

全国煤炭高等教育专升本“十二五”规划教材

Quanguo Meitan Gaodeng Jiaoyu
Zhuanshengben Shierwu Guihua Jiaocai

煤炭 深加工与利用

主编 邵景景

副主编 田成民 吴 鹏 袁堂霞



中国矿业大学出版社

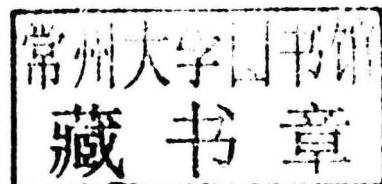
China University of Mining and Technology Press

全国煤炭高等教育专升本“十二五”规划教材

煤炭深加工与利用

主 编 邵景景

副主编 田成民 吴 鹏 袁堂霞



中国矿业大学出版社

内 容 提 要

全书根据成人高等教育专业人才培养目标和特点而编写。教材内容为十章，分别为煤的基础知识、煤的洗选加工、煤的炼焦生产、炼焦化学产品回收与利用、煤的气化、煤的液化、水煤浆、煤制碳素材料、煤制碳一化工产品及煤综合利用的环境保护等。通过本教材的学习，学生可以对煤炭加工与利用的基本内容有一个较为清晰和系统的认识。

本教材内容简明扼要，图文并茂，各章内容自成系统，可单独讲授。

煤炭深加工与利用

图书在版编目(CIP)数据

煤炭深加工与利用 / 邵景景主编. —徐州：中国矿业大学出版社，2014. 1

ISBN 978-7-5646-1951-0

I . ①煤… II . ①邵… III . ①煤炭—化学加工—教材
②煤炭利用—教材 IV . ①TQ536 ②TD849

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 165823 号

书 名 煤炭深加工与利用

主 编 邵景景

责任编辑 时应征 耿东锋

责任校对 周俊平

出版发行 中国矿业大学出版社有限责任公司
(江苏省徐州市解放南路 邮编 221008)

营销热线 (0516)83885307 83884995

出版服务 (0516)83885767 83884920

网 址 <http://www.cumtp.com> E-mail:cumtpvip@cumtp.com

印 刷 徐州中矿大印发科技有限公司

开 本 787×1092 1/16 印张 14.5 字数 361 千字

版次印次 2014 年 1 月第 1 版 2014 年 1 月第 1 次印刷

定 价 24.00 元

(图书出现印装质量问题，本社负责调换)

全国煤炭高等教育专升本“十二五”规划教材

建设委员会成员名单

主任:李增全

副主任:于广云 丁三青 王廷弼

委员:(按姓氏笔画排序)

王宪军 王继华 王德福 刘建中

刘福民 孙茂林 李维安 张吉春

陈学华 周智仁 赵文武 赵济荣

郝虎在 荆双喜 徐国财 廖新宇

秘书长:王廷弼

秘书:何 戈

全国煤炭高等教育专升本“十二五”规划教材

煤矿开采技术专业编审委员会成员名单

主任：张吉春

副主任：陈学华

委员：（按姓氏笔画排序）

王 猛 卢国斌 田成民 刘艳杰

李学忠 李德忠 杨艳国 张宝安

胡绍祥 胡海峰 南存全 贾喜荣

郭忠平

前 言

近年来,我国的煤炭加工工业发展十分迅速,尤其是煤化工产业不断发展壮大,煤炭加工利用技术进步速度加快,新设备、新工艺、新技术层出不穷。本教材力图反映煤炭加工与利用的前沿技术,并根据成人高等教育专业人才培养目标和特点而编写。

本教材主要介绍了煤炭深加工与利用技术方面的知识,系统讲述了煤的基础内容、洗选加工技术、炼焦生产工艺、炼焦化学产品的回收与利用、煤的气化、煤的液化、煤制浆技术、煤制碳素材料、煤制碳一化工产品及煤综合利用的环境保护等方面的知识。教材立足于成人教育的特点,考虑了成人学生的知识基础情况、岗位需求情况、学习时间特殊性、跨专业学习的实际,在编写过程中,适当降低了教材的难度,删繁就简,基本理论讲述以“必需、够用”为度,以实际应用与实践运用为主,着重培养学生的操作能力,具有实用性和基础性。

本书由邵景景任主编,田成民、吴鹏、袁堂霞任副主编。第一章、第八章、第九章由黑龙江科技大学邵景景编写;第二章、第三章、第七章由黑龙江煤炭职业技术学院袁堂霞编写;第四章、第五章由黑龙江科技大学吴鹏编写;第六章由黑龙江科技大学薛丽梅编写;第十章及附录由黑龙江科技大学继续教育学院田成民编写。全书由邵景景统稿。

在本书的编写过程中,得到了黑龙江科技大学资源与环境学院宋志伟教授的大力支持。同时本书参考了大量书籍和资料,在此向这些文献的作者表示感谢!

鉴于编者的水平有限,书中难免有疏漏,希望读者批评指正。

编 者

2013年2月

目 录

第一章 煤的基础知识	1
第一节 煤的生成	1
第二节 煤的结构	6
第三节 煤的性质	12
第四节 煤的种类	17
本章小结	18
思考题	19
 第二章 煤的洗选加工	20
第一节 煤的浮选技术	20
第二节 洁净煤技术	26
本章小结	34
思考题	34
 第三章 煤的炼焦生产	35
第一节 焦炭的性质与用途	35
第二节 炼焦炉	41
第三节 炼焦工艺与操作	49
本章小结	56
思考题	57
 第四章 炼焦化学产品回收与利用	58
第一节 概述	58
第二节 煤气的冷却、输送及焦油氨水的分离	59
第三节 煤气脱硫	65
第四节 煤气中氨的回收	73
第五节 粗苯回收与苯精制	80
第六节 焦油加工	93
本章小结	98
思考题	98

第五章 煤的气化	100
第一节 概述	100
第二节 煤气化机理	101
第三节 煤气化工艺	104
第四节 新型煤气化技术	134
本章小结	136
思考题	136
第六章 煤的液化	138
第一节 概述	138
第二节 煤的间接液化	139
第三节 煤的直接液化	148
第四节 间接液化和直接液化的对比	157
本章小结	159
思考题	159
第七章 水煤浆	160
第一节 水煤浆技术	160
第二节 水煤浆的应用	166
本章小结	173
思考题	173
第八章 煤制碳素材料	174
第一节 煤基碳素材料的种类与用途	174
第二节 煤基活性炭	175
本章小结	181
思考题	182
第九章 煤制碳一化工产品	183
第一节 甲醇生产	183
第二节 二甲醚生产	189
第三节 醋酸生产	197
第四节 甲醛生产	200
本章小结	205
思考题	206
第十章 煤综合利用的环境保护	207
第一节 煤炭加工中的废渣处理及利用	208
第二节 煤炭加工中的废水污染及治理	209

目 录

第三节 煤炭加工中的烟尘污染及治理.....	212
本章小结.....	214
思考题.....	215
 附录.....	216
附录一 吸收法烟气脱硫技术.....	216
附录二 吸附法净化气态污染物.....	219
 参考文献.....	221

第一章 煤的基础知识

【本章重点】煤的形成;煤的结构;煤的物理性质、化学性质和工艺性质。

【本章难点】煤的结构及工艺性质。

【学习目标】掌握煤的形成过程,煤的结构,煤的物理性质、化学性质及工艺性质。

第一节 煤的形成

煤炭作为主要能源,在国民经济中起着举足轻重的作用。煤炭的性质、质量决定其价格以及被利用的方式。在煤的形成过程中,成煤的原始物质和成煤过程至关重要。

一、成煤的原始物质

(一) 成煤物质的发现

虽然煤的开采、利用可以追溯到很早,但是在19世纪以前,对于成煤的原始物质,并没有正确的认识。有人认为煤和地壳中的其他岩石一样,自地球形成时就存在了;有人认为煤是由岩石转变而成的。随着煤炭的大规模开采,人们在煤层的顶、底板岩层中发现了大量的树根、树叶、树干等植物化石,于是猜测煤可能是由植物形成的,但缺乏直接的证据。直到19世纪以后,发明了显微镜,人们利用显微镜在煤中观察到许多植物的细胞结构,最终揭开了成煤原始物质之谜,证实了煤是由植物形成的。

(二) 植物的演化

植物的演化是由单细胞到多细胞、由低级到高级、由简单到复杂、由水生到陆生逐步进化发展的,其演化过程主要经历了以下几个阶段。

菌藻植物时期:中志留世以前,植物以水生的菌类、藻类植物为主,如蓝绿藻等。

裸藻植物时期:晚志留世至中泥盆世,伴随着地壳的上升,陆地逐渐扩大,促使那些能适应环境变化的植物由水生转为陆生,产生了最古老的陆生植物群。

蕨类植物时期:晚泥盆世至早二叠世,随着原始的蕨类植物逐渐被淘汰,比它更优越的石松类、真蕨类等迅速崛起,节蕨类也重趋繁盛,植物界进入了大发展的时期,出现了大面积的植物群,乔木型植物比较普遍。中石炭世至早二叠世是全球最重要的成煤时期。

裸子植物时期:晚二叠世至早白垩世,气候逐渐干旱,适宜温暖潮湿环境的各种蕨类植物除真蕨纲较适应这一变化外,其他蕨类植物逐渐衰退了,这一时期以裸子植物为主,它们大量繁殖并形成茂密的森林。裸子植物一般都具有大型羽状复叶,树干高大。在所发现的松柏类化石中,科达树高度可达20~30 m,树顶有浓密、茂盛的枝叶,树冠庞大。

被子植物时期:晚白垩世至现代,随着古地理、古气候的变化,裸子植物逐渐走向衰退和灭绝,被子植物迅速繁殖,成为占绝对优势的植物群。被子植物具有完善的输导组

织和支持组织,生理机能得到大大提高。今天的被子植物分布极其广泛,无论是寒带还是热带,到处都可以找到被子植物的踪迹。被子植物约有 27 万多种,数量占整个植物界的一半还多。

(三) 地质年代与成煤情况

1. 地质年代

地球从形成至今已经经历了漫长的 45 亿年,而且地球始终进行着运动、发展和变化,地壳上留下了许多反映地球运动、发展和变化的踪迹。为了便于开展地质研究及找矿工作,地质学家综合了地层层序、生物演化、地壳运动等因素,把地质历史划分为许多阶段,每个阶段又可分为几个次级阶段,这样就产生了地质年代单位。

常用的地质年代单位有代、纪、世。其中代是根据生物演化的主要阶段划分的;划分纪的依据地壳节奏运动造成的沉积旋回、古地理特征及生物群的变化;世是根据生物科目的发展演化阶段划分的。具体见表 1-1。

2. 中国主要聚煤期和聚煤作用

中国蕴藏着丰富的煤炭资源,含煤地层遍布全国各地。研究表明,中国的聚煤期主要有八个:早寒武世、早石炭世、晚石炭世—早二叠世、晚二叠世、晚三叠世、早中侏罗世、晚侏罗世—早白垩世、第三纪。早寒武世是由低等植物成煤。由陆生高等植物形成煤,则开始于晚古生代的早石炭世,其中以石炭纪、二叠纪、第三纪聚煤作用最强。

(四) 植物的族组成及其成煤性质

1. 植物的族组成

在生物发展史上,植物经历了由水生到陆生、由低级到高级、由简单到复杂的逐步进化和发展。按其进化顺序可分为菌藻类植物、苔藓类植物、蕨类植物、裸子植物、被子植物,其中菌藻类植物属低等植物,其余为高级植物。

表 1-1 地质年代与成煤期

代	纪	世	距今年龄 /亿年	生物开始繁殖时期		成煤主要类型
				植物	动物	
新生代	第四纪	全新世 更新世	0.03	被子植物大量繁殖为 成煤提供原始物质	古人类出现	泥炭
	新近纪	上新世 中新世	0.25			泥炭
	古近纪	渐新世 始新世 古新世	0.80			褐煤 低变质烟煤
中生代	白垩纪	晚白垩世 早白垩世	1.40	被子植物	爬行动物	褐煤
	侏罗纪	晚侏罗世 中侏罗世 早侏罗世	1.95			烟煤
	三叠纪	晚三叠世 中三叠世 早三叠世	2.30			

续表 1-1

代	纪	世	距今年龄 /亿年	生物开始繁殖时期		成煤主要类型
				植物	动物	
古生代	晚古生代	二叠纪	晚二叠世 早二叠世	2.70	裸子植物	烟煤 无烟煤
		石炭纪	晚石炭世 中石炭世 早石炭世	3.20		
		泥盆纪	晚泥盆世 中泥盆世 早泥盆世	3.75		
	早古生代	志留纪	晚志留世 中志留世 早志留世	4.40	裸蕨植物	无烟煤
		奥陶纪	晚奥陶世 中奥陶世 早奥陶世	5.00		
		寒武纪	晚寒武世 中寒武世 早寒武世	6.20		
元生代	震旦纪	晚震旦世 中震旦世 早震旦世	约 16	菌藻类	石煤	没有煤
	早元古代		20			
太古代			45			

低等植物主要由蛋白质和糖类组成,脂类化合物含量较高。高等植物的有机组成以糖类物质和木质素为主。在木本植物的各部分中:根、茎、叶以糖类和木质素为主;孢子、花粉和角质层主要由脂类化合物组成。原生质则含有大量的蛋白质。植物有机组成的差异,直接影响它们在成煤过程中的分解与转化,并且影响煤的性质和煤的用途。

2. 成煤原始物质对煤质的影响

植物的演化、发展经历了几个大的地质历史阶段,在不同的地质时期生物群的面貌存在很大的差异。不同种类的植物,其有机组分的含量相差很大,相同植物的不同部分有机组分的含量也不相同,而且,不同植物的元素组成有差异,不同类型的有机组分其元素组成也有较大变化。

从理论上讲,各种植物的各个部分分解后的产物及参与分解的微生物都能参与成煤,但是,由于植物的不同部分在有机组成上存在差异,而有机组分在化学元素组成上也存在差异,所以不同植物和植物的不同部分的分解、保存和转化存在很大差别。例如,低等植物中蛋白质、脂类化合物含量高,由低等植物形成的煤中氢含量较高。因此成煤原始物质是影响煤质的重要因素之一。

二、成煤过程

成煤过程是指从植物死亡、遗体堆积直到转变成煤所经历的一系列演变过程。

(一) 成煤条件

1. 古植物条件

植物是成煤的物质基础,只有植物大量繁殖的时期才是成煤的有利时期。在植物发展史上,早期出现的植物是生活在水中的低等植物,如台菌类、藻类。分布于中国南方省份的石煤就是由低等植物演变而成的。随着植物的进化,从晚志留世到早泥盆世植物开始“登陆”,出现了陆生的高等植物。裸蕨只能生活在水盆地的边缘,数量较少且个体矮小,未形成大规模的煤层。到了石炭纪、二叠纪,裸子植物飞速发展,不仅数量多,而且发育成高大的木本植物,为成煤提供了大量的物质基础,形成大量如今具有工业价值的煤层。

2. 气候条件

气候与成煤的关系非常密切,它对成煤的影响主要表现在两个方面。首先,气候能影响植物的繁殖。研究表明,干旱的气候环境,不利于植物的生长,植被稀少;寒冷地区,植物生长缓慢;只有温暖、潮湿的气候环境最适宜植物的生长繁殖,植物才会茂盛。其次,气候控制着泥炭沼泽的发育。当年平均降水量小于年平均蒸发量时,只有少数有水源补给的低洼地区可能沼泽化。而当年平均降水量大于年平均蒸发量时,可导致低洼地区大范围沼泽化。所以,温暖、潮湿的气候条件最适宜成煤。

3. 古地理条件

研究表明,要想形成分布面积广、具有开采价值的煤层,必须有既适宜植物大量繁殖又能使植物遗体得以保存的良好自然地理环境。自然界中,只有泥炭沼泽具备这种条件。因为沼泽地表常年积浅水,植物遗体及时被沼泽中的水掩盖,避免全部氧化,所以,泥炭沼泽是发生聚煤的良好古地理环境。

4. 地壳运动条件

地壳运动是地球运动、发展、变化的一种表现形式。地壳运动对成煤的影响表现在以下方面:

(1) 地壳运动对自然地理环境起控制作用。当地壳发生沉降运动时,可以使近海平原或内陆地积水,引起沼泽化。而且沼泽的面积大小、覆水深度、演化过程都受地壳运动控制。

(2) 地壳沉降速度直接影响泥炭层的沉积厚度。当地壳的沉降速度与植物遗体的沉积速度大致相等时,沼泽基底沉降的空间恰好被植物遗体的堆积所充填,沼泽中积水的深度基本保持不变,继续维持沼泽环境,这种平衡持续时间越长,泥炭的堆积厚度就越大。

当地壳沉降速度小于植物遗体堆积速度时,沼泽基底沉降的空间不足以充填植物遗体,相当于沼泽中积水的深度变浅,这种状况持续一段时间后,沼泽被植物遗体填满,后续植物死亡后不能被水掩盖,遭受氧化而破坏,无法形成较厚的泥炭层。

当地壳沉降速度大于植物遗体堆积速度时,沼泽基底沉降的空间不能被植物遗体填满,相当于沼泽中积水的深度增大,这种状况持续一段时间后,沼泽逐渐演变成湖泊,植物的生长繁殖受到限制,泥炭的沉积中断,不能形成较厚的泥炭层,转而沉积泥沙物质。

综上所述,在地质历史时期,聚煤盆地只有同时具备植物、气候、古地理和地壳运动这四个条件,且相互配合默契,持续时间长,才能形成煤层多、储量大的重要煤田。

(二) 成煤过程

当植物死亡后,遗体堆积在沼泽中,经过复杂的生物化学变化转变为泥炭或腐泥。随着地壳沉降运动,泥炭、腐泥被埋到地下深部,经过物理化学作用、地质作用,逐渐演变成腐殖

煤或腐泥煤。根据成煤过程中影响因素和结果的不同,成煤过程可分为泥炭化作用和煤化作用两个阶段。

1. 泥炭化作用

研究表明,由植物转变成泥炭后,其化学组成发生了明显的变化。其中,植物中所含的蛋白质全部消失了,在植物中占主要地位的纤维素、木质素也所剩无几,而植物中原本没有的腐殖酸在泥炭中的含量却相当高。元素组成上,泥炭的碳含量比植物高,氢、氮的含量有所增加,而氧、硫的含量降低较多(见表 1-2)。

表 1-2 植物与泥炭化学组成的比较

植物或泥炭	元素组成/%				有机组分/%				
	$\omega(\text{C})$	$\omega(\text{H})$	$\omega(\text{N})$	$\Omega(\text{S+O})$	纤维素和半纤维素	木质素	沥青	蛋白质	腐殖酸
莎草	47.9	5.51	1.64	44.95	50	20~30	5~10	5~10	0
木本植物	50.15	5.20	1.05	43.60	50~60	20~30	1~3	1~7	0
桦川草本泥炭	55.87	6.35	2.90	34.98	19.69	0.75	3.56	0	43.58
合浦木本泥炭	65.46	6.53	1.26	26.75	0.89	0.39	0	0	42.88

泥炭一般为棕褐色或黑褐色,无光泽,质软且富含水分和腐殖酸。泥炭在中国分布广泛,储量约 270 亿吨,具有很高的利用价值。泥炭干燥后可做燃料,泥炭中的腐殖酸可做腐殖酸肥料,可进行低温干馏制取化工原料等。近年来,泥炭开发和利用受到一些国家的高度重视。

腐泥作用是指低等植物遗体经过复杂的生物化学变化转变成腐泥的过程。腐泥常呈黄褐色、暗褐色、黑灰色等,水分含量可达 70%~90%,是一种粥状流动的或冻胶淤泥状物质,干燥后水分降低至 18%~20%,为具有弹性的橡皮状物质。腐泥干燥后也可做燃料或肥料使用,干馏时腐泥的焦油产率很高。

2. 煤化作用

煤化作用是指泥炭转变为腐殖煤的过程,或腐泥转变为腐泥煤的过程。根据作用条件的不同,煤化作用可分为成岩作用和变质作用两个阶段。

(1) 成岩作用

泥炭层沉积之后,由于地壳持续沉降,泥炭层被埋到地下一定深度,泥炭在以压力、温度为主的物理化学作用下,逐渐被压紧,失去水分,密度增大。当作用减弱以至消失后,泥炭中碳元素含量逐渐增加,氢、氧元素含量逐渐减少,腐殖酸的含量不断降低直至完全消失,经过一系列复杂变化,泥炭变成了褐煤,这种由泥炭变成褐煤的过程称为煤的成岩作用。泥炭变成褐煤,化学组成发生了明显的变化(见表 1-3)。

表 1-3 成煤过程的化学组成变化

物料	$\omega(\text{C})/\%$	$\omega(\text{O})/\%$	腐殖酸(daf)/%	挥发分 $V_{\text{daf}}/\%$	水分 $M_{\text{ad}}/\%$
植物	草本植物	48	39		
	木本植物	39	42		

续表 1-3

物料		$\omega(C)/\%$	$\omega(O)/\%$	腐殖酸(daf)/%	挥发分 $V_{daf}/\%$	水分 $M_{ad}/\%$
泥炭	草本泥炭	56	34	43	70	>40
	木本泥炭	66	26	53	70	>40
褐煤	低煤化度褐煤	67	25	68	58	10~30
	典型褐煤	71	23	22	50	
	高煤化度褐煤	73	17	3	45	
烟煤	长焰煤	77	13	0	43	10
	气煤	82	10	0	41	3
	肥煤	85	5	0	33	1.5
	焦煤	88	4	0	25	0.9
	瘦煤	90	3.8	0	16	0.9
	贫煤	91	2.8	0	15	1.3
	无烟煤	93	2.7	0	10	2.3

(2) 变质作用

年轻的褐煤在较高的温度、压力和较长的时间作用下,进一步发生物理化学变化,变成老褐煤、烟煤、无烟煤和变无烟煤。在这个过程中,腐殖质不断发生聚合反应,稠环芳香系统的侧链减少,芳构化程度提高,分子排列更加规则,这个化学作用称为变质作用。

煤在变质过程中,内部结构、化学组成、物理特征以及工艺性能都呈有规律的变化。在变质过程中,温度、压力和作用的持续时间是煤变质的主要因素。温度因素是最重要的,因为温度促使镜质组中芳香结构发生化学变化,官能团和键减少,链缩短、缩聚,从而使煤的变质程度增高;时间因素指煤受热的持续时间,煤经受温度高于50~60℃时,其持续的时间越长,煤的变质程度就越高;压力是煤变质不可缺少的因素,它主要促使煤的物理结构发生变化。

煤的变质程度指煤在温度、时间、压力因素作用下,物理、化学、工艺性质变化的程度。一般以煤级或煤阶表示煤的变质程度。

第二节 煤的结构

在煤的形成过程中,成煤物质组成和地质化学作用是十分复杂的。因此,煤的组成是复杂的、多样的、不均一的,难以从中分离简单的物质进行结构和性质的研究分析。但要合理利用煤炭,测定煤的结构是很重要的。目前对煤结构的研究主要通过物理研究法、物理化学研究法和化学研究法进行开展。对煤的结构的研究结论,只是根据实验结果进行分析与推测。

一、煤的结构

煤是由分子量不同、分子结构相似但又不完全相同的一组“相似化合物”的混合物组成的。构成煤的大分子、聚合的“相似化合物”被称为基本结构单元,这样的多个相似的基本结构单元通过桥键连接而形成煤的立体结构(见图1-1)。煤的基本结构单元包括规则部分和

不规则部分。在煤的立体结构中,还有些游离或镶嵌在煤大分子基本结构单元中的低分子化合物,主要是指一些相对分子质量小于 500 的有机化合物。

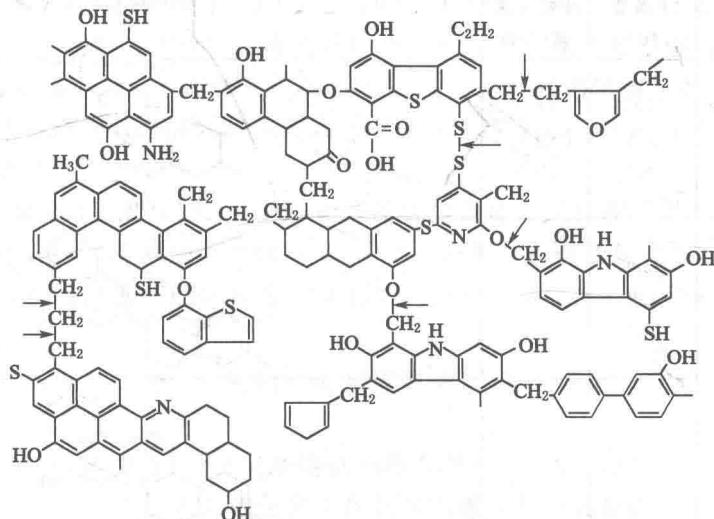


图 1-1 煤的大分子结构示意图

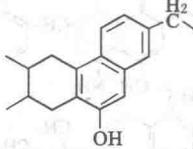
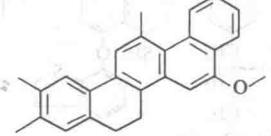
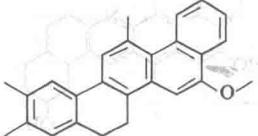
(一) 规则部分

规则部分为结构单元的核心部分。它由几个或十几个苯环、酯环、氢化芳环及杂环(含氮、氧、硫等元素)缩聚而成,称为核或芳香核。煤结构(大分子芳香核)的主要参数有芳碳率、芳氢率、芳环率。煤的结构单元核心部分组成随着煤化程度的变化也呈现规律性变化(见表 1-4)。

表 1-4 不同煤化程度煤的结构单元变化规律

煤种	成分特征/%			结构单元
	指标	干燥基 (d)	干燥无灰 基(daf)	
褐煤	C	64.5	76.2	
	H	4.3	4.5	
	V	40.8	45.5	
次烟煤	C	72.9	76.7	
	H	5.3	5.6	
	V	41.5	43.6	

续表 1-4

煤种	成分特征/%			结构单元
	指标	干燥基(d)	干燥无灰基(daf)	
高挥发分烟煤	C H V	77.1 5.1 36.5	84.2 5.5 39.9	
低挥发分烟煤	C H V	83.8 4.2 17.5	— — —	
无烟煤				

1. 芳碳率 f_{Ar}^C

$$f_{Ar}^C = \frac{N_{Ar}(C)}{N_{total}(C)}$$

芳碳率是指煤的基本结构单元中, 属于芳香族结构的碳原子数 $N_{Ar}(C)$ 与总的碳原子数 $N_{total}(C)$ 之比。

2. 芳氢率 f_{Ar}^H

$$f_{Ar}^H = \frac{N_{Ar}(H)}{N_{total}(H)}$$

芳氢率是指煤的基本结构单元中, 属于芳香族结构的氢原子数 $N_{Ar}(H)$ 与总的氢原子数 $N_{total}(H)$ 之比。

3. 芳环率 f_{Ar}^R

$$f_{Ar}^R = \frac{N_{Ar}(R)}{N_{total}(R)}$$

芳环率是指煤的基本结构单元中, 芳香环数 $N_{Ar}(R)$ 与总环数 $N_{total}(R)$ 之比。

(二) 不规则部分

不规则部分是连接在核周围的官能团、烷基侧链和桥键。它们的数量随着煤化程度的增加而减少。

1. 官能团

煤分子上的官能团主要有: 含氧官能团、含硫官能团和含氮官能团。

① 含氧官能团

氧是构成官能团的主要元素之一, 对煤的影响很大, 尤其对年轻煤的影响更大。氧的存在形式可分为两类: 一类是羟基($-OH$)、羧基($-COOH$)、羰基($\text{C}=\text{O}$)、甲氧基($-OCH_3$)、醚键、酰基、酚羟基等, 煤化程度越低, 这一部分的比例越大; 另一类是醚键和味