

Научная статья

УДК 662.742: 544.723.21

DOI: 10.26730/1999-4125-2022-2-42-50

ВЛИЯНИЕ СКОРОСТИ ПОДЪЕМА ТЕМПЕРАТУРЫ ПРИ ЩЕЛОЧНОЙ АКТИВАЦИИ УГЛЕЙ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОРИСТОСТИ СОРБЕНТОВ**Федорова Наталья Ивановна,
Зыков Игорь Юрьевич**

Федеральный исследовательский центр угля и углехимии СО РАН

*для корреспонденции: FedorovaNI@iccms.sbras.ru

**Информация о статье**

Поступила:

24 февраля 2022 г.

Одобрена после
рецензирования:

30 марта 2022 г.

Принята к публикации:

29 апреля 2022 г.

Ключевые слова:каменный уголь,
термогравиметрический
анализ, щелочная активация,
текстурные характеристики,
удельная поверхность,
пористая структура**Аннотация.**

Актуальность исследования определяется прежде всего тем, что для определения наиболее эффективных и экономичных методов приготовления углеродных сорбентов большое значение имеют данные о влиянии варьирования различных технологических параметров на свойства получаемых углеродных материалов.

Цель проведенного исследования – изучение влияния скорости подъема температуры термолитиза на текстурные характеристики сорбентов, полученных посредством химической активации каменного угля в присутствии щелочи.

В качестве объекта исследования использовался уголь технологической марки Д, который характеризуется низкой зольностью (3,4%), выходом летучих веществ порядка 43,3% и сравнительно малым содержанием общей серы (0,3%).

Термогравиметрическим анализом установлено, что увеличение скорости подъема температуры пиролиза приводит к росту максимальной скорости термического разложения (V_{max} более чем в 5раз) органической массы исследованного угля и температуры (T_{max} на 30°C), при которой она достигается.

Углеродные сорбенты были получены методом щелочной активации при соотношении уголь/КОН равном 1/0,5 г/г при температуре 800°C, выдержки 1 ч и различной скорости нагрева: 10°C/мин, 30°C/мин и в режиме теплового удара, когда тигли с углещелочной смесью помещались в разогретую до 800°C муфельную печь.

Показано, что при увеличении скорости нагрева наблюдается тенденция к росту текстурных характеристик получаемых сорбентов. Например, при активации углещелочной смеси при наибольшей скорости подъема температуры значение удельной поверхности возрастает на 20%. При этом применение режима теплового удара приводит к формированию более однородного углеродного материала по строению пористой структуры с преобладающей долей микропористости с преимущественным вкладом ультрамикропор.

Для цитирования: Федорова Н.И., Зыков И.Ю. Влияние скорости подъема температуры при щелочной активации углей на характеристики пористости сорбентов // Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2022. № 2 (150). С. 42-50. doi: 10.26730/1999-4125-2022-2-42-50

В настоящее время щелочная активация является достаточно распространенным способом получения активированных углей с развитой пористой структурой и высокой адсорбционной

Таблица 1. Характеристика исследованного угля технологической марки Д
Table 1. Characteristics of the investigated coal of technological grade D

Код образца	Технический анализ, %				Элементный состав, % на <i>daf</i>			Атомное отношение	
	W^a	A^d	V^{daf}	S_t^d	С	Н	(N+S+O)	Н/С	О/С
Д	4,5	3,4	43,3	0,3	80,2	5,6	14,2	0,84	0,13

емкостью по отношению к адсорбатам различной природы [1-10]. Такие углеродные сорбенты получают из ископаемых углей всего ряда метаморфизма, содержание углерода у которых возрастает от 60 до 95%. Образующиеся сорбенты имеют высокоразвитую поверхность (более 1000 м²/г) за счет высокой доли микропор, достигающей 90% от общего объема адсорбирующего пространства. При этом пористость углеродных сорбентов формируется как за счет термической деструкции угольного органического каркаса, так и за счет химической реакции с гидроксидом калия.

Следует отметить, что выбор условий проведения химической активации (температура, скорость нагрева, добавки химических реагентов и т.д.) позволяет оптимизировать процесс в целом и сделать его экономически более целесообразным. Кроме того, правильно выбранный режим проведения процесса позволяет селективно направлять его в сторону получения твердого продукта с определенными текстурными характеристиками.

Цель проведенной работы – исследование текстурных характеристик сорбентов, полученных из каменного угля посредством щелочной активации при различных режимах нагрева.

В качестве объекта исследования использовался уголь технологической марки Д. Выбор марки угля определялся тем, что он согласно ГОСТ25543–2013 рекомендуется для производства углеродных сорбентов.

Для аналитических исследований использовалась фракция менее 0,2 мм. Технический анализ проводили стандартными методами. Общую серу определяли по методу Эшка согласно ГОСТ 8606–2015 (ISO 334:2013). Элементный состав органической массы исследованного образца определяли с помощью элементного анализатора Thermo Flash 2000 (Thermo Fisher Scientific, Великобритания), результаты определений пересчитывали на сухое беззольное состояние топлива (*daf*). Характеристика образца приведена в таблице 1.

Термический анализ проводили на термоанализаторе фирмы Netzsch STA 409 в следующих условиях: масса образца 40 мг; тигель платиново-иридиевый; нагрев до 1000°C со скоростью 10°/мин в инертной атмосфере с различной скоростью нагрева – 5, 10, 20 и 50°C/мин. В ходе анализа регистрировали потерю массы (ТГ), скорость потери массы (ДТГ). Температурный интервал деструкции органической массы образца на кривой ТГ устанавливали методом касательных с помощью программного обеспечения Netzsch Proteus. Потерю массы при заданной температуре (Δm) определяли согласно кривой ТГ, на основании ДТГ кривой устанавливали температуры (T_{max}), соответствующие максимальным скоростям потери массы.

Получение сорбентов проводили методом щелочной активации при массовом соотношении щелочь – уголь, равном 0,5 г/г. Введение твердой щелочи (KOH) в уголь осуществляли механическим смешением в лабораторной шаровой мельнице *Pulverisette 6* фирмы *Fritsch* при вращении рабочего органа 290 об/мин в течение 80 секунд. Таким образом получали гомогенную смесь гидроксида калия и угля.

Карбонизацию угольных образцов со щелочью проводили в муфельной печи в фарфоровых тиглях с притертыми крышками. Режим термолiza: нагревание со скоростью 10°C/мин, 30°C/мин до 800°C и с применением теплового удара. Режим теплового удара осуществляли посредством быстрого введения тигля с углещелочной смесью в разогретую до 800°C муфельную печь, при данном способе достигалась максимально возможная скорость нагрева. После достижения температуры 800°C для всех образцов осуществлялась изотермическая выдержка 1 ч и далее быстрое охлаждение тиглей в инертной среде. Карбонизованные остатки отмывали от щелочи водой, затем 0,1 М раствором HCl и снова водой до отрицательной реакции на ионы Cl⁻. Промытые образцы сушили при температуре 105°C до постоянной массы.

Величину удельной поверхности ($S_{вет}$, м²/г) и характеристики пористой структуры (общий

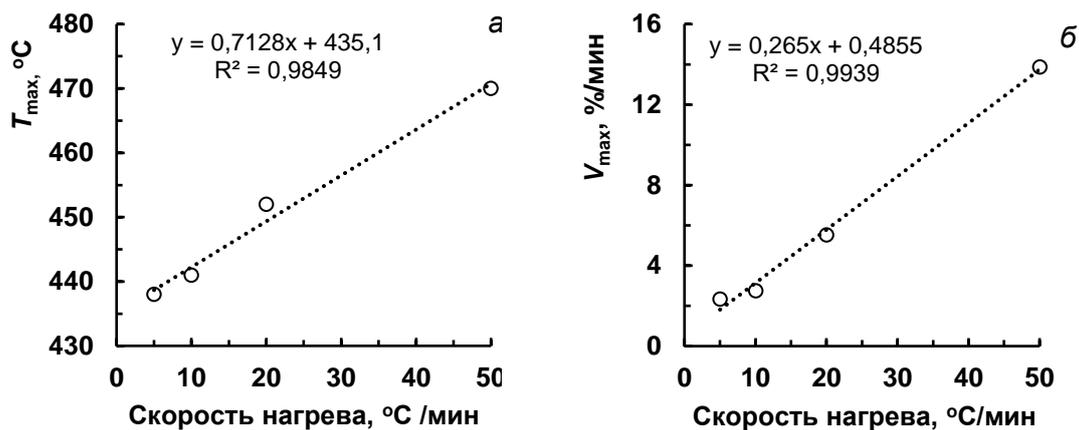


Рис. 1. Влияние скорости нагрева на максимальную скорость (а) и температуру достижения максимальной скорости (б) при термической деструкции органической массы угля марки Д
 Fig. 1. Influence of the heating rate on the maximum rate (a) and the temperature at which the maximum rate is reached (b) during the thermal destruction of the organic matter of grade D coal

Таблица 2. Характеристика полученных образцов углеродных сорбентов
 Table 2. Characteristics of the obtained samples of carbon sorbents

Код образца	Условия активации	W^a , %	A^d , %	V^{daf} , %
1	Холодный муфельный шкаф – нагрев до 800°C, скорость нагрева 10°C/мин	1,3	2,0	3,8
2	Холодный муфельный шкаф – нагрев до 800°C, скорость нагрева 30°C/мин.	1,1	1,0	3,6
3	Нагретый муфельный шкаф до 800°C (режим теплового удара)	1,1	1,3	3,5

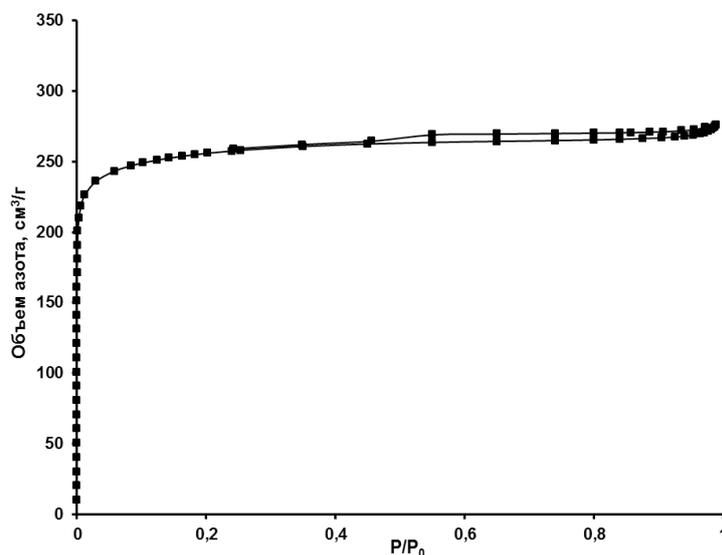


Рис. 2. Изотермы адсорбции-десорбции азота для образца №1
 Fig. 2. Nitrogen adsorption-desorption isotherms for sample No. 1

объем пор V_{Σ} , см³/г; объем мезо- и микропор V_{me} и V_{mi} , см³/г) изученных образцов углеродных материалов получали из анализа изотерм адсорбции-десорбции N₂ при -195,97°C (77,4 К), измеренных на объемной вакуумной статической установке ASAP-2020. Перед проведением адсорбционных измерений исследуемые образцы вакуумировали непосредственно в специальном порту прибора при 200°C в течение 12 часов до остаточного давления не менее 0,13 Па. Измерения изотерм адсорбции-десорбции азота вели в области равновесных относительных давлений паров от 10⁻³ до 0,995 P/P_0 . Средний диаметр пор оценивали по формуле $D_{cp} = 4V_{ads}$

Таблица 3. Текстуальные характеристики сорбентов, полученных при различных скоростях нагрева
 Table 3. Textural characteristics of sorbents obtained at different heating rates

Код образца	$S_{\text{ВЕТ}}$, $\text{м}^2/\text{г}$	V_{Σ} , $\text{см}^3/\text{г}$	V_{mi} , $\text{см}^3/\text{г}$	V_{me} , $\text{см}^3/\text{г}$	V_{mi}/V_{Σ} , %	V_{me}/V_{Σ} , %	$D_{\text{ср}}$, нм
1	980	0,43	0,33	0,041	76,7	9,5	1,73
2	1080	0,47	0,36	0,055	76,6	11,7	1,75
3	1180	0,50	0,39	0,063	78,0	12,6	1,75

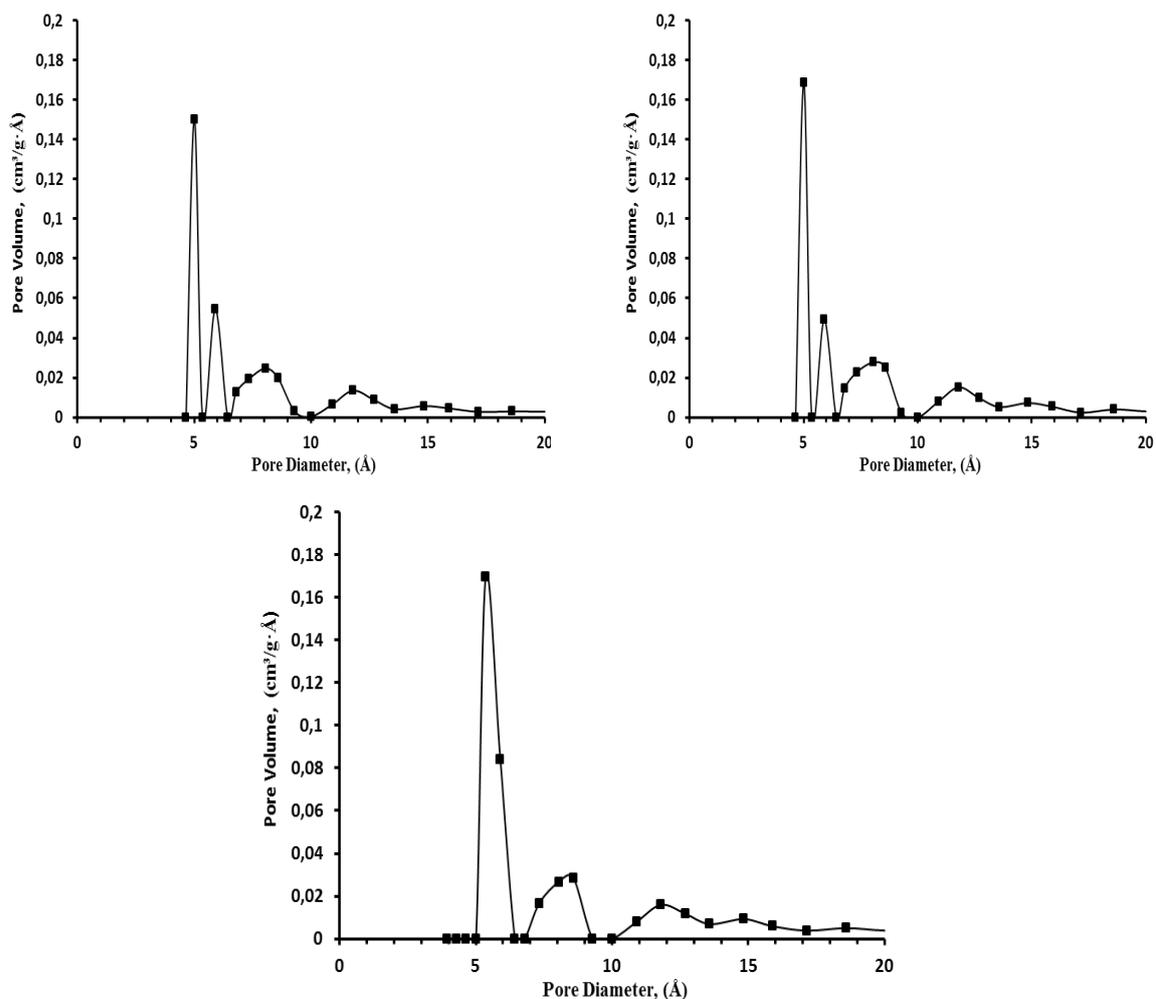


Рис. 3. Кривые распределения микропор по размерам для исследованных образцов №1, №2, №3, рассчитанные методом NL DFT
 Fig. 3. Micropore size distribution curves for the studied samples No. 1, No. 2, No. 3, calculated by the NL DFT method

$/S_{\text{ВЕТ}}$. Объем мезопор V_{me} ($\text{см}^3/\text{г}$) рассчитывали из распределения мезопор по размерам (метод ВЖ).

Известно, что изменение теплоемкости углей в ходе пиролиза зависит от скорости нагрева, так как от этого фактора зависят характер и результат термохимических преобразований [11-14]. При медленном нагреве в процесс деструкции последовательно включаются реакции с постепенно возрастающей энергией активации. Иными словами, при малых скоростях нагрева процесс разложения характеризуется селективностью – последовательным отщеплением различных атомных группировок в порядке возрастания термостойкости их связей. Следовательно, ускорение нагрева должно приводить к относительному увеличению в

реакционной массе продуктов реакций с высокой энергией активации, деструкция которых, в свою очередь, требует повышенных энергетических затрат. Из этого следует, что с повышением скорости нагрева степень эндотермичности реакций разложения должна повышаться, а максимум эндотермичности – сдвигаться к более высоким температурам [15-17].

В данной работе оба этих вывода были подтверждены экспериментально. Посредством термогравиметрического анализа, проведенного в инертной атмосфере, исследовано влияние скорости нагрева на процесс деструкции органического вещества образца угля технологической марки Д.

Результаты обработки термогравиметрических кривых приведены на рисунке 1. Видно, что увеличение скорости подъема температуры пиролиза приводит к росту максимальной скорости термического разложения V_{\max} органической массы исследованного угля и температуры T_{\max} , при которой она достигается.

Благоприятный эффект высокой скорости нагрева на выходе летучих веществ связан с меньшим появлением вторичных реакций повторной полимеризации и крекинга исходных реакционноспособных фрагментов, это приводит к быстрому высвобождению летучих веществ из углеродистой структуры, что может положительно сказаться на текстурных характеристиках карбонизованных остатков.

Характеристика полученных сорбентов приведена в таблице 2. Анализ полученных результатов показывает, что образцы характеризуются достаточно низкой зольностью (менее 2,0%) и выходом летучих веществ (менее 3,8%). При этом следует отметить, что с увеличением скорости термолиза при получении образцов наблюдается тенденция к снижению V^{daf} из полученных сорбентов.

Изотермы адсорбции-десорбции азота углеродных сорбентов имеют подобный вид (рисунок 2). Для всех изотерм адсорбции наблюдается наличие резкого подъема в области низких относительных давлений и почти горизонтальное плато, что характерно для изотерм I типа по классификации IUPAC, которые описывают физическую адсорбцию в микропористых системах.

Рассчитанные по изотермам адсорбции-десорбции азота параметры пористой структуры исследуемых углеродных сорбентов ($S_{\text{ВЕТ}}$ – удельная поверхность, V_{Σ} – общий объем пор, V_{mi} – объем микропор, V_{me} – объем мезопор) представлены в таблице 3. Можно заключить, что с ростом скорости нагрева наблюдается тенденция к увеличению текстурных характеристик получаемых сорбентов. Все образцы характеризуются достаточно высокой удельной поверхностью от 1000 м²/г. При изменении скорости нагрева с 10°С/мин до 30°С/мин (образцы 1 и 2 соответственно) значение удельной поверхности возрастает на 10%, а при активации тепловым ударом (образец №3) – практически на 20%. При этом возрастают величины общего объема пор, а также доли микро и мезопор в поровом пространстве (таблица 3). Таким образом, проведение щелочной активации угля с применением быстрого нагрева (теплового удара) позволяет получать углеродные сорбенты с более высокими текстурными характеристиками.

Полученные кривые распределения микропор по размерам в рамках метода теории нелокального функционала плотности ($NL\ DFT$) имеют полимодальный характер и демонстрируют три выраженные области микропор: 0,5-0,7 нм (область ультрамикропор), 0,7-0,9 нм и 1,0-2,0 нм (области супермикропор). Из приведенных данных на рисунке 3 видно, что для всех исследованных образцов микропоры неоднородны и имеют широкое распределение по размерам: от ультрамикропор до супермикропор в интервале от 0,4 – 2,0 нм. При этом для образца №3, полученного в режиме теплового удара, по сравнению с другими образцами наблюдается чуть более выраженная область заполнения ультрамикропор, что и вносит дополнительный вклад в удельный объем микропор (таблица 3). Другими словами, этот углеродный материал имеет более узкое (гомогенное) распределение микропор по размерам с преимущественным вкладом ультрамикропор. Вероятно, при скоростном нагреве в результате возникновения больших градиентов температуры, сопровождающиеся повышенными скоростями выхода летучих веществ в образцах возникают значительные внутренние напряжения, приводящие к образованию более развитой системы микропор.

Таким образом, проведено исследование текстурных характеристик, углеродных сорбентов, полученных из угля технологической марки Д посредством щелочной активации с КОН при различных скоростях подъема температуры термолиза. Установлено, при щелочной активации

формируются углеродные материалы с развитой удельной поверхностью и удельным объемом пор. Все исследованные образцы являются микропористыми с малым объемом мезопор (относительное содержание микропор более 75%).

Показано, что при увеличении скорости нагрева наблюдается тенденция к росту текстурных характеристик получаемых сорбентов. Например, при активации углещелочной смеси при наибольшей скорости подъема температуры значение удельной поверхности возрастает на 20%. При этом применение режима теплового удара приводит к формированию более однородного углеродного материала по строению пористой структуры с преобладающей долей микропористости с преимущественным вкладом ультрамикропор.

Применение щелочной активации при повышенных скоростях подъема температуры процесса позволяет получать углеродные сорбенты с более высокими текстурными характеристиками. Полученные данные важны, так как могут использоваться для определения практических рекомендаций при разработке технологических решений для производства углеродных сорбентов на основе каменных углей.

Работа выполнена в рамках гос. задания ИУХМ ФИЦ УУХ СО РАН (проект 121031500194-5) с использованием оборудования ЦКП ФИЦ УУХ СО РАН. Авторы выражают благодарность Л.М. Хицовой за выполнение термогравиметрического анализа, О.С. Ефимовой – элементного анализа,

Ю.Н. Дудниковой за определение текстурных характеристик сорбентов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шендрик Т. Г. [и др.] Формирование пористой структуры бурого угля при термоллизе с гидроксидом калия // Химия твердого топлива. 2009. №5. С.51-55.
2. Тамаркина Ю. В., Кучеренко В. А., Шендрик Т. Г. Взаимосвязь газовой выделения и порообразования при щелочной активации бурого угля // Химия твердого топлива. 2015. №2. С.34-40.
3. Козлов А. П. [и др.] Синтез углеродных сорбентов из природноокисленного барзасского угля, инпрегнированного гидроксидом калия // Вестник КузГТУ. 2017. №4. С. 170-175.
4. Козлов А. П. [и др.] Влияние температуры щелочной активации на характеристики пористой структуры сорбентов на основе бурого угля // Вестник КузГТУ. 2018. №5. С. 68-75.
5. Зыков И. Ю. [и др.] Текстуальные характеристики углеродных сорбентов из каменных углей различных стадий метаморфизма // Вестник КузГТУ. 2019. №4. С. 64-69.
6. Rehman A. [et al.] Solvent-free, one-pot synthesis of nitrogen-tailored alkali-activated microporous carbons with an efficient CO₂ adsorption. 172:71-82. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.09.088>.
7. García-Díez E. [et al.] CO₂ capture by novel hierarchical activated ordered micro-mesoporous carbons derived from low value coal tar products // Microporous and Mesoporous Materials. 2021. 318. P. 110986. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2021.110986>.
8. Kaewmee P. [et al.] Porous and reusable potassium-activated geopolymer adsorbent with high compressive strength fabricated from coal fly ash wastes // Journal of Cleaner Production. 2020. V. 272. P. 122617. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.122617>.
10. Song G. [et al.] Anthracite coal-based activated carbon for elemental Hg adsorption in simulated flue gas: Preparation and evaluation // Fuel. 2020. V. 275 P. 117921. –DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117921>.
11. Грязнов Н. С. Основы теории коксования. М. : Металлургия, 1976. 312 с.
12. Романова Т. А., Михайлова Е. С., Исмагилов З. Р. Низкотемпературный пиролиз // Химия в интересах устойчивого развития. 2017. Т.25. №5. С. 599-606.
13. Бойко Е. А., Страшников А. В. Кинетика термохимического превращения твердого органического топлива при высокоскоростном нагреве // Известия РАН. Энергетика. 2021. №4 С. 103-126.
14. Тюрина, Э. А., Медников А. С., Елсуков П. Ю. Экологически чистые технологии производства электроэнергии и синтетического жидкого топлива на основе угля для условий распределенной генерации // Известия РАН. Энергетика. 2020. №5. С. 21-31.
15. Заварухин С. Г., Яковлев В. А. Математическое моделирование неизотермического пиролиза биомассы сорго на основе трехкомпонентной кинетической модели // Кинетика и катализ. 2021. Т. 62. №5. С. 647-654.
16. Jingchong Yan, Hanren Jiao [et al.] Kinetic analysis and modeling of coal pyrolysis with model-free methods // Fuel. 2019. №241. P.382-391. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.12.079>.
17. Yehan Wang, Jun Liana [et al.] The pyrolysis of vitrinite and inertinite by a combination of quantum chemistry calculation and thermogravimetry-mass spectrometry // Fuel. 2020. V. 264. P. 116794. DOI:

<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116794>.

© 2022 Авторы. Эта статья доступна по лицензии Creative Commons «Attribution» («Атрибуция») 4.0 Всемирная (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)
Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Об авторах:

Федорова Наталья Ивановна, Федеральный исследовательский центр угля и углехимии СО РАН (650000, Россия, г. Кемерово, Советский пр., 18), канд. хим. наук, FedorovaNI@iccms.sbras.ru

Зыков Игорь Юрьевич, Федеральный исследовательский центр угля и углехимии СО РАН (650000, Россия, г. Кемерово, Советский пр., 18), канд. физ.-мат. наук, zyak.kot@mail.ru

Заявленный вклад авторов:

Федорова Н.И. – постановка исследовательской задачи; научный менеджмент; обзор соответствующей литературы; концептуализация исследования; написание текста, сбор и анализ данных; обзор соответствующей литературы; выводы; написание текста.

Зыков И.Ю. – постановка исследовательской задачи; научный менеджмент; обзор соответствующей литературы; концептуализация исследования; написание текста, сбор и анализ данных; обзор соответствующей литературы; выводы; написание текста.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

Original article

INFLUENCE OF THE RATE OF TEMPERATURE RISE AT ALKALINE COAL ACTIVATION ON THE CHARACTERISTICS OF SORBENT POROSITY

Natalia I. Fedorova,
Igor Yu. Zykov

National University of Oil and Gas "Gubkin University"

*for correspondence: FedorovaNI@iccms.sbras.ru

**Article info**

Submitted:

24 February 2022

Approved after reviewing:

30 March 2022

Accepted for publication:

29 April 2022

Keywords: hard coal, thermogravimetric analysis, alkaline activation, textural characteristics, specific surface area, porous structure

Abstract.

The relevance of the study is determined primarily by the fact that in order to determine the most efficient and economical methods for the preparation of carbon sorbents, data on the effect of varying various technological parameters on the properties of the resulting carbon materials are of great importance.

The purpose of this study is the effect of the thermolysis temperature rise rate on the textural characteristics of sorbents obtained by chemical activation of coal in the presence of alkali.

The object of study was coal of technological grade D, which is characterized by a low ash content (3.4%), a yield of volatile substances of about 43.3%, and a relatively low total sulfur content (0.3%).

Thermogravimetric analysis found that an increase in the rate of pyrolysis temperature rise leads to an increase in the maximum rate of thermal decomposition (V_{max} by more than 5 times) of the organic mass of the studied coal and the temperature (T_{max} by 30°C) at which it is achieved.

Carbon sorbents were obtained by the method of alkaline activation at a ratio of coal/KOH equal to 1/0.5 g/g at a temperature of 800°C, holding for 1 hour and various heating rates: 10°C/min, 30°C/min and in the thermal shock mode, when crucibles with a coal-alkali mixture were placed in a muffle furnace heated to 800°C.

It is shown that with an increase in the heating rate, there is a tendency to an increase in the texture characteristics of the resulting sorbents. For example, when a coal-alkali mixture is activated at the highest rate of temperature rise, the value of the specific surface area increases by 20%. In this case, the application of the thermal shock mode leads to the formation of a more homogeneous carbon material in terms of the structure of the porous structure with a predominant share of microporosity with a predominant contribution of ultramicropores.

For citation: Fedorova N.I., Zykov I.Yu. Influence of the rate of temperature rise at alkaline coal activation on the characteristics of sorbent porosity. *Vestnik Kuzbasskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*=Bulletin of the Kuzbass State Technical University. 2022; 2(150):42-50. (In Russ., abstract in Eng.). doi: 10.26730/1999-4125-2022-2-42-50

REFERENCES

1. Shendrik T.G. [et al.] Formirovanie poristoj struktury burogo uglja pri termolize s gidroksidom kalija. *Himija tverdogo topliva*. 2009; 5:51-55.
2. Tamarkina Ju.V. [et al.] Vzaimosvjaz' gazovydelenija i poroobrazovanija pri shheloch-noj aktivacii burogo uglja. *Himija tverdogo topliva*. 2015;2:34-40.
3. Kozlov A.P. [et al.] Sintez uglerodnyh sorbentov iz prirodnookislennogo barzasskogo uglja, in-pregnirovannogo gidroksidom kalija. *Vestnik KuzGTU*. 2017; 4:170-175.
4. Kozlov A.P. [et al.] Vlijanie temperatury shhelochnoj aktivacii na harakteristiki poristoj struktury sorbentov na osnove burogo uglja. *Vestnik KuzGTU*. 2018; 5:68-75.
5. Zykov I.Ju. Teksturnye harakteristiki uglerodnyh sorbentov iz kamennyh uglej raz-lichnyh stadij metamorfizma *Vestnik KuzGTU*. 2019; 4: 64-69.

6. Rehman A. [et al.] Solvent-free, one-pot synthesis of nitrogen-tailored alkali-activated microporous carbons with an efficient CO₂ adsorption. *Carbon*. 172:71-82. – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.09.088>.
7. García-Díez E. [et al.] CO₂ capture by novel hierarchical activated ordered micro-mesoporous carbons de-rived from low value coal tar products. *Microporous and Mesoporous Materials*. 2021; 318:110986. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2021.110986>.
8. Kaewmee P. [et al.] Porous and reusable potassium-activated geopolymer adsorbent with high compressive strength fabricated from coal fly ash wastes. *Journal of Cleaner Production*. 2020; 272:122617. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.122617>.
10. Song G., [et al.] Anthracite coal-based activated carbon for elemental Hg adsorption in simulated flue gas: Preparation and evaluation. *Fuel*. 2020; 275:117921. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117921>.
11. Grjaznov N.S. Osnovy teorii koksovanija. M.: Metallurgija; 1976.
12. Romanova T.A. [et al.] Nizkotemperaturnyj piroliz. *Himija v interesah ustojchivogo razvitija*. 2017; 25(5): 599-606.
13. Bojko E.A., Strashnikov A.V. Kinetika termohimicheskogo prevrashhenija tverdogo organicheskogo topliva pri vysokoskorostnom nagreve. *Jenergetika*. 2021; 4:103-126.
14. Tjurina Je.A. [et al.] Jekologicheski chistye tehnologii proizvodstva jelektrojener-gii i sinteticheskogo zhidkogo topliva na osnove uglja dlja uslovij raspredelennoj generacii. *Izvestija RAN. Jenergetika*. 2020; 5:21-31.
15. Zavaruhin S.G., Jakovlev V.A. Matematicheskoe modelirovanie neizotermicheskogo piroliza biomassy sorgo na osnove trehkomentnoj kineticheskoy modeli. *Kinetika i kataliz*. 2021; 62(5):647-654.
16. Jing-chong Yan, Hanren Jiao [et al.] Kinetic analysis and modeling of coal pyrolysis with model-free methods. *Fuel*. 2019(241):382-391. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.12.079>.
17. Yehan Wang, Jun Liana [et al.] The pyrolysis of vitrinite and inertinite by a combination of quantum chemistry calculation and thermogravimetry-mass spectrometry. *Fuel*. 2020; 264:116794. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116794>.

© 2022 The Authors. This is an open access article under the CC BY license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

The authors declare no conflict of interest.

About the authors:

Natalia I. Fedorova, leading researcher, Federal Research Center of Coal and Coal Chemistry SB RAS (650000, Kemerovo, 18, pr. Sovjetsky, Russian Federation), C. Sc. in Chemistry, FedorovaNI@iccms.sbras.ru

Igor Yu. Zykov, researcher, Federal Research Center of Coal and Coal Chemistry SB RAS (650000, Kemerovo, 18, pr. Sovjetsky, Russian Federation), C. Sc. in Physics and Mathematics, FedorovaNI@iccms.sbras.ru

Contribution of the authors:

Natalia I. Fedorova - research problem statement; scientific management; reviewing the relevant literature; conceptualisation of research; writing the text, data collection; data analysis; reviewing the relevant literature; drawing the conclusions; writing the text.

Igor Yu. Zykov - research problem statement; scientific management; reviewing the relevant literature; conceptualisation of research; writing the text, data collection; data analysis; reviewing the relevant literature; drawing the conclusions; writing the text.

All authors have read and approved the final manuscript.

