东曲2号镜煤

FTIR

700-900



700~900cm-1波段分峰参数表

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 编号 | 峰位/cm-1 | 半峰宽 | 面积百分比/% | 峰位归属 |
| 1 | 721.75 | 12.18 | 0.80 | 灰分 |
| 2 | 750.69 | 29.49 | 23.45 | 一取代芳烃 |
| 3 | 788.22 | 36.72 | 12.70 | 二取代芳烃 |
| 4 | 810.68 | 30.05 | 18.75 | 三取代芳烃 |
| 5 | 836.55 | 34.32 | 13.74 | 三取代芳烃 |
| 6 | 868.47 | 29.86 | 22.07 | 四取代芳烃 |
| 7 | 887.47 | 27.39 | 8.09 | 五取代芳烃 |
| 8 | 915.90 | 10.61 | 0.41 | 五取代芳烃 |

2800-3000



2800~3000cm-1段红外吸收峰分峰参数表

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 编号 | 峰位/cm-1 | 半峰宽 | 面积百分比/% | 峰位归属 |
| 1 | 2837.53 | 34.72 | 7.39 | R2CH2 |
| 2 | 2854.62 | 26.21 | 11.08 | R2CH2 |
| 3 | 2873.34 | 34.85 | 12.48 | R2CH2 |
| 4 | 2899.85 | 33.56 | 18.17 | R3CH |
| 5 | 2923.88 | 29.14 | 32.46 | RCH3 |
| 6 | 2954.18 | 28.92 | 18.42 | RCH3 |

甲基、亚甲基、次甲基的比值约为4:3:2

红外芳碳率：







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

XPS

1. 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. 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. 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 |

XRD

2为10-35区间



2为35-50区间



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 |