

硅铝比对 $\text{CaO-SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$ 熔体微观结构的影响分析

马芳茹¹, 魏博¹, 买尔哈巴·阿不都热合曼¹, 王建江¹, 李显², 王学斌³

(1.新疆大学 煤炭清洁转化与化工过程重点实验室,新疆 乌鲁木齐 830000;2.华中科技大学 煤燃烧国家重点实验室,湖北 武汉 430074;

3.西安交通大学 能源与动力工程学院,陕西 西安 710049)

摘要:煤灰的酸碱比和硅铝比是影响煤灰特性的关键因素。在煤中加入添加剂或采用混煤等方法,改变煤灰硅铝比来调节煤灰的熔融特性,是改善煤高温转化过程中带来灰渣问题的重要手段。为了分析硅铝比变化对煤灰体系微观结构产生的影响,得出宏观性质改变的理论机理,基于第一性原理在 1 600 °C 下模拟计算了 $\text{CaO-SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$ 体系中 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 从 0.5 升至 3.1 时,径向分布函数(RDF)、平均配位数(CN)、聚合度、氧的分布等微观结构的变化规律。结果表明: $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 从 0.5 增至 3.1 时, Si-O 有稳定的四配位结构且平均键长为 1.61×10^{-10} m; Al-O 的平均键长为 1.75×10^{-10} m, Al-O 配位较为稳定,且配位数随着硅铝比的增加而降低,合成煤灰硅酸盐体系中 Si、Al 为网络形成体。随着 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 从 0.5 增至 3.1 时, Q^4 、 Q^5 逐渐减少,生成聚合度低的 Q^2 、 Q^3 ,其中 Q^4 、 Q^5 分别降低 23%、10% 左右, Q^3 、 Q^2 分别升高 14%、11% 左右。大量 $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 和 $[\text{AlO}_4]^{5-}$ 被破坏,煤灰体系的聚合度降低,无序性升高,网络结构被破坏,导致煤灰熔融性降低。随着体系硅铝比的增加, O_i 和 O_b 含量逐渐降低, O_{nb} 含量增加显著,其中, O_b 、 O_i 含量分别降低 7%、13% 左右, O_{nb} 含量升高 18% 左右。体系网络结构遭到破坏变得松散,疏松的网络结构导致体系硅酸盐网络在高温下更易塌陷和瓦解,宏观表现为煤灰的熔融温度降低,更易产生低温共熔体。

关键词:硅铝比;微观特性;熔融特性;分子动力学;聚合度

中图分类号:TQ546.4

文献标志码:A

文章编号:1006-6772(2021)04-0189-06

Influence of $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ ratio on microstructure of $\text{CaO-SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$ melt

MA Fangru¹, WEI Bo¹, MAIERHABA · Abudoureheman¹, WANG Jianjiang¹, LI Xian², WANG Xuebing³

(1.Key Laboratory of Coal Clean Conversion and Chemical Process, Xinjiang University, Urumqi 830000, China; 2.State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China; 3.School of Energy and Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710000, China)

Abstract: The acid-base ratio and Si-Al ratio of coal ash are the key factors affecting coal ash properties. Adding additives to coal or using mixed coal to adjust coal ash fusing characteristics by changing the ratio of SiO_2 to Al_2O_3 is an important means to improve the ash and slag problems in the high temperature coal conversion process. In order to analyze the influence of the change of Si-Al ratio on the microstructure of coal ash system and obtain the theoretical mechanism of the change of macroscopic properties, the radial distribution function (RDF), mean coordination number (CN), degree of polymerization, distribution of oxygen and other microstructures in $\text{CaO-SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$ system were simulated and calculated when $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ increased from 0.5 to 3.1 based on first principles at 1 600 °C. The results show that: when $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ increases from 0.5 to 3.1, Si-O has a stable four coordination structure and the average bond length is 1.61×10^{-10} m; the average bond length of Al-O is 1.75×10^{-10} m, the coordination number of Al-O is relatively stable, and the coordination number decreases with the increase of Si-Al ratio. Si and Al are network formers in the silicate system of synthetic coal ash. As $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ increases from 0.5 to 3.1, Q^4 and Q^5 decrease gradually, forming Q^2 and Q^3 with low degree of polymerization. Among them, Q^4 and

收稿日期:2021-03-27;责任编辑:张晓宁 DOI:10.13226/j.issn.1006-6772.CE21032701

基金项目:国家自然科学基金资助项目(51966017)

作者简介:马芳茹(1997—),女,新疆库尔勒人,硕士研究生,从事高温气化下煤灰微观结构模拟研究。E-mail: 2434674613@qq.com。通讯作者:魏博,副教授,从事燃烧与污染控制、燃烧设备结渣与腐蚀研究。E-mail: weiboxju@163.com

引用格式:马芳茹,魏博,买尔哈巴·阿不都热合曼,等.硅铝比对 $\text{CaO-SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$ 熔体微观结构的影响分析[J].洁净煤技术,2021,27(4):189-194.

MA Fangru, WEI Bo, MAIERHABA · Abudoureheman, et al. Influence of $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ ratio on microstructure of $\text{CaO-SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$ melt[J]. Clean Coal Technology, 2021, 27(4): 189-194.



移动阅读

Q^3 decrease by about 23% and 10% respectively and Q^3 and Q^2 increase by about 14% and 11% respectively. A large number of $[\text{SiO}_4]^{4-}$ and $[\text{AlO}_4]^{5-}$ are destroyed, the degree of polymerization is reduced, the disorder is increased, and the network structure is destroyed, resulting in the decrease of ash fusibility. With the increase of Si-Al ratio, O_t and O_b decrease gradually, and O_{nb} increases significantly. Among them, O_b and O_t decrease by about 7% and 13% respectively, and O_{nb} increases by about 18%. The network structure of the system is destroyed, and the loose network structure makes the system more prone to collapse at high temperature. The macro performance is that the melting temperature of coal ash is reduced, and it is easier to produce low-temperature eutectic.

Key words: Si/Al ratio; microscopic characteristics; melting characteristics; molecular dynamics; degree of polymerization

0 引言

煤炭作为我国不可替代的基础能源,发展和改善洁净煤技术已经成为我国研究学者的重要课题^[1]。煤气化技术是现代煤化工发展的龙头技术之一,为降低污染、实现能源可持续发展提供了重要支持^[2-3]。煤灰成分复杂、元素多变,一般分为 SiO_2 、 Al_2O_3 、 TiO_2 等酸性成分和 CaO 、 MgO 、 Na_2O 、 K_2O 等碱性成分,各成分含量直接决定了煤灰的熔融特性和黏温特性^[4]。煤灰的酸碱比和硅铝比是影响煤灰特性的关键因素^[5-6]。我国典型煤种的硅铝比在 0.63~3.50^[7],通过在煤中加入添加剂或采用混煤等方法,改变煤灰硅铝比来调节煤灰的熔融特性,是改善煤高温转化过程中带来灰渣问题的重要手段^[8]。刘峰等^[9]对比分析了不同硅铝比下的新疆气化煤、山东枣庄煤、陕蒙气化煤 3 种典型煤种,认为硅铝比在 2.5 左右的煤渣流动特性和黏温特性较好,在一定程度上保护气化炉耐火砖。孟莹等^[10]研究了硅铝比对煤灰热膨胀性的影响,研究表明硅铝比高的煤灰有较明显的膨胀性,灰渣表面气孔大。臧卓异^[7]从熔融矿物质角度研究不同硅铝比下的碱性氧化物对煤灰熔融特性的影响,发现随着硅铝比增大,碱性氧化物对煤灰熔融特征温度的改善效果更加明显。Liu 等^[11]采用 X 射线衍射 (XRD) 和扫描电子显微镜 (SEM) 研究了合成的煤灰体系并分析煤灰中熔融颗粒微观结构、矿物组成、形貌等变化,证明煤灰的灰熔融温度随硅铝比的增加而降低。但上述研究多从宏观角度分析硅铝比的影响,从体系聚合度、氧的分布等方向的理论研究报道较少,缺乏微观结构对宏观性质改变的理论机理。

第一性原理 (First Principle) 是从量子力学理论出发的计算方法,根据原子核和电子相互作用的原理及其基本运动规律求解薛定谔方程,进而得到计算物质的基态性质^[12]。分子动力学 (Molecular dynamics) 是模拟体系的动力学演化过程,给出微量与宏观可观测量之间的关系^[13]。模拟成功的关键是体系势函数,可通过第一性原理计算^[14]。“第一

性原理分子动力学”在煤灰等硅酸盐体系已有应用,得出体系微观结构和宏观量之间关系的准确性已被验证^[15-16]。

为了能够具体分析硅铝比的变化对煤灰体系微观结构的影响,得出宏观性质改变的理论机理,本文基于第一性原理,采用分子动力学模拟方法,在 1 600 °C 下研究由 Si、Al、Ca 所组成的 $\text{CaO}-\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$ 三元体系^[17],详细分析了硅铝比从 0.5 升至 3.1 时体系径向分布函数 (RDF)、平均配位数 (CN)、平均键长、聚合度、氧的分布等微观结构的变化规律,从微观结构解释宏观性质的变化,以期通过改变煤灰硅铝比调节煤灰熔融特性提供理论参考。

1 计算方法

1.1 势函数确定

模拟体系为 CaO 、 SiO_2 、 Al_2O_3 , 在 1 600 °C、0.1 MPa 下研究 3 种氧化物制备的合成煤灰在熔融状态下的微观结构。保证体系 CaO 、 SiO_2 与 Al_2O_3 总和不变,将硅铝比 (SiO_2 与 Al_2O_3 的摩尔比) 由 0.5 升至 3.1,模拟体系离子数保持在 4 000 左右,初始构象为随机构象,体系密度采用经验公式计算^[18],具体体系粒子数及密度见表 1。

表 1 体系粒子数分布

Table 1 Particle number distribution of the system

Si/Al	粒子数				密度/ ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	边长/nm
	Ca	Si	Al	O		
0.5	471	235	941	2 353	2.764	3.760
0.8	490	327	816	2 367	2.769	3.762
1.1	505	396	721	2 378	2.768	3.763
1.5	519	468	623	2 390	2.760	3.771
1.9	531	522	549	2 398	2.751	3.775
2.3	540	564	491	2 405	2.739	3.781
2.7	547	599	444	2 410	2.728	3.788
3.1	553	627	405	2 415	2.717	3.793

势函数的选取直接影响体系模拟结果的正确性,对于硅酸盐体系,较常见的是 Born-Mayer-

Huggins (BMH) 双体势函数, 其正确性已被验证^[19-20]。由于 BMH 势参数是离子型两体间势, 模拟过程中体系应为熔融态, 使体系被视为完全离子溶液, 因此模拟体系温度和组分通过 Factsage 相图选取。BMH 势函数的形式^[20]为

$$U(r_{ij}) = \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + A_{ij} \exp(-B_{ij} r_{ij}) - \frac{C_{ij}}{r^6}, \quad (1)$$

其中, $U(r_{ij})$ 为粒子 i, j 的原子间势; r_{ij} 为粒子 i, j 之间的距离, m; q_i 和 q_j 为粒子 i, j 的有效电荷, C; A_{ij} 和 B_{ij} 为粒子 i, j 之间的排斥常量; C_{ij} 为范德华力常量; r 为模拟盒子边长, nm。不同粒子与氧离子间势能参数见表 2^[21]。

表 2 BMH 势函数离子间势能

Table 2 BMH potential parameters of melt ion pairs

Atom 1	Atom 2	A_{ij}/eV	$B_{ij}/10^{10} \text{ m}$	$C_{ij}/(\text{eV} \cdot 10^{-60})$
Ca	O	717 827.00	6.06	8.67
Si	O	62 794.37	6.06	0
Al	O	86 057.58	6.06	0
O	O	1 497 049.00	5.88	17.34

模拟过程中采用 NVT 系综, 使用 Parrinello-Rahman 方法^[22]进行温度控制、Nosé 方法^[23]进行压力控制, 对于长程库仑力的计算采用 Ewald 求和方法。在 4 000 K 下运行 40 000 步, 使体系中原子充分混合以消除初始分布状态所带来的应力, 随后运行 64 000 步使温度降至 1 873 K, 最后在 1 873 K 下驰豫 52 000 步使体系达到平衡状态。在平衡状态下得到体系各粒子空间坐标, 通过对坐标的分析得出体系的微观结构特征。

1.2 径向分布函数和平均配位数

径向分布函数 (Radial distribution function, RDF) 的物理意义为在某一个粒子距离为 $r \sim \Delta r$ 的另一种粒子的平均数量, 第 1 峰位横坐标反映 2 个粒子之间的平均键长, 从而得出粒子间成键的变化趋势, 计算公式^[24]如下:

$$g_{ij}(r) = \frac{V}{N_i N_j} \sum \frac{\langle n_{ij}(r) \rangle}{4\pi r^2 \Delta r}, \quad (2)$$

其中, $g_{ij}(r)$ 为粒子 i, j 之间的 RDF; $n_{ij}(r)$ 为以任意一个 i 粒子为中心, 在与其距离为 $r \sim \Delta r$ 的 j 粒子数量; N_i, N_j 为粒子 i, j 的个数; V 为体系总体积, m³。平均配位数 (Coordination number function, CN) 直接反映体系的结构变化, 是衡量熔体结构的重要指标。CN 通过对 RDF 的第 1 峰谷位进行积分计算得出, 公式^[25]如下:

$$N_{ij}(r) = 4\pi x_j \int_0^r g_{ij}(r) r^2 dr, \quad (3)$$

式中, $N_{ij}(r)$ 为粒子 i, j 间的平均配位数; x_j 为粒子 j 的平均数密度。

2 结果与分析

2.1 径向分布函数和平均配位数

为了验证模拟结果的准确性, 以文献中常见 SiO₂/Al₂O₃ = 1.5 时的计算结果为例, 在 1 600 °C 下得出各粒子之间的 RDF 如图 1(a) 所示, 第 1 峰位对应的横坐标即为各粒子间的平均键长, Si—O、Al—O、Ca—O 和 O—O 的平均键长分别为 1.61×10^{-10} 、 1.75×10^{-10} 、 2.32×10^{-10} 、 2.62×10^{-10} m, 与文献^[26-27]基本一致。图 1(b) 为各粒子间的 CN, 其中曲线斜率趋于 0 时的平滑状态, 表示该粒子间存在较稳定的配位结构, 对应的纵坐标即为粒子间的平均配位数^[17], 可以看出, Si—O、Al—O 存在稳定的配位结构, 其他各粒子间配位数不稳定, 说明在煤灰体系中 Si、Al 为网络形成体, Si—O、Al—O 构成了煤灰的基本网络结构^[18]。Si—O、Al—O 配位数分别为 4.08 和 4.32, 与文献^[28]基本一致, 验证了模拟结果的准确性。

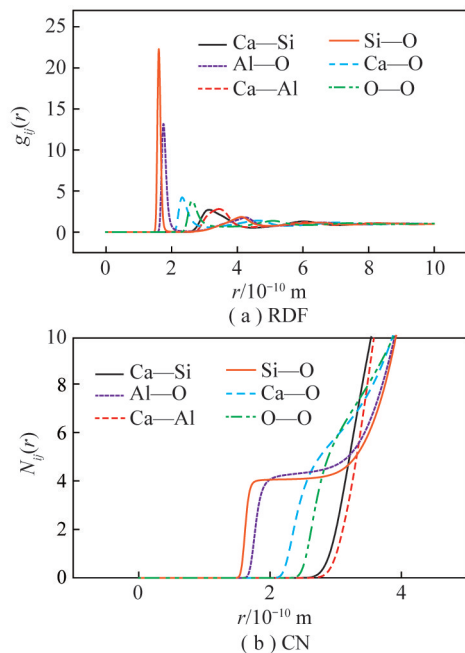


图 1 SiO₂/Al₂O₃ = 1.5 时各粒子间 RDF 和 CN

Fig.1 RDF and CN between particles when SiO₂/Al₂O₃ is 1.5

2.1.1 径向分布函数

1 600 °C 下 SiO₂/Al₂O₃ 由 0.5 升至 3.1 时, Si—O 和 Al—O 的 RDF 如图 2 所示。由图 2(a) 可以看出, Si—O 间 RDF 第 1 峰位不随 SiO₂/Al₂O₃ 的增大而变化, 均保持在 1.61×10^{-10} m, 证明体系中 Si—O 较稳定, 且平均键长为 1.61×10^{-10} m。但峰尖逐渐降低, 第 1 峰位越尖锐, 表明 Si 和 O 的相对距离在

该位置存在数量多且较为集中,随着 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 增大,更多 Si—O 受到 Al 的影响,增加了体系的无序性。由图 2(b) 可知, Al—O 平均键长为 $1.75 \times 10^{-10} \text{ m}$, 随着 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 增大, Al—O 存在从 $1.75 \times 10^{-10} \text{ m}$ 到 $1.76 \times 10^{-10} \text{ m}$ 的迹象, 分布并不像 Si—O 规律, 表明 Al—O 没有 Si—O 稳定, Al—O 在煤灰中的结构比 Si—O 复杂。同时, Al—O 第 1 峰位也随着硅铝比的升高而降低, 体系的有序度降低, 变化趋势与 Si—O 一致。

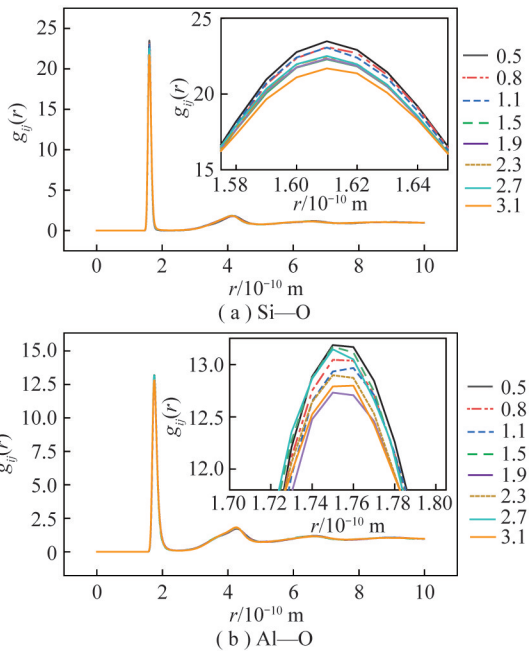


图2 不同 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 下 Si—O、Al—O 的 RDF

Fig.2 RDF between Si—O and Al—O at different $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$

2.1.2 平均配位数

0.1 MPa、1 600 °C 下 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 由 0.5 增至 3.1 时, Si—O 和 Al—O 的平均配位数如图 3 所示。在合成的煤灰体系中, 仅有网络形成体 Si、Al 出现似平台状的配位情况, 故在此仅分析 Si—O、Al—O 的配位分布。由图 3(a) 可知, 随着 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 增大, Si—O 平均配位数由 4.12 降至 4.03, Si—O 键断裂, Si^{4+} 对 O^{2-} 的吸引力降低。同时, 图中出现稳定的平台, 说明 Si—O 以 $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 四配位结构存在且数量较多、较为稳定^[18]。由图 3(b) 可以看出, 随着 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 从 0.5 增至 3.1 时, Al—O 平均配位数由 4.4 降至 4.32, 平均配位数略大于 Si—O, 且 Al—O 配位以 $[\text{AlO}_4]^{5-}$ 四配位结构为主, 有少量 Al—O 键断裂, $[\text{AlO}_4]^{5-}$ 网络结构被破坏。Al—O 的配位平台倾斜程度高于 Si—O, 说明 $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 四配位结构比 $[\text{AlO}_4]^{5-}$ 更稳定。

2.2 聚合度

硅酸盐体系中常用 Q^n 表示体系的聚合度, 其中

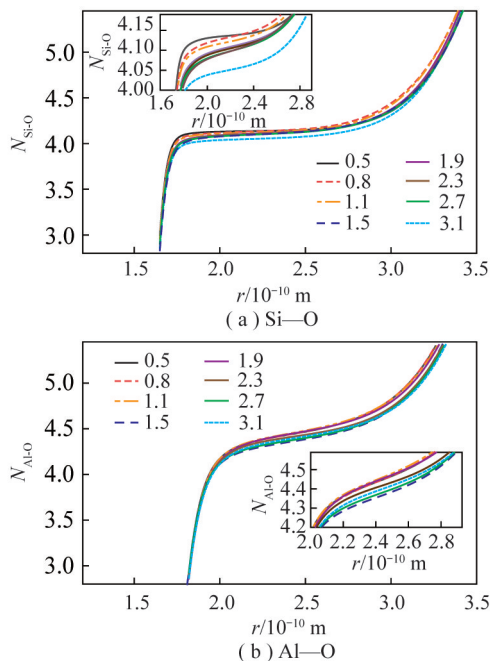


图3 不同 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 下 Si—O 和 Al—O 的 CN

Fig.3 CN between Si—O and Al—O at different $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$, n 为桥氧键的个数^[16], Q^n 可分为 Q^0 、 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 、 Q^4 、 Q^5 。图 4 为 1 600 °C 下不同 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 时 Q^n 的分布情况。随着 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 增加, 聚合度高的 Q^4 、 Q^5 逐渐降低, 生成聚合度较低的 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 , 体系逐渐解聚, 由于体系中 Q^0 含量低于 0.1%, 不予讨论。合成煤灰体系中, Si、Al 作为煤灰体系的网络形成体, 主要由 $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 和 $[\text{AlO}_4]^{5-}$ 构成煤灰的网络结构。体系聚合度高的 Q^4 从 60% 降至 37%, Q^5 由 17% 左右降到 7% 左右, 大量 $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 和 $[\text{AlO}_4]^{5-}$ 被破坏, 聚合度低的 Q^3 升高 14% 左右、 Q^2 升高 11% 左右。煤灰体系的聚合度降低, 无序性升高, 网络结构被破坏。随着硅铝比增加, 煤的硅酸盐网络结构更易解聚, 聚合度的降低使煤渣易产生低温共熔体, 表现为煤灰熔融性降低。臧卓异^[7] 研究表明, 硅铝比的增加导致煤灰聚合度降低, 高聚集的复杂网络结构变为简单结构, 使加入的其他碱性金属氧化物更易代替煤灰

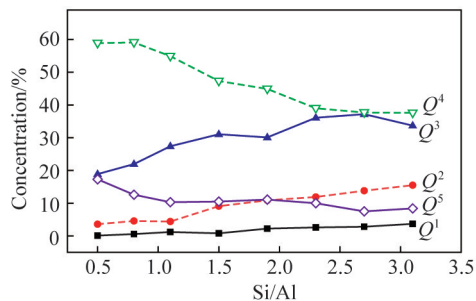


图4 不同 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 下 Q^n 分布

Fig.4 Q^n distribution under different $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$

硅酸盐中的网络形成体,因此硅铝比的增加更易改变煤灰熔融温度。

2.3 氧的分布

硅酸盐体系中,氧离子可分为三配位氧(O_t)、桥氧(O_b)、非桥氧(O_{nb})、自由氧(O_f)等4种情况^[29],桥氧以 Al—O—Al、Al—O—Si、Si—O—Si 三种形式存在,三配位氧以 O(Al, Al, Al)、O(Al, Al, Si) 两种形式存在^[30]。SiO₂/Al₂O₃从0.5增至3.1时氧的分布如图5所示。随着SiO₂/Al₂O₃增加,O_t和O_b含量降低,O_{nb}含量增加显著。体系中Al³⁺的减少导致O_t结构中的O(Al, Al, Al)、O(Al, Al, Si)结构开始分解成结构较为简单的O_b和O_{nb}。随着SiO₂/Al₂O₃增加,O_b含量从72%左右降至65%,O_t含量从15%左右降至2%,体系网络结构被破坏,解聚生成的O_{nb}含量由13%升至31%左右。随着硅铝比增加,合成煤灰体系网络结构变得松散,疏松的网络结构导致体系在高温下更易塌陷和瓦解,宏观表现为煤灰的熔融温度降低。这与Liu等^[12]研究得到的煤灰熔融温度随硅铝比增加而降低的结论一致。

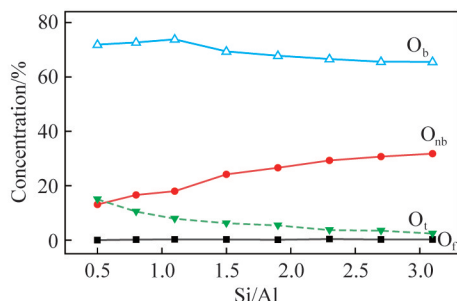


图5 不同SiO₂/Al₂O₃下氧的分布

Fig.5 Oxygen distribution under different SiO₂/Al₂O₃

3 结论

1)随着SiO₂/Al₂O₃增加,Si—O键较稳定,平均键长为1.61×10⁻¹⁰ m且以四配位为主;Al—O的平均键长为1.75×10⁻¹⁰ m,随着SiO₂/Al₂O₃增加可变化至1.76×10⁻¹⁰ m;Si—O、Al—O均有较稳定的配位结构,配位数随着SiO₂/Al₂O₃增加而略降,煤灰体系中Si、Al为网络形成体,构成了基本的网络结构。

2)SiO₂/Al₂O₃从0.5增至3.1时,合成煤灰体系中,聚合度高的Q⁴、Q⁵逐渐降低,生成聚合度较低的Q¹、Q²、Q³,其中Q⁴、Q⁵分别降低23%、10%左右,Q³、Q²分别升高14%、11%左右。大量[SiO₄]⁴⁻和[AlO₄]⁵⁻被破坏,体系逐渐解聚,有序性降低,表现为煤灰熔融性降低,更易产生低温共熔体。

3)1600℃下SiO₂/Al₂O₃从0.5增至3.1时,O_t和O_b含量逐渐降低,O_{nb}含量增加显著,其中,O_b含量降低7%左右,O_t含量降低13%左右,O_{nb}含量升高18%左右。体系网络结构遭到破坏,疏松的网络结构导致体系在高温下塌陷和瓦解,使煤灰的熔融温度降低。

参考文献(References):

- [1] 孙旭东,张博,彭苏萍.我国洁净煤技术2035发展趋势与战略对策研究[J].中国工程科学,2020,22(3):132-140.
SUN Xudong,ZHANG Bo,PENG Suping.Research on the development trend and strategic countermeasures of China's clean coal technology 2035 [J]. Engineering Sciences, 2020, 22(3): 132-140.
- [2] ISOBAEV M D,MINGBOEV S A ,RUSTAMZODA S I ,et al. Production of coal pitch based on liquid waste of coal gasification [J]. Solid Fuel Chemistry, 2021, 55(1): 37-40.
- [3] SONG G, SONG W, QI X, et al. Transformation characteristics of sodium of Zhundong coal combustion/gasification in circulating fluidized bed[J]. Energy & Fuels, 2016, 30(4): 3473-3478.
- [4] 尹洪清,王艳,王振华,等.新疆地区气化煤种调配实验及工业应用[J].煤化工,2019,47(3):51-54.
YIN Hongqing,WANG Yan,WANG Zhenhua, et al. Experimental and industrial application of gasification coal mixture in Xinjiang [J]. Coal Chemical Industry, 2019, 47(3): 51-54.
- [5] 武占强.助熔剂对煤灰熔融特性及其成分的影响[J].氮肥与合成气,2019,47(7):27-31.
WU Zhanqiang. Influence of fluxing agent on coal ash fusion characteristics and composition [J]. Nitrogen Fertilizer and Syngas, 2019, 47(7): 27-31.
- [6] 李寒旭,段锦,陶然,等.硅铝比对钙镁耦合作用降低煤灰熔融性的影响研究[J].硅酸盐通报,2018,37(3):990-995.
LI Hanxu,DUAN Jin,TAO Ran, et al. Effect of Si-Al ratio on the reduction of coal ash fusibility by coupling of calcium and magnesium [J]. Chinese Journal of Ceramics, 2018, 37(3): 990-995.
- [7] 臧卓异.不同硅铝比下碱性氧化物对煤灰熔融性改善研究[D].徐州:中国矿业大学,2017.
ZANG Zhuoyi. Improvement of coal ash fusibility by alkaline oxides with different Si-Al ratios [D]. Xuzhou: China University of Mining and Technology, 2017.
- [8] 杨国辉,李磊,尹洪清,等.煤种调配对煤灰熔融特性的影响研究[J].煤炭加工与综合利用,2017(8):67-71.
YANG Guohui,LI Lei,YIN Hongqing, et al. Study on the influence of coal type blending on coal ash fusion characteristics [J]. Coal Processing and Comprehensive Utilization, 2017(8): 67-71.
- [9] 刘峰,乔波,尹洪清,等.新疆气化煤灰渣特征及其对气化炉的适应性研究[J].煤化工,2020,48(6):66-69.
LIU Feng,QIAO Bo,YIN Hongqing, et al. Characteristics of coal ash and slag in Xinjiang gasification and its adaptability to gasifier [J]. Coal Chemical Industry, 2020, 48(6): 66-69.
- [10] 李寒旭,孟莹,董众兵,等.硅铝比对煤灰热膨胀性的影响[J].煤炭科学技术,2011,39(3):112-115.

- LI Hanxu, MENG Ying, DONG Zhongbing, et al. Effect of Si-Al ratio on thermal expansion of coal ash [J]. Coal Science and Technology, 2011, 39(3): 112-115.
- [11] LIU Bo, HE Qihui, JIANG Zihao, et al. Relationship between coal ash composition and ash fusion temperatures [J]. Fuel, 2013, 46(6): 293-300.
- [12] 张跃. 计算材料学基础[M]. 北京: 北京航空航天大学出版社, 2007.
- ZHANG Yue. Fundamentals of computational materials science [M]. Beijing: Beihang University Press, 2007.
- [13] 文玉华, 朱如曾, 周富信, 等. 分子动力学模拟的主要技术[J]. 力学进展, 2003, 33(1): 65-73.
- WEN Yuhua, ZHU Ruzeng, ZHOU Fuxin, et al. The main techniques of molecular dynamics simulation [J]. Advances in Mechanics, 2003, 33(1): 65-73.
- [14] 李震宇, 贺伟, 杨金龙. 密度泛函理论及其数值方法新进展[J]. 化学进展, 2005, 17(2): 192-202.
- LI Zhenyu, HE Wei, YANG Jinlong. Advances in density functional theory and numerical methods [J]. Progress in Chemistry, 2005, 17(2): 192-202.
- [15] WU Ting, WANG Qian, YU Chengfeng, et al. Structural and viscosity properties of CaO-SiO₂-Al₂O₃-FeO slags based on molecular dynamic simulation [J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 2016, 24(7): 23-31.
- [16] 吴永全, 尤静林, 蒋国昌. 氯化钙溶体结构的分子动力学模拟研究[J]. 无机材料学报, 2003, 18(3): 619-626.
- WU Yongquan, YOU Jinglin, JIANG Guochang. Molecular dynamics study of the structure of calcium aluminate melts [J]. Journal of Inorganic Materials, 2003, 18(3): 619-626.
- [17] 玄伟伟. 非牛顿煤灰熔渣结晶过程及动力学实验研究[D]. 北京: 清华大学, 2015.
- XUAN Weiwei. Experimental study on crystallization process of non-newtonian coal ash slag [D]. Beijing: Tsinghua University, 2015.
- [18] 吴婷. 低反应性连铸保护渣熔体的微结构特征及宏观性能研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2017.
- WU Ting. Study on microstructure characteristics and macro properties of low reactivity continuous casting protective slag melt [D]. Chongqing: Chongqing University, 2017.
- [19] FEUSTON B P, GAROFALINI S. Empirical three-body potential for vitreous silica [J]. J. chem. phys., 1988, 89(9): 5818-5824.
- [20] AL-HASNI B M, MOUNTJOY Gavin. A molecular dynamics study of the atomic structure of $x(\text{MgO})100-x(\text{SiO}_2)$ [J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 2014, 400: 33-44.
- [21] DICKS L, MCCORD T G, WESTBY T S. Coal blends having improved ash viscosity: US5364421 A [P]. 1994-05-21.
- [22] PARRINELLO M, RAHMAN A. Polymorphic transitions in single crystals: A new molecular dynamics method [J]. Journal of Applied Physics, 1998, 52(12): 7182-7190.
- [23] NOSE S. A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble [J]. Molecular Physics, 2002, 100(1): 191-198.
- [24] GUIDE A M. Molecular modeling and simulation [J]. Interdisciplinary Applied Mathematics, 2002, 26(1): 1-31.
- [25] SCHLICK T. Molecular modeling and simulation [M]. New York: Springer-Verlag, 2002: 656.
- [26] LAURENT C, DANIEL R N, GEORGES C. Structure and properties of low-silica calcium aluminosilicate glasses [J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 2000, 274(3): 110-114.
- [27] GANSTER P, BENOIT M, KOB W, et al. Structural properties of a calcium aluminosilicate glass from molecular-dynamics simulations: A finite size effects study [J]. The Journal of Chemical Physics, 2004, 120(21): 10172-10181.
- [28] CHEN Y, PAN W, JIA B, et al. Effects of the amphoteric behavior of Al₂O₃ on the structure and properties of CaO-SiO₂-Al₂O₃ melts by molecular dynamics [J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 2021, 552: 120435.
- [29] MILLS K C, HAYASHI M, WANG L. The Structure and properties of silicate slags [J]. Process Fundamentals, 2014, 1: 149-286.
- [30] XU L, WANG X, WU Y, et al. Coordination and dynamics of oxygen in calcium aluminosilicate melts [J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2006, 34(9): 1117-1123.