

# 净化沥青的傅里叶变换红外光谱分峰拟合定量分析

朱亚明<sup>1</sup>, 高丽娟<sup>1</sup>, 赵雪飞<sup>1\*</sup>, 吕君<sup>1,2</sup>

1. 辽宁科技大学先进煤焦化及煤资源高效利用工程研究中心, 辽宁 鞍山 114051
2. 齐齐哈尔大学化学与化学工程学院, 黑龙江 齐齐哈尔 161006

**摘要** 高温煤焦油沥青是人造炭材料的优质原料。为了获得高品质人造炭材料, 必须对原料沥青进行净化处理, 使得净化沥青具有合理的分子量分布、较高芳香缩合度和适宜的脂肪族侧链结构, 炭化后才能生成易于石墨化的趋于规整的碳微晶结构。分别以中温沥青和热聚合改性沥青为原料, 采用两种净化分离处理方法, 得到四种净化沥青(RP-1, RP-2, RP-3 和 RP-4)。以四种净化沥青的傅里叶变换红外光谱数据为基础, 结合分峰拟合数学方法, 准确获得了净化沥青的芳香性指数(Iar)、支链化指数(CH<sub>3</sub>/CH<sub>2</sub>)、OH 官能团的存在形式及分布情况和其他基础官能团含量。由分析研究结果可知, 四种净化沥青均具有较大的芳香缩合度。RP-3 芳香性指数高达 0.90, 芳香缩合度最高。RP-4 支链化指数仅为 0.07, 脂肪族侧链数量较多、碳链较长。四种净化沥青中 OH 官能团存在形式有明显不同。研究结果将为人造炭/石墨材料的原料优选提供理论支持。

**关键词** 净化沥青; 傅里叶变换红外光谱; 分峰拟合; 定量分析

**中图分类号:** TQ522.6 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)03-0765-07

## 引言

煤沥青是煤焦油加工过程中的副产品, 约占焦炭总产值的 2.4%~3.6%<sup>[1]</sup>。也是生产一系列人造炭材料和石墨材料的重要前驱体<sup>[2-4]</sup>。例如, 煤沥青被广泛用于生产针状焦<sup>[5-6]</sup>, 碳纤维<sup>[7-8]</sup>, 以及包覆沥青<sup>[9]</sup>(主要用于锂离子电池负极材料的包覆剂)。但是, 由于沥青中含有大量的喹啉不溶物(QI)而不能直接用于这些材料的生产。因此, 以煤沥青为前驱体制备人造炭/石墨材料之前, 需对煤沥青进行净化处理, 以除去沥青中的 QI。目前, 常用的脱除 QI 的方法有以下几种<sup>[10-11]</sup>: 溶剂过滤法, 溶剂重力沉降法, 离心法, 和静电场法。在众多沥青净化方法中, 最常用的脱除 QI 的方法是溶剂热过滤法和溶剂重力沉降法。被脱除 QI 的沥青通常被称作净化沥青。

检测物质的官能团结构是研究复杂混合物(如煤及其衍生物)最通用的一种分析技术<sup>[12]</sup>。近年来研究者们发现利用分峰拟合所特有的分离重叠峰的特点, 结合 FTIR 光谱数据可以更为准确的定量分析诸如煤等复杂物质中各官能团的含

量, 对复杂化合物的性质的判定有更好的帮助<sup>[13-14]</sup>。

利用傅里叶变换红外光谱结合分峰拟合的数学方法对通过溶剂萃取沉降法和溶剂萃取热过滤法获得的四种净化沥青的芳香性指数(Iar)、支链化指数(CH<sub>3</sub>/CH<sub>2</sub>)、并各官能团分布情况进行了定量分析。对制备的几种净化沥青作为高性能炭材料前驱体的可行性进行了初步判断。

## 1 实验部分

### 1.1 原料

中温沥青由山西焦化厂提供; 热聚合改性沥青由将中温沥青在一定条件下进行热缩聚反应得到; 甲苯(北京化工厂); 喹啉(天津瑞金特化工有限公司)。

### 1.2 净化沥青的制备

编号为 RP-1, RP-2, RP-3 和 RP-4 的四种净化沥青通过不同的净化分离方法得到。其中, RP-1 和 RP-2 是以中温沥青为原料, 分别通过溶剂重力沉降法和溶剂热过滤法得到; RP-3 和 RP-4 则是以热聚合改性沥青为原料, 分别通过溶剂重力沉降法和溶剂热过滤法制得。

收稿日期: 2017-03-27, 修订日期: 2017-10-09

基金项目: 国家自然科学基金项目(U1361126), 教育部博士点基金项目(20132120110001), 辽宁省教育厅先进煤焦化及煤资源高效利用工程研究中心开放基金项目(USTLKFZD201503)资助

作者简介: 朱亚明, 1989 年生, 辽宁科技大学先进煤焦化及煤资源高效利用工程研究中心博士研究生

e-mail: zhuyaming0504@163.com \* 通讯联系人 e-mail: zhao\_xuefei@163.com

### 1.3 沥青的工业分析

几种沥青的工业分析严格按照国家标准执行检测。其中,软化点(SP)是通过环球法测得(ASTM E28);甲苯不溶物(TI)参考 GB/T 2292—1997 标准进行;喹啉不溶物(QI)参考 GB/T 2293—1997 标准进行测试;结焦值(CV)依据 GB/T 2727—88 标准测试。四种净化沥青的工业分析如表 1 所示。

表 1 净化沥青的工业分析

Table 1 Proximate analysis of refined pitches

Samples	SP <sup>a</sup> /°C	TI <sup>b</sup> /%	QI <sup>c</sup> /%	CV <sup>d</sup> /%
RP-1	49	10.95	0.07	41.76
RP-2	53	11.37	0.06	43.59
RP-3	54	13.32	0.06	44.56
RP-4	76	15.26	0.05	47.04

<sup>a</sup> Softening point, <sup>b</sup> Toluene insoluble, <sup>c</sup> Quinoline insoluble, <sup>d</sup> Coke value

### 1.4 FTIR 光谱分析

净化沥青的 FTIR 光谱测试在 FTIR/NIR 光谱仪上进行(PerkinElmer Spotlight-400),测试之前,需将样品和 KBr 严格按照质量比为 1 mg : 150 mg 的比例混合压片处理。通过对波长为 3 000~2 700 和 900~700 cm<sup>-1</sup> 吸收峰进行分峰拟合处理,以波长和吸光度的积分面积为基础,较为准确的计算出了脂肪族氢和芳香族氢的含量。通过分峰拟合处理可以计算出波长为 1 800~1 000 cm<sup>-1</sup> 区间内的含氧官能团分布情况,以及 3 700~3 000 cm<sup>-1</sup> 区间内羟基官能团的分布情况<sup>[14]</sup>。文献[14]报道的 FTIR 光谱中,各官能团的归属如表 2 所示。

### 1.5 分峰拟合分析

分峰拟合处理是对 FTIR 重叠峰进行有效分离从而获得每个吸收峰面积的一种非常有效的方法。对相应重叠峰进行分峰拟合处理所用的数据处理软件是常见的 Origin Pro/Origin Lab Corporation 软件。在选定的 FTIR 区间内,吸收峰个数和吸收峰位置通过对该区间内的 FTIR 数据进行二阶导数得到,拟合过程中,所有的拟合吸收峰均为高斯拟合。为了提高拟合的准确度,拟合过程中需达到以下标准:确定系数(COD)大于 0.999,标准误差参数(chi-squared)小于 10<sup>-5</sup>。

## 2 结果与讨论

### 2.1 净化沥青的 FTIR 光谱定性分析

净化沥青的 FTIR 谱图如图 1 所示。由图 1 可以看出在 300~2 700 cm<sup>-1</sup> 区间内的脂肪氢吸收峰的吸光度从 RP-1 到 RP-4 呈现逐次增加的趋势;图 1 中,四种样品中含氧官能团的区分最大(1 800~1 100 cm<sup>-1</sup>),并且,热过滤方法得到的净化沥青(RP-2, RP-4)比沉降法得到的净化沥青(RP-1, RP-3)中 C=O 官能团要多;四种净化沥青中,芳香氢(900~700 cm<sup>-1</sup>)也有明显的区别。

表 2 FTIR 光谱中官能团的归属

Table 2 Band wavenumbers and assignments in the FTIR spectra

Position/cm <sup>-1</sup>	Assignments
a	
3 610	Free OH groups
3 516	OH- $\pi$ hydrogen bonds
3 400	Self-associated <i>n</i> -mers ( <i>n</i> >3)
3 300	OH-ether O hydrogen bonds
3 200	Tightly bound cyclic OH tetramers
3 050	Aromatic hydrogen
b	
2 953	Asym. RCH <sub>3</sub>
2 923	Asym. R <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>
2 896	R <sub>3</sub> CH
2 879	Sym. RCH <sub>3</sub>
2 853	Sym. R <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>
c	
895	1H
876	1H
860	1H
838	2H
815	2H
790	3H
750	4H
742	4H
720	(CH <sub>3</sub> ) <sub>n=4</sub>
695	5H
d	
1 772	Aryl esters
1 703	Carboxyl acids
1 650	Conjugated C=O
1 610	Aromatic C=C
1 586	Aromatic C=C
1 500	Aromatic C=C
1 410	Asym. CH-(CH <sub>3</sub> ); OH
1 458	Asym. CH <sub>3</sub> - , CH <sub>2</sub> -
1 437	Aromatic C=C
1 377	Sym. CH <sub>3</sub> -Ar, R
1 350	Sym. CH <sub>2</sub> -C=O
1 274	C-O in aryl ethers
1 222	C-O and OH, phenoxy structures, ethers
1 168	C-O phenols, ethers
1 094	C-O sec. alcohols
1 036	Alkyl ethers

### 2.2 净化沥青的 FTIR 定量分析

为了更准确的对四种净化沥青的官能团含量进行判定,利用 FTIR 光谱和分峰拟合相结合的方法对样品进行了研究,以获得更充足的结构参数信息。计算过程中选取的特征区间为 3 700~3 100, 3 000~2 800, 1 800~1 000 和 900~700 cm<sup>-1</sup>(参照表 2),拟合峰中,波数与吸光度的积分面积用于各结构参数的计算。其中,支链化指数(CH<sub>3</sub>/CH<sub>2</sub>)和芳香性指数(I<sub>ar</sub>)参照式(1)和式(2)进行计算。

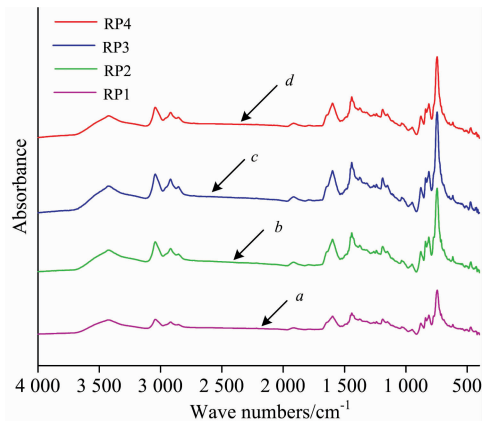


图 1 各净化沥青的 FTIR 谱图

Fig. 1 FTIR spectrum of refined pitches

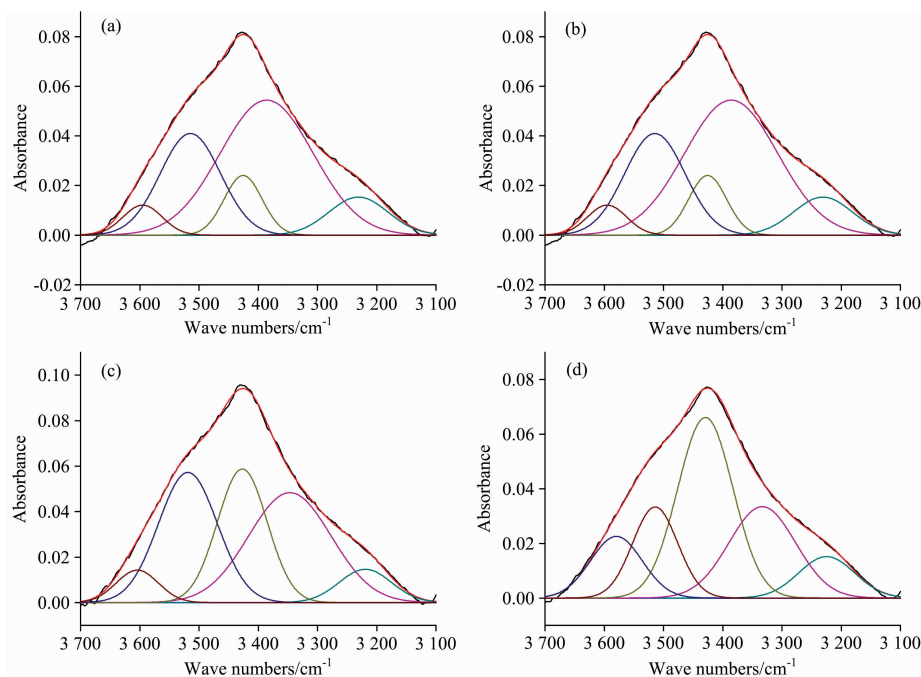


图 2 区间 3 700~3 100 cm<sup>-1</sup> 的 FTIR 拟合谱图

(a): RP-1; (b): RP-2; (c): RP-3; (d): RP-4

Fig. 2 The curve-fitted IR spectra of 3 700~3 100 cm<sup>-1</sup> zone

(a): RP-1; (b): RP-2; (c): RP-3; (d): RP-4

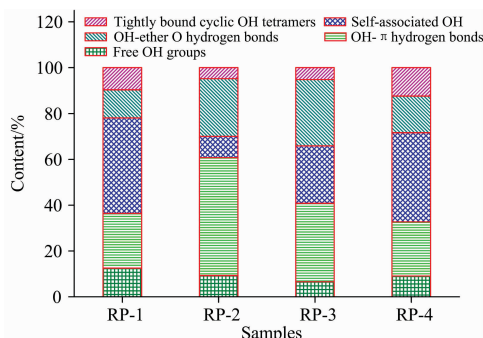


图 3 各净化沥青的 OH 官能团分布

Fig. 3 The distribution of OH groups in refined pitches

$$\text{CH}_3/\text{CH}_2 = \text{Abs} \cdot 2\,950\text{ cm}^{-1}\text{ band}/$$

$$\text{Abs} \cdot 2\,920\text{ cm}^{-1}\text{ band} \quad (1)$$

$$\text{Iar} = \text{Abs} \cdot 3\,050\text{ cm}^{-1} / (\text{Abs} \cdot 3\,050\text{ cm}^{-1} + \text{Abs} \cdot 2\,920\text{ cm}^{-1}) \quad (2)$$

式(1)是—CH<sub>3</sub>—的吸收峰积分面积和—CH<sub>2</sub>—的吸收峰面积的比值,该参数可以用来准确的判定煤及其衍生物的支链长度和支链的多少<sup>[14]</sup>。式(2)用于拟合峰的面积来准确计算净化沥青的芳香性。

### 2. 2. 1 净化沥青中 OH 形成的氢键分布情况

文献[14-15]报道,煤及其衍生物在为 3 700~3 100 cm<sup>-1</sup> 的区间内的吸收峰主要是 6 个官能团的吸收峰的叠加造成的(如表 2 所示),其中有 5 个吸收峰归属于 OH 官能团形成的氢键结构。图 2(a, b, c, d)分别是四种净化沥青在波数为 3 700~3 100 cm<sup>-1</sup> 区间内的分峰拟合图。图 3 是净化沥青中 OH 官能团的氢键结构分布情况。

由图 3 可以看出,RP-1 中 OH 官能团形成的氢键结构主要是以羟基自缔合氢键为主(含量达 41.71%),其次是羟基-π 氢键(含量为 23.93%),环状缔合羟基氢键的含量最少(含量仅为 9.68%);RP-2 则主要是以羟基-π 氢键为主(含量高达 51.52%),其次为羟基-醚氧氢键(含量为 25.17%);RP-3 则是以羟基-π 氢键和羟基-醚氧氢键为主(含量分别为 34.25%和 30.00%),羟基自缔合氢键含量次之(含量为 25.04%);RP-4 中羟基官能团形成的氢键结构分布情况与 RP-1 有着相类似的趋势,主要是以羟基自缔合氢键为主(含量为 38.92%),并且各羟基官能团含量相对较为平均。

### 2. 2. 2 净化沥青的脂肪氢结构分布情况

图 4(a, b, c, d) 分别是四种净化沥青的 FTIR 光谱在波长为  $3\ 000\sim 2\ 700\text{ cm}^{-1}$  脂肪氢区间内的分峰拟合结果。具体的峰位置和归属见表 2。众所周知, 在波数为  $2\ 950$  和  $2\ 920\text{ cm}^{-1}$  处的 FTIR 吸收峰分别是由  $-\text{CH}_3$  的不对称伸缩振动和  $-\text{CH}_2-$  的不对称伸缩振动造成的。另外, 在此脂肪氢区

间内还可拟合成另外的三个吸收峰, 即  $-\text{CH}_3$  和  $-\text{CH}_2-$  的对称伸缩振动吸收峰(分别在  $2\ 879$  和  $2\ 853\text{ cm}^{-1}$  处), 以及  $2\ 896\text{ cm}^{-1}$  处的次甲基  $\text{C}-\text{H}$  伸缩振动。相应的拟合数据结果见表 3 所示。

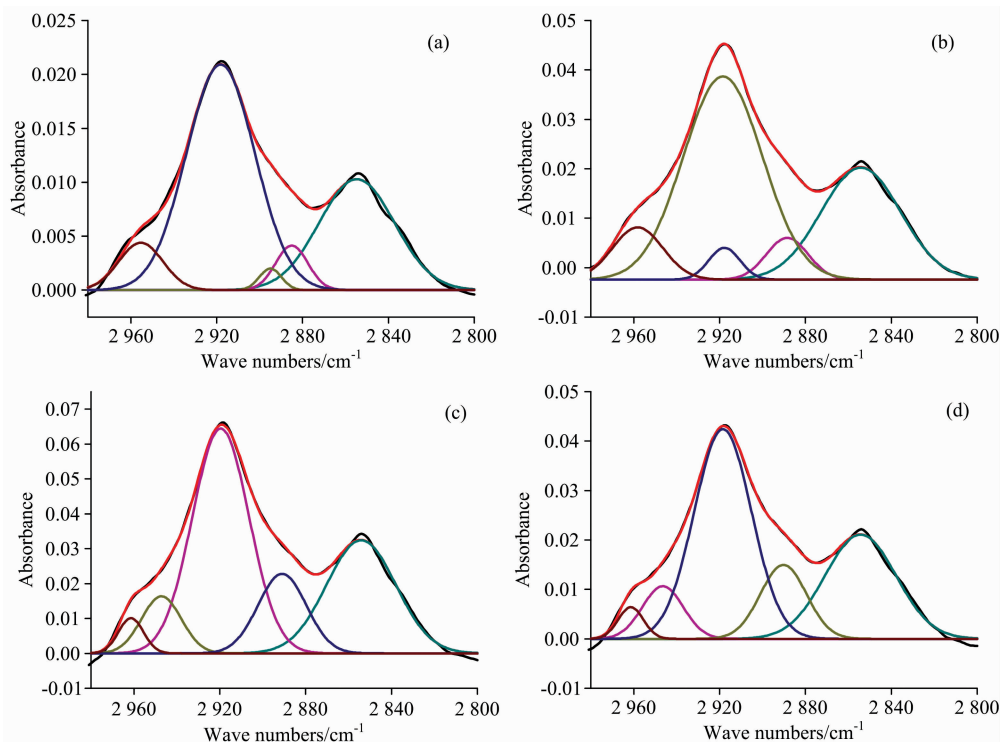


图 4 各净化沥青在  $3\ 000\sim 2\ 800\text{ cm}^{-1}$  区间内的分峰拟合谱

(a): RP-1; (b): RP-2; (c): RP-3; (d): RP-4

Fig. 4 Curve-fitted IR spectra of the  $3\ 000\sim 2\ 700\text{ cm}^{-1}$  zone

(a): RP-1; (b): RP-2; (c): RP-3; (d): RP-4

表 3 各净化沥青的结构参数

Table 3 Structural parameters of refined pitches

Sample	Centre/ $\text{cm}^{-1}$	Height <sup>1</sup>	Width/ $\text{cm}^{-1}$	Area <sup>2</sup>	I <sub>ar</sub>	$\text{CH}_3/\text{CH}_2$
RP-1	2 920	0.0209 2	68.530 17	0.837 23	0.65	0.14
	2 950	0.004 4	44.061 51	0.113 18		
	3 050	0.034 51	43	1.544 82		
RP-2	2 920	0.039 97	59.414 8	1.386 92	0.71	0.33
	2 950	0.013 95	56.999 92	0.464 5		
	3 050	0.077 99	43	3.478 3		
RP-3	2 920	0.018 3	43.651 04	0.466 52	0.90	0.40
	2 950	0.010 84	29.514 39	0.186 82		
	3 050	0.092 49	43	4.196 7		
RP-4	2 920	0.042 42	57.373 05	1.421 38	0.69	0.07
	2 950	0.006 41	25.181 35	0.094 29		
	3 050	0.071 88	43	3.238 02		

由表 3 可以看出四种净化沥青的芳香性指数(I<sub>ar</sub>)和支链化指数( $\text{CH}_3/\text{CH}_2$ )明显不同。RP-3 的 I<sub>ar</sub> 和  $\text{CH}_3/\text{CH}_2$  数值均为最大(依次为 0.90 和 0.40), 说明 RP-3 的芳香缩合度

最高, 并且脂肪侧链的数量最少, 链长最短, 说明 RP-3 主要是以芳香族稠环为主。相对于相同原料来源的 RP-3, RP-4 的结构性质与之迥异, RP-4 的  $\text{CH}_3/\text{CH}_2$  指数最小(仅为

0.07), 说明 RP-4 中脂肪侧链的含量很多, 并且链较长。RP-2 的结构组成与 RP-3 类似, 主要是以芳香性稠环为主, 而脂肪侧链较少, 而 RP-1 的脂肪侧链的数量和长度均要高于 RP-2。

### 2.2.3 净化沥青的含氧官能团分布情况

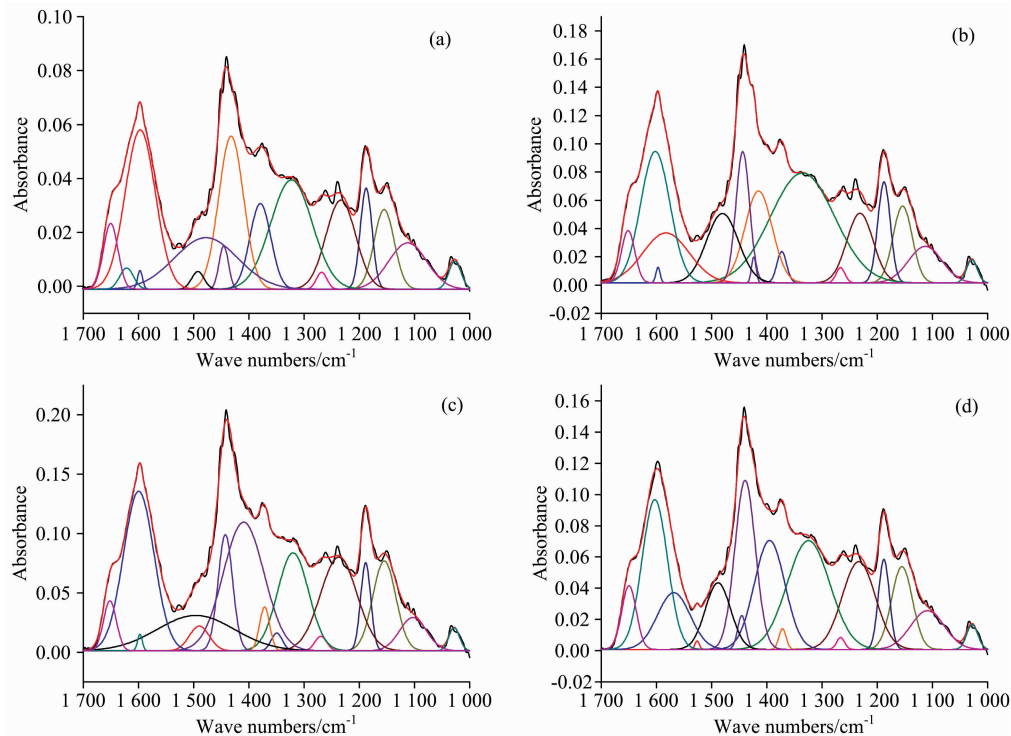


图 5 1 800~1 000  $\text{cm}^{-1}$  区间内的 FTIR 拟合谱图

(a); RP-1; (b); RP-2; (c); RP-3; (d); RP-4

Fig. 5 Curve-fitted FTIR spectrum of the 1 800~1 000  $\text{cm}^{-1}$  zone

(a); RP-1; (b); RP-2; (c); RP-3; (d); RP-4

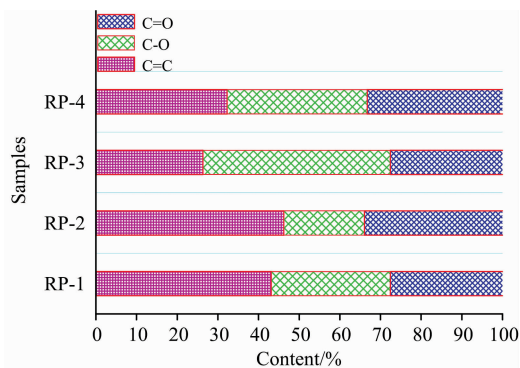


图 6 基础官能团分布

Fig. 6 Distribution of primary functional groups

由图 5(a, b, c, d)和表 2 可以看出, 净化沥青在 1 800~1 000  $\text{cm}^{-1}$  区间内的官能团主要归属于 C=C, C=O 和 C-O 官能团, 并没有 -COOH 官能团的出现。也就是说, 净化沥青中 C=O 官能团主要是酯类和酮类官能团结构。

图 6 是四种净化沥青在 1 800~1 000  $\text{cm}^{-1}$  区间内的基础官能团分布情况。可以看出, RP-1 中 C=C 官能团含量

四种净化沥青在波长为 1 800~1 000  $\text{cm}^{-1}$  区间内拟合谱图分别如图 5(a, b, c, d)所示, 该区间内主要是含氧官能团的吸收峰叠加而成的, 相应的官能团含量分布情况如图 6 所示。

为 43.14%, 而 C=O 和 C-O 官能团含量依次为 29.28% 和 27.58%。RP-2 中, C=C, C=O 和 C-O 官能团的含量依次为 46.22%, 19.84% 和 33.94%。RP-3 中基础官能团主要是以 C=O 为主, 含量达到 46.10%, 而 RP-4 中三种官能团含量依次为: 32.27%, 34.45% 和 33.28%, 各官能团分布较为平均。

表 4 芳香 C-H 面外振动的拟合结果

Table 4 Evolution of the aromatic C-H out-of-plane deformation zone<sup>a</sup>

Type <sup>b</sup>	Samples			
	RP-1	RP-2	RP-3	RP-4
1H	59.97	61.12	53.77	62.71
2H, 3H	22.26	17.12	23.77	24.78
4H, 5H	17.77	21.76	22.46	12.51

<sup>a</sup> Integrated absorbance area; absorbance units  $\times \text{cm}^{-1}$ ;

<sup>b</sup> Number of adjacent aromatic hydrogen per ring

### 2.2.4 净化沥青的芳香氢分布情况

净化沥青在 900~700  $\text{cm}^{-1}$  区间内的 FTIR 吸收峰是由

于芳环 C—H 的面外振动造成的,按芳环上 H 的个数可以分为三种:芳环上孤立的 H(870  $\text{cm}^{-1}$  左右)的吸收峰,芳环上相邻两 H(815  $\text{cm}^{-1}$  左右处)的吸收峰和芳环上四 H(750

$\text{cm}^{-1}$  左右处)的吸收峰<sup>[14-15]</sup>。在此区间内,四种净化沥青的 FTIR 分峰拟合情况结果如图 7(a, b, c, d)所示,相应的分峰拟合计算数据如表 4 所示。

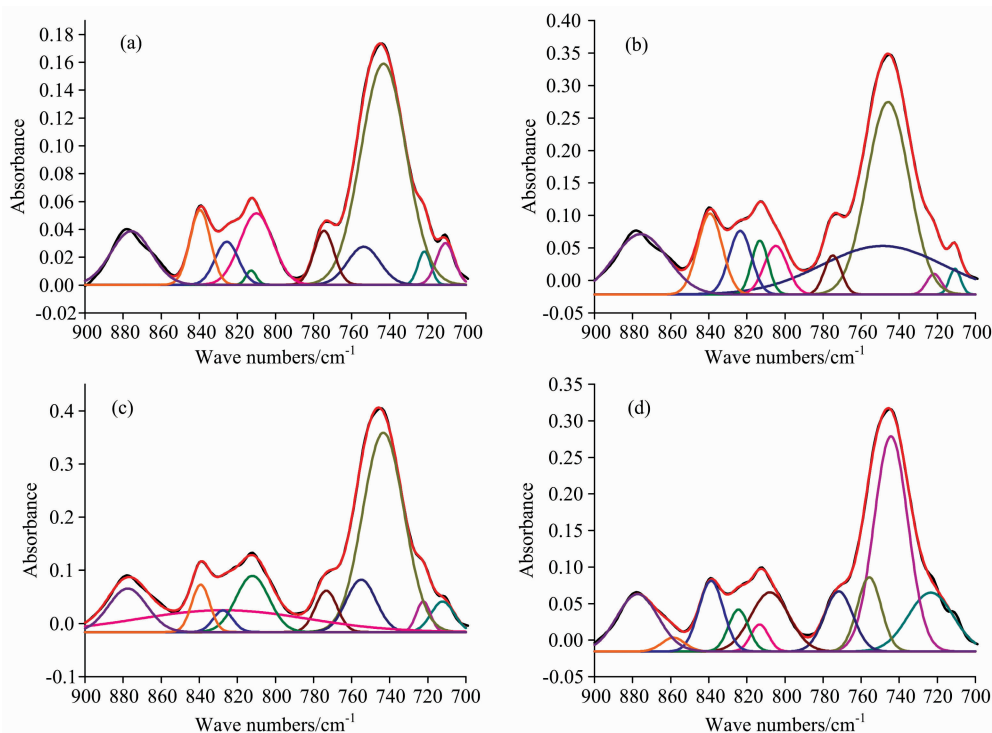


图 7 900~700  $\text{cm}^{-1}$  区间内的 FTIR 拟合谱

(a): RP-1; (b): RP-2; (c): RP-3; (d): RP-4

Fig. 7 Curve-fitted FTIR spectrum of the 900~700  $\text{cm}^{-1}$  zone

(a): RP-1; (b): RP-2; (c): RP-3; (d): RP-4

表 4 可以看出四种净化沥青中,三类芳香环上 H 的分布情况各不相同。四种净化沥青中,RP-3 中芳环上 1H 的含量最少(为 53.78%),说明侧链取代最少,支链越多;而 RP-4 中芳环上 1H 的含量最多(为 62.71%),说明侧链取代最多,支链最多。另外,RP-3 中 4H/5H 的含量高达 22.46%,RP-2 的含量紧随其后为 21.76%,说明 RP-3 的芳香缩合度最高,RP-2 次之,这与之前的芳香性指数  $I_{ar}$  和支链化指数  $\text{CH}_3/\text{CH}_2$  分析结果相一致。

### 3 结论

(1) 沥青的来源和净化方法的选择对获得的净化沥青的性质有重要的影响。RP-1, RP-2, RP-3 和 RP-4 的芳香性指数均大于 0.6,净化沥青的芳香性稠环结构较多;RP-4 的支链化指数  $\text{CH}_3/\text{CH}_2$  仅为 0.07,说明其脂肪侧链数量和长度

最多,RP-3 的芳香性指数高达 0.90,说明其芳香缩合度最高,芳环数最多。

(2) 对净化沥青的 OH 官能团分析可知,RP-1 中 OH 官能团形成的氢键结构主要是以羟基自缔合氢键为主(含量达 41.71%),RP-2 则主要是以羟基- $\pi$  氢键为主(含量高达 51.52%),RP-3 则是以羟基- $\pi$  氢键和羟基-醚氧氢键为主(含量分别为 34.25% 和 30.00%),RP-4 中羟基官能团形成的氢键结构分布情况与 RP-1 有着相类似的趋势,主要是以羟基自缔合氢键为主(含量为 38.92%)。另外,四种净化沥青的基础官能团 C=C, C=O 和 C—O 含量得到了较为准确的计算。

(3) FTIR 光谱结合分峰拟合的数学方法可以准确定量分析净化沥青中各官能团的含量,为高性能炭材料的前驱体沥青的选择提供了一种更准确的判定方法。

### References

- [1] Ramjee S, Rand B, Focke W W. Carbon, 2015, 82: 368.
- [2] Cao Q, Xie X L, Li J P, et al. Fuel, 2012, 96: 314.
- [3] XIAO Nan, QIU Jie-shan(肖南,邱介山). Chemical Industry and Engineering Progress(化工进展), 2016, 35(6): 1804.
- [4] TANG Xian-yi, WEI Xiao-hui, XU De-ping, et al(唐闲逸,魏晓慧,许德平). Chinese Journal of Materials Research(材料研究学报),

- 2016, 30(6): 448.
- [ 5 ] SUN Quan, WANG Bao-cheng, ZHANG Huai-ping, et al(孙 权, 王保成, 张怀平, 等). *New Carbon Materials(新型炭材料)*, 2011, 26(6): 429.
- [ 6 ] Li G N, Peng Y L, Song S L, et al. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*, 2012, 48: 349.
- [ 7 ] Mochida I, Yoon S H, Takano N, et al. *Carbon*, 1996, 34: 941.
- [ 8 ] Yu B J, Wang C Y, Chen M M, et al. *Fuel Processing Technology*, 2012, 104: 155.
- [ 9 ] Han YJ, Kim J, Yeo J S, et al. *Carbon*, 2015, 94: 432.
- [10] Blanco C, Prada V, Santamaria R, et al. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2002, 63: 251.
- [11] Cao Q, Guo L C, Dong Y W, et al. *Fuel Processing Technology*, 2015, 129: 61.
- [12] Qin Z H, Chen H, Yan Y J, et al. *Fuel Processing Technology*, 2015, 133: 14.
- [13] Fuller E L, Smyrl N R, Howell R L, et al. *Am. Chem. Soc. Div. Fuel Chem.*, 1984, 29(1): 1.
- [14] Meng F R, Yu J L, Tahmasebi A, et al. *Energy Fuels*, 2014, 28: 275.
- [15] Tahmasebi A, Yu J L, Han Y N, et al. *Energy Fuels*, 2012, 26: 3651.

## Quantitative Analysis of Refined Pitches by Curve-Fitting of Fourier Transform Infrared Spectroscopy Spectrum

ZHU Ya-ming<sup>1</sup>, GAO Li-juan<sup>1</sup>, ZHAO Xue-fei<sup>1\*</sup>, LÜ Jun<sup>1, 2</sup>

1. Engineering Research Center of Advanced Coal Coking and Efficient Use of Coal Resources, University of Science and Technology Liaoning, Anshan 114051, China
2. College of Chemistry and Chemical Engineering, Qiqihar University, Qiqihar 161006, China

**Abstract** High temperature coal tar pitch is a kind of high quality raw material to produce carbon materials. However, coal tar pitches without refining treatment was not suitable to produce such high quality carbon materials. Actually, refining treatment is an important way to adjust the molecular weight distribution, aromatic structure, and aliphatic side chain structure of coal tar pitch. Refining treatment is a precondition to produce carbon materials which is easy to graphitize with coal tar pitch as the raw material. In this study, four kinds of refined pitches numbered as RP-1, RP-2, RP-3 and RP-4 have been obtained by two kinds of preparation methods with the medium pitch and modified pitch as the raw materials, respectively. The refined pitches have been studied by Fourier Transform infrared spectroscopy (FTIR) and curve-fitting analysis in order to gain additional information on the comparison of these four refined pitches. The curve-fitted data provide quantitative evidence of aromaticity(Iar), length of aliphatic chain(CH<sub>3</sub>/CH<sub>2</sub>), distribution of OH groups, and oxygen-containing functional groups with different refined pitches. The results have showed that: these four kinds of refined pitches has a larger aromatic condensation degree. RP-3 has the highest aromaticity index of 0.9. RP-4 has the Index of the branched chain of 0.07, which means that RP-4 have a long aliphatic chain. The distribution of OH groups in refined pitches was significantly different. The results can provide a theoretical support for the selected raw materials in the preparation of carbon/graphite materials.

**Keywords** Refined pitches; Fourier transform infrared spectroscopy; Curve-fitted analysis; Quantitative analysis

(Received Mar. 27, 2017; accepted Oct. 9, 2017)

\* Corresponding author