

Advantages of X-ray Fluorescence Spectroscopy in Analysis of Coal Ash Composition

Ziyun Liao Jing Yin Lili Wei

Quality Inspection Center, Manufacturing Management Department, Baowu Group Echeng Iron and Steel Co., Ltd., Ezhou, Hubei, 436000, China

Abstract

Coal ash composition analysis serves as a critical metric for evaluating coal quality, predicting environmental impacts, optimizing coking processes, and guiding coal blending strategies. Traditional methods like atomic absorption spectroscopy (AAS) have been predominantly used in coal ash analysis, yet they suffer from time-consuming procedures, complex workflows, and excessive reagent consumption. In recent years, X-ray fluorescence spectroscopy (XRF) has gained widespread adoption in coal quality assessment due to its broad elemental analysis range, high efficiency, simplified sample preparation, and advanced automation. These advantages have driven the effective application of XRF in coal ash composition analysis, meeting practical demands. This study aims to provide an overview of XRF technology, highlight its advantages in coal ash analysis, and explore specific application scenarios for reference by relevant professionals.

Keywords

analysis of coal ash composition; X-ray fluorescence spectrometry; application advantages

煤灰成分分析中 X 射线荧光光谱法的应用优势

廖子云 尹静 魏丽丽

宝武集团鄂城钢铁有限公司制造管理部质检中心, 中国·湖北·鄂州 436000

摘要

煤灰成分分析是评估煤炭品质、预测环境影响、指导配煤方案调整以及优化炼焦工艺的核心指标。在以往工作中煤灰成分分析主要依赖原子吸收光谱法等方法, 存在耗时冗长、流程烦琐、试剂消耗大的局限性。近些年, X射线荧光光谱法在煤质分析中得到了广泛的应用, 分析元素范围广, 效率高, 样品前处理简单, 自动化程度高, 这些应用优势推动着X射线荧光光谱法在煤灰成分分析中的高效应用, 满足工作需求。鉴于此, 开展本文的研究工作, 主要概述X射线荧光光谱法, 分析该方法在煤灰成分分析中的应用优势, 探究具体的应用情况, 以供相关人员参考。

关键词

煤灰成分分析; X射线荧光光谱法; 应用优势

1 引言

炼焦煤催化指数是评价煤在炼焦过程中促进碳质结构有序化能力的量化指标, 主要反映煤中天然存在的矿物质(如碱金属、碱土金属、铁等)对结焦过程的催化作用程度。该指数可以根据分析测定的煤灰成分按照比例公司计算得到, 所以准确的煤灰成分直接关系到催化指数的真实性和准确性。X 荧光光谱法的合理应用, 实现传统煤灰成分分析的有效创新, 具有分析元素种类多、精度高、范围广等优质特性, X 荧光光谱法成为了分析物质组成的常用方法。在具体应用中, 做好样品前处理, 开展仪器分析与校准, 提高检测质量。

【作者简介】廖子云(1983-), 男, 中国湖北鄂州人, 本科, 高级工程师, 从事化学分析研究。

2 X 射线荧光光谱法的概述

X 射线荧光光谱法的基本原理是, 当高能 X 射线照射样品时, 样品中原子的内层电子会被激发溢出, 形成电子空穴。外层电子跃迁至内层空穴时, 会释放出具有特定能量的特征 X 射线。不同元素的原子结构存在差异, 其特征 X 射线的能量和波长具有唯一性, 据此可实现元素的定性分析。而特征 X 射线的强度与样品中对应元素的含量呈正相关。通过与标准样品的强度对比, 结合基体校正模型, 可完成定量分析。根据分光和探测原理的不同, 应用于煤灰分析的 X 射线荧光光谱法主要分为两类。一种是波长色散型, 利用分光晶体根据波长差异对荧光进行色散, 再由探测器接收; 该方法具有极高的分辨率和探测精度, 擅长复杂基体中相邻元素的精确区分, 但仪器结构复杂, 造价昂贵^[1]。另一种是能量色散型。直接使用高性能半导体探测器测量荧光光子的能

量, 并进行区分。仪器结构紧凑, 无需复杂的光学系统, 且可以同时快速分析多元素, 维护简便, 成本相对较低。

3 煤灰成分分析中 X 射线荧光光谱法的应用优势

3.1 分析元素范围广

煤灰成分具有复杂性的特点, 在分析工作中选择的检测方法需要同时满足主量、次要和微量元素的分析要求。而 X 射线荧光光谱法恰好能满足这一要求, 可实现全元素覆盖, 分析元素范围广。煤灰中二氧化硅、氧化铁、氧化铝、氧化钙的含量通常占比超过 80%, 使用 X 射线荧光光谱法, 通过熔融法精准测定含量相对误差可控制在 0.5% 以内^[2]。而对于次要元素, 例如氧化钠、氧化钾等, 其含量在 0.5% ~ 3%, 会严重劣化焦炭热态性能、侵蚀焦炭结构降低其机械强度。传统化学法中, 使用火焰光度法测定氧化钠和氧化钾, 步骤烦琐, 而且容易受到干扰。而 X 射线荧光光谱法可在同一次检测中完成上述元素的同步分析, 大幅提升了检测效率。在微量元素方面, 煤灰中的砷、铅、铬等重金属元素含量虽低于 0.1%, 但对环境保护以及职业健康有一定危害。X 射线荧光光谱法对微量元素的检出限可低至 ppm 级。而原子吸收分光光度法, 虽可测定微量重金属, 但一次只能检测一种元素, 无法实现多元素同步分析。

3.2 分析高效性与快速性

在煤灰成分分析中, 传统的化学分析法还需要对样品进行酸消解、分离、掩蔽等一些复杂的前处理。而且一种方法仅针对单一或少数几种元素, 完成煤灰中硅、铝、铁、钙等多种成分全分析往往需要 2~3 个工作日。而 X 射线荧光光谱法的应用可以缩短时间, 提高工作效率。无论是压片法还是熔融法, 样品制备完成后放入仪器舱体, 仅需一次照射, 便可在数 10 秒至数分钟内同步获得所有可测元素的定性及定量结果。而且 X 射线荧光光谱法的检测流程可实现

高度标准化, 检测结果无需复杂的人工计算, 仪器软件可直接输出各元素的氧化物含量, 减少了人工计算的误差和时间成本, 进一步提升了批量检测的效率。

3.3 样品前处理简便, 基体干扰可控

与传统的化学分析法相比, X 射线荧光光谱法的样品制备相对简单, 具有非破坏性的特点。一种是压片法, 将研磨均匀的煤灰粉末与粘结剂混合, 在高压下压制成表面光洁致密的圆片, 该方法操作快捷, 可以更好地保留挥发性元素, 是日常分析中的常用方法。一种是熔融法, 将煤灰样品与助熔剂高温熔融制成均匀的玻璃片, 可以有效消除样品中的矿物效应和颗粒度效应, 获得更高的分析准确度^[3]。而传统化学分析法为破坏性检测, 样品在消解、滴定的过程中被完全消耗, 无法留存复查。

3.4 自动化程度高

X 射线荧光光谱法具有自动化程度高的应用优势。相关仪器配备了智能化的操作软件, 内置了煤灰分析的专用校准曲线和基体校正模型。操作人员仅需要完成样品前处理和进样, 仪器便可自动完成激发、检测、数据计算和结果输出, 无需手动调整检测参数^[3]。而化学分析法对人员的专业技能要求极高。需要他们有丰富的积累经验, 人为操作失误, 会导致结果偏差。

3.5 出色的准确性与精密度

X 射线荧光光谱法具有出色的准确性和精密度。通过成熟的基体校正技术和标准化流程, 可保障检测数据的可靠性, 完全满足行业标准的精度指标。在相关标准规定中, 煤灰中主量元素的允许误差需要控制在 0.5% 以内, 次要元素允许误差控制在 0.2% 以内。X 射线荧光光谱法采用优化样品制备和有效校正基体效应的方法, 其分析结果与标准煤灰物质的标准值高度吻合, 误差均在可接受的不确定度范围内。X 射线荧光光谱法煤灰分析核心技术参数表详见表 1。

表 1 X 射线荧光光谱法煤灰分析核心技术参数表

项目	具体参数	适用场景
可检测元素范围	周期表 Be-U (覆盖煤灰全组分)	主量、次要、微量元素分析
主量元素检出精度	相对误差 ≤ 0.5% (绝对误差)	精准定量分析
微量元素检出限	Cr:0.5ppm、Pb:0.3ppm、As:0.2ppm	重金属污染筛查
样品前处理方式	压片法、熔融法	压片法用于快速筛查, 熔融法用于精准检测
单样品检测时间	3-5 分钟 (全元素检测)	批量样品检测
样品消耗量	压片法 2-5g/样, 熔融法 0.5-1g/样	常规检测、稀缺样品检测
基体校正方法	经验系数法、基本参数法	复杂基体煤灰样品

4 X 射线荧光光谱法在煤灰成分分析中的具体应用

4.1 样品的制备

样品制备是 X 射线荧光光谱法分析过程中最关键且最容易引入误差的步骤, 目的是获得均匀、稳定、有代表性的样品表面。首先, 原煤需要在 815℃ 下完全灰化, 以除去

所有有机质和挥发分, 获得化学成分稳定的煤灰。灰化是否彻底直接影响后续校准的准确性。然后选择恰当的前处理方法, 包括压片法和熔融法。压片法快速简便, 能保留挥发性元素, 不过可能会存在矿物效应和颗粒度效应, 适合日常大批量快速检测、生产控制和工艺监控。而熔融法可以彻底消除矿物和颗粒度效应, 基体均匀一致, 准确度最高, 校准曲

线更稳定。缺点是流程耗时成本高，可能导致挥发性元素损失。因此可根据需求合理选择。

4.2 仪器分析与校准

首先，建立标准曲线，这是定量分析的关键，必须使用一系列化学成分覆盖范围广，且已知准确值的煤灰国家标准物质来建立校准曲线^[4]。仪器软件会根据标准物质的光谱强度和已知浓度，通过数学模型建立各元素的校准工作曲

线。煤灰中各元素间存在相互吸引或增强荧光的基体效应。相关仪器设备通过软件内置的数学模型进行自动校正。例如，硅对铝的谱线有吸收，而铁对钙的谱线可能有增强效应，这些需要在建立校准曲线时，通过算法予以补偿。而后将制备好的样品片放入样品仓中，根据预设程序进行自动测量。开展多元素同步测定，在几分钟至十几分钟内即可获得可测元素含量。

表 2 压片法与熔融法的优缺点和适用场景

方法	主要步骤	优点	缺点	适用场景
压片法	将煤灰研磨后与粘结剂混合，在高压下压制成片。	快速、简便；能保留挥发性元素。	可能存在矿物效应和颗粒度效应；对于轻元素精度稍逊。	日常大批量快速检测、生产控制、工艺监控。
熔融法	将煤灰与助熔剂按比例混合，在高温下熔融，浇铸成均匀玻璃片。	彻底消除矿物和颗粒度效应；基体均匀一致，准确度最高；校准曲线更稳定。	流程耗时、成本高；可能导致挥发性元素损失。	仲裁分析、标准物质定值、研究开发、建立高精度校准曲线。

4.3 对优化炼焦工艺的应用

通过灰成分的分析建立催化指数计算模型，可以指导炼焦工序优化配煤方案，如催化指数较高的煤可以改善弱粘性煤的结焦性能，在保证焦炭质量的前提下，降低优质炼焦煤配比，从而降低生产成本。同时可以用来调控焦炭质量，适量的催化成分能够促进胶质体流动性，增强煤粒间结合，提高焦炭抗碎强度，还可以促进焦炭微晶结构有序排列，形成致密的碳结构，降低热反应性。但是，过高的催化指数可能导致焦炭过度收缩产生微裂纹，降低其耐磨强度，这点需要注意。

4.4 煤炭清洁利用与环保监测中的应用

在灰渣无害化处置中，也可以应用 X 射线荧光光谱法，检察灰渣中重金属元素的含量情况。如果总量没有超标，判定为一般工业固废，直接用于填埋或资源化利用。同时可以推动灰渣资源化利用，如高硅铝灰适用于生产水泥、陶粒；高钙灰可作土壤改良剂。

5 结语

综上所述，X 射线荧光光谱法应用于煤灰成分分析中，具有分析元素范围广、速度快、精度高、自动化程度高等一系列应用优势。在优化炼焦配煤工艺、和煤炭清洁化利用等多个方面都能得到广泛应用。为煤炭资源的合理利用和环保监测提供支持，从而促进行业的安全高效和绿色发展。

参考文献

- [1] 马克富, 龚婉莉. X射线荧光光谱技术发展现状及在煤质检测中的应用[J]. 中国矿业, 2024, 33(8): 218-224.
- [2] 刘立晓, 侯娇云. 煤灰成分分析及实验检测技术研究[J]. 内蒙古煤炭经济, 2025(6): 68-70.
- [3] 梁新燕. 煤灰成分分析及其应用[J]. 华北自然资源, 2021(4): 22-23.
- [4] 刘娜, 宋文丽, 周利琴. X荧光光谱法(压片法)在煤灰成分分析中的应用[J]. 宁夏电力, 2024(6): 85-90.
- [5] 任燕. X射线荧光光谱法在煤灰成分分析中的应用[J]. 石油石化物资采购, 2023(18): 94-96.