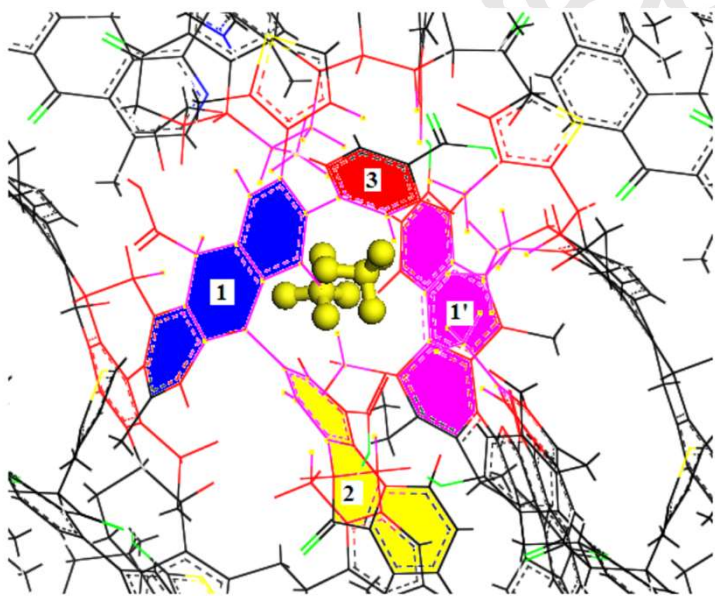


技术十一：CH₄、CO₂与煤/页岩有机结构相互作用的分子模拟技术

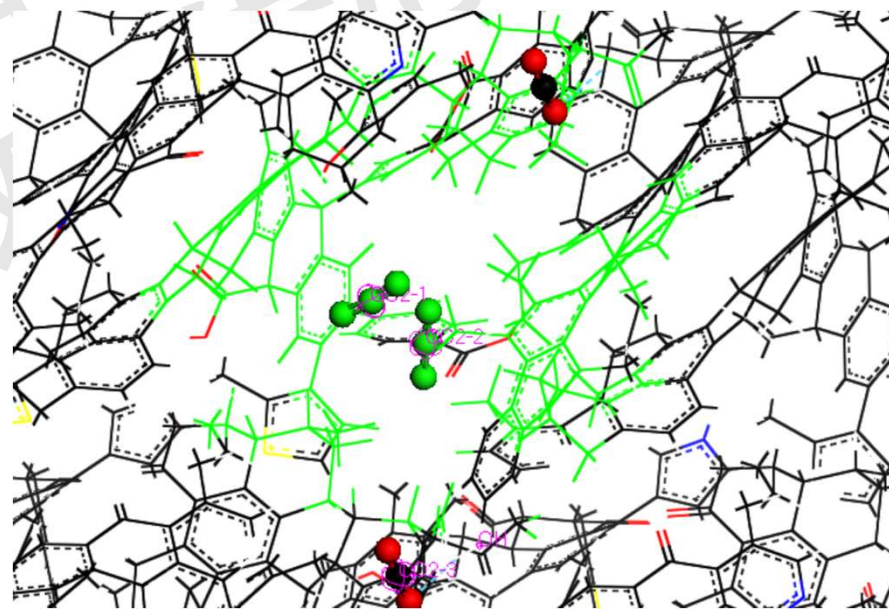
◆ **技术特色：** 基于MS分子模拟软件，通过分子动力学与量子化学计算，模拟仿真煤/页岩聚集态结构中CH₄、CO₂的吸附-扩散行为，解析油页岩热解反应过程及演化特征。

◆ **解决的问题：**

- ① 有机质聚集态结构的煤层气/页岩气吸附机理
- ② 油页岩原位热解反应路径及机理



CH₄的吸附孔放大图



CO₂的吸附孔放大图

联系人：孙先达 (13945900006)