

基于 FTIR 和 XRD 法分析阜新长焰煤结构特征

安文博^{1*}, 王来贵¹, 刘向峰¹, 潘纪伟¹, 李喜林²

(1. 辽宁工程技术大学 力学与工程学院, 阜新 123000; 2. 辽宁工程技术大学 土木与工程学院, 阜新 123000)

摘要:为了研究阜新长焰煤的大分子结构,通过测定 12 个煤样品的工业分析和元素分析,选取最接近平均值的煤样 CYM-9 作为实验样品,采用傅里叶红外光谱(FTIR)、X 射线衍射(XRD)和单轴压缩实验对煤样进行研究,通过与抚顺长焰煤结构特征进行对比,进一步分析煤的微晶结构参数及其力学特性。研究表明:CYM-9 煤样的基本结构特征参数芳氢率(f_{ar}^H)为 0.47,氢碳原子比(H/C)为 0.858,芳碳率(f_{ar}^C)为 0.747,脂肪烃支链长度(CH_3/CH_2)为 0.617。与抚顺长焰煤结构相比,其芳碳率较大,芳香核缩合程度较大,芳香结构单元排列秩序较规则;煤样 XRD 图谱具有 002 峰和 100 峰两条明显的峰,层间距(d_{002})为 0.3816nm,层片堆砌高度(L_c)为 1.2462nm,层片直径(L_a)为 1.0136nm,芳香堆砌层数(N)为 4.26;煤样的平均峰值强度为 9.24MPa,达到峰值强度时平均应变值为 23.58×10^{-3} ,平均弹性模量为 405MPa。

关键词:阜新长焰煤; X 射线衍射; 傅里叶红外光谱; 煤大分子结构

引言

煤不同于一般的高分子化合物或聚合物,其具有不均匀性、非晶态特性和不溶性,煤的大分子结构十分复杂,主要由基本结构单元及其边缘基团构成。煤化程度高,煤的大分子结构比较规则,由芳环连接而成,而煤化程度越低,煤大分子结构越不规则,由芳环及周围侧链及含氧官能团连接而成,主要表现在芳环间的连接形式和侧链结构,以往研究者们对煤结构的认识仍然停留在表象阶段^[1]。近几年来,随着仪器装备水平和分析技术的进步,在煤结构研究方面取得了较大进展。红外光谱法是研究煤结构参数的有效技术之一,用于定量分析煤中官能团的含量^[2,3],X 射线衍射法是测定晶体结构的重要手段,被广泛应用于研究非晶态物质的多核芳香结构和微晶芳环层片组成^[4]。Geng 等^[5]利用 FTIR 对多种煤及煤中羧基进行研究,归属了芳香 C—H、脂肪 C—H 和羧基的吸收带,并根据芳香羧酸可推断出羧基官能团的含量;Lu 等^[6]采用 X 射线衍射对 4 种不同煤阶煤进行研究,发现煤中存在相当数量的无序物质即非晶碳,随着变质程度的增加,非晶碳数量逐渐减少;罗隕飞等^[7]利用 XRD 对不同中低变质程度煤大分子结构进行研究,发现变质程度越高,煤中芳香结构越多,脂肪结构越少,芳核在横向和纵向上进行芳环的缩聚反应;李霞等^[8,9]利用 FTIR 和 XRD 手段对低中级煤结构进行表征,发现煤化学结构主要由芳香结构、脂族结构和含氧官能团组成,煤结构演化主要是芳香结构化为主,并伴随着含氧官能团的脱落和部分小分子的缩合作用。

基于此,本文以阜新长焰煤为研究对象,通过测定 12 个煤样品的工业分析和元素分析,选取最接近平均值的煤样 CYM-9 作为实验样品,采用多种分析方法进行分析,首先利用 FTIR 光谱进行分峰解叠处理以获取各官能团的峰位和峰面积,确定煤的基本结构参数,并与抚顺长焰煤结果特征作对比,其次利用 XRD 图谱计算煤的微晶结构参数,进一步确定阜新长焰煤的结构特征,从而更深刻地认识煤样的物理力学特性。

10.14028/j.cnki.1003-3726.2018.03.009

收稿:2017-10-19;修回:2017-12-09;

基金项目:国家自然科学基金资助项目(51474121,51274110);

作者简介:安文博(1992—),女,博士研究生,主要从事地下煤岩结构和力学特性的研究。Tel:15042550307,E-mail:WB-An1992@163.com;

* 通讯联系人,E-mail: WB-An1992@163.com.

1 实验

1.1 实验材料

实验所用煤样取自阜新平安矿,属于长焰煤,样品均为新鲜煤样,按照国标(GB/T 482-2008)采集煤样,将采集后的样品立即装入采集袋中,并封口,防止污染和氧化。实验前,将采集的煤样敲碎后,放入玛瑙研钵中研磨至小于 200 目,保存备用。根据国标(GB/T 212-20008)和(GB/T 476-20008)对煤样进行工业分析和元素分析,分析结果见表 1。为了简化后续操作步骤,对 12 个煤样的工业分析和元素分析求平均值,选取最接近平均值的煤样 CYM-9 作为后续实验样品,实验前,首先对 CYM-9 进行脱灰处理,其目的主要是避免利用高灰煤(灰分在 30%左右)进行红外光谱实验和 X 射线衍射实验时,引起的不必要误差。

表 1 煤样的工业分析及元素分析
Table 1 Industry and elemental analysis of coal samples

煤样	工业分析/%				元素分析/%				
	水分	灰分	挥发分	固定碳	碳	氢	氧	氮	硫
CYM-1	5.84	29.76	25.34	39.05	80.29	5.96	11.87	1.12	0.76
CYM-2	6.01	30.32	23.68	40.00	78.92	5.55	13.62	1.20	0.71
CYM-3	6.15	30.21	23.71	39.93	78.99	5.51	13.65	1.21	0.64
CYM-4	6.04	30.29	23.67	39.98	77.89	5.54	13.62	1.26	0.69
CYM-5	6.22	28.99	24.43	40.36	79.56	5.78	12.88	1.09	0.69
CYM-6	6.16	29.15	25.36	39.33	79.43	5.86	13.08	1.13	0.5
CYM-7	6.08	29.94	24.03	39.95	78.94	5.62	13.60	1.18	0.66
CYM-8	5.96	32.10	22.08	39.86	77.85	5.84	14.29	1.30	0.72
CYM-9	6.07	30.19	23.80	39.94	78.82	5.64	13.68	1.19	0.67
CYM-10	6.01	30.32	23.68	40.00	78.90	5.55	13.62	1.20	0.71
CYM-11	6.18	30.87	22.02	40.94	77.50	5.14	15.36	1.28	0.66
CYM-12	6.07	29.88	23.14	40.91	78.10	5.21	14.89	1.26	0.54
平均值	6.07	30.17	23.74	40.02	78.76	5.60	13.68	1.20	0.66

1.2 实验方法

(1)红外光谱(Fourier Transform Infrared Spectroscopy,FTIR)实验

利用傅里叶红外光谱仪 Nicolet 6700 进行实验,按 KBr 和煤粉质量比约为 100:1,置于玛瑙研钵中,充分研磨装模后,将模具置于压片机上并施加约 10MPa 压力,受压 5min,把样品制成 0.1~1.0mm 厚,直径为 13mm 的薄片,放到样品架上,置于红外光谱仪样品室内测试。仪器扫描范围为 4000~400cm⁻¹,分辨率为 4cm⁻¹,累加扫描次数 32 次,获得高质量红外光谱图。

(2)FTIR 解叠分峰处理

考虑到煤的成分比较复杂,许多官能团的吸收带对红外光谱的贡献比较宽泛,容易造成图谱叠加这一问题,本文采用 Peak Fit 软件对叠加的峰进行分峰处理,根据光谱的二阶导数确定初始解叠拟合峰的位置和数量,调整吸收峰的各项参数,以原光谱和拟合光谱之间的残差平方和为最小目标函数为拟合标准进行拟合,将分峰拟合后结果归一化,确定官能团,得到煤的分峰解叠图和吸收峰参数^[10],图 3 为以 CYM-9 为例说明谱图的分峰和拟合。

(3)X 射线衍射(X-Ray Diffraction,XRD)实验

利用 X 射线衍射仪 ShimadzuXRD-6100 进行实验,将煤粉样品(小于 200 目)装填在铝支架上,光源

为 X 光管铜靶辐射($\lambda=0.154056\text{nm}$)、电压 40kV 、电流 40mA 、扫描速度 $10^\circ/\text{mm}$ 、扫描范围 $5\sim80^\circ$ 的条件下进行物相分析,得到 XRD 光谱图。

(4)单轴压缩实验

实验前将煤块切割成大小为 $\text{O}50\text{mm}\times100\text{mm}$ 的标准煤样,抛光打磨后备用,在同一系列试件中,剔除强度和弹性模量离散性较大的试件,选取 5 个标准煤样,编号 1#~5#,将煤样放在万能试验机上进行单轴抗压试验,加载方式为位移加载,控制位移加载速率为 0.01mm/s 。

2 实验结果及分析

2.1 煤样红外光谱结果与分析

对 CYM-9 样品进行红外光谱实验,并进行分峰拟合,图 1 为 CYM-9 的红外光谱及二阶导数。分析 CYM-9 的红外光谱特征与前人的研究基本一致^[11],可将红外光谱划分为 4 个吸收带谱进行分段分峰,即羟基吸收带($3700\text{cm}^{-1}\sim3000\text{cm}^{-1}$)、脂肪结构吸收带($3000\sim2800\text{cm}^{-1}$)、含氧官能团吸收带($1800\text{cm}^{-1}\sim1000\text{cm}^{-1}$)、芳香结构吸收带($900\text{cm}^{-1}\sim700\text{cm}^{-1}$),只是由于煤的变质程度不同导致吸收峰的位置有所差别,对 CYM-9 的分峰结果见图 2,各峰位吸收峰的峰面积和归属情况见表 2。

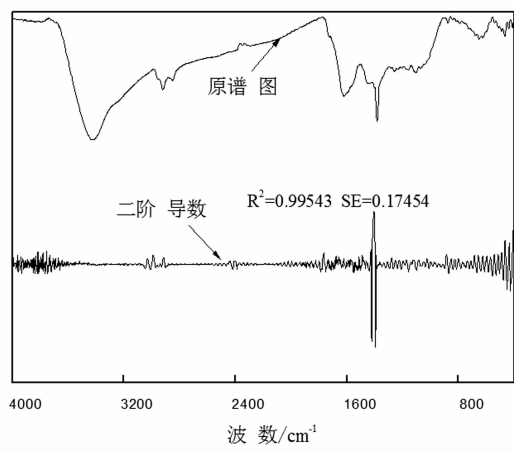


图 1 CYM-9 煤样红外光谱图及二阶导数谱图
Figure 1 FTIR and the second derivative spectra of CYM-9 coal sample

表 2 CYM-9 煤样红外光谱主要吸收峰面积和归属

Table 2 The peak area and attribution of FTIR absorption wave in CYM-9 coal sample

峰数	峰位置(cm^{-1})	峰面积(cm^2)	归属	峰数	峰位置(cm^{-1})	峰面积(cm^2)	归属
1	3693	564.44	游离的—OH	11	1317	439.52	与苯环相连的 CH_3
2	3609	557.62	游离的—OH	12	1224	523.99	叔醇 C—O 伸缩振动
3	3531	294.91	分子间/分子内氢键	13	1132	832.57	仲醇 C—O 伸缩振动
4	3279	30.03	缔合的—OH	14	1032	1062.34	伯醇 C—O 伸缩振动
5	2998	54.28	甲基反对称	15	854	27.03	1,3,5-三取代芳烃
6	2973	64.51	亚甲基反对称	16	828	25.03	1,4-二取代芳烃
7	2946	6.92	甲基对称	17	799	16.04	1,3-二取代芳烃
8	2886	34.76	亚甲基对称	18	773	15.99	1,2-二取代芳烃
9	1782	49.08	酮类 C=O	19	746	9.08	单取代芳烃
10	1472	47.91	CH_2 、 CH_3 非对称变形	20	707	3.95	单取代芳烃

2.1.1 红外光谱特征分析 FTIR 中 $3700\text{cm}^{-1} \sim 3000\text{cm}^{-1}$ 吸收带为羟基的振动吸收峰^[12]，其中 $3640\text{cm}^{-1} \sim 3610\text{cm}^{-1}$ 处的吸收峰峰形尖锐，强度较大，极易识别，为游离—OH 的吸收峰； $3550\text{cm}^{-1} \sim 3200\text{cm}^{-1}$ 处的吸收峰峰形宽而散，此处羟基化合物的缔合现象非常明显，为缔合的—OH 及与—O—键作用形成氢键的羟基。 $3000\text{cm}^{-1} \sim 2800\text{cm}^{-1}$ 吸收带为脂肪烃 CH_x 的伸缩振动，其中包括— CH_2 、— CH_3 的对称和反对称伸缩振动。 $1800\text{cm}^{-1} \sim 1000\text{cm}^{-1}$ 归属于含氧官能团^[13]，其中 $1800\text{cm}^{-1} \sim 1510\text{cm}^{-1}$ 处的吸收峰可能是两种结构的伸缩振动吸收峰，一种是具有一O—取代的 C—C(苯环)伸缩振动吸收峰，另一种是 C—O 与—OH 形成的氢键共振吸收峰，属于—COOH 的贡献； 1460cm^{-1} 、 $1380\text{cm}^{-1} \sim 1375\text{cm}^{-1}$ 处的吸收峰为脂肪类物质的对称与不对称变形振动，结合 CYM-9 的工业分析数据，其灰分较高，因此 1460cm^{-1} 处的吸收峰还可能归属于无机碳酸盐； $1300\text{cm}^{-1} \sim 1100\text{cm}^{-1}$ 处的吸收峰主要有酚、醇、醚、酯等的 C—O 伸缩振动。 $900\text{cm}^{-1} \sim 700\text{cm}^{-1}$ 吸收带为芳香结构的 C—H 伸缩振动、C=C 的面内弯曲振动和 C—H 的面内弯曲振动^[14]，是识别苯环上取代位置和数目的重要特征峰，其中 $971\text{cm}^{-1} \sim 710\text{cm}^{-1}$ 为烯烃双键上的 C—H 键面外伸缩振动； $860\text{cm}^{-1} \sim 800\text{cm}^{-1}$ 为 1,4-二取代苯的吸收峰； $810\text{cm}^{-1} \sim 770\text{cm}^{-1}$ 为 1,3-二取代苯的吸收峰； $770\text{cm}^{-1} \sim 735\text{cm}^{-1}$ 为 1,2-二取代苯的吸收峰； $710\text{cm}^{-1} \sim 690\text{cm}^{-1}$ 为单取代苯的吸收峰。

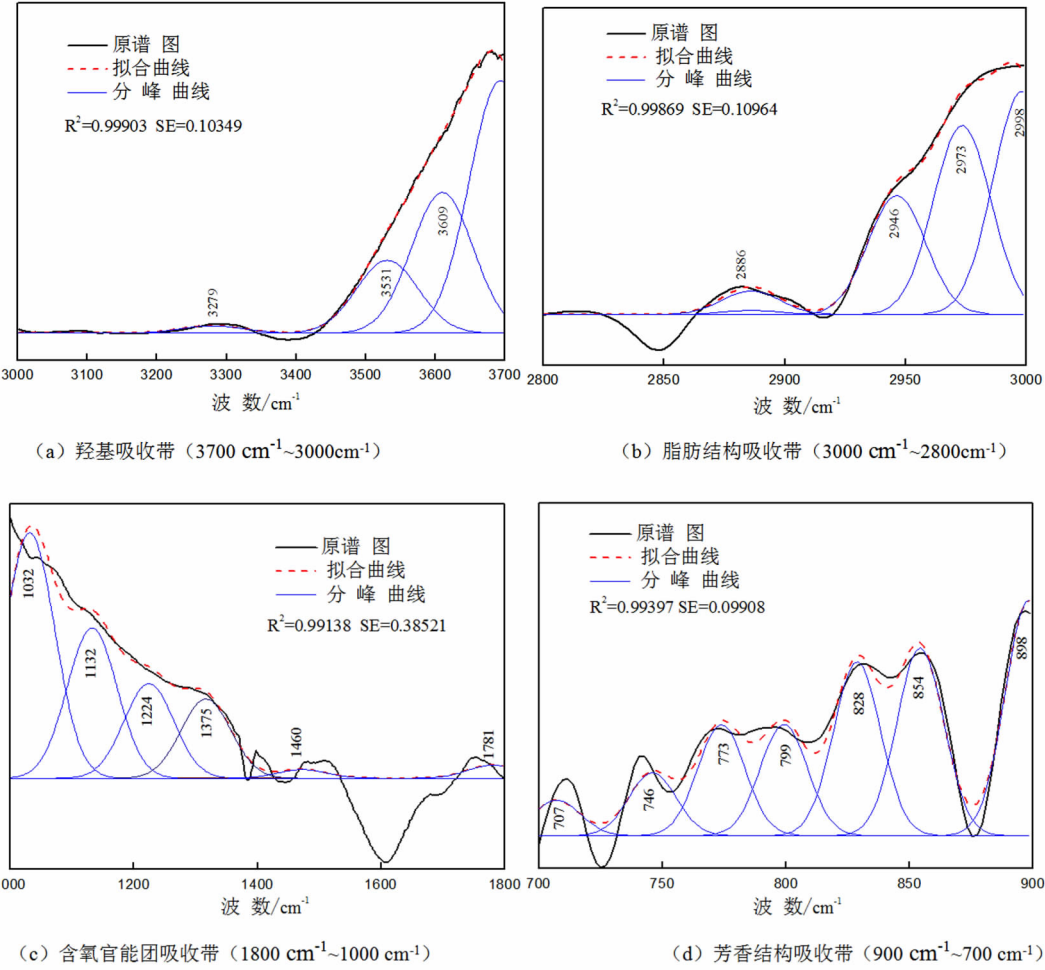


图 2 CYM-9 煤样红外光谱分峰拟合图

(a)羟基吸收带($3700\text{cm}^{-1} \sim 3000\text{cm}^{-1}$)(b)脂肪结构吸收带($3000\text{cm}^{-1} \sim 2800\text{cm}^{-1}$)；
(c)含氧官能团吸收带($1800\text{cm}^{-1} \sim 1000\text{cm}^{-1}$)(d)芳香结构吸收带($900\text{cm}^{-1} \sim 700\text{cm}^{-1}$)

Figure 2 Peak curves-fitting FTIR spectrum of CYM-9 coal sample

2.1.2 FTIR 结构参数计算 为了分析长焰煤的大分子结构,确定煤的基本结构参数(如芳氢率、氢碳原子比、芳碳率及脂肪烃支链长度等)至关重要。

(1)芳氢率(f_{ar}^H)是表征芳香化合物的氢原子百分比^[18]。在计算时,假设煤中只含有芳香氢和脂肪氢两种,脂肪氢用脂肪结构吸收带($3000 \sim 2800\text{cm}^{-1}$)面积来表示,芳香氢用芳香结构吸收带($900 \sim 700\text{cm}^{-1}$)面积来表示,计算公式如下:

$$f_{ar}^H = \frac{H_{ar}}{H} = \frac{A(900 \sim 700\text{cm}^{-1})}{A(900 \sim 700\text{cm}^{-1}) + A(3000 \sim 2800\text{cm}^{-1})} \tag{1}$$

式中: H_{ar} 为芳香化合物中氢原子数; H 为总氢原子数。

由此可算出 CYM-9 的芳氢率为 0.47。

(2)氢碳原子比(H/C)是煤中氢原子数与碳原子数之比。计算时,可通过元素分析数据按如下公式计算:

$$\frac{H}{C} = \frac{H_{ad}}{C_{ad}/12} \tag{2}$$

由此可算出, CYM-9 的氢碳原子比为 0.858。

(3)芳碳率(f_{ar}^C)是表征芳香化合物的碳原子百分比^[19]。计算时,假设煤中只有芳香碳和脂肪碳两种,考虑到煤中含有一定的羧基,对计算结果会造成误差,因此,采用如下公式计算芳碳率:

$$f_{ar}^C = \frac{C_{ar}}{C} = 1 - \frac{C_{al}}{C} = 1 - \left(\frac{H_{al}}{H} \times \frac{H}{C} \right) / \frac{H_{al}}{C_{al}} \tag{3}$$

$$\frac{H_{al}}{H} = \frac{A(3000 \sim 2800\text{cm}^{-1})}{A(3000 \sim 2800\text{cm}^{-1}) + A(900 \sim 700\text{cm}^{-1})} \tag{4}$$

式中: C_{al}/C 为脂肪碳占总碳比; H_{al}/H 为脂肪氢占总氢比; H/C 为氢碳原子比; H_{al}/C_{al} 为脂肪化合物中氢碳原子比,通常取经验值 1.8。

由此可算出, CYM-9 的芳碳率为 0.747。

(4)脂肪烃支链长度(CH_3/CH_2)是表征脂肪链长程度和支链化程度^[17]。计算时, CH_2 主要是脂肪链、脂环及芳烃侧链的直链部分; CH_3 主要是脂肪烃侧链、脂环侧链及芳烃侧链的支链部分。

$$\frac{CH_3}{CH_2} = \frac{A(2998\text{cm}^{-1}) + A(2946\text{cm}^{-1})}{A(2973\text{cm}^{-1}) + A(2886\text{cm}^{-1})} \tag{5}$$

由此可算出, CYM-9 的脂肪链长程度和支链化程度为 0.617。

可见, CYM-9 的芳氢率为 0.47,氢碳原子比(H/C)为 0.858,芳碳率(f_{ar}^C)为 0.747,脂肪烃支链长度(CH_3/CH_2)为 0.617。与文献[15]相比较,阜新长焰煤的芳氢率,芳碳率均较大,芳香烃较多,而脂肪烃较少;脂肪烃支链长度较小,芳香核缩合程度较大,芳香结构单元排列秩序较规则。

2.2 煤样 X 射线衍射结果与分析

对煤样 CYM-9 进行 X 射线衍射实验,衍射结果见图 3。

2.2.1 煤样灰分中无机矿物特征 经物相分析得出煤中主要含有以蒙脱石、伊利石、高岭石和石英为主的硅酸盐矿物,以方解石和白云石为主的碳酸盐矿物及一些黄铁矿等硫化物。

2.2.2 XRD 微晶结构参数计算 经 X 射线衍射分析可以得到具体(002)和(100)衍射峰的图谱,由衍射角和半峰宽可以计算出微晶结构参数 d_{002} 、 La 、 Lc 和 N ^[18]。根据布拉格方程(1)计算得到面间距 d_{002} ,根据谢乐公式(2)、(3)计算得到层片直径 La 和层片堆砌高度 Lc ,根据公式(4)计算出芳香堆砌层数 N ,见表 3。

$$d_{002} = \frac{\lambda}{2\sin\theta_{002}} \tag{6}$$

$$La = \frac{k_1\lambda}{\beta_{100}\cos\theta_{100}} \tag{7}$$

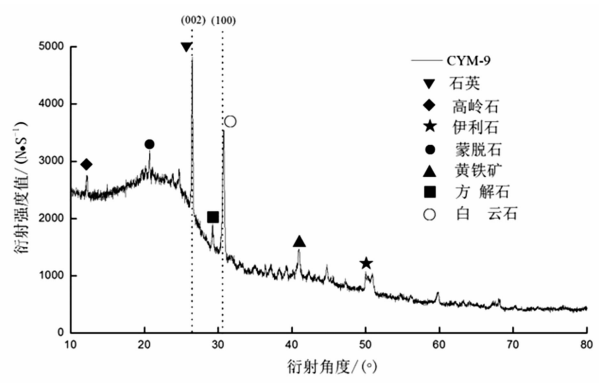


图 3 CYM-9 煤样的 X 射线衍射图谱

Figure 3 XRD spectra of CYM-9 coal samples

$$Lc = \frac{k_2 \lambda}{\beta_{002} \cos \theta_{002}} \tag{8}$$

$$N = Lc/d_{002} + 1 \tag{9}$$

式中： λ 为 X 射线波长， θ_{002} 、 θ_{100} 分别为 (002)、(100) 两峰的峰位对应的衍射角， β_{002} 、 β_{100} 分别为两峰所对应的半峰宽值， k_1 、 k_2 为微晶形状因子， $k_1=1.84$ 、 $k_2=0.94$ 。

表 3 CYM-9 煤样的 XRD 结构参数

Table 3 XRD structural parameters of CYM-9 coal samples

煤样	$2\theta_{002}$	$2\theta_{100}$	d_{002}/nm	La/nm	Lc/nm	N
CYM-9	23.29	32.23	0.3816	1.0150	1.2459	4.26

2.2.3 XRD 微晶结构参数分析 图 1 中有两个明显的峰，分别对应 002 峰和 100 峰， 2θ 分别为 23.29° 和 32.23° 。煤是由若干芳香环层片以不同的平行程度堆砌而成，002 峰是 002 带和 γ 带叠加所致，002 带与芳香环层间的堆砌程度有关，即芳香核缩聚所形成的芳香微晶， γ 带与缩聚芳香核相连的脂肪烃支链、各种官能团和脂环烃有关^[19]，即支链微晶，由公式 (6) 和 (8) 计算出煤样的层片堆砌高度 Lc 为 1.2459nm ，层面间距 d_{002} 为 0.3816nm 。100 峰与芳香环的缩合程度有关，即芳香碳网层片的直径大小，由公式 (7) 计算出煤样的层片的直径 La 为 1.0150nm 。长焰煤属于低变质程度煤，与其他变质程度较高的煤相比较，其脂族结构增多，芳香结构减少，芳香环的缩合程度较差，芳香层片在空间上排列秩序比较不规则，这与前人的研究结果一致^[9]。

2.3 煤样单轴压缩实验结果与分析

图 4 表示 5 个煤样的应力-应变曲线，煤样在单轴压缩破坏过程中，经历了如下四个阶段：(1) 压密阶段：煤样起初受到轴向应力，内部的微裂隙和微孔洞逐渐闭合， $\sigma\epsilon$ 曲线呈上凸形，即曲线的斜率随着应变的增大而增大；(2) 弹性变形阶段：随着载荷的继续增加，煤样中的微裂隙基本闭合，理论上 $\sigma\epsilon$ 曲线基本呈直线形，该阶段煤样的变形曲线比较曲折，主要因为煤本身的非均匀性；(3) 屈服阶段：原有裂隙的闭合不明显，煤内的裂隙发生和扩展使得煤样产生非弹性的不可逆变形， $\sigma\epsilon$ 曲线呈上凸形，该阶段煤样由体积压缩转变为扩容，轴向应变和体积应变速率迅速增加，直至达到峰值强度；(4) 峰后应变软化阶段：当达到峰值强度以后，煤样内部裂隙快速发展，交叉且相互联合形成宏观断裂面，内部结构被破坏，但煤体基本保持整体块， $\sigma\epsilon$ 曲线呈下凹形。

在单轴压缩过程中煤样的应力应变曲线发生了一定的变化，从应力-应变曲线得到煤样的力学参数，如表 4 所示。煤样的峰值强度在 $7.5\sim11.5\text{MPa}$ 之间波动，平均峰值强度为 9.24MPa ；达到峰值强度时平均应变值为 23.58×10^{-3} ；煤样的弹性模量能体现出煤样抵抗弹性变形的能力，在 $270\sim550\text{MPa}$ 之间

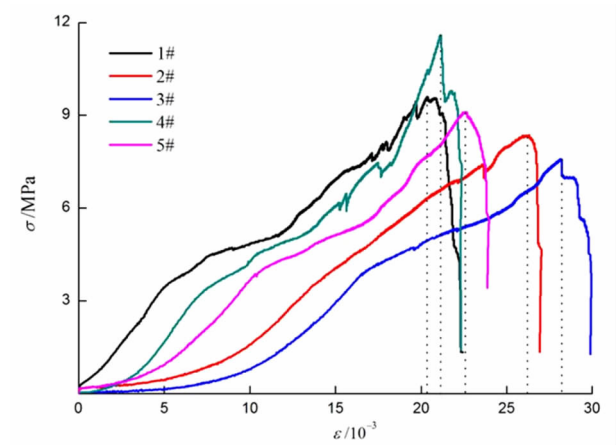


图 4 煤样应力-应变曲线

Figure 4 Stress-strain curve of coal samples

波动,平均弹性模量为 405MPa。

表 4 煤样基本参数和力学参数

Table 4 The basic parameters and mechanical parameters of coal samples

试件编号	基本参数		力学参数		
	直径/mm	高度/mm	峰值强度/MPa	应变(10 ⁻³)	弹性模量/MPa
1 #	46.9	98.8	9.59	19.68	487
2 #	48.8	102.8	8.35	26.27	318
3 #	48.8	102.8	7.58	28.17	270
4 #	49.2	103.4	11.57	21.16	546
5 #	46.5	100.6	9.11	22.63	402
平均值	48.0	101.6	9.24	23.58	405

3 结论

通过对阜新长焰煤进行 X 射线衍射和红外光谱实验,分析煤的矿物质成分、微晶结构参数和基本结构参数,得到如下结论:

(1)与抚顺长焰煤相比较,阜新长焰煤芳氢率,芳碳率均较大,芳香烃较多,而脂肪烃较少;脂肪烃支链长度较小,芳香核缩合程度较大,芳香结构单元排列秩序较规则;

(2)与其它变质程度较高的煤相比较,阜新长焰煤脂族结构较多,芳香结构较少,芳香环的缩合程度较差,芳香层片在空间上排列秩序较不规则;

(3)阜新长焰煤的力学特征大致相似,峰值强度在 7.5~11.5MPa 之间波动,弹性模量在 270~550MPa 之间波动,但其力学强度高于抚顺长焰煤的力学强度。

参考文献:

[1] 曾凡桂,谢克昌. 煤炭学报,2004,29(4):443~447.
[2] IGlesias M J, Delrio J C, Laggoun-defarge F, et al. J Anal Pyrolysis, 2002, 62(1): 1~34.
[3] Wang S Q, Tang Y G, Schobert H H, et al. J Anal Pyrolysis, 2013, 100(3): 75~80.
[4] 盛世雄, 译. X 射线衍射技术(多晶体和非晶质材料). 北京: 冶金工业出版社, 1986.

[5] Geng W H, Nakajima Tsunenori, Takanashi Hirokazu, et al. Fuel, 2009, 88(1): 139~144.

[6] Lu L, Sahajwalla V, Kong C, et al. Carbon, 2001, 39(12): 1821~1833.

[7] 罗隕飞, 李文华. 煤炭学报, 2004, 29(3): 338~341.

[8] 李霞, 曾凡桂, 王威, 等. 燃料化学学报, 2016, 44(7): 777~783.

[9] 李霞, 曾凡桂, 王威, 等. 煤炭学报, 2015, 40(12): 2900~2908.

[10] 姬新强, 要惠芳, 李伟. 煤炭学报, 2016, 41(8): 2050~2056.

[11] 郑庆荣, 曾凡桂, 张世同. 煤炭学报, 2011, 36(3): 481~486.

[12] 朱红, 李虎林, 欧泽深, 等. 中国矿业大学学报, 2001, 30(4): 366~370.

[13] 张莉, 曾凡桂, 向建华. 燃料化学学报, 2013, 41(11): 1295~1302.

[14] 冯杰, 李文英, 谢克昌. 中国矿业大学学报, 2002, 31(5): 362~366.

[15] 石开仪, 陶秀祥, 李志, 等. 高分子通报, 2013, 25(3): 61~66.

[16] Ibarra J V, Munoz E, Moliner R. Org Geochem, 1996, 24(6/7): 725~735.

[17] Ibarra J V, Moliner R, Bonet A J. Fuel, 1994, 73(6): 918~924.

[18] 徐龙君, 鲜学福, 刘成伦, 等. 重庆大学学报(自然科学版), 1999, 22(4): 23~27, 33.

[19] 苏现波, 司青, 王乾. 河南理工大学学报(自然科学版), 2016, 35(4): 487~492.

Analysis the Structural Characteristics of Fuxin Long Flame Coal Based on FTIR and XRD Experiments

AN Wen-bo^{1*}, WANG Lai-gui¹, LIU Xiang-feng¹, PAN Ji-wei¹, LI Xi-lin²
(1. College of Mechanics Engineering, Liaoning Technical University, Fuxin 123000, China;
2. College of Civil Engineering, Liaoning Technical University, Fuxin 123000, China)

Abstract:In order to study the macromolecule structure of Fuxin long flame coal, the CYM-9 coal sample which is closest to the average value was selected as the experimental sample by measuring the industrial analysis and elemental analysis of 12 coal samples, the Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR), X-ray diffraction (XRD) and uniaxial compression experiments were used to study coal samples, the microcrystalline structure parameters and mechanical properties of coal were further analyzed by comparing with the characteristics of Fushun long flame coal. The results show that the basic structure parameters of CYM-9 coal sample were as follows: aromatic hydrogen ratio (f_{ar}^H) was 0.47, hydrogen/atomic ratio (H/C) was 0.858, aromatic carbon ratio (f_{ar}^C) was 0.747, aliphatic hydrocarbon branch length (CH_3/CH_2) was 0.617, compared with Fushun long flame coal structure, its aromatic carbon ratio was larger, aromatic nucleus condensation degree was bigger, aromatic structure unit arrangement order was more regular;The XRD pattern pf coal samples had two peaks with 002 peak and 100 peak,the layer spacing(d_{002}) was 0.3816 nm, the stacking height (L_c) was 1.2462 nm, the layer diameter (L_a) was 1.0136 nm, and the number of aromatic piles (N) was 4.26;The average peak strength of the coal sample was 9.24MPa,the average strain value was 23.58×10^{-3} , and the average elastic modulus was 405MPa.

Key words:Fuxin long flame coal; X-ray diffraction; Fourier transform infrared spectroscopy; Coal macromolecule structure