

在200℃前是吸附水和吸附气体的脱除，基本没有失重。

从331℃开始失重，此时是煤活泼的热解阶段，煤样失重明显，在482℃达到最大失重速率为0.16%/℃，此时煤大分子结构解聚和分解，有大量的挥发气体和焦油产生，进而形成胶质体，当温度超过胶质体的固化温度时，胶质体发生粘结，形成半焦。在331℃～482℃，失重率为7.24 %，而在482℃～562℃，失重率为7.15%，说明在最大失重率前时间段，焦油产率增加，482℃焦油量最大，后段焦油量析出减少，生成大量煤气。562 ℃时开始形成焦炭，发生缩聚反应。随着温度的继续增加，DTG曲线又变得较为平缓，煤样的失重速率减小，挥发份析出基本完毕，主要是半焦缩聚成焦炭及热解产物的二次反应，放出以甲烷、氢气为主的气体。

从室温至1200 ℃的失重过程，总共质量损失23.21％，从331℃~562℃的失重过程，质量损失14.39％，失重量占总失重量的62%。在整个热解过程中质量损失不大，说明其惰质组分很高。



水 (H2 O) (M /Z=18)：

水存在的方式有内水、外水和结晶水、热解水。而煤中含氧官能团的键断裂生成热解水的情况最能表现煤的结构与反应性。

在92℃脱除外水后，H2O的逸出是逐渐减小的，130℃开始脱除内水，到200℃完全析出。H2O在200℃之前以水蒸汽的形式逸出，在200℃之后逸出的水大部分为热解水，所以在速率曲线上，130℃出现凹形，水的生成出现一个缓冲过程。515℃出现水生成速率最大峰，说明此时 H2O 的聚合反应速率达到最大。析出的热解水在515℃和743℃ 存在两个高峰，其中最大峰析出温度与甲烷的接近( 524℃ 左右) ，表明甲烷的形成伴随着大量水的生成。

水的分布范围很宽，由含氧官能团与煤结构键的强度决定的，相对较弱键在较低温度断裂生成水，较强键则需要更高的温度才能断裂。煤中含氧官能团的热稳定性顺序为：羟基大于羰基大于羧基。根据速率峰的峰宽对应的温度范围判断含氧官能团主要以羟基为主。



氢 (H2 ) (M /Z=2)：

热解氢气的生成由以下5种基元反应组成

1. 较低温度下氢化芳香结构的脱氢
2. 反应C＋H2O→CO2＋H2＋△H，CO＋H2O→CO2＋H2＋△H，生成氢气
3. 链烷烃环化
4. 环烷烃芳构化
5. 芳烃的缩合。

H2 的逸出可以分为四个阶段。第一阶段在200℃~430℃之间为缓慢生成阶段，有可能为游离态或吸附态的H2，也有可能为CO和水反应产生H2；第二阶段在430℃~516℃之间为煤活泼分解阶段，气体析出量最多，以解聚和分解反应为主，较低温度下氢化芳香结构的脱氢；第三阶段在516℃~750℃之间为煤的二次脱气阶段，H2 大量生成，到达750℃时H2离子流强度是整个热解过程中最大，H2 生成量达到顶峰，产生大量氢气的主要原因是高温时芳香结构和氢化芳香结构的缩聚脱氢反应，其中二次裂解反应中的化合反应产生氢气较多；第四阶段在750℃以后，此时为煤热解后期，半焦开始形成焦炭，脱氢气的速度开始减缓，H2离子流强度开始减小，H2 的生成量迅速减少，整个形成焦炭的脱氢过程逐渐完成。





二氧化碳 (CO2 ) (M /Z =44)：

在曲线上有2个明显的强度峰，分别为491 ℃和647 ℃。 200℃~444℃由煤中羧基分解引起，CO2缓慢生成。随着温度的升高，在444~568℃ 之间，含氧羰基官能团开始断裂，除了一部分以CO的形式逸出外，还有一部分与煤中的氧原子结合为CO2，表现在491℃出现CO2强度峰。而647℃的强度峰是由煤中稳定的含氧杂环的断裂分解生成CO，再与氧原子结合为CO2。由于浮选不能去除嵌布在煤分子结构中的碳酸盐，在 878℃以后，由碳酸盐矿物质分解生成CO2。



甲烷 (CH4 ) (M /Z=16)：

煤热解中甲烷是由四类反应所导致。

反应①是由于甲氧基、醇类官能团、杂原子连接的甲基类脂肪侧链中甲基的脱落而形成甲烷。反应②中生成的甲基自由基是由长链脂肪烃类的二次裂解及短脂肪链的断裂所生成的。

反应③是由芳香核和环烷结构相连的甲基基团在高温阶段，C-C键的断裂而生成的。

反应④与煤中芳香结构缩合聚合作用有关，是由脂环结构中释放的碳而生成的。

据逸出曲线来看CH4析出过程，在400℃开始有甲烷生成，速率逐渐增加，到526℃强度最大，然后一直减小。最大CH4生成量的温度526℃大于最大失重温度482℃。而在526℃左右为煤裂解，粘结为半焦的阶段，气体析出量最多，分析原因可能是桥键断裂生成自由基，这些桥键受热易裂解，超过分解温度后突然增加，在526℃时达到最大值，然后急剧下降，生成的大量氢气与活性半焦发生加氢反应，生成CH4。



烃类气体的逸出曲线都呈单峰分布，而且逸出曲线随温度变化趋势基本一致。除了峰的强度不同，峰值都十分接近，都在483℃～526 ℃，大部分气呈高斯分布，并存在明显的波峰，即在波峰两侧煤样的反应剧烈，伴随着大量煤分子结构裂解和缩聚，其中，除了C1烃类在热解过程中生成的温度范围在400~800℃之间，其他烃类在热解过程中生成的温度范围都在400~600℃，说明其余烃类均来自大分子结构侧链的裂解。部分烃类在200~400℃析出，有可能为煤样中的吸附态、游离态。

483℃：C4H9

488℃：C4H8、C4H7、C3H7、C3H5

489℃：C6H5、C3H6

491℃：C4H10、C2H3

492℃：C2H5

494℃：C3H3

496℃：C8H9、C7H7、C6H6

497℃：C2H6

500℃：C8H10

504℃：C7H8

515℃：CH2

521℃：CH3