摘要：借助电感耦合等离子体原子发射光谱仪及管式炉实验系统对三种高钠准东煤进行实验研究.重点研究了煤中钠金属赋存形态及其在燃烧过程中的挥发特性.结果表明，三种准东煤中，金属钠以水溶钠和有机钠居多.钠的赋存形态对钠的挥发特性有一定影响，主要是可溶钠挥发到气相中，钠含量越高的煤，燃烧过程中钠的挥发量越高；煤中大部分钠的挥发发生在1 000 ℃之前，在此范围内，温度越高，钠金属的挥发率越高；在1 000 ℃前煤中钠会有大量集中挥发的现象，且水溶钠含量越高的煤，激增现象越明显.

关键词：准东煤，钠，赋存形态，燃烧，挥发特性

摘要：由于煤化学吸附O2的过程是煤氧化反应的初始阶段，可通过抑制煤对O2的吸附来抑制煤的氧化自燃.应用Gaussian 03程序，采用密度泛函(DFT)方法，在B3LYP/6-31G(d，p)水平下研究分析Zn2+与煤中α位醛基结构的作用机理，并以活化能为指标表征Zn2+抑控煤中α位醛基结构氧化的效果，为煤炭自燃的阻化技术研究奠定基础.由计算结果可知，Zn2+的sp0.02d0.02轨道与C10H7CHO结构的20O原子的sp12.20d0.01轨道杂化形成σZn-O配位共价键，此配位共价键的二阶稳定化能为131.84 kJ/mol.当C10H7CHO结构氧化时，首先O2分子被物理吸附在—CHO基上，形成复合物complexⅠ，并释放30.86 kJ/mol的能量，然后复合物complexⅠ的分子间发生化学作用，导致O2分子被化学吸附在—CHO基上，所需活化能为Ea=66.87 kJ/mol；当煤中的活性α位醛基与Zn2+形成[ZnOHCC10H7]2+配合物后，—CHO基物理吸附O2分子释放的能量减少了19.38 kJ/mol，且化学吸附所需活化能增加了52.34 kJ/mol.因此，Zn2+对煤中α位醛基氧化具有明显的控制作用.

关键词：α位醛基，量子化学，阻化，吸附，活化能

摘要：用水热提质的方法对我国两种典型低阶煤进行脱水提质，提质后低阶煤的水分含量大幅度下降、固定碳含量和热值升高.低阶煤经过提质后裂解特性曲线向高温方向移动，挥发分开始析出温度升高，昭通煤和准东煤的最大失重速率呈现不同的变化趋势，裂解最终失重率随着水热提质温度的升高而降低.通过对脱灰后低阶煤的裂解特性分析，发现脱灰过程可以增大低阶煤的裂解失重速率，而水热提质过程对低阶煤裂解特性的主要影响是减少低阶煤的轻质组分，使低阶煤的失重峰变窄.

关键词：低阶煤，水热提质，脱灰，裂解特性

摘要：针对燃煤电厂煤场燃料损耗，在电厂煤场和实验室开展了褐煤存储氧化特性的实验研究.煤场实验结果表明，随着现场煤堆堆放时间增加，煤的热值和水分含量减小，灰分含量增大；煤的大颗粒减小，小颗粒增加，平均粒度减小；实验室实验结果表明，随着褐煤存放时间增加，TG曲线变化趋势与现场实验结果相一致，DTG曲线向低温段偏移，失重峰值增大，动力学参数表观活化能E减小，频率因子A增大.

关键词：燃煤电厂，褐煤，煤质，氧化特性，热重分析

摘要：采用ReaxFF(reactive force field，活性反应力场)分子动力学方法模拟了褐煤在1 000 K~2 000 K下的热解过程，分析了热解温度对热解产物分布的影响，搜寻到了噻吩、硫酚和硫醚中硫元素迁移的基元反应以及热解产物中硫原子的存在形式.结果表明，热解温度是影响热解产物中硫元素分布的一个重要因素，高温会抑制硫从褐煤中逸出.在热解过程中，噻吩、硫酚和硫醚中的硫原子会通过硫自由基中间体进行相互转化.在热解结束时大多数硫原子以噻吩和硫醚的形式存在.

关键词：褐煤模型，ReaxFF，热解，硫迁移

摘要：以循环流化床锅炉的循环灰为热载体对府谷烟煤进行了热解实验，考察了热解温度(470 ℃～630 ℃)对气液固产物产率和特性的影响，分析了原煤中的硫和氮在气液固三相产物中的分布.结果表明，随热解温度的升高，半焦产率降低，煤气产率从0.97%增加到5.44%，焦油产率从1.96%增加到8.07%；焦油中的轻油含量占80%(质量分数)以上，随热解温度的升高而降低.半焦的灰熔点在1 000 ℃以上.原煤经过热解后半焦中的硫含量可降到原煤中硫含量的70%（质量分数）左右，氮含量可降到原煤中氮含量的90%左右.

关键词：府谷烟煤，热解，固体热载体，硫氮分布

摘要：在箱式电阻炉装置上，进行典型新疆高钠煤五彩湾煤和加入胶体添加剂后混合煤样的热解实验，确定了五彩湾煤中钠在热解过程中的析出规律以及胶体添加剂对其的影响.结果表明，五彩湾煤原煤热解过程中，钠的析出量随着温度的升高而增大，钠的析出主要集中在700 ℃~900 ℃.适量添加硅溶胶能有效减少钠的析出，而铝溶胶的添加能促进钠的析出，且钠的析出量随着铝溶胶添加比例的增加而增大.

关键词：五彩湾煤，钠，热解，胶体添加剂

摘要：在1 kg/h规模的常压流化床气化实验系统上，在850 ℃，900 ℃和950 ℃，n(O)∶n(C)分别为1.0，1.1，1.2，1.3和1.4，生物质的质量分数分别为20%和40%的条件下，对某地PRB煤和一种生物质(美国竹柳)的共气化特性进行了研究.结果表明：随着温度的升高，H2含量(体积分数，下同)逐渐增加，CO和CH4含量及QHHV(合成气热值)逐渐减少，合成气产量和碳转化率增加较多.随着n(O)∶n(C)的增加，CO，H2，CH4含量和QHHV呈下降趋势；合成气产量和碳转化率增加.随着生物质比例的增加，CO，H2，CH4的含量先减少后增加，QHHV增加较多，合成气产量和碳转化率增加.n(O)∶n(C)为1.0时的炭黑量要高于n(O)∶n(C)为1.3时的炭黑量.

关键词：生物质，共气化，流化床，炭黑

摘要：利用自行搭建的小型流化床实验台，研究了不同温度(650 ℃，750 ℃，850 ℃，950 ℃)和不同气氛(CH4，CO+H2)下铁基载氧体在化学链燃烧中的积炭特性，并研究了添加水蒸气和CO2对积炭特性的影响.结果表明：铁基载氧体在CH4与CO+H2气氛下均产生积炭，CO+H2气氛下积炭量较少，积炭程度较轻；在CO+H2气氛下，温度升高，积炭减轻，积炭量在850 ℃时最少；还原气氛中添加水蒸气和CO2能够抑制积炭，水蒸气的效果明显好于CO2的效果.

关键词：流化床，铁基载氧体，氧化反应，积炭特性

摘要：研究两种不同溶剂条件下，煤直接液化初级产品的物理化学特性，通过实沸点蒸馏装置，将样品油进行了实沸点切割，得到17个窄馏分，并考察了各窄馏分的密度、相对分子质量、元素组成及临界性质.结果表明，两种煤液化粗油馏分组成差别不大，得到的相应粗油窄馏分的密度、元素组成和相对分子质量等相差也较小.加氢后的循环溶剂条件下，煤液化粗油S和N元素含量较低；最后采用经验关联式对两种煤液化粗油窄馏分的假临界性质进行了计算.结果显示，两种油的假临界性质差别不大，且随切割馏程升高假临界温度和假临界体积逐渐增大，窄馏分的假临界压力逐渐减小.

关键词：煤液化，溶剂，窄馏分，物性分析

摘要：在微型高压反应釜中，将五彩湾煤(WCW)及其镜质组(WCWV)和惰质组(WCWI)加氢液化，用气相色谱分析气体产物组成.结果表明，在380 ℃时，气体产率的次序为：镜质组>惰质组>五彩湾煤；在420 ℃时，气体产率的次序为：镜质组>五彩湾煤>惰质组；三种样品在液化过程中，C1~C4烷烃类气体(以下简称C1~C4)及COx气体含量随温度升高的变化趋势不同，对于WCW，C1~C4及COx气体含量随温度升高增加较明显；对于WCWI，C1~C4及COx气体含量随温度升高略有增加；对于WCWV，C1~C4及COx气体含量随温度升高反而降低；液化气体产物的分布特点为：C1~C4含量依次为CH4>C2H6>C3H8>C4H10，其总量约为COx气体的3倍，在C1~C4中CH4约占67%，C2H6约占22%，在COx气体中CO2含量约占69%，气相产物总体呈现出“富”烷烃、“富”甲烷及“富”二氧化碳的特性.

关键词：五彩湾煤，加氢液化，显微组分，气相产物，气相色谱

摘要：以吐鲁番长焰煤及其热解半焦为原料，经筛选采用AB复合黏结剂压制型煤，利用X射线衍射和扫描电镜研究型煤的成型机理.结果表明，AB复合黏结剂的最佳配比为：添加量11%，组分A和B质量比为5∶3，相应型煤具有较高的强度和良好的防水性；黏结剂加入煤中形成水化相C，其稳定存在且均匀分布在煤粒间并与煤粒紧密结合使型煤具有较高强度，半焦型煤中C水化相更多且与半焦颗粒结合更紧密，致使半焦型煤强度高于长焰煤型煤强度.

关键词：长焰煤，热解半焦，型煤，黏结剂，水化相

摘要：以高温煤焦油为原料，二甲苯和溶剂油为溶剂，采用溶剂沉降法对煤焦油中的喹林不溶物(QI)进行分离研究.考察了溶剂中芳脂比、溶剂比、沉降时间和沉降温度对精制焦油中QI含量及收率的影响.结果表明，在一定范围内，温度越高，时间越长，越有利于QI的脱除；随着芳脂比的逐渐增加，焦油中QI含量先下降后增加，焦油收率逐渐增加；随着溶剂比的增加，QI含量逐渐减少，焦油收率先增加后降低.当溶剂比为1，芳脂比为0.6，在75 ℃下沉降2 h，精制焦油收率可达到75.48%，QI脱除率达到87.7%，QI含量降至0.178%.

关键词：高温煤焦油，溶剂沉降，喹啉不溶物

摘要：以酚醛树脂为改性剂，采用共混的方法对煤焦油沥青(煤沥青)进行改性.主要利用热重与傅立叶变换红外光谱联用仪(TG-FTIR)考察了不同共混比例改性煤沥青的热解特性.结果表明，随着酚醛树脂掺混量的增加，改性煤沥青中的n(H)∶n(C)逐渐减小；2 953 cm-1(—CH3)和2 924 cm-1(—CH2—)处透射峰强度逐渐减弱；1 512 cm-1(苯环CC)处的透射峰强度逐渐增强；1 232 cm-1(芳香醚键=C—O—C)处和1 101 cm-1(脂链醚键=C—O—C)处透射峰强度逐渐增强；随着酚醛树脂掺混量的增加，改性煤沥青的起始失重温度逐渐升高，最大失重速率逐渐降低；改性煤沥青热解挥发物在较宽的温度范围内析出；改性煤沥青的实际失重率大于理论失重率；酚醛树脂与煤沥青发生交联；酚醛树脂的添加使得芳香烃类、脂肪烃类和CH4的释放量减少，并且挥发产物的析出发生在更宽的热解温度范围；芳香烃类和CH4的释放量由低温向高温延伸.

关键词：煤沥青，酚醛树脂，改质，热解

摘要：测定了陕西神木中低温煤焦油轻油(L-tar)和重油(H-tar)的基本性质.通过常压蒸馏将煤焦油切割为<220 ℃，220 ℃~260 ℃，260 ℃~300 ℃和>300 ℃四段馏分.利用酸碱法对<220 ℃，220 ℃~260 ℃，260 ℃~300 ℃三段馏分进行酚类提取研究，测定了三段馏分的总酚含量及最小碱油比.通过正交实验确定最佳碱洗条件，在最佳条件下，轻油对应的馏分段的总酚收率分别为92.23%，89.99%和87.91%；重油对应馏分段的总酚收率分别为94.60%，91.88%和90.73%.考察了所提取的混酚替代苯酚合成酚醛树脂的性能，轻油和重油混酚树脂的黏度及固含量分别为3.18 Pa·s和3.73 Pa·s以及79.39%和82.15%.

关键词：煤焦油，酸碱法，酚类，酚醛树脂

摘要：采用正交实验，以宁夏灵武不黏煤、贵州贫煤和蔗渣焦为原料，添加一定量的添加剂，通过水蒸气活化法制得糖液脱色颗粒活性炭.最佳实验条件是，宁夏灵武不黏煤与贵州贫煤的质量比8∶2，外加煤总量20%的蔗渣焦、8%的聚磷酸铵和1%的磷酸钠，炭化温度550 ℃，活化温度930 ℃，烧失率70%.在上述条件下，制得的活性炭焦糖脱色率为97.1%，微孔孔容为0.37 cm3/g，中孔孔容为0.28 cm3/g，2.6 nm~4.8 nm内的孔容为0.06 8 cm3/g，平均孔径为2.81 nm.孔径分析表明，微孔结构不利于吸附糖液中的色素物质，中孔结构有利于脱色性能的提高，2.6 nm~4.8 nm内的孔容对脱色有显著影响.

关键词：颗粒活性炭，糖液脱色，孔隙结构

摘要：以新疆煤为原料，采用水蒸气活化一步法制备出多孔炭材料，考察了活化时间和原料粒度对活化过程的影响，对比了活化前脱灰和活化后脱灰的优劣.结果表明，活化时间以120 min为宜，原料粒度在150 μm～180 μm时较优，活化后比表面积高达1 300 m2/g，收率为30%.样品脱灰适宜在活化后进行.将所制备的多孔炭材料应用于超级电容器，考察了其电容性能.结果表明，在6 mol/L KOH电解液中，三电极体系材料电容值可达149 F/g.两电极超级电容器具有良好的长循环稳定性，30 000次循环后容量几乎无衰减.

关键词：水蒸气活化，粒度，灰分，煤基多孔炭，超级电容器

摘要：分别以真空低温热处理和酸碱脱灰的兰炭为基体，将苯胺引入其孔隙和表面，并引发苯胺原位聚合，制备出兼具双电层电容和赝电容特征的兰炭/聚苯胺.FTIR、兰炭工业分析和电容性能测试表明，对兰炭真空低温热处理能破坏小分子有机物与兰炭间的弱相互作用，有效去除兰炭中的小分子有机物，有效改善兰炭/聚苯胺的电容特性，比电容和能量密度分别提高到169.4 F/g和24.1 Wh/kg.对兰炭进行脱灰处理，会降低苯胺对兰炭的浸润性，减弱聚苯胺与兰炭间的界面作用，降低兰炭/聚苯胺的比电容.

关键词：兰炭，聚苯胺，真空热处理，脱灰，电容性能

摘要：利用X射线光电子能谱(XPS)，研究了神木烟煤及神木半焦中氮和硫赋存形态，并在热重-质谱(TG-MS)联用分析仪上，利用等效特征谱分析(ECSA)法对煤焦燃烧过程中的气体产物进行了定量分析，研究含氮、含硫气体在煤焦燃烧过程中的生成规律.结果表明，神木烟煤和神木半焦中有四种不同形态的含氮物质，分别为吡咯和吡咯酮氮、吡啶氮、季氮和氧化吡啶，不含胺类物质；神木半焦中各形态含氮物质的绝对含量都减小，而季氮和氧化吡啶相对含量增加；NOx前驱物主要是NH3和HCN，HCN的生成量要高于NH3；神木烟煤和神木半焦含有三种不同价态的硫(S1，S2和S3)，+6价S3最多，大部分硫以硫酸盐的形式存在，相比神木烟煤，神木半焦中S3和S1的绝对含量下降，而S2绝对含量增加；检测到的SO2前驱物有H2S和COS，神木半焦燃烧过程中没有检测到COS和SO2；神木烟煤燃烧过程中含氮、含硫气体生成量明显高于神木半焦，气体析出时间更早，气体析出时间段对应的温度区间更宽.

关键词：等效特征谱分析，硫，氮，赋存形态

摘要：采用微波与氢氧化钠溶液协同法对乌海煤中硫进行脱除，通过正交实验确定了微波氢氧化钠溶液协同脱除煤中硫的最佳条件，考察了煤样粒度、氢氧化钠浓度、微波辐照时间和微波功率等因素对煤中硫脱除效果的影响，并对脱硫机理进行了分析.借助SEM，XRD，FTIR和XPS测试方法对实验前后的煤质进行了对比分析.结果表明，微波与氢氧化钠溶液协同可脱除煤中29.53%的硫分，煤的基本结构并未发生变化，煤中矿物含量减少.通过介电常数测试，研究了不同氢氧化钠浓度条件下的固体混合物对微波的介电响应情况，同时借助material studio软件模拟了电场效应对有机硫脱除的影响作用.

关键词：脱硫，微波，氢氧化钠，介电常数

摘要：利用傅立叶红外对低温干燥前后低阶煤中官能团的演变进行了研究，并通过红外谱图的峰面积曲线拟合处理，分析了低阶煤中各官能团在干燥过程中的变化规律及干燥后低阶煤性质的演变.结果表明，在干燥过程中，随着温度的增加，脂肪族结构逐渐消失，脂肪侧链中亚甲基官能团比甲基官能团活泼，在干燥过程中最先被氧化；含氧官能团羧基、羟基、羰基及醚键含量均呈现降低趋势，其中羧基反应活性最好，其含量降低的速度最快，羰基性质最为稳定，其含量变化最为缓慢；芳香环C=C先增加后减少，伊敏煤中C=C在230 ℃时开始分解，天池能源煤中C=C在190 ℃时已开始大量分解.研究表明，在低温干燥过程中低阶煤的变质程度有所增加，可在一定程度上提高其煤阶.

关键词：低阶煤，低温干燥，傅立叶红外，官能团

摘要：以N-甲基吡咯烷酮为溶剂，380 ℃下分别萃取褐煤、长焰煤、气煤和肥煤制备无灰煤.通过元素、红外、热重分析及常温分级萃取实验考察无灰煤的化学结构变化，在唐山1/3焦煤中添加10%无灰煤，研究煤阶对无灰煤配煤效果的影响.结果表明：相比原煤，无灰煤烃类增多，黏结性增强，以非黏结性煤为原料所得的无灰煤黏结指数可达90以上.随着原煤煤阶升高，无灰煤脂肪烃和含氧物质减少，芳烃增多，平均分子量增大，热失重减少.在唐山1/3焦煤中配入无灰煤，混煤软化点降低，热塑性随无灰煤原煤煤阶提高而增强.

关键词：煤阶，无灰煤，化学结构，热塑性

摘要：基于“相似相溶”原理，采用三氯甲烷溶剂萃取方法对不同煤级原生结构煤和共生构造煤进行超声-微波协同萃取，借助红外光谱、柱层析和色谱-质谱测试手段，对萃取物结构组成进行分析.研究表明：随煤级的增加，原生结构煤的萃取率全部小于共生构造煤，原生结构煤萃取率呈减少趋势，构造煤萃取率呈增加趋势，主要取决于演化过程中煤体结构的变化；萃取物呈阶段性、爆发性溶出，脂肪族类物质表现尤为明显，这与不同煤级煤中小分子的赋存形式有关；色谱-质谱测定与红外光谱分析预测结果基本一致，各煤级萃取物脂肪烃较多，芳香烃较少.从微观成烃理论和化学动力学原理对煤成烃成因进行探讨，用层析理论对烃类运移进行了描述.

关键词：构造煤，红外光谱，色谱-质谱，层析效应

摘要：以单颗粒煤粉燃烧破碎模型为基础，提出了以破碎比率概念来表征破碎程度，并以同心圆方式划分网格，由外向内依次按圆环形式模拟热解一次破碎过程.研究发现：煤颗粒粒径是影响煤颗粒破碎最重要的影响因素，粒径越小，反应的比表面积越大，相同膨胀应力产生的压强越大，破碎效果越明显；挥发分含量越高，热解析出过程中产生的膨胀应力越大，同时，气态的挥发分与固态的煤焦壁脱离产生更大的孔隙率，进一步降低了煤颗粒本身的屈服强度，破碎更容易产生；燃烧温度升高，起始阶段温度梯度增大，挥发分析出速度越快，膨胀应力越大，从而使破碎发生.

关键词：单颗粒煤粉，热解，破碎模型，破碎比率

摘要：以内蒙东胜褐煤和澳大利亚Yallourn褐煤为研究对象，应用红外光谱对其主要分子结构进行分析，并进行了等温热解实验.主要对比考察了等温热解温度对两种褐煤热解气组成、产量和热值的影响.结果表明，两种褐煤的脂肪烃类结构及含氧官能团比较多；随着等温热解温度的升高，CO和H2的含量(体积分数)增加，CO2的含量(体积分数)明显减少，热解气的产量和热值增加； 东胜褐煤热解过程中获得的H2量较高，更适合作为热解制氢的原料.相同热解温度下，等温热解与程序升温相比，得到的煤气热值高，是一种比较有效的获得高热值的热解方法.

关键词：褐煤，红外光谱，等温热解，热解气

摘要：以综合计算法为基础，将地下气化过程分为干馏阶段和气化阶段，结合反应平衡计算法相关理论，引入二氧化碳还原反应、碳与蒸汽反应的平衡常数方程，并考虑地下气化过程中瓦斯涌出、地下水渗入、工作面采出率、炉体排水、围岩散热和煤气泄漏等特有因素的影响，建立了一种适宜煤炭地下气化过程的计算模型.应用模型对华亭地下气化现场实验进行模拟计算，并与实测数据对比分析，结果表明，绝大部分理论计算值与现场实测值的相对误差在5%以内，准确度较高.该模型可以用于地下气化项目的前期研究，为相关工艺参数的设计和选择提供参考.

关键词：煤炭地下气化(UCG)，计算模型，综合计算法，反应平衡计算法

摘要：以神华煤直接液化示范装置加氢稳定单元进料为原料，在300 mL加氢装置上进行了煤直接液化油加氢稳定催化剂活性评价实验.结果表明：与HTS-358进口催化剂相比，FFT-1B国产催化剂在降低生成油密度和氮含量、提高溶剂油供氢性能方面有较大优势，加氢反应化学氢耗高0.2%(质量分数)，但裂化活性低；FFT-1B催化剂的活性金属含量较高.

关键词：煤直接液化，加氢催化剂，活性评价

摘要：采用Ni-W/γ-Al2O3型催化剂，利用固定床反应器对煤直接液化油进行催化加氢改质，研究了反应温度和氢压对烃类液体和气体产物分布的影响.结果表明：随着反应温度的升高，液态烃类产物中芳烃和烷烃组分的含量(质量分数)增加，当温度高于500 ℃时，裂化反应加剧，甲烷和乙烷气体含量(体积分数)急剧增加；随着反应压力的升高，氢化芳烃的含量增加，但高于4 MPa后，增加趋势变缓，甲烷气体含量随着压力升高而增加，其他气体含量受压力影响微弱.300 ℃，4 MPa条件下加氢液体产物中轻馏分油含量由加氢前的11%提高到17%；催化剂的HDN(加氢脱氮)、HDS(加氢脱硫)和HDO(加氢脱氧)活性分别为35.56%，72.73%和24.20%，n(H)∶n(C)由1.37提高到1.52.

关键词：直接液化油，气体产物，催化加氢，芳烃

摘要：以兰炭粉为主要原料，配加黏结性烟煤和黏结剂，通过冲压方式制成大块型煤，再利用改进的隧道窑将型煤炭化成型焦，型焦应用于冲天炉，作为冲天炉化铁的主要燃料.结果表明，以兰炭粉为主要原料所制得的型煤落下强度均为97.0%；型煤经隧道窑炭化所得型焦的整块率均为99.5%，落下强度为91.0%和93.5%，固定碳含量为86.5%和88.2%，热值为27.77 kJ/g和27.81 kJ/g；经炭化后的型焦应用于冲天炉，冲天炉风压降低，炉内透气性得到明显改善，熔化的铁水温度达到1 421 ℃和1 418 ℃，化铁效果好，完全满足铸造的要求.

关键词：神木兰炭，型煤，铸造型焦，型焦炭化

摘要：以新疆三道岭不黏结烟煤热解兰炭粉末为原料，采用复合黏结剂制备冶炼用型焦，考察黏结剂配比对型焦冷、热强度的影响规律.在优化黏结剂配比的基础上，考察了压力和炭化温度对型焦抗压强度的影响，并通过扫描电镜(SEM)解析了不同温度下型焦的微观结构.结果表明，型焦复合黏结剂的最佳配比为：淀粉3.65%(质量分数，下同)，沥青2.81%，有机钙0.33%，Fe2O3 0.49%，水34%.在实验范围内，成型压力越大，型焦抗压强度越大.随着温度的升高，在300 ℃~500 ℃范围内型焦的抗压强度明显下降；在500 ℃~900 ℃范围内型焦的抗压强度呈上升趋势.低温时，黏结作用主要以范德华力和静电力等物理作用方式为主.随着温度的升高，沥青和淀粉热解所产生的桥键成为黏结作用的主体，在温度超过500 ℃后，焦粉自身及其与有机钙、Fe2O3之间发生化学反应，产生黏性物质，促使型焦抗压强度提高.

关键词：型焦，黏结剂，炭化温度，抗压强度

摘要：针对300 MW贫煤锅炉，进行了低NOx燃烧系统改造和性能优化实验，研究了低氮燃烧器组合深度空气分级低氮燃烧技术对贫煤燃烧锅炉NOx排放的影响规律和控制效果.结果表明，锅炉采用新型低氮燃烧器、全炉膛深度分级燃烧改造后，锅炉SCR脱硝系统入口NOx浓度可由改造前约1 100 mg/m3(干态，6%氧量)下降至改造后的460 mg/m3(干态，6%氧量)左右，氮氧化物排放浓度平均降幅达到50%以上.改造方案及实验结果可为贫煤燃烧锅炉低NOx燃烧改造和运行优化提供借鉴.

关键词：贫煤，氮氧化物，低氮燃烧器，空气分级，三次风改造

摘要：以中温煤沥青为原料，使用芳烃和烷烃作为溶剂，采用溶剂法制备出灰分低于0.03%的纯化沥青；再以纯化沥青为原料，采用空气吹扫和高温热缩聚及刮膜蒸发的方法，制备出软化点高达250 ℃的纺丝沥青.借助偏光显微镜、热台和扫描电子显微镜对沥青的软化点、同性度和碳纤维的显微形貌进行表征，研究溶剂的芳环比、沉降温度和时间对制备纯化沥青的影响，以及温度和空气吹扫对聚合后沥青同性度的影响.结果表明，芳环比、沉降温度和时间对纯化沥青的影响较大；空气吹扫在一定程度上能提高沥青的分子质量，保证沥青的产率，温度控制在360 ℃以下可以防止中间相的生成.

关键词：中温煤沥青，溶剂法，纺丝沥青，各向同性

摘要：以昭通(ZT)、小龙潭(XLT)和先锋(XF)三个地区的褐煤为原料进行腐植酸(humic acid，HA)的提取研究.以褐煤中腐植酸含量、腐植酸提取率及品质因素为分析指标，考察三种褐煤提取腐植酸的适用性.通过工业分析及酸性官能团含量的检测等手段对腐植酸的品质进行综合评价.结果表明，三种褐煤腐植酸提取率分别为76.13%，47.61%和43.48%.昭通褐煤腐植酸中灰分含量(16.83%)相对较高，小龙潭褐煤腐植酸和先锋褐煤腐植酸中灰分含量分别为6.66%和4.63%，且水分、挥发分和固定碳含量也相差较小.在腐植酸含氧官能团含量上，三种褐煤腐植酸的总酸性官能团含量及羧基含量相差较小，但昭通褐煤腐植酸提取残渣中含氧官能团含量远低于另外两种提取残渣.以上分析表明，昭通褐煤腐植酸提取较为完全，在腐植酸提取方面适用性更强.

关键词：褐煤，腐植酸提取，含氧官能团

摘要：利用超声波辅助共沉淀法制备了半焦负载Fe基脱硫剂，在固定床反应器中考察了其脱硫及再生特性.采用X射线衍射(XRD)法和傅立叶红外光谱(FTIR)法对硫化前后及再生后样品的晶体结构和表面化学结构变化进行了表征.结果表明，金属Zn和Cu的加入使得Fe基脱硫剂的脱硫性能得到明显改善，其中半焦负载Fe-Zn-Cu脱硫剂具有最佳脱硫及再生性能.利用水蒸气法再生后的脱硫剂脱硫性能稳定，脱硫剂经多次硫化-再生循环后，仍具有良好的脱硫性能.

关键词：Fe基脱硫剂，复合金属氧化物，焦炉煤气，脱硫，水蒸气再生

摘要：在固体热载体快速热解装置上考察了锅炉循环灰对内蒙古羊市塔烟煤热解过程中氮的迁移转化特性的影响.结果表明，在考察温度(530 ℃~660 ℃)内，在气相氮中仅含有HCN和NH3，无N2产生.循环灰对煤结构及焦油分子中氮杂环的裂解没有催化作用，与惰性石英砂作为热载体的实验结果相比，热解温度600 ℃时，循环灰作为热载体使气相中HCN-N和NH3-N的产率分别降低了24.53%和29.86%.并通过向惰性石英砂中添加碱性矿物质对循环灰中影响煤热解过程中气相氮释放的主要物质进行了考察.

关键词：快速热解，固体热载体，循环灰，氮

摘要：选择宁夏吴忠某造纸厂污泥为研究对象，将其与宁夏本地煤炭进行混合，用热重-质谱仪分析了室温~1 000 ℃时，污泥与煤混烧特性及混烧过程中NOx和SOx污染物的排放，并用原子吸收分光光度计和原子荧光光谱仪分别研究了燃烧前后样品中重金属Pb，Cr，Cu， Zn， Ni， Mn，Hg和As的迁移.结果表明，造纸厂污泥与煤混烧后，燃烧特性良好，并且燃烧后的灰渣中重金属含量符合GB 4284-1984，不会对水土造成二次污染；燃烧过程中一部分重金属迁移到烟气中去.因此，应采用吸附及除尘结合的方式对烟气进行处理，避免污泥资源化处理过程中对大气的污染.

关键词：造纸污泥，燃烧，热重分析，重金属迁移

摘要：通过溶胶-凝胶法制备蜂窝状Mn-Ce/TiO2催化剂，并探究在烟道气脱硝应用中不同工艺条件对Mn-Ce/TiO2催化活性的影响.结果表明，催化剂在高体积分数NO、高空速、高氧的条件下，仍然显示出了优越的活性.暂态响应实验表明，NO以气态或少数弱吸附态的形式与强吸附的NH3反应；O2在SCR(选择性催化还原)反应中起着重要的作用，O2促进了Mn-Ce/TiO2催化剂上表面氧的生成，进一步补充了晶格氧，同时也促进了NO的吸附.

关键词：烟道气，脱硝，蜂窝状Mn-Ce/TiO2

摘要：以山西长治霍尔辛赫矿贫煤为研究对象，对煤样分别进行了不同溶剂的抽提，并借助柱层析法和X射线衍射技术(XRD)对抽提物和抽余物进行了测试分析.结果表明：高阶煤进行溶剂抽提后，THF对煤样的抽提率最高，其次是CS2、丙酮和乙醇，苯的抽提率最低；除CS2抽提物中非烃类含量高于总烃含量外，其余溶剂的抽提物均表现为总烃含量大于非烃类含量，同时，随着抽提效果的增强，抽提物中非烃类化合物的质量分数逐渐增大；经溶剂抽提后抽余物的基本结构单元(BSU)的芳香层间距d002、堆砌度Lc和芳香层数N均表现出大于原煤微晶结构的规律，而延展度La在溶剂抽提后却呈现出小于原煤微晶结构延展度的特性.

关键词：溶剂抽提，高阶煤，化学组成，化学结构，柱层析法，XRD

摘要：利用静态热机械分析法(TMA)测定三种煤样的热膨胀特性，分析煤质特性对热膨胀性的影响，通过滚筒干燥实验，研究干燥过程中不同作用力加载方式、温度和煤质对破碎特性的影响，以及热膨胀与破碎特性的相关关系.结果表明，不同煤种的热膨胀特性差异较大，最大膨胀率和最大收缩率均与原煤全水分存在正相关关系；干燥过程中，热力和机械外力两种作用力的耦合加载方式相较单独加载方式产生了协同效应，其中热力作用使褐煤孔隙和裂隙结构发生变化，颗粒机械强度降低，而机械外力的作用使破碎现象更为显著，且细粒级产量大幅增多；褐煤的热膨胀和破碎特性相一致，原煤全水分越高，热膨胀性越强，在干燥过程中也越易发生破碎及粉化.

关键词：热膨胀，破碎，粉化，粒度分布，TMA

摘要：依据煤全组分族分离方法——萃取反萃取法及煤嵌布结构模型思想，采用正己烷、甲醇、丙酮、氯仿、CS2和THF六级溶剂对淮北童亭煤(HB)、徐州煤(XZ)和平顶山煤(PDS)各族组分进行分级分次索氏萃取，对各级萃取物进行GC-MS分析.结果表明：索氏萃取溶出物中有机卤化物的溶出行为主要发生在氯仿级的萃取过程中，其溶出物主要以脂基氯、芳基氯(溴)和杂环基氯化物4类卤化物为主，相对分子质量为94~250.其中，杂环基氯化物倾向分布于疏中质组和密中质组中，以较小微孔嵌入态和网络嵌入态赋存；芳基卤化物倾向分布于重质组中，以较小微孔嵌入态赋存；脂基氯化物在各族组分中没有倾向性，以3种赋存状态存在于各族组分中.

关键词：萃取反萃取法，有机卤化物，GC-MS，氯仿

摘要：采用碱酸法对鄂尔多斯褐煤进行了不同温度下的脱灰处理，通过元素分析、FTIR、TG和SEM等分析手段比较了脱灰前后煤的结构变化.结果表明，煤经过碱酸处理后，水含量和灰含量降低，经高温(240 ℃)酸碱处理，灰分降低到0.84%.碱酸处理过程减少了煤的含氧量，提高了碳含量和发热量.室温碱酸处理会加速煤的热解，使煤的粒度更加均匀.高温碱酸处理降低了煤的挥发分，热失重曲线变缓，小分子间发生聚合反应，增强了煤的紧密性，使煤表面变得粗糙.说明碱酸处理在一定程度上改变了煤的物理化学结构，且高温下更加明显.

关键词：褐煤，碱酸处理，红外光谱分析，热重分析，扫描电子显微镜

摘要：以煤的基氏流动度实验作为研究胶质体性质的出发点，提出以加权平均流动度lgFwa和最大流动度lgFm分别代表整个阶段胶质体所体现的平均质量和最佳质量，并提出以软固温度区间Tr-Ts表征胶质体数量.在此基础上，以因子分析为综合评价胶质体性质的模型，建立一个全面表征胶质体性质的新指标——流动指数F，发现流动指数F较lgFm与煤工艺性质有更密切的联系，具有更好的加和性，预测焦炭质量更准确，表明流动指数F作为黏结性指标可以全面反映胶质体的性质.

关键词：基氏流动度，加权平均流动度，胶质体，因子分析，流动指数

摘要：在实验室规模的固体热载体快速热解装置上，以内蒙古富安高硫煤为研究对象，考察热解温度、升温速率及热载体种类对煤中硫在热解产物中分布的影响.结果表明，燃烧灰和气化半焦为热载体时，均具有明显的固硫能力.在650 ℃热解时，煤中约40%的硫转移至热载体中.由于热载体中碱性矿物质存在形态的差异及其物理性质的不同，低温下气化半焦的固硫能力强于燃烧灰的固硫能力，随热解温度的提高其差异逐渐降低.与慢速程序升温过程相比，由于高温有利于Fe2O3与还原性气体反应生成FeO，快速热解时热载体的固硫能力较强.

关键词：固体热载体，快速热解，慢速热解，脱硫

摘要：通过热重分析的方法对褐煤、生物质及褐煤生物质混合物的热解特性进行研究，以考察生物质与褐煤共热解过程中是否存在协同效应，结果表明：将褐煤与生物质按1∶1(质量比)的比例混合后，其初始热解温度及挥发分最大释放峰出现温度与生物质单独热解基本相同，热解终温与褐煤相比大幅度提前，混合物热解在各个阶段的失重率均大于其单独热解失重率的平均值.褐煤、生物质及其混合物的热解过程可以用一级和二级热解反应动力学模型描述，通过计算动力学参数，发现在整个主要热解过程中，混合物在各个温度段的E值均小于褐煤或生物质单独热解时的E值，热解反应更加容易进行.证明了生物质对褐煤的热解有促进作用，褐煤与生物质在共热解过程中存在协同效应.

关键词：褐煤，生物质，共热解，协同效应

摘要：采用热重分析仪分别对废轮胎、煤及其混合样进行热解实验，研究废轮胎与煤的混合比例及热解升温速率对混合物失重特性的影响.结果表明：废轮胎和煤单独热解时发生剧烈缩聚反应，DTG曲线在400 ℃～480 ℃的温度区间有重叠部分；添加废轮胎对煤的热解有促进作用，随废轮胎质量分数的不断增加，煤的热解高峰区逐渐向低温区移动，且失重率不断提高；对混合样进行不同升温速率的热解实验发现，在较低的升温速率范围(15 K/min~20 K/min)内，增大升温速率可以促进热解反应的进行；而升温速率过高(>20 K/min)会使样品颗粒内部热解产生的挥发分来不及逸出而出现笼蔽效应，从而使样品的失重率减小.

关键词：废轮胎，共热解，热重分析，协同效应

摘要：采用热重分析法探讨了影响低阶煤热解半焦燃烧性能的主要因素；采用比表面积和孔隙结构分析仪、扫描电镜揭示了半焦燃烧性能差异的机理.结果表明：热解条件是影响半焦燃烧性能的重要因素.煤种相同时，随热解温度的升高和热解时间的延长，半焦的燃烧性能变差，用半焦的燃料比可预测半焦的燃烧性能；对于不同煤种，不能根据半焦的燃料比来预测半焦的燃烧性能.原煤的内水含量是影响其热解半焦燃烧性能的关键因素，可根据煤的内水含量预测其热解半焦的燃烧性能；半焦的BET比表面积和微表面特征是造成其燃烧性能好坏的主要原因，与半焦热解母体(煤炭)的内水含量密切相关.

关键词：低阶煤，热解，半焦，燃烧性能，煤的内水

摘要：采用煤炭地下气化实验系统模拟鹤壁烟煤地下气化过程，收集气化后残留半焦(气化残焦)，研究了气化残焦中污染物在地下水中的浸出规律.研究表明，煤炭地下气化残焦浸出液中含有挥发酚等有机污染物及镉(Cd)、铅(Pb)、砷(As)、铬(Cr)、铜(Cu)、镍(Ni)和锌(Zn)等10余种重金属无机污染物.浸出温度和浸出时间是影响煤炭地下气化残留半焦浸出液中污染物质量浓度的重要因素.当浸出温度为45 ℃，浸出时间为8 h时，气化残焦浸出液中挥发酚、总有机碳(TOC)及化学需氧量(COD)的质量浓度分别为0.03 mg/L，5.07 mg/L，7.48 mg/L；Cr，V，Cu，Se，Ni及Zn等重金属离子的质量浓度介于4.0 μg/L~73.4 μg/L之间.大规模进行煤炭地下气化可能会对地下水造成潜在污染.

关键词：煤炭地下气化，气化残焦，地下水，污染物

摘要：以新疆阜康西沟煤为研究对象，考察了甲醇(MET)和洗油(WO)混合溶剂下的醇解条件，醇-碱体系下的醇解行为及醇解残渣的液化性能，并与煤样直接液化结果进行对比.结果表明：θ=320 ℃，t=60 min，m(solvent)∶m(coal)=10∶1，mMET∶mWO=8∶2为适宜的醇解条件，此条件下，醇解率为21.8%.进一步加入NaOH或CaO作为醇解催化剂，当碱煤比=0.8∶1时，醇解率分别为51.3%和27.4%.以洗油为供氢溶剂，对醇解残渣进行直接液化，并与原煤样直接液化的结果进行对比，煤样直接液化的总液体产率为62.3%，而无碱醇解、CaO醇解和NaOH醇解产物的总液体产率依次为71.0%，72.7%，83.2%，分别提高了8.7%，10.4%和20.9%.同时，对醇解产物进行了FTIR，TG-DTG和SEM表征，对催化醇解与煤样直接液化的气体产物进行了GC分析.

关键词：超临界，醇解，洗油，液化，固体碱催化剂

摘要：利用间歇式高压反应釜考察温和条件下，铁基复配催化剂对红柳林煤液化性能的影响，并利用元素分析仪和红外光谱仪对前沥青烯(PA)和沥青烯(AS)的元素组成和官能团进行分析.结果表明，在温和液化条件下(反应温度430 ℃，氢初压4 MPa)，铁基复配催化剂可显著提高γ-FeOOH的催化活性，其中三元复配催化剂的活性优于二元复配催化剂.与γ-FeOOH相比，二元和三元复配铁基催化剂最多可将油产率提高3.88%和6.12%.铁基复配催化剂可同时促进前沥青烯和沥青烯的加氢，尤其是沥青烯的加氢.

关键词：红柳林煤，温和液化，复配催化剂，液化油

摘要：应用云芝菌(Coriolus versicolor，简称为C.versicolov)对昭通褐煤进行液化，并对液化产物进行了13C NMR光谱分析.结果发现，云芝菌对未处理的原煤无液化效果，对脱灰预处理煤有一定液化效果，对硝酸氧化预处理煤具有较强的液化效果.在DOX培养基中的液化效果是在SMB培养基中的10倍左右.摇床培养比静置更利于生物液化，当转速为120 r/min时，由于菌体生长过于旺盛，不如转速为60 r/min时的液化效果好.13C NMR光谱分析发现，液化产物中含有≡C—O—(80.7×10-6)，—CH2—O—(59.0×10-6)和—COOR(179.6×10-6)等含氧官能团，这主要是云芝菌对昭通硝酸氧化煤液化过程中发生氧化反应造成的.

关键词：云芝菌，褐煤，硝酸氧化，生物液化，13C NMR

摘要：在炼焦配合煤中添加K2CO3或Na2CO3进行捣固炼焦，考察K或Na对炼焦煤工艺性质和焦炭性能的影响，运用DTG分析K或Na对炼焦煤热解质量的影响规律，运用XRD和SEM分析K或Na对焦炭性质的影响规律.结果表明，随着K或Na添加量的增加，炼焦煤的干燥无灰基挥发分(Vdaf)质量分数先增加后保持不变，黏结指数(G)和胶质层最大厚度(Y)减小；K或Na使炼焦煤的热解DTG曲线在200 ℃出现失重峰，在400 ℃～600 ℃之间的热解速率变大.随着配合煤中K或Na添加量的增加，焦炭的冷态强度降低，热态性能变差，焦炭微晶结构中堆垛高度Lc减小，网状平面尺寸La变化不大，层间距d002增大，石墨化度降低；K或Na使得焦炭基质受CO2破坏的程度加剧，从而降低焦炭结构强度.

关键词：碱金属，炼焦煤，捣固焦炭，焦炭质量

摘要：通过控制驯化条件对接种物进行选择性培养，分析接种物驯化过程中pH值、SCOD质量浓度、辅酶F420质量摩尔浓度和产气量的变化.获得接种物的驯化方案为：在35 ℃培养温度下，每天进料量为2 g泥炭，驯化30 d；其在第20天辅酶F420质量摩尔浓度达到最高值0.037 3 mmol/g，远远大于对照组P0第19天的辅酶F420质量摩尔浓度最高值0.011 0 mmol/g，揭示驯化接种物有助于富集厌氧微生物，尤其是产甲烷细菌.实验结果可为泥炭转化为生物甲烷、扩大煤制天然气煤种资源开辟新途径.

关键词：泥炭，生物甲烷，接种物，驯化

摘要：以太西煤及其煤基活性炭为碳源，硅酸钠为硅源，Fe(NO3)3·9H2O为催化剂，利用溶胶-凝胶法经碳热还原制备碳化硅粉体，探究不同n(Fe)∶n(Si)对制备的碳化硅的结构和形貌的影响.分别采用XRD，SEM和BET等分析技术对所制备的样品进行表征.结果表明，以太西煤为碳源，制得的碳化硅存在不同程度的堆积缺陷，且随着n(Fe)∶n(Si)的提高，堆积缺陷逐渐减弱，碳化硅的形貌由部分晶须逐渐变为尺寸均匀的纳米颗粒.以煤基活性炭为碳源制备的碳化硅堆积缺陷较弱，碳化硅的结晶度高，而且随着n(Fe)∶n(Si)的提高，碳化硅粒径逐渐增大，但基本保持在50 nm~100 nm范围.

关键词：煤基活性炭，太西煤，催化剂，碳化硅

摘要：以HCl作为酸浸介质，考察热活化及碳酸钠助剂+热活化耦合活化两种活化方式下，煤矸石物料在酸浸过程中Al，Fe，Ca，Mg，K和Ti等金属离子的溶出活性，采用X射线衍射光谱(XRD)和红外光谱(IR)对活化前后的物料及酸浸渣进行矿物组成和微观结构表征，并根据金属在煤矸石中的矿物存在形态对金属离子的溶出活性进行解释.结果表明，在750 ℃热活化作用下，煤矸石中Al，Fe，Ca和Mg大量溶出，K的溶出率很低，Ti基本上不溶出；加碳酸钠助剂活化不仅有利于Al的溶出，同时滤液中金属离子K，Ti和Na也大量溶出，增加了滤液分离提纯和铝产品制备的难度.此外还研究了煤矸石热活化-酸浸工艺过程中金属离子的溶出规律，提出了酸浸预除杂的措施.

关键词：煤矸石，酸浸，热活化，碳酸钠助剂，金属离子溶出

摘要：以二苄基硫醚(DBS)和二苄基二硫醚(DBDS)为有机含硫模型化合物，以二苯甲烷(DPM)亚甲基作为活性氢源，研究了反应温度对DBS中C烷—S键及DBDS中C烷—S和S—S键断裂以及硫的热迁移的影响.结果表明：200 ℃以下，DBS中C烷—S键未断裂；225 ℃以上，DBS中C烷—S键能够发生有效热断裂.而模型化合物DBDS在200 ℃时C烷—S和S—S键可发生有效热断裂.两种化合物热断裂反应遵循自由基型反应机理，两种模型化合物中硫的热迁移历程基本相同，主要产物是甲苯(PhMe)、二苯乙烯(DPE)、二苯乙烷(DPEA)和三苯乙烯(TPE)，有机含硫化合物很少，说明温和条件下化合物DBS中C烷—S键及DBDS中的C烷—S和S—S键能有效热断裂，热断裂硫能有效以气体H2S形式迁出，少量转化为其他形态有机硫.

关键词：二苄基硫醚，二苄基二硫醚，硫，自由基反应，热迁移

摘要：运用量子化学密度泛函理论(DFT)研究了褐煤表面含氧官能团对水分子的吸附机理，结果表明，氢键作用为主要作用力，水分子在羧基上吸附时形成两个氢键，最短氢键长度为0.173 3 nm.在酚羟基和醇羟基上吸附时，含氧官能团作为氢键供体，水分子作为氢键受体是最优吸附构型，氢键长度分别为0.187 6 nm和0.192 7 nm.在羰基和醚键上吸附时形成的氢键长度分别为0.196 1 nm和0.206 0 nm.由Mulliken电荷布局可知，吸附后含氧官能团中氧原子得电子，O—H，C=O和C—O键的强度被削弱，从而键长被拉长.吸附能计算结果符合吸附平衡距离变化规律，含氧官能团对水分子的吸附强弱顺序为：羧基>酚羟基>醇羟基>羰基>醚键.水分子在酚羟基上的吸附符合Lennard-Jones理论，水分子离酚羟基约0.188 5 nm处的吸附能最低，此为稳定吸附平衡态，吸附能为-45.63 kJ /mol.

关键词：褐煤，含氧官能团，量子化学，几何吸附构型，吸附能

摘要：分别在1 400 ℃，1 700 ℃，2 000 ℃，2 200 ℃，2 400 ℃和2 600 ℃下对云南昭通无烟煤高温热处理，并采用CA，XRD和SEM等方法对其进行了测试和表征.结果表明，云南昭通无烟煤水分、灰分和挥发分等物相随着热处理温度的提升转变为逃逸相后遗失，热处理温度越高，三种物相转变越迅速，越彻底；超高温热处理能使无烟煤转变为石墨相，固定碳相从非晶态向晶态转变，热处理温度越高，内部碳原子规整化程度越高，芳香层结构逐渐发育长大完善，石墨化程度就越高.

关键词：无烟煤，超高温热处理，物相转变，微观结构

摘要：运用煤的结构化学理论，基于固体13C-NMR测试方法，对比分析了构造煤在混合酸处理脱灰前后碳组成的变化.研究表明，混合酸处理脱灰对构造煤中脂肪碳、芳香碳和含氧官能团的比例分配影响不大，但对碳组成有一定影响.脱灰后比例增加明显的结构包括脂甲基碳、甲氧基/芳甲氧基碳、桥接芳碳，结构受到明显破坏；比例显著减小的结构归属为亚甲基/次甲基碳、环内氧接脂碳、侧支芳碳、质子化芳碳.混合酸处理脱灰对构造煤结构最重要的影响在于芳香稠环结构有所改变，脱灰样品中芳香簇的尺寸变大了.

关键词：构造煤，13C-NMR分析，混合酸，脱灰，碳组成

摘要：采用超高温热重/差示扫描量热仪，研究了神木烟煤和宝日希勒褐煤在室温至1 600 ℃之间N2气氛中的热解特性，以及神木烟煤在CO2气氛中的热解气化特性.研究表明，在1 000 ℃~1600 ℃范围内，两种煤仍保持一定的热解速率，在该温度段的失重分别为4.49%和6.21%，褐煤在1 200 ℃~1 500 ℃内还存在一个明显的失重峰.在200 ℃~949 ℃/969 ℃之间，烟煤和褐煤热解放出热量，两种煤最大净放热量分别为728 mJ/mg和1 776 mJ/mg，而在其他温度段主要表现为吸热.CO2气氛下烟煤中低温失重曲线与N2气氛中的基本相同，800 ℃时失重量相近.但CO2气氛下中低温热解过程几乎不放热，反应级数也变为3级，与N2气氛完全不同.

关键词：热解，热重，N2气氛，CO2气氛，气化

摘要：利用热重分析仪研究了植入金属氧化物对褐煤半焦水蒸气气化反应的影响，并对其气化反应机理及动力学特性进行了分析.实验结果表明：水蒸气气化反应温度和负载的过渡金属氧化物是影响半焦水蒸气气化反应的重要因素.随着气化反应温度的升高，反应速率加快；Fe-Zn形成的复合金属氧化物铁酸锌对半焦气化反应具有最强的催化作用，达到最大气化反应速率的时间最短，具有最小的表观反应活化能(166.89 kJ/mol).

关键词：半焦，水蒸气气化，金属氧化物，转化率，动力学

摘要：利用STA449F3同步热分析仪，在50 ℃~1 500 ℃温度下，对4种粒度的半焦和焦炭进行CO2气化实验.结果表明，粒度对半焦和焦炭的反应性影响不大，粒度越小，半焦和焦炭的气化反应温度越低，反应越易进行.粒度变化对半焦中挥发分析出温度和起始反应温度几乎无影响.半焦的失重主要由挥发分的析出和固定碳的气化引起，焦炭的失重则只是由固定碳的气化引起.半焦的最大气化速率随粒度减小呈现加快的趋势，焦炭则呈减慢的趋势.

关键词：粒度，半焦，焦炭，气化反应

摘要：以生物质和褐煤共气化半焦为研究对象，向生物质与褐煤混合热解获得的半焦中植入Fe(NO3)3后进行共气化，制备了活性半焦脱硫剂，利用固定床实验装置对脱硫剂的脱硫性能进行考察，并通过BET和XRD等检测手段对脱硫前后样品的比表面积和晶体结构进行表征.结果表明，负载Fe3O4的生物质与褐煤共气化半焦具有良好的脱硫活性；植入10%Fe的脱硫剂在O2和H2O存在的条件下，脱硫效率最高，硫容最大，达到764.1 mg/g；在脱硫剂吸附SO2的过程中，O2首先化学吸附在活性半焦表面的C活性位点，形成C(O)络合物，作为SO2被氧化的活性位点，金属氧化物促进了半焦表面对O2的化学吸附，形成更多的活性位点，并将SO2氧化为SO3，在水蒸气存在的条件下生成硫酸储存在半焦的微孔中，并有少量的金属硫酸盐(Fe2(SO4)3)生成.

关键词：共气化半焦，金属氧化物，脱硫，硫容，催化剂

摘要：基于密度泛函理论的方法，对硫覆盖度为0.22的Ni(111)表面上合成气甲烷化的反应机理进行了研究.描述了Ni(111)含硫表面上各种反应分子和可能中间体的稳定构型，相对于Ni(111)表面，反应物CO的吸附能降低了0.30 eV，而重要中间体CH2，CH3和HCO吸附能分别下降了0.11 eV，0.24 eV和0.23 eV.得出在0.22 mL硫覆盖度的Ni(111)表面上CO通过加氢反应生成甲烷的最优路径为：CO+4H→HCO+3H→CH2O+2H→CH3O+H→CH3+H→CH4，而在Ni(111)洁净表面甲烷化时，HCO的进一步加氢则容易生成CHOH，这说明表面S原子的存在使CO甲烷化的路径发生了改变.

关键词：Ni(111)含硫表面，密度泛函理论，CO甲烷化，中间体，反应路径

摘要：采用热重-差热分析法，研究了水煤浆中水分分布特征.通过水煤浆脱水率、Zeta电位、粒径、动态稳定性和黏度等指标的对比分析，研究了聚合氯化铝(PAC)调节水煤浆脱水性能以及错流过滤实现水煤浆浓缩的可行性，对比研究了平纹丙纶滤布与土工布过滤分离的性能.结果表明，添加PAC可以增加水煤浆中自由水的质量分数，显著提高水煤浆的脱水速率.添加0.01%(质量分数)的PAC，可以同时满足动态稳定性、黏度和脱水速率等要求；实验设计的错流过滤装置，能快速将水煤浆的质量分数由52%提升至65%以上，平纹丙纶滤布的水透过通量与煤水分离效果优于土工布.

关键词：水煤浆，聚合氯化铝，脱水，错流过滤，膜通量，浓缩

摘要：利用矢量网络分析仪测定煤样及其相关含硫模型化合物的吸波特性，得到0.5 GHz~2 GHz频段是微波辐照脱除硫醚/硫醇类有机硫的最佳频率范围；使用不同频率的微波辐照开展炼焦煤脱硫实验，通过X-射线光电子能谱(XPS)解析，辐照前后煤中有机硫质量分数的变化.结果表明，频率为0.84 GHz和0.915 GHz的微波对硫醚/硫醇类的脱除效果远高于频率为2.45 GHz的微波.

关键词：炼焦煤，微波辐照，脱硫，硫醇/硫醚类

摘要：研究了不同比例下顶装焦与捣固焦均匀混合后焦炭的等温连续热反应，结果表明：当顶装焦与捣固焦分别以3∶1，2∶1和1∶1的质量比混合进行反应时，捣固焦优先于顶装焦与CO2反应，使顶装焦的反应性(CRI)较单独使用时明显降低，反应后强度(CSR)明显改善.随捣固焦混合比例的增加，混合焦炭的CRI增大，CSR减小，其中，顶装焦的CRI减小，CSR增大，捣固焦的CRI增大，CSR减小，并且混合焦炭的CSR和CRI的实测值与计算值接近.混合焦炭可使优质焦得到保护，保障焦炭整体的骨架支撑作用.

关键词：顶装焦，捣固焦，混合焦，反应性，反应后强度

摘要：采用立式煤粉燃烧电阻炉装置，研究了燃烧气氛(O2/N2和O2/CO2气氛)、石英砂质量分数和氧气体积分数对半焦燃烧时N2O生成特性的影响.结果表明：燃烧气氛对N2O收率无明显影响，随着温度升高，N2O收率显著降低(最大降幅为1.96%)；添加石英砂对N2O收率影响明显，在石英砂质量分数为50%，温度为1 300 ℃时，N2O收率较未添加石英砂时增加约2.5%；N2O收率在低氧气体积分数(20%)时受氧气体积分数影响，在高氧气体积分数(40%)时受焦炭颗粒数量影响.

关键词：低阶煤，半焦，燃烧，N2O收率，立式管式炉

摘要：以矿热炉法生产电石过程中产生的二次废料为添加剂，在不同添加量下，对不同挥发分煤的燃烧特性及其动力学行为进行分析.结果表明，当二次废料添加量分别为4%(质量分数，下同)，8%及6%时，王佐煤、石嘴山煤及二者混合煤燃烧效果最佳；当二次废料添加量一定时，煤粉挥发分含量越高，燃烧促进作用越显著；随二次废料添加量增加，煤粉燃烧温度区间整体上呈变窄趋势；动力学分析结果与煤粉燃烧特性实验结果相一致.

关键词：二次废料，煤粉，添加量，燃烧特性，动力学

摘要：采用制备液相色谱，分别用石油醚、甲苯与无水甲醇对低温煤焦油进行洗脱，对含氮化合物进行富集，使用GC-MS与XPS分别对洗脱液和残留物质进行分析.结果表明，以硅胶和硅酸的混合填料(质量比为3∶1)为色谱柱填料，检测出4种吡啶类化合物，占1.59%(质量分数，下同)；6种苯胺类化合物，占4.18%；7种喹啉类化合物，占6.91%；两类吲哚化合物，占0.97%；咔唑类化合物，占0.56%以及腈类化合物，占0.26%.含氮化合物主要为碱性含氮化合物，非碱性含氮化合物质量分数极低.

关键词：低温煤焦油，含氮化合物，制备液相色谱法，洗脱

摘要：采用等体积浸渍法制备了Ni/ZnO-Al2O3催化剂，以含酚油为原料，通过固定床实验筛选出了最优的脱硫催化剂，并评价了其对含酚油脱硫不脱酚的最佳工艺条件.结果表明，ZnO粒径越小，其制备出的脱硫催化剂脱硫活性越高；较高的反应温度和较低的体积空速有利于提高Ni/ZnO-Al2O3对含酚油的脱硫效果.Ni/ZnO-Al2O3脱硫剂脱硫不脱酚的适宜操作条件为：常压，温度320 ℃~340 ℃，空速0.2 h-1，此时Ni/ZnO-Al2O3催化剂的脱硫率达99.1%，且可稳定运行200多小时.该催化剂在常压临氢条件下，可以实现对含酚油脱硫且不脱酚，不仅解决了工艺难题，也大大节约了生产成本.

关键词：镍，氧化锌，催化剂，含酚油，脱硫

摘要：以煤萃取反萃取分离所获得的疏中质组分为原料，通过简单的炭化过程制备了泡沫炭并进行了石墨化处理.采用热重分析、傅立叶红外光谱、扫描电镜与透射电镜以及压汞仪等对原料的结构特征、热反应性质及产品特性进行了分析表征.结果表明，煤疏中质组因其在分离的同时并行发泡，形成微纳尺度下的泡状结构，且分子质量中等，灰分极低，有较强的黏结性能，是制备煤基泡沫炭的优良前驱体；经塑型和炭化后所制得的泡沫炭主要由球形“泡”和超薄“泡壁”构成三维立体结构，泡孔密集且连续排布，泡沫炭孔隙率最高可达81.32％.疏中质组中最主要的作用力是氢键作用，是导致萃取反萃取过程析出疏中质组分结构疏松并呈现泡状结构的最主要原因；疏中质组本身的微纳级泡状结构，使其成为炭化过程中生成的热解气体的聚集地，并由此推动泡孔不断长大，从而形成所需要的泡沫炭泡孔结构.

关键词：化学工艺，煤疏中质组，泡沫炭，炭化，制备

摘要：针对徐州华润彭城发电厂三期工程超超临界凝汽式机组(2×1 000 MW 级机组)，研究混煤与各单一煤在燃烧特性上的关系，设计煤采用晋中烟煤，校核煤采用徐州混煤，任选4种不同煤质的单煤，并按照不同质量分数两两混合，通过热重实验分析比较各煤种的燃煤特性，以及难燃煤质量分数的改变对混煤特性的影响.分别采用加权平均法、线性规划法和模糊综合评判法等数学方法优化配煤，得到彭城发电厂最优混煤配比，与该电厂实际运行配煤结果进行比较，验证模型的可靠性和适用范围.结果表明，采用线性规划法获得的配比可为电厂节省百万元配煤成本.

关键词：燃烧特性，混合配煤，线性规划法，热重分析