

О.В. Тутова, В.О. Пінчук

КЕРУВАННЯ УТВОРЕННЯМ СІРКО- ТА АЗОТОВМІСНИХ КОМПОНЕНТІВ ЯК ОСНОВА ЕКОЛОГІЧНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ ГАЗИФІКАЦІЇ ВУГІЛЛЯ

Анотація. Перспективним напрямом покращення екологічних показників термічної переробки низькосортного вугілля, що характеризується підвищеною зольністю та значним вмістом сірки, є його газифікація. В роботі досліджено екологічні показники процесу газифікації вугілля при одночасному варіюванні кількох керуючих факторів (температури, вмісту кисню в окиснику, коефіцієнта витрати окисника) зі встановленням їх впливу на закономірності утворення широкого набору сірко- та азотовмісних компонентів у генераторному газі.

На основі отриманих результатів сформовано підхід до керування складом генераторного газу через зміну окислювально-відновних умов процесу. Встановлено, що вміст кисню в окиснику та коефіцієнт витрати окисника є визначальними параметрами, які задають напрям трансформації сірки між відновними (H_2S , CO) та окислювальними (SO , SO_2) формами. Встановлено, що температура процесу визначає області керування складом газу, зокрема положення екстремумів утворення ключових компонентів, максимум H_2S (до 0,4 %) досягається при 1873 К, після чого відбувається перехід до переважного утворення окислювальних форм сірки (до 0,24-0,25 %). Показано, що при значеннях коефіцієнта витрати окисника $\alpha > 0,32$ реалізується керований перехід від відновного до окислювального режиму газифікації. Показано, що утворення азотовмісних компонентів має підпорядкований характер і визначається окислювально-відновними умовами процесу. Зі зміною складу окисника та режимних параметрів відбувається зменшення вмісту реакційноздатних форм (наприклад, CN_2), тоді як концентрація NO залишається незначною, що свідчить про можливість їх обмеження на стадії формування газу.

Доведено, що цілеспрямоване варіювання керуючих параметрів дозволяє формувати заданий склад генераторного газу та мінімізувати вміст екологічно небезпечних компонентів без зміни принципової схеми процесу. Отримані результати обґрунтовують можливість використання параметричного керування процесом газифікації як інструменту екологічної оптимізації термохімічної переробки вугілля.

Ключові слова: вугілля, газифікація, генераторний газ, сірковмісні компоненти, азотовмісні компоненти, окисник, температура в реакторі, коефіцієнт витрати окисника.

Постановка проблеми. Вугільна енергетика залишається важливою складовою паливно-енергетичного балансу України, зважаючи на значні запаси вугілля та обме-

женість альтернативних енергетичних ресурсів. У сучасних умовах у паливному балансі все більшого значення набуває низькосортне вугілля, яке характеризується підвищеною зольністю та значним вмістом сірки. Використання такого палива при традиційному спалюванні супроводжується утворенням значної кількості шкідливих викидів, зокрема оксидів сірки (SO_x), оксидів азоту (NO_x), твердих частинок та інших токсичних сполук, що негативно впливають на стан навколишнього середовища [1-3]. Водночас сучасні екологічні вимоги, що регулюються системою національних законів, підзаконних актів та гармонізованих з ЄС директив [4-8], передбачають суттєве обмеження рівня викидів забруднюючих речовин, що робить пряме спалювання низькосортного вугілля екологічно неприйнятним.

У зв'язку з цим актуальним є пошук ефективних технологічних рішень, які б дозволили використовувати наявні ресурси вугілля із мінімальним негативним впливом на довкілля. Одним із перспективних напрямів є газифікація вугілля, яка дає змогу перетворювати тверде паливо на генераторний газ із подальшою можливістю його очищення від сірко- та азотовмісних сполук перед спалюванням або використанням у технологічних процесах. Утворення сірко- та азотовмісних речовин залежить, головним чином, від кількості сірки та азоту у вихідному вугіллі, а також від реакційної здатності палива у процесі переробки. Кількість речовин, що утворюються, залежить від температури процесу, а, отже, на механізм утворення сірко- та азотовмісних речовин буде впливати і спосіб газифікації. Крім того, на утворення різних оксидів у газі впливає концентрація та склад окисника.

Таким чином, комплексне дослідження процесів газифікації низькосортного вугілля та визначення умов формування складу генераторного газу є актуальним завданням, спрямованим на підвищення екологічної безпеки та ефективності використання вугільних ресурсів України.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. У сучасних наукових дослідженнях значна увага приділяється процесам газифікації вугілля як одному з ключових напрямів екологізації вугільної енергетики. Згідно з узагальненими бібліометричними дослідженнями, у 2024 році кількість наукових публікацій з проблематики вугілля досягла пікових значень, що свідчить про зростання інтересу до технологій газифікації, декарбонізації та очищення продуктів переробки [9]. Разом з тим аналіз сучасних робіт показує, що більшість досліджень присвячено впливу окремих режимних параметрів або вивченню лише окремих цільових домішок, без одночасного охоплення всього комплексу факторів, що визначають склад генераторного газу.

У дослідженні [10] показано вплив температури, концентрації кисню та тиску на ступінь конверсії вугілля при газифікації та окси-паливному процесі. Автори встановили суттєву залежність ступеня вигорання від цих параметрів, однак склад генераторного газу та утворення сірко- і азотовмісних домішок не були предметом детального аналізу.

В роботах [11, 12] досліджено особливості виділення газоподібного азоту при газифікації, де показано, що характер утворення азотовмісних компонентів суттєво залежить від умов процесу та структури палива. Проте автори зосереджуються переважно

на загальному балансі азоту та його основних формах, не розглядаючи детально утворення таких компонентів, як HCN, NH₃, CN₂ у взаємозв'язку з іншими домішками. Дослідження [13, 14], що присвячені механізмам утворення NH₃, HCN під час газифікації, показують, що саме ці сполуки визначають подальше формування оксидів азоту, а їх співвідношення залежить від умов процесу та складу палива. Автори досліджують селективне утворення NH₃ та HCN, однак інші форми азоту (N₂, NO, CN₂) залишаються поза межами аналізу. Авторами роботи [15] запропоновано модель утворення NO_x при спалюванні частково газифікованого палива, що дозволяє оцінити кінетику утворення оксидів азоту. Однак дослідження обмежується лише NO_x і не охоплює інші азотовмісні сполуки, які формуються на стадії газифікації.

Роботи, присвячені сірковмісним сполукам, також мають обмежений характер. Наприклад, у дослідженнях емісії SO₂ [16] показано, що її кількість визначається якістю вугілля, умовами спалювання та подачею повітря. Однак такі дослідження не враховують утворення інших форм сірки (H₂S, COS, CS₂), які є характерними саме для процесів газифікації. Авторами роботи [17] проведено дослідження утворення сірковмісних домішок при газифікації вугілля зі встановленням впливу температури та реакційної атмосфери та показано, що основною газоподібною формою сірки є H₂S, далі за вмістом іде COS, тоді як SO₂ та CS₂ утворюються в невеликих кількостях, а зі зростанням температури кількість сірки в газовій фазі збільшується. Дослідження [18, 19] впливу співвідношень O₂/C та H₂O/C на перебіг газифікації та трансформацію сірки показали, що збільшення O₂/C зменшує співвідношення H₂S/COS, тоді як збільшення H₂O/C, навпаки, підвищує його. Однак, навіть у більш деталізованих роботах аналіз зосереджується переважно на окремих співвідношеннях сірковмісних газів, а не на повному спектрі домішок генераторного газу.

Додатково слід відзначити, що в енергетичних дослідженнях, пов'язаних із використанням вугілля, основна увага приділяється скороченню NO_x та SO₂ як основних забруднювачів [20, 21]. При цьому інші азотовмісні (NH₃, HCN, CN₂) та сірковмісні (H₂S, COS, S₂) компоненти залишаються недостатньо вивченими, хоча саме вони визначають подальші процеси очищення газу та екологічні характеристики.

Отже, аналіз літературних джерел свідчить, що наявні дослідження здебільшого мають фрагментарний характер: в одних роботах розглядається лише вплив температури, в інших – лише співвідношення O₂/C або склад реакційної атмосфери; одні автори досліджують тільки NO_x, N₂, HCN або NH₃, інші – лише H₂S, COS, SO₂ чи окремі форми сірки. Разом з тим, у публікаціях недостатньо висвітлено питання одночасного впливу температури, вмісту кисню в окиснику та коефіцієнта витрати окисника на утворення широкого спектра сірко- та азотовмісних компонентів генераторного газу при газифікації вугілля. Саме тому комплексне дослідження впливу режимних параметрів на утворення різних сірко- та азотовмісних компонентів при газифікації вугілля є актуальним завданням.

Мета дослідження. Метою роботи є встановлення впливу температури, вмісту кисню в окиснику та коефіцієнта витрати окисника на утворення широкого набору сір-

ко- та азотовмісних компонентів при газифікації низькосортного вугілля. Дослідження спрямоване на виявлення закономірностей їх формування в залежності від окислювально-відновних умов процесу та обґрунтування можливості керування складом генераторного газу з метою зниження екологічно небезпечних викидів.

Викладення основного матеріалу дослідження. Дослідження процесу газифікації проводилися для високосольного вугілля з підвищеним вмістом сірки. При дослідженні процесу утворення сірко- та азотовмісних компонентів у генераторному газі при газифікації вугілля зі складу золи були виключені елементи, які істотно не впливають на компонентний склад генераторного газу, переходячи в газоподібний і конденсований стан, не пов'язуючи сірку і азот і не вступаючи у взаємодію з іншими речовинами.

Дослідження здійснювалося за допомогою програмного комплексу з моделювання багатоконцентних рівноважних систем, призначеного для визначення характеристик рівноваги, фазового та хімічного складу. Процес газифікації досліджувався при постійному тиску 0,1 МПа та в температурному діапазоні 1073-2673 К. В якості окисника розглядаються повітря з вмістом кисню 21 %, 35 %, 50 % і 75 % та кисень. Коефіцієнт витрати окисника змінювався в діапазоні від 0,2 до 0,5.

Результати дослідження впливу вмісту кисню в окиснику на вміст сірко- та азотовмісних компонентів у газі представлені у вигляді графічних залежностей на рисунку 1 (при температурі 2073 К та коефіцієнті витрати окисника 0,5).

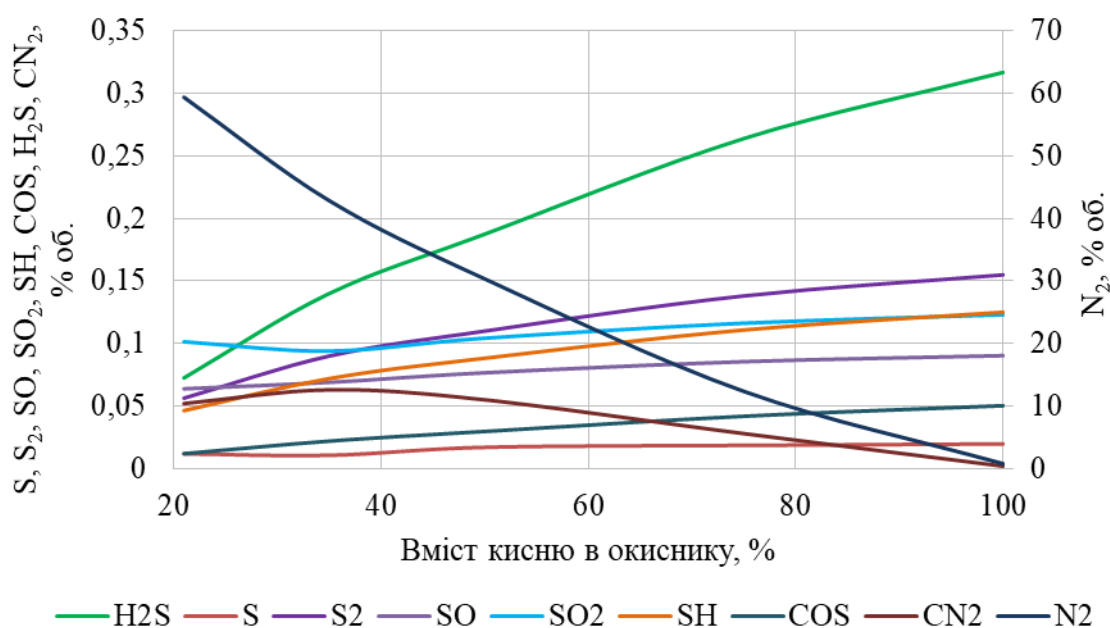


Рисунок 1 – Формування сірко- та азотовмісних компонентів генераторного газу при зміні вмісту кисню в окиснику

При розгляді загальної картини утворення сірковмісних сполук спостерігається збільшення їх вмісту зі збільшенням частки кисню повітря. При газифікації у найбільших кількостях утворюється сірководень, вміст якого зі збільшенням вмісту кисню в окиснику зростає. Швидкість зростання вмісту H₂S у досліджуваному діапазоні має

стабільний характер. Вміст сірководню в генераторному газі при температурі 2073 К коливається в межах 0,07-0,32 %. Вміст сірководню в газі залежить, головним чином, від кількості сірки у вихідному вугіллі, а також від реакційної здатності палив у процесі газифікації та складу їх золи.

Графічне уявлення утворення сіркооксиду вуглецю COS залежно від вмісту кисню в дутті має вигляд кривої, що зростає. Вихід сіркооксиду вуглецю змінюється не більше 0,01-0,05 %. Утворення сіркооксиду вуглецю при газифікації вугілля відбувається за рахунок реакції взаємодії сірководню з діоксидом вуглецю:



Дослідження, проведені при температурі 2073 К свідчать, що вихід радикала SH носить зростаючий характер, причому швидкість зростання при зміні вмісту кисню в окиснику є відносно стабільною величиною. Утворення SH коливається не більше від 0,046 до 0,12 %.

Зі збільшенням вмісту кисню в окиснику відбувається зростання концентрації газоподібної сірки S. Швидкість утворення S має постійний досить рівномірний характер. Вміст газоподібної сірки в генераторному газі коливається не більше 0,012-0,02 %. Крім того, зі збільшенням вмісту кисню в окиснику відбувається збільшення виходу S₂, що становить 0,056-0,16 %.

У твердому паливі міститься сірка сульфідна, яка в процесі газифікації може окислюватися в основному до діоксиду сірки:



Вихід SO та SO₂ при зміні вмісту кисню в окиснику носить зростаючий з відносно стабільною швидкістю характер. Вихід SO становить 0,06-0,09 %, а концентрація SO₂ 0,1-0,12 %.

Також спостерігається незначна кількість таких компонентів, як FeS, SiS, CS, CS₂, які знаходяться в нестійкій газовій фазі, швидко реагують з іншими речовинами, утворюючи нові компоненти.

Зі зростанням вмісту кисню в окиснику спостерігається різке зниження утворення газоподібного азоту N₂. Швидкість зниження концентрації азоту зі збільшенням частки кисню в окиснику безперервно падає і вміст N₂ становить 60,0-0,78 %.

Утворення радикалу CN₂ зі збільшенням вмісту кисню в окиснику зменшується. Швидкість зміни концентрації CN₂ при різному складі окисника різна. Зі збільшенням вмісту кисню в окиснику швидкість зміни концентрації зменшується. Вміст CN₂ змінюється від 0,05 до 0,002 %. Вихід NO практично не залежить від вмісту кисню у повітрі і становить 0,005 %.

Характер утворення сірко- та азотовмісних компонентів у газі при зміні вмісту кисню в окиснику за інших температур процесу аналогічний. Аналізуючи отримані дані, можна зробити висновки, що зі збільшенням вмісту кисню в окиснику відбувається збільшення вмісту всіх сірковмісних та зменшення азотовмісних N₂ і CN₂ компонентів генераторного газу.

Дослідження впливу температури в реакторі при газифікації вугілля на утворення сірко- та азотовмісних речовин у генераторному газі проводилися в діапазоні температур 1073-2673 К. Дані, отримані при дослідженні впливу температури в реакторі на вихід сірко- і азотовмісних речовин, представлені у вигляді графічних залежностей на рисунку 2 на прикладі розрахунку процесу при 50 % вмісту кисню в повітрі та коефіцієнті витрати окисника 0,5.

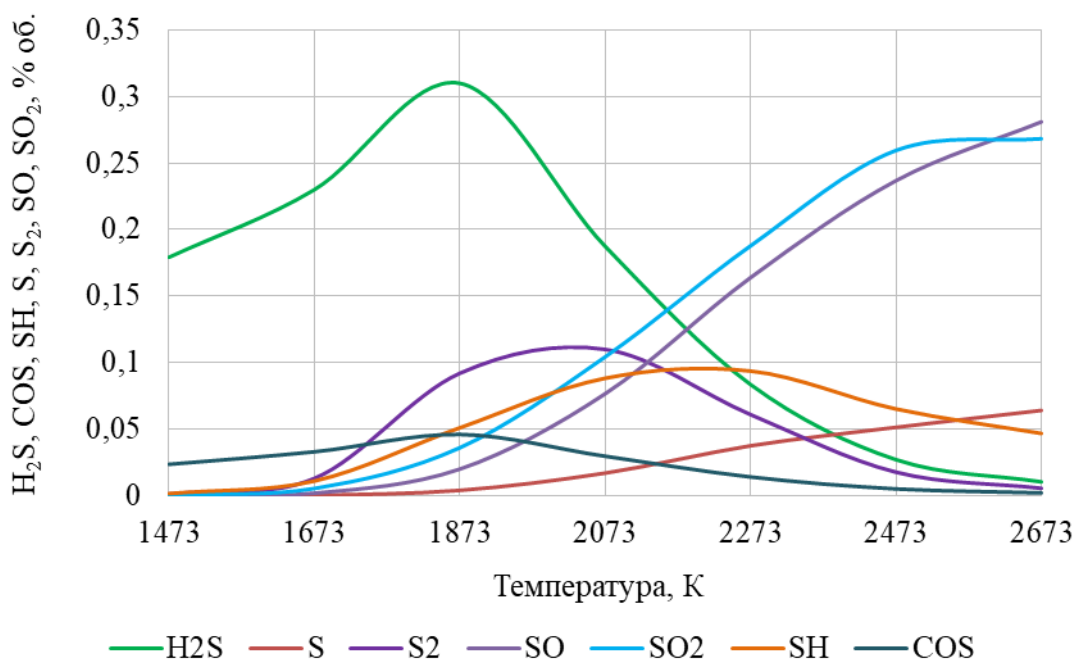


Рисунок 2 – Формування сірководневих компонентів генераторного газу в залежності від температури процесу

Характер утворення газу багатокомпонентного складу за інших варіантів режимних факторів має аналогічний вигляд. Утворення сірководню H₂S має екстремальний характер. Максимум вмісту спостерігається при температурі 1873 К і становить 0,31 %. Вміст H₂S в залежності від температури становить 0,08-0,31 %.

Утворення сіркоокису вуглецю COS носить експоненціальний характер, має максимум при температурі, що дорівнює 1873 К і змінюється в межах 0,005-0,05 %.

Також необхідно звернути увагу на утворення радикалу SH, що свідчить про деструкцію паливних елементів. Графічна залежність концентрації SH носить експоненціальний характер та має максимум при температурі 2173 К. Утворення радикала на початковій ділянці, що відповідає зміні температури в межах 1673-1873 К, збільшується, а досягнувши максимуму, починає зменшуватися. Швидкість зміни концентрації залишається постійною. Вихід цього радикала коливається не більше 0,0016-0,09 %.

Вміст у продуктах газифікації сірки S в газоподібному стані має досить стабільний характер у зазначеному діапазоні температур, зростаючи з відносно постійною швидкістю. Вихід сірки змінюється не більше від 0,0003-0,05 %.

Утворення S₂ має екстремальний характер. Максимум вмісту спостерігається при температурі 2073 К. Вміст S₂ у газі становить 0,001-0,11 %.

Вихід SO за зміни температури процесу носить зростаючий зі стабільною швидкістю характер. Вихід сірчистого оксиду становить 0,00008-0,24 %.

Утворення сірчистого ангідриду SO₂ зі збільшенням температури процесу зростає. Вміст SO₂ коливається не більше 0,0003-0,25 %.

Утворення сульфідів FeS та SiS зі збільшенням температури збільшується з постійною швидкістю. Вміст FeS коливається не більше 0-0,011 %, а SiS – 0-0,014 % залежно від температури. Також спостерігається незначна кількість таких компонентів, як CS та CS₂, що знаходяться в нестійкій газовій фазі, швидко реагують з іншими речовинами, утворюючи нові компоненти.

При температурах 1100-1250 К можливе зв'язування сірки компонентами золи сульфиду кальцію CaS. Зола, що містить CaS, не можна вивозити на золовідвали або відправляти споживачеві, тому що у вологому середовищі з CaS утворюватиметься сірководень, що може викликати вторинне забруднення навколишнього середовища. При високотемпературній газифікації утворення CaS у конденсованій фазі немає.

З графіка випливає, що утворення сірковмісних компонентів збалансоване. Це можна проілюструвати тим, що при різкому зростанні вмісту SO₂ та SO відбувається різке зниження виходу сірководню H₂S.

Дослідження показали, що вміст N₂ у газі має незначний екстремальний характер. Максимум вмісту N₂ спостерігається при температурі 1673 К, концентрація N₂ коливається в межах 30,8-29,2 %. Оксид азоту NO, вихід якого незначний до 2073 К, становить 0,00006-0,0005 %. А потім зростає із збільшенням температури до 0,058 %.

Вміст радикала CN₂ в діапазоні температур 1473-1873 К різко зменшується, потім швидкість утворення зменшується. Утворення CN₂ у генераторному газі змінюється в межах 0,81-0,009 %.

Крім того, при температурах до 1273 К утворюється ціановодень HCN в кількості до 0,012 % і аміак HN₃ в кількості до 0,001 %. При подальшому підвищенні температури HCN та HN₃ не утворюються.

Досліджуваний температурний діапазон охоплює різні способи процесу газифікації: в щільному шарі, киплячому шарі та в потоці. Вихід сірко- та азотовмісних речовин при різних способах кисневої газифікації представлено у таблиці 1.

Дослідження впливу коефіцієнта витрати окисника на утворення сірко- та азотовмісних речовин у генераторному газі проводилися в діапазоні від 0,2 до 0,5. Коефіцієнт витрати окисника обмежується рівним 0,5, оскільки відповідно до рівняння реакції саме за такої кількості кисню по стехіометрії забезпечується повне вигорання вуглецю. При коефіцієнті витрати окисника більшому, ніж 0,5 відбудеться окиснення вуглецю до CO₂, що негативно впливає на робочі характеристики одержуваних продуктів.

Результати досліджень впливу коефіцієнта витрати окисника на склад газу представлені у вигляді графічних залежностей на прикладі розрахунку процесу газифікації при температурі 2073 К при 50 % вмісті кисню в окиснику (рис. 3).

Зростання коефіцієнта витрати окисника призводить до збільшення виходу всіх сірковмісних речовин. При коефіцієнтах витрати окисника вище 0,35 відбувається зни-

ження вмісту H_2S , при цьому відбувається збільшення вмісту S , SO , SO_2 , що викликано перебігом реакцій:



Таблиця 1

Вихід сірко-і азотовмісних речовин при різних способах кисневої газифікації, % об

Речовина	Спосіб газифікації		
	в щільному шарі	в киплячому шарі	в потоці
H_2S	0,1167	0,32	0,48
S	0,00005	0,0003	0,004
S_2	0,0012	0,0132	0,092
SO	0,00007	0,0019	0,0204
SO_2	0,003	0,0021	0,0053
SH	0,002	0,018	0,061
COS	0,03	0,048	0,036
FeS	0	0,0001	0,0109
SiS	0	0	0,024
CS	0	0,0003	0,0002
CS_2	0,0003	0,0002	0,00016
N_2	0,029	0,626	0,672
CN_2	0,448	0,0603	0,0119
HCN	0,0012	0	0
HN_3	0,001	0	0

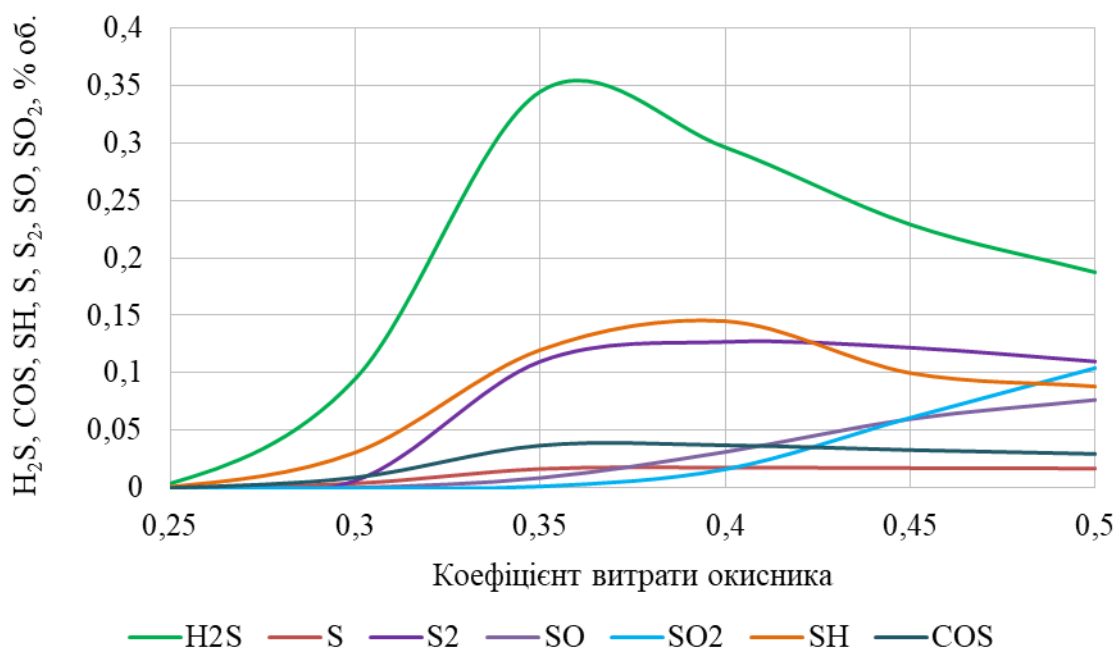


Рисунок 3 – Формування сірковмісних компонентів генераторного газу в залежності від коефіцієнта витрати окисника

Подальше збільшення коефіцієнта витрати окисника мало впливає на вихід інших сірковмісних речовин. При малих коефіцієнтах витрати окисника у газі спостерігається наявність SiS (до 0,7 %), і навіть утворення таких сполук, як CS і CS₂. При вищих коефіцієнтах витрати окисника ці сполуки не утворюються.

Вміст N₂ зі збільшенням коефіцієнта витрати окисника збільшується. Одночасно відбувається зменшення вмісту радикалу CN₂. При коефіцієнтах витрати окисника до 0,4 оксид азоту NO відсутній, а потім зростає зі збільшенням коефіцієнта витрати окисника до 0,0004 %.

При коефіцієнтах витрати окисника до 0,35 у генераторному газі спостерігається утворення ціановодню HCN. Його вихід становить до 0,025 %.

Характер залежностей виходу продуктів газифікації вугілля від значення коефіцієнта витрати окисника аналогічний і за інших режимних характеристик. Причому значення коефіцієнта витрати окисника, при яких спостерігаються екстремуми вмісту компонентів у генераторному газі збігаються, змінюється тільки вміст компонентів у генераторному газі.

Таким чином, генераторний газ, отриманий при газифікації вугілля, містить шкідливі компоненти, що здатні завдати шкоди навколишньому середовищу або знизити якість технологічного продукту. Тому отримані дані можна використовувати при розробці технологій використання продуктів газифікації вугілля з огляду на питання захисту навколишнього середовища, вимоги технологічного процесу та інші фактори.

Дослідженнями встановлено, що у процесі газифікації вугілля будь-якого заданого складу можна отримати бажаний склад газу. Приймаючи як основні керуючі параметри вміст кисню в окиснику та температуру процесу, можна підтримувати такий коефіцієнт витрати окисника, який встановить необхідне співвідношення відновних та окислювальних компонентів у газі та призведе до мінімуму вмісту в ньому шкідливих компонентів. Екологічна оцінка основних способів газифікації при раціональних параметрах представлена таблиці 2.

Таблиця 2

Екологічна оцінка основних способів газифікації вугілля

З'єднання, ×10 ² % об.	Повітряна газифікація	Киснева газифікація
H ₂ S	27,8	37,4
S	0,07	1,0
S ₂	1,5	4,8
SO	0,023	0,034
SO ₂	0,00016	0,00032
SH	2,6	10,2
COS	2,1	3,1
NO	0,0009	0,005
NH ₃	0,0163	0,00025
HCN	0,48	0,099

Подальше спалювання генераторного газу має відбуватися при очищенні газу від сполук сірки (насамперед від сірководню), оскільки такі сполуки викликають корозію трубопроводів та апаратури, отруєння каталізаторів, погіршення якості продукції та забруднення навколишнього середовища.

Висновки. Показано, що газифікація низькосортного високосольного вугілля є ефективним напрямом термохімічної переробки, який дозволяє перенести формування екологічно небезпечних компонентів у контрольовану стадію отримання генераторного газу з подальшим його очищенням.

Встановлено, що склад генераторного газу визначається окислювально-відновними умовами процесу, які задаються температурою, вмістом кисню в окиснику та коефіцієнтом витрати окисника. Зміна цих параметрів забезпечує керований перерозподіл сірки між відновними (H_2S , COS) та окислювальними (SO , SO_2) формами, а також впливає на утворення азотовмісних компонентів.

Показано, що підвищення вмісту кисню в окиснику призводить до зростання концентрації сірковмісних сполук (H_2S до 0,32 %, S_2 до 0,16 %, SO_2 до 0,12 %) при одночасному зменшенні вмісту реакційнодатних азотовмісних компонентів. Встановлено, що сірководень є основним носієм сірки в газі (95-98 %), що визначає напрям подальших технологій очищення.

Встановлено, що температура процесу є ключовим параметром керування формами зв'язування сірки. У діапазоні 1873-2073 К досягається максимум утворення H_2S (до 0,4 %), тоді як подальше підвищення температури призводить до переходу до окислювальних форм (SO , SO_2 до 0,24-0,25 %). Для низькотемпературних режимів характерне утворення HCN , NH_3 та CS_2 , які зникають при підвищенні температури, а також можливе утворення CaS , що створює ризик вторинного забруднення.

Показано, що коефіцієнт витрати окисника визначає режим переходу між відновними та окислювальними умовами газифікації. При $\alpha > 0,32$ відбувається зниження вмісту H_2S та зростання концентрацій S , SO і SO_2 , що відповідає керованому переходу до окислювального режиму. Встановлено, що при $\alpha < 0,35$ можливе утворення HCN , тоді як при $\alpha > 0,4$ з'являється NO .

Доведено, що цілеспрямоване варіювання режимних параметрів дозволяє формувати заданий склад генераторного газу та мінімізувати вміст екологічно небезпечних компонентів без зміни принципової схеми процесу. Це створює основу для керування екологічними характеристиками газифікації залежно від вимог подальшого використання газу.

ЛІТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Джежулей, В. О., Безценний, І. В., Бондзик, Д. Л., & Дунаєвська, Н. І. (2025). Технологія спільного спалювання вугілля й біомаси: особливості, стан і перспективи. *Науковий вісник Національного гірничого університету*, (4), 46–54. <https://doi.org/10.33271/nvngu/2025-4/046>
2. Volchyn, I. A., Haponych, L. S., & Przybylski, W. J. (2020). Current state and forecast of sulfur dioxide and dust emissions at thermal power plants of Ukraine. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*, 5, 87–93.

<https://doi.org/10.33271/nvngu/2021-5/087>

3 Вольчина, І. А., & Гапонич, Л. С. (2018). Викиди діоксиду вуглецю на українських вугільних теплових електростанціях. *Наукові праці НУХТ*, 24(6), 131–142.

<https://dspace.nuft.edu.ua/handle/123456789/32556>

4. Закон України «Про оцінку впливу на довкілля» : Закон України від 23.05.2017 № 2059-VIII. – Київ, 2017. <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/2059-19#Text>

5. Про затвердження Порядку видачі дозволів на викиди забруднюючих речовин в атмосферне повітря стаціонарними джерелами : Постанова Кабінету Міністрів України від 13.03.2002 № 302 (зі змінами). – Київ, 2002. <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/302-2002-%D0%BF#Text>

6. Directive 2010/75/EU of the European Parliament and of the Council. (2010). On industrial emissions (integrated pollution prevention and control). Official Journal of the European Union, L334, 17–119. <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2010/75/oj/eng>

7. Directive 2001/80/EC of the European Parliament and of the Council. (2001). On the limitation of emissions of certain pollutants into the air from large combustion plants. Official Journal of the European Communities, L309, 1–21. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX%3A32001L0080&qid=1766771641426>

8. Directive (EU) 2016/2284 of the European Parliament and of the Council. (2016). On the reduction of national emissions of certain atmospheric pollutants. Official Journal of the European Union, L344, 1–31. <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2016/2284/oj/eng>

9. Junussov, M., Zholtayev, G. Z., Kembayev, M. K., Umarbekova, Z. T., Mashrapova, M. A., Antonenko, A. A., & Fu, B. (2026). Coal Research in the Global Energy Transition: Trends and Transformation (1975–2024). *Energies*, 19(4), 1017.

<https://doi.org/10.3390/en19041017>

10. Lei, M., Ye, B., Tian, X., Hong, D., Zhang, Q., & Zhang, L. (2025). Effect of CO₂ Gasification on Coal Burnout during Pressurized Oxy-Fuel Combustion by Experiment and Machine Learning Method. *Journal of Thermal Science*, 34(5), 1721–1735.

<https://doi.org/10.1007/s11630-025-2170-x>

11. Lei, M., Zeng, Y., Hong, D., Zhao, Z., Tian, X., Zhang, L., & Zhang, Q. (2024). Experimental and ReaxFF MD study on the release characteristics of gaseous nitrogen during pressurized bituminous coal gasification. *Fuel*, 367, 131428.

<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.131428>

12. Cao, J., Zhang, H., Shi, K., Wen, S., Zhang, W., & Fan, W. (2025). Study on the reaction mechanism of nitrogen migration in pressurized oxy-fuel combustion. *Energy*, 342, 139526.

<https://doi.org/10.1016/j.energy.2025.139526>

13. Bai, Z., Jiang, X. Z., & Luo, K. H. (2022). A reactive molecular dynamics study of NO removal by nitrogen-containing species in coal pyrolysis gas. *Proceedings of the Combustion Institute*, 39(4), 4573–4581. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2022.07.154>

14. Liu, T., Ding, G., Xu, X., Zhu, L., Li, H., Xu, B., & Li, S. (2026). Nitrogen migration and transformation during municipal sewage sludge pyrolysis: in-situ control and selective for-

mation of NH₃ and HCN. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 196, 107766. <https://doi.org/10.1016/j.jaap.2026.107766>

15. Lin, C., Wang, Y., Wang, X., Cui, B., & Tan, H. (2025). Numerical simulation of NO formation during combustion process of gasified fuel generated from partial gasification of pulverized coal. *Process Safety and Environmental Protection*, 201, 107484. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2025.107484>

16. Madzarevic, A., Jovancic, P., Djenadic, S., Miletic, F., Ristic, M., & Crnogorac, M. (2024). Anticipated sulfur dioxide emissions from coal-fired power plants. *Thermal Science*, 29(1 Part A), 145–158. <https://doi.org/10.2298/tsci240308167m>

17. Xian, S., Zhang, H., Chai, Z., Jiang, D., & Zhu, Z. (2021). Release Behavior of Sulfur during Fluidized Bed Gasification. *Journal of Thermal Science*, 30(5), 1731–1740. <https://doi.org/10.1007/s11630-021-1476-6>

18. Zhang, H., Zhang, Y., Zhu, Z., & Lu, Q. (2016). Circulating fluidized bed gasification of low rank coal: Influence of O₂/C molar ratio on gasification performance and sulphur transformation. *Journal of Thermal Science*, 25(4), 363–371. <https://doi.org/10.1007/s11630-016-0872-9>

19. Xian, S., Zhang, H., Fan, Y., Chai, Z., & Zhu, Z. (2021). Effects of the ratio of O₂/C and H₂O/C on sulfur release behaviors during fluidized bed gasification. *Fuel*, 297, 120751. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.120751>

20. Karuana, F., Prismantoko, A., Putra, H. P., Ruhayat, A. S., Darmawan, A., Saputra, I. N. a. A., Syahril, M., Vuthaluru, H. B., Muflikhun, M. A., & Hariana, H. (2024). Experimental investigation of sulfur and nitrogen oxide emissions and corrosion propensity during the combustion of coals and biomass fuels. *Combustion Science and Technology*, 197(17), 5002–5024. <https://doi.org/10.1080/00102202.2024.2392004>

21. Mihajlović, S., Đorđević, N., Matijašević, S., & Kašić, V. (2025). Treatment of flue gas and coal to reduce air pollution-overview. *Podzemni Radovi*, 46, 123–137. <https://doi.org/10.5937/podrad2501123m>

Received 14.04.2026.

Accepted 17.04.2026.

Published 30.04.2026

Control of sulfur- and nitrogen-containing component formation as a basis for ecological optimization of coal gasification

Gasification of low-grade coal characterized by high ash content and elevated sulfur content is considered an effective approach for improving the environmental performance of coal-based energy systems by transferring the formation of hazardous components to a controlled stage of producer gas generation. At the same time, analysis of recent studies shows that most works are focused on the influence of individual process parameters or on a limited set of impurities, while the issue of integrated control of sulfur- and nitrogen-containing species formation remains insufficiently addressed.

The aim of this study is to establish the formation patterns of sulfur- and nitrogen-containing components in producer gas during coal gasification and to substantiate the possibility of controlling their formation by varying key process parameters.

It is shown that the composition of producer gas is governed by the redox conditions of the process, which are determined by the oxygen content in the oxidizer and the oxidizer-to-fuel ratio. An increase in oxygen content leads to a rise in sulfur-containing species concentrations (H_2S up to 0,32 %, S_2 up to 0,16 %, SO_2 up to 0,12 %), while the content of reactive nitrogen-containing species decreases and the NO concentration remains low. Hydrogen sulfide is identified as the dominant sulfur carrier (95-98 %), which determines the requirements for subsequent gas cleaning processes.

It is demonstrated that temperature defines the transformation pathways of sulfur species. In the range of 1873-2073 K, the maximum H_2S formation is observed (up to 0,4), while further temperature increase leads to a shift toward oxidized forms (SO and SO_2 up to 0,24-0,25 %). It is established that at oxidizer ratios $\alpha > 0,32$, a controlled transition from reducing to oxidizing conditions occurs, accompanied by a decrease in H_2S and an increase in SO and SO_2 concentrations. At low temperatures, the formation of HCN , NH_3 , and CS_2 is observed, which disappear at higher temperatures, indicating additional possibilities for composition control.

The obtained results demonstrate that targeted variation of temperature, oxygen content, and oxidizer ratio enables controlled formation of producer gas composition and limitation of environmentally hazardous components without changing the fundamental process scheme. Thus, parametric control of the gasification process can be considered an effective tool for ecological optimization of coal thermochemical conversion.

Keywords: coal, gasification, producer gas, sulfur-containing species, nitrogen-containing species, oxidizer, reactor temperature, oxidizer ratio.

Тугова Олена Валеріївна - аспірант, Український державний університет науки і технологій.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6846-0327>

Пінчук Валерія Олександрівна – д.т.н., проф., завідувач кафедри теплового інжинірингу та енергетичних технологій Національного технічного університету «Дніпровська політехніка».

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7684-1867>

Tutova Olena Valeriyivna - junior researcher, Ukrainian State University of Science and Technologies.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6846-0327>

Pinchuk Valeriia Oleksandrivna - Doctor of Engineering Sciences, Professor, Head of Department of Thermal Engineering And Energy Technology of the Dnipro University of Technology.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7684-1867>