برای ارزیابی ترشوندگی زغال‌سنگ، از جمله روش قطره، روش رسوب‌گذاری، جذب خودبه‌خودی رو به جلو و معکوس و اندازه‌گیری زاویه تماس استفاده می‌شود. برای بررسی بیشتر چگونگی تغییر ویژگی‌های ترشوندگی زغال‌سنگ تحت اتمسفرهای گازی مختلف، تیم تحقیقاتی، یک دستگاه آزمایشی سفارشی را که به‌طور خاص برای آزمایش ترشوندگی زغال‌سنگ حاوی گاز طراحی شده است، توسعه داد. این سیستم، امکان نظارت بر ارتفاع مهاجرت مایع، تغییرات وابسته به زمان در رفتار ترشوندگی و تکامل مقاومت ویژه را تحت فشارهای گاز کنترل‌شده و اندازه ذرات فراهم می‌کند. با تنظیم فشار گاز و اندازه ذرات، این آزمایش، ساختارهای مختلف منافذ تشکیل‌شده، از طریق بسته‌بندی ذرات را شبیه‌سازی می‌کند. در این مطالعه، ترشوندگی زغال‌سنگ، تحت فشارهای مختلف متان و ساختارهای منافذ، از طریق آزمایش‌های آزمایشگاهی و شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی بررسی شد. تجزیه و تحلیل ترکیبی ماکرو-میکرو، مکانیسم‌های حاکم بر تزریق آب در لایه‌های زغال‌سنگ حاوی گاز را روشن می‌کند. نتایج اصلی به شرح زیر است:

(۱) آزمایش‌های جذب نیتروژن نشان داد که، حجم منافذ در محدوده ۰ تا ۲ نانومتر از تقریباً ۰ برای نمونه زغال‌سنگ ۲۰ تا ۶۰ مش به 1.46×10^{-4} تا 1.46×10^{-4} $cm^3/g{\cdot}nm$ برای نمونه زغال‌سنگ ۱۰۰ تا ۱۴۰ مش افزایش یافته است. در محدوده ۲ تا ۵۰ نانومتر، حجم منافذ از 3.29×10^{-5} به 1.75×10^{-5} $cm^3/g{\cdot}nm$ در همان محدوده اندازه ذرات تغییر یافته است. سطح ویژه نیز به طور مشابه از ۰.۲۴۶۷ متر مربع بر گرم (۲۰-۶۰ مش) به ۰.۵۸۴۸ متر مربع بر گرم (۱۰۰-۱۴۰ مش) افزایش یافت. این نتایج، نشان می‌دهد که تعداد مش‌های بزرگتر، تشکیل میکروپورها و مزوپورهای بیشتر را در طول تراکم ذرات افزایش می‌دهد.

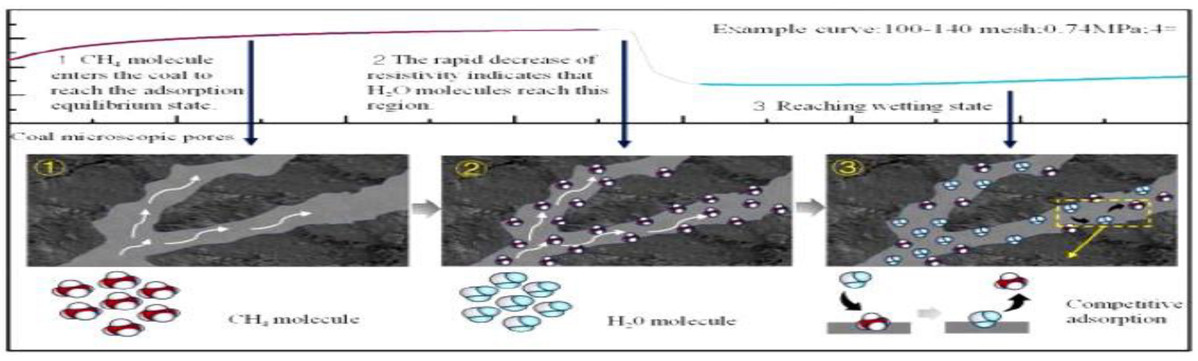
(۲) با افزایش فشار، متان، به طور فزاینده‌ای در منافذ زغال‌سنگ تجمع می‌یابد، مسیرهای آشام را باریک می‌کند و مانع مهاجرت آب می‌شود. اثربخشی ترشوندگی- مویرگی تحت فشار بالا، به طور قابل توجهی کاهش می‌یابد. برعکس، در لایه‌های زغال‌سنگ کم فشار، تزریق آب به طور قابل توجهی ترشوندگی زغال‌سنگ حاوی گاز را افزایش می‌دهد.

(۳) با افزایش فشار، مولکول‌های متان و آب، جذب رقابتی قابل توجهی را نشان می‌دهند. متان به فاز آزاد دفع می‌شود و هنگامی که جذب آب به اشباع می‌رسد، سیستم به یک تعادل پویای گاز-مایع دست می‌یابد. گرادیان‌های فشار متان، مهاجرت بیرونی مولکول‌های آب از داخل سلول ماکرومولکولی زغال‌سنگ به سمت سطح بیرونی و نفوذپذیری فاز آب را کاهش می‌دهند.

(۴) در شرایط فشار پایین، مولکول‌های فاز جذب‌شده‌ی محدوده و مولکول‌های فاز آزاد، چرخه‌های جذب-واجذب رقابتی مکرری را متحمل می‌شوند، که باعث ایجاد ارتعاشات مولکولی با دامنه‌ی بزرگ می‌شود. این امر، منجر به جابجایی مربع میانگین بالا و ضرایب انتشار بالا می‌گردد. با این حال، در شرایط فشار بالا، متان دفع شده در گلوگاه‌های منافذ تجمع می‌یابد، تا یک مانع دینامیکی تشکیل دهد و محدودیت‌های هندسی را اعمال کند که مسیرهای انتشار مؤثر برای مولکول‌های آب را کوتاه کرده و تحرک آنها را به طور قابل توجهی کاهش می‌دهد.

پیشنهادها

معادن زغال سنگ پروده طبس، به‌عنوان یکی از مهم‌ترین مخازن زغال‌سنگ گازدار ایران، به دلیل ساختار ریزحفره‌ای و محتوای گاز قابل توجه، بستر مناسبی برای مطالعه پدیده ترشوندگی و جذب رقابتی آب و گاز محسوب می‌شوند. بررسی جنبشی جذب رقابتی در این زغال‌سنگ‌ها نشان می‌دهد که، برهم‌کنش هم‌زمان مولکول‌های آب و گاز بر سطح و درون ماتریس زغال‌سنگ، نقش تعیین‌کننده‌ای در تغییر ترشوندگی، نفوذپذیری و رهایش گاز دارد. رویکرد آزمایشگاهی-مولکولی، امکان درک دقیق‌تر مکانیزم‌های حاکم بر این فرآیندها را فراهم کرده و می‌تواند در بهینه‌سازی تولید گاز زغال‌سنگی و مدیریت تزریق سیالات در معادن زغال‌سنگ پروده طبس مؤثر باشد. زغال‌سنگ گازدار پروده طبس، به دلیل رتبه زغالی نسبتاً بالا، مقدار قابل‌توجه مواد فرار و توسعه‌یافتگی شبکه ریزحفرات و مزوحفرات، رفتار پیچیده‌ای در برابر جذب هم‌زمان آب و گاز از خود نشان می‌دهد. در این زغال‌سنگ‌ها، حضور گروه‌های عاملی اکسیژنه بر سطح ماتریس زغالی، باعث افزایش تمایل به ترشوندگی آبی شده و در عین حال، جذب فیزیکی گازهایی مانند متان در ریزحفرات را تحت تأثیر قرار می‌دهد. بررسی جنبشی جذب رقابتی آب و گاز، نشان می‌دهد که، سرعت و مکانیسم جذب هر فاز، به شرایط فشار، دما و میزان اشباع اولیه وابسته بوده و می‌تواند منجر به جابه‌جایی تدریجی گاز از حفرات در اثر نفوذ آب شود. به‌کارگیری رویکرد ترکیبی آزمایشگاهی–مولکولی در معادن زغال‌سنگ پروده طبس، این امکان را فراهم می‌کند تا نتایج آزمایش‌های ماکروسکوپی جذب و ترشوندگی با شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و مدل‌های جنبشی در مقیاس نانو تفسیر شوند. این هم‌افزایی، به شناسایی مسیرهای غالب انتقال جرم، انرژی‌های جذب و تغییرات ترشوندگی در سطح زغال‌سنگ، کمک کرده و می‌تواند مبنای علمی مناسبی برای پیش‌بینی رفتار مخزن، افزایش بازیافت گاز زغال‌سنگی (CBM) و طراحی سناریوهای بهینه تزریق آب یا گاز در معادن زغال‌سنگ پروده طبس فراهم آورد.



شکل ۵: منحنی حاشیه‌نویسی‌شده‌ی نرخ تغییر مقاومت در طول فرآیند ترشوندگی زغال‌سنگ

منابع

[1] L. Yuan. (2024), Progress and Advancements of coal mine gas control and management for Safe Mining in China, Journal of Industrial Safety, 1 (1), Article 100005.

[2] W. Jiang, Y. Sun. (2023), Which is the more important factor of carbon emission, coal consumption or industrial structure? Energy Policy, 176, Article 113508.

[3] G. Wang, X. Chen, W. Cheng, et al. (2025), Research progress on seepage and wetting mechanism of water injection [J]. Journal of Shandong University of Science and Technology (Natural Science), 44 (01), pp. 1-17.

[4] X. Wu, C. Zhai, Y. Zheng, et al. (2023), The variations and mechanisms of coal wettability affected by fracturing fluids with different concentrations of Ca^{2+} during fracturing[J] Applied Surface Science, 636, Article 157830.

[5] J. Du, S. Bian, L. Lin, et al. (2022), Influence of changes in soluble organie matter in coal on its surface hydrophobicity[J]. Journal of Shandong University of Science and Technology (Natural Science), 41 (06), pp. 50-60.

[6] H. Zheng, S. Shi, B. Jiang, et al. (2022), Research on coal dust wettability identification based on GA–BP model[J] International Journal of Environmental Research and Public Health, 20 (1), p. 624.

[7] A. Drew, W. Jody, T. Margaret. (2020), A new era of coal workers' pneumoconiosis: decades in mines may not be required[J] The Lancet, 395 (10234), Article e82.

[8] B. Yu, Q. Huang, H. Liu, et al. (2025), Experimental study on the influence mechanism of injection pressure on water seepage and imbibition in coal pores[J] Journal of Industrial Safety.

[9] H. Yang, W. Cheng, Z. Liu, et al. (2020), Study on the dynamic evolution law of the effective stress in the coal seam water infusion process based on fractal theory[J] Fractals, 28 (05), p. 2050086.

[10] L. Si, Y. Xi, J. Wei, et al. (2022), The influence of inorganic salt on coal-water wetting angle and its mechanism on eliminating water blocking effect[J] Journal of Natural Gas Science and Engineering, 103, Article 104618.

[11] K. Wang, X. Ma, S. Jiang, et al. (2016), Application study on complex wetting agent for dust-proof after gas drainage by outburst seams in coal mines[J] International Journal of Mining Science and Technology, 26 (4), pp. 669-675.

[12] Zhen Liu, Lulong Jiao, He Yang, Muyao Zhu, Qingbo Gu, Zhaoyun Zhang, Guangming Li, Xiangyuan Liu. (2025), Study on the competitive adsorption kinetics during water wetting in gas bearing coal, Journal of Industrial Safety, Available online 9.