

ISSN 1999-4125 (Print)

ISSN 2949-0642 (Online)

Научная статья

УДК 622.831.322

DOI: 10.26730/1999-4125-2025-4-84-90

ОСОБЕННОСТИ АДСОРБЦИИ МЕТАНА НА МИКРОПОРИСТОЙ ПОВЕРХНОСТИ В СТРУКТУРЕ КАМЕННОГО УГЛЯ

Фофанов Андрей Алексеевич

Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева

* для корреспонденции: faa.fiz@mail.ru



Информация о статье

Поступила:

12 мая 2025 г.

Одобрена после

рецензирования:

22 июня 2025 г.

Принята к публикации:

30 июня 2025 г.

Опубликована:

28 августа 2025 г.

Ключевые слова:

молекула метана, атом водорода, атом углерода, каменный уголь, поверхность микропоры, энергия взаимодействия, ориентация относительно поверхности, угол поворота, нормаль к поверхности.

Аннотация.

Потребности производства, связанные с потреблением каменного угля в качестве источника энергии, приводят к тому, что возникает необходимость наращивать темпы добычи угля, тем самым отрабатывать пласты на больших глубинах залегания. С увеличением глубины отрабатываемых угольных пластов увеличивается их природная газоносность. В этой связи увеличивается вероятность возникновения внезапных выбросов угля и газа. Ключевыми факторами, которые определяют возникновение внезапных выбросов угля и газа, являются газоносность пласта, структура угля и горное давление, зависящее от глубины залегания пласта. Так как уголь является высокопористым веществом, то его структура определяется распределением пор по разным типам и размерам. Поры заполнены рудничным газом, который состоит из смеси различных газов. Наибольшую долю из них составляет метан, концентрация которого более 80%. Распределение пор в каменном угле таково, что микропоры в нем составляют большую часть и могут вносить существенный вклад в процессы дополнительного газовыделения. В то же время механизм взаимодействия молекул метана с поверхностью микропоры, энергия их межмолекулярной связи авторами не приводятся. На основании вышесказанного можно сделать вывод, что на данный момент вопросы о зависимости энергии связи молекулы метана с микропористой поверхностью угля от ориентации ее дипольных моментов, образованных связями C-H относительно поверхности, являются малоизученными и актуальными. В статье рассмотрена физическая модель взаимодействия молекул метана с атомом углерода, который находится в угольном веществе. Модель позволяет установить зависимость энергии связи молекулы метана с микропористой поверхностью угля от ориентации ее дипольных моментов, образованных связями C-H относительно поверхности. Проведен расчет энергии взаимодействия молекулы метана с поверхностью микропоры и получено условие устойчивой конфигурации положения молекулы метана относительно атома углерода в структуре микропористой поверхности угля, при котором энергия имеет максимальное значение.

Для цитирования: Фофанов А.А. Особенности адсорбции метана на микропористой поверхности в структуре каменного угля // Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2025. № 4 (170). С. 84-90. DOI: 10.26730/1999-4125-2025-4-84-90, EDN: VIIYCM

Анализ данных, представленных в каталоге ВОСТНИИ [1], показывает, что количество выброшенного газа во всех случаях внезапных выбросов значительно превышает объем газа,

обусловленный природной газоносностью каменного угля, причем источники дополнительного газовыделения не приводятся.

Один из возможных источников газовой выделения связан с процессами разрушения угля при зависании и последующем обрушении основной кровли, когда в массиве впереди очистного забоя возникает большая концентрация напряжений.

Ископаемый уголь является высокопористым веществом и представляет собой твердый углеводородный полимер с чрезвычайно сложным химическим и элементным составом [2, 3, 4]. Содержит (75÷97)% и более углерода; (1,5÷5,7)% водорода; (1,5÷15)% кислорода; (0,5÷4)% серы; до 1,5% азота; (45÷2)% летучих веществ; количество влаги колеблется от 4 до 14%; золы – обычно от (2÷4)% до 45%.

Изучение механизмов взаимодействия молекул метана с поверхностью каменного угля представляет большой интерес исследователей с точки зрения энергии и силы взаимодействия угля и газа, их влияния на развитие выбросоопасных ситуаций.

Согласно результатам исследований [5, 6, 7], структура выбросоопасных углей содержит (17÷4,4)% – макропор, (28÷6,6)% – мезопор и (55÷89)% – микропор.

Диаметр макропор составляет 1000 Å и более, поэтому в процессах сорбции метана они играют роль транспортных каналов. Мезо- или переходных пор значительно меньше, их диаметры от 20 до 1000 Å.

Объем макропор находится в пределах (0,2÷0,8) см³/г. Информацию об их диаметрах и объемах находят с помощью метода вдавливания ртути под давлением до 5,0 и более Мпа [8, 9].

Объем переходных пор составляет (0,02÷0,1) см³/г, а удельная поверхность (20÷70) см²/г.

Большая часть пористой структуры каменных углей представлена микропорами, диаметр которых (15÷16) Å. Они составляют большую часть объема пористой структуры каменных углей [10]. Микропоры имеют большую удельную поверхность, что позволяет им адсорбировать вещества, имеющие небольшие молекулы, такие как газы и пары.

По мнению И. Л. Эттингера [11], в угле содержится газа больше, чем можно загнать в него в лабораторных условиях, где поглощение происходит благодаря лишь физической адсорбции. В этой связи в работе [12] рассмотрена модель «закрытых пор» и представлены расчеты сил, действующих на адсорбированные молекулы первого и других сорбционных слоев, находящихся на различных расстояниях от поверхности угля. Установлено, что наибольшие силы связывают молекулы метана первого слоя с поверхностью угля. Эта связь может быть преодолена только при разрушении микропористой структуры угля. В общем случае сила взаимодействия молекулы метана с поверхностью угля объясняется

наличием кулоновского взаимодействия, ориентационно-индукционного и дисперсионного.

Если молекулу метана вблизи поверхности угля представить в виде трехосного эллипсоида, то он характеризуется тензором поляризуемости и вектором дипольного момента и другими параметрами Ван-дер-Ваальсового и кулоновского взаимодействия. В этом случае энергия взаимодействия молекулы метана с поверхностью угля зависит не только от расстояния ее до поверхности угля по нормали, но и от ориентационно-индукционных сил, определяемых дипольным моментом молекулы и его угловой ориентацией ϕ [17]:

$$U(z) = - \left[C_1 \frac{\alpha_A \theta_A}{(z+a_0)^3} + C_2 \frac{p^2}{z^3} + \frac{C_3}{z} \right] \left(1 - \frac{z}{2\rho} \right)^{-3} + U_{от}, \quad (1)$$

где параметры C_1 , C_2 , C_3 характеризуют силы притяжения к поверхности: $C_1 = \frac{\pi}{4} \frac{I_0}{I+I_0} \alpha_A n_A$ – дисперсионные; $C_2 = k(1 + \cos^2 \phi)$ – ориентационно-индукционные; $C_3 = kQ^2$ – кулоновские; $U_{от}$ – определяется силами отталкивания.

В формуле (1) приведены следующие обозначения: p – дипольный момент молекулы адсорбата B , α_A – поляризуемости молекул A , I , I_0 – потенциалы ионизации молекул A и B , ρ – радиус кривизны поверхности адсорбента, z – расстояние геометрического центра молекулы адсорбата до поверхности адсорбента, n_A – концентрация молекул адсорбента, ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость адсорбента, ϵ – диэлектрическая проницаемость адсорбата, величина $\theta_A = \left[1 - \left(\frac{r_A}{2\rho} \right)^2 \right]^{-2}$ учитывает протяженность молекулы адсорбента в направлении нормали к поверхности, r_A – радиус молекулы адсорбента, $k = \frac{1}{8\epsilon} \frac{\epsilon_0 - \epsilon}{\epsilon_0 + \epsilon}$.

Согласно данным авторов [13, 14] молекула метана (CH₄) является неполярной, несмотря на то, что связи между углеродом и водородом полярные. В молекуле метана (CH₄) связи между атомами водорода и атомом углерода являются ковалентными связями. Это означает, что атомы совместно используют электроны для образования стабильной молекулы. Эти связи являются σ -связями, которые образуются в результате перекрывания орбиталей атомов. В метане все четыре связи между углеродом и водородом одинаковы по длине и энергии, образуя тетраэдрическую форму. Расстояние между атомом углерода и атомом водорода в молекуле метана (плечо диполя) составляет около 0,109 нм (1,09 Å). Молекула метана имеет тетраэдрическую форму, где атом углерода находится в центре, а четыре атома водорода расположены на вершинах тетраэдра. Углы между связями C-H составляют 109,47°.

Экспериментально показано, что все четыре σ -связи имеют одинаковую длину и энергию. Энергия σ -связи в молекуле метана составляет примерно 413 кДж/моль [15, 16].

При взаимодействии молекулы метана с молекулами угля молекула метана попадает во внешнее электрическое поле атомов углерода молекул угля. Молекула метана, будучи неполярной, деформируется, и в ней образуется дипольный момент.

Это происходит из-за смещения центра масс электронного облака относительно положительных ядер атомов водорода. В результате молекула становится временным диполем, ориентированным вдоль внешнего поля. Следовательно, энергия межмолекулярных взаимодействий суммируется с энергией упругой деформации молекулы. Результирующее значение энергии можно задать выражением [17]

$$W(s) = -\frac{A}{(H-s)^3} \left(1 - \frac{H-s}{2\rho}\right)^{-3} + \frac{1}{2}\gamma s^2, \quad (2)$$

где $H = z+s$ – «глубина зависания»,

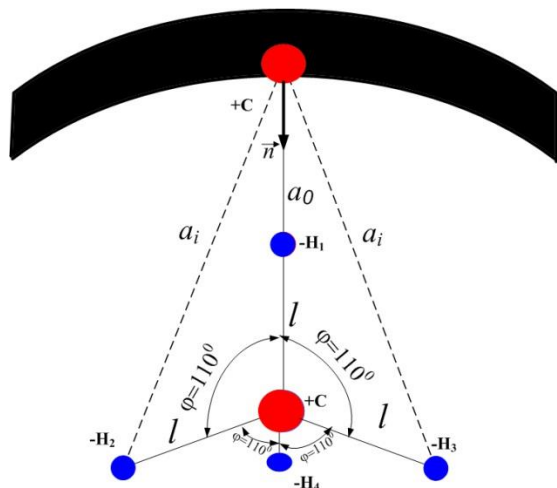


Рис. 1. Молекула метана вблизи поверхности микропоры угля:

$\vec{n}$ – вектор нормали к поверхности угля; a_i – расстояние от центра электронного облака атома водорода H до атома углерода C микропоры угля; φ – угол между направлениями собственных дипольных моментов молекулы метана CH_4 ; l – плечо диполя (длина связи $C-H$ в молекуле CH_4); a_0 – минимальное расстояние от атома водорода H до атома углерода C микропоры угля при $\varphi = 0$.

Fig. 1. Methane molecule near the surface of a micropore in coal matter:

$\vec{n}$ – vector of the normal to the coal surface; a_i – distance from the center of the electron cloud of the hydrogen atom H to the carbon atom C of the coal substance micropore; φ – angle between the directions of the proper dipole moments of the methane molecule CH_4 ; l – dipole shoulder (length of the $C-H$ bond in the CH_4 molecule); a_0 – minimum distance from the hydrogen atom H to the carbon atom C of the coal substance micropore at $\varphi = 0$.

определяемая согласно авторам работы [17] отношением размеров эллипсоида формы молекулы метана и радиусом поры; A – константа, значение которой можно определить по энергии десорбции; s – стрела перегиба, характеризующая степень деформации молекулы метана в электрическом поле (плечо наведенного диполя атома водорода в молекуле метана); γ – коэффициент жесткости молекулы, который может быть определен по частотам деформационных мод колебательных спектров метана.

Согласно данным, представленным в работе [17], энергия межмолекулярного взаимодействия на примере 3-амино-N-метилфталимида (3-АМФ) в зависимости от углов ориентации молекулы φ_i относительно поверхности адсорбента имеет два близких минимума энергии, то есть две устойчивые конфигурации деформированной молекулы с возможностью перехода из одной конфигурации в другую.

В данной статье рассматривается взаимодействие молекулы метана с атомом углерода, находящегося в структуре поверхности угля, для того, чтобы установить, зависит ли энергия связи молекулы метана с поверхностью угля от ее ориентации относительно поверхности. Для этого рассмотрим взаимодействие молекулы метана с атомом углерода в микропоре угля. На Рис. 1 представлена модель молекулы метана вблизи поверхности угля. Данная поверхность представляет собой цилиндр радиуса R , а вектор нормали совпадает по направлению с линией, соединяющей центры атомов углерода в молекулах метана и угля. Вращение молекулы метана происходит относительно оси, совпадающей с линией, проведенной через связь $C-H$ таким образом, что два атома водорода в молекуле метана лежат в одной плоскости, а наведенные дипольные моменты разворачиваются относительно прямой линии, соединяющей центры атомов углерода метана и угля, на угол, равный φ . В зависимости от угла поворота φ меняется и величина a_i .

На Рис. 2 представлена расчетная схема определения a_i – расстояния от атома углерода C до центра электронного облака атома водорода H_1 в зависимости от угла ориентации наведенного дипольного момента молекулы метана относительно нормали к поверхности микропоры угля. Молекулу метана будем вращать по часовой стрелке. По этому принципу были пронумерованы атомы водорода в молекуле метана.

Величина a_i определяется выражением

$$a_i^2 = (a_0 + l(1 - \cos \varphi_1))^2 + l^2 \sin^2 \varphi_1, \quad (3)$$

где φ_1 – угол поворота дипольного момента молекулы метана. Индекс 1 соответствует номеру атома водорода. Так как молекула метана симметрична, имеет одинаковое значение l для каждой связи С-Н и угол $\varphi \approx 110^\circ$ между связями С-Н, то при повороте молекулы метана по часовой стрелке величина a_i для атома H_1 будет увеличиваться в зависимости от φ_1 , а для атома H_2 – a_i будет уменьшаться в зависимости от φ_2 . При изменении угла φ_1 от 0 до 110° атом H_2 встанет на место атома H_1 , а угол φ_2 будет меняться в пределах от 110° до 0. Расстояние a_i

от атома углерода С до центра электронного облака атома водорода H_2 будет так же определяться по формуле (3). Атом водорода H_3 по мере удаления атома H_1 от поверхности поры будет удаляться еще дальше и его вклад в энергию межмолекулярного взаимодействия будет уменьшаться до нуля, так как он будет экранироваться атомом углерода молекулы метана. Атом H_4 во взаимодействии участвовать не будет, т. к. проекция связи С- H_4 на нормаль будет равна нулю. Таким образом, энергия межмолекулярного взаимодействия метана с поверхностью угольного вещества микропоры складывается из двух слагаемых:

$$W(s) = W_1(s) + W_2(s), \quad (4)$$

где $W_1(s)$ – энергия межмолекулярного взаимодействия атома H_1 и атома углерода поверхности поры, а $W_2(s)$ – энергия межмолекулярного взаимодействия атома H_2 и атома углерода поверхности поры соответственно.

Наведенное плечо диполя атома Н можно определить по формуле

$$s_i(\varphi) = \frac{\alpha}{a_i^2}, \quad (5)$$

где α – электронная поляризуемость атома водорода.

Коэффициент жесткости γ молекулы метана определим из выражения

$$\frac{\gamma s^2}{2} = h\nu, \quad (6)$$

где $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка; ν – частота деформационных мод ИК спектра молекулы CH_4 . Согласно данным работ [18, 19, 20] частоты деформационных мод колебательных спектров метана лежат в диапазоне $(1300 \div 1500)$ cm^{-1} . Однако следует иметь в виду, что значения частот могут незначительно меняться в зависимости от условий эксперимента (температура, давление и др.).

Расчет потенциальной энергии взаимодействия молекулы метана с поверхностью угольного вещества проводился по формуле (2) с учетом формул (3-6). Для расчета $W(s)$ использовались следующие параметры: $a_0 = 1.9$ Å; $A = 143$ кДж·Å³/моль; $\gamma = 967,2$ кДж·Å²/моль; $l = 1,09$ Å; $R = 8$ Å. Результаты расчета представлены на Рис. 3.

Полученная зависимость имеет один отрицательный максимум

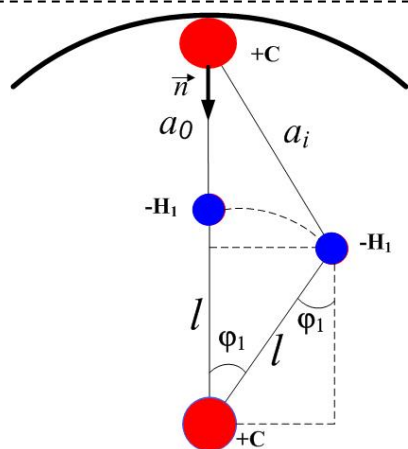


Рис. 2. Расчетная схема определения a_i для атома H_1 при повороте молекулы метана на угол φ_1

Fig. 2. Calculation scheme for determining a_i for the H_1 atom when the methane molecule is rotated by an angle of φ_1

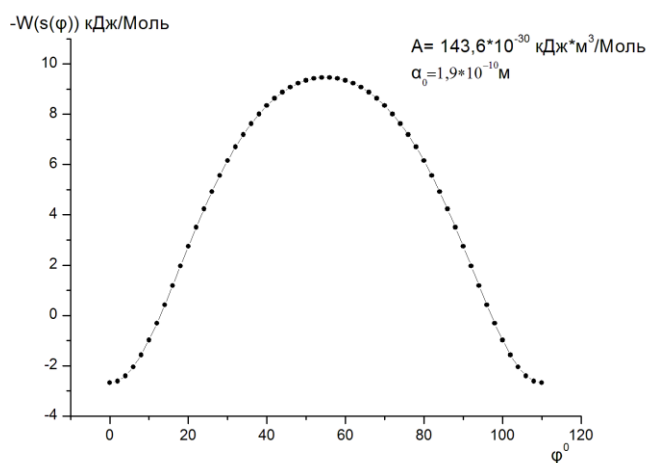


Рис. 3. График зависимости энергии $W(s)$ от ориентации молекулы метана относительно поверхности микропоры угля

Fig. 3. Graph of the dependence of energy $W(s)$ on the orientation of the methane molecule relative to the surface of the coal micropore

энергии притяжения при симметричном расположении молекулы метана относительно нормали к поверхности угольной микропоры, то есть угол между направлением связей C-H₁ и C-H₂ и нормали к поверхности поры равен 55°, что составляет половину угла между плечами диполей молекулы метана. Величина максимума энергии межмолекулярных связей между молекулой метана и поровой поверхностью равна 9,5 кДж/моль для угла $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi = 55^\circ$, что соответствует устойчивой связи молекулы метана с поверхностью микропоры, и для удаления метана необходимо преодолеть данную силу взаимодействия. При энергии межмолекулярного взаимодействия, равной – 2,66 кДж/моль ($\varphi_1 = 0$), молекула начнет разворачиваться до тех пор, пока не займет устойчивое положение в микропоре угля. Это означает, что при значениях a , меньших, чем радиус молекулы метана (~2,1 Å), энергия межмолекулярного взаимодействия соответствует энергии отталкивания, а при расстояниях больших, чем 2,1 Å – энергии притяжения.

Представленные данные находятся в хорошем согласии с результатами расчетов потенциальной энергии взаимодействия молекулы метана первого слоя с поровой поверхностью в микропоре каменного угля, опубликованных в работе [12]. В микропорах каменного угля в первом слое содержится молекул метана на порядок больше, чем во втором и третьем слоях. При симметричном расположении молекулы метана относительно нормали к поверхности угольной микропоры энергия межмолекулярной связи метана с углем превышает энергию теплового движения молекул газа (кТ~3кДж/моль). Таким образом, для удаления молекулы метана из микропор и перехода ее в свободное состояние необходимо приложить энергию, которая по величине больше энергии связи, равной 9,5 кДж/моль, т. е. нужно разрушить микропору.

Выводы

1. Молекулы метана, располагающиеся в первом слое относительно поверхности угольной микропоры симметрично относительно нормали в поверхности $\varphi = 55^\circ$, имеют максимальное значение потенциальной энергии и не могут быть удалены с помощью процесса дегазации.

2. Разрушение микропористой структуры угля дает дополнительный объем газа при внезапных выбросах, который составляет значительную часть природной газонасности угольного пласта.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Каталог внезапных выбросов угля и газа по шахтам восточных и северных месторождений страны за 1975–1982 гг. Кемерово : ВостНИИ, 1983.

2. Касаточкин В. И., Ларина Н. К. Строение и свойства природных углей. Москва : Недра, 1975. 159 с.

3. Хуань Чэн, Ци Ван, Сон Чжан, Син Хань. Влияние условий эксперимента на результаты определения характеристик пор угля // Кокс и химия. 2015. № 9. С. 12–23.

4. Исмагилов З. Р., Шикина Н. В., Журавлева Н. В., Потокина Р. Р., Теряева Т. Н., Керженцев М. А. Пористая структура углей Усинского месторождения Печорского угольного бассейна // Химия твердого топлива. 2014. № 4. С. 3–11.

5. Чернов О. И., Пузырев В. Н. Прогноз внезапных выбросов угля и газа. Москва : Недра, 1979. 296 с.

6. Зыков И. Ю., Звеков А. А., Дудникова Ю. Н., Федорова Н. И., Исмагилов З. Р. Тектурные характеристики углеродных сорбентов из каменных углей различных стадий метаморфизма // Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2019. № 4. С. 64–69.

7. Зыков В. С. Внезапные выбросы угля и газа и другие газодинамические явления в шахтах. Кемерово: Институт угля и углехимии СО РАН, 2010. 333 с.

8. Плаченков Т. Г., Колосенцев С. Д. Порометрия. Ленинград : Химия, 1988. 175 с.

9. Klobes P., Meyer K., Munro R. G. Porosity and Specific Surface Area Measurements for Solid Materials. NIST, 2006.

10. Киряева Т. А., Опарин В. Н., Яценко Д. А. Микро-наноструктурный анализ особенностей в строении угольного вещества в зависимости от стадий его метаморфизма // Горный информационно-аналитический бюллетень. 2021. № 5. С. 5–23.

11. Эттингер И. Л. Физическая химия газонасыщенного угольного пласта. Москва : Наука, 1975. 112 с.

12. Дырдин В. В., Полягалов Ю. И., Лудзиш В. С., Шепелева С. А., Терехов А. Н., Потапов П. В., Фофанов А. А., Ким Т. Л. К вопросу образования «закрытых» пор в каменном угле // Вестник Научного центра ВостНИИ по промышленной и экологической безопасности. 2021. № 4. С. 39–49.

13. Henze Henry R. [et al.] The number of isomeric hydrocarbons of the methane series // Journal of the American Chemical Society. ACS Publishers. 1931. Vol. 53. № 8. P. 3077–3085. DOI: 10.1021/ja01359a034.

14. Pólya G. Kombinatorische Anzahlbestimmungen für Gruppen, Graphen und chemische Verbindungen // Acta Mathematica. 1937. Vol. 68. P. 145–254. DOI: 10.1007/BF02546665.

15. Виноградова М. Г., Папулова Д. Р., Артемьев А. А. Энергии связей замещенных метана и его аналогов // Успехи современного естествознания. 2006. № 11. С. 36–37.

16. Папулов Ю. Г., Левин В. П., Виноградова М. Г. Строение вещества в естественнонаучной картине мира. Молекулярные аспекты. Учебное пособие, 2-ое издание. Тверь : ТвГУ, 2005. 208 с.

17. Сечкарев А. В., Бегер В. Н., Земский В. И.

Конфигурационные переходы многоатомных молекул, адсорбированных неоднородной поверхностью диэлектрика // Журнал физической химии. 1993. Т. 67. № 4. С. 400–404.

18. Millot G. [et al.] Collisional broadening, line shifting, and line mixing in the stimulated Raman 2v₂ Q branch of CH₄ // J. Chem. Phys. 1991. Vol. 95. № 11. Pp. 7938–7946.

19. Литтл Л. Инфракрасные спектры адсорбированных молекул. Москва : Мир, 1966. 514 с.

20. Леонтьева А. В., Прохоров А. Ю., Дмитриев Ю. А. Низко- и высокотемпературный переходы в кристаллическом метане // Вестник Новгородского государственного университета. 2021. № 4(125). С. 38–42. DOI: 10.34680/2076-8052.2021.4(125).38-42

© 2025 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:

Фофанов Андрей Алексеевич, ст. преподаватель, Кузбасского государственного технического университета имени Т. Ф. Горбачева (г. Кемерово, ул. Весенняя, д.28), e-mail: faa.fiz@mail.ru

Заявленный вклад авторов:

Фофанов Андрей Алексеевич – постановка исследовательской задачи, научный менеджмент, обзор соответствующей литературы, концептуализация исследования, сбор и анализ данных, выводы, написание текста.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

Original article

FEATURES OF METHANE ADSORPTION ON A MICROPOROUS SURFACE IN THE STRUCTURE OF COAL

Andrey A. Fofanov

T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University

* for correspondence: faa.fiz@mail.ru



Article info

Received:
12 May 2025

Accepted for publication:
22 June 2025

Accepted:
30 June 2025

Published:
28 August 2025

Keywords: methane molecule, hydrogen atom, carbon atom, coal, micropore surfaces, interaction energy, orientation relative to the surface, rotation angle, normal to the surface

Abstract.

The production needs associated with the consumption of coal as an energy source lead to the need to increase the pace of coal production, thereby mining formations at great depths. As the depth of the mined coal seams increases, their natural gas content increases. This increases the likelihood of sudden emissions of coal and gas. The key factors that determine the occurrence of sudden emissions of coal and gas are the gas content of the reservoir, the structure of the coal and the rock pressure, depending on the depth of the reservoir. Since coal is a highly porous substance, its structure is determined by the distribution of pores into different types and sizes. The pores are filled with mine gas, which consists of a mixture of various gases. The largest proportion of them is methane, the concentration of which is more than 80%. The distribution of pores in coal is such that micropores in it make up a large part and can make a significant contribution to the processes of additional gas release. At the same time, the mechanism of interaction of methane molecules with the surface of the micropore and the energy of their intermolecular bonding are not given by the authors. Based on the above, it can be concluded that at the moment the issues of the dependence of the binding energy of a methane molecule with a microporous coal surface on the orientation of its dipole moments formed by C-H bonds relative to the surface are poorly understood and relevant. The article considers a physical model of the interaction of methane molecules with a carbon atom, which is located in a coal substance. The model allows us to

establish the dependence of the binding energy of a methane molecule with a microporous coal surface on the orientation of its dipole moments formed by C-H bonds relative to the surface. The energy of interaction of a methane molecule with the surface of a micropore is calculated and a condition for a stable configuration of the position of the methane molecule relative to the carbon atom in the structure of the microporous surface of coal is obtained, at which the energy has a maximum value

For citation: Fofanov A.A. Features of methane adsorption on a microporous surface in the structure of coal. *Vestnik Kuzbasskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*=Bulletin of the Kuzbass State Technical University. 2025; 4(170):84-90. (In Russ., abstract in Eng.). DOI: 10.26730/1999-4125-2025-4-84-90, EDN: VIIYCM

REFERENCES

1. Catalogue of sudden coal and gas outbursts in mines of the eastern and northern deposits of the country for 1975–1982. Kemerovo: VostNII: 1983.
2. Kasatochkin V.I., Larina N.K. Structure and properties of natural coals. Moscow: Nedra; 1975. 159 p.
3. Huan Cheng, Qi Wang, Song Zhang, Xing. The influence of experimental conditions on the results of determining the characteristics of coal pores. *Coke and Chemistry*. 2015; 9:12–23.
4. Ismagilov Z.R., Shikina N.V., Zhuravleva N.V., Potokina R.R., Teryaeva T.N., Kerzhentsev M.A. Porous structure of coals of the Usinskoye deposit of the Pechora coal basin. *Chemistry of solid fuel*. 2014; 4:3–11.
5. Chernov O.I., Puzyrev V.N. Forecast of sudden coal and gas emissions. Moscow: Nedra; 1979. 296 p.
6. Zykov I.Yu., Zvekov A.A., Dudnikova Yu.N., Fedorova N.I., Ismagilov Z.R. Textural characteristics of carbon sorbents from coals of various stages of metamorphism. *Bulletin of the Kuzbass State Technical University*. 2019; 4:64–69.
7. Zykov V.S. Sudden outbursts of coal and gas and other gas-dynamic phenomena in mines Kemerovo: Institute of Coal and Coal Chemistry SB RAS; 2010. 333 p.
8. Plachenov T.G., Kolosentsev S.D. Leningrad: Chemistry; 1988. 175 p.
9. Klobes P., Meyer K., Munro R. G. Porosity and Specific Surface Area Measurements for Solid Materials. NIST, 2006.
10. Kiryaeva T.A., Oparin V.N., Yatsenko D.A. Micro-nanostructural analysis of the structural features of coal matter depending on the stages of its metamorphism. *Mining Information and Analytical Bulletin*. 2021; 5:5–23.
11. Ettinger I.L. Physical chemistry of gas-bearing coal seam. Moscow: Nauka; 1975. 112 p.
12. Dyrdin V.V., Polygalov Yu.I., Ludzish V.S., Shepeleva S.A., Terekhov A.N., Potapov P.V., Fofanov A.A., Kim T.L. On the formation of "closed" pores in coal. *Bulletin of the Scientific Center of the Eastern Research Institute for Industrial and Environmental Safety*. 2021; 4:39–49.
13. Henze Henry R. [et al.] The number of isomeric hydrocarbons of the methane series. *Journal of the American Chemical Society*. ACS Publishers. 1931; 53(8):3077–3085. DOI: 10.1021/ja01359a034.
14. Pólya G. Kombinatorische Anzahlbestimmungen für Gruppen, Graphen und chemische Verbindungen. *Acta Mathematica*. 1937; 68:145–254. DOI: 10.1007/BF02546665.
15. Vinogradova M.G., Papulova D.R., Artemyev A.A. Bond energies of substituted methane and its analogs. *Advances in modern natural science*. 2006; 11:36–37.
16. Papulov Yu.G., Levin V.P., Vinogradova M.G. The structure of matter in the natural science picture of the world. Molecular aspects. Textbook, 2nd edition. Tver: Tver State University; 2005. 208 p.
17. Sechkarev A.V., Beger V.N., Zemsky V.I. Configurational transitions of polyatomic molecules adsorbed by a non-uniform dielectric surface. *Journal of Physical Chemistry*. 1993; 67(4):400–404.
18. Millot G. [et al.] Collisional broadening, line shifting, and line mixing in the stimulated Raman 2v₂ Q branch of CH₄. *J. Chem. Phys.* 1991; 95(11):7938–7946.
19. Little L. Infrared spectra of adsorbed molecules. Moscow: Mir; 1966. 514 p.
20. Leontyeva A.V., Prokhorov A.Yu., Dmitriev Yu.A. Low- and high-temperature transitions in crystalline methane. *Bulletin of Novgorod State University*. 2021; 4 (125):38–42. DOI: 10.34680/2076-8052.2021.4(125).38-42.

© 2025 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:

Andrey A. Fofanov, senior lecturer, T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University (Kemerovo, Vesennaya St., 28), e-mail: faa.fiz@mail.ru

Contribution of the authors:

Andrey A. Fofanov – formulation of a research task, scientific management, review of relevant literature, conceptualization of research, data collection and analysis, conclusions, writing a text

All authors have read and approved the final manuscript.

