

煤高温快速液化

凌开成 盛清涛 著

205

QUICK COAL
LIQUEFACTION
AT HIGH
TEMPERATURE



化学工业出版社

煤高温快速液化

凌开成 盛清涛 著

QUICK COAL
LIQUEFACTION
AT HIGH
TEMPERATURE



化学工业出版社

·北京·

本书共分7章,包括煤液化概述、煤高温快速液化、煤的结构和热解特征与煤高温快速液化的关系、煤高温快速液化反应中溶剂供氢的特点、氢气在煤高温快速液化中的作用、煤中矿物质和小分子对煤高温快速液化的影响,以及煤的理想液化及煤高温快速液化机理。

本书可供煤化工、环境工程、能源工程等领域的工程技术人员、科研人员和管理人员参考,也可供高等学校相关专业师生参阅。

图书在版编目(CIP)数据

煤高温快速液化/凌开成,盛清涛著. —北京:

化学工业出版社, 2016. 10

ISBN 978-7-122-27863-0

I. ①煤… II. ①凌…②盛… III. ①煤液化-研究
IV. ①TQ529

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 193027 号

责任编辑: 刘兴春 刘 婧

责任校对: 边 涛

装帧设计: 张 辉

出版发行: 化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印 刷: 北京永鑫印刷有限责任公司

装 订: 三河市宇新装订厂

710mm×1000mm 1/16 印张11½ 字数171千字 2017年1月北京第1版第1次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价: 68.00 元

版权所有 违者必究

前言

能源在国家经济和社会发展中占有极其重要的地位，随着我国经济的持续快速发展，能源的需求也在不断地增长。众所周知，中国是一个富煤贫油的国家，以煤为主的能源结构格局在相当长的时间内难以改变。因此，发展煤炭液化等先进的洁净煤技术，对于充分利用我国丰富的煤炭资源、提高煤炭资源利用效率、控制环境污染、保证国家能源安全都具有十分重要的意义。

煤炭直接液化是将固态煤与液态溶剂进行充分混合，在一定的氢气压力、反应温度和催化剂的条件下将煤直接加氢转化为液体燃料和化工原料的加工过程。2008年，中国神华集团在我国内蒙古自治区鄂尔多斯市建成了第一座具有自主知识产权的 $1 \times 10^6 \text{ t/a}$ 液化油的煤直接液化工厂。虽然煤炭直接液化工艺在我国已经实现了工业化，但是在煤炭直接液化理论领域仍存在诸多空白。理论上的进一步完善，必然会对煤炭直接液化工艺的优化提供理论支持，因此，深入研究探讨煤直接液化的机理是很有必要的。

本书是太原理工大学以凌开成教授为首的课题组多年来研究成果的汇编。在早期研究煤液化动力学时，发现可将煤的液化过程分成3个阶段，并且还发现煤在转化过程中都存在着一个初始高活性反应阶段，在进一步深入研究该特性时，提出了煤高温快速液化的概念。煤高温快速液化从学科上隶属于煤炭直接液化，是一种特殊条件下的煤直接液化。本书针对煤初始高反应活性的行为规律，主要从煤液化涉及的化学反应、煤结构特点及煤热解时可能发生的一系列化学反应进行了较详细的剖析，深入探讨了煤高温快速液化过程中溶剂供氢和氢气供氢的机理以及煤中矿物质和小分子化合物对煤高温快速液化的影响，形成了一套较为独立完整的煤高温快速液化理论，其补充完善了煤直接液化理论体系。煤高温快速液化理论的

研究不仅可以为煤液化工工艺提供适当提高反应温度、缩短反应时间的理论依据，而且对进一步改善溶剂的供氢性能，以及氢气的催化供氢等技术的优化均具有重要的参考价值。

本书的研究工作得到了国家自然科学基金项目（20776094）、973 项目的子项目（2004CB217602）、山西省自然科学基金项目（2009011010-2）、山西省归国留学人员科研资金资助项目（2008-27）等的大力资助。本书的研究工作是在凌开成教授的指导下，由博士研究生李刚、罗化峰、王迎春，硕士研究生申峻、薛永兵、盛清涛、朱天星、李鑫、贾伟、王顺华、张志峰、冯伟等参与完成的，该成果是本研究集体共同努力的结果。本书由凌开成、盛清涛著述，其中罗华峰校核第 5 章，王迎春校核第 6 章。

感谢国家自然科学基金委员会、山西省科技厅、山西省归国留学人员办公室等在资金方面的资助，感谢太原理工大学各级领导的大力支持，感谢历届研究生的辛勤工作。

限于著者时间和水平，本书不足之处在所难免，欢迎广大读者和专家提出批评指正。

著者

2016 年 8 月

目 录

1 煤液化概述

1.1 煤的化学结构与石油化学结构的区别	2
1.2 煤直接液化	4
1.2.1 煤直接液化综述	4
1.2.2 煤直接液化主要影响因素	5
1.2.3 煤直接液化反应机理	10
1.2.4 液化产物的分离及计算	11
1.3 煤间接液化	14
1.3.1 煤间接液化基本化学反应	15
1.3.2 费托合成技术	16
1.3.3 费托合成过程的工艺参数	16
1.3.4 F-T 合成催化剂	18
1.4 发展煤炭液化的意义	19
参考文献	21

2 煤高温快速液化

2.1 煤高温快速液化实验	22
2.1.1 煤样	22
2.1.2 抽提溶剂	23
2.1.3 反应气体	23
2.1.4 煤高温快速液化反应装置	23
2.2 煤加氢液化涉及的化学反应	24

2.3	煤液化动力学研究	28
2.4	煤的高温快速液化	31
2.4.1	煤高温快速液化的可行性	31
2.4.2	煤高温快速液化的概念	34
2.5	本章要点	35
	参考文献	36

3 煤的结构和热解特征与煤高温快速液化的关系

3.1	煤的结构特征	37
3.1.1	煤的基本结构	37
3.1.2	煤分子结构的官能团模型	39
3.1.3	Shinn 模型分析	41
3.2	煤的热解特征	46
3.2.1	兖州煤的热解分析	46
3.2.2	煤热解动力学模型及参数的计算	48
3.3	煤的结构和热解特征与煤高温快速液化的关系	51
3.3.1	煤高温快速液化反应温度的影响	51
3.3.2	煤高温快速液化反应温度和时间的确定	53
3.4	本章要点	54
	参考文献	55

4 煤高温快速液化反应中溶剂供氢的特点

4.1	溶剂的作用	57
4.1.1	溶剂用量对煤液化的影响	57
4.1.2	溶剂结构性质对煤液化的影响	59
4.2	煤高温快速液化溶剂供氢的特点	62
4.2.1	混合溶剂对溶剂供氢的影响	62
4.2.2	供氢溶剂四氢萘的供氢状态	63
4.2.3	搅拌作用对溶剂供氢的影响	65
4.3	本章要点	66

参考文献 67

5 氢气在煤高温快速液化中的作用

5.1 气氛对煤高温快速液化的影响 70

5.2 氢气在溶剂中的溶解规律 72

5.2.1 氢气溶解度的测定 72

5.2.2 氢气在煤液化油中的溶解度 100

5.2.3 氢气在萘和四氢萘中溶解 105

5.3 氢气预溶解对煤高温快速液化的影响 107

5.3.1 氢气预溶解条件的确定 108

5.3.2 氢气预溶解时间对煤高温快速液化的影响 108

5.4 氢气溶解度计算模型 110

5.4.1 简化气液平衡数学模型的建立 110

5.4.2 计算结果 113

5.4.3 氢气在混合溶剂中溶解度的估算 122

5.5 氢气活化在煤高温快速液化中作用研究 127

5.5.1 煤液化催化剂 127

5.5.2 催化剂对原煤热解的影响 129

5.5.3 催化剂活化氢气对煤高温快速液化反应的影响 133

5.6 催化剂活化供氢与溶剂供氢的比较 137

5.7 本章要点 138

参考文献 141

6 煤中矿物质和小分子对煤高温快速液化的影响

6.1 煤中矿物质的影响 143

6.1.1 煤中矿物质的脱除及脱灰率计算 144

6.1.2 煤灰分的分析 146

6.1.3 脱矿物质前后煤样的分析 148

6.1.4 脱除煤中矿物质对煤高温快速液化的影响 149

6.1.5 含铁矿物质对兖州煤高温快速液化的影响 151

6.2	煤中的小分子化合物对煤高温快速液化的影响	152
6.2.1	煤中小分子化合物	152
6.2.2	小分子化合物的抽提	153
6.2.3	抽提率和溶剂抽余煤转化率的计算	154
6.2.4	原煤、抽余煤及煤中小分子化合物的表征	155
6.2.5	溶剂抽提对煤高温快速液化性能的影响	160
6.2.6	煤中小分子化合物对煤高温快速液化的影响	162
6.3	本章要点	165
	参考文献	167

7 煤的理想液化及煤高温快速液化机理

7.1	煤高温快速液化及“理想液化”的概念	170
7.1.1	煤高温快速液化的定义	170
7.1.2	“理想液化”概念的提出	170
7.2	煤高温快速液化机理分析	171
7.2.1	煤液化反应过程及步骤的分析	171
7.2.2	将煤的热分解反应与煤的结构理论及煤的热分析数据结合起来	171
7.2.3	煤高温快速液化反应中的加氢反应	172
7.2.4	煤高温快速液化反应时间	174
7.3	煤高温快速液化的理论研究价值与实际应用的意义	175
	参考文献	176

煤液化概述

能源在国家经济和社会发展中占有重要的地位，近年来，随着我国经济的持续高速发展，对能源和化工品的需求出现了较高的增长速度。众所周知，中国是一个富煤贫油的国家，随着石油资源短缺形势的加剧，煤炭直接液化被认为是解决石油短缺最可行的技术途径之一。

我国一次能源消费结构中煤炭约占 65%，尽管近年来，煤炭所占比重有所下降，但是煤炭仍然是我国现在和未来能源的重要组成部分，以煤为主的能源格局在相当长的时间内难以改变。因此，发展煤炭液化等先进的煤洁净利用技术、充分利用我国丰富的煤炭资源、提高煤炭资源的利用效率、控制环境的污染，对于调整我国能源结构、缓解石油进口压力、降低石油风险都有十分重要的意义。

煤液化是指煤通过一系列化学加工，转化为液体燃料及其他化学品的过程，俗称煤制油。液体燃料主要是指汽油、柴油、液化石油气、重质渣油等液态烃类燃料，即通常是由天然原油加工而获得的石油产品，有时也把甲醇、乙醇等醇类燃料包括在煤液化的产品范围之内。中国有着丰富的煤炭资源，发展煤液化技术生产石油替代产品，是解决中国石油短缺，调整我国煤多油少能源格局的重要途径之一。同时，煤炭液化过程可将难处

理的固体燃料转变为便于运输、储存、清洁的液体燃料，使煤炭中潜在的化学品得到合理利用，并且在反应过程中可以脱除煤中硫、氮等杂原子及灰分等，因此，煤炭液化技术是一种高效清洁煤转化技术，它扩大了煤的综合利用范围，是以煤代油战略重要、有效和可行的途径之一。

目前根据化学加工过程的不同路线，煤炭液化可分为间接液化和直接液化两大类。间接液化是先将煤气化成合成气，然后再在催化剂的作用下进行费托合成制取液体燃料和化学品。间接液化技术在南非 Sasol 已实现了大型工业化生产。另外还有合成气最终制取燃料油的两种间接液化技术：一是美国 Mobil 公司开发成功用甲醇生产汽油的 MTG 工艺；二是 Shell 公司开发的 SMDS 技术，用合成气制取发动机燃料油。我国也拥有完全自主知识产权的煤间接液化技术。20 世纪 80 年代，我国开发了固定床两段法合成 MFT 工艺和浆态床-固定床两段合成 SMFT 工艺，以“煤基液体燃料合成浆态床工业化技术”为核心技术的潞安集团的 $1.6 \times 10^5 \text{ t/a}$ 煤基合成油示范项目也已成功出油。

煤的直接液化是指在一定温度、压力和催化剂下，以一定的溶剂作为供氢溶剂将煤加氢直接转化为液体燃料和化工原料的加工过程。煤直接液化具有工艺路线短、热效率高、液体产品收率高等优点，但同时也存在操作条件较苛刻等问题。神华集团煤直接液化示范项目成功运行，为中国煤直接液化产业化发展和技术进步奠定了坚实的基础。

在煤炭液化的加工过程中，煤炭中含有的硫等有害元素以及无机矿物质均可脱除，硫还可以硫黄的形态得到回收，而液体产品是比一般石油产品更优质洁净的燃料。

1.1 煤的化学结构与石油化学结构的区别

煤炭是由古代植物残骸在一定的温度和压力条件下经过复杂漫长的地壳物理、化学变化而形成的有机矿物质。石油主要是由古代低级动植物残骸在地层和细菌的作用下经过复杂的化学变化和生物化学变化而形成的液态烃类混合物，往往聚集在有孔隙和裂缝的岩石中。石油主要由烷烃、环

烷烃及芳香烃组成。

煤和石油都是由 C、H、O、S、N 等元素组成，但它们在外观和化学组成上有着明显的差别。表 1-1 列出了不同变质程度的煤与石油的元素组成。

表 1-1 煤与石油的元素组成 单位：%

元素	无烟煤	中等挥发分烟煤	高挥发分烟煤	褐煤	泥炭	石油	汽油	CH ₄
C	93.7	88.4	80.3	72.7	50~70	83~87	86	75
H	2.4	5.0	5.5	4.2	5.0~6.1	11~14	14	25
O	2.4	4.1	11.1	21.3	25~45	0.3~0.9		
N	0.9	1.7	1.9	1.2	0.5~1.9	0.2		
S	0.6	0.8	1.2	0.6	0.1~0.5	1.0		
H/C 原子比	0.31	0.67	0.82	0.87	约 1	1.76	1.94	4

由表 1-1 可知，煤与石油、汽油元素组成含量各不相同。煤中的 H 含量比石油低，O 含量比石油高，H/C 原子比低于石油，而 O/C 原子比高于石油，因此煤炭液化的实质是提高 H/C 原子比。另外，煤中的 N 含量比石油略高，S 含量视产地不同而不同。这主要是由于煤与石油的分子结构存在着很大的差异。煤的分子结构极其复杂，至今仍未彻底了解，现在公认的结论是：煤是以缩合芳香环为基本结构单元，结构单元的环上带有侧链和含有 S、N、O 的官能团，结构单元之间通过各种桥键相连，呈空间立体结构的高分子化合物。煤中桥键多为醚键和次甲基键。而石油主要是由烷烃、环烷烃和少量芳烃组成的液态混合物。煤的吡啶萃取物平均相对分子质量约为 200，而石油的平均相对分子质量约为 200，低馏分的相对分子质量更低，高沸点残渣油的相对分子质量较高，但不超过 600。

由于煤炭与石油化学结构和性质的不同，要把固态的煤转化成为液态的油，首先要将煤的大分子裂解成为小分子物质，提高煤的 H/C 原子比，同时降低 O/C 原子比。总之，煤直接液化的实质就是在一定温度、压力、溶剂和催化剂下，提高 H/C 原子比，使固态煤转化为液态油的化学加工过程。

1.2 煤直接液化

1.2.1 煤直接液化综述

煤液化技术的发展所走过的历程大致可以分为以下三个阶段。第一阶段是从 1913 年到第二次世界大战结束,这一阶段主要以德国为代表,德国人 F. Bergius 获得了世界上第一个煤液化技术专利。在此阶段前期,煤直接液化由专利技术转化为工业生产成果;此阶段后期,德国为满足其战争的燃料需求,以其丰富的煤炭资源为基础,建立了 12 个煤直接液化工厂,工业化技术进一步成熟和完善。第二阶段是从第二次世界大战结束后到 20 世纪 70 年代,这一阶段前期即 20 世纪 50 年代,随着石油的大量开采,煤制液化油失去了市场竞争力,煤直接液化技术的发展陷入了低潮。而在 70 年代,由于战争原因引发的能源危机使得各国均意识到煤液化技术的重要性,使其又进入一个崭新的发展阶段。此阶段的代表工艺有溶剂精炼煤法 I 和 II (SRC I 和 II)、氢-煤法 (H-Coal)、供氢溶剂法 (EDS) 等。第三阶段是从 20 世纪 70 年代至今,在这期间开发了两段集成液化工工艺、超临界溶剂抽提法以及煤和石油渣油联合加工等方法。总结 20 世纪 70 年代以来的煤直接液化工工艺,其中最具代表的工艺有:德国 IGOR 工艺、美国碳氢公司 (HRI) 的氢-煤法 (H-Coal) 工艺、美国溶剂精炼煤工艺 (SRC)、埃克森供氢溶剂法 (EDS 法)、日本 NEDOL 烟煤液化工工艺等。

我国从 20 世纪 80 年代初开始煤直接液化的研究和开发。多年来,我国众多学者在煤直接液化的煤样选择、工艺优化、机理探讨和加氢催化剂的研发等方面均取得了丰硕的成果,为进一步开发具有中国特色的煤直接液化工工艺奠定了坚实的基础。通过国际合作,煤炭科学研究院北京煤化工研究分院先后引进了 3 套不同工艺的煤直接液化连续试验装置,进行了上百个中国煤种的液化特性评价和煤液化工工艺技术研究,筛选出了 15 种适合于液化的煤种,其液化油率达 50% 以上,取得了一批具有先进水平的研究成果,完成了国内液化煤种和铁系催化剂的筛选。目前我国人工合成铁系

催化剂的研究、放大试验和催化剂催化性能评价已基本成熟。中国神华集团吸收了近几年煤炭液化研究成果，在美国 HTI 工艺基础上结合其他新工艺的优点，开发出了适合神华煤的一种先进煤直接液化工艺。

煤制油是满足未来不断增长液体燃料需求的重要途径之一，从 1913 年 Bergius 研究发现煤在高压下直接加氢液化获得成功开始，煤直接液化的研究已有百年历史。国内外的众多学者，无论在煤液化基础理论研究方面，还是在工程应用方面都做了大量工作，取得了丰硕的研究成果。

1.2.2 煤直接液化主要影响因素

煤在加氢液化过程中的化学反应极其复杂，涉及很多的化学反应，是一系列顺序和平行反应的综合，煤加氢液化过程受到很多因素的影响，主要有原料煤品种、气氛、溶剂、催化剂及反应条件等因素。

1.2.2.1 煤种的影响

煤直接液化对原料煤的品种有一定的要求，煤的反应性在很大程度上受到煤种的影响。一般用于煤炭直接液化的煤是年老的褐煤和年轻的烟煤。煤炭直接液化的难易程度与煤的变质程度有着密切的联系，反应的难易程度随煤的变质程度的增加而增加。表 1-2 列出了煤变质程度与加氢液化转化率间的关系。

表 1-2 煤变质程度与加氢液化转化率的关系

煤样	液体收率/%	气体收率/%	总转化率/%
中等挥发分烟煤	62	28	90
高挥发分烟煤 A	71.5	20	91.5
高挥发分烟煤 B	74	17	91
高挥发分烟煤 C	73	21.5	94.5
次烟煤 B	66.5	26	92.5
次烟煤 C	58	29	87
褐煤	57	30	87
泥炭	44	40	84

除煤的变质程度外，煤的化学组成和岩相组成对煤液化也有很大影响。H 含量高、O 含量高、C 含量低的煤转化为低分子产物的速度快，加氢液化生成的气体和水较多。原料煤中 H/C 原子比越大，在煤结构中存在的烷

基侧链和亚甲基桥键也越多。这些基团的键能比较弱，在液化过程中易发生裂解反应而生成自由基碎片。从煤的岩相组分来看，煤中的壳质组和镜质组是煤加氢液化的有益组分，而惰性组分最难加氢。因此，含镜质组和稳定组高的煤，液化性能优于丝质组多的煤，表 1-3 列出了煤的岩相组分的元素组成和液化转化率的关系。

另外，煤中含有的官能团也对煤液化反应有一定程度的影响，其中含氧官能团对煤直接液化的影响最大^[1]。煤中的矿物质对煤液化也有很大的影响，它既影响着催化剂的作用，本身又对煤直接液化反应有自催化作用。

表 1-3 煤的岩相组分的元素组成和液化转化率的关系

岩相组分	元素组成/%			H/C 原子比	加氢液化转化率/%
	C	H	O		
丝炭	93	2.9	0.6	0.37	11.7
暗煤	85.4	4.7	8.1	0.66	59.8
亮煤	83.0	5.8	8.8	0.84	93.0
镜煤	81.5	5.6	8.3	0.82	98

1.2.2.2 气氛的影响

(1) 氢气在煤液化中的作用

氢气是煤直接液化的反应物之一，高压氢气有利于煤的溶解和加氢液化转化率的提高。Guin 等^[2]用烷烃油分别在 N₂ 和 H₂ 气氛中将煤加热至 400℃，溶解 2h，然后冷却，用显微镜观察产物。结果发现，在 H₂ 中煤粒已有很大的变化，已经看不到原来的煤粒；在 N₂ 中煤粒基本上没有变化，这说明氢气能促进煤的溶解。Bruce 等^[3]的研究结果表明，在溶剂的供氢性能和数量不足时，氢气参与了短时液化反应。在氢气存在，尤其是在高压氢和催化剂条件下，煤转化率提高，前沥青烯向沥青烯或油的转化被促进，液化产品的质量有所提高。

一般而言，氢气参与煤液化反应的步骤为溶解、活化和反应。有研究者认为，在催化剂和高压氢气存在的条件下，供氢反应主要发生在煤和氢气之间，而不通过供氢溶剂，溶剂只是很好地溶解了煤以及液化过程中生成的小分子物质^[4~6]。Ikenaga 等^[7]考察了以四氢萘为溶剂的煤直接液化反应。实验结果表明，不添加催化剂的煤直接液化反应，70% 的活性氢来自

于供氢溶剂；添加催化剂的煤直接液化反应，在过量的四氢萘中 15%~40% 的活性氢来自于供氢溶剂，而 60%~80% 的活性氢来自于气相氢。虽然前人为此做了大量的基础工作，但是由于煤液化机理的复杂性和影响因素的多样性，至今对煤直接液化过程中氢传递机理还没有形成统一的观点，因而氢气与煤之间能否直接发生热反应的问题至今年尚无满意的答案。由于氢的键合度较高（氢键裂解能 427kJ/mol），氢分子似乎不可能直接与煤裂解的自由基碎片发生反应，如进行反应，需通过催化剂活化氢分子实现。

(2) 其他气氛在液化中的作用

Fischer 等在 1921 年指出，使用 $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$ 很容易使褐煤液化。许多研究表明，低煤化程度的煤与 $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$ 反应要比与 H_2 反应更加容易，随着煤化程度增加， $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$ 的优势减弱，而高含氧量的煤和有机物质（如泥炭、纤维素和木质素等）对 $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$ 同样有较高的反应性。Mukherjee 等^[8]在 $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$ 系统对维多利亚褐煤进行了液化研究，比较了 NaAlO_2 、 NaOH 、 Na_2CO_3 以及 $\text{Ca}(\text{AlO}_2)_2$ 作为催化剂时的液化性能，并研究了反应时间、温度、搅拌速率等工艺条件对转化率的影响，发现在较低的煤水比及较低催化剂载入量的情况下，高效混合可以得到获得较高的转化率。Artanto 等^[9]在 $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$ 系统对来自印度尼西亚烟煤和褐煤进行了液化试验，研究了碱金属催化剂及催化剂 NaAlO_2 对液化性能的影响。结果表明在 Ni/Mo 催化剂中添加少量的 S 对液化反应具有较好的催化效果。

由于甲烷要在高温下才能热解，所以，长期以来的研究一直认为甲烷在煤的热解过程中是一种惰性气体，为了减少煤液化过程中耗氢量，也有研究者对甲烷气氛下煤加氢液化进行了研究。结果发现煤热解释放出的活性自由基促使甲烷在较低温度下（400℃左右）裂解，释放出活性甲基和活性氢，从而提供了稳定自由基碎片的活性氢，提高煤转化率。

1.2.2.3 溶剂的影响

在一定条件下，许多有机溶剂都能溶解一定量的煤，除了起溶解煤的作用外，更重要的是供氢溶剂在煤液化中能提供和传递活性氢。一般认为，分子量较大且部分饱和的稠环化合物适合用作供氢体，溶剂在煤液化中除了充当溶解和传热介质外，更重要的是可以提供和传递氢，使煤大分子中

键裂解生成的自由基通过结合活性氢及时稳定下来。煤加氢液化中的溶剂有以下几种作用：

- a. 热溶解作用；
- b. 对煤粒的溶胀和分散作用；
- c. 对煤粒热裂解生成的自由基起稳定保护作用；
- d. 提供和传递活性氢作用；
- e. 对液化产物起稀释作用。

一般来说，可提供活性氢的溶剂都可用作供氢溶剂，而性能好的供氢溶剂要具有以下的特点：

- a. 具有芳香结构；
- b. 具有氢化芳香结构；
- c. 具有极性基团，如氨基或酚羟基；
- d. 高沸点的有机化合物；
- e. 分子体积不要太大。

工业上常用杂酚油或加氢蒽油作为溶剂。

1.2.2.4 催化剂的影响

煤高压加氢液化工工艺初始时不用催化剂，循环油中沥青烯含量很高，黏度很大，操作发生困难，把反应压力提高到 70.0MPa 还是不行，后来用钼酸铵和氧化铁作催化剂才使这一工艺得以实施。有些工艺虽然不外加催化剂，但所用煤的矿物质中含黄铁矿，而黄铁矿也是一种活性较好的加氢催化剂。

在煤直接液化反应过程中催化剂起着举足轻重的作用，也是影响煤液化成本的关键因素之一。研究认为，催化剂的作用有以下两个方面：

- a. 促进煤的热解；
- b. 促进氢气转化为活性氢。

煤直接液化催化剂在工业上可以分为以下三类：第一类是金属卤化物催化剂，如氯化锌和氯化锡等化合物；第二类是金属催化剂，如 Mo、Ni、Co、W 等硫化物，这类催化剂一般用于重油加氢，活性高，用量少，但价格高，再生反复使用困难；第三类催化剂是铁基催化剂，现在工业上用得最多的是铁系催化剂，主要包括含铁的氧化物、硫化物和氢氧化物，及其他一些工业废弃的残渣和天然的含铁的矿石。因为铁系催化剂活性比较高、