

* 国际交流与合作 *

第十届国际煤科学大会展望

李保庆* 刘振宇

(山西煤炭化学研究所煤转化国家重点实验室 太原 030001)

关键词 煤科学, 国际会议

1 会议概况

20世纪最后一届即第十届国际煤科学大会(ICCS)将于1999年9月12—17日在中国太原举行。国际煤科学大会每两年举办一次,是国际能源署主办的世界煤科学界级别最高、规模最大和最重要的学术会议。该会议由国际能源署主要成员国轮流举办,唯此次例外。我国目前虽不是国际能源署成员国,但却是世界煤炭生产和消费大国,同时由于中国科学院及山西煤炭化学研究所和煤转化国家重点实验室的积极争取,国际能源署及其成员国经过认真讨论,在1997年德国埃森举行的第九届ICCS会议上正式宣布,1999年第十届ICCS由中国承办。

第十届ICCS的会议主题为“21世纪煤科学的发展前景”,这也是当今国际上煤科学的研究工作者乃至企业界和政府部门所共同关心的问题。会议的主要专题包括:煤的基础科学、煤燃烧、煤转化(气化、热解及液化)、煤基化学品和材料、备煤和煤加工、燃煤污染物的排放控制等,研讨内容广泛,展示出国际煤科学发展的最新趋势,代表了国际煤科学界的最高水平。会议国际组织委员会由10个国家的16名代表组成,李保庆研究员任大会主席。国内学术委员会由我国14名煤科学界的著名专家学者组成,刘振宇研究员任主席。

第十届ICCS大会共收到会议论文摘要499篇,其中国外论文占70%,经会议学术委员会认真评审及筛选,最后有29个国家的391篇论文入选,并邀请代表世界不同地区的四名专家作大会报告,还将分专题讨论“计算机模拟应用于煤科学领域中的新进展”及“煤科学在绿色能源中的地位”。会议不仅总结本世纪煤科学的成就,而且将对下世纪煤科学的总体发展做出预测,几个用煤大国的专家还将就其所在国家及地区下世纪煤科学的具体走向在闭幕式上发言。

2 煤科学研究发展趋势

尽管目前廉价而又供应充足的石油严重影响了煤科学的研究及煤转化利用技术的发展,

* 山西煤炭化学研究所研究员
收稿日期:1999年7月26日

但从论文总数及覆盖的国家和地区来看,煤科学研究仍是世界关注的热点之一。除中国外,日本、英国、西班牙、美国、俄罗斯、德国等国家也对煤科学研究十分重视。表1列出了第十届

表1 第十届 ICCS 论文按国家及研究领域分类情况

国家\分类	A1	A2	B1	B2	B3	C	D	E	总计
奥地利							1	1	
澳大利亚	2		3	1	1		2	9	
巴西			1	1		1		2	5
保加利亚		2						2	
比利时		1					2		3
波兰	3	1		2		1	1	1	9
丹麦								1	1
德国	2		7			1		6	16
俄罗斯	6	7	1		1	1	2		18
法国	3		1	1		1			6
芬兰				1	1				2
哥伦比亚	1	1	5	2	1	1	1		12
荷兰				2				1	3
加拿大		1							1
捷克	5	1	2				3		11
罗马尼亚						1			1
美国	1		4	7	2	4	1	9	28
孟加拉国	1								1
葡萄牙	1	1							2
日本	4	11	6	9	10	2	5	12	59
瑞典								1	1
土耳其			1	1		1			3
乌克兰	1					5	2		8
西班牙	1	1	4	1		11	4	12	34
希腊								2	2
意大利				1					1
印度	1						1		2
英国	3	7	14	4	2	3	2	3	38
中国	12	7	13	9	10	17	27	17	112
总计(29个国家)	47	41	65	39	28	50	51	70	391

注:A1-煤的物理、化学与岩相特性,A2-煤结构及反应性,B1-燃烧与气化,
B2-热解,B3-液化,C-煤基化学品与材料,D-备煤与煤加工,E-污染控制

ICCS 所收录的论文按国家及研究领域分类情况。

从表 2 可以看出第一届会议以来不同研究领域的变化趋势。与煤的燃烧及转化相关的论文比例由历届的 50%—60% 下降到本届会议的 34%，煤的基础研究维持在 22%—25%，而在环境和煤作为材料及化学品的利用等方面的研究则有大幅度增长。这表明，煤仅作为能源资源的概念正在改变，同时也表明国民经济的可持续发展对煤的洁净转化提出了更高的要求。

表 2 历届 ICCS 的论文总数及分类情况

年代	1981	1983	1985	1987	1989	1991	1993	1995	1997	1999
论文总数	146	195	247	225	283	252	331	493	479	391
燃烧及转化(%)	61.0	51.9	56.2	61.8	61.1	60.3	54.0	51.5	53.6	33.8
其中										
燃烧、气化	15.1	14.4	20.2	21.8	20.1	20.2	17.5	16.2	21.9	16.6
热解	15.8	10.8	10.9	14.7	15.2	18.7	16.0	18.1	19.2	10.0
液化	30.1	26.7	25.1	25.3	25.8	21.4	20.5	17.2	12.5	7.2
结构及性质(%)							25.4	23.8	22.5	
环境(%)							12.0	13.2	17.9	
煤基化学品及材料(%)									12.8	
备煤和煤加工(%)										13.0

注: % 为占当年论文总数的比例

3 若干研究方向

3.1 煤大分子结构及其在转化过程中变化规律的计算机模拟

煤的反应性极大地依赖于煤的大分子结构。为阐明煤的反应性,煤结构的研究一直是煤化学的核心问题,但由于煤结构的多样性与复杂性,煤科学的研究发展至今仍只局限于对煤结构的宏观认识,而缺乏在分子水平上的识别。虽然不少学者提出了一系列结构模型,但均系建立在经验和假设基础之上,还远不能反映煤的结构特性,也不能深入认识煤结构和反应性的关联。

近年来,煤化学已要求越来越深入地从煤结构的分子水平来认识煤的反应性,从而在煤转化技术中,可根据煤分子结构特征进行反应设计,指导煤高效、洁净利用中的优化转化及污染控制,并最终达到按需进行化学裁剪的目的。

随着现代分析仪器的发展,尤其是¹³CNMR 和热解/色谱/质谱的应用,为研究煤的化学结构及反应性提供了丰富的信息。同时,计算机技术的飞速发展,使复杂艰巨的量子力学、分子力学和分子动力学的计算成为可能,并可使由分析数据所推得的大量初始煤结构模型通过随机抽样及能量优化,建立从统计学观点较真实反映煤平均结构的分子三维立体模型。美、日学者在这方面的开创性工作,使我们可以从三维可视性的分子水平高度认识煤的大分子结构。

在第十届 ICCS 大会上,美、日及我国代表将发表有关煤大分子结构计算机模拟的研究论文。但目前煤结构的计算机模拟还未与煤的反应性相互关联。研究煤结构及其在转化过程中变化规律的计算机模拟是煤化学今后的研究方向之一。

3.2 绿色煤科学

随着油、气资源的逐渐枯竭,在21世纪作为世界上蕴藏最丰富的化石燃料的煤的利用将重新受到青睐。但同油、气相比,煤转化及利用过程的问题是效率低、污染重,这在我国尤为突出。而经济的可持续发展及在21世纪明显改进人类生态环境的要求,对煤转化及利用过程的污染控制提出了更高的标准。随着绿色化学的兴起与发展,煤如何成为绿色能源中的一员也已提到议事日程。

与第九届 ICCS 相比,第十届 ICCS 大会上与煤转化和利用的环境有关的论文比例从 12% 上升到 18%,其中大部分仍与 S、N 脱除有关,一部分涉及多环芳烃(PAH)、微量有害元素和灰的性质、分布、脱除及利用;新型的吸附剂和催化剂的研究以及污染物脱除的数学模型与机理。开发煤中 S、N 等有害元素的源头定向脱除技术及根据绿色煤科学的要求研究无污染排放的煤的直接或综合利用过程,无疑会引起人们更大的兴趣。

3.3 煤制取化学品或新材料

目前世界上煤的主要利用方式是燃烧。尽管煤中 H/C 比低于油与气,但煤中富氢组分仍然是宝贵的化学品的原料,而富 C 组分及转化产品中的高聚 C 部分也是制取高性能材料的原料。可以预计,下世纪煤不仅将继续作为能源原料,而且它的包括化学品及材料在内的非燃料利用也将受到重视。在第十届 ICCS 上,第一次把这一领域单独列为专题,所收到的论文占总数的近 13%,其中煤的制水溶性有机酸,芳烃制功能型高聚物,煤基沥青制各类碳材料及富勒烯、纳米管及金刚石的制备的研究等均有明显的开发与应用前景。

4 结语

根据我国能源结构的特点,我国已成为世界煤炭生产与利用的第一大国,但与国际水平相比,我国煤炭的利用技术落后,效率低,污染严重,极大地制约了经济的可持续发展。如何加快煤科学技术的发展,推动煤的高效洁净转化与利用,是我国目前急需研究的重要方向之一。

第十届煤科学大会在我国的召开,无疑将促进我国与国际同行间的交流、合作与了解,扩大我国科学家的国际影响,也必将有助于从整体上促进我国煤科学和煤炭利用领域的发展。我们深信,由于第十届 ICCS 的推动和我国全体煤科学研究工作者的不懈努力,中国有希望在下世纪成为世界煤科学和煤利用技术的研究与开发中心,并通过煤的高效洁净转化与利用,促进国民经济的可持续发展。