

# شناسایی ویژگی‌های ساختاری و ترکیب باندی زغال‌سنگ‌های منطقه قشلاق، البرز شرقی: با استفاده از آنالیزهای FT-IR، XRD و Raman

نادر تقی‌پور<sup>۱</sup>، طاهره ربانی<sup>۲</sup> و رضا ظهیری<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup>استادیار، دانشکده علوم زمین، دانشگاه دامغان، دامغان، ایران

<sup>۲</sup>کارشناسی ارشد، دانشکده علوم زمین، دانشگاه دامغان، دامغان، ایران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۶/۰۲/۰۱ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۰۵/۱۴

## چکیده

نهشته‌های زغال‌سنگی قشلاق در گستره رسوبات سازند شمشک با ترکیب ماسه‌سنگ، کنگلومرا، سیلتستون، آهک و آرژیلیت قرار گرفته‌اند. به منظور بررسی‌های کانی‌شناسی و ویژگی‌های ساختاری لایه‌های زغال‌سنگی قشلاق، از یازده لایه زغال‌سنگ از چهار معدن در حال استخراج، نمونه‌برداری شد. رخداد کانی‌های موجود در زغال‌سنگ و همچنین شناسایی ساختار باندهای آلی و معدنی در زغال‌سنگ‌های منطقه قشلاق با استفاده از پتروگرافی معدنی و انجام آنالیزهای FT-IR، XRD و Raman مورد بررسی قرار گرفت. مطالعه نمونه‌های دستی و مقاطع صیقلی، حضور کانی‌های رسی، پیریت، کالکوپیریت، سیدریت و کوارتز را تأیید می‌کند. همچنین حضور کانی‌های کانولینیت، کوارتز، سیدریت، دولومیت، کلسیت، پیریت، مونت‌موریلونیت و ایلیت توسط طیف‌های XRD به اثبات رسید. باندهای آلی - معدنی نظیر  $\text{CO}_2$ ،  $\text{OH}$ ،  $\text{Al-OH}$ ،  $\text{C-S}$ ،  $\text{S-S}$ ،  $\text{Si-O}$ ،  $\text{CH}_3$ ، کانی‌های کربناته،  $\text{C=C}$  آروماتیک و  $\text{CH}$  آروماتیک و آلفاتیک توسط FT-IR در لایه‌های زغال‌سنگ قشلاق تشخیص داده شده‌اند. طیف‌سنجی Raman باند گرافیتی (G) در محدوده  $1585\text{ cm}^{-1}$  -  $1581\text{ cm}^{-1}$  و باند نقص ( $D_1$ ) در محدوده  $1352\text{ cm}^{-1}$  -  $1341\text{ cm}^{-1}$  در لایه‌های زغال‌سنگ قشلاق مشاهده شد. باند گرافیتی شدت قوی دارد و پهن‌شدگی چندانی را نشان نمی‌دهند.

**کلیدواژه‌ها:** زغال‌سنگ، Raman، FT-IR، XRD، البرز شرقی.

\*نویسنده مسئول: نادر تقی‌پور

E-mail: taghipour@du.ac.ir

## ۱- پیش‌نوشتار

زغال‌سنگ مجموعه‌ای شیمیایی، فیزیکی و ماده‌ای غیرمتجانس شامل سازنده‌های آلی و غیرآلی است. استفاده از زغال‌سنگ در صنعت، وابستگی شدیدی به هر دو سازنده آلی و معدنی آن دارد (Georgakopoulos et al., 2003). به گونه‌ای که رفتار زغال‌سنگ در موقعیت‌های صنعتی تابع شکل بلورین سازندگان مختلف مواد کانیایی آن بوده (Ward, 2016) و ساختار و ترکیب زغال‌سنگ تعیین‌کننده نوع کاربرد آن است (Davis, 2003). به‌طور کلی ویژگی‌های ساختاری زغال‌سنگ به دلیل تأثیرگذاری آن بر روی واکنش‌پذیری شیمیایی در فرایندهای سوختن، پیرولیز، گدازش و تبخیرشدگی در میان پژوهشگران بسیار مورد توجه است. به بیان دیگر آگاهی از پارامترهای ساختاری زغال‌سنگ در پیش‌بینی و کنترل این فرایندها ضروری است. به همین دلیل ساختار پیچیده و ناهمگن زغال‌سنگ سبب شده بررسی ساختار آن یک موضوع پژوهشی مهم باشد (Manoj and Kunjomana, 2012). Ward (2016) کانی‌ها و سایر مواد غیرآلی موجود در زغال‌سنگ شامل نمک‌ها و سایر مواد غیرآلی حل شده در آب منفذی زغال‌سنگ، عناصر غیرآلی ترکیب شده با سازنده‌های آلی و ذرات غیرآلی گسسته (بلورین یا غیر بلورین) را نماینده واقعی اجزای کانیایی می‌داند و در بررسی اهمیت و آنالیز مواد کانیایی موجود در لایه‌های زغال‌سنگی، بر اساس فرایندهای تشکیل، کانی‌ها را در چهار گروه آواری، زیستی، ته‌نشست هم‌زمان با رسوب‌گذاری و ته‌نشست غیرهمزمان با رسوب‌گذاری بررسی می‌کند. بیش از ۱۸۰ کانی در زغال‌سنگ، محصولات اکسیداسیون و باطله‌های حاصل از آن تشخیص داده شده است (Ward, 2016). طبق نظر Schatzel and Stewart (2012) رایج‌ترین کانی‌ها و گروه‌های کانیایی در لایه‌های زغال‌سنگی شامل سولفید، رس، کربنات، فلدسپار و کوارتز هستند.

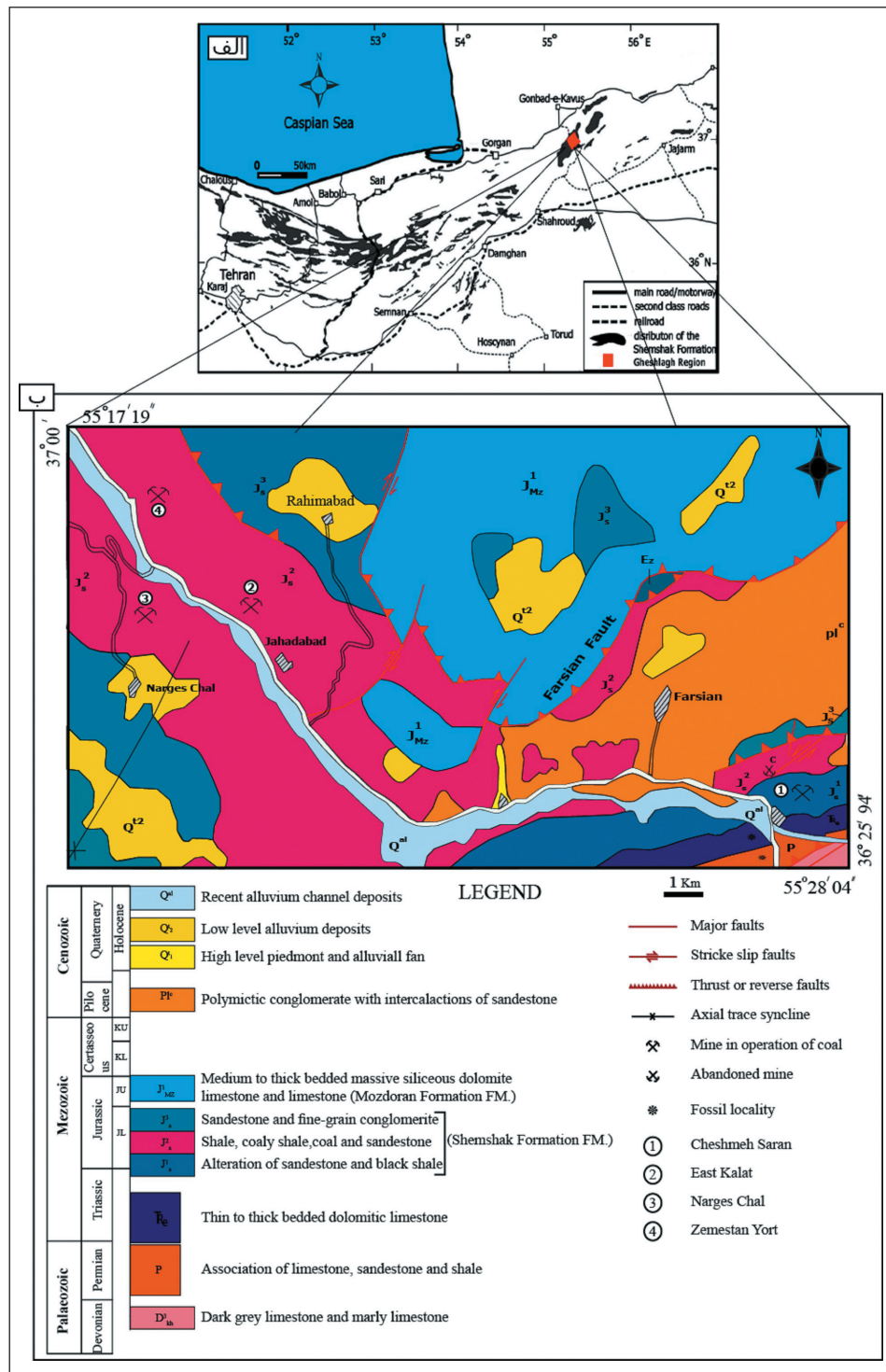
رخداد عناصر در زغال‌سنگ به دو شیوه، پیوند با مواد آلی و پیوند با مواد کانیایی است، در نتیجه به منظور فهمیدن الگوی توزیع عناصر در زغال‌سنگ، شناخت این دو شکل بسیار مهم است (Baruah et al., 2003). به‌طوری که آنالیزهای کانیایی ممکن است کمک شایانی در تشخیص شیوه رخداد و تحرک عناصر جزئی ویژه، همراه با سازنده‌های سمی بالقوه مانند آرسنیک و جیوه کنند (Ward, 2016) و این

## ۲- زمین‌شناسی ناحیه زغال‌دار قشلاق

منابع زغال‌سنگی ایران متعلق به دو حوضه زغال‌سنگی اصلی در شمال و مرکز ایران هستند. حوضه شمالی ایران به سه ناحیه بزرگ البرز غربی، مرکزی و شرقی تقسیم شده است (شکل ۱-الف). به‌طور کلی لایه‌های زغال‌دار در شمال ایران مربوط به سن تریاس بالایی تا ژوراسیک زیرین و بخشی از سازند زغال‌دار شمشک هستند (Bragin et al., 1981). سازند ضخیم لایه و سیلیسی-آواری شمشک به سن تریاس بالایی-باجوسین زیرین به‌طور گسترده‌ای در شمال و مرکز ایران رخمون دارد (Assereto, 1966; Vollmer, 1987; Seyed-Emami, 2003; Fürsich et al., 2005 and 2009; Seyed-Emami et al., 2001, 2005 and 2006; Shekarifard et al., 2012). ناحیه زغال‌دار قشلاق در البرز شرقی (در محدوده استان گلستان) و در ناودیس اولنگ-قشلاق با امتداد شمال شرقی جنوب غربی واقع شده است (شکل ۱-ب). این ناحیه زغال‌دار دارای وسعت ۷۰ کیلومتر مربع با طول جغرافیایی  $37^\circ$  تا  $23'$  و  $37^\circ$  عرض جغرافیایی  $15'$  تا  $20'$   $55^\circ$  (فتوحی، ۱۳۵۷) و شامل بخش‌های زغال‌دار وطن، نرگس‌چال، کلات، زمستان

شمشک، بر روی سنگ‌آهک دولومیتی الیکا و در زیر تشکیلات آهکی دلیچای و لار واقع شده‌اند و واحدهای سنگی شامل ماسه‌سنگ، شیل، سیلتستون، آهک، آهک‌های دولومیتی و آرژیلیت افق‌های زغالی مورد مطالعه را دربر می‌گیرند.

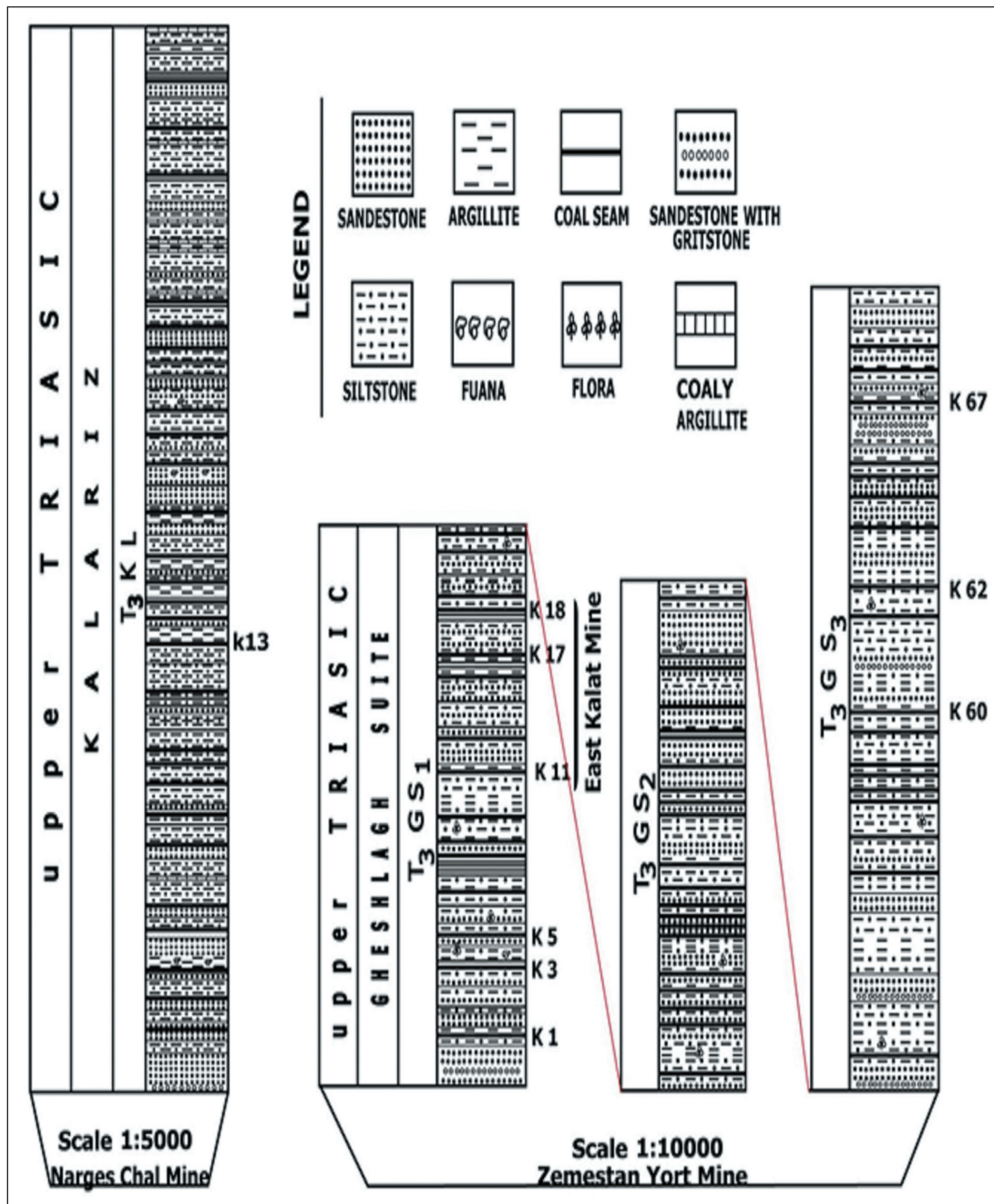
یورت و رودبار است. تحقیق فوق بر روی ۱۱ لایه زغال‌سنگی از ۴ معدن در حال استخراج در ناحیه زغال‌دار قشلاق در گستره رسوبات سازند شمشک صورت پذیرفته است. در حالت کلی لایه‌های زغال‌سنگی در ناحیه مذکور در گستره رسوبات سازند



شکل ۱- الف) نقشه محلی توزیع گروه شمشک در البرز مرکزی و شرقی که منطقه مورد مطالعه بر روی آن مشخص شده است (Seyed-Emami et al., 2006)؛ ب) نقشه زمین‌شناسی بخشی از ناحیه قشلاق که معادن زغال‌سنگ مورد مطالعه در آن واقع شده‌اند (زهراب، ۱۳۸۳).

طبقات و خصوصیات زغال‌خیزی، لایه‌های زغال‌سنگی در ۳ زیربخش کلاریز پایینی، میانی و بالایی بررسی می‌شوند. همچنین زیربخش کلاریز در بخش معدنی زمستان یورت و کلات به ۵ زیر بخش شامل: بخش غزنوی، بخش قشلاق پایینی، بخش قشلاق میانی، بخش قشلاق فوقانی و بخش آسیاب تقسیم می‌شود. معدن زغال‌سنگ چشمه‌ساران نیز متعلق به بخش غزنوی از این ناحیه است (شرکت زغال‌سنگ البرز شرقی، ۱۳۶۲ و ۱۳۷۸ الف و ب) (شکل ۲).

بر اساس تقسیمات ناحیه‌ای، سازند شمشک در ناحیه قشلاق به ۶ واحد سنگی (اکراسر، لهنبد، کلاریز، آلاشت، شیرین دشت، دانسرت) تقسیم شده است. زیربخش کلاریز بخش اصلی زغال‌دار ناحیه بوده که به علت ضخامت بسیار زیاد به ۳ قسمت تحتانی، میانی و بالایی تقسیم شده و شامل ماسه‌سنگ‌های خاکستری رنگ با دانه‌بندی مختلف، سیلستون، آرژیلیت و زغال همراه با فسیل‌های گیاهی فراوان است (فتوحی، ۱۳۵۷). در بخش معدنی نرگس چال با توجه به ترکیب سنگ‌شناسی



شکل ۲- ستون چینه‌شناسی لایه‌های زغال‌سنگی در منطقه قشلاق که لایه‌های زغال‌سنگ نمونه‌برداری شده بر روی آن مشخص شده است (شرکت زغال‌سنگ البرز شرقی، ۱۳۶۲ و ۱۳۷۸).

بررسی پتروگرافی آلی زغال‌سنگ‌های قشلاق بیانگر حضور هر سه گروه ماسرالی شامل گروه ویتربیت (vol.% ۶۶/۲ تا ۸۷/۲ شامل ماسرال‌های کالودترینیت، کالولیتینیت و کورپوزلینیت)، گروه اینترتینیت (vol.% ۴/۹ تا ۲۳/۳ شامل ماسرال‌های فوزینیت، سمی‌فوزینیت، ماکرینیت، اسکرتینیت، فانگینیت، اینرتودترینیت و میکربینیت) و گروه لپتینیت (vol.% ۰ تا ۳/۵ شامل ماسرال‌های اسپورینیت، کوتینیت، رزینیت و لیتودترینیت) است (ربانی و همکاران، ۱۳۹۵ الف). شاخص آب زیرزمینی (GWI) و شاخص پوشش گیاهی (VI) زغال‌سنگ‌های قشلاق گویای برتری گیاهان آبی/علفی، شرایط بی‌هوازی تا کم اکسیژن، آلکانل و تغییرات سطح ایستایی به همراه مجاورت نسبی به سمت محیط‌های دریایی در تشکیل این زغال‌سنگ‌هاست (ربانی و همکاران، ۱۳۹۵ ب).

شمعانیان و حسینی اشلقی (۱۳۹۴) به مطالعه کانی‌شناسی و ژئوشیمی زغال‌سنگ‌های منطقه قشلاق پرداخته‌اند و کانی‌های کوارتز، کائولینیت، مونت‌موریلونیت، آلیت، مسکوویت و ایلیت را به عنوان کانی‌های اصلی این زغال‌سنگ‌ها معرفی کرده‌اند. تأثیر کانی‌شناسی زغال‌سنگ‌های قشلاق بر روی زهاب اسیدی این معدن نیز توسط حسینی اشلقی و شمعانیان (۱۳۹۱) مورد مطالعه قرار گرفته است.

شعاعانیان و لایه ۱۱ لایه زغال‌سنگ استخراجی مربوط به ۴ معدن فعال در ناحیه زغال‌دار قشلاق، شامل لایه‌های K1، K3، K5، K60، K62 و K67 معدن زمستان بورت، لایه K13 معدن نرگس‌چال، لایه S2 معدن چشمه‌ساران و لایه‌های K11، K17 و K18 معدن شرق کلات نمونه‌برداری صورت گرفت. پس از پایان هر نمونه‌برداری، جهت حفظ نمونه‌ها از آلودگی و هوازدگی و همچنین تفکیک آنها از یکدیگر، نمونه‌ها در کیسه‌های مخصوص همراه با شماره نمونه قرار داده شدند. به منظور بررسی‌های میکروسکوپی اجزای معدنی زغال‌سنگ‌ها، تعداد چهار مقطع صیقلی برای هر کدام از لایه‌های زغال‌سنگی تهیه شد که شامل سه مقطع صیقلی از ذرات خرد شده زغال‌سنگ با اندازه کمتر از یک میلی‌متر و یک مقطع صیقلی از نمونه دستی زغال‌سنگ، توسط میکروسکوپ پلاریزان Olympus مدل BX51 و با عدسی‌هایی با بزرگنمایی ۴، ۱۰ و ۲۰ در نور سفید مورد مطالعه قرار گرفتند. آنالیز XRD بر روی نمونه‌های زغال‌سنگ و خاکستر تهیه شده از آن، از دستگاه پراش پرتو ایکس دانشگاه دامغان (مدل ادونس دی ایت شرکت بروکر)، مجهز به منبع تابش

برای تهیه خاکستر، نمونه‌های زغال‌سنگ بر اساس روش پیشنهادی Goodarzi et al. (2006) به مدت ۱۲ ساعت در دمای ۴۰۰°C حرارت داده شدند تا تمامی مواد آلی آنها بسوزد.

برای انجام آنالیزهای FT-IR و Raman ابتدا قرص هر نمونه به نسبت یک به سی (یک واحد نمونه و سی واحد پتاسیم برومید (KBr)) در هاون مخلوط و با فشار ۱۰ تن توسط دستگاه پرس قرص تهیه شد. برای جلوگیری از خطای احتمالی، قرص هادر آن در حرارت ۱۲۰ درجه سانتی‌گراد خشک شدند. آنالیز FT-IR با دستگاه پرکین-المبر مدل RXI انجام شد. طیف رامان توسط دستگاه طیف سنج رامان مدل Almega Thermo Nicolet با سیستم لیزری Nd:YLF ( $\lambda=532\text{ nm}$ ) در گستره طیفی  $1000\text{ cm}^{-1}$  تا  $1800\text{ cm}^{-1}$  و تفکیک‌پذیری  $4\text{ cm}^{-1}$  موجود در دانشگاه تربیت مدرس اندازه‌گیری شده است. توان لیزر  $10\text{ mW}$  است که جهت حفظ نمونه‌ها از  $30\text{ mW}$  استفاده شده است.

#### ۴- کانی‌شناسی

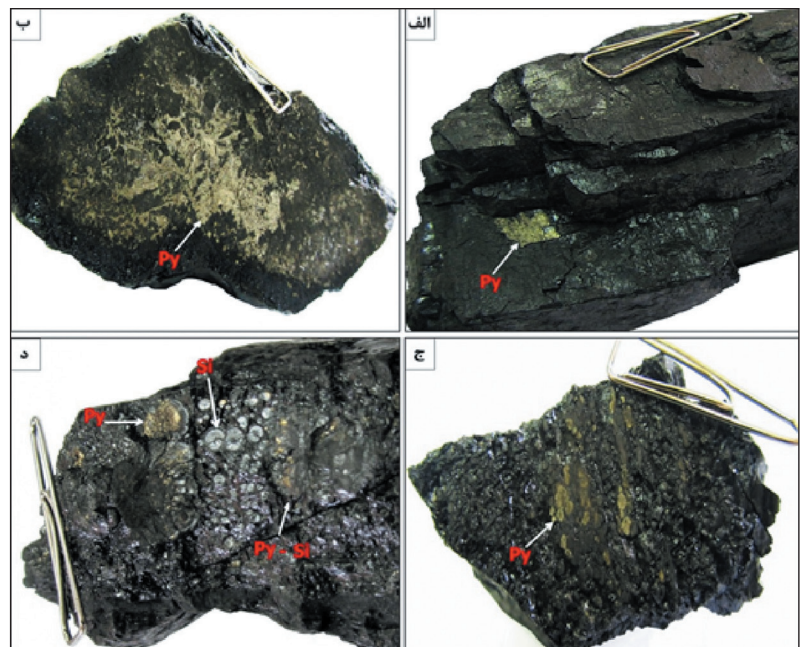
شناسایی مواد کانیایی زغال‌سنگ‌ها در دو گروه شامل کانی‌هایی با منشأ خارجی و مستقل از مواد معدنی و کانی‌هایی با منشأ ذاتی همراه با اجزای آلی موجود در زغال‌سنگ انجام می‌گیرد (Mukherjee and Srivastava, 2006). بررسی‌های پتروگرافی زغال‌سنگ‌های منطقه قشلاق نشان می‌دهد که بخش اعظم مواد معدنی موجود در این زغال‌سنگ‌ها از کانی‌های پیریت، کالکوپیریت، سیدریت، کانی‌های رسی و کوارتز تشکیل شده است.

#### ۴-۱. کانی‌های سولفیدی

سولفور به دو شکل آلی و غیرآلی در زغال‌سنگ‌ها یافت می‌شود. سولفور غیرآلی به شکل سولفید آهن (پیریت یا مارکاسیت)، سولفات و سولفات‌های آهن و همچنین سولفور عنصری رخ می‌دهد. سولفور آلی در پیوند با ساختار زغال‌سنگ است و در کل پیریت و سولفور آلی مسئول بیشترین میزان سولفور در زغال‌سنگ هستند. Frankie and Hower (1985) معتقدند که سولفید آهن می‌تواند در طی فرایند تورب‌زایی در نتیجه فعالیت‌های باکتریایی تشکیل شود. در نمونه‌های دستی زغال‌سنگ‌های منطقه قشلاق، پیریت در اشکال بلوری شکل‌دار تا نیمه‌شکل‌دار (شکل ۳- الف)، توده‌ای (شکل ۳- ب)، پولکی، کنکرسینون (شکل‌های ۳- ج و د) و پراکنده و لایه‌ای مشاهده می‌شوند (جدول ۱).

#### ۳- روش مطالعه

ابتدا از ۱۱ لایه زغال‌سنگ استخراجی مربوط به ۴ معدن فعال در ناحیه زغال‌دار قشلاق، شامل لایه‌های K1، K3، K5، K60، K62 و K67 معدن زمستان بورت، لایه K13 معدن نرگس‌چال، لایه S2 معدن چشمه‌ساران و لایه‌های K11، K17 و K18 معدن شرق کلات نمونه‌برداری صورت گرفت. پس از پایان هر نمونه‌برداری، جهت حفظ نمونه‌ها از آلودگی و هوازدگی و همچنین تفکیک آنها از یکدیگر، نمونه‌ها در کیسه‌های مخصوص همراه با شماره نمونه قرار داده شدند. به منظور بررسی‌های میکروسکوپی اجزای معدنی زغال‌سنگ‌ها، تعداد چهار مقطع صیقلی برای هر کدام از لایه‌های زغال‌سنگی تهیه شد که شامل سه مقطع صیقلی از ذرات خرد شده زغال‌سنگ با اندازه کمتر از یک میلی‌متر و یک مقطع صیقلی از نمونه دستی زغال‌سنگ، توسط میکروسکوپ پلاریزان Olympus مدل BX51 و با عدسی‌هایی با بزرگنمایی ۴، ۱۰ و ۲۰ در نور سفید مورد مطالعه قرار گرفتند. آنالیز XRD بر روی نمونه‌های زغال‌سنگ و خاکستر تهیه شده از آن، از دستگاه پراش پرتو ایکس دانشگاه دامغان (مدل ادونس دی ایت شرکت بروکر)، مجهز به منبع تابش



شکل ۳- الف) پیریت شکل‌دار (Py)؛ ب) پیریت توده‌ای (Py)؛ ج) کنکرسینون‌های پیریت (Py)؛ د) کنکرسینون‌های پیریت (Py) و سیدریت (Si) با بافت شعاعی در کنار یکدیگر.

جدول ۱- خلاصه‌ای از فراوانی و نحوه رخداد کانی‌های موجود در زغال‌سنگ‌های منطقه قشلاق.

شبه رخداد	فراوانی	کانی
N, D, Fr, M, Fi	متغیر	پیریت
M, Fi	کم	کالکوپیریت
N, M, D, Fi	متغیر	سیدریت
D, Fi	رایج	کانی‌های رسی
M, Fi	متغیر	کوارتز

(شکل ۴-ج) و لایه S2 بیشترین پیریت شکل‌دار را نسبت به سایرین دارد. تشکیل کانی کالکوپیریت به‌صورت توده‌ای (شکل ۴-الف) و در موارد نادر در اشکال پراکنده منافذ در زغال‌سنگ‌های مورد مطالعه ناحیه زغال‌دار قشلاق قابل رؤیت است.

#### ۴-۲. کانی‌های رسی

حضور این کانی‌ها به‌صورت پراکنده حفرات ماسرال‌های فوزینیت‌ها (شکل ۴-ح)، سمی فوزینیت‌ها، فانگینیت‌ها، شکستگی‌ها و پراکنده در زمینه ماسرال کالودترینیت قابل مشاهده است. در بسیاری از موارد، کانی‌های رسی کانی‌های پیریت، سیدریت و کالکوپیریت را فرا گرفته‌اند (شکل ۴-ب). فراوانی نسبی کانی‌های رسی تقریباً در تمامی نمونه‌های مورد مطالعه یکسان است. به‌طور کلی رس‌ها (ایلیت و کائولینیت) و کوارتز، کانی‌های تخریبی رایج در زغال‌سنگ‌ها هستند و در بعضی موارد می‌توانند علتی برای حضور تقریباً همه مواد کانیایی باشند (Stach et al., 1982).

#### ۴-۳. سیدریت

رخداد سیدریت در نمونه دستی به‌صورت کنکرسین بوده و اغلب بافت شعاعی این کنکرسین‌ها به وضوح قابل مشاهده است. در مواردی نیز می‌توان کنکرسین‌های سیدریتی را در کنار کنکرسین‌های پیریت مشاهده کرد (شکل ۳-د). سیدریت در مقاطع میکروسکوپی به‌صورت اشکال مختلف ندول، کنکرسین، پراکنده درزه و شکاف و پراکنده یا جانشین شده در ماسرال‌های مختلف و پراکنده در زمینه کالودترینیت قابل مشاهده است (جدول ۱). کنکرسین‌های سیدریتی در بیشتر موارد به‌صورت مستقل و در مواردی هم به‌صورت کنکرسین‌های متشکل از پیریت و سیدریت در زمینه ماسرال کالولینیت دیده می‌شوند (شکل ۴-ب). سیدریت را می‌توان به‌صورت ادخال در پیریت و کالکوپیریت موجود نیز مشاهده کرد (شکل ۴-الف). Goodarzi et al. (2006) مقدار بالای کرنات را در بررسی زغال‌سنگ‌های شمال ایران (گلندرود) منعکس‌کننده شرایط دیرینه زمین‌شناسی نهشت می‌دانند. زیرا زغال‌سنگ‌های گلندرود بر روی دگرشیبی از دولومیت و سنگ‌آهک فرسایش یافته تشکیل شده‌اند. این امر می‌تواند در مورد زغال‌سنگ‌های ناحیه قشلاق نیز صادق باشد. زیرا سازند شمشک در ناحیه غزنوی-فارسیان، با دگرشیبی فرسایشی روی رسوبات کرنات‌سازند الیکا واقع شده است (نجفی حاجی‌پور، ۱۳۸۸). از طرفی رسوبات پرمین به‌صورت سنگ‌آهک فوزولین‌دار در قسمت شرقی ناحیه زغال‌دار قشلاق (زمستان پورت) و در شمال غربی ناحیه و در کنار جاده شاهرود- آزادشهر نزدیک پادگان نوده مشاهده شده است (فتوحی، ۱۳۵۷).

#### ۴-۴. کوارتز

کوارتز فراوان‌ترین کانی اکسیدی رایج در بیشتر زغال‌سنگ‌هاست. این کانی اغلب منشأ آواری دارد و ممکن است به‌صورت دیرزاد نظیر پراکنده شکستگی‌ها و سلول‌ها و همزمان با رسوب‌گذاری از دگرسانی سیلیکات‌های آلومینیم تشکیل

پیریت رایج‌ترین کانی سولفیدی در تمامی نمونه‌های زغال‌سنگ منطقه قشلاق است. رخداد پیریت را می‌توان در کنار سیدریت، کانی‌های رسی و کالکوپیریت در تمامی مقاطع و با فراوانی و اشکال مختلف مشاهده کرد. پیریت‌های مشاهده شده دارای اشکال مختلفی نظیر بلورهای شکل‌دار تا نیمه‌شکل‌دار، کنکرسین، فراموبیدال، رگه‌ای، پراکنده درزه‌ها و شکاف‌ها و پراکنده یا جانشین شده در ماسرال‌های فوزینیت و سمی فوزینیت و پراکنده در زمینه کالودترینیت هستند (شکل ۴ و جدول ۱). (Kortenski and Kostova (1996) فاکتورهای اصلی تأثیرگذار بر روی توزیع اشکال مختلف پیریت را شامل حضور S و Fe در سنگ‌های مجاور حوضه، رساندن S و Fe به حوضه توسط آب‌های سطحی و زیرزمینی، شرایط Eh و pH، توسعه باکتری‌های سولفور، شرایط تکتونیکی و حضور محلول‌های کانی‌زا در طول فرایند زغال‌شدگی بیان می‌کنند.

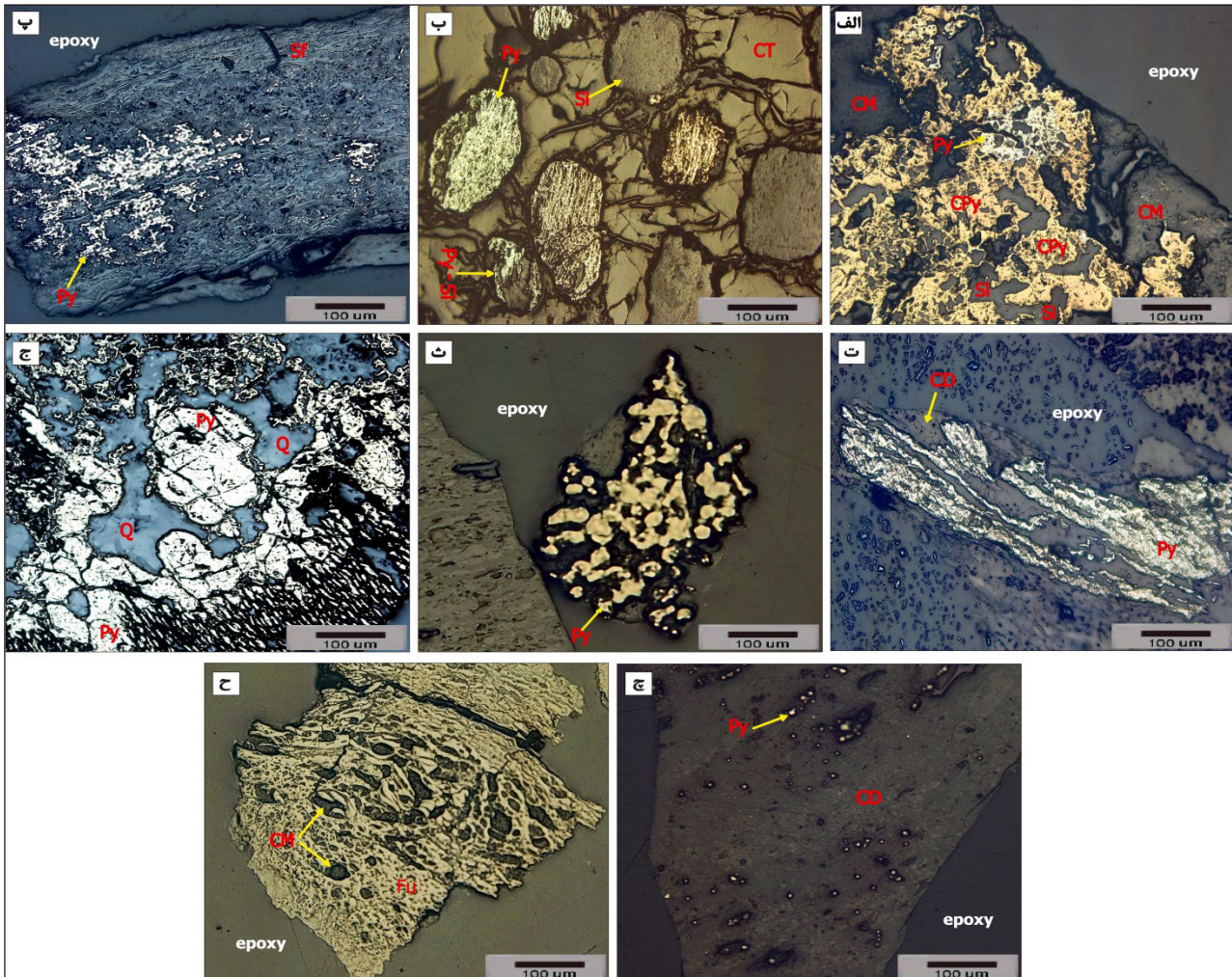
پیریت‌های فراموبیدال در زمینه‌ای از کالودترینیت و یا همراه با ماسرال فوزینیت و سمی فوزینیت و در موارد نادر در کنار سایر کانی‌ها و اشکال دیگر پیریت مشاهده می‌شوند. در مواردی نیز تشکیل پیریت‌های توده‌ای از اجتماع پیریت‌های فراموبیدال مشاهده می‌شود (شکل ۴-ث). بر اساس نظر Dai et al. (2007) اشکال فراموبیدال پیریت به عنوان همزمان با رسوب‌گذاری طبقه‌بندی می‌شوند.

در نمونه‌های مورد مطالعه، پیریت‌های توده‌ای از اجتماع پیریت‌های فراموبیدال مشاهده می‌شوند (شکل ۴-ث). پیریت‌های افشان در زمینه‌ای از ماسرال کالودترینیت با فراوانی متوسط قابل مشاهده هستند (شکل ۴-ج). همچنین پیریت‌های توده‌ای بی‌شکل با حاشیه خردشده و زاویه‌دار با اندازه‌های درشت و فراوانی متوسط دیده می‌شوند. بیشترین فراوانی پیریت‌های توده‌ای در نمونه‌های دستی متعلق به لایه K18 است. در نمونه‌های مورد مطالعه معمولاً می‌توان پیریت و کالکوپیریت توده‌ای زاویه‌دار را در کنار سیدریت، کوارتز و کانی‌های رسی مشاهده کرد (شکل ۴-الف). پیریت در اشکال جانیشینی حفرات ماسرال‌های مختلف (شکل ۴-ب) و به‌صورت پراکنده شکستگی‌ها، درز و شکاف‌ها قابل مشاهده است، به گونه‌ای که می‌توان قطع شدن باند کالودترینیت را توسط پیریت‌های پراکنده شکستگی‌ها مشاهده کرد (شکل ۴-ت). بعضی مواقع پیریت و کالکوپیریت حاوی مقدار اندکی از ادخال‌های سیدریت (شکل ۴-الف)، کوارتز، کانی‌های رسی و مواد آلی هستند (شکل ۴-ج).

پیریت به‌صورت کنکرسین در کنار کنکرسین‌های سیدریت و در زمینه‌ای از ماسرال کالولینیت حضور دارد (شکل ۴-ب). لایه K11 دارای فراوان‌ترین میزان کنکرسین‌های سیدریتی و پیریتی با اندازه‌های نزدیک به ۱ تا ۲ میلی‌متر در نمونه دستی است. به گونه‌ای که ذرات گرد پیریت در نمونه دستی از متن آلی زغال‌سنگ به خوبی قابل تفکیک و جداسازی هستند (شکل ۳-ج). پیریت‌های شکل‌دار و نیمه‌شکل‌دار حوضه زغال‌دار قشلاق در اندازه و فراوانی متوسط هستند

از سازند شمشک در ناحیه کلات و زمستان یورت (شرکت زغال‌سنگ البرز شرقی، ۱۳۷۸ الف) و ماسه‌سنگ‌های خاکستری دانه‌ریز در بخش رزمجا از سازند شمشک در منطقه نرگس چال (شرکت زغال‌سنگ البرز شرقی، ۱۳۶۲)، حضور کوارتز را می‌توان در ارتباط با این عوامل دانست.

شود (Dai et al., 2008). بیشترین رخداد کانی کوارتز در نمونه‌های مورد مطالعه به‌صورت ذرات منفرد با حاشیه خرد شده و زاویه‌دار همراه با پیریت‌های توده‌ای بی‌شکل و نیمه‌شکل‌دار هستند که در بیشتر موارد در زمینه‌ای از کانی‌های رسی قرار دارند (شکل ۴-ج). با توجه به وجود آرژیلیت- ماسه‌سنگ در بخش غزنوی



شکل ۴- الف) حضور پیریت (Py)، کالکوپیریت (CPy)، سیدریت (Si) و کانی‌های رسی (CM) در کنار یکدیگر؛ ب) کنکرسون‌های پیریت (Py) و سیدریت (Si) در زمینه‌ای از ماسرال کالوتلینیت (CT)؛ پ) حفرات ماسرال سمی فوزینیت (Sf) که توسط کانی پیریت (Py) پر شده است؛ ت) قطع شدن باند کالودترینیت (CD) توسط پیریت‌های (Py) پرکننده شکستگی‌ها؛ ث) تشکیل پیریت‌های توده‌ای (Py) از اجتماع پیریت‌های فرامویدال؛ ج) پیریت‌های نیمه‌شکل‌دار (Py) به همراه کوارتز (Q) و ادخال‌های سیاه‌رنگ ماده معدنی؛ چ) پیریت (Py) به‌صورت افشان در زمینه ماسرال کالودترینیت (CD)؛ ح) حفرات ماسرال فوزینیت (Fu) که توسط کانی‌های رسی (CM) پر شده است (از نور انعکاسی استفاده شده است).

## ۵- آنالیز پراش اشعه ایکس (XRD)

هویت کانی‌های بلورین در زغال‌سنگ می‌تواند به وسیله در معرض قرار دادن نمونه‌های پودری تهیه شده از زغال‌سنگ یا کانی‌های جدا شده از آن توسط روش پراش اشعه ایکس مورد بررسی قرار گیرد (Ward, 2016). معمولاً نتایج آنالیز پراش اشعه ایکس می‌تواند یک آنالیز نیمه کمی از مواد بلورین موجود در نمونه تولید کند و قویترین پیک‌های پراش یافته بیانگر مقدار بیشتری از سازنده هستند (Qiu et al., 2011).

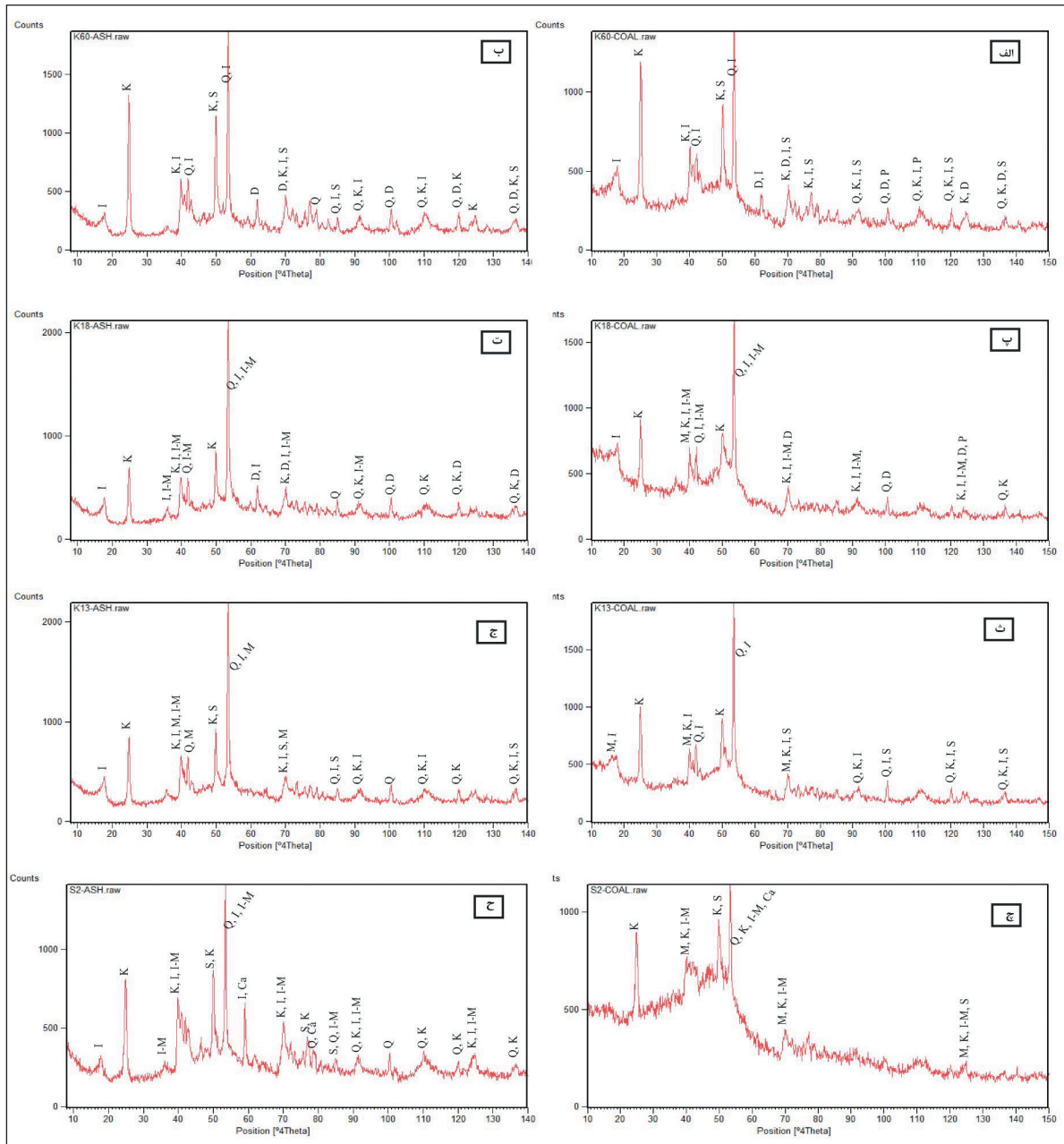
این چنین روش شناسایی برای سازنده‌هایی نظیر کانی‌های رسی - که به سختی توسط سایر روش‌ها تشخیص داده می‌شوند - مهم است. نمونه‌ای از تفسیر الگوی پراش اشعه ایکس مربوط به ۴ لایه زغال‌سنگی در شکل ۵ و نتایج نهایی حاصل از تفسیر طیف‌های آنالیز پراش اشعه ایکس (XRD) بر روی زغال‌سنگ و خاکستر نمونه‌های زغال‌سنگی ناحیه قشلاق در جدول ۲ ارائه شده است.

قوی‌ترین آنومالی در نمودارهای حاصل از آنالیز XRD لایه‌های زغال‌سنگی ناحیه قشلاق متعلق به کانی کوارتز است و بیشترین فراوانی را کوارتز به همراه کانی‌های رسی به خود اختصاص داده‌اند. کانی‌های رسی تشخیص داده شده با این روش کائولینیت و مونت‌موریلونیت هستند که کائولینیت دارای فراوانی بیشتری

حاصل مقدار اندک این دو کانی در حجم کلی زغال‌سنگ‌های ناحیه باشد که پس از تهیه خاکستر و سوختن بخش آلی زغال‌سنگ‌ها، در بخش معدنی آن، این دو کانی تغلیظ شده‌اند. کم بودن میزان این دو کانی با توجه به حضور نهشته‌های آهکی در حوضه زغال‌سنگی قشلاق می‌تواند ناشی از این باشد که در محیط‌های واقعی تشکیل زغال‌سنگ، آب‌های اسیدی باتلاق‌های تورب‌زا باعث انحلال کربنات‌ها می‌شوند (Belkin et al., 2010).

است و در تمامی لایه‌های زغال‌سنگی حضور دارد. کائولینیت در زغال‌سنگ به صورت پرکننده حفرات تلتیت و فوزینیت عمل می‌کند. این امر در بسیاری از زغال‌سنگ‌ها رایج بوده و ممکن است گویای تشکیل به وسیله فرایندهای درجا باشد (Ward, 2016).

فراوان‌ترین آنومالی‌های مشاهده شده از کانی‌های کلسیت و دولومیت تنها مربوط به خاکستر تهیه شده از زغال‌سنگ‌های ناحیه قشلاق است که این رخداد می‌تواند



شکل ۵- الگوی پراش اشعه ایکس زغال‌سنگ و خاکستر تهیه شده از آن مربوط به: الف) نمونه زغال‌سنگ لایه K60؛ ب) خاکستر زغال‌سنگ لایه K60؛ پ) نمونه زغال‌سنگ لایه K18؛ ت) خاکستر زغال‌سنگ لایه K18؛ ث) نمونه زغال‌سنگ لایه K13؛ ج) خاکستر زغال‌سنگ لایه K13؛ چ) نمونه زغال‌سنگ لایه S2؛ ح) خاکستر زغال‌سنگ لایه S2 (اختصارات: کوآرتز: Q، کائولینیت: K، پیریت: P، سیدریت: S، مونت‌موریلونیت: M، ایلیت: I، مونت‌موریلونیت: I-M، کلسیت: Ca، دولومیت: D).

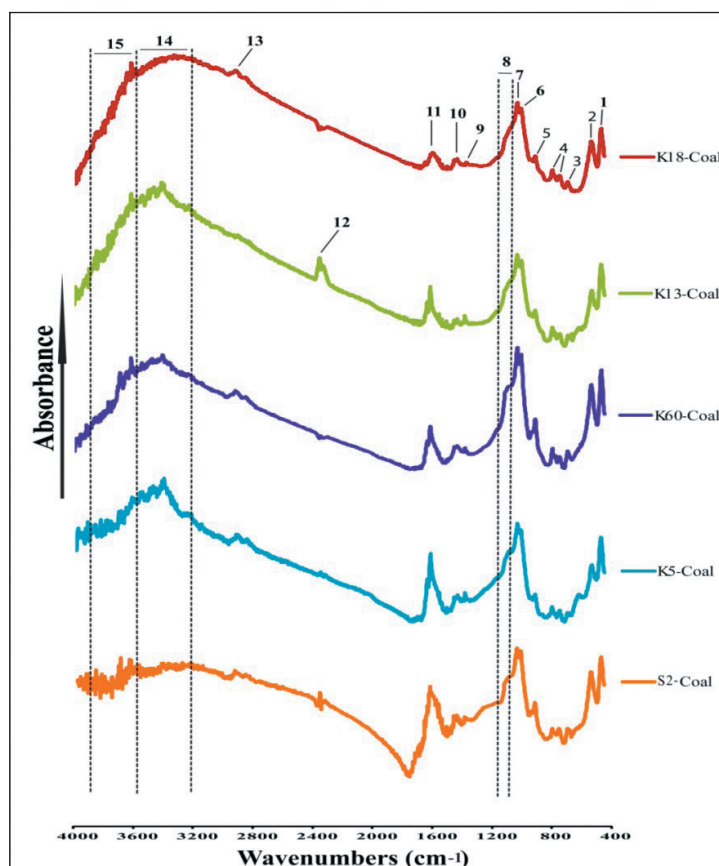
جدول ۲- کانی‌های مشاهده شده در لایه‌های زغال‌سنگی و خاکستر مربوط به لایه‌های K18, K13, K60 و S2 ناحیه قشلاق بر اساس نتایج حاصل از آنالیز پراش اشعه ایکس (XRD).

کانی‌های شناسایی شده	لایه‌های زغال‌سنگی
کوارتز، کانولینیت، ایلیت، پیریت، سیدریت، دولومیت	K60
کوارتز، کانولینیت، پیریت، مونتوریلونیت، ایلیت، دولومیت	K18
کوارتز، کانولینیت، سیدریت، مونتوریلونیت، ایلیت	K13
کوارتز، کانولینیت، سیدریت، مونتوریلونیت، ایلیت، کلسیت	S2

### ۶- آنالیز طیف‌سنج مادون قرمز (FT-IR)

از زغال‌سنگ‌های ناحیه قشلاق در واحد طول موج در جدول ۳ آورده شده است. تشخیص و تفسیر پیک‌ها به وسیله مقایسه فرکانس‌های مشاهده‌ای با پیک‌های مراجع در سایر مقالات (Cooke et al., 1986; Matteson and Herron, 1993; Baruah et al., 2003; Mukherjee and Srivastava, 2006; Saikia et al., 2007; Ravisankar et al., 2011) انجام گرفته است. با نگاه کلی به طیف‌های حاصل از آنالیز FT-IR می‌توان دریافت که ماهیت طیف‌های حاصل برای تمام نمونه‌ها تقریباً مشابه است (شکل ۶).

ساختارهای شیمیایی مولکول‌های آلی در زغال‌سنگ به شدت متغیر هستند و با تغییر درجه زغال‌شدگی آنها نیز تغییر می‌کنند. FT-IR می‌تواند به عنوان یک ابزار قدرتمند برای توصیف ویژگی‌های زغال‌سنگ، به سرعت یک دید جامع و وسیع از ساختار و گروه‌های تشکیل دهنده مواد ارائه دهد (Qiu et al., 2011). به‌طور کلی FT-IR یکی از روش‌های مفید برای آنالیز مستقیم گروه‌های عاملی در زغال‌سنگ و سازنده‌های وابسته است (Painter et al., 1987). فرکانس‌های جذب برای آنومالی‌های موجود در طیف‌های FT-IR پنج نمونه



شکل ۶- طیف‌های حاصل از انجام آنالیز FT-IR بر روی لایه‌های زغال‌سنگ حوضه زغال‌دار قشلاق.



جدول ۳- اطلاعات حاصل از تفسیر طیف‌های آنالیز FT-IR بر روی لایه‌های زغال‌سنگ ناحیه قشلاق.

شماره طیف	موقعیت باندهای نمونه‌های زغال‌سنگ (cm <sup>-1</sup> )	نوع باندها
۱۵	۳۶۰۰ - ۳۹۰۰	کانی‌های رسی
۱۴	۳۲۰۰ - ۳۶۰۰	ارتعاش باند OH
۱۳	۲۹۰۸ - ۲۹۲۰	CH آلفاتیک
۱۲	۲۳۴۴ - ۲۳۵۶	CO <sub>2</sub>
۱۱	۱۶۱۶ - ۱۶۱۴	گروه آروماتیک C=C و H <sub>2</sub> O
۱۰	۱۴۳۲ - ۱۴۲۸	کانی‌های کربناته
۹	۱۳۸۰ - ۱۳۸۶	گروه‌های CH <sub>3</sub>
۸	۱۰۶۰ - ۱۲۰۰	Si-O
۷	۱۰۲۸ - ۱۰۳۰	کوارتز
۶	۱۰۰۴ - ۱۰۰۶	کانولین
۵	۹۱۰ - ۹۱۶	Al-OH
۴	۷۴۸ - ۸۰۰	CH آروماتیک
۳	۶۹۰ - ۶۹۲	C-S
۲	۵۳۰ - ۵۳۶	Si-O
۱	۴۶۶ - ۴۶۸	S-S

اتم‌های کربن و اکسیژن در طول جهت محورهای کریستالوگرافی نسبت داد (Ravisankar et al., 2011). محدوده cm<sup>-1</sup> ۱۶۰۰ تا ۱۸۰۰ به گروه‌های عاملی دارای اکسیژن نسبت داده می‌شود و نیز بنا بر پیشنهاد پژوهشگران مختلف جذب قوی در cm<sup>-1</sup> ۱۶۰۰ نیز به وسیله باند C=C آروماتیک به وجود آمده و شدت آن به وسیله گروه‌های عاملی دارای اکسیژن برجسته شده است (Cooke et al., 1986).

بنا بر نظر Yaman et al. (2000) باند C=C در بین باندهای C=O و C-O قرار گرفته است. در نتیجه در زغال‌سنگ‌های درجه پایین که میزان اکسیژن بالاتری دارند، این باندها، باند ساختاری C=C را پنهان می‌کنند. در نمونه‌های مورد مطالعه در حوضه زغال‌سنگی قشلاق، گروه‌های عاملی دارای اکسیژن در محدوده cm<sup>-1</sup> ۱۶۰۰ تا ۱۸۰۰ دارای پیک جذب بسیار ضعیف و ناچیزی هستند. در مقابل باند C=C آروماتیک میزان جذب نسبتاً خوبی در cm<sup>-1</sup> ۱۶۱۴ تا ۱۶۱۶ نشان می‌دهد که این امر نشان از میزان کم باندهای C=O و C-O در زغال‌سنگ‌های منطقه قشلاق دارد.

گروه‌های عاملی حاوی اکسیژن در زغال‌سنگ شامل فنول، الکل‌ها، اترها، اسید کربوکسیل و کربونیل است (Saikia et al., 2007). محدوده جذبی cm<sup>-1</sup> ۲۳۴۴ تا ۲۳۵۶ متعلق به باند ساختاری CO<sub>2</sub> و محدوده جذبی cm<sup>-1</sup> ۳۲۰۰ تا ۳۶۰۰ متعلق به باند OH هستند. این باند ساختاری در زغال‌سنگ‌های بی‌تومین به دلیل مقدار کم آن، بسیار ضعیف است (Cooke et al., 1986). در نمونه‌های مورد آنالیز نیز گروه OH جذب چندانی در محدوده ذکر شده نشان نمی‌دهند و طیف مربوط به لایه S2 دارای کمترین میزان جذب و لایه k18 دارای بیشترین جذب برای گروه OH هستند.

با توجه به آنکه بر پایه رخداد نوسانات کششی باند OH، فیلسیلیکات‌ها (رس‌ها) از تکنوسیلیکات‌ها (نظیر کوارتز) قابل تفکیک هستند (Matteson and Herron, 1993) و کانی‌های رسی حاوی آب جذبی، آب میان‌لایه‌ای و گروه‌های OH ساختاری هستند (Mukherjee and Srivastava, 2006). در نتیجه پیک‌های جذبی در محدوده cm<sup>-1</sup> ۳۶۰۰ تا ۳۹۰۰ ناشی از حضور باند OH در کانی‌های رسی موجود در زغال‌سنگ‌های مورد مطالعه نظیر ایلیت و کانولینیت است.

ارتعاشات کششی برای باند S-S (دی‌سولفید) معمولاً در محدوده cm<sup>-1</sup> ۴۰۰ تا ۵۰۰ مشاهده می‌شود (Baruah et al., 2003). ارتعاشات مربوط به این باند در نمونه‌های مورد مطالعه در محدوده cm<sup>-1</sup> ۴۶۶ تا ۴۶۸ قرار دارد و عامل آن می‌تواند کانی پیریت باشد که حضور آن توسط مطالعات پتروگرافی و نیز آنالیز اشعه ایکس تأیید شده است.

محدوده جذبی cm<sup>-1</sup> ۵۳۰ تا ۵۳۶ ناشی از ارتعاشات خمشی (bending vibration) و محدوده جذبی cm<sup>-1</sup> ۱۰۶۰ تا ۱۲۰۰ متعلق به ارتعاشات کششی Si-O هستند که می‌تواند متأثر از حضور کانی‌های سیلیکاتی نظیر کوارتز و کانی‌های رسی نظیر کانولینیت باشد که در شبکه خود بنیان سیلیس-اکسیژن دارند و حضورشان در تمامی نمونه‌های مورد مطالعه به اثبات رسیده است. کوارتز در محدوده طول موجی cm<sup>-1</sup> ۱۰۲۸ تا ۱۰۳۰ و کانولینیت در محدوده طول موجی cm<sup>-1</sup> ۱۰۰۴ تا ۱۰۰۶ دارای جذب هستند. حضور یکنواخت کوارتز در همه نمونه‌ها گویای این نکته است که کوارتز کانی رایج زغال‌سنگ‌های این حوضه زغال‌سنگی است و کانولینیت نیز به همراه کوارتز در تمامی طیف‌ها حضور دارد.

محدوده جذبی cm<sup>-1</sup> ۷۴۸ تا ۸۰۰ متعلق به گروه CH آروماتیک و محدوده جذبی cm<sup>-1</sup> ۲۹۰۸ تا ۲۹۲۰ متعلق به گروه CH آلفاتیک هستند. با اندکی توجه به الگوی طیف نمونه‌ها می‌توان دریافت که شدت جذب برای باندهای گروه CH آلفاتیک در سطح بالاتری نسبت به باندهای گروه CH آروماتیک قرار دارد.

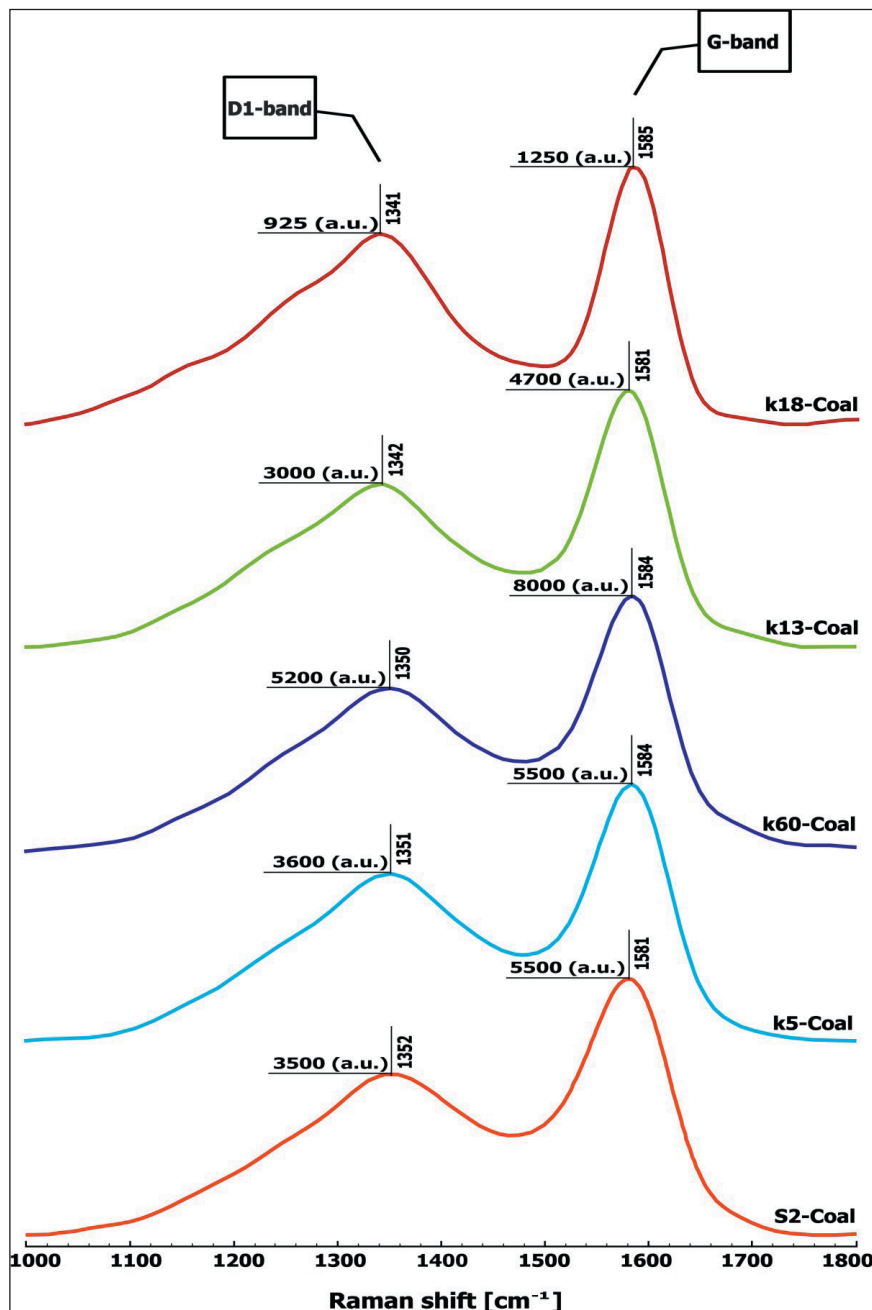
بر اساس نظر Saikia et al. (2007) جذب در محدوده cm<sup>-1</sup> ۶۹۰ احتمالاً به علت پیوند C-S است. محدوده طول موج cm<sup>-1</sup> ۹۱۰ تا ۹۱۶ متعلق به باند Al-OH بوده که به احتمال زیاد ناشی از حضور کانی مونت‌موریلونیت است که در ترکیب خود بنیان Al-OH دارد و حضور آن توسط آنالیز XRD نیز تأیید شده است.

جذب در محدوده cm<sup>-1</sup> ۱۳۸۰ تا ۱۳۸۶ متعلق به باند ساختاری CH<sub>3</sub> است. محدوده جذبی cm<sup>-1</sup> ۱۴۳۲ تا ۱۴۲۸ متعلق به کانی‌های کربناته را می‌توان به نوسانات بنیادین رادیکال‌های کربن، CO<sub>3,2</sub> و باندهای گوناگون مرتبط با نوسانات

### ۷- آنالیز طیف‌سنجی رامان

تمامی طیف‌های حاصل از انجام طیف‌سنجی رامان دارای وجه مشترکی شامل دو منحنی عریض هستند که بر هم همپوشانی دارند و نیز شدت پیک در محدوده  $1581$  تا  $1585$   $\text{cm}^{-1}$  در تمامی نمونه‌ها ثابت نیست و نرخ متفاوت و افزایشی دارد. در حالی که باند D1 در محدوده  $1341$  تا  $1352$   $\text{cm}^{-1}$  شدت نسبتاً ثابت و دامنه تغییرات کمتری در نمونه‌ها دارد (شکل ۷).

پژوهشگران طیف‌سنجی رامان را به عنوان ابزاری جهت بررسی ویژگی‌های ساختاری زغال‌سنگ (Potgieter-Vermaak et al., 2010) و تولیدات مشتق شده از آن معرفی کرده‌اند. طیف رامان نمونه‌های زغال‌سنگ منطقه قشلاق در محدوده  $1800$  تا  $1000$   $\text{cm}^{-1}$  در شکل ۷ و اطلاعات مربوط به باندهای موجود در این طیف‌ها در جدول ۴ ارائه شده است.



شکل ۷- طیف‌های حاصل از انجام آنالیز Raman بر روی لایه‌های زغال‌سنگ حوضه زغال‌دار قشلاق.

جدول ۴- اطلاعات حاصل از تفسیر طیف‌های آنالیز Raman بر روی لایه‌های زغال‌سنگ ناحیه قشلاق.

Sample	band position (cm <sup>-1</sup> )	Intensity of the peak (a.u.)
<b>K18-coal</b>		
G	1585	1250
D1	1341	925
<b>K13-coal</b>		
G	1581	4700
D1	1342	3000
<b>K60-coal</b>		
G	1584	8000
D1	1350	5200
<b>K5-coal</b>		
G	1584	5500
D1	1351	3600
<b>S2-coal</b>		
G	1581	5500
D1	1352	3500

### ۸- نتیجه‌گیری

بر اساس مطالعات پتروگرافی، حضور کانی‌های پیریت، کالکوپیریت، کوارتز، سیدریت و کانی‌های رسی در زغال‌سنگ‌های ناحیه قشلاق تأیید شد. کانی‌های رسی، کانی اصلی موجود در زغال‌سنگ‌های این منطقه هستند و پیریت نیز فراوانی نسبتاً بالایی دارد.

اشکال مختلف کانی پیریت نظیر شکل دار تا نیمه‌شکل دار، توده‌ای، پولکی، کنکرسین، پراکنده و لایه‌ای به همراه سیدریت، کالکوپیریت، کوارتز و کانی‌های رسی در نمونه دستی زغال‌سنگ‌های قشلاق حضور دارد.

در طیف‌های حاصل از آنالیز XRD بر روی زغال‌سنگ‌های ناحیه قشلاق کانی‌های کائولینیت، کوارتز، پیریت، سیدریت، ایلیت، مونت‌موریلونیت، دولومیت و کلسیت مشاهده شد. قوی‌ترین و بیشترین پیک در طیف‌های XRD متعلق به کانی کوارتز و همچنین بیشترین حضور کانی‌های کلسیت و دولومیت مربوط به خاکستر تهیه شده از زغال‌سنگ‌هاست.

مطالعه باندهای ساختاری و کانی‌شناسی توسط آنالیز FT-IR، حضور باندهای C=C، Al-OH، C-S، S-S، Si-O، CH<sub>3</sub>، CO<sub>2</sub>، OH آروماتیک را تأیید کرد.

تمامی طیف‌های رامان زغال‌سنگ‌های منطقه قشلاق دارای دو منحنی هستند که بر هم همپوشانی دارند. موقعیت بیشترین شدت پیک‌های موجود در این منحنی‌ها مشابه باندهای G و D1 هستند. باند G در محدوده ۱۵۸۱ تا ۱۵۸۵ cm<sup>-1</sup> در تمامی نمونه‌ها ثابت نیست و نرخ متفاوت و افزایشی دارد. در حالی که باند D1 در محدوده ۱۱۳۴ تا ۱۳۵۲ cm<sup>-1</sup> دارای شدت نسبتاً ثابتی است و دامنه تغییرات کمتری در نمونه‌ها نشان می‌دهد.

حضور باند G در تمامی نمونه‌های زغال‌سنگ منطقه قشلاق گویای حضور کربن بلورین است و لایه K60 با بیشترین شدت باند G دارای بلورینگی بیشتر و لایه K18 با کمترین شدت باند G دارای بلورینگی کمتر است که درجه بالای زغال‌شدگی را در لایه K60 نسبت به لایه K18 نشان می‌دهد.

بنابر مطالعات اصلی رامان انجام گرفته توسط پژوهشگران مختلف، موقعیت بیشترین شدت پیک‌های موجود در این منحنی‌ها مشابه باندهای G یا باند گرافیتی (Tuinstra and Koenig, 1970) و D1 یا باند نقص (Tuinstra and Koenig, 1970; Beyssac et al., 2003; Sadezky et al., 2005) کشف شده در گرافیت و سایر مواد کربن دار نظیر زغال‌سنگ است که توسط این روش مورد بررسی قرار گرفته‌اند. گرافیت خالص فقط یک باند در موقعیت ۱۵۸۲ cm<sup>-1</sup> دارد و در مطالعات Chabalala et al. (2011) علت این باند نوسانات C-C در لایه‌های آروماتیک گزارش شده است. طبق گزارشات این دو باند می‌تواند اطلاعاتی را جهت ارزیابی درجه نظم و بلورینگی در مواد کربن دار فراهم کنند (Tuinstra and Koenig, 1970; Zerdar et al., 1981; Cuesta et al., 1998; Robertson, 2002; Xiaojian et al., 2006). از طرفی طبق مطالعه رامان انجام گرفته توسط Qiu et al. (2011) بر روی خرده‌های زغال‌سنگ در اندازه‌های مختلف، شدت پیک در ۱۵۹۰ cm<sup>-1</sup> با کاهش اندازه ذرات افزایش می‌یابد، آنان اعلام کرده‌اند که خرده ذرات زغال‌سنگ با اندازه کوچک‌تر، بلورینگی بیشتری (حضور مواد گرافیتی و شبه گرافیتی) دارند. در نمونه‌های زغال‌سنگ قشلاق نیز، باند G در محدوده ۱۵۸۱ تا ۱۵۸۵ حضور دارد و دارای شدت نسبتاً خوبی است و همان‌طور که در شکل ۷ دیده می‌شود کمترین میزان شدت این باند متعلق به لایه K18 و بیشترین شدت متعلق به لایه K60 است. به عبارتی می‌توان گفت با توجه به حضور باند G در تمامی نمونه‌ها، کربن بلورین در نمونه‌های مورد مطالعه حضور دارد و با توجه به رابطه عکس مشاهده شده توسط Qiu et al. (2011) بین بلورینگی و اندازه ذرات، لایه K60 با بیشترین شدت باند G دارای بلورینگی بیشتر و اندازه ذرات کوچک‌تری نسبت به سایرین بوده است.

پژوهشگران باند D یا همان باند نقص موجود در واحدهای ساختاری و بی‌نظمی را که در تمامی نمونه‌ها با دامنه تغییرات کم حضور دارد، به حلقه‌های بنزن فشرده مربوط می‌دانند (Schwan et al., 1996). (Chabalala et al., 2011). نیز بیان می‌دارند که باند D1 از نقص درون صفحه‌ای واقع در بین واحدهای ساختاری پدید می‌آید و می‌گیرد.

## سپاسگزاری

نمونه‌برداری، از جناب آقای جزء ترابی مسئول محترم کارگاه مقطع‌گیری دانشگاه دامغان برای همکاری در بخش مقطع‌گیری و از داوران محترم فصلنامه علوم زمین برای با پیشنهادات سازنده خود در راستای غنای بیشتر این پژوهش سپاسگزاری می‌شود.

از جناب آقای مهندس ناطقی، مسئول اکتشافات شرکت زغال‌سنگ البرز شرقی (شاهرود)، به جهت راهنمایی‌های ارزنده‌شان در بخش زمین‌شناسی ناحیه، از جناب آقایان مهندس خاک فرجی، افتخاری، نوروزپور و سوسرایی برای کمک در بخش

## کتابنگاری

- حسینی اشلقی، ف. و شمعانیان، غ.، ۱۳۹۱- کانی‌شناسی زغال‌سنگ‌های معدن قشلاق و اثر آن بر زهاب اسیدی معدن، سی و یکمین گردهمایی علوم زمین. ربانی، ط.، تقی‌پور، ن. و اهری‌پور، ر.، ۱۳۹۵ الف- پتروگرافی آلی: رویکردی برای شناسایی گروه‌های ماسرالی زغال‌سنگ‌های منطقه قشلاق، البرز شرقی، مجله زمین‌شناسی اقتصادی، جلد ۸، شماره ۱، صص. ۱۱۷ تا ۱۲۸.
- ربانی، ط.، تقی‌پور، ن. و اهری‌پور، ر.، ۱۳۹۵ ب- شرایط محیط دیرینه لایه‌های زغال‌سنگی ناحیه زغال‌دار قشلاق (البرز شرقی) بر اساس شواهد پتروگرافی و رخساره‌ای. فصلنامه علوم زمین، شماره ۹۹، صص. ۲۷۱ تا ۲۸۰.
- زهراب، ا.، ۱۳۸۳- نقشه زمین‌شناسی ۱/۱۰۰۰۰۰ خوش بیلاق، وزارت صنایع و معادن، سازمان زمین‌شناسی و اکتشاف معدنی کشور.
- شرکت زغال‌سنگ البرز شرقی، ۱۳۶۲- گزارش زمین‌شناسی نتایج اکتشاف مقدماتی منطقه نرگس چال (مجتمع قشلاق).
- شرکت زغال‌سنگ البرز شرقی، دفتر اکتشافات، ۱۳۷۸ الف- عملیات زمین‌شناسی انجام شده در منطقه زمستان یورت.
- شرکت زغال‌سنگ البرز شرقی، دفتر اکتشافات، ۱۳۷۸ ب- عملیات زمین‌شناسی انجام شده در منطقه کلات.
- شمعانیان، غ.، و حسینی اشلقی، ف.، ۱۳۹۴- کانی‌شناسی و ژئوشیمی زغال‌سنگ‌های ژوراسیک معدن قشلاق، البرز شرقی، مجله زمین‌شناسی اقتصادی، جلد ۷، شماره ۲، صص. ۳۶۹ تا ۳۸۳.
- فتوحی، ز.، ۱۳۵۷- گزارش زمین‌شناسی دره وطن در منطقه قشلاق، شرکت زغال‌سنگ البرز شرقی، گروه اکتشافی قشلاق.
- نجفی حاجی‌پور، د.، ۱۳۸۸- مطالعه ماکروفسیل‌های گیاهی سازند شمشک در ناحیه غزنوی- فارسین، در مسیر جاده شاهرود- آزاد شهر (البرز شرقی)، شمال ایران: کاربرد چینه‌شناسی ناحیه‌ای و آب‌وهوای دیرینه، فصلنامه رخساره‌های رسوبی جلد ۲، شماره ۱، صص. ۴۰۶ تا ۱۱۵.

## References

- Assereto, R., 1966- The Jurassic Shemshak Formation in Central Elburz (Iran), *Rivista Italiana di Palenotologia stratigraphia*, 74, 3- 21.
- Baruah, M. K., Kotoky, P. and Borah, G. C., 2003- Distribution and nature of organic/mineral bound elements in Assam coals, India. *Fuel*, 82, 1783- 1791.
- Belkin, H. E., Tewalt, S. J., Hower, J. C., Stucker, J. D., O'Keefe, J. M. K., Tatu, C. A. and Buia, G., 2010- Petrography and geochemistry of Oligocene bituminous coal from the Jiu Valley, Petroșani basin (southern Carpathian Mountains), Romania. *International Journal of Coal Geology*, 82 (1- 2), 68- 80.
- Beysac, O., Goffè, B., Petitet, J. P., Froigneux, E., Moreau, M. and Rouzaud, J. N., 2003- On the characterization of disorder and heterogeneous carbonaceous materials by Raman spectroscopy. *Spectrochim. Acta, Part A* 59, 2267- 2276.
- Bragin, Y. N., Golubev, S. A. and Polyanskiy, B. V., 1981- Paleogeography of major accumulation stages of lower Mesozoic coal deposits in Iran. *Lithology and Mineral Resources*, NO:16, P:50- 59, Published by Consultants Bureau. New York, NY, United States.
- Chabalala, V. P., Wagner, N. and Potgieter-Vermaak, S., 2011- Investigation into the evolution of char structure using Raman spectroscopy in conjunction with coal petrography; Part 1, *Fuel Processing Technology*, 92, 750- 756.
- Cooke, N. E., Maynard Fuller, O. and Gaikwad, R. P., 1986- FTIR spectroscopic analysis of coals and coal extracts. *Fuel*, 65, 1254- 1260.
- Cuesta, A., Dhamelincourt, P., Laureyns, J., Martinez-Alonso, A. and Tacson, J. M. D., 1998- Comparative performance of X-ray diffraction and Raman microprobe techniques for the study of carbon materials. *J. Mater Chem.*, 8, 2875- 2879.
- Dai, S., Li, D., Chou, C. L., Zhao, L., Zhang, Y., Ren, Y., Ma, Y. and Sun, Y., 2008- Mineralogy and geochemistry of boehmite-rich coals: new insights from the Haerwusu Surface Mine, Jungar Coalfield, Inner Mongolia, China. *International Journal of Coal Geology*, 74, 185- 202.
- Dai, S., Zhou, P., Ren, D., Wang, X., Li, D. and Zhao, L., 2007- Geochemistry and mineralogy of the Late Permian coals from the Songzao Coalfield, Chongqing, southwestern China. *Science in China Series D-Earth Sciences*, 50, 678- 688.
- Davis, B. H., 2003- Clean fuels from coal: The path to 1972. *Prepr. Symp. - Am. Chem. Soc., Div. Fuel Chem.*, 48, 1, 141- 143.
- Frankie, K. A. and Hower, J., 1985- Pyrite/marcasite size, form and microlithotype association in Western Kentucky prepared coals. *Fuel processing Technology*, 10, 269- 283.
- Fürsich, F. T., Wilmsen, M., Seyed-Emami, K. and Majidifard, M. R., 2009- Lithostratigraphy of the Upper Triassic-Middle Jurassic Shemshak

- Group of northern Iran. In South Caspian to Central Iran basins (eds M.F. Brunet, M. Wilmsen & J.W. Granath). The Geological Society, London, Special Publications, 312, 129- 160.
- Fürsich, F. T., Wilmsen, M., Seyed-Emami, K., Cecca, F. and Majidifard, M. R., 2005- The Upper Shemshak Formation (Toarcian–Aalenian) of the eastern Alborz: biota and paleoenvironments during a transgressive–regressive cycle. *Facies* 51, 365- 384.
- Georgakopoulos, A., Iordanidis, A. and Kapina, V., 2003- Study of Low Rank Greek Coals Using FTIR Spectroscopy, *Energy Sources*, 25, 995- 1005.
- Goodarzi, F., Sanei, H., Stasiuk, L. D., Bagheri-Sadeghi, H. and Reyes, J., 2006- A preliminary study of mineralogy and geochemistry of four coal samples from northern Iran. *International Journal of Coal Geology*, 65 (1- 2), 35- 50.
- Kortenski, J. and Kostova, I., 1996- Occurrence and morphology of pyrite in Bulgarian coals. *International Journal of Coal Geology*, 29, 273- 290.
- Manoj, B. and Kunjomana, A. G., 2012- Structural characterization of selected Indian coals by x-ray diffraction and spectroscopic techniques. *Trends in Applied Sciences Research*, 7, 434- 444.
- Matteson, A. and Herron, M. M., 1993- Quantitative mineral analysis by Fourier transform infrared spectroscopy. SCA Conference Paper, 1- 15.
- Mukherjee, S. and Srivastava, S. K., 2006- Minerals Transformations in Northeastern Region Coals of India on Heat Treatm, ent. *Energy and Fuels*, 20, 1089- 1096.
- Painter, P. C., Sobkowiak, M. and Youtcheff, J., 1987- FT-IR study of hydrogen bonding in coal. *Fuel*, 66 (7), 973- 978.
- Potgieter-Vermaak, S., Maledi, N., Wagner, N., Van Heerden, J. H. P., Van Grieken, R. and Potgieter, J. H., 2010- Raman spectroscopy for the analysis of coal: a review. *Journal of Raman Spectroscopy*, 42, 2, 123- 129.
- Qiu, Y., Zhang, Q., Tian, Y., Zhang, J., Cao, J. and Xiao, T., 2011- Composition and Structure Luxing of Coal with Different Particle Sizes, *Petroleum and Coal*, 53 (1), 45- 55.
- Ravisankar, R., Chandrasekaran, A., Kalaiarsi, S., Eswaran, P., Rajashekhar, C., Vanasundari, K. and Athavale, A., 2011- Mineral analysis in beach rocks of Andaman Island, India by spectroscopic techniques. *Archives of Applied Science Research*, 3 (3), 77- 84.
- Robertson, J., 2002- Diamond-Like amorphous carbon. *Mater. Sci. Eng. R: Rep.*, 37: 129- 281.
- Sadezky, A., Muckenhuber, H., Grothe, H., Niessner, R. and Poschl, U., 2005- Raman microspectroscopy of soot and related carbonaceous materials: spectral analysis and structural information. *Carbon*, 42, 1731- 42.
- Saikia, B. K., Boruah, R. K. and Gogoi, P. K., 2007- FT-IR and XRD analysis of coal from Makum coalfield of Assam. *Journal of Earth System Science*, 116, 575- 579.
- Schatzel, S. J. and Stewart, B. W., 2012- A provenance study of mineral matter in coal from Appalachian Basin coal mining regions and implications regarding the respirable health of underground coal workers: A geochemical and Nd isotope investigation. *International Journal of Coal Geology*, 94, 123- 136.
- Schwan, J., Ulrich, S., Batori, V., Ehrhardt, H. and Silva, S. R. P., 1996- Raman spectroscopy on amorphous carbon films. *Journal of Applied Physics*, 80, 440- 447.
- Seyed-Emami, K., 2003- Triassic in Iran. *Facies* 48, 91- 106.
- Seyed-Emami, K., Fürsich, F. T. and Schairer, G., 2001- Lithostratigraphy, ammonite faunas and paleoenvironments of Middle Jurassic strata in North and Central Iran. *Newsletters on Stratigraphy* 38, 163- 184.
- Seyed-Emami, K., Fürsich, F. T., Wilmsen, M., Cecca, F., Majidifard, M. R., Schairer, G. and Shekarifard, A., 2006- Stratigraphy and ammonite fauna of the upper Shemshak Formation (Toarcian–Aalenian) at Tazareh, eastern Alborz, Iran. *Journal of Asian Earth Sciences*, 2, 259- 275.
- Seyed-Emami, K., Fürsich, F. T., Wilmsen, M., Schairer, G. and Majidifard, M. R., 2005- Toarcian and Aalenian (Jurassic) ammonites from the Shemshak Group of the Jajarm area (eastern Alborz, Iran). *Paläontologische Zeitschrift* 79, 349- 369.
- Shekarifard, A., Baudin, F., Seyed-Emami, K., Schnyder, J., Laggoun-Défarge, F., Riboulleau, A., Brunet, M. F. and Shahidi, A., 2012- Thermal maturity of the Upper Triassic-Middle Jurassic Shemshak Group (Alborz Range, Northern Iran) based on organic petrography, geochemistry and basin modelling: implications for source rock evaluation and petroleum exploration, *Geological Magazine*, 149, 19- 38.
- Stach, E., Mackowsky, M. Th., Teichmüller, M., Taylor, G. H., Chandra, D. and Teichmüller, R. (Eds.), 1982- Stach's Textbook of Coal Petrology, Gebrüder Borntraeger, Berlin-Stuttgart, 535 P.
- Tuinstra, F. and Koenig, J. L., 1970- Raman spectrum of graphite. *Journal of Chemical Physics*, 53, 1126- 1130.
- Vollmer, T., 1987- Zur Geologie des nördlichen Zentral-Elburz zwischen Chalus-und Haraz-Tal, Iran. *Mitteilungen aus dem Geologisch-Paläontologischen Institut der Universität Hamburg* 63, 1- 125.
- Wang, W., Qin, Y., Sang, S., Zhu, Y., Wang, C. and Weiss, D. J. 2008- Geochemistry of rare earth elements in a marine influenced coal and its organic solvent extracts from the Antaibao mining district, Shanxi, China. *International Journal of Coal Geology* 76, 309- 317.

- Ward, C. R., 2016- Analysis, origin and significance of mineral matter in coal: An updated review. *International Journal of Coal Geology* 165, 1- 27.
- Xiaojiang, L., Jun-ichiro, H. and Chun-Zhu, L., 2006- FT-Raman spectroscopic study of the evolution of char structure during the pyrolysis of a Victorian brown coal. *Fuel*, 85, 1700- 1707.
- Zerda, T. W., John, A. and Chmura, K., 1981- Raman studies of coals. *Fuel*, 60, 375- 378.

# Investigation of structural characteristic and bond composition of coals of Gheshlagh region, Eastern Alborz: Using of XRD, FT-IR and Raman

N. Taghipour<sup>1\*</sup>, T. Rabani<sup>2</sup> and R. Zahiri<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Assistant Professor, School of Earth Sciences, Damghan University, Damghan, Iran

<sup>2</sup>M.Sc.School of Earth Sciences, Damghan University, Damghan, Iran

Received: 2017 April 21

Accepted: 2018 August 05

## Abstract

Coal deposits in Gheshlagh region are embedded in the sediments of Shemshak formation with lithological units such as sandstone, conglomerate, siltstone, limestone and argillite. For investigation of mineralogy and structural characteristics of Gheshlagh coal seams sampled of eleven coal seams in four active mines. Occurrence of minerals with distribution and nature of organic – mineral bonds in coals seams of this region is considered by using of petrographic and XRD and FT-IR analyses. Study of hand specimen and polished section are approved the presence of clay minerals, pyrite, chalcocopyrite, siderite and quartz. Also The presence of minerals like kaolinite, quartz, siderite, dolomite, calcite, pyrite, montmorillonite and biotite was revealed by XRD. Mineral–organic bands such as: OH, CO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, Si-O, S-S, C-S, Al-OH, carbonate minerals, C=C, aromatic and aliphatic CH have been identified by the FT-IR in Gheshlagh coal seams. Raman spectroscopic confirms the presence of the graphitic band (G) (1581 cm<sup>-1</sup>- 1585 cm<sup>-1</sup>) and the defect band (D1) (1341 cm<sup>-1</sup> – 1352 cm<sup>-1</sup>) in Gheshlagh coal seams. Graphitic bands contain high intensity and insignificant broadening.

**Keywords:** Coal, XRD, FT-IR, Raman, Eastern Alborz.

For Persian Version see pages 75 to 88

\*Corresponding author: N. Taghipour; E-mail: taghipour@du.ac.ir