

 现代化学专著系列·典藏版 26

煤的结构与反应性

谢克昌 著



科学出版社

现代化学专著系列·典藏版 26

煤的结构与反应性

谢克昌 著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书是煤科学领域内关于煤结构与反应性的学术专著,集中了作者十几年来在该方向上的创新性科学研究成果。内容包括煤的结构及其研究方法,煤在热解、气化、解聚液化、燃烧、溶胀、等离子体条件下的反应性和测试方法,以及煤的结构与反应性的内在关系。本书以大量的实验事实和深入的理论分析较全面地回答了实现煤的优化转化需要解决的三个基础性关键问题:不同煤种的反应性有何共性?煤的结构在煤的热转化过程中如何变化?究竟什么是煤的结构?

本书可供煤科学与技术领域和相关专业的科技工作者、大学教师和研究生学习参考。

图书在版编目(CIP)数据

现代化学专著系列:典藏版/江明,李静海,沈家骢,等编著. —北京:科学出版社, 2017.1

ISBN 978-7-03-051504-9

I. ①现… II. ①江… ②李… ③沈… III. ①化学 IV. ①O6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 013428 号

责任编辑:刘俊来 孙克玮 / 责任校对:宋玲玲

责任印制:张 伟 / 封面设计:铭轩堂

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京教图印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2017 年 1 月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2017 年 1 月第一次印刷 印张:37 3/4

字数:740 000

定价:7980.00 元(全 45 册)

(如有印装质量问题,我社负责调换)



Preface to “Coal Structure and Its Reactivity”

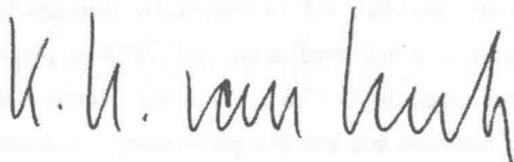
No doubt, the reader will be aware of the fact, that coal has been the dominant source of energy, for coke and for chemicals, throughout the world for long periods in the past two centuries of industrialisation and still is at present and will be in the future in many countries, especially in China. Thus the readiness of the best technology for its conversion and use has been and still is a prominent, yes an outstanding, factor for the development of the international economy and consequently the subject of strategic considerations and measures. Technology of coal utilisation has been always in a dynamic interaction with coal science; new scientific results paving the way for technological progress, practical problems asking for scientific treatment.

Even if nowadays coal is world-wide preferably used for electricity production and coke making only, we can be pretty sure, that knowledge gained in the fields of liquefaction, gasification and pyrolysis, will become necessary for practical processes, possibly soon, as inexpensive oil and gas will not last forever and will not be equally accessible for every country. The predictions of the Club of Rome since 1972 are valid generally, even if the chronological order has had to be shifted somewhat into the future. Thus, as a global view, new and especially improved processes remain to be a steady task for coming generations of coal scientists and engineers. In China, however, being the country with the world's largest and further expanding coal industry and utilising coal as by far the main source of energy and raw material this challenge faces its coal community today already.

The book on “Coal Structure and Its Reactivity” written by my colleague Dr. Ke-Chang Xie meets the needs to strengthen the basis on which the further development of improved, efficient and clean coal-based processes can rely. Extensively it summarises and evaluates the creative results in various areas of research devoted to coal structure. I consider the headline “Structure and Reactivity” to be an excellent goal-directed guideline of research as this aspect is one key issue for the transfer of scientific result into practice, reactivity being among the main parameters controlling kinetics and therefore important for reactor design with respect to conversion, including the control of formation and prevention of hazardous species. Besides the useful results, the book demonstrates, how coal offers a fascinating subject for re-

search to a large number of scientific disciplines and how consistently new methods are being applied for in-depth studies on its micro composition and structure and its basic reactions.

I congratulate Dr. Ke-Chang Xie on having fulfilled this enormous and important work so successfully and I am convinced that this book will meet with a lively response both for educational, research, and industrial purposes.



Dr. Karl Heinrich van Heek

Former Director of the DMT Institute of Coke Making and Fuel Technology, Essen Germany

Professor of Chemical Engineering (em.), University of Essen, Germany

29. September 2002

(参考译文)

毫无疑问,大家都知道这样一个事实,煤是主要的能源,也是焦和许多化学制品的主要来源。全世界在过去的两个工业化世纪是这样,现在是这样,未来的许多个世纪,特别是在中国,仍然会是这样。最好的煤转化和利用技术的储备对国际经济发展仍然是非常突出和重要的因素,因而它成为具有战略性的课题。煤利用技术总是与煤科学处于动态的互交作用之中——新的科学研究结果为技术进步铺平道路,而实践中的问题在科学研究中寻求解决的方法。

即使是现阶段,用于发电,煤依然是全世界范围内最合适的;用于焦炭制造则是惟一选择。我们可以肯定地说,不久以后,从煤的液化、气化和热解等领域所取得的相关知识,将是实际工艺所必需的。因为廉价的石油和天然气不能为每一个国家的平等获取,它本身也不会永续不竭。罗马俱乐部的预言自从 1972 年以来就基本上是正确的,即使其所预言的年代顺序不得不稍微向未来推移。作为一个全球性的观点,全新的和专门改进的工艺的研究,仍然是未来一代的煤科学家和工程师们肩负的重任。中国具有世界上最大并且还进一步发展的煤炭工业,同时以煤作为最主要能源和原料矿物,中国的煤炭科学和技术界同样面临着这一挑战。

我的同行谢克昌博士所作的这部关于“煤结构与反应性”的著作,适应了关于加强关于高效和清洁煤加工工艺所依托的基础研究的需求。该著作深入到煤结构的层

次,广泛地总结和评价了其所涉及研究领域创新性的研究成果。我认为“结构和反应性”这一主题,是一个极好的具有方向性的研究路线,它是科学研究结果向实际转化之关键所在。此外,这本书还展示了煤的研究如何给众多的学科提供了令人着迷的课题,展示了新的研究方法如何应用于深入研究煤的微观组成、结构以及基本反应研究之中。

祝贺谢克昌博士如此成功地完成了这一巨大而重要的工作,我深信这本著作将在教育、研究和工业领域受到热烈的反响。

(签名)

K. H. van Heek 博士

德国埃森制焦和燃料技术 DMT 研究所前所长

德国埃森大学化学工程教授

2002 年 9 月 29 日

前 言

煤炭是主要的矿物能源和化工原料,如果开采特别是利用技术落后,同时也将是严重的环境污染源。在中国,煤的利用和污染问题尤其突出。因此,控制或减轻煤利用过程中对环境造成的不利影响是我国可持续发展的重大需求,煤的高效、洁净转化是实现这一需求的最主要途径。但是,由于煤在化学和物理上都是非均相的,是主要含有 C、H、O,还有少量 S 和 N 的有机化合物及其他无机化合物的矿石,而且随产地的不同,煤的类型(主要指煤中显微组分的结构和含量)和煤阶(煤的变质过程完成的程度)均有较大差异。因此,与石油和天然气相比,煤的高效、洁净转化难度很大。1990 年 9 月国际能源组织(IEA)和 *Fuel* 期刊联合在英国召开了第一届国际煤结构和反应性学术会议。来自世界 20 多个国家的 300 余名煤科学研究者几乎一致认为,要最终实现对环境友好的煤的优化转化,研究和解决以下问题是关键性的。这些问题是:

- What are the similarities in reactivity of coals from differing parts of the globe?
- How is coal's structure affected by the processes it undergoes?

And indeed,

- What is the structure of coal?

作者在题为“Pyrolysis Characteristics of Macerals Separated from a Single Coal and Their Artificial Mixture”的大会报告中就第一个问题用实验发现和结果分析做了初步回答:不同煤种在反应性方面存在有共性,因为它们都由共同的有机显微组分组成;而不同煤种的反应性差异除已公认的煤阶影响外,有机显微组分的含量和它们之间的相互作用也是主要原因。作者还给出了考虑这种相互作用的热解转化率和热解活化能的计算式。论文发表后(*Fuel*, 1991, Vol. 70)引起国际煤科学界的关注,时任美国化学会燃料化学分会主席 Delaware 大学的 W. H. Calkins 教授 1994 年 9 月评价此文:“这是至今我在文献中看到的最优秀的研究工作”。英国 Strathclyde 大学 M. M. Marotovaler 等多次引用有关结果。

但是,这种共性在煤的不同热转化过程中如何表现?这些过程又是怎样影响煤的结构,而后者究竟是什么,是否可用来揭示煤的共性?这些问题的回答还需进行全面、系统、深入的研究。纵观以往的相关研究,全煤往往是研究的主体,研究也主要集中在煤的不同地理及形成年代对煤的性质的影响。20 世纪 70 年代末期,美国学者 M. A. Elliott 曾指出:“似乎讨论全煤的化学结构没有什么价值,应该研

究煤中显微组分的反应性与结构。但是分离纯的显微组分太困难,而一般不作尝试”。这一切中要害却又因难度大而“不作尝试”的论断严重影响了煤的结构与反应性的研究。人们虽然已逐渐认识到不同产地、不同煤阶的煤有基本相同的有机显微组分(主要是镜质组、惰质组和壳质组)组成,这三种显微组分的结构特性有所不同,其组成量的变化使全煤表现出不同的结构特征与反应性能,作者也通过正交设计将不同量的三种显微组分混合成模型煤进行热解的研究首次给出了直接的实验证据。但是,只有深入到对煤中显微组分的探索,才有可能掌握反映不同煤种共性的结构特征,进而发现这种结构特征与煤热反应性的客观规律。遗憾的是,20世纪90年代前的文献中,几乎看不到这种深入探索的报道。而即使所看到的对全煤结构的研究,也大都依靠元素分析数据与有限的化学反应,如乙酰化、烷基化和红外光谱等分析数据去推断结构组成,鲜有直接测得的结构参数;至于对反应性的研究则局限于在传统的反应器中测试,难以了解煤的复杂的、瞬间变化的热反应行为。研究方法上的落后使本来就作用有限的全煤结构与反应性的实验结果和认识变得更加扑朔迷离。难怪煤科学界不仅在1990年首次以煤的结构与反应性为主题召开专门会议而且提出前述的三个关键的科学问题。

作为产煤、用煤都是世界第一大国的煤科学与技术工作者,采用新的、直接、快速、准确的测试手段和方法,从微观层次和化学、物理学、岩相学、矿物学多角度回答上述三个问题并最终揭示定量的、更客观的煤结构与反应性的关系是一种义不容辞的科学责任,其结果也将是对发展建立在传统学术思想上煤化学工程技术学科的一种科学贡献。

在上述学术思想的指导下,作者形成了以下研究思路和实施方案:

- 在突破分离,特别是从同一煤种中分离富集纯的显微组分难关的基础上,采用NMR、HRTEM、XRD、XPS、FTIR等多种测试技术,通过化学和物理结构分析测定建立煤在显微组分、大分子网络和小分子相三个微观层次上的结构模型,阐明反映不同煤种共性的化学和物理本质。

- 在可以模拟本征条件、工业条件等多种实验条件下,创立新的实验方法,采用PFTIR、GC/MS、PGC、DTA、TG、TPD等多种实验技术,快速、准确获取不同煤种、不同显微组分在不同热转化过程中的反应性数据,建立煤的结构和反应性关系的预测理论,特别是从微观角度阐明煤的热解、气化动力规律。

- 在上述结构和反应性研究的同时,探明硫、氮杂原子在煤中的赋存形态以及它们在煤的热转化过程中的变化及终态分布,为硫的定向脱除和氮污染物的控制提供理论基础。

本书就是对上述研究方案和研究目标历时10余年的实施结果。全书共分10章。第一、二章的主要内容是基于前人的研究成果和学术共识为理解作者研究结果的理论基础铺垫,其中第二章还介绍了作者用分形几何方法对煤表面结构的描

述过程和结果。第三章是在介绍煤结构研究方法的基础上,作者对不同变质程度煤种的化学结构和对典型煤种在三个微观层次上的结构研究结果。第四章至第九章是作者对不同煤种、不同显微组分分别在热解、气化、解聚液化、燃烧、溶胀和等离子体过程中结构变化和反应性的研究结果。在每一章都用少量文字介绍了研究方法,而对作者自行创立的方法则结合研究结果进行了较为详尽的描述,如快速热解反应器-红外光谱联用技术;多气氛高温高压差热法气化动力学分析及数据处理理论;煤的等离子体反应技术等。第十章给出了作者通过不同的研究方法得到的煤结构与热解、气化反应性的预测模型和定量关系。为便于读者阅读和使用此书,本书还附有较为详尽的英文目录。

必须指出的是,虽然本书的蓝本是作者在日本信州大学获得工学博士学位论文 *Coal Structures and Its Reactivities*,但本书的问世绝非作者一人之功,而是作者和作者在这一研究方向培养的博士、硕士们瞄准既定的研究目标,按照科学的研究方案,坚持不懈、分工合作、共同奋斗的结果。他们是:李文英博士(1995年毕业)、冯杰博士(1998年毕业)、陈宏刚博士(1999年毕业)、张永发博士(1999年毕业)、赵炜博士(1999年毕业)、田亚峻博士(2001年毕业)、李春柱硕士(1988年毕业,后获英国帝国理工学院博士学位)、王永刚硕士(1988年毕业,后获日本九州大学博士学位)、吴帆硕士(1989年毕业)、李凡硕士(1993年毕业)、胡大为硕士(1999年毕业)、刘劲松硕士(1999年毕业)、赵融芳硕士(2001年毕业)。此外,在读博士生王宝俊、常丽萍、吕永康、张玉贵及在读硕士生鲍卫仁等也参与了部分工作,其中王宝俊副教授对本书的告成做出了特别贡献。因此,本书的作者更准确地说应该是一个群体,是一个以煤科学与技术为研究方向不动摇的、坚持创新研究的群体。

创新性的科学研究需要有动力和支持。不动摇的信念是动力之源,来自于国家的经费则是实际支持。作者1985年底从美国学成回国,刚刚在这个研究方向上起步就获得了国家科技攻关、国家和山西省自然科学基金等的资助,十几年来先后获得与本书内容相关的13项资助。它们是:

“差热法煤气化微观动力学”(国家重点科技攻关课题 75-10-05-03)

“流化床煤气化炉内石灰石脱硫特性研究”(国家重点科技攻关课题 85-207-02-01)

“煤热解过程的化学基础”(国家重点基础研究发展规划项目课题 G1999022101)

“高灰煤的气化动力学和灰分的影响”(国家自然科学基金面上项目 2870181)

“煤中有机显微组分的气化特性和规律”(国家自然科学基金面上项目 28970297)

“煤岩显微组分的大分子结构及其与反应性的关系”(国家自然科学基金项目 29476247)

“等离子体裂解煤制有机物的物理化学基础研究”(国家自然科学基金面上重点项目 19935010)

“多气氛高压高温差热分析仪研制”(山西省科技攻关项目)

“等离子体裂解粉煤制乙炔反应器研制”(山西省自然科学基金重点项目)

“煤的催化气化和催化剂的研究”(山西省教育厅项目)

“高灰煤的气化动力学和灰分的影响”(山西省自然科学基金项目)

“氧化钙在煤气化中固硫与催化双功能作用的机理和规律”(山西省自然科学基金项目)

“中澳煤气化中氮化物及其前驱物的形成和抑制”(中澳政府机构合作和山西省归国留学基金项目)

正是上述强有力的支持才使作者的研究思路、方案和目标得以实现,而最终使研究成果以学术著作形式面世的资助则来源于华夏英才基金。在本书付梓之际,作者对上述资助单位以及对本人多年来的科学研究提供各种支持的国内外的同仁、朋友、家人,特别是我的学生们表示诚挚的感谢。同时,作者对科学出版社刘俊来、孙克玮先生出色的编辑工作表示赞赏和感谢。

尤使作者深感荣幸的是世界著名煤科学家、德国埃森(Essen)大学教授 van Heek 博士在获知他一直认为对实践具有关键指导作用的煤结构与反应性研究的专著将首先在中国问世时,欣然为本书作序。曾任 DMT 炼焦和燃料技术研究所所长和 *Fuel* 主编的 van Heek 博士成功地将创新性的科学研究成果用于改进和开发洁净煤技术取得了令人瞩目的成就。如今,他将体会与预言通过为本书撰写的序文昭示于世界煤科学工作者,这对他的同行无疑都是一件幸事。鉴此,作者的一声感谢难尽全意。

借用一位校友的赠诗作为前言的结语,“转过青山又一山,幽兰藏躲路回环。众香国里谁能到,容我书呆在其间”。作者虽然在认准的科研方向上获得一些重要发现、取得一些重要成果并将其集中发表以便求取同行指正,但深知科学研究的道路是坎坷的,更何况所选择的方向颇为复杂和艰难。“靡不有初,鲜克有终”,终在意志,终在持之以恒。作者深信:“不是因为有些事情难以做到,我们才失去自信,而是因为我们失去了自信,有些事情才显得难以做到。”



2002 年 10 月 5 日于清泽园

目 录

第一章 煤的基本特征	(1)
第一节 煤的矿物学和岩相学基本特征	(1)
一、煤的种类	(1)
二、成煤物质和成煤过程	(6)
三、煤的显微组分	(14)
四、煤的类型和煤化程度的关系	(21)
第二节 煤的基本物理特征	(22)
一、煤的力学性质	(22)
二、煤的热性质	(27)
三、煤的光学性质	(32)
四、煤的电性质与磁性质	(35)
五、煤的表面性质	(39)
第三节 煤的基本化学特征	(43)
一、煤中的水分	(43)
二、煤中的矿物质和煤的灰分	(46)
三、煤中的挥发分和固定碳	(49)
四、煤的元素组成及形态	(50)
五、煤分析指标的不同基准表示	(54)
六、煤的化学反应	(57)
第二章 煤的结构	(68)
第一节 煤的微观结构	(68)
一、煤中的官能团	(68)
二、煤的化学结构模型	(71)
三、煤的物理结构模型	(76)
四、煤的相对分子质量	(78)
五、煤的族组成特性	(83)
六、煤微观结构的基本概念	(85)
第二节 煤中的低分子化合物	(92)
一、低分子化合物的来源与分离	(92)
二、低分子化合物的含量	(93)

三、低分子化合物的组成	(94)
第三节 煤岩显微组分	(94)
一、煤岩显微组分的制取	(94)
二、煤岩显微组分的化学组成	(96)
三、煤岩显微组分的反射率	(99)
第四节 煤和煤焦的表面结构	(100)
一、煤的表面结构性质	(100)
二、煤焦的表面结构性质	(103)
三、分形几何对表面结构描述	(107)
第三章 煤结构的研究方法和研究结果	(115)
第一节 物理方法	(115)
一、红外光谱	(115)
二、核磁共振波谱	(130)
三、X 射线衍射法	(137)
四、表面测试技术	(141)
第二节 化学方法	(151)
一、煤中主要元素的化学分析	(151)
二、煤中官能团的化学分析	(154)
三、溶剂抽提	(156)
第三节 统计结构解析法	(167)
第四节 计算化学方法	(173)
一、分子力学在煤分子模型研究中的应用	(173)
二、量子化学在煤结构研究中的应用	(181)
第五节 平朔烟煤结构的研究	(186)
一、平朔烟煤显微组分和大分子网络的结构	(186)
二、平朔烟煤小分子相的结构	(197)
第四章 煤的热解反应	(210)
第一节 煤的一般热解过程	(210)
一、煤热解过程的基本描述	(210)
二、煤在热解过程中的化学反应	(215)
三、煤热解动力学	(218)
第二节 煤的热解-色谱研究	(222)
一、煤的热解反应	(223)
二、煤抽提物的热解反应	(229)
第三节 热解反应器-红外光谱联用对煤热解的研究	(230)

一、红外光谱-热解反应技术的实验方法	(231)
二、不同官能团热解活性的比较	(232)
三、煤种对官能团活性的影响	(233)
第四节 用热重法研究煤的热解	(252)
一、煤的热解反应性	(252)
二、煤岩显微组分的结构与热解反应性	(257)
三、煤岩显微组分混合物的热解特性	(260)
第五节 煤化过程的热解模拟研究	(263)
一、热解模拟煤化过程的基本概念	(263)
二、改进的封闭系统的热解模拟研究	(268)
第五章 煤的气化反应	(289)
第一节 煤气化反应的一般过程	(289)
一、影响煤气化的主要因素	(290)
二、煤的 CO_2 气化反应性	(294)
三、气化反应的机理研究	(297)
第二节 热重法对煤气化反应的研究	(301)
一、煤的非催化气化	(302)
二、煤催化气化的影响因素	(310)
第三节 差热分析法对煤和显微组分气化反应的研究	(317)
一、煤和煤焦的加压气化动力学	(317)
二、显微组分的气化反应性和加压气化动力学	(324)
第四节 程序升温脱附法对煤的气化反应的研究	(333)
一、实验过程和数据处理方法	(334)
二、煤焦的程序升温脱附	(337)
第五节 气化反应中的补偿效应	(343)
一、煤焦气化动力学参数间的补偿效应	(343)
二、补偿效应的理论分析	(345)
第六节 金属化合物的催化作用	(350)
一、金属化合物催化作用的测量和表征	(350)
二、金属化合物的催化作用的理论分析	(355)
第六章 煤的解聚液化反应	(360)
第一节 煤的解聚液化反应的一般认识	(360)
一、煤的解聚液化方法	(360)
二、煤的低温解聚液化反应	(361)
第二节 神府煤的解聚液化反应研究	(367)
一、实验过程	(367)

二、神府煤在不同解聚条件下解聚液化反应萃取馏分的 FTIR 分析	(370)
三、神府煤在不同解聚条件下解聚液化反应萃取馏分的 GC-MS 分析	(378)
四、神府煤在醇-碱体系中的解聚液化反应性	(382)
第七章 煤的燃烧反应	(390)
第一节 煤的燃烧反应和表面形态变化	(390)
一、煤燃烧过程的基本描述	(390)
二、燃烧反应中的孔模型	(396)
三、四种煤样在燃烧过程中表面形态变化的研究	(399)
第二节 煤燃烧反应的动力学研究	(408)
一、程序升温热重法对煤燃烧反应动力学研究	(408)
二、固定床条件下煤的燃烧反应动力学	(412)
三、等温热重法对煤燃烧反应动力学研究	(416)
四、煤燃烧的分形动力学	(417)
第八章 煤的溶胀过程	(424)
第一节 煤溶胀过程的基本概念	(424)
一、溶胀的概念	(424)
二、煤的物理结构模型与溶胀过程	(428)
三、煤溶胀度的影响因素	(429)
四、溶胀在煤热解中的作用	(434)
五、溶胀在煤液化中的作用	(436)
第二节 8 种煤样的溶胀过程研究	(437)
一、溶胀度	(437)
二、溶胀机理	(440)
三、溶胀煤性质的变化	(449)
第九章 煤在等离子体中的反应	(456)
第一节 煤在等离子体中的热解	(456)
一、煤在电弧等离子体中的热解	(457)
二、煤与等离子体中活性物种的作用	(459)
三、等离子体热解煤制乙炔的研究工作	(461)
四、等离子体技术在煤化工中的其他应用	(464)
第二节 碳-氢-氩-氧多相体系化学反应的热力学平衡	(467)
一、乙炔的自由能	(467)
二、复杂体系化学反应平衡的计算方法	(468)
三、热力学平衡的数学描述	(469)
四、热力学数据	(471)
五、热力学计算结果	(472)

第三节 等离子体裂解煤制乙炔的实验	(479)
一、实验装置	(480)
二、实验步骤	(486)
三、实验中的检测和计量	(488)
第四节 煤在电弧等离子体中的热解	(492)
一、生成乙炔的影响因素	(493)
二、热解反应残渣的性质	(500)
三、煤在等离子体中的反应动力学和反应机理分析	(504)
第五节 煤在等离子体中脱挥发分过程的模拟	(507)
一、脱挥发分模型	(507)
二、CPD 模型的原理	(508)
三、脱挥发分过程中的网格统计	(510)
四、CPD 模型的应用	(517)
第六节 煤在电弧等离子体中结焦机理的初步探索	(523)
一、结焦的影响因素	(524)
二、结焦物的性质	(528)
三、结焦规律初步探索	(531)
第十章 煤的结构与反应性的关系	(537)
第一节 煤的反应性	(537)
一、煤反应性的概念	(537)
二、影响煤反应性的因素	(538)
三、煤的反应性的测定	(538)
第二节 煤的结构与反应性关系的研究方法	(541)
一、热解方法在煤结构与反应性关系研究中的应用	(541)
二、溶剂抽提在煤结构与反应性研究中的应用	(544)
三、模型化合物在煤结构与反应性研究中的作用	(545)
第三节 热解和加氢反应性模型	(546)
一、影响煤反应性的参数选择	(546)
二、参数独立性分析	(547)
三、煤结构与反应性模型的建立	(548)
四、加氢反应性与热解反应性的关系	(550)
第四节 气化反应性与煤结构的关系	(552)
一、气化反应性的影响因素	(552)
二、气化反应性与煤焦的微晶结构关系	(557)
三、气化反应性与煤焦表面性质的关系	(560)
附录 Contents of Coal Structure and Its Reactivity	(573)

第一章 煤的基本特征

煤是植物残骸在适宜的地质环境中,逐渐堆积而达到一定厚度,并被水或泥沙覆盖,经过了漫长的地质年代,经历了物理、化学和生物的复杂作用,而逐渐形成的有机生物岩石。生成煤的原始物质复杂多样,生成煤的外部条件和生成煤的历史年代各有不同,造成了煤在具有一些共性的同时,与一般的矿物相比,在矿物学和岩相学、基本物理和化学特征等方面更具种类的多样性和结构的复杂性。

第一节 煤的矿物学和岩相学基本特征

一、煤的种类

(一) 煤的一般分类

从一般意义上说,煤根据成煤植物种类的不同分为两大类:主要由高等植物形成的煤称为腐植煤,主要由低等植物形成的煤称为腐泥煤。绝大多数腐植煤都是由植物中的木质素和纤维素等主要组分形成的,它在自然界分布最广,储量最大。腐泥煤包括藻煤和胶泥煤等。藻煤主要由藻类生成,胶泥煤是无结构的腐泥煤,植物成分分解彻底,几乎完全由基质组成。此外,还有腐植煤和腐泥煤的混合体,有时单独分类,称为腐植腐泥煤。考虑到腐植煤的储量份额和习惯上的原因,通常所讲的煤,就是指主要由木质素、纤维素等形成的腐植煤。腐植煤是近代煤炭综合利用的主要物质基础,也是煤科学的重点研究对象。腐植煤与腐泥煤主要特征的比较如表 1-1 所示。

表 1-1 腐植煤与腐泥煤的主要特征

特 征	腐 植 煤	腐 泥 煤
颜色	褐色和黑色,多数为黑色	多数为褐色
光泽	光亮者居多	暗
用火柴点火	不燃烧	燃烧,有沥青气味
氢含量/%	一般<6	一般>6
低温干馏焦产率/%	一般<20	一般>25

根据煤化度的不同,腐植煤可分为泥炭、褐煤、烟煤和无烟煤四大类。各类煤具有不同的外表特征和特性,其典型的品种,一般根据视觉感官就能区分。

1. 泥炭

泥炭(peat)外观呈不均匀的深褐色,属于植物残骸与煤之间的过渡产物。泥炭是在沼泽中形成的,保留了大量未分解的根、茎、叶等植物组织,含水量很高,一般可达 85%~95%。开采出的泥炭经自然风干后,水分可降至 25%~35%。干泥炭为棕黑色或黑褐色土状碎块,真密度为 $1.29\sim 1.61\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。

泥炭的有机质主要包括腐植酸、沥青质、植物壳质组成以及未分解或尚未完全分解的植物族组成。腐植酸是泥炭最主要的有机成分,是一种由高分子羟基羧酸组成的复杂混合物,可溶于碱溶液,当调节溶液的 pH 值至酸性时,则有絮状沉淀析出;沥青质是指可用苯、甲醇等有机溶剂抽提出的那部分有机物;植物壳质组成是指与原始植物形态相比变化不大的成分,如角质、树脂等;未分解或尚未完全分解的植物族组成主要包括纤维素、半纤维素和木质素等。

2. 褐煤

大多数褐煤(lignite, brown coal)外表呈褐色或暗褐色,大都无光泽,因而得名。褐煤是泥炭沉积后,经历了脱水、压实等成煤作用的初期产物。褐煤含水较多,达 30%~60%。空气干燥后仍有 10%~30%的水分,易风化破裂,真密度 $1.10\sim 1.40\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。我国褐煤比较丰富,储量约 893 亿吨。

在外观上,褐煤与泥炭的最大区别在于褐煤不含未分解的植物组织残骸,且呈成层分布状态。与泥炭相比,褐煤中腐植酸的芳香核缩合程度有所增加,含氧官能团有所减少,侧链较短,侧链的数量也较少,腐植酸开始转变为中性腐殖质(表 1-2)。

表 1-2 泥炭与褐煤的区分

区分标志	泥 炭	褐 煤
原始水分/%	>60 或 70	<60 或 70
游离纤维素	存在	不存在
颜色、结构	黑色、褐色,疏松易切割	褐色,较难切割

3. 烟煤

烟煤(bituminous coal)是自然界最重要、分布最广、储量最大和品种最多的煤种。烟煤的煤化度低于无烟煤而高于褐煤,因燃烧时烟多而得名。因为烟煤中的腐植酸已全部转变为更复杂的中性腐殖质,因此,烟煤不能使酸、碱溶液染色。一