DQ2V原煤数据处理

CMNR



DQ2V原煤的结构参数

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **SP2杂化碳(芳香碳)** | | | | | | | | **SP2杂化碳(脂肪碳)** | | | |  |
| fa | fa’ | faC | faH | faN | faP | faS | faB | fa1 | faH | fa\* | faO | XBP |
| 总碳 | 芳环碳 | 羧基碳 | 质子化芳碳 | 非质子化芳碳 | 酚羟基或醚氧连碳 | 烷基取代碳 | 芳香桥碳 | 总碳 | 亚甲基或次甲基碳 | 甲基碳或季碳 | 氧连碳 | 桥碳与周碳之比 |
| 100，220 | 100，165 | 165，--- | 100，129 | 129，165 | 150，165 | 135，150 | 129，137 | --，90 | --，36 | 36，50 | 50，90 |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| fa | fa’ | faC | faH | faN | faP | faS | faB | fa1 | faH | fa\* | faO | XBP |
| 0.74 | 0.64 | 0.10 | 0.39 | 0.25 | 0.02 | 0.12 | 0.10 | 0.26 | 0.21 | 0.06 | 0.05 | 0.28 |

= 0.28

0.25<0.28<0.4

桥碳比平均值为 **0.28**的实验煤样的芳香碳结构以萘、蒽(菲)为主，芳香层片多为小于 3×3 的结构。

XPS

1. XPS对S元素的解析



DQ2V原煤硫原子的存在形式及其含量

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| E/ev | Sulfur from | Content Wmol / % |
| 162.63 | Pyrite | 14.63 |
| 163.62 | Alkyl sulphides | 52.38 |
| 164.71 | Thiophenes | 18.35 |
| 165.24 | Sulphoxides | 14.64 |

1. XPS对N元素的解析



DQ2V原煤氮原子的存在形式及其含量

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| E/eV | Sulfur from | Content Wmol / % |
| 398.54 | Pyridinic nitrogen N-6 | 41.90 |
| 399.96 | Pyrrolic nitrogen N-5 | 35.57 |
| 401.05 | Quaternary nitrogen N-Q | 14.96 |
| 402.49 | Oxidized nitrogen N-X | 7.581 |

1. XPS对O元素的解析



DQ2V原煤氧原子的存在形式及其含量

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| E/eV | Sulfur from | Content Wmol / % |
| 531.48 | Carbonyl C=O | 13.58 |
| 533.19 | Carbon-oxygen C-O | 48.26 |
| 534.43 | carboxyl COO- | 38.16 |

FTIR

700-900



1000-1800



2800-3000



甲基、亚甲基、次甲基的比值约为3:2:4

3000-3600



煤的芳碳率：







式中，fa为红外芳碳率；*Cal*/*C*是脂肪碳占总碳的相对含量；H/C为氢碳原子数之比，利用元素分析结果计算得到；Hal/H代表脂肪氢含量与总氢含量的比值；Hal/Cal代表脂肪簇团中的氢碳原子数目比，取经验值1.8



= 3.58/(3.58+2.53) = 0.57



= (0.57 + (4.66/90.31))/1.8

=0.35



=1-0.35

=0.65

XRD

5-35



35-50



芳香层片的结构参数d002 ，Lc ，La ，Nave

芳香环层片的层间距：

堆砌簇中芳香环层片的平均直径：

芳香环层片沿芳核垂直方向的有效堆砌高度：

芳香环层片的有效堆砌层数：

式中：

——X射线的波长，（nm）。本实验用铜靶， = 1.54056

， ——002峰和100峰峰位对应的衍射角（）

， ——002带和100带的半峰宽值（rad）

K1，K2 —— 微晶形状因子，K1 = 0.94，K2 = 1.84

2为10-35区间解析计算结果

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 区间/2 | 2 |  | 弧度 | 2\*sin | d002/ | FWHM(du) | 半峰宽 | Lc/ | Nave |
| 10-35 | 24.96 | 12.48 | 0.22 | 0.43 | 3.55 | 4.27 | 0.07 | 21.32 | 6.01 |

2为35-50区间解析计算结果

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 区间/2 | 2 |  | 弧度 | FWHM(du) | La/ |
| 35-50 | 43.42 | 21.71 | 0.38 | 9.00 | 19.62 |