

**KARAKTERISASI GUGUS FUNGSIONAL DAN IMPLIKASINYA
TERHADAP KEMATANGAN BATUBARA FORMASI STEENKOOOL,
CEKUNGAN BINTUNI, KABUPATEN TELUK BINTUNI, PAPUA BARAT**

Rizal Muhammad Faishal¹, Ahmad Helman Hamdani¹, Reza Moh. Ganjar Gani¹

¹ Fakultas Teknik Geologi, Universitas Padjadjaran

ABSTRAK

Pemahaman mengenai struktur molekul batubara dapat digunakan sebagai dasar penentuan karakteristik dan kualitas dari batubara sehingga penggunaan batubara dapat dilakukan secara tepat dan efisien. Daerah penelitian terletak di Formasi Steenkool, pada Cekungan Bintuni. Penelitian ini, bertujuan untuk meneliti karakterisasi gugus fungsional kimia batubara terhadap parameter kematangan batubara *Vitrinite Reflectance* (Ro) di daerah penelitian. Metode yang digunakan dalam penelitian ini menggunakan Analisis *FTIR* (*Fourier-Transform Infrared Spectroscopy*) pada 6 sampel batubara terpilih. Hasil analisis menunjukkan rentang nilai dari parameter struktural yang tersebar di beberapa grup fungsional kimia batubara, terdapat 4 parameter yang menunjukkan kenaikan nilai tren seiring bertambahnya nilai *Vitrinite Reflectance* (Ro), yaitu parameter *fa*, DOC, I, $A(CH_2)/A(CH_3)$. Parameter lainnya menunjukkan penurunan nilai tren seiring bertambahnya nilai Ro, parameter tersebut yaitu Hal/H, Faktor C, dan (R/C)u.

Kata Kunci: batubara, struktur molekul, Formasi Steenkool, gugus fungsional, FTIR

ABSTRACT

An understanding of coal molecular structure can be used as a basis for determining the characteristics and quality of coal so that the use of coal can be used correctly and efficient research area located in Steenkool Formation at Bintuni Basin. The purpose of this research is to identify functional groups characteristics related to coal maturity parameter Vitrinite Reflectance (Ro) in research area. Fourier-Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) Analysis is used as an analysis method on 6 selected samples. The result of analysis shows range of structural parameter value spread across chemical functional group, 4 parameters show an increasing trend value along with the increase in the value of Vitrinite Reflectance (Ro), i.e. fa, DOC, I, $A(CH_2)/A(CH_3)$. Other parameters show a decreasing trend value along with the increase in the value of Vitrinite Reflectance (Ro), namely, Hal/H, C Factor, and (R/C)u.

Keywords: coal, molecular structure, Steenkool Formation, functional group, FTIR

1. PENDAHULUAN

Batubara merupakan sumber energi yang banyak digunakan di seluruh dunia termasuk di Indonesia, meskipun banyak alternatif sumber energi lain seperti panas bumi yang akhir – akhir ini banyak dikembangkan, penggunaan batubara sebagai sumber energi pada industri masih dibutuhkan secara besar, hal ini bisa dilihat dari total penggunaan batubara dunia yang semakin naik dari tahun 1978 sebesar 70160 TJ hingga tahun 2020 sebesar 157164 TJ (International Energy Agency : Coal Information Overview)

Penentuan karakteristik dan kualitas dari batubara merupakan suatu hal yang penting sehingga penggunaan batubara dapat dilakukan secara tepat. Analisis *FTIR (Fourier-Transform Infrared Spectroscopy)* merupakan salah satu metode analisis yang dapat digunakan menentukan karakteristik dari gugus fungsional kimia batubara. Parameter struktural yang tersebar di beberapa gugus fungsional pada batubara dikorelasikan dengan nilai parameter kematangan batubara *Vitrinite Reflectance (Ro)*.

2. TINJAUAN PUSTAKA

Geologi Regional

Daerah penelitian terletak pada koordinat 133° 39' 57.6" BT - 133° 45' 39.6" BT dan 1° 36' 43.2" LS - 1° 39' 54" LS yang termasuk kedalam sebagian peta geologi regional lembar ransiki no 3014 – 2914.

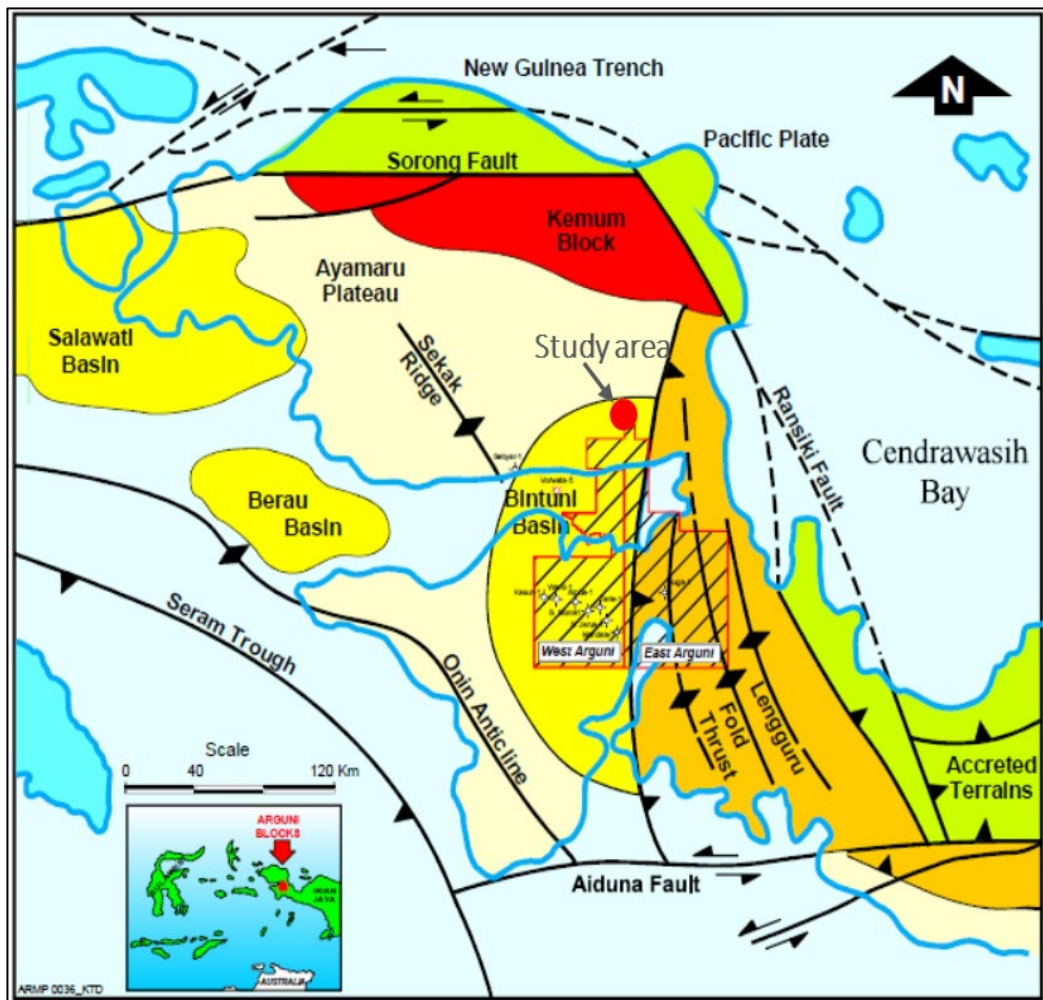
Tempat penelitian terletak di daerah kepala burung di Papua Barat tepatnya di Formasi Steenkool yang merupakan salah satu formasi yang

terbentuk di Cekungan Bintuni. Di bagian barat Cekungan Bintuni dibatasi oleh Dataran Tinggi Onin-Kumawa, di bagian timur dibatasi oleh Lengguru Fold-Thrust Belt (LFTB), di bagian utara dibatasi oleh Dataran tinggi Kemun, dan di bagian selatan dibatasi oleh Zona Patahan Tarera-Aiduna. Batas – batas tersebut membagi daerah kepala burung menjadi lima daerah sesuai dengan penelitian terdahulu (Pigram et al., 1982) (Pieters et al., 1983,1990) dalam (Setiadi et al., 2018) (Gambar 1)

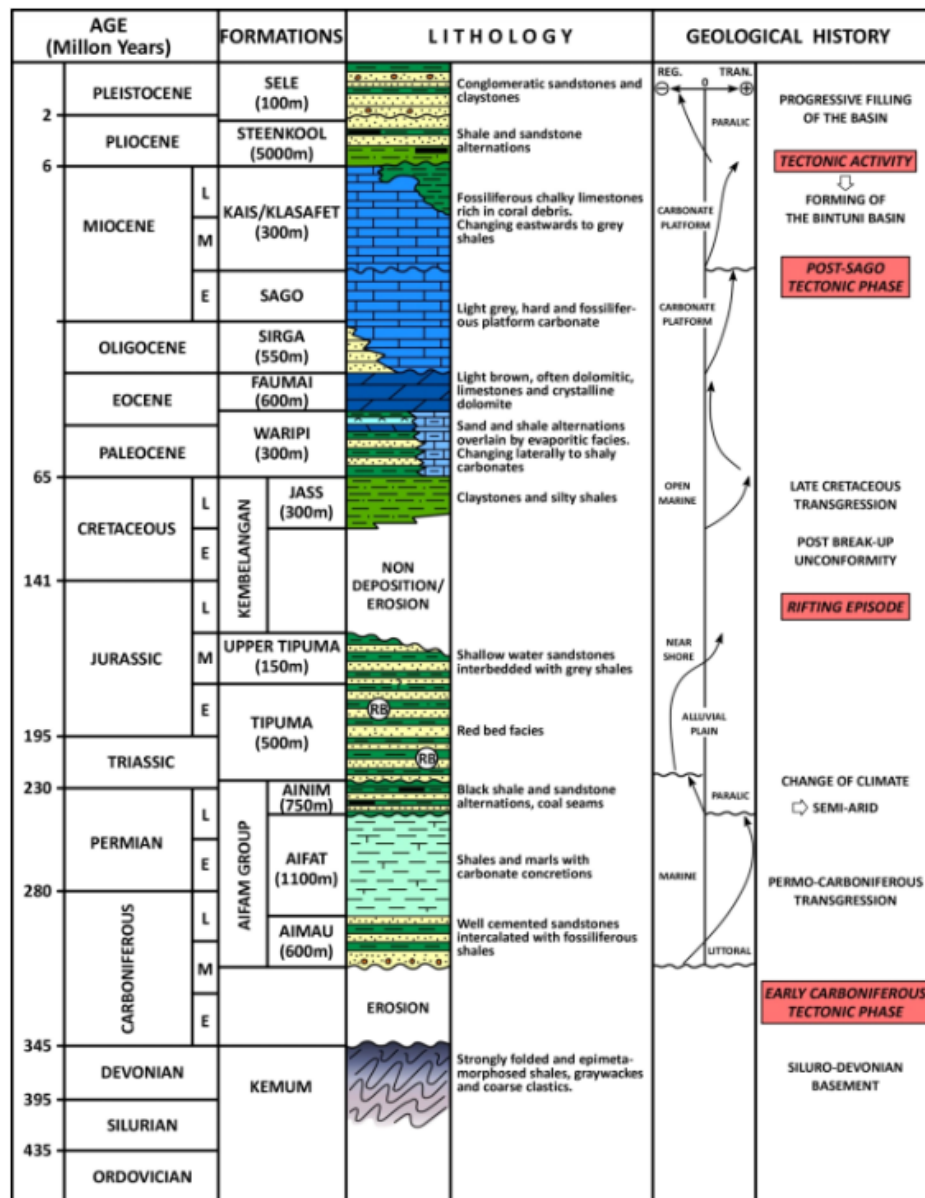
Stratigrafi

Stratigrafi daerah penelitian telah dijelaskan pada penelitian terdahulu oleh Chevalier dan Bernadave (1986) (Gambar 2). Berikut merupakan lapisan batuan yang terdapat di daerah penelitian yang diurutkan dari yang muda ke tua:

1. Bagian Batupasir Formasi Steenkool (TQss), formasi ini disusun oleh batupasir, batulumpur, batulanau, dan konglomerat dengan sisipan kalkarenit dan batubara, namun didominasi oleh Batupasir
2. Bagian Batulumpur Formasi Steenkool (TQsm), formasi ini disusun oleh batupasir, batulumpur, batulanau, dan konglomerat dengan sisipan kalkarenit dan batubara, namun didominasi oleh Batulumpur
3. Formasi Klasafet (Tpk), formasi ini disusun oleh batunapal, batulumpur gampingan, shale, batupasir gampingan, kalkarenit, kalsirudit, dan konglomerat gampingan



Gambar 1. Peta geologi regional daerah penelitian berdasarkan laporan PT.GES 2018



Gambar 2. Stratigrafi bagian timur Kepala Burung, Papua menurut Chevalier dan Berdenave (1986)

3. METODE PENELITIAN

Analisis Proksimat dan Ultimat

Analisis proksimat dan ultimat dilakukan pada keenam sampel, kemudian dari hasil analisis tersebut dapat ditentukan parameter (f_a), $((R/C)_u)$, dan (H_a/H) .

Parameter *Apparent Aromaticity* (f_a) merepresentasikan nilai rasio karbon aromatik dengan total karbon yang terdapat pada batubara dapat dikalkulasikan dengan rumus (Mielczarski et al., 1986):

$$f_a = (100 - VM) \times 0,9677/C$$

dimana VM merupakan *Volatile Matter* yang didapatkan dari hasil analisis proximate, C merupakan total atom karbon yang didapatkan dari hasil analisis ultimat, sedangkan 0,9677 merupakan konstanta *Fitting Coefficient* (Krevelen, 1993).

Parameter(R/C)_u merepresentasikan jumlah cincin aromatik tiap monomer, dapat dihitung dengan rumus (Kastner et al., 1994) (Jiang et al., 2019):

$$1 - \frac{fa}{2} - \frac{(\frac{H}{C})}{2}$$

dimana *fa* merupakan nilai rasio karbon aromatik dengan total karbon yang terdapat pada batubara, H/C merupakan total atom hidrogen dibagi dengan total atom karbon yang didapatkan dari hasil analisis ultimat.

Parameter Hal/H merepresentasikan rasio hidrogen alifatik dengan total atom hidrogen, dapat dihitung dengan rumus (Orrego-Ruiz et al., 2011) (He et al., 2017) (Zhao et al., 2020) :

$$Hal/H = (1 - fa) / (Cal/Hal) / (H/C)$$

dimana *fa* merupakan nilai rasio karbon aromatik dengan total karbon yang terdapat pada batubara, Cal/Hal merupakan rasio karbon dengan hidrogen pada grup alifatik, biasanya berkisar di 0,55 pada batubara dan H/C merupakan total atom hidrogen dibagi dengan total atom karbon yang didapatkan dari hasil analisis ultimat

Analisis FTIR

Analisis FTIR dilakukan pada spektrum 400 cm⁻¹ – 4000 cm⁻¹, kemudian dilakukan proses *curve-*

fitting dengan perangkat lunak menggunakan metode *Gaussian Peak*, proses *curve-fitting* dilakukan pada spektrum FTIR untuk mencari lebar, tinggi, dan luas area dari puncak – puncak yang menunjukkan intensitas dari parameter struktural yang terdapat pada spektrum FTIR.

A. Parameter Struktur Aromatik

Apparent Aromaticity (*fa*) pada analisis FTIR dapat dihitung dengan rumus (He et al., 2017) (Jiang et al., 2019):

$$Hal/H = \frac{Hal}{Hal + Har} = \frac{A_{3000} - 2800}{A_{3000} - 2800 + A_{900} - 700}$$

$$Cal/C = \frac{Hal}{H} \times \frac{H}{C} / \frac{Hal}{Cal}$$

$$fa = 1 - \frac{Cal}{C}$$

Hal/H merepresentasikan rasio hidrogen alifatik dengan total atom hidrogen, Cal/C merepresentasikan rasio karbon alifatik dengan total atom karbon, H/C merupakan total atom hidrogen dibagi dengan total atom karbon, dan Hal/Cal merupakan konstanta pada batubara dengan nilai 1,8.

Parameter I merupakan indeks tingkat aromatisitas batubara yang menunjukkan jumlah relatif dari gugus aromatis dan gugus alifatik, dapat dihitung dengan rumus (Chen et al. 2012) :

$$I = \frac{A_{700} - 900}{A_{2800} - 3000}$$

Tabel 1. Gugus fungsional pada spektrum FTIR

Band Region	Functional Group Assignment
700-900	aromatic bonds, (C-H)ar (out-of plane bending)
1093	C-O stretching secondary alcohol
1279	C-O stretching aromatic ester or alkyl aryl ether
1452	C-H bending alkane
1600	aromatic C=C ring stretch
1650-1800	C=O stretching
2800-3000	aliphatic CH _x stretching
3200-3570	hydroxy group, H-bonded OH stretch

A700-900 merupakan luas area antara spektrum 700-900 cm⁻¹ dimana range spektrum tersebut mewakili gugus alifatik yang terdapat sedangkan A2800-3000 merupakan spektrum yang mewakili gugus aromatik yang terdapat batubara.

Parameter *Degree of Condensation (DOC)* menunjukkan derajat kondensasi dari cincin aromatik, dapat dihitung dengan rumus (He et al., 2017):

$$DOC = \frac{A_{700-900}}{A_{1600}}$$

A700-900 merupakan luas area antara spektrum 700-900 cm⁻¹ dimana range spektrum tersebut mewakili gugus alifatik yang terdapat sedangkan A1600 merupakan spektrum yang mewakili ikatan C=C.

B. Parameter Struktur Alifatik

Parameter struktur alifatik menunjukkan panjang dari cincin alifatik, dapat direpresentasikan dengan rasio dari luas area pada spektrum 2863 cm⁻¹ dengan 2930 cm⁻¹ dengan rumus (Yan et al., 2020) :

$$CH_2 / CH_3 = \frac{A_{2930}}{A_{2863}}$$

C. Struktur yang Mengandung Oksigen

Parameter ini menunjukkan perubahan rasio gugus C=O dan C=C yang digunakan sebagai indeks kematangan batubara, dapat dihitung dengan rumus (He et al., 2017) (J. Jiang et al. 2019)

$$“C” = \frac{A_{1800} - 1650}{A_{1800} - 1650 + A_{1600}}$$

4. HASIL DAN PEMBAHASAN

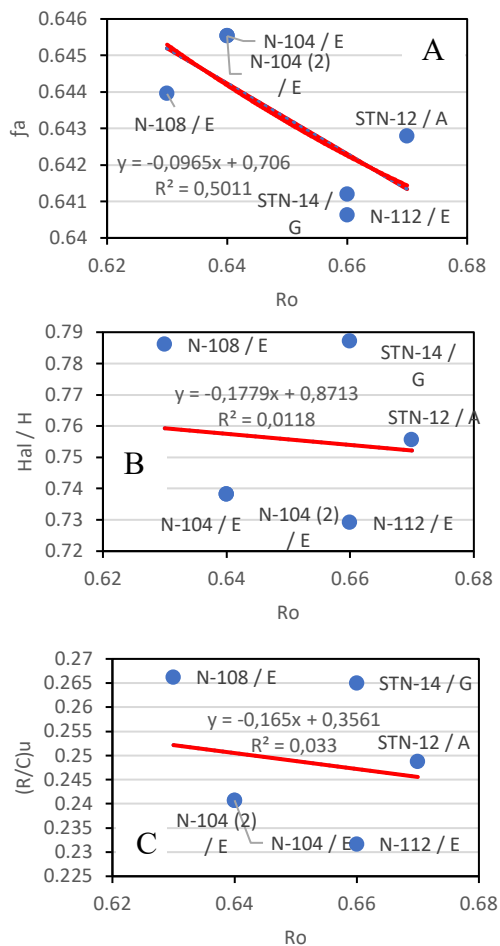
Analisis Ultimat dan Proksimat

Tabel 2. merupakan hasil analisis proksimat dan ultimat, terlihat rentang nilai *Apparent Aromaticity (fa)* sebesar 0,6406 – 0,6455, jumlah cincin karbon aromatik pada monomer ((R/C)_u) sebesar 0,2316 – 0,2663, rasio hidrogen alifatik dengan total atom hidrogen (H_{al}/H) sebesar 0,7292 – 0,7871.

Gambar3.A menunjukkan penurunan nilai *fa* seiring bertambahnya nilai Ro, hal ini mengindikasikan penurunan aromatisitas dengan meningkatnya derajat pembatubaraan, namun hal ini tidak sesuai dengan penelitian terdahulu (Jiang et al., 2019) dimana

Tabel 2. Hasil analisis ultimat dan proksimat

Sampel	Analisis Proksimat						Analisis Ultimate			Rasio		Ro	fa	(R/C)u	Hal / H
	TM (%)	IM (%)	Ash (%)	VM (%)	FC (%)	GCV (Btu/lb)	C (%)	H (%)	O (%)	H/C	O/C				
STN-14 / G	5,1	1,8	1,8	45,8	50,6	14277,6	81,8	5,65	9,54	0,82885	0,0875	0,66	0,6412	0,265	0,7871
N-104 / E	5,8	2,4	4,2	45,9	47,5	14247	81,1	5,9	9,77	0,873	0,0904	0,64	0,6455	0,2407	0,7382
N-104 (2) / E	5,8	2,4	4,2	45,9	47,5	14247	81,1	5,9	9,77	0,873	0,0904	0,64	0,6455	0,2407	0,7382
N-108 / E	5,2	2,1	3,8	45,7	48,8	14238	81,6	5,6	9,45	0,82353	0,0869	0,63	0,6439	0,2663	0,7861
N-112 / E	4,9	1,9	4,1	46,1	47,9	14265	81,42	6,08	9,48	0,89609	0,0873	0,66	0,6406	0,2316	0,7292
STN-12 / A	5,2	2,3	1,4	45,2	51,1	14274	82,5	5,91	8,63	0,85964	0,0785	0,67	0,6428	0,2488	0,7555



Gambar 3. Grafik korelasi antara fa, (R/C)u, dan Hal/H terhadap Ro

nilai aromatisitas bertambah seiring bertambahnya nilai Ro.

Penurunan nilai (R/C)u juga terlihat seiring bertambahnya nilai Ro (Gambar 3.C), hal ini menunjukkan penurunan nilai jumlah

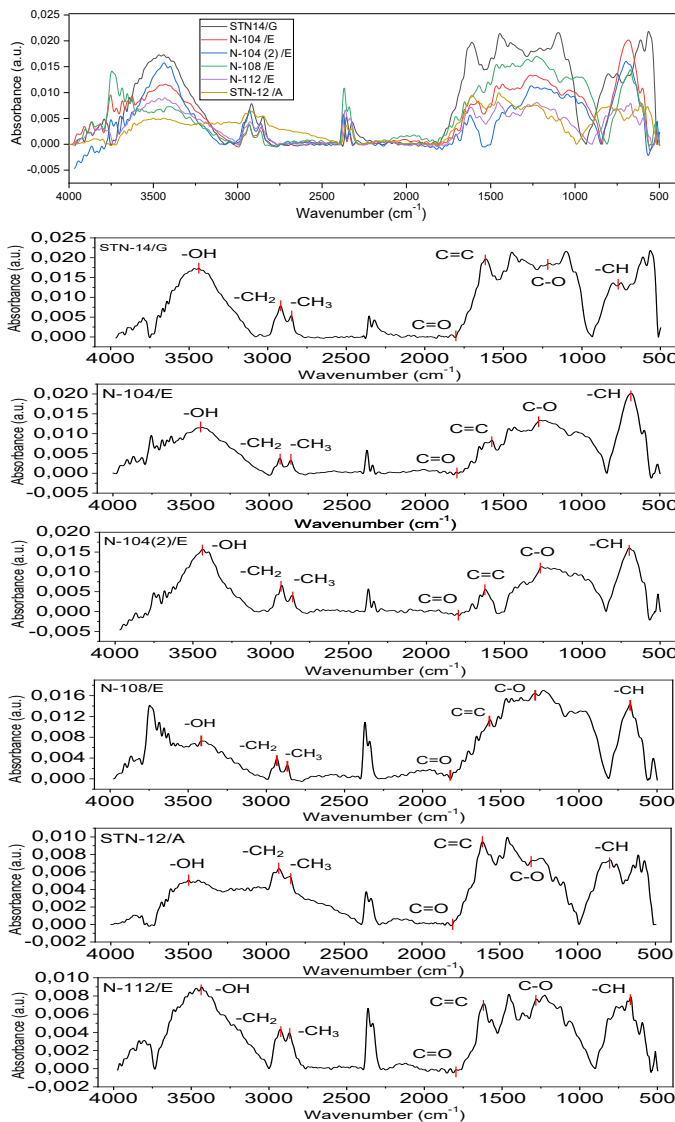
cincin karbon aromatik pada monomer seiring meningkatnya derajat pembatubaraan, namun hal ini juga tidak sesuai dengan penelitian terdahulu (Jiang et al., 2019) dan (Yan et al., 2020) dimana nilai jumlah cincin karbon aromatik pada monomer bertambah seiring bertambahnya nilai Ro.

Penurunan nilai Hal/H terlihat seiring bertambahnya nilai Ro (Gambar 3.B), hal ini menunjukkan penurunan nilai hidrogen alifatik pada sampel seiring bertambahnya derajat pembatubaraan, hal ini sesuai dengan penelitian terdahulu (Jiang et al., 2019) dan (Yan et al., 2020)

Analisis FTIR

Spektrum FTIR pada keenam sampel telah ditandai dengan beberapa puncak yang menunjukkan gugus fungsionalnya, keenam spektrum FTIR menunjukkan karakteristik puncak pada posisi serupa namun memiliki intensitas yang berbeda (Gambar 4).

Dalam Tabel 1 dijelaskan gugus fungsi yang tersebar pada keenam spektrum FTIR, kemudian dilakukan proses curve fitting pada tiap sampel (Gambar 5) untuk menemukan luas area puncak (Tabel 4) yang digunakan untuk mencari nilai parameter struktural (Tabel 5) sehingga bisa dilakukan korelasi



Gambar 4. Spektrum FTIR keenam sampel batubara

terhadap parameter kematangan batubara *vitrinite reflectance* (R_o) (Gambar 6).

Pada gambar 6.A parameter H_{al}/H mengalami penurunan seiring bertambahnya nilai R_o , hal ini menunjukkan pengurangan rasio hidrogen alifatik pada total atom hidrogen seiring bertambahnya derajat kematangan batubara, hal ini konsisten dengan hasil penelitian

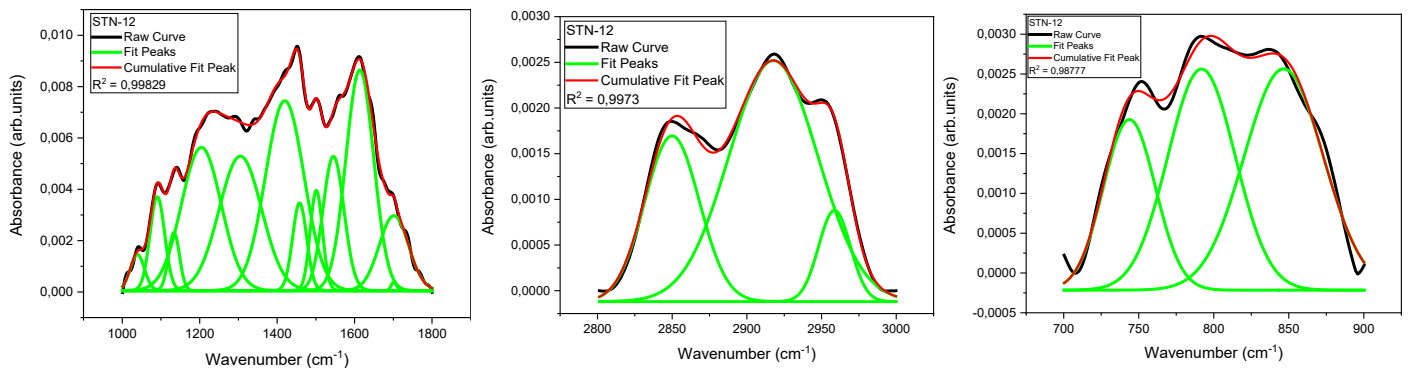
terdahulu (Jiang et al., 2019) dan (Yan et al., 2020).

Pada gambar 6.B parameter f_a mengalami kenaikan seiring bertambahnya nilai R_o , menunjukkan bertambahnya aromatisitas seiring bertambahnya derajat kematangan batubara, hal ini konsisten dengan hasil penelitian terdahulu (Jiang et al., 2019) dan (Yan et al., 2020).

Pada Gambar 6.C parameter CH_2/CH_3 terlihat mengalami kenaikan seiring bertambahnya nilai R_o , hal ini menunjukkan bahwa terjadi pertambahan panjang rantai karbon alifatik seiring bertambahnya derajat kematangan batubara, hal ini tidak sesuai dengan hasil penelitian terdahulu (Jiang et al., 2019) dan (Yan et al., 2020), dimana seharusnya semakin tinggi derajat kematangan batubara, semakin pendek panjang rantai karbon alifatik.

Pada Gambar 6.F parameter C mengalami penurunan seiring bertambahnya nilai R_o , hal ini menunjukkan pengurangan rasio $C=O$ karena telah menjadi $C=C$ seiring bertambahnya derajat kematangan batubara, hal ini konsisten dengan hasil penelitian terdahulu (Jiang et al., 2019) dan (Yan et al., 2020).

Pada Gambar 6.D parameter $(R/C)_u$ mengalami penurunan seiring bertambahnya nilai R_o , hal ini menunjukkan bahwa adanya pengurangan jumlah cincin karbon aromatik pada monomer seiring bertambahnya derajat kematangan batubara, hal ini tidak sesuai dengan hasil penelitian terdahulu (Jiang et al., 2019) dan (Yan et al., 2020), dimana seharusnya jumlah cincin karbon aromatik bertambah seiring



Gambar 5. Hasil curve-fitting pada sampel STN-12

Tabel 4. Luas area puncakan pada spektrum ftir keenam sampel batubara

Sampel	Area					
	700-900	1600	1650-1800	2863	2930	2800-3000
STN-14 /G	0,602	1,557	0,043	0,171	0,465	0,673
N-104 /E	0,086	0,677	0,049	0,181	0,201	0,435
N-104 (2) /E	0,115	0,453	0,068	0,161	0,262	0,522
N-108 /E	0,078	0,395	0,075	0,134	0,180	0,372
N-112 /E	0,290	0,137	0,011	0,193	0,185	0,455
STN-12 /A	0,352	0,769	0,029	0,083	0,196	0,281

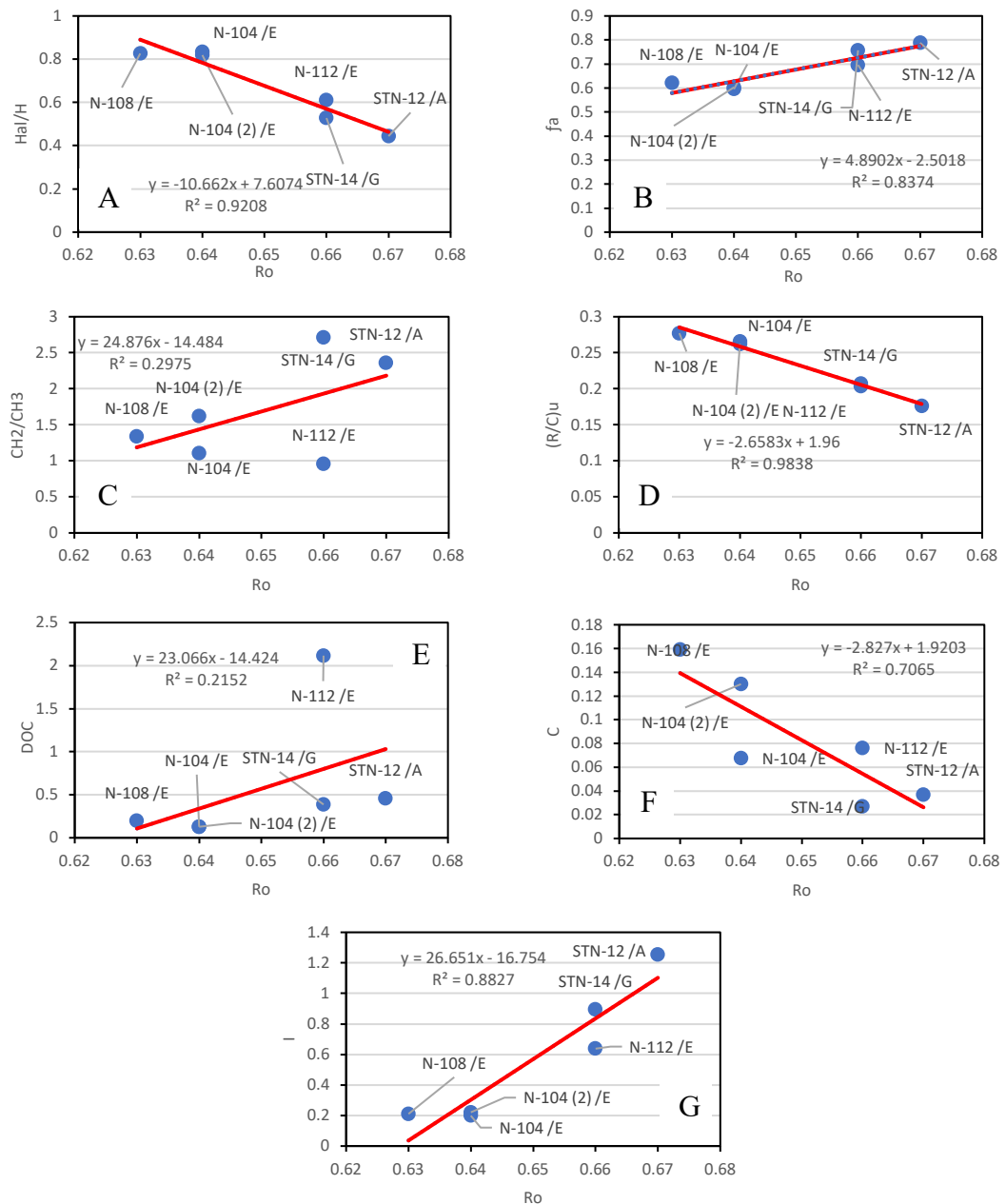
Tabel 5. Nilai parameter struktural pada keenam sampel batubara

Sampel	Parameter FTIR								
	Hal / H	Cal / C	fa	CH ₂ /CH ₃	Faktor 'C'	(R/C)u	DOC	I	Ro
STN-14 /G	0,528	0,243	0,757	2,712	0,027	0,207	0,387	0,895	0,66
N-104 /E	0,834	0,405	0,595	1,111	0,068	0,266	0,128	0,199	0,64
N-104 (2) /E	0,819	0,397	0,603	1,623	0,130	0,262	0,128	0,221	0,64
N-108 /E	0,826	0,378	0,622	1,341	0,159	0,277	0,198	0,210	0,63
N-112 /E	0,611	0,304	0,696	0,959	0,076	0,204	2,116	0,638	0,66
STN-12 /A	0,444	0,212	0,788	2,365	0,037	0,176	0,458	1,253	0,67

bertambahnya derajat kematangan batubara.

Pada Gambar 6.E parameter **DOC** mengalami kenaikan seiring bertambahnya nilai Ro, hal ini menunjukkan bertambahnya derajat kondensasi cincin karbon aromatik seiring bertambahnya derajat kematangan batubara hal ini konsisten dengan hasil penelitian terdahulu (Jiang et al., 2019) dan (Yan et al., 2020).

Pada Gambar 6.G parameter **I** mengalami kenaikan seiring bertambahnya nilai Ro, hal ini menunjukkan bahwa kelimpahan dari gugus aromatik bertambah seiring bertambahnya derajat kematangan batubara, hal ini konsisten dengan hasil penelitian terdahulu (Jiang et al., 2019) dan (Yan et al., 2020).



Gambar 6. Grafik korelasi antara parameter FTIR dengan Ro

5. KESIMPULAN

Pada studi ini enam sampel batubara yang berasal dari Formasi Steenkool di Cekungan Bintuni dianalisis dengan beberapa metode yaitu metode analisis proksimat, analisis ultimat, dan analisis FTIR (*Fourier Transform*

Infrared Spectroscopy) sehingga karakteristik gugus fungsional kimiawinya bisa teramati, korelasi parameter struktural dan parameter kematangan batubara *Vitrinite Reflectance (Ro)* dapat terlihat pada grafik yang telah dibuat.

Berdasarkan analisis yang telah dilakukan dapat disimpulkan :

1. Parameter f_a , (R/C)_u, dan Hal/H yang dikalkulasikan berdasarkan analisis ultimat dan proksimat menunjukkan penurunan nilai tren seiring bertambahnya nilai R_o , namun hal ini kurang sesuai dengan penelitian terdahulu, dimana seharusnya hanya nilai parameter Hal/H saja yang mengalami penurunan tren seiring pertambahan derajat pematubaraan.
2. Pada analisis menggunakan metode FTIR, parameter f_a , DOC, I, dan CH_2/CH_3 yang menunjukkan aromatisitas, derajat kondensasi cincin aromatik, kelimpahan gugus aromatik, dan panjang rantai karbon alifatik terlihat mengalami kenaikan nilai tren seiring bertambahnya derajat pematubaraan dan terlihat juga parameter Hal/H, C, dan (R/C)_u terlihat mengalami tren penurunan nilai seiring bertambahnya derajat pematubaraan, hal ini menunjukkan berkurangnya hidrogen alifatik pada total hidrogen, pengurangan rasio molekul C=O yang telah menjadi C=C, dan juga pengurangan jumlah cincin karbon aromatik pada tiap monomer seiring meningkatnya derajat pematubaraan seiring meningkatnya derajat pematubaraan. 5 dari 7 parameter konsisten dengan hasil penelitian terdahulu, namun terdapat ketidaksesuaian dari hasil perhitungan parameter CH_2/CH_3 yang seharusnya berkurang dan

juga parameter (R/C)_u yang seharusnya bertambah seiring naiknya derajatnya pematubaraan.

3. Terdapatnya ketidaksesuaian dalam perhitungan parameter disebabkan oleh beberapa faktor yaitu, persebaran sampel yang seragam hanya pada satu kelas saja, sedangkan penelitian terdahulu memiliki range sampel yang lebih luas, dan juga sampel yang digunakan merupakan raw coal dimana sampel masih memiliki kandungan zat pengotor seperti mineral lempung.

DAFTAR PUSTAKA

- Pigram, C. J., G. P. Robinson, dan S. L. Tobing, 1982, Late Cenozoic origin of the Bintuni Basin and adjacent Lengguru Fold Belt, Irian Jaya, Proceedings Indonesian Petroleum Association 11th Annual Convention, Vol. I, h. 109-126.
- Pieters, P. E., C. J. Pigram, D. S. Trail, D. B. Dow, N. Ratman, dan R. Sukanto, 1983, The stratigraphy of western Irian Jaya, Proceedings Indonesian Petroleum Association 12th Annual Convention, Vol. I, h. 229-261.
- Pieters, P. E., A. Sufni Hakim, dan S. Atmawinata, 1990, Geologi Lembar Ransiki, Irian Jaya, Skala 1 : 250.000, Bandung: Pusat Penelitian dan Pengembangan Geologi.
- Setiadi, D. J., Alam, S., Muljana, B., Gani, R. M. G., & Firmansyah, Y. (2018). BATUBARA FORMASI STEENKOOL DI DAERAH

- RANSIKI, PAPUA. *Bulletin of Scientific Contribution: GEOLOGY*, 16(3), 237–246.
- Chevallier, B., dan M. L., Bordenave, 1986, Contribution of geochemistry to the exploration in the Bintuni area, Irian Jaya, Proceedings Indonesian Petroleum Association 15th Annual Convention, Vol. I, h. 439-460.
- Mielczarski, J. A., Deńca, A., & Strojek, J. W. (1986). Application of Attenuated Total Reflection Infrared Spectroscopy to the Characterization of Coal. *Applied Spectroscopy*, 40(7), 998–1004. <https://doi.org/10.1366/0003702864507909>
- Krevelen, D. W. Van. (1993). *Coal: Typology Chemistry Physics Constitution* (3rd ed.). Elsevier.
- Kastner, J., Pichler, T., Kuzmany, H., Curran, S., Blau, W., Weldon, D. N., Delamesiere, M., Draper, S., & Zandbergen, H. (1994). Resonance Raman and infrared spectroscopy of carbon nanotubes. *Chemical Physics Letters*, 221(1–2), 53–58. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(94\)87015-2](https://doi.org/10.1016/0009-2614(94)87015-2)
- Jiang, J., Yang, W., Cheng, Y., Liu, Z., Zhang, Q., & Zhao, K. (2019). Molecular structure characterization of middle-high rank coal via XRD, Raman and FTIR spectroscopy: Implications for coalification. *Fuel*, 239(October 2018), 559–572. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.11.057>
- Orrego-Ruiz, J. A., Cabanzo, R., & Mejía-Ospino, E. (2011). Study of Colombian coals using photoacoustic Fourier transform infrared spectroscopy. *International Journal of Coal Geology*, 85(3–4), 307–310. <https://doi.org/10.1016/j.coal.2010.12.013>
- He, X., Liu, X., Nie, B., & Song, D. (2017). FTIR and Raman spectroscopy characterization of functional groups in various rank coals. *Fuel*, 206, 555–563. <https://doi.org/10.1016/J.FUEL.2017.05.101>
- Zhao, L., Guanhua, N., Hui, W., Qian, S., Gang, W., Bingyou, J., & Chao, Z. (2020). Molecular structure characterization of lignite treated with ionic liquid via FTIR and XRD spectroscopy. *Fuel*, 272(December 2019), 117705. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117705>
- Chen, Y., Mastalerz, M., & Schimmelmann, A. (2012). Characterization of chemical functional groups in macerals across different coal ranks via micro-FTIR spectroscopy. *International Journal of Coal Geology*, 104, 22–33. <https://doi.org/10.1016/j.coal.2012.09.001>
- Yan, J., Lei, Z., Li, Z., Wang, Z., Ren, S., Kang, S., Wang, X., & Shui, H. (2020). Molecular structure characterization of low-medium rank coals via XRD, solid state ¹³C NMR and FTIR spectroscopy. *Fuel*, 268(December 2019), 117038. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117038>