

ДИНАМІКА УТВОРЕННЯ СПОЛУК МІКРОЕЛЕМЕНТІВ ТА ЇХ РОЗПОДІЛ В ПРОДУКТАХ ТЕРМІЧНОЇ ПЕРЕРОБКИ ВУГІЛЛЯ

S. Pinchuk¹, <https://orcid.org/0009-0002-3570-4131>

T. Sharabura¹ <https://orcid.org/0009-0002-9175-6876>

¹Dnipro University of Technology, Dnipro, Ukraine

DYNAMICS OF COMPOUND FORMATION OF TRACE ELEMENTS AND THEIR DISTRIBUTION IN THE PRODUCTS OF COAL THERMAL TREATMENT

Мета. Дослідження характеру і динаміки утворення сполук мікроелементів при термічній переробці вугілля та їх розподіл в продуктах переробки.

Методика полягає в проведенні теоретичних досліджень з використанням програмного комплексу по моделюванню багатокомпонентних рівноважних гетерогенних систем.

Результати. В статті наведено результати дослідження утворення сполук мікроелементів малої групи (Li, Ba, Ge, Ti, Zr, Mo, Cu, Zn) при термічній переробці вугілля з використанням як якості окисника повітря та кисню. Встановлено, що всі малі елементи, крім германію та цинку, знаходяться як у розплаві, так і у газоподібній фазі. Визначено температурні інтервали переходу окремих мікроелементів у газову фазу та встановлено, що цинк активно переходить у газову фазу за температур нижче 1500 °С, тоді як більшість інших елементів малої групи демонструють максимальні концентрації в газах при температурах понад 1500 °С. Кількісно визначено ступінь переходу мікроелементів у газову фазу залежно від виду окисника, що показує суттєве зростання леткості літію, титану та міді (до 83–90% та 64–75%) та менш інтенсивний перехід барію та молібдену (22–32% та 35–75%). Визначено температуру переходу сполук мікроелементів із газоподібної фази в рідку для розробки систем утилізації мікроелементів із газоподібної фази.

Наукова новизна. Отримали подальший розвиток закономірності утворення та розподілу мікроелементів малої групи в процесі термічної переробки вугілля залежно від типу окисника та температури процесу. Визначено температурні інтервали й ступені переходу окремих мікроелементів у газову фазу, що дозволило уточнити їх леткість та поведінку під час газифікації. Отримані результати формують наукові передумови для оптимізації технологій вилучення цінних мікроелементів із продуктів термічної переробки вугілля.

Практична значимість. Отримані результати дозволяють оптимізувати режими термічної переробки вугілля для підвищення вилучення цінних мікроелементів та зниження їх втрат у золошлакових відходах. Визначені закономірності переходу мікроелементів у газову та конденсовану фази можуть бути використані для вдосконалення систем очищення газів і розроблення технологій комплексного використання українського вугілля, що підвищує його економічну та екологічну ефективність.

Ключові слова: вугілля, мікроелементи, сполуки, термічна переробка, коефіцієнт витрати окисника, газифікація, розплав золи, газова фаза.

Вступ. Згідно з представленою в Україні концепцію «зеленого переходу» передбачається досягнення вуглецевої нейтральності економіки країни до 2050 року та зменшення залежності від забруднювальних джерел енергії. Реалізація такого курсу потребує значних інвестицій у відновлювані ресурси та екологічні технології [1]. Попри ці тенденції, вугілля у найближчій перспективі залишатиметься важливим джерелом енергії через значні запаси порівняно зі зменшенням ресурсів нафти й природного газу. Відомо, що вугілля містить різні цінні компоненти, до яких можна віднести германій, уран, цинк, мідь, титан тощо [2–4]. Хоча структура та властивості вугільної речовини досліджені добре, питання вмісту рідких елементів, форм їхнього зв'язку з вугільною речовиною, методів їх кількісного визначення у вугіллі і під час його термічної переробки та контролю викидів залишаються актуальними й недостатньо вивченими [5].

Так званий мікроелемент визначається як елемент, що міститься в дуже низькій кількості. Вміст мікроелементів у твердих горючих копалинах – вугіллі та горючих сланцях, зазвичай не перевищує 0,1% (1000 г/т). Розподіл мікроелементів може змінюватися в залежності від геологічних умов утворення вугілля та процесів його формування [6, 7]. Різні типи вугілля, зокрема бітумінозні, антрацит чи кам'яне, можуть істотно відрізнятися за хімічним складом та рівнем накопичення мікроелементів [8]. Розуміння особливостей розподілу мікроелементів у вугіллі є важливим для енергетики та промисловості, оскільки впливає на якість сировини та умови її переробки [9].

Існують різні способи, які спрямовані на вилучення цінних мікроелементів з вугілля під час його спалювання або інших процесів термічної переробки [2]. Одним з таких способів є газифікація вугілля, процес якої полягає у термічному перетворенні вугілля у газову форму за високої температури та окисників [10]. Загальний принцип процесу газифікації включає в себе отримання газів, таких як метан, водень та оксиди вуглецю. Вплив на вилучення мікроелементів залежить від умов газифікації. Зазвичай, висока температура сприяє переходу багатьох мікроелементів у газоподібний стан чи утворенню летких сполук [11, 12]. Керування цим процесом та оптимізація умов можуть допомогти в контролі вилучення мікроелементів та поліпшенні чистоти отриманих газів.

Викладення основного матеріалу і аналіз отриманих результатів. Для оцінки поведінки мікроелементів при їх корисному використанні та мінімізації шкідливого впливу на навколишнє середовище, необхідно знати характер і динаміку утворення сполук мікроелементів та їх розподіл у продуктах переробки.

Відомо, що мікроелементи поділяються на 3 основні групи [13]:

1. Токсичні елементи. До цієї групи належать: миш'як (As), вміст якого у твердому паливі знаходиться в діапазоні 9–65 г/т; ртуть (Hg) – 0,009–0,9 г/т; берилій (Be) – 1,5–4 г/т; фтор (F) – 2–120 г/т.

2. Потенційно-токсичні елементи. До цієї групи належать: марганець (Mn) – 52–170 г/т; свинець (Pb) – 5–18 г/т; нікель (Ni) – 9–38 г/т; ванадій (V) – 5–38 г/т; хром (Cr) – 4–32 г/т; кобальт (Co) – 5–11 г/т.

3. Малі елементи. До цієї групи належать: літій (Li) – 2–23 г/т; барій (Ba) – 60–3650 г/т; германій (Ge) – 0,16–63,4 г/т; титан (Ti) – 260–2083 г/т; цирконій (Zr) – 32–93 г/т; молібден (Mo) – 0,1–0,85 г/т; мідь (Cu) – 10–22 г/т; цинк (Zn) – 3–24 г/т.

В даний час у зв'язку з обмеженими світовими запасами цінних і рідкісних елементів та складною геополітичною ситуацією важливим є вилучення з вугілля в процесі його переробки мікроелементів малої групи. Для розуміння розподілу даних мікроелементів під час термічної переробки вугілля проведено дослідження процесу газифікації вугілля з визначенням впливу параметрів процесу на динаміку утворення деяких мікроелементів та їх розподіл у продуктах переробки (між золою та газами).

Дослідження поведінки мікроелементів в процесі газифікації вугілля проведено за допомогою програмного комплексу з моделювання багатокомпонентних рівноважних систем. Склад досліджуваного вугілля наведено у таблицях 1–3.

Таблиця 1

Склад досліджуваного вугілля

Склад	W ^p	A ^p	S ^p	C ^p	H ^p	N ^p	O ^p
Вміст, %	10,5	21,6	2,1	54,6	3,9	0,9	6,4

Таблиця 2

Склад зольної частини досліджуваного вугілля

Склад	SiO	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	K ₂ O	Na ₂ O	TiO ₂
Вміст, %	12,5	4,0	3,3	0,3	0,6	0,6	0,2	0,1

Таблиця 3

Вміст мікроелементів досліджуваного вугілля

Елемент	Li	Ba	Ge	Ti	Zr	Mo	Cu	Zn
Вміст, г/т	23	260	15	2083	93	0,6	18	22

В якості окисника використовувалися повітря і кисень. Коефіцієнт витрати окисника при повітряній газифікації змінювався в межах 0,3–1, а при кисневій – 0,2–0,45. Визначено, що зі збільшенням коефіцієнта витрати окисника спостерігається збільшення температури. При використанні в якості окисника повітря температура змінюється в діапазоні 811–1981 °С, а при використанні в якості окисника кисню температура змінюється в діапазоні 887–2085 °С.

Дослідження впливу виду та кількості окисника на утворення сполук мікроелементів малої групи показали, що при термічній переробці вугілля усі малі елементи, крім германію та цинку, знаходяться як у розплаві, так і у газоподібній фазі.

Встановлено, що характер поведінки літію при повітряній та кисневій газифікації є аналогічним. У розплаві золи літій присутній у сполуці Li₂SiO₃ при коефіцієнті витрати окисника рівному 0,3–0,4 при повітряній газифікації та при коефіцієнті витрати окисника рівному 0,2–0,3 – при кисневій. Зі збільшенням коефіцієнта витрати окисника спостерігається зниження вмісту Li₂SiO₃, яке змінюється в інтервалі 46,30–29,45 мг/кг при повітряній газифікації та 110,90–46,60 мг/кг – при кисневій (рис. 1 а).

У газоподібній фазі літій у більшій кількості присутній у сполуці гідроксиду літію LiOH , максимальний вміст якої при повітряній газифікації знаходиться при коефіцієнті витрати окисника 0,45 і становить $20,05 \text{ мг/м}^3$ (рис. 1 б), а при кисневій газифікації знаходиться при коефіцієнті витрати окисника 0,35 і дорівнює $48,32 \text{ мг/м}^3$. Крім того, у газоподібній фазі присутні сполуки літію, вміст яких незначний ($\text{Li} = 0,12 \text{ мг/м}^3$ при коефіцієнті витрати окисника 0,75; $\text{LiO} = 0,01 \text{ мг/м}^3$ при коефіцієнті витрати окисника 0,85).

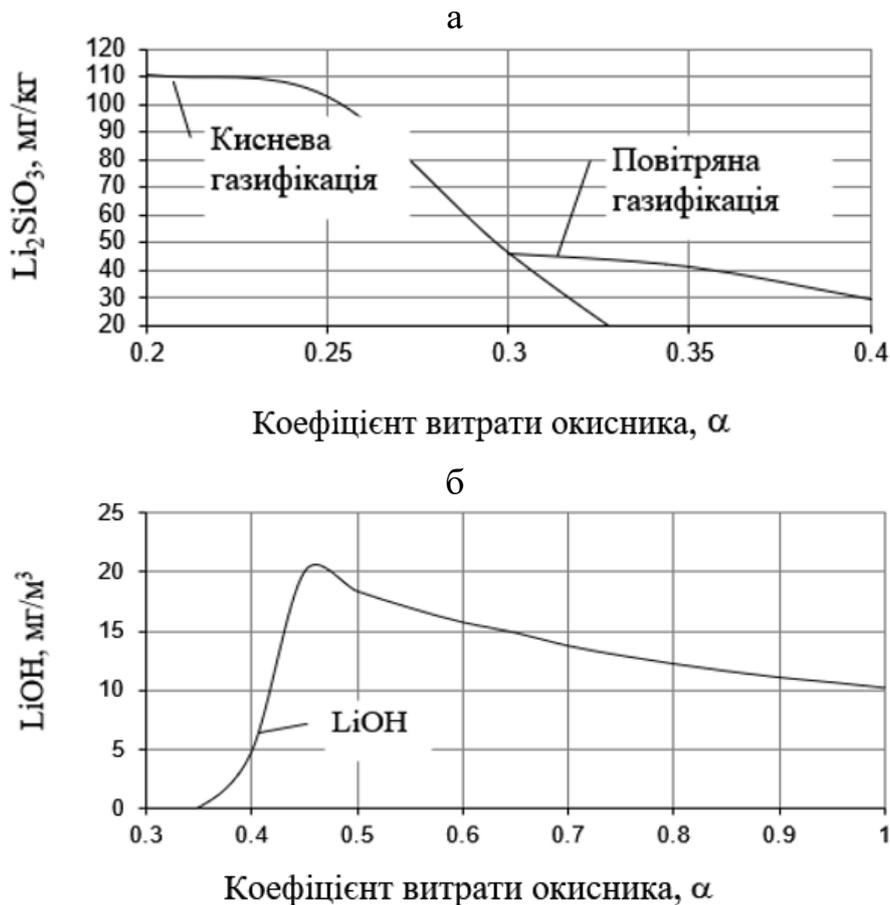


Рис. 1. Вплив коефіцієнта витрати окисника на утворення сполук літію в розплаві золи (а) та в газоподібній фазі при повітряній газифікації (б)

Дослідження показали, що барій у розплаві золи присутній у поєднанні BaSiO_3 при коефіцієнті витрати окисника рівному 0,3–0,9 при повітряній газифікації та при коефіцієнті витрати окисника рівному 0,2–0,45 – при кисневій. Зі збільшенням коефіцієнта витрати окисника спостерігається зниження вмісту BaSiO_3 , яке змінюється в інтервалі $125,60\text{--}15,73 \text{ мг/кг}$ при повітряній газифікації та $301,50\text{--}28,45 \text{ мг/кг}$ – при кисневій (рис. 2 а).

У газоподібній фазі барій у більшій кількості присутній у наступних сполуках: Ba(OH)_2 , BaOH , BaO при повітряній газифікації та Ba(OH)_2 , BaOH , BaO , BaS – при кисневій. Як видно з графіка (рис. 2 б), при повітряній газифікації максимумами вмісту сполук Ba(OH)_2 і BaO знаходяться при коефіцієнті витрати окисника 0,95 і відповідно становлять $21,77 \text{ мг/м}^3$ і $9,44 \text{ мг/м}^3$, вміст сполуки BaOH максимально становить $2,72 \text{ мг/м}^3$ при коефіцієнті витрати окисника 0,9.

При кисневій газифікації вміст всіх сполук барію збільшується зі збільшенням коефіцієнта витрати окисника і вони не мають явно виражених максимумів. Вміст $Ba(OH)_2$ змінюється в діапазоні 0,00001–69,33 мг/м³, вміст $BaOH$ змінюється в діапазоні 0,0002–57,97 мг/м³, вміст BaO змінюється в діапазоні 0,005–33,17 мг/м³, вміст BaS змінюється в діапазоні 0,004–51,67 мг/м³, (рис. 2 в). У газоподібній фазі в невеликій кількості барій присутній у наступних сполуках ($Ba = 0,31$ мг/м³; $BaH = 0,004$ мг/м³).

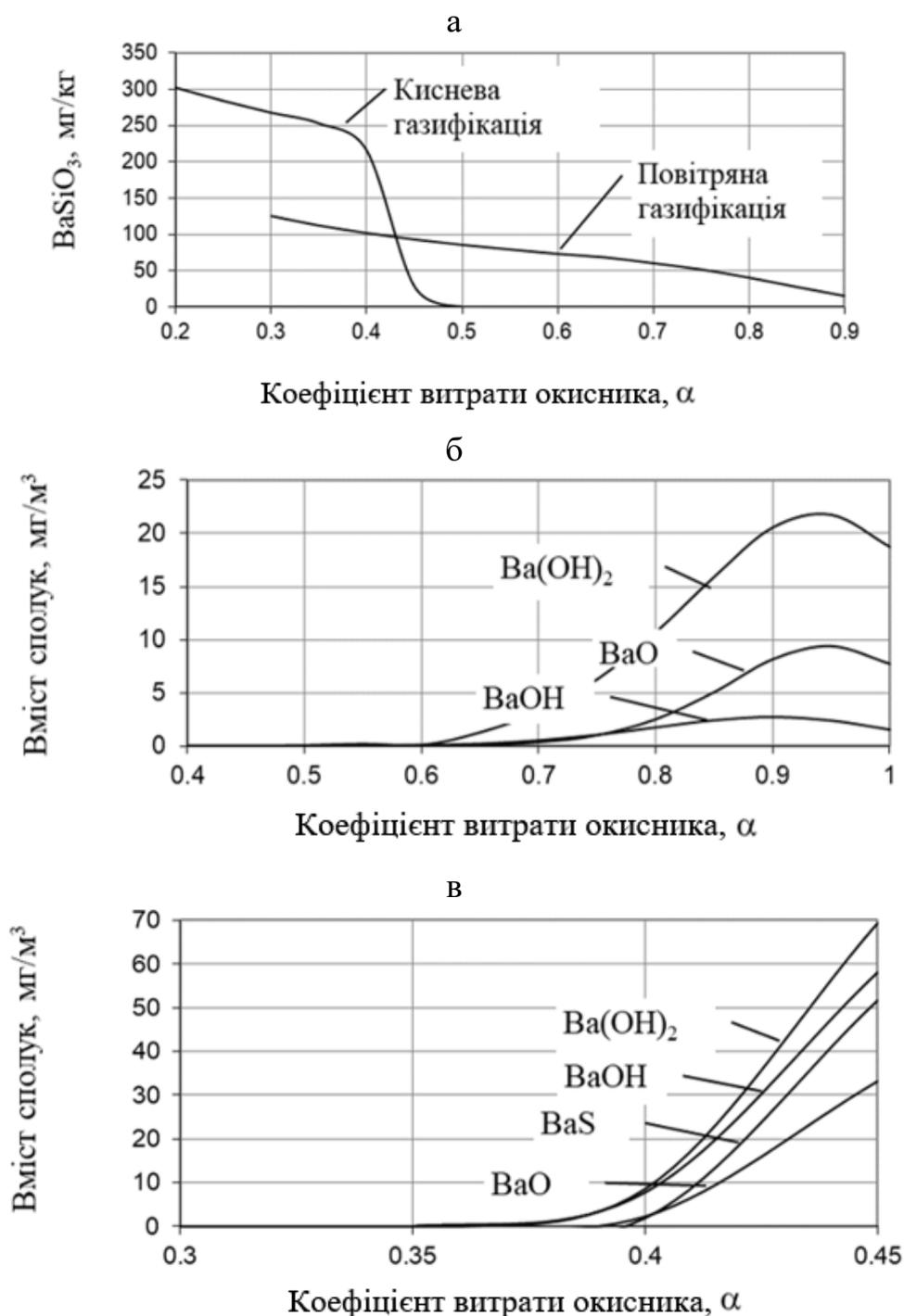


Рис. 2. Вплив коефіцієнта витрати окисника на утворення сполук барію в розплаві золи (а), у газоподібній фазі при повітряній (б) та кисневій (в) газифікації

Дослідженнями встановлено, що характер поведінки германію при повітряній та кисневій газифікації є аналогічним (рис. 3). При термічній переробці вугілля германій у розплаві золи не присутній, він повністю переходить у газоподібну фазу.

У газоподібній фазі германій у більшій кількості присутній у сполуках GeS та GeO. Зі збільшенням коефіцієнта витрати окисника спостерігається збільшення вмісту германію, що реагує з киснем, утворюючи оксид германію GeO, так як сірка реагує з воднем, утворюючи сполуку H₂S. Як видно з графіка (рис. 3 а), при повітряній газифікації максимум вмісту GeO знаходиться при коефіцієнті витрати окисника 0,7 і становить 3,06 мг/м³. Вміст сполуки GeS зменшується зі збільшенням коефіцієнта витрати окисника та знаходиться в інтервалі 7,39–0,00003 мг/м³. При кисневій газифікації сполуки GeS та GeO явно виражених максимумів не мають. Зі збільшенням коефіцієнта витрати окисника вміст GeO збільшується і знаходиться в діапазоні 0,008–7,71 мг/м³, а вміст GeS зменшується та знаходиться в діапазоні 17,74–4,32 мг/м³ (рис. 3 б). Крім того, у газоподібній фазі присутні сполуки германію, вміст яких незначний (Ge = 0,00006 мг/м³; GeO₂ = 0,0007 мг/м³; GeS₂ = 0,0015 мг/м³).

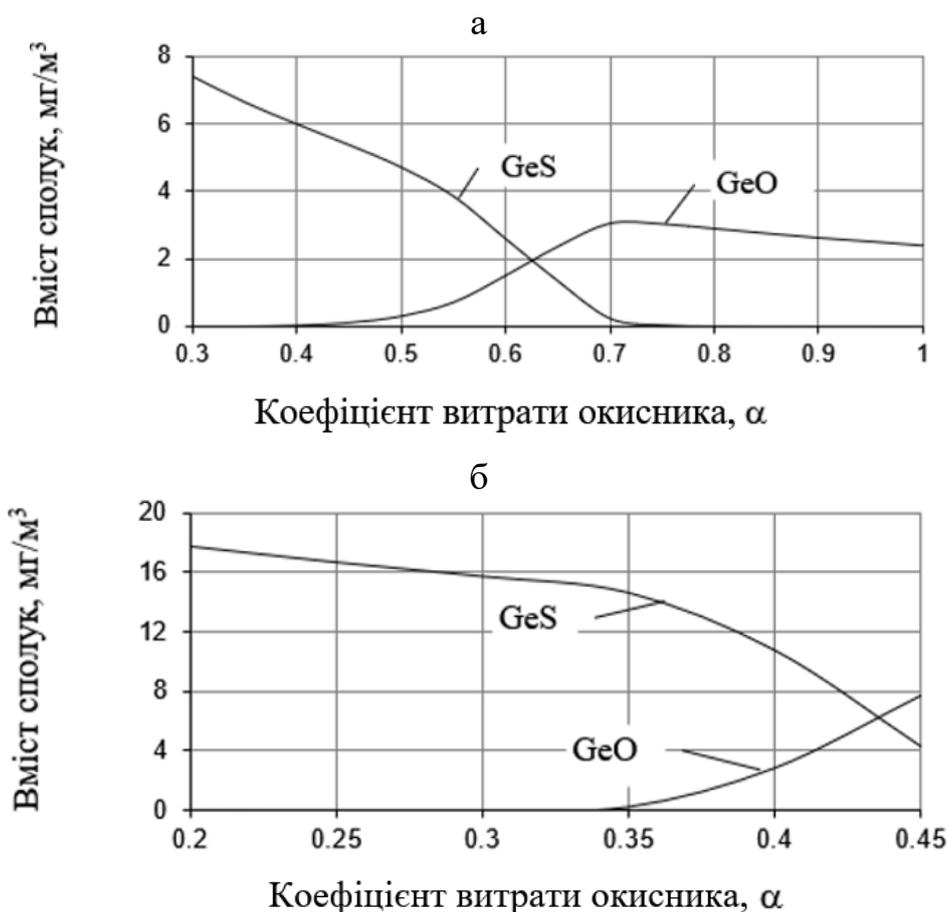


Рис. 3. Вплив коефіцієнта витрати окисника на утворення сполук германію в газоподібній фазі при повітряній (а) та кисневій (б) газифікації

Дослідженнями встановлено, що характер поведінки титану при повітряній та кисневій газифікації є аналогічним. У розплаві золи титан присутній у сполуці TiO_2 при коефіцієнті витрати окисника рівному 0,3–0,4 при повітряній газифікації та при коефіцієнті витрати окисника рівному 0,2–0,25 – при кисневій. Зі збільшенням коефіцієнта витрати окисника спостерігається зниження вмісту TiO_2 , яке змінюється в інтервалі 373,00–303,30 мг/кг при повітряній газифікації та 894,30–840,4 мг/кг – при кисневій (рис. 4 а), після чого повністю переходить у газоподібну фазу.

У газоподібній фазі максимум вмісту оксиду титану TiO_2 знаходиться при коефіцієнті витрати окисника 0,95 і становить 33,89 мг/м³ (рис. 4 б), а при кисневій газифікації знаходиться при коефіцієнті витрати окисника 0,45 і дорівнює 115,61 мг/м³. Також у газоподібній фазі присутня сполука титану, вміст якої є незначним – це гідроксид титану $TiOH$, максимум вмісту якого знаходиться при коефіцієнті витрати окисника 0,85 і становить 0,0001 мг/м³.

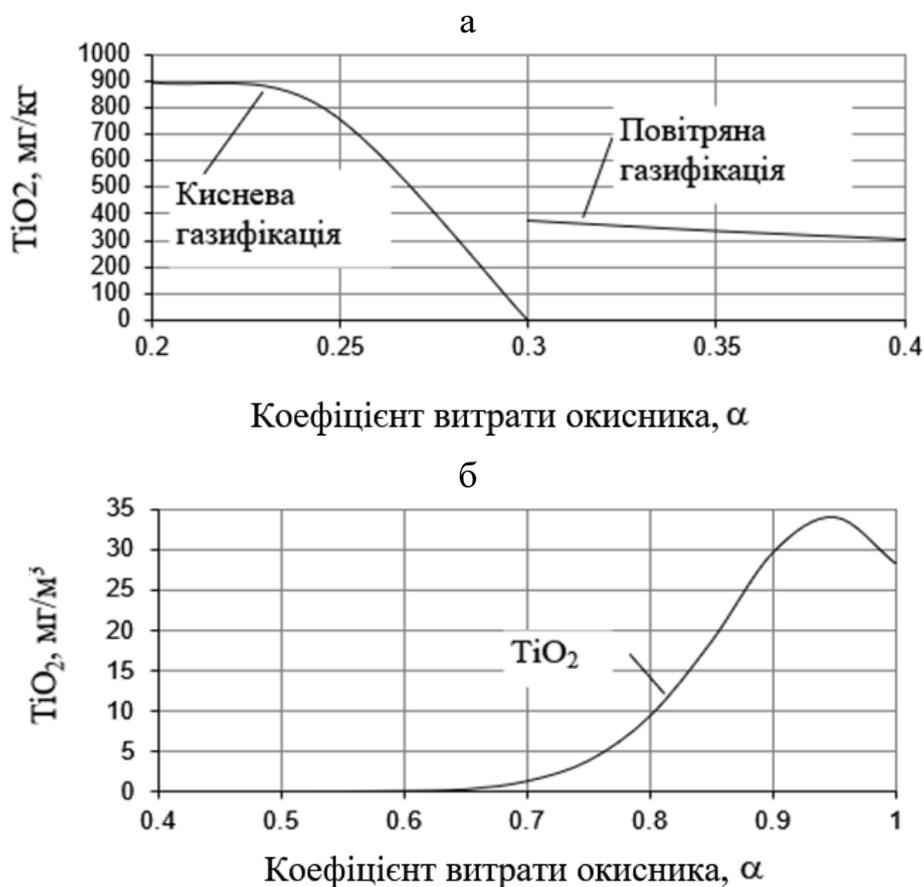


Рис. 4. Вплив коефіцієнта витрати окисника на утворення сполук титану в розплаві золи (а) та у газоподібній фазі при повітряній газифікації (б)

Дослідженнями встановлено, що характер поведінки молібдену при повітряній та кисневій газифікації є аналогічним. У розплаві золи молібден присутній у сполуці MoS_2 при коефіцієнті витрати окисника рівному 0,3–0,4 при повітряній газифікації та при коефіцієнті витрати окисника рівному 0,2 – при кис-

невій. Зі збільшенням коефіцієнта витрати окисника спостерігається зниження вмісту MoS_2 , яке змінюється в інтервалі 0,31–0,25 мг/кг при повітряній газифікації та 0,82 мг/кг – при кисневій (рис. 5 а).

У газоподібній фазі молибден у більшій кількості присутній у сполуці оксиду молибдену MoO_3 , максимальний вміст якої при повітряній газифікації знаходиться при коефіцієнті витрати окисника 0,95 і становить 0,07 мг/м³ (рис. 5 б), а при кисневій газифікації знаходиться при коефіцієнті витрати окисника 0,45 і дорівнює 0,18 мг/м³.

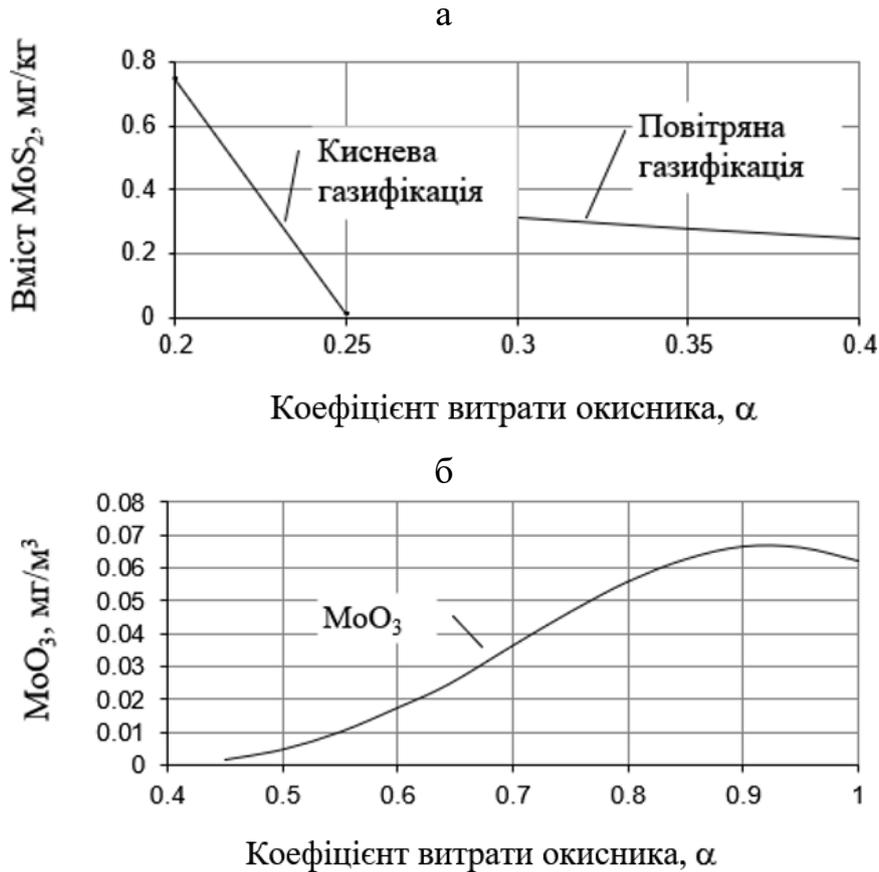


Рис. 5. Вплив коефіцієнта витрати окисника на утворення сполук молибдену в розплаві золи (а) та у газоподібній фазі при повітряній газифікації (б)

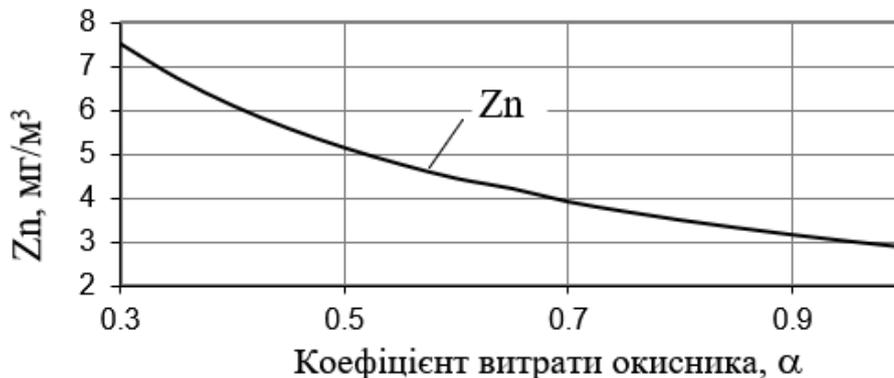


Рис. 6. Вплив коефіцієнта витрати окисника на поведінку цинку під час повітряної газифікації вугілля

Дослідженнями встановлено, що в газоподібній фазі вміст цинку зменшується при збільшенні коефіцієнта витрати окисника і при повітряній газифікації знаходиться в інтервалі 7,53–2,88 мг/м³ (див. рис. 6), а при кисневій газифікації знаходиться в інтервалі 18,06–13,66 мг/м³.

Крім того, у газоподібній фазі присутні сполуки цинку, вміст яких незначний ($ZnO = 0,006$ мг/м³; $ZnS = 0,003$ мг/м³).

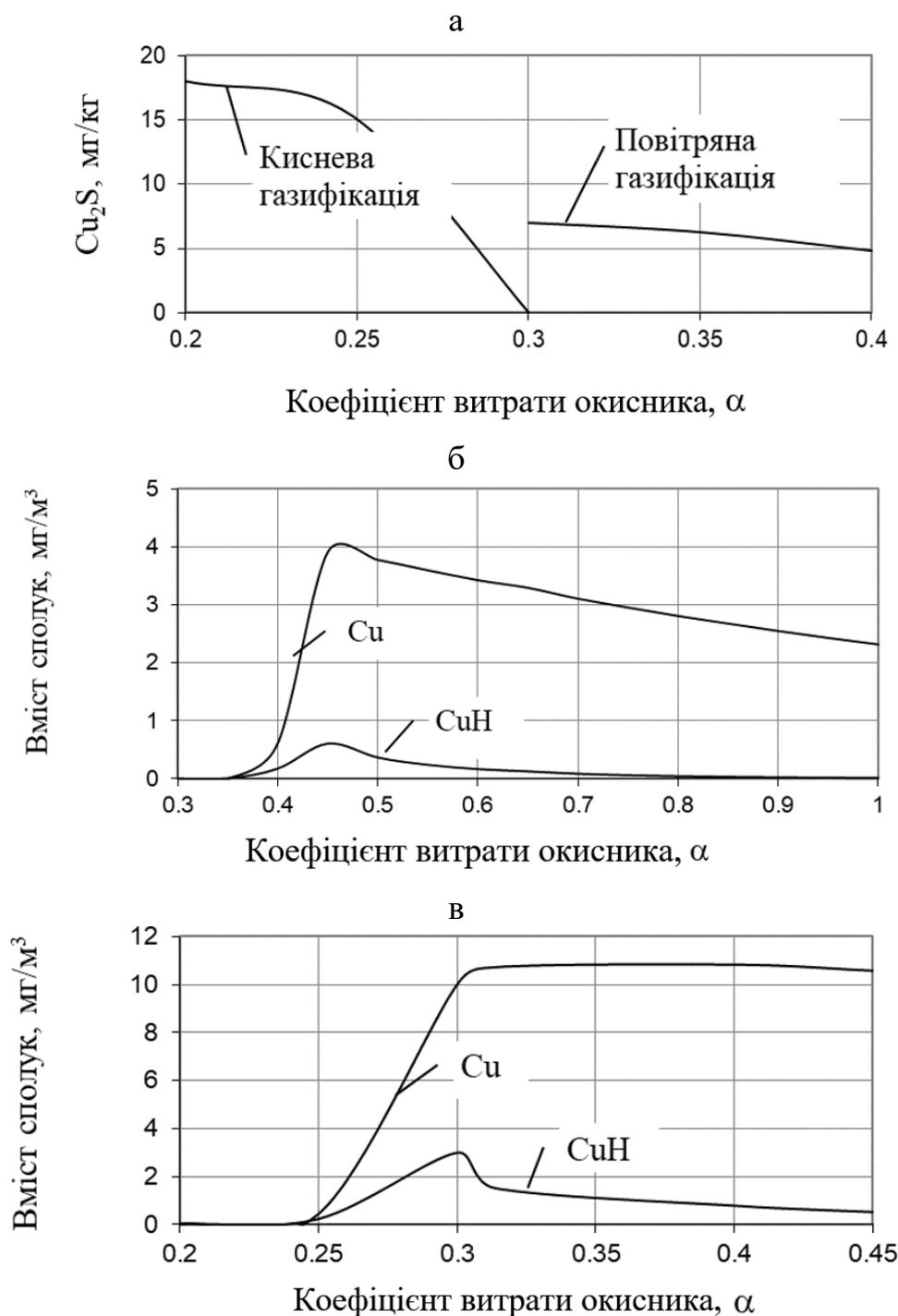


Рис. 7. Вплив коефіцієнта витрати окисника на утворення сполук міді в розплаві золи (а), у газоподібній фазі при повітряній (б) та кисневій (в) газифікації

Дослідження показали, що характер поведінки міді при повітряній та кисневій газифікації є аналогічним (див. рис. 7). У розплаві золи мідь присутня у сполуці Cu_2S при коефіцієнті витрати окисника рівному 0,3–0,4 при повітряній газифікації та при коефіцієнті витрати окисника рівному 0,2–0,25 – при кисневій.

Зі збільшенням коефіцієнта витрати окисника спостерігається зниження вмісту Cu_2S , яке змінюється в інтервалі 7,01–4,81 мг/кг при повітряній газифікації та 16,78–15,04 мг/кг – при кисневій (див. рис. 7 а).

У газоподібній фазі мідь у більшій кількості присутня у сполуках Cu та CuH . Як видно з графіка (див. рис. 7 б), при повітряній газифікації максимумами вмісту сполук Cu та CuH знаходяться при коефіцієнті витрати окисника 0,45 і відповідно становлять 3,92 мг/м³ та 0,60 мг/м³. При кисневій газифікації максимум вмісту сполуки Cu знаходиться при коефіцієнті витрати окисника 0,4 і становить 10,82 мг/м³, а сполуки CuH – при коефіцієнті витрати окисника 0,3 і становить 2,99 мг/м³ (див. рис. 7 в).

У газоподібній фазі в невеликій кількості мідь присутня в наступних сполуках ($\text{CuO} = 0,02$ мг/м³ при коефіцієнті витрати окисника 1; $\text{CuOH} = 0,02$ мг/м³ при коефіцієнті витрати окисника 1; $\text{CuS} = 0,11$ мг/м³ при коефіцієнті витрати окисника 0,5).

Таким чином, в результаті проведених досліджень визначено вміст основних сполук мікроелементів малої групи в газоподібній фазі при повітряній та кисневій газифікації вугілля, що наведено в таблиці 4.

Таблиця 4

Вміст основних сполук мікроелементів малої групи в газоподібній фазі при термічній переробці вугілля, мг/м³

Основні сполуки мікроелементів	Вміст при $T = 1000\text{--}1500$ °C		Вміст при $T = 1500\text{--}2000$ °C	
	повітряна газифікація	киснева газифікація	повітряна газифікація	киснева газифікація
LiOH	4,79–16,98	0,77–48,32	19,98–10,20	48,32–41,04
Ba(OH) ₂	0,00008–0,16	0,00–0,08	0,16–18,76	0,08–69,33
GeO	0,03–0,72	0,003–0,21	0,72–2,40	0,21–7,71
TiO ₂	0,00–0,008	0,00–0,02	0,008–28,09	0,02–115,61
MoO ₃	0,00–0,01	0,00–0,005	0,01–0,06	0,005–0,18
Zn	6,12–4,78	16,96–15,13	4,78–2,88	15,13–13,66
Cu	0,61–3,61	0,42–10,71	3,61–2,32	10,71–10,57

Для проєктування систем утилізації мікроелементів із газоподібної фази дослідженнями встановлено температуру переходу сполук мікроелементів із газоподібної фази в рідку (табл. 5).

Таблиця 5

Температура переходу сполук мікроелементів малої групи з газоподібної фази в рідку

Сполуки мікроелементів	T, °C
Сполуки титану	1532-807
Сполуки барію	1437-1418
Сполуки міді	1117-367
Сполуки літію	777-227
Сполуки молібдену	757-725
Сполуки германію	523-490
Сполуки цинку	521-500

Вилучення мікроелементів із продуктів термічної переробки вугілля можливо здійснювати такими способами:

1. Мікроелементи сорбуються на зольних виносах (з реакцією або без) – для цього необхідно доокислити до H_nO_m , потім перевести мікроелементи в розчинні сполуки (HCl, HNO₃, HNO₃+HCl) і виділити їх із цих сполук.

2. Установка холодних стрижнів в потік газу – суть способу полягає в тому, що мікроелементи осідають на стрижнях, потім здійснюється їх змив з холодних стрижнів і виділення. Стрижні є тонкими мідними трубками з хладагентом, також можливий варіант використання замість стрижнів сітки.

Висновки. Підвищення конкурентоспроможності українського вугілля можливо здійснювати шляхом вилучення цінних мікроелементів з продуктів, що утворюються в процесі його термічної переробки.

В роботі проведено дослідження впливу виду (повітря та кисень) та кількості окисника на утворення сполук мікроелементів малої групи при термічній переробці вугілля та їх розподіл в продуктах переробки. Результати досліджень показали, що при термічній переробці вугілля усі малі елементи, крім германію та цинку, знаходяться як у розплаві золи, так і у газоподібній фазі.

Встановлено, що найбільший вміст цинку (2,88–16,96 мг/м³) у газовій фазі спостерігається при температурах нижче 1500 °C, а вміст решти всіх елементів малої групи при температурах вищих за 1500 °C. Ступінь переходу літію (20,05 мг/м³; 48,32 мг/м³), титану (33,89 мг/м³; 115,61 мг/м³), та міді (3,92 мг/м³; 10,82 мг/м³) у газову фазу становить 83–90% та 64–75% залежно від виду окисника. Ступінь переходу барію (21,77 мг/м³; 69,33 мг/м³) та молібдену (0,07 мг/м³; 0,18 мг/м³) в газову фазу становить 22-32% та 35–75% залежно від виду окисника.

Враховуючи складну будову безпосередньо вугільної речовини та складність процесів термохімічних перетворень в ній, механізми поведінки та розподілу мікроелементів при термічній обробці вугілля потребують подальших досліджень.

Перелік посилань

1. Stoiko, N. (2016). Green economy – the paradigm of sustainable development of agroecosystems in Ukraine. *International Journal of New Economics and Social Sciences*, 3(1), 90–99. <https://doi.org/10.5604/01.3001.0010.4709>

2. Li, H., Qu, W., Yang, Z., & Zhao, J. (2019). Trace element partition in coal combustion. *Emission and Control of Trace Elements from Coal-Derived Gas Streams*, 63–103. <https://doi.org/10.1016/b978-0-08-102591-8.00003-9>
3. Wiater, J., Wojciula, A., & Szatyłowicz, E. (2021). Trace Elements in Popular Coals Burnt in Low Power Boilers. *Journal of Ecological Engineering*, 22(11), 178–187. <https://doi.org/10.12911/22998993/143287>
4. Dai, S., Yan, X., Ward, C. R., Hower, J. C., Zhao, L., Wang, X., Zhao, L., Ren, D., & Finkelman, R. B. (2020). Valuable elements in Chinese coals: a review. *Coal Geology of China*, 60–90. <https://doi.org/10.4324/9780429449369-5>
5. Rezaee, M. (2012). Development of Strategies to Minimize the Release of Trace Elements from Coal Waste Source. *Theses and Dissertations--Mining Engineering*, 6. https://uknowledge.uky.edu/mng_etds/6
6. Ishkov, V.V., & Koziy, E.S. (2017). About distribution of Co, Ni, Pb, Cr and V in coal layer c4 of mine «Samarskaya» of Pavlograd-Petropavlovsk geological and industrial district. *Widening our horizons: International Forum for Students and Young Researchers*, 64.
7. Васильєва, І. В. (2023). Германій вугільних пластів та породних відвалів західного Донбасу. *Матеріали XI науково-практичної конференції «Мінерально-сировинні багатства України: Шляхи оптимального використання»*. <https://doi.org/10.59911/conf.2023.5>
8. Булат, А.Ф., & Баранов, В.А (2021). Аналіз стану германієності вугілля України. *Геотехнічні проблеми розробки родовищ: Матеріали XIX міжнародної конференції молодих вчених*.
9. Zajusz-Zubek, E., & Koniecznyński, J. (2014). Coal Cleaning Versus the Reduction of Mercury and other Trace Elements' Emissions from Coal Combustion Processes. *Archives of Environmental Protection*, 40(1), 115–127. <https://doi.org/10.2478/aep-2014-0012>
10. Minchener A. J. (2005). Coal gasification for advanced power generation. *Fuel*, 84(17), 2222–2235. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2005.08.035>
11. Schobert, H. (2022). Gasification. *Rethinking Coal*, 157–173. <https://doi.org/10.1093/oso/9780199767083.003.0011>
12. Díaz-Somoano, M., & Martínez-Tarazona, M.R. (2003). Trace element evaporation during coal gasification based on a thermodynamic equilibrium calculation approach. *Fuel*, 82(2), 137–145. [https://doi.org/10.1016/s0016-2361\(02\)00251-x](https://doi.org/10.1016/s0016-2361(02)00251-x)
13. Mishra S. K. (2023). Coal, Trace Elements. *Encyclopedia of Mineral and Energy Policy*. Berlin, Heidelberg, 184–186. https://doi.org/10.1007/978-3-662-47493-8_100

ABSTRACT

Purpose. To investigate the nature and dynamics of trace elements compound formation during coal thermal treatment and to determine their distribution among the resulting products.

The methods. The study is based on theoretical research using a software package for modeling multicomponent equilibrium heterogeneous systems.

Findings. The article presents the results of investigating the formation of trace elements compounds of the minor group (Li, Ba, Ge, Ti, Zr, Mo, Cu, Zn) during coal thermal treatment using air and oxygen as oxidizing agents. It was established that all minor elements, except germanium and zinc, are present both in the molten ash and in the gas phase. The temperature intervals of transition of individual trace elements into the gas phase were determined, showing that zinc actively volatilizes at temperatures below 1500 °C. Whereas most other minor elements reach their maximum concentrations in the gas phase at temperatures above 1500 °C. The degree of transition of trace elements into the gas phase was quantitatively determined depending on the type of oxidizer. It has demonstrated a significant increase in the volatility of lithium, titanium, and copper (up to 83–90% and 64–75%) and a less intensive transition of barium and molybdenum (22–32% and 35–75%). The temperature of condensation of trace elements compounds from the gas phase

into the liquid phase was identified. This provided a basis for designing systems to recover trace elements from gaseous products.

The originality. Further development was achieved in understanding the patterns of formation and distribution of trace elements of the minor group during the thermal treatment of coal, depending on the type of oxidizing agent and the treatment temperature. The temperature intervals and transition degrees of individual trace elements into the gas phase were determined. They enabled a more precise characterization of their volatility and behavior during gasification. The results form a scientific foundation for optimizing technologies aimed at recovering valuable trace elements from the products of coal thermal treatment.

Practical implementation. The obtained results make it possible to optimize the operating conditions of coal thermal treatment in order to enhance the extraction of valuable trace elements and reduce their losses in coal ash residues. The identified regularities of trace elements transitions into gaseous and condensed phases can be applied to improve gas-cleaning systems and to develop technologies for comprehensive use of Ukrainian coal, thereby increasing its economic and environmental efficiency.

Keywords: *coal, trace elements, compounds, thermal treatment, oxidizer flow rate coefficient, gasification, molten ash, gas phase.*

дата першого надходження статті до видання	01.10.2025
дата прийняття до друку статті після рецензування	08.11.2025
дата публікації (оприлюднення)	29.12.2025