

# 采用 Agilent ExoScan 4100 手持式 FTIR 光谱仪确认煤的质量

## 应用简报

### 材料

### 作者

Alan Rein<sup>1</sup>

Frank Higgins<sup>1</sup>

Donald Inglis<sup>2</sup>

安捷伦科技公司

<sup>1</sup>丹伯里，康涅狄格州，美国

<sup>2</sup>爱丁堡，英国



### 前言

在全球经济中，煤是一种基础商品。它是一种复杂的物质，其总体成分与产地有关。煤化进程受到地质学和矿物学条件的影响，造就了煤的不同质量和杂质分布。因此，工业上往往使用多种理化测试来确定煤的质量和成分组成。

煤的价值与其具体用途息息相关，包括从简单提供热量到作为一种起始材料合成化学品等一系列应用。具体应用中煤的价格直接与其质量相关，因此检验其成分组成至关重要。煤的客户要求要保证他们接收到的煤具有预期质量，并且煤中没有故意掺入廉价的次级煤或其它材料。例如，在世界上的某些地方，曾发生为增加重量，在装运的煤中加入黑色岩石或沥青碎片的事件。



Agilent Technologies

在本文中，我们展示了配备漫反射采样技术的 Agilent 4100 ExoScan FTIR 如何辨别质量合格的煤和故意掺入低质量材料的煤。该手持式 FTIR 系统的轻便性可使这些测量在现场实时进行。

### 手持式 FTIR 在煤分析应用中的价值

虽然 FTIR 光谱技术在煤研究和分析中已运用多年，但直到最近，该强大的技术才应用于非实验室环境。便携式 FTIR 在煤分析中的优势包括：

- 可在现场、装货点或收货点对煤进行快速分析
- 可以实时检测到掺杂的、不纯的，或其它不合格的材料，并当场作出接收还是拒收的决定
- 可以确定所装运的煤的成分和质量，并根据测定的真实参数付款
- 可以测定出煤的含水量，以及煤中的无机和有机成分，准确了解煤的质量
- 可以查明当地煤化作用的程度，为煤的探测和/或采矿作业提供实时指标



图 1a. 可现场使用的手持式 Agilent 4100 ExoScan FTIR 系统。当用于煤的现场分析时，可以使用附带的 PDA 来执行所有仪器功能。仅需简单触摸屏幕命令即可启动用于煤质量验证的自动化机载方法，结果可以清晰显示在 PDA 上。

无论是在实验室，还是在现场的分析应用，安捷伦的 4100 ExoScan 手持式 FTIR（图 1a 和 1b）都非常适合于煤分析。设计的电池供电系统可使其手持移动使用，或者在实验室分析应用中使之成为一款高效的台式 FTIR 光谱仪。



图 1b. 安放在扩充槽中的 Agilent 4100 ExoScan FTIR 系统可作为固定位置使用的台式系统

虽然有许多不同的采样技术可用于 4100 ExoScan 系统，但对于煤的测定，高效漫反射采样接口是最理想的技术。该系统拥有所需的性能和耐用性，可在苛刻的环境中提供检测结果，软件使用简单，即使是那些对 FTIR 不熟悉的非专业用户也可提供满意的检测结果。

### 材料与方法

来自东欧的 15 个煤样品，采用配备了漫反射采样接口的 4100 ExoScan 系统进行测定。对每份煤样品进行研磨或粉碎为颗粒 (2-3 mm) 状态，提高其均匀性。对原煤进行测定，每张样品光谱的采集时间不到 3 min（记录了累加 330 次的干涉图，分辨率  $16 \text{ cm}^{-1}$ ）。我们已知一些煤样品中混入了不同产地的低质量煤。本实验的目标是确定 FTIR 测量是否可以将更高质量和更高价值的煤与那些已知从低质量煤产区采来的煤区分开来。

## 结果与讨论

判断煤是否合格的首要指标是煤样品中硅酸盐矿物的含量。所有在  $1216\text{ cm}^{-1}$  的 IR 吸收带（图 2）源自煤样品中的长石硅酸盐包含物。该谱带在已知源于高质量煤产区的煤中并不存在。因此，如果煤光谱中含有较多的来自长石硅酸盐的谱带，我们即可认为该煤的质量较低，或者它来自差煤产区。

测定了该长石  $1216\text{ cm}^{-1}$  的吸收带对比其它硅酸盐在该区域吸收带的峰高比。

较低质量的煤（即样品 12–14）与较好质量的煤相比，展现了明显更高的吸收比率（图 3）。对于这些煤样品，该测量值是一个评价煤质量的主要指标，因为它对于较高质量的煤没有出现假阳性，而对于低质量的煤也没有出现假阴性。

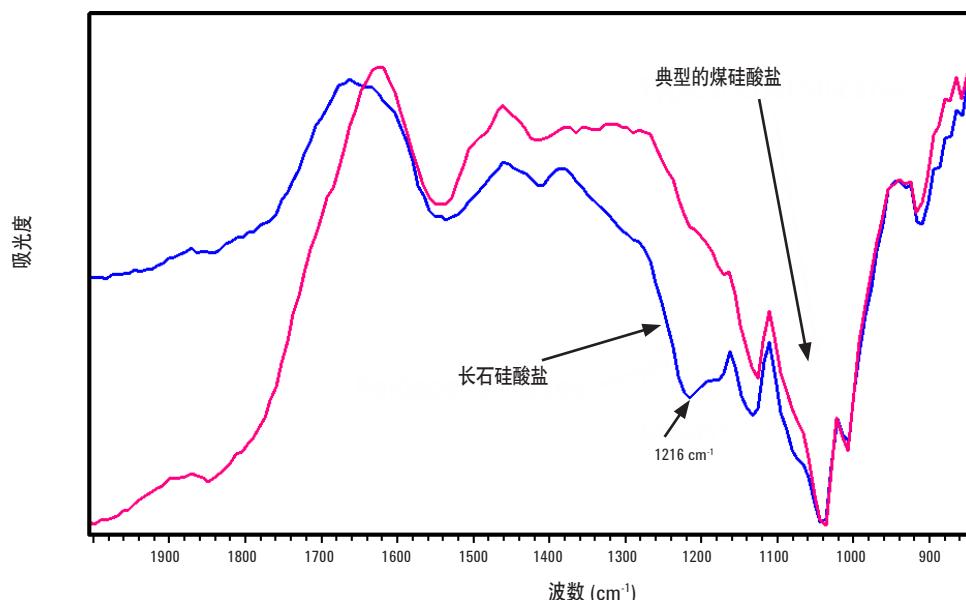


图 2. 较低质量煤的 IR 光谱（蓝色）与较高质量煤的 IR 光谱（红色）的比较。较低质量煤样品在  $1216\text{ cm}^{-1}$  处存在长石类硅酸盐吸收

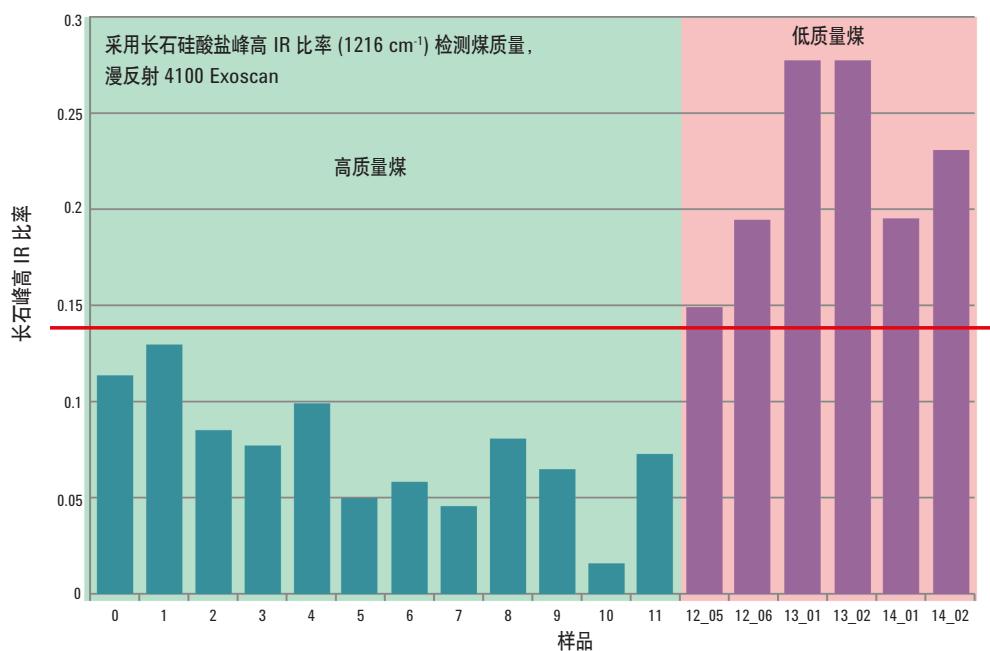


图 3. 用于“煤质量”测定的 IR 比率说明了煤中掺加的硅酸盐（即长石）和含石英矿物质的相对量。样品 12-14 已被鉴定为较低质量煤。红线是针对低质量煤设定的阈值，没有假阳性或假阴性结果。样品 0-11 是 2-3 次测量值的平均值

除了使用长石比率这一煤质量指标，煤样品的漫反射谱图也在其 IR 光谱的“碳氢化合物”区域展示出脂肪类物质 CH 基团伸缩振动强度差异（图 4）。煤中的碳氢化合物主要是有机物，是煤中实际上燃烧并提供热量或能量的成分。碳氢化合物的 IR 区域会受到源自煤中其它成分羟基 (OH) 吸收的干扰，因此，采用单一峰面积或峰高测量值很难测定它的含量。因此，我们测定了碳氢化合物在  $3000\text{-}2800\text{ cm}^{-1}$

吸收带的峰面积，并且计算了它与  $3350\text{-}2800\text{ cm}^{-1}$  吸收带总峰面积的比率。采用该峰面积比率方法可有效消除羟基吸收的干扰。

通过设定质量合格煤的阈值，采用碳氢化合物峰面积比率来确定煤样品的质量（图 5，红线）。样品 12-14 已经受到客户有关煤质量低劣的投诉，并且其碳氢化合物水平明显在

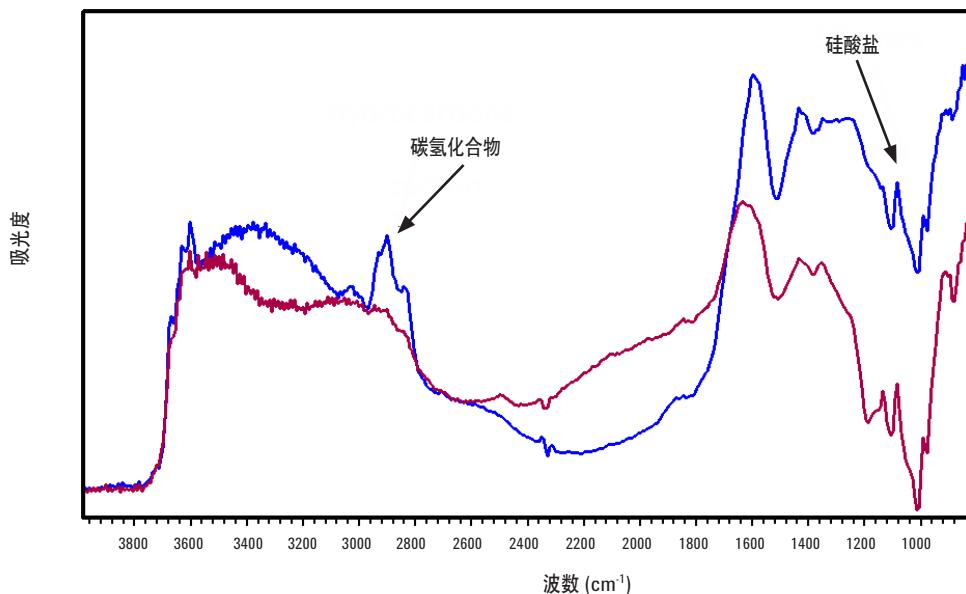


图 4. 煤样品的 IR 光谱表明了强碳氢化合物吸收带（蓝色）与较弱碳氢化合物吸收带（红色）

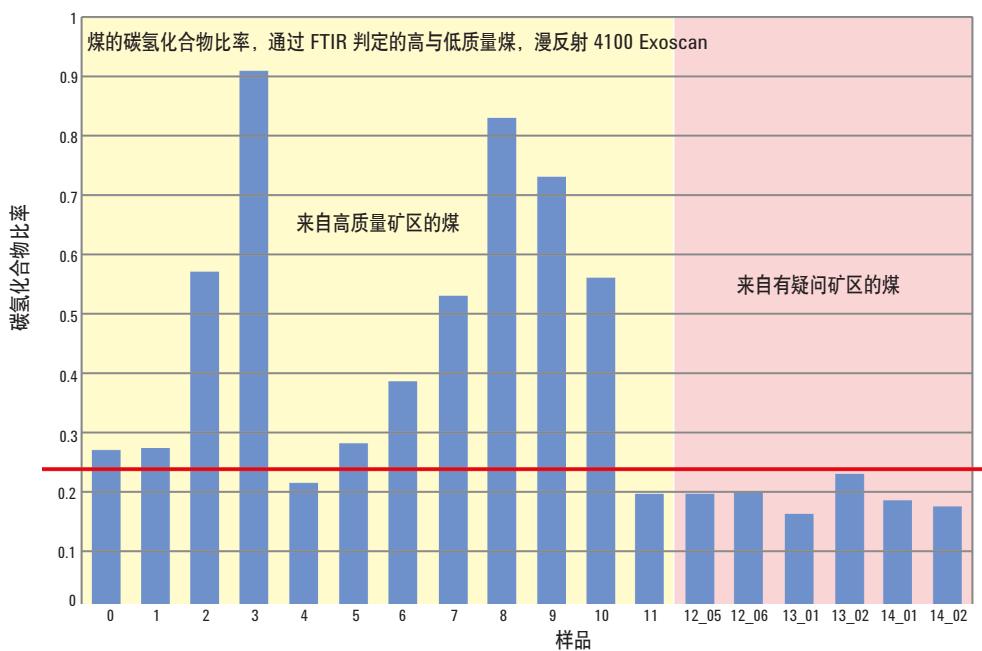


图 5. IR 比率方法提供了煤中碳氢化合物的相对量。样品 4 和 11-14 已被鉴定为低碳氢化合物含量煤。样品 0-11 是 2-3 次测量值的平均值

阈值以下。一些样品，如 4 和 11，来自高质量煤产区，但却有较低的碳氢化合物含量。如前所述，煤的组成是不均匀的；可以预期采自矿区不同地点的煤样品会有不同的碳氢化合物含量。例如，样品 0–10 来自主矿区，而样品 11 来自矿区边缘。这表明可以直接采用碳氢化合物测量值来进一步区分单个矿区内的煤的不同质量。我们可以采用碳氢化合物值将来自同一煤矿或矿区的优质煤与标准煤区别开来。样品 0、1 和 5 具有临界的低碳氢化合物含量。

碳氢化合物测量值还采用了 PLS 分类（数值范围 0–1）方法进行建模，结合了碳氢化合物 IR 峰面积比率。虽然碳氢化合物比率测量值用于进一步比较煤样品间的质量，但它并非主要测定参数。长石 IR 比率的范围也是 0–1，1 表明存在很高的长石污染，而 0 表明煤的质量非常理想。使用标准版 Agilent MicroLab 软件设置阈值，并且显示彩色的警告，以指示样品的质量。例如，样品 13 的红色警告（图 6）指示有高含量的长石硅酸盐和低含量的碳氢化合物成分。样品 1 的黄色警告（图 7）表明煤的质量处于临界状态，但还是可以接受的。如果长石硅酸盐成分的量不高于阈值，并且碳氢化合物成分的量高于阈值，即可认为这批煤具有较高质量，如样品 10（图 8）。



图 6：煤质量判定方法表明样品 13 不合格，无论是长石比率“煤质量”，还是脂肪族 HC 含量测定（红色 – 质量不合格）



图 7：煤质量判定方法表明，样品 1 刚好通过了长石比率“煤质量”和碳氢化合物含量测定（黄色 – 略可接受）



图 8：煤质量判定方法表明，样品 10 完全通过了长石比率“煤质量”和碳氢化合物含量测定（绿色 – 合格）

## 结论

使用配备了漫反射采样接口的 Agilent 4100 ExoScan 手持式 FTIR 系统成功测定了东欧煤的质量，并且可以确定煤中是否掺入低质量材料或受到低质量材料的污染。我们开发了一个可以明确分辨这种特定煤质量的方法，首先根据其硅酸盐含量，然后再根据其碳氢化合物含量来评判。该方法为用户提供了彩色的警告，可以快速准确地指示煤样品的质量。

我们还可以根据其它煤产区的具体要求另外创建方法。在所有情况下，手持式 FTIR 均可以让质控人员将测定从实验室移到现场（煤开采、装运或收货的地点）进行，并且对煤的质量做出及时、明智的判定。因此，4100 ExoScan FTIR 系统为煤生产商及其客户提供了潜在的和显著的经济效益。

[www.agilent.com/chem/cn](http://www.agilent.com/chem/cn)

安捷伦不对本文可能存在的错误或由于提供、展示或使用本文所造成的间接损失承担任何责任。

本文中的信息、说明和技术指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司, 2013

2013 年 10 月 24 日, 中国印刷

出版号: 5991-2391CHCN

