



## بررسی تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی آن در نانوتیوب

پوهنيار اللهيار انوش

ديپارتمنت فزيک، پوهنځی تعليم و تربيه، مؤسسه تحصیلات عالی دايکندي: افغانستان.

ایمیل آدرس: allahyaranosh1213@gmail.com

### خلاصه

**بیان مسئله:** تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل در نانوتیوب‌ها یک مسئله مهم در زمینه نانوتکنالوژی و نانو مواد است که به بررسی تأثیر پراکندگی پرتوهای الکترونی یا فوتونی ساختار نانوتیوب‌ها بر خواص و عمل کرد آن‌ها می‌پردازد.

**هدف:** هدف این تحقیق بررسی تابع توزیع الکترون، نرخ پراکندگی کل و اثرات آن‌ها بر خواص نانو ساختار می‌باشد.

روش تحقیق: این تحقیق از نظر هدف و جمع آوری معلومات بنیادی-کیفی بوده که به روش کتابخانه‌ای صورت گرفته است.

**نتیجه:** تابع توزیع فریمان، توزیع احتمال مکانی الکترون‌ها در یک جامد را توصیف می‌کند. این تابع مشخص می‌کند که الکترون‌ها به چه احتمالی در مکان‌های مختلف درون جامد قرار دارند. این یک تابع احتمال سه‌بعدی از مختصات مختلف فضایی مانند  $(x, y, z)$  برای هر الکترون در سیستم جامد است.

**نتیجه‌گیری:** در مطالعه خواص الکترونیکی نانو تیوب‌ها، تحلیل تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل اطلاعات مهمی ارائه می‌دهد. به‌طور خاص، بررسی این توابع در نانو تیوب‌ها می‌تواند به ما در درک بهتر از رفتار الکترون‌ها در این ساختارهای نانو کمک کند. با تحلیل تابع توزیع الکترون در نانو تیوب‌ها، می‌توانیم نحوه توزیع الکترون‌ها در فضا و انرژی را در این ساختارهای نانو دقیق‌تر بفهمیم.

**کلمات کلیدی:** پراکندگی، تابع توزیع، نانو ساختار، نانوتیوب.

استناد: انوش، اللهیار. (۱۴۰۳). بررسی تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی آن در نانوتیوب. دو فصلنامه علمی-

تحقیقی عینک، سال اول، شماره ۲: ۱۱۶-۱۰۴.

حق مؤلف © نویسندگان.

ناشر: مؤسسه تحصیلات عالی لوگر

## مقدمه

تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل در نانو تیوب‌ها یک مسئله مهم در زمینه نانو تکنالوژی و نانو مواد است (Odom et al., 2000; Reich et al., 2008)، که به بررسی تأثیر پراکندگی پرتوهای الکترونی یا فوتونی از سطح و ساختار نانو تیوب‌ها بر خواص و عملکرد آن‌ها می‌پردازد. این مسئله می‌تواند تأثیر گسترده‌ای بر رفتار الکترونی، اپتیکی و حرارتی نانو تیوب‌ها داشته باشد (Reich et al., 2008). با توجه به اینکه نانو تیوب‌ها به‌عنوان یک دستگاه کلیدی در فناوری‌های نانو ساختار مورد استفاده قرار می‌گیرند، شناخت دقیق از تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل در این ساختارها اهمیت بالایی دارد. این مسئله می‌تواند در طراحی و ساخت دستگاه‌های نانو الکترونیک، نانو فوتونیک، حسگرهای نانو ساختار و سایر فناوری‌های نانو مواد، تأثیرگذار باشد (Léonard, 2008; Wilder et al., 1998).

بنابراین، بررسی و تحلیل تابع توزیع و نرخ پراکندگی کل در نانو تیوب‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است و مطالعات بیشتر در این زمینه می‌تواند به توسعه و بهبود فناوری‌های نانو ساختار کمک کند. تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل دو مفهوم مهم در فزیک نانو مواد هستند که تأثیر به‌سزایی بر رفتار الکترونی و خواص برقی و الکترونیکی مواد دارند (Léonard, 2008).

این دو مفهوم به‌طور مستقیم با حرکت الکترون‌ها و انتقال حرارت در ساختارهای نانو ساختار و نانو مواد مرتبط هستند. اینجا چند نکته در مورد اهمیت و ضرورت این مفهوم مورد توجه قرار گرفته است (Jin et al., 2008; Kittel & McEuen, 2018). تابع توزیع الکترون: این تابع مشخص‌کننده توزیع احتمالاتی الکترون‌ها در یک ماده است. این تابع برای توصیف و پیش‌بینی ویژگی‌های الکترونی ماده، مانند جریان الکتریکی یا برقی، خواص الکترونیکی و خواص حرارتی، بسیار حائز اهمیت است. به‌عنوان مثال، در نانو مواد، تغییرات در تابع توزیع الکترون ممکن است منجر به خصوصیات الکترونی جدید و نوآورانه شود. نرخ پراکندگی کل: این نرخ نشان‌دهنده احتمال پراکندگی الکترون‌ها از سطح‌ها، خطاها و عیوب داخلی در یک ماده است. نرخ پراکندگی کل بر رفتار حرارتی، حرکت الکترون‌ها و خواص الکترونیکی تأثیرگذار است. اطلاعات در مورد نرخ پراکندگی کل به ما کمک می‌کند تا اثرات پراکندگی را در نانو مواد در نظر بگیریم و بر رفتار الکترون‌ها تأثیر بگذاریم. به‌طور کلی، شناخت دقیق این دو مفهوم در فزیک نانو مواد ضروری است تا بتوان به‌طور دقیق‌تر به خصوصیات و رفتار الکترون‌ها در این ساختارهای نانو ساختار پی برد و از آن‌ها برای طراحی و ساخت دستگاه‌های الکترونیکی و نانو الکترونیکی پیشرفته بهره‌برده شود (Jin et al., 2008).

تحقیقات در زمینه تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل در نانو تیوب‌ها بسیار گسترده است و موضوعات مختلفی از جمله خواص الکترونیکی، رفتار الکترون در مواد نانو، اثرات پراکندگی و ... مورد بررسی قرار گرفته‌اند (Dirac, 1928).

در زیر به برخی از تحقیقات پیشین در این زمینه اشاره خواهیم کرد: یک تحقیق در سال ۲۰۱۸ با استفاده از شبیه‌سازی‌های نظری، تأثیر اندازه و شکل نانو تیوب بر تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل را بررسی کرد. نتایج نشان داد که اندازه و شکل نانو تیوب می‌تواند به‌طور قابل توجهی بر خواص الکترونیکی و رفتار الکترون‌ها تأثیرگذار باشد (Ionițua et al., 2018). تحقیقات دیگر در زمینه نانو تیوب‌های دوجداره نشان داده است که تحلیل تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل می‌تواند به ما کمک کند تا به فهم عمیق‌تری از خواص الکترونیکی این ساختارها دست‌یابیم و در طراحی دستگاه‌های الکترونیکی دوجداره بهبود داشته باشیم (Ando et al., 1982). برخی تحقیقات در زمینه نانو تیوب‌های گرافن نشان داده است که تحلیل تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل می‌تواند به ما کمک کند تا به فهم بهتر از رفتار الکترون‌ها در این ساختارهای نانو دست‌یابیم و بهبود در خصوص عملکرد و کارایی آن‌ها داشته باشیم (M. S. Dresselhaus et al., 1996). در راستای این تحقیقات ما به بررسی خواص برقی نانو تیوب‌های کاربنی پرداخته‌ایم. بسیاری از دانشمندان بر این باور هستند که نانو تیوب‌های کاربنی به دلیل قابلیت هدایت ویژه یک‌بعدی جای مواد سیلیکانی در تراشه‌های نسل آینده را خواهند گرفت (Avouris et al., 2002; Guo et al., 2002).

به‌طور کلی، تحقیقات در زمینه تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل در نانو تیوب‌ها به‌منظور بهبود فهم ما از خواص الکترونیکی و رفتار الکترون‌ها در این ساختارهای نانو صورت گرفته است و اطلاعات حاصل از این تحقیقات می‌تواند در طراحی و بهبود فناوری‌های الکترونیکی نانو مؤثر باشد. هدف اساسی این تحقیق بررسی نرخ پراکندگی کل در نانو تیوب و اثرات آن بر خواص این نانو ساختار می‌باشد، که در نهایت به جواب سوال؛ تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل در نانو تیوب چه نقشی دارد؟ خواهیم رسید.

## مواد و روش کار

این تحقیق به روش کتابخانه‌ای انجام گرفته و اطلاعات آن از مقالات علمی که جدیداً نشر گردیده، جمع‌آوری شده است.

## تابع توزیع الکترون در نانوتیوب

الکترون‌ها فرمیون هستند و از آمار فرمی - دیراک پیروی می‌کنند. تابع توزیع فرمی دیراک به‌صورت زیر بیان می‌شود:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{1 + e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}}} \quad (1)$$

در این رابطه  $\epsilon$  انرژی الکترون و  $\mu$  پتانسیل کیمیاوی سیستم است. در درجه حرارت صفر پتانسیل کیمیاوی همان انرژی فرمی ذرات است. از آنجایی که  $k_B T$  در درجه حرارت اتاق از مرتبه  $0.01 eV$

است بنابراین تابع توزیع (۱) تنها در حوالی  $\varepsilon = \mu$  دارای تغییرات می‌باشد. پتانسیل کیمیاوی تا تصحیح مرتبه دوم درجه حرارت برای فلزات به صورت زیر بیان می‌شود (Ashcroft, 1976).

$$\pi = \varepsilon_f - \frac{\pi^2}{6} (K_B T)^2 \frac{DOS'(\varepsilon_f)}{DOS(\varepsilon_f)} \quad (2)$$

در این رابطه DOS کثافت حالت می‌باشد. از این رابطه به سرعت می‌توان فهمید، جایی که مشتق کثافت حالات نسبت به انرژی صفر است پتانسیل کیمیاوی با انرژی فرمی برابر است. اما تابع توزیع در پراکندگی‌ها دچار تغییر می‌شود به عبارتی ساحه برقی و یا برخوردها ماهیت تابع توزیع را دچار تغییر می‌کنند. در این گونه موارد به جای تابع توزیع (۱) تابع نابرابری به نام  $g$  معرفی می‌کنند که ماهیت تابع توزیع را در پراکندگی‌های گوناگون بیان می‌کند. تابع توزیع نابرابر  $g$  را در حالت کلی به صورت معادله بولتزمن بیان می‌کنیم (Ashcroft, 1976).

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{r}} + \vec{f} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{K}} = \sum_{\vec{K}'} \frac{d\vec{K}}{8\pi^3} \{W_{\vec{K}\vec{K}'} g(\vec{K}) [1 - (\vec{K}')] - W_{\vec{K}\vec{K}'} g(\vec{K}') [1 - g(\vec{K})]\} \quad (3)$$

در این رابطه  $K_{\vec{K}\vec{K}'}$  نرخ پراکندگی<sup>۱</sup> از حالتی با وکتور موج  $\vec{k}$  به حالتی با وکتور موج  $\vec{k}'$  است. زمان برقراری که معیاری از احتمال برخورد الکترون در مدت زمانی معلوم را می‌دهد، برابر معکوس آهنگ پراکندگی کل<sup>۲</sup> از یک حالت  $\vec{k}$  به تمامی حالات ممکن  $\vec{k}'$  است (Grinyaev et al., 2018; Xiao et al., 2003).

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \sum_{\vec{k}'} W_{\vec{k}\vec{k}'} \quad (4)$$

از مکانیک کوانتومی می‌دانیم آهنگ پراکندگی از یک حالت به حالت دیگر به وسیله فائده طلایی فرمی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$W_{i-f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|H|i\rangle|^2 \delta(E_i - E_f \pm \hbar\omega) \quad (5)$$

در این رابطه  $H$  هامیلتونی عکس‌العمل است که عامل پراکندگی می‌باشد. همان‌گونه که قبلاً اشاره کردیم در غیاب ناخالصی‌ها و نقایص بلوری، فونون‌ها عوامل پراکنده در جامدات می‌باشند. نرخ پراکندگی الکترون - فونون در نانو تیوب‌های کاربنی به وسیله رابطه زیر داده می‌شود

(Pennington & Goldsman, 2003b, 2003a):

<sup>1</sup> Scattering rate

<sup>2</sup> Total scattering rate

$$W_{\vec{k},\vec{k}} = \sum_{a||q,\mu} \frac{\hbar D^2 DOS(\vec{k}+\vec{q})}{\rho d E_p(\vec{q},\mu)} \left[ N_p + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \quad (6)$$

در این رابطه  $\rho$  کثافت کتله صفحه گرافیت بوده و برابر  $7.6 \times 10^{-7} \frac{kg}{m^2}$  است  $E_p$  و  $N_p$  به ترتیب انرژی فونون و عدد اشغال<sup>۱</sup> بوزونی است.  $D$  عددی است که با وکتور موج فونون رابطه مستقیم و خطی دارد  $D = D_1 \left( \frac{2 \left( \sum_{ph}^{\mu} (q=0) \right)^2}{E_{RMB}^2} + q \right)$  (Pennington & Goldsman, 2003b). ضرایب  $D_1 = 14eV$  و  $E_{RMB} = 30meV$  می باشند (Pennington & Goldsman, 2003b). انرژی فونون در نانو تیوب کاربنی به وسیله ی رابطه ذیل داده می شود (G. Dresselhaus et al., 1998).

$$\hbar \omega_{NT}^{\mu} = \hbar \omega_G \left( q \frac{|\vec{q}|}{|q|} + \mu \vec{q} \cdot \vec{1} \right) \quad \mu = 0, 1, \dots, N \quad (7)$$

عدد اشغال بوز - اینستن به صورت زیر بیان می شود:

$$N_p = \frac{1}{e^{\frac{E_p}{k_B T}} - 1} \quad (8)$$

هنگامی که (۶) به دست آمد، می توان آن را در معادله (۳) قرارداد تا تابع توزیع نابرابر  $g$  را به دست آورد. معادله (۳) یک معادله دیفرانسیل غیر خطی است، ولی می توان با تقریب زمان برقراری آن را به یک معادله خطی تبدیل کرد. تقریب زمان برقراری به صورت زیر بیان می شود:

$$\frac{\partial}{\partial t} g(\vec{r}, \vec{k}, t) + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} g(\vec{r}, \vec{k}, t) + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} g(\vec{r}, \vec{k}, t) = \frac{g(\vec{r}, \vec{k}, t) - g^0(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\tau(\vec{k})} \quad (9)$$

هنگامی که تابع توزیع به دست آمد مقدار انتظاری هر کمیت فیزیکی به صورت زیر به دست می آید:

$$\vec{A}(t) = \sum_{n, \vec{k}} A(\vec{k}, t) g_n(\vec{k}, t) \quad (10)$$

تقریب زمان برقراری آشکارا به این معنا است که زمان قرار مستقل از پراکندگی ها است. تابع  $g^0$  تابع توزیع ترازمند موضعی می باشد که مستقل از ساحه های اعمالی و پراکندگی ها است. در واقع این تابع همان تابع توزیع فرمی - دیراک در مورد فرمیون ها می باشد. با حل معادله (۹) تابع توزیع در یک محیط متجانس فضایی که در آن مشتقات مکانی صفر هستند به صورت زیر داده می شود (G. Dresselhaus et al., 1998):

$$g_n(\vec{k}, t) = g_n^0(\vec{k}) + e \int_{-\infty}^t dt' P(t, t') \frac{\partial}{\partial \epsilon_n(k(t'))} g_n^0(\vec{k}(t')) \cdot \vec{E}$$

(11)

<sup>1</sup> Occupation number

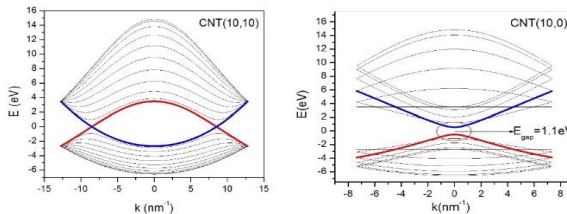
$$g_n^0(\vec{k}) = \frac{1}{e \frac{\tau_n(k) - \mu}{k_B T} + 1} \quad (12)$$

در رابطه فوق  $\vec{E}$  ساحه برقی است و نیز باید توجه داشت جهت به دست آوردن رابطه (۱۱) از معادلات نیمه کلاسیکی حرکت استفاده شده است. این معادلات به صورت زیر بیان می شوند:

$$\hbar \frac{d}{dt} \vec{k} = -e\vec{E} \quad (13)$$

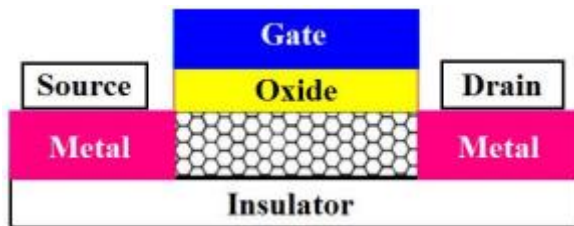
$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k} \varepsilon_n(\vec{k}) \quad (14)$$

در معادله (۱۱)  $P(t, t')$  معرف کسری از الکترون‌ها است که در انتروال زمانی  $(t, t')$  در نقطه  $\vec{k}$  هیچ‌گونه برخوردی را نداشته‌اند. با استفاده از رابطه (۶) و معادلات حرکت نیمه کلاسیکی (۱۳) و (۱۴) تابع توزیع نائرازمند  $g$  به راحتی به دست می‌آید. باید توجه کرد که در رابطه (۱۱) مشتق انرژی برای جمله تصحیحی به تابع توزیع ترازمند تنها در محدوده انرژی‌های  $\mu \approx \varepsilon$  دارای مقدار است. چون در درجه حرارت‌های پایین و در حد درجه حرارت اتاق تابع توزیع فرمی - دیراک (رابطه ۳-۱) برای انرژی‌هایی که تفاضل آن‌ها از پتانسیل کیمیاوی از مرتبه  $k_B T$  نباشد عدد ثابتی است. بنابراین عملاً تابع توزیع برای نانوتیوب‌های زیگزاگ نیمه‌هادی که اندازه تفاوت انرژی کیمینه یا بیشینه آن‌ها تا سطح فرمی چندین بار بزرگتر از  $k_B T \approx 0.01 eV$  است مقداری صفر ( $\varepsilon - \mu > 0$ ) یا یک ( $\varepsilon - \mu < 0$ ) دارد. چون نوار انرژی الکترونی حول نقطه  $k = 0$  دارای تقارن است بنا بر این متوسط سرعت الکترون‌ها در نوار انرژی صفر می‌شود و هیچ جریان خالصی به وجود نمی‌آید. این حالت، هدایت در نانوتیوب‌های زیگزاگ را ناممکن می‌سازد. برای آنکه بتوان از این گونه نانوتیوب‌ها جهت انتقال حامل‌ها استفاده کرد باید به نوعی سطح فرمی را که در حالت معمول برابر صفر است قرار شکل (۱) تا نوار هدایت بالا برد (Chen et al., 2006).



شکل (۱): (الف) گراف سطوح انرژی برای نانو تیوب زیگزاگ (10,0) (ب) سطوح انرژی نانو تیوب آرمچر (10,10).

در ترانزیستورهای اثر ساحه این کار به راحتی امکان پذیر است به صورتی که نانوتیوب را به عنوان یک مجرا بین جریان و چشمه قرار می دهند شکل (۲) در این وضعیت نانوتیوب و درگاه تشکیل یک خازن می دهند (Chen et al., 2006; Park, 2007).



شکل (۲): شمایی از یک *CNTFET* همان گونه که نشان داده شده بین چشمه و جریان یک نانو تیوب را به عنوان مجرا قرار دارد (Appenzeller et al., 2005; Sharifi et al., 2015).

با اعمال یک ولتاژ به درگاه مقداری چارج درون نانوتیوب تزریق می شود که باعث تغییر مکان سطح فرمی می شود. اگر پتانسیل مثبت به درگاه اعمال شود سطح فرمی به درون نوار هدایت کشیده خواهد شد (Nanotubes, 2008). وکتور موج فرمی به وسیله رابطه زیر داده می شود (Zhou, 2007):

$$K_F = \frac{\pi Q}{4eL} \quad (15)$$

$$Q = C(V_G - V_{Th}) \quad (16)$$

در این رابطه  $V_{Th}$  پتانسیل آستانه کار ترانزیستور می باشد و  $C$  ظرفیت خازن درگاه و نانوتیوب استوانه شکل است. ظرفیت خازن درگاه - نانو تیوب به صورت زیر معرفی می شود (Avouris et al., 2002; Javey et al., 2002):

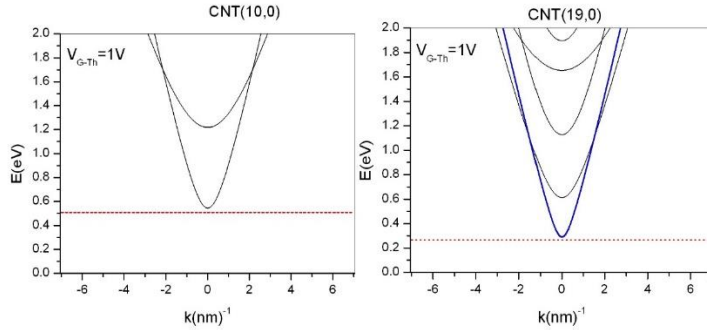
$$C = \frac{2\pi K \epsilon_0 L}{Ln\left(\frac{2(t+r)}{r}\right)} \quad (17)$$

در این رابطه  $K$  ثابت دی الکتریک اکساید درگاه،  $r$  شعاع نانو تیوب و  $t$  ضخامت اکساید درگاه است. انرژی فرمی با به دست آوردن تعداد چارج های تزریق شده به درون نانو تیوب به دست می آید. در شکل فوق سطح فرمی را برای ترانزیستوری با ضخامت اکساید درگاه ۱۰ نانومتر و ثابت دی الکتریک ۴ (اکساید سیلیکان) برای دو نانو تیوب زیگزآگ نشان داده شده است.

#### ۴. نرخ پراکندگی کل

برای محاسبه نرخ پراکندگی کل از یک نقطه با وکتور موج  $\vec{k}$  از شاخه  $v$  ساختار نوار انرژی نانو تیوب باید نرخ پراکندگی تمام پراکندگی های الکترون - فونون را که از شاخه  $v$  و وکتور موج  $\vec{k}$  به

دست می‌آید را به دست آورد و باهم جمع نمود (Compton, 1923). اما باید توجه کرد که در هر پراکندگی تحفظ انرژی و مومنتم برای حالات اولیه و نهایی باید برقرار باشد.



شکل (۳): در این شکل محل انرژی فرمی دو نانو تیوب زیگزاگ مختلف نشان داده شده است.

یک الکترون می‌تواند در مسیر حرکت خود یک فونون جذب کند این موضوع باعث افزایش انرژی الکترون می‌شود و یا می‌تواند در طول مسیر خود یک فونون گسیل کند که در این صورت انرژی الکترون کم خواهد شد (Slater, 1963). قوانین تحفظ برای این دو رویداد به صورت زیر بیان می‌شوند:

$$E_F = E_F \pm E_{phonon} \quad (18)$$

$$\vec{k}_F = \vec{k}_i \pm \vec{q} \quad (19)$$

علامت مثبت مربوط به جذب فونون و علامت منفی مربوط به گسیل فونون است. رابطه وکتوری (۱۸) با توجه به رابطه وکتور موج کل نانو تیوب به صورت حاصل جمع مؤلفه‌های خود تبدیل به دو شرط تحفظ برای اندازه وکتورهای موج و شاخه نهایی از نوار انرژی که الکترون باید برود می‌شود (Devreese, 2000; Hilsun & Rose-Innes, 2014).

$$\left( \vec{k}_F \frac{\vec{k}_{||}}{|\vec{k}_{||}|} + v_f \vec{k}_{\perp} \right) = \left( k_i \frac{\vec{k}_{||}}{|\vec{k}_{||}|} + v_i \vec{k}_{\perp} \right) \pm \left( q \frac{\vec{k}_{||}}{|\vec{k}_{||}|} + \mu \vec{k}_{\perp} \right) \quad (20)$$

از برابر قرار دادن ضرایب دو وکتور  $\vec{k}_{||}$  و  $\vec{k}_{\perp}$  در رابطه (۱۸) و در نظر گرفتن رابطه (۱۸) برای تحفظ انرژی در نهایت قوانین تحفظ زیر هر پراکندگی مجاز را تعریف می‌کند:

$$E_F = E_F \pm E_{phonon}, \quad \vec{k}_F = \vec{k}_i \pm \vec{q}, \quad V_F = V_i \pm \mu \quad (21)$$

منطقه اول بریلوئن در هر شبکه یک بعدی در محدوده  $-\frac{\pi}{T} \leq k \leq \frac{\pi}{T}$  قرار دارد که در آن T اندازه وکتور انتقال شبکه است و در مورد نانو تیوب‌های کاربنی در بخش‌های قبل کاملاً تعریف شده است.



در هر پراکندگی ممکن است بردار موج الکترون از منطقه اول بریلون خارج شود و یا عدد مربوط به شاخه نوری منفی شود و یا از حد پیشینه خود بزرگتر شود. البته هیچ کدام از اینها نقض قوانین تحفظ نیست، چون ساختار شبکه دوره‌ای است ما می‌توانیم مسئله را در یک منطقه دوره‌ای دنبال کنیم و یا در منطقه کاهش یافته مسائل را دنبال کنیم و هر دوی اینها جواب‌های یکسانی خواهند داشت (M. Dresselhaus et al., 2018)؛ ولی بنا به دلایلی که بعداً خواهیم دید کار کردن در محدوده منطقه کاهش یافته بسیار مناسب‌تر است. در یک شبکه دوره‌ای همواره می‌توان نقاط خارج از منطقه اول بریلون را با اضافه کردن وکتوری در شبکه معکوس به نقطه معادل در منطقه اول بریلون آورد (M. Dresselhaus et al., 2018). تنها کاری که باید انجام داد آن است که این وکتور را پیدا کنیم. به روندی که با استفاده از تقارن‌های موجود در شبکه به پیدا کردن نقطه معادل در منطقه اول بریلون می‌شود اصطلاحاً پروسه متباعد گفته می‌شود و به‌عنوان قلب تپنده‌ای در محاسبات کامپیوتری به میزان بسیار زیادی از محاسبات می‌کاهد (Sidebottom, 2012).

اکنون در موقعیتی هستیم که می‌توانیم عامل نرخ پراکندگی کل را به دست آوریم. برای این کار ساختار نوار انرژی الکترونی و فونونی را به تکه‌های کوچکی تقسیم می‌کنیم؛ هرچه تعداد این تکه‌ها بیشتر باشد محاسبات ما دقیق‌تر خواهد شد. بعد از این که این کار را کردیم شرایط تحفظ (۱۹) را در مورد هر پراکندگی بررسی می‌کنیم اگر این شرایط برقرار بود آنگاه یک پراکندگی مجاز خواهد بود و نرخ پراکندگی را به وسیله رابطه (۶) به دست می‌آوریم. برای روشن شدن مطلب این موضوع را کمی بیشتر توضیح می‌دهیم. یک الکترون وقتی پراکنده می‌شود وکتور موج و هم‌چنین تراز که در آن قرار می‌گیرد تغییر می‌کند در واقع بعد از هر برخورد مطابق با رابطه (۱۷) و (۱۹) الکترون دارای وکتور موجی برابر  $\vec{k}_F = \vec{k}_i \pm \vec{q}$  می‌شود و به تراز  $v_F = v_i \pm \mu$  می‌رود حال باید بررسی کرد انرژی الکترون در این تراز جدید و وکتور موج جدید، انرژی معادل  $E_F \pm E_{\text{photon}}$  دارد یا نه. اگر این دو انرژی برابر بودند قوانین تحفظ (۱۹) برقرار بوده و پراکندگی مجاز می‌باشد. هنگامی که نرخ‌های پراکندگی برای یک نقطه به دست آمد با جمع زنی رو تمام آن‌ها نرخ پراکندگی کل به دست خواهد آمد. با به دست آمدن نرخ پراکندگی کل در هر نقطه، زمان واهلش از رابطه (۴) به دست می‌آید و تابع توزیع را می‌توان از رابطه (۱۱) به دست آورد (Sidebottom, 2012).

### نتیجه‌گیری

در مطالعه خواص الکترونیکی نانو تیوب‌ها، تحلیل تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل اطلاعات مهمی ارائه می‌دهد. به‌طور خاص، بررسی این توابع در نانو تیوب‌ها می‌تواند به ما در درک بهتر از رفتار الکترون‌ها در این ساختارهای نانو کمک کند.

<sup>1</sup> Umklapp Process

با تحلیل تابع توزیع الکترون در نانو تیوب‌ها، می‌توانیم نحوه توزیع الکترون‌ها در فضا و انرژی را در این ساختارهای نانو دقیق‌تر بفهمیم. این اطلاعات می‌تواند به ما کمک کند تا خواص الکترونیکی نانو تیوب‌ها را بهبود بخشیم و رفتار الکترون‌ها در این ساختارها را بهتر پیش‌بینی کنیم.

همچنین، تحلیل نرخ پراکندگی کل در نانو تیوب‌ها می‌تواند به ما در درک بهتر از پراکندگی الکترون‌ها از طریق موانع مختلف در این ساختارهای نانو کمک کند. این اطلاعات می‌تواند به ما کمک کند تا عامل‌های مختلفی که بر رفتار الکترون‌ها در نانو تیوب‌ها تأثیر می‌گذارند را شناسایی کرده و بهبودی در خصوص عملکرد و کارایی این ساختارهای نانو داشته باشیم.

بنابراین، تحلیل تابع توزیع الکترون و نرخ پراکندگی کل در نانو تیوب‌ها می‌تواند به ما کمک کند تا به فهم عمیق‌تر و دقیق‌تری از خواص الکترونیکی و رفتار الکترون‌ها در این ساختارهای نانو دست یابیم و در طراحی و بهبود فناوری‌های الکترونیک نانو تأثیرگذار باشیم.

## References

- Ando, T., Fowler, A. B., & Stern, F. (1982). Electronic properties of two-dimensional systems. *Reviews of Modern Physics*, 54(2), 437.
- Appenzeller, J., Lin, Y.-M., Knoch, J., Chen, Z., & Avouris, P. (2005). Comparing carbon nanotube transistors-the ideal choice: a novel tunneling device design. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 52(12), 2568–2576.
- Ashcroft, N. W. (1976). *ND Mermin Solid State Physics* Saunders College. Philadelphia, PA, USA.
- Avouris, P., Martel, R., Derycke, V., & Appenzeller, J. (2002). Carbon nanotube transistors and logic circuits. *Physica B: Condensed Matter*, 323(1–4), 6–14.
- Chen, B.-H., Wei, J.-H., Lo, P.-Y., Wang, H.-H., Lai, M.-J., Tsai, M.-J., Chao, T. S., Lin, H.-C., & Huang, T.-Y. (2006). A carbon nanotube field effect transistor with tunable conduction-type by electrostatic effects. *Solid-State Electronics*, 50(7–8), 1341–1348.
- Compton, A. H. (1923). A quantum theory of the scattering of X-rays by light elements. *Physical Review*, 21(5), 483.
- Devreese, J. T. (2000). Polarons. *ArXiv Preprint Cond-Mat/0004497*.
- Dirac, P. A. M. (1928). The quantum theory of the electron. Part II. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 118(779), 351–361.
- Dresselhaus, G., Dresselhaus, M. S., & Saito, R. (1998). *Physical properties of carbon nanotubes*. World scientific.
- Dresselhaus, M., Dresselhaus, G., Cronin, S., Gomes Souza Filho, A., Dresselhaus, M., Dresselhaus, G., Cronin, S. B., & Gomes Souza Filho, A. (2018). Electron and Phonon Scattering. *Solid State Properties: From*

- Bulk to Nano*, 185–209.
- Dresselhaus, M. S., Dresselhaus, G., & Eklund, P. C. (1996). *Science of fullerenes and carbon nanotubes: their properties and applications*. Elsevier.
- Grinyaev, Y. V., Chertova, N. V., Shilko, E. V., & Psakhie, S. G. (2018). The Continuum Approach to the Description of Semi-Crystalline Polymers Deformation Regimes: The Role of Dynamic and Translational Defects. *Polymers*, 10(10), 1155.
- Guo, J., Lundstrom, M., & Datta, S. (2002). Performance projections for ballistic carbon nanotube field-effect transistors. *Applied Physics Letters*, 80(17), 3192–3194.
- Hilsum, C., & Rose-Innes, A. C. (2014). *Semiconducting III--V Compounds: International Series of Monographs on Semiconductors*. Elsevier.
- Ionițua, M., Cricua, L. E., Voicu, S. I., Dinescu, S., Miculescu, F., Costache, M., & Iovu, H. (2018). Synergistic effect of carbon nanotubes and graphene for high performance cellulose acetate membranes in biomedical applications. *Carbohydrate Polymers*, 183, 50–61.
- Javey, A., Kim, H., Brink, M., Wang, Q., Ural, A., Guo, J., McIntyre, P., McEuen, P., Lundstrom, M., & Dai, H. (2002). High- $\kappa$  dielectrics for advanced carbon-nanotube transistors and logic gates. *Nature Materials*, 1(4), 241–246.
- Jin, S., Fischetti, M. V., & Tang, T. (2008). Theoretical study of carrier transport in silicon nanowire transistors based on the multisubband Boltzmann transport equation. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 55(11), 2886–2897.
- Kittel, C., & McEuen, P. (2018). *Introduction to solid state physics*. John Wiley & Sons.
- Léonard, F. (2008). *Physics of carbon nanotube devices*. William Andrew.
- Nanotubes, C. (2008). *Quantum Cylinders of Graphene, editado por S. Saito e A. Zettl*. Elsevier, Amsterdam.
- Odom, T. W., Huang, J.-L., Kim, P., & Lieber, C. M. (2000). Structure and electronic properties of carbon nanotubes. In *The Journal of Physical Chemistry B* (Vol. 104, Issue 13, pp. 2794–2809). ACS Publications.
- Park, J.-Y. (2007). Carbon nanotube field-effect transistor with a carbon nanotube gate electrode. *Nanotechnology*, 18(9), 95202.
- Pennington, G., & Goldsman, N. (2003a). Monte Carlo study of electron transport in a carbon nanotube. *IEICE Transactions on Electronics*, 86(3), 372–378.
- Pennington, G., & Goldsman, N. (2003b). Semiclassical transport and phonon scattering of electrons in semiconducting carbon nanotubes. *Physical Review B*, 68(4), 45426.
- Reich, S., Thomsen, C., & Maultzsch, J. (2008). *Carbon nanotubes: basic concepts and physical properties*. John Wiley & Sons.
- Sharifi, F., Moaiyeri, M. H., Navi, K., & Bagherzadeh, N. (2015). Quaternary

- full adder cells based on carbon nanotube FETs. *Journal of Computational Electronics*, 14, 762–772.
- Sidebottom, D. L. (2012). *Fundamentals of condensed matter and crystalline physics: an introduction for students of physics and materials science*. Cambridge University Press.
- Slater, J. C. (1963). *Quantum Theory of Molecules and Solids: Volume 1, Electronic Structure of Molecules*. McGraw-Hill.
- Wilder, J. W. G., Venema, L. C., Rinzler, A. G., Smalley, R. E., & Dekker, C. (1998). Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes. *Nature*, 391(6662), 59–62.
- Xiao, Y., Yan, X. H., Cao, J. X., & Ding, J. W. (2003). Three-phonon Umklapp process in zigzag single-walled carbon nanotubes. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 15(23), L341.
- Zhou, X. (2007). *Carbon nanotube transistors, sensors, and beyond*.



Two quarterly

Ainak Academic- Research Journal

Logar Higher Education Institute

Journal license date: June/2023



## Investigation of electron distribution function and its scattering rate in nanotubes

Allahyar Anosh

Physics, Education, Daikundi Higher Education Institute.

Email: allahyaranosh1213@gmail.com

---

### ABSTRACT

---

**Problem statement:** Electron distribution function and total scattering rate in nanotubes is an important issue in the field of nanotechnology and nanomaterial, which examines the influence of electron or phonon beam scattering on the structure of nanotubes on their properties and performance.

**Objective:** The purpose of this research was to investigate electron distribution function, total scattering rate and their effects on nanostructure properties.

**Methods:** Based on the purpose and the collection of data, this research study is qualitative which was done using the library method.

**Results:** The Freeman distribution function describes the spatial probability distribution of electrons in a solid. This function specifies the probability that the electrons are located in different places inside the solid. It is a three-dimensional probability function of different spatial coordinates such as  $(x,y,z)$  for each electron in the solid system.

In the study of electronic properties of nanotubes, the analysis of electron distribution function and total scattering rate provides important information. In particular, investigating these functions in nanotube can help us better understand the behavior of electrons in these nanostructures. By analyzing the electron distribution function in nanotubes, we can understand more precisely how electrons are distributed in space and energy in these nanostructures.

**Keywords:** Nanostructure, Scattering, Distribution function, Nanotube.

---

Cite this article: Anosh, Allahyar.(2024). Investigation of electron distribution function and its scattering rate in nanotubes, Ainak Academic – Research Journal (Two Quarterly). 1(2): 104-116.

Logar Higher Education Institute

© The Author(s).

---



## مشکلات محیطی مرکبات سلفر در زغال سنگ و راه‌های جلوگیری آن

پوهنیار سید رضا سروری<sup>۱\*</sup>، پوهنیار امان‌الله لامع<sup>۲</sup>

<sup>۱\*</sup> د پیاوړتیا کیمیا، تعلیم و تربیه، موسسه تحصیلات عالی نیمروز: افغانستان.

<sup>۲</sup> د پیاوړتیا بیولوژی، تعلیم و تربیه، موسسه تحصیلات عالی نیمروز: افغانستان.

ایمیل آدرس: s.reza.sarwari@gmail.com

### خلاصه

**بیان مسئله:** زغال سنگ یکی از مهم‌ترین منابع تأمین انرژی است که در تولید کوک مورد استفاده قرار می‌گیرد و از دو بخش مواد عضوی و معدنی تشکیل شده است که مواد عضوی اجزایی اصلی تشکیل دهنده زغال سنگ با منشاء گیاهی هستند، حضور ناخالصی‌هایی مانند سلفر و خاکستر در زغال سنگ، کیفیت آن را تحت تأثیر قرار داده و باعث خورده‌گی تجهیزات و آلوده‌گی محیط زیست می‌گردد. معمولاً در اثر سوخت زغال سنگ مرکبات سلفر مخصوصاً سلفردای اکساید ( $SO_2$ ) در محیط آزاد می‌شود که از طریق باران‌های تیزابی اثر نامطلوب بر صحت انسان و محیط زیست می‌گذارد.

**هدف:** مطالعه و مرور مشکلات محیطی مرکبات سلفر در زغال سنگ و راه‌های جلوگیری آن برای به حداقل رساندن مرکبات سلفر در جو می‌باشد.  
**روش تحقیق:** برای نگارش این مقاله از روش توصیفی و کتابخانه‌ای (مروری) استفاده کرده و همچنان مقالات معتبر بین‌المللی (سایت‌های معتبر گوگل اسکالر، ای‌اس‌ای) و کمپیوتر مورد استفاده قرار گرفته است.

**نتیجه‌گیری:** در نتیجه برای حذف ناخالصی‌های محتوای زغال سنگ توسط جاذب کاربن فعال، خاک رس مورد بررسی قرار گرفته که می‌تواند ۸۰٪ محتوایی سلفر در زغال سنگ را کاهش دهد.

**کلمات کلیدی:** روش حذف سلفر، زغال سنگ، سلفردای اکساید، مشکلات محیط زیست.

**استاد:** سروری، سید رضا و لامع، امان‌الله (۱۴۰۳). مشکلات محیطی مرکبات سلفر در زغال سنگ و راه‌های جلوگیری آن، دو فصلنامه علمی - تحقیقی عینک، سال اول، شماره ۲: ۱۱۷-۱۲۵.

حق مؤلف © نویسندگان.

ناشر: مؤسسه تحصیلات عالی لوگر

## مقدمه

در اثر احتراق زغال‌سنگ سففر موجود در آن، به شکل اکسایدهای سففر وارد هوا شده و از طریق باران‌های تیزابی اثرات نامطلوبی بر محیط‌زیست می‌گذارند (Starý et al., 2021). موادی سوخت که در مرکبات خود دارای مقداری سففر می‌باشند، باید قبل از استفاده سففر آنها حذف نمود، زیرا درصدی مقدار سففر باعث تولید گازهای سففردار شده و در نهایت باعث آلودگی محیط‌زیست می‌گردد. مرکبات سففر به گونه‌های مختلفی وجود دارند اما می‌توان آن‌ها به ۴ دسته کلی تقسیم‌بندی نمود که عبارت‌اند از: مرکپتان، سلفیت‌ها، دای‌سلفیت‌ها، و تیوفن‌ها می‌باشد (Ali et al., 2006)

وجود مرکبات سففر در مواد سوختی جامد (زغال‌سنگ) و جریان تصفیه آن نامطلوب است زیرا می‌تواند باعث آلودگی محیط‌زیست شود (Speight, 2015). در سال‌های اخیر محیط‌زیست تحت تأثیر آلودگی مرکبات سففر قرار گرفته‌اند که اثرات نامطلوب بالای محیط‌زیست به وجود می‌آورد. از جمله: باران‌های تیزابی، مزاحمت بوی بد ناشی از آلودگی مرکبات سففر، بحران محیط‌زیست که امروزه به یک مسأله‌ای قابل ملاحظه تبدیل شده در اثر دخالت و بهره‌وری نامعقول انسان‌ها در استفاده از مواد سوخت سففردار است که گستردگی و اهمیت این موضوع نظر دانشمندان را برای نجات آن برانگیخته است (Basfar & Mohamed, 2011). امروزه به دلیل قوانین زیست‌محیطی انگیزه قوی برای کاهش سففر در ترکیب سوخت‌ها وجود دارد. بررسی‌های انجام‌گرفته در ۳۳ کشور جهان نشان می‌دهد که مقدار سففر سوخت در تمام نمونه‌های اخذ شده نسبت به سال قبل کاهش بسیار قابل ملاحظه را نشان می‌دهد (Yu et al., 2005). در این تحقیق ما در پی آنیم تا بهترین روش‌ها را جهت کاهش آلودگی سففر و حذف آن از مواد سوخت، که همان روش‌های، جاذب کاربن فعال و بنتونیت می‌باشند، مورد بررسی قرار دهیم (Attar & Corcoran, 1978).

## مواد و روش کار

برای نگارش این مقاله از روش توصیفی و کتابخانه‌ای (مروری) استفاده شده است، مواد و وسایل کار عبارت‌اند از قلم، کاغذ، مقالات معتبر بین‌المللی (سایت‌های معتبر گوگل‌سکالر، ای‌اس‌ای) و کامپیوتر.

## ترکیب و ساختار زغال‌سنگ

زغال‌سنگ از دو بخش مواد عضوی و معدنی ناخالصی‌های فلزی و غیرفلزی تشکیل شده است. در واقع مواد عضوی اجزایی تشکیل‌دهنده زغال‌سنگ با منشأ گیاهی هستند. زغال‌سنگ معمولاً دارای مقادیر قابل توجهی از ناخالصی‌های فلزی و غیرفلزی مانند اکسایدها، سلفایدها، سلیکات‌ها، کاربونیت‌ها، فاسفیت‌ها سلفیت‌ها و غیره است که بعد از سوختن زغال‌سنگ به صورت خاکستر به جا می‌ماند و محتوایی بالای خاکستر در زغال‌سنگ باعث تجهیزات و انتشار گاز سمی می‌گردد (Meshram et al., 2015).

تجزیه و تحلیل کیمیاوی عنصری زغال سنگ ماهیت کیمیاوی مرکبات موجود در آن‌ها را آشکار نمی‌کند و بنابراین نمی‌تواند تصویر کاملی از خواص آن‌ها ارائه دهد، با این حال، خواص سوخت با اجزای کیمیاوی آن بستگی دارد که توسط عنصر تعیین می‌شود. تجزیه و تحلیل کیمیاوی مواد قابل احتراق سوخت جامد، متشکل از کاربن، هایدروجن، نایتروجن و سلفر، هنگامی که توسط اکسیجن اکساید می‌شوند، گرما آزاد می‌کنند، درحالی که اکسیجن به ویژه اجزای معدنی مرتبط با زغال سنگ به عنوان مصرف کننده گرما در طول جریان احتراق عمل می‌کنند (Fedяeva & Патраков, 2004).

جزء اصلی قابل احتراق سوخت جامد کاربن C است. محتوای کاربن در سوخت جامد بین ۵۰ تا ۹۶ درصد است. پس از احتراق کامل، ۱ کیلوگرم کاربن حدود (8230KCal/Kgr) گرما آزاد می‌کند. محتوای کاربن سوخت جامد با افزایش سن افزایش می‌یابد.

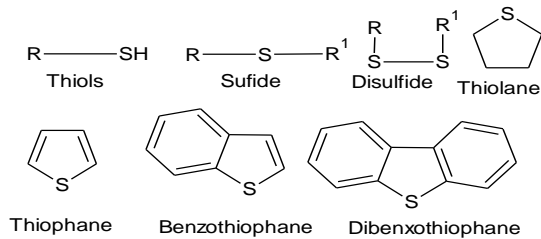
جدول ۱- افزایش محتوای کاربن در انواع زغال سنگ (Бухаркина et al., 2009).

| عناصر | انواع زغال سنگ |          |                  |               |      |
|-------|----------------|----------|------------------|---------------|------|
|       | انتراسیت       | زغال سنگ | زغال سنگ قهوه‌ای | زغال سنگ نارس | گیاه |
| C     | ۹۶             | ۸۵       | ۷۰               | ۵۵            | ۵۰   |
| H     | ۲              | ۶        | ۵                | ۶             | ۶    |
| O+S+N | ۲              | ۹        | ۲۵               | ۳۹            | ۴۴   |

سلفر یکی از مهم‌ترین ناخالصی موجود در زغال سنگ است که وجود آن در زغال سنگ باعث آلودگی محیط زیست در اثر تولید سلفردای اکساید و هایدروجن سلفاید در هنگام احتراق زغال سنگ می‌شود. برهم خوردن تعامل لایه اوزون مساله باران‌های تیزابی و ایجاد مشکلات تنفسی ناشی از متصاعد شدن این گاز سمی و مضر می‌باشد (Abdollahy et al., 2006; Jorjani et al., 2004).

سلفر S یک عنصر سوخت قابل احتراق است. محتوای سلفر در سوخت جامد ناچیز است، به استثنای شیل. سلفر در سوخت به دو بخش تقسیم می‌شوند ۱- عضوی ۲- معدنی: سلفر در ترکیبات عضوی بخشی از ترکیبات پیچیده سوخت مرکبات عضوی می‌باشد. سلفر پیریت ترکیب آن با فلزات، اغلب با آهن به شکل سلفاید است و در بخش معدنی سوخت گنجانیده شده است. سلفر عضوی و پیریت‌ها مضر می‌باشد. هنگامی که می‌سوزد، سلفر مضر اکساید شده و گرما آزاد می‌شود (انرژی احتراق سلفر 9.3MJ/Kgr است). از آنجایی که تنها سلفر مضر در احتراق دخیل است، محتوای آن در سوخت موجود است که هنگام انجام محاسبات مهندسی حرارتی مورد توجه قرار می‌گیرد (Ozbayoglu G., 1998).

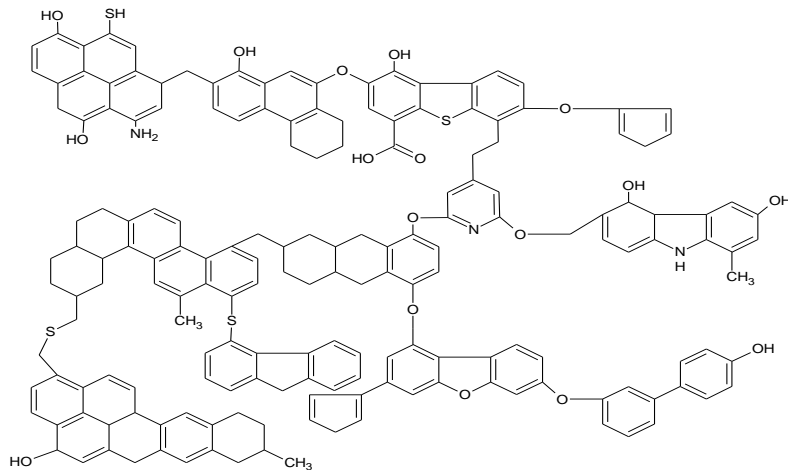




شکل ۱- ساختار کیمیاوی تعداد از ترکیبات عضوی مرکبات سلفر (Markuszewski et al, 1980).

هنگام سوزاندن سلفر مضر، سلفر دای اکساید  $SO_2$  و مقدار کمی سلفوریک انهایدرید  $SO_3$  تشکیل می‌شود که اتموسفر را آلوده می‌کند. علاوه بر این، وجود سلفوریک انهایدرید  $SO_3$  در شرایط خاصی منجر به خوردگی سطوح گرمایش فلزی، لوله و تجهیزات می‌شود. از این نظر سلفر یک ناخالصی مضر در سوخت است (Speight, JG. 2002).

سلفیت‌ها به صورت سلفیت کلسیم و آهن وارد قسمت معدنی سوخت می‌شود و قابل سوخت نیستند. در طی احتراق آن‌ها، مرکبات سلفیت به خاکستر تبدیل می‌شوند (Graveland et al. 1974).

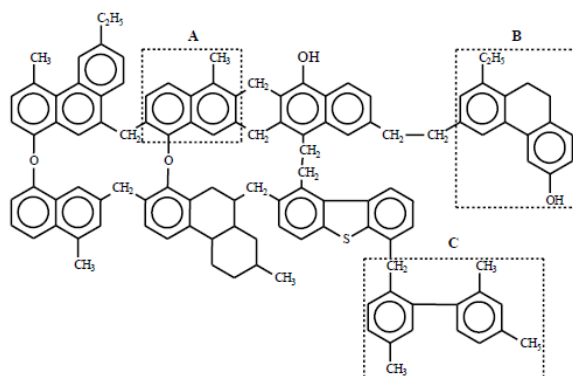


شکل ۲- تصویر از زغال‌سنگ و نحوه فرارگیری سلفر در آن (Wise, 1981).

به منظور ایجاد ساختار زغال‌سنگ، روش‌هایی برای تعیین کمی ساختار ترکیبات عضوی، بر اساس تخریب ماده، تا تشکیل ترکیباتی که با روش‌های شناخته‌شده قابل شناسایی هستند، انجام می‌شود. ساختار محصول اولیه با مطالعه مسیرهای تشکیل محصولات جانبی و محصولات اصلی مشخص می‌شود (Moskalenko et al., 2009; Бунеева & Трясунов, 2017). محصولات تخریب زغال‌سنگ را نمی‌توان به طور مستقل از سایر مرکبات جدا کرد، زیرا آن‌ها مخلوط پیچیده‌ای از مواد ساختاری مشابه را تشکیل می‌دهند. هنگامی که از بین می‌روند، آن‌ها به مرکبات ساده‌ای تبدیل می‌شوند که بینشی در

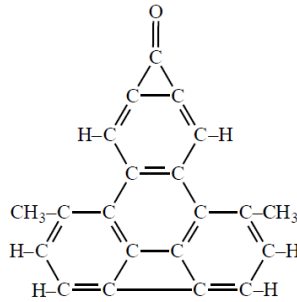
مورد مکانیزم تعامل ارائه نمی‌دهند. به‌عنوان مثال، اکسیدیشن با اکسیژن باعث تولید کاربن‌دای اکساید، استیک اسید، اسیدهای آروماتیک و آب می‌شود. بنابراین، ایجاد ساختار زغال‌سنگ یک کار بسیار دشوار است که تنها به‌صورت تقریبی قابل انجام است. در نتیجه تحقیقات، می‌توان نه یک فورمول ساختاری دقیق، بلکه تعداد زیادی پارامتر که ساختار را به‌طور متوسط توصیف می‌کند، به دست آورد. منطقی است که در مورد یک "واحد ساختاری متوسط" صحبت کنیم که ایده‌آز ساختار مرکبات اتمی را ارائه می‌دهد و برای اکثر گروپ‌های معطر یک مقدار متوسط است. چنین واحد ساختاری متوسطی باید به‌عنوان مدلی در نظر گرفته شود که از طریق آن می‌توان ویژگی‌های سیستم را تعیین کرد. زغال‌سنگ از اتوم‌هایی تشکیل شده است که ساختار نامنظمی شبیه لیگنین را تشکیل می‌دهند (Бунеева & Трясунов, 2017).

به‌عنوان یک قاعده، تعیین ساختار زغال‌سنگ و قطعات آن‌ها از طریق تجزیه و تحلیل عنصری و کمی‌ای تعامل انجام می‌شود. نظریات مختلفی در مورد ساختار مالیکولی مواد عضوی در زغال‌سنگ بیان شده است و حتی فورمول‌ها یا مدل‌هایی از واحدهای ساختاری ابتدایی ارائه شده است که مورد پذیرش عمومی قرار نگرفته است (Кушнарев et al., 2013).

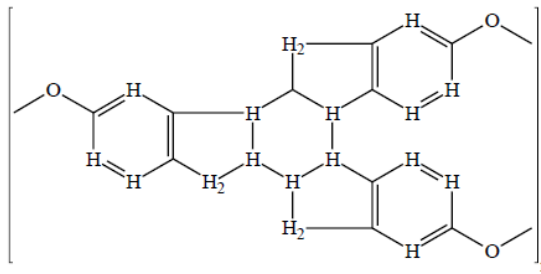


شکل ۳- مدل ساختمانی زغال‌سنگ (Бунеева, Е., & Трясунов, Б. Г. 2017).

حتی در قرن گذشته، F. Muk، بر اساس تجزیه و تحلیل عنصری زغال‌سنگ، یک فرمول تجربی برای "مالیکول" زغال‌سنگ با ترکیب  $C_{21}H_{12}O$  پیشنهاد کرد و مدل آن را به شکل یک حلقه متراکم مطرح نمود (Malumbazo, N. 2011).



شکل ۴- نشان دهند واحد ساختار فرضی مالیکولی زغال سنگ سخت مطابق نظریه (Бунеева & F. Muck Трясунов, 2017)

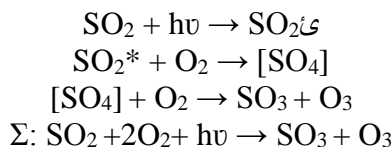


شکل ۵- مدل واحد ساختاری ابتدایی زغال سنگ مطابق نظریه (Бунеева & Трясунов, 2017) G. Storch

### آلودگی محیطی سلفر

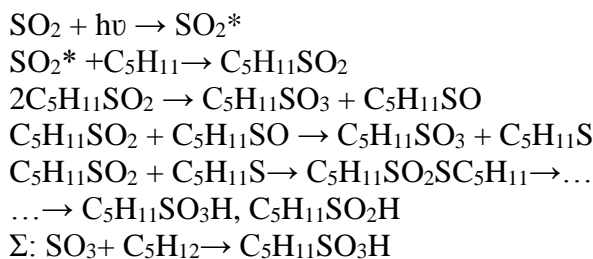
محتوای سلفردای اکساید در محصولات احتراق معمولاً از ۲ تا ۳ درصد می باشند. سلفردای اکساید پس از انتشار در جو، تحت تأثیر نور خورشید قرار گرفته و سلفردای اکساید به سلفوریک انهایدراید اکساید می شود و سپس به سلفوریک اسید تبدیل می شود. اکسیدیشن سلفردای اکساید برای تشکیل آئروسول های سلفیت و قطرات سلفوریک اسید یکی از مهم ترین جریان های کیمیاوی در جو بوده که میکانیزم اکسیدیشن آن به دو طریقه صورت می گیرد: ۱- اکسیدیشن فتوکیمیاوی (فاز گاز) ۲- اکسیدیشن ناهمگن در قطرات آبی (Деменкова & Игишева, 2014).

اکسیدیشن فتوکیمیاوی جریان تشکیل ذرات سلفیت و تیزاب سلفوریک در نتیجه اکسیدیشن فتوکیمیاوی مستقیم  $SO_2$  است. این جریان به طور مؤثر در حرارت نسبتاً بالا در تابستان یا اوایل خزان رخ می دهد. اکسیدیشن در چندین مرحله تحت تأثیر نور خورشید  $\lambda < 400$  نانومتر بر اساس مکانیزم زیر رخ می دهد (Денисов et al., 2002)

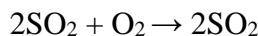


در اینجا  $h\nu$  یک کوانتوم نوری است،  $SO_2^*$  ذره برانگیخته شده سلفردای اکساید که دارای 8msec طول عمر می باشد. اکسیدیشن حالت گاز سلفردای اکساید منجر به تشکیل سلفترای اکساید می شود که می تواند بر روی هسته های مترکم موجود در هوا جذب شود. در نتیجه، خوشه هایی با مالیکول های آب تشکیل می شوند که به دلیل تراکم بیشتر به اندازه های ۱، ۰.۵-۰، میکرون می توانند بزرگ تر شوند. علاوه بر اکسیدیشن حالت گاز، جریان اکسیدیشن فاز مایع  $SO_2$  به  $SO_3$  با تشکیل سلفوریک اسید بعدی امکان پذیر است. این جریان مبتنی بر تحریک فتوکیمیای ذرات موجود در هوا ( $NO_2$  و هایدروکاربن ها) است که در حالت برانگیخته قادر به اکسیدیشن سلفردای اکساید به سلفترای اکساید هستند. حلالیت سلفردای اکساید به شدت به pH قطرات آب بستگی دارد. هر چه میزان تیزابی بیشتر باشد، اثر اکساید کننده کمتر است. سرعت اکسیدیشن سلفردای اکساید در حضور کتلیست ها (منگان، آهن یا عوامل اکساید کننده قوی اوزون، هایدروجن پراکساید) به طور قابل توجهی افزایش می یابد. وجود آمونیا حالت تیزابی قطرات را کاهش می دهد و باعث اکسیدیشن فاز مایع می شود (Peza et al., 2021).

اکسیدیشن فاز مایع سلفردای اکساید به زمان و ویژگی های قلمروی که توده هوای آلوده در آن حرکت می کند نیز بستگی دارد. به این دلیل است که وقتی توده های هوا از مناطق دارای نایتروجن کم عبور می کنند، می توان محتوای آمونیا موجود در هوا را به دلیل مصرف آن توسط جزء زیستی کاهش داد (Суркова, 2016). جریان های اکسیدیشن هیتروجن می تواند منجر به تشکیل آئروسول هایی با اندازه ذرات ۱، ۰.۵-۰، میکرون می شود که حاوی تیزاب های سولفونیک و سولفینیک هستند. مکانیزم تشکیل آن ها را با استفاده از مثال تعامل  $SO_2$  با پنتان نشان داده شده است:



تحقیقات نشان داده که در غلظت سلفردای اکساید در حدود  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ، غلظت سولفونیک اسید در محصولات تعامل به  $10^{12} \text{ cm}^{-3}$  می رسد. اکسیدیشن سلفردای اکساید به  $SO_3$  توسط آکسیجن اتموسفر نیز امکان پذیر است. کتلست های این جریان اکساید های فلزی موجود در هوا به شکل گردوغبار هستند (Organization, 2019).



در صورت وجود رطوبت، سلفردای اکساید محلول ضعیفی از سلفوریک اسید تشکیل می شود و به صورت باران تیزابی، میکرو فلور خاک و آب را مختل می کند، خاصیت تیزابی آن ها را تغییر می

دهد که باعث کاهش بهره‌وری آن‌ها می‌شود، در موجودیت قطرات آب باعث خوردگی در فلزات می‌شود (Sуркова, 2016; Yi et al., 2013).

اکسایدهای سلفر اثر مخربی بر پوست دارند، مجاری تنفسی و چشم را تحریک می‌کنند. آئروسول  $(SO_3 + H_2O)$  سمی‌تر از  $H_2SO_4$  است. اثر سمی آن قبلاً در غلظت ۱ میلی‌گرم بر مترمکعب ظاهر می‌شود و باعث سوختگی شدید و زخم‌های عمیق می‌شود (Белокурова et al., 2015). غلظت بالای سلفردای اکساید در اتوسفیر باعث ایجاد مشکلات تنفسی در انسان‌ها می‌گردد. (Sуркова, И. В. 2016).

### بررسی روش‌های حذف سلفر از زغال‌سنگ

حذف سلفر به‌منظور ذیل از مواد سوخت جامد (زغال‌سنگ) صورت می‌گیرد:

۱. برای جلوگیری از زنگ زدن وسایل نقلیه
  ۲. برای از بین بردن بوی بد مواد سوخت
  ۳. برای کاهش آلودگی محیط‌زیست توسط سلفردای اکساید
- برای حذف محتوایی سلفر از زغال‌سنگ، از روش‌های فیزیکی، کیمیاوی، و بیولوژیکی استفاده می‌شود.

روش فیزیکی: روش‌های کار فیزیکی به اساس اختلاف کثافت، خواص مقناطیسی، الکترواستاتیکی استوار بوده که مقدار سلفر موجود در مرکبات معدنی را به همین مکانیزم از فعال سنگ جدا می‌کنند (Van Aelst, et al. 2000).

روش کیمیاوی: یکی از معمول‌ترین روش‌ها برای حذف سلفر از زغال‌سنگ می‌باشد. این روش قادر به حذف هر دو نوع سلفر عضوی و معدنی است که در آن عملیات استخراج، با استفاده از روش‌های همزنی و حرارتی صورت می‌گیرد (Alam H.G., et al. 2009).

۱- روش جاذب کاربن فعال: یکی از روش‌های که جهت حذف سلفر مورد توجه محققان قرار گرفته است، کاربن فعال با ظرفیت جذب بالا و ارزان‌قیمت می‌باشد،



شکل ۷- جاذب کاربن فعال (Yi, D, Huang, et al. 2013).

۲- روش بنتونیت: بنتونیت (خاک رس معدنی) دارای جاذب متخلخل به دلیل ظرفیت جذب بالا، قیمت ارزان و مساحت سطح بالا مورد توجه محققان قرار گرفته است (Yi, D, Huang, et al. 2013).

که به روش آسان و ارزان قیمت می‌تواند غلظت مرکبات سلفر را در مواد سوخت کاهش دهد.

(Ullah, et al. 2020).



شکل ۸- جاذب بنتونیت (Ullah, et al. 2020).

### نتیجه‌گیری

- ✓ زغال سنگ سوخت جامدی است که برای آن مدل‌های متفاوت توسط دانشمندان پیشنهاد شده است.
- ✓ میزان سلفر یکی از شاخص اصلی کیفیت زغال سنگ بوده و افزایش آن بر کیفیت سوخت زغال سنگ تأثیر منفی می‌گذارد.
- ✓ سلفر یکی از اجزایی نامطلوب در زغال سنگ بوده که به شکل سلفردای اکساید وارد محیط شده و در اثر اکسیدیشن به سلفرترای اکساید تبدیل شده، سلفرترای اکساید با آب باران در جو یکجا شده به شکل باران‌های تیزابی وارد زمین شده و اثر مخربی بالای انسان‌ها و حیوانات به جا می‌گذارد.
- ✓ بناً بررسی انجام شده در سطح ۳۳ کشور جهان انجام شده تا برای حفاظت از اتموسفر، انتشار سلفردای اکساید به حداقل خود برسد.
- ✓ بهترین روش که برای حذف سلفر از زغال سنگ به کار گرفته شده جاذب‌های کاربن فعال و خاک‌رست می‌باشد که تا ۸۰٪ حذف ناخالصی‌ها مؤثر می‌باشد
- ✓ تحقیقات که در این مقاله انجام شده است، محتوایی بهتری راجع به (مشکلات محیطی مرکبات سلفر در زغال سنگ و راه‌های جلوگیری آن) جمع‌آوری شده و یک منبع بهتر در زبان دری برای محققان و محصلان می‌باشد. این موضوع در منابع دیگر به صورت پراکنده موجود بوده که محققان و محصلان رشته کیمیا نمی‌توانست از آن به صورت بهتر بهره‌مند شوند.
- ✓ تحقیقات انجام شده با محدودیت‌های کاری عملی و لابراتواری نیز همراه بوده لذا به مسئولان محترم پیشنهاد می‌گردد تا برای انجام کاری علمی و تحقیقی وسایل و مواد لازم را مهیا نمایند، تا مقدار سلفر موجود در زغال سنگ را به صورت عملی و تجربی انجام داده و به یک نتیجه بهتری برسیم.

- Starý, J., Jirasek, J., Pticen, F., Zahradnik, J., & Sivek, M. (2021). Review of production, reserves, and processing of clays (including bentonite) in the Czech Republic. *Applied Clay Science*, 205, 106049.
- Ali, M. F., Al-Malki, A., El-Ali, B., Martinie, G., & Siddiqui, M. N. (2006). Deep desulphurization of gasoline and diesel fuels using non-hydrogen consuming techniques. *Fuel*, 85(10-11), 1354-1363.
- Speight, J. G. (2015). *Handbook of petroleum product analysis*. John Wiley & Sons.
- Yu, G., Lu, S., Chen, H., & Zhu, Z. (2005). Oxidative desulfurization of diesel fuels with hydrogen peroxide in the presence of activated carbon and formic acid. *Energy & Fuels*, 19(2), 447-452.
- Basfar, A. A., & Mohamed, K. A. (2011). Radiation-induced desulfurization of Arabian crude oil and straight-run diesel. *Radiation Physics and Chemistry*, 80(11), 1289-1290.
- Attar, A., & Corcoran, W. H. (1978). Desulfurization of organic sulfur compounds by selective oxidation. 1. Regenerable and nonregenerable oxygen carriers. *Industrial & Engineering Chemistry Product Research and Development*, 17(2), 102-109.
- Федяева, О. Н., & Патраков, Ю. Ф. (2004). структура и свойства макромолекулярных фрагментов органического вещества углей. *химия твердого топлива*, (5), 24-31.
- Деменкова, Л. Г., & Игишева, А. Л. (2014). Каменный уголь: состав, строение, теории образования. *Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук*, (3-2), 392-395.
- Кушнарев, Д. Ф., Пройдаков, А. Г., & Бисикало, А. Л. (2013), оличественная спектроскопия ЯМР многокомпонентных систем природного происхождения.
- World Health Organization. (2019). Ambient air pollution: training for health care providers (No. WHO/CED/PHE/EPE/19.12. 14). World Health Organization.
- Денисов, Г. В., Кузнецов, Д. Л., Новоселов, Ю. Н., & Ткаченко, Р. М. (2002). Конверсия оксидов серы и азота в воздухе под ействием микросекундных пучков электронов. *Журнал технической физики*, 72(5), 102-107.
- Белокурова, В. М., Смольникова, П. В., Карбаинова, Н. В., & Волкова, Е. А. (2015). экологические проблемы в теплоэнергетике при сжигании твердого топлива. *Экология и научно-технический прогресс. Урбанистика*, 1, 44-48.
- Perera, F. (2018). Pollution from fossil-fuel combustion is the leading environmental threat to global pediatric health and equity: Solutions exist. *International journal of environmental research and public health*, 15(1),16.

- Watts, N., Adger, W. N., Agnolucci, P., Blackstock, J., Byass, P., Cai, W., ... & Costello, A. (2015). Health and climate change: policy responses to protect public health. *The lancet*, 386(10006), 1861-1914.
- سورکوا، و. و. (2016). آنتروپوژنیک آلودگی هوا - عامل بیماری‌های زیست‌محیطی. *مجله علمی و فناوری*, (3-1)، 74-83.
- Yi, D., Huang, H., Meng, X., & Shi, L. (2013). Desulfurization of liquid hydrocarbon streams via adsorption reactions by silver-modified bentonite. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52(18), 6112-6118.
- Ullah, S., Hussain, S., Ahmad, W., Khan, H., Khan, K. I., Khan, S. U., & Khan, S. (2020). Desulfurization of model oil through adsorption over activated charcoal and bentonite clay composites. *Chemical Engineering & Technology*, 43(3), 564-573.
- Dehbashi, M., Pahlavani, M., & Moradi, E. (2014). Investigating the effect of trade development and economic growth on the quality of the environment Living in Iran. *Economic Research*, 49(3), 463-482.
- Malumbazo, N. (2011). Chemical and physical structural studies on two inertinite-rich lump coals. *University of the Witwatersrand, Johannesburg*.
- Speight, JG. (2002) Handbook of Petroleum Product Analysis, New Jersey: John Wiley & Sons, p. 454.
- Wise, W. (1981). Coal, water, fuel technology. In *Workshop US Dept. Energy. Pittsburgh, ETCTr-Report-NO. BNL* (Vol. 51427).
- Meshram, P., Purohit, B. K., Sinha, M. K., Sahu, S. K., & Pandey, B. D. (2015). Demineralization of low grade coal—A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 41, 745-761.
- Markuszewski, R., Wei, C. K., & Wheelock, T. D. (1980). Oxydesulfurization of coal treated with methyl iodide—Implications for removal of organic sulfur. *Am. Chem. Soc. Div. FuelChem. Prepr*, 25(2), 187-194.
- Ozbayoglu, G. (1998). Desulfurization of coal to protect the environment. In *Mineral processing and the environment* (pp. 199-222). Dordrecht: Springer Netherlands.
- Jorjani, E., Rezai, B., Vossoughi, M., & Osanloo, M. (2004). Desulfurization of Tabas coal with microwave irradiation/ peroxyacetic acid washing at 25, 55 and 85 C. *Fuel*, 83(7-8), 943-949.
- Abdollahy, M., Moghaddam, A. Z., & Rami, K. (2006). Desulfurization of mezino coal using combination of 'flotation' and 'leaching with potassium hydroxide/methanol'. *Fuel*, 85(7-8), 1117-1124.
- Бухаркина, Т. В., Вержичинская, С. В., Дигуров, Н. Г., & Туманян, Б. П. (2009). Химия природных энергоносителей и углеродных материалов.
- Бунеева, Е., & Трясунов, Б. Г. (2017). Методы определения структуры угля. *Вестник Кузбасского государственного технического университета*, (4 (122)), 147-155.



- Москаленко, Т. В., Данилов, О. С., Михеев, В. А., & Леонов, А. М. (2009). Теоретические методы расчета структурных параметров органической массы угля (обзор). *Горный информационно-аналитический бюллетень (научно-технический журнал)*, 10(12), 417-427.
- Liu, G., Peng, Z., Yang, P., & Wang, G. (2001). Sulfur in coal and its environmental impact from Yanzhou mining district, China. *Chinese Journal of Geochemistry*, 20, 273-281.
- Реза, С. С., Степнова, А. Ф., & Казиев, Г. З. (2021). ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ СЕРЫ И ОБЩЕЙ ВЛАГИ В КАМЕННОМ УГЛЕ МЕСТОРОЖДЕНИЯ КУЗБАСС. *ББК 72: 4я431*, 432.
- Meshram, P., Purohit, B. K., Sinha, M. K., Sahu, S. K., & Pandey, B. D. (2015). Demineralization of low grade coal—A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 41, 745-761.
- Gürü, M., Sariöz, B. V., & Cakanyildirim, C. (2008). Oxidative desulfurization of tufanbeyli coal by hydrogen peroxide solution. *Energy Sources, Part A*, 30(11), 981-987.
- Van Aelst, J., Rodríguez, R. Á., Yperman, J., Jul, C. C., Franco, D. V., Mullens, J., & Van Poucke, L. C. (2000). Ap–tpr investigation of the effect of nitric acid leaching on the sulphur distribution in coal. *Fuel*, 79(5), 537-544.
- Alam, H. G., Moghaddam, A. Z., & Omidkhah, M. R. (2009). The influence of process parameters on desulfurization of Mezino coal by HNO<sub>3</sub>/HCl leaching. *Fuel processing technology*, 90(1), 1-7.



Two quarterly

Ainak Academic- Research Journal

Logar Higher Education Institute

Journal license date: June/2023



## Environmental problems of sulfur citrus in coal and ways to prevent it

Sayed Reza, Sarwari<sup>1\*</sup> and Amanullah Lami<sup>2</sup>

<sup>1\*</sup> Chemistry, Education, Nimroz Institute of Higher Education

<sup>2</sup> Biology, Education, Nimroz Institute of Higher Education.

Email: s.reza.sarwari@gmail.com

---

### ABSTRACT

---

**Problem Statement:** Coal is one of the most important sources of energy supply, which is used in the production of coke, and it consists of two parts, organic and mineral materials, which organic materials are the main components of coal with herbal origin. The presence of impurities such as sulfur and ash, in coal, affects its quality and causes equipment to corrode and pollute the environment. Usually, as a result of burning coal, sulfur, especially sulfur dioxide (SO<sub>2</sub>), is released in the environment, which has an adverse effect on human health and the environment through acid rain.

**Objective:** The objective of this research is to study and review the environmental problems of sulfur compounds in coal and ways to prevent them to minimize sulfur compounds in the atmosphere.

**Method:** To write this article, a descriptive and library (review) method was used, as well as international authoritative articles (Google Scholar, ISA) and computer were used.

**Conclusion:** As a result, to remove the impurities of the coal content by the active carbon absorber, clay has been investigated, which can reduce 80% of the sulfur content in the coal.

**Keywords:** sulfur removal method, coal, sulfur dioxide, environmental problems.

---

**Cite this article:** Sarwari· Sayed Reza & Lami, Amanullah.(2024). Environmental problems of sulfur citrus in coal and ways to prevent it, Ainak Academic – Research Journal (Two Quarterly). 1(2): 117- 129.

Logar Higher Education Institute

© The Author(s).

---