

УДК 539.21:622.411.33

Т.А. Василенко (д-р техн. наук, ст.науч сотр.)
А.К. Кириллов, (канд.физ.-мат. наук, ст. науч сотр.)
А.Н. Молчанов (канд.физ.-мат. наук, ст. науч сотр.)
Институт физики горных процессов НАН Украины

ОЦЕНКА КОЛИЧЕСТВА МЕТАНА, РАСТВОРЕННОГО В УГОЛЬНОМ ВЕЩЕСТВЕ

Проведен анализ данных и представлены результаты вычисления растворимости метана в угольном веществе (объемного поглощения) для набора параметров, которые наиболее правдоподобно отражают реальную ситуацию для пористой структуры каменных углей.

Ключевые слова: ископаемый уголь, метан, абсорбция, растворимость.

Имеется несколько вариантов описания растворимости твердых растворов в металлах и других сплошных средах [1, 2]. Подобный подход используется и для вычисления концентрации метана в каменном угле [3, 4]. Предполагается, что молекула метана внедряется в структуру сложной макромолекулярной твердой матрицы угольного вещества по типу твердых растворов в металлах. Такой подход позволяет объяснить высокую метаноемкость угольных пластов и решать задачи массопереноса молекул метана из объема закрытых пор к поверхности угольных образцов или к груди угольного забоя в производственных условиях.

В ряде работ [3 - 6] решались задачи массопереноса метана в каменных углях. Однако не приводятся детали вычисления растворимости метана. При решении систем уравнений этот параметр задается в значительной степени произвольно, поскольку отсутствовали достаточно надежные значения энергии связи молекул метана для углей различных стадий метаморфизма. Целью нашей работы является вычисление растворимости метана в угольном веществе для набора параметров, которые наиболее правдоподобно отражают реальную ситуацию для пористой структуры каменных углей.

Впервые детально проблема растворимости метана в углях рассмотрена в [3]. Сохраняя обозначения, принятые в [3], запишем выражение для растворимости:

$$\delta = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{h}{2\pi m_0 T} \right)^{3/2} Z^{-1} \exp\left(-\frac{E_f}{T}\right), \quad (1a)$$

где $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с - постоянная Планка; m_0 - масса молекулы (или атома) твердого раствора; T - температура, выраженная в единицах постоянной Больцмана $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К; Z - статистическая сумма; E_f - изменение энергии твердого тела при возникновении в нем примесной молекулы; Ω - объем, приходящийся на одну молекулу твердого раствора [3].

В работе [4] приведена следующая формула для растворимости:

$$\nu = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{h}{2\pi m_0 T} \right)^{3/2} \left(\frac{T_r}{T} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{|\Psi|}{T}\right), \quad (16)$$

где $T_r = \left(\frac{18}{\pi}\right)^{1/3} \frac{h^2}{4\pi^2 \cdot I}$ - «вращательная температура», которая является энер-

гией вращения молекулы, выраженная в единицах постоянной Больцмана; I – момент вращения молекулы; $|\Psi|$ - энергия связи молекулы метана с угольным веществом; Ω - объем, приходящийся на одно место, которое может быть занято одной молекулой метана (обратная метаноемкость). Величина Ω оценивается как 10^{-29} м^3 . Растворимость ν (или δ) - коэффициент пропорциональности между концентрацией метана в твердом растворе и его плотностью в объеме пор $C = \nu \cdot \rho$, т.е. выполняется закон Генри.

Согласно [2] для ненасыщенных твердых растворов связь между равновесной концентрацией C_r на границе зерна в металле и концентрацией примеси в объеме зерна, C_0 , выражается в виде равенства

$$C_r = \frac{0,33 \cdot C_0 \exp\left(\frac{W}{T}\right)}{1 + C_0 \exp\left(\frac{W}{T}\right)}, \quad (2)$$

где температура тоже выражена в энергетических единицах; W – энергия связи примесного атома с границей. Здесь концентрация выражена в единицах, отнесенных к концентрации атомов матрицы. Коэффициент 0,33 вводится из допущений, основанных на теории вероятности, и означает, что только одна треть положений в границах зерна растянута, сжата или не изменилась, т.е. искажена настолько, что является благоприятной для замещения примесными атомами определенного размера.

Преобразование (2) в предположении, что $C_r/0,33 \ll 1$, позволило связать обе величины концентрации:

$$C_0 = (C_r / 0,33) \cdot \exp\left(-\frac{W}{T}\right) \quad (3)$$

Имеется также описание связи концентрации C_g твердого раствора в окрестности газонаполненной поры в твердом теле согласно [1]. Если P_g – давление газа в поре, то

$$C_g = \frac{P_g w_0}{T} \cdot \delta, \quad (4)$$

где

$$w_0 = \left(\frac{h^2}{2\pi \cdot mT}\right)^{3/2} Z^{-1}. \quad (5)$$

Здесь обозначение те же самые, что в (1) и (2), а Z – сумма по состояниям, которая записана в [1] в виде

$$Z = \sum_n \exp(-\varepsilon_n / T) \approx \exp(-\varepsilon_0 / T), \quad (6)$$

где $\varepsilon_0 = -|\varepsilon_0|$ - основной энергетический уровень молекулы. Последний множитель в (4) выражается через энергетические и деформационные характеристики матрицы:

$$\delta = \exp \left\{ -\frac{1}{T} \left[\Psi_0 + \varepsilon + \frac{\partial \varepsilon^{el}}{\partial c} \Big|_{U_{ik}} \omega + a \cdot \varepsilon^{el} \cdot \omega \right] \right\}. \quad (7)$$

В (7) приняты следующие обозначения: $\varepsilon^{el} = \frac{1}{2} \lambda_{iklm} u_{ik} \cdot u_{lm} = \frac{1}{2} \sigma_{ik} u_{ik}$; λ_{iklm} - тензор упругих модулей для слабого раствора; σ_{ik} , u_{ik} - тензоры деформаций и смещения соответственно. Величина Ψ_0 определяется при дифференцировании термодинамических потенциалов: $\frac{\partial \Phi}{\partial c} \Big|_{\sigma_{ik}} = \frac{\partial F}{\partial c} \Big|_{U_{ik}}$.

При отсутствии деформаций в матрице Ψ_0 выражается через химический потенциал $\mu = \Psi_0 + T \cdot \ln(c)$, где c - концентрация раствора.

Константа a в (7) равна единице для раствора замещения и равна нулю, если это раствор внедрения. Второй вариант соответствует случаю объемного поглощения метана в веществе. Другие величины имеют следующий смысл: $\varepsilon = -\Omega \sigma_{el} / 3$ - «размерное» взаимодействие раствора с полем напряжений; $\partial \varepsilon^{el} / \partial c$ - «модульное» взаимодействие, связанное с изменением модуля упругости с концентрацией. Для изотропной среды

$$\frac{\partial \varepsilon^{el}}{\partial c} \Big|_{U_{ik}} = \frac{\Omega}{\omega} \tilde{\lambda}_{ik \ln} u_{ik} u_{ln} \approx \frac{dE}{dc} u_{ik} u_{ln},$$

где E - модуль Юнга; Ω - релаксационный объем решетки матрицы, $\omega = 1/n$ - объем на узел решетки, n - плотность атомов матрицы. Для слабого раствора $\Omega/\omega \approx 1$. В свою очередь концентрация примесей связана с плотностью атомов матрицы через равенства $C_m = n_m/N$ и $n = N \left(1 - \sum_m C_m \right)$, где m - номер примеси. Согласно [1] $N = N_0$ для раствора внедрения, где N_0 - количество узлов решетки.

Попробуем связать все виды записи растворимости твердого раствора. Сначала рассмотрим выражения (1а) и (1б). Согласно [7] сумма по состояниям молекулы учитывает все возможные состояния: трансляционные, вращательные, колебательные и электронные уровни энергии. Тогда статистическая сумма Z молекулы запишется в виде произведения:

$$Z = Z_{trans} Z_{rot} Z_{vib} Z_{el}, \quad (8)$$

причем индексы *trans*, *rot*, *vib*, *el* использованы для обозначения статистических сумм по поступательным, вращательным, колебательным и электронным возбуждениям соответственно, которые для двухатомной или линейной многоатомной молекулы выражаются следующим образом:

$$Z_{trans} = \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2} V, \quad (9)$$

где m – масса частицы, а V – объем, занятый газом.

$$Z_{rot} = \frac{8\pi I k_B T}{h^2 \sigma}. \quad (10)$$

Здесь I – момент инерции. Фактор симметрии σ равен единице плюс число перестановок одинаковых атомов ($\sigma = 2$ для двухатомной молекулы, содержащей одинаковые атомы и $\sigma = 1$ для двухатомной молекулы, состоящей из различных атомов).

Для вращательных степеней свободы молекулы

$$Z_{rot} = \frac{8\pi^2}{\sigma} \left(\frac{2\pi I k_B T}{h^2} \right)^{3/2}. \quad (11)$$

Формула (11) применима лишь для молекул с максимальной симметрией, когда все три главных момента инерции одинаковы.

$$Z_{vib} = \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu_{vib}}{k_B T}\right) \right]^{-1}, \quad (12)$$

где ν_{vib} – частота колебаний.

И, наконец,

$$Z_{el} = \sum_n g_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) = u \exp\left(-\frac{E_0}{k_B T}\right), \quad (13)$$

где g_n – статистический вес n -го уровня с энергией E_n , E_0 – энергия нулевого уровня (энергии основного состояния), а статистическая сумма u есть величина, равная

$$u = \sum_k g_k \exp\left(-\frac{E_k}{k_B T}\right) = g_0 + g_1 \exp\left(-\frac{E_1}{k_B T}\right) + \dots, \quad (14)$$

причем $E_k = E_k - E_0$ – энергия возбуждения иона k -го уровня, отсчитываемая от основного состояния, и g_k – статистический вес k -го уровня. Энергетический уровень с полным угловым моментом J имеет $g_k = 2J + 1$, для водородоподобных атомов $g_k = 2k^2$.

Теперь можно сделать вывод, что (1а) и (1б) имеют одно происхождение, и вторая скобка в (1а) представляет собой сумму по состояниям для вращательных уровней. Сумма по состояниям для колебаний отсутствует, т.к. величина $h\nu_{vib} / k_B T$ настолько велика, что все выражение в квадратных скобках (12) прак-

тически равно единице. Действительно при $T = 300 \text{ К}$ $k_B T = 4,14 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$. Для энергии $0,425 \text{ эВ}$ основного деформационного колебания молекулы CH_4 имеем $h\nu_{\text{vib}} = 6,8 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$, что дает отношение $h\nu_{\text{vib}} / k_B T = 16,4$.

Отношение T_r / T фактически является отношением энергии вращательной к энергии тепловой. В классической механике энергия вращения выражается через момент инерции I как $E_r = I\omega^2$, где

$$I = m \cdot r_i^2, \quad (15)$$

m – масса молекулы, r_i – так называемый радиус инерции. Последняя величина имеет следующий смысл. Так как для однородного шара $I = 0,4m \cdot R^2$, где R – радиус шара, то для получения выражения (15) необходимо положить $r_i = \sqrt{0,4R}$. Подстановка численных значений величин в (15) для молекулы метана приводит к $I = 2,8 \cdot 10^{-40} \text{ г·см}$, что сравнимо с величиной момента инерции для молекулы CH_4 , известной из справочника: $I_{\text{CH}_4} = 1,92 \cdot 10^{-40} \text{ г·см}$.

Квантовая механика дает свои выражения для энергии вращения молекул. Так в простейшем случае для двухатомной молекулы [8]

$$E_{\text{vib}} = \frac{h^2}{8\pi^2 I} J(J+1), \quad (16)$$

где $J = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ вращательные квантовые числа. Для многоатомной молекулы типа симметричного волчка, где $I_1 = I_2 \neq I_3$ имеем [8]

$$E_{\text{vib}} = hBJ(J+1) + h(A-B)K^2 + h \frac{A_1 A_2}{A} (k_1 - k_2 \frac{A}{A_1})^2, \quad (17)$$

где

$$A = \frac{h}{4\pi I_{\parallel}}; \quad B = \frac{h}{4\pi I_{\perp}}; \quad A_1 = \frac{h}{4\pi I_{\parallel}^{(1)}}; \quad A_2 = \frac{h}{4\pi I_{\parallel}^{(2)}},$$

I_{\parallel}, I_{\perp} – моменты инерции молекулы параллельно и перпендикулярно ее оси; $I_{\parallel}^{(1)}, I_{\perp}^{(2)}$ – моменты инерции вращающихся друг относительно друга частей молекулы по отношению к ее оси; J, K, k_1, k_2 – вращательные квантовые числа, принимающие значения $J = K, K+1, K+2, \dots; K = 0, 1, 2, \dots; k_1 = 0, \pm 1, \pm 2; k_2 = \pm K$.

Первые два члена в (17) относятся к вращению молекулы как целого, третий – к внутреннему вращению молекулы. Молекулу метана CH_4 можно отнести к симметричному волчку.

Попробуем оценить энергию и длину волны перехода основного состояния вращательной системы уровней молекулы метана. Пусть $E_r = h^2/8\pi^2 I = 2 \cdot 10^{-22} J = 1,25 \text{ эВ}$. Тогда $\lambda = hc / E_r = 10^{-6} \text{ м} = 1 \text{ мкм}$, т.е. это соответствует инфракрасной области спектра с частотой $\omega = 2\pi c / \lambda = 2 \cdot 10^{13} \text{ рад/с}$ (или $f = \omega/2\pi = 3 \cdot 10^{11} \text{ Гц} = 300 \text{ ТГц}$).

Отношение энергии вращения к энергии тепловых колебаний в (1а) будет равно $T_r / T = E_r / k_B T = 4,83 \cdot 10^{-2}$.

Остается выяснить смысл множителя с экспонентой, стоящей в (1), (3), (4 - 7). В каждом из этих вариантов под энергией понимают или энергию связи молекулы с поверхностью вещества или изменение энергии при внедрении примесной молекулы. Если воспользоваться самой простой формулой (3) для случая метанового раствора в угле, то можно принять для энергии связи $W = 20$ кДж/моль. При $T = 300$ К отношение $W/k_B T = 7,55$. Поэтому концентрация молекул в твердом растворе C_0 относительно их концентрации на внешней границе будет равно $C_0 / C_r \approx 1,8 \cdot 10^{-4}$, т.е. раствор достаточно слабый.

Заметим, что в формуле (3) энергия связи стоит в экспоненте со знаком «минус». Это означает, что растворимость уменьшается, если энергия связи с поверхностью будет больше при той же температуре. В другом случае, предлагаемая формула (1б) содержит энергию связи Ψ в показателе экспоненты со знаком «плюс». Поэтому тенденция к степени растворимости будет противоположная. Тем не менее, оценим величину растворимости ν согласно (1б). Если принять для $\Omega = 10^{-29}$, $\Psi/T = 7,55$, как и в предыдущем случае, $T_r / T = 4,83 \cdot 10^{-2}$, то получим достаточно разумное значение для $\nu = 1,67 \cdot 10^{-5} \exp(7,55) = 0,032$, которое существенно зависит от величины Ω .

Если исходить из формулы (1а) с учетом суммы по состояниям молекулы в виде (6) и (13), то в качестве числителя показателя в экспоненте следует принять разность $\Psi = E_0 - E_f$, где E_0 – энергия основного уровня молекулы, E_f – изменение энергии твердого тела при внедрении примеси (твердого раствора). Фактически E_f должно совпадать с выражением, стоящим в квадратных скобках (7), а при отсутствии деформаций – с величиной Ψ_0 . Попробуем определить величину Ψ с помощью (4).

Будем считать, что концентрация твердого раствора C_g выражена в относительных единицах, т.е. $C_g = n_g/N$, N – количество атомов матрицы в единице объема. Тогда (4) можно переписать следующим образом

$$C_g = C_0 N \cdot w_0 \delta \quad (18)$$

В отличие от выражений (2) и (3) через C_0 обозначена концентрация газа вне твердой матрицы $C_0 = n_0/N$, а N совпадает с $1/\Omega = 10^{29} \text{ м}^{-3}$ (т.е. $\sqrt[3]{\Omega} = 2,15 \cdot 10^{10} \text{ м}$) из (1б). Для слабого раствора такое приближение справедливо. Тогда (18) примет вид:

$$C_g / C_0 \equiv \nu = N \cdot \left(\frac{h}{2\pi \cdot mT} \right)^{3/2} \cdot \exp\left(\frac{\Psi}{T} \right) \quad (19)$$

После подстановки в правой части численных значений имеем:

$$C_g / C_0 \equiv \nu = 1,57 \cdot 10^{-3} \cdot \exp\left(\frac{\Psi}{T} \right) \quad (20)$$

Сравним (20) со значением $\nu = 0,032$, полученным из (1б) выше. Считая, что в (20) слева стоит это же значение, получим при логарифмировании этого выраже-

ния $\Psi/T = 3,0$. Тогда из $\Psi = E_0 - E_f$, принимая $E_f = 20$ кДж/моль и $T = 300$ К, получаем $E_0 = 28$ кДж/моль (если принять, что $\Psi = -(E_0 + E_f)$, то $E_0 = 12$ кДж/моль). Учитывая различие в записи (1б) и (4), (а именно в (6) не учтено произведение $(T_r/T)^{3/2}$), можно сопоставить последнее выражение с $\exp(E_0/T)$, чтобы прийти к выражению для концентрации в виде (3). Для этого приравняем оба выражения

$$(T_r/T)^{3/2} = \exp(-12/2,65) \quad (21)$$

То есть при $E_0 = 12$ кДж/моль $T_r/T = 0,045$, что хорошо согласуется с полученным выше значением при обсуждении формулы (1а). Однако чтобы в показателе было отрицательное число, необходимо, чтобы E_f превосходило значение 28 кДж/моль. Определим значение энергии E_f , характеризующей изменение энергии твердого тела при его образовании. Фактически – это изменение термодинамического потенциала Φ согласно [1] или потенциала Гиббса G , который можно понимать как полную химическую энергию системы (кристалла, жидкости и т. д.).

Будем считать, что $C_0/C_r \approx 1,8 \cdot 10^{-4}$ согласно (3). Тогда для (20) можно записать

$$C_g/C_0 \equiv \nu = 1,57 \cdot 10^{-3} \cdot \left(\frac{T_r}{T}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{-\Psi}{T}\right) = 1,8 \cdot 10^{-4} \quad (22)$$

После проведения вычислений получено значение $\Psi = -6,26$ кДж/моль. То есть в показателе стоит положительная величина. Если вновь принять $E_0 = 12$ кДж/моль, то из $\Psi = E_0 - E_f$ следует, что $E_f = 18,26$ кДж/моль. Таким образом, при значении $\Psi = -6,26$ кДж/моль формула (1а) будет удовлетворительно описывать изменение растворимости твердого раствора в угольном веществе.

Энергия связи растворенной молекулы метана в твердой матрице угольного вещества E_f по величине превосходит энергию связи этой же молекулы, адсорбированной на поверхности открытых пор. Согласно [9, 10] для углей марки Ж она равна 0,34 эВ (33,1 кДж/моль).

Если принять для метана, что объем, занимаемый каждой растворенной в твердой матрице угля молекулой равен $V \equiv \Omega = 5,2 \cdot 10^{-28}$ м³, то это соответствует такой упаковке молекул метана, при которой расстояние между их центрами равно 1 нм [10]. Реально величина Ω может быть гораздо выше этого значения. Поэтому мы приняли для вычислений три значения, близкие к данному значению Ω .

Исходными данными для вычисления растворимости метана в угольном веществе были следующие:

- 1) Расчеты проводились по формуле (1б);
- 2) Значения Ω приняты такими, чтобы обеспечить условие слабого раствора метана, когда содержание внедренных молекул близко к концентрации молекул угольного вещества, т.е. $\Omega/\omega \approx 1$;
- 3) Рассмотрены варианты для энергии связи молекулы CH_4 , которые согласуются с экспериментальными данными и обеспечивают наблюдаемую в процессе десорбции скорость эмиссии метана из угольных образцов в результате твердотельной диффузии.

На рисунках 1 и 2 представлены результаты расчетов для интервала температур (270-370) К.

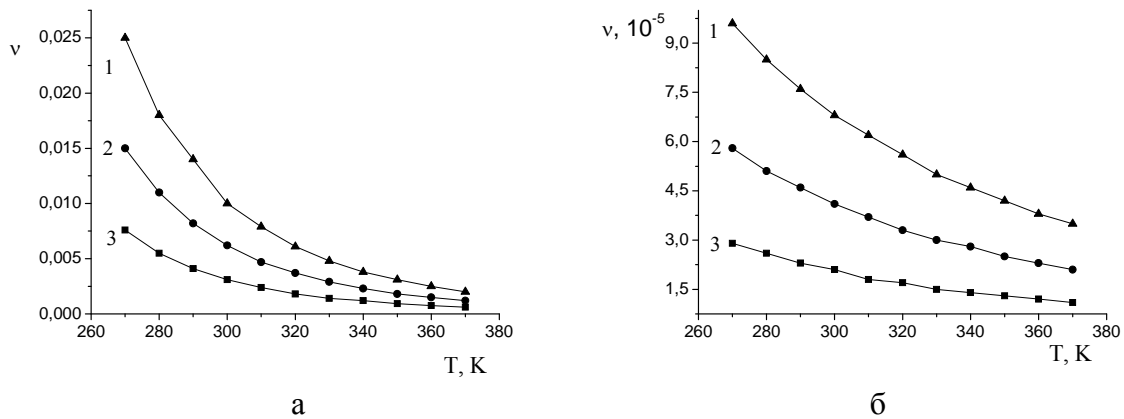


Рис. 1. Растворимость метана в зависимости от температуры. Варианты:
 (а) - $\Psi = 13$ кДж/моль, $E_f = 25$ кДж/моль; (б) - $\Psi = 0,5$ кДж/моль, $E_f = 12,5$ кДж/моль.
 1 - $\Omega = 0,3 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3$, 2 - $\Omega = 0,5 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3$, 3 - $\Omega = 10^{-29} \text{ м}^3$

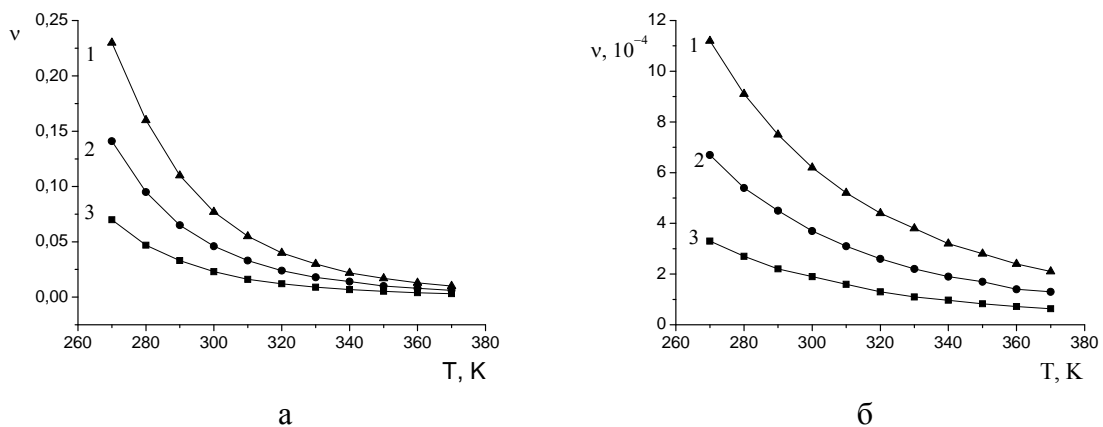


Рис. 2. Растворимость метана в зависимости от температуры. Варианты:
 (а) - $\Psi = 6$ кДж/моль, $E_f = 18$ кДж/моль; (б) - $\Psi = 18$ кДж/моль, $E_f = 30$ кДж/моль.
 1 - $\Omega = 0,3 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3$, 2 - $\Omega = 0,5 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3$, 3 - $\Omega = 10^{-29} \text{ м}^3$

Полученные значения растворимости не превосходят значений 0,3 и зависят от разности энергии связи E_f молекулы CH_4 и параметра Ψ , который характеризует способность молекулы проникать через границу газ-твердая матрица угольного вещества. При одной и той же температуре растворимость варьируется в широком интервале в зависимости от энергии связи молекул CH_4 с окружением в объеме угольного вещества.

Заключение

Результаты вычисления растворимости, представленные в нашем исследовании, находятся в согласии с имеющимися представлениями о содержании сорбированного (растворенного) метана в объеме ископаемых углей. Величина растворенного в угле флюида (метана, углекислого газа) сильно (экспоненциально) зависит от температуры и стадия метаморфизма углей. Чем выше стадия метаморфизма, тем больше энергия связи метана с угольной матрицей. Поэтому растворимость метана возрастает при переходе к антрацитам, имеющим более высокое значение энергии связи молекулы метана в объеме твердой матрицы. В то же время авторы [6] показали, что вклад объемного поглощения CH_4 бурым и каменными углями

ранних стадій метаморфізму сравним с адсорбцией на поверхности пор. Это связано с наличием развитой поверхности открытых пор, которая у этих углей может достигать больших значений. Механизм сорбции CO_2 отличается от такового для CH_4 [5]. Вклад сорбированной компоненты CO_2 заметно влияет на вид изотермы. Этот результат можно объяснить тем, что энергия связи полярной молекулы CO_2 превосходит E_f для метана [11], что дает возможность использовать метод нагнетания в угольные пласты углекислого газа под высоким давлением для повышения эффективности добычи метана [12]. Наши расчеты позволяют прогнозировать ситуации, при которых как объемная сорбция метана, так и адсорбция молекул на поверхности порового пространства могут достигать значительных величин в угольном веществе.

Список литературы

1. Черемской П.Г. Поры в твердом теле / П.Г. Черемской, В.В. Слезов, В.И. Бетехтин. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 275 с.
2. Гликман Е.Э. О связи между влиянием примесей на хладноломкость и на поверхностную энергию металлических твердых растворов / Е.Э. Гликман, Р.Э. Брувер // Физическая химия поверхностных явлений при высоких температурах. – К.: Наукова думка, 1971. – С. 251-258.
3. Алексеев А.Д. Теория абсорбции газа пористыми веществами / А.Д. Алексеев, В.В. Синолицкий // Физика и техника высоких давлений. – 1982. – Т. 12. – С. 103-106.
4. Массоперенос метана в угле, обусловленный совместной фильтрацией и диффузией / А.Д. Алексеев, Э.П. Фельдман, Т.А. Василенко и др. // Физика и техника высоких давлений. – 2004. – Т. 14. – № 3. – С. 107-118.
5. Milevska-Duda J. Absorption and adsorption of methane and carbon dioxide in coal and active carbon / J. Milevska-Duda, J. Duda, A. Nodzenski, J. Lakatos // Langmuir. – 2000. – Vol. 16. – N. 12. – P. 5458-5466.
6. Weishauptova Z. Bond forms of methane in porous system of coal II / Z. Weishauptová, J. Medek, L. Kovář // Fuel. – 2004. – Vol. 83. – N. 13. – P. 1759-1764.
7. Ленг К. Астрофизические формулы / К. Ленг. – М.: Мир, 1978. – Т. 1. – 444 с.
8. Яворский Б.М. Справочник по физике для инженеров и студентов вузов / Б.М. Яворский, А.А. Детлаф. – М.: Наука, 1965. – 716 с.
9. Alexeev A.D. Alternation of methane pressure in closed pores of fossil coals / A.D. Alexeev, E.P. Feldman, T.A. Vasilenko // Fuel. – 2000. – Vol. 79. – N. 8. – P. 939-943.
10. Алексеев А.Д. Оценка энергии связи молекул метана с угольным веществом в твердом растворе / А.Д. Алексеев, Т.А. Василенко, Э.П. Фельдман // Горный информационно-аналитический бюллетень. – 2000. – № 7. – С. 206-209.
11. Day S. Supercritical gas sorption on moist coals / S. Day, R. Sakurovs, S. Weir // Intern. J. Coal Geology. – 2008. – Vol. 74. – N. 3-4. – P. 203 – 214.
12. High-pressure sorption isotherms and sorption kinetics of CH_4 and CO_2 on coals / D. Li, Q. Liu, Ph. Weniger et al. // Fuel. – 2010. – Vol. 89. – N. 3. – P. 569-580.

Надійшла до редколегії 09.01.2012

Т.А. Василенко, А.К. Кірілов, О.М. Молчанов
ОЦІНКА КІЛЬКОСТІ МЕТАНА, РОЗЧИНЕНОГО У ВУГІЛЬНІЙ РЕЧОВИНІ

Проведено аналіз даних і представлені результати обчислення розчинності метану у вугільній речовині (об'ємного поглинання) для набору параметрів, які найбільше правдоподібно відбивають реальну ситуацію для пористої структури кам'яного вугілля.

Ключові слова: викопне вугілля, метан, абсорбція, розчинність.

T.A. Vasilenko, A.K. Kirillov, A.N. Molchanov
EVALUATION OF THE AMOUNT OF METHANE DISSOLVED IN THE COAL SUBSTANCE

The analysis of the data is carried out and the results of calculation of methane ability to dissolve (absorption) in coal substance for a set of parameters which most plausibly reflect a real situation for porous structure of fossil coals are presented.

Keywords: fossil coal, methane, absorption, solubility.